HAL open science

# Obtention de modèles de diffusion à partir d'équations cinétiques. Modélisation, étude mathématique et simulation

Jean-Pierre Bourgade

▶ To cite this version:

Jean-Pierre Bourgade. Obtention de modèles de diffusion à partir d'équations cinétiques. Modélisation, étude mathématique et simulation. Mathématiques [math]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. Français. NNT : . tel-00008808

HAL Id: tel-00008808

https://theses.hal.science/tel-00008808v1

Submitted on 17 Mar 2005

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**UNIVERSITE TOULOUSE III - PAUL SABATIER**
**U.F.R. M.I.G.**

**THÈSE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ TOULOUSE III**

Discipline : Mathématiques Appliquées

présentée par

**Jean-Pierre Bourgade**

le 10 décembre 2004

**Titre : Obtention de modèles de diffusion à partir d'équations cinétiques**
**Modélisation, étude mathématique et simulation**

Soutenue publiquement devant le jury composé de :

| | | |
|---|---|---|
| *Rapporteur* | A. Nouri | Professeur,<br>Université de Provence, Marseille |
| *Examinateurs* | K. Aoki | Professeur,<br>Kyoto University, Kyoto |
| | N. Ben Abdallah | Professeur,<br>Université Paul Sabatier, Toulouse |
| | J.-M. Roquejoffre | Professur,<br>Université Paul Sabatier, Toulouse |
| *Directeurs* | P. Degond | Directeur de Recherche CNRS,<br>Université Paul Sabatier, Toulouse |
| | L. Mieussens | Maître de Conférences,<br>Université Paul Sabatier, Toulouse |

# Remerciements

La réalisation de ce travail n'aurait pas été pensable sans l'aide et le soutien constant de mes directeurs de thèse, Pierre Degond et Luc Mieussens. La qualité de mon travail rend sans doute un hommage insuffisant à leur exigence et à la pertinence de leurs conseils. Je tiens à les remercier ici d'avoir accepté de diriger mes recherches, mais aussi d'avoir su me faire partager leurs connaissances en mathématiques appliquées ainsi qu'en physique ou en analyse numérique.

Certains travaux présentés ici sont le fruit de collaborations. Je tiens à saluer ici la gentillesse d'Antoine Mellet avec qui ce fut toujours un plaisir de travailler. Florian Méhats mérite toute ma reconnaissance pour les compétences et la patience dont il a fait preuve pendant le long travail de correction et d'amélioration des résultats sur les modèles SHE quantiques. Je suis également reconnaissant envers Christian Ringhofer qui m'a accueilli chaleureusement durant mon séjour à Arizona State University à Phoenix.

Je remercie Anne Nouri et Juan Soler pour l'intérêt qu'ils ont accordé à ma thèse en acceptant d'en être les rapporteurs et pour les suggestions stimulantes qu'ils ont pu me faire.

J'ai effectué mes premiers pas en mathématiques appliquées en suivant les cours très fournis de N. Ben Abdallah et J.-M. Roquejoffre. C'est un plaisir pour moi qu'ils aient accepté d'être membres du jury. Je suis également très honoré que M. Aoki ait accepté de faire partie de mon jury.

Il serait absurde et injuste d'oublier de mentionner ici Nicolas, avec qui la cohabitation dans le bureau 201 fut toujours extrêmement salutaire pour moi. Je pense que je ne serais jamais parvenu à terminer ce travail sans son intelligence, son extraordinaire gentillesse et son amitié. Clément et Sébastien ont supporté également mon amitié encombrante pendant des années. J'espère que leurs épaules sont encore assez solides pour les années à venir. Je remercie également les amis qui, de près ou de loin, souvent sans le savoir, m'ont aidé dans l'achèvement de ce travail : Renaud, Yann, Jonathan, les statisticiens Cécile, Christophe, Lionel et Marielle, le probabiliste Yan, Sophie, Mattias et Abderrahim du "bureau d'en face", Céline et Francis, Géraldine et toutes les personnes, jeunes ou moins jeunes, qui ont rendu le séjour dans ce laboratoire agréable. Je remercie particulièrement Christine Marty d'avoir apporté, pour beaucoup d'entre nous, la preuve que la compétence, la discrétion et la gentillesse pouvaient se trouver réunies chez une même personne.

Pierre Mazet a joué un rôle unique dans ma trajectoire et je n'aurais probablement jamais fait de mathématiques s'il n'avait été un passeur merveilleux. Des domaines aussi passionnants que la sociologie, la physique ou les mathématiques me seraient certainement restés fermés sans lui. Je ne sais comment lui exprimer ma gratitude sinon peut-être en soulignant sa culture quasi universelle, son intégrité exemplaire et sa gentillesse.

Le montant de ma dette envers mes parents est infini. Les conditions initiales idéales qu'ils m'ont données, la famille qu'ils ont fondée et l'affection faite d'écoute et de soutien que j'y ai toujours trouvée m'ont permis de surmonter les phases les plus angoissantes de ma vie. Je remercie par ailleurs mes petites grandes soeurs Annie et Florence qui, par leur présence discrète mais constante, m'ont aidé à faire mes premiers pas, et les suivants, dans la vie.

Enfin et surtout, merci à Christel pour tout ce qu'elle est.

*A mes grand-parents, présents et absents*

# Table des matières


**I Introduction et résumé** **11**

**1 Modélisation du transport de particules chargées** **17**
1 Modélisation cinétique des phénomènes de transport . . . . . 17
1.1 Equations cinétiques sans terme de collision : équation de Vlasov, équation de Wigner . . . . . 17
1.2 Interactions avec le milieu et entre particules : Opérateurs de collision . . . . . 21
2 Modélisation macroscopique des phénomènes de transport . . . . . 26
2.1 Généralités : le système de Dérive Diffusion . . . . . 28
2.2 Lien entre équilibre thermodynamique et opérateur de collision . . . . . 28
2.3 Dérivation formelle des systèmes DD et SHE . . . . . 31
2.4 Remarque générale sur le modèle SHE Le modèle SHE couplé . . . . . 34

**2 Etude des modèles de type SHE et SHE couplé** **39**
1 Modèles SHE quantiques et opérateurs de collision dissipant l'entropie quantique 39
2 Modèles macroscopiques pour les collisions entre électrons et phonons . . . . . 45
3 Régimes de diffusion engendrés par des collisions de surface . . . . . 52
4 Simulations numériques . . . . . 64

**II Modélisation et étude mathématique** **79**

**3 Sur deux modèles de diffusion de type SHE quantique** **81**
1 Introduction . . . . . 81
2 Classical modelling of Electron-Phonon Scattering in semiconductor devices . . . 83
2.1 The Classical Electron-Phonon collision operator . . . . . 85
2.2 Derivation of the Classical SHE model . . . . . 86
3 Classical collision operators and Quasi-Quantum SHE models . . . . . 88
3.1 The Wigner-Boltzmann equation . . . . . 88
3.2 The Quasi-Quantum SHE model (QQSHE) . . . . . 91
3.3 The $QQSHE_2$ model : quantum corrections to the classical SHE model . 94
4 Quantum collision operators . . . . . 94

4.1 The Quantum Electron-Phonon collision operator . . . 96
4.2 The quantum relaxation operator . . . 98
5 Quantum SHE models . . . 100
A The $QQSHE_2$ model . . . 101
B The $QSHE_2$ model . . . 104

**4 Sur des modèles macroscopiques pour les collisions avec les phonons 111**
1 Introduction . . . 111
2 Two elastic/inelastic splittings . . . 114
3 Formal approach to the diffusion approximation . . . 118
4 The diffusion tensor : an infinite dimensional matrix . . . 120
5 Rigorous approach to the diffusion approximation . . . 124
5.1 Convergence and continuity equation . . . 124
5.2 Current equation . . . 126
5.3 Uniqueness of the asymptotic current and density . . . 131
6 Conclusion . . . 132

**5 Régimes de diffusion engendrés par des collisions de surface 137**
1 Introduction . . . 137
2 The Microscopic Model . . . 139
3 The Boundary Condition : properties of the Collision Operator . . . 142
3.1 The general form of the collision operator . . . 142
3.2 Two splittings of the boundary collision operator . . . 143
3.3 Flux conservation . . . 144
3.4 Mathematical properties of the collision operators . . . 145
4 Formal Derivation of the macroscopic model . . . 147
4.1 The limit as a function of the energy . . . 148
4.2 The continuity equation . . . 148
4.3 Resolution of the auxiliary equation . . . 149
4.4 The current equation . . . 152
5 Existence for the microscopic problem . . . 152
5.1 Green's formula . . . 153
5.2 Resolution of an approximate kinetic problem . . . 153
5.3 Trace estimates and existence for the kinetic problem . . . 154
6 From the kinetic problem to the coupled SHE model : Rigorous Asymptotics . . 157
6.1 Weak convergence of $f^\eta$ . . . 157
6.2 Resolution of the auxiliary problem . . . 159
6.3 Positivity of the diffusion tensor . . . 160
6.4 Derivation of the current equation . . . 161
6.5 The coupled SHE model . . . 163
7 Conclusion . . . 164

**III Simulations Numériques** **169**

**6 Comparaison de deux modèles SHE et d'un modèle cinétique** **171**
1 Introduction . . . 171
2 The microscopic model and the SHE models . . . 173
2.1 The kinetic model . . . 173
2.2 The standard SHE model . . . 174
2.3 The coupled SHE model . . . 175
3 Numerical methods . . . 178
3.1 The discretized Boltzmann equation . . . 178
3.2 The SHE models . . . 179
4 Numerical results . . . 180
4.1 The diffusion and stationary regimes . . . 182
4.2 The transient regime . . . 184
5 Conclusion . . . 185

# Première partie

# Introduction et résumé

La modélisation du transport de particules chargées est un enjeu majeur de la physique des semi-conducteurs. Les propriétés physiques de ces matériaux ne peuvent être prévues et expliquées correctement que dans la mesure où l'on sait rendre compte de façon précise d'un ensemble de phénomènes tels que :

- l'action des champs de force (essentiellement électriques dans les travaux présentés ici) sur les particules (en particulier, parce que les matériaux actuels atteignent des tailles de l'ordre de la centaine de nanomètres, il devient crucial de donner dans certains cas une description quantique du transport des particules) ;
- les interactions entre particules, qui, en première approximation, peuvent être modélisées comme des collisions - élastiques ou non - bien que, dans la même perspective de miniaturisation des composants électroniques, il devienne nécessaire de proposer des modèles qui rendent compte du caractère quantique des interactions particulaires ;
- les interactions des particules avec le milieu dans lequel elles évoluent, soit, plus précisément dans le cas d'électrons dans des semi-conducteurs, les échanges d'énergie entre les électrons et le réseau atomique, ou encore les interactions entre les particules et le bord des matériaux.

Les échelles typiques des matériaux semi-conducteurs imposent de considérer un nombre très important de particules à la fois et il est impossible pratiquement de proposer une description réaliste et aisément expoitable (notamment numériquement) des phénomènes à l'échelle des particules. Une des perspectives le plus souvent adoptées depuis les années 1960 consiste à modéliser l'évolution au cours du temps d'un nuage de particules dans l'espace des phases par l'intermédiaire d'équations cinétiques (on trouvera de nombreux éléments de la théorie cinétique des semi-conducteurs dans [18], [71] et [69], et un exposé plus centré sur les questions mathématiques dans [62]). L'échelle de description de ces modèles permet de conserver une certaine pertinence physique tout en autorisant des implémentations numériques. Cependant, la résolution numérique de ces équations reste souvent très coûteuse en temps de calcul. L'étude de modèles macroscopiques - diffusifs ou hydrodynamiques - s'impose alors comme une direction de recherche très fertile. Il s'agit de mettre en équation l'évolution de quantités macroscopiques telles que la densité particulaire, le courant, la température, l'énergie, etc. La résolution numérique de ces équations s'avère largement moins onéreuse que celle des équations de type cinétique. Le gain en temps de calcul se paie toutefois par une perte de précision et la justification théorique de ces modèles est souvent délicate et constitue en soi un objet d'étude complet.

Le but de ce type d'approche est de proposer des modèles macroscopiques aussi fiables et aussi proches de la réalité physique que possible. Or, si la physique des particules est relativement bien comprise, à ce jour l'obtention de modèles macroscopiques à partir de considérations purement microscopiques reste délicate. Le problème consiste essentiellement à comprendre en détail comment certains phénomènes microscopiques (par exemple les collisions entre particules) peuvent s'exprimer à une échelle méso ou macroscopique (à travers les phénomènes de diffusion ou de dissipation d'entropie par exemple). Il est assez délicat d'établir des équations d'évolution macroscopiques à partir de considérations purement phénoménologiques et une des façons de garantir une certaine fidélité des modèles macroscopiques envers la réalité physique consiste à les dériver à partir d'équations microscopiques via un changement d'échelle.

On est donc amené à étudier l'influence des changements d'échelle sur le comportement des solutions des équations microscopiques. Les méthodes de perturbation singulière fournissent un cadre général, quoique non systématique, pour l'étude de ces changement d'échelle. Il s'agit d'effectuer un changement de variables dans les équations microscopiques en y introduisant un paramètre qui mesure le rapport de l'échelle typique à laquelle se produisent les phénomènes microscopiques pertinents (par exemple le libre parcours moyen, de l'ordre du nanomètre) à l'échelle du matériau semi-conducteur lui-même (de l'ordre du millimètre ou du micron). Ces méthodes présentent l'avantage de proposer une justification heuristique pour la dérivation de modèles macroscopiques à partir des équations fondamentales de la physique des particules. La notion intuitive de changement d'échelle s'y traduit mathématiquement de façon relativement simple et elles fournissent un cadre formel assez homogène d'un problème à l'autre, donnant ainsi l'espoir de produire des théories relativement cohérentes (fondées par exemple sur les développements de Hilbert ou de Chapman-Enskog [17], [15], [62] ou encore les méthodes de moments de Levermore [50]) permettant des démonstrations mathématiques au moins partiellement rigoureuses.

Ici, nous cherchons à dériver des modèles (macroscopiques) relativement généraux à partir d'équations cinétiques (microscopiques) dont le réalisme physique est déjà bien établi. Un des modèles de diffusion les plus récents est le modèle Spherical Harmonics Expansion (SHE), qui généralise le modèle de Dérive Diffusion (DD) en ce qu'il décrit le comportement d'un nuage de particules en fonction du temps, de la position et d'une variable d'énergie (alors que les modèles de type DD ne prennent pas en compte l'énergie des particules). Le modèle SHE a pu être dérivé (formellement et, dans certains cas, rigoureusement) à partir d'équations cinétiques par des méthodes de changement d'échelle dans le cas où les interactions particulaires sont élastiques (voir entre autres les travaux de P. Degond et N. Ben Abdallah [22], [8]), et sa validité a été testée numériquement dans des cas stationnaires (cf. [24]). A ce jour, le modèle SHE n'a été étudié que pour des systèmes dont l'échelle permet de négliger les phénomènes quantiques.

Récemment, P. Degond [21] a introduit une généralisation du modèle SHE permettant de prendre en compte des collisions élastiques locales et non locales. Ce modèle, le modèle SHE couplé, donne l'espoir de décrire plus précisément les situations physiques où les interactions dominantes sont inélastiques (ce qui est le cas le plus fréquent).

Cette thèse se donne trois objectifs principaux. Tout d'abord un objectif de modélisation, avec l'introduction de modèles SHE quantiques dont le but est de décrire les phénomènes de diffusion avec précision dans le cas de matériaux de très petite échelle. Nous proposons essentiellement deux modèles diffusifs, le modèle SHE quasi quantique (*Quasi Quantum SHE model*, QQSHE) qui tient compte des propriétés quantiques du transport des particules dans un champ électrique, et le modèle SHE quantique (*Quantum SHE model*, QSHE) qui, outre ces propriétés, vise également à décrire les effets quantiques des interactions entre particules. Pour cela, nous proposons des opérateurs susceptibles de décrire les interactions quantiques et qui dissipent une entropie quantique. Pour ces deux modèles nous développons une étude entropique (suivant P. Degond et C. Ringhofer [30] et P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer [29]) et nous donnons une dérivation formelle à partir de l'équation (de type cinétique) de Wigner. La dérivation du modèle QQSHE a pu être réalisée rigoureusement d'un point de vue

mathématique. Cette étude est le fruit d'une collaboration avec P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer. Nous présentons un résumé de ces travaux en section 1 de cette introduction et les détails sont donnés dans le chapitre 3.

Un deuxième enjeu est l'étude mathématique du modèle SHE couplé, dans la suite des travaux de P. Degond [21] et de T. Goudon et A. Mellet [44]. D'une part, nous donnons la dérivation formelle et rigoureuse du modèle SHE couplé dans le cas d'interactions entre électrons et phonons dans un semi-conducteur. Il s'agit à notre connaissance du premier modèle SHE *non périodique* dédié à l'étude des interactions entre électrons et phonons. Le résumé de ce travail est présenté en section 2. L'étude complète constitue le chapitre 4 de cette thèse.

D'autre part, nous reprenons l'étude d'un modèle SHE introduit par P. Degond [23] en vue de modéliser les phénomènes de diffusion engendrés par des collisions de particules avec une surface. Nous introduisons un modèle SHE couplé qui généralise ce modèle et nous en donnons une dérivation rigoureuse. Un exposé légèrement détaillé est donné en section 3. Le chapitre 5 approfondit et détaille les énoncés et preuves.

Enfin, en vue d'éprouver la validité des modèles SHE et SHE couplé, nous proposons une étude numérique comparée de ces modèles, le modèle de référence de la comparaison étant de type cinétique. Nous nous plaçons dans un contexte purement classique et nous donnons une comparaison de ces modèles avec un modèle cinétique en présence ou non d'un champ électrique. Cette étude, a été menée avec A. Mellet et L. Mieussens. Nous la présentons succinctement en section 4 et le travail est repris dans son intégralité dans le chapitre 6.

# Chapitre 1

# Modélisation du transport de particules chargées

Ce chapitre rappelle des résultats classiques sur les équations cinétiques et les modèles de diffusion utilisés couramment pour la modélisation des matériaux semiconducteurs.

## 1 Modélisation cinétique des phénomènes de transport

Dans cette section, nous rappelons quelques généralités sur les équations microscopiques de type cinétique. Les travaux présentés dans cette thèse ont pour point de départ des équations cinétiques classiques (de type Boltzmann) ou quantiques (de type Wigner). Nous introduisons les deux points de vue parallèlement. Nous présentons d'abord les équations sans terme de collision, puis nous donnons une présentation détaillée des opérateurs de collision que nous utilisons dans cette thèse.

### 1.1 Equations cinétiques sans terme de collision : équation de Vlasov, équation de Wigner

Dans un premier temps, on considère que les dimensions du système modélisé sont telles que les phénomènes quantiques n'ont qu'une influence marginale sur le comportement des particules étudiées.

#### 1.1.1 Transport classique : équation de Vlasov

On considère un nuage de particules (électrons) dans un semi-conducteur. On introduit la fonction de distribution $f$ de ces électrons. C'est une fonction du temps $t > 0$, de la position $x \in \Omega$ dans l'espace ($\Omega$ peut être l'espace $\mathbb{R}^3$ tout entier ou un sous-domaine propre de $\mathbb{R}^3$) et de la vitesse des particules $v \in \mathbb{R}^3$. La quantité $f(t, x, v)dxdv$ représente par définition le nombre de particules situées à l'instant $t$ à la position $x$ - à $dx$ près - et évoluant avec une vitesse $v$ - à $dv$ près. L'objet de la théorie cinétique est d'établir et d'étudier mathématiquement des équations d'évolution pour la fonction $f$ (cf. par exemple [14]).

Soit un électron se déplaçant à la vitesse $\mathcal{V}(t)$ le long d'une trajectoire $\mathcal{X}(t)$. On suppose ici que les phénomènes quantiques sont négligeables à l'échelle étudiée. On peut alors déduire l'équation paramétrique de la courbe $\mathcal{X}(t)$ de l'équation fondamentale de la cinématique

$$\mathcal{V}(t) = \mathcal{X}'(t) \tag{1.1}$$

et de la deuxième loi de Newton

$$m\mathcal{V}'(t) = \mathcal{F}(m, q, t, \mathcal{X}(t), \mathcal{V}(t)) \tag{1.2}$$

où $\mathcal{F}(m, q, t, x, v)$ est la résultante des forces exercées à l'instant $t$ sur une particule de masse $m$, de charge $q$, située à la position $x$ et évoluant à la vitesse $v$. Dans le cas d'un champ de force engendré par un potentiel électrique $V$, la force considérée est la force électrique $\mathcal{F}(m, q, t, x, v) = -qE(t, x)$, où le champ électrique $E(t, x) = -\nabla_x V(t, x)$ dérive du potentiel $V$ ($\nabla_x$ désigne le gradient par rapport à la variable $x$). Dans toute la suite et sauf mention contraire, toutes les constantes physiques non pertinentes pour le problème étudié sont prises égales à 1 ou $-1$ (par exemple, ici, $m = 1$ et $q = -1$). On a alors :

$$\frac{d\mathcal{X}}{dt}(t) = \mathcal{V}(t); \qquad \frac{d\mathcal{V}}{dt}(t) = -\nabla_x V(t, \mathcal{X}(t)). \tag{1.3}$$

Sous des conditions de régularité convenables sur le champ $V$, il est bien connu qu'étant données une position $x_0$ et une vitesse $v_0$ initiales quelconques, un tel système de Cauchy admet une unique solution. On cherche maintenant à calculer le nombre de particules par unité de volume (dans l'espace des phases) qui, au point $x$, ont à l'instant $t$ une vitesse égale à $v$. Par définition de la fonction de distribution $f$, ce nombre est égal à $f(t, x, v)$.

D'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, il existe une unique trajectoire $t \to (\mathcal{X}(t), \mathcal{V}(t))$ (et une unique donnée initiale $(x_0, v_0)$) solution des équations (1.1) et (1.2) telles que

$$\begin{cases} \mathcal{X}(t) = x \\ \mathcal{X}(0) = x_0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathcal{V}(t) = v \\ \mathcal{V}(0) = v_0. \end{cases}$$

Alors, on a

$$f(t, x, v) = f(t, \mathcal{X}(t), \mathcal{V}(t)).$$

Par ailleurs, en l'absence de collisions (qui pourraient faire passer une particule d'une trajectoire à l'autre), la conservation de la masse impose que le long d'une trajectoire le nombre de particules reste constant, ou encore que

$$\frac{d}{dt} f\left(t, \mathcal{X}(t), \mathcal{V}(t)\right) = \left(\partial_t f + \mathcal{X}'(t) \cdot \nabla_x f + \mathcal{V}'(t) \cdot \nabla_v f\right)(t, \mathcal{X}(t), \mathcal{V}(t)) = 0$$

où $\nabla_v$ désigne le gradient par rapport à $v$. En utilisant (1.3), on établit ainsi que $f$ est solution de l'équation de Vlasov

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) - \nabla_x V(t, x) \cdot \nabla_v f(t, x, v) = 0, \quad t > 0, \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3. \tag{1.4}$$

Les équations (1.3) définissent les courbes caractéristiques de cette équation. Selon les cas, $V$ peut être un potentiel extérieur appliqué au semi-conducteur ou bien un potentiel autoconsistant engendré par la distribution spatiale des charges électroniques, des trous et des impuretés ionisées (dopants). Dans ce dernier cas, le potentiel est solution de l'équation de Poisson

$$\Delta V = \int_{\mathbb{R}^3} f(t,x,v)dv, \tag{1.5}$$

et la fonction de distribution $f$ est alors solution du système non linéaire de Vlasov-Poisson (1.4), (1.5). Les résultats les plus généraux d'existence de solutions faibles ou de solutions régulières pour ce système peuvent être trouvées respectivement dans les travaux de R. J. DiPerna et P. L. Lions [32], [33], et P. L. et B. Perthame [54].

### 1.1.2 Transport quantique : équation de Wigner

Avec la miniaturisation progressive des composants électroniques, les échelles atteintes sont de l'ordre de la centaine, voire de la dizaine de nanomètres. A ces échelles, les électrons ne suivent plus que très approximativement les équations de la mécanique classique et les phénomènes quantiques ne sont plus négligeables. Il devient donc essentiel de proposer des modèles cinétiques tenant compte de ces aspects quantiques.

L'état d'un élecron libre soumis à un potentiel électrique $V$ peut être décrit par l'équation de Schrödinger (cf. [3], [47]) :

$$i\partial_t\psi = -\frac{\hbar}{2}\Delta\psi + V\psi. \tag{1.6}$$

On note $\mathcal{H} = -(\hbar/2)\,\Delta + V$ l'hamiltonien et $\Delta$ désigne l'opérateur laplacien. La solution $\psi$ de cette équation est la fonction d'onde associée au système considéré. On interprète généralement $|\psi(t,x)|^2$ comme la probabilité de présence de la particule en $x$ à l'instant $t$. Wigner a introduit en 1934 une transformation qui a toute solution $\psi$ de l'équation de Schrödinger (1.6) associe une fonction $W$ solution d'une équation de type cinétique (l'équation de Wigner, que nous introduisons plus bas). La transformée de Wigner d'une fonction $\psi(x)$ (avec $x \in \mathbb{R}^3$) peut s'écrire

$$W(x,p) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi\left(x+\frac{\eta}{2}\right)\psi^\star\left(x-\frac{\eta}{2}\right)e^{i\eta\cdot p/\hbar}d\eta$$

où $z^\star$ désigne le nombre complexe conjugué de $z$. L'application qui à $\psi$ associe $W$ est évidemment quadratique. L'objet naturel auquel associer *de façon linéaire* la fonction $W$ est la matrice densité

$$\rho(x,y) = \psi(x)\psi^\star(y).$$

On notera par la suite

$$W[\rho](x,p) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho\left(x+\frac{\eta}{2}, x-\frac{\eta}{2}\right)e^{i\eta\cdot p/\hbar}d\eta$$

la transformée de Wigner de la matrice densité $\rho$. Par conséquent, il devient naturel de s'intéresser à une équation sur $\rho$ équivalente à l'équation de Schrödinger et de partir d'elle

pour dériver l'équation de Wigner. On peut montrer aisément que $\psi$ est solution de l'équation de Schrödinger (1.6) si et seulement si la matrice densité $\rho$ associée à $\psi$ est solution de l'équation de Von Neumann

$$\partial_t \rho = \frac{-i}{\hbar}\,[\mathcal{H}, \rho] \tag{1.7}$$

où $[\rho, \sigma] = \rho\sigma - \sigma\rho$ désigne le commutateur de deux opérateurs $\rho$ et $\sigma$. Un calcul élémentaire permet de montrer que pour tout opérateur $\rho$ de Hilbert-Schmidt on a

$$W[\mathcal{H}, \rho](x, p) = \frac{\hbar}{i}(p \cdot \nabla_x - \theta[V])W[\rho]$$

où $\theta[V]$ est un opérateur pseudo-différentiel dépendant de $\hbar$. Par application de la transformée de Wigner, l'équation de Von Neumann (1.7) devient donc (en notant $f$ la transformée de Wigner $W[\rho]$ de $\rho$)

$$\partial_t f + p \cdot \nabla_x f - \theta[V] f = 0. \tag{1.8}$$

L'équation de Wigner (1.8) est formellement semblable à l'équation de Vlasov (1.4) où l'opérateur différentiel $\nabla_x V \cdot \nabla_p$ a été remplacé par $\theta[V]$. Dans le cas d'un champ autoconsistant donné par l'équation de Poisson, on est amené à étudier le système de Wigner-Poisson (cf. par exemple entre autres références [58], [76], [28]). Il est bien connu que les lois de la mécanique classique sont valides lorsque les dimensions du système considéré sont telles que la constante de Planck peut être considérée comme négligeable. Une attente légitime est alors que l'opérateur $\theta[V]$ soit asymptotiquement égal à $\nabla_x V \cdot \nabla_p$ lorsque $\hbar$ tend vers 0. Cet opérateur est donné par

$$\theta[V] f = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^6} \frac{V(x + \frac{\hbar}{2}\eta) - V(x - \frac{\hbar}{2}\eta)}{\hbar}\, f(t, x, p')\, e^{i(p-p')\cdot\eta}\, d\eta\, dp',$$

et le terme principal du développement limité formel en $\hbar$ de $\theta[V]$ est $\nabla_x V \cdot \nabla_p$ ce qui assure bien la convergence formelle semi-classique (c'est-à-dire lorsque $\hbar$ tend vers 0) vers l'équation de Vlasov. Ce point de vue a été etudié par de nombreux physiciens. Citons par exemple [86], [87] pour des développements en lien avec la physique statistique.

On peut donc voir l'équation de Wigner comme une généralisation quantique de l'équation de Vlasov (1.4) ou, mieux, voir cette dernière comme une approximation (valable lorsque $\hbar$ est négligeable) de l'équation de Wigner (1.8) (on trouvera une preuve rigoureuse de la limite semi-classique dans [53]). En fait, ce point de vue n'est valable que formellement puisque, à strictement parler, l'équation de Wigner qui fait l'objet de cette section n'est pas une équation cinétique dans le sens où une solution $f$ de (1.8) pourrait être interprétée aisément comme une fonction de distribution : en particulier, la positivité de $f$ n'est pas garantie. Par ailleurs, la transformée de Wigner admet une transformation inverse (la quantification de Weyl, introduite dans le chapitre 3) et par application de cette transformée à l'équation de Wigner on retrouve l'équation de Von Neumann. L'équation de Wigner est donc en fait équivalente à l'équation de Schrödinger *pour un corps*. De ce fait, il n'est pas aisé de comprendre en quoi l'équation de Wigner pourrait modéliser le transport d'un *nuage* de particules.

Ici, cette équation est avant tout utilisée comme un outil intéressant pour la dérivation de modèles macroscopiques quantiques. Equivalente mathématiquement à l'équation de Schrödinger, elle est formellement semblable à une équation cinétique et les outils utilisés pour la dérivation de modèles de diffusion à partir d'équations de type Vlasov ou Boltzmann restent pertinents pour l'étude de l'asymptotique de diffusion à partir de l'équation de Wigner.

## 1.2 Interactions avec le milieu et entre particules : Opérateurs de collision

Outre le transport des particules sous l'influence de champs de forces, il est nécessaire de rendre compte des autres types de phénomènes microscopiques et notamment des interactions entre les particules et le milieu dans lequel elles évoluent ou encore des collisions entre les particules elles-mêmes. Ces interactions sont modélisées dans les équations cinétiques par l'action d'opérateurs sur la fonction de distribution. Ces opérateurs respectent deux exigences fondamentales : ils conservent la masse et entraînent une dissipation d'entropie.

On peut scinder en deux grandes classes les types d'interactions selon le type d'opérateur qui les modélisent le mieux : interactions en volume et interactions au bord.

Les collisions entre particules ou entre les particules et le milieu (le réseau atomique du semi-conducteur par exemple) sont du premier type : elles peuvent se produire en tout point du domaine $\Omega$. On les modélise grâce à des opérateurs agissant sur la fonction de distribution $f(t, x, v)$ en tout point $x$ de $\Omega$.

A l'inverse, les collisions entre les particules et le bord du système ne se produisent par définition qu'à la frontière du domaine $\Omega$ et en général elles sont décrites par des opérateurs n'agissant que sur la trace de $f$ sur le bord de $\Omega$ : $\gamma f(t, x, v)$ pour $x \in \partial\Omega$ (où $\partial\Omega$ désigne la frontière de $\Omega$ et $\gamma$ l'opérateur trace).

L'étude mathématique des équations cinétiques tenant compte des collisions ne présente pas les mêmes types de difficultés selon que l'on considère des collisions en volume ou au bord. Il est donc naturel de présenter séparément les deux types d'opérateurs associés à ces interactions.

### 1.2.1 Collisions en volume

Si les particules sont en nombre conséquent et si le dispositif est grand par rapport au libre parcours moyen, l'influence des collisions entre particules devient importante et il est nécessaire d'en tenir compte dans l'équation. On suppose cependant que les collisions binaires ont seules de l'importance (on peut montrer que les collisions entre trois particules ou plus sont suffisamment rares pour être négligées). De façon classique, on introduit dans l'équation cinétique un opérateur $\mathcal{C}$ dont l'action sur la fonction de distribution consiste essentiellement à modifier le nombre de particules présentes le long d'une courbe caractéristique : en effet, lors d'une collision entre particules chaque particule quitte en général sa trajectoire précollisionnelle. L'équation de Vlasov est remplacée par une équation de type Boltzmann :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \nabla_x V \cdot \nabla_v f = \mathcal{C} f. \tag{1.9}$$

En l'absence de collisions la conservation de la masse se traduit par l'équation de Vlasov (1.4). Si l'on tient compte des collisions, une exigence élémentaire est que la masse soit conservée, non plus le long des trajectoires, mais globalement. On doit donc avoir :

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} f(t,x,v)dxdv = 0, \quad \forall t > 0.$$

En intégrant (1.9) et en supposant que le nombre de particules tend vers 0 pour de grandes vitesses et près du bord de $\Omega$, on obtient

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} f(t,x,v)dxdv = \int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} \mathcal{C}(f)(t,x,v)dxdv, \quad \forall t > 0.$$

Ainsi, naturellement, un opérateur de collision est dit conservatif s'il vérifie

$$\int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} \mathcal{C}(f)(x,v)dxdv = 0, \quad \forall f.$$

Dans la plupart des situations classiques, on considère que les collisions sont locales en espace. Si une collision se produit en $x$, le nombre de particules en $x$ n'est pas modifié et seules les vitesses des particules sont changées. L'opérateur $\mathcal{C}$ n'agit alors que sur la distribution en vitesse des particules et la condition de conservativité se simplifie en

$$\int_{\mathbb{R}^3} C(f)(v)dv = 0, \quad \forall f. \tag{1.10}$$

Dans toute la suite, les opérateurs de collision considérés seront locaux en espace.

L'opérateur $\mathcal{C}$ peut prendre des formes très différentes selon la physique du système considéré. Il peut en particulier être linéaire ou non linéaire, élastique ou inélastique. Un opérateur suffisamment général peut s'écrire comme un opérateur intégral de la forme

$$\mathcal{C}f = \int_{\mathbb{R}^3} \sigma(x,v,v')\left(Mf'(1-f) - M'f(1-f')\right)dv'$$

où la section efficace de collision $\sigma$ dépend de la physique du problème, $M(v) = \exp(-|v|^2/2)$ désigne la Maxwellienne et, pour une fonction $g$ quelconque on a noté $g$ et $g'$ pour $g(v)$ et $g(v')$ respectivement. Dans la suite, nous ferons toujours l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 1.1** *Les opérateurs de collisions considérés ici sont tous tels que la section efficace de collision $\sigma$ est symétrique :*

$$\sigma(v,v') = \sigma(v',v).$$

Cette hypothèse suffit à prouver la conservativité (1.10) de l'opérateur $\mathcal{C}$.

D'autre part, on souhaite obtenir une dissipation d'entropie (exigence minimale lorsque l'on modélise des phénomènes aussi typiquement irréversibles que la diffusion), c'est-à-dire pour toute solution $f$ de (1.9) une inégalité de la forme

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

où $H$ est une fonctionnelle convexe. Cette inégalité (Théorème H de Boltzmann) découle nécessairement de propriétés de l'opérateur de collision puisque l'équation de Vlasov est réversible. On doit en fait avoir une estimation du type

$$-\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}(f)h(f)dv \geq 0$$

avec $h$ convexe. Dans les travaux présentés dans cette thèse cette estimation découle généralement d'une inégalité ou, dans certains cas, d'un encadrement de la section efficace de collision. A l'équilibre thermodynamique (s'il est atteint), l'entropie devient constante et la solution $f$ de l'équation (1.9) vérifie $\mathcal{C}(f) = 0$ : on dit alors que $f$ est un état d'équilibre pour $\mathcal{C}$.

Une grande partie de l'information physique sur les collisions est modélisée à travers la section efficace de collision. En faisant quelques hypothèses sur $\sigma$ et sur $f$, on peut ainsi obtenir des cas particuliers intéressants d'opérateurs de collision.

**(i)** Si la densité électronique est très faible (c'est-à-dire si $f << 1$), alors la quantité $\mathcal{C}f$ est bien approchée par l'action sur $f$ de l'opérateur linéarisé $\mathcal{C}_{lin}$ défini par

$$\mathcal{C}_{lin}f = \int_{\mathbb{R}^3} \sigma(v', v)\,(Mf' - M'f)\,dv'.$$

L'hypothèse $f << 1$ est faite dans tous les travaux présentés ici.

On peut faire un partage entre deux grandes classes de collisions : les collisions élastiques et les collisions inélastiques. Si deux particules intéragissent et si à l'issue de l'interaction chaque particule a conservé son énergie, l'interaction est dite élastique. A l'inverse, si l'énergie de chaque particule n'est pas conservée, l'interaction est inélastique. Pour donner un sens précis à ces notions on introduit l'énergie $\varepsilon(v)$ d'une particule de vitesse $v$. Dans la suite, on prendra pour $\varepsilon$ l'énergie cinétique. En notant $\omega$ la partie angulaire de la vitesse, on effectue le changement de variables suivant

$$\begin{cases} \varepsilon = \frac{|v|^2}{2} > 0 \\ \omega = \frac{v}{|v|} \in \mathbb{S}^2 \end{cases} \tag{1.11}$$

de jacobien $\sqrt{2\varepsilon}$, de sorte que $v = \sqrt{2\varepsilon}\omega$.

En ces variables et en notant abusivement $g(\varepsilon, \omega) = g(\sqrt{2\varepsilon}\omega) = g(v)$ pour toute fonction $g$, l'opérateur $\mathcal{C}_{lin}$ s'écrit

$$\mathcal{C}_{lin}f = \int_{\varepsilon>0,\,\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon', \omega'; \varepsilon, \omega)\,(M(\varepsilon)f(\varepsilon', \omega') - M(\varepsilon')f(\varepsilon, \omega))\,\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega'.$$

Dans cette formulation, $\varepsilon$ correspond à l'énergie d'une particule après collision et $\varepsilon'$ à l'énergie précollisionnelle.

Un type particulier de collision élastique est donné par une interaction lors de laquelle une particule d'énergie post collisionnelle $\varepsilon$ résulte en fait de la collision d'une particule d'énergie précollisionnelle égale elle-même à $\varepsilon$. Lors d'une telle interaction, la fonction de distribution $f(t, x, \varepsilon, \omega)$ doit rester constante par rapport à $\varepsilon$ (le nombre de particules d'énergie $\varepsilon$ par unité de volume doit rester constant). Un opérateur modélisant de telles collisions ne doit donc agir sur $f$ qu'à travers la partie angulaire $\omega$ de la variable de vitesse.

**(ii)** Dans ce cas (qui correspond par exemple à des collisions entre électrons et des impuretés ionisées, cf. [69], la section efficace $\sigma$ peut en fait s'écrire $\sigma(v', v) = \tilde{\sigma}(v', v)\delta(\varepsilon(v') - \varepsilon(v))$ où $\varepsilon(v)$ est l'énergie d'un électron de vitesse $v$ et $\delta$ est la masse de Dirac. Si on considère l'énergie cinétique $\varepsilon(v) = |v|^2/2$, l'opérateur de collision linéaire élastique $\mathcal{C}^0_{el}$ s'écrit

$$\mathcal{C}^0_{el} f = \sqrt{2\varepsilon} \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} \tilde{\sigma}\left(\varepsilon, \omega'; \varepsilon, \omega\right) M\left(f(\varepsilon, \omega') - f(\varepsilon, \omega)\right) d\omega'. \tag{1.12}$$

Pour garantir la conservativité, on supposera, outre l'hypothèse 1.1, que $\sigma$ satisfait

$$\sigma(\varepsilon', \omega'; \varepsilon, \omega) = \sigma(\varepsilon', \omega; \varepsilon, \omega').$$

Un tel opérateur de collision est dit "local" : il agit localement en énergie puisque le nombre de particules à une énergie donnée $\varepsilon$ après collision ne dépend que du nombre de particules d'énergie précollisionnelle $\varepsilon$ (et non de toutes les énergies $\varepsilon' > 0$). On peut également modéliser des collisions élastiques "non locales" par un opérateur intégral agissant sur la variable d'énergie comme suit :

$$\mathcal{C}^1_{el} f = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\sigma}\left(\varepsilon', \omega'; \varepsilon, \omega\right) M\left(f(\varepsilon', \omega') - f(\varepsilon', \omega)\right) \sqrt{2\varepsilon'} d\varepsilon' d\omega'. \tag{1.13}$$

Cet opérateur est bien élastique puisque les énergies pré et post collisionnelle sont égales, mais il est non local. Un tel opérateur sera utilisé par la suite dans la présentation du modèle SHE *couplé* (cf. section 2.4).

Dans la physique des semi-conducteurs, les interactions entre les électrons et le réseau atomique sont très importantes et peuvent assurer la thermalisation du système dans certains cas (par exemple lorsque la densité électronique est trop faible pour que les collisions entre électrons soient dominantes). Le réseau atomique est en vibration constante du fait de l'agitation thermique et on peut modéliser ces vibrations par des oscillateurs harmoniques de pulsation propre $\omega_0 > 0$ avec lesquels les électrons échangent de l'énergie (en première approximation, on peut supposer que tous les oscillateurs ont même pulsation propre). En fait, la modélisation par des oscillateurs est trompeuse puisque les électrons ne peuvent pas échanger n'importe quelle quantité d'énergie avec le réseau : ils ne peuvent que gagner ou perdre une énergie multiple du quantum d'énergie $\hbar\omega_0$. Ceci conduit à introduire en guise de quantification des oscillateurs harmoniques une pseudo-particule d'énergie $\hbar\omega_0$, le phonon. L'interaction d'un électron avec le réseau atomique se traduit en fait par l'absorption ou l'émission d'un phonon d'énergie $\hbar\omega_0$ (où $\hbar$ désigne la constante de Planck réduite). L'énergie post collisionnelle d'un électron de vitesse $v'$ avant absorption (resp. émission) d'un phonon d'énergie $\hbar\omega_0$ est alors $\varepsilon = \varepsilon' + \hbar\omega_0$ (resp. $\varepsilon = \varepsilon' - \hbar\omega_0$) où $\varepsilon' = |v'|^2/2$. La probabilité pour qu'une collision ait lieu dépend nécessairement de la quantité de phonons dans le réseau soit, plus précisément, du nombre d'occupation $N_0$ des phonons. Les phonons étant des bosons, ce nombre est donné par la statistique de Bose-Einstein, soit :

$$N_0 = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1},$$

où $k_B$ est la constante de Boltzmann et $T$ la température du réseau. Tenant compte de ceci,

**(iii)** les interactions entre électrons et phonons sont bien modélisées par une section efficace

$$\sigma(v', v) = \tilde{\sigma}(v', v)\,(\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0))$$

où $\tilde{\sigma}$ s'exprime en fonction de $N_0$ et de $\hbar\omega_0$ (cf. [62] pour plus de détails. Quelques éléments d'information sont rappelés dans les chapitres 3 et 4). L'opérateur s'écrit alors

$$\mathcal{C}_{e\varphi}(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\sigma}(v', v)\,(Mf' - M'f)\,(\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0))\,dv'$$

sous l'hypothèse de faible densité $f << 1$.

Remarquons que les termes $\delta(\varepsilon' - \varepsilon \pm \hbar\omega_0)$ sont proches de $\delta(\varepsilon' - \varepsilon)$, et donc $\mathcal{C}_{e\varphi} \approx \mathcal{C}^0_{el}$ si l'énergie des électrons est très élevée par rapport à l'énergie $\hbar\omega_0$ des phonons. L'opérateur $\mathcal{C}_{e\varphi}$ est donc bien adapté pour décrire des systèmes où l'énergie électronique n'est pas trop élevée, ce qui est par exemple le cas lorsque la tension appliquée au semi-conducteur reste faible.

Ces opérateurs de collision modélisent des interactions relevant essentiellement de la mécanique classique et un des enjeux importants de la modélisation du transport de particules dans les semi-conducteurs consiste à rendre compte d'interactions de type quantique. Ce travail fait l'objet du Chapitre 3 et sera détaillé dans la section 1 de l'introduction.

### 1.2.2 Collisions au bord

Les opérateurs de collision que nous venons de présenter ne permettent pas de rendre compte d'interactions localisées le long d'une surface. La plupart des systèmes physiques usuels (semi-conducteurs, panneaux solaires, etc.) sont évidemment bornés et il est crucial de parvenir à modéliser les interactions entre le nuage de particules considéré et le bord du domaine. A l'échelle cinétique, on doit pouvoir distinguer les particules sortant du domaine (*i.e.* dont la vitesse $v'$ est de même sens que la normale extérieure $n$ au domaine) des particules réémises par la paroi (dont la vitesse $v$ est de sens opposé à celui de la normale extérieure). On note $\gamma^{\pm} f$ la restriction de $f$ à $\{(x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3 / \pm v \cdot n(x) > 0\}$ ; $\gamma^+ f$ (resp. $\gamma^- f$) représente donc la fonction de distribution des particules sortant (resp. entrant) dans le domaine. Pour simplifier la présentation, nous supposons que $\Omega$ est en fait le demi-espace $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^*_-$. Alors, $\partial\Omega = \mathbb{R}^2 \times \{0\} \cong \mathbb{R}^2$ et $\gamma^{\pm} f$ est la restriction de $f$ à $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^3_{\pm}$ où $\mathbb{R}^3_{\pm} = \{v \in \mathbb{R}^3 / \pm v_z > 0\}$. On note $v = (v_1, v_2, v_z)$, $\underline{v} = (v_1, v_2)$, $x = (x_1, x_2, x_z)$, $\underline{x} = (x_1, x_2)$ et, plus généralement, pour tout vecteur $l$ de $\mathbb{R}^3$, $l = (l_1, l_2, l_z) = (\underline{l}, l_z)$.

L'enjeu est alors de savoir déterminer la distribution $\gamma^- f$ des particules réémises par le mur connaissant la distribution $\gamma^+ f$ des particules incidentes au moment de la collision avec le mur. Il s'agit de déterminer un opérateur (de collision avec le bord) $\mathcal{K}$ tel que

$$\gamma^- f = \mathcal{K}\left(\gamma^+ f\right). \tag{1.14}$$

L'équation que l'on considère est alors l'équation de Vlasov (1.4) (dans le cas où les collisions en volume sont négligeables devant les collisions au bord) ou l'équation de Boltzmann (1.9) associée à une condition au bord du type (1.14)

Le choix de $\mathcal{K}$ dépend du comportement des particules le long de la frontière $\partial\Omega$. En première approximation, on peut supposer que les particules subissent des collisions élastiques avec le bord ; alors la condition au bord est une condition de type *réflexion spéculaire* :

$$\gamma^- f(t,x,v) = \gamma^+ f(t,x,v_*), \quad \forall x \in \partial\Omega$$

avec $v_* = (v_1, v_2, -v_z)$. Cette condition est valide en présence d'une surface parfaitement lisse, ce qui n'est pas du tout réaliste ici puisque les particules considérées (électrons) sont de taille subatomique : à cette échelle les parois des matériaux présentent évidemment de nombreuses aspérités. En fait parler de collision n'a même pas grand sens, les électrons étant diffusés par les atomes de la paroi plutôt qu'ils ne subissent des collisions. On préférera donc modéliser la réflexion des particules par la paroi sous la forme d'un opérateur diffusif :

$$\gamma^- f(v) = \mathcal{K}(\gamma^+ f)(v) = \left( \int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v) \gamma^+ f(v') |v'_z| dv' \right) M(v), \quad \forall v \in \mathbb{R}^3 \text{ s. t. } v_z < 0 \quad (1.15)$$

où $\kappa(v' \to v)|v'_z|dv'M(v)$ est la probabilité qu'une particule de vitesse $v'$ soit réémise avec une vitesse $v$. On parle de *réflexion diffusive* lorsque la section efficace de collision $\kappa$ est strictement positive.

La conservation de la masse impose que le nombre de particules réémises après collision soit égal au nombre de particules ayant heurté la paroi (on exclut donc ici les phénomènes d'attachement), ce qui se traduit au niveau de la section $\kappa$ par la contrainte suivante :

$$\int_{v_z<0} \kappa(v' \to v) M(v) |v_z| dv = 1.$$

Dans le cas où les collisions en volume sont négligeables, on peut retrouver un analogue du Théorème H de Boltzmann pour l'opérateur de collision au bord sous la forme d'une inégalité de type Darrozès-Guiraud (cf. [19]). Nous détaillerons ce point en section 3.

De même que dans le cas de collisions en volume on peut, en faisant diverses hypothèses sur la section $\kappa$, modéliser des types d'interaction différents. Nous nous intéresserons principalement au cas des interactions élastiques. En posant $\kappa(v' \to v) = \tilde{\kappa}(v' \to v)\delta(\varepsilon(v') - \varepsilon(v))$ on obtient un opérateur de collision *élastique* et *local* (cf. le paragraphe consacré aux collisions en volume pour la terminologie). L'obtention d'un opérateur élastique mais *non local* est plus délicate que dans le cas des interactions en volume puisque, clairement, une condition au bord modélisant des interactions non locales en énergie ne peut pas se mettre sous la forme (1.14). Nous détaillerons en section 3 un moyen de modéliser des interactions élastiques non locales.

# 2 Modélisation macroscopique des phénomènes de transport : Méthodes de perturbation singulière

Dans la plupart des applications, il est très délicat de mettre en oeuvre des simulations numériques des équations cinétiques à peu de frais. Pour cette raison, dès les années 1950 [81]

on a cherché à développer des modèles approchant la réalité physique suffisamment pour donner des informations précises sur les systèmes modélisés et qui soient moins coûteux numériquement que les modèles cinétiques. Par analogie avec la dynamique des gaz, des modèles de type diffusif ou hydrodynamique ont successivement vu le jour pour rendre compte du comportement d'électrons dans des semi-conducteurs. Dans cette thèse, nous nous attachons exclusivement à l'étude de modèles de diffusion, par conséquent nous ne parlerons pas de modèles hydrodynamiques dans cette introduction, même s'ils ont une importance cruciale dans certains des travaux de modélisation actuels. Les premiers modèles diffusifs obtenus pour les semi-conducteurs sont les modèles de Dérive Diffusion (DD), ou modèles de Van Roosbroeck [81].

Les modèles DD sont fondés sur l'hypothèse que lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint, la distribution des particules (électrons) dans l'espace des phases est une Maxwellienne. Or, dans de nombreux cas, l'équilibre thermodynamique n'est pas Maxwellien tout en étant une fonction de l'énergie cinétique (comme dans le cas du transport de petits ions dans un champ électrique [65]). Le modèle Spherical Harmonics Expansion (SHE), également appelé modèle de Fokker-Planck, est bien adapté à de telles situations. Il apparaît dans de nombreux domaines de la physique et de la chimie [70] et trouve de larges applications notamment dans la description de la cinétique électronique dans les décharges de gaz et dans les plasmas [74], [48], [68], mais aussi dans les semi-conducteurs [12], [11]. Une des premières utilisations de ce modèle remonte aux travaux de Stratton [77], [78], [79], [80]. Par la suite le modèle SHE a été utilisé comme une méthode numérique d'approximation pour les modèles cinétiques [83], [40], [72], [39], [41], [52], [42].

L'obtention de modèles diffusifs ou fluides à partir d'équations cinétiques remonte aux travaux pionniers de Hilbert [46] dans un article célèbre où il jette les fondements d'une approche qui sera améliorée plus tard par Chapman [16] et Enskog [35]. Grad [45] a ensuite fourni un cadre mathématique et, à sa suite, de multiples travaux ont appliqué ces techniques à la dynamique des gaz. Dans le cas des semi-conducteurs, l'établissement des modèles DD à partir de l'équation de Boltzmann revient en premier lieu aux physiciens ([63], [82], [71], [18], etc.). Les aspects mathématiques ont été traités par F. Poupaud dans [66] (voir aussi les travaux de C. Bardos, R. Santos et R. Sentis [7], ou encore E. Larsen et J. B. Keller [49] dans le cas de la neutronique). On trouvera une revue des résultats principaux sur ce thème dans l'ouvrage [62].

Le modèle SHE, pour sa part, a été établi par P. Dmitruk, A. Saul et L. Reyna dans une limite diffusive à partir de l'équation de Boltzmann pour la première fois dans [34]. L'analyse développée dans ce travail restreint l'établissement du modèle aux scatterings isotropiques (et celle de [83] se limite aux diagrammes de bande à symétrie sphérique). Il faut attendre les travaux de P. Degond et N. Ben Abdallah [8] pour l'obtention du modèle dans un contexte général. Par la suite, P. Degond a introduit un modèle de type SHE dans lequel les niveaux d'énergie sont couplés dans l'équation de courant. Ce modèle devrait permettre de mieux décrire les interactions inélastiques. Il a été établi formellement et rigoureusement pour la première fois par P. Degond dans [21], puis appliqué à la neutronique par T. Goudon et A. Mellet [44].

## 2.1 Généralités : le système de Dérive Diffusion

L'équation de diffusion la mieux connue est bien sûr l'équation de la chaleur qui relève d'une catégorie assez large d'équations : les équations de Dérive Diffusion. Considérons un gaz d'électrons dans un domaine $\Omega$ de l'espace (avec $\Omega = \mathbb{R}^3$ éventuellement), soumis à un potentiel électrique $V$ supposé donné. Les équations de Dérive Diffusion décrivent l'évolution au cours du temps d'une quantité macroscopique, la densité $n(t,x)$ de particules (électrons), qui est une fonction du temps $t$ et de la position $x$. Si l'on note $j(t,x)$ le flux de particules en un point $x$ et à l'instant $t$, la conservation de la masse impose que la variation spatiale de ce flux soit égale à la variation temporelle de la densité, ce qui s'exprime par l'équation de continuité suivante :

$$\partial_t n(t,x) + \nabla_x j(t,x) = 0. \tag{2.16}$$

Pour fermer le système DD il reste à trouver une relation supplémentaire entre le courant $j$ et la densité $n$. Intuitivement, il semble clair que, du fait des interactions (répulsion électrostatique, collisions), les électrons auront tendance à fuir les zones de forte densité pour gagner les zones de faible densité. Ainsi, si les particules à un instant donné se répartissent dans l'espace selon un gradient de densité $\nabla_x n$, le courant sera vraisemblablement dirigé selon le sens opposé à ce gradient. De même, les électrons sont accélérés par la force électrique $\nabla_x V$, ce qui se traduit à l'échelle macroscopique par un mouvement de dérive du gaz d'électron dirigé dans le sens de cette force.

Ceci s'exprime précisément selon l'équation de courant suivante (dite loi de Fick) :

$$j(t,x) = -\mathbb{D}\left(\nabla_x n - \nabla_x V\, n\right)$$

où, d'après les considérations qui précèdent, la matrice de diffusion $\mathbb{D}$ doit être positive. Son expression exacte dépend de la physique du problème considéré (en l'occurrence, du type d'interactions qui entraînent la diffusion - collisions, etc.). Un des buts principaux de la modélisation mathématique des phénomènes de transport est de parvenir à spécifier explicitement la matrice de diffusion à partir de considérations physiques précises sur le comportement microscopique des particules.

La théorie mathématique du modèle de Dérive Diffusion dans le cas des semi-conducteurs est traitée dans ses grandes lignes par P. A. Markowich dans [57] et sa résolution numérique est présentée dans [73].

## 2.2 Lien entre équilibre thermodynamique et opérateur de collision

Une des perspectives courantes consiste à étudier les équations cinétiques de type (1.9) au voisinage de l'équilibre thermodynamique. Il est à noter que c'est l'existence d'un Théorème H pour l'opérateur $\mathcal{C}$ qui garantit (au moins formellement) la convergence du système vers un équilibre thermodynamique. Dans des cas simples, l'inégalité d'entropie découle de la coercivité de l'opérateur de collision sur un certain espace et on peut en déduire explicitement le noyau de $\mathcal{C}$. Nous nous placerons dans ce cas par la suite.

Dans des situations de ce type, étudier le comportement d'une solution $f$ de (1.9) au voisinage de l'équilibre revient à analyser son évolution lorsqu'elle est proche du noyau de l'opérateur

$\mathcal{C}$. Pour cela, on étudie le comportement de $f$ à l'échelle de diffusion : en temps long et à une échelle spatiale macroscopique. On introduit le changement d'échelle suivant

$$\begin{cases} t' = \eta^2 t \\ x' = \eta x \end{cases} \tag{2.17}$$

où $x$ et $t$ sont les variables microscopiques et $x'$ et $t'$ les variables macroscopiques. On notera que, pour $\eta$ petit, l'unité de longueur (ou de temps) en les nouvelles variables n'est atteinte que pour des valeurs très grandes de $x$ (ou de $t$). Les nouvelles variables $x'$ et $t'$ correspondent donc bien à une échelle macroscopique. Dans la suite, on négligera de noter les primes pour préserver la lisibilité des équations. Le paramètre $\eta$ peut par exemple être pris égal au rapport entre l'échelle typique à laquelle se produisent les phénomènes microscopiques (de l'ordre du libre parcours moyen : quelques nanomètres) et l'échelle du dispositif (quelques centaines de nanomètres, voire quelques microns).

Après changement d'échelle, l'équation de Boltzmann (1.9) s'écrit

$$\eta^2 \partial_t f^\eta + \eta \left( v \cdot \nabla_x f^\eta - \nabla_x V \cdot \nabla_v f^\eta \right) = \mathcal{C} f^\eta. \tag{2.18}$$

Si $\eta$ est très petit, le terme dominant dans l'équation (2.18) est $\mathcal{C} f^\eta$ et, en première approximation, la solution $f^\eta$ doit donc être proche du noyau de $\mathcal{C}$ : on doit avoir $\mathcal{C}(f^\eta) = 0$ à $\mathcal{O}(\eta)$ près. La fonction $f^\eta$ est donc proche de l'équilibre. Etudier le comportement de $f^\eta$ au voisinage de l'équilibre du système revient donc à déterminer une équation sur la limite $f^0$ de $f^\eta$ lorsque $\eta$ tend vers 0.

Une des méthodes les plus courantes repose sur l'idée de développement limité (sur les développements de Hilbert ou de Chapman-Enskog, voir par exemple [17], [15]) et sur l'étude du projecteur $\mathcal{P}$ sur le noyau de $\mathcal{C}$.

### 2.2.1 Thermalisation complète

Dans le cas où les collisions entre particules conduisent à une thermalisation complète (le système atteint un équilibre thermique caractérisé par une température homogène), la répartition des particules dans l'espace des vitesses est donnée par une Maxwellienne. L'équilibre est donc de la forme $f(t,x,v) = n(t,x)M(v)$ avec $M(v) = \exp(-|v|^2/2)$. C'est la situation où les équations de type Dérive Diffusion sont pertinentes. L'opérateur $\mathcal{C}_{lin}$ est particulièrement adapté à cette situation. En effet, on peut prouver facilement que si la section $\sigma$ est minorée uniformément :

$$\sigma(v,v') \geq \underline{\sigma} > 0.$$

alors cet opérateur vérifie l'inégalité d'entropie suivante :

$$-\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}_{lin}(f) \frac{f}{M} dv \geq C \parallel f - \mathcal{P}_{DD}(f) \parallel^2_{L^2(\mathbb{R}^3)}$$

pour toute fonction $f$ dans $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$. L'opérateur $\mathcal{P}_{DD}$ est le projecteur sur le sous-espace de $L^2(\mathbb{R}^3)$ engendré par la Maxwellienne $M$ :

$$\mathcal{P}_{DD}(f) = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} f(v')dv'}{\int_{\mathbb{R}^3} M(v')dv'} M(v).$$

Le noyau Ker $(\mathcal{C}_{lin})$ de $\mathcal{C}_{lin}$ est donc clairement engendré par la Maxwellienne $M$. Notons enfin que l'image Im $(\mathcal{C}_{lin})$ de $\mathcal{C}_{lin}$ est fermée et égale à l'orthogonal du noyau dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3, M^{-1}dv)$. L'opérateur de collision est donc inversible sur son image et l'équation

$$\mathcal{C}_{lin}(f) = g$$

d'inconnue $f$ admet une solution dans Im $(\mathcal{C}_{lin})$ sous la condition de solvabilité

$$\mathcal{P}_{DD}(g) = 0. \tag{2.19}$$

### 2.2.2 Thermalisation partielle

Si on se place à une échelle intermédiaire où le système n'est pas complètement thermalisé mais où la répartition des particules dans l'espace des phases se caractérise par une certaine régularité, on peut chercher à développer des modèles intermédiaires entre les modèles cinétiques et les modèles de Dérive Diffusion. C'est sur cette idée que se fonde l'étude des modèles de type SHE. On suppose que les particules peuvent être classées selon leur niveau d'énergie et que leur répartition selon la direction de leur vitesse est homogène. Formulé de façon cinétique, cela revient à exiger que $f(t,x,v) = f(t,x,v')$ pour tout couple $(v,v')$ tel que $|v| = |v'|$. L'équilibre est alors de la forme $f(t,x,v) = F(t,x,|v|^2/2)$. L'opérateur $\mathcal{C}^0_{el}$ défini par (1.12) en section 1.2 est bien adapté à la modélisation de ce type de système. Il fait en effet relaxer la fonction de distribution $f$ vers une fonction de l'énergie puisque l'inégalité d'entropie suivante est vérifiée pour tout $f$ :

$$-\int \mathcal{C}^0_{el}(f)\frac{f}{M}dv \geq C \parallel f - \mathcal{P}_{SHE}(f) \parallel^2_{L^2(\mathbb{R}^3;M^{-1}dv)} \tag{2.20}$$

lorsqu'on a

$$\sigma(v,v') \geq \underline{\sigma} > 0$$

par exemple. L'opérateur $\mathcal{P}_{SHE}$ est le projecteur sur l'espace des fonctions constantes par rapport à la partie angulaire de la vitesse (c'est-à-dire des fonctions qui ne dépendent de la vitesse qu'à travers l'énergie cinétique $\varepsilon = |v|^2/2$) :

$$\mathcal{P}_{SHE}(f)(v) = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} f(v')\delta\left(\varepsilon(v') - \varepsilon(v)\right)dv'}{\int_{\mathbb{R}^3} \delta\left(\varepsilon(v') - \varepsilon(v)\right)dv'} = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathbb{S}^2} f(t,x,|v|\omega')d\omega'$$

où $\varepsilon(u) = |u|^2/2$. Le noyau de $\mathcal{C}^0_{el}$ est donc bien constitué des fonctions de l'énergie.

L'image Im $(\mathcal{C}^0_{el})$ de $\mathcal{C}^0_{el}$ est fermée et égale à l'orthogonal du noyau dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$. L'opérateur de collision est donc inversible sur son image et l'équation

$$\mathcal{C}^0_{el}(f) = g$$

d'inconnue $f$ admet une solution dans Im $(\mathcal{C}^0_{el})$ sous la condition de solvabilité

$$\mathcal{P}_{SHE}(g) = 0. \tag{2.21}$$

## 2.3 Dérivation formelle des systèmes DD et SHE

La dérivation formelle de modèles de diffusion à partir d'une équation cinétique peut souvent être effectuée en suivant une méthode générale utilisant des notions comme le développement de Hilbert ou de Chapman-Enskog. Les dérivations de modèles diffusifs données dans ce travail sont fondées sur cette méthode et, pour clarifier les idées utilisées dans les chapitres suivant, nous les illustrons ici dans un cas simple de dérivation d'un modèle SHE. Par ailleurs, la dérivation formelle de systèmes de Dérive Diffusion est assez connue (cf. par exemple [66] et, dans le cas du transport de neutrons, [7]) et il nous semble profitable de présenter parallèlement la dérivation d'un modèle SHE et d'un modèle DD pour montrer les analogies et les différences entre les deux démarches.

Dans tous les cas, on part de l'équation (2.18) après changement d'échelle. L'opérateur $\mathcal{C}$ est pris égal à $\mathcal{C}_{lin}$ ou $\mathcal{C}^0_{el}$. On suppose que la suite $f^\eta$ présente suffisamment de régularité par rapport à $\eta$ pour que le développement limité suivant (développement de Hilbert) ait un sens

$$f^\eta = f^0 + \eta f^1 + \eta^2 f^2 + \mathcal{O}\left(\eta^3\right). \tag{2.22}$$

La méthode (formelle) repose sur l'identification des termes de même ordre en $\eta$ dans l'équation (2.18) où l'on a remplacé $f^\eta$ par le développement (2.22). Nous détaillons cette méthode en insistant particulièrement sur le traitement des termes d'ordre 1 qui est crucial pour l'obtention des coefficients de diffusion.

**Termes d'ordre** 0 **:** L'ordre 0 en $\eta$ donne la valeur asymptotique de $f^\eta$. On doit avoir $\mathcal{C}(f^0) = 0$, ce qui implique, selon que $\mathcal{C}$ est pris égal à $\mathcal{C}_{lin}$ ou à $\mathcal{C}^0_{el}$ :

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $f^0 = \mathcal{P}_{DD}\left(f^0\right)$, c-à-d $f^0(t,x,v) = n(t,x)M(v)$ | $f^0 = \mathcal{P}_{SHE}(f^0)$, c-à-d $f^0(t,x,v) = F(t,x,\varepsilon(v))$. |

Le terme d'ordre 0 dans le développement de Hilbert est donc égal à l'équilibre thermodynamique (Maxwellienne dans le cas d'une thermalisation complète, fonction de l'énergie dans le cas d'une thermalisation partielle).

**Termes d'ordre** 1 **:** A l'ordre 1 on obtient l'équation suivante

$$\left(v \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_v\right) f^0 = \mathcal{C} f^1$$

dont nous donnons les formes exactes ainsi que les conditions de solvabilité selon que l'on considère $\mathcal{C} = \mathcal{C}_{lin}$ ou $\mathcal{C} = \mathcal{C}^0_{el}$ :

| | Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|---|
| | $M(v)v \cdot (\nabla_x n - \nabla_x V n) = \mathcal{C}_{lin}(f^1)$ | $v \cdot \nabla F = \mathcal{C}^0_{el}(f^1)$ |
| Conditions de solvabilité : | $\int M(v)v \cdot (\nabla_x n - \nabla_x V n) dv = 0$ | $\int v \cdot \tilde{\nabla} F d\omega = 0.$ |

Notons que les conditions de solvabilité sont assurées par imparité. Nous avons noté $\tilde{\nabla} = \nabla_x - \nabla_x V \partial_\varepsilon$. Ces équations peuvent donc être inversées (puisque $\mathcal{C}$ est un isomorphisme de l'orthogonal de son noyau sur lui-même) et on obtient

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $f^1 = \mathcal{C}_{lin}^{-1}(M(v)v \cdot (\nabla_x n - \nabla_x V n))$ | $f^1 = \mathcal{C}_{el}^{0\,-1}(v \cdot \tilde{\nabla} F)$ |

(2.23)

c'est-à-dire

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $f^1 = \mathcal{C}_{lin}^{-1}(M(v)v) \cdot (\nabla_x n - \nabla_x V n)$ | $f^1 = \mathcal{C}_{el}^{0\,-1}(v) \cdot \tilde{\nabla} F.$ |

(2.24)

Soulignons que le passage de (2.23) à (2.24) repose sur le fait que $\mathcal{C}_{el}^0$ (resp. $\mathcal{C}_{lin}$) n'agit que sur la variable d'angle $\omega$ (resp. de vitesse $v$), si bien que, pour toutes fonctions $\phi(x, \varepsilon)$, $\psi(x)$ et $f(x, v)$, on a :

$$\mathcal{C}_{el}^0(f\phi) = \mathcal{C}_{el}^0(f)\phi, \ \left(\mathcal{C}_{el}^0\right)^{-1}(f\phi) = \left(\mathcal{C}_{el}^0\right)^{-1}(f)\phi \tag{2.25}$$

(resp. $\mathcal{C}_{lin}(f\psi) = \mathcal{C}_{lin}(f)\psi$ et $\mathcal{C}_{lin}^{-1}(f\psi) = \mathcal{C}_{lin}^{-1}(f)\psi$). Cette propriété de $\mathcal{C}_{el}^0$ est directement liée au fait que cet opérateur est *local* en énergie. (Le fait qu'il soit élastique ne suffit pas : l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^1$ défini par (1.13) en section 1.2 n'a pas de propriété analogue.) Notons aussi que, pour une fonction vectorielle $\xi$ de composantes $\xi_i$, $\mathcal{C}^{-1}(\xi)$, s'il existe, est le vecteur de composantes $\mathcal{C}^{-1}(\xi_i)$.

Les équations (2.24) peuvent être interprétées comme des lois de Fick. En effet, définissant le courant de la façon suivante :

$$j_{DD} = \mathcal{P}_{DD}(vf^1)M^{-1}, \qquad J_{SHE} = \sqrt{2\varepsilon}\ \mathcal{P}_{SHE}(vf^1)$$

on a, en projetant (2.24) sur $(\text{Ker}\ \mathcal{C})^\perp$ :

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $j_{DD} = -\mathbb{D}_{DD}\left(\nabla_x n - \nabla_x V n\right)$ | $J_{SHE} = -\mathbb{D}_{SHE}\tilde{\nabla} F$ |
| $\mathbb{D}_{DD} = \mathcal{P}_{DD}\left(v \otimes \mathcal{C}_{lin}^{-1}\left(-v\, M(v)\right)\right) M^{-1}$ | $\mathbb{D}_{SHE} = \sqrt{2\varepsilon}\ \mathcal{P}_{SHE}\left(v \otimes \mathcal{C}_{el}^{0\,-1}(-v)\right).$ |

On voit dès lors comment une telle méthode permet de déduire la valeur des constantes de diffusion d'un modèle macroscopique à partir d'équations microscopiques bien établies. Au frais d'une hypothèse (on suppose que le changement de variables (2.17) et le passage à la limite $\eta \to 0$ sont valides mathématiquement et ont un sens physique précis) on obtient une information directe sur les tenseurs de diffusion en s'affranchissant d'un intermédiaire expérimental (qui reste néanmoins nécessaire à titre de validation *a posteriori* de la méthode de perturbation singulière). Remarquons enfin que toutes les informations contenues dans la matrice de diffusion $\mathbb{D}$ découlent de propriétés de l'opérateur de collision $\mathcal{C}$, ce qui n'est qu'une façon de dire précisément que la diffusion constatée à l'échelle macroscopique résulte des collisions entre particules - ou encore, que la thermalisation est le produit des collisions.

**Termes d'ordre** 2 **:** Le terme $f^1$ est désormais connu. On a, à l'ordre 2

$$\partial_t f^0 + (v \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_v) f^1 = \mathcal{C}(f^2)$$

et la condition de solvabilité de cette équation d'inconnue $f^2$ s'écrit

$$\mathcal{P}\left(\partial_t f^0 + (v \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_v) f^1\right) = 0$$

où $\mathcal{P}$ est le projecteur sur le noyau de $\mathcal{C}$. Des calculs simples conduisent à

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $\partial_t n + \nabla_x \cdot j_{DD} = 0$ | $\sqrt{2\varepsilon}\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J_{SHE} = 0$ |

Les modèles obtenus sont donc :

| Dérive Diffusion | SHE |
|---|---|
| $\partial_t n + \nabla_x \cdot j_{DD} = 0$ | $\sqrt{2\varepsilon}\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J_{SHE} = 0$ |
| $j_{DD} = -\mathbb{D}_{DD}\left(\nabla_x n - \nabla_x V n\right)$ | $J_{SHE} = -\mathbb{D}_{SHE}\tilde{\nabla} F$ |
| $\mathbb{D}_{DD} = \mathcal{P}_{DD}\left(v \otimes \mathcal{C}_{lin}^{-1}\left(-v\, M(v)\right)\right) M^{-1}$ | $\mathbb{D}_{SHE} = \sqrt{2\varepsilon}\ \mathcal{P}_{SHE}\left(v \otimes {\mathcal{C}_{el}^{0}}^{-1}(-v)\right).$ |

Tab. 1.1 – Modèles DD et SHE

On peut également reprendre la dérivation formelle du modèle SHE en choisissant pour opérateur de collision un opérateur de la forme

$$\mathcal{C}(f) = \mathcal{C}_{el} + \beta \mathcal{C}_{inel}$$

où le noyau de l'opérateur (élastique et local) $\mathcal{C}_{el}$ est formé de fonctions de l'énergie seulement, l'opérateur $\mathcal{C}_{inel}$ peut être assez général (et, en particulier, il peut être inélastique), et le paramètre $\beta$ doit être de l'ordre de $\eta^2$. On obtient alors un modèle SHE collisionnel qui s'écrit :

$$\begin{aligned}
&\sqrt{2\varepsilon}\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J_{SHE} = \mathcal{Q}(F)\\
&J_{SHE} = -\mathbb{D}_{SHE}\tilde{\nabla} F\\
&\mathbb{D}_{SHE} = \sqrt{2\varepsilon}\ \mathcal{P}_{SHE}\left(v \otimes {\mathcal{C}_{el}^{0}}^{-1}(-v)\right)\\
&\mathcal{Q}(F) = \sqrt{2\varepsilon}\mathcal{P}_{SHE}\left(\mathcal{C}_{inel}(F)\right).
\end{aligned}$$

Soulignons pour terminer que la positivité de la matrice de diffusion découle de la coercivité de l'opérateur de collision qui, elle-même, est une conséquence de l'estimation uniforme suivante :

$$\sigma(x, v, v') \geq \underline{\sigma} > 0.$$

Cette estimation implique notamment que le noyau de collision ne dégénère pas et, donc, que les collisions font intervenir des particules de toutes vitesses et sont homogènes spatialement.

Notons enfin que dans certains cas la diffusion peut être le produit des interactions entre les particules et le bord du domaine, par exemple lorsque les collisions en volume sont négligeables devant les collisions au bord et que celles-ci sont de type diffusif (chaque particule frappant le mur avec une vitesse $v'$ est réémise avec une vitesse $v$, la distribution des vitesses de réémission étant par exemple une Maxwellienne). La dérivation de modèles de type SHE dans ce cas fera l'objet du chapitre 5 qui sera présenté en section 3. Remarquons dès maintenant que, dans le cas d'une diffusion générée par les collisions pariétales, la dérivation formelle est structurellement semblable à celle que nous venons de présenter, à ceci près que l'inégalité d'entropie (2.20) est remplacée par une inégalité de type Darrozès-Guiraud [19]. La principale difficulté est alors de déduire la nature de l'équilibre thermodynamique (une fonction de $x \in \Omega$ et $v \in \mathbb{R}^3$) à partir de l'étude du noyau de l'opérateur de collision au bord (qui opère seulement sur les *traces* entrantes et sortantes qui sont des fonctions de $x \in \partial\Omega$ et $v \in \mathbb{R}^3$).

## 2.4 Remarque générale sur le modèle SHE Le modèle SHE couplé

La dérivation de modèles de diffusion à partir d'équations cinétiques repose sur une donnée fondamentale : l'opérateur de collision choisi doit faire relaxer la fonction de distribution vers un équilibre thermodynamique correspondant au type de modèle diffusif souhaité (DD, Energie Transport, SHE, etc.). En particulier, les conditions de validité des modèles diffusifs ainsi obtenus dépendent étroitement du domaine d'application de l'opérateur de collision choisi. Le modèle de Dérive Diffusion est assez limité puisqu'il n'est vraiment pertinent que lorsqu'on peut attribuer une température au système considéré. En particulier, il est exclu de modéliser par une équation de type DD des systèmes où la fonction de distribution des particules n'est pas proche d'une Maxwellienne.

Le modèle SHE lève en partie la difficulté en autorisant la modélisation macroscopique de systèmes présentant une fonction de distribution paire mais non nécessairement Maxwellienne. Cependant, ce modèle est également limité théoriquement par le fait qu'il n'est rigoureusement dérivable d'équations cinétiques que dans le cas où les collisions dominantes sont élastiques. Or, dans la plupart des situations physiquement pertinentes, les interactions particulaires sont très largement inélastiques. Une étape suivante dans la modélisation des matériaux semi-conducteurs consiste donc à proposer des modèles diffusifs de type SHE permettant de modéliser au mieux les interactions inélastiques.

On peut représenter grossièrement l'effet d'une interaction sur une particule de vitesse $v'$ sous la forme du diagramme 1.1. La particule, dont la vitesse précollisionnelle est $v'$, subit une collision qui l'amène à la vitesse $v$. Une représentation réaliste de cette interaction est donnée en traits pleins. L'énergie et la partie angulaire de la vitesse changent progressivement et simultanément. Ce type de collision est bien modélisé par un opérateur de la forme

$$\mathcal{C}_{lin}(f) = \int_{\varepsilon'>0} \int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon', \omega'; \varepsilon, \omega) \left(Mf\left(\varepsilon', \omega'\right) - M'f\left(\varepsilon, \omega\right)\right) \sqrt{2\varepsilon'} d\varepsilon' d\omega'.$$

Les deux autres courbes représentent une schématisation de la collision en deux phases distinctes : une phase élastique et une phase inélastique. En pointillés, on donne l'image d'une

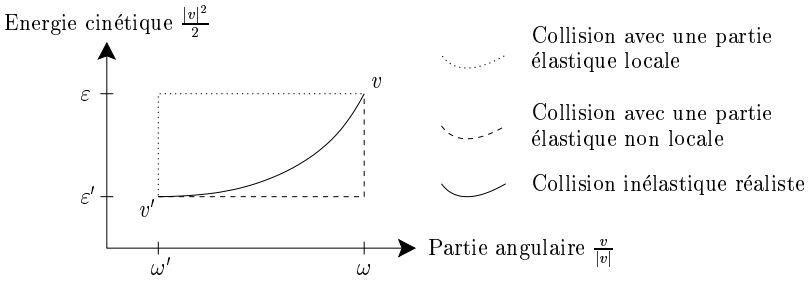


FIG. 1 – Trois types de collisions

FIG. 1.1 – Trois types de collisions

collision qui agit dans un premier temps sur l'énergie (phase inélastique : l'énergie passe de $\varepsilon'$ à $\varepsilon$) puis sur la partie angulaire (phase élastique *locale* : la partie angulaire passe de $\omega'$ à $\omega$ alors que l'énergie vaut $\varepsilon$). On peut réécrire formellement l'opérateur $\mathcal{C}_{lin}$ de façon à distinguer ces deux phases :

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_{lin}(f) &= \mathcal{C}^0_{inel}(f) + \mathcal{C}^0_{el}(f) \\
&= \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon',\omega';\varepsilon,\omega)\left(Mf\left(\varepsilon',\omega'\right) - M'f\left(\varepsilon,\omega'\right)\right)\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega' \\
&\quad + \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon',\omega';\varepsilon,\omega)M'\left(f\left(\varepsilon,\omega'\right) - f\left(\varepsilon,\omega\right)\right)\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega'.
\end{aligned}$$

La représentation donnée en tirets sur le diagramme 1.1 correspond à une collision qui change d'abord la valeur de la partie angulaire (phase élastique *non locale* : la partie angulaire passe de $\omega'$ à $\omega$ alors que l'énergie vaut $\varepsilon'$), puis celle de l'énergie cinétique (phase inélastique : l'énergie passe de $\varepsilon'$ à $\varepsilon$). L'opérateur $\mathcal{C}_{lin}$ peut s'écrire conformément à ce point de vue :

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_{lin}(f) &= \mathcal{C}^1_{el}(f) + \mathcal{C}^1_{inel}(f) \\
&= \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon',\omega';\varepsilon,\omega)M\left(f\left(\varepsilon',\omega'\right) - f\left(\varepsilon',\omega\right)\right)\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega' \\
&\quad + \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \sigma(\varepsilon',\omega';\varepsilon,\omega)\left(Mf\left(\varepsilon',\omega\right) - M'f\left(\varepsilon,\omega\right)\right)\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega'.
\end{aligned}$$

On a vu que la dérivation du modèle SHE n'est techniquement possible qu'aussi longtemps que les collisions sont élastiques de façon dominante (cf. la fin de la section 2.3). Par conséquent, on ne pourrait utiliser les décompositions précédentes de l'opérateur $\mathcal{C}_{lin}$ en parties élastiques et inélastiques pour dériver un modèle SHE qu'en supposant que les parties inélastiques sont en fait de l'ordre de $\eta^2$ (où $\eta$ représente le ratio du libre parcours moyen par l'échelle du système : cf. section (2.2)) ou, même, sont négligeables. Pour simplifier, plaçons nous dans ce cas. A ce niveau, on a donc essentiellement deux possibilités pour modéliser des collisions élastiques : $\mathcal{C}^0_{el}$ et $\mathcal{C}^1_{el}$. L'opérateur $\mathcal{C}^1_{el}$ étant élastique, on a en fait peu d'espoir d'obtenir un modèle SHE qui soit plus pertinent pour décrire les interactions inélastiques en le préférant à l'opérateur $\mathcal{C}^0_{el}$.

En revanche le diagramme 1.1 suggère qu'une collision réaliste peut être en fait approchée par une combinaison convexe de collisions élastiques locale et non locale. D'où l'idée d'introduire l'opérateur suivant :

$$\mathcal{C}_{el}^{\alpha} = (1-\alpha)\mathcal{C}_{el}^{0} + \alpha\mathcal{C}_{el}^{1}.$$

Cet opérateur est élastique, donc on a quelque espoir de parvenir à dériver un modèle SHE à partir de lui (sous réserve que la caractérisation de son noyau ne pose pas de problème). Par ailleurs, il est un bon candidat pour modéliser des collisions inélastiques puisqu'il propose un mélange de collisions élastiques locales et non locales.

Cette idée est à la source de l'introduction des modèles SHE couplés par P. Degond [21]. La caractérisation du noyau est possible sous une hypothèse du type

**Hypothèse 2.1** *La section efficace de collision est bornée inférieurement et supérieurement :*

$$\exists\, \underline{\sigma},\ \overline{\sigma} \ > \ 0 \ / \ \underline{\sigma} \ \leq \ \sigma \ \leq \ \overline{\sigma}.$$

Alors, si

$$\alpha < \frac{\underline{\sigma}}{\underline{\sigma} + \overline{\sigma}}, \tag{2.26}$$

le noyau Ker $(\mathcal{C}_{el}^{\alpha})$ de $\mathcal{C}_{el}^{\alpha}$ est égal à celui de $\mathcal{C}_{el}^{0}$ et on a une inégalité d'entropie de la forme

$$-\int \mathcal{C}_{el}^{\alpha}(f)\frac{f}{M}dv \geq C \parallel f - \mathcal{P}_{SHE}(f) \parallel^2_{L^2(\mathbb{R}^3;M^{-1}dv)}$$

ce qui fournit les outils de base pour la dérivation d'un modèle SHE à partir de cet opérateur. Cependant, après insertion du développement de Hilbert dans l'équation (2.18), une différence notable apparaît dans la dérivation formelle au niveau de l'étude des termes d'ordre 1. En effet, on a vu en section (2.3) que le caractère *local* de l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^{0}$ était nécessaire pour passer de l'équation (2.23) à l'équation (2.24), soit, pour le calcul suivant :

$$\mathcal{C}_{el}^{0\,-1}(v \cdot \tilde{\nabla} F) = \mathcal{C}_{el}^{0\,-1}(v) \cdot \tilde{\nabla} F.$$

Cette égalité repose effectivement sur la propriété (2.25) que ne satisfait pas l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^{1}$ (ni, par conséquent, l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^{\alpha}$ dès que $\alpha > 0$). Reprenons la dérivation formelle à ce point.

Etant donné un niveau d'énergie $\varepsilon_0$, résolvons l'équation suivante d'inconnue $f$ :

$$-\mathcal{C}_{el}^{\alpha}(f) = vM\delta(\varepsilon - \varepsilon_0). \tag{2.27}$$

P. Degond [21] a montré que l'on peut trouver une solution (au moins) de la forme

$$f(\varepsilon, \omega) = \theta(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0) + \overline{f}(\varepsilon, \omega) \tag{2.28}$$

avec $\theta \in L^2(\mathbb{S}^2)$ et $\overline{f} \in L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$. Posons $\chi_{\varepsilon_0} = fM^{-1}$. On a alors $-\mathcal{C}_{el}^{\alpha}(\chi_{\varepsilon_0}M) = vM\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$. Le courant $J_{SHE}$ vaut par définition :

$$4\pi J_{SHE}(\varepsilon_0) = 4\pi\sqrt{2\varepsilon_0}\mathcal{P}_{SHE}(vf^1) = \int_{\mathbb{R}^3} vf^1\delta\left(\varepsilon(v) - \varepsilon_0\right)dv$$

c'est-à-dire, en tenant compte de la définition de $\chi_{\varepsilon_0}$ :

$$4\pi J_{SHE}(\varepsilon_0) = \int_{\mathbb{R}^3} -\mathcal{C}_{el}^{\alpha}\left(\chi_{\varepsilon_0} M\right) f^1 M^{-1} dv.$$

La propriété de symétrie de $\sigma$ (Hypothèse 1.1) permet de montrer que les opérateurs $\mathcal{C}_{el}^{\alpha}$ sont autoadjoints dans $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$, pour tout $\alpha \in [0,1]$. Par conséquent, le courant vaut

$$4\pi J_{SHE}(\varepsilon_0) = \int_{\mathbb{R}^3} -\mathcal{C}_{el}^{\alpha}\left(f^1\right) \chi_{\varepsilon_0} dv.$$

Rappelons que l'identification des termes d'ordre 1 dans (2.18) conduit à $\mathcal{C}_{el}^{\alpha}(f^1) = v \cdot \tilde{\nabla} F$, ce qui implique finalement l'égalité suivante

$$J_{SHE}(\varepsilon_0) = -\int_{\varepsilon>0} \sqrt{2\varepsilon}\mathcal{P}_{SHE}\left(\chi_{\varepsilon_0} \otimes v\right) \tilde{\nabla} F(\varepsilon) d\varepsilon = -\int_{\varepsilon>0} \mathbb{D}_{SHE}(\varepsilon_0, \varepsilon) \tilde{\nabla} F(\varepsilon) d\varepsilon \tag{2.29}$$

qui définit une équation de courant. En posant

$$\begin{aligned}
\mathbb{D}_{SHE}(\varepsilon, \varepsilon') &= 2\varepsilon' \mathcal{P}_{SHE}\left(\chi_\varepsilon(\varepsilon', \omega) \otimes \omega\right) = \mathbb{D}_{SHE}^0(\varepsilon)\delta(\varepsilon' - \varepsilon) + \mathbb{D}_{SHE}^{\alpha}(\varepsilon, \varepsilon') \\
\mathbb{D}_{SHE}^0(\varepsilon) &= 2\varepsilon \mathcal{P}_{SHE}\left(\theta_\varepsilon(\omega) \otimes \omega\right) \\
\mathbb{D}_{SHE}^{\alpha}(\varepsilon, \varepsilon') &= 2\varepsilon' \mathcal{P}_{SHE}\left(\overline{\chi_\varepsilon}(\varepsilon', \omega) \otimes \omega\right)
\end{aligned}$$

avec $\chi_\varepsilon(\varepsilon', \omega) = \theta(\omega)\delta(\varepsilon' - \varepsilon) + \overline{\chi_\varepsilon}(\varepsilon', \omega)$, on obtient le modèle SHE couplé :

$$\sqrt{2\varepsilon}\, \partial_t F(t, x, \varepsilon) + \tilde{\nabla} \cdot J_{SHE}(t, x, \varepsilon) = 0 \tag{2.30}$$

$$J_{SHE}(t, x, \varepsilon) = -\mathbb{D}_{SHE}^0(\varepsilon)\, \tilde{\nabla} F(t, x, \varepsilon) - \int_{\varepsilon>0} \mathbb{D}_{SHE}^{\alpha}(\varepsilon, \varepsilon')\, \tilde{\nabla} F(t, x, \varepsilon')\, d\varepsilon'. \tag{2.31}$$

Le premier terme du second membre de l'équation (2.31) correspond à la loi de Fick obtenue dans le cas de collisions élastiques locales (cf. le tableau 1.1). Le second terme introduit un *couplage* entre les différents niveaux d'énergie puisque la valeur du courant $J_{SHE}$ à la valeur $\varepsilon$ dépend de la valeur du gradient de la densité $\tilde{\nabla} F$ *pour tout* $\varepsilon' > 0$. On peut ainsi espérer pouvoir rendre compte plus précisément de l'influence des interactions inélastiques grâce au modèle SHE couplé puisqu'il permet de décrire des situations où le courant et la densité sont reliées de manière non locale en énergie, ce qui est une des traductions macroscopiques possibles de l'inélasticité des interactions microscopiques.

Soulignons pour terminer que la difficulté principale dans la dérivation formelle du modèle SHE couplé réside dans la résolution de l'équation (2.27). Les dérivations de modèles de type SHE couplé que nous proposons dans ce travail reposent également sur la résolution de *problèmes auxiliaires* de la forme :

**Etant donnée une fontion $\psi(\omega)$, trouver une fonction $\chi_{\varepsilon_0}$ telle que**

$$-\mathcal{C}_{el}^{\alpha}(\chi_{\varepsilon_0}) = \psi(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0). \tag{2.32}$$

# Chapitre 2

# Etude des modèles de type SHE et SHE couplé

Dans cette thèse, nous nous intéressons plus particulièrement à l'étude de modèles de diffusion de type SHE. Il s'agit avant tout de proposer des modèles performants et peu coûteux numériquement dans des contextes d'application où les modèles de type DD deviennent limités. Nous effectuons d'une part une étude mathématique de ces modèles, en en donnant une dérivation mathématiquement rigoureuse à partir d'équations cinétiques lorsque c'est possible (Cf. sections 1, 2, 3) et, d'autre part, une validation numérique par comparaison avec des modèles cinétiques bien établis (Cf. section 4). Les sections suivantes présentent les résultats principaux de ces travaux. Les preuves sont détaillées dans les chapitres de la partie II et les comparaisons numériques s'appuient sur les résultats présentés dans le chapitre 6.

## 1 Modèles SHE quantiques et opérateurs de collision dissipant l'entropie quantique

Cette section est une contribution à la recherche de modèles cinétiques et diffusifs pour les semiconducteurs dans le cas où des phénomènes quantiques interviennent. Nous avons vu en section 1.1 que l'équation de Wigner constituait une équation bien adaptée à la description du transport quantique de particules chargées dans un champ électrique. Cependant, cette équation ne rend pas compte des interactions entre particules et on se trouve donc confronté à un problème de modélisation. S'il semble naturel, par analogie avec le cas classique, de modéliser les collisions entre particules par un opérateur de collision dans le membre de droite de l'équation de Wigner, à ce jour il est encore difficile d'imaginer des opérateurs qui décrivent les interactions particulaires quantiques. Or l'obtention de modèles macroscopiques par des méthodes de perturbations singulières à partir d'équations cinétiques requiert une théorie quantique des collisions (pour des travaux dans ce domaine, on se reportera à [1], [13], [36], [51], [67] et, pour des avancées plus récentes, [2], [6] et [38]).

Une développement important a été fait dans le sens d'une théorie quantique des collisions par P. Degond et C. Ringhofer [30], [31], puis par P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer [29].

Ces auteurs proposent de construire des opérateurs de type simplification BGK en définissant leurs états d'équilibres comme les minimiseurs d'une entropie quantique sous contraintes *locales* de moments. Les variables thermodynamiques (les multiplicateurs de Lagrange) sont alors non-locaux en espace, ce qui constitue une différence notable par rapport aux états d'équilibre classiques. L'intérêt de cette approche est qu'elle permet de proposer une méthode de moments pour l'établissement de modèles hydrodynamiques quantiques, analogue quantique de la méthode de Levermore [50] (cf. aussi [64]).

Dans ce travail, nous proposons quelques opérateurs de collision destinés à modéliser les interactions entre électrons et phonons. Ces opérateurs satisfont deux exigences fondamentales : d'une part ils préservent la masse et, d'autre part, ils dissipent une entropie quantique (entropie de Von Neumann). On sait également caractériser leurs états d'équilibre. Cependant, la définition de ces opérateurs de collision reste formelle et leur étude mathématique est un problème largement ouvert. Pour rendre possible une étude mathématique exhaustive de ces modèles cinétiques quantiques tenant compte des collisions, nous considérons également des opérateurs de collision classiques (au double sens : usuels et relevant de la mécanique classique).

Quel que soit le choix de modélisation effectué (opérateurs quantiques ou classiques), on réalise la dérivation formelle de modèles de diffusion par des méthodes de perturbation singulière semblables à celle présentée en section 2.3. Des modèles de type Dérive Diffusion quantique et Energie Transport quantique ont déjà été obtenus ainsi par P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer [29]. Nous présentons ici deux types principaux de modèles. D'une part, les modèles SHE Quasi Quantiques sont obtenus en limite diffusive d'équations de Wigner avec un opérateur de collision *classique*. Le modèle asymptotique est dit *quasi* quantique puisqu'il tient compte du caractère quantique du transport des particules, mais la diffusion proprement dite est engendrée par des collisions relevant de la mécanique *classique*. Dans ce cas, l'étude des opérateurs de collision est aisée et autorise une dérivation rigoureuse des modèles dans certains cas particuliers au moins. D'autre part, si l'on tient compte du caractère quantique des collisions, on obtient des modèles SHE Quantiques. Les opérateurs de collision sont définis uniquement de manière formelle et l'étude rigoureuse de la dérivation reste à ce niveau un problème très largement ouvert. Nous présentons toutefois une dérivation formelle.

C'est un résultat bien connu que l'opérateur de transport quantique $p \cdot \nabla_x - \theta[V]$ tend, lorsque la constante de Planck devient négligeable, vers l'opérateur de Vlasov $p \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_p$. De même, les modèles SHE Quasi Quantiques obtenus par approximation diffusive à partir de l'équation de Wigner dépendent de la constante de Planck et sont égaux, à l'ordre principal en $\hbar$, aux modèles SHE classiques correspondants. En effectuant des développements en $\hbar$ on récupère des termes correctifs quantiques par rapport aux modèles classiques. Nous donnons ainsi deux développements limités formels en $\hbar$ jusqu'à l'ordre 2. Le premier, à partir du modèle SHE Quasi Quantique, donne naissance à un modèle que nous nommons $\mathrm{QQSHE}_2$. Le modèle SHE Quantique, quant à lui, donne naissance au modèle $\mathrm{QSHE}_2$.

Ce travail a fait l'objet d'une collaboration avec P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer.

### 1.0.1 Les modèles SHE Quasi Quantique et QQSHE$_2$

On considère l'équation de Wigner-Boltzmann suivante (après changement d'échelle de type diffusif) :

$$\alpha^2 \partial_t f^\alpha + \alpha \left(p \cdot \nabla_x - \theta[V]\right) f^\alpha = \mathcal{C}_{el}^\nu(f^\alpha) = \nu(\mathcal{P}_{SHE} f^\alpha - f^\alpha) \tag{1.1}$$

où $\nu > 0$ et $\mathcal{P}_{SHE}$ est le projecteur défini en section 2.2. Le noyau de l'opérateur de collision $\mathcal{C}_{el}^\nu$ est clairement constitué de fonctions de l'énergie. Dans l'espace $L^2\left(\mathbb{R}^6_{x,p}\right)$, on note $\mathcal{E} = \{f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^6)/f(x,p) = f(x,|p|\omega)\ \forall \omega \in \mathbb{S}^2\}$ le noyau de $\mathcal{C}_{el}^\nu$. Cet opérateur est égal à l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^0$ lorsque $\sigma = \nu$ est constante. De plus, nous avons vu en section 1.2 que $\mathcal{C}_{el}^0 \approx \mathcal{C}_{e\varphi}$ lorsque l'énergie des électrons est grande devant l'énergie des phonons. Par conséquent, l'opérateur $\mathcal{C}_{el}^\nu$ est une simplification BGK (ou approximation de type temps de relaxation) de l'opérateur $\mathcal{C}_{e\varphi}$.

On montre le théorème suivant :

**Théoreme 1.1** *La suite $f^\alpha$ de solutions de (1.1) avec condition initiale $f_I(x,p) = F_I(x,|p|^2/2)$ admet une sous-suite convergeant faiblement dans $L^2\left(0,T;L^2\left(\mathbb{R}^6_{x,p}\right)\right)$ vers une limite $f^0 \in L^2(0,T;\mathcal{E})$. On note $F(t,x,|p|^2/2) = f^0(t,x,p)$. De plus $F$ est une solution faible de l'équation SHE Quasi Quantique :*

$$N(\varepsilon)\partial_t F - \frac{1}{\nu} N(\varepsilon)\mathcal{P}_{SHE}\left(L^{\text{Wig}}\left(L^{\text{Wig}}(F)\right)\right) = 0 \tag{1.2}$$

*où $L^{\text{Wig}} f = (p \cdot \nabla_x - \theta[V])\, f$. Nous avons noté abusivement $F(t,x,p) = F(t,x,|p|^2/2)$.*

La démonstration de ce théorème est très semblable à celle de la dérivation rigoureuse des modèles SHE classiques, à la différence près que l'opérateur pseudo-différentiel $\theta[V]$ est borné dans $L^2$ (contrairement à l'opérateur différentiel $\nabla_x V \cdot \nabla_p$) : les difficultés liées aux problèmes de régularité des solutions des problèmes auxiliaires dans le cas classique disparaissent et on peut dériver le modèle rigoureusement en présence d'un potentiel non nul $V$. (Cf. section 3.2, Théorème 3.5 pour la preuve.)

Aux échelles macroscopiques habituelles, l'approximation $\hbar << 1$ est valide et l'opérateur de Wigner peut être approché par l'opérateur de Vlasov. On a le développement formel suivant :

$$L^{\text{Wig}} = L^{\text{Vl}} + \hbar^2 L^{(2)} + \mathcal{O}\left(\hbar^4\right)$$

avec $L^{\text{Vl}} = p \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_p$ et

$$L^{(2)} = \frac{1}{24} \nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3}.$$

Les tenseurs d'ordre 3 sont définis par $(\nabla_x^{\otimes 3})_{i,j,k} = \partial^3_{x_i,x_j,x_k}$ (de même pour $\nabla_p^{\otimes 3}$) et $\vdots$ représente le produit tensoriel d'ordre 3.

Le terme de diffusion dans l'équation (1.2) devient alors :

$$\mathcal{P}_{SHE}\left(L^{\text{Wig}}\left(L^{\text{Wig}} F\right)\right) = \mathcal{P}_{SHE}\left(L^{\text{Vl}}\left(L^{\text{Vl}} F\right)\right) + \hbar^2\left(\mathcal{P}_{SHE}\left(L^{\text{Vl}}\left(L^{(2)} F\right)\right) + \mathcal{P}_{SHE}\left(L^{(2)}\left(L^{\text{Vl}} F\right)\right)\right)$$
$$+\mathcal{O}\left(\hbar^4\right).$$

Le calcul de ces termes, effectué en section A, conduit au modèle QQSHE$_2$ suivant :

$$N(\varepsilon)\partial_t F - \frac{4\pi}{\nu}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}F\right)$$
$$-\frac{4\pi\hbar^2}{24\nu}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)+\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right)\right\}=0.$$

Ce modèle est une approximation d'ordre 2 du modèle SHE Quasi Quantique. Il se présente formellement comme un modèle SHE classique auquel sont ajoutés des termes correctifs d'ordre 2 en $\hbar$. L'intérêt de ce modèle réside dans une implémentation numérique probablement plus aisée que pour le modèle SHE Quasi Quantique.

### 1.0.2 Quelques opérateurs de collision quantiques et entropie quantique

Dans la section 4, nous proposons trois opérateurs de collision quantiques. Tout d'abord, nous donnons une version de l'opérateur de collision avec les phonons $\mathcal{C}_{e\varphi}$ qui dissipe une entropie quantique. Nous donnons ensuite la limite "élastique" de cet opérateur. Enfin, nous proposons une approximation de cet opérateur limite par un opérateur de relaxation. Pour ces trois opérateurs, nous souhaitons obtenir les propriétés suivantes pour toute fontion $f(x,p)$ :

**Conservation de la masse :** $\int \mathcal{Q}(f)(p)dxdp = 0$,

**Dissipation d'entropie :** $-\int \mathcal{Q}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}\,(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\,(\mathcal{M}ax)\right)dxdp \geq 0$,

où le logarithme quantique $\mathcal{L}$n et la maxwellienne quantique $\mathcal{M}ax$ sont définies par (cf. [29])

$$\mathcal{L}\mathrm{n}(f) = W\left[\ln\left(\mathrm{Op}(f)\right)\right],\ \ \mathcal{M}ax(x,p) = W\left[\exp\left(\mathrm{Op}\left(-\frac{|p|^2}{2} - V(x)\right)\right)\right],$$

où nous avons noté Op la quantification de Weyl qui constitue la transformation inverse de la transformée de Wigner. Pour tout symbole $a(x,p)$ on a :

$$\mathrm{Op}(a)\phi = (2\pi\hbar)^{-3}\int_{\mathbb{R}^6} a\left(\frac{x+y}{2},p\right)\phi(y)e^{ip\cdot(x-y)/\hbar}dpdy.$$

On définit également l'exponentielle quantique $\mathcal{E}$xp par (cf. [29])

$$\mathcal{E}\mathrm{xp}(f) = W\left[\exp\left(\mathrm{Op}(f)\right)\right],$$

si bien que $\mathcal{M}ax(x,p) = \mathcal{E}\mathrm{xp}(-|p|^2/2 - V)$. Remarquons que $\mathcal{L}$n et $\mathcal{E}$xp sont inverses l'un de l'autre (formellement) et que $-|p|^2/2 - V = \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax(x,p)\right)$. Lorsque $\hbar \to 0$, on a $\mathcal{L}\mathrm{n} \to \ln$ et $\mathcal{M}ax \to \exp\left(-|p|^2/2 - V\right) =: \mathcal{M}$ et donc $-\int \mathcal{Q}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}(\mathcal{M}ax)\right)dxdp \to -\int \mathcal{Q}(f)\ln\left(\frac{f}{\mathcal{M}}\right)dxdp$. On récupère donc asymptotiquement la dissipation de l'entropie relative par l'opérateur $\mathcal{Q}$. De fait, on peut montrer (Cf. Lemme 4.1) que la propriété $-\int \mathcal{Q}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}\,(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\,(\mathcal{M}ax)\right)dxdp \geq 0$ implique la dissipation d'une entropie quantique associée à l'équation de Wigner-Boltzmann

$$\partial_t f + \left(p\cdot\nabla_x - \theta[V]\right)f = \mathcal{Q}(f). \tag{1.3}$$

En effet, si $-\int \mathcal{Q}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}\left(f\right)-\mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax\right)\right)dxdp \geq 0$ pour tout $f$, alors, si $f$ est une solution de (1.3), on a

$$\frac{dH_Q(f)}{dt} \leq 0,$$

où l'entropie quantique est définie comme

$$H_Q(f) = \int f\left(\mathcal{L}\mathrm{n}f - \mathcal{L}\mathrm{n}\mathcal{M}ax - 1\right)dpdx.$$

On peut montrer que, si $\rho = \mathrm{Op}(f)$ est la quantification de Weyl de $f$, alors on a

$$H_Q(f) = (2\pi\hbar)^3\, H_{VN}(\rho) = (2\pi\hbar)^3\, \mathrm{Tr}\left\{\rho(\ln\rho - 1 + \mathcal{H})\right\}$$

où $H_{VN}$ est l'entropie de Von Neumann associée à l'hamiltonien $\mathcal{H} = -(\hbar^2/2)\Delta + V$.

Par conséquent, si $\mathcal{Q}$ est un opérateur vérifiant les deux propriétés, conservation de la masse et dissipativité, alors l'équation (1.3) est conservative et ses solutions sont entropiques, ce qui constitue une motivation essentielle pour chercher des opérateurs ayant ces propriétés.

Nous montrons en section 4.1, Proposition 4.2, que la version quantique ci-dessous de l'opérateur de collision $\mathcal{C}_{e\varphi}$ entre électrons et phonons satisfait ces deux exigences :

$$\mathcal{Q}_{e\varphi}(f) = \int \mathcal{S}(p,p')\left[\delta(|p'|^2/2 - |p|^2/2 - \hbar\omega_0) + \delta(|p'|^2/2 - |p|^2/2 + \hbar\omega_0)\right]\left(\frac{\mathcal{A}(f)'}{M'} - \frac{\mathcal{A}(f)}{M}\right)dp'$$

où $\mathcal{A}(f) = \exp W[\ln \mathrm{Op}(f)] = \exp \mathcal{L}\mathrm{n}f$, ou encore, $\mathcal{L}\mathrm{n}f = \ln A(f)$ où ln désigne le logarithme ordinaire. Remarquons que les conditions sur $f$ sous lesquelles $\mathcal{A}(f)$ est une fonction bien définie ne sont pas clairement identifiables. Par conséquent à ce stade l'opérateur $Q_{e\varphi}$ est défini de façon purement formelle.

La limite élastique $\hbar\omega_0 \to 0$ de l'opérateur $\hbar\omega_0\mathcal{Q}_{e\varphi}$ s'écrit

$$\mathcal{Q}_{el}(f)(p) = N(|p|^2/2)\left\{\mathcal{P}_{SHE}\left(\mathcal{S}(p,\cdot)\mathcal{A}(f)(\cdot)\right) - \mathcal{P}_{SHE}\left(\mathcal{S}(p,\cdot)\right)\mathcal{A}(f)(p)\right\},$$

avec $N(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}$.

Cet opérateur conserve la masse et dissipe l'entropie quantique (Cf. section 4, Proposition 4.2). De plus, ses états d'équilibre sont de la forme

$$\mathcal{E}\mathrm{xp}(\lambda)$$

avec $\lambda$ une fonction qui ne dépend que de la partie radiale $|p|$ de $p$. Ici aussi, si $\hbar \to 0$, on retrouve un équilibre $F(\varepsilon) = \exp\lambda$ qui ne dépend que de l'énergie (équilibre de l'opérateur $\mathcal{C}_{el}$ qui peut donc être vu comme la limite lorsque $\hbar$ tend vers 0 de $\mathcal{Q}_{el}$).

Enfin, en vue de faciliter l'étude asymptotique de l'équation Wigner-Boltzmann dans une approximation de la diffusion, on introduit l'opérateur $\mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}$ qui constitue une approximation de type temps de relaxation de l'opérateur $\mathcal{Q}_{el}$ (au même titre que $\nu\left(\mathcal{P}_{SHE}(f) - f\right)$ est un opérateur de relaxation approchant $\mathcal{C}_{el}$) :

$$\mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}(f) = \nu\left(\mathcal{E}_f - f\right)$$

où $\mathcal{E}_f$ est la solution du problème de minimisation d'entropie suivant ($f$ étant donnée) : Trouver une fonction $\mathcal{E}_f$ telle que

$$H_Q(\mathcal{E}_f) = \mathrm{Min}\left\{H_Q(g) \,/\, \mathcal{P}_{SHE}(f-g) = 0\right\}. \tag{1.4}$$

De même que pour les deux opérateurs précédents, on peut montrer que $\mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}$ est conservatif et dissipe l'entropie quantique (Cf. Proposition 4.5, section 4.2). Remarquons au passage que cet opérateur est bien un opérateur de relaxation adapté à l'opérateur $\mathcal{Q}_{el}$ puisqu'on peut montrer (Cf. Proposition 4.5) que ces deux opérateurs ont les mêmes états d'équilibre.

### 1.0.3 Les modèles SHE Quantique et QSHE$_2$

Nous considérons maintenant l'équation de Wigner-Boltzmann suivante (après changement d'échelle) :

$$\alpha^2 \partial_t f^\alpha + \alpha\left(p \cdot \nabla_x - \theta[V]\right) f^\alpha = \mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}(f^\alpha).$$

Nous admettons qu'une telle équation admet des solutions et que la suite $(f^\alpha)_\alpha$ des solutions converge vers une fonction $F$ lorsque $\alpha \to 0$. On peut montrer qu'il existe une fonction $\lambda(t,x,\varepsilon)$ telle que $\tilde{\lambda} : p \to \lambda(|p|^2/2)$ satisfait

$$F(t,x,p) = \mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\tilde{\lambda}\right)(t,x,p)$$

et $F$ est solution de l'équation SHE quantique suivante

$$N(\varepsilon)\partial_t \mathcal{P}_{SHE}\left(\mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\tilde{\lambda}\right)\right) - N(\varepsilon)\mathcal{P}_{SHE}\left(L^{\mathrm{Wig}}\left(\frac{1}{\nu}L^{\mathrm{Wig}}\left(\mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\tilde{\lambda}\right)\right)\right)\right) = 0. \tag{1.5}$$

La preuve de ce résultat (formel) repose essentiellement sur le Lemme suivant (Cf. Lemme 4.7) :

**Lemme 1.1** *Soit $f$ une fonction telle que le problème de minimisation (1.4) ait une solution $\mathcal{E}_f$. Alors, il existe une fonction $\lambda(x,\varepsilon)$ telle que*

$$\mathcal{E}_f(x,p) = \mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\tilde{\lambda}\right)$$

*avec $\tilde{\lambda}(x,p) = \lambda(x,|p|^2/2)$.*

De même que dans le cas du modèle SHE Quasi Quantique, on peut donner un développement formel en $\hbar$ de l'équation (1.5). Pour le modèle SHE Quasi Quantique, seuls les opérateurs de transport dépendaient de $\hbar$. Ici, du fait que l'opérateur de collision $\mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}$ dépend de $\hbar$, les équilibres en dépendent également. De fait, la solution de l'équation (1.5) s'écrit $\mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\tilde{\lambda}\right)$ et l'exponentielle quantique dépend évidemment de $\hbar$. Nous avons vu qu'à la limite $\hbar \to 0$ l'opérateur $\mathcal{E}\mathrm{xp}$ tend vers l'exponentielle usuelle. P. Degond F. Méhats et C. Ringhofer [29] ont obtenu le développement limité formel suivant :

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}\mathrm{xp} f &= \exp f\left[1 + \hbar^2 \mathcal{T} f + \mathcal{O}(\hbar^4)\right] \\
\mathcal{T} f &= \frac{1}{8}(\nabla_x^{\otimes 2} f : \nabla_p^{\otimes 2} f - \nabla_x \nabla_p f : \nabla_p \nabla_x f + \frac{1}{3}(\nabla_x^{\otimes 2} f : \nabla_p f \nabla_p f \\
&\qquad -2\nabla_x \nabla_p f : \nabla_p f \nabla_x f + \nabla_p^{\otimes 2} f : \nabla_x f \nabla_x f)).
\end{aligned}$$

Par conséquent, le modèle SHE Quantique peut formellement être approché par le modèle suivant ($\mathrm{QSHE}_2$) :

$$\begin{aligned}
&N(\varepsilon)\partial_t F - \frac{4\pi}{\nu}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}F\right) + \hbar^2 N(\varepsilon)\partial_t\left[\mathcal{P}\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right]\\
&-\frac{4\pi\hbar^2}{24\nu}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right) + \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right)\right\}\\
&+\frac{\hbar^2 N(\varepsilon)}{\nu}\mathcal{P}\left[L^{\mathrm{VI}}\left(L^{\mathrm{VI}}\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right] = 0.
\end{aligned}$$

On reconnaît ici le modèle $\mathrm{QQSHE}_2$ auquel viennent s'ajouter les termes faisant intervenir l'opérateur $\mathcal{T}$. Nous donnons l'expression explicite de ce modèle en section 5.

# 2 Modèles macroscopiques pour les collisions entre électrons et phonons

Dans section, nous présentons un modèle de diffusion de type SHE couplé dans le cas d'interactions entre électrons et phonons. Nous supposons donc que dans le système étudié l'énergie typique des électrons n'est pas trop importante en comparaison de l'énergie des phonons (prise égale à $\hbar\omega_0$ pour tous les phonons). Dans ce cas, l'influence des interactions avec les phonons sur l'énergie des électrons n'est pas négligeable.

La dérivation de modèles de type SHE dans le cas d'interactions avec les phonons a été étudiée par P. A. Markowich et C. Schmeiser [59] (où les interactions entre phonons et électrons sont données par un modèle avec temps de relaxation et sous l'hypothèse de faible densité électronique), P. A. Markowich et C. Schmeiser [60] (avec un opérateur de collision linéaire de type $\mathcal{C}_{e\varphi}$), et P. A. Markowich, F. Poupaud et C. Schmeiser [61] (avec un opérateur de collision non linéaire tenant compte du principe d'exclusion de Pauli), en se fondant sur les travaux d'A. Majorana [55], [56]. Toutefois, dans ces travaux les modèles macroscopiques obtenus sont périodiques en énergie de période $\hbar\omega_0$, ce qui peut sembler peu réaliste dans la mesure où on s'attend plutôt à obtenir une répartition électronique plus localisée vers les énergies faibles à moyennes alors que ce type de modèle prévoit au contraire que la densité électronique ait une répartition périodique en énergie. Ceci est dû au type d'équilibres que présentent l'opérateur $\mathcal{C}_{e\varphi}$ et son pendant non linéaire (incluant les termes d'exclusion de Pauli) puisque ces équilibres sont périodiques et nous avons vu en section 2.3 que les modèles cinétiques conduisent, en approximation diffusive, à des solutions proches des équilibres collisionnels.

Nous donnons ici la dérivation d'un modèle SHE *non périodique* pour ce type d'interaction. D'après ce que nous venons de dire, cette dérivation se fait au prix d'une hypothèse sur le type de collisions dominantes. Pour obtenir un modèle non périodique nous devons en effet supposer que les interactions sont essentiellement élastiques (de façon à ce que l'opérateur de collision ait des équilibres qui ne dépendent que de l'énergie et ce de façon non périodique), ce qui conduit à réécrire l'opérateur de collision $\mathcal{C}_{e\varphi}$ sous la forme (exacte) suivante :

$$\mathcal{C}_{e\varphi} = \mathcal{E} + \mathcal{I} \tag{2.6}$$

où $\mathcal{E}$ et $\mathcal{I}$ sont respectivement élastique et inélastique, et à supposer que les interactions entre phonons et électrons sont en fait bien décrites par l'opérateur

$$\mathcal{E} + \eta^2 \mathcal{I}$$

avec $\eta$ le paramètre de changement d'échelle introduit dans l'équation (2.18) (Cf. section 2.3 pour la justification de cette hypothèse). Alors, lorsque $\eta$ tend vers 0, la solution $f^\eta$ de l'équation cinétique (2.18) munie de l'opérateur $\mathcal{E}+\eta^2\mathcal{I}$ doit devenir proche d'un équilibre $F$ de l'opérateur $\mathcal{E}$, conformément à l'étude formelle présentée en section 2.3. Si $\mathcal{E}$ a pour états d'équilibre des fonctions de l'énergie seulement, on obtient bien un modèle de type SHE non périodique.

Le seul problème lié à ce point de vue est qu'il conduit à des modèles dont la validité théorique est limitée à la description d'interactions élastiques or, très clairement, les interactions entre électrons et phonons sont inélastiques. Comme P. Degond l'a suggéré [21], une façon de modéliser des intéractions inélastiques consiste sans doute à développer des modèles de type SHE couplé (Cf. section 2.4). C'est l'objectif que nous nous donnons dans ce travail.

Rappelons tout d'abord la forme de l'opérateur $\mathcal{C}_{e\varphi}$ :

$$\mathcal{C}_{e\varphi}(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(v', v)\,(Mf' - M'f)\,(\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0))\,dv'$$

où la section efficace de collision satisfait $\Psi(v, v') = \Psi(v', v)$. Nous avons vu en section 2.4 qu'il y a plusieurs façons de réaliser la décomposition (2.6). Une première décomposition conduit à introduire un opérateur élastique *local en énergie* : $\mathcal{C}_{e\varphi} = Q^0_{el} + Q^0_{inel}$ avec

$$\begin{aligned}
Q^0(f)(v) &= Q^0_{el}(f)(v) = \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon_+} + \sigma_- e^{-\varepsilon_-})[f(\varepsilon, \omega') - f(\varepsilon, \omega)]d\omega' \\
Q^0_{in}(f)(v) &= \int_{\varepsilon'>0} \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega')\sqrt{2\varepsilon'}[e^{-\varepsilon} f(\varepsilon', \omega') - e^{-\varepsilon'} f(\varepsilon, \omega')][\delta'_+ + \delta'_-]d\varepsilon' d\omega'.
\end{aligned}$$

La deuxième décomposition $\mathcal{C}_{e\varphi} = Q^1_{el} + Q^1_{inel}$ donne un opérateur élastique *non local en énergie* :

$$\begin{aligned}
Q^1(f)(v) &= Q^1_{el}(f)(v) = \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon}[f(\varepsilon_+, \omega') - f(\varepsilon_+, \omega)] \\
&\qquad + \sigma_- e^{-\varepsilon}[f(\varepsilon_-, \omega') - f(\varepsilon_-, \omega)])d\omega' \\
Q^1_{in}(f)(v) &= \int_{\varepsilon'>0} \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega')\sqrt{2\varepsilon'}[e^{-\varepsilon} f(\varepsilon', \omega) - e^{-\varepsilon'} f(\varepsilon, \omega)][\delta'_+ + \delta'_-]d\varepsilon' d\omega'.
\end{aligned}$$

Dans ce qui précède, nous avons noté $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \hbar\omega_0$, $\sigma_+ = \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon_+, \omega')\sqrt{2\varepsilon_+}$, $\sigma_- = \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon_-, \omega')\sqrt{2\varepsilon_-}\,\mathbb{I}_{(\hbar\omega_0\,;\,+\infty)}(\varepsilon)$, et $\delta'_\pm = \delta(\varepsilon' - \varepsilon_\pm)$ ($\mathbb{I}_A$ désigne la fonction indicatrice de l'ensemble $A$).

L'utilisation de la première décomposition conduirait à un modèle SHE non couplé. Notre but étant de donner un modèle SHE couplé pour les collisions électrons/phonons, nous introduisons les opérateurs suivants, conformément à la technique présentée en section 2.4 :

$$Q^\alpha = (1-\alpha)Q^0 + \alpha Q^1, \qquad Q^\alpha_{inel} = (1-\alpha)Q^0_{inel} + \alpha Q^1_{inel}$$

et nous considérons l'équation (2.18) munie de l'opérateur $Q^\alpha + \eta^2 Q^\alpha_{inel}$, soit :

$$\eta^2 \partial_t f^\eta + \eta \left( v \cdot \nabla_x f^\eta - \nabla_x V \cdot \nabla_v f^\eta \right) = Q^\alpha \left( f^\eta \right) + \eta^2 Q^\alpha_{inel} \left( f^\eta \right), \; x \in \mathbb{R}^3, \; v \in \mathbb{R}^3. \tag{2.7}$$

P. Degond [21] considère le cas de collisions avec des impuretés (dans ce cas, les échanges d'énergies peuvent être arbitrairement petits). Il obtient un modèle de la forme (2.30), (2.31). Dans notre cas, le caractère discret des échanges d'énergie lors des collisions entre électrons et phonons introduit une différence dans l'équation de courant : ce ne sont pas tous les niveaux d'énergie qui sont couplés, mais seulement les niveaux d'énergies égaux modulo $\hbar\omega_0$. En effet, dans notre cas le modèle SHE couplé s'écrit

$$N \partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J = N \, \mathcal{P}_{SHE} \left( Q^\alpha_{in}(F) \right) \tag{2.8}$$

$$J(\varepsilon) = - \sum_{k \geq -k_0(\varepsilon)} D_k(\varepsilon) \tilde{\nabla} F(\varepsilon + k\hbar\omega_0), \quad k_0(\varepsilon) = -[1 - \varepsilon/\hbar\omega_0] \tag{2.9}$$

où $[x]$ désigne la partie entière du réel $x$ et $(D_k(\varepsilon))_k$ est une suite infinie de tenseurs de diffusion dont l'expression (2.12) découle de la résolution du problème auxiliaire

$$-Q^\alpha(\chi) = \psi(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0), \tag{2.10}$$

analogue de (2.32). On note, ici aussi, $N(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}$.

La preuve rigoureuse de la dérivation de ce modèle repose sur des idées introduites par P. Degond dans [21]. Cependant, nous améliorons ses résultats de deux façons : d'une part, nous montrons que la solution $F$ est continue en temps à valeurs dans $L^2$, ce qui permet d'établir l'unicité, et, d'autre part, nous établissons la convergence en levant une hypothèse (densité dans $L^2$ d'un certain espace de fonctions tests) qui est vérifiée dans le cas particulier d'une section efficace de collision constante, mais dont la validité générale demeure douteuse. Les techniques utilisées pour cela sont largement inspirées du travail de T. Goudon et A. Mellet [44] effectué dans le cas d'un espace d'énergie discret pour des applications à la neutronique.

Avant de détailler les dérivations formelle et rigoureuse, nous présentons quelques propriétés de l'opérateur de collision $Q^\alpha$.

### 2.0.4 Etude de l'opérateur $Q^\alpha$ (section 2)

De même que dans le cas de l'opérateur élastique $\mathcal{C}^\alpha_{el}$ étudié dans [21] (Cf. Section 2.4), on peut caractériser le noyau de $Q^\alpha$ et établir une inégalité d'entropie sous certaines conditions sur la section efficace de collision. On fait l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 2.1** *(i)* $\Psi(\varepsilon', \omega'; \varepsilon, \omega) = \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega') = \Psi(\varepsilon, \omega', \varepsilon', \omega)$,
*(ii) Il existe deux constantes* $C_0, C_1 > 0$, *une fonction* $\varphi$ *et une constante* $\underline{\varphi} > 0$ *telles que*

$$C_0 \varphi \varphi' e^{\frac{\varepsilon + \varepsilon' + \hbar\omega_0}{2}} \leq \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega') \leq C_1 \varphi \varphi' e^{\frac{\varepsilon + \varepsilon' + \hbar\omega_0}{2}},$$

$$\varphi \geq \underline{\varphi} > 0, \quad \varphi N \geq \underline{\varphi} > 0.$$

La condition (i) garantit la conservation de la masse et permet de montrer que $Q^\alpha$ est autoadjoint dans l'espace à poids $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$. L'hypothèse (ii) implique que $Q^\alpha$ est un opérateur borné dans $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$ et dissipatif si $0 \leq \alpha < C_0/\left(C_0 + C_1\right)$. En effet, sous cette condition sur $\alpha$, on peut montrer (Cf. Lemme 2.2) que

$$-\int Q^\alpha(f) f \frac{dv}{M} \geq 2C_\alpha \underline{\varphi}^2 \parallel f - \mathcal{P}_{SHE}(f) \parallel^2_{L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)},$$

ce qui montre que le noyau Ker $Q^\alpha$ de $Q^\alpha$ dans $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$ est constitué des fonctions ne dépendant que de l'énergie et que, d'après l'alternative de Fredholm, l'image Im $Q^\alpha$ de $Q^\alpha$ est constituée des fonctions dont la moyenne sur les sphères d'énergie constante est nulle, c'est-à-dire dont la projection par $\mathcal{P}_{SHE}$ est nulle.

### 2.0.5 Dérivation formelle (section 3)

On rappelle le développement de Hilbert de $f^\eta$ : $f^\eta = f^0 + \eta f^1 + \eta^2 f^2$, que l'on introduit dans l'équation (2.7). Reprenons les étapes décrites en section 2.3. L'identification des termes d'ordre 0 ne présente pas de difficulté : $f^0$ doit appartenir à Ker $Q^\alpha$ et on a donc, d'après ce qui précède,

$$f(t, x, v) = F(t, x, |v|^2/2).$$

Le correcteur d'ordre 1 est solution de

$$Q^\alpha(f^1) = v \cdot \tilde{\nabla} F$$

et, comme $Q^\alpha$ est non local en énergie, on est conduit à étudier le problème auxiliaire (2.10).

**Etude du Problème Auxiliaire (section 4)** On cherche à résoudre (2.10) lorsque $\mathcal{P}_{SHE}(\psi) = 0$. Contrairement au cas d'un opérateur de collision de type $\mathcal{C}^\alpha_{el}$, il est impossible de trouver une solution de la forme $\theta\delta(\varepsilon - \varepsilon_0) + \overline{\chi}$. En revanche, un simple calcul formel de $Q^\alpha(\delta(\varepsilon - \varepsilon_0))$ suggère de chercher la solution sous la forme d'un peigne de Dirac infini tel que :

$$\chi_{\varepsilon_0}(\varepsilon, \omega) = \sum_{k \geq -k_0(\varepsilon_0)} \chi_k(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \tag{2.11}$$

avec $\mathcal{P}_{SHE}(\chi_k) = 0$ et $\chi_k \in L^2(\mathbb{S}^2)$. On a noté $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + k\hbar\omega_0$ et on rappelle que $k_0(\varepsilon) = -[1 - \varepsilon/\hbar\omega_0]$. La restriction de la somme aux indices supérieurs à $k_0$ est nécessaire pour éviter de considérer des énergies $\varepsilon_k$ négatives. Il reste à prouver l'existence d'une suite $\chi_k$ d'éléments de $L^2(\mathbb{S}^2)$ de moyenne nulle telle que la mesure $\chi_{\varepsilon_0}$ définie par (2.11) vérifie (2.10). Pour cela, on est amené à étudier l'inversibilité d'un opérateur $A^\alpha$ sur des espaces bien choisis de suites d'éléments de $L^2(\mathbb{S}^2)$. En effet, on peut montrer par un simple calcul que pour toute suite $(\chi_k)_k$ de $L^2(\mathbb{S}^2)$, $Q^\alpha(\chi)$ peut se mettre sous la forme

$$Q^\alpha(\chi) = 4\pi \sum_{k \geq -k_0} \left(A^\alpha(\chi)\right)_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

où, pour simplifier, nous avons noté $\chi = \sum \chi_k(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ dans le membre de gauche et $\chi = (\chi_k)_k$ la suite d'éléments de $L^2(\mathbb{S}^2)$ dans le membre de droite (Cf. section 4 pour la définition de $A^\alpha$).

Or, on peut montrer (Cf. Lemme 4.1) que, sous l'hypothèse 2.1 et si

**Hypothèse 2.2** *Le paramètre $\alpha$ satisfait :* $0 \leq \alpha < C_0/\left(C_0 + e^{\hbar\omega_0}C_1\right)$

alors l'opérateur $A^\alpha$ est bien inversible sur un espace convenable. Cette propriété implique que, pour toute fonction $\psi$ de moyenne angulaire nulle, il existe une suite $(\chi_k)_k$ dans un bon sous-espace de $L^2(\mathbb{S}^2)$ telle que la fonction $\chi$ définie par (2.11) est une solution de (2.10).

En notant $\theta^{\varepsilon_0}$ la solution du problème (2.10) avec $\psi(\omega) = \omega M(\varepsilon_0)\sqrt{2\varepsilon_0}$, on peut montrer comme en section 2.4 que $J(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}\mathcal{P}_{SHE}(vf^1)$ vérifie

$$J(\varepsilon) = -\int_{\varepsilon'} D(\varepsilon,\varepsilon')\tilde{\nabla}F(\varepsilon')d\varepsilon'$$

avec $D(\varepsilon,\varepsilon') = 2\varepsilon' M^{-1}(\varepsilon')\mathcal{P}_{SHE}\left(\theta^\varepsilon(\varepsilon',\omega)\otimes\omega\right)$, qui est une équation formellement semblable à l'équation (2.29). Si l'on tient compte de la forme précise du peigne de Dirac $\theta^\varepsilon$, on montre que $J$ et $F$ vérifient (2.9) avec

$$D_k(\varepsilon) = 2\left(\varepsilon + k\hbar\omega_0\right)M^{-1}\left(\varepsilon + k\hbar\omega_0\right)\mathcal{P}_{SHE}(\theta_k^\varepsilon(\omega)\otimes\omega). \tag{2.12}$$

Enfin, l'identification des termes d'ordre 2 conduit à une équation d'inconnue $f^2$ dont la condition de solvabilité est équivalente à l'équation de continuité (2.30).

On peut interpréter par dualité l'équation de courant en introduisant la forme bilinéaire suivante :

$$\mathcal{D}(\Phi,\Psi) = \int_{\mathbb{R}^3_x}\int_{\varepsilon>0}\int_{\varepsilon'>0}\Phi^T(\varepsilon)D(\varepsilon,\varepsilon')\Psi(\varepsilon')M^{-1}(\varepsilon)d\varepsilon' d\varepsilon dx$$

qui, sous les hypothèses 2.1 et 2.2, vérifie le lemme suivant (Cf. Lemme 5.5)

**Lemme 2.3** *(i) $\mathcal{D}$ est une forme bilinéaire continue et symétrique sur* $\left(L^2\left(\mathbb{R}^3\times(0,\infty);\varepsilon^{3/2}M^{-1}(\varepsilon)d\varepsilon dx\right)\right)^3 =: \left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)^3$.

*(ii) $\mathcal{D}$ est coercive sur cet espace : il existe une constante $C > 0$ telle que, pour $\Phi \in \left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)^3$,*

$$\mathcal{D}(\Phi,\Phi) \geq C \parallel \Phi \parallel^2_{\left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)^3}.$$

*(iii) (Théorème de Riesz) Il existe une application linéaire continue inversible $\mathcal{F}$ de $\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ sur* $L^2\left(\mathbb{R}^3\times(0,\infty);\varepsilon^{-3/2}M^{-1}(\varepsilon)d\varepsilon dx\right) =: \mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$ *telle que*

$$\forall\Phi,\Psi\in(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3 \qquad \mathcal{D}(\Phi,\Psi) = -\int_{\mathbb{R}^3_x}\int_{\varepsilon>0}\mathcal{F}(\Phi)\cdot\Psi M^{-1}d\varepsilon dx.$$

Notons que, si l'on identifie l'espace $\mathcal{L}^2_{M^{-1}} = L^2(\mathbb{R}^3 \times (0,\infty); M^{-1} d\varepsilon dx)$ avec son dual, alors $\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}} = \left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)'$ et $\mathcal{F}$ introduit une dualité entre les espaces $\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ et $\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$ qui permet d'interpréter l'équation de courant comme une relation de dualité entre le courant $J$ et la densité $F$ :

$$J = \mathcal{F}\left(\tilde{\nabla} F\right).$$

Ce point de vue est la clef du raisonnement introduit par T. Goudon et A. Mellet dans [44] pour établir la dérivation rigoureuse sans trop d'hypothèses simplificatrices.

### 2.0.6 Dérivation rigoureuse (section 5)

La dérivation rigoureuse de modèles de type SHE couplé en présence d'un potentiel $V$ non nul est encore un problème ouvert à ce jour. Nous supposerons ici que $V = 0$ et que $Q^\alpha_{inel} = 0$. On considère donc le problème de Cauchy suivant :

$$\begin{array}{l} \eta^2\, \partial_t f^\eta + \eta\, v \cdot \nabla_x f^\eta = Q^\alpha\left(f^\eta\right) \\ f^\eta(t=0) = f^\eta_I \end{array} \tag{2.13}$$

dont nous étudions le comportement lorsque $\eta$ tend vers 0.

Voici le résultat principal de ce travail :

**Théoreme 2.1** *Le problème de Cauchy (2.13) admet une suite de solutions $\left(f^\eta\right)_\eta$ telle que, sous les hypothèses 2.1, 2.2 et en supposant que la suite $\left(f^\eta_I\right)_\eta$ est bornée, les suites $\left(F^\eta = \mathcal{P}_{SHE}\left(f^\eta\right)\right)_\eta$ et $\left(J^\eta = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{\eta}\mathcal{P}_{SHE}\left(v f^\eta\right)\right)_\eta$ convergent faiblement vers $(F,J) \in \{G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) : \nabla_x G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3})^3\} \times L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}})$. Le couple $(F,J)$ satisfait le système de type SHE couplé suivant*

$$\left\{\begin{array}{l} N\partial_t F + \nabla_x \cdot J = 0 \\ J = -\displaystyle\int_{\varepsilon'>0} D(\varepsilon,\varepsilon')\nabla_x F(\varepsilon')d\varepsilon' \\ F_{|t=0} = F_I \end{array}\right.$$

*dans le sens suivant :*

**- équation de continuité :**

$$\forall\, \Phi \in \{\psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) : \partial_t\psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}), v\cdot\nabla_x\psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})\}$$

*tel que $\Phi(T) = 0$,*

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} NF\partial_t\Phi + J\cdot\nabla_x\Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt + \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} NF_I\Phi_{|t=0}M^{-1}d\varepsilon dx = 0. \tag{2.14}$$

**- équation de courant :**

$$J = \mathcal{F}(\nabla_x F).$$

*De plus, le couple $(F,J)$ est unique dans la classe de solutions $\{G \in L^2(0,T;\ \mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) : \nabla_x G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3})^3\} \times L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}})$, et $F \in C([0,T];\mathcal{L}^2_{NM^{-1}})$.*

Les espaces fonctionnels sont définis par : $\mathcal{L}^2_{N^\alpha M^\beta} = L^2(\mathbb{R}^3 \times (0,\infty); \varepsilon^{\alpha/2} M^\beta d\varepsilon dx)$ et $\mathbb{L}^2_{M^{-1}} = L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}(v) dv dx)$.

**Preuve :** Dans un premier temps, le théorème de Hille-Yosida permet d'établir l'existence et l'unicité (pour $\eta$ fixé) d'une solution à (2.13). En multipliant la formulation faible (5.2) de l'équation (2.13) par $f^\eta/M$ et en intégrant on obtient des estimations sur $f^\eta$ et sur $\mathcal{P}_{SHE} f^\eta$ qui permettent d'établir la convergence faible de $F^\eta = \mathcal{P}_{SHE}(f^\eta)$ vers une fonction $F$ indépendante de $\omega$ et celle de $J^\eta = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{\eta} \mathcal{P}_{SHE}(v f^\eta)$ vers un courant $J$. De plus, $F$ et $J$ satisfont la forme faible de l'équation de continuité (2.14). (Cf. section (5.1) pour plus de détais.)

L'étape la plus délicate consiste à établir l'équation de courant. Nous nous inspirons ici de la méthode proposée par T. Goudon et A. Mellet [44]. Posons, pour toute fonction $\Phi \in \left(\mathcal{L}^2_{N^3 M^{-1}}\right)^3$, $K^\Phi = (-Q^\alpha)^{-1}(v \cdot \Phi)$. La fonctionnelle $\Phi \to K^\Phi$ est bien définie puisque pour toute fonction $\Phi$ de l'énergie seulement, $v \cdot \Phi$ appartient bien à Ker $(Q^\alpha)^\perp$. En multipliant l'équation cinétique (2.13) par $K^\Phi M^{-1}$, en intégrant et en prenant la limite $\eta \to 0$ on obtient :

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} J \cdot \Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} F(x,\varepsilon,t) \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(v K^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt$$

qui est bien la formulation faible de l'équation de courant $J = \mathcal{F}(\nabla_x F)$. Cependant, pour que le passage à la limite soit valable, il faut que la fonction test $\Phi$ appartienne à

$$\left\{ \Phi \in L^2\left((0,T); \left(\mathcal{L}^2_{N^3 M^{-1}}\right)^3\right) / \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(v K^\Phi\right) \in L^2\left((0,T); \mathcal{L}^2_{N M^{-1}}\right) \right\}.$$

Dans [21], P. Degond vérifie que cet espace est dense dans $L^2\left((0,T); \left(\mathcal{L}^2_{N^3 M^{-1}}\right)^3\right)$ dans le cas particulier où la section efficace de collision est constante. Cependant, dans le cas général, il n'est pas clair que cet espace ne soit pas vide.

Pour contourner ce problème, qui est essentiellement dû au fait que l'on ne contrôle pas le comportement de $K^\Phi$ pour les hautes énergies, on introduit une fonction de troncation en énergie $\rho_R(\varepsilon) = \rho(\varepsilon/R)$ (avec $\rho \in C^\infty(\mathbb{R})$ paire et telle que $\rho(\varepsilon) = 0$ si $\varepsilon > 2$ et $\rho(\varepsilon) = 1$ si $0 \le \varepsilon < 1$) et on établit une version approchée de l'équation de courant ci-dessus. On montre que $F$ et $J$ vérifient

$$-4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(v K^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,v}} g Q^\alpha\left(K^\Phi \rho_R\right) M^{-1} dx dv dt$$

pour tout $\Phi$ dans $\left(\mathcal{L}^2_{N^3 M^{-1}}\right)^3$ et tout $R > 0$. On a noté $g$ la limite lorsque $\eta$ tend vers 0 de $(f^\eta - F^\eta)/\eta$. Le passage à la limite $\eta \to 0$ ne présente plus de problème ici puisqu'on s'est affranchi des hautes énergies grâce à la fonction de troncation $\rho_R$ et $\Phi$ est une fonction test admissible. Cette équation est bien une approximation de l'équation de courant car $J = \sqrt{2\varepsilon} \mathcal{P}_{SHE}(vg)$ et $Q^\alpha\left(K^\Phi \rho_R\right) \to v \cdot \Phi$ quand $R \to \infty$.

Il reste à étudier la limite $R \to \infty$. La forme linéaire $\mathcal{F}_R$ définie par

$$\mathcal{F}_R(\Phi) = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(v K^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt$$

(qui n'est rien d'autre que la forme faible de $\mathcal{D}(\rho_R \nabla_x F, \Phi)$) est en fait uniformément bornée par rapport à $R$ :

$$|\mathcal{F}_R(\Phi)| \leq C \parallel g \parallel \parallel v \cdot \Phi \parallel_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} = C \parallel g \parallel \parallel \Phi \parallel_{L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})}$$

et on peut donc lui associer un élément $\Theta_R \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ tel que $\parallel \Theta_R \parallel_{L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})} \leq C$ et

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_R(\Phi) &= -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x, \varepsilon>0} \mathcal{F}(\Theta_R) \cdot \Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt = 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\Theta_R, \Phi) dt \\
&= -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(vK^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt
\end{aligned}$$

et donc, par définition de $\mathcal{D}$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_R(\Phi) &= 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\Theta_R, \Phi) dt = 4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x, \varepsilon>0} \Theta_R \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(vK^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt \\
&= -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{SHE}\left(vK^\Phi\right) \sqrt{2\varepsilon} M^{-1} d\varepsilon dx dt.
\end{aligned}$$

Grâce à un lemme de densité (Lemme 5.8), il découle de cette égalité que la suite $\rho_R \nabla_x F = \Theta_R$ indexée par $R$ est bornée dans $L^2\left(0, T; \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)$. Par passage à la limite, on obtient l'équation de courant :

$$\mathcal{F}_R(\Phi) \to 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\nabla_x F, \Phi) dt = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x, \varepsilon>0} J \cdot \Phi M^{-1} dx d\varepsilon dt$$

c'est-à-dire $J = \mathcal{F}(\nabla_x F)$.

# 3 Régimes de diffusion engendrés par des collisions de surface

L'étude des phénomènes de diffusion engendrés par des collisions de surface repose largement sur les travaux pionniers de H. Babovsky [4], et H. Babovsky, C. Bardos et T. Platkowski [5], qui considèrent le cas d'interactions inelastiques entre des particules et deux parois parallèles, en l'absence de collisions entre particules. Toutefois, pour ce problème, C. Börgers, C. Greengard et E. Thomann ont montré [10] que la diffusivité est en fait infinie et qu'il faut faire un changement d'échelle temporelle pour obtenir une diffusivité finie. Ce phénomène ("diffusion anomale") a également été souligné par F. Golse [43].

Ces dernières années, plusieurs travaux ont été menés dans le but d'étendre aux modèles de type SHE les résultats obtenus par ces auteurs dans le cas des équations de type Dérive Diffusion. Ainsi, dans [20], P. Degond a proposé un modèle SHE pour décrire les interactions de surface dans les moteurs à plasma. Le modèle y est dérivé formellement à partir d'une équation

cinétique avec condition au bord diffusive. La géométrie du problème est assez complexe (deux cylindres infinis concentriques entre lesquels est confiné le plasma) et, dans [27], les auteurs réduisent la complexité géométrique en considérant un gaz d'électrons confiné entre deux plans infinis. La dérivation d'un modèle SHE est réalisée formellement et rigoureusement. (On peut aussi se reporter à [26] pour la dérivation d'un modèle SHE pour le même système physique, mais tenant compte des interactions en volume.) Une étude similaire réalisée dans le cas des super réseaux semiconducteurs est donnée dans [9].

Plus récemment, dans [23], P. Degond considère un gaz de particules placées dans le demi-espace $\mathbb{R}^2 \times (-\infty, 0)$ soumis à un potentiel $\Psi$ de confinement, comme en Figure 2.1. On adopte les notations introduites en section 1.2 (section Collisions au bord) et, en particulier, on note $x = (x_1, x_2, z)$ et $\underline{x} = (x_1, x_2)$. Soit une particule réémise, après collision avec la paroi infinie,

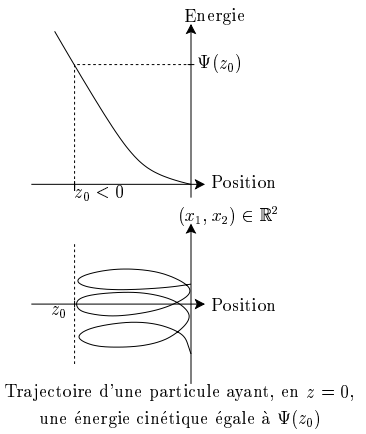


FIG. 2.1 – Confinement par un potentiel

vers l'intérieur du domaine avec une vitesse $v$. Alors, sous de bonnes hypothèses sur le potentiel, il existe une position $z_0$ telle que son énergie cinétique $|v|^2/2$ soit égale à $\Psi(z_0)$. La particule s'éloigne de la paroi (sa position $z$ décroît) et, sous l'action du potentiel de rappel $\Psi$, son énergie cinétique diminue et se convertit en énergie potentielle. Lorsqu'elle atteint la position $z_0$, appelée point de retour, sa vitesse est nulle et son énergie potentielle vaut $\Psi(z_0)$. Elle amorce alors son retour vers la paroi, convertissant désormais son énergie potentielle en énergie cinétique jusqu'à frapper la paroi avec une vitesse $v'$ telle que $|v'|^2/2 = \Psi(z_0) = |v|^2/2$, puisque l'énergie est conservée pendant le déplacement de la particule. Si les collisions avec la paroi sont élastiques (c'est-à-dire si elles préservent l'énergie), alors la particule est de nouveau émise avec une énergie cinétique égale à $\Psi(z_0)$ et la particule effectue ainsi une infinité de rebonds.

Pour garantir la pertinence de cette description, nous faisons l'hypothèse suivante sur le potentiel $\Psi$ :

**Hypothèse 3.1** *On suppose que, pour tout $\underline{x} \in \mathbb{R}^2$, la fonction $z \to \Psi(\underline{x}, z)$ est continue, décroissante et que*

$$\lim_{z \to -\infty} \Psi(\underline{x}, z) = +\infty,$$

*ce qui garantit la bijectivité de $\Psi(\underline{x},\cdot)$ et, donc, la possibilité de déterminer le point de retour d'une particule connaissant son énergie cinétique.*

Considérons maintenant un nuage de particules suffisamment dilué pour que les collisions entre particules soient beaucoup plus rares que les collisions avec la paroi. Si l'on néglige alors les collisions en volume, on peut décrire le comportement de ce nuage dans le domaine $\Omega = \mathbb{R}^2 \times (-\infty, 0)$ grâce à l'équation de Vlasov

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \nabla_x \Psi \cdot \nabla_v f = 0, \quad x \in \Omega, \ v \in \mathbb{R}^3.$$

En distinguant entre les directions $\underline{x} = (x_1, x_2)$ tangentes à la paroi et la direction $z$ transversale, l'équation s'écrit

$$\partial_t f + (\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi \cdot \nabla_{\underline{v}}) f + \left( v_z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial v_z} \right) f = 0, \quad x \in \Omega, \ v \in \mathbb{R}^3.$$

On décrit les collisions au bord au moyen d'une condition du type

$$\gamma^- f = \mathcal{K} \gamma^+ f$$

où $\mathcal{K}$ est défini plus bas par (3.17). Pour étudier le régime de diffusion, on effectue un changement d'échelle analogue à celui proposé en section 2.2 :

$$\begin{cases} t' = \eta^2 t \\ \underline{x}' = \eta \underline{x} \end{cases} \tag{3.15}$$

et on négligera de noter les primes par souci de simplicité. Ce changement d'échelle revient à supposer que le potentiel de rappel devient infini près de la paroi et donc que les rebonds des particules contre la paroi deviennent extrêmement fréquents. On comprend donc que ce type de changement d'échelle permette d'étudier les phénomènes de diffusion (Cf. [4], [5]).

L'équation de Vlasov avec condition au bord s'écrit alors

$$\eta^2 \, \partial_t f^\eta + \eta \, (\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi \cdot \nabla_{\underline{v}}) \, f + (v_z \partial/\partial z - (\partial \Psi/\partial z) \partial/\partial v_z) \, f^\eta = 0, \quad x \in \Omega, \ v \in \mathbb{R}^3, \tag{3.16}$$

$$\gamma^- f^\eta(v) = \mathcal{K} \left( \gamma^+ f^\eta \right)(v) = \int_{v'_z > 0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M' \gamma^+ f(\varepsilon, \omega') |v'_z| dv', \ \forall v \in \mathbb{R}^3_-. \tag{3.17}$$

On fait les hypothèses suivantes sur la section efficace de collision :

**Hypothèse 3.2** *(i) Conservation de la masse*

$$\int_{v_z < 0} \kappa(v' \to v) M(v) |v_z| dv = 1, \tag{3.18}$$

*(ii) Réciprocité*

$$\kappa(v' \to v) = \kappa(-v \to -v') = \kappa(|v|\omega' \to |v'|\omega) = \kappa(|v'|\omega_* \to |v|\omega'_*), \tag{3.19}$$

*où $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z)$ et $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$.*
*(iii) Positivité*

$$\kappa(v' \to v) > 0.$$

Dans [23], l'auteur établit formellement la convergence de ce système vers un modèle de type SHE : lorsque $\eta$ tend vers 0, $f^\eta$ tend vers une fonction $f^0(t,x,v)$ qui est en fait une fonction de l'énergie totale. Ainsi :

$$f^\eta(t,x,v) \to f^0(t,x,v) = F\left(t, \underline{x}, \frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x}, z)\right),$$

et $F$ est solution du système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} &N(\underline{x},\varepsilon)\partial_t F + (\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon)\cdot \underline{J} = 0, \\ &\underline{J}(t,\underline{x},\varepsilon) = -D(\underline{x},\varepsilon)\left(\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon\right)F(t,\underline{x},\varepsilon), \end{aligned}$$

où la densité d'états $N$ est donnée par

$$N(\underline{x},\varepsilon) = \int \delta\left(\frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x},z) - \varepsilon\right) dvdz$$

et la matrice de diffusion $D$ s'écrit

$$D(\underline{x},\varepsilon) = \int \underline{\chi} \otimes \underline{v}\, \delta\left(\frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x},z) - \varepsilon\right) dvdz.$$

La fonction vectorielle $\underline{\chi} = (\chi_1, \chi_2)$ est la solution du problème auxiliaire suivant :

$$\left(-v_z\,\partial_z + \partial_z\psi\,\partial_{v_z}\right)\underline{\chi} = \underline{v}, \quad \gamma^+\left(\underline{\chi}\right) = \mathcal{K}^*\left(\gamma^-\left(\underline{\chi}\right)\right). \tag{3.20}$$

On a noté $\Psi_0(\underline{x}) = \Psi(\underline{x}, z=0)$ et $\psi(\underline{x},z) = \Psi(\underline{x},z) - \Psi(\underline{x},z=0) = \Psi(\underline{x},z) - \Psi_0(\underline{x})$, de telle sorte que $\psi(\underline{x},0) = 0$.

Notre but ici est de proposer une généralisation de ce modèle au cas de collisions inélastiques avec le bord en dérivant un modèle SHE couplé. Pour cela, nous introduisons un opérateur de collision au bord *inélastique* $\mathcal{B}$ dont nous donnons deux décompositions en parties élastique et inélastique. Dans un cas, la partie élastique est *locale*, dans l'autre elle est *non locale*. Prenant une combinaison convexe de ces décompositions et supposant que les parties inélastiques sont en fait d'ordre $\eta^2$ (hypothèse identique à celle faite dans le cas de collisions en volume : Cf. sections 2.4 et 2) on obtient un modèle cinétique dont la limite quand $\eta$ tend vers 0 est un modèle de type SHE couplé.

L'opérateur (1.15) modélise bien des collisions élastiques *locales en énergie* et, dans la mesure où elle n'exprime pas le terme de gain $\gamma^- f$ sous forme intégrale, une condition au bord de type $\gamma^- f = \mathcal{K}\gamma^+ f$ n'a aucune chance de modéliser des collisions élastiques *non locales*. Réécrivons la relation (3.17) sous la forme d'une seule intégrale. On doit avoir :

$$\int_{v'_z>0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M'[\gamma^+ f(\varepsilon,\omega') - \gamma^- f(\varepsilon,\omega)]|v'_z|dv' = 0$$

puisque, d'après l'hypothèse 3.2, (3.18), on a

$$\int_{v'_z>0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M'\gamma^- f(\varepsilon,\omega)|v'_z|dv' = \gamma^- f(v).$$

Dès lors, il est assez naturel de voir cet opérateur comme la partie élastique de l'opérateur suivant

$$\mathcal{B}(\gamma(f))(v) = \int_{v' \in \mathbb{R}^3_+} \kappa(v' \to v)[M(v')\gamma^- f(v) - M(v)\gamma^+(f)(v')]|v'_z|dv'.$$

En effet, on a $\mathcal{B}(\gamma(f)) = \mathcal{B}^0_{el}(\gamma(f)) + \mathcal{B}^0_{in}(\gamma(f))$, avec

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}^0_{el}(\gamma(f)) &= \int_{v'_z>0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M'[\gamma^+ f(\varepsilon, \omega') - \gamma^- f(\varepsilon, \omega)]|v'_z|dv', \\
\mathcal{B}^0_{in}(\gamma(f))(v) &= \int_{v'_z>0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega)[M\gamma^+ f(\varepsilon', \omega') - M'\gamma^+ f(\varepsilon, \omega')]|v'_z|dv',
\end{aligned}$$

ce qui donne la décomposition de $\mathcal{B}$ en une partie élastique *locale* $\mathcal{B}^0_{el}$ et une partie inélastique $\mathcal{B}^0_{in}$. Nous proposons par ailleurs la décomposition suivante en une partie élastique *non locale* $\mathcal{B}^1_{el}$ et une partie inélastique $\mathcal{B}^1_{in}$ :

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}^1_{el}(\gamma(f))(v) &= \int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v) M[\gamma^+ f(\varepsilon', \omega') - \gamma^+ f(\varepsilon', \omega_*)]|v'_z|dv', \\
\mathcal{B}^1_{in}(\gamma(f))(v) &= \int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v)[M\gamma^+ f(\varepsilon', \omega_*) - M'\gamma^- f(\varepsilon, \omega)]|v'_z|dv',
\end{aligned}$$

avec $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z)$ et $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$.

De même que dans le cas des collisions en volume (Cf. sections 2.4 et 2) on suppose que les interactions au bord sont bien modélisées, à l'échelle cinétique, par un opérateur, élastique à l'ordre principal en $\eta$, tel que :

$$\mathcal{B}^{\alpha,\eta}(\gamma f) = \left\{(1-\alpha)\mathcal{B}^0_{el} + \alpha\mathcal{B}^1_{el} + \eta^2[(1-\alpha)\mathcal{B}^0_{in} + \alpha\mathcal{B}^1_{in}]\right\}(\gamma f).$$

Une fois que l'on a obtenu les deux décompositions élastique/inélastique, le point de vue intégral sur la condition au bord n'est plus le plus pertinent pour la suite et il est intéressant de se ramener à une condition au bord de la forme suivante

$$\gamma^-(f^\eta) = \mathcal{K}^\alpha_{el}(\gamma^+(f^\eta)) + \eta^2\mathcal{K}^\alpha_{in}(\gamma(f^\eta)) \tag{3.21}$$

avec

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}^\alpha_{el}(\gamma^+(f^\eta)) &= \mathcal{K}^0_{el}(\gamma^+(f^\eta)) + \frac{\alpha}{1-\alpha}\mathcal{B}^1_{el}(\gamma^+(f^\eta)) \\
\mathcal{K}^\alpha_{in}(\gamma(f^\eta)) &= \left[\mathcal{B}^0_{in} + \frac{\alpha}{1-\alpha}\mathcal{B}^1_{in}\right](\gamma f^\eta), \\
\mathcal{K}^0_{el}(\gamma^+(f^\eta)) &= \int_{v'_z>0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M'\gamma^+ f^\eta(\varepsilon, \omega')|v'_z|dv'.
\end{aligned}$$

(On a bien sûr $\mathcal{B}^0_{el}(\gamma f^\eta) = \mathcal{K}^0_{el}(\gamma^+ f^\eta) - \gamma^- f^\eta$.)

Nous faisons une hypothèse supplémentaire sur la section $\kappa$ :

**Hypothèse 3.3** *Nous supposons qu'il y a deux constantes $C_0, C_1 > 0$ et une fonction $\underline{\kappa}(\varepsilon)$ telles que*

$$C_0\, \underline{\kappa}(\varepsilon)\underline{\kappa}(\varepsilon') \leq \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) \leq C_1\, \underline{\kappa}(\varepsilon)\underline{\kappa}(\varepsilon').$$

*De plus, on suppose que*

$$\underline{\kappa} \geq \tilde{\kappa}, \qquad \underline{\kappa} \leq K$$

*où $\tilde{\kappa} > 0$ et $K > 0$ sont des constantes.*

Alors, on a :

**Théoreme 3.1** *Sous les hypothèses 3.1, 3.2 et 3.3, la solution $f^\eta$ du problème (3.16), (3.21) converge* formellement *vers une fonction $f^0(t, x, v)$ qui ne dépend que de l'énergie totale, soit, telle que :*

$$f^0(t, x, v) = F\left(t, \underline{x}, \frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x}, z)\right).$$

*De plus, $F(t, x, \varepsilon)$ satisfait le système de type SHE* couplé *suivant :*

$$N(\underline{x}, \varepsilon)\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot \underline{J} = \tilde{Q}(F) = \frac{1}{1-\alpha}\int_{\varepsilon'>0} \sigma(\varepsilon' \to \varepsilon)(MF' - M'F)d\varepsilon',$$

$$\underline{J}(t, \underline{x}, \varepsilon) = -D(\underline{x}; \varepsilon)\tilde{\nabla}F(t, \underline{x}, \varepsilon) - \int_{\varepsilon'>0} \Delta(\underline{x}; \varepsilon, \varepsilon')\tilde{\nabla}F(t, \underline{x}, \varepsilon')d\varepsilon'.$$

*La section efficace de collision $\sigma$ s'écrit :*

$$\sigma(\varepsilon' \to \varepsilon) = 4\varepsilon'\varepsilon \int_{\mathbb{S}^2_-}\int_{\mathbb{S}^2_+} \kappa(v' \to v)|\omega'_z||\omega_z|d\omega' d\omega.$$

*Les tenseurs de diffusion $D$ et $\Delta$ sont donnés par les formules suivantes :*

$$\begin{aligned} D(\underline{x}; \varepsilon) &= \int_{-\infty}^0 \int_{\mathbb{R}^3} \underline{\theta_s^\varepsilon}(\underline{x}, z, v) \otimes \underline{v}\, \delta(|v|^2/2 + \psi(\underline{x}, z) - \varepsilon)dvdz, \\ \Delta(\underline{x}; \varepsilon, \varepsilon') &= \int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi_{\underline{x}}^{-1}(\varepsilon'\omega_z^2)}^0 \underline{\theta_r^\varepsilon}(\underline{x}, z, \sqrt{2\varepsilon'}\omega) \otimes \sqrt{2\varepsilon'}\underline{\omega}\frac{|\omega_z|\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\omega_z^2 - \psi(\underline{x}, z)/\varepsilon'}}dzd\omega. \end{aligned}$$

*La fonction $\underline{\chi} = \underline{\theta_s}\delta(|v|^2/2 + \psi(\underline{x}, z) - \varepsilon) + \underline{\theta_r}$ est la solution du problème auxiliaire*

$$\left(-v_z\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\left(\mathcal{M}\underline{\chi}\right) = \underline{v}\, \mathcal{M}\, \delta(|v|^2/2 + \psi(\underline{x}, z) - \varepsilon), \qquad \gamma^+\left(\mathcal{M}\underline{\chi}\right) = \mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\left(\gamma^-\left(\mathcal{M}\underline{\chi}\right)\right),$$

*où $\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}$ est l'adjoint de l'opérateur $\mathcal{K}_{el}^\alpha$ et $\mathcal{M}(\underline{x}, z, v) = \exp -(|v|^2/2 + \Psi(\underline{x}, z))$.*

On notera les différences avec le résultat obtenu dans [23] et, notamment, la présence d'une matrice de diffusion $\Delta(\varepsilon', \varepsilon)$ qui *couple* différents niveaux d'énergie.

### 3.0.7 Etude de l'opérateur de bord (section 3.4)

Nous donnons ici des résultats analogues à ceux établis pour l'opérateur de collision en volume dans la section 2. Le projecteur convenable n'est plus ici $\mathcal{P}_{SHE}$ du fait que l'on est obligé de distinguer entre particules entrantes (de vitesse $v \in \mathbb{R}^3_- = \mathbb{R}^2 \times (-\infty, 0)$) et particules sortantes (de vitesse $v \in \mathbb{R}^3_+ = \mathbb{R}^2 \times (0, \infty)$). Nous noterons :

$$\mathbb{R}^3_\pm = \{v \in \mathbb{R}^3 : \pm v_z > 0\}, \qquad \mathbb{S}^2_\pm = \{\omega \in \mathbb{S}^2 : \pm\omega_z > 0\},$$

$$\mathcal{M}(\underline{x}, z, v) = \exp -(|v|^2/2 + \Psi(\underline{x}, z)), \;\; \mathbb{M}(\underline{x}, v) = \exp -(|v|^2/2 + \Psi_0(\underline{x})).$$

Nous travaillons dans l'espace

$$L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm) = \left\{ f : \int_{\mathbb{R}^3_\pm} [f(v)]^2 |v_z| \mathbb{M}^{-1} dv < \infty \right\},$$

muni du produit scalaire

$$\{f, g\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm)} = \int_{\mathbb{R}^3_\pm} f(v) g(v) |v_z| \mathbb{M}^{-1} dv.$$

Nous notons $\mathcal{P}^\pm$ le projecteur sur le sous-espace de $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm)$ formé des fonctions ne dépendant que de l'énergie. Nous notons

$$\mathcal{E}^\pm = \mathcal{P}^\pm \left( L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm) \right).$$

La formule explicite définissant $\mathcal{P}^\pm$ est

$$\mathcal{P}^\pm(\varphi) = \frac{1}{|\mathbb{S}^2_\pm|} \int_{\mathbb{S}^2_\pm} \varphi(\omega) |\omega_z| d\omega$$

où $|\mathbb{S}^2_\pm| = \int_{\mathbb{S}^2_\pm} |\omega_z| d\omega$. Enfin, on note $\mathcal{J}$ l'opérateur de réflexion spéculaire défini de $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$ à valeurs dans $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$ par $(\mathcal{J}\varphi)(\omega) = \varphi(\omega_*)$, avec $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z)$ et $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$. Son adjoint $\mathcal{J}^*$ est l'opérateur de réflexion de $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$ dans $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$.

Alors, sous les hypothèses 3.2 et 3.3, la Proposition 3.4 établit que, pour $\alpha < C_0/(C_0 + C_1)$, on a, pour tout $\varphi \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$ et tout $\psi \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$, les inégalités suivantes :

$$\{(I - \mathcal{K}^\alpha_{el}\mathcal{J}^*)\varphi, \varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)} = \{(I - \mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*}_{el})\varphi, \varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)} \geq 2|\mathbb{S}^2_\pm| \tilde{\kappa}^2 C_\alpha \parallel \varphi - \mathcal{P}^-(\varphi) \parallel^2_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)}, \quad (3.22)$$

$$\{(I - \mathcal{K}^{\alpha,*}_{el}\mathcal{J})\psi, \psi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)} = \{(I - \mathcal{J}^*\mathcal{K}^\alpha_{el})\psi, \psi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)} \geq 2|\mathbb{S}^2_\pm| \tilde{\kappa}^2 C_\alpha \parallel \psi - \mathcal{P}^+(\psi) \parallel^2_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)}, \quad (3.23)$$

avec $C_\alpha = C_0 \left[ 1 - \frac{\alpha}{1-\alpha} \frac{C_1}{C_0} \right]$. Ces inégalités, qui jouent le rôle d'inégalités de Darrozès-Guiraud, sont un analogue des inégalités d'entropie dans le cas d'interactions de surface.

Ce résultat montre que les opérateurs $I - \mathcal{K}^\alpha_{el}\mathcal{J}^*$ et $I - \mathcal{K}^{\alpha,*}_{el}\mathcal{J}$ sont dissipatifs et ont pour noyau les espaces $\mathcal{E}^-$ et $\mathcal{E}^+$ respectivement.

### 3.0.8 Dérivation formelle (section 4)

Dans la suite, nous notons $\delta_\varepsilon(x,v) = \delta(|v|^2/2 + \psi(\underline{x},z) - \varepsilon)$. L'obtention des modèles SHE dans le cas de collisions en volume reposait sur la projection de l'équation (2.18) sur l'espace des états d'équilibre de l'opérateur de collision. Ici, les états d'équilibre de l'opérateur de collision au bord sont des fonctions définies uniquement au bord du domaine et qui ne sont donc pas vraiment des équilibres thermodynamiques pour le système entier. On peut supposer qu'ici un état d'équilibre sera une fonction $F$ dont la trace sur le bord est dans le noyau de l'opérateur de collision au bord $(1-\alpha)\mathcal{B}^0_{el} + \alpha\mathcal{B}^1_{el}$ et, en l'absence de collisions en volume, qui reste constante le long des courbes d'énergie *totale* constante (en vertu de la conservation de l'énergie totale particule par particule : Cf. l'étude rapide de la Figure 2.1 en début de section). On peut vérifier qu'une telle fonction s'écrit

$$f(t,x,v) = F\left(t, \underline{x}, \frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x},z)\right)$$

et qu'elle vérifie $\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(f) = f$ avec

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(f)(x,v) &= \frac{1}{N(\underline{x},\varepsilon(x,v))}\int f(\underline{x},z',v')\delta\left(|v'|^2/2 + \psi(\underline{x},z') - |v|^2/2 - \psi(\underline{x},z)\right)dv'dz' \\ &= \frac{1}{N(\underline{x},\varepsilon(x,v))}\int f(\underline{x},z',v')\delta_{\varepsilon(x,v)}\left((\underline{x},z'),v'\right)dv'dz',\end{aligned}$$

où $\varepsilon(x,v)$ représente l'énergie totale : $\varepsilon(x,v) = |v|^2/2 + \psi(\underline{x},z)$ et où $N(\underline{x},\varepsilon) = \int \delta\left(|v'|^2/2 + \psi(\underline{x},z') - \varepsilon\right)dv'dz'$. On notera également :

$$\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(f)(\underline{x},\varepsilon_0) = \frac{1}{N(\underline{x},\varepsilon_0)}\int f(\underline{x},z',v')\delta_{\varepsilon_0}\left((\underline{x},z'),v'\right)dv'dz'.$$

Remarquons que l'on a, pour toute fonction $\varphi(\underline{x},z,v)$,

$$\int \varphi(\underline{x},z,v)dvdz = \int_{\varepsilon>0} N(\underline{x},\varepsilon)\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(\varphi)(\underline{x},\varepsilon)d\varepsilon. \tag{3.24}$$

De façon analogue au cas des collisions en volume, on posera donc

$$F(t,\underline{x},\varepsilon) = \hat{\mathcal{P}}_{SHE}(f^0), \quad \underline{J}(\underline{x},\varepsilon) = N(\underline{x},\varepsilon)\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(\underline{v}f^1),$$

où on a utilisé le développement de Hilbert $f^\eta = f^0 + \eta f^1 + \eta^2 f^2$.

Ici aussi, on substitue ce développement à $f^\eta$ dans l'équation (3.16), (3.21). L'identification des termes de même ordre ne pose pas de problème particulier par rapport au cas considéré par P. Degond [23], à ceci près que la résolution du problème auxiliaire (3.20) est plus délicate dans notre cas.

Le terme d'ordre 0 vérifie

$$\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)f^0 = 0, \tag{3.25}$$

$$\gamma^- f^0 = \mathcal{K}^\alpha_{el}\gamma^+ f^0. \tag{3.26}$$

L'étude de cette équation est identique dans notre cas et dans celui étudié par P. Degond [23]. On montre que $f^0(t,x,v) = F\left(t,\underline{x},|v|^2/2+\psi(\underline{x},z)\right)$. Comme nous l'avons annoncé plus haut, ce résultat est lié aux états d'équilibre de l'opérateur de collision, comme dans le cas de collisions en volume, mais en tenant compte de l'équation (3.25), qui équivaut à énoncer la conservation du nombre de particules sur les courbes d'énergie constante $(z,v_z) \to |v_z|^2/2+\psi(z) = C$. Grâce aux inégalités (3.22), (3.23), l'équation (3.26) permet de montrer que ce nombre de particules ne dépend pas de l'orientation de la vitesse au bord mais seulement de l'énergie cinétique au bord et donc, en remontant le long des courbes d'énergie constante, que ce nombre ne dépend que de l'énergie totale (et pas de la direction de la vitesse en tout point).

Remarquant que $\left(\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi\cdot\nabla_{\underline{v}}\right)F = \underline{v}\cdot\left(\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon\right)F$, on a, à l'ordre 1,

$$\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)f^1 = -\underline{v}\cdot\left(\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon\right)F, \tag{3.27}$$

$$\gamma^- f^1 = \mathcal{K}_{el}^{\alpha}\gamma^+ f^1. \tag{3.28}$$

De même que, dans le cas des collisions en volume, on devait inverser l'opérateur de collision ($f^1 = \left(Q^\alpha\right)^{-1}(v\cdot F)$, Cf. section 2), ici, on doit inverser l'opérateur $v_z\partial/\partial z - (\partial\Psi/\partial z)\partial/\partial v_z$ associé à la condition au bord.

En notant $\underline{\chi}^{\varepsilon_0}$ la solution du problème auxiliaire suivant ($\underline{x}$ et $\varepsilon_0$ étant donnés) :

$$\left(-v_z\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\left(\mathcal{M}\underline{\chi}^{\varepsilon_0}\right) = \underline{v}\,\mathcal{M}\,\delta_{\varepsilon_0}(x,v), \qquad \gamma^+\left(\mathcal{M}\underline{\chi}^{\varepsilon_0}\right) = \mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\left(\gamma^-\left(\mathcal{M}\underline{\chi}^{\varepsilon_0}\right)\right), \tag{3.29}$$

on a

$$\underline{J}(\underline{x},\varepsilon_0) = N(\underline{x},\varepsilon_0)\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(\underline{v}f^1) = \int -\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)(\mathcal{M}\underline{\chi}^{\varepsilon_0})f^1\mathcal{M}^{-1}dvdz$$

et, en remarquant que $(v_z\partial/\partial z - (\partial\Psi/\partial z)\partial/\partial v_z)\mathcal{M}^{-1} = 0$, la formule de Green implique

$$\underline{J}(\underline{x},\varepsilon_0) = -\left(\int v_z f^1\underline{\chi}^{\varepsilon_0}dv\right)\Bigg|_{z=0} + \int\underline{\chi}^{\varepsilon_0}\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\left(f^1\right)dvdz.$$

La condition au bord (3.28) assure que le premier terme du membre de droite de cette équation est nul. Enfin, l'équation (3.27) donne :

$$\underline{J}(\underline{x},\varepsilon) = -\int\underline{\chi}^{\varepsilon}\otimes\underline{v}\,\tilde{\nabla}F dvdz$$

et donc, d'après (3.24), on obtient l'équation de courant :

$$\underline{J}(\underline{x},\varepsilon) = -\int\mathbb{D}_{SHE}(\varepsilon,\varepsilon')\tilde{\nabla}F(\underline{x},\varepsilon')d\varepsilon'$$

avec

$$\mathbb{D}_{SHE}(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon') = \underline{N}(\underline{x},\varepsilon')\hat{\mathcal{P}}_{SHE}\left(\underline{\chi}^{\varepsilon}\otimes\sqrt{2\varepsilon'}\underline{\omega}\right)$$

et $\tilde{\nabla} = \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon$. La dérivation de l'équation de continuité ne pose pas de problème particulier (Cf. section 4.2).

Il reste à résoudre le problème (3.29).

**Etude du Problème Auxiliaire (section 4.3)** On résout la généralisation suivante de (3.29), d'inconnue $\chi$.

$$\left(-v_z\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\chi=g(x,v)\delta_{\varepsilon_0}(x,v),\qquad \gamma^+(\chi)=\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}(\gamma^-\chi). \tag{3.30}$$

(Remarquons que ce problème est unidimensionnel. On résout alors (3.29) composante par composante.) Via un changement de variable (on pose $u_z(z,v_z)=\text{signe}(v_z)\sqrt{v_z^2+2\psi(z)}$ et $v_z(z,u_z)=\text{signe}(u_z)\sqrt{u_z^2-2\psi(z)}$), l'équation (3.30) s'écrit (en notant $\overline{f}(z,u_z)=f(z,v_z(z,u_z))$) :

$$v_z(z,u_z)\frac{d}{dz}\left(\chi(z,v_z(z,u_z))\right)=v_z(z,u_z)\frac{\partial}{\partial z}\overline{\chi}(z,u_z)=0,\quad \gamma^+(\overline{\chi})=\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}(\gamma^-\overline{\chi})$$

et, en intégrant cette équation entre 0 et le point de retour $Z$ (tel que $\psi(Z)=|u|^2/2$, avec $u=(\underline{v},u_z)$), on est conduit à

$$(I-\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\mathcal{J})\gamma^+(\overline{\chi})=\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\left(G\left(\underline{v},u_z\right)\delta\left(\frac{|u|^2}{2}-\varepsilon_0\right)\right), \tag{3.31}$$

avec $G(\underline{v},u_z)=\int_Z^0\left[\overline{g}(-u_z)+\overline{g}(u_z)\right]|v_z(z,u_z)|^{-1}dz$. On a utilisé de manière cruciale le fait que $\overline{g}(Z,u_z)=g(Z,0)=\overline{g}(Z,-u_z)$ car le point de retour $Z$ est caractérisé par le fait que $\Psi(Z)$ est égal à $|\underline{v}|^2/2+u_z^2/2=|\underline{v}|^2/2+(-u_z)^2/2$.
En notant $u=\sqrt{2\varepsilon}\omega$, le membre de droite de (3.31) s'écrit encore

$$\mathcal{K}_{el}^{0,*}(G)\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)+2\varepsilon_0\frac{\alpha}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa(\varepsilon,\omega\to\varepsilon_0,\omega')M[G(\varepsilon_0,\omega')-G(\varepsilon_0,-\omega)]|\omega'_z|d\omega'. \tag{3.32}$$

En s'inspirant de la dérivation de modèles de type SHE couplé, on cherche $\chi$ sous la forme $\theta_s\delta_{\varepsilon_0}+\theta_r$ (Cf. section 2.4, notamment (2.28)). Alors, on a

$$(I-\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+(\overline{\theta_s}\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)+\overline{\theta_r}))=(I-\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+\overline{\theta_r})+(I-\mathcal{K}_{el}^{0,*}\mathcal{J})(\gamma^+\overline{\theta_s})\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)$$

$$+2\varepsilon_0\frac{\alpha}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa(\varepsilon,\omega\to\varepsilon_0,\omega')M\left(\gamma^+\overline{\theta_s}(\varepsilon_0,\omega'_*)-\gamma^+\overline{\theta_s}(\varepsilon_0,-\omega_*)\right)|\omega'_z|d\omega'. \tag{3.33}$$

Par identification des termes singuliers dans (3.32) et (3.33), on est amené à résoudre des équations par inversion des opérateurs $I-\mathcal{K}_{el}^{0,*}\mathcal{J}$ et $I-\mathcal{K}_{el}^{\alpha,*}$. Il est aisé de constater que les conditions de solvabilité de ces équations sont réalisées à la condition que

$$\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(g)=0.$$

On obtient ainsi l'existence de $\theta_r$ et $\theta_s$ au bord. Une intégration en la variable $z$ permet de récupérer l'existence de $\chi$ sur tout le domaine $\Omega$. On montre de plus que $\chi$ est l'unique solution de la forme $\theta_s\delta_{\varepsilon_0}+\theta_r$ sous la condition $\hat{\mathcal{P}}_{SHE}(\chi)=0$.

On obtient donc une solution de (3.29) sous la forme $\underline{\chi}^\varepsilon = \underline{\theta}_s^\varepsilon \delta_\varepsilon + \underline{\theta}_r^\varepsilon$. On peut alors montrer aisément que $\mathbb{D}_{SHE}(\underline{x}, \varepsilon, \varepsilon') = -D(\varepsilon)\delta(\varepsilon - \varepsilon') - \Delta(\varepsilon, \varepsilon')$, ce qui achève la preuve du théorème formel 3.1.

Comme dans le cas des collisions en volume, on peut interpréter l'équation de courant par dualité en introduisant la forme bilinéaire suivante :

$$\mathcal{D}(\Phi_1, \Phi_2) = \int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}} \int_{\varepsilon'>0} \int_{\varepsilon>0} \Phi_1(\varepsilon)^T \mathbb{D}_{SHE}(\underline{x}; \varepsilon, \varepsilon') \Phi_2(\varepsilon') M^{-1} d\varepsilon d\varepsilon' d\underline{x},$$

définie sur l'espace

$$\mathbb{E} = \left\{ \mathcal{F} \in \left(L^2_{\mathcal{M}}\right)^2 : \| \mathcal{F} \|^2_{\mathbb{E}} = \int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}} \int_{-\infty}^0 \int_{\mathbb{R}^3_v} \left| \underline{v} \cdot \mathcal{F}\left(\underline{x}, \frac{|v|^2}{2} + \psi(\underline{x}, z)\right) \right|^2 \mathcal{M}^{-1} dv dz d\underline{x} < +\infty \right\}.$$

La preuve (Cf. section 6.3, Lemme 6.8) de la positivité de cette forme bilinéaire est plus délicate que dans le cas de collisions en volume et fait intervenir la résolution d'un problème auxiliaire qui intervient dans la dérivation rigoureuse du modèle SHE couplé. Nous reportons cette étude à la section suivante.

### 3.0.9 Dérivation formelle (section 4)

On suppose que les termes inélastiques $\mathcal{B}^0_{in}$ et $\mathcal{B}^1_{in}$ sont nuls. De plus, on considère que le potentiel de rappel ne dépend que de la distance $z$ à la paroi : $\nabla_{\underline{x}} \Psi = 0$. On suppose enfin que $\Psi_0 = 0$ (le potentiel étant choisi à constante près, ce dernier point n'est pas vraiment une restriction). On a donc $\Psi(\underline{x}, z) = \psi(z)$.

L'existence et l'unicité de solutions pour le problème cinétique découlent des résultats établis dans [9]. Nous rappelons l'essentiel de la démonstration et détaillons les différences dues à l'introduction de l'opérateur $\mathcal{B}^\alpha_{el}$ en section 5. On obtient notamment une estimation (6.1) qui permet d'établir la convergence faible de $f^\eta$ vers une fonction $f^0$. Des estimations sur la trace (6.2), (6.3), permettent de montrer que les traces $\gamma^\pm f^\eta$ convergent fortement vers des fonctions de $|v|$. On peut alors établir que la trace de $f^0$ est une fonction $q$ qui ne dépend que de la partie radiale de la vitesse.

En utilisant la formulation faible de l'équation (3.16), (3.17) et en passant à la limite $\eta \to 0$ on montre que $f^0$ est une solution au sens des distributions du problème aux limites $(v_z \partial/\partial z - (\partial\Psi/\partial z)\partial/\partial v_z) f^0 = 0$, $\gamma f = q$ dont la résolution est semblable en tout point à celle du problème (3.25), (3.26).

L'établissement d'une forme faible de l'équation de continuité ne pose pas de problème une fois que l'on a réussi à établir la convergence de $\underline{J}^\eta = \frac{1}{\eta} N(\underline{x}, \varepsilon) \hat{\mathcal{P}}_{SHE}(\underline{v} f^\eta)$ vers le courant $\underline{J}$. Pour cela il est nécessaire de résoudre le problème auxiliaire suivant : Etant donnée une fonction test $\Phi$ dans $\mathbb{E}$, on cherche une fonction $\phi$ telle que

$$-\left(v_z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{d\psi}{dz} \frac{\partial}{\partial v_z}\right) \phi = \underline{v} \cdot \Phi, \quad \gamma^+ \phi = \mathcal{K}^{\alpha,*}_{el} \gamma^- \phi.$$

**Etude du Problème Auxiliaire (section 6.2)** La résolution de ce problème est semblable à celle du problème auxiliaire étudié dans la dérivation formelle. Après changement de variable ($u_z(z,v_z) = \text{signe}(v_z)\sqrt{v_z^2+2\psi(z)}$) et intégrant entre 0 et le point de retour $Z=\psi^{-1}(u_z^2/2)$, on obtient (en notant $\overline{g}(z,u_z(z,v_z)=g(z,v_z))$ :

$$\gamma^-\overline{\phi}-\mathcal{J}\gamma^+\overline{\phi}=(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*})\gamma^-\overline{\phi}=2\int_{\psi^{-1}(u_z^2/2)}^{0}|v_z(z,u_z)|^{-1}dz\ \underline{u}\cdot\Phi. \tag{3.34}$$

L'existence de $\gamma^-\overline{\phi}$ est garantie par les conditions de solvabilité suivantes :

$$T(u_z^2/2)\ \underline{u}\cdot\Phi\in\mathcal{L}^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-),\qquad \int_{\mathbb{S}^2_-}T(\varepsilon|\omega_z|^2)\underline{u}\cdot\Phi|\omega_z|d\omega=0,$$

où $T(\varepsilon)=2\int_{\psi^{-1}(\varepsilon)}^{0}\left|v_z\left(\zeta,\sqrt{2\varepsilon}\right)\right|^{-1}d\zeta$ est la période de rebond d'une particule d'énergie $\varepsilon$ et $v_z(\zeta,u_z)=\text{signe}(u_z)\sqrt{u_z^2-2\psi(\zeta)}$.
La deuxième condition est vraie par imparité et la première est vraie si le potentiel $\psi$ est tel que

**Hypothèse 3.4** *La période de rebond $T$ est toujours finie ($T(\varepsilon)<\infty\,\forall\varepsilon$) et est bornée pour les petites énergies comme pour les grandes : $T(\varepsilon)\to C$ lorsque $\varepsilon\to 0$ ou $\varepsilon\to\infty$.*

L'existence de $\gamma^-\overline{\phi}$ est donc établie et celle de $\gamma^+\overline{\phi}$ découle de (3.34). La continuité des opérateurs $(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*})^{-1}$ et $\mathcal{K}^{\alpha,*}$ donne les estimations suivantes :

$$\parallel\gamma^\pm\phi\parallel_{\mathcal{L}^2_\pm}\leq C\parallel\Phi\parallel_{\mathbb{E}} \tag{3.35}$$

où $\mathcal{L}^2_\pm=L^2\left(\mathbb{R}^2_{\underline{x}}L^2_{\mathbb{M}}\left(\mathbb{R}^3_\pm\right)\right)$. En intégrant l'équation (3.34) entre $z<0$ et 0 on obtient

$$\overline{\phi}(z,\pm u_z)=\gamma^\pm\overline{\phi}(0,\pm u_z)\pm\int_z^0|v_z(\zeta,\pm u_z)|^{-1}d\zeta\ \underline{u}\cdot\Phi(\underline{x},|u|^2/2).$$

En intégrant cette équation en énergie et en position on obtient

$$\parallel\phi\parallel_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}\leq C\parallel\Phi\parallel_{\mathbb{E}} \tag{3.36}$$

grâce aux estimations que l'on vient d'établir pour les traces et à l'hypothèse 3.4.
On a donc montré l'existence d'une solution et des estimations sur celle-ci. On peut alors définir un opérateur $\mathcal{S}_z:\mathbb{E}\to\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$ borné tel que, pour toute fonction $\Phi\in\mathbb{E}$, $\mathcal{S}_z(\Phi)$ soit égal à la solution $\phi$ obtenue ci-dessus. L'inégalité (3.36) garantit que $\mathcal{S}_z$ est bien borné.
On remarquera enfin que $\mathcal{S}_z$ vérifie $\mathcal{T}_z\left(\mathcal{S}_z(\Phi)\right)=\underline{v}\cdot\Phi$, où $\mathcal{T}_z=-\left(v_z\frac{\partial}{\partial z}-\frac{d\psi}{dz}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)$.

**Fin de l'étude du tenseur de diffusion (section 6.3)** Pour montrer la positivité de $\mathbb{D}_{SHE}$ il suffit de remarquer que la forme bilinéaire $\mathcal{D}$ peut s'écrire en fonction de $\mathcal{S}_z$ de la façon suivante :

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2)=\int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}}\int_{-\infty}^{0}\int_{\mathbb{R}^3_{v'}}\mathcal{S}_{z'}(\Phi_1)\ \underline{v}'\cdot\Phi_2\ \mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x},$$

ou encore, en rappelant que $\mathcal{T}_z\left(\mathcal{S}_z(\Phi)\right) = \underline{v}\cdot\Phi$,

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2) = \int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}}\int_{-\infty}^{0}\int_{\mathbb{R}^3_{v'}} \mathcal{S}_{z'}(\Phi_1)\ \mathcal{T}_{z'}\left(\mathcal{S}_{z'}(\Phi_2)\right)\ \mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x}.$$

Alors, sachant que, pour $\Phi\in\mathbb{E}$, $\mathcal{S}_{z'}(\Phi)$ et $\mathcal{T}'_z(\mathcal{S}'_z(\Phi))$ sont dans $\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$, la formule de Green implique (en utilisant (3.35) et la continuité de $\mathcal{K}^\alpha$) :

$$2\mathcal{D}(\Phi,\Phi) = \| \gamma^-\phi \|^2_{\mathcal{L}^2_-} - \| \gamma^+\phi \|^2_{\mathcal{L}^2_+} \geq C \| \Phi \|^2_{\mathbb{E}},$$

ce qui montre la positivité de $\mathcal{D}$ sur $\mathbb{E}$.

En fait, on ne peut appliquer la formule de Green que si les fonctions $\mathcal{S}_{z'}(\Phi)$ et $\mathcal{T}'_z(\mathcal{S}'_z(\Phi))$ sont à support compact relativement à $v$. On utilise une méthode de troncature que nous ne détaillons pas ici mais dont on trouvera les détails dans la preuve du Lemme 6.8.

La dérivation de l'équation de courant est alors aisée. Il suffit de choisir une fonction $\Phi$ suffisamment régulière pour que $\mathcal{S}_z(\Phi)$ soit une fonction test admissible dans la formulation faible de (3.16). Dès lors, on a

$$\frac{1}{\eta}\int f^\eta \mathcal{T}_z\mathcal{S}_z(\Phi)\mathcal{M}^{-1}dtdxdv = \int f^\eta \underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}\mathcal{S}_z(\Phi)\mathcal{M}^{-1}dtdxdv + \mathcal{O}(\eta).$$

Quand $\eta\to 0$, le membre de droite tend vers la formulation faible de $\mathbb{D}_{SHE}\nabla_x F$, alors que le membre de droite est la limite de $\int \underline{J}^\eta(\underline{x},\varepsilon)\cdot\Phi M^{-1}d\underline{x}d\varepsilon$, ce qui établit une formulation faible de l'équation de courant (Cf. section 6.4). Il n'est toutefois pas clair que l'espace de fonctions tests $\Phi$ considéré soit dense dans $C^1((0,T)\times\mathbb{R}^2\times\mathbb{R}^*_+;\mathbb{R}^2)$, ce qui garantirait la convergence au sens des distributions. Nous faisons l'hypothèse que cette propriété est vérifiée. Nous montrons qu'elle l'est au moins dans le cas particulier d'une section efficace de collision isotrope (Cf. Lemme 6.10).

En section 6.5 on dérive finalement l'équation de continuité sans problème particulier.

# 4 Simulations numériques

Les modèles de type SHE ont fait l'objet de simulations numériques (cf. les travaux de P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues et J.P. Boeuf [24], [25]) dans un cas stationnaire. Il ressort de cette étude que la précision du modèle SHE s'avère très proche de celle des modèles cinétiques, même lorsque la diffusion est engendrée par des collisions inélastiques, ce qui est assez surprenant dans la mesure où, comme nous l'avons vu (cf. section 2.3), les modèles de type SHE ne sont théoriquement valides qu'en présence de collisions élastiques.

Dans cette section, nous présentons une étude comparée de modèles de type cinétique, SHE et SHE couplé. Les modèles étudiés sont instationnaires et on s'est attaché en particulier à analyser l'influence de l'inélasticité des collisions sur la précision comparée des modèles (le modèle cinétique étant pris comme référence). Le cas test considéré est simple : unidimensionnel et en l'absence de champ électrique. On considère un nuage d'électrons injectés à la même vitesse

$v_{inj}$ à l'extrémité d'un tube vide filiforme de longueur $L$, et réfléchis de façon spéculaire par une paroi placée à l'autre extrémité du tube. On suppose que les particules sont soumises à des collisions élastiques en proportion $1-\beta$ et inélastique en proportion $\beta$, $\beta \in (0,1)$. Le paramètre $\beta$ permet de modifier la proportion de collisions élastiques et donc d'étudier l'influence de cette proportion sur la validité des modèles SHE et SHE couplé.

Le modèle microscopique est donc une équation cinétique de type Boltzmann sur l'intervalle $(0,L)$, avec une condition de Dirichlet non homogène en $x=0$ et une condition de réflexion spéculaire en $x=L$. La fonction de distribution $f(t,x,v)$ est donc solution de

$$\begin{array}{ll} \partial_t f(t,x,v) + v\partial_x f(t,x,v) = \mathcal{C}(f), & x \in (0,L),\ v \in \mathbb{R},\ t \in (0,T_{max}), \\ f(t,0,v) = g(v) \approx \delta_{v_{inj}}(v), & v > 0,\ t \in (0,T_{max}), \\ f(t,L,v) = f(t,L,-v), & v < 0,\ t \in (0,T_{max}), \\ f(0,x,v) = 0, & x \in (0,L),\ v \in \mathbb{R}. \end{array} \tag{4.37}$$

L'opérateur $\mathcal{C}$ s'écrit comme une combinaison convexe (de paramètre $\beta$) d'opérateurs élastique et inélastique :

$$\mathcal{C}f = (1-\beta)\mathcal{C}^0_{el}f + \beta\mathcal{C}_{in}f$$

avec

$$\mathcal{C}^0_{el}f = \nu\left(\mathcal{P}f - f\right), \quad \mathcal{C}_{in}f = \nu\left(\int_{\mathbb{R}} f(v')dv'M(v) - f(v)\right),$$

où $\mathcal{P}(f) = \left(f(v) + f(-v)\right)/2$ (moyenne sur une surface d'énergie) et $\nu$ est une fréquence de collision, tandis que $M(v) = C\exp - \left(v/v_{th}\right)^2$ ($v_{th}$ est la vitesse thermique et $C$ est une constante de normalisation).

On veut comparer à ce modèle les équations de type SHE et SHE couplé qui peuvent en être déduites par limite diffusive. Pour cela, on introduit le rapport $\eta$ du libre parcours moyen $\lambda$ et de la longueur du domaine $L$ et $\tau$, le temps de relaxation ($\tau = 1/\nu$). Dans cette section, on exprime tous les modèles (micro et macroscopiques) dans les variables microscopiques. On suppose donc que $\lambda$ et $\tau$ sont fixés et on pose $L = \lambda/\eta$, $T_{max} = nT_{relax}$ et $T_{relax} = \tau/\eta^2$. On prendra $\lambda = v_{th}\tau$. Alors $T_{relax}$ correspond au temps caractéristique de diffusion et l'état stationnaire est atteint pour $T_{max} \approx 10T_{relax}$.

D'après l'étude esquissée en section 2.3, le modèle SHE doit décrire le comportement asymptotique de $f$ lorsque $\beta \approx \eta^2$ (collisions élastiques dominantes) et $\eta << 1$ (régime de diffusion). Plus précisément, on a (en variables microscopiques) :

$$f(t,x,v) = F(t,x,\varepsilon(v)) + \frac{v}{\nu}\partial_x F(t,x,\varepsilon(v)) + \mathcal{O}\left(\eta^2\right),$$

où $\varepsilon(v) = |v|^2/2$ et $F$ est solution de l'équation de type SHE suivante

$$\begin{array}{ll} \partial_t F(t,x,\varepsilon(v)) - \dfrac{|v|^2}{\nu}\partial_x^2 F(t,x,\varepsilon(v)) = & \nu\beta\left(\int_{\mathbb{R}} F(\varepsilon(t,x,\varepsilon(v'))dv'M(v) - F(t,x,\varepsilon(v))\right), \\ & t \in (0,\tau/\alpha^2), x \in (0,\lambda/\alpha), v \in \mathbb{R}, \\ F(t,0,\varepsilon(v)) - \dfrac{|v|}{\nu}\partial_x F(t,x,\varepsilon(v)) = g(v), & t \in (0,\tau/\alpha^2), v \in \mathbb{R}, \\ \partial_x F(t,\lambda/\alpha,\varepsilon(v)) = 0, & t \in (0,\tau/\alpha^2), v \in \mathbb{R}. \end{array} \tag{4.38}$$

La condition au bord en 0 se traduit à l'échelle macroscopique par une condition de type Robin (cf. section 2.2 pour les détails de la dérivation de ce modèle). Cette condition permet d'obtenir une meilleure approximation de la fonction de distribution (cf. [7] et [85]).

Pour dériver le modèle SHE couplé, on décompose l'opérateur inélastique $\mathcal{C}_{in}$ en une partie élastique *non locale* $\mathcal{C}^1_{el}$ et une partie inélastique $\mathcal{C}^1_{in}$ et on écrit l'opérateur $\mathcal{C}$ comme combinaison convexe de ce splitting et de $(1-\beta)\mathcal{C}^0_{el} + \beta\mathcal{C}_{in}$. On note $\alpha$ le paramètre de cette nouvelle combinaison. On dérive alors le modèle SHE couplé suivant (sous la condition $\alpha\beta < 1/2$) qui est un cas particulier de (2.26)) :

$$\partial_t F(t,x,\varepsilon(v)) + \partial_x J(t,x,\varepsilon(v)) = \nu\beta\left(\int_{\mathbb{R}} F(t,x,\varepsilon(w)dwM(v) - F(t,x,\varepsilon(v))\right)$$
$$J(t,x,\varepsilon(w)) = -D_{\alpha\beta}(v)\partial_x F(\varepsilon(v)) - \int_{\mathbb{R}} \Delta_{\alpha\beta}(v,w)\partial_x F(t,x,\varepsilon(w))dw,$$

avec $t \in (0,\tau/\alpha^2), x \in (0,\lambda/\alpha), v \in \mathbb{R}$. Les tenseurs de diffusion et la condition au bord de Robin sont donnés en section 2.3.

### 4.0.10 Méthodes numériques

L'équation cinétique est discrétisée moyennant une méthode de splitting en temps (cf. section 3.1 du chapitre 6). En effet, on peut décomposer l'équation cinétique (4.37) en une équation de transport libre et une équation différentielle ordinaire. A chaque pas de temps on résout séparément chacune de ces équations :

$$\partial_t f + v\,\partial_x f = 0, \tag{4.39}$$
$$\partial_t f = \mathcal{C}f. \tag{4.40}$$

On résout l'équation de transport libre (4.39) par une méthode semi-Lagrangienne (cf. [75] et [37]) : on calcule à chaque pas de temps la solution de cette équation sur un point du maillage grâce à une méthode de caractéristique. En remontant le long des caractéristiques de cette équation on peut déterminer la valeur de la solution à l'instant $t+dt$ en fonction de la valeur de la solution à l'instant $t$. La difficulté principale tient au fait que la caractéristique issue d'un point du maillage à $t+dt$ peut ne pas passer par un point du maillage à $t$. La valeur de la solution à $t$ hors du maillage n'étant pas connue, on la reconstitue par une méthode d'interpolation de Lagrange d'ordre 3 [37]. Pour sa part, l'équation différentielle ordinaire (4.40) est résolue par une méthode de point milieu.

On utilise en fait une méthode de splitting de Strang en trois étapes : on résout successivement (4.39) sur un demi pas de temps, puis (4.40) sur un pas de temps, puis de nouveau (4.39) sur un demi pas de temps. Le schéma ainsi construit est alors d'ordre 2 en espace et en temps.

En l'absence de champ électrique, le modèle SHE (4.38) se réduit à une équation de diffusion par rapport à la variable d'espace avec un terme source qui couple les niveaux d'énergie (cf. section 3.2 du chapitre 6). Dans le membre de gauche de l'équation (4.38) la variable d'énergie n'est qu'un paramètre. On discrétise alors cette équation à l'aide d'un schéma de type Cranck-Nicholson. Le terme de gain de l'opérateur de collision est discrétisé de manière explicite. Le

schéma utilisé est donc semi-explicite. Le schéma est d'ordre 1 en temps et d'ordre 2 en espace. Il est inconditionnellement stable.

Dans le cas du modèle SHE couplé, on utilise un schéma similaire. Les termes de couplage qui apparaissent dans l'équation de courant sont traités de façon explicite.

### 4.0.11 Simulations

On considère un domaine borné $[-V_{max}, V_{max}]$ en vitesse. Nous avons effectué une étude de convergence en maillage et en pas de temps. Les simulations ont été réalisées avec $2 \times 50$ pas en vitesse et 100 pas en espace, ce qui donne une bonne précision d'après l'étude de convergence en maillage. Le pas de temps doit être pris très petit dans le modèle cinétique à cause de la condition au bord entrante à gauche. La méthode lagrangienne est à l'origine de ce problème : la courbe caractéristique ne doit pas franchir plus d'une maille en un pas de temps à une vitesse inférieure ou égale à la vitesse d'injection $v_{inj}$. Toutefois, le pas de temps choisi est du même ordre que dans le cas d'un schéma aux différences finies puisque $v_{inj} \leq V_{max}$ (il n'y aurait pas de CFL en l'absence de condition de Dirichlet à gauche).

Dans les simulations, nous avons pris $\eta = 0.1$. On s'attend alors à ce que les modèles SHE et SHE couplé donnent de bons résultats pour $\beta = \eta^2 = 0.01$. Au temps de diffusion $t = T_{relax}$, la densité et l'énergie sont aussi bien approchées par le modèle SHE que par le modèle SHE couplé (cf. Fig. 2.2).

Il s'avère que ces modèles se comportent également très bien dans des régimes très inélastiques. Par exemple, pour $\beta = 1$ et au temps de diffusion, on observe une bonne correspondance entre les simulations de la densité et de l'énergie par les trois modèles (cf. Fig. 2.3).

La Fig. 2.4 donne une idée de la précision de ces modèles en fonction du degré d'inélasticité. La précision est évaluée par comparaison avec les résultats obtenus avec le modèle cinétique à $T = T_{relax}$ et est donnée en norme $L^1$. On constate un minimum pour l'erreur pour des valeurs de $\alpha$ et $\beta$ telles que $\alpha\beta \approx 0.045$. Par conséquent le modèle SHE couplé donne de meilleurs résultats que le modèle SHE standard (qui correspond à $\alpha\beta = 0$).

Les modèles SHE et SHE couplé donnent également de bons résultats en temps long.

Nous avons également étudié la validité de ces modèles dans le régime transitoire ($T < T_{relax}$). La Fig. 2.5 montre l'évolution au cours du temps de l'erreur relative entre le modèles SHE et l'équation cinétique, prise ici aussi pour référence. Pour la densité, on constate que l'erreur reste inférieure à 2.5% pour des temps très brefs pour le modèle SHE standard. Pour l'énergie, l'erreur est encore moins importante. Dans les deux cas, le modèle SHE reste très fiable. Le modèle SHE couplé est plus précis que le modèle SHE standard pour des temps proches du temps de relaxation. En revanche, pour des temps proches de 0 ou supérieurs à $1.5T_{relax}$, le modèle SHE standard est meilleur que le modèle SHE couplé. Notons toutefois que les deux modèles restent fiables à moins de 2% près pour $T > T_{relax}$.

Notons enfin que le calcul du premier correcteur dans le modèle SHE permet de visualiser une approximation de la fonction de distribution qui ne soit pas paire. Ainsi, en Fig. 2.6, on donne la représentation du profil de la distribution au milieu du domaine en espace pour des collisions fortement inélastiques. Bien que ce profil soit très dissymétrique les deux modèles

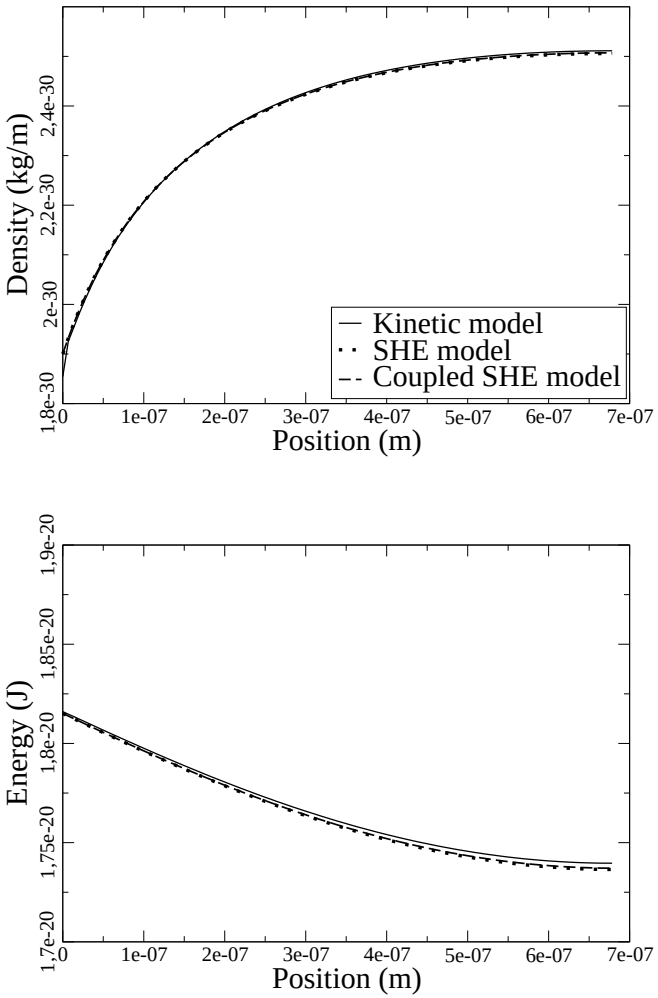


FIG. 2.2 – Densité (en haut) et énergie (en bas) à $T = T_{relax}$, pour $\eta = 0.1$, $\beta = 0.01$, $\alpha = 0.5$.

SHE donnent accès à une approximation très satisfaisante.

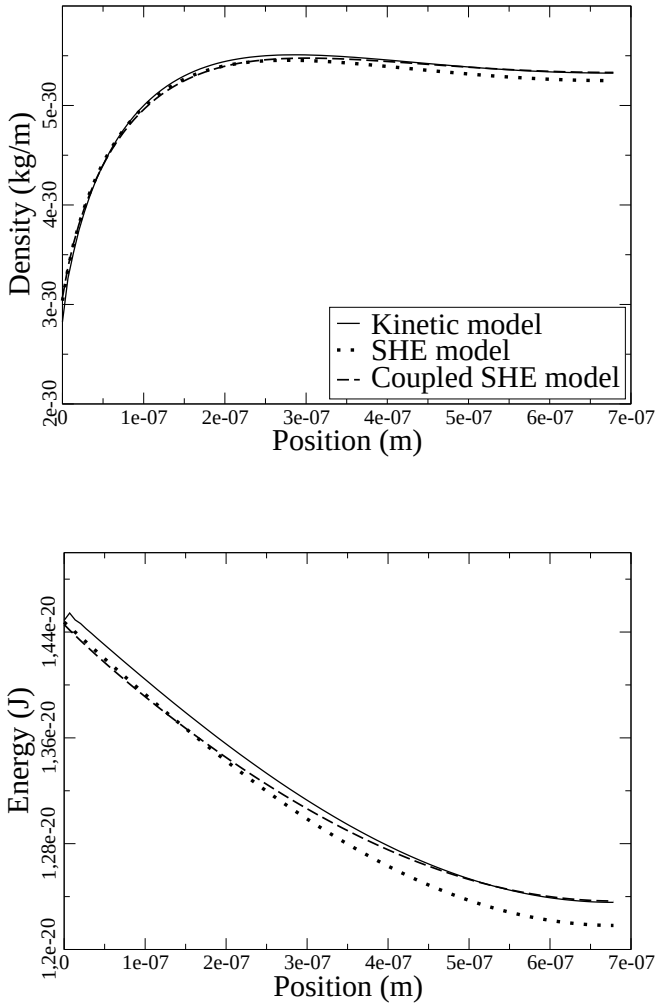


FIG. 2.3 – Densité (en haut) et énergie (en bas) à $T = T_{relax}$, pour $\eta = 0.1$, $\beta = 1$, $\alpha = 0.05$.

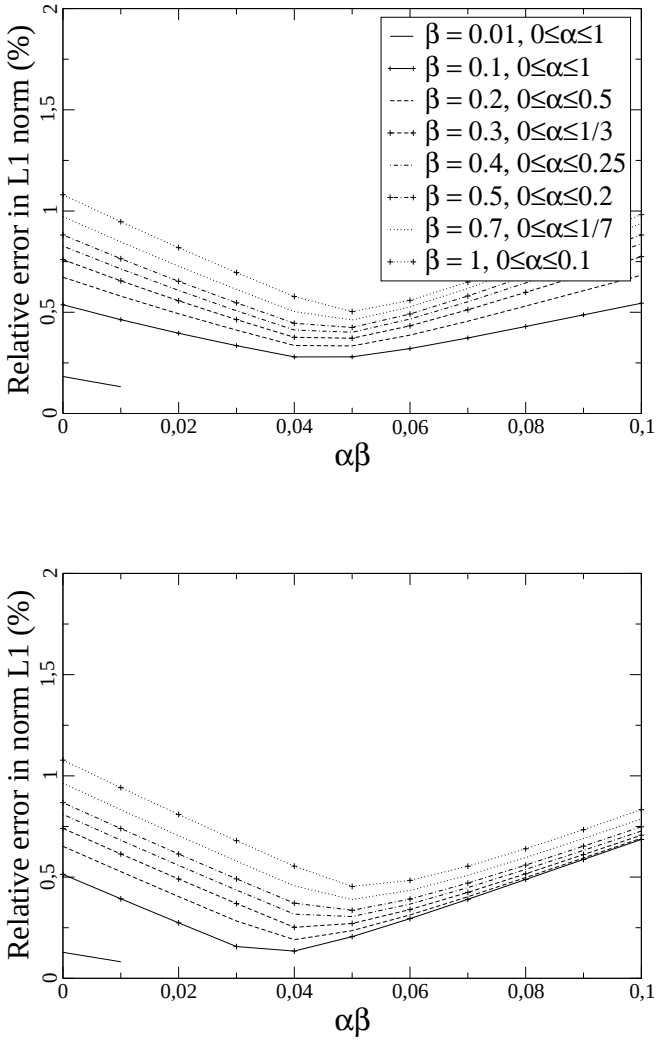


FIG. 2.4 – Erreur relative en norme $L^1$ pour la densité (en haut) et l'énergie (en bas) à $T = T_{relax}$, pour $\eta = 0.1$ : comparaison entre le modèle cinétique et les modèles SHE ($\alpha\beta = 0$) et SHE couplé ($\alpha\beta \neq 0$).

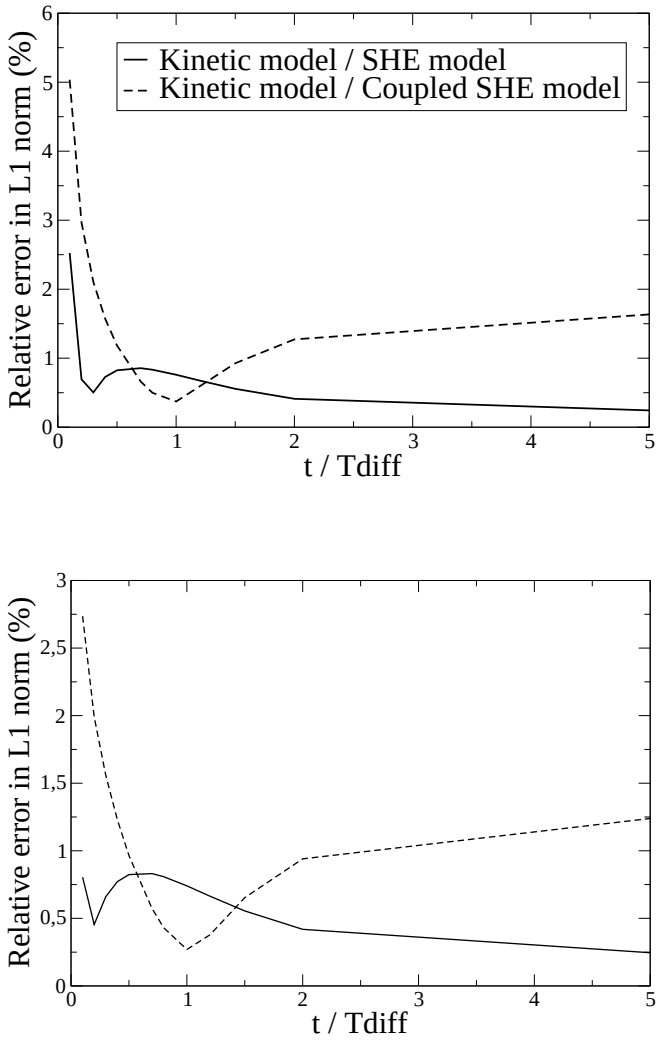


FIG. 2.5 – Evolution en temps de l'erreur relative en norme $L^1$ pour la densité (en haut) et l'énergie (en bas), pour à $T = T_{relax}$, pour $\eta = 0.1$, $\beta = 0.3$ et $\alpha = 0.166$ : comparaison entre le modèle cinétique et les modèles SHE et SHE couplé.

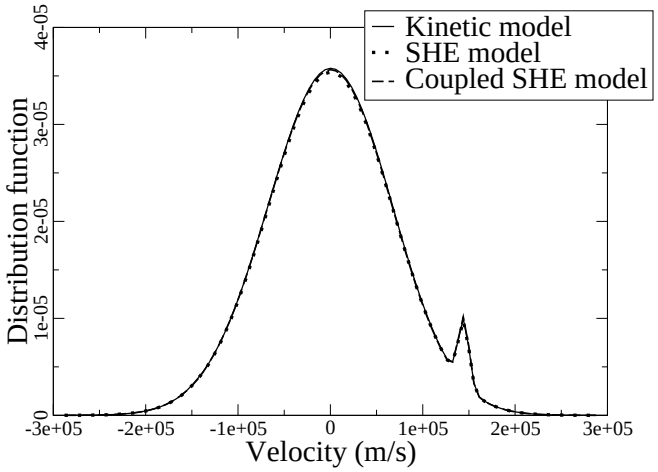


FIG. 2.6 – Fonction de distribution à $T = T_{relax}$, en $x = L/2$, pour $\eta = 0.1$, $\beta = 1$ et $\alpha = 0.05$ : comparaison entre le modèle cinétique et les modèles SHE et SHE couplé.

# Bibliographie


[1] P. N. Argyres, *Quantum kinetic equations for electrons in high electric and phonon fields*, Physics Lett. A **171** (1992), p. 373.

[2] A. Arnold, J. Lopez, P. Markowich et J. Soler, *An analysis of quantum Fokker-Planck models : A Wigner function approach*, to appear in Revista Mat. Iber.

[3] N. D. Ashcroft et N. D. Mernim, Solid-state physics, Saunders College Publishing, Orlando, 1976.

[4] H. Babovsky, *On the Knudsen flows within thin tubes*, J. Statist. Phys. **44** (1986), pp. 856-878.

[5] H. Babovsky, C. Bardos et T. Platkowski, *Diffusion approximation for a Knudsen gas in a thin domain with accomodation on the boundary*, Asymptotic Analysis **3** (1991), pp. 265-289.

[6] J. Barker et D. Ferry, *Self-scattering path-variable formulation of high-field, time-dependent, quantum kinetic equations for semiconductor transport in the finite collision-duration regime*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979), pp. 1779-1781.

[7] C. Bardos, R. Santos et R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. A. M. S., **284** (1984), pp. 617-649.

[8] N. Ben Abdallah et P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Math. Phys. **37** (1996), no. 7, pp. 3306-3333.

[9] N. Ben Abdallah, P. Degond, A. Mellet, F. Poupaud, *Electron transport in semiconductor supperlattices*, Quart. Appl. Math. **61** (2003), no. 1, pp. 161-192.

[10] C. Börgers, C. Greengard et E. Thomann, *The diffusion limit of free molecular flow in thin plane channels*, SIAM J. Appl. Math. **52**, no. 4 (1992), pp. 1057-1075.

[11] E. Bringuier, *Fokker-Planck transport simulation tool for semiconductor devices*, Phil. Mag. B **68** (2002), pp. 1113-1128.

[12] E. Bringuier, *Statistical mechanics of high-field transport in semiconductors*, Phys. Rev. B **52** (1995), pp. 8092-8105.

[13] F. A. Buot et K. L. Jensen, *Lattice Weyl-Wigner formulation of exact manybody quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices*, Phys. Rev. B **42** (1990), p. 9429.

[14] C. Cercignani, The Boltzmann equation and its applications, Springer, Berlin, 1988.

[15] C. Cercignani, R. Illner et M. Pulvirenti, The mathematical theory of dilute gases, Springer, New-York, 1994.

[16] S. Chapman, *The kinetic theory of simple and composite gases : viscosity, thermal conduction and diffusion*, Proc. Roy. Soc. (London) **A93** (1916/17), pp. 1-20.

[17] S. Chapman et T. G. Cowling, The mathematical theory of non-uniform gases, Cambridge University Press, New-York, 1958.

[18] E. M. Conwell, *High-field transport in semiconductor*, Solid State Physics Vol. g, Academic Press, New-York, 1967.

[19] J. S. Darrozès et J. P. Guiraud, *Généralisation formelle du théorème H en présence de parois*, C. R. Acad. Sci. Serie I **262** (1966), pp. 1368-1371.

[20] P. Degond, *A model of near-wall conductivity and its application to plasma thrusters*, SIAM J. Appl. Math. **58** (1998), no. 4, pp. 1138-1162.

[21] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled Spherical Harmonics Expansion model*, Math. Models Methods Appl. Sci. **11** (2001), no. 5, 903–932.

[22] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, **15**, AMS and International Press, 2000, pp. 77-110.

[23] P. Degond, *Transport of trapped particles in a surface potential*, Studies in Mathematics and its Applications, **31**, D. Cioranescu and J. L. Lions (eds), Elsevier, 2002, chapter 13, pp. 273-296.

[24] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues et J.P. Boeuf, Electron transport in stationary plasma thrusters, *Transp. Th. Stat. Phys.* **27** (1998), pp. 203-221.

[25] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues et J.P. Boeuf, *Numerical simulation of electron transport in stationary plasma thrusters*, submitted for publication.

[26] P. Degond, V. Latocha, S. Mancini et A. Mellet, *Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates*, Methods and Applications of Analysis **9** (2002), pp. 127-150.

[27] P. Degond et S. Mancini, *Diffusion driven by collisions with the boundary*, Asymptotic Analysis **27** (2001), pp. 47-73.

[28] P. Degond et P. A. Markowich, *A quantum-transport model for semiconductors : the Wigner-Poisson problem on a bounded Brillouin zone*, $M^2AN$ **24** (1990), pp. 697-710.

[29] P. Degond, F. Méhats et C. Ringhofer, *On Quantum Energy Transport and Quantum Drift-Diffusion models*, soumis pour publication.

[30] P. Degond et C. Ringhofer, *Quantum moment hydrodynamics and the entropy principle*, J. Stat. Phys **112** (2003), pp. 587-628.

[31] P. Degond et C. Ringhofer, *A note on binary quantum collision operators conserving mass momentum and energy*, C. R. Acad. Sci. Paris **336** (2003), no. 9, pp. 785-790.

[32] R. J. DiPerna et P. L. Lions, *Solutions globales d'équations du type Vlasov-Poisson*, C. R. Acad. Sci. Paris **307** (1988), pp. 655-658.

[33] R. J. DiPerna et P. L. Lions, *Global weak solutions of kinetic equations*, Sem. Mat. Torino **46** (1988), pp. 259-288.

[34] P. Dmitruk, A. Saul et L. Reyna, *High electric field approximation to charge transport in semiconductor devices*, Appl. Math. Letters **5** (1992), pp. 99-102.

[35] D. Enskog, *Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünntent Gasen, 1*, dans Allgemeiner Teil, Almqvist & Wiksell, Uppsala, 1917.

[36] B. C. Eu et K. Mao, *Quantum kinetic theory of irreversible tbermodynamics : low-density gases*, Phys. Rev. E **50** (1994), p. 4380.

[37] F. Filbet, Contribution à l'analyse et à la simulation numérique de l'équation de Vlasov, Thèse de Doctorat, Université Henri Poincaré-Nancy I.

[38] F. Fromlet, P. Markowich et C. Ringhofer, *A Wignerfunction Approach to Phonon Scattering*, VLSI Design **9** (1999), pp. 339-350.

[39] A. Gnudi, D. Ventura et G. Baccarani, *Modelling impact ionization in a BJT by means of spherical harmonics expansion of the Boltzmann Transport Equation*, IEEE Trans. CAD of integ. circuits and systems **12** (1993), pp. 1706-1713.

[40] A. Gnudi, D. Ventura, G. Baccarani et F. Odeh, *Two-dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonics expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron. **36** (1993), pp. 575-581.

[41] N. Goldsman, L. Henrickson et J. Frey, *A Physics-based analytical/numerical solution to the Boltzmann Transport Equation for use in device simulation*, Solid State Electron. **34** (1991), pp. 389-396.

[42] N. Goldsman, Y. J. Wu et J. Frey, *Efficient calculation of ionization coefficient in cilicon from the energy distribution function*, J. Appl. Phys. **68** (1990), pp. 1075-1081.

[43] F. Golse, *Anomalous diffusion limit for the Knudsen gas*, Asymptot. Anal. **17** (1998), no.1, pp. 1-12.

[44] T. Goudon et A. Mellet, *Discrete version of the SHE asymptotics : multigroup neutron transport equations*, J. Math. Phys. **43** (2002), no. 6, pp. 3232-3260.

[45] H. Grad, Principles of the kinetic theory of gases, dans Handbuch der Physik (S. Flügge ed.), vol XII, Springer, Berlin, 1958.

[46] D. Hilbert, *Begründung der kinetischen Gastheorie*, Matematische Annalen **72** (1916/17), pp. 562-577.

[47] C. Kittel, Introduction to solid-state physics, Wiley, New-York, 1976.

[48] V. I. Kolobov, *Fokker-Planck modeling of electron kinetics in plasmas and semiconductors*, Comp. Mat. Sc. **28** (2003), pp. 302-320.

[49] E. W. Larsen et J. B. Keller, *Asymptotic solution of neutron transport problems for small mean free paths*, J. Math. Phys. **15** (1974), pp. 75-81.

[50] C. D. Levermore, *Moment closure hierarchies for kinetic theories*, J. Stat. Phys., **83** (1996), pp. 1021-1065.

[51] I. B. Levinson, *Translational invariance in uniform fields and the equation for the density matrix in the Wigner representation*, Soviet Physics JETP **30** (1976), p. 362.

[52] H. Lin, N. Goldsman et L. D. Mayergoyz, *Device modelling by deterministic self-consistent solution of Poisson and Boltzmann Transport Equations*, Solid State Electron. **35** (1992), pp. 769-778.

[53] P. L. Lions et T. Paul, *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Mat. Iberoamericana **9** (1993), no. 3, pp. 553-618.

[54] P. L. Lions et B. Perthame, *Lemmes de moments, de moyenne et de dispersion*, C. R. Acad. Sci. Paris **314** (1992), no. 11, pp. 801-806.

[55] A. Majorana, *Space homogeneous solutions of the Boltzmann equation describing electron-phonon interactions in semiconductors*, Transp. Theory and Stat. Phys. **20** (1991), pp. 261-279.

[56] A. Majorana, *Equilibrium solutions of the nonlinear Boltzmann equation for an electron gas in a semiconductor*, Nuovo Cimento B **108** (1993), pp. 871-877.

[57] P. A. Markowich, The stationary semiconductor device equations, Springer, Wien, 1986.

[58] P. A. Markowich et C. Ringhofer, *An analysis of the quantum Liouville equation*, Z. Angew. Math. Mech. **69** (1989), pp. 121-127.

[59] P. A. Markowich et C. Schmeiser, *Relaxation time approximation for electron-phonon interaction in semiconductors*, Math. Models Methods Appl. Sci. **5** (1995), no. 4, pp. 519-527.

[60] P. A. Markowich et C. Schmeiser, *The drift-diffusion limit for electron-phonon interaction in semiconductors*, Math. Models and Methods in Applied Sciences, **7** (1997), pp. 707-729.

[61] P. A. Markowich, F. Poupaud et C. Schmeiser, *Diffusion approximation of nonlinear electron phonon collision mechanisms*, RAIRO Mod. Math. Anal. Num. **29** (1995), no. 7, pp. 857-869.

[62] P. A. Markowich, C. Ringhofer et C. Schmeiser, Semiconductor Equations, Springer, Wien, 1990.

[63] A. H. Marshak et K. M. Van Vliet, *Electrical current in solids with position dependent band structure*, Solid-State Electron. **21** (1977), pp. 417-427.

[64] I. Muller et T. Ruggeri, Rational Extended Thermodynamics, Springer Tracts in Natural Philosophy, vol. 37, Second edition, 1998.

[65] F. B. Pidduck, *The kinetic theory of the motion of ions in gases*, Proc. London Maht. Soc. **15** (1916), pp. 89-127.

[66] F. Poupaud, *Diffusion approximation of the linear semiconductor equation : analysis of boundary layers*, Asymptotic Analysis **4** (1991), pp. 293-317.

[67] E. Prugovecki, *A quantum mechanical Boltzmann equation for one-particle* $\Gamma_s$ *distribution functions*, Physica **91 A** (1978), p. 229.

[68] Yu. P. Raizer, Gas discharge Physics, Springer, Berlin, 1997.

[69] L. Reggiani (ed), Hot electron transport in semiconductors, Springer, Berlin, 1985.

[70] H. Risken, The Fokker-Planck equation, Springer, Berlin, 1984.

[71] D. L. Rode, *Low-field electron transport*, in "Semiconductor and semimetals", vol. 10, Academic Press, New-York, 1967.

[72] D. Schroeder, D. Ventura, A. Gnudi et G. Baccarani, *Boundary conditions for spherical expansion of Boltzmann Equation*, Electronics Letters **28** (1992), pp. 995-996.

[73] S. Selberherr, Analysis and simulation of semiconductor devices, Springer, Wien, 1984.

[74] I. P. Shkarofsky, T. W. Johnson et M. P. Bachinski, The Particle Kinetics of the Plasmas, Addison-Wesley, Reading, MA, 1966.

[75] E. Sonnendrücker, J. Roche, P. Bertrand et A. Ghizzo, *The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation*, J. Comp. Phys. **149** (1999), pp. 201-220.

[76] H. Steinrück, *The Wigner Poisson problem in a crystal : existence, uniqueness, semiclassical limit in the one-dimensional case*, Z. Angew. Math. Mech. **72** (1992), no. 2, pp. 93-102.

[77] R. Stratton, *Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers*, Phys. Rev. **126** (1962), pp. 2002-2014.

[78] R. Stratton, *Semiconductor current flow equations (diffusion and degeneracy)*, IEEE Trans. Electron devices **ED-19** (1972), pp. 1288-1292.

[79] R. Stratton, *The influence of interelectronic collisions on conduction and breakdown in covalent semiconductors*, Proc. Roy. Soc. (London) **A 242** (1957), pp. 355-373.

[80] R. Stratton, *The influence of interelectron collisions on conduction and breakdown in polar crystals*, Proc. Roy. Soc. (London) **A 246** (1958), pp. 406-422.

[81] W. V. Van Roosbroeck, *Theory of flow of electrons and holes in Germanium and other semiconductors*, Bell Syst. Techn. **J 29** (1950), pp. 560-607.

[82] K. M. Van Vliet et A. M. Marshak, *Conduction current and generalized Einstein relations for degenerate semiconductors and metals*, Phys. Stat. Sol. (b) **78**, pp. 501-517.

[83] D. Ventura, A. Gnudi, G. Baccarani et F. Odeh, *Multidimensional spherical harmonics expansion of Boltzmann equation for transport in semiconductors*, Appl. Math. Letters **5** (1992), pp. 85-90.

[84] E. Wigner, *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium* Phys. Rev. **40** (1932), pp. 749-759.

[85] A. Yamnahakki, *Second order boundary conditions for the drift-diffusion equation of semiconductors*, Math. Models Meth. in Appl. Sci. **5**, no. 4 (1995), pp. 429-455.

[86] J. Yvon, *Sur les rapports entre la théorie des mélanges et la statistique classique*, C. R. Acad. Sci. Paris **223** (1946), pp. 347-349.

[87] J. Yvon, *Théorie quantique et classique*, dans Mécanique statistique, éd. A. Blanc-Lapierre, Masson, Paris, 1967.

# Deuxième partie

# Modélisation et étude mathématique

# Chapitre 3

# Sur deux modèles de diffusion de type SHE quantique[1]

With P. Degond[2], F. Méhats[3] and C. Ringhofer[4]

**Abstract :** By following the strategy of previous works, quantum extensions of the classical electron-phonon scattering operator are deduced from first principles. These quantum collision operators satisfy a quantum H-theorem and relax towards quantum equilibria. Then, under an assumption of dominant elastic interactions, a hierarchy of quantum Spherical Harmonic Expansions (SHE) models is derived by a diffusive approximation of collisional Wigner equations. These models are proven entropic and their expansions into powers of the reduced Planck constant $\hbar$ are calculated, leading to $\hbar^2$ corrections for the classical SHE model.

## 1 Introduction

The transport of charged particles in electronic devices is generally described by kinetic models such as Boltzmann like equations or macroscopic models of hydrodynamic or diffusion type. Due to the ongoing miniaturization of devices at the nanometric scale, the reliability of these classical models becomes doubtful as quantum effects become important. Since, at an intermediate scale, collision phenomena remain significant, one of the most challenging areas of investigation in semiconductor modelling deals with the setting-up of quantum transport models which take into accoung scattering effects. Though many works are concerned with the numerical simulation of ballistic quantum transport models for semiconductors (see *e.g.*

[1] *Phonon collision operators consistent with quantum entropy relaxation and quantum Spherical Harmonics Expansion models*, in preparation.

[2] Laboratoire MIP, Université Paul Sabatier, Toulouse.
E-mail : degond@mip.ups-tlse.fr

[3] Laboratoire MIP, Université Paul Sabatier, Toulouse.
E-mail : mehats@mip.ups-tlse.fr

[4] Department of Mathematics, Arizona State University.
E-mail : ringhofer@asu.edu.

[25, 36, 43, 24, 16, 44]), a quantum theory of collisions is not yet fully available (among other works on the quantum theory of scattering, see *e.g.* [3, 13, 23, 37, 45] and, more recently, [4, 6, 26]). Furthermore, several attempts were made to adapt existing classical macroscopic models to quantum mechanics [1, 2, 29, 30, 31, 32] but, generally, there is no clear link between the so-obtained models and a microscopic quantum description of the transport, which makes these models difficult to justify.

Recently, a strategy for deriving quantum macroscopic models was introduced in [20, 21]. It relies on a notion of quantum local equilibrium (called "quantum Maxwellian"), defined by a Gibbs principle as the minimizer of the quantum entropy under local moment constraints. This approach enabled to write prototypes of collision operators which decrease the quantum entropy and relax towards the quantum local equilibria. By introducing such collision operators in the Wigner equation and by performing formally an hydrodynamic (resp. diffusive) limit, quantum hydrodynamic (resp. quantum diffusive) models were derived in [20] and [18] (these two papers are reviewed in [19]). As a by-product of the method, these quantum macroscopic models display some interesting physical properties, such as the preservation of the positivity of the density or an entropy dissipation. The numerical resolution of the simplest of these models, the quantum drift-diffusion model, is investigated in [27, 28].

The small size of current semiconductor devices raises another problem. In some regimes, the relevant time and length scales are too small for the cloud of electrons to reach a thermodynamical equilibrium. Therefore the description of these devices can hardly be achieved by models which, as drift-diffusion or hydrodynamic models, rely on the assumption that the system has been driven to an equilibrium with a given profile (of Maxwellian or of Fermi-Dirac type). Intermediate models have been recently introduced, in a classical setting, to fill the gap between precise but numerically expensive models (kinetic models for instance) and numerically affordable but less accurate models as drift-diffusion models : among others are the Spherical Harmonics Expansion (SHE) models (see [7, 15] for a mathematical description and a justification). These diffusive models in the position-energy space have been applied to semiconductor physics ([33, 11, 12, 8, 9]), neutronics ([34]), gas discharge ([46]) and plasma physics ([22]). Numerical computations have established the relevance of the classical SHE models ([17, 10]). They consist of a mass balance equation (the continuity equation) and of an equation for the mass flux (the current equation). The former governs the transport of the density and the latter describes the effects of the diffusion due to the particle scattering.

The goal of this paper is twofold. On the one hand, following the strategy, described above, which leads to deriving quantum versions of the hydrodynamic (HD), energy-transport (ET) and drift-diffusion (DD) models, we propose quantum SHE models. These models are expected to be better adapted than classical SHE models to situations where quantum phenomena are predominant. Moreover, as in the classical case where SHE models appear as intermediate models between kinetic and macroscopic equations, quantum SHE models fit better than quantum HD, ET and DD models to systems far from Maxwellian-like equilibria.

The derivation of quantum SHE models by a diffusion approximation procedure makes necessary the introduction of quantum collision operators at the kinetic level. In this consists the second goal of this work. A quantum collision operators is built following ideas first introduced in [20, 21, 18] and generalizing the classical electron-phonon scattering operator [39]. Then, in the

regime of dominant elastic scattering, several other operators are proposed. All these operators are consistent with the elementary properties which are sought for describing collisions with phonons (conservations, equilibrium states, quantum entropy dissipation).

The paper is organized as follows. Section 2 recalls some well-known results about the derivation of classical SHE models and emphasizes on the importance of the dissipativity of the collision operator to obtain an entropic structure at the diffusive level. Classical features of the linearized electron-phonon collision operator are also recalled. Section 3 is a first step towards the derivation of a quantum SHE model : we consider the Wigner equation equipped with a classical collision operator and perform the derivation in this setting, which leads to the Quasi-Quantum SHE model. This model does not account for quantum diffusion. Quantum collision operators are introduced in Section 4 following a heuristic analogy : these operators must fulfill properties analogue to those satisfied by the classical operators given in Section 2. For this sake, a quantum entropy is given and quantum thermodynamical equilibria are defined as minimizers of this entropy, allowing the introduction of quantum relaxation operators. Then the derivation of a fully quantum SHE model can be performed and this is achieved in Section 5.

These Quantum SHE and Quasi-Quantum SHE models involve pseudo-differential operator and display a deep non-local character. In order to obtain models easier to handle, a formal expansion of these equations with respect to the reduced Planck constant $\hbar$ are given in Sections 3 and 5. As it was done in [18] for the quantum energy-transport and the quantum drift-diffusion models, by keeping only the terms up to order $\hbar^2$ in this expansion, we derive quantum correction terms for the classical SHE model.

# 2 Classical modelling of Electron-Phonon Scattering in semiconductor devices

In this section, we recall some well-known features concerning electron-phonon scattering in classical kinetic models.

The evolution of electrons in semiconductor devices can be described at a microscopic level through classical kinetic equations of Boltzmann type as long as quantum effects are neglected. To that purpose, one introduces the distribution function $f(t,x,p)$ of the electrons. Then $f$ is given as the solution of the initial value problem

$$\begin{cases} \partial_t f + p\cdot\nabla_x f - \nabla_x V\cdot\nabla_p f = \mathcal{C}(f), \quad x\in\mathbb{R}^3,\, p\in\mathbb{R}^3,\, t>0 \\ f(0,x,p) = f_I(x,p) \end{cases} \tag{2.1}$$

where $V = V(x)$ is a given potential and $f_I$ an initial condition. The collision operator $\mathcal{C}$ models the interactions of the electrons with the medium. In the sequel, we will note

$$L = p\cdot\nabla_x - \nabla_x V\cdot\nabla_p$$

the classical transport (Liouville) operator. The classical relative entropy usually associated to

this kind of equation is

$$H_C(f) = \int_{\mathbb{R}^6} f\left(\ln f - 1 + \frac{|p|^2}{2} + V(x)\right) dxdp = \int_{\mathbb{R}^6} f\left(\ln \frac{f}{\mathcal{M}} - 1\right) dxdp$$

where the global Maxwellian $\mathcal{M}$ is defined by

$$\mathcal{M}(x,p) = \exp\left(-\frac{|p|^2}{2} - V(x)\right). \tag{2.2}$$

When the context is clear, we will note aswell $\mathcal{M}(x,\varepsilon) = \exp(-\varepsilon - V(x))$. The following lemma is a classical result on $H_C$. Its proof is straightforward.

**Lemma 2.1** *Let $\mathcal{C}$ in (2.1) be such that, for any positive measurable function $g$, this inequality is true :*

$$-\int \mathcal{C}(g) \ln\left(\frac{g}{\mathcal{M}}\right) dxdp \geq 0. \tag{2.3}$$

*Then, if $f$ is a positive solution of Eq. (2.1), the associated entropy satisfies :*

$$\frac{dH_C(f)}{dt} \leq 0. \tag{2.4}$$

According to this lemma, the study of the entropic structure of equations of type (2.1) reduces to proving an inequality on the collision operator $\mathcal{C}$. In this section, several collision operators are introduced in order to model the scattering of electrons in semiconductors. The classical electron-phonon collision operator is introduced and some of its properties are recalled. The limit of a vanishing phonon energy is performed and yields an elastic collision operator. Then, the derivation of a classical SHE model is set out (following [7, 15]) and its entropic structure is emphasized.

Before achieving these tasks, we introduce the spherical coordinates in the momentum space : $\omega = p/|p| \in \mathbb{S}^2$, $\varepsilon = |p|^2/2 > 0$. For any function $f$, we note equally $f(p) = f(\varepsilon,\omega)$ and, when the context is unambiguous, $f = f(p)$ and $f' = f(p')$. The following formula holds for any integrable function $f$

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(p)dp = \int_{(0,\infty)\times\mathbb{S}^2} f(\varepsilon,\omega)\sqrt{2\varepsilon}\, d\varepsilon d\omega$$

and we define

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(p')\delta\left(|p'|^2/2 - \varepsilon\right) dp' = \int_{(0,\infty)\times\mathbb{S}^2} f(\varepsilon',\omega')\delta(\varepsilon'-\varepsilon)\sqrt{2\varepsilon'}d\varepsilon' d\omega := \sqrt{2\varepsilon}\int_{\mathbb{S}^2} f(\varepsilon,\omega')d\omega'.$$

Let $L^2_{x,p} = L^2(\mathbb{R}^6)$ denote the space of square integrable functions on the phase space $\mathbb{R}^6$. The closed subspace of energy dependent functions will be of considerable interest in the remainder of the paper and is denoted by

$$\mathcal{E} = \left\{ f \in L^2_{x,p} : f(x,p) = f(x,|p|) \text{ a.e. } \right\}$$

and the space orthogonal to $\mathcal{E}$ in $L^2_{x,p}$ is denoted by $\mathcal{E}^\perp$. The projectors on $\mathcal{E}$ and on $\mathcal{E}^\perp$ are respectively denoted by $\mathcal{P}$ and $\mathcal{P}^\perp$ and, for any $\phi$ in $L^2_{x,p}$, they are given by

$$\mathcal{P}(\phi)(\varepsilon) = \frac{1}{N(\varepsilon)} \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\varepsilon', \omega')\delta(\varepsilon' - \varepsilon)dp', \qquad \mathcal{P}^\perp\phi = (\ \mathrm{Id}\ - \mathcal{P})\phi$$

where $\mathrm{Id}$ denotes the identity operator on $L^2_{x,p}$ and $N(\varepsilon)$, the density of state, is defined by

$$N(\varepsilon) = \int_{\mathbb{R}^3} \delta(|p'|^2/2 - \varepsilon)dp' = 4\pi\sqrt{2\varepsilon},$$

so that the projector $\mathcal{P}$ can be written equivalently as

$$\mathcal{P}(\phi)(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \phi(\varepsilon, \omega')d\omega'.$$

Note that, for any $f$ and $\phi$, $\mathcal{P}(\phi f) = \phi\mathcal{P}(f)$ and $\mathcal{P}^\perp\phi = 0$ as soon as $\phi$ is a function of the energy only. Moreover, $\mathcal{E}^\perp$ is spanned by functions of null angular average.

## 2.1 The Classical Electron-Phonon collision operator

In semiconductor physics, a wide class of interactions between the electrons cloud and the lattice can be interpreted as collisions between electrons and fictitious particles, the so-called phonons, that are a quantization of the lattice vibrations. Then, in a kinetic perspective as (2.1), all the phenomenological information on the scattering can be dealt with by the electron-phonon collision operator $\mathcal{C}_{e\varphi}$. Classically (see [42] for instance), in a low density case, this operator is linear and can be written

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_{e\varphi}(f)(p) \quad = \quad & \int \Sigma(p,p') \left\{ \left[ (N_0+1)\delta(\varepsilon - \varepsilon' + \hbar\omega_0) + N_0\delta(\varepsilon - \varepsilon - \hbar\omega_0) \right] f(p') \right. \\ & \left. - \left[ (N_0+1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0) + N_0\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) \right] f(p) \right\} dp'\end{aligned}$$

where $\Sigma(p,p')$ is a symmetric function, $\hbar\omega_0$ is the phonon energy and

$$N_0 = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/T} - 1}$$

is the phonon occupation number given by the Bose-Einstein statistics for a lattice temperature $T$. The collision operator can also be written

$$\mathcal{C}_{e\varphi}(f) = \int \mathcal{S}(p,p') \left[ \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0) \right] \left( \frac{f'}{M'} - \frac{f}{M} \right) dp' \tag{2.5}$$

with $M = M(\varepsilon) = \exp(-\varepsilon)$ the Maxwellian and

$$\mathcal{S}(p,p') = \Sigma(p,p') N_0 e^{-(\varepsilon+\varepsilon')/2}\, e^{\hbar\omega_0/2},$$

which is a symmetric function.

The proof of the following proposition can be found in [39].

**Proposition 2.2** *The collision operator $\mathcal{C}_{e\varphi}$ defined by (2.5) satisfies the following properties :*
*(i) Mass conservation : $\int \mathcal{C}_{e\varphi}(f)dp = 0$ for any measurable function $f$.*
*(ii) States of equilibrium : for any measurable function $f$, we have $\mathcal{C}_{e\varphi}(f) = 0$ if and only if*

$$f(p) = M(|p|^2/2)F(|p|^2/2)$$

*where $F$ is $1/n-$periodic ($n \in \mathbb{N}^*$).*
*(iii) Dissipativity : $-\int \mathcal{C}_{e\varphi}(f)\ln(f/\mathcal{M})dp \geq 0$ for any positive integrable function $f$.*

Though a classical periodic SHE model can be obtained in a diffusion limit with this operator (see [40], and [41] in the nonlinear case), it is interesting to consider the elastic limit of the electron-phonon collision operator since it is a means to obtain a nonperiodic SHE model. From a modelling viewpoint, this elastic limit is valid as soon as the temperature of the lattice is small enough. The following operator $\mathcal{C}_{el}$ can be obtained as the limit of $\hbar\omega_0\mathcal{C}_{e\varphi}$ as the phonon energy $\hbar\omega_0$ tends to 0 :

$$\mathcal{C}_{el}(f)(p) = N(|p|^2/2)\left\{\mathcal{P}\left(\widetilde{\mathcal{S}}(p,\cdot)\ f(\cdot)\right) - \mathcal{P}\left(\widetilde{\mathcal{S}}(p,\cdot)\right)\ f(p)\right\} \tag{2.6}$$

where $\widetilde{\mathcal{S}}(p,p') = \Sigma(p,p')\,T$. From now on, we drop the tilda. It is straightforward to prove that

**Proposition 2.3** *The collision operator $\mathcal{C}_{el}$ defined by (2.6) satisfies the following properties :*
*(i) Mass conservation : $\int \mathcal{C}_{el}(f)dp = 0$ for any measurable function $f$.*
*(ii) States of equilibrium : for any function $f$ in $L^2_{x,p}$, we have $\mathcal{C}_{el}(f) = 0$ if and only if*

$$f(p) = F(|p|^2/2)$$

*where $F$ lies in $\mathcal{E}$.*
*(iii) Dissipativity : $-\int \mathcal{C}_{el}(f)\ln(f/\mathcal{M})dp \geq 0$ for any positive integrable function $f$.*

## 2.2 Derivation of the Classical SHE model

The derivation of classical SHE (CSHE) models can be performed in the case of dominant elastic scattering, that is, when the collisions preserve the number of particles at a given energy shell. In this section, we consider the derivation of SHE models starting from Eq. (2.1) where the collision operator $\mathcal{C}$ is $\mathcal{C}_{el}$ , given by (2.6). SHE models are diffusion models and, as such, they are valid at a macroscopic time and length scale. Therefore, to derive CSHE models from the Boltzmann equation, a diffusion rescaling has to be performed. The position variable $x$ is replaced by $x' = \alpha x$ and the time variable $t$ is changed for $t' = \alpha^2 t$, where $\alpha$ is a rescaling parameter. The primes are dropped for clarity. The Classical Boltzmann equation becomes

$$\alpha\partial_t f^\alpha + (p\cdot\nabla_x - \nabla_x V\cdot\nabla_p)\,f^\alpha = \frac{1}{\alpha}\mathcal{C}_{el}(f). \tag{2.7}$$

In order to ensure boundedness and positivity for the collision operator, we assume that

**Hypothesis 2.4** *There exists two positive constants $K, K'$ such that $K < \mathcal{S} < K'$.*

Then some properties of this operator follow :

**Lemma 2.5** *If Assumption 2.4 is fulfilled, then $\mathcal{C}_{el}$ is bounded from $L^2_{x,p}$ to $L^2_{x,p}$, its kernel is $N(\mathcal{C}_{el}) = \mathcal{E}$, its range is $R(\mathcal{C}_{el}) = \mathcal{E}^\perp$ and $-\mathcal{C}_{el}$ is coercive on $\mathcal{E}^\perp$. More precisely, there exists a constant $C > 0$ such that, for any $f$ in $L^2_{x,p}$, we have*

$$-\langle \mathcal{C}_{el}(f), f\rangle_{L^2_{x,p}} \geq C \parallel \mathcal{P}^\perp f \parallel^2_{L^2_{x,p}} . \tag{2.8}$$

*Therefore, $\mathcal{C}_{el}$ is an isomorphism from $\mathcal{E}^\perp$ onto $\mathcal{E}^\perp$.*

In this lemma, we have denoted by $\langle \cdot , \cdot \rangle_{L^2_{x,p}}$ the inner product on $L^2_{x,p}$. Then, Equation (2.7) has solutions according to the Hille-Yosida theorem.

**Lemma 2.6** *Eq. (2.7) with initial datum $f_I$ in $\mathcal{D}(L) := \left\{ f \in L^2_{x,p} : Lf \in L^2_{x,p} \right\}$ has a unique solution $f^\alpha$ in $C^1([0,T], L^2_{x,p}) \cap C^0([0,T], \mathcal{D}(L))$.*

Proposition 2.7 sums up some results on the derivation of the CSHE model (see [7] and [15] for instance) :

**Proposition 2.7** *We consider Eq. (2.7) with initial datum $f_I^\alpha$ such that the sequence $(f_I^\alpha)$ converges in $L^2_{x,p}$ to an element $F_{in}$ of $\mathcal{E}$ as $\alpha \to 0$. By Lemma 2.6, this problem has a unique solution $f^\alpha$ for all $\alpha > 0$.*

***Formal result :*** *The formal limit $F$ of $f^\alpha$ as $\alpha \to 0$ is the solution of the classical SHE (CSHE) model :*

$$\begin{gathered} N(\varepsilon)\partial_t F - \tilde{\nabla} \cdot \left( D \, \tilde{\nabla} F \right) = 0 \\ F(0,x,\varepsilon) = F_{in}(x,\varepsilon) \\ \tilde{\nabla} = \nabla_x - \nabla_x V \partial_\varepsilon, \quad D = \mathcal{P}\left( \mathcal{C}_{el}^{-1}(p) \otimes p \right). \end{gathered} \tag{2.9}$$

***Rigorous result :*** *When the potential $V$ is null, the sequence $(f^\alpha)_\alpha$ converges weakly in $L^\infty((0,T), L^2_{x,p})$ to a limit $F \in L^\infty((0,T), \mathcal{E})$, that is a weak solution of the following force free classical SHE (CSHE) model :*

$$\begin{gathered} N(\varepsilon)\partial_t F - D(\varepsilon)\Delta_x F = 0 \\ F(0,x,\varepsilon) = F_{in}(x,\varepsilon) \\ D = \mathcal{P}\left( \mathcal{C}_{el}^{-1}(p) \otimes p \right). \end{gathered}$$

*The solution $F$ is positive.*

*Entropic structure of the CSHE model : $H_{CSHE}(F) = \int F \left( \ln \frac{F}{\mathcal{M}} - 1 \right) N(\varepsilon) d\varepsilon dx$ is a decaying function of time.*

**Proof:** The proof of the derivation itself can be found in [7, 15] (formal proof) and [14] (rigorous proof). The entropic structure for the SHE model is a straight consequence of the decay of the classical entropy for the kinetic model by letting $\alpha$ tend to 0 in (2.4). Note that in

the case $V = 0$, the CSHE model appears as an infinite system of heat equations, parametrized by the energy $\varepsilon > 0$. The solution $F$ is therefore positive as soon as $F_{in}$ is positive since the diffusion tensor is a positive constant with respect to the space and time variables. Therefore, the entropy is well defined. □

An interesting case is when the collision kernel is isotropic : $\mathcal{S}(p, p') = \mathcal{S}(|p|, |p'|)$ and $\mathcal{S}(|p|, |p|)N(|p|^2/2)$ is constant. Then, setting $\mathcal{S}(|p|, |p|)N(|p|^2/2) = \nu$, the collision operator reads :

$$\mathcal{C}_{el}(f) = \nu\,(\mathcal{P}f - f)\,. \tag{2.10}$$

This operator allows explicit computations in the derivation of the classical SHE model. Indeed, if $\mathcal{S}N = \nu$ is a constant, then the diffusion matrix is

$$D = \frac{4\pi}{3\nu}(2\varepsilon)^{3/2}. \tag{2.11}$$

**Remark 2.8** Note that, in the definition of this operator (2.10), the projection term $\mathcal{P}f$ can be obtained as the minimizer of the classical entropy $H_C(g)$ under the constraint $\mathcal{P}(g - f) = 0$. The definition of a quantum analogue of this relaxation operator in section 4.2 is inspired by this remark. □

# 3 Classical collision operators and Quasi-Quantum SHE models

As a first attempt to introduce quantum phenomenology in the SHE model, the Wigner equation can be substituted to the left hand side of the Boltzmann equation (2.1). First, the Wigner-Boltzmann equation (*i.e.* the Wigner equation with a collisional source term) is introduced. Some notations and properties are given and the resolution of the Cauchy problem for this equation is recalled. Note that in this section, we will focus on the influence of the quantum transport operator. The scattering phenomena are still modelled by a classical collision operator.

Then, the so-called Quasi-Quantum SHE (QQSHE) model is rigorously derived from the Wigner-Boltzmann equation in a diffusion asymptotics. As the Wigner equation, the QQSHE model depends on the Planck constant. The expansion of this model with respect to $\hbar$ is investigated and a focus is made on the $\text{QQSHE}_2$ model, that is, the expanded model up to second order terms in $\hbar$. This model is of thorough interest since it introduces correction terms to the CSHE model and may lead to a comparison of the qualities and drawbacks of both models in a quantum mechanical context.

## 3.1 The Wigner-Boltzmann equation

Let us introduce the Wigner transform and its properties. All the results of this subsection are given without proof (one can refer to [38] for instance). To any complex number $z$ we

associate its complex conjugate $\overline{z}$. We adopt the following conventions for the Fourier transform $\mathcal{F}$ and the inverse Fourier transform $\mathcal{F}^{-1}$ (in dimension 3)

$$\mathcal{F}(f)(\eta) = \int f(p)e^{-ip\cdot\eta/\hbar}dp, \qquad \mathcal{F}^{-1}(g)(p) = \int g(\eta)e^{ip\cdot\eta/\hbar}\frac{d\eta}{(2\pi\hbar)^3}$$

where $\hbar$ is the reduced Planck constant. Let $\rho$ denote a trace class nonnegative hermitian operator on $L^2(\mathbb{R}^3)$ and let $\rho(x,y)$ be its integral kernel. Then its Wigner transform is

$$W[\rho](x,p) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho\left(x-\frac{\eta}{2}, x+\frac{\eta}{2}\right) e^{i\eta\cdot p/\hbar}d\eta$$

whereas the Weyl quantization of any symbol $a(x,p)$ defines an operator $\mathrm{Op}(a)$ :

$$\mathrm{Op}(a)\phi = (2\pi\hbar)^{-3}\int_{\mathbb{R}^6} a\left(\frac{x+y}{2}, p\right)\phi(y)e^{ip\cdot(x-y)/\hbar}dpdy.$$

Then Op and $W$ are formally inverse operations one to each other :

$$\mathrm{Op}(W[\rho]) = \rho \quad ; \quad W[\mathrm{Op}(a)] = a.$$

For any trace class operator $\rho$, we denote by $\mathrm{Tr}\,\rho$ its trace and by $\rho^\dagger$ its hermitian adjoint. We sum up some classical properties of Op and $W$ in the following lemma. We recall that an operator $K$ is a Hilbert-Schmidt operator if there exists a kernel $k \in L^2_{x,p}$ such that, for any $\phi \in L^2_{x,p}$, $K(\phi)(y) = \int k(x,y)\phi(y)dy$. We note $K \in \mathrm{HS}$.

**Lemma 3.1** (Properties of $W$ and Op)
*(i) The Weyl quantization Op($a$) of a symbol $a$ is a Hilbert-Schmidt operator if and only if $a$ is in $L^2_{x,p}$. Moreover, Op is an isometry from $L^2_{x,p}$ onto HS.*
*(ii) An operator $\rho$ is hermitian if and only if $W[\rho]$ is real valued. The Wigner transform $W$, defined from HS onto $L^2_{x,p}$ is the inverse transform to the Weyl quantization.*
*(iii) For two Hilbert-Schmidt operators $\rho$ and $\sigma$, the following formula is a consequence of Plancherel's identity*

$$Tr\,\{\rho\sigma^\dagger\} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int W[\rho]\overline{W[\sigma]}dxdp. \tag{3.1}$$

*(iv) Let $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$ denote the particle Hamiltonian. Then, for any Hilbert-Schmidt operator $\rho$, we formally have*

$$\frac{i}{\hbar}W\left[\mathcal{H},\rho\right] = \left(p\cdot\nabla_x - \theta[V]\right)\left(W[\rho]\right), \tag{3.2}$$

*where $\theta[V]$ denotes the pseudodifferential operator due to the potential $V(x)$ :*

$$\begin{aligned}\theta[V]f &= \mathcal{F}^{-1}\left(i\frac{V\left(x+\frac{\eta}{2}\right)-V\left(x-\frac{\eta}{2}\right)}{\hbar}\mathcal{F}(f)\right) \\ &= \frac{i}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^6}\frac{V(x+\frac{\hbar}{2}\eta)-V(x-\frac{\hbar}{2}\eta)}{\hbar}f(t,x,p')\,e^{i(p-p')\cdot\eta}\,d\eta\,dp',\end{aligned} \tag{3.3}$$

*and* $[\rho, \sigma] = \rho\sigma - \sigma\rho$ *is the commutator of two operators* $\rho$ *and* $\sigma$.
*(v)* $Op(|p|^2) = -\hbar^2\Delta$ *and, for any symbol* $s$ *depending only on* $x$, $Op(s)$ *is the* $s$*-multiplication operator :* $Op(s)\varphi : x \to s(x)\varphi(x)$.

Now we recall the link between the Wigner and the von Neumann equations. The density matrix $\rho$ satisfies the von Neumann equation

$$i\hbar\partial_t\rho = [\mathcal{H}, \rho] \tag{3.4}$$

if and only if its Wigner transform $f = W[\rho]$ satisfies the Wigner equation

$$\partial_t f + p \cdot \nabla_x f - \theta[V]f = 0 \tag{3.5}$$

as can be seen thanks to Eq. (3.2). The function $f$ cannot be easily interpreted as a distribution function (for instance, it is not necessarily positive), but the classical transport equation $\partial_t f + (p \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_p)f = 0$ can be obtained as the semi-classical limit of the Wigner equation as $\hbar$ tends to 0 (see [38]).

Lemma 3.3 gives some information on the operator $\theta[V]$ if we assume :

**Hypothesis 3.2** *The potential* $V$ *lies in* $W^{2,\infty}(\mathbb{R}^3)$.

**Lemma 3.3** *If the potential* $V$ *satisfies Assumption 3.2, then*
*(i)* $\theta[V]$ *is a bounded skew-adjoint operator from* $L^2_{x,p}$ *to* $L^2_{x,p}$ ,
*(ii) for any function* $f \in W^{2,2}(\mathbb{R}^3_x; L^2(\mathbb{R}^3_p))$,

$$\theta[V](f) \in W^{2,2}(\mathbb{R}^3_x, L^2(\mathbb{R}^3_p)),$$

*and, for* $f \in W^{1,2}(\mathbb{R}^3_x; L^2(\mathbb{R}^3_p))$,

$$\nabla_x\theta[V]f = \theta[\nabla_x V](f) + \theta[V](\nabla_x f),$$

*where* $\theta[\nabla_x V](f)$ *and* $\theta[V](\nabla_x f)$ *denote respectively the vectors of components* $\theta[\partial_{x_i} V](f)$ *and* $\theta[V](\partial_{x_i} f)$, *for* $i = 1, 2, 3$ ,
*(iii) for any function* $f \in L^2_{x,p}$ *such that* $p\, f \in \left(L^2_{x,p}\right)^3$, $p\,\theta[V](f)$ *is in* $L^2_{x,p}$ ,
*(iv) for any function* $F \in \mathcal{E}$, $\theta[V]F$ *belongs to* $\mathcal{E}^\perp$ .

Eq. (3.5) does not take collision phenomena into account. In the remainder of section 3 it is assumed that the scattering can be modelled through classical mechanics. Therefore, the collision operator is still $\mathcal{C}_{el}$, as defined in (2.6). This leads to the following Wigner-Boltzmann equation (after rescaling) :

$$\alpha\partial_t f^\alpha + (p \cdot \nabla_x - \theta[V])\, f^\alpha = \frac{1}{\alpha}\mathcal{C}_{el}(f^\alpha) \tag{3.6}$$

We denote by $\Lambda$ the Wigner operator of domain $\mathcal{D}(\Lambda) = \left\{g \in L^2_{x,p} : p \cdot \nabla_x g \in L^2_{x,p}\right\}$ and defined by

$$\begin{array}{rcl} \Lambda : \mathcal{D}(\Lambda) & \to & L^2_{x,p} \\ g & \to & (p \cdot \nabla_x - \theta[V])\, g. \end{array}$$

Note that, since $\theta[V]$ is skew-adjoint on $L^2_{x,p}$, so is $\Lambda$ on $\mathcal{D}(\Lambda)$.

For the study of the QQSHE model, we introduce the following functional spaces :

$$\mathcal{L}^2_{N^k} = \left\{ h\,(x,\varepsilon) - \text{measurable} \;:\; \int_{\mathbb{R}^3_x} \int_{\varepsilon>0} |h(x,\varepsilon)|^2 \,(N(\varepsilon))^k \, d\varepsilon dx < \infty \right\}, \tag{3.7}$$

with $N(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}$ and $k \in \mathbb{Z}$. So $\mathcal{E} = \mathcal{L}^2_N$.

Now, we give an existence result for the Wigner-Boltzmann equation (3.6).

**Lemma 3.4** *For any value of the parameter $\alpha > 0$, any initial condition $f^\alpha_I \in \mathcal{D}(\Lambda)$ and any time $T > 0$, there exists a unique solution $f^\alpha \in C^1\left([0,T]; L^2_{x,p}\right) \cap C^0\left([0,T]; \mathcal{D}(\Lambda)\right)$ to the initial value problem (3.6), $f(t=0,x,p) = f^\alpha_I$.*

**Proof:** This is a straightforward consequence of the classical semigroup theory -see *e.g.* [35] and [47]. □

## 3.2 The Quasi-Quantum SHE model (QQSHE)

This section is dedicated to the investigation of the limit $\alpha \to 0$ in (3.6). The collision phenomena are modelled by the collision operator $\widetilde{\mathcal{C}}_{el}$ defined by (2.10). The main result of this section is

**Theorem 3.5** *Let $f^\alpha_I \in L^2_{x,p}$ be a convergent sequence such that the limit $f_I$ be in $\mathcal{E}$. We note $F_I(x,|p|^2/2) = f_I(x,p)$. Therefore, $F_I$ is in $\mathcal{L}^2_N$. Let $f^\alpha$ denote the solution of (3.6), with initial condition $f^\alpha(t=0,x,p) = f^\alpha_I(x,p)$, and with the relaxation operator $\mathcal{C}_{el}(f) = \nu(\mathcal{P}(f) - f)$. Then, as $\alpha \to 0$, the sequence $(f^\alpha)_{\alpha>0}$ converges (up to the extraction of a subsequence) weakly in $L^2(0,T;L^2_{x,p})$ to a limit $f \in L^2(0,T;\mathcal{E})$. We note $F(t,x,|p|^2/2) = f(t,x,p)$, so that $F \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_N)$. In addition, $F$ is a weak solution of :*

$$N(\varepsilon)\partial_t F - \frac{1}{\nu} N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(\Lambda\left(\Lambda(F)\right)\right) = 0, \tag{3.8}$$

$$F(t=0,x,\varepsilon) = F_I(x,\varepsilon), \tag{3.9}$$

*and, if $F$ is positive, the following macroscopic entropy decays*

$$H_{CSHE}(F) = \int F\left(\ln\frac{F}{\mathcal{M}} - 1\right) N(\varepsilon) d\varepsilon dx\,.$$

**Remark 3.6** If the collisions are modelled by the more general collision operator (2.6), then one can prove that the limit equation satisfied by $F$ is

$$N(\varepsilon)\partial_t F - N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(\Lambda\left(\mathcal{C}^{-1}_{el}\left(\Lambda(F)\right)\right)\right) = 0, \tag{3.10}$$

under the condition that the following set of test functions is dense in $L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_N)$ :

$$\mathbb{H} = \{\varphi \in W^{1,\infty}(0,T;C^\infty_c(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+)) : \mathcal{P}(\Lambda(\mathcal{C}^{-1}_{el}(\Lambda\varphi))) \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_N)\}$$

This condition is obviously fulfilled when $\mathcal{C}_{el} = \nu(\mathcal{P}f - f)$. □

**Proof:** We start from (3.6). We multiply by $f^\alpha$ and integrate with respect to $t$, $x$ and $p$. This yields

$$\| f^\alpha(t) \|^2_{L^2_{x,p}} + \frac{1}{\alpha^2} \int_0^t \| \mathcal{P}^\perp f^\alpha(s) \|^2_{L^2_{x,p}} ds = \| f^\alpha_I \|^2_{L^2_{x,p}} . \tag{3.11}$$

Therefore, the sequence $(f^\alpha)$ is bounded in $L^2_{x,p}$ since $(f^\alpha_I)$ is bounded. There exists $f$ in $L^\infty(0,T;L^2_{x,p})$ such that $f^\alpha \rightharpoonup f$ weakly $*$ in $L^\infty(0,T;L^2_{x,p})$. Moreover, the same estimate (3.11) shows that $\mathcal{P}^\perp f^\alpha$ tends strongly to 0 as $\alpha \to 0$ in the same space. Consequently, the limit $f$ belongs to $\mathcal{E}$ and we can note $F(t,x,|p|^2/2) = f(t,x,p)$.

The Wigner-Boltzmann equation can be written in a weak form, by introducing the following set of test functions :

$$\mathcal{S} = \left\{ \varphi \in W^{1,\infty}(0,T;L^2_{x,p}) \cap L^\infty(0,T;\mathcal{D}(\Lambda)) \ : \quad \varphi(T,x,p) = 0 \right\}.$$

The weak solutions of (3.6) satisfy

$$\forall \varphi \in \mathcal{S} \qquad \int_{[0,T]\times\mathbb{R}^6} f^\alpha \left( \partial_t \varphi + \frac{1}{\alpha}\Lambda\varphi + \frac{1}{\alpha^2}\mathcal{C}_{el}\varphi \right) dtdxdp = \int_{\mathbb{R}^6} f^\alpha_I \varphi(0,x,p) dxdp. \tag{3.12}$$

In order to prove that $F$ is a weak solution of (3.8), let us introduce a test function $\Phi(t,x,\varepsilon)$ for this equation, in $W^{1,\infty}\left(0,T;C^\infty_c\left(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^+\right)\right)$. Obviously the function $\varphi_1(t,x,p)$ defined by $\varphi_1(t,x,p) = \Phi(t,x,|p|^2/2)$ belongs to $\mathcal{S}$ and can be taken as a test function in (3.12). We consider the asymptotic behaviour of each term in (3.12) as $\alpha \to 0$, in this special case where the test function $\varphi_1$ is a function of $(t,x,|p|^2/2)$. The weak convergence of $f^\alpha$ implies

$$\int f^\alpha \partial_t \varphi_1(t,x,p) dtdxdp \to \int N(\varepsilon) F(t,x,\varepsilon) \partial_t \Phi(t,x,\varepsilon) dtdxd\varepsilon$$

and

$$\int f^\alpha_I \varphi_1(0,x,p) dxdp \to \int N(\varepsilon) F_I(x,\varepsilon) \Phi(0,x,\varepsilon) dxd\varepsilon.$$

On the other hand, since $\varphi_1(t,\cdot,\cdot) \in \mathcal{E}$, necessarily $\int f^\alpha \mathcal{C}_{el}\varphi_1 dtdxdp = 0$.

Let us decompose $f^\alpha$ as follows :

$$f^\alpha = F^\alpha + \alpha g^\alpha,$$

with $F^\alpha = \mathcal{P} f^\alpha$ and $g^\alpha = \mathcal{P}^\perp f^\alpha/\alpha$. According to Lemma 3.3 (iv), $\Lambda\varphi_1$ lies in $\mathcal{E}^\perp$. Therefore, $\int F^\alpha \Lambda\varphi_1 dtdxdp = 0$ since $F^\alpha \in \mathcal{E}$ and

$$\frac{1}{\alpha} \int f^\alpha \, \Lambda \, \varphi_1 \, dtdxdp = \int g^\alpha \, \Lambda \, \varphi_1 \, dtdxdp. \tag{3.13}$$

We are thus led to investigate the behaviour of $g^\alpha$ as $\alpha \to 0$. According to Eq. (3.11), and using the definition of $g^\alpha$, we have

$$\int_0^t \| g^\alpha(s) \|_{L^2_{x,p}} ds \le C.$$

Therefore, there exists $g$ such that $g^\alpha \rightharpoonup g$ weakly $*$ in $L^\infty(0,T;L^2_{x,p})$ and,

$$\frac{1}{\alpha}\int f^\alpha\,\Lambda\,\varphi_1\,dtdxdp = \int g^\alpha\,\Lambda\,\varphi_1\,dtdxdp \to \int g\,\Lambda\,\varphi_1\,dtdxdp \tag{3.14}$$

as $\alpha \to 0$. It remains to relate the last integral in (3.14) to $F$.

To this aim, we come back to (3.12), that we write with another particular test function $\varphi_2$ (specified below). Eq. (3.12) can be written in terms of $g^\alpha$ and $F^\alpha$. Since the sequences $F^\alpha$ and $g^\alpha$ are bounded, keeping only the leading order terms in this equation leads to

$$\int g^\alpha\,\mathcal{C}_{el}\,\varphi_2\,dtdxdp = -\int F^\alpha\,\Lambda\,\varphi_2\,dtdxdp + \mathcal{O}(\alpha),$$

or, letting $\alpha \to 0$,

$$\int g\,\mathcal{C}_{el}\,\varphi_2\,dtdxdp = -\int F\,\Lambda\,\varphi_2\,dtdxdp. \tag{3.15}$$

Now, by choosing

$$\varphi_2 = (\mathcal{C}_{el})^{-1}(\Lambda\widetilde{\varphi}_1),$$

we deduce that the last integral in (3.14) can be rewritten

$$\int g\,\Lambda\,\varphi_1\,dtdxdp = \int g\,\mathcal{C}_{el}\,\varphi_2\,dtdxdp$$

and straightforward calculations lead to

$$\int g\,\Lambda\,\varphi_1\,dtdxdp = -\int N\,F\,\mathcal{P}\left(\Lambda\left((\mathcal{C}_{el})^{-1}(\Lambda\varphi_1)\right)\right)dtdxd\varepsilon\,.$$

Finally, we get

$$\int NF\left(\partial_t\Phi - \mathcal{P}\left(\Lambda\left((\mathcal{C}_{el})^{-1}(\Lambda\varphi_1)\right)\right)\right)dtdxd\varepsilon = \int NF_I\Phi(0,x,\varepsilon)dxd\varepsilon \tag{3.16}$$

which is obviously the weak form of (3.10). It remains to check that this formal identification can be made rigorous. Namely, we have to prove that, if $\Phi \in W^{1,\infty}\left(0,T;C_c^\infty\left(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^+\right)\right)$, then $\varphi_2 = (\mathcal{C}_{el})^{-1}(\Lambda\varphi_1)$ is an admissible test function for (3.12). By Lemma 3.3 (under Assumption 3.2), it is an easy task, since we have

$$(\mathcal{C}_{el})^{-1}(\Lambda\varphi_1) = -\frac{1}{\nu}\Lambda\varphi_1\,.$$

□

### 3.3 The QQSHE$_2$ model : quantum corrections to the classical SHE model

In the remainder of this paper, when a function $F$ depends on $p$ through the energy $|p|^2/2$ only, we note equally $F(|p|^2/2) = F(p)$ when the context is clear.

The explicit form of the diffusion term $\mathcal{P}\left(\Lambda(\Lambda F)\right) N(\varepsilon)/\nu$ in (3.8) is not easy to handle. As in [18] we give the expansion of this model in $\hbar$, up to second order terms. This leads to the classical SHE model enriched with quantum correction terms.

The Wigner transport operator $\Lambda$ depends on the reduced Planck constant. At usual macroscopic scales, this constant is negligible and the transport operator $\Lambda$ can be expanded in powers of $\hbar$. Formally, one has

$$\Lambda = L + \hbar^2 L^{(2)} + \mathcal{O}(\hbar^4)$$

where $L = p \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_p$ is the classical transport operator and $L^{(2)}$ is a third order differential operator given by

$$L^{(2)} = \frac{1}{24} \nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3}\,.$$

Here the third order tensors are defined as $(\nabla_x^{\otimes 3})_{i,j,k} = \partial^3_{x_i,x_j,x_k}$ (and analogously for $\nabla_p^{\otimes 3}$) and $\vdots$ denotes the third order tensor product.

Then the diffusion term becomes

$$\mathcal{P}\left(\Lambda(\Lambda F)\right) = \mathcal{P}\left(L(LF)\right) + \hbar^2 \left(\mathcal{P}\left(L^{(2)}(LF)\right) + \mathcal{P}\left(L(L^{(2)}F)\right)\right) + \mathcal{O}(\hbar^4).$$

Note that $\mathcal{P}\left(L(LF)\right)$ is the diffusion term that is involved in the CSHE model (2.9), (2.11). For the computations of the other terms, turn to Appendix A. They are summed up in the following formal Lemma :

**Lemma 3.7** *We assume that the collision operator is given by (2.10). Up to second order terms in $\hbar$, the QQSHE model can be formally approached by the following QQSHE$_2$ model :*

$$\begin{aligned} &N(\varepsilon)\partial_t F - \frac{4\pi}{\nu}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}F\right) \\ &-\frac{4\pi\hbar^2}{24\nu}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right) + \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right)\right\} = 0. \end{aligned} \tag{3.17}$$

# 4 Quantum collision operators

Note as a preliminary that all the results given in this section are utterly formal. In Section 3, the SHE models are of a hybrid type, since they deal with particles transported according to quantum mechanics but subject to classical collisions only. However, particle scattering is an influent phenomenon, specially as regards diffusion or fluid regimes, and to derive fully quantum SHE models we have to endeavour to give a precise meaning to the notion of quantum collision operator.

An important property of the collision operators used in classical kinetic theory is their dissipativity, since, as stated in Lemma 2.1, it is closely related to the dissipation of entropy.

Therefore, in the quantum case, a natural demand is that a quantum collision operator $\mathcal{Q}$ dissipate a quantum entropy and that a quantum kinetic equations such as the Wigner-Boltzmann equation

$$\partial_t f + p \cdot \nabla_x f - \theta[V] f = \mathcal{Q}(f) \tag{4.1}$$

should satisfy a quantum analogue to Lemma 2.1.

The obvious quantum relative entropy associated to the Von Neumann equation (3.4) is the Von Neumann relative entropy defined for any operator $\rho$ by $\mathrm{Tr}\,\{\rho(\ln \rho - 1 + \mathcal{H})\}$ where $\mathcal{H} = -(\hbar^2/2)\Delta + V$ is the particle hamiltonian. Lemma (3.1) (iii) gives a tool to deduce a quantum entropy for the Wigner equation from the Von Neumann entropy. Setting $f = W[\rho]$, straightforward computations based on Lemma (3.1) (iii) and (iv) yield, for the Von Neumann entropy,

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int f \left( \mathcal{L}\mathrm{n}(f) - 1 + \frac{|p|^2}{2} + V \right) dpdx,$$

where the "quantum logarithm" $\mathcal{L}\mathrm{n}$ is defined by

$$\mathcal{L}\mathrm{n}(f) = W\left[\ln\left(\mathrm{Op}(f)\right)\right].$$

Analogously, we define the "quantum exponential" and the quantum Maxwellian $\mathcal{M}ax$ respectively by

$$\mathcal{E}\mathrm{xp}(f) = W\left[\exp\left(\mathrm{Op}(f)\right)\right],$$

$$\mathcal{M}ax(x,p) = W\left[\exp\left(\mathrm{Op}\left(-\frac{|p|^2}{2} - V(x)\right)\right)\right] = \mathcal{E}\mathrm{xp}(-|p|^2/2 - V).$$

Note that $\mathcal{L}\mathrm{n}$ and $\mathcal{E}\mathrm{xp}$ are formal inverses and that $-|p|^2/2 - V = \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax(x,p)\right)$.

The quantum entropy for the Wigner equation is then naturally defined by

$$H_Q(f) = \int f\left(\mathcal{L}\mathrm{n}(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax\right) - 1\right) dpdx.$$

The following Lemma gives a criterion on $\mathcal{Q}$ for Eq. (4.1) to be consistent with the quantum entropy $H_Q$.

**Lemma 4.1** *Let $\mathcal{Q}$ in (4.1) be such that, for any function $g$, this inequality is true :*

$$-\int \mathcal{Q}(g)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}(g) - \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax\right)\right) dxdp \geq 0 \tag{4.2}$$

*Then, if $f$ is a solution of Eq. (4.1), the associated quantum entropy satisfies :*

$$\frac{dH_Q(f)}{dt} \leq 0. \tag{4.3}$$

**Proof:** To begin, we recall that (see [20]) $H_Q$ is Gâteaux differentiable and its Gâteaux derivative at $f$ in the direction $\delta f$ is

$$H'_Q(f)\delta f = (2\pi\hbar)^3 \mathrm{Tr}\ \{(\ln \mathrm{Op}(f) + \mathcal{H})\, \mathrm{Op}(\delta f)\}$$

or,

$$H'_Q(f)\delta f = \int \left(\mathcal{L}\mathrm{n} f + \frac{|p|^2}{2} + V\right) \delta f\, dpdx.$$

Therefore, if $f$ is a solution of (4.1),

$$\begin{aligned}
\frac{dH_Q(f)}{dt} &= \int \left(\mathcal{L}\mathrm{n} f + \frac{|p|^2}{2} + V\right) \partial_t f\, dpdx \\
&= -\int \left(\mathcal{L}\mathrm{n} f + \frac{|p|^2}{2} + V\right) \Lambda f\, dpdx - \int \left(\mathcal{L}\mathrm{n} f + \frac{|p|^2}{2} + V\right) \mathcal{Q}(f)\, dpdx \\
&= -\int \left((W[\ln(\mathrm{Op}(f))] + W[\mathcal{H}])\, \frac{i}{\hbar} W[\mathcal{H}\mathrm{Op}(f) - \mathrm{Op}(f)\mathcal{H}]\right) dpdx \\
&\quad - \int (\mathcal{L}\mathrm{n}(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\,(\mathcal{M}ax))\, \mathcal{Q}(f)\, dpdx
\end{aligned} \tag{4.4}$$

thanks to Lemma (3.1) (iv). Now, using (3.1) (iii), the first integral on the right hand side can be written

$$(2\pi)^3 i\hbar^2 \mathrm{Tr}\ \{(\ln(\mathrm{Op}(f)) + \mathcal{H})\, [\mathcal{H}, \mathrm{Op}(f)]\}$$

or, using the cyclicity of the trace,

$$(2\pi)^3 i\hbar^2 \mathrm{Tr}\ \{[\mathrm{Op}(f), \ln(\mathrm{Op}(f))]\, \mathcal{H} + [\mathcal{H}, \mathcal{H}]\, \mathrm{Op}(f)\}$$

and this trace is obviously null. Finally, the second integral on the right-hand side of (4.4) is nonnegative according to (4.2), which completes the proof. □

Consequently, after [21], what is meant in this paper by quantum collision operators is a class of collision operators $\mathcal{Q}$ that satisfy the following formal properties : for any function $f(x,p)$,

*Mass conservation :* $\int \mathcal{Q}(f)(p)dxdp = 0$,

*Dissipativity :* $-\int \mathcal{Q}(f)\,(\mathcal{L}\mathrm{n}\,(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\,(\mathcal{M}ax))\, dxdp \geq 0$.

## 4.1 The Quantum Electron-Phonon collision operator

Keeping in view Lemma 4.1 we introduce the following quantum version of the electron-phonon collision operator $\mathcal{C}_{e\varphi}$ described in Section 2.1 :

$$\mathcal{Q}_{e\varphi}(f) = \int \mathcal{S}(p,p')\, [\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0)] \left(\frac{\mathcal{A}(f)'}{M'} - \frac{\mathcal{A}(f)}{M}\right) dp' \tag{4.5}$$

where $\mathcal{A}(f) = \exp W[\ln \mathrm{Op}(f)] = \exp \mathcal{L}\mathrm{n} f$, namely $\mathcal{L}\mathrm{n} f = \ln \mathcal{A}(f)$ where ln is the ordinary logarithm. Note that it is not clear what conditions $f$ should satisfy for $\mathcal{A}(f)$ to be a well defined function. Therefore, the definition of $Q_{e\varphi}$ is purely formal at this point and all the results stated in this Section are formal.

However, we claim that this operator is a natural extension of the classical phonon operator to quantum systems, and that it is consistent with quantum entropy relaxation. Indeed, we have :

**Proposition 4.2** *The collision operator $\mathcal{Q}_{e\varphi}$ defined by (4.5) satisfies the following properties :*
*(i) Mass conservation : $\int \mathcal{Q}_{e\varphi}(f)dp = 0$ for any measurable function $f$.*
*(ii) States of equilibrium : for any measurable function $f$, we have $\mathcal{Q}_{e\varphi}(f) = 0$ if and only if*

$$f(p) = \mathcal{E}\mathrm{xp}\left(\frac{|p|^2}{2} + \ln F\left(\frac{|p|^2}{2}\right)\right) = W\left[\exp\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + Op(\ln F)\right)\right]$$

*where $F = F(\varepsilon)$ is $1/n-$periodic ($n \in \mathbb{N}^*$).*
*(iii) Dissipativity : $-\int \mathcal{Q}_{e\varphi}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax\right)\right) dp \geq 0$ for any function $f$.*

**Proof:** The mass conservation follows from the symmetry of $\mathcal{S}(p,p')$. The equilibria of operator $\mathcal{Q}_{e\varphi}$ can be easily deduced from those of operator $\mathcal{C}_{e\varphi}$ by remarking that $\mathcal{Q}_{e\varphi}(f) = \mathcal{C}_{e\varphi}(\mathcal{A}(f))$. On the other hand, it follows from the symmetry of $\mathcal{S}$ that

$$-\int \mathcal{Q}_{e\varphi}(f)\left(\mathcal{L}\mathrm{n}(f) - \mathcal{L}\mathrm{n}\left(\mathcal{M}ax\right)\right) dp = \frac{1}{2}\int \mathcal{S}(p,p')\left(\delta_+ + \delta_-\right)\left(\frac{\mathcal{A}(f)'}{M'} - \frac{\mathcal{A}(f)}{M}\right)\left(\ln\frac{\mathcal{A}(f)'}{M'} - \ln\frac{\mathcal{A}(f)}{M}\right) dpdp'dx$$

which is nonnegative since ln is an increasing function. □

As in the case of the classical electron-phonon scattering, we are interested in the elastic limit $\hbar\omega_0 \to 0$ of the operator $\hbar\omega_0\mathcal{Q}_{e\varphi}$. More precisely, we let $\omega_0$ tend to zero and get :

$$\mathcal{Q}_{el}(f) = N(\varepsilon)\left\{\mathcal{P}\left(\mathcal{S}\mathcal{A}(f)\right) - \mathcal{P}\left(\mathcal{S}\right)\mathcal{A}(f)\right\}. \tag{4.6}$$

This operator has the properties of a quantum collision operator :

**Proposition 4.3** *The collision operator $\mathcal{Q}_{el}$ defined by (4.6) satisfies the following properties :*
*(i) Mass conservation : $\int \mathcal{Q}_{el}(f)dp = 0$ for any measurable function $f$.*
*(ii) States of equilibrium : for any measurable function $f$, we have $\mathcal{Q}_{el}(f) = 0$ if and only if there exists a function $\lambda(\varepsilon)$ of the energy only such that*

$$f(p) = \mathcal{E}\mathrm{xp}(\tilde{\lambda})(p),$$

*where $\tilde{\lambda}(p) = \lambda(|p|^2/2)$.*
*(iii) Dissipativity : $-\int \mathcal{Q}_{el}(f)\left(\mathcal{L}n\left(f\right) - \mathcal{L}n\left(\mathcal{M}ax\right)\right) dp \geq 0$ for any function $f$.*

**Remark 4.4** Note that $f$, unlike $\lambda$, is *not* a function of the energy only but depends on $p$. □

**Proof:** Mass conservation and dissipativity can be proven in the same way as for $\mathcal{Q}_{e\varphi}$. We leave to the reader the adaptation of the proof of Proposition 4.2 for these properties. Let us consider

$$\begin{aligned} -\int \mathcal{Q}_{el}(f)(p)\mathcal{A}(f)(p)dp &= \frac{1}{2}\int \delta(\frac{|p'|^2}{2}-\frac{|p|^2}{2})\mathcal{S}(p,p')\left(\mathcal{A}(f)(p')-\mathcal{A}(f)(p)\right)^2 dp'dp \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Obviously, if $Q_{Qel}(f)=0$, then one necessarily has

$$\mathcal{A}(f)(\sqrt{2\varepsilon}\omega')=\mathcal{A}(f)(\sqrt{2\varepsilon}\omega)$$

for almost any pair $(\omega,\omega')$ in $\mathbb{S}^2$ and any $\varepsilon>0$. Therefore, $\mathcal{A}(f)$ is a function of $p$ that depends only on $|p|^2/2$. Consequently, $\ln\mathcal{A}(f)$ depends only on $|p|^2/2$ too and, finally, one can set $\lambda(\varepsilon)=\ln\mathcal{A}(f)=\mathcal{L}\mathrm{n}f$, or $f=\mathcal{E}\mathrm{xp}\lambda$. □

## 4.2 The quantum relaxation operator

In classical kinetic theory, an important class of collision operators is constituted by the relaxation operators. The mathematical study of these operators is simpler than for Boltzmann-like collision operators and, though, they share many important properties of the Boltzmann operators as the entropy dissipation, the conservation of mass and their states of equilibrium.

The task in this section is to introduce a consistent notion of quantum relaxation operator. We seek an operator that shares the properties (i), (ii) and (iii) of $\mathcal{Q}_{el}$ as given in Proposition 4.3. Hence, after Remark 2.8, rises the idea of introducing the following minimization problem :

$$\textit{Given } f, \textit{ find } \mathcal{E}_f \textit{ such that :}$$

$$H_Q(\mathcal{E}_f)=\mathrm{Min}\left\{H_Q(g)\,/\,\mathcal{P}(f-g)=0\right\}. \tag{4.7}$$

Assuming that, given $f$ in a suitable space, a solution $\mathcal{E}_f$ to this problem exists, we set :

$$\mathcal{Q}_{\mathrm{rel}}(f)=\nu\left(\mathcal{E}_f-f\right). \tag{4.8}$$

It remains to prove that such an operator preserves the mass, decreases the quantum entropy $H_Q$ and has the same equilibria as $\mathcal{Q}_{el}$. We have :

**Proposition 4.5** *The collision operator $\mathcal{Q}_{rel}$ defined by (4.8) satisfies the following properties :*
*(i) Mass conservation : $\int \mathcal{Q}_{rel}(f)dp=0$ for any measurable function $f$.*
*(ii) States of equilibrium : for any measurable function $f$, we have $\mathcal{Q}_{rel}(f)=0$ if and only if there exists a function $\lambda(\varepsilon)$ of the energy only such that*

$$f(p)=\mathcal{E}\mathrm{xp}(\tilde{\lambda})(p),$$

*where $\tilde{\lambda}(p)=\lambda(|p|^2/2)$.*
*(iii) Dissipativity : $-\int \mathcal{Q}_{rel}(f)\left(\mathcal{L}n(f)-\mathcal{L}n\left(\mathcal{M}ax\right)\right)dp\geq 0$ for any function $f$.*

**Remark 4.6** This proposition must be compared to Proposition 4.2 : $\mathcal{Q}_{\text{rel}}$ shares the properties of operator $\mathcal{Q}_{el}$ and appears as the relaxation operator associated to this quantum elastic operator. □

Before proving Proposition 4.5, we state an important property of the solutions of the minimization problem (4.7).

**Lemma 4.7** *Let $f$ be a function such that a solution of the minimization problem (4.7) exists. We note such a solution $\mathcal{E}_f$. Then, there exists a function $\lambda(x,\varepsilon)$ such that*

$$\mathcal{E}_f(x,p) = \mathcal{E}\text{xp}(\lambda)(x,p).$$

**Proof:** Since $\mathcal{E}_f$ is the minimizer of $H_Q(g)$ under the constraint $\mathcal{P}(f-g)=0$, there exists some Lagrange multiplier $\mu(x,\varepsilon)$ such that $H'_Q(f)g + \mu\mathcal{P}(g) = 0$ for all $g$. This means that, for all $g$,

$$\int \left(\mathcal{L}\text{n}(f) + \frac{|p|^2}{2} + V - \mu(x,|p|^2/2)\right) g(x,p)dpdx = 0,$$

that is : $f = \mathcal{E}\text{xp}(\lambda(x,\varepsilon))$ with $\lambda(x,\varepsilon) = -\mu(x,\varepsilon) + \varepsilon + V(x)$. □

**Proof of Proposition 4.5 :** Point (i) is obvious since the definition of $\mathcal{E}_f$ implies that $\mathcal{P}(f-\mathcal{E}_f)=0$. Point (ii) is a straightforward consequence of Lemma 4.7. The proof of point (iii) is inspired from [18]. We introduce

$$\Gamma : \gamma \in [0,1] \to \int_{\mathbb{R}^6} \nu(x,\varepsilon) h((1-\gamma)\mathcal{E}_f + \gamma f)dxdp$$

with $h : f \to f(\mathcal{L}\text{n}f - 1 + |p|^2/2 + V)$. Deriving $\Gamma$ by a chain rule yields

$$\frac{d\Gamma}{d\gamma}(\gamma) = \int_{\mathbb{R}^6} \nu(x,\varepsilon_p)\,(f-\mathcal{E}_f)\left(\mathcal{L}\text{n}\left((1-\gamma)\mathcal{E}_f + \gamma f\right) + |p|^2/2 + V\right) dxdp.$$

The convexity of $h$ implies that $\Gamma$ is also convex so that $(d\Gamma/d\gamma)(1) \geq \Gamma(1) - \Gamma(0)$, which in turn gives

$$-\int Q_{el}(f)\left(\mathcal{L}\text{n}(f) + |p|^2/2 + V\right) dxdp \geq \underline{\nu}\left(H_Q(f) - H_Q(\mathcal{E}_f)\right) \geq 0$$

since $\mathcal{E}_f$ is a minimizer of $H_Q$. □

This quantum relaxation collision operator will be used for the derivation of the fully quantum SHE model. Note that at this point, the existence of a minimizer for (4.7) is an open problem.

# 5 Quantum SHE models

In this section, we formally investigate the limit $\alpha \to 0$ in the following rescaled Wigner-Quantum relaxation equation

$$\alpha^2 \partial_t f^\alpha + \alpha \Lambda f^\alpha = \mathcal{Q}_{\text{rel}}(f^\alpha), \tag{5.1}$$

where we recall that $\Lambda = p \cdot \nabla_x - \theta[V]$ is the Wigner operator. The following formal result holds :

**Theorem 5.1** *If (5.1) admits a solution $f^\alpha$ for all $\alpha$ and if the so-obtained sequence $f^\alpha$ admits a convergent subsequence, then the limit is denoted by $\mathcal{F}$ and there exists a function $\lambda$ such that $\widetilde{\lambda} : (t,x,p) \to \lambda(t,x,|p|^2/2)$ satisfies*
*(i)* $\mathcal{F}(t,x,p) = \mathcal{E}\text{xp}\left(\widetilde{\lambda}\right)(t,x,p)$
*(ii)* $N(\varepsilon)\partial_t \mathcal{P}\left(\mathcal{E}\text{xp}\left(\widetilde{\lambda}\right)\right) - N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(\Lambda\left(\frac{1}{\nu}\Lambda\left(\mathcal{E}\text{xp}\left(\widetilde{\lambda}\right)\right)\right)\right) = 0$
*Entropic structure of the QSHE model :* $H_{QSHE}(F) = \displaystyle\int \mathcal{P}(\mathcal{F})\left(\lambda + \varepsilon + V - 1\right) N(\varepsilon) d\varepsilon dx$ *decays.*

**Proof:** First, letting $\alpha \to 0$ in equation (5.1) leads to $\mathcal{Q}_{\text{rel}}(\mathcal{F}) = 0$ so that, according to Proposition 4.5, there exists $\lambda(x,\varepsilon)$ such that $\mathcal{F} = \mathcal{E}\text{xp}\widetilde{\lambda}$.

Now, the Chapman-Enskog expansion of $f^\alpha$ is written

$$f^\alpha = \mathcal{E}_{f^\alpha} + \alpha g^\alpha$$

since $f^\alpha$ is close to the equilibrium when $\alpha$ is small. We assume that $\mathcal{E}_{f^\alpha}$ and $g^\alpha$ are bounded with respect to $\alpha$. Then, introducing this expansion in equation (5.1) yields, at second order in $\alpha$ :

$$\mathcal{P}\left(\partial_t \mathcal{E}_{f^\alpha} + \Lambda g^\alpha\right) = \mathcal{O}(\alpha) \tag{5.2}$$

and, at first order in $\alpha$ :

$$\Lambda \mathcal{E}_{f^\alpha} = -\nu g^\alpha + \mathcal{O}(\alpha) \tag{5.3}$$

since $\mathcal{Q}_{\text{rel}}\left(f^\alpha\right) = \nu\left(\mathcal{E}_{f^\alpha} - \left(\mathcal{E}_{f^\alpha} + \alpha g^\alpha\right)\right) = -\alpha\,\nu g^\alpha$. According to (5.3), Eq. (5.2) becomes

$$\mathcal{P}\left(\partial_t \mathcal{E}_{f^\alpha} - \Lambda\left(\frac{1}{\nu}\Lambda \mathcal{E}_{f^\alpha}\right)\right) = \mathcal{O}(\alpha). \tag{5.4}$$

We recall that $\mathcal{E}_{f^\alpha} \to \mathcal{E}\text{xp}\widetilde{\lambda}$ as $\alpha \to 0$. Letting $\alpha \to 0$ in (5.4) leads to (ii). The entropy decay is obtained by taking the limit $\alpha \to 0$ in (4.3). □

From now on, we drop the tilda and identify $\lambda$ to $\widetilde{\lambda}$. As in the case of the Quasi-Quantum SHE model, it is interesting to expand the Quantum SHE model in powers of $\hbar$ up to second order terms. We recall that $\Lambda = L + \hbar^2 L^{(2)} + \mathcal{O}(\hbar^4)$ where $L = p \cdot \nabla_x - \nabla_x V \cdot \nabla_p$ is the classical transport operator and $L^{(2)} = (1/24)\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3}$. However, unlike in the case of the

Quasi-Quantum SHE model, here not only $\Lambda$ depends on $\hbar$, but also $\mathcal{E}\mathrm{xp}\lambda$. After [18], the quantum exponential of any function $f(x,p)$ can be written

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\mathrm{xp}f &= \exp f\left[1+\hbar^2\mathcal{T}f+\mathcal{O}(\hbar^4)\right] && (5.5)\\ \mathcal{T}f &= \frac{1}{8}(\nabla_x^{\otimes 2}f:\nabla_p^{\otimes 2}f-\nabla_x\nabla_p f:\nabla_p\nabla_x f+\frac{1}{3}(\nabla_x^{\otimes 2}f:\nabla_p f\nabla_p f\\ &\qquad -2\nabla_x\nabla_p f:\nabla_p f\nabla_x f+\nabla_p^{\otimes 2}f:\nabla_x f\nabla_x f)). && (5.6)\end{aligned}$$

Therefore, the QSHE model is formally approached, up to second order terms, by

$$\begin{aligned}&N(\varepsilon)\partial_t F-N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(L\left(\frac{1}{\nu}L(F)\right)\right)+\hbar^2N(\varepsilon)\partial_t\left[\mathcal{P}\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right]\\ &-\hbar^2N(\varepsilon)\mathcal{P}\left[\left(L\left(\frac{1}{\nu}L^{(2)}\right)+L^{(2)}\left(\frac{1}{\nu}L\right)\right)(F)-L\left(\frac{1}{\nu}L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right]=0\end{aligned} \tag{5.7}$$

where we have set $F=\exp\lambda$.

From now on, we assume that $\nu$ is a constant coefficient. Using the computations already performed to prove Lemma 3.7, we obtain

$$\begin{aligned}&N(\varepsilon)\partial_t F-\frac{4\pi}{\nu}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}F\right)+\hbar^2N(\varepsilon)\partial_t\left[\mathcal{P}\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right]\\ &-\frac{4\pi\hbar^2}{24\nu}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)+\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2F\right)\right\}\\ &+\frac{\hbar^2N(\varepsilon)}{\nu}\mathcal{P}\left[L\left(L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right]=0.\end{aligned}$$

Note that this equation is similar to the QQSHE$_2$ equation (3.17), enriched with additional second order terms due to the expansion of the quantum exponential $\mathcal{E}\mathrm{xp}$. The explicit form of these terms is given in Appendix B.

# Appendix

## A The QQSHE$_2$ model

In the sequel, the following identities are needed ($a$ denotes a fourth order tensor and the Einstein convention is used) :

$$\mathcal{P}(1)=1,\qquad \mathcal{P}(p)=0,\qquad \mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right)(\varepsilon)=\frac{2\varepsilon}{3}\delta, \tag{A.1}$$

$$\left(\mathcal{P}\left(p^{\otimes 4}\right)::a\right)(\varepsilon)=\frac{(2\varepsilon)^2}{15}\left(a_{i,i,j,j}+a_{i,j,i,j}+a_{i,j,j,i}\right) \tag{A.2}$$

where $\delta$ denotes the second order tensor the components of which are $\delta^i_j$ ($\delta^i_j$ is the Kronecker symbol). No confusion should arise with the Dirac measure $\delta$. The trace of any second order tensor $\mathcal{G}$ is denoted by $\mathrm{Trace}\,\mathcal{G}$. We recall that we note $\tilde{\nabla} = \nabla_x - \nabla_x V \partial_\varepsilon$.

We first compute the term $\mathcal{P}\left(L(L^2F)\right)$, where $F$ depends on $p$ only through the kinetic energy $|p|^2/2$. Obviously then, $\nabla_p F = p\partial_\varepsilon F$. Then :

$$\begin{aligned}
\nabla_p^{\otimes 3} F &= \nabla_p \otimes \left[\nabla_p \otimes (p\,\partial_\varepsilon F)\right] \\
&= \nabla_p \otimes \left[\delta\,\partial_\varepsilon F + p \otimes p\,\partial_\varepsilon^2 F\right] \\
&= (2\delta \otimes p + p \otimes \delta)\ \partial_\varepsilon^2 F + p^{\otimes 3}\,\partial_\varepsilon^3 F
\end{aligned}$$

and, since $\nabla_x^{\otimes 3} V$ is a symmetric tensor, we have :

$$\begin{aligned}
\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3} F &= 3\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots p \otimes \delta\,\partial_\varepsilon^2 F + \nabla_x^{\otimes 3} V \vdots p^{\otimes 3}\,\partial_\varepsilon^3 F \\
&= 3p \cdot \nabla_x\left(\Delta V\right)\partial_\varepsilon^2 F + \nabla_x^{\otimes 3} V \vdots p^{\otimes 3}\,\partial_\varepsilon^3 F
\end{aligned} \tag{A.3}$$

since $\mathcal{G} : \delta = \mathrm{Trace}\,(\mathcal{G})$ for any second order tensor. Now, apply $L$ to $\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3} F$. First, by (A.3),

$$p \cdot \nabla_x(\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3} F) = p^{\otimes 2} : \nabla_x\left(\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right) + p^{\otimes 4} :: \nabla_x\left(\nabla_x^{\otimes 3} V \partial_\varepsilon^3 F\right) \tag{A.4}$$

(where :: denotes the fourth order tensor product) and, on the other hand,

$$\begin{aligned}
\nabla_x V \cdot \nabla_p\left(\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3} F\right) &= 3\nabla_x V \nabla_x(\Delta V) : \nabla_p\left(p\partial_\varepsilon^2 F\right) + \nabla_x V \nabla_x^{\otimes 3} :: \nabla_p\left(p^{\otimes 3}\partial_\varepsilon^3 F\right) \\
= 3\nabla_x V \nabla_x(\Delta V) : \left(\delta\partial_\varepsilon^2 F + p^{\otimes 2}\partial_\varepsilon^3 F\right) &+ \nabla_x V \nabla_x^{\otimes 3} V :: \left[\left(\delta p^{\otimes 2} + 2p^{\otimes 2}\delta\right)\partial_\varepsilon^3 F + p^{\otimes 4}\partial_\varepsilon^4 F\right].
\end{aligned} \tag{A.5}$$

We recall that $N(\varepsilon) = 4\pi\sqrt{2\varepsilon}$ and that, for any function $f(p)$ and any function $\phi$ independent of $p$ or depending on $p$ only through the energy $|p|^2/2$, we have $\mathcal{P}(f\phi) = \mathcal{P}(f)\phi$. Based on this, the projection on $\mathcal{E}$ takes the form :

$$\begin{aligned}
N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(p \cdot \nabla_x(\nabla_x^{\otimes 3} V \vdots \nabla_p^{\otimes 3} F)\right)(\varepsilon) &= N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(3p^{\otimes 2}\right) : \nabla_x\left(\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right) \\
&\quad + N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(p^{\otimes 4}\right) :: \nabla_x\left(\nabla_x^{\otimes 3} V \partial_\varepsilon^3 F\right) \\
&= 4\pi\left\{(2\varepsilon)^{3/2}\nabla_x \cdot \left(\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right) + \frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x \cdot \left(\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^3 F\right)\right\} \\
&= 4\pi\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\nabla_x \cdot \left\{\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\left(\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right)\right\}
\end{aligned}$$

according to (A.4) (we have used (A.1) and (A.2)), and, following (A.5) :

$$\begin{aligned}
N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(\nabla_x V\cdot\nabla_p(\nabla_x^{\otimes 3}V\vdots\nabla_p^{\otimes 3}F)\right)(\varepsilon) &= N(\varepsilon)\left\{3\nabla_x V\nabla_x(\Delta V):\left(\delta\partial_\varepsilon^2 F+\mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right)\partial_\varepsilon^3 F\right)\right.\\
&\qquad\left.+\nabla_x V\nabla_x^{\otimes 3}V::\left[\left(\delta\mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right)+2\mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right)\delta\right)\partial_\varepsilon^3 F+\mathcal{P}\left(p^{\otimes 4}\right)\partial_\varepsilon^4 F\right]\right\}\\
&= 4\pi\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left\{(2\varepsilon)^{3/2}\nabla_x V\cdot\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F+\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x V\cdot\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^3 F\right\}\\
&= 4\pi\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\nabla_x V\cdot\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left\{\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right\}
\end{aligned}$$

where we have used (A.1), (A.2) and the symmetries of $\nabla_x^3 V$. Therefore,

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(L\left(L^{(2)}F\right)\right)(\varepsilon)=\frac{4\pi}{24}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\tilde{\nabla}\cdot\left\{\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\partial_\varepsilon^2 F\right\}.$$

Let's turn to $\mathcal{P}(L^{(2)}(LF))$. First, note that, for any vector $\mathcal{G}(x,\varepsilon)$ depending only on the position and the energy (such as $\tilde{\nabla}F$ and its derivatives with respect to $\varepsilon$), one can write

$$\nabla_p\left(p\cdot\mathcal{G}\right)=\mathcal{G}+p(p\cdot\partial_\varepsilon\mathcal{G}). \tag{A.6}$$

This will be useful in the following computations.

We start from $LF=p\cdot\tilde{\nabla}F$ and apply $\nabla_p^{\otimes 3}$. Using (A.6), this gives

$$\begin{aligned}
\nabla_p^{\otimes 3}\left(p\cdot\tilde{\nabla}F\right) &= \nabla_p^{\otimes 2}\left(\tilde{\nabla}F+p\left(p\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)\right)\\
&= \nabla_p\left(p\,\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)+\nabla_p\left(\delta\left(p\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)\right)+\nabla_p\left(p\,\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)+\nabla_p\left(p^{\otimes 2}\left(p\cdot\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\right)\right)\\
&= 3\delta\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F+3p^{\otimes 2}\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F+(2\delta p+p\delta)\left(p\cdot\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\right)+p^{\otimes 3}\left(p\cdot\partial_\varepsilon^3\tilde{\nabla}F\right).
\end{aligned}$$

Using the symmetry of the third order tensor $\nabla_x^{\otimes 3}V$, we get :

$$\begin{aligned}
24L^{(2)}\left(LF\right) &= 3\,\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\cdot\nabla_x\left(\Delta V\right)+3\,p^{\otimes 2}:\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\nabla_x\left(\Delta V\right)\\
&\qquad+3\,\nabla_x^{\otimes 3}V\vdots p^{\otimes 2}\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F+p^{\otimes 4}::\nabla_x^{\otimes 3}V\partial_\varepsilon^3\tilde{\nabla}F.
\end{aligned}$$

Reminding (A.1) and (A.2), we have

$$\begin{aligned}
24\mathcal{P}\left(L^{(2)}\left(LF\right)\right) &= N(\varepsilon)\left(3\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right)+3N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right):\left(\nabla_x\left(\Delta V\right)\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\right)\\
&\quad+3N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(p^{\otimes 2}\right)\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\vdots\nabla_x^{\otimes 3}V+N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(p^{\otimes 4}\right)::\partial_\varepsilon^3\tilde{\nabla}F\nabla_x^{\otimes 3}V\\
&= 4\pi\left\{3(2\varepsilon)^{1/2}\nabla_x\left(\Delta V\right)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F+(2\varepsilon)^{3/2}\left(2\,\nabla_x\left(\Delta V\right)\cdot\partial_\varepsilon^2\tilde{\nabla}F\right)+\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\left(\tilde{\nabla}\left(\Delta V\right)\cdot\partial_\varepsilon^3\tilde{\nabla}F\right)\right\}
\end{aligned}$$

which finally gives

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(L^{(2)}\left(LF\right)\right)(\varepsilon)=\frac{4\pi}{24}\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}\left(\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{5}\nabla_x(\Delta V)\cdot\partial_\varepsilon\tilde{\nabla}F\right\}.$$

# B The QSHE$_2$ model

Let us note $\lambda = \ln F$ as in Theorem 5.1. The function $\lambda$ is a function of $x$ and $\varepsilon$ only. We shall identify the functions $(x,p) \to \lambda(x,|p|^2/2)$ and $\lambda$ when no confusion arises. Then, for $f(x,p) = \lambda(x,|p|^2/2)$, formula (5.6) can be rewritten as

$$\begin{aligned}\mathcal{T}\lambda(x,p) &= \frac{1}{8}\Big\{ \Delta\lambda\partial_\varepsilon\lambda + p^{\otimes 2} : \left(\nabla_x^{\otimes 2}\lambda\partial_\varepsilon^2\lambda - \nabla_x\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)\nabla_x\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)\right) \\ &+\frac{1}{3}\left[p^{\otimes 2} : \left(\nabla_x^{\otimes 2}\lambda\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)^2 - \partial_\varepsilon\left(\nabla_x\lambda\nabla_x\lambda\right)\partial_\varepsilon\lambda + \nabla_x\lambda\nabla_x\lambda\partial_\varepsilon^2\lambda\right) + |\nabla_x\lambda|^2\partial_\varepsilon\lambda\right]\Big\}. \qquad \text{(B.1)}\end{aligned}$$

Note that, according to (B.1), $\mathcal{T}\lambda$ can be written as

$$\frac{1}{8}\left(\mathcal{I} + p^{\otimes 2} : \mathcal{J}\right) \qquad \text{(B.2)}$$

where

$$\mathcal{I} = \Delta\lambda\ \partial_\varepsilon\lambda + \frac{1}{3}|\nabla_x\lambda|^2\,\partial_\varepsilon\lambda \qquad \text{(B.3)}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{J} &= \nabla_x^{\otimes 2}\lambda\,\partial_\varepsilon^2\lambda - \nabla_x\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)\nabla_x\left(\partial_\varepsilon\lambda\right) \\ &+\frac{1}{3}\left[\nabla_x^{\otimes 2}\lambda\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)^2 - \partial_\varepsilon\left(\nabla_x\lambda\nabla_x\lambda\right)\partial_\varepsilon\lambda + \nabla_x\lambda\nabla_x\lambda\,\partial_\varepsilon^2\lambda\right]. \qquad \text{(B.4)}\end{aligned}$$

The expression of the trace of the second order tensor $\mathcal{J}$ will be useful in the sequel :

$$\text{Trace}\,\mathcal{J} = \Delta\lambda\,\partial_\varepsilon^2\lambda - |\nabla_x\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)|^2 + \frac{1}{3}\left(\Delta\lambda\left(\partial_\varepsilon\lambda\right)^2 - \partial_\varepsilon\left(|\nabla_x\lambda|^2\right)\partial_\varepsilon\lambda + |\nabla_x\lambda|^2\partial_\varepsilon^2\lambda\right) \qquad \text{(B.5)}$$

The terms to compute are $\mathcal{P}\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)$ and $\mathcal{P}\left(L\left(L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right)$. Since $F$ is a function of the energy only, the first term is equal to $F\,\mathcal{P}\left(\mathcal{T}(\ln F)\right)$.

### Computation of $N\,F\,\mathcal{P}\left(\mathcal{T}(\ln F)\right)$

Here, we only have to project Eq. (B.1). Using formulas (A.1) and (A.2), this equation becomes (we recall that $N(\varepsilon) = 4\pi(2\varepsilon)^{1/2}$) :

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}(\mathcal{T}\lambda) = \frac{4\pi}{8}\left(\sqrt{2\varepsilon}\,\mathcal{I} + \frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\ \text{Trace}\,\mathcal{J}\right)$$

where Trace $\mathcal{J}$ is explicited in (B.5).

### Computation of $N\,\mathcal{P}\left(L\left(L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right)$

We first give some expressions valid for any function $G$ and tensor $\mathcal{G}$ that depend only on the energy. It has been seen that $LG = p\cdot\tilde{\nabla}G$. Then a straightforward computation yields

$$L(LG) = L(p\cdot\tilde{\nabla}G) = p^{\otimes 2} : \tilde{\nabla}^{\otimes 2}G - \nabla_x V\cdot\tilde{\nabla}G$$

where $L(p) = -\nabla_x V$ has been used. Recalling that $N(\varepsilon) = 4\pi\sqrt{2\varepsilon}$, formula (A.1) gives

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(L\left(LG\right)\right) = 4\pi\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\nabla}(G) - \sqrt{2\varepsilon}\nabla_x V\cdot\tilde{\nabla}G\right)$$

and, since $\tilde{\nabla}\left(2\varepsilon\right)^{(k+1)/2} = (k+1)\left(2\varepsilon\right)^{k/2}\nabla_x V$,

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}\left(L\left(LG\right)\right) = 4\pi\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}G\right). \tag{B.6}$$

On the other hand, since $L$ is a first order tensor, we have

$$L\left(L\left(p^{\otimes 2}:\mathcal{G}\right)\right) = L\left(L\left(p^{\otimes 2}\right)\right):\mathcal{G} + 2\,L\left(p^{\otimes 2}\right):L\left(\mathcal{G}\right) + p^{\otimes 2}:L\left(L\left(\mathcal{G}\right)\right).$$

Obviously, $Lp = -\nabla_x V$ and $L\left(\nabla_x V\right) = p\cdot\nabla_x\left(\nabla_x V\right)$. Therefore,

$$L\left(L\left(p^{\otimes 2}\right)\right) = L\left(-\nabla_x V p - p\nabla_x V\right) = \left[-p\cdot\nabla_x\left(\nabla_x V\right)\right]p - p\left[p\cdot\nabla_x\left(\nabla_x V\right)\right] + 2\,\nabla_x V\nabla_x V. \tag{B.7}$$

Since $\mathcal{G}$ depends only on the energy, we have $L\mathcal{G} = p\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathcal{G}\right)$ and, consequently,

$$L\left(L\left(\mathcal{G}\right)\right) = \left(p^{\otimes 2}:\tilde{\nabla}^{\otimes 2}\right)\mathcal{G} - \nabla_x V\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathcal{G}\right). \tag{B.8}$$

Therefore, reminding that $L(p) = -\nabla_x V$, $L\mathcal{G} = p\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathcal{G}\right)$, that $\mathcal{G}$ is symmetric, and using (B.7) and (B.8), we obtain

$$\begin{aligned} L\left(L\left(p^{\otimes 2}:\mathcal{G}\right)\right) &= \left[-\left(2\,p\cdot\nabla_x\left(\nabla_x V\right)\right)p + 2\,\nabla_x V\,\nabla_x V\right]:\mathcal{G} + 4\left(-\nabla_x V\right)p:p\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathcal{G}\right) \\ &\quad + p^{\otimes 4}::\tilde{\nabla}^{\otimes 2}\mathcal{G} - p^{\otimes 2}:\nabla_x V\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathcal{G}\right), \end{aligned}$$

which, according to (A.1) and (A.2), yields

$$\begin{aligned} N(\varepsilon)\mathcal{P}\left[L\left(L\left(p^{\otimes 2}:\mathcal{G}\right)\right)\right] &= 4\pi\left\{2\left(-\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\nabla_x^{\otimes 2}V + \sqrt{2\varepsilon}\nabla_x V\,\nabla_x V\right):\mathcal{G}\right. \\ &\quad + 4\,\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\left(-\nabla_x V\,\tilde{\nabla}\right):\mathcal{G} + \frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{15}\left(\tilde{\nabla}\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathrm{Trace}\,\mathcal{G}\right) + 2\,\tilde{\nabla}^{\otimes 2}:\mathcal{G}\right) \\ &\quad \left. -\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\nabla_x V\cdot\tilde{\nabla}\left(\mathrm{Trace}\,\mathcal{G}\right)\right\} \end{aligned}$$

Finally, using again $\tilde{\nabla}\left(2\varepsilon\right)^{(k+1)/2} = (k+1)\left(2\varepsilon\right)^{k/2}\nabla_x V$, we have

$$N(\varepsilon)\mathcal{P}\left[L\left(L\left(p^{\otimes 2}:\mathcal{G}\right)\right)\right] = 4\pi\left\{2\tilde{\nabla}^{\otimes 2}:\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{15}\mathcal{G} + \tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}\mathrm{Trace}\,\mathcal{G}\right)\right\}. \tag{B.9}$$

Let us go back to the computation of $N\,\mathcal{P}\left(L\left(L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right)$. Taking for $G$ the function $F\,\mathcal{I}$ and, for $\mathcal{G}$, the second order tensor $F\,\mathcal{J}$, equations (B.6) and (B.9) allow to conclude that

$$\begin{aligned} N\,\mathcal{P}\left(L\left(L\left(F\mathcal{T}(\ln F)\right)\right)\right) &= \frac{4\pi}{8}\left\{\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}\left(F\,\mathcal{I}\right)\right) + 2\tilde{\nabla}^{\otimes 2}:\frac{(2\varepsilon)^{5/2}}{15}\left(F\,\mathcal{J}\right)\right. \\ &\quad \left. +\tilde{\nabla}\cdot\left(\frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{3}\tilde{\nabla}\left(F\,\mathrm{Trace}\,\mathcal{J}\right)\right)\right\}. \end{aligned}$$

since $F\mathcal{T}(\ln F) = F\,\mathcal{I} + p^{\otimes 2}:F\,\mathcal{J}$ by (B.2).

# Bibliographie


[1] M. G. Ancona, *Diffusion-Drift modeling of strong inversion layers*, COMPEL **6** (1987), pp. 11-18.

[2] M. G. Ancona, G. J. Iafrate, *Quantum correction of the equation of state of an electron gas in a semiconductor*, Phys. Rev. B **39** (1989), pp. 9536-9540.

[3] P. N. Argyres, *Quantum kinetic equations for electrons in high electric and phonon fields*, Physics Lett. A **171** (1992), p. 373.

[4] A. Arnold, J. Lopez, P. Markowich and J. Soler, *An analysis of quantum Fokker-Planck models : A Wigner function approach*, to appear in Revista Mat. Iber.

[5] R. Balian, From microphysics to macrophysics, Springer, 1982.

[6] J. Barker and D. Ferry, *Self-scattering path-variable formulation of high-field, time-dependent, quantum kinetic equations for semiconductor transport in the finite collision-duration regime*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979), pp. 1779-1781.

[7] N. Ben Abdallah and P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Maths. Phys. **37** (1996), pp. 3306-3333.

[8] N. Ben Abdallah, P. Degond, A. Mellet, F. Poupaud, *Electron transport in semiconductor supperlattices*, Quart. Appl. Math. **61** (2003), no. 1, pp. 161-192.

[9] J. P. Bourgade, *On Spherical Harmonics Expansion type models for electron-phonon collisions*, Math. Methods Appl. Sci. **26** (2003), no.3, pp. 247-271.

[10] J. P. Bourgade, A. Mellet and L. Mieussens, *Numerical comparison between two Spherical Harmonics Expansion models and a kinetic equation*, to appear in Math. Comp. Modelling.

[11] E. Bringuier, *Kinetic theory of high-field transport in semiconductors*, Phys. Rev. B **57** (1998), pp. 2280-2285.

[12] E. Bringuier, *Nonequilibrium statistical mechanics of drifting particles*, Phys. Rev. E **61** (2000), pp. 6351-6358.

[13] F. A. Buot and K. L. Jensen, *Lattice Weyl-Wigner formulation of exact manybody quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices*, Phys. Rev. B **42** (1990), p. 9429.

[14] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled Spherical Harmonics Expansion model*, Math. Models Methods Appl. Sci. **11** (2001), no. 5, pp. 903-932.

[15] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, vol 15, AMS and International Press (2000), pp. 77-110.

[16] P. Degond and A. El Ayyadi, *A coupled Schrödinger Drift-Diffusion model for quantum semiconductor device simulations*, J. Comput. Phys. **181** (2002), pp. 222-259.

[17] P. Degond, V. Latocha, L. Guarrigues and J. P. Boeuf, *Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters*, Transp. Theory and Stat. Phys **27** (1998), pp. 203-221.

[18] P. Degond, F. Méhats and C. Ringhofer, *On Quantum Energy Transport and Quantum Drift-Diffusion models*, submitted for publication.

[19] P. Degond, F. Méhats and C. Ringhofer, *Quantum hydrodynamic models derived from the entropy principle*, to appear in Contemp. Math.

[20] P. Degond and C. Ringhofer, *Quantum moment hydrodynamics and the entropy principle*, J. Stat. Phys **112** (2003), pp. 587-628.

[21] P. Degond and C. Ringhofer, *A note on binary quantum collision operators conserving mass momentum and energy*, C. R. Acad. Sci. Paris **336** (2003), no. 9, pp. 785-790.

[22] J. L. Delcroix and A. Bers, Physique des plasmas, CNRS éditions, Paris, 1994.

[23] B. C. Eu and K. Mao, *Quantum kinetic theory of irreversible tbermodynamics : low-density gases*, Phys. Rev. E **50** (1994), p. 4380.

[24] M. V. Fischetti, *Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli Master equation*, J. Appl. Phys. **83** (1998), pp. 270-291.

[25] W. R. Frensley, *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, Rev. Mod. Phys. **62** (1990), p. 745.

[26] F. Fromlet, P. Markowich and C. Ringhofer, *A Wignerfunction Approach to Phonon Scattering*, VLSI Design **9** (1999), pp. 339-350.

[27] S. Gallego, F. Méhats, *Numerical approximation of a quantum drift-diffusion model*, to appear in C. R. Acad. Sci. Paris.

[28] S. Gallego, F. Méhats, *Entropic discretization of a quantum drift-diffusion model*, submitted for publication.

[29] C. Gardner and C. Ringhofer, *The Chapman-Enskog Expansion and the Quantum Hydrodynamic Model for Semiconductor Devices*, VLSI Design **10** (2000), pp. 415–435.

[30] I. Gasser and A. Jüngel, *The quantum hydrodynamic model for semiconductors in thermal equilibrium*, Z. Angew. Math. Phys. **48** (1997), no. 1, pp. 45–59.

[31] I. Gasser and P. A. Markowich, *Quantum Hydrodynamics, Wigner Transforms and the Classical Limit*, Asympt. Analysis, **14** (1997), no. 2, pp. 97-116.

[32] I. Gasser, P. Markowich and C. Ringhofer, *Closure conditions for classical and quantum moment hierarchies in the small temperature limit*, Transp. Th. Stat. Phys. **25** (1996), no. 3-5, pp. 409–423.

[33] A. Gnudi, D. Ventura, G. Baccarani and F. Odeh, *Two-dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonic expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron. **36** (1993), pp. 575-581.

[34] T. Goudon and A. Mellet, *Discrete version of the SHE asymptotics : multigroup neutron transport equations*, J. Math. Phys. **43** (2002), no. 6, pp. 3232-3260.

[35] T. Kato, Perturbation theory for linear operators, Springer, Berlin Heidelberg New-York, 1995

[36] N. C. Kluksdahl, A. M. Kriman, D. K. Ferry and C. Ringhofer, *Self-consistent study of the resonant-tunneling diode*, Phys. Rev. B **39** (1989), p. 7720.

[37] I. B. Levinson, *Translational invariance in uniform fields and the equation for the density matrix in the Wigner representation*, Soviet Physics JETP **30** (1976), p. 362.

[38] P. L. Lions and T. Paul, *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Mat. Iberoamericana **9** (1993), no. 3, pp. 553-618.

[39] A. Majorana, *Space homogeneous solutions of the Boltzmann equation describing electron-phonon interactions in semiconductors*, Transp, Theory and Statist. Phys. **20** (1991), pp. 261-279.

[40] P. A. Markowich and C. Schmeiser, *The drift-diffusion limit for electron-phonon interaction in semiconductors*, Math. Models and Methods in Applied Sciences, **7** (1997), pp. 707-729.

[41] P. A. Markowich, F. Poupaud and C. Schmeiser, *Diffusion approximation of nonlinear electron phonon collision mechanisms*, RAIRO Modél. Math. Anal. Numér. **29** (1995), no. 7, pp. 857-869.

[42] P. A. Markowich, C. Ringhofer and C. Schmeiser, Semiconductor Equations, Springer, Wien, 1990.

[43] P. Mounaix, O. Vanbésien and D. Lippens, *Effect of cathode spacer layer on the current voltage characteristics of resonant tunneling diodes*, Appl. Phys. Let. **57** (1990), p. 1517.

[44] E. Polizzi, N. Ben Abdallah, *Self-consistent three dimensional models for quantum ballistic transport in open systems*, Phys. Rev B **66** (2002), p. 245301.

[45] E. Prugovecki, *A quantum mechanical Boltzmann equation for one-particle $\Gamma_s$ distribution functions*, Physica **91 A** (1978), p. 229.

[46] Yu. P. Raizer, Gas discharge Physics, Springer, Berlin, 1997.

[47] K. Yosida, Functional Analysis, Springer, Berlin Heidelberg New-York, 1995.

# Chapitre 4

# Sur des modèles macroscopiques pour les collisions avec les phonons[1]

**Abstract :** In this paper, we give the rigorous derivation of a diffusion model for semiconductor devices, the starting point being a microscopic description of electron transport by means of a kinetic equation of Boltzmann type. The limit of a small mean free path at a large time leads to a diffusion equation of 'SHE' type (Spherical Harmonics Expansion). We deal with a collision operator that models interactions between electron and phonons. This induces a peculiar form for the diffusion tensor : electron-phonon collisions happen to be discontinuous in energy and inelastic, and, as a consequence, the diffusion tensor appears as an infinite dimensional matrix.

## 1 Introduction

The evolution of electrons in semiconductor devices can be described at a microscopic level through kinetic equations of Boltzmann type. To that purpose, one introduces the distribution function $f(x, v, t)$ of the electrons, where $x \in \mathbb{R}^3$ and $v \in \mathbb{R}^3$ are the electron position and velocity respectively, and $t > 0$ denotes the time, so that $f(x, v, t)dxdv$ is the number of electrons at time $t$ in an elementary phase-space volume $dxdv$. Then $f$ is given as the solution of the initial value problem :

$$\begin{cases} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E \cdot \nabla_v f = Q(f),\ x \in \mathbb{R}^3,\ v \in \mathbb{R}^3,\ t > 0 \\ f(x, v, 0) = f_I(x, v) \end{cases} \tag{1.1}$$

where $E = E(x, t)$ is a force field (assumed to be known) and $f_I$ an initial condition. The collision operator $Q(f)$ represents the interactions of the particles with the medium, namely, in our case, the collisions of electrons with phonons, which are a quantization of the lattice vibration in the semiconductor. Classically (see [16] for instance), in a low density case, this

[1] *On Spherical Harmonics Expansion type models for electron-phonon collisions*, Math. Methods Appl. Sci. **26** (2003), no.3, pp. 247-271.

operator is linear and can be written :

$$Q(f) = \int_{v' \in \mathbb{R}^3} [s(v', v)f(v') - s(v, v')f(v)]dv',$$
$$\text{with} \quad s(v, v') = \Phi(v, v')[(N_0 + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0) + N_0\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0)],$$

where $s(v', v)dv$ is the transition probability from velocity $v'$ to an elementary volume $dv$ about $v$, $N_0$ is the phonon occupation number given by the Bose-Einstein statistics : $N_0 = (e^{\hbar\omega_0/k_BT} - 1)^{-1}$, so that $N_0 + 1 = e^{\hbar\omega_0/k_BT}N_0$, $k_B$ is Boltzmann's constant, $T$ is the lattice temperature, $\hbar$ is the reduced Planck constant, $\omega_0$ is a constant approximately equal to the (variable) pulsation of the semiconductor lattice vibrations, so that $\hbar\omega_0$ stands for the phonon energy, $\varepsilon = \frac{|v|^2}{2}$ is the kinetic energy of an electron of velocity $v$.

For the sake of simplicity, we suppose that $k_BT = 1$ and we introduce the following transition rate :

$$\Psi(v, v') = N_0\Phi(v, v')e^{\frac{\varepsilon+\varepsilon'}{2}}e^{\frac{\hbar\omega_0}{2}}.$$

The collision operator is finally written :

$$Q(f) = \int_{v' \in \mathbb{R}^3} \Psi(v, v')[e^{-\varepsilon}f(v') - e^{-\varepsilon'}f(v)][\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0)]dv'.$$

Our aim is to derive from a rescaled version of equation (1.1) a macroscopic model of SHE type :

$$\begin{cases} N(\varepsilon)\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J = N(\varepsilon)\tilde{Q}(F) \\ J(\varepsilon) = -\sum_k D_k(\varepsilon)\tilde{\nabla}F(\varepsilon + k\hbar\omega_0), \end{cases}$$

where $J(x, \varepsilon, t)$ is the current of electrons of energy $\varepsilon > 0$, $N(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}$, $F(x, \varepsilon, t)$ is the density of electrons of energy $\varepsilon$, $\tilde{\nabla} = \nabla_x + E\partial/\partial\varepsilon$ is a generalized gradient in the position-energy space, $\tilde{Q}(F)$ is an operator depending on the collision operator $Q$, and $(D_k(\varepsilon))_k$ is a sequence of diffusion tensors.

Such diffusion asymptotics have been widely investigated in the recent past. The mathematical theory goes back to [4], where the general method relies on an expansion of the solution in powers of a small parameter. This approach has been extensively used in diffusion limits of kinetic equations since Hilbert and Chapman-Enskog (see [7]), in particular in semiconductor physics (see [17], [10] and [3]), but also in neutron transport (as in [13] or [2]) and in radiative transfer (see [1]).

In the case of electron-phonon interactions in semiconductor devices, diffusion limits leading to equations depending on the energy have been considered in [15] by means of an explicit diagonalization of the collision operator in terms of spherical harmonics. The mathematical analysis of this scattering operator was developed in [14].

Spherical Harmonics Expansion (SHE) models appeared to be a good compromise between a very accurate description of physical phenomena by kinetic models and less numerically expensive macroscopic models such as Drift-Diffusion or Energy-Transport models. Whereas kinetic equations deal with functions of seven variables (six variables in the phase space, and time) and classical macroscopic models deal with functions of four variables (three in the

position space, and time), SHE models introduce an intermediate one dimensional variable replacing the velocity and which appears as the kinetic energy associated to the velocity of a particle. This makes of SHE models quite reliable models at a rather low numerical cost. (For a formal derivation of SHE models and their situation in a hierarchy of models from the Boltzmann equation to Drift-Diffusion equations, see [3] and [9], for their application to semiconductor physics, see e.g. [5] and [6].) A second step in the mathematical approach to these models was to attempt to take the inelastic nature of common collisions into account. This was made on both formal and rigorous points of view in [8] and led to 'coupled SHE models', i.e. models of SHE type with a diffusion matrix coupling different levels of energy - and thus rendering the non locality in energy of inelastic collisions.

Our purpose is to realize the derivation of a coupled SHE model in the case of electron-phonon collisions. More precisely, we suppose that the typical energy of electrons is not too large compared with the phonon energy $\hbar\omega_0$. This is the case when the potential difference applied to the semiconductor is low enough. Then the influence of interactions with phonons on the energy of the electrons cannot be neglected. It follows from the non-classical nature of these collisions that the energy transfers are discontinuous : the interaction with a phonon of energy $\hbar\omega_0$ swaps the electron energy $\varepsilon$ for the energy $\varepsilon' = \varepsilon + \hbar\omega_0$ or $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar\omega_0$ whether the electron absorbs or emits a phonon respectively. This induces the main difference between the collision operator we will consider and that studied in [8]. The shape of the diffusion matrix in the current equation is somewhat modified. In [8] the diffusion equation was of the form :

$$J(\varepsilon) = -D(\varepsilon)\tilde{\nabla}F(\varepsilon) - \int_0^\infty \Delta(\varepsilon, \varepsilon')\tilde{\nabla}F(\varepsilon')d\varepsilon',$$

so that the current $J(\varepsilon)$ depended on the value of the generalized gradient of $F$ at any energy level $\varepsilon' > 0$, while, in our case, it will take the following form :

$$J(\varepsilon) = -\sum_k D_k(\varepsilon)\tilde{\nabla}F(\varepsilon + k\hbar\omega_0). \tag{1.2}$$

The series introduces the coupling of the energy level $\varepsilon$ at which we evaluate $J$ with all the energies (and only these) that could be reached by absorbing or emitting phonons of energy $\hbar\omega_0$. We recover the non locality of the electron-phonon interaction, the current $J$ at the energy level $\varepsilon$ being influenced by the gradient of the density $F$ at each level of energy $\varepsilon + k\hbar\omega_0$ ($k \in \mathbb{Z}$ s.t. $\varepsilon + k\hbar\omega_0 > 0$).

Section 2 is devoted to general properties of the collision operator. We introduce two splittings of this operator into 'elastic' and 'inelastic' parts, which will not lead to the same physical and mathematical characteristics. In section 3, we give a formal derivation of the SHE model. We will see that, combining the two splittings given in section 2 the right way gives rise to SHE type models with energy coupling. Namely, the current equation will be proven to take the form (1.2). The computation of the diffusion coefficient (which is in this case an infinite dimensional matrix) will make necessary to solve an auxiliary problem. This task will be achieved in section 4. It will appear as the inversion of an infinite tridiagonal matrix on an appropriate space of sequences : this is the consequence of the discretization in energy of the operator $Q$,

resulting from the discontinuous nature of electron-phonon collisions. Section 5 will be dedicated to the rigorous proof (in a force-free case) of the convergence of solutions of a rescaled Boltzmann equation to the solutions of the SHE set of equations. Existence and uniqueness for these asymptotic equations will be proven. The central point in this section will thus be to establish theorem 5.10. The dual structure of the current equation will be underlined.

# 2 Two elastic/inelastic splittings

In this section, we propose to split the collision operator into two parts : one part will be refered to as the 'elastic' part - it does not change the number of particles at a given energy level -, while the other one will be called 'inelastic'. According to [8], it is useful to consider the convex combination of two splittings in order to obtain more physical accuracy. Indeed, we will see in sections 3 and 4 that by using such a combined operator we get a coupled (in energy) current equation in a diffusion limit, while considering only the operator arising in the first splitting (see below the splitting $Q^0$-$Q^0_{in}$) would lead to a 'classical' uncoupled SHE system (as in [3] for instance).

Since we want to base these splittings on energy considerations, it is relevant to interpret the velocity of a particle in terms of its energy. This is why we introduce the following change of variables in $\mathbb{R}^3$ :

$$\begin{cases} \omega = \frac{v}{|v|}, \\ \varepsilon = \frac{|v|^2}{2}, \\ v = |v|\omega = \sqrt{2\varepsilon}\omega = N(\varepsilon)\omega, \end{cases}$$

in order to have, for any integrable function $\varphi(v)$ :

$$\int_{v\in\mathbb{R}^3} \varphi(v)dv = \int_{\varepsilon>0}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} \varphi(\varepsilon,\omega)d\omega N(\varepsilon)d\varepsilon.$$

In this change of variables, $\omega$ represents the angular part of the velocity, and $\varepsilon$ the energy of an electron in the frame of a parabolic band diagram approximation. In the remainder of our work, we will assume the cross section $\Psi$ to be symmetric. More accurately, we suppose that :

$$\Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon',\omega') = \Psi(\varepsilon',\omega';\varepsilon,\omega) = \Psi(\varepsilon',\omega;\varepsilon,\omega').$$

We first give a series of notations :

$\forall f = f(\omega)$, $\langle f\rangle$ will denote the angular average of $f$ on the sphere $\mathbb{S}^2$ ($\langle f\rangle = \frac{1}{4\pi}\int_{\omega\in\mathbb{S}^2} f(\omega)d\omega$) ;

$N = N(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon}$ ; $M = e^{-\varepsilon}$ ; $\varepsilon_+ = \varepsilon + \hbar\omega_0$, $\varepsilon_- = \varepsilon - \hbar\omega_0$ ; $\delta'_+ = \delta(\varepsilon' - \varepsilon_+)$, $\delta'_- = \delta(\varepsilon' - \varepsilon_-)$ ;

$\mathbb{I} = \mathbb{I}_{(\hbar\omega_0\,;\,+\infty)}(\varepsilon)$, where $\mathbb{I}_A$ denotes the indicatrix function of the set $A$ ;

$\sigma_+ = \sigma_+(\varepsilon;\omega,\omega') = \Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon_+,\omega')N(\varepsilon_+)$ ; $\sigma_- = \sigma_-(\varepsilon;\omega,\omega') = \Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon_-,\omega')N(\varepsilon_-)\mathbb{I}$ ;

$\forall f = f(\varepsilon)$, $f' = f(\varepsilon')$, $f_+ = f(\varepsilon_+)$, $f_- = f(\varepsilon_-)$, except, of course, for $f = \sigma$ and for $f = \delta$ where the notations are those given previously.

With these notations, the collision operator may formally be split into an elastic contribution $Q_{el}$ and an inelastic contribution $Q_{in}$ :

$$\begin{aligned}
Q^0(f)(v) &= Q^0_{el}(f)(v) = \int_{\omega'\in\mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon_+} + \sigma_- e^{-\varepsilon_-})[f(\varepsilon,\omega') - f(\varepsilon,\omega)]d\omega' \\
Q^0_{in}(f)(v) &= \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega'\in\mathbb{S}^2} \Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon',\omega')N'[e^{-\varepsilon}f(\varepsilon',\omega') - e^{-\varepsilon'}f(\varepsilon,\omega')] \\
&\qquad [\delta'_+ + \delta'_-]d\varepsilon' d\omega' \\
\text{or}\quad Q^1(f)(v) &= Q^1_{el}(f)(v) = \int_{\omega'\in\mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon}[f(\varepsilon_+,\omega') - f(\varepsilon_+,\omega)] \\
&\qquad +\sigma_- e^{-\varepsilon}[f(\varepsilon_-,\omega') - f(\varepsilon_-,\omega)])d\omega' \\
Q^1_{in}(f)(v) &= \int_{\varepsilon'>0}\int_{\omega'\in\mathbb{S}^2} \Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon',\omega')N'[e^{-\varepsilon}f(\varepsilon',\omega) - e^{-\varepsilon'}f(\varepsilon,\omega)] \\
&\qquad [\delta'_+ + \delta'_-]d\varepsilon' d\omega'
\end{aligned}$$

We will see that $Q^0$ has good mathematical properties (positivity for instance) that we lose when considering the operator $Q^1$. On the other hand, the operators $Q^0$ and $Q^1$ do not keep the same information on the levels of energy (while $Q^0$ operates on $f(v)$ only through the angular part $\omega$ of the velocity $v$ and keeps the energy constant, $Q^1$ also operates on the energy level $\varepsilon$), so that we can hope to get a coupled-in-energy model by studying a convex combination of these operators : $(1-\alpha)Q^0 + \alpha Q^1$, and we can expect to keep the good mathematical properties of $Q^0$ if we take $\alpha$ small enough.

We introduce two additional hypotheses on the cross-section $\Psi$ :

**Hypothesis (H1)** There exists two positive constants $C_0$ and $C_1$ and a function of $\varepsilon$ only $\varphi(\varepsilon)$ such that :

$$C_0\varphi\varphi' e^{\frac{\varepsilon+\varepsilon'+\hbar\omega_0}{2}} \le \Psi(\varepsilon,\omega;\varepsilon',\omega') \le C_1\varphi\varphi' e^{\frac{\varepsilon+\varepsilon'+\hbar\omega_0}{2}}.$$

**Hypothesis (H2)** There exists a positive constant $\underline{\varphi}$ such that :

$$\varphi \ge \underline{\varphi} > 0 \quad \text{and} \quad \varphi N \ge \underline{\varphi} > 0.$$

In addition, we underline that if the cross-section $\Psi$ is bounded from above, the operators $Q^0$ and $Q^1$ are bounded in $L^2_M$. From now on, we make this hypothesis of boundedness.

We note : $L^2_M = L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$ and $L^2 = \mathcal{L}^2$. Now, we give a few classical properties of the elastic operator $Q^0$ :

**Lemma 2.1** *(i) For any functions $f(\varepsilon,\omega)$ and $g(\varepsilon,\omega)$, we have :*

$$\begin{aligned}
\int_{v\in\mathbb{R}^3} Q^0(f)(v)g(v)M^{-1}dv = \int_{v\in\mathbb{R}^3} Q^0(g)(v)f(v)M^{-1}dv = -\frac{1}{2}\int_{\varepsilon>0,\,\omega,\omega'\in\mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon_+} + \sigma_- e^{-\varepsilon_-}) \\
\times[f(\varepsilon,\omega') - f(\varepsilon,\omega)][g(\varepsilon,\omega') - g(\varepsilon,\omega)]M^{-1}d\omega' d\omega d\varepsilon
\end{aligned} \tag{2.1}$$

*As a consequence, $-Q^0$ is a self-adjoint positive operator on the Hilbert space $L^2_{M^{-1}}$ :*

$$-\int_{v\in\mathbb{R}^3} Q^0(f)f\frac{dv}{M} = \frac{1}{2}\int_{\varepsilon>0,\,\omega,\omega'\in\mathbb{S}^2} (\sigma_+ e^{-\varepsilon_+} + \sigma_- e^{-\varepsilon_-})[f(\varepsilon,\omega') - f(\varepsilon,\omega)]^2 d\omega' d\omega N\frac{d\varepsilon}{M} \ge 0, \tag{2.2}$$

*the null-space of $Q^0$ and its orthogonal in $L^2_{M^{-1}}$ are given by :*

$$N(Q^0) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3, M^{-1}dv) : f(\varepsilon,\omega) = f(\varepsilon)\}, \tag{2.3}$$
$$N(Q^0)^\perp = \{f \in L^2(\mathbb{R}^3, M^{-1}dv) : \langle f\rangle(\varepsilon) = 0 \ \forall \varepsilon > 0\}. \tag{2.4}$$

*(ii) If we suppose (H1) and (H2), we have the following estimates on $Q^0$ :*

$$\forall f \in N(Q^0)^\perp, \ -\int_{v\in\mathbb{R}^3} Q^0(f) f M^{-1} dv \geq 8\pi C_0 \underline{\varphi}^2 \int_{v\in\mathbb{R}^3} f^2(v) M^{-1} dv \tag{2.5}$$

*Therefore, the range $R(Q^0)$ of $Q^0$ is closed and, by the self-adjointness of $Q^0$, $R(Q^0) = N(Q^0)^\perp$.*
*(iii) For all functions $f(\varepsilon,\omega)$ and $g(\varepsilon)$, we have $Q^0(gf) = gQ^0(f)$.*

**Remark :** In fact, all the properties we gave in the functional space $L^2_{M^{-1}}$ would still be valid in $L^2$, but, as we shall see, it is not the case for the analogous statements for the elastic operator $Q^1$ for which we shall have to work in the weighted space $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$.
**Proof:** (2.1) and (2.2) follow from a simple computation, (2.3) and (2.4) are obvious consequences of (2.2). Now, we prove (2.5). For any $f \in N(Q^0)^\perp$, according to (H1), we have (omitting the dependences on $\varepsilon$ for $f$) :

$$\begin{aligned} -\int Q^0(f) f M^{-1} dv &= \frac{1}{2}\int (\sigma_+ e^{-\varepsilon_+} + \sigma_- e^{-\varepsilon_-})[f(\omega') - f(\omega)]^2 M^{-1} N d\varepsilon d\omega' d\omega \\ &\geq \frac{1}{2} C_0 \int (\varphi\varphi_+ N_+ + \varphi\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I})[f(\omega')^2 + f(\omega)^2] M^{-1} N d\varepsilon d\omega' d\omega \\ &\quad - C_0 \int (\varphi\varphi_+ N_+ + \varphi\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I}) f(\omega') f(\omega) M^{-1} N d\varepsilon d\omega' d\omega. \end{aligned} \tag{2.6}$$

But, since $C_0(\varphi\varphi_+ N_+ + \varphi\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I}) =: K(\varepsilon)$ is independent of $\omega$, we have :

$$-\int C_0(\varphi\varphi_+ N_+ + \varphi\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I}) f(\omega') f(\omega) N \frac{d\varepsilon}{M} d\omega' d\omega = -(4\pi)^2 \int_{\varepsilon>0} K(\varepsilon)\langle f\rangle\langle f\rangle N \frac{d\varepsilon}{M} = 0$$

for $f \in N(Q^0)^\perp$. Therefore, by (2.6) :

$$-\int Q^0(f) f M^{-1} dv \geq 4\pi C_0 \int_{\mathbb{R}^3} (\varphi\varphi_+ N_+ + \varphi\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I}) f^2(v) M^{-1} dv, \tag{2.7}$$

which proves (2.5) under hypothesis (H2).

The closedness of $R(Q^0)$ is a straightforward consequence of (2.5). □

We can establish some analogous results for $Q^1$. The following expression shows that $Q^1$ is self adjoint in $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$ since $\Psi N N'[\delta_+ + \delta_-]$ is symmetric in $\varepsilon$,$\varepsilon'$ :

$$-\int Q^1(f) g \frac{dv}{M} = \frac{1}{2}\int \Psi N N'[\delta_+ + \delta_-][f(\varepsilon',\omega') - f(\varepsilon',\omega)] \times [g(\varepsilon,\omega') - g(\varepsilon,\omega)] d\omega' d\varepsilon' d\omega d\varepsilon. \tag{2.8}$$

We also have $N(Q^0) \subset N(Q^1)$. At last, we underline that in general we **do not have** $Q^1(gf) = gQ^1(f)$ for $f(\varepsilon, \omega)$ and $g(\varepsilon)$. This is again the same remark on $Q^1$ : it operates on the energy level while $Q^0$ did not.

There is no obvious positivity property for $-Q^1$. Meanwhile, we can establish a coercivity inequality for a convex combination $Q^\alpha = (1-\alpha)Q^0 + \alpha Q^1$ if $\alpha$ is not too large. More precisely, the following lemma stands for $Q^\alpha$ :

**Lemma 2.2** *(i) $Q^\alpha$ is self-adjoint in the weighted space $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$.*
*(ii) If hypotheses (H1), (H2) and*

**Hypothesis (H3)** $\alpha \in \left[0, \frac{C_0}{C_0+C_1}\right)$

*stand, we have :*

$$\forall f \in N(Q^0)^\perp, \; -\int Q^\alpha(f) f \frac{dv}{M} \;\; \geq \;\; 2C_\alpha \underline{\varphi}^2 \parallel f \parallel^2_{L^2_M}, \tag{2.9}$$

*with $C_\alpha = 4\pi C_0(1 - \alpha\frac{C_0+C_1}{C_0})$. Therefore the null spaces of $Q^\alpha$ and $Q^0$ coincide, the range of $Q^\alpha$ is closed and, by the self-adjointness of $Q^\alpha$, $R(Q^\alpha) = N(Q^\alpha)^\perp = N(Q^0)^\perp$.*
*(iii) The restriction of $-Q^\alpha$ to $N(Q^\alpha)^\perp$ (also denoted by $-Q^\alpha$) is an invertible linear operator from $N(Q^\alpha)^\perp$ onto $N(Q^\alpha)^\perp$. The inverse operator (that we note $(-Q^\alpha)^{-1}$) is bounded from $N(Q^\alpha)^\perp$ onto $N(Q^\alpha)^\perp$, of operator norm $\leq (2C_\alpha\underline{\varphi}^2)^{-1}$.*

**Proof:** Point (i) follows from the self-adjointness of $Q^0$ and $Q^1$ in $L^2(\mathbb{R}^3; M^{-1}dv)$.

We can imagine that the estimate (2.9) on $Q^\alpha$ is based on the analogous statement on $Q^0$ established in lemma 2.1. Meanwhile, we have to control $Q^1$ if we want its lack of coercivity to be compensated by the positivity of $Q^0$. Hypothesis (H3) naturally arises when we try to obtain this compensation.

First, we notice that we also can express the product $\int Q^1(f)f$ in terms of $\varepsilon$ and $\varepsilon_+$ only :

$$\begin{aligned} & \int \Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega') N' \delta_+ [f(\varepsilon', \omega') - f(\varepsilon', \omega)][f(\varepsilon, \omega') - f(\varepsilon, \omega)] N d\omega' d\varepsilon' d\omega d\varepsilon \\ = & \int \Psi(\varepsilon', \omega; \varepsilon, \omega') N \delta_- [f(\varepsilon, \omega') - f(\varepsilon, \omega)][f(\varepsilon', \omega') - f(\varepsilon', \omega)] N' d\omega' d\varepsilon' d\omega d\varepsilon, \end{aligned}$$

so that, by (2.8) :

$$-\int Q^1(f) f \frac{dv}{M} = \int \sigma_+ [f(\varepsilon_+, \omega') - f(\varepsilon_+, \omega)][f(\varepsilon, \omega') - f(\varepsilon, \omega)] N d\omega' d\omega d\varepsilon$$

for instance. We now give a bound on this product : $\forall f \in N(Q^0)^\perp, \langle f \rangle = 0$ and consequently :

$$\left| -\int Q^1(f) f \frac{dv}{M} \right| \leq \int |\sigma_+| (|f(\varepsilon_+, \omega') f(\varepsilon, \omega')| + |f(\varepsilon_+, \omega) f(\varepsilon, \omega)| + |f(\varepsilon_+, \omega') f(\varepsilon, \omega)| +$$

$$|f(\varepsilon_+, \omega) f(\varepsilon, \omega')|) N d\omega' d\omega d\varepsilon$$

$$
\begin{aligned}
&\leq 8\pi C_1 e^{\frac{\hbar\omega_0}{2}} \int_{\varepsilon>0} \frac{\varphi\varphi_+ N_+}{(MM_+)^{\frac{1}{2}}} \int_{\mathbb{S}^2} |f(\varepsilon_+,\omega')f(\varepsilon,\omega')| d\omega' N d\varepsilon \text{ by (H1), using } \langle f\rangle = 0,\\
&= 8\pi C_1 \int_{\varepsilon>0}\int_{\mathbb{S}^2} (\varphi N\varphi_+ N_+)^{\frac{1}{2}} \left|\frac{f(\varepsilon,\omega')}{M^{\frac{1}{2}}}\right| (\varphi N\varphi_+ N_+ e^{\hbar\omega_0})^{\frac{1}{2}} \left|\frac{f(\varepsilon_+,\omega')}{M_+^{\frac{1}{2}}}\right| d\omega' d\varepsilon\\
&\leq 4\pi C_1 \left(\int \varphi N\varphi_+ N_+ \frac{f(\varepsilon_+,\omega)^2}{M_+} e^{\hbar\omega_0} d\omega d\varepsilon + \int \varphi N\varphi_+ N_+ \frac{f(\varepsilon,\omega)^2}{M} d\omega d\varepsilon\right)\\
&= 4\pi C_1 \int_{\mathbb{R}^3} (\varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I} + \varphi_+ N_+) f(v)^2 \varphi M^{-1} dv.
\end{aligned}
$$

Then, under hypothesis (H1) and using the estimate (2.7) on $Q^0$, we have for $Q^\alpha$ :

$$
\forall f \in N(Q^0)^\perp, -\int_{\mathbb{R}^3} Q^\alpha(f) f M^{-1} dv \geq 4\pi C_0 (1 - \alpha \frac{C_0 + C_1}{C_0}) \int_{\mathbb{R}^3} (\varphi_+ N_+ + \varphi_- N_- e^{\hbar\omega_0}\mathbb{I}) f^2 \varphi M^{-1} dv,
$$

which, under hypotheses (H2) and (H3), leads to (2.9). Consequently, the range of $Q^\alpha$ is closed and the boundedness of $(-Q^\alpha)^{-1}$ follows straightforwardly. □

This lemma ends this brief study of two elastic-inelastic splittings of the collision operator.

# 3 Formal approach to the diffusion approximation

We now consider the rescaled Boltzmann equation (with a classical diffusion scaling) :

$$
\partial_t f^\eta + \frac{1}{\eta}\left[v \cdot \nabla_x + E \cdot \nabla_v\right] f^\eta = \frac{1}{\eta^2}\left(Q^\alpha(f^\eta) + \eta^2 Q^\alpha_{in}(f^\eta)\right) \tag{3.1}
$$

with $Q^\alpha_{in} = (1-\alpha)Q^0_{in} + \alpha Q^1_{in}$. Thus, we assume that elastic collisions dominate inelastic ones at order $1/\eta^2$. We want to study the asymptotic behaviour of the solutions $f^\eta$ of this equation as $\eta \to 0$. This approach will formally give rise to a set of diffusion equations to be viewed as a SHE system. In fact, this formal derivation will not be completed in this section since an 'auxiliary problem' - the resolution of wich will be postponed to section 4 - will arise during this study.

We assume that hypotheses (H1), (H2), and (H3) hold. Let us suppose that $f^\eta \to f^0$ in a smooth way. Then, if we multiply (3.1) by $\eta^2$ and take the limit $\eta \to 0$, we obtain $Q^\alpha(f^0) = 0$. According to lemma 2.2, this means that $f^0$ is a function of energy only (in the velocity space) : $f^0(x,v,t) = f^0(x,\varepsilon,t)$. Therefore, it is quite natural to expect that $f^\eta$ be mainly given by a function of $\varepsilon$ only at order 0 in $\eta$, for instance the macroscopic quantity $\langle f^\eta\rangle$. We set : $F^\eta = \langle f^\eta\rangle$. So we expect that there exists a function $g^\eta(x,v,t)$ such that :

$$
f^\eta(x,v,t) = F^\eta(x,\varepsilon,t) + \eta g^\eta(x,v,t).
$$

After introducing the current of energy $J^\eta = \frac{1}{\eta} N(\varepsilon)\langle v f^\eta\rangle$, (so that $J^\eta = N(\varepsilon)\langle v g^\eta\rangle$), we integrate (3.1) on a sphere of constant energy. It leads to the following continuity equation (we recall that $Q^\alpha(f^\eta)$ is of angular average equal to zero) :

$$
N(\varepsilon)\partial_t F^\eta + \tilde{\nabla} \cdot J^\eta = N(\varepsilon)\langle Q^\alpha_{in}(f^\eta)\rangle,
$$

with $\tilde{\nabla} = \nabla_x + E\partial/\partial\varepsilon$. Indeed, we have :

$$\int_{\mathbb{S}^2} (v \cdot \nabla_x + E \cdot \nabla_v)(F^\eta + \eta g^\eta) d\omega = \int_{\mathbb{S}^2} v d\omega \cdot \tilde{\nabla} F^\eta + \eta \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{S}^2} v g^\eta d\omega + \eta E \cdot \int_{\mathbb{S}^2} \nabla_v g^\eta d\omega$$
$$= \frac{4\pi\eta}{N} \nabla_x \cdot J^\eta + \eta E \cdot \int_{\mathbb{S}^2} \nabla_v g^\eta d\omega \text{ for } \int_{\mathbb{S}^2} v d\omega = 0.$$

Moreover, for any test function $\chi(\varepsilon)$, a straightforward computation yields :

$$\int_{\varepsilon>0} \chi \int_{\mathbb{S}^2} \nabla_v g^\eta d\omega N(\varepsilon) d\varepsilon = 4\pi \int_{\varepsilon>0} \chi \frac{\partial J^\eta}{\partial \varepsilon} d\varepsilon,$$

which finally proves : $1/4\pi\eta \int (v \cdot \nabla_x + E \cdot \nabla_v) f^\eta d\omega N = \tilde{\nabla} \cdot J^\eta$.

Next, we have to find a current equation giving a relation between $J^\eta$ and the density $F^\eta$ :

$$\begin{aligned} J^\eta(\varepsilon_0) &= N(\varepsilon_0)\langle (g^\eta v)(\varepsilon_0, .)\rangle = (4\pi)^{-1} \int_{v\in\mathbb{R}^3} g^\eta (M\delta(\varepsilon(v) - \varepsilon_0)v) M^{-1} dv \\ &= (4\pi)^{-1} \int_{v\in\mathbb{R}^3} g^\eta (-Q^\alpha) \left[(-Q^\alpha)^{-1}(M\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)v)\right] M^{-1} dv \\ &= (4\pi)^{-1} \int_{v\in\mathbb{R}^3} -Q^\alpha(g^\eta)(-Q^\alpha)^{-1}(M\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)v) M^{-1} dv \end{aligned}$$

by the self-adjointness of $Q^\alpha$ in $L^2_M$. We underline that applying $(-Q^\alpha)^{-1}$ to $M\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)v$ is not justified up to now. We temporarily admit that there exists $\theta^{\varepsilon_0}$ a (measure) solution of the equation :

$$-Q^\alpha(\theta^{\varepsilon_0}) = MN\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)\omega. \tag{3.2}$$

This existence result is not immediate and will be proven in section 4. Then, by (3.1), we have, for any test function $\eta\chi(v)$ :

$$\eta \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t f^\eta \chi dv + \int_{\mathbb{R}^3} (v \cdot \nabla_x + E \cdot \nabla_v) f^\eta \chi dv = \frac{1}{\eta} \int_{\mathbb{R}^3} Q^\alpha(f^\eta)\chi dv + \eta \int_{\mathbb{R}^3} Q^\alpha_{in}(f^\eta)\chi dv$$

and thus :

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q^\alpha(g^\eta)\chi dv = \int_{\mathbb{R}^3} v \cdot \tilde{\nabla} F^\eta \chi dv + \mathcal{O}(\eta).$$

Therefore : $J^\eta(\varepsilon_0) = -\int_{\varepsilon>0} \langle M^{-1}\theta^{\varepsilon_0}(\varepsilon, \omega) \otimes v\rangle \tilde{\nabla} F^\eta(\varepsilon) N(\varepsilon) d\varepsilon + \mathcal{O}(\eta)$.

Taking the limit $\eta \to 0$ finally gives a system of coupled equations of SHE type :

$$N\partial_t F + \tilde{\nabla} \cdot J = N\langle Q^\alpha_{in}(f^0)\rangle \tag{3.3}$$

$$J(\varepsilon) = -\int_{\varepsilon'>0} D(\varepsilon, \varepsilon')\tilde{\nabla} F(\varepsilon') d\varepsilon' \tag{3.4}$$

where $J = \lim J^\eta,\ F = \lim F^\eta$, and :

$$D(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{N'^2}{M'} \langle \theta^\varepsilon(\varepsilon', \omega) \otimes \omega\rangle. \tag{3.5}$$

It only remains to prove the existence of $\theta^\varepsilon$, which will be achieved in section 4. We underline that the diffusion matrix $D(\varepsilon', \varepsilon)$ has general properties (symmetry, positivity) that will be given in section 5 (see lemma 5.5).

# 4 The diffusion tensor : an infinite dimensional matrix

This section is devoted to the calculation of the diffusion tensor. We have seen in section 3 that in order to give a rigorous meaning to equation (3.5), we have to solve (3.2), or, more generally :

$$-Q^\alpha(f) = g \text{ with } g = \psi(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0), \text{ and } \langle\psi\rangle = 0, \tag{4.1}$$

with $\varepsilon_0 > 0$ fixed. The diffusion coefficient in the current equation will then appear as an infinite dimensional matrix : this matrix will couple any two levels of energy separated by a gap of energy $k\hbar\omega_0$ with $k \in \mathbb{Z}$; this is a consequence of both the inelastic nature of $Q^1$ and the discontinuity in energy that appears in electron-phonon collisions.

According to the right hand side of (4.1) and to the computation of $Q^\alpha(\delta(\varepsilon-\varepsilon_0))$, it is quite natural to search $f$ as an infinite sum of Dirac measures such as :

$$f(\varepsilon,\omega) = \sum_{k\geq -k_0(\varepsilon_0)} f_k(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \text{ with } \langle f_k\rangle = 0,\ f_k \in L^2(\mathbb{S}^2) \tag{4.2}$$

where $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + k\hbar\omega_0$, and $k_0(\varepsilon_0) = -\mathbb{E}(1 - \varepsilon_0/\hbar\omega_0)$ is the only integer such that $0 < \varepsilon_0 - k_0(\varepsilon_0)\hbar\omega_0 \leq \hbar\omega_0$ ($\mathbb{E}$ denotes the integer part function). The restriction to integers superior to $-k_0$ is necessary to deal only with positive values of $\varepsilon_k$, which are the only physically meaningful ones. To the same purpose we introduce the symbol $\mathbb{1}$ : it will denote $\mathbb{I}_{[k\geq -k_0(\varepsilon_0)+1]}$.

With these notations, we have $f(\varepsilon_+,\omega) = \sum_{k\geq -k_0} f_{k+1}\delta(\varepsilon-\varepsilon_k)$ and $f(\varepsilon_-,\omega) = \sum_{k\geq -k_0} f_{k-1}$ $\delta(\varepsilon-\varepsilon_k)\mathbb{1}$, and the actions of operators $Q^0$ and $Q^1$ on such a function $f$ are respectively written :

$$\begin{aligned}
(4\pi)^{-1}Q^0(f) &= \sum_{k\geq -k_0} [\langle(\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_{k+1} + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_{k-1}\mathbb{1})f_k\rangle \\
&\quad - \langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_{k+1} + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_{k-1}\mathbb{1}\rangle f_k]\,\delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \qquad (4.3)\\
(4\pi)^{-1}Q^1(f) &= \sum_{k\geq -k_0} [(\langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k f_{k+1}\rangle + \langle\Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}f_{k-1}\rangle) \\
&\quad - (\langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k\rangle f_{k+1} + \langle\Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}\rangle f_{k-1})]\,\delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \qquad (4.4)
\end{aligned}$$

where we have used the following notations : $\forall g(\varepsilon)$ except $\Psi$, $g_k = g(\varepsilon_k)$, and $\Psi_{j,k} = \Psi(\varepsilon_j,\omega;\varepsilon_k,\omega')$.

We now see that our problem will be solved by identifying terms in $\delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ for the same $k$ in equation $-Q^\alpha(f) = \psi(\omega)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$, which can come into view as the inversion of an infinite tridiagonal matrix, the diagonal terms of which come from (4.3) and the infra- and supradiagonal terms of which come from (4.4). Then, the following spaces of sequences appear as a suitable frame of work :

$$\begin{aligned}
L^2_{SN/M} &= \left\{(g_k)_{k\in\mathbb{N}} \in L^2(\mathbb{S}^2)^{\mathbb{N}} : \int_{\mathbb{S}^2}\sum_{k\geq -k_0} g_k^2\frac{N_k}{M_k}d\omega < \infty\right\},\\
L^{2,0}_{SN/M} &= \left\{(g_k)_{k\in\mathbb{N}} \in L^2_{SN/M} : \langle g_k\rangle = 0\,\forall k \geq -k_0\right\}.
\end{aligned}$$

We denote by $(f|g)_{SN/M}$ the inner product in $L^2_{SN/M}$ and by $\| g \|_{SN/M}$ the corresponding norm. We now precise the operator we have to invert in the space $L^{2,0}_{SN/M}$. We can express it as

a convex combination of two operators $A^0 : L^{2,0}_{SN/M} \to L^{2,0}_{SN/M}$ and $A^1 : L^{2,0}_{SN/M} \to L^{2,0}_{SN/M}$ that satisfy : $\forall f = (f_k)_k \in L^{2,0}_{SN/M}$

$$(A^0 f)_k = (\langle(\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_{k+1} + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_{k-1}\mathbb{1})f_k\rangle$$

$$- \langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_{k+1} + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_{k-1}\mathbb{1}\rangle\, f_k)_k$$

according to the k-th term of the sum (4.3), and

$$(A^1 f)_k = (\langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k f_{k+1}\rangle + \langle\Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}f_{k-1}\rangle)$$

$$-(\langle\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k\rangle\, f_{k+1} + \langle\Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}\rangle\, f_{k-1})_k$$

according to the k-th term of the sum (4.4). We naturally set $A^\alpha = (1-\alpha)A^0 + \alpha A^1$ in order to have $(4\pi)^{-1}Q^\alpha(f) = \sum_{k\geq -k_0}(A^\alpha f)_k\delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$. The following lemma proves that we can invert $A^\alpha$ in $L^{2,0}_{SN/M}$.

**Lemma 4.1** *(i) $A^\alpha$ is a self-adjoint operator in $L^2_{SN/M}$*
*(ii)If hypotheses (H1), (H2) and*

**Hypothesis (H4)** $\alpha \in \left[0, \frac{C_0}{C_0+e^{\hbar\omega_0}C_1}\right)$

*stand, we have $\forall f \in L^{2,0}_{SN/M}$,*

$$(-A^\alpha f|f)_{SN/M} \geq 2\tilde{C}_\alpha\underline{\varphi}^2 \parallel f \parallel^2_{SN/M}, \tag{4.5}$$

*with $\tilde{C}_\alpha = C_0\left(1 - \alpha\frac{C_0+e^{\hbar\omega_0}C_1}{C_0}\right)$ and therefore, under these assumptions, the null space $N(A^\alpha)$ in $L^{2,0}_{SN/M}$ is reduced to zero, the range $R(A^\alpha)$ is closed in $L^{2,0}_{SN/M}$ and thus we have (by self-adjointness) $R(A^\alpha) = N(A^\alpha)^\perp = L^{2,0}_{SN/M}$ (where the orthogonal was taken in $L^{2,0}_{SN/M}$).*
*(iii) Consequently, if hypotheses (H1), (H2) and (H4) are satisfied, $-A^\alpha$ is an invertible operator from $L^{2,0}_{SN/M}$ onto $L^{2,0}_{SN/M}$, the inverse operator $(-A^\alpha)^{-1}$ is bounded on $L^{2,0}_{SN/M}$ of operator norm $\leq (2\tilde{C}_\alpha\underline{\varphi}^2)^{-1}$.*

**Proof:** As in the case of operator $Q^\alpha$, the proof consists in giving a coercivity inequality on $A^0$ and controlling $|(A^1 f|f)|$ in order to obtain a coercivity estimate for the convex combination $A^\alpha$.

We begin with the estimate on $A^0$. We note : $c^0 = c^0(k;\omega,\omega') = \Psi_{k,k+1}(\omega,\omega')N_{k+1}M_{k+1} + \Psi_{k,k-1}(\omega,\omega')N_{k-1}M_{k-1}\mathbb{1}$. Throughout this proof, we shall use the convention : $\forall h(\omega), h' = h(\omega')$. Then, the self-adjointness of $A^0$ is given by : $2\times 4\pi(-A^0 f|g)_{SN/M} = \sum_{k\geq -k_0}\int c^0\,(f'_k - f_k)(g'_k - g_k)d\omega' d\omega\frac{N_k}{M_k}$, which in turn gives, for $g = f$ :

$$2\times 4\pi(-A^0 f|f)_{SN/M} = \sum_{k\geq -k_0}\int_{\omega,\,\omega'\in\mathbb{S}^2} c^0\,(f'_k - f_k)^2 d\omega' d\omega\frac{N_k}{M_k},$$

and, since $\langle f_k \rangle = 0\ \forall k$, we have, by hypothesis (H1) and remarking that $e^{\hbar\omega_0} > 1$ :

$$(-A^0 f|f)_{SN/M} \geq C_0 \sum_{k\geq -k_0} (\varphi_k\varphi_{k+1}N_{k+1} + \varphi_k\varphi_{k-1}N_{k-1}\mathbb{1}) \int_{\mathbb{S}^2} f_k^2 d\omega \frac{N_k}{M_k}. \tag{4.6}$$

Now, we turn our attention to the operator $A^1$ :

$$\begin{aligned}
4\pi(-A^1 f|g)_{SN/M} &= \sum_{k\geq -k_0} \int_{\omega,\,\omega'\in\mathbb{S}^2} \Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k(f'_{k+1} - f_{k+1})(g'_k - g_k) \\
&\quad + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}(f'_{k-1} - f_{k-1})(g'_k - g_k)d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k} \\
&= \sum_{k\geq -k_0} \int_{\omega,\,\omega'\in\mathbb{S}^2} \Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k(g'_{k+1} - g_{k+1})(f'_k - f_k) \\
&\quad + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}(g'_{k-1} - g_{k-1})(f'_k - f_k)d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k},
\end{aligned}$$

so that this operator is self adjoint in $L^{2,0}_{SN/M}$. We give the estimate on $A^1$ that will enable us to prove the coercivity of $A^\alpha$ :

$$\begin{aligned}
8\pi|(-A^1 f|f)| &= \Bigg| \sum_{k\geq -k_0} \int_{\omega,\,\omega'\in\mathbb{S}^2} \Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k(f'_{k+1} - f_{k+1})(f'_k - f_k) \\
&\qquad\qquad + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}(f'_{k-1} - f_{k-1})(f'_k - f_k)d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k} \Bigg| \\
&\leq \frac{1}{2} \sum_{k\geq -k_0} \int \big\{ \Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k(f'_{k+1} - f_{k+1})^2 + \Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k(f'_k - f_k)^2 \\
&\quad + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}(f'_{k-1} - f_{k-1})^2 + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1}(f'_k - f_k)^2 \big\}\, d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k} \\
&= \sum_{k\geq -k_0} \int (\Psi_{k,k+1}N_{k+1}M_k + \Psi_{k,k-1}N_{k-1}M_k\mathbb{1})(f'_k - f_k)^2 d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k} \\
&\leq C_1 \sum_{k\geq -k_0} \varphi_k(\varphi_{k+1}N_{k+1}e^{\hbar\omega_0} + \varphi_{k-1}N_{k-1}\mathbb{1}) \int (f'_k - f_k)^2 d\omega' d\omega \frac{N_k}{M_k} \text{ by (H1)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 8\pi C_1 \sum_{k\geq -k_0} \varphi_k(\varphi_{k+1}N_{k+1}e^{\hbar\omega_0} + \varphi_{k-1}N_{k-1}\mathbb{1}) \int f_k^2 d\omega \frac{N_k}{M_k} \text{ for } \langle f_k \rangle = 0 \\
&\leq 8\pi e^{\hbar\omega_0} C_1 \sum_{k\geq -k_0} \varphi_k(\varphi_{k+1}N_{k+1} + \varphi_{k-1}N_{k-1}\mathbb{1}) \int_{\mathbb{S}^2} f_k^2 d\omega \frac{N_k}{M_k}, \text{ since } 1 < e^{\hbar\omega_0}.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Consequently, we have the following coercivity inequality for $A^\alpha$ (by (4.6) and (4.7), under hypothesis (H1)) :

$$(-A^\alpha f|f)_{SN/M} \geq C_0(1 - \alpha\frac{C_0 + e^{\hbar\omega_0}C_1}{C_0}) \sum_{k\geq -k_0} \varphi_k(\varphi_{k+1}N_{k+1} + \varphi_{k-1}N_{k-1}\mathbb{1}) \int_{\mathbb{S}^2} f_k^2 d\omega \frac{N_k}{M_k},$$

which leads to (4.5) under assumptions (H2) and (H4).

Point (iii) follows as in lemma 2.2. □

**Remark :** We point out that hypothesis (H4) implies hypothesis (H3) since $e^{\hbar\omega_0} > 1$.

This lemma enables us to prove the following proposition :

**Proposition 4.2** *$\forall\varepsilon > 0, \forall\psi \in L^2(\mathbb{S}^2)$ such that $\langle\psi\rangle = 0$, there exists a unique sequence $(f_k)_k \in L^{2,0}_{SN/M}$ such that the function $f$ defined by (4.2) solves the equation (4.1).*

*Moreover, the diffusion tensor (3.5) takes the form*

$$D(\varepsilon,\varepsilon') = \frac{N'^2}{M'}\langle\theta^\varepsilon(\varepsilon',\omega)\otimes\omega\rangle, \tag{4.8}$$

*where $\theta^\varepsilon$ is the unique solution (of type (4.2) of equation (4.1) with $\psi = N(\varepsilon)M(\varepsilon)\omega$.*

*Equation (1.2) holds if we set*

$$D_k(\varepsilon) = \langle\theta^\varepsilon_k(\omega)\otimes\omega\rangle N(\varepsilon + k\hbar\omega_0)^2 M^{-1}(\varepsilon + k\hbar\omega_0),$$

*where $(\theta^\varepsilon_k)_k$ is such that $\theta^\varepsilon(\varepsilon',\omega) = \sum_{k\geq -k_0(\varepsilon)}\theta^\varepsilon_k(\omega)\delta(\varepsilon' - \varepsilon_k)$.*

**Proof:** The existence and uniqueness follow from lemma 4.1 (iii). One has just to consider $(f_k)_k = (-A^\alpha)^{-1}(\Psi))_k$ where the sequence $\Psi$ is given by $\Psi_{k_0(\varepsilon_0)} = \psi/4\pi$ and $\psi_k = 0$ if $k \neq k_0(\varepsilon_0)$.

Then the solution is written : $f(\varepsilon,\omega) = \sum_{k\geq -k_0(\varepsilon_0)} f_k(\omega)\delta(\varepsilon - (\varepsilon_0 + k\hbar\omega_0)\,)$.

Now, if we take for $\psi(\omega)$ the function : $N(\varepsilon_0)M(\varepsilon_0)\omega$, we call $\theta^{\varepsilon_0}(\varepsilon,\omega)$ the corresponding solution, with :

$$\theta^{\varepsilon_0}(\varepsilon,\omega) = \sum_{k\geq -k_0(\varepsilon_0)}\theta^{\varepsilon_0}_k(\varepsilon,\omega)\delta(\varepsilon - (\varepsilon_0 + k\hbar\omega_0)).$$

Then the diffusion matrix given in (3.5) takes the following form :

$$D(\varepsilon,\varepsilon') = \frac{N'^2}{M'}\sum_{k\geq -k_0(\varepsilon)}\langle\theta^\varepsilon_k(\omega)\otimes\omega\rangle\delta(\varepsilon' - (\varepsilon + k\hbar\omega_0)).$$

Then we obtain equation (1.2) by setting $D_k(\varepsilon) = \langle\theta^\varepsilon_k(\omega)\otimes\omega\rangle N(\varepsilon + k\hbar\omega_0)^2 M^{-1}(\varepsilon + k\hbar\omega_0)$. □

Therefore, the form of the diffusion tensor is the expected one. Nevertheless, we underline that, if the uniqueness was proven for the solutions of the auxiliary problem (4.1), it was only in a restricted class of solutions : those that can be written as a sum of Dirac measures. This is not a real problem, since we have seen in section 3 that all that was required was the existence of such a solution.

Proposition 4.2 makes the formal approach to the derivation complete. It remains to see in what sense this derivation can be made rigorous.

# 5 Rigorous approach to the diffusion approximation

We are now concerned with the rigorous asymptotic study of the solution $f^\eta$ of the rescaled Boltzmann equation :

$$\begin{cases} \partial_t f^\eta + \frac{1}{\eta} v \cdot \nabla_x f^\eta = \frac{1}{\eta^2} Q^\alpha(f^\eta) \\ f^\eta(t=0) = f_I^\eta, \end{cases} \tag{5.1}$$

where we have supposed $Q^\alpha_{in} = 0$ and $E = 0$.

The aim of this section is to prove the convergence theorem 5.10. The following proof if inspired from [8] : the approach developed in [8] relies on functional theoretic properties of the diffusion operator, which can be adapted to the present case.

We also improve the results of [8], following the work [11], and obtain regularity of the solution without additional hypothesis.

## 5.1 Convergence and continuity equation

Classical semigroup theory (see e.g. [12] and [18]) gives the following existence result for the initial vlaue problem (5.1).

**Lemma 5.1** *The problem (5.1) admits a unique solution $f^\eta(t,x,v) \in C^1((0,\infty); L^2(\mathbb{R}^6, M^{-1}dx\, dv)) \cap C^0((0,\infty); \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ where $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ denotes the domain of the differential operator $\mathcal{A} = \frac{1}{\eta} v \cdot \nabla_x - \frac{1}{\eta^2} Q^\alpha$ in $L^2(\mathbb{R}^6, M^{-1}dxdv)$, i.e. $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}dxdv) : v \cdot \nabla_x f \in L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}dx\, dv\}$ .*

Furthermore, the solutions $f^\eta$ satisfy the following weak form of equation (5.1) ($\forall T > 0$) :

$$\begin{aligned} -\int_0^T \int f^\eta \partial_t \varphi M^{-1} dxdvdt - \frac{1}{\eta} \int_0^T \int f^\eta v \cdot \nabla_x \varphi M^{-1} dxdvdt \\ -\frac{1}{\eta^2} \int_0^T \int Q^\alpha \varphi f^\eta M^{-1} dxdvdt = \int f_I^\eta \varphi(0) M^{-1} dxdv \end{aligned} \tag{5.2}$$

$$\begin{aligned} \forall \varphi \in \mathcal{S} \quad = \quad & \big\{\psi \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}dxdv)) : \partial_t \psi \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}dxdv)), \\ & v \cdot \nabla_x \psi \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}^6; M^{-1}dxdv))\big\} \text{ s.t. } \varphi(T) = 0. \end{aligned}$$

As we have seen in section 3, one can expect the sequence $(f^\eta)_\eta$ to tend to the density $F(x,\varepsilon,t)$, while $(\frac{N}{\eta}\langle v f^\eta\rangle)_\eta$ should approach the current $J(x,\varepsilon,t)$. To give a rigorous meaning to this, we have to consider peculiar weighted functional spaces. We note : $\mathbb{L}^2_\phi = L^2(\mathbb{R}^6; \phi\ dvdx)$, and $\mathcal{L}^2_\phi = L^2(\mathbb{R}^3 \times (0;\infty); \phi\ d\varepsilon dx)$, where $\phi$ is the weight.

We now assume the family of initial values $(f_I^\eta)_\eta$ to be bounded in $\mathbb{L}^2_{M^{-1}}$. Then the next proposition holds :

**Proposition 5.2** *Up to the extraction of subsequences, we have :*

$$f^\eta \rightharpoonup F \qquad L^\infty(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) \text{ - weak *}, \tag{5.3}$$
$$F^\eta \rightharpoonup F \qquad L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) \text{ - weak *}, \tag{5.4}$$
$$J^\eta \rightharpoonup J \qquad L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3 \text{ - weak *}, \tag{5.5}$$

*and the asymptotic density $F$ and current $J$ satisfy the following weak form of the continuity equation (3.3) :*

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} NF\partial_t\Phi + J\cdot\nabla_x\Phi\frac{d\varepsilon}{M}dxdt + \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} NF_I\Phi_{|t=0}\frac{d\varepsilon}{M}dx = 0\ \forall\ \Phi\in\mathcal{S}\ s.t.\ \Phi(T)=0, \tag{5.6}$$

*where $F_I$ is the limit as $\eta\to 0$ of the (bounded) sequence $(F_I^\eta)_\eta = (\langle f_I^\eta\rangle)_\eta$.*

**Proof:** We formally multiply (5.1) by $f^\eta/M$ and integrate :

$$\int_0^t\int_{\mathbb{R}^6_{x,v}}\left(\partial_t f^\eta f^\eta M^{-1} + \frac{1}{\eta}v\cdot\nabla_x f^\eta M^{-1}\right)dvdxdt - \frac{1}{\eta^2}\int_0^t\int_{\mathbb{R}^6_{x,v}} Q^\alpha f^\eta f^\eta M^{-1}dvdxdt = 0$$

$$\text{i.e. } \parallel f^\eta(t)\parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} - \frac{2}{\eta^2}\int_0^t\int_{\mathbb{R}^6_{x,v}} Q^\alpha f^\eta f^\eta M^{-1}dvdxdt = \parallel f_I^\eta\parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} \tag{5.7}$$

for $\int v\cdot\nabla_x f^\eta f^\eta M^{-1}dxdvdt = 0$ by oddity. Therefore, using the coercivity inequality (2.9), we have the following estimates :

$$\parallel f^\eta\parallel^2_{L^\infty(0,\infty\,;\,\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} \le \parallel f_I^\eta\parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}};\quad \parallel P^\perp f^\eta\parallel^2_{L^2(0,t\,;\,\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} \le \frac{\eta^2}{4C_\alpha\underline{\varphi}^2}\parallel f_I^\eta\parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}},$$

where $P^\perp$ denotes the orthogonal projection on $N(Q^\alpha)^\perp$. By the uniform boundedness of $(f_I^\eta)_\eta$, these estimates respectively lead to :

$$\begin{aligned} & f^\eta(x,t,v) \rightharpoonup f(t,x,v) \qquad L^\infty(0,T\,;\,\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) \text{ - weak *},\\ \text{and}\qquad & f(t,x,v) = \tilde{F}(t,x,\varepsilon)\in L^2(0,T\,;\,\mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) \end{aligned}$$

since $P^\perp f^\eta\to 0$ strongly in $L^2(0,T\,;\,\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$. Moreover, remarking that $\parallel F^\eta\parallel_{L^\infty(0,T\,;\,\mathcal{L}^2_{NM^{-1}})}\le\parallel f^\eta\parallel_{L^\infty(0,T\,;\,\mathbb{L}^2_{M^{-1}})}$ yields (5.4). One can easily check that $F=\tilde{F}$ and thus obtain (5.3).

On the other hand, we have to study the convergence of the current $J^\eta = \frac{N}{\eta}\langle f^\eta v\rangle$. We have :

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0}|J^\eta|^2M^{-1}N^{-3}d\varepsilon dx &\le \frac{1}{(4\pi\eta)^2}\int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0}\left(\left|\int_{\mathbb{S}^2} f^\eta v d\omega\right|\right)^2 N^2M^{-1}N^{-3}d\varepsilon dx\\ &\le \frac{1}{4\pi\eta^2}\int_{\mathbb{R}^6_{x,v}}(f^\eta)^2M^{-1}dvdx \le \parallel f_I^\eta\parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}}\le C.\end{aligned}$$

Thus, $J^\eta$ is bounded in $L^\infty(0,\infty\,;\,\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3$ and there exists $J$ s.t. (5.5) holds.

In addition, the boundedness of $f_I^\eta$ implies that $F_I^\eta \to F_I \quad \mathcal{L}^2_{NM^{-1}}$ - weak, where $F_I^\eta = \langle f_I^\eta \rangle$. Using the weak form (5.2) of equation (5.1) with $\Phi = \Phi(x, \varepsilon, t)$ we have :

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0,\, \omega\in\mathbb{S}^2} f^\eta d\omega \partial_t \Phi(t,x,\varepsilon) N \frac{d\varepsilon}{M} dxdt + \frac{1}{\eta} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0,\, \omega\in\mathbb{S}^2} v f^\eta d\omega \cdot \nabla_x \Phi N \frac{d\varepsilon}{M} dxdt$$
$$+ \frac{1}{\eta^2} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0,\, \omega\in\mathbb{S}^2} Q(f^\eta) d\omega \Phi N M^{-1} d\varepsilon dxdt + \int_{\mathbb{R}^6_{x,v}} f_I^\eta \Phi(0) M^{-1} dvdx = 0$$

$$\text{i.e.} \quad \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} N F^\eta \partial_t \Phi M^{-1} d\varepsilon dxdt + \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} J^\eta \cdot \nabla_x \Phi M^{-1} d\varepsilon dxdt$$
$$+ \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} N F_I^\eta \Phi(0) M^{-1} d\varepsilon dx = 0, \tag{5.8}$$

where $\Phi$ was taken in the admissible set $\mathcal{S}$, independent of $\omega$ and such that $\Phi(T) = 0$. Finally, taking the limit $\eta \to 0$ in (5.8) gives the continuity equation for $F$ and $J$ in the weak sense stated in (5.6). □

## 5.2 Current equation

We now wish to prove that the density $F$ and the current $J$ given by proposition 5.2 satisfy a current equation. According to section 3, this equation is expected to be (3.4). Following [8], we could establish a weak formulation of this equation, namely (see [8] for more details) :

**Definition 5.3** *$J \in L^\infty(0,T; \mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3$ and $F \in L^\infty(0,T; \mathcal{L}^2_{NM^{-1}})$ are said to satisfy the current equation (3.4) in the weak sense if* $\forall \Phi \in \mathcal{H} = \{\Psi \in L^2(0,T; \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3 : \nabla_x \cdot \langle v(-Q^\alpha)^{-1}(\Psi \cdot v)\rangle \in L^2(0,T; \mathcal{L}^2_{NM^{-1}})\}$,

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} J \cdot \Phi M^{-1} d\varepsilon dxdt = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} F(x,\varepsilon,t) \nabla_x \cdot \langle v(-Q^\alpha)^{-1}(\Phi \cdot v)\rangle N M^{-1} d\varepsilon dxdt.$$

One can prove (see [8]) that the current and density arising in proposition 5.2 actually satisfy equation (3.4) in the weak sense. But we will see that, in order to prove a uniqueness result, $\nabla_x F$ will be asked to belong to $L^2(0,T; \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$. This regularity was obtained in [8] under an additional hypothesis (namely, the density of $\mathcal{H}$ in $L^2(0,T; \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$ was assumed) which is satisfied at least in the case of an isotropic cross section : $\Psi(\varepsilon, \omega; \varepsilon', \omega') = \varphi(\varepsilon)\varphi(\varepsilon')$. Meanwhile, in a different context (with the hypothesis of an *a priori* discrete ditribution of energy levels, which naturally appears in multigroup neutron transport theory) T. Goudon and A. Mellet developed a strategy of proof in two steps (see [11]). First, they established an approximate form of the current equation by a truncation-in-energy method, and then proved the convergence of the solutions of this approximate equation to the solution of a dual form of

the current equation (concerning the formulation of the current equation by means of duality considerations, see also [8]).

Following [11], we first give an approximate weak formulation of the current equation. From now on, we note :

$$\forall \Phi \in \left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)^3, \qquad K^\Phi = (-Q^\alpha)^{-1}(v\cdot\Phi).$$

We point out that $\forall \Phi \in \left(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}\right)^3$, $v\cdot\Phi \in \mathbb{L}^2_{M^{-1}}$ and satisfies the solvability condition $\langle v\cdot\Phi\rangle = \langle v\rangle\cdot\Phi = 0$. Therefore, $v\cdot\Phi \in N(Q^\alpha)^\perp$ and $K$ is a well defined bounded linear operator from $(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$ onto $N(Q^\alpha)^\perp$.

Since we want to establish an approximate current equation by means of truncation in energy, we also define a truncation function $\rho_R$ by $\rho_R(\varepsilon) = \rho(\varepsilon/R)$ with $\rho \in C^\infty(\mathbb{R})$ with values in $[0,1]$ satisfying $\rho(\varepsilon) = 0$ if $|\varepsilon| \geq 2$, and $\rho(\varepsilon) = 1$ if $|\varepsilon| \leq 1$. With these notations, we have :

**Lemma 5.4** *The pair $(J,F)$ given by proposition 5.2 satisfies an approximate weak form of the current equation (3.4). Namely, we have $\forall R > 0$ and $\forall \Phi \in \mathcal{H}$ :*

$$4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \langle K^\Phi v\rangle N M^{-1} d\varepsilon dx dt = -\int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\,v}} Q^\alpha(K^\Phi \rho_R) g M^{-1} dx dv dt, \tag{5.9}$$

*where $g = \lim g^\eta = \lim 1/\eta(f^\eta - F^\eta)$ satisfies*

$$N\langle vg\rangle = J. \tag{5.10}$$

**Remark :** (5.9) is indeed an approximate weak form of the current equation since $-Q^\alpha(K^\Phi\rho_R)$ can be viewed as an approximation of $-Q^\alpha(K^\Phi) = v\cdot\Phi$ and one has $N\langle gv\rangle = J$ by (5.10).
**Proof:** Let $\Phi \in \mathcal{H}$. Then a straightforward computation yields $K^\Phi \in \{\phi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) : \partial_t\phi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}), v\cdot\nabla_x\phi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})\} \subset \mathcal{S}$. Then, $\rho_R K^\Phi$ is an admissible test function. Introducing it in (5.2) gives :

$$\begin{aligned}\eta \int_0^T \int \rho_R f^\eta \partial_t K^\Phi M^{-1} dx dv dt + \int_0^T \int \rho_R f^\eta v\cdot\nabla_x K^\Phi M^{-1} dx dv dt \\ + \frac{1}{\eta}\int_0^T \int Q^\alpha(K^\Phi\rho_R) f^\eta M^{-1} dx dv dt = -\eta \int \rho_R f_I^\eta K^\Phi_{|t=0} M^{-1} dx dv\end{aligned} \tag{5.11}$$

$\forall R > 0$, $\forall \eta > 0$. Since $(f^\eta)_\eta$ and $(f_I^\eta)_\eta$ are bounded, taking the limit $\eta \to 0$ results in :

$$\eta \int_0^T \int \rho_R f^\eta \partial_t K^\Phi M^{-1} dx dv dt \to 0,$$

$$\eta \int \rho_R f_I^\eta K^\Phi_{|t=0} M^{-1} dx dv \to 0,\ \forall R > 0.$$

On the other hand, $f^\eta = F^\eta + \eta g^\eta$ (where we set $g^\eta = \frac{1}{\eta}(f^\eta - F^\eta)$ as in section 3) and, since $F^\eta \in N(Q^\alpha) = R(Q^\alpha)^\perp$, we have :

$$\frac{1}{\eta}\int_0^T \int Q^\alpha(K^\Phi\rho_R) f^\eta M^{-1} dx dv dt = \int_0^T \int Q^\alpha(K^\Phi\rho_R) g^\eta M^{-1} dx dv dt.$$

Since we have $Q^\alpha(f^\eta)f^\eta = \eta^2 Q^\alpha(g^\eta)g^\eta$, and since $g^\eta \in N(Q^\alpha)^\perp$, lemma 2.2 gives :

$$-\eta^2 \int_0^T \int Q^\alpha(g^\eta)g^\eta M^{-1} dxdvdt \geq C\eta^2 \parallel g^\eta \parallel^2_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})},$$

which proves (using the estimate (5.7) and the boundedness of $(f_I^\eta)_\eta$) that there exists $g \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$ such that (up to a subsequence) $g^\eta \rightharpoonup g$ $L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$ -weak. So we have :

$$\int_0^T \int Q^\alpha(K^\Phi \rho_R)g^\eta M^{-1} dxdvdt \to \int_0^T \int Q^\alpha(K^\Phi \rho_R)gM^{-1} dxdvdt$$

for $Q^\alpha(K^\Phi \rho_R) \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$. The boundedness of $(g^\eta)_\eta$, (5.4) and the identity :

$$\int_0^T \int \rho_R f^\eta v \cdot \nabla_x K^\Phi M^{-1} dxdvdt = \int_0^T \int \rho_R F^\eta v \cdot \nabla_x K^\Phi M^{-1} dxdvdt$$
$$+\eta \int_0^T \int \rho_R g^\eta v \cdot \nabla_x K^\Phi M^{-1} dxdvdt$$

lead to :

$$\int_0^T \int \rho_R f^\eta v \cdot \nabla_x K^\Phi M^{-1} dxdvdt \to \int_0^T \int \rho_R F v \cdot \nabla_x K^\Phi M^{-1} dxdvdt$$

for $v \cdot \nabla_x K^\Phi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$ since $K^\Phi \in \mathcal{S}$. Finally, we asymptotically have ($R$ being fixed) $\forall \Phi \in \mathcal{H}$ :

$$4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \langle K^\Phi v \rangle N M^{-1} d\varepsilon dxdt = -\int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\, v}} Q^\alpha(K^\Phi \rho_R) g M^{-1} dxdvdt.$$

It remains only to prove equality (5.10), where J is the current given by proposition 5.2. We have :

$$N\langle vg \rangle - J^\eta = N\langle v(g - \frac{f^\eta}{\eta}) \rangle = N\langle v(g - g^\eta) \rangle \text{ for } \langle vF^\eta \rangle = 0,$$

and thus $N\langle vg \rangle - J^\eta \rightharpoonup 0$ in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3$-weak. □

We remark that, while it was required to have $\Phi$ in $\mathcal{H}$ for the sake of the convergence $\eta \to 0$, equation (5.9) is meaningful for less regular functions $\Phi$. For instance, if $\Phi \in \mathcal{E} = \{\Psi \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3 : \nabla_x \cdot \langle vK^\Psi \rangle N \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})\}$, this equation still holds since, by truncation in energy, $\rho_R F \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ $\forall R > 0$ as soon as $F \in \mathcal{L}^2_{NM^{-1}}$. Therefore, we can define on $\mathcal{E}$ a linear mapping $\mathcal{F}_R$ by :

$$\forall \Phi \in \mathcal{E}, \qquad \mathcal{F}_R(\Phi) = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} \rho_R F \nabla_x \cdot \langle vK^\Phi \rangle N M^{-1} d\varepsilon dxdt. \tag{5.12}$$

By regularization in space, $\mathcal{E}$ is dense in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ since $\forall \Phi \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$, $N\langle vK^\Phi \rangle \in \mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$. Moreover, by equation (5.9),

$$\mathcal{F}_R(\Phi) = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\, v}} g Q^\alpha(K^\Phi \rho_R) M^{-1} dxdvdt \qquad \forall \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{E}).$$

By the continuity of $Q^\alpha$ on $\mathbb{L}^2_{M^{-1}}$, we have, $\forall \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{E})$ :

$$|\mathcal{F}_R(\Phi)| \leq \| g \|_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} \| Q^\alpha(K^\Phi \rho_R) \|_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} \leq C \| g \|_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} \| K^\Phi \|_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})},$$

for $\rho_R \leq 1$. But : $K^\Phi = (-Q^\alpha)^{-1}(v \cdot \Phi)$ and, by the continuity of $(-Q^\alpha)^{-1}$ (by lemma 2.2) :

$$|\mathcal{F}_R(\Phi)| \leq C \| g \| \| v \cdot \Phi \|_{L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} = C \| g \| \| \Phi \|_{L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})} . \tag{5.13}$$

Therefore, $\mathcal{F}_R$ is a continuous linear form on $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ (since $\mathcal{E}$ is dense in $\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$) ; it stands for a weak form of $\nabla_x F \rho_R$. To obtain a dual form for the current equation, it is wishful to introduce a duality correspondence between $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ and linear forms on this space. Then it will remain to prove the convergence of a family $(\Theta_R)_R \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ - corresponding to $(\nabla_x F \rho_R)_R$ -, at least in a weak way. This will give rise to a dual form of the asymptotic current equation (3.4). Moreover, we will get some regularity on $F$ if we can prove the convergence of $\Theta_R$ in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$. First, we give a precise meaning to the duality between $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ and its dual space :

**Lemma 5.5** *Under hypotheses (H1), (H2) and (H4), the expression :*

$$\mathcal{D}(\Phi,\Psi) = \int_{\mathbb{R}^3_x} \int_{\varepsilon>0} \int_{\varepsilon'>0} \Phi^T(\varepsilon) D(\varepsilon,\varepsilon') \Psi(\varepsilon') M^{-1}(\varepsilon) d\varepsilon' d\varepsilon dx,$$

*where $D(\varepsilon,\varepsilon')$ is given by (4.8), defines a continuous bilinear symmetric form on $(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$.*

*Furthermore, $\mathcal{D}$ is coercive, namely, there exists $C > 0$ such that :*

$$\forall \Phi \in (\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3, \qquad \mathcal{D}(\Phi,\Phi) \geq C \| \Phi \|^2_{(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3} . \tag{5.14}$$

The proof of lemma 5.5 can be found in [8].

From now on, we identify $\mathcal{L}^2_{M^{-1}} = L^2((0,\infty)_\varepsilon \times \mathbb{R}^3_x; M^{-1} d\varepsilon dx)$ with its dual space. Then $(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})' = \mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$ and the symmetric continuous positive bilinear form $\mathcal{D}$ defines (by Riesz' representation theorem) a linear bicontinuous one-to-one map $\mathcal{F}$ from $\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$ onto $\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$. Precisely, we require :

$$\forall \Phi,\Psi \in (\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3 \qquad \mathcal{D}(\Phi,\Psi) = -\int_{\mathbb{R}^3_x} \int_{\varepsilon>0} \mathcal{F}(\Phi) \cdot \Psi M^{-1} d\varepsilon dx. \tag{5.15}$$

Now, the duality frame is set up, and we can complete the derivation of the current equation. We give :

**Definition 5.6** *$J \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3$ and $F \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{NM^{-1}})$ are said to satisfy the current equation (3.4) in the dual sense if $\nabla_x F \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$ and $J = \mathcal{F}(\nabla_x F)$.*

Then we have :

**Proposition 5.7** *The density $F$ and the current $J$ given by proposition 5.2 satisfy the current equation in the dual sense.*

To prove proposition 5.7, we need the following density result :

**Lemma 5.8** *The set $\mathcal{K} = \{N\langle vK^\Phi\rangle : \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})\}$ is dense in $\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}}$.*

**Proof:** We prove that $\mathcal{K}^\perp = \{0\}$, where the orthogonal space is taken in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$. Let $\Theta \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ such that :

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x} \int_{\varepsilon>0} \Theta \cdot \langle vK^\Phi\rangle NM^{-1} d\varepsilon dx dt = 0 \qquad \forall\, \Phi \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$$

$$\text{i.e.} \quad \int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\,v}} \Theta \cdot v(-Q^\alpha)^{-1}(v\cdot\Phi)M^{-1} dv dx dt = 0 \qquad \forall\, \Phi \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}}$$

$$\text{i.e.} \quad \int_0^T \mathcal{D}(\Phi,\Theta) dt = 0 \qquad \forall\, \Phi \in \mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}} \text{ according to the definition of } D(\varepsilon,\varepsilon').$$

Thus, $\int_0^T \mathcal{D}(\Theta,\Theta)dt = 0$ and, since by (5.14) $\int_0^T \mathcal{D}(\Theta,\Theta)dt \geq C \parallel \Theta \parallel^2_{L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})}$, $\Theta = 0$. □

**Proof of proposition 5.7 :** Estimate (5.13) allows us to see $\mathcal{F}_R$ as a point in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ thanks to the dual correspondence $\mathcal{F}$. More accurately, there exists $(\Theta_R)_R \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$, uniformly bounded with respect to $R$, such that :

$$\forall R > 0, \mathcal{F}_R(\Phi) = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} \mathcal{F}(\Theta_R)\cdot\Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt = 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\Theta_R,\Phi)dt.$$

The uniform boundedness of $(\Theta_R)_R$ is a consequence of (5.13) and the continuity of $\mathcal{F}^{-1}$. Therefore, maybe up to a subsequence, there exists $\Theta \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ such that $\Theta_R \rightharpoonup \Theta$ $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$-weak. On the other hand, we have : $\forall \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_R(\Phi) &= 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\Theta_R,\Phi)dt = 4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} \Theta_R \cdot \langle vK^\Phi\rangle NM^{-1} d\varepsilon dx dt \\
&= -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} (\rho_R F)\nabla_x \cdot \langle vK^\Phi\rangle NM^{-1} dx d\varepsilon dt \text{ by (5.12).}
\end{aligned}$$

Thus, $\Theta_R$ and $\rho_R\nabla_x F$ actually coincide on the set $\mathcal{K} = \{N\langle vK^\Phi\rangle : \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})\}$. We know by lemma 5.8 that $\mathcal{K}$ is dense in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})$. Therefore, we can conclude that $\Theta_R$ coincides with $\rho_R\nabla_x F$ as a linear form on $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})$. Furthermore, the boundedness of $(\Theta_R)_R$ in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ and the convergence $\rho_R\nabla_x F \to \nabla_x F$ in a distributional sense yield the expected outcome $\rho_R\nabla_x F \rightharpoonup \nabla_x F$ $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$ - weak . Consequently, $\forall \Phi \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})$,

$$\mathcal{F}_R(\Phi) \to 4\pi \int_0^T \mathcal{D}(\nabla_x F,\Phi)dt = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_{x,v},\,\varepsilon>0} \mathcal{F}(\nabla_x F)\cdot\Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt.$$

Taking the limit $R \to \infty$ in (5.9) gives rise to a weak formulation of the current equation :

$$-4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} \mathcal{F}(\nabla_x F)\cdot \Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\,v}} g Q^\alpha(K^\Phi) M^{-1} dx dv dt$$
$$= -\int_0^T \int_{\mathbb{R}^6_{x,\,v}} vg\cdot \Phi M^{-1} dx dv dt = -4\pi \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} J\cdot \Phi M^{-1} dx d\varepsilon dt,$$

since $J = N\langle vg\rangle$. We deduce from this the equality in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}M^{-1}})^3$ : $J = \mathcal{F}(\nabla_x F)$. □

## 5.3 Uniqueness of the asymptotic current and density

As a by product we have proved in proposition 5.7 that $\nabla_x F \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3$. This enables us to prove the uniqueness of $J$ and $F$ in the very spaces where their existence was established.

**Proposition 5.9** *The density $F$ given by proposition 5.2 is in $C([0,T];\mathcal{L}^2_{NM^{-1}})$ and satisfies :*

$$\| F \|^2_{L^\infty(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})} + \| \nabla_x F \|^2_{L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})} \leq C \| F_{|t=0} \|^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} . \tag{5.16}$$

**Proof:** The proof relies on the following general embedding :

$$W(0,T;\mathcal{Y},\mathcal{Y}') \subset C([0,T];\mathcal{L}), \tag{5.17}$$

where $W(0,T;\mathcal{Y},\mathcal{Y}') = \{f \in L^2(0,T;\mathcal{Y}) : \partial_t f \in L^2(0,T;\mathcal{Y}')\}$, $\mathcal{L}$ and $\mathcal{Y}$ are Hilbert spaces, $\mathcal{L}$ is identified to its dual space and $\mathcal{Y}$ is dense in $\mathcal{L}$. The inclusion (5.17) is continuous.

In our case, since we want to recover the continuity of $F$ with values in $\mathcal{L}^2_N$ (or, if we see $F$ as a function of $v$, in $\mathbb{L}^2_{M^{-1}}$), we shall identify $\mathbb{L}^2_{M^{-1}}$ with its dual space. The previous results give :

$$\begin{cases} F \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) \\ \nabla_x F \in L^2(0,T;(\mathcal{L}^2_{N^3M^{-1}})^3) = L^2(0,T;(\mathbb{L}^2_{N^2M^{-1}})^3). \end{cases}$$

We set $\mathcal{Y} = \{f \in \mathcal{L}^2_{M^{-1}} : \nabla_x f \in (\mathbb{L}^2_{N^2M^{-1}})^3\}$. A straightforward computation leads to $\mathcal{Y}' = \{\sum_{\beta=1}^3 \sum_{|\alpha|=1} \partial_x^\alpha J^\beta : J \in (\mathbb{L}^2_{N^{-2}M^{-1}})^3\}$. In addition, (5.6) yields $N\partial_t F + \nabla_x \cdot J = 0$ in a distributional sense, and thus, $\partial_t F \in L^2(0,T;\mathcal{Y}')$. Consequently, we have $F \in W(0,T;\mathcal{Y},\mathcal{Y}')$. Since $\mathcal{Y}$ is obviously dense in $\mathbb{L}^2_{M^{-1}}$, inclusion (5.17) holds with $\mathcal{L} = \mathbb{L}^2_{M^{-1}}$, and we have $F \in C([0,T];\mathbb{L}^2_{M^{-1}})$.

By classical properties of $W(0,T)$ spaces, we have :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \| F \|^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} &= 2\langle \partial_t F, F\rangle_{\mathcal{Y}'\times\mathcal{Y}} = -2\langle \frac{1}{N}\nabla_x \cdot J, F\rangle_{\mathcal{Y}'\times\mathcal{Y}} \\ &= 2\langle \frac{1}{N} J, \nabla_x F\rangle_{\mathbb{L}^2_{N^{-2}M^{-1}}\times\mathbb{L}^2_{N^2M^{-1}}} = \langle \frac{1}{N}\mathcal{F}(\nabla_x F), \nabla_x F\rangle_{\mathbb{L}^2_{N^{-2}M^{-1}}\times\mathbb{L}^2_{N^2M^{-1}}} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3_x,\,\varepsilon>0} \mathcal{F}(\nabla_x F)\cdot \nabla_x F M^{-1} d\varepsilon dx, \end{aligned}$$

since we actually deal with functions of $\varepsilon$ only. By (5.15), this in turn gives $\frac{d}{dt} \parallel F \parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} = -\mathcal{D}(\nabla_x F, \nabla_x F)$. An integration in time yields :

$$\parallel F(t) \parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} + \int_0^T \mathcal{D}(\nabla_x F, \nabla_x F) dt = \parallel F_{|t=0} \parallel^2_{\mathbb{L}^2_{M^{-1}}} .$$

By the coercivity inequality (5.14), this gives the expected estimate (5.16). The uniqueness follows from (5.16) by considering $F_{|t=0} = 0$. □

This uniqueness result guarantees that the whole sequences converge, without extracting subsequences. The following theorem gives a synthesis of this section :

**Theorem 5.10** *The initial value problem (5.1) admits a sequence of solutions $(f^\eta)_\eta$ such that, under hypotheses (H1), (H2), (H4) and an assumption of boundedness on $(f_I^\eta)_\eta$, the sequences of approximate density $(F^\eta = \langle f^\eta \rangle)_\eta$ and current $(J^\eta = \frac{N}{\eta}\langle f^\eta \rangle)_\eta$ converge to a pair $(F, J) \in \{G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) : \nabla_x G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3})^3\} \times L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}})$. These asymptotic current and density satisfy a set of equations of SHE-type, coupled in energy :*

$$\begin{cases} N\partial_t F + \nabla_x \cdot J = 0 \\ J = -\int_{\varepsilon'>0} D(\varepsilon,\varepsilon')\nabla_x F(\varepsilon') d\varepsilon' \\ F_{|t=0} = F_I \end{cases}$$

*in the weak following sense :*

**- continuity equation :**

$$\forall\, \Phi \in \{\psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}) : \partial_t \psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}}), v \cdot \nabla_x \psi \in L^2(0,T;\mathbb{L}^2_{M^{-1}})\}$$

*such that $\Phi(T) = 0$,*

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} NF\partial_t \Phi + J \cdot \nabla_x \Phi M^{-1} d\varepsilon dx dt + \int_{\mathbb{R}^3_x,\, \varepsilon>0} NF_I \Phi_{|t=0} M^{-1} d\varepsilon dx = 0.$$

**- current equation :**

$$J = \mathcal{F}(\nabla_x F).$$

*Moreover, the pair $(F, J)$ is uniquely determined in the class of solutions $\{G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{NM^{-1}}) : \nabla_x G \in L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^3})^3\} \times L^2(0,T;\mathcal{L}^2_{N^{-3}})$, and $F \in C([0,T];\mathcal{L}^2_{NM^{-1}})$.*

# 6 Conclusion

In this paper, we studied the rigorous derivation of a SHE type system of equations, coupled in energy, from a kinetic equation arising in electron transport in semiconductors. The derivation is based on the analysis of the convex combination of two elastic operators (coming from two different splittings of the collision operator). This combination appears as a useful means to take into account the inelastic nature of collisions through a non local dependence on the energy.

We considered a collision operator rendering interactions between electrons and phonons (which we assumed to be dominant). These interactions are discontinuous in energy : it gave rise to the peculiar form of the (coupling) diffusion tensor in the asymptotic current equation. Not only did it appear to couple different levels of energy (as in [8] for instance) ; it is overall characterized in that it only couples energies separated by gaps - namely, only those that can be joined by phonon emission or absorption. Thus the diffusion tensor takes the form of an infinite dimensional matrix in the energy space.

The convergence proof was given in a force-free case. We also obtained an existence and uniqueness result for the SHE system. The general formal duality between currents and densities (that appears in any equation of the form of a Fourier law) was given a rigorous meaning and proved to be fundamental in the convergence proof.

In this work, we dealt with a linear collision operator : in the case of a low density of electrons, the non linear contribution of Pauli's exclusion terms can be neglected. We will dedicate future work to the study of the general case of a non linear collision operator for electron-phonon interactions.

# Bibliographie


[1] C. Bardos, F. Golse and B. Perthame, *The Rosseland approximation for the radiative transfer equations*, Comm. Pure Appl. Math. **40** (1987), pp. 691-721 and **42** (1989), pp. 265-289.

[2] C. Bardos, R. Santos and R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. A. M. S., **284** (1984), pp. 617-649.

[3] N. Ben Abdallah and P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Maths. Phys. **37** (1996), pp.3306-3333.

[4] A. Bensoussan, J. L. Lions, and G. Papanicolaou, *Boundary layers and homogenization of transport processes*, Publ. RIMS Kyoto Univ. **15** (1979), pp. 53-157.

[5] E. Bringuier, *Kinetic theory of high-field transport in semiconductors*, Phys. Rev. B **57** (1998), pp. 2280-2285.

[6] E. Bringuier, *Nonequilibrium statistical mechanics of drifting particles*, Phys. Rev. E **61** (2000), pp. 6351-6358.

[7] S. Chapman and T. G. Cowling, The mathematical theory of non-uniform gases, Cambridge University Press, New-York, 1958.

[8] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled Spherical Harmonics Expansion model*, to appear in Math. Models and Methods in Applied Sciences.

[9] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, vol 15, AMS and International Press, 2000, pp. 77-110.

[10] F. Golse and F. Poupaud, *Limite fluide des equations de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac*, Asymptotic Analysis **6** (1992), pp. 135-160.

[11] T. Goudon and A. Mellet, *Discrete version of the SHE asymptotics : multigroup neutron transport equations*, J. Math. Phys. **43** (2002), no. 6, 3232–3260.

[12] T. Kato, Perturbation theory for linear operators, Springer, Berlin Heidelberg New-York, 1995

[13] E. W. Larsen and J. B. Keller, *Asymptotic solution of neutron transport problems for small mean free paths*, J. Math. Phys. **15** (1974), pp. 75-81.

[14] A. Majorana, *Space homogeneous solutions of the Boltzmann equation describing electron-phonon interactions in semiconductors*, Transp, Theory and Statist. Phys. **20** (1991), pp. 261-279.

[15] P. A. Markowich and C. Schmeiser, *The drift-diffusion limit for electron-phonon interaction in semiconductors*, Math. Models and Methods in Applied Sciences, **7** (1997), pp. 707-729.

[16] P. A. Markowich, C. Ringhofer and C. Schmeiser, Semiconductor Equations, Springer, Wien, 1990.

[17] F. Poupaud, *Diffusion approximation of the linear semiconductor equation : analysis of boundary layers*, Asymptotic Analysis **4** (1991), pp. 293-317.

[18] K. Yosida, Functional Analysis, Springer, Berlin Heidelberg New-York, 1995.

# Chapitre 5

# Régimes de diffusion engendrés par des collisions de surface[1]

**Abstract :** Our goal in this paper is to derive from a kinetic setting a diffusion model for the transport of charged particles trapped in a surface potential. The so-obtained model is derived through a diffusion approximation, as we assume the thermalization to be governed by particle-wall collisions. In order to take into account the possible inelasticity of such collisions, we introduce a non-local (in energy) collision operator on the boundary. At the macroscopic scale, this results in a coupled (in energy) Spherical Harmonics Expansion (SHE) model. The model is both formally and rigorously derived from the kinetic equation, and existence is obtained as a by-product of the derivation.

## 1 Introduction

In this work, we aim at the rigorous derivation of a diffusion model for the transport of charged particles suffering inelastic collisions with a surface, and trapped in a surface potential. Such a model was first introduced in[14] (in the case of elastic collisions) as a general framework for the analysis of diffusion phenomena arising when collisions with surfaces occur. These diffusion regimes are of particular interest for the modelling of the energy distribution function of the electrons in ionic propellors[11] (plasma thrusters) and in semiconductor devices as well.[6] In both cases, the particles are accelerated by a (magnetic or electric) force field and subject to very frequent collisions with the boundaries of the device. From this point of view, a natural way to model these physical situations is to suppose the cloud of particles to be confined close to the boundary by a potential surface. When the confinment volume is very small, the collision frequency increases, so that the dynamics of the particle system can be modeled by a diffusion equation at a macroscopic scale. Namely, it has been proved in[1],[2],[16] and[15] that collisions with the boundary can generate such diffusion regimes.

With the miniaturization of common devices in high precision physics, classical diffusion

[1] *A coupled Spherical Harmonics Expansion model for confined particles*, Math. Models and Methods in Appl. Sci. **14** (2004), No. 8, pp. 1133-1165.

models (as Drift Diffusion models) can become unrealistic. New models have been proposed in the recent past to describe diffusion phenomena with more accuracy (see[18],[13] and[5]) : the Spherical Harmonics Expansion (SHE) models are Drift Diffusion (DD) type equations that take into account the dependence of the density distribution function on the (kinetic or, as in our case, total) energy of the particles. Though more precise than classical DD models, the SHE models are less numerically costly than kinetic models for instance. Their applications range from neutronics[19] and semiconductor physics[18],[9],[10],[7],[6], to gas discharge physics[24] and plasma physics[17]. In the case of particle-surface interaction, they have first been introduced in[11], then rigorously derived from a kinetic model in[16],[15] (see[6] for an analogous work in the case of semiconductor devices).

However, the mathematical derivation of SHE models from kinetic equations, though a good means to ensure their relevance, can only been performed in the case of dominant elastic collisions with the boundary. Of course, common particle-surface interactions can be expected to be inelastic. One of the possible consequences of the inelasticity of collisions on the shape of diffusion equations of SHE type could be a non local (in energy) dependence of the current of particles with respect to the density. This leads to the so-called coupled SHE models (see[12] for their first derivation,[19] for application to neutronics,[7] for the case of electron-phonon interactions in semiconductor devices). Indeed, these models give rise to a current equation that couples the value of the current at a given energy with the variations of the density at different energies. However, the question of the relevance of such models is still widely open (see[8] for a first discussion).

Our goal in this work is to derive a coupled SHE system of equations for the general model proposed in[14]. We perform a diffusion approximation based on a kinetic transport equation with boundary conditions accounting for the collision phenomena. The collisions in volume are assumed to have no influence on the transport of the particles (it is reasonable if collisions with the boundary are dominant) and are neglected. Particle collisions with a surface can result from a wide range of processes. We do not consider specular reflection, attachment to the wall or secondary emission : we restrict ourself to the case of a randomized reemission in direction and energy. In this framework, we present both a formal and a rigorous derivation of the SHE model. The rigorous derivation of the model formally introduced in[14] appears as a by product of this work (when the energy coupling degenerates).

The paper is organized as follows. Section 2 is devoted to the description of the initial microscopic model. We also detail the formal operations on the boundary condition that are necessary to obtain asymptotically a coupled SHE model (though under the hypothesis of dominant elastic scattering processes). We state the main formal and rigorous results too. In section 3, we present the collision boundary operator in its more general form and establish some mathematical results on this operator. In particular, we prove that the flux of particles is conserved at the boundary and that there is an entropy dissipation (that is, a Darrozès-Guiraud-like inequality : see proposition 3.4). This will be enough to allow the formal derivation of the coupled SHE model, which is achieved in section 4. A necessary step for the rigorous derivation is to establish the existence of solutions for the kinetic problem. We recall a classical proof of this fact and give some estimates on the solutions in section 5. Finally, section 6 is dedicated to the rigorous derivation itself. We prove the existence of weak solutions to the coupled SHE

set of equations.

# 2 The Microscopic Model : a Kinetic description for the Transport of Trapped Particles in a surface potential

The microscopic model describes the evolution of particles in a half-space limited by an infinite two dimensional solid wall. In this region of the space, the particles are submitted to a force field. We suppose that the particles do not suffer collisions in volume, but only with the wall.

We denote by $\Omega = \mathbb{R}^2 \times (-\infty, 0]$ the half-space, $\Gamma = \partial\Omega \cong \mathbb{R}^2$ represents the infinite solid boundary. The position vector is denoted by $x = (x_1, x_2, z) \in \Omega$, the velocity vector by $v = (v_1, v_2, v_z) \in \mathbb{R}^3$. We split the position and velocity vectors into their parallel and perpendicular components relative to the boundary $\Gamma = \{z = 0\} : x = (\underline{x}, z)$, with $\underline{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$, $v = (\underline{v}, v_z)$, with $\underline{v} = (v_1, v_2) \in \mathbb{R}^2$.

With analogous notations, the force field is written $E = (E_1, E_2, E_z) = (\underline{E}, E_z)$. We suppose that there exists a potential $\Psi$ such that $E(x) = -\nabla_x \Psi$. Therefore, denoting the two dimensional gradient with respect to $\underline{x}$ by $\nabla_{\underline{x}}$, we have $\underline{E} = -\nabla_{\underline{x}} \Psi$. In this paper, we consider the situation where the particles are confined close to the boundary $\Gamma$ by the potential $\Psi$. Namely, we assume :

**Hypothesis 2.1** *For any fixed* $\underline{x} \in \Gamma$, *the function* $z \to \Psi(\underline{x}, z)$ *is continuous, decreasing and* $\lim_{z \to -\infty} \Psi(\underline{x}, z) = +\infty$.

We introduce $\Psi_0$ defined as the trace of $\Psi$ on the solid boundary $\Gamma$. We set $\Psi_0(\underline{x}) = \Psi(\underline{x}, z = 0)$, $\psi(\underline{x}, z) = \Psi(\underline{x}, z) - \Psi_0(\underline{x})$. We remark that $\psi(\underline{x}, 0) = 0$. The particles are confined since, on the one hand, their motion is limited by the solid wall $\Gamma$, and on the other hand, the potential field attracks them back to the wall - as a consequence of hypothesis 2.1.

We describe the evolution of the particles through their distribution function $f(t, x, v)$. This function characterizes the number density of the ensemble of particles in the phase space in the sense that $f(t, x, v)dxdv$ represents the number of particles at time $t$ in a phase volume $dxdv$ around the point $(x, v)$ in the phase space. Since we have assumed that there are no collisions in the domain $\Omega$, the function $f$ evolves according to a free transport equation :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E \cdot \nabla_v f = 0, \tag{2.1}$$

where we have set the mass equal to 1. Eq. (2.1) only expresses the mass conservation along the trajectories determined by Newton's equations. For the sake of well-posedness we have to introduce boundary conditions on the boundary $\Gamma$. We define the traces of $f$ on $\Gamma \times \mathbb{R}^3$ by $\gamma(f) = f|_{\{z=0\}}$, $\gamma^{\pm}(f) = f|_{\{z=0,\, \pm v_z > 0\}}$. The traces $\gamma^+(f)$ and $\gamma^-(f)$ can respectively be interpreted as the distribution functions of the outgoing (resp. incoming) particles at the boundary $\Gamma$. Following [14], we suppose that the incoming trace depends on the outgoing trace through a linear operator $\mathcal{K}$ which models the interactions between the particles and the wall. Thus, the boundary conditions are written

$$\gamma^-(f) = \mathcal{K}(\gamma^+(f)). \tag{2.2}$$

Introducing the operator $\mathcal{B}(\gamma(f)) = \gamma^-(f) - \mathcal{K}(\gamma^+(f))$, we have $\mathcal{B}(\gamma(f)) = 0$.

Diffusion models of SHE type are theoretically relevant when elastic scattering is dominant. For the derivation of the coupled SHE model from a kinetic setting, we focus on such kind of regimes and consider operators $\mathcal{B}$ that can split into two parts, a dominant elastic one $\mathcal{B}_{el}$ which models collisions that keep the number of particles on an energy shell unchanged, and an inelastic one $\mathcal{B}_{inel}$. We introduce a small parameter $\beta$ and write

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}^\beta = \mathcal{B}_{el} + \beta^2 \mathcal{B}_{inel}. \tag{2.3}$$

In a sense, $\beta$ measures the degree of inelasticity of the collisions.

The derivation of a SHE type model from a kinetic equation is based on such splittings. Given a peculiar collision operator, there are many ways to split it formally into elastic and inelastic parts. In section 3 we propose two different splittings. The first one (denoted by $\mathcal{B}^0_{el}$-$\mathcal{B}^0_{inel}$) is such that its elastic part $\mathcal{B}^0_{el}$ acts on the distribution function locally in energy. The elastic part $\mathcal{B}^1_{el}$ of the second splitting (denoted by $\mathcal{B}^1_{el}$-$\mathcal{B}^1_{inel}$), on the contrary, acts non-locally in energy. For the derivation of an uncoupled SHE model, one considers a splitting with a local elastic part (see *e.g.*[5]), while, according to[12], it is relevant to consider a convex combination of both splittings in order to obtain a coupled SHE model. Indeed, such a combination leads to a non local current equation in the SHE model, while considering only the first splitting (with a 'local' elastic part) would give rise to a local one. On the other hand, the elastic part of the second splitting is not satisfactory from a mathematical point of view (it lacks of coercivity) so that we cannot consider it alone even though it would be expected to lead to a non local current equation. Therefore, we give two formal splittings of the operator $\mathcal{B}$, $\mathcal{B}^{0,\beta} = \mathcal{B}^0_{el} + \beta^2 \mathcal{B}^0_{inel}$, $\mathcal{B}^{1,\beta} = \mathcal{B}^1_{el} + \beta^2 \mathcal{B}^1_{inel}$. Then, the convex combination of these splittings reads as follows

$$\mathcal{B}^{\alpha,\beta} = (1-\alpha)\mathcal{B}^0_{el} + \alpha \mathcal{B}^1_{el} + \beta^2[(1-\alpha)\mathcal{B}^0_{inel} + \alpha \mathcal{B}^1_{inel}], \tag{2.4}$$

with $0 \leq \alpha \leq 1$. In the sequel, we consider the following general operator

$$\mathcal{B}(\gamma(f))(v) = \int_{v' \in \mathbb{R}^3 \text{ s.t. } v'_z > 0} \kappa(\underline{x}, v' \to v)[M(v')\gamma^- f(v) - M(v)\gamma^+(f)(v')]|v'_z| dv'$$

where $\kappa(\underline{x}, v' \to v)|v_z|dv$ is the probability for a particle hitting the wall at point $\underline{x}$ with velocity $v'$ to be reflected with velocity $v$ in the elementary volume $dv$ and $M$ is the maxwellian $\exp(-|v|^2/2)$. (For the physical relevance and meaning of such an operator, we refer to[11] and the references given in this paper.) See section 3.2 for the splittings of this operator. As above, we note $\mathcal{B}^{\alpha,\beta}$ the convex combination of the corresponding splittings. We will prove in section 3.1 that this operator can induce a boundary condition of type (2.2) under some assumptions on $\kappa$.

To obtain a description of the large time dynamics for particles suffering such collisions, we follow[14] and introduce a (classical : see [4],[5],[13], [21]) diffusion rescaling in $(t, \underline{x})$. We set $\underline{x}' = \eta \underline{x}$, $t' = \eta^2 t$, where $\eta \ll 1$ represents the ratio of the size of the typical motion of a particle between two collisions with the wall to the longitudinal length scale (*e.g.* the size of the device). In addition, we suppose that this ratio is linked to the parameter $\beta$ by :

$$\eta = \beta. \tag{2.5}$$

After rescaling (and dropping the primes for the sake of clarity), the problem reads :

$$\eta\partial_t f^\eta + (\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi\cdot\nabla_{\underline{v}})f^\eta + \frac{1}{\eta}\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)f^\eta = 0, \tag{2.6}$$

$$\mathcal{B}^{\alpha,\eta}(\gamma(f^\eta)) = 0. \tag{2.7}$$

We introduce an initial condition :

$$f^\eta(t=0,x,v) = f_I(x,v), \qquad \forall\,(x,v)\in\Omega\times\mathbb{R}^3. \tag{2.8}$$

Our purpose is to investigate the limit $\eta\to 0$ in the initial, boundary value problem (2.6), (2.7), (2.8). The formal convergence is first investigated in section 4 and leads to the following purely formal result :

**Theorem 2.2** *Under hypotheses 2.1, 3.1 and 3.3, the solution $f^\eta$ of problem (2.6), (2.7), (2.8) converges as $\eta\to 0$ to a function $F(t,\underline{x},\frac{1}{2}|v|^2+\psi(\underline{x},z))$, where $F(t,\underline{x},\varepsilon)$ satisfies the following coupled SHE system of equations :*

$$N(\underline{x},\varepsilon)\partial_t F + \tilde{\nabla}\cdot\underline{J} = \tilde{Q}(F) = \frac{1}{1-\alpha}\int_{\varepsilon'>0}\sigma(\varepsilon'\to\varepsilon)(MF'-M'F)d\varepsilon', \tag{2.9}$$

$$\underline{J}(t,\underline{x},\varepsilon) = -D(\underline{x};\varepsilon)\tilde{\nabla}F(t,\underline{x},\varepsilon) - \int_{\varepsilon'>0}\Delta(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon')\tilde{\nabla}F(t,\underline{x},\varepsilon')d\varepsilon', \tag{2.10}$$

$$F(t=0,\underline{x},\varepsilon) = F_I(\underline{x},\varepsilon) = \frac{1}{N(\underline{x},\varepsilon)}\int f_I\delta_\varepsilon(x,v)dvdz, \tag{2.11}$$

*with $\delta_\varepsilon(x,v) = \delta(\frac{1}{2}|v|^2+\psi(\underline{x},z)-\varepsilon)$ and $\tilde{\nabla} = \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon$. The cross section $\sigma$ is written :*

$$\sigma(\varepsilon'\to\varepsilon) = 4\varepsilon'\varepsilon\int_{\mathbb{S}^2_-}\int_{\mathbb{S}^2_+}\kappa(\sqrt{2\varepsilon'}\omega'\to\sqrt{2\varepsilon}\omega)|\omega'_z||\omega_z|d\omega'd\omega.$$

*The coefficients $N$ (the 'density of states'), $D$ and $\Delta$ (the 'diffusivity tensors') are given by :*

$$\begin{aligned} N(\underline{x},\varepsilon) &= \int_{-\infty}^0\int_{\mathbb{R}^3}\delta_\varepsilon(x,v)dvdz, \\ D(\underline{x};\varepsilon) &= \int_{-\infty}^0\int_{\mathbb{R}^3}\underline{\theta_s^\varepsilon}(\underline{x},z,v)\otimes\underline{v}\,\delta_\varepsilon(x,v)dvdz, \\ \Delta(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon') &= \int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi_{\underline{x}}^{-1}(\varepsilon'\omega_z^2)}^0\underline{\theta_r^\varepsilon}(\underline{x},z,\sqrt{2\varepsilon'}\omega)\otimes\sqrt{2\varepsilon'}\underline{\omega}\frac{|\omega_z|\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\omega_z^2-\psi(\underline{x},z)/\varepsilon'}}dzd\omega, \end{aligned} \tag{2.12}$$

*where $\omega = (\underline{\omega},\omega_z)$. The function $\underline{\theta_s}\delta_\varepsilon(x,v)+\underline{\theta_r}$ is defined as the solution of the auxiliary problem (4.7) (see section 4.3).*

Next, in section 6, the convergence is proven rigorously under additional assumptions in Theorem 6.12

# 3 The Boundary Condition : properties of the Collision Operator

In this section, we present the general form of the collision operator. First, we give some assumptions on the cross section of this operator. Then we present two ways to split the so-obtained collision operator into elastic and inelastic operators. We also underline that the current conservation is satisfied by the elastic parts of these splittings. Finally, we give some properties of the operators and their adjoints in adapted functional spaces.

## 3.1 The general form of the collision operator

A quite general boundary condition can be written as follows,

$$\gamma^- f(v) = \left( \int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v) \gamma^+ f(v') |v'_z| dv' \right) M(v), \qquad \forall v \in \mathbb{R}^3 \text{ s. t. } v_z < 0. \tag{3.1}$$

We give some assumptions on the cross section $\kappa$. Under these hypotheses, one can give condition (3.1) the form (2.7).

**Hypothesis 3.1** *(i) flux conservation :*

$$\int_{v_z<0} \kappa(v' \to v) M(v) |v_z| dv = 1, \tag{3.2}$$

*(ii) reciprocity :*

$$\kappa(v' \to v) = \kappa(-v \to -v') = \kappa(|v|\omega' \to |v'|\omega) = \kappa(|v'|\omega_* \to |v|\omega'_*), \tag{3.3}$$

*where* $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z) = v/|v|$ *and* $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$.
*(iii) positivity :*

$$\kappa(v' \to v) > 0.$$

From (3.2) and (3.3), we deduce :

$$\int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v) M(v') |v'_z| dv' = 1. \tag{3.4}$$

Therefore, the boundary condition (3.1) can equivalently be written, for $v \in \mathbb{R}^3$ such that $v_z < 0$,

$$\mathcal{B}(\gamma(f))(v) = \int_{v'_z>0} \kappa(v' \to v) [M(v)\gamma^+ f(v') - M(v')\gamma^- f(v)] |v'_z| dv' = 0.$$

In order to express $\mathcal{B}$ as an operator acting on $\gamma f$ through the modulus and the angular part of the velocity separately, we introduce the following change of coordinates

$$\begin{cases} \omega = \frac{v}{|v|}, \\ \varepsilon = \frac{|v|^2}{2}, \\ v = |v|\omega = \sqrt{2\varepsilon}\omega, \end{cases}$$

where $\omega$ represents the angular part of the velocity and $\varepsilon$ the kinetic energy associated to a particle of velocity $v$. In these spherical coordinates, we can rewrite the boundary operator as follows :

$$\mathcal{B}(\gamma(f)) = \int_{\omega'_z>0,\,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)[M\gamma^+ f(\varepsilon',\omega') - M'\gamma^- f(\varepsilon,\omega)]|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega', \tag{3.5}$$

where we denoted $M(v)$ and $M(v')$ respectively by $M$ and $M'$.

## 3.2 Two splittings of the boundary collision operator

We call 'elastic' any operator that preserves the density of particles on a given energy shell. There are many ways to split an inelastic operator such as $\mathcal{B}$ into elastic and inelastic parts. The most natural way to procede is maybe to consider that the elastic collisions are local in energy. Applying this idea to the expression (3.5), we obtain $\mathcal{B}(\gamma(f)) = \mathcal{B}^0_{el}(\gamma(f)) + \mathcal{B}^0_{in}(\gamma(f))$, with

$$\mathcal{B}^0_{el}(\gamma(f))(v) = \int_{\omega'_z>0,\,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)M'[\gamma^+ f(\varepsilon,\omega') - \gamma^- f(\varepsilon,\omega)]|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega', \tag{3.6}$$

$$\mathcal{B}^0_{in}(\gamma(f))(v) = \int_{\omega'_z>0,\,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)[M\gamma^+ f(\varepsilon',\omega') - M'\gamma^+ f(\varepsilon,\omega')]|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega', \tag{3.7}$$

for all $v \in \mathbb{R}^3$ such that $v_z < 0$. At this step, we underline that the diffusion asymptotic for this splitting would lead to the same (uncoupled) SHE model as in [14]. The operator can also be split in the following way :

$$\mathcal{B}^1_{el}(\gamma(f))(v) = \int_{\omega'_z>0,\,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)M[\gamma^+ f(\varepsilon',\omega') - \gamma^+ f(\varepsilon',\omega_*)]|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega', \tag{3.8}$$

$$\mathcal{B}^1_{in}(\gamma(f))(v) = \int_{\omega'_z>0,\,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)[M\gamma^+ f(\varepsilon',\omega_*) - M'\gamma^- f(\varepsilon,\omega)]|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega', \tag{3.9}$$

for all $v \in \mathbb{R}^3$ such that $v_z < 0$. We recall that $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z)$ and $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$. In the remainder of the paper, we drop the subscript 'el' in the elastic parts of the splittings. In order to derive a coupled SHE type model, we introduce the convex combination of these splittings as proposed in section 2. Eq. (2.4), (2.5) yield $\mathcal{B}^{\alpha,\eta} = \mathcal{B}^\alpha + \eta^2\mathcal{B}^\alpha_{in}$, with

$$\mathcal{B}^\alpha = (1-\alpha)\mathcal{B}^0 + \alpha\mathcal{B}^1, \quad \mathcal{B}^\alpha_{in} = (1-\alpha)\mathcal{B}^0_{in} + \alpha\mathcal{B}^1_{in} \tag{3.10}$$

and $\eta$ is the rescaling parameter introduced in section 2. Then the boundary condition (2.7) is rewritten

$$\mathcal{B}^{\alpha,\eta}(\gamma f) = \left\{(1-\alpha)\mathcal{B}^0 + \alpha\mathcal{B}^1 + \eta^2[(1-\alpha)\mathcal{B}^0_{in} + \alpha\mathcal{B}^1_{in}]\right\}(\gamma f) = 0. \tag{3.11}$$

We introduce two operators $\mathcal{K}^0$ and $\mathcal{K}^\alpha$ such that

$$\gamma^-(f) = \mathcal{K}^\alpha(\gamma^+(f)) := \mathcal{K}^0(\gamma^+(f)) + \frac{\alpha}{1-\alpha}\mathcal{B}^1(\gamma^+(f)),$$

$$\mathcal{K}^0(\gamma^+(f)) = \int_{\omega'_z,\varepsilon'>0} \kappa(\varepsilon',\omega' \to \varepsilon,\omega)M'\gamma^+ f(\varepsilon,\omega')|\omega'_z|2\varepsilon' d\varepsilon' d\omega'.$$

We note that $\mathcal{B}^0(\gamma(f)) = \mathcal{K}^0(\gamma^+(f)) - \gamma^-(f)$ according to (3.4). $\mathcal{K}^\alpha$ is an operator on the space of outgoing traces, with values in the space of incoming traces. The adjoint operator $\mathcal{K}^{\alpha,*}$ is defined from $L^2(\mathbb{R}^2 \times (-\infty, 0), |v_z|\mathbb{M}^{-1}(v)dv)$ on $L^2(\mathbb{R}^2 \times (0, \infty), |v_z|\mathbb{M}^{-1}(v)dv)$ by $\mathcal{K}^{\alpha,*} = \mathcal{K}^{0,*} + \alpha/(1-\alpha)\mathcal{B}^{1,*}$, with :

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}^{0,*}(\gamma^- f)(v) &= \int_{v' \in \mathbb{R}^3_-} \kappa(v \to v') M' \gamma^- f(\varepsilon, \omega') |v'_z| dv', \\
\mathcal{B}^{1,*}(\gamma^- f)(v) &= \int_{v' \in \mathbb{R}^3_-} \kappa(v \to v') M (\gamma^- f(\varepsilon', \omega') - \gamma^- f(\varepsilon', \omega_*)) |v'_z| dv',
\end{aligned}$$

for $v \in \mathbb{R}^3_+$.

## 3.3 Flux conservation

Using relation (3.2), it can be proved that the operator $(1-\alpha)\mathcal{B}^0 + \alpha\mathcal{B}^1$ conserves the normal flux of particles. First, we define the incoming and outgoing normal fluxes associated to a distribution function $f$ :

$$\mathbb{J}^-(\varepsilon) = \int_{\omega_z < 0} \gamma^- f(\varepsilon, \omega) \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega, \qquad \mathbb{J}^+(\varepsilon) = \int_{\omega_z > 0} \gamma^+ f(\varepsilon, \omega) \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega.$$

Then, we have :

**Lemma 3.2** *We assume that $\mathcal{B}^\alpha(f) = 0$. Then the normal flux is conserved :*

$$\mathbb{J}^- = \mathbb{J}^+. \tag{3.12}$$

**Proof:** We recall that the condition $\mathcal{B}^\alpha(f) = 0$ can also be written

$$\gamma^- f = \mathcal{K}^0(\gamma^+ f) + \frac{\alpha}{1-\alpha} \mathcal{B}^1(\gamma^+ f).$$

The incoming normal flux $\mathbb{J}^-$ is easily obtained by integrating the left hand side of this equation. On the other hand, relation (3.3) allows to prove that

$$\begin{aligned}
&\int_{\omega_z < 0} \mathcal{K}^0(\gamma^+ f) \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega = \\
&\qquad \int_{\omega_z > 0} \left( \int_{\omega'_z < 0,\ \varepsilon' > 0} \kappa(\varepsilon', \omega'_* \to \varepsilon, \omega_*) M' 2\varepsilon' |\omega'_z| d\varepsilon' d\omega' \right) \gamma^+ f \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega
\end{aligned}$$

which, in turn, is equal to $\mathbb{J}^+$ according to (3.4). It remains to prove that $\int \mathcal{B}^1(\gamma^+ f)\sqrt{2\varepsilon}|\omega_z| d\omega = 0$. But

$$\begin{aligned}
&\int_{\omega_z < 0} \int_{\varepsilon' > 0, \omega'_z > 0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M \gamma^+ f(\varepsilon', \omega') 2\varepsilon' |\omega'_z| d\omega' d\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega \\
&= \int_{\omega_z < 0} \int_{\varepsilon' > 0, \omega'_z > 0} \kappa(\varepsilon', \omega_* \to \varepsilon, \omega'_*) M \gamma^+ f(\varepsilon', \omega_*) 2\varepsilon' |\omega'_z| d\omega' d\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega \qquad (3.13) \\
&= \int_{\omega_z < 0} \int_{\varepsilon' > 0, \omega'_z > 0} \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) M \gamma^+ f(\varepsilon', \omega_*) 2\varepsilon' |\omega'_z| d\omega' d\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon} |\omega_z| d\omega \qquad (3.14)
\end{aligned}$$

which is the expected equality. In (3.13), the variables $\omega$ and $\omega'_*$ are swapped one for the other, while Eq. (3.14) is obtained thanks to relation (3.3). □

## 3.4 Mathematical properties of the collision operators

We first give the adapted functional setting for the study of the collision operators. We introduce a decomposition of the velocity domain $\mathbb{R}^3$ in order to make a difference between incoming and outgoing particles. We make an analogous decomposition for the unit sphere $\mathbb{S}^2$. We set :

$$\mathbb{R}^3_\pm = \{v \in \mathbb{R}^3 : \pm v_z > 0\}, \qquad \mathbb{S}^2_\pm = \{\omega \in \mathbb{S}^2 : \pm\omega_z > 0\}.$$

The adapted Hilbert spaces for the study of these operator are :

$$\begin{aligned} L^2_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_-) &= L^2_{\mathcal{M}} = \left\{ f : \int_{-\infty}^0 \int_{\mathbb{R}^3} [f(v,z)]^2 \mathcal{M}^{-1}(\underline{x}, z, v) dv dz < \infty \right\}, \\ L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm) &= \left\{ f : \int_{\mathbb{R}^3_\pm} [f(v)]^2 |v_z| \mathbb{M}^{-1} dv < \infty \right\}, \\ L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{S}^2_\pm) &= \left\{ f : \int_{\mathbb{S}^2_\pm} [f(\omega)]^2 |\omega_z| \mathbb{M}^{-1} d\omega < \infty \right\}, \end{aligned}$$

and, finally $\mathcal{E}^\pm = \left\{ f \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_\pm) : f(\varepsilon, \omega) \text{ is constant with respect to } \omega \right\}$, where $\mathcal{M}(\underline{x}, z, v) = \exp[-(|v|^2/2 + \Psi(\underline{x}, z))]$ and $\mathbb{M}(\underline{x}, v) = \exp[-(|v|^2/2 + \Psi_0(\underline{x}))]$. We note $M(v) = \exp(-|v|^2/2)$ and $M(\varepsilon) = \exp(-\varepsilon)$ (no confusion should be induced by this simplified notation). Note that these spaces are parametrized by $\underline{x}$ *via* the maxwellians $\mathbb{M}$ and $\mathcal{M}$. For any functional space $\mathbb{F}$, we denote by $\{,\}_{\mathbb{F}}$ the scalar product and by $\|\cdot\|_{\mathbb{F}}$ the norm on $\mathbb{F}$ when they are well defined. The orthogonal projection on $(\mathcal{E}^\pm)^\perp$ and on $\mathcal{E}^\pm$ are respectively denoted by $P^\pm$ and $Q^\pm$. We have $Q^\pm = I - P^\pm = \langle \cdot \rangle_\pm$ with

$$\langle \varphi \rangle_\pm = (1/|\mathbb{S}^2_\pm|) \int_{\mathbb{S}^2_\pm} \varphi(\omega) |\omega_z| d\omega$$

and $|\mathbb{S}^2_\pm| = \int_{\mathbb{S}^2_\pm} |\omega_z| d\omega$. We introduce the specular reflection operator $\mathcal{J}$ defined from $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$ onto $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$ by $(\mathcal{J}\varphi)(\omega) = \varphi(\omega_*)$, with $\omega = (\underline{\omega}, \omega_z)$ and $\omega_* = (\underline{\omega}, -\omega_z)$. Its adjoint $\mathcal{J}^*$ is the specular reflection operator from $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$ to $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$.

In the derivation of the SHE model, we are interested in the characterization of the equilibria of operator $I - \mathcal{K}^\alpha \mathcal{J}^*$ in $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$. To achieve this task, we make the following assumption

**Hypothesis 3.3** *We suppose that there exist two constants $C_0, C_1 > 0$ and a function $\underline{\kappa}(\varepsilon)$ such that :*

$$C_0\, \underline{\kappa}(\varepsilon) \underline{\kappa}(\varepsilon') \leq \kappa(\varepsilon', \omega' \to \varepsilon, \omega) \leq C_1\, \underline{\kappa}(\varepsilon) \underline{\kappa}(\varepsilon').$$

*In addition, we assume that*

$$\underline{\kappa} \geq \tilde{\kappa}, \qquad \kappa \leq K$$

*where $\tilde{\kappa} > 0$ and $K > 0$ are constants.*

Note as a first consequence that $\mathcal{J}$, $\mathcal{K}^0$, $\mathcal{B}^1$ (and therefore $\mathcal{K}^\alpha$ and $I-\mathcal{J}^*\mathcal{K}^\alpha$) are bounded operators from $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$ to $L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$.

**Proposition 3.4** *We assume that $\alpha < \frac{C_0}{C_0+C_1}$. (i) Under hypothesis 3.3 and for all $\varphi \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$, the following Darrozès-Guiraud-like inequalities hold :*

$$\{(I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*)\varphi,\varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)} = \{(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*})\varphi,\varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)} \geq c_\alpha \parallel \varphi - \langle\varphi\rangle_- \parallel^2_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)}, \tag{3.15}$$

*and for all $\varphi \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)$ :*

$$\{(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})\varphi,\varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)} = \{(I-\mathcal{J}^*\mathcal{K}^{\alpha})\varphi,\varphi\}_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)} \geq c_\alpha \parallel \varphi - \langle\varphi\rangle_+ \parallel^2_{L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_+)}, \tag{3.16}$$

*where $c_\alpha = 2|\mathbb{S}^2_\pm|\tilde{\kappa}^2 C_\alpha$, with $C_\alpha = C_0\left[1-\frac{\alpha}{1-\alpha}\frac{C_1}{C_0}\right]$.*
*(ii) We denote by $N(A)$ and $R(A)$ the null space and the range space of any operator $A$ respectively. We have :*

$$N(I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*) = N(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*}) = \mathcal{E}^-,\ R(I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*) = R(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*}) = (\mathcal{E}^-)^\perp.$$

*The restriction of $I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*$ to $N(I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*)^\perp = (\mathcal{E}^-)^\perp$ is an invertible linear operator from $(\mathcal{E}^-)^\perp$ onto $(\mathcal{E}^-)^\perp$. The inverse operator (that we note $(I-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*)^{-1}$) is bounded, of operator norm $\leq C_\alpha^{-1}$. The same properties hold true for $I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J}$,* mutatis mutandis.

**Proof:** Inequality (3.16) can be deduced from (3.15) by taking $\varphi = \mathcal{J}^*\phi$, with $\phi \in L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-)$, and remarking that $\mathcal{J}$ and $\mathcal{J}^*$ are isometries. It remains to prove (3.15). First, note that $\mathcal{E}^- \subset N(I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)$ and $\mathcal{E}^- \subset N(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{0,*}) = N((I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)^*)$. Therefore $\{(I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)\varphi,\varphi\} = \{(I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)(\varphi-\langle\varphi\rangle_-),(\varphi-\langle\varphi\rangle_-)\}$, since $\langle\varphi\rangle_- \in \mathcal{E}^-$. Consequently, we set $\psi = \varphi - \langle\varphi\rangle_- \in (\mathcal{E}^-)^\perp$. By a straightforward computation involving (3.3), we have

$$\{(I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)\psi,\psi\} = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^3_+}\kappa(v'\to v)M'M\left[\frac{\psi(\varepsilon,\omega'_*)}{M}-\frac{\psi(\varepsilon,\omega)}{M}\right]^2|v'_z||v_z|dv'dv\,e^{\Psi_0(\underline{x})}$$

and, remarking that $\langle\psi\rangle_- = 0$, hypothesis 3.3 yields

$$\{(I-\mathcal{K}^0\mathcal{J}^*)\psi,\psi\} \geq C_0|\mathbb{S}^2_\pm|\int_{\varepsilon'}\underline{\kappa}(\varepsilon')M'2\varepsilon'd\varepsilon'\int_{v_z<0}\underline{\kappa}\left(\frac{|v|^2}{2}\right)|\psi(v)|^2\,\mathbb{M}^{-1}|v_z|dv. \tag{3.17}$$

Now, an estimate is given for the operator $\mathcal{B}^1$. We have $\mathcal{E}^- \subset N(\mathcal{B}^1\mathcal{J}^*)$ and $\mathcal{E}^- \subset N(\mathcal{J}\mathcal{B}^{1,*}) = N((\mathcal{B}^1\mathcal{J}^*)^*)$. So, for $\psi = \varphi - \langle\varphi\rangle_-$, we have

$$\frac{\{\mathcal{B}^1\mathcal{J}^*\varphi,\varphi\}}{e^{\Psi_0(\underline{x})}} = -\frac{1}{2}\int\kappa(v'\to v)(\psi(\varepsilon',\omega'_*)-\psi(\varepsilon',\omega))(\psi(\varepsilon,\omega'_*)-\psi(\varepsilon,\omega))|v'_z|dv'|v_z|dv,$$

by (3.3). Consequently, by hypothesis 3.3 and using the fact that $\langle\psi\rangle_- = 0$, we obtain :

$$\frac{|\{\mathcal{B}^1\mathcal{J}^*\psi,\psi\}|}{e^{\Psi_0(\underline{x})}} \leq C_1|\mathbb{S}^2_\pm|\int_{\varepsilon'}\underline{\kappa}'M'2\varepsilon'\int_\varepsilon\underline{\kappa}M2\varepsilon\int_{\mathbb{S}^2_-}\left|\frac{\psi(\varepsilon,\omega)}{M}\frac{\psi(\varepsilon',\omega)}{M'}\right||\omega_z|d\omega d\varepsilon d\varepsilon'.$$

Then, we get

$$\begin{aligned}\left|\{\mathcal{B}^1\mathcal{J}^*\psi,\psi\}\right| &\leq C_1|\mathbb{S}^2_\pm|\left[\int_\varepsilon \underline{\kappa}(\varepsilon)M2\varepsilon\left(\int_{\mathbb{S}^2_-}\left|\frac{\psi(\varepsilon,\omega)}{M}\right|^2|\omega_z|d\omega\right)^{\frac{1}{2}}d\varepsilon\right]^2\exp\left(\Psi_0(\underline{x})\right)\\ &\leq C_1|\mathbb{S}^2_\pm|\int_{\varepsilon'}\underline{\kappa}(\varepsilon')M'2\varepsilon'd\varepsilon'\int_{v_z<0}\underline{\kappa}\left(\frac{|v|^2}{2}\right)|\psi(v)|^2\,\mathbb{M}^{-1}|v_z|dv, \qquad (3.18)\end{aligned}$$

where the Cauchy Schwarz inequality is used at each step. Then, combining estimates (3.17) and (3.18) and using the estimate $\underline{\kappa} > \tilde{\kappa}$, we obtain estimate (3.15). Finally, (ii) is a straightforward consequence of (i). □

We recall that $P^\pm$ is the orthogonal projection on $(\mathcal{E}^\pm)^\perp$ and $Q^\pm$ the orthogonal projection on $\mathcal{E}^\pm$. Then the following lemma holds :

**Lemma 3.5** *The operator $\mathcal{K}^\alpha$ satisfies :*

$$\mathcal{K}^\alpha Q^+ = Q^-\mathcal{K}^\alpha = \mathcal{J}Q^+ = Q^-\mathcal{J}, \qquad \mathcal{K}^\alpha P^+ = P^-\mathcal{K}^\alpha.$$

The proof of this lemma is a straightforward adaptation from[16].

In section 6, lemma 6.10, we will be led to consider the particular situation of an isotropic cross section $\kappa$ such that $\kappa(v' \to v) = C\underline{\kappa}(|v'|^2/2)\underline{\kappa}(|v|^2/2)$. According to the flux conservation property (3.2), this leads to

$$\kappa(v' \to v) = \frac{1}{2|\mathbb{S}^2_\pm|}. \qquad (3.19)$$

Note that such a section satisfies hypothesis 3.3.

# 4 Formal Derivation of the macroscopic model

We consider a sequence $(f_\eta)_\eta$ of solutions to the problem (2.6), (2.7), (2.8). We assume that there exists a function $f$ such that $f_\eta \to f$ strongly. We divide the formal asymptotics in several steps. First, we prove that the limit $f$ is a function of the total energy. Then we prove that this limit satisfies a continuity equation. An auxiliary problem will be considered, which allows to finally derive the current equation.

Note that all the results presented in this section are purely formal and our task is essentially a modelling one : the coupled SHE model equations are derived from a kinetic setting with formal tools only. In section 6 the derivation will be proven rigorously under more restrictive hypotheses.

The following change of variables will be useful in the remainder of the paper.

$$\mathrm{sign}(u_z)\sqrt{u_z^2 - 2\psi(z)} = v_z(z,u_z) \in \mathbb{R}, \qquad u_z(z,v_z) = \mathrm{sign}(v_z)\sqrt{v_z^2 + 2\psi(z)} \in D_z, \qquad (4.1)$$

where $D_z := (-\infty, -\sqrt{2\psi(z)}] \cup [\sqrt{2\psi(z)}, \infty)$ and sign stands for the sign function. For any function $g$, we set : $\widetilde{g}(z,u) = g(z,v)$, with $u = (\underline{v}, v_z)$.

## 4.1 The limit as a function of the energy

Taking formally the limit $\eta \to 0$ in Eq. (2.6), (2.7) shows that $f$ is the solution of the following system of equations :

$$\left(v_z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right) f = 0, \tag{4.2}$$

$$\gamma^- f = \mathcal{K}^\alpha \gamma^+ f. \tag{4.3}$$

We have :

**Lemma 4.1** *The solutions of (4.2), (4.3) are functions of the total energy only :*

$$f(t,x,v) = F(t,\underline{x},\frac{1}{2}|v|^2 + \psi(\underline{x},z))$$

**Proof:** The proof is analogous to that in[14]. It relies on the characterization of the equilibria of $I - \mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J}$ given in proposition 3.4. □

## 4.2 The continuity equation

We are now concerned with the derivation of the continuity equation (2.9). We first define the approximate current and density (the density of states $N$ is defined in (2.12)) :

$$F^\eta(t,\underline{x},\varepsilon) = \frac{1}{N(\underline{x},\varepsilon)}\int f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz, \quad J^\eta(t,\underline{x},\varepsilon) = \frac{1}{\eta}\int \underline{v} f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz. \tag{4.4}$$

The following formal lemma holds :

**Lemma 4.2** *We temporarily admit that $J^\eta \to J$ as $\eta \to 0$. Then $F$ and $J$ satisfy the continuity equation (2.9).*

**Proof:** We integrate Eq. (2.6) on a shell of constant total energy $\{\frac{1}{2}|v|^2 + \psi(x,z) = \varepsilon\}$. For this sake, we multiply this equation by $\delta_\varepsilon(x,v)$ and integrate it with respect to $v$ and $z$. We recall that $\delta_\varepsilon(x,v) = \delta(|v|^2/2 + \psi(\underline{x},z) - \varepsilon)$. We get $\int \partial_t f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz = N(\underline{x},\varepsilon)\partial_t F^\eta$. A straightforward application of Green's formula yields

$$\int (\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi\cdot\nabla_{\underline{v}}) f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz = \eta(\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon)J^\eta.$$

(We have used $\partial_\varepsilon \int \underline{v} f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz = -\int \underline{v} f^\eta \delta'_\varepsilon(x,v)dvdz$.) Green's formula also shows that

$$\int (v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}) f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dvdz = \int v_z f^\eta \delta_\varepsilon(x,v)dv|_{z=0} - \int v_z \partial_z(\Psi_0)\delta'_\varepsilon(x,v) f^\eta dvdz. \tag{4.5}$$

Remarking that $\partial_z \Psi_0 = 0$ and that $\delta_\varepsilon(x,v)_{|z=0} = \delta(|v|^2/2-\varepsilon)$ since $\psi(z=0)=0$, the left hand side of Eq. (4.5) can be written :

$$2\varepsilon \left( \int_{\mathbb{S}^2_+} \gamma^+ f^\eta(\varepsilon,\omega)|\omega_z| d\omega - \int_{\mathbb{S}^2_-} \gamma^- f^\eta(\varepsilon,\omega)|\omega_z| d\omega \right).$$

According to (3.11), we can replace the incoming trace $\gamma^- f^\eta$ by $\mathcal{K}^\alpha(\gamma^+ f^\eta) + \eta^2[\mathcal{B}^0_{in}(\gamma f^\eta) + \alpha/(1-\alpha)\mathcal{B}^1_{in}(\gamma f^\eta)]$. Thanks to the flux conservation (3.12) we have :

$$\int v_z f^\eta \delta_\varepsilon(x,v) dv|_{z=0} = -2\varepsilon\eta^2 \int_{\mathbb{S}^2_-} [\mathcal{B}^0_{in}(\gamma f^\eta) + \alpha/(1-\alpha)\mathcal{B}^1_{in}(\gamma f^\eta)]|\omega_z| d\omega.$$

Finally, we have :

$$\int \left( \partial_t f^\eta + \frac{1}{\eta}(\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi\cdot\nabla_{\underline{v}}) f^\eta + \frac{1}{\eta^2}(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}) f^\eta \delta_\varepsilon(x,v) \right) dv\, dz =$$
$$N(\underline{x},\varepsilon)\partial_t F^\eta + (\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi_0\partial_\varepsilon) J^\eta - \frac{2\varepsilon}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-} \mathcal{B}^\alpha_{in}(\gamma f^\eta)|\omega_z| d\omega. \tag{4.6}$$

The continuity of the trace garantees that $\gamma^\pm f^\eta \to F$ formally if the convergence $f^\eta \to F$ is strong enough. Taking the limit $\eta \to 0$ in Eq. (4.6), we get the expected continuity equation (2.9). □

## 4.3 Resolution of the auxiliary equation

In order to establish the current equation (2.10), the following problem (with $\varepsilon_0$, $\underline{x}$ given arbitrarily) has to be solved.

$$\left(-v_z\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)(\mathcal{M}\underline{\chi}) = \underline{v}\,\mathcal{M}\,\delta_{\varepsilon_0}(x,v),\ \gamma^+\left(\mathcal{M}\underline{\chi}\right) = \mathcal{K}^{\alpha,*}\left(\gamma^-\left(\mathcal{M}\underline{\chi}\right)\right). \tag{4.7}$$

We consider a more general formulation of this problem. Given a function $g(x,v)$, to find a solution $\chi$ to the following boundary value problem :

$$\left(-v_z\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\chi = g(x,v)\delta_{\varepsilon_0}(x,v), \qquad \gamma^+(\chi) = \mathcal{K}^{\alpha,*}(\gamma^-\chi). \tag{4.8}$$

We underline that problem (4.7) is a particular case of (4.8). Note that $\underline{\chi}$ and $\underline{v}\mathcal{M}\delta_{\varepsilon_0}(x,v)$ are vector valued functions (with values in $\mathbb{R}^2$) and that Eq. (4.7) must be understood componentwise. Omitting the dependence on $\underline{x}$ (which appears as a mere parameter in (4.7)), we prove the following formal lemma.

**Lemma 4.3** *(i) If $g$ satisfies $\int g\delta_\varepsilon(x,v)dzdv = 0$, the problem (4.8) has at least one solution of the form :*

$$\chi(\varepsilon_0, v, \underline{x}, z) = \theta_s(x,v)\delta_{\varepsilon_0}(x,v) + \theta_r(x,v). \tag{4.9}$$

*Under this condition, the solution $\chi$ is unique in the class of solutions of the form (4.9) with $\int \theta_s(x,v)\delta_\varepsilon(x,v)dvdz = \int \theta_r(x,v)dvdz = 0$.*
*(ii) We assume that $\nabla_{\underline{x}}\Psi = 0$ and set $\Psi_0 = 0$, so that $\Psi(x) = \psi(z)$. Then, in the case of an isotropic cross section of type (3.19), the explicit form of the solution of the auxiliary problem (4.7) is (for $i = 1, 2$)*

$$\begin{aligned}
\chi_i^{\varepsilon_0}(x,v) &= -\frac{\alpha M(\varepsilon_0)\varepsilon_0}{|\mathbb{S}^2_\pm|}\int_{\mathbb{S}^2_-} T\left(\varepsilon_0|\omega'_z|^2\right)|\omega'_z|d\omega'\sqrt{2\varepsilon_0}\omega_i \qquad (4.10)\\
&+ \frac{1}{2}\mathbb{T}\left(z, \frac{|v_z|^2}{2}+\psi(z)\right)M(\varepsilon_0)\sqrt{2\varepsilon_0}\delta\left(\varepsilon_0 - \frac{|v|^2}{2}-\psi(z)\right)\omega_i \qquad \forall v\in\mathbb{R}^3_+\\
\chi_i^{\varepsilon_0}(x,v) &= -\frac{\alpha M(\varepsilon_0)\varepsilon_0}{|\mathbb{S}^2_\pm|}\int_{\mathbb{S}^2_-} T\left(\varepsilon_0|\omega'_z|^2\right)|\omega'_z|d\omega'\sqrt{2\varepsilon_0}\omega_i + \left(T\left(\frac{|v_z|^2}{2}+\psi(z)\right)\right. \qquad (4.11)\\
&- \left.\frac{1}{2}\mathbb{T}\left(z, \frac{|v_z|^2}{2}+\psi(z)\right)\right)M(\varepsilon_0)\sqrt{2\varepsilon_0}\delta\left(\varepsilon_0 - \frac{|v|^2}{2}-\psi(z)\right)\omega_i \qquad \forall v\in\mathbb{R}^3_-
\end{aligned}$$

*where $\chi_i^{\varepsilon_0}$ represents the $i$-th component of the solution $\underline{\chi}^{\varepsilon_0}$. We have set (using (4.1))*

$$T(\varepsilon) = 2\int_{\psi^{-1}(\varepsilon)}^0 \left|v_z\left(\zeta,\sqrt{2\varepsilon}\right)\right|^{-1}d\zeta,\ \ \mathbb{T}(z,\varepsilon) = 2\int_z^0 \left|v_z\left(\zeta,\sqrt{2\varepsilon}\right)\right|^{-1}d\zeta,\ \ \forall\varepsilon>\psi(z),$$

*where $T(\varepsilon)$ is the bounce period of a particle of total energy $\varepsilon$ and $\mathbb{T}(z,\varepsilon)$ the duration of a bounce of a particle of total energy $\varepsilon$ from a position $z$.*

**Proof:** The proof of point (i) is analogous to the proof in the uncoupled case[14]. We only point out the differences. We use the change of variables (4.1). By this means, Eq. (4.8) can equivalently be written

$$-v_z(z,u_z)\frac{\partial\tilde{\chi}}{\partial z} = \tilde{g}\delta\left(\frac{|u|^2}{2}-\varepsilon_0\right), \qquad \gamma^+(\tilde{\chi}) = \mathcal{K}^{\alpha,*}(\gamma^-(\tilde{\chi})), \qquad (4.12)$$

with $\tilde{g}(x,u)\delta(|u|^2/2-\varepsilon_0) = g(x,v)\delta(|v|^2/2+\psi(\underline{x},z)-\varepsilon_0)$. Let $u$ be fixed with $u_z>0$. We integrate (4.12) between the turning point $Z(u_z^2/2) = \Psi^{-1}(\underline{x},u_z^2/2)$ and 0 (with fixed $\underline{x}$, $\Psi(\underline{x},\cdot)$ is invertible). Since $Z$ is the turning point, we have $\tilde{\chi}(Z,\underline{v},u_z) = \tilde{\chi}(Z,\underline{v},-u_z)$. We use the boundary condition in (4.12) and obtain (see[14] for details at this level)

$$(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})\gamma^+(\tilde{\chi}) = \mathcal{K}^{\alpha,*}\left(G\left(\underline{v},u_z\right)\delta\left(\frac{|u|^2}{2}-\varepsilon_0\right)\right), \qquad (4.13)$$

with $G(\underline{v},u_z) = \int_Z^0 [\tilde{g}(-u_z)+\tilde{g}(u_z)]\,|v_z(z,u_z)|^{-1}dz$. By a straightforward computation and writing $u$ as $\sqrt{2\varepsilon}\omega$, we can rewrite the right-hand side of Eq. (4.13) :

$$\mathcal{K}^{0,*}(G)\delta(\varepsilon-\varepsilon_0) + \frac{2\varepsilon_0\,\alpha}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa(\varepsilon,\omega\to\varepsilon_0,\omega')M[G(\varepsilon_0,\omega')-G(\varepsilon_0,-\omega)]|\omega'_z|d\omega',$$

and, since we search a solution $\chi$ of the form $\theta_s\delta_{\varepsilon_0}+\theta_r$, we are led to compute the value of $(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+(\widetilde{\theta}_s\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)+\widetilde{\theta}_r))$. We obtain

$$(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+(\widetilde{\theta}_s\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)+\widetilde{\theta}_r))=(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+\widetilde{\theta}_r)+(I-\mathcal{K}^{0,*}\mathcal{J})(\gamma^+\widetilde{\theta}_s)\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)$$

$$+\frac{2\varepsilon_0\,\alpha}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa(\varepsilon,\omega\to\varepsilon_0,\omega')M\left(\gamma^+\widetilde{\theta}_s(\varepsilon_0,\omega'_*)-\gamma^+\widetilde{\theta}_s(\varepsilon_0,-\omega_*)\right)|\omega'_z|d\omega'.$$

Then, identifying singular and regular terms, Eq. (4.13) reduces to the following set of equations :

$$(I-\mathcal{K}^{0,*}\mathcal{J})(\gamma^+\widetilde{\theta}_s)=\mathcal{K}^{0,*}(G), \tag{4.14}$$

$$(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})(\gamma^+\widetilde{\theta}_r)=\frac{2\varepsilon_0\,\alpha}{1-\alpha}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa(\varepsilon,\omega\to\varepsilon_0,\omega')M$$

$$\times\left[(\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)(\varepsilon_0,\omega'_*)-\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)(\varepsilon_0,-\omega_*))+(G(\varepsilon_0,\omega')-G(\varepsilon_0,-\omega))\right]|\omega'_z|d\omega'. \tag{4.15}$$

According to proposition 3.4, Eq. (4.14) admits a solution as soon as $\mathcal{K}^{0,*}(G)$ satisfies $Q^+\mathcal{K}^{0,*}(G)=0$. Following[14], one can establish that this condition is equivalent to the expected condition $\int g\delta_\varepsilon(x,v)dzdv=0$. On the other hand, we can solve Eq. (4.15) if

$$\int_{\mathbb{S}^2_+}\int_{\mathbb{S}^2_-}\kappa M\left[(\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)(\varepsilon_0,\omega'_*)-\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)(\varepsilon_0,-\omega_*))+(G(\varepsilon_0,\omega')-G(\varepsilon_0,-\omega))\right]|\omega'_z|d\omega'|\omega_z|d\omega=0,$$

which is obviously true by (3.3). We have thus established the existence of the traces $\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)$ and $\gamma^+(\widetilde{\theta}_r)$. Still by proposition 3.4, we know that we can choose $\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)$ and $\gamma^+(\widetilde{\theta}_r)$ such that $Q^+\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)=0$ and $Q^+\gamma^+(\widetilde{\theta}_s)=0$. At this level, the proof of (i) can be completed as in[14].

We now prove point (ii). One can easily check that $\underline{v}\,\mathcal{M}$ statisfies the solvability condition of lemma 4.3. It remains to give the explicit formulas (4.10), (4.11). We write $\chi_i^{\varepsilon_0}=\theta_r^{i,\varepsilon_0}+\theta_s^{i,\varepsilon_0}\delta_{\varepsilon_0}(x,v), i=1,2$. After some computations, formulas (4.14), (4.15) read

$$\gamma^+\widetilde{\theta}_s^{i,\varepsilon_0}=\langle\gamma^+\widetilde{\theta}_s^{i,\varepsilon_0}\rangle_+ \tag{4.16}$$

$$(I-\mathcal{K}^{\alpha,*}\mathcal{J})\left(M\gamma^+\widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}\right)=\frac{1}{2}\frac{\alpha}{1-\alpha}M(\varepsilon)M(\varepsilon_0)\left\{2\varepsilon_0\left(\langle\gamma^+\widetilde{\theta}_s^{i,\varepsilon_0}\rangle_+-\gamma^+\widetilde{\theta}_s^{i,\varepsilon_0}(\omega)\right)\right.$$

$$\left.-\left(\sqrt{2\varepsilon_0}\right)^3\int_{\mathbb{S}^2_-}T\left(\varepsilon_0|\omega'_z|^2\right)|\omega'_z|d\omega'\,\omega_i\right\}. \tag{4.17}$$

By choosing $\gamma^+\widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}$ and $\gamma^+\widetilde{\theta}_s^{i,\varepsilon_0}$ in $(\mathcal{E}^+)^\perp$, we have $\gamma^+\widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}=0$ by (4.16) and, after straightforward computations, Eq. (4.17) becomes

$$\gamma^+\widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}+\frac{\alpha}{1-\alpha}\int\varepsilon' M(\varepsilon')\gamma^+\widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}(\varepsilon',\omega)d\varepsilon'=-\frac{\alpha}{1-\alpha}\frac{M(\varepsilon_0)}{2|\mathbb{S}^2_\pm|}\left(\sqrt{2\varepsilon_0}\right)^3\int_{\mathbb{S}^2_-}T(\varepsilon_0|\omega'_z|^2)|\omega'_z|d\omega'\omega_i.$$

To determine the integral term on the left hand side, we integrate this equation with respect to $\varepsilon$ after multiplying by $\varepsilon M(\varepsilon)$. After simplifications, one gets

$$\int_{\varepsilon>0} \gamma^+ \widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0} \varepsilon M(\varepsilon) d\varepsilon = -\alpha \frac{M(\varepsilon_0)}{2|\mathbb{S}^2_\pm|} \left(\sqrt{2\varepsilon_0}\right)^3 \int_{\mathbb{S}^2_-} T(\varepsilon_0|\omega'_z|) d\omega' \, \omega_i,$$

which enables to write explicitly $\gamma^+ \widetilde{\theta}_r^{i,\varepsilon_0}$. On the other hand, it can be proven by integrating (4.12) between the turning point and 0 that the following relation holds (see[14])

$$\mathcal{J}\left(\gamma^- \widetilde{\chi}_i^{\varepsilon_0}\right)(\varepsilon,\omega) = \gamma^+ \widetilde{\chi}_i^{\varepsilon_0}(\varepsilon,\omega) + 2M(\varepsilon) T(\varepsilon|\omega_z|^2) \delta\left(\varepsilon_0 - \frac{|u|^2}{2}\right) \sqrt{2\varepsilon}\, \omega_i$$

which enables to exhibit the explicit form of the incoming traces. Once both incoming and outgoing traces are known, it is enough to integrate between $z < 0$ and 0 to recover the expected formulas. □

## 4.4 The current equation

To conclude the formal derivation of the coupled SHE model, we only have to prove that $J^\eta$ converges to a function $J$ such that $F$ and $J$ satisfy the current equation (2.10). The following formal lemma holds :

**Lemma 4.4** *The current equation (2.10) is satisfied.*

**Proof:** The proof is similar to the proof in the uncoupled case. See[14] for details. Let $\mathcal{M}\underline{\chi}$ be the solution to the auxiliary problem (4.7) with $\varepsilon_0$ given. Then, one can prove that

$$J^\eta \to -\int\int \left(\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi \cdot \nabla_{\underline{v}}\right) F \, \underline{\chi} \, dv dz \tag{4.18}$$

as $\eta \to 0$. We set $\tilde{\nabla} = \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi_0 \partial_\varepsilon$ and remark that, since $F$ is a function of the total energy only, $\left(\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi \cdot \nabla_{\underline{v}}\right) F = \underline{v} \cdot \tilde{\nabla} F$. Then, noting $\underline{\chi} = \underline{\theta}_s \delta_{\varepsilon_0}(x,v) + \underline{\theta}_r$, we straightforwardly obtain the expected current equation (2.10). □

The positivity of the diffusion tensor will be established in section 6.3.

# 5 Existence for the microscopic problem

In this section, we establish the existence of solutions to the microscopic problem (2.6), (2.7). Following[16] and[6], we make the following assumption on the initial datum $f_I$ :

**Hypothesis 5.1** *We assume that there exists a function $F_I$ such that $f_I(x,v) = F_I(\underline{x}, |v|^2/2 + \psi(\underline{x}, z))$ and that $f_I$ satisfies $f_I \in L^2(\mathbb{R}^2_{\underline{x}}; L^2_{\mathcal{M}})$, $(\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}} \Psi \cdot \nabla_{\underline{v}}) f_I \in L^2(\mathbb{R}^2_{\underline{x}}; L^2_{\mathcal{M}})$.*

We consider a simplified framework, and assume that the inelastic part of the collision operator vanishes. We make the following technical assumption :

**Hypothesis 5.2** *We restrict ourselves to the case where $\mathcal{B}^\alpha_{in} = 0$. The first and second derivatives of the potential $\Psi$ are bounded : $\nabla_x \Psi \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^2_{\underline{x}} \times \mathbb{R}^-)$.*

## 5.1 Green's formula

In the remainder of this paper, we shall use the change of variables (4.1) in integral terms. We have the following general formula : $\forall \phi(z,v) \in L^1((-\infty,0)\times\mathbb{R}^3)$, $\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2$,

$$\int_{-\infty}^{0}\int_{\mathbb{R}^3_v}\phi(z,v)dvdz = \int_{\mathbb{R}^3_u}\int_{\psi_{\underline{x}}^{-1}(u_z^2/2)}^{0}\widetilde{\phi}(z,u)\frac{|u_z|}{\sqrt{u_z^2-2\psi(\underline{x},z)}}dzdu, \tag{5.1}$$

where we denoted by $\psi_{\underline{x}}^{-1}(\varepsilon)$ the inverse function of $z \to \psi(\underline{x},z)$, $\underline{x}$ being fixed. We deduce from this the following expression of the density of states $N$ given by (2.12) :

$$N(\underline{x},\varepsilon) = \int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi_{\underline{x}}^{-1}(\varepsilon|\omega_z|^2)}^{0}\frac{\sqrt{2\varepsilon}|\omega_z|}{\sqrt{\omega_z^2-\psi(\underline{x},z)/\varepsilon}}dzd\omega. \tag{5.2}$$

We introduce some new functional spaces that take into account the position dependence. We set :

$$\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}} = L^2(\mathbb{R}^2_{\underline{x}};L^2_{\mathcal{M}}), \qquad \mathcal{L}^2_{\pm} = L^2_{\mathbb{M}}(\Gamma\times\mathbb{R}^3_{\pm}) = L^2(\mathbb{R}^2_{\underline{x}};L^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_{\pm})),$$

$$L^2_M = L^2(\mathbb{R}^2_{\underline{x}}\times(0,\infty)_{\varepsilon};\exp(\varepsilon)d\underline{x}d\varepsilon),$$

$$\mathbb{E}=\left\{\mathcal{F}\in\left(L^2_M\right)^2 :\| \mathcal{F} \|^2_{\mathbb{E}}=\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^3}\left|\underline{v}\cdot\mathcal{F}\left(\underline{x},\frac{|v|^2}{2}+\psi(\underline{x},z)\right)\right|^2\mathcal{M}^{-1}dvdx<+\infty\right\}.$$

We equip the Hilbert space $\mathbb{E}$ with the norm $\|\cdot\|_{\mathbb{E}}$.

We now aim at giving Green's formula for the transport operator $\mathcal{A}^\eta = \underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}} - \nabla_{\underline{x}}\Psi\cdot\nabla_{\underline{v}} + (1/\eta)(v_z\partial/\partial z - (\partial\Psi/\partial z)\partial/\partial v_z)$. Following[3],[22] and,[23] we define $H(\mathcal{A}^\eta) = \{f\in\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}} : \mathcal{A}^\eta f\in\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}\}$, $H_0(\mathcal{A}^\eta) = \{f\in H(\mathcal{A}^\eta) : \gamma^+ f\in\mathcal{L}^2_+\} = \{f\in H(\mathcal{A}^\eta) : \gamma^- f\in\mathcal{L}^2_-\}$. According to[3],[22],[23] and by hypothesis 5.2, we have

**Lemma 5.3** *For $g$ and $h$ in $H_0(\mathcal{A}^\eta)$ compactly supported with respect to $v$, the following Green formula holds :*

$$\{\mathcal{A}^\eta g,h\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} = -\{g,\mathcal{A}^\eta h\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} + \frac{1}{\eta}\left[\{\gamma^+g,\gamma^+h\}_{\mathcal{L}^2_+} - \{\gamma^-g,\gamma^-h\}_{\mathcal{L}^2_-}\right]. \tag{5.3}$$

## 5.2 Resolution of an approximate kinetic problem

Applying the Hille-Yosida theorem to the transport operator $\mathcal{A}^\eta$ with domain $D(\mathcal{A}^\eta) = \{f\in H(\mathcal{A}^\eta) : \gamma^+ f\in\mathcal{L}^2_+, \gamma^- f = \mathcal{K}^\alpha(\gamma^+ f)\}$ would be enough to prove the existence for the kinetic problem. Nevertheless, it is not obvious that $\mathcal{A}^\eta$ with domain $D(\mathcal{A}^\eta)$ be accretive. Indeed, since $\mathcal{K}^\alpha$ acts like the identity on $\mathcal{E}^\pm$, we are lacking for some estimates on the traces. Following [16] and[6] (see the latter for details), we introduce an approximate problem. Let $\tau>0$ be a small approximating parameter. We approach the boundary operator by

$$\mathcal{K}^\alpha_\tau = \mathcal{K}^0P^+ + \frac{\alpha}{1-\alpha}\mathcal{B}^1P^+ + \frac{1}{1+\tau}\mathcal{J}Q^+ = \mathcal{K}^\alpha P^+ + \frac{1}{1+\tau}\mathcal{J}Q^+. \tag{5.4}$$

We consider the associated initial boundary value problem :

$$\eta\partial_t f_\tau^\eta + \mathcal{A}_\tau^\eta f_\tau^\eta = 0, \qquad f_{\tau|t=0}^\eta = F_\tau, \tag{5.5}$$

$$\gamma^- f_\tau^\eta = \mathcal{K}_\tau^\alpha \gamma^+ f_\tau^\eta, \tag{5.6}$$

with $F_\tau \in D(\mathcal{A}_\tau^\eta) = \{f \in H(\mathcal{A}^\eta) : \gamma^+ f \in \mathcal{L}_+^2, \gamma^- f = \mathcal{K}_\tau^\alpha(\gamma^+ f)\}$.

We denote by $\mathcal{A}_\tau^\eta$ the transport operator $\mathcal{A}^\eta$ with domain $D(\mathcal{A}_\tau^\eta)$. We notice that, for $\tau = 0$, we recover the microscopic problem (2.6), (2.7), (2.8) since $\mathcal{K}^0 = \mathcal{K}^0 P^+ + \mathcal{J} Q^+$ and $\mathcal{B}^1 = \mathcal{B}^1 P^+$. Thanks to lemma 3.5, we can establish the following result.

**Lemma 5.4** *If $\alpha < \frac{C_0}{C_0+C_1}$, then the boundary collision operator $\mathcal{K}_\tau^\alpha$ satisfies $\| \mathcal{K}_\tau^\alpha \|_{\mathcal{L}(\mathcal{L}_+^2, \mathcal{L}_-^2)} < 1$.*

**Proof:** According to proposition 3.4, for any test function $\varphi$, one has $\{\mathcal{J}^* \mathcal{K}^\alpha P^+ \varphi, \varphi\} \leq (1 - 2|\mathbb{S}_\pm^2|\tilde{\kappa}^2 C_\alpha) \| \varphi \|^2$, and $1 - 2|\mathbb{S}_\pm^2|\tilde{\kappa}^2 C_\alpha < 1$ if $\alpha < \frac{C_0}{C_0+C_1}$, so that $\| \mathcal{K}^\alpha P^+ \| < 1$ for these values of $\alpha$. One concludes by remarking that $\| \mathcal{K}_\tau^\alpha \| \leq \max\left\{\| \mathcal{K}^\alpha P^+ \|, \left(\frac{1}{1+\tau}\right) \| Q^+ \|\right\}$. □

This estimate is the only requirement to adapt easily Proposition 4.1 and Lemmata 4.2-4.3 in[16]. Namely, we have :

**Proposition 5.5** *(i) For all $\eta > 0$, for all $F_\tau \in D(\mathcal{A}_\tau^\eta)$, there exists a unique function $f_\tau^\eta \in C([O,T]; D(\mathcal{A}_\tau^\eta)) \cap C^1([0,T]; \mathcal{L}_\mathcal{M}^2)$ that solves (5.5), (5.6). We also have*

$$\| f_\tau^\eta \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} \leq \| F_\tau \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2}, \qquad \| \eta\partial_t f_\tau^\eta \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} = \| \mathcal{A}^\eta f_\tau^\eta \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} \leq \| \mathcal{A}^\eta F_\tau \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} .$$

*(ii) Let $F_I$ be like in hypothesis 5.1. Then there exists a sequence $(F_\tau)_{\tau>0}$ such that $F_\tau \in D(\mathcal{A}_\tau^\eta)$ and $F_\tau \rightharpoonup F_I$, $\mathcal{A}^\eta F_\tau \rightharpoonup \mathcal{A}^\eta F_I$ in $\mathcal{L}_\mathcal{M}^2$ - weak as $\tau \to 0$.*

## 5.3 Trace estimates and existence for the kinetic problem

We now establish estimates on the boundary values in order to give sense to the boundary condition (2.7).

**Lemma 5.6** *We assume that $\Psi$ satisfies hypothesis 5.2. We also suppose that $\alpha < C_0/(C_0+C_1)$. Then for all $f \in D(\mathcal{A}_\tau^\eta)$, there exists a constant (independent of $\tau$) $C > 0$ such that :*

$$\| P^- \gamma^- f \|_{\mathcal{L}_-^2}^2 \leq \| P^+ \gamma^+ f \|_{\mathcal{L}_+^2}^2 \leq \frac{2\eta}{1 - (1 - 2|\mathbb{S}_\pm^2|\tilde{\kappa}^2 C_\alpha)^2} \{\mathcal{A}^\eta f, f\}_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} \leq C\eta \| f \|_{\mathcal{A}^\eta}^2,$$

*where $\| g \|_{\mathcal{A}^\eta} = \| g \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2} + \| \mathcal{A}^\eta g \|_{\mathcal{L}_\mathcal{M}^2}$ is the graph norm and $C_\alpha$ is defined in proposition 3.4.*

**Proof:** We only give the outline of this proof, which is analogous to that of lemma 4.4 in [16]. We apply the Green formula (5.3) to $g = h = f$ times a cut off function $\rho_R(|v|^2/2) = \rho\left(|v|^2/(2R)\right)$ with $\rho \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^+)$ such that $0 \leq \rho \leq 1, \rho(u) = 1$ for $u < 1$ and $\rho(u) = 0$ for $u > 2$.

The cut off function has to be used for $f$ is not necessarily compactly supported with respect to $v$. After some computations, we obtain

$$\begin{aligned}\{\mathcal{A}^\eta \rho_R f, \rho_R f\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} &\geq \frac{1}{\eta}\left[\int\int_{\mathbb{R}^3_+}\left(|P^+\gamma^+ f|^2 - \left|\mathcal{J}^*\mathcal{K}^\alpha P^+\gamma^+ f\right|^2\right)|\rho_R|^2\mathbb{M}^{-1}|v_z|dvd\underline{x}\right] \\ &\geq \frac{1-(1-2|\mathbb{S}^2_\pm|\tilde{\kappa}^2 C_\alpha)^2}{\eta}\left[\int\int |P^+\gamma^+ f|^2|\rho_R|^2\mathbb{M}^{-1}|v_z|dvd\underline{x}\right] \qquad (5.7)\end{aligned}$$

according to proposition 3.4. Using the boundedness of $\Psi$ leads to $2\{\mathcal{A}^\eta(\rho_R f), \rho_R f\} \leq \| \mathcal{A}^\eta f \|^2 + \| f \|^2 + (C(\eta)/\sqrt{R}) \| f \|^2$. Taking the limit $R \to \infty$ in this estimate and recalling (5.7) allows to conclude. □

It remains to give some a priori estimates on the projections on $\mathcal{E}^\pm$. For this sake, we first notice that, for $f \in D(\mathcal{A}^\eta_\tau)$, we have $\gamma^- f = \mathcal{K}^\alpha_\tau \gamma^+ f$. By lemma 3.5 and using the form (5.4) of $\mathcal{K}^\alpha_\tau$, the orthogonal projection of the trace on $\mathcal{E}^-$ reads $Q^-\gamma^- f = \frac{1}{1+\tau}\mathcal{J}Q^+\gamma^+ f$. Therefore, there exists a function $q(f) = q(\underline{x}, |v|)$ which does not depend on $z$ and $\omega$, such that :

$$q = (1+\tau)Q^-\gamma^- f \text{ on } \Gamma \times \mathbb{R}^3_-, \qquad q = Q^+\gamma^+ f \text{ on } \Gamma \times \mathbb{R}^3_+. \qquad (5.8)$$

**Lemma 5.7** *If $f \in D(\mathcal{A}^\eta_\tau)$, then there exists a constant (independent of $\tau$) $C > 0$ such that*

$$\| q(f) \|^2_{\Gamma\times\mathbb{R}^3,R} \leq C(\eta \| f \|^2_{\mathcal{A}^\eta} + R \| f \|^2_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}),$$

*where, for $R > 0$, $\| \cdot \|_{\Gamma\times\mathbb{R}^3,R}$ is defined by*

$$\| \varphi \|^2_{\Gamma\times\mathbb{R}^3,R} = \int_{\Gamma\times\mathbb{R}^3} |\varphi|^2\mathbb{M}^{-1}s_R(v_z)v_z d\underline{x}dv,$$

*with $s_R$ a regularization of the sign function ($s_R(u) = sign(u)$ if $|u| \geq 1/R$, $s_R(u) = Ru$ if $|u| \leq 1/R$). We denote by $\mathcal{L}^2_R$ the associated space.*

**Proof:** The proof of this lemma is inspired from[6]. If $f \in D(\mathcal{A}^\eta_\tau)$, then one can straightforwardly verify that $s_R(v_z)f \in H_0(\mathcal{A}^\eta)$. To apply Green's formula (5.3), we need compactly supported functions with respect to $v$. We should multiply by the cut off function $\rho_r$ and take the limit $r \to \infty$ just as in the proof of lemma 5.6. Nevertheless, the limit $R \to \infty$ does not raise any problem, so we omit details and apply Green's formula to $s_R(v_z)f$ as if it were compactly supported. This leads to

$$\eta\{\mathcal{A}^\eta f, f s_R(v_z)\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} = -\eta\{f, \mathcal{A}^\eta(s_R)f\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} - \eta\{f, s_R\mathcal{A}^\eta(f)\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}$$

$$+\{\gamma^+ f, s_R\gamma^+ f\}_{\mathcal{L}^2_+} - \{\gamma^- f, s_R\gamma^- f\}_{\mathcal{L}^2_-}.$$

In addition, $\mathcal{A}^\eta\left(s_R(v_z)\right) = \left(\partial\Psi/\partial z\right) R\mathbb{1}_{\{|v_z|\leq 1/R\}}$, where $\mathbb{1}_A$ denotes the indicator function of a set $A$. Straightforward computations based on (5.8) yield

$$2\eta\{\mathcal{A}^\eta f, f s_R(v_z)\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} - \left\{ f\frac{\partial\Psi}{\partial z} R\mathbb{1}_{[|v_z|\leq 1/R]}, f\right\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} = \int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} |P^+\gamma^+ f|^2 s_R|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x}$$
$$+\int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} |q(f)|^2 s_R|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} + 2\int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} \left(P^+\gamma^+ f\right)\left(q(f)\right) s_R|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x}$$
$$+\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} |P^-\gamma^- f|^2(-s_R)|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} + \frac{1}{1+\tau}\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} |q(f)|^2(-s_R)|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x}$$
$$+\frac{2}{1+\tau}\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} \left(P^-\gamma^- f\right)\left(q(f)\right)(-s_R)|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x}.$$

The third and last terms of the right hand side are dominated respectively by the bounds (5.9) and (5.10)

$$2\int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} |P^+\gamma^+ f|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} |q(f)|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} \tag{5.9}$$

$$2\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} |P^-\gamma^- f|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} + \frac{1}{2(1+\tau)}\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} |q(f)|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} \tag{5.10}$$

This yields :

$$\int_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^2} |q(f)|^2 s_R(v_z)v_z\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} \leq C\left[2\eta\{\mathcal{A}^\eta f, f s_R(v_z)\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} - \left\{ f\frac{\partial\Psi}{\partial z} R\mathbb{1}_{[|v_z|\leq 1/R]}, f\right\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}\right.$$
$$\left. + \int_{\mathbb{R}^3_+\times\mathbb{R}^2} |P^+\gamma^+ f|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x} + \int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^2} |P^-\gamma^- f|^2|v_z|\mathbb{M}^{-1}dvd\underline{x}\right]. \tag{5.11}$$

By hypothesis 2.1, $-\partial\Psi/\partial z \geq 0$ and, by hypothesis 5.2, we have : $-\{f\partial\Psi/\partial z R\mathbb{1}_{[|v_z|\leq 1/R]}, f\} \leq C\times R \parallel f \parallel^2_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}$. Moreover, $2\eta\{\mathcal{A}^\eta f, f s_R(v_z)\}_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}$ and the two last terms of the right hand side of (5.11) can be bounded by $\eta \parallel f \parallel^2_{\mathcal{A}^\eta}$ thanks to lemma 5.6, which allows to conclude. □

The existence for the kinetic problem can now be stated. The proof of the following proposition can be found in.[16]

**Proposition 5.8** *We assume that hypotheses 2.1-5.2 hold true and that $\alpha < C_0/(C_0+C_1)$. Then there exists a solution $f^\eta$ to problem (2.6), (2.7) such that $f^\eta \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}), \mathcal{A}^\eta f^\eta \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}), P^+\gamma^+ f^\eta \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_+), Q^+\gamma^+ f^\eta \in L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_R(\Gamma\times\mathbb{R}^3_+))$ for all $R>0$, and the boundary condition is satisfied in the sense that $P^-\gamma^- f^\eta = \mathcal{K}^\alpha P^+\gamma^+ f^\eta$, and $Q^-\gamma^- f^\eta = Q^+\gamma^+ f^\eta$. We also have $\int_0^T \parallel P^+\gamma^+ f^\eta(t) \parallel^2_{\mathcal{L}^2_+} dt \leq C\eta^2 \parallel F_I \parallel_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}$.*

As a conclusion of this section, we underline that A. Mellet and S. Mischler developed an alternative existence proof for the Vlasov equation with local (in energy) elastic-diffusive boundary conditions.[20] We postpone to future work the adaptation to non necessarily local boundary operators.

# 6 From the kinetic problem to the coupled SHE model : Rigorous Asymptotics

In this section, we present the rigorous derivation of the SHE model (2.9), (2.10) from the kinetic problem (2.6), (2.7). The proof is split in several steps. A priori estimates established in the former section allows to give some weak convergence statements for the sequence of solutions $(f^\eta)_\eta$ of the kinetic equation. Then, by an adaptation of lemma 4.1 it can be proven that the weak limit is a function that depends only on the total energy of the particles. The next step is to derive a weak form of the current equation (2.10). For this sake, we have to achieve the rigorous resolution of the auxiliary problem studied (formally) in section 4.3, and to establish the weak convergence of the approximate current $\underline{J^\eta}$. We also prove the positivity of the diffusion tensor. Finally, we conclude the rigorous derivation by giving a meaning to the continuity equation (2.9).

We strengthen hypothesis 5.2 by considering that the confining potential field $\Psi$ is constant with respect to $\underline{x}$. Precisely, we require :

**Hypothesis 6.1** *The potential field $\Psi$ satisfies $\nabla_{\underline{x}}\Psi = 0$. Consequently, $\Psi_0$ is a constant. We take it equal to zero, so that $\Psi(x) = \psi(z)$.*

The extension to potential fields depending on $\underline{x}$ would requires some regularity results on the solution of the auxiliary problem that are not established in this work. In addition, hypotheses 2.1 to 6.1 are assumed to hold in the whole section.

## 6.1 Weak convergence of $f^\eta$

As in[16] and[6], the convergence statements are based on the estimates that we obtained in the previous sections :

**Lemma 6.2** *The following estimates are satisfied by the solution $f^\eta$ of the kinetic problem (2.6), (2.7), (2.8) constructed in section 5 under hypotheses 2.1 to 5.2 :*

$$\| f^\eta \|_{C^0\left([0,T];\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}\right)} \leq \| F_I \|_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}, \tag{6.1}$$

$$\int_0^T \| P^+\gamma^+ f^\eta(t) \|^2_{\mathcal{L}^2_+}\, dt \leq C\eta^2 \| F_I \|^2_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}, \tag{6.2}$$

$$\int_0^T \| P^-\gamma^- f^\eta(t) \|^2_{\mathcal{L}^2_-}\, dt \leq C\eta^2 \| F_I \|^2_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}, \tag{6.3}$$

$$\int_0^T \| q(f^\eta) \|^2_{\Gamma\times\mathbb{R}^3,R} \leq C_R \| F_I \|^2_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}}, \tag{6.4}$$

*where $q(f^\eta)$ is defined by (5.8) with $\tau = 0$.*

As a straight consequence of (6.1), $(f^\eta)_\eta$ admits a subsequence (still denoted by $(f^\eta)$) that converges to a function $f^0$ in $L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}})$ weak star as $\eta \to 0$. Inequalities (6.2), (6.3) give the strong convergence of the traces $P^+\gamma^+ f^\eta$ and $P^-\gamma^- f^\eta$ to zero in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_\pm)$ as $\eta \to 0$.

Also, by a diagonal extraction process, (6.4) shows that, $q(f^\eta)$ converges to a function $q(\underline{x}, |v|, t)$ in $L^2(0,T;\mathcal{L}^2_R)$ weakly for any $R > 0$. In order to give a precise meaning to the limits of the traces, we remark that the boundedness of $f^\eta$ in $L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_\mathcal{M})$ implies the boundedness of $\mathcal{A}^\eta f^\eta$ in $H^{-1}(0,T;\mathcal{L}^2_\mathcal{M})$ by Eq. (2.6) ; this implies (according to[3],[22] and[23]) the boundedness of the sequence $(v_z f^\eta)_\eta$ in $H^{-1}(0,T;H^{-1/2}(\Gamma \times B_R))$ (where $B_R$ is the centered ball with radius $R$ in the velocity space) for any $R$. Thanks to this estimate, we obtain the convergence in the distributional sense of the traces of $f^\eta$ on $\Gamma \times \mathbb{R}^3$ to the traces of $f^0$. At last, the traces $\gamma^\pm f^0$ of $f^0$ on $\Gamma \times \mathbb{R}^3_\pm$ satisfy $P^-\gamma^- f^0 = P^+\gamma^+ f^0 = 0$, $Q^-\gamma^- f^0 = Q^+\gamma^+ f^0 = q$, so that

$$f^0|_{\Gamma\times\mathbb{R}^3} = q \tag{6.5}$$

is independent of the angular part of the velocity variable.

We easily deduce from Green's formula (5.3) a weak formulation of Eq. (2.6), (2.7), (2.8) (remember that, in this section, $\nabla\underline{x}\Psi = 0$) :

**Lemma 6.3** *Let $f^\eta$ be a solution to the kinetic problem (2.6), (2.7) given by proposition 5.8. Then, $\forall\phi \in W^{1,1}_{loc}(0,T;\mathcal{L}^2_\mathcal{M}) \cap L^1_{loc}(0,T;H_0(\mathcal{A}^\eta))$, compactly supported with respect to $v$, such that $\phi(T,\cdot,\cdot) = 0$, we have*

$$\begin{aligned}&\int_0^T \int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} f^\eta \left(\eta\frac{\partial\phi}{\partial t} + \underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}\phi + \frac{1}{\eta}\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{d\psi}{dz}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\phi\right)\mathcal{M}^{-1}dtdxdv \\ &+\ \eta\int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} f_I\phi|_{t=0}\mathcal{M}^{-1}dxdv = \frac{1}{\eta}\int_0^T \{\gamma^+ f^\eta, \gamma^+\phi - \mathcal{K}^{\alpha,*}\gamma^-\phi\}_{\mathcal{L}^2_+}dt.\end{aligned} \tag{6.6}$$

**Proof:** Eq. (6.6) is established by writing the weak formulation of the perturbated problem (5.5), (5.6) and letting $\tau$ tend to 0 in this weak formulation. □

As a consequence, one can prove that $f^0$ is a function of the total energy only.

**Lemma 6.4** *The limit function $f^0$ depends on $z$, $v$ through the total energy only : $f^0(t,x,v) = F\left(t, \underline{x}, \frac{1}{2}|v|^2 + \psi(z)\right)$.*

**Proof:** We use the weak formulation (6.6) with a test function $\phi$ such that $\gamma^\pm\phi = 0$. The boundedness of $f^\eta$ in $L^\infty([0,T];\mathcal{L}^2_\mathcal{M})$ implies that (by taking the limit $\eta \to 0$ in (6.6)) $\int f^0$ $(v_z\partial/\partial z - (d\psi/dz)\partial/\partial v_z)\phi\mathcal{M}^{-1}dtdxdv = 0$. This, supplemented with (6.5), proves that $f^0$ happens to be a distributional solution of

$$\left(v_z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{d\psi}{dz}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)f^0 = 0, \qquad f^0|_{\Gamma\times\mathbb{R}^3} = q.$$

The remainder of the proof is a straightforward adaptation of lemma 4.1 where we replace (4.3) by $\gamma^- f = q$. (We refer to[14] for the details of the proof of lemma 4.1.) □

## 6.2 Resolution of the auxiliary problem

The rigorous derivation of the current equation involves the consideration of the following problem. Given a function $\Phi(\underline{x}, \varepsilon)$, we search the solution $\phi$ of :

$$-\left(v_z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{d\psi}{dz}\frac{\partial}{\partial v_z}\right)\phi = \underline{v}\cdot\Phi, \tag{6.7}$$

$$\gamma^+\phi = \mathcal{K}^{\alpha,*}(\gamma^-\phi). \tag{6.8}$$

This can come into view as defining an inverse operator to the differential operator $\mathcal{T}_z = -v_z\partial/\partial z + (d\psi/dz)\partial/\partial z$ defined on the set $\{\phi \in \mathcal{L}^2_{\mathcal{M}} : \mathcal{T}_z\phi \in \mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}, \gamma^+\phi \in \mathcal{L}^2_+, \gamma^+\phi = \mathcal{K}^{\alpha,*}(\gamma^-\phi)\}$. Since we consider confined particles, it is quite natural to require the bounce period $T(u_z^2/2)$ of a particle of tranverse velocity $u_z$ at the origin $z = 0$ to remain finite. In fact, we have to suppose more about the potential field in order to prove estimates on the solution $\phi$ of the auxiliary problem (6.7), (6.8) : we assume that the bounce period remains bounded uniformly with respect to the energy $u_z^2/2$ in a neighborhood of 0 (we expect the slope of the potential field not to be too rough near 0 to avoid attachment of particles to the wall) and near $+\infty$.

**Hypothesis 6.5** *We assume that $\psi$ is such that $\forall\varepsilon > 0$, $T(\varepsilon) < +\infty$, and there exists a constant $C > 0$ such that $T(\varepsilon) \to C$ as $\varepsilon \to +\infty$ or $\varepsilon \to 0$.*

In the present work, we do not try to relax this hypothesis. Nevertheless, we give an example of such a potential.

**Lemma 6.6** *The harmonic potential $\psi_h(z) = \frac{1}{2}\omega^2 z^2$ (where $\omega$ is the angular frequency of the harmonic oscillator) fulfils the conditions of hypothesis 6.5.*

**Proof:** We can explicitly compute the bounce period $T_h$ in this case. We find $T_h(\varepsilon) = \pi/\omega$, which obviously satisfies the expected estimates. □

Then :

**Proposition 6.7** *Under hypothesis 6.5, if $\Phi(\underline{x}, \varepsilon) \in \mathbb{E}$, then there exists a unique function $\phi \in \mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$ that solves (6.7), (6.8). As a consequence, we can define an operator $\mathcal{S}_z$ from $\mathbb{E}$ to $\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$ such that, for $\Phi \in \mathbb{E}$, $\mathcal{S}_z(\Phi) = \phi$, where $\phi$ is the solution of (6.7), (6.8). The following estimates hold :*

$$\| \gamma^-\mathcal{S}_z(\Phi) \|_{\mathcal{L}^2_-} \leq C \| \Phi \|_{\mathbb{E}}, \qquad \| \gamma^+\mathcal{S}_z(\Phi) \|_{\mathcal{L}^2_+} \leq C \| \Phi \|_{\mathbb{E}}, \tag{6.9}$$

$$\| \mathcal{S}_z(\Phi) \|_{\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}} \leq C \| \Phi \|_{\mathbb{E}} . \tag{6.10}$$

**Proof:** We use the change of variable (4.1). Then Eq. (6.7), (6.8) are written :

$$-v_z(z, u_z)\frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial z} = \underline{u}\cdot\Phi(\underline{x}, |u|^2/2), \qquad \gamma^+\tilde{\phi} = \mathcal{K}^{\alpha,*}(\gamma^-\tilde{\phi}). \tag{6.11}$$

Given $\pm u_z > 0$, we integrate the first equation in (6.11) between $\psi^{-1}(u_z^2/2)$ and 0 for all $\underline{x} \in \mathbb{R}^2$. We combine the two so-obtained expressions and use the definition of the turning point $\psi^{-1}(u_z^2/2)$. Together with the boundary condition in (6.11), it gives

$$\gamma^-\tilde{\phi} - \mathcal{J}\gamma^+\tilde{\phi} = (I - \mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*})\gamma^-\tilde{\phi} = 2\int_{\psi^{-1}(u_z^2/2)}^{0} |v_z(z,u_z)|^{-1} dz\ \underline{u}\cdot\Phi. \tag{6.12}$$

According to proposition 3.4, the solvability condition of Eq. (6.12) is (with $u = \sqrt{2\varepsilon}\omega$) :

$$T(u_z^2/2)\ \underline{u}\cdot\Phi \in \mathcal{L}^2_{\mathbb{M}}(\mathbb{R}^3_-), \qquad \int_{\mathbb{S}^2_-} T(\varepsilon|\omega_z|^2)\underline{u}\cdot\Phi|\omega_z|d\omega = 0. \tag{6.13}$$

Since $T(v_z^2/2)\ \underline{u}\Phi$ is even with respect to $v_z$, the first part of (6.13) is in fact $\int \left(T(u_z^2/2)\right)^2\ |\underline{u}\cdot\Phi|^2$ $M^{-1}|u_z|du < +\infty$, and hypothesis 6.5 ensures that this convergence holds as soon as $\Phi \in \mathbb{E}$ as one can see it by applying the change of variables (5.1). The second part of (6.13) is obviously true by oddness with respect to $\underline{\omega}$. Therefore proposition 3.4 gives the existence of a unique function $\gamma^-\tilde{\phi}(\underline{x},u) \in L^2\left(\mathbb{R}^2_{\underline{x}};(\mathcal{E}^-)^\perp\right)$ which satisfies (6.12). Eq. (6.12) gives the existence and uniqueness of $\gamma^+\tilde{\phi}(\underline{x},u) \in L^2\left(\mathbb{R}^2_{\underline{x}};(\mathcal{E}^+)^\perp\right)$. In addition, the same equation supplied with the boundedness of $(I-\mathcal{J}\mathcal{K}^{\alpha,*})^{-1}$ gives the first part of (6.9), while, with the boundedness of $\mathcal{K}^{\alpha,*}$, it gives the second estimate.

Let now $z < 0$ be fixed. Let $u_z > 0$. Integrating (6.11) between $z$ and 0 yields

$$\tilde{\phi}(z,\pm u_z) = \gamma^\pm\tilde{\phi}(0,\pm u_z) \pm \int_z^0 |v_z(\zeta,\pm u_z)|^{-1} d\zeta\ \underline{u}\cdot\Phi(\underline{x},|u|^2/2). \tag{6.14}$$

Integrating (6.14) gives (6.10) thanks to estimates (6.9) and hypothesis 6.5. □

## 6.3 Positivity of the diffusion tensor

We now give some properties of the diffusion tensor. We introduce the following bilinear form on $\mathbb{E}$

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2) = \int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}}\int_{\varepsilon'>0}\int_{\varepsilon>0} \Phi_1(\varepsilon)^T\mathbb{D}(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon')\Phi_2(\varepsilon')M^{-1}d\varepsilon d\varepsilon' d\underline{x},$$

where $M(\varepsilon) = \exp(-\varepsilon)$ is the maxwellian, and $\mathbb{D}$ is the diffusion tensor defined by

$$\mathbb{D}(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon') = \int_{\omega'\in\mathbb{S}^2}\int_{\psi^{-1}(\varepsilon'\omega_z'^2)}^{0} \widetilde{\underline{\chi}}^{\varepsilon}(\underline{x},z',\sqrt{2\varepsilon'}\omega')\otimes\sqrt{2\varepsilon'}\underline{\omega}'\frac{|\omega_z'|\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\omega_z'^2-\psi(z)/\varepsilon'}}dz'd\omega'. \tag{6.15}$$

We have :

**Lemma 6.8** *The expression (6.15) defines a continuous, coercive bilinear form on* $\mathbb{E}$.

**Proof:** In order to prove the boundedness, we first express $\mathcal{D}$ thanks to the operator $\mathcal{S}_z$. By a straightforward computation, we have

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2)=\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^3_{v'}}\int_{\varepsilon>0}\Phi_1(\varepsilon)\cdot\underline{\chi}^\varepsilon(\underline{x},z',v')M^{-1}d\varepsilon\,\underline{v}'\cdot\Phi_2\left(\frac{|v'|^2}{2}+\psi(z')\right)dv'dz'd\underline{x}.$$

By definition of $\underline{\chi}$ and using the linearity of $\mathcal{T}_z$ and $\mathcal{K}^\alpha$, we have :

$$\mathcal{M}'\int_{\varepsilon>0}\Phi\cdot\underline{\chi}^\varepsilon(\underline{x},z',v')M^{-1}d\varepsilon=\mathcal{S}_{z'}(\Phi),\tag{6.16}$$

so that

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2)=\int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}}\int_{-\infty}^0\int_{\mathbb{R}^3_{v'}}\mathcal{S}_{z'}(\Phi_1)\,\underline{v}'\cdot\Phi_2\,\mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x}.\tag{6.17}$$

Now, the boundedness on $\mathbb{E}$ is clear by a Cauchy-Schwarz inequality, thanks to the continuity of $\mathcal{S}_z$ (6.10).

On the other hand, applying (6.16), we can see $\underline{v}'\cdot\Phi_2$ as $\mathcal{T}_{z'}\left(\mathcal{S}_{z'}(\Phi_2)\right)$. Then

$$\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2)=\int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}}}\int_{-\infty}^0\int_{\mathbb{R}^3_{v'}}\mathcal{S}_{z'}(\Phi_1)\,\mathcal{T}_{z'}\left(\mathcal{S}_{z'}(\Phi_2)\right)\,\mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x}.$$

To any function $\Phi$ in $\mathbb{E}$, we associate $\phi^R(\underline{x},z,v)=(\mathcal{S}_z\Phi)(\underline{x},z,v)\rho_R\left(|v|^2/2+\psi(z)\right)$, with $\rho_R$ defined as in the proof of lemma 5.6. We note $\mathcal{D}^R(\Phi_1,\Phi_2)=\int\phi_1^R\mathcal{T}_{z'}(\phi_2^R)\mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x}$. This expression is equal to

$$\int\mathcal{S}_{z'}(\Phi_1)\,\underline{v}'\cdot\Phi_2\,\rho_R\,\mathcal{M}'^{-1}dv'dz'd\underline{x}$$

since $\mathcal{T}_z\rho_R=0$, so that $\mathcal{D}^R(\Phi_1,\Phi_2)=\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2\rho_R)$. As a consequence, $\mathcal{D}^R(\Phi_1,\Phi_2)\to\mathcal{D}(\Phi_1,\Phi_2)$ as $R\to\infty$ since $\mathcal{D}$ is continuous. For $\Phi\in\mathbb{E}$, $\phi^R(x,v)=\mathcal{S}_z(\Phi)(x,v)\rho_R(|v|^2/2+\psi(z))$ belongs to $\mathcal{L}^2_M$ as well as $\mathcal{T}_z\phi^R$ (by proposition 6.7) and is compactly supported. Then, by Green's formula,

$$2\mathcal{D}^R(\Phi,\Phi)=\|\,\gamma^-\phi^R\,\|^2_{\mathcal{L}^2_-}-\|\,\gamma^+\phi^R\,\|^2_{\mathcal{L}^2_+}\geq C\,\|\,\Phi\rho_R\,\|^2_{\mathbb{E}}\,.$$

The last inequality is a consequence of (6.12) and hypothesis 6.5. Letting $R$ go to $+\infty$ leads to the coercivity of $\mathcal{D}$ on $\mathbb{E}$. □

## 6.4 Derivation of the current equation

In this section, our goal is to prove that the approximate current $\underline{J^\eta}$ converges weakly towards a current $\underline{J}$ that satisfies (in a weak sense) the current equation (2.10) (with $F$ the limit of $(f^\eta)_\eta$). For this sake, we first give a (formal) weak expression of the current. By (4.4) and for any test function $\Phi(\underline{x},\varepsilon)$, we have :

$$\begin{aligned}\int\underline{J^\eta}\cdot\Phi M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}&=\frac{1}{\eta}\int_{\mathbb{R}^3_-\times\mathbb{R}^3_v}\underline{v}f^\eta\cdot\left(\int_{\varepsilon>0}\Phi(\varepsilon)M^{-1}(\varepsilon)\delta_\varepsilon(x,v)d\varepsilon\right)d\underline{x}dzdv\\&=\frac{1}{\eta}\int_{\Omega\times\mathbb{R}^3}\underline{v}f^\eta(x,v)\cdot\Phi\left(\underline{x},\frac{|v|^2}{2}+\psi(z)\right)\mathcal{M}^{-1}dvdx.\end{aligned}\tag{6.18}$$

According to (4.18) the asymptotic current takes formally the following form :

$$\underline{J} = -\int\int \underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}F\left(t,\underline{x},\frac{|v|^2}{2}+\psi(z)\right)\,\underline{\chi}\,dvdz. \tag{6.19}$$

We can prove that the sequence $\underline{J}^\eta$ converges in a distributional sense and that its limit satisfies a weak form of the current equation. More precisely

**Proposition 6.9** *For any test function $\Phi\in C^1([0,T]\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*;\mathbb{R}^2)$, compactly supported in $[0,T[\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*$, and such that $\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}\mathcal{S}_z(\Phi)\in C^1\left([0,T];\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}\right)$ we have*

$$\int_0^T\int_{\Gamma\times\mathbb{R}_+^*}\underline{J^\eta}\cdot\Phi M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}dt\to \tag{6.20}$$

$$\int_0^T\int_{\Gamma\times\mathbb{R}_+^*}F\nabla_{\underline{x}}\cdot\left\{\int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi^{-1}(\varepsilon|\omega_z|^2)}^0\underline{\omega}\,\widetilde{\mathcal{S}_z(\Phi)}\,\frac{2\varepsilon|\omega_z|}{\sqrt{\omega_z^2-\psi(z)/\varepsilon}}\,dz\,d\omega\right\}M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}dt$$

*as $\eta\to 0$. The right hand side of (6.20) is a weak form of the current equation (6.19).*

**Proof:** We recall that we note $\mathcal{T}_z=-\left(v_z\partial/\partial z-(d\psi/dz)\partial/\partial v_z\right)$. One can easily check that the test function $\Phi$ belongs to $\mathbb{E}$. Then, according to proposition 6.7, $\Phi$ is such that $\mathcal{S}_z(\Phi)$ belongs to $C^1\left([0,T];\mathcal{H}_0(\mathcal{A}^\eta)\right)$. Nevertheless, it is not clear that $\mathcal{S}_z(\Phi)$ is compactly supported with respect to $v$, which is needed to use (6.6). However, we could use a truncation function in velocity to approximate $\mathcal{S}_z(\Phi)$ by a sequence of compactly supported test functions. The convergence in (6.6) would raise no problem, so that we apply the weak formulation (6.6) to $\mathcal{S}_z(\Phi)$ as if it were compactly supported. Since $f^\eta$ is bounded, we have

$$\frac{1}{\eta}\int f^\eta\mathcal{T}_z\mathcal{S}_z(\Phi)\mathcal{M}^{-1}dtdxdv=\int f^\eta\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}\mathcal{S}_z(\Phi)\mathcal{M}^{-1}dtdxdv+\mathcal{O}(\eta).$$

Letting $\eta$ tend to 0, the right hand side of this equation converges to the right hand side of (6.20). On the other hand, by definition of $\mathcal{S}_z$, the left hand side is equal to $(1/\eta)\int f^\eta\underline{v}\cdot\Phi\mathcal{M}^{-1}dtdxdv$, which, by (6.18), is equal to the left hand side of (6.20).

It remains to prove that this is indeed a weak form of (6.19). We start from the formal expression (6.19) and write it by means of the current tensor $\mathbb{D}$ defined by (6.15). We have $\underline{J}(\underline{x},\varepsilon)=-\int\mathbb{D}(\underline{x};\varepsilon,\varepsilon')\nabla_{\underline{x}}F(\varepsilon')d\varepsilon'$. Then $\int\underline{J}(t,\underline{x},\varepsilon)\cdot\Phi(t,\underline{x},\varepsilon)M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}$ can be formally written $\mathcal{D}(\Phi,\nabla_{\underline{x}}F)$ with $\mathcal{D}$ defined as in section 6.3. Then, equality (6.17) and Green's formula (with respect to $\underline{x}$) allow to obtain (6.20) by applying identity (5.1). □

It is not obvious that the class, considered in proposition 6.9, of smooth test functions $\Phi$ such that $\underline{v}\cdot\mathcal{S}_z\Phi$ belongs to $\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$ is dense in the set of continuously differentiable functions compactly supported in $[0,T[\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*$, which would ensure the convergence in a distributional sense. We do not prove this but show that it is true at least in the peculiar situation of an isotropic cross section of type (3.19).

**Lemma 6.10** *We consider the case of an isotropic cross section $\kappa=1/(2|\mathbb{S}^2_\pm|)$. For $\Phi\in C^1([0,T]\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*;\mathbb{R}^2)$, compactly supported in $[0,T[\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*$, we have $\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}}\mathcal{S}_z(\Phi)\in C^1\left([0,T];\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}\right)$.*

**Proof:** According to (6.16),

$$\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{x}} \mathcal{S}_z(\Phi) = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} v_j \mathcal{M} \int_{\varepsilon>0} \partial_{x_j} \Phi_i(\underline{x}, \varepsilon) \chi_i^{\varepsilon}(x, v) M^{-1} d\varepsilon.$$

Using the explicit formulas for $\underline{\chi}$ in the isotropic case (4.10) and (4.11), one can check that all that is necessary is that the following quantities be in $\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}}$ (for $i = 1, 2$ and $j = 1, 2$) :

$$\mathcal{M} \int_{\mathbb{R}^3_-} v_j T\left(\frac{|v'_z|^2}{2}\right) \partial_{x_j} \Phi_i \left(\underline{x}, \frac{|v'|^2}{2}\right) |v'_z||v'| dv' \omega_i$$
$$\mathcal{M} T\left(\frac{|v_z|^2}{2} + \psi(z)\right) \partial_{x_j} \Phi_i \left(\underline{x}, \frac{|v_z|^2}{2} + \psi(z)\right) v_j v_i$$
$$\mathcal{M} \mathbb{T}\left(z, \frac{|v_z|^2}{2} + \psi(z)\right) \partial_{x_j} \Phi_i \left(\underline{x}, \frac{|v_z|^2}{2} + \psi(z)\right) v_j v_i.$$

Clearly, $\mathbb{T}(z, |v_z|^2/2 + \psi(z)) \leq T(|v_z|^2/2 + \psi(z))$, and thus these two quantities are bounded on any compact subset of $(-\infty, 0) \times \mathbb{R}$ after hypothesis 6.5. Since $\partial_{x_j} \Phi_i$ is compactly supported with respect to $\underline{x}$ and $\varepsilon$, the expected estimates follow. □

## 6.5 The coupled SHE model

It remains to prove that Eq. (2.9) and (2.11) are satisfied in a weak sense. We include this statement in the following theorem which sums up the main results obtained in this section. This theorem holds under this hypothesis on the potential :

**Hypothesis 6.11** *(i) The potential $\Psi$ depends only on the $z$ variable :*

$$\Psi(\underline{x}, z) = \psi(z) \ \forall \underline{x}, \in \mathbb{R}^2, \ \forall z < 0.$$

*(ii) $\psi$ is a continuous and decreasing function from $(-\infty, 0)$ onto $(0, \infty)$ such that $\psi(0) = 0$ and $\psi(z) \to \infty$ as $z \to -\infty$. Moreover, $\psi' \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^-)$.*
*(iii) The bounce period $T$ satisfies $\forall \varepsilon > 0$, $T(\varepsilon) < +\infty$ and there exists two positive constants $C$ and $C'$ such that $T(\varepsilon) \to C$ as $\varepsilon \to 0$ and $T(\varepsilon) \to C'$ as $\varepsilon \to \infty$.*

Now, the main theorem can be stated.

**Theorem 6.12** *We assume that the potential and the initial data satisfy hypotheses 6.11 and 5.1 respectively. We also suppose that $\mathcal{B}^{\alpha}_{in} = 0$ and that the cross section $\kappa$ is isotropic,* i.e. *that $\kappa = 1/(2|\mathbb{S}^2|)$.*

*Then, for all $\eta > 0$, there exists a solution $f^{\eta}$ to the initial boundary value problem (2.6)-(2.8) in the weak sense (6.6). Up to the extraction of a subsequence, the sequence $(f^{\eta})$ converges*

*to a function $F$ such that, for any test function $\varphi(t,\underline{x},\varepsilon) \in C^2([0,T]\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*)$ compactly supported in $[0,T[\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*$,*

$$\int_{[0,T]\times\mathbb{R}^2_{\underline{x}},\varepsilon>0} F(t,\underline{x},\varepsilon)\frac{\partial\varphi}{\partial t}(t,\underline{x},\varepsilon)\ N(\underline{x},\varepsilon)\ M^{-1}\ d\varepsilon\ d\underline{x}\ dt \tag{6.21}$$

$$+\int_{[0,T]\times\mathbb{R}^2_{\underline{x}},\varepsilon>0} F\,\nabla_{\underline{x}}\cdot\left\{\int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi^{-1}(\varepsilon|\omega_z|^2)}^{0}\underline{\omega}\ \widetilde{\mathcal{S}_z(\nabla_{\underline{x}}\varphi)}\ \frac{2\varepsilon|\omega_z|}{\sqrt{\omega_z^2-\psi(z)/\varepsilon}}\ dz\ d\omega\right\}M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}dt$$

$$=\int_{\mathbb{R}^2_{\underline{x}},\varepsilon>0} NF_I\varphi|_{t=0}M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}.$$

*This is the weak formulation of Eq. (2.9), (2.10) and (2.11).*

**Proof:** We introduce $\phi$ such that $\phi(x,v)=\varphi(\underline{x},|v|^2/2+\psi(z))$. Then $\phi$ is compactly supported with respect to $v$ and belongs to the set of admissible test functions for the weak formulation (6.6) of the kinetic problem. We apply (6.6) with $\phi$ as a test function. Note that $\phi$ is even with respect to $v$, so that $\gamma^+\phi-\mathcal{K}^\alpha\mathcal{J}^*\gamma^-\phi=0$. Moreover,

$$\int_{[0,T]\times\Omega\times\mathbb{R}^3_v} f^\eta\frac{\partial\phi}{\partial t}\mathcal{M}^{-1}dvd\underline{x}dzdt\to\int_{[0,T]\times\Omega\times\mathbb{R}^3_v} F\left(t,\underline{x},\frac{|v|^2}{2}+\psi(z)\right)\frac{\partial\phi}{\partial t}\mathcal{M}^{-1}dvd\underline{x}dzdt,$$

for $f^\eta \rightharpoonup F\ \ L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}})$ - weak star and $\partial_t\phi\in L^1(0,T;\mathcal{L}^2_{\mathcal{M}})$. The first term in the left hand side of (6.21) is obtained thanks to (5.1). On the other hand, applying (6.18) to $\Phi=\nabla_{\underline{x}}\varphi$ yields

$$\frac{1}{\eta}\int_{[0,T]\times\Omega\times\mathbb{R}^3_v} f^\eta\,(\underline{v}\cdot\nabla_{\underline{x}})\,\phi\ \mathcal{M}^{-1}\ dvdzd\underline{x}dt=\int_{[0,T]\times\mathbb{R}^2_{\underline{x}},\varepsilon>0}\underline{J^\eta}\cdot\nabla_{\underline{x}}\varphi M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}dt$$

$$\to\ \int_{[0,T]\times\mathbb{R}^2_{\underline{x}},\varepsilon>0} F\nabla_{\underline{x}}\cdot\left\{\int_{\mathbb{S}^2}\int_{\psi^{-1}(\varepsilon|\omega_z|^2)}^{0}\underline{\omega}\ \widetilde{\mathcal{S}_z(\nabla_{\underline{x}}\varphi)}\ \frac{2\varepsilon|\omega_z|}{\sqrt{\omega_z^2-\psi(z)/\varepsilon}}\ dz\ d\omega\right\}M^{-1}d\varepsilon d\underline{x}dt$$

according to proposition 6.9 since $\nabla_{\underline{x}}\varphi$ belongs to $C^1([0,T]\times\Gamma\times\mathbb{R}_+^*)$ and is compactly supported. Moreover, $\int f^\eta\phi|_{t=0}\mathcal{M}^{-1}dvdzd\underline{x}=\int F_I\varphi|_{t=0}NM^{-1}d\varepsilon d\underline{x}$, by (5.1) and (5.2). Finally, $(v_z\partial/\partial z-(d\psi/dz)\partial/\partial v_z)\varphi(t,\underline{x},|v|^2/2+\psi(z))=0$, which allows to conclude by taking the limit $\eta\to 0$ in (6.6).

Statement (ii) is proved in proposition 6.9. □

# 7 Conclusion

In this paper, we derived a diffusion model in position-energy, the so-called coupled SHE model, for the modelling of the density distribution function of a gas of charged particles. The particles are subject to collisions with a boundary and confined by a potential force field. This model is expected to give a general framework for the study of diffusion phenomena in the case of particle-wall interactions, for plasma physics as well as for semiconductor devices. It neglects collisions in volume, which is relevant if collisions with the boundary are frequent enough.

The derivation was both performed on a formal and on a rigorous point of view. The so-obtained model gives a generalization of the model proposed in[14] since it involves a non local (in energy) current equation. It should improve the description of inelastic collision processes on the boundary. The derivation is mainly based on the splitting of the boundary collision operator that appears in the kinetic model into elastic and inelastic parts. Combining two different splittings allows the obtention of a non local diffusion matrix under the assumption of dominant elastic collisions.

From a mathematical point of view, existence has been rigorously proven for the macroscopic model, and existence for the model derived in[14] is a by product of this proof when the coupling parameter $\alpha$ is set equal to 0. Nevertheless, the proof is complete only for peculiar force fields. The generalization to more common situations is postponed to future work, as well as the derivation of a coupled SHE model taking account not only of collisions with the boundary but also of collisions in volume.

# Acknowledgment

The author wishes to thank P. Degond for suggesting him this problem and providing references and advices, and A. Mellet for fruitful conversations.

# Bibliographie


[1] H. Babovsky, *On the Knudsen flows within thin tubes*, J. Statist. Phys. **44** (1986), pp. 856-878.

[2] H. Babovsky, C. Bardos and T. Platkowski, *Diffusion approximation for a Knudsen gas in a thin domain with accomodation on the boundary*, Asymptotic Analysis **3** (1991), pp. 265-289.

[3] C. Bardos, *Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre à coefficients réels ; Théorèmes d'approximation ; application à l'équation de transport*, Ann. Sci. École Norm. Sup. **4** (1970), pp. 185-233.

[4] C. Bardos, R. Santos and R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. A. M. S., **284** (1984), pp. 617-649.

[5] N. Ben Abdallah and P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Maths. Phys. **37** (1996), pp. 3306-3333.

[6] N. Ben Abdallah, P. Degond, A. Mellet, F. Poupaud, *Electron transport in semiconductor supperlattices*, Quart. Appl. Math. **61** (2003), no. 1, pp. 161-192.

[7] J. P. Bourgade, *On Spherical Harmonics Expansion type models for electron-phonon collisions*, Math. Methods Appl. Sci. **26** (2003), no.3, pp. 247-271.

[8] J. P. Bourgade, A. Mellet and L. Mieussens, *Numerical comparison between two Spherical Harmonics Expansion models and a kinetic equation*, to appear in Math. and Computers Modelling.

[9] E. Bringuier, *Kinetic theory of high-field transport in semiconductors*, Phys. Rev. B **57** (1998), pp. 2280-2285.

[10] E. Bringuier, *Nonequilibrium statistical mechanics of drifting particles*, Phys. Rev. E **61** (2000), pp. 6351-6358.

[11] P. Degond, *A model of near-wall conductivity and its application to plasma thrusters*, SIAM J. Appl. Math. **58** (1998), no. 4, pp. 1138-1162.

[12] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled Spherical Harmonics Expansion model*, Math. Models Methods Appl. Sci. **11** (2001), no. 5, pp. 903-932.

[13] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, vol 15, AMS and International Press, 2000, pp. 77-110.

[14] P. Degond, *Transport of trapped particles in a surface potential*, Studies in Mathematics and its Applications, vol 31, D. Cioranescu and J. L. Lions (eds), Elsevier, 2002, chapter 13, pp. 273-296.

[15] P. Degond, V. Latocha, S. Mancini and A. Mellet, *Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates*, Methods and Applications of Analysis **9** (2002), pp. 127-150.

[16] P. Degond and S. Mancini, *Diffusion driven by collisions with the boundary*, Asymptotic Analysis **27** (2001), pp. 47-73.

[17] A. Bers and J. L. Delcroix, Physique des plasmas, CNRS éditions, Paris, 1994.

[18] A. Gnudi, D. Ventura, G. Baccarani, F. Odeh, *Two-dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonic expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron., **36** (1993), pp. 575-581.

[19] T. Goudon and A. Mellet, *Discrete version of the SHE asymptotics : multigroup neutron transport equations*, J. Math. Phys. **43** (2002), no. 6, pp. 3232-3260.

[20] A. Mellet and S. Mischler, *Uniqueness and semigroup for the Vlasov equation with elastic-diffusive reflexion boundary conditions*, preprint.

[21] F. Poupaud, *Diffusion approximation of the linear semiconductor equation : analysis of boundary layers*, Asymptotic Analysis **4** (1991), pp. 293-317.

[22] F. Poupaud, *Étude de l'opérateur de transport* $Au = a\nabla u$, manuscript, unpublished.

[23] E. Beals and V. Protopopescu, *Abstract time-dependent transport equation*, J. Math. Anal Appl. **121** (1987), pp. 370-405.

[24] Yu. P. Raizer, Gas discharge Physics, Springer, Berlin, 1997.

# Troisième partie

# Simulations Numériques

# Chapitre 6

# Comparaison de deux modèles SHE et d'un modèle cinétique[1]

With A. Mellet[2] and L. Mieussens[3]

**Abstract :** In this paper, we investigate the reliability of two diffusion models, the SHE and coupled SHE models, by accurate numerical comparisons with a Boltzmann like equation. These models describe the transport of particles subject to collisions with the medium. Comparisons are given at three levels of description : at small times (transient regime), at the diffusion time (diffusion regime) and for long times (stationary regime). The three regimes are well described by both SHE models. A discussion of the main benefits and drawbacks of each of the SHE models is given, according to the regime.

## 1 Introduction

With the development of microelectronics in the early 1950's, the description of the motion of electrons in semiconductors arose as a crucial problem. Kinetic models of Boltzmann type, though very accurate, proved to be computationaly expensive. On the other hand, macroscopic models such as Drift Diffusion become unrealistic as semiconductor components get miniaturized. Intermediate models have been recently proposed, such as the Spherical Harmonics Expansion (SHE) model which appears as a good compromise between physical accuracy and a low computational cost (see [1]). The SHE model is a diffusion type equation in the position-energy space for the particles distribution function. It takes the following form

$$N(\mathcal{E})\partial_t F(t,x,\mathcal{E}) - \tilde{\nabla}\cdot D(\mathcal{E})\tilde{\nabla}F(t,x,\mathcal{E}) = 0$$

[1] *Numerical comparison between two Spherical Harmonics Expansion models and a kinetic equation*, to appear in Math. Comp. Modelling.

[2] Department of Mathematics, University of Texas.
E-mail : mellet@math.utexas.edu

[3] Laboratoire MIP, Université Paul Sabatier, Toulouse.
E-mail : mieussens@mip.ups-tlse.fr

where $t$ denotes the time variable, $x$ is the position and $\mathcal{E}$ is the (kinetic) energy of the particle. We note $N(\mathcal{E})$ the density of states, $F(t,x,\mathcal{E})$ is the density of particles at time $t$, located at $x$, evolving with a kinetic energy $\mathcal{E}$. The energy dependent diffusion tensor $D(\mathcal{E})$ is a positive tensor and $\tilde{\nabla} = \nabla_x + E(\partial/\partial\mathcal{E})$, where $E$ is a force field applied to the particles, is a generalized gradient in the position-energy space. Such a model can be derived from kinetic models under the assumption of dominant elastic scattering between the particles and the medium. Nevertheless, inelastic regimes are quite frequent and a natural problem is to extend the (theoretical) reliability of SHE models to thermalizations due to inelastic scatterings. The work on such regimes was initiated by P. Degond in [2] and led to the introduction of coupled SHE models which can be written as follows

$$N(\mathcal{E})\partial_t F(t,x,\mathcal{E}) - \tilde{\nabla}\cdot\int_{\mathcal{E}'>0} D_\alpha(\mathcal{E}',\mathcal{E})\tilde{\nabla}F(t,x,\mathcal{E}')d\mathcal{E}' = 0.$$

In this case, the diffusion tensor $D_\alpha$ is non local. The model is 'coupled' in the sense that the current of particles at a given energy depends on the distribution of particles at any energy, thus coupling different levels of energy. Indeed, introducing the current of particles $J$, the coupled SHE model can also be written

$$N(\mathcal{E})\partial_t F(t,x,\mathcal{E}) + \tilde{\nabla}\cdot J(t,x,\mathcal{E}) = 0, \quad J(t,x,\mathcal{E}) = -\int_{\mathcal{E}'>0} D_\alpha(\mathcal{E}',\mathcal{E})\tilde{\nabla}F(t,x,\mathcal{E}')d\mathcal{E}'$$

where the first equation is nothing but a conservation law while the second one takes the form of a Fourier law relating the current of particles to the (generalized) gradient of the density of particles. One can easily see the non local influence of the gradient of $F$ on the value of the current at a given energy $\mathcal{E}$. The diffusion tensor depends on a parameter $\alpha$ which controls the coupling between energy levels. For $\alpha = 0$, the coupled SHE model degenerates into a classical uncoupled SHE model. The theoretical derivation of the coupled SHE model can be performed for a limited range of values for $\alpha$ ($0 \leq \alpha < 1/2$ in our case). One of the aims of this work is to study the influence of this parameter on the reliability of the coupled SHE model.

More generally, we aim at assessing the reliability of both the coupled and the uncoupled SHE models by comparing them to the kinetic model of Boltzmann type from which they can be derived. As a first step, we propose monodimensional simulations in both space and velocity in a force free case. In this case, we do not expect the SHE models to be computationaly less expensive than the kinetic model since the number of variables is the same in both models (the 1D velocity variable is changed for a 1D energy variable in the case of the SHE models). However, this simple framework enables us to make a rather exhaustive comparison between the models. The introduction of a self consistent electric field (which represents a wide range of semiconductor applications) and computations in higher dimensions in the phase space are postponed to future work. Up to our knowledge, the only existing systematic comparison between the SHE model and a kinetic model is made a stationary case [3] and deals only with the uncoupled SHE model. In the present work, we propose a general study not only of the SHE model but also of the coupled SHE model, and the comparisons are performed in small and diffusion times as well as in stationary regimes.

The paper is organized as follows. In section 2 we introduce the different models : the kinetic one and the SHE models. Next, section 3 is dedicated to the discretization of these models. In

section 4, the test case is precisely described. This section also gathers the different numerical results : while section 4.1 is devoted to the study of the diffusion and stationary regimes, we give the analysis of the theoretically worst situation for the SHE model, the transient regime, in section 4.2.

# 2 The microscopic model and the SHE models

In this section, we introduce the microscopic model which will be the basis of the comparisons. We also present the macroscopic SHE models and their derivation starting from the kinetic model.

## 2.1 The kinetic model

We consider a set of particles as described by a distribution function $f = f(t, x, v)$. The quantity $f(t, x, v)dxdv$ represents the number of particles at time $t$ in an elementary volume $dxdv$ in the phase space around $(x, v)$. The function $f$ depends on time $t$, position $x$ and velocity $v$, and is defined on $(0, \infty) \times (0, L) \times \mathbb{R}$. Its evolution is described by a kinetic equation supplemented with initial and boundary conditions. On the left boundary, an inflow of particles is modeled by a Dirichlet condition $f_l$ for positive velocities. On the right boundary, outgoing particles are reemitted in the domain according to a specular reflexion on the wall. The initial condition is assumed to be equal to zero : $f(0, x, v) = 0$. The model reads

$$\begin{array}{ll} \partial_t f + v\partial_x f = Q(f), & x \in (0, L),\ v \in \mathbb{R},\ t \in (0, \infty), \\ f(0, x, v) = 0, & x \in (0, L),\ v \in \mathbb{R}, \\ f(t, 0, v) = f_l(v), & v > 0,\ t \in (0, \infty), \\ f(t, L, v) = f(t, L, -v), & v < 0,\ t \in (0, \infty). \end{array} \tag{2.1}$$

Since we want to investigate the relevance of the SHE model even when inelastic mechanisms are dominant, we define the collision operator by

$$Q(f) = (1 - \beta)Q^0_{el}(f) + \beta Q_{in}(f), \tag{2.2}$$

where the parameter $\beta$ lies in $[0, 1]$. The operator $Q^0_{el}$ is given by

$$Q^0_{el}(f) = \nu\big([f](v) - f(v)\big), \tag{2.3}$$

where $[f](v)$ denotes the average of $f$ on a constant energy surface, which, in this one-dimension framework, is given by $[f](v) = (f(v)+f(-v))/2$, and $\nu$ denotes the constant collision frequency. This operator is elastic in the sense that it does not change the number of particles on a shell of constant energy (it does not act on $f$ through the modulus of the velocity). The operator $Q_{in}$ is said to be inelastic and is written

$$Q_{in}(f) = \nu\left(\int_{\mathbb{R}} f(v')\, dv'\, M(\mathcal{E}(v)) - f(v)\right), \tag{2.4}$$

where $M(\mathcal{E}) = C\exp(-\mathcal{E}/(kT))$ denotes the maxwellian distribution of particles of kinetic energy $\mathcal{E}$ and $C$ is a constant such that $\int_{\mathbb{R}} M(\mathcal{E}(v))dv = 1$. We denote by $\mathcal{E}(v) = m^* v^2/2$ the kinetic energy of particles of mass $m^*$.

In order to derive the macroscopic SHE models, we introduce the following rescaled variables :

$$x' = \varepsilon x, \quad t' = \varepsilon^2 t$$

where $\varepsilon$ is a small parameter. We also introduce $\lambda$ such that $L = \lambda/\varepsilon$ and $\tau$ such that $T_{diff} = \tau/\varepsilon^2$ is the diffusion time. Then, the rescaled distribution function $f^\varepsilon$ is solution to :

$$\begin{array}{ll} \partial_{t'} f^\varepsilon + \dfrac{1}{\varepsilon} v \partial_{x'} f^\varepsilon = \dfrac{1}{\varepsilon^2} Q(f^\varepsilon) & x' \in (0,\lambda),\ v \in \mathbb{R},\ t' \in (0,\infty), \\ f^\varepsilon(0,x',v) = 0, & x' \in (0,\lambda),\ v \in \mathbb{R}, \\ f^\varepsilon(t',0,v) = f_l(v), & v > 0,\ t' \in (0,\infty), \\ f^\varepsilon(t',\lambda,v) = f^\varepsilon(t',\lambda,-v), & v < 0,\ t' \in (0,\infty). \end{array} \tag{2.5}$$

In the next section, we detail the macroscopic models obtained by investigating the behaviour of $f^\varepsilon$ as $\varepsilon$ goes to zero.

## 2.2 The standard SHE model

We start from the rescaled equation (2.5). To obtain the SHE model, the inelastic collision operator (2.4) is split as follows :

$$\begin{aligned} Q_{in}(f) &= \nu\big([f](v) - f(v)\big) + \nu\left(\int_{\mathbb{R}} f(v')\,dv' M(\mathcal{E}(v)) - [f](v)\right) \\ &= Q^0_{el}(f) + Q^0_{in}(f). \end{aligned} \tag{2.6}$$

We suppose that $\beta$ is of order $\varepsilon^2$ and introduce $\beta = \varepsilon^2\tilde{\beta}$. Consequently, the collision operator $Q(f)$ is written

$$Q(f) = Q^0_{el}(f) + \varepsilon^2\tilde{\beta} Q^0_{in}(f)\,,$$

and we expect the SHE model to furnish a good approximation of the Boltzmann equation (2.1) when $\tilde{\beta}$ is of order 1. More precisely, we have

**Proposition 2.1** *The solution $f^\varepsilon$ of the system of equations (2.5) is such that we (formally) have $f^\varepsilon = F + \varepsilon f^1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, with*

$$f^1 = -\frac{v}{\nu}\partial_x F$$

*and where $F = F(t,x,\mathcal{E})$ is the solution of the following SHE set of equations (written in kinetic variables)*

$$\begin{array}{l} \partial_t F - D\partial_x^2 F = \nu\beta\left(\displaystyle\int_{\mathbb{R}} F(\mathcal{E}(v'))dv'\, M(\mathcal{E}(v)) - F\right), x \in (0,L), t \in (0,\infty), v \in \mathbb{R}, \\ F(0,x,\mathcal{E}) = 0, \quad \mathcal{E} \in (0,\infty) \\ F(t,0,\mathcal{E}(v)) - \Lambda\partial_x F(t,0,\mathcal{E}(v)) = f_l(v), \quad v > 0 \\ \partial_x F(t,L,\mathcal{E}) = 0, \quad \mathcal{E} \in (0,\infty). \end{array}$$

*The diffusion tensor $D$ is defined by $D = |v|^2/\nu$ and the extrapolation length arising in the Robin condition is $\Lambda = \frac{|v|}{\nu}$.*

*In addition, the velocity average of $f^\varepsilon$ and the density and the energy associated to the distribution $f^\varepsilon$ are approximated up to second order by the corresponding quantities given by $F$. That is :*

$$
\begin{aligned}
&[f^\varepsilon] = F + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
&\int_{\mathbb{R}} f^\varepsilon(t,x,v)dv = \int_{\mathbb{R}} F(t,x,\mathcal{E}(v))dv + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
&\int_{\mathbb{R}} \mathcal{E}(v) f^\varepsilon(t,x,v)dv = \int_{\mathbb{R}} \mathcal{E}(v) F(t,x,\mathcal{E}(v))dv + \mathcal{O}(\varepsilon^2).
\end{aligned}
$$

**Proof:** The formal proof of this proposition is similar, though simpler, to the proof of proposition 2.2, which is given in section 2.3. □

## 2.3 The coupled SHE model

The derivation of a model which would take into account the coupling between the flux and the density at different energy levels is more recent. It first appeared in [2]. See also [4] for an application to the neutronics, and [5] in the case of electron-phonon interactions in semiconductor devices. It relies on the combination of two splittings of the inelastic operator. A first splitting is given in (2.6) and will be refered to as the 'local' splitting because the elastic part $Q^0_{el}$ acts on $f$ only through the sign of the velocity and not on the kinetic energy. Now we introduce a 'non local' splitting in the sense that its elastic part $Q^1_{el}$ acts on $f$ through the energy too (it involves an integration with respect to $v$) :

$$
\begin{aligned}
Q_{in}(f) &= \nu M(\mathcal{E}(v)) \left( \int_{\mathbb{R}} f(v')\, dv' - 2 \int_0^\infty f(\mathrm{sign}(v)v')dv' \right) \\
&\quad + \nu \left( 2 \int_0^\infty f(\mathrm{sign}(v)v')dv'\, M(\mathcal{E}(v)) - f(v) \right) \\
&= Q^1_{el}(f) + Q^1_{in}(f)\,,
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

where $\mathrm{sign}(v) = \pm 1$ when $\pm v > 0$.

Following [2], we consider the convex combination $Q_{in} = (1-\alpha)\,(Q^0_{el} + Q^0_{in}) + \alpha\,(Q^1_{el} + Q^1_{in})$ of the two splittings (2.6) and (2.7). Introducing this combination in (2.2), we find

$$
Q = (1-\alpha\beta)Q^0_{el} + \alpha\beta Q^1_{el} + \beta((1-\alpha)Q^0_{in} + \alpha Q^1_{in})\,.
$$

Based on the work [2], the following proposition holds

**Proposition 2.2** *If $\alpha\beta < 1/2$, then the solution $f^\varepsilon$ of equations (2.5) is such that we (formally) have $f^\varepsilon = F + \varepsilon f^1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, with*

$$
f^1 = \int \chi(w,v)\partial_x F\,(t,x,\mathcal{E}(w))\,dw
$$

*and where $F = F(t,x,\mathcal{E})$ is the solution of the following coupled SHE system of equations (written in kinetic variables) :*

$$\partial_t F + \partial_x J = \nu\beta \left( \int_{\mathbb{R}} F(\mathcal{E}(w))dw\, M(\mathcal{E}(v)) - F(\mathcal{E}(v)) \right) \tag{2.8}$$

$$J(\mathcal{E}(v)) = -D_{\alpha\beta}(v)\partial_x F(\mathcal{E}(v)) - \int_{\mathbb{R}} \Delta_{\alpha\beta}(v,w)\partial_x F(\mathcal{E}(w))\, dw\,, \tag{2.9}$$

$$F(0,x,\mathcal{E}(v)) = 0$$

$$F(t,0,\mathcal{E}(v)) + \int \chi(v,w)\partial_x F(t,0,\mathcal{E}(w))dw = f_l(v), \quad v > 0 \tag{2.10}$$

$$\int \chi(v,w)\partial_x F(t,L,\mathcal{E}(w))dw = 0 \tag{2.11}$$

*with $x \in (0,L)$, $t \in (0,\infty)$, and :*

$$D_{\alpha\beta}(v) = \frac{|v|^2}{\nu(1-\alpha\beta)}, \qquad \Delta_{\alpha\beta}(v,w) = \frac{\alpha\beta}{\nu(1-\alpha\beta)} M(\mathcal{E}(v))|v||w|.$$

*At last, $\chi(w,v) = \overline{\chi}(w,v) + \theta(w,v)$, where*

$$\overline{\chi}(w,v) = -\frac{1}{\nu(1-\alpha\beta)}\frac{v}{2}\delta(\mathcal{E}(w) - \mathcal{E}(v)), \quad \theta(w,v) = -\frac{\alpha\beta}{\nu(1-\alpha\beta)} M(\mathcal{E}(v))sign(v)|w|. \tag{2.12}$$

**Proof:** This proof is only formal. The convergence of $f^\varepsilon$ to $F$ has been rigorously established in [2] in an unbounded domain, without boundary conditions. A formal approximation result is proven in [6] for the uncoupled SHE model with boundary conditions. The rigorous proof of this approximation problem remains an open question.

As a preliminary, we underline that, if $\alpha\beta < 1/2$, then the null space $N(Q^\alpha_{el})$ of the operator $Q^\alpha_{el} = (1-\alpha\beta)Q^0_{el} + \alpha\beta Q^1_{el}$ is the set of functions depending on $v$ only through the energy $\mathcal{E}(v)$. In addition, the equation

$$Q^\alpha_{el}(f) = g \tag{2.13}$$

of unknown $f$ can be solved if $g$ belongs to the range of $Q^\alpha_{el}$ in $L^2(\mathbb{R}_v; M^{-1}dv)$. It is straightforward to prove that, in our case, this condition reads :

$$[g] = \frac{1}{2}\left(g(v) + g(-v)\right) = 0. \tag{2.14}$$

Moreover, under condition (2.14), the solution $f$ of equation (2.13) is unique in the class of functions $h$ such that $[h] = 0$.

We consider the following formal Hilbert expansion of $f^\varepsilon$ in powers of $\varepsilon$ : $f^\varepsilon = f^0 + \varepsilon f^1 + \varepsilon^2 f^2 + \varepsilon^3 f^3 + r^\varepsilon$. Inserting this expansion in equation (2.5) we get, as $\varepsilon \to 0$, $Q^\alpha_{el}(f^0) = 0$, which implies that $f^0(t,x,v)$ is a function of the energy only, denoted by $F = F(t,x,\mathcal{E}(v))$. Now, if we consider terms of order $\varepsilon$ in the expansion, we get the following relation between $F$ and $f^1$

$$Q^\alpha_{el}(f^1) = v\,\partial_x F.$$

Note that, by oddness, $v\partial_x F$ satisfies the solvability condition (2.14). It can be proved that a solution of this equation is

$$f^1(t,x,v) = \int \chi(w,v)\partial_x F(t,x,\mathcal{E}(w))dw$$

where $\chi$ is given by (2.12). Then the current $J = [vf^1]$ takes the expected form (2.9).

Considering second order terms in (2.5) yields

$$\partial_t f^0 + v\partial_x f^1 = Q^\alpha_{el}(f^2) + \tilde{\beta} Q^\alpha_{in}(f^0).$$

Straightforward computations (that are detailed in [2]) show that the solvability condition for this equation of unknown $f^2$ corresponds to equation (2.8). Note that, in our case, $f^2$ can be chosen identically equal to zero.

We now turn our attention to the derivation of the boundary conditions. Our aim is to prove that the conditions (2.10), (2.11) are necessary to get an accurate enough approximation of the kinetic equation by the SHE model. For this sake, the remainder $r^\varepsilon$ in the Hilbert expansion has to be estimated. We first establish an equation solved by $r^\varepsilon$.

Considering order $\varepsilon^3$ terms in (2.5), we get $Q^\alpha_{el}(f^3) = \partial_t f^1 - \tilde{\beta} Q^\alpha_{in}(f^1)$ (since $f^2 = 0$). The solvability condition (2.14) for this equation is satisfied according to the explicit form obtained for $f^1$ and to conservation properties of the collision operator. Consequently, $f^3$ exists.

If we come back to the rescaled variables $(t', x', v)$ (but dropping the primes for the sake of clarity), we see that $r^\varepsilon(t,x,v)$ is solution of

$$\partial_t r^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} v\partial_x r^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} Q^\alpha_{el}(r^\varepsilon) + \tilde{\beta} Q^\alpha_{in}(r^\varepsilon) + \varepsilon^2 S^\varepsilon(t,x,v)\,, \tag{2.15}$$

where the source term $S^\varepsilon(t,x,v)$ is bounded with respect to $\varepsilon$.

In order to prove that we get a second order approximation of $f^\varepsilon$, we need to investigate the boundary values of $r^\varepsilon$. Along the boundary $x = 0$ and for $v > 0$, we have $f^\varepsilon(t,0,v) = f_l(v)$. It implies for $r^\varepsilon$

$$r^\varepsilon(t,0,v) = f_l(v) - F(t,0,\mathcal{E}(v)) - \varepsilon \int \chi(w,v)\partial_x F(t,0,\mathcal{E}(w))dw - \varepsilon^3 f^3(t,0,v)$$

Note that this equation is still written in rescaled variables. To get a second order approximation, $F$ must be chosen such that

$$F(t,0,\mathcal{E}(v)) + \varepsilon \int \chi(w,v)\partial_x F(t,0,\mathcal{E}(w)dw = f_l(v)$$

which, in macroscopic variables, is exactly the Robin condition (2.10). Note that taking a Dirichlet condition would lead to a first order approximation only.

On the other hand, along the boundary $x = L$, and for $v < 0$, we have $f^\varepsilon(t,\lambda,v) - f^\varepsilon(t,\lambda,-v) = 0$. It implies for $r^\varepsilon$ (still in rescaled variables) :

$$\begin{aligned} r^\varepsilon(t,\lambda,v) - r^\varepsilon(t,\lambda,-v) &= -2\varepsilon \int \chi(w,v)\partial_x F(t,\lambda,\mathcal{E}(w))dw + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned}$$

if we assume (2.11).

Therefore, the approximation is globally of second order with respect to $\varepsilon$ as soon as the boundary conditions are chosen to be (2.10) and (2.11). Indeed, $r^\varepsilon$ is, up to second order terms, the solution of a linear kinetic equation with homogeneous boundary conditions and an initial condition equal to zero.

It should be noted that no boundary layer corrector is needed in this case (contrary to SHE or Drift Difusion models in several dimensions). □

# 3 Numerical methods

In this section, we present the numerical methods used in our computations. From now on we consider a bounded velocity domain $(-V_{max}, V_{max})$. The numerical value of $V_{max}$ is to be precised in section 4.

## 3.1 The discretized Boltzmann equation

We deal with equation (2.1), where the collision operator is defined by (2.2), (2.3) and (2.4). Then, the kinetic equation takes the following form :

$$\partial_t f + v\partial_x f = \nu \left[ (1-\beta)\frac{f(-v)-f(v)}{2} + \beta \left( \int_{\mathbb{R}} f(v')dv' M(\mathcal{E}(v)) - f(v) \right) \right]. \tag{3.1}$$

Let $x_i = i\Delta x$, $v_j = (j - j_{max})\Delta v$ and $t_n = n\Delta t$ denote the mesh respectively on $[0, L]$, $[-V_{max}, V_{max}]$, and $[0, T_{max}]$, with $i \in [\![0, i_{max}]\!]$, $j \in [\![0, 2j_{max}]\!]$ and $n \in [\![0, n_{max}]\!]$.

The solution of equation (3.1) is assumed to be approximated at each point of the grid by $f^n_{i,j} \approx f(t_n, x_i, v_j)$. Note that $f(t_n, x_i, -v_j)$ is approximated by $f^n_{i,2j_{max}-j}$. The sequence $f^n_{i,j}$ is constructed by a second order scheme in space and time. The second order approximation in time is obtained thanks to the classical Strang splitting.

1. Solve
$$\begin{cases} \partial_t g_1 + v_j \partial_x g_1 &= 0 \\ g_{1|t=0} &= f^n_{i,j} \end{cases} \tag{3.2}$$
and set $f^{n+1/3}_{i,j} = g_1\left(\frac{\Delta t}{2}, x_i, v_j\right)$ (or a second order approximation of $g_1\left(\frac{\Delta t}{2}\right)$).
2. Solve
$$\begin{cases} \partial_t g_2 &= Q(g_2) \\ g_{2|t=0} &= f^{n+1/3}_{i,j} \end{cases} \tag{3.3}$$
and set $f^{n+2/3}_{i,j} = g_2(\Delta t, x_i, v_j)$ (or a second order approximation of $g_2(\Delta t)$).
3. Solve
$$\begin{cases} \partial_t g_3 + v_j \partial_x g_3 &= 0 \\ g_{3|t=0} &= f^{n+2/3}_{i,j} \end{cases}$$
and set $f^{n+1}_{i,j} = g_3\left(\frac{\Delta t}{2}, x_i, v_j\right)$ (or a second order approximation of $g_3\left(\frac{\Delta t}{2}\right)$).

We now describe the numerical solving of each step.

**First and third steps : the transport equation.**

We use the semi-lagrangian method that we briefly describe hereafter (see [7] for a detailed presentation). We remark that equation (3.2) can be solved thanks to a characteristic method. Precisely, if we assume that the solution is known on any mesh point $(x_i, v_j)$ at time $t^{n-1}$, then at the next time step $t_n$ it satisfies

$$f(t^n, x_i, v_j) = f(t^{n-1}, X(t^{n-1}, t^n, x_i, v_j), v_j),$$

where $X(t, s, x, v)$ denotes the solution at time $t$ of the ordinary differential equation associated to the characteristic curve that represents the trajectory of a particle of velocity $v$ located in $x$ at time $s$ (when no collision occur). Namely, $X(t^{n-1}, t^n, x_i, v_j) = x_i - v_j \Delta t$. The only problem is that the ending point $X(t^{n-1}, t^n, x_i, v_j)$ of the characteristic curve is generally not a mesh point. Therefore, we have to approximate the value of $f(t^{n-1}, X(t^{n-1}, t^n, x_i, v_j), v_j)$ by interpolation. In order to keep a second order approximation, we use a third order Lagrange interpolation (a second order interpolation would be sufficient but we follow [8] and use an interpolation of odd order for the scheme to be centered).

**Second step : the collision equation.**

The approximate solution $f_{i,j}^{n+1/3}$ of the free transport equation (3.2) is known at time $t_n$ and for all $i$, $j$. We obtain the approximated solution $f_{i,j}^{n+2/3}$ by solving the ordinary differential equation (3.3) by the mid-point formula

$$f^{n+2/3} = f^{n+1/3} + \Delta t\, Q\left(f^{n+1/3} + \frac{\Delta t}{2} Q\left(f^{n+1/3}\right)\right).$$

## 3.2 The SHE models

As long as there is no force field, the SHE model is nothing but a diffusion equation with respect to the position variable, with a source term mixing the energy levels. We can write it as follows :

$$\partial_t F(t, x, \mathcal{E}) - D(\mathcal{E})\partial_{xx}^2 F(t, x, \mathcal{E}) + \nu\beta F(t, x, \mathcal{E}) = \nu\beta\rho(t, x)M(\mathcal{E}), \tag{3.4}$$

where $\rho(t, x) = \int F(t, x, \mathcal{E})\frac{d\mathcal{E}}{2\sqrt{\mathcal{E}}}$ is the density associated to $F$. In order to avoid numerical difficulties due to the stiff jacobian $1/\sqrt{\mathcal{E}}$, we prefer to compute the density by using the following equivalent expression

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}} F(t, x, \mathcal{E}(v))dv.$$

In the left-hand side of (3.4), the variable $v$ is nothing but a parameter. We shall therefore discretize (3.4) on $[0, L] \times [0, V_{max}]$ using a classical Cranck-Nicholson scheme. The gain term of the collision operator is kept explicit. Using the same space grid as for the Boltzmann equation

and the velocity grid $v_j = j\Delta v, j \in [\![0, j_{max}]\!]$, equation (3.4) is then discretized by

$$\frac{F_{i,j}^{n+1} - F_{i,j}^n}{\Delta t} - D(\mathcal{E}(v_j)) \left( \frac{1}{2}\delta_x^2 F_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{2}\delta_x^2 F_{i,j}^n \right) + \nu\beta \left( \frac{1}{2}F_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{2}F_{i,j}^n \right) = \nu\beta\rho_i^n M(\mathcal{E}(v_j)) \,,$$

with $\rho_i^n = \sum_{j=0}^{j_{max}-1} \left(F_{i,j}^n + F_{i,j+1}^n\right) \Delta v$, and $\delta_x^2 F_{i,j} = \dfrac{F_{i+1,j} - 2F_{i,j} + F_{i-1,j}}{\Delta x^2}$. The boundary conditions are also discretized in a semi-implicit way.

Note that, due to the explicit gain term, the Cranck-Nicholson scheme is a first order scheme in time, but a second order scheme in space and is unconditionnally stable.

We shall discretize the coupled SHE model in the same way, keeping explicit the coupling terms coming from the current equation. We get :

$$\frac{F_{i,j}^{n+1} - F_{i,j}^n}{\Delta t} - D_{\alpha\beta}(v_j) \left( \frac{1}{2}\delta_x^2 F_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{2}\delta_x^2 F_{i,j}^n \right) + \nu\beta \left( \frac{1}{2}F_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{2}F_{i,j}^n \right) = \nu\beta\rho_i^n M(v_j) + \Phi_{i,j}^n \,, \tag{3.5}$$

with

$$\Phi_{i,j}^n = \sum_{k=0}^{M-1} \left( \Delta_{\alpha\beta}(v_j, v_k)\delta_x^2 F_{i,k}^n + \Delta_\alpha(v_j, v_{k+1})\delta_x^2 F_{i,k+1}^n \right) \Delta v \,.$$

# 4 Numerical results

We consider the evolution of an inflow of electrons in an interval $(0, L)$. The electron mass is taken equal to $m^* = 9.010 \times 10^{-31} kg$ and we assume that the surrounding medium is at a fixed temperature $\Theta = 300K$. The Boltzmann constant is $k_B = 1.38054 \times 10^{-23}\, J.K^{-1}$ and we suppose that the collision frequency is $\nu = 10^{12} s^{-1}$. The typical microscopic time is given by $\tau = \nu^{-1}$ and the typical microscopic length is $\lambda = V_{th}\tau$, where the thermal velocity of the cloud of electrons can be computed according to the formula $V_{th} = \sqrt{k_B\Theta/m^*}$. We have $\tau = 10^{-12}s$ and $\lambda = 10^{-7}m$. The length of the domain is $L = V_{th}/(\nu\varepsilon)$, the velocity domain is $(-V_{max}, V_{max})$, with $V_{max} = 3\sqrt{2}V_{th} = 287\,806\, ms^{-1}$. At last, the diffusion time is defined as $T_{diff} = 1/(\nu\varepsilon^2)$.

At the beginning ($t = 0$), no particle is present in the interval $(0, L)$. On the left boundary ($x = 0$) particles are injected according to a narrow normalized Maxwellian distribution centered on the velocity $V_{max}/2$ and of temperature $m^*(V_{max}/50)^2/k_B = 18\Theta/(50^2)$. This Maxwellian is normalized on $(-V_{max}, V_{max})$ and we note $C$ the normalization constant. On the right boundary,

particles undergo a specular reflection. The initial and boundary conditions read

$$\begin{aligned} f_I(x,v) &= 0 \quad \forall\, x \in (0,L),\ \forall\, v \in (-V_{max}, V_{max}), \\ f(t,0,v) &= f_l(v) = C \exp\left(-\frac{m^*(V_{max}/2 - v)^2}{2k_B\Theta}\right), \forall\, v \in (0,\, V_{max})\, \forall\, t > 0, \\ f(t,L,v) &= f(t,L,-v) \quad \forall\, v \in (-V_{max}, 0)\ \forall\, t > 0. \end{aligned}$$

The simulations were performed with $2 \times 50$ steps in velocity (or 50 steps in energy for the SHE models) and 100 steps in space. Due to the left boundary condition, a small time step has to be taken in the kinetic model for reasons of precision of the lagrangian method (we postpone the analysis of this phenomenon to future work). Nevertheless, a study of convergence has been performed and the space, velocity and time steps used in the simulations presented in this paper were taken optimals. Namely, dividing the space and velocity steps by 2 leads to no meaningful difference, and the same is observed if we divide the optimal time step by 10.

First, we present a qualitative comparison between the coupled SHE model and the kinetic model. A 3D representation of the distribution function depending on space and velocity is presented at different times. Note that the distribution function is not directly given by the SHE models (since the solutions of the SHE models are even with respect to the velocity). In this comparison, the approximated distribution function is obtained by adding the distribution $F$ described by the SHE model and the first order corrector $f^1$ (see propositions 2.1 and 2.2).

The aim is to show how the diffusion model is able to give some information on the global behaviour of the cloud of particles. The comparison is given for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.3$, $\alpha = 0.166$, that is for a situation near the diffusion regime, but with rather inelastic collisions (we recall that the SHE models are derived theoretically for values of $\beta$ close to $\varepsilon^2$).

At the beginning of the simulation ($T = 0.001T_{diff}$, see Fig. 6.1) almost no particle is in the domain. The inflow of particles on nonnegative velocities can be seen at its very beginning and appears as a rough peak on the kinetic simulation.

At this time, the approximation by the SHE model is qualitatively bad : a negative peak appears for negative velocities. Moreover, as any diffusion model, the SHE model involves propagation phenomena with infinite velocity. This is well seen on Fig. 6.1 : the peak for positive velocities is not as thin as for the kinetic model in the position direction. Even in a very short time period, the number of particles is not null in the domain (while it is null for the kinetic model). Nevertheless, as the following figures show, this drawback has no major influence on the qualitative behaviour for longer times.

The two following figures show the evolution of the incoming particles : due to elastic collisions, the distribution is somewhat symmetrized in velocity (a small peak appears for negative velocities) while inelastic collisions tend to relax the distribution function of particles towards a Maxwellian (see Fig. 6.2). Nevertheless, the distribution function cannot relax completely to a Maxwellian because of the incoming boundary condition on the left. The propagation of the incoming particles throughout the domain is well seen and Fig. 6.2 shows the reflection on the right boundary. The time at which the inflow hits the right boundary and undergoes the specular reflexion is $0.05T_{diff}$ in the kinetic case and this bounce is well seen on the SHE simulation at about the same time : Fig. 6.2 shows a rough increase in the number of particles leaving

the right boundary with a negative velocity. The bounce is particularly clear for $v = V_{max}/2$, the velocity corresponding to the incoming particles (the peak on positive velocities). It is an important point that the coupled SHE model is able to show this bounce at the same time as the kinetic model does. Note that we are still in a transient regime, where the diffusion model was not expected to be relevant. Fig. 6.3 shows the propagation of these reflected particles towards the left boundary. Since there is no boundary condition on the left for particles with a negative velocity, these particles go out of the domain without affecting the distribution function. At this step, the evolution of the cloud of particles becomes quite simple : the centered hump keeps on growing towards an equilibrium which is approximately reached for $T = 5T_{diff}$. Fig. 6.4 shows the distribution function at $10T_{diff}$, *i.e.* in the stationary regime. Again, the kinetic and coupled SHE models coincide as far as the qualitative behaviour is concerned. A more precise analysis is given in the following section.

## 4.1 The diffusion and stationary regimes

From a theoretical point of view, diffusion models are supposed to behave correctly not only in stationary regimes but also in diffusion regimes, that is for large scales in space and for such long times that the scattering phenomena have been numerous enough for the distribution function to be close to an equilibrium of the kinetic collision operator. In our case, this means that there is reasonable hope for the SHE models to be reliable for times near $T_{diff}$. In the case of SHE models, it has already been observed that they indeed give results very close to those obtained thanks to kinetic models of Boltzmann type in stationary regimes, at least in the case of applications to plasma physics (see [3]).

In all the figures to follow in this section, regarding the density, the energy or the distribution function, the kinetic model is pictured by a continuous line, the SHE model by a dotted line and the coupled SHE model by a dashed line.

First, we present a comparison in the most suitable situation : at $T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, we take $\beta = 0.01 = \varepsilon^2$. In this case, the SHE models are expected to give their best. Indeed, as can be seen in Fig. 6.5, the macroscopic density and energy computed by means of the kinetic model are well approached by both SHE models.

But, not only macroscopic quantities are well described by these models. The distribution function of particles, as given by the kinetic model, can be approximated by using the first order correction term in the Hilbert expansion as seen in the proof of proposition 2.2. Fig. 6.6 shows that this approximation is very accurate. This figure presents a section of the distribution function at a fixed position ($x = L/2$) for any value of the velocity. Note that the peaks are approached very accurately by both models. The distribution function is not even with respect to the velocity because of the dissymmetry of the left boundary condition : the peak for negative velocities is smaller than the other one. Nevertheless, even though the solutions of the SHE systems of equations are even with respect to the velocity, considering the first order corrector allows to recover the shape of the distribution.

Computations can be carried on until the steady state is reached, which, in our case, is the case at approximately $T = 5T_{diff}$. Here again, in Fig. 6.7 we present the density and the energy. The density is still very well approached while the energy is less strictly approached than at the

diffusion time. Nevertheless, the relative error is very small. Note that the SHE model better approaches the kinetic model than the coupled SHE model.

In Ref. [3], it has been shown that the SHE model is surprisingly good in inelastic regimes, at least in steady states simulations. Our aim now is to analyse the behaviour of the SHE and coupled SHE models in inelastic regimes at the diffusion time as well as in steady states. Many questions arise : can the coupled SHE model describe inelastic regimes better than the SHE model ? We recall that the coupled SHE model involves a parameter $\alpha$ which can take any value in an *a priori* limited interval. In our case, $\alpha$ can be chosen so that $\alpha\beta \in (0, 1/2)$. Is the coupled SHE model better than the SHE model for any admissible value of $\alpha$ or only for some values ? Though limited, since restricted to a 1D simulation in a force free case, our study gives a first rough answer to these questions.

First, we give an example of a situation where both models approach well the kinetic model, though in inelastic regimes, and where the coupled SHE model is even better than the SHE model. This simulation is done at $T = T_{diff}$, for different values of $\beta$, say, $\beta = 0.1$, $\beta = 0.5$ and $\beta = 1$. Note that the case $\beta = 1$ is the worst possible and corresponds to fully inelastic collisions. We chose $\alpha$ such that the product $\alpha\beta$ remains approximately constant and equal to 0.05. Fig. 6.8, 6.9 and 6.10 show the energy and the density for these values. One can see that, for the energy, both SHE models coincide on the left boundary and are not exactly superimposed to the energy curve given by the kinetic model. In the domain and near the right boundary, the approximation gets better and better for the coupled SHE model while the SHE model remains reliable. Such an analysis can be made for the density aswell. In both cases, the coupled SHE model is more accurate than the SHE model far from the left boundary (they are equivalently accurate at the left boundary). Also, it gets better as the inelasticity grows (as $\beta \to 1$) as the comparison of Fig. 6.8, 6.9 and 6.10 reveals it. However, it is remarkable that the SHE model is very good in any case. Even in the case of a fully inelastic scattering ($\beta = 1$), the distribution function at $x = L/2$ is still very well described by the SHE models as can be seen on Fig. 6.11. On the central hump, the three curves are superimposed. Since there is no elastic scattering, the distribution function is not symmetrized and only one peak appears. In spite of this high dissymmetry, the diffusion models give a good approximation of the peak.

To give a more precise answer to the question of the reliability of the coupled SHE model compared to that of the SHE model, a systematic study of the influence of the couple $(\alpha, \beta)$ on the relative error between the coupled SHE model and the kinetic model has been performed at $T = T_{diff}$. Fig. 6.12 presents the relative error (for the density and the energy) in $L^1$ norm for values of $\beta$ ranging from 0.01 to 1. It consists in various curves corresponding to the relative error for each value of $\beta$, the abscissa being the product $\alpha\beta$ (taken between 0 and 0.01 when possible). The value $\alpha\beta = 0$ corresponds to the uncoupled SHE model.

These graphs show that for any degree of inelasticity for the collisions, *i.e.* for any value of $\beta$, the coupled SHE model can become closer to the kinetic model than the SHE model for a convenient value of $\alpha$. Moreover, the choice of $\alpha$ is not arbitrary since it follows approximately a law of the type $\alpha\beta = 0.045$ as can be read on Fig. 6.12 : the relative errors always reach a minimum for a value of $\alpha\beta$ near 0.045. For $\beta = 0.01$, the constraint $\alpha < 1$ forbids $\alpha\beta$ to reach the value 0.045 so that the relative error reaches its optimum for $\alpha \approx 1$. The coupled SHE model is then better than the SHE model for any value of $\alpha$. Nevertheless, it has to be noted

that the relative error for the SHE model is very small in this case (less than 0.25 %)

A next step is to consider the time evolution of this behaviour. In fact, as it is the case at $T = T_{diff}$ for $\beta = 0.01$, the approximation of the kinetic model by the SHE model is so precise that the coupled SHE model cannot give better results, even though it remains very accurate. In Fig. 6.13, 6.14 and 6.15, we present the comparisons between the SHE models and the kinetic model at $T = 5T_{diff}$ for $\varepsilon = 0.1$ and $\beta = 0.1$, $\beta = 0.5$ and $\beta = 1$. For the coupled SHE model, we consider the optimal value of $\alpha$ as obtained for $T = T_{diff}$, namely, we keep $\alpha\beta$ close to 0.045.

Now, the density aswell as the energy are better approached by the SHE model than by the coupled SHE model, wherever in the domain and for the three regimes ($\beta = 0.1, 0.5, 1$). Consequently, the optimal value of the product $\alpha\beta$, for which the coupled SHE model gave the best approximation, does not remain optimal for any time. In particular, the steady state is not described the best by the coupled SHE model for this value. Fig. 6.16 gives a precise meaning to this remark. Indeed, it represents the time evolution of the relative error (in $L^1$ norm) for the density and for the energy between the coupled SHE model and the kinetic model. The comparison is made for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.3$ and we chose $\alpha$ such that $\alpha\beta = 0.05$ (the optimal value for $T = T_{diff}$). Let us first consider the relative error for the density. The relative error is very high at the beginning for both models (which is not surprising since these models are theoretically relevant for diffusion regimes and not for short times), though higher for the coupled SHE model than for the SHE model. The error decreases and reaches a minimum for both models (around $T = 0.3T_{diff}$ for the SHE model, near $T_{diff}$ for the coupled SHE model). Then the evolution is different since the error for the coupled SHE model grows until $T = 5T_{diff}$ while the error for the SHE model first grows until $T \approx 0.7T_{diff}$ and then decreases again. Note that, from $T = 0.2T_{diff}$ to $T = 5T_{diff}$, the SHE model keeps very accurate since the relative error remains smaller than 1 %. The relative error for the coupled SHE model remains less than 2 % for $T \in (0.3T_{diff},\ 5T_{diff})$ and, at $T = T_{diff}$, it is twice as accurate as the SHE model. For the energy, the evolution is qualitatively the same, but the error is smaller for both models.

## 4.2 The transient regime

In this section simulations for times lower than $T_{diff}$ are given. We present comparisons for an intermediate small time, $T = 0.05T_{diff}$. The parameter $\alpha$ in the coupled SHE model is chosen such that $\alpha\beta$ corresponds to the optimal value at $T_{diff}$. In fact, the simulations show that there is no such an optimal value for small enough times (see the discussion in section 4.1). We present a simulation for $\beta = 0.3$, a moderately inelastic regime. For this value of $\beta$, Fig. 6.17 presents the energy and density curves. The coincidence of the SHE models with the kinetic equation is obviously not as good as at $T = T_{diff}$, but the macroscopic models remain very close to the kinetic model. Moreover, the coupled SHE model is less accurate than the SHE model in this case as could be expected according to Fig. 6.16 which shows that, for small times, the relative error between the coupled SHE model and the kinetic model is higher (for the density as well as for the energy) than the relative error between the SHE and kinetic models.

# 5 Conclusion

In this paper, the results of numerical simulations for the SHE and the coupled SHE models have been presented. The simulations were carried out in an unstationary, force free case.

The presented results mainly concern macroscopic quantities such as the density and the energy. Meanwhile, we also established that we can recover much information on the distribution function through the SHE models.

To the questions raised by the differences between the SHE and coupled SHE models, the answers given in this paper must be considered as partial and temporary for many reasons among which the fact that the test case considered is very simple and cannot claim to give more than preliminary indications for future investigations. In particular, for the time being, no unstationary simulation taking a force field into account has been performed and we can hardly imagine what differences the extension to multidimensional cases may induce.

Nevertheless, the following facts are of some interest. First, our simulations show that both the coupled and the uncoupled SHE models seem to be highly reliable for scatterings going to quasi-elastic to fully inelastic. On the other hand, the reliability is important not only for times greater than the diffusion time, but also in the transient regime, even for rather small times (of the order of $0.05T_{diff}$), which is quite surprising for a diffusion model.

In some cases, in particular at the diffusion time and for smaller times, the coupled SHE model gives a better approximation of the kinetic model than the classical SHE model. Moreover, the influence of the value of the coupling parameter $\alpha$ follows a simple rule, at least at the diffusion time.

The results presented in this paper are encouraging : the coupled and uncoupled SHE models proved to be very relevant to describe transport phenomena not only at a diffusion scale. Nevertheless, many questions remain open. In particular, future work will be dedicated to the extension to non zero force fields.

# Bibliographie


[1] A. Gnudi, D. Ventura, G. Baccarani and F. Odeh, *Two-dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonic expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron. **36** (1993), pp. 575-581.

[2] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled Spherical Harmonics Expansion model*, Math. Models Methods Appl. Sci. **11** (5) (2001), pp. 903-932.

[3] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues and J.P. Boeuf, *Electron transport in stationary plasma thrusters*, Transp. Th. Stat. Phys. **27** (1998), pp. 203-221.

[4] T. Goudon and A. Mellet, *Discrete version of the SHE asymptotics : Multigroup neutron transport equations*, J. Math. Phys. **43** (6) (2002), pp. 3232-3260.

[5] J.P. Bourgade, *On spherical harmonics expansion type models for electron-phonon collisions*, Math. Methods Appl. Sci. **26** (3) (2003), pp. 247-271.

[6] P. Degond and C. Schmeiser, *Macroscopic models for semiconductor heterostructures*, J. Math. Phys. **39** (9) , pp. 4634-4663 (1998), pp. 4634-4663.

[7] E. Sonnendrücker, J. Roche, P. Bertrand and A. Ghizzo, *The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation*, J. Comp. Phys. **149** (1999), pp. 201-220.

[8] F. Filbet, Contribution à l'analyse et à la simulation numérique de l'équation de Vlasov, PhD Thesis, Université Henri Poincaré-Nancy I.

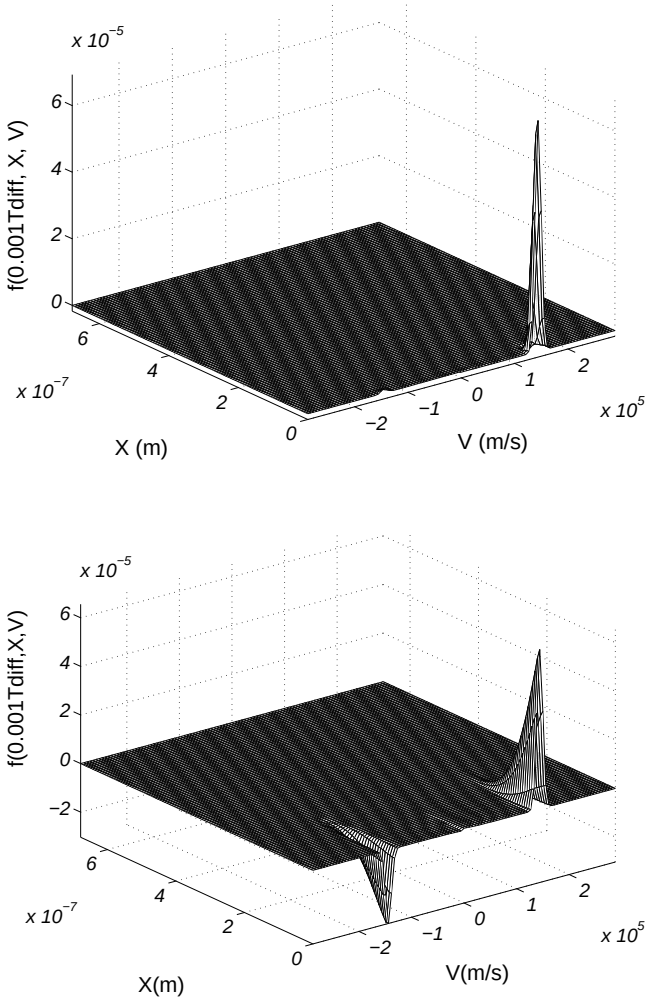


FIG. 6.1 – Distribution function at $T = 0.001T_{diff}$ for the Kinetic (top) and the Coupled SHE (bottom) models

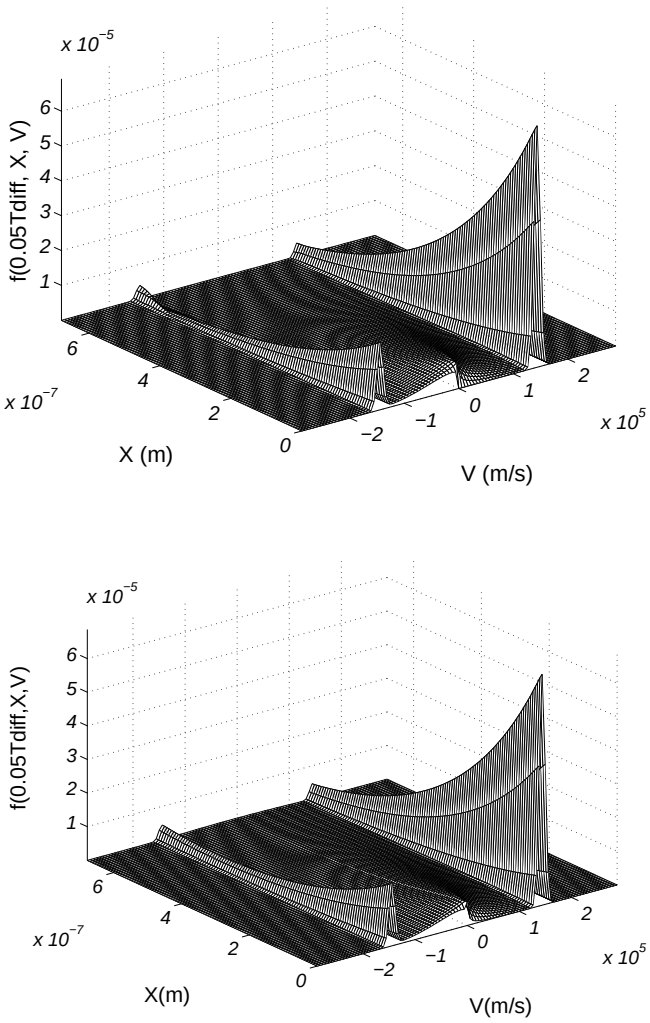


FIG. 6.2 – Distribution function at $T = 0.05T_{diff}$ for the Kinetic (top) and the Coupled SHE (bottom) models

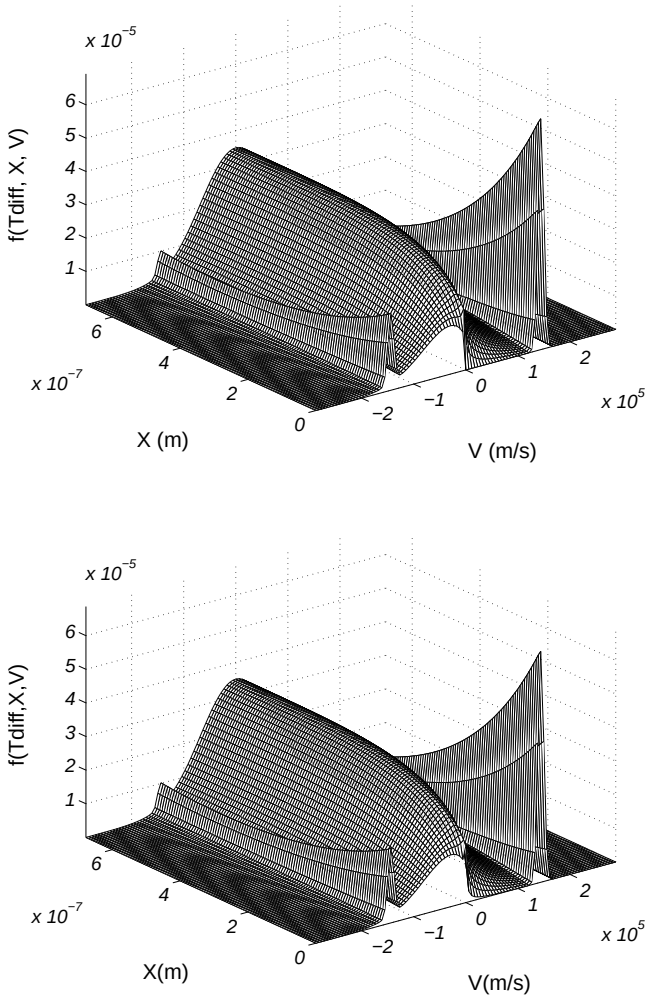


FIG. 6.3 – Distribution function at $T = T_{diff}$ for the Kinetic (top) and the Coupled SHE (bottom) models

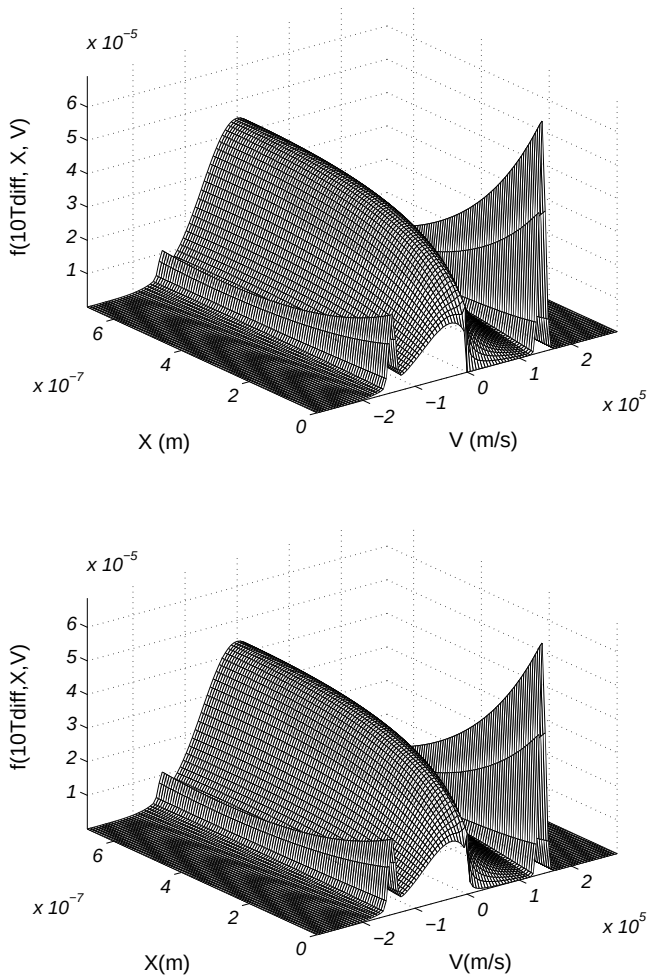


FIG. 6.4 – Distribution function at $T = 10T_{diff}$ for the Kinetic (top) and the Coupled SHE (bottom) models

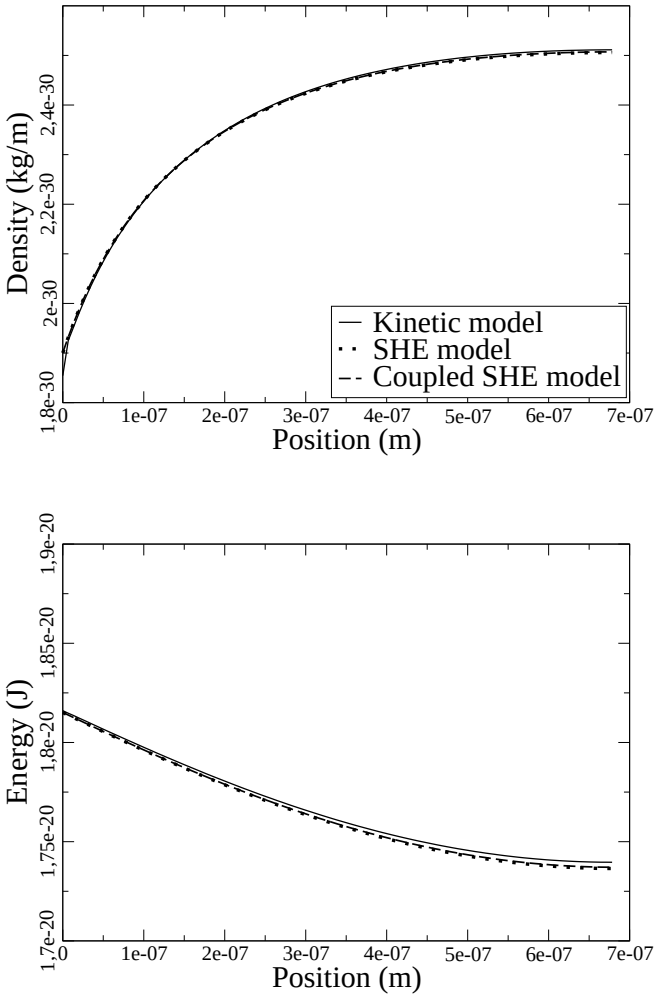


FIG. 6.5 – Density (top) and energy (bottom) at $T = T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.01$, $\alpha = 0.5$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

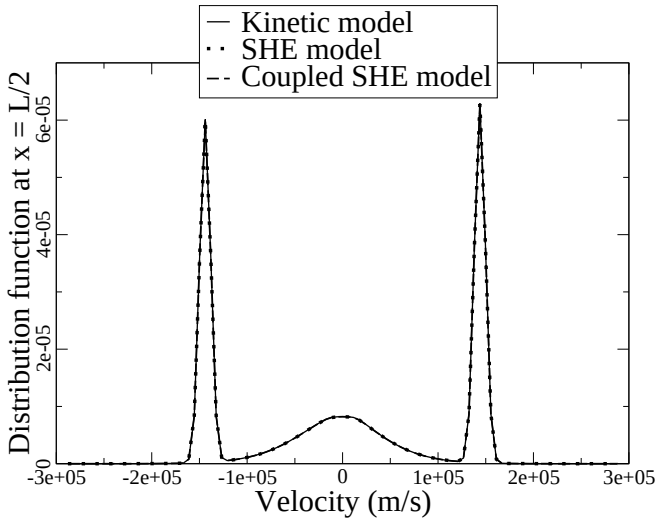


FIG. 6.6 – Distribution function at $T = T_{diff}$, $x = L/2$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.01$, $\alpha = 0.5$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

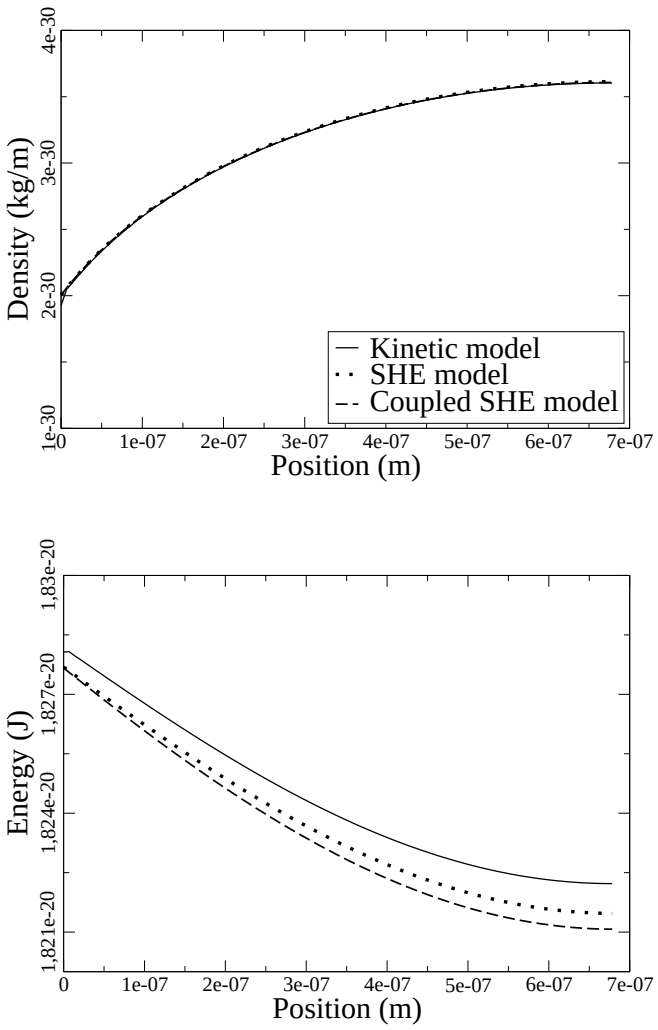


FIG. 6.7 – Density (top) and energy (bottom) at $T = 5T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.01$, $\alpha = 0.5$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

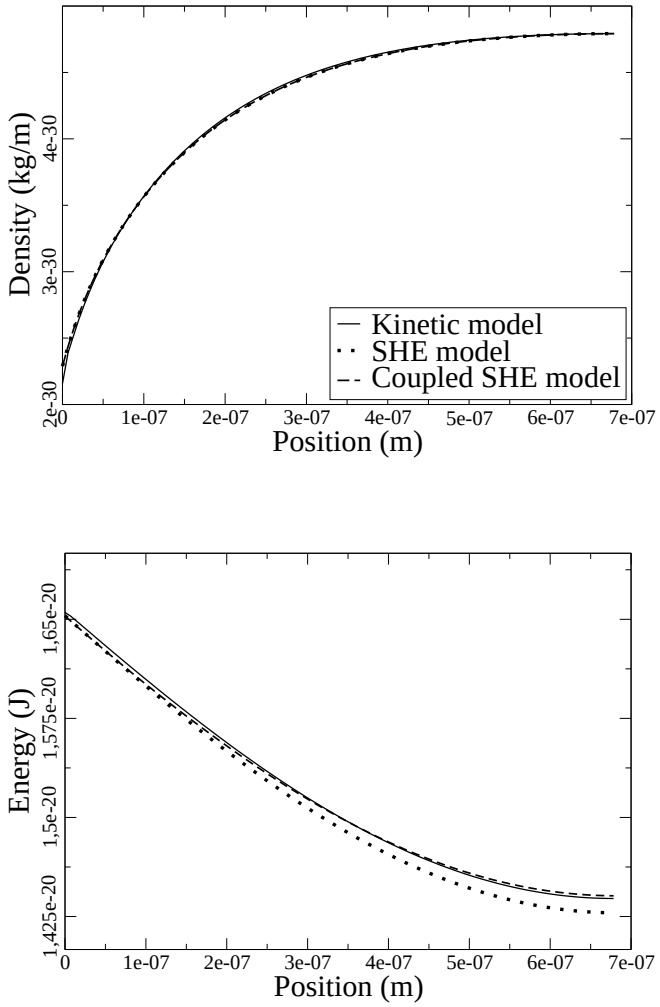


FIG. 6.8 – Density (top) and energy (bottom) at $T = T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.1$, $\alpha = 0.4$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

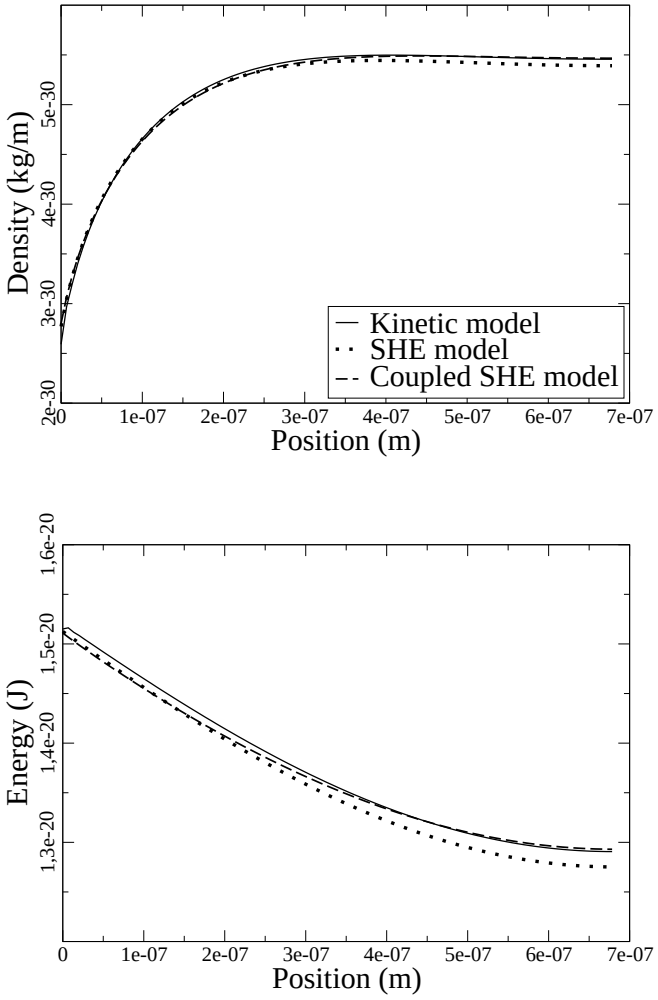


FIG. 6.9 – Density (top) and energy (bottom) at $T = T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.5$, $\alpha = 0.1$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

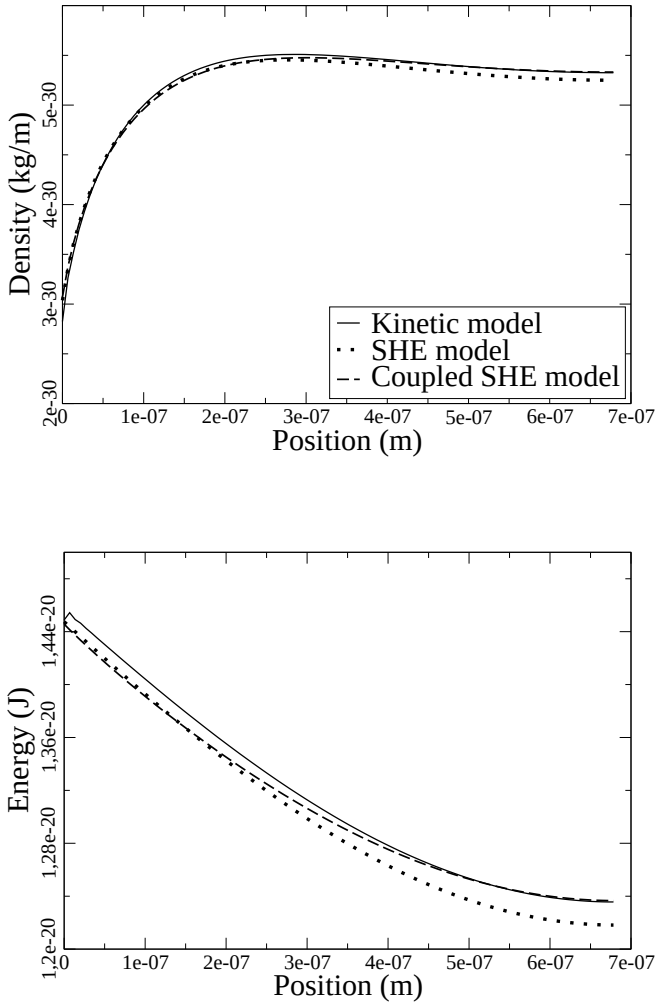


FIG. 6.10 – Density (top) and energy (bottom) at $T = T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 1$, $\alpha = 0.05$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

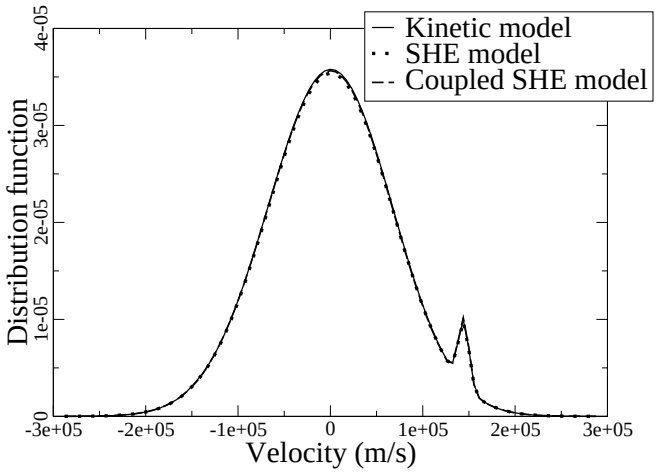


FIG. 6.11 – Distribution function at $T = T_{diff}$, $x = L/2$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 1$, $\alpha = 0.05$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

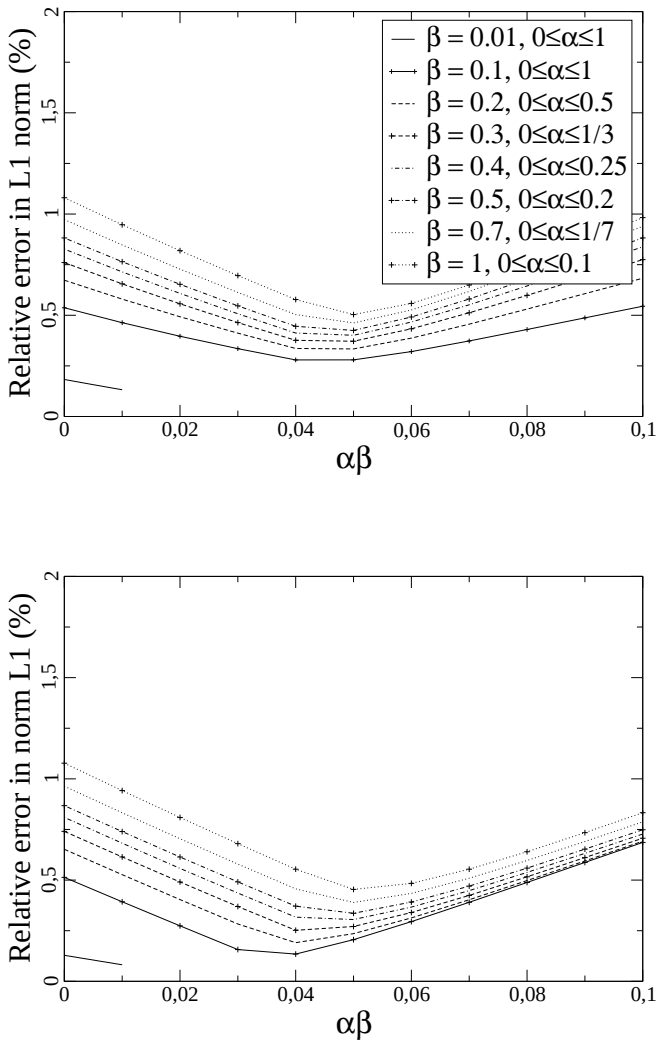


FIG. 6.12 – Relative errors in $L^1$ norm for the density (top) and the energy (bottom) at $T = T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$ : comparison between the kinetic, SHE ($\alpha\beta = 0$) and coupled SHE ($\alpha\beta \neq 0$) models.

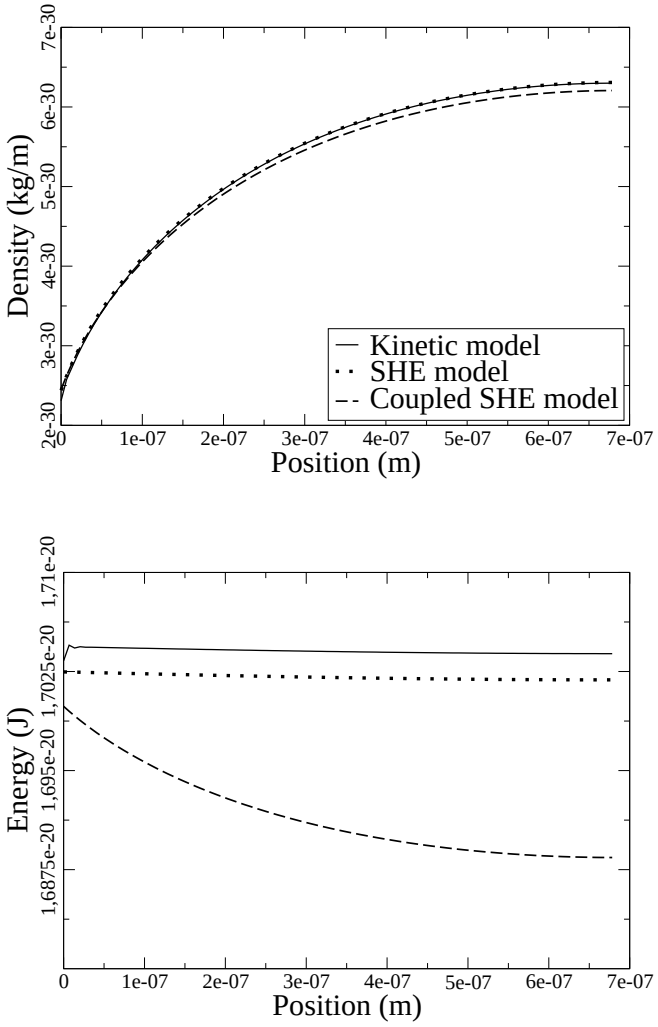


FIG. 6.13 – Density (top) and energy (bottom) at $T = 5T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.1$, $\alpha = 0.4$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

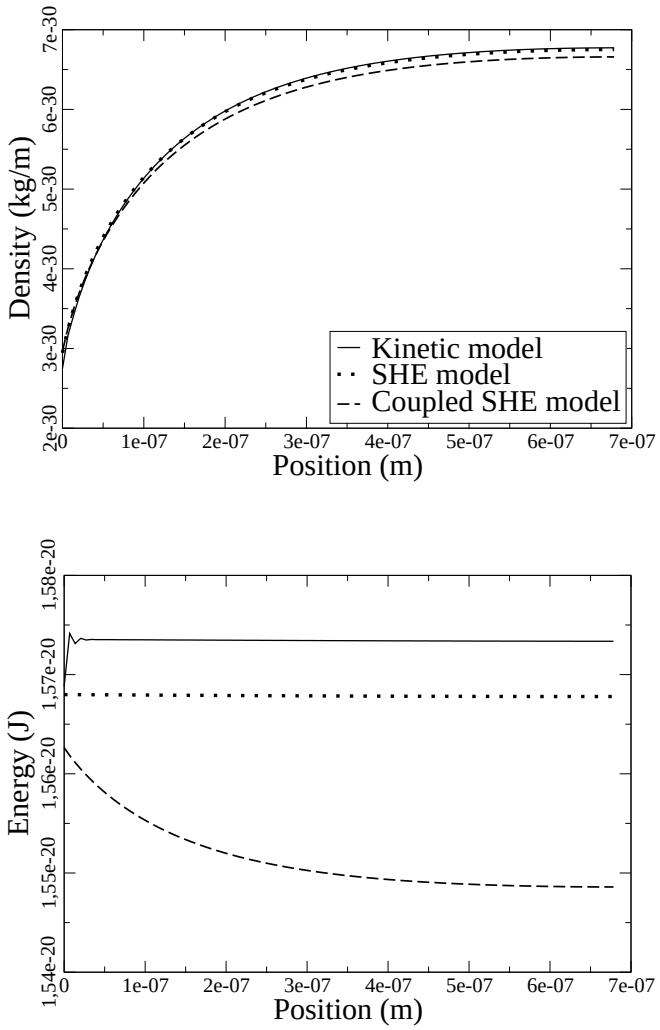


FIG. 6.14 – Density (top) and energy (bottom) at $T = 5T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.5$, $\alpha = 0.1$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

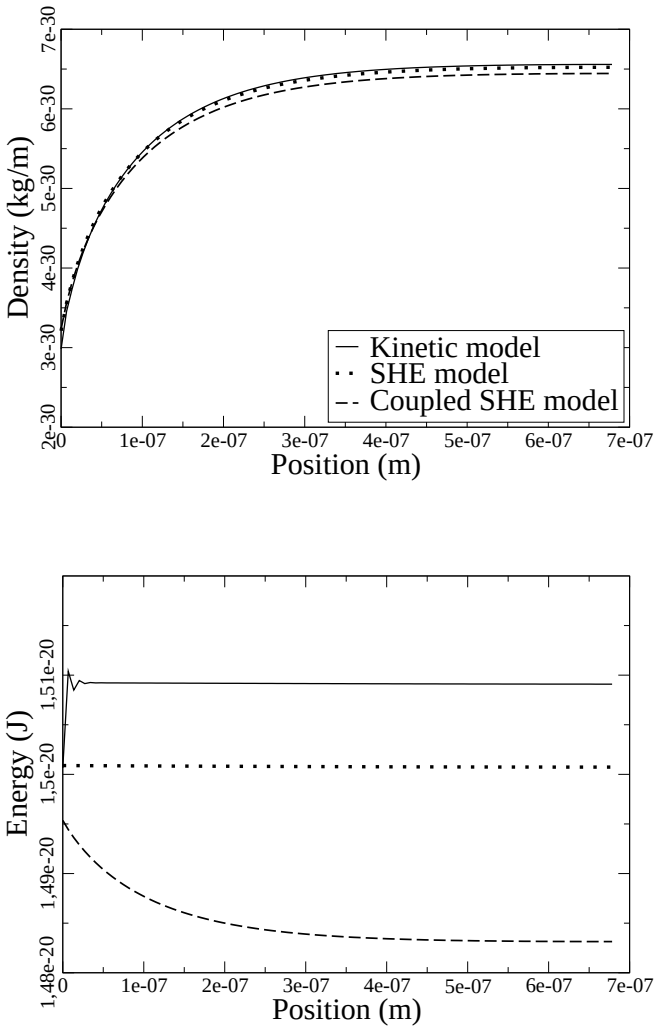


FIG. 6.15 – Density (top) and energy (bottom) at $T = 5T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 1$, $\alpha = 0.05$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.

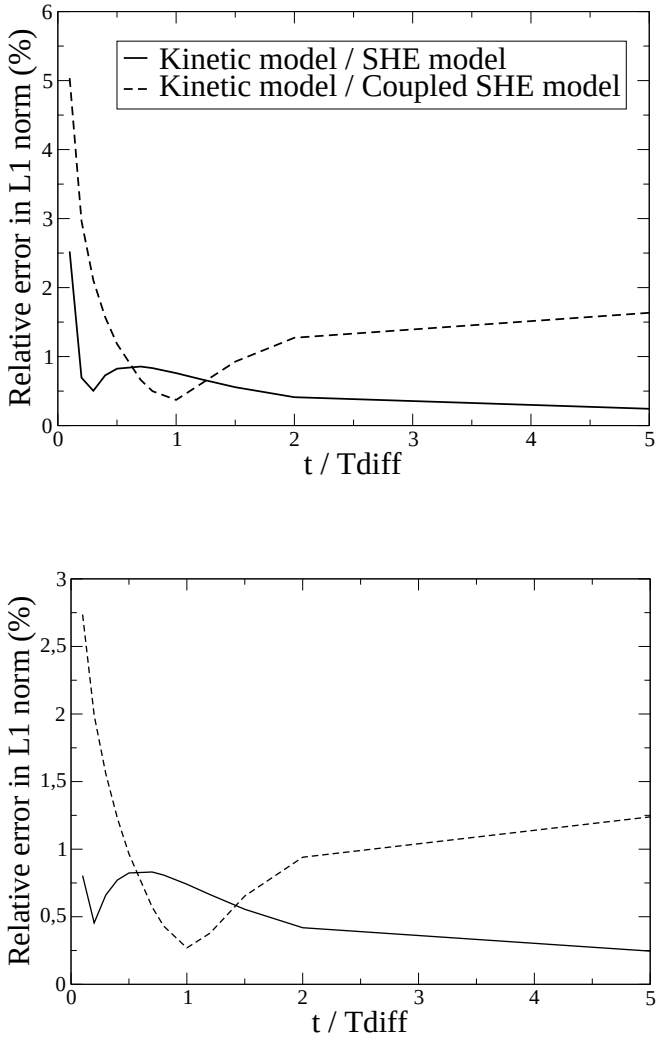


FIG. 6.16 – Time evolution of the relative error in $L^1$ norm for the density (top) and the energy (bottom) for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.3$, $\alpha = 0.166$ : comparison between the kinetic and the SHE models.

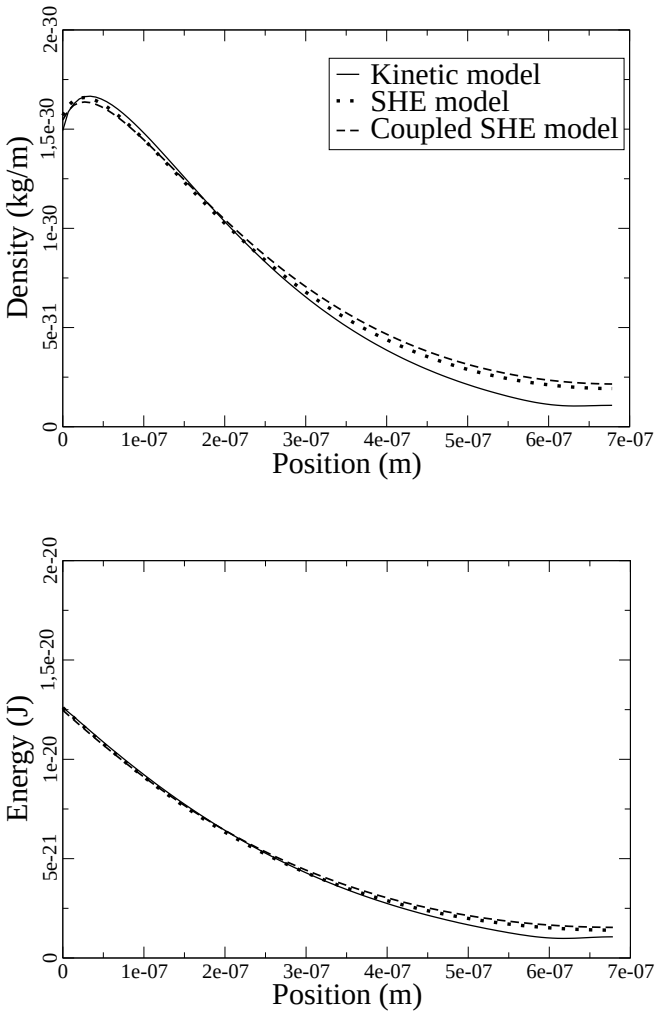


FIG. 6.17 – Density (top) and energy (bottom) at $T = 0.05T_{diff}$, for $\varepsilon = 0.1$, $\beta = 0.3$, $\alpha = 0.166$ : comparison between the kinetic, SHE and coupled SHE models.