

PROGETTO DI UNA UNITÀ DI RICERCA - MODELLO B
Anno 2006 - prot. 2006012132_004

PARTE I

1.1 Programma di Ricerca afferente a

Area Scientifico Disciplinare 01: Scienze matematiche e informatiche 100%

1.2 Durata del Programma di Ricerca

24 Mesi

1.3 Coordinatore Scientifico del Programma di Ricerca

TOSCANI GIUSEPPE

Professore Ordinario

MAT/07 - Fisica matematica

Università degli Studi di PAVIA

Facoltà di SCIENZE MATEMATICHE FISICHE e NATURALI

1.4 Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

FROSALI GIOVANNI

Professore Ordinario 29/11/1947 FRSGNN47S29I728W

MAT/07 - Fisica matematica

Università degli Studi di FIRENZE

Facoltà di INGEGNERIA

Dipartimento di MATEMATICA APPLICATA "G. SANSONE"

055/4796307 055/471787 giovanni.frosali@unifi.it
(Prefisso e telefono) (Numero fax) (Indirizzo posta elettronica)

1.5 Curriculum scientifico del Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

Testo italiano

G.Frosali ha svolto i suoi studi presso l'Università di Firenze, dove è stato assistente dal 1973 al 1983 e professore associato di Meccanica Razionale presso la Facoltà di Ingegneria di Firenze dal 1983. Vincitore di concorso nel 1986, è stato professore ordinario di Meccanica Razionale dal 1987 al 1997, presso l'Università di Ancona dove è stato Direttore del Dipartimento di Matematica per due trienni. Attualmente è professore di Meccanica Razionale presso la Facoltà di Ingegneria di Firenze. Ha svolto ricerche nell'ambito della teoria del trasporto di particelle, con particolare riguardo a problemi stazionari e di criticità, a problemi di esistenza ed unicità con metodi di semigruppì, a problemi di runaway, a scattering theory e ad analisi asintotica per equazioni cinetiche. Negli ultimi anni ha svolto attività di ricerca nella modellistica, sia semiclassica che quantistica, dei semiconduttori. E' autore di più di 75 articoli pubblicati su riviste nazionali ed internazionali, su atti di congressi, e rapporti interni. E' stato membro

della Commissione Scientifica dell'UMI ed è socio di numerose società di matematica pura ed applicata.

Testo inglese

Dr. Frosali completed his studies at the University of Florence, where he has been assistant professor from 1973 to 1983 and associate professor of Analytical Mechanics at the Faculty of Engineering from 1983. In 1986, he was promoted professor of Analytical Mechanics from 1987 to 1997 at the University of Ancona, where he was the chairman of the Mathematical Department for six years. Since 1997 he is professor of Analytical Mechanics at the Faculty of Engineering of the University of Florence. He has been interested in transport theory and in mathematical methods in applied sciences, participating at numerous national and international scientific meetings, congresses, and conferences. Recently, he is working in mathematical modeling of semiconductors. His research activity is strongly related with the research of numerous groups working in these fields. He authored more than 75 journal articles published in prestigious national and international journals, conference papers, and internal reports. He has been member of the Scientific Committee of UMI and he is member of others societies of pure and applied mathematics.

1.6 Pubblicazioni scientifiche più significative del Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

1. FROSALI G., MORANDI O. (in stampa). A quantum kinetic approach for modeling a two-band resonant tunneling diode. *TRANSPORT THEORY AND STATISTICAL PHYSICS*. ISSN: 0041-1450 2006 (to appear).
2. BARLETTI L., DEMEIO L., FROSALI G. (in stampa). Multiband quantum transport models for semiconductors devices. *Kinetic Equations: Direct and Inverse Problems. Proceedings del Convegno tenuto a Mantova, May 15-17, 2005*. Atti in corso di stampa.
3. BORGIOLO G., FROSALI G., MANZINI C. (in stampa). Hydrodynamic models for a two-band nonzero-temperature quantum fluid. *WASCOM2005 13th Conference on Waves and Stability in Continuous Media*. World Scientific, Singapore (to appear).
4. ALI' G., FROSALI G. (2005). On the quantum hydrodynamic models for the two-band Kane system. *IL NUOVO CIMENTO DELLA SOCIETÀ ITALIANA DI FISICA. B, GENERAL PHYSICS, RELATIVITY, ASTRONOMY AND MATHEMATICAL PHYSICS AND METHODS*. vol. 120(12) pp. 1279-1298 ISSN: 1594-9982
5. DESVILLETES L., FROSALI G., MONACO R., SPIGA G., TOSCANI G. (2005). Summer School on "Methods and Models of Kinetic Theory" (M&MKT2004). *Riv. Mat. Univ. Parma* (vol. (7) 4**). Held in Porto Ercole, June 6-12, 2004.
6. BORGIOLO G., FROSALI G., MORANDI O., MODUGNO M. (2005). Different approaches for multi-band transport in semiconductors. *UKRAINIAN MATHEMATICAL JOURNAL*. vol. 57(6) pp. 742-748 ISSN: 0041-5995
7. ALI' G., FROSALI G., MANZINI C. (2005). On the drift-diffusion model for a two-band quantum fluid at zero-temperature. *UKRAINIAN MATHEMATICAL JOURNAL*. vol. 57(6) pp. 723-730 ISSN: 0041-5995
8. FROSALI G., VAN DER MEE C., MUGELLI F. (2004). A characterization theorem for the evolution semigroup generated by the sum of two unbounded operators. *MATHEMATICAL METHODS IN THE APPLIED SCIENCES*. vol. 27(6) pp. 669-685 ISSN: 0170-4214
9. ALI' G., FROSALI G., MORANDI O. (2004). Two-band quantum hydrodynamic models arising from the Bloch envelope theory. *Proc. 5th International Workshop Scientific Computing in Electrical Engineering SCEE2004*, 5-9 September 2004 (to appear).
10. BIONDINI S., FROSALI G., MUGELLI F. (2004). Quantum hydrodynamic equations for a two-band Wigner-Kane model. *WASCOM2003 - 12th Int. Conference on Waves and Stability in Continuous Media*. (pp. 78-84). World Scientific, Singapore.
11. BORGIOLO G., FROSALI G., ZWEIFEL P.F. (2003). Wigner approach to the two-band Kane model for a tunneling diode. *TRANSPORT THEORY AND STATISTICAL PHYSICS*. vol. 32(3&4) pp. 347-366 ISSN: 0041-1450
12. BANASIAK J., FROSALI G., SPIGA G. (2002). Interplay of elastic and inelastic scattering operators in extended kinetic models and their hydrodynamic limits - reference manual. *TRANSPORT THEORY AND STATISTICAL PHYSICS*. vol. 31(3) pp. 187-248 ISSN: 0041-1450
13. FROSALI G., VAN DER MEE C., MUGELLI F. (2002). Conditions for runaway phenomena in kinetic theory revisited. *SIMAI2002 - V Congresso Naz. Soc. Ital. di Matematica Industriale e Applicata*. 27-31 maggio 2002 12 pagg. (su CD).
14. BANASIAK J., FROSALI G., MUGELLI F. (2002). Space homogeneous solutions of the linear Boltzmann equation for semiconductors: a semigroup approach. *WASCOM2001 - 11th Conference on Waves and Stability in Continuous Media*. (pp. 34-40). World Scientific, Singapore.
15. DEMEIO L., FROSALI G. (2001). Theoretical and numerical comparison of hydrodynamic limits for kinetic equations with elastic and inelastic scattering. *WASCOM99 - X Conference on Waves Stability in Continuous Media*. (pp. 146-158). WORLD SCIENTIFIC, SINGAPORE.
16. BANASIAK J., FROSALI G., SPIGA G. (2000). Inelastic scattering models in transport theory and their small mean free path analysis. *MATHEMATICAL METHODS IN THE APPLIED SCIENCES*. vol. 23 pp. 121-145 ISSN: 0170-4214
17. BARLETTI L., BORGIOLO G., CAMPRINI M., CIDRONALI A., FROSALI G. (2000). Tunneling current in resonant interband tunneling diode (RITD). *SIMAI2000 Congresso Naz. Soc. Ital. di Matematica Industriale e Applicata*. 5-9 giugno 2000 (pp. 558-561).
- 18.

DEMEIO L., FROSALI G. (2000). Diffusion limits of the linear Boltzmann equation in extended kinetic theory: weak and strong inelastic collisions. *RENDICONTI DEL SEMINARIO MATEMATICO E FISICO DI MILANO*. vol. LXIX pp. 51-81 ISSN: 0370-7377

19. FROSALI G., SPIGA G., DORNING J.J. (2000). Special Issue Devoted to the Proceedings of the International Conference on Models and Numerical Methods in Transport Theory and Mathematical Physics. *Transport Theory Statist. Physics*. (vol. 29(1&2)). Guest Editor.
20. BANASIAK J., FROSALI G., SPIGA G. (1998). Asymptotic analysis for a particle transport equation with inelastic scattering in extended kinetic theory. *MATHEMATICAL MODELS AND METHODS IN APPLIED SCIENCES*. vol. 8(5) pp. 851-874 ISSN: 0218-2025
21. FROSALI G. (1998). Asymptotic analysis for a particle transport problem in a moving medium. *IMA JOURNAL OF APPLIED MATHEMATICS*. vol. 60 pp. 1-19 ISSN: 0272-4960
22. DEMEIO L., FROSALI G. (1998). Diffusion approximation of the Boltzmann equation: comparison results for linear model problems. *ATTI DEL SEMINARIO MATEMATICO E FISICO DELL'UNIVERSITA' DI MODENA*. vol. 46 pp. 653-675 ISSN: 0041-8986

1.7 Risorse umane impegnabili nel Programma dell'Unità di Ricerca

1.7.1 Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca

Personale docente

n°	Cognome	Nome	Dipartimento	Qualifica	Settore Disc.	Mesi Uomo	
						1° anno	2° anno
1.	FROSALI	Giovanni	Dip. MATEMATICA APPLICATA	Prof. Ordinario	MAT/07	11	10
2.	BARLETTI	Luigi	Dip. MATEMATICA	Ricercatore Universitario	MAT/07	11	9
3.	BORGIOLI	Giovanni	Dip. ELETTRONICA E TELECOMUNICAZIONI	Prof. Associato	MAT/07	11	10
4.	BUSONI	Giorgio	Dip. MATEMATICA	Prof. Ordinario	MAT/07	11	9
5.	MUGELLI	Francesco	Dip. MATEMATICA APPLICATA	Ricercatore Universitario	MAT/05	6	6
TOTALE						50	44

Altro personale

n°	Cognome	Nome	Dipartimento	Qualifica	Mesi Uomo		
					1° anno	2° anno	
1.	MODUGNO	Michele	Dip. MATEMATICA APPLICATA	Ricercatore a tempo det.	5	5	
TOTALE						5	5

1.7.2 Personale universitario di altre Università

Personale docente

n°	Cognome	Nome	Università	Dipartimento	Qualifica	Settore Disc.	Mesi Uomo	
							1° anno	2° anno
1.	BORDONE	Paolo	MODENA e REGGIO EMILIA	Dip. FISICA	RU	FIS/03	8	7
2.	TOTARO	Silvia	SIENA	Dip. SCIENZE MATEMATICHE ED INFORMATICHE	PO	MAT/07	11	9
3.	DEMEIO	Lucio	Politecnica delle MARCHE	Dip. SCIENZE MATEMATICHE	PA	MAT/07	11	11
TOTALE							30	27

Altro personale

n°	Cognome	Nome	Università	Dipartimento	Qualifica	Mesi Uomo	
						1° anno	2° anno
1.	LISI	MERI	Università degli Studi di SIENA	Dipartimento di Scienze Matematiche ed Informatiche	Contratto a tempo determinato	11	8
TOTALE						11	8

1.7.3 Titolari di assegni di ricerca

n°	Cognome	Nome	Dipartimento	Data di inizio del contratto	Durata (in anni)	Mesi Uomo	
						1° anno	2° anno
1.	MANZINI	Chiara	Dip. MATEMATICA APPLICATA	01/11/2005	1	11	11
TOTALE						11	11

1.7.4 Titolari di borse

Nessuno

1.7.5.a Personale a contratto da destinare a questo specifico programma

n°	Tipologia di contratto	Costo previsto	Mesi Uomo		Note
			1° anno	2° anno	
1.	Assegnista	18.100	2	10	Assegno di Ricerca per la durata di un anno
TOTALE		18.100	2	10	

1.7.5.b Dottorati a carico del PRIN da destinare a questo specifico programma

Nessuno

1.7.6 Personale extrauniversitario indipendente o dipendente da altri Enti

n°	Cognome	Nome	Nome dell'ente	Qualifica	Mesi Uomo	
					1° anno	2° anno
1.	MORANDI	OMAR	Dip. di Matematica Applicata FI	DOTTORATO	11	9
TOTALE					11	9

PARTE II

2.1 Titolo specifico del programma svolto dall'Unità di Ricerca

Testo italiano

Modelli matematici per dispositivi a semiconduttore, metodi matematici in teorie cinetiche ed applicazioni

Testo inglese

Mathematical modelling of semiconductor devices, mathematical methods in kinetic theories and applications

2.2 Settori scientifico-disciplinari interessati dal Programma di Ricerca

MAT/07 - Fisica matematica

2.3 Parole chiave

n°	Parola chiave (in italiano)	Parola chiave (in inglese)
1.	EQUAZIONE DI BOLTZMANN QUANTISTICA	QUANTUM BOLTZMANN EQUATION
2.	FUNZIONE DI WIGNER	WIGNER FUNCTION
3.	EQUAZIONE DI WIGNER QUANTISTICA	QUANTUM WIGNER EQUATION
4.	SEMICONDUTTORI	SEMICONDUCTORS
5.	TRASPORTO MULTI-BANDA	MULTIBAND TRANSPORT
6.	MODELLI IDRODINAMICI QUANTISTICI	QUANTUM HYDRODYNAMIC MODELS
7.	TEORIA DEL TRASPORTO	TRANSPORT THEORY
8.	ANALISI ASINTOTICA	ASYMPTOTIC ANALYSIS
9.	TEORIA FUNZIONALE	FUNCTIONAL THEORY

2.4 Base di partenza scientifica nazionale o internazionale

Testo italiano

1. Modelli multibanda per i dispositivi a semiconduttore
2. Modelli idrodinamici per sistemi quantistici
3. Studio asintotico di equazioni cinetiche
4. Gerarchia BBGKY e problemi connessi

1. Modelli multibanda per i dispositivi a semiconduttore

Nella modellizzazione dei semiconduttori di nuova generazione e' necessario tenere conto degli effetti quantistici [1.1]. L'effetto dell'interferenza quantistica e delle dimensioni finite dominano il comportamento di queste nanostrutture e controllano il flusso di corrente. Un ruolo importante, nella teoria del trasporto quantistico, e' ricoperto dalla funzione di Wigner, che ha un ruolo simile a quello di una funzione distribuzione classica, ed i cui momenti danno le quantita' macroscopiche che caratterizzano il comportamento del sistema [1.1,1.2,1.3]. La funzione di Wigner e' definita dalla trasformazione di Wigner-Weyl [1.1] della funzione d'onda (per stati puri) o della matrice densita' (per stati misti).

Uno dei prototipi fra i semiconduttori di scala nanometrica e' il Resonant Tunneling Diode (RTD), nel quale il flusso di corrente e' determinato dagli elettroni di conduzione, e le cui proprieta' sono state gia' studiate facendo uso del formalismo di Wigner [1.4]. Il modello di trasporto adottato in [1.4] utilizza l'approssimazione di banda parabolica, grazie alla quale si ottiene una importante semplificazione delle equazioni. Un altro dispositivo di grande interesse e' il Resonant Interband Tunneling Diode (RITD) che si differenzia dall'RTD per il fatto che i portatori della banda di valenza danno un contributo importante al flusso di corrente [1.5]. Entrambi questi dispositivi presentano regioni con resistivita' differenziale negativa. Per la descrizione cinetica dell'RITD mediante la funzione di Wigner, e' necessario sviluppare un modello di trasporto multibanda, finora assente in letteratura, cosi' come sono assenti modelli cinetici che permettano di trattare le regioni di non-parabolicita' delle bande di energia.

Il nostro gruppo di ricerca ha gia' elaborato modelli che estendono il formalismo della funzione di Wigner ai casi di trasporto multibanda [1.6,1.7,1.8,1.9,1.10] e di trasporto non-parabolico [1.9,1.10,1.11,1.12]. Le equazioni di trasporto dei modelli a singola banda di profilo non-parabolico sono state risolte numericamente e sono stati studiati alcuni processi elementari che coinvolgono transizioni intervalley [1.11,1.12]. In [1.12] e' stato anche aggiunto alle equazioni cinetiche un termine di collisione di tipo Boltzmann.

I problemi relativi alla trattazione quantistica dei fenomeni di scattering risultano amplificati quando si cerchi di trattare sistemi multibanda, la cui formulazione cinetica e' tuttora oggetto di studio sia in ambito fisico che matematico. Infatti i risultati presenti in letteratura permettono di trattare i fenomeni collisionali elettrone-fonone a livello cinetico solo per fluidi di tipo classico o semiclassico. L'analogia fra i formalismi di Boltzmann e di Wigner suggerisce la possibile estensione dei metodi Monte Carlo o di

multigruppo classici [1.13] a sistemi quantistici.

La soluzione numerica delle equazioni dei modelli multibanda e' invece ancora in fase di studio.

2. Modelli idrodinamici per sistemi quantistici

Negli ultimi tre anni, sono stati introdotti e analizzati diversi modelli per dispositivi a semiconduttore secondo un approccio fluidodinamico quantistico ([2.1,2.2,2.3]). Un'equazione fluidodinamica quantistica (QFD) discende dalla meccanica quantistica, ed ha come incognite le grandezze macroscopiche tipiche della dinamica dei fluidi, cioè densità, corrente, temperatura. Le più note sono le equazioni di Madelung ([2.4]), che sono una riformulazione dell'equazione di Schroedinger in termini di densità e corrente (di probabilità).

Modelli QFD possono anche essere dedotti, come succede nella fluidodinamica classica, da equazioni cinetiche quantistiche, cioè dalla formulazione della meccanica statistica quantistica basata sul formalismo di Wigner [2.5,2.6]. Il vantaggio di quest'ultimo approccio e' che si può pensare di applicare al caso quantistico le stesse tecniche che si applicano solitamente al caso classico termini collisionali di tipo BGK, chiusure di massima entropia [2.7], procedure alla Chapman-Enskog, ecc.).

Negli ultimi anni, la nostra ricerca e' stata indirizzata allo sviluppo di modelli QFD per sistemi quantistici in cui sono coinvolti due o più livelli di energia (Hamiltoniane multi-banda). Un esempio importante e' costituito dall'Hamiltoniana di Kane [2.8], che si e' dimostrata utile, ad esempio, per la descrizione di un diodo risonante in cui si evidenziano effetti interbanda (RITD). Recentemente, un'Hamiltoniana multibanda, che si e' rivelata un'interessante alternativa a quella di Kane, e' stata proposta dal nostro gruppo (Morandi e Modugno, [2.9, 2.10]). Un altro esempio significativo di un sistema multibanda e' rappresentato dalla Hamiltoniana di Rashba [2.11], che gioca un ruolo fondamentale nella teoria della moderna spintronica.

I nostri primi tentativi di sviluppare metodi multibanda QFD, sia per l'Hamiltoniana di Kane [2.12] che per quella di Morandi e Modugno [2.13], hanno seguito la formulazione di Schroedinger.

In parallelo, e' stato sviluppato l'approccio multibanda con la funzione di Wigner [2.14-2.21], allo scopo di conseguire la formulazione cinetica dei modelli quantistici multibanda.

I riferimenti bibliografici relativi a questo progetto mostrano che le attività di ricerca comuni con l'Unita' di Catania e l'Universita' di Modena sono già avviate da tempo.

3. Studio asintotico di equazioni cinetiche

L'equazione di Wigner, in quanto versione quantistica dell'equazione di Liouville, descrive l'evoluzione reversibile di un sistema. Nel caso di un dispositivo a semiconduttore, questo significa descrivere un sistema isolato di elettroni.

Un modo per tener conto dell'interazione con l'ambiente e' quello di includere un termine collisionale classico. Il più semplice e' il cosiddetto operatore di BGK, che descrive il rilassamento del sistema verso uno stato di equilibrio termodinamico per effetto delle collisioni (vedi [3.1]). Del resto, come nella teoria del trasporto classico e semiclassico [3.2], una riduzione del modello cinetico quantistico a modelli idrodinamici [3.3],[3.4] e' sicuramente auspicabile, in quanti i modelli idrodinamici consentono una più agevole e rigorosa trattazione numerica [3.5]. In particolare, l'analisi asintotica consente di ricavare modelli idrodinamici "approssimati", che permettono di valutare l'incidenza del termine collisionale a un livello macroscopico [3.6],[3.7].

Il metodo di Chapman-Eskog "compresso" [3.8] si e' dimostrato, nella teoria cinetica, uno strumento utile per svolgere un'analisi rigorosa di modelli idrodinamici corretti all'ordine secondo in epsilon (libero cammino medio): rende possibile, in effetti, uno studio della convergenza della soluzione dell'equazione approssimata verso quella esatta, che tenga conto anche dell'intervallo di tempi iniziale, tipicamente trattato separatamente in analisi asintotica.

Nell'ambito dei problemi cinetici legati alla biologia, si studiano fenomeni che evolvono secondo due scale di tempi diverse: una scala lenta, relativa ad esempio alla crescita demografica, ed una scala veloce, relativa ad esempio ai processi di migrazione, [3.10] (il caso dei pesci piatti durante il loro stato larvale, ne e' un esempio). Al fine di poter diminuire le variabili in gioco, sono stati ampiamente studiati in letteratura i cosiddetti sistemi aggregati, che permettono di ottenere uno studio del comportamento delle popolazioni, cioè per tempi molto lunghi.

In questo tipo di problemi deve essere naturalmente valutato il diverso comportamento che individui della stessa specie hanno a seconda della fascia di età considerata (popolazione strutturata per età) [3.11,3.13]. I modelli matematici che si ricavano tengono anche conto dell'influenza che può avere la presenza della luce su talune popolazioni [3.12]. In alcuni casi, la luce può favorire la vita degli organismi considerati (nel caso del processo di fotosintesi) mentre in altri casi può danneggiarla (per esempio nei problemi della fauna ittica, legati alla crescita di alghe).

4. Gerarchia BBGKY e problemi associati

La descrizione "esatta" di un sistema composto da un numero finito di particelle quantistiche è data dall'equazione di Von Neumann per la matrice densità, che è l'equivalente dell'equazione di Liouville nel caso classico [4.1]. L'equazione di Von Neumann è equivalente alla sequenza finita di equazioni di evoluzione che può essere costruita in analogia con la derivazione della gerarchia BBGKY, per le funzioni di distribuzione ridotte, dall'equazione di Liouville classica [4.2].

Le difficoltà sorgono quando si vuol descrivere un sistema di infinite particelle, a causa dei connessi problemi di convergenza. In questo caso la gerarchia BBGKY infinita è lo strumento giusto da utilizzare per una descrizione "esatta" del comportamento del sistema.

Una descrizione alternativa può essere ottenuta costruendo la gerarchia BBGKY duale per l'evoluzione delle osservabili, come già proposto in [4.3] per il caso classico, il che significa assumere la descrizione di Heisenber della Meccanica Quantistica.

Testo inglese

1. Multiband transport in semiconductors
2. Hydrodynamic models for quantum systems
3. Asymptotic analysis of kinetic models
4. BBGKY hierarchy and related problems

1. Multiband transport in semiconductor

In the modelling of last-generation semiconductor devices, quantum effects must be taken into account [1.1]. Quantum interference

and size-quantized effects dominate the behaviour of these nanostructures and control the flow of current. In quantum transport theory, an important role is played by the Wigner function, which is similar to a classical distribution function, and whose moments give the macroscopic quantities which characterize the behaviour of the system [1.1,1.2,1.3]. The Wigner function is defined by the Wigner-Weyl transform of the wave function (for pure states) or of the density matrix (for mixed states).

One of the prototypes among the nanoscale semiconductor devices is the resonant tunneling diode (RTD), whose properties have already been investigated by the Wigner-function approach [1.4]. In this device, only conduction band carriers contribute to the flow of current; also, the transport model adopted in [1.4] uses the parabolic band approximation, which leads to important simplifications of the equations. Another device, which has recently received much interest, is the Resonant Interband Tunneling Diode (RITD), in which valence band carriers contribute to the flow of current [1.5]. Both devices present regions with negative differential

resistivity. For the kinetic description of the RITD, a multiband transport model, so far not present in the literature, is needed; also, kinetic models which include non-parabolic band profiles were also absent in the literature. Our research group has already developed transport models which extend the Wigner-function formalism to multiband [1.6,1.7,1.8,1.9,1.10] and non-parabolic [1.9,1.10,1.11,1.12] transport cases. The transport equations of the single-band models with non-parabolic band profiles have been solved numerically and some elementary processes, which involve intervalley transitions, have been studied [1.11,1.12]. In [1.12], a Boltzmann-like collision term has also been added to the kinetic equations.

The problems related to the quantum description of scattering phenomena increase in case of multi-band systems, whose kinetic formulation is still under investigation both in the physical and in the mathematical framework. Indeed, the results in the current literature allow to deal with electron-phonon collisional phenomena at the kinetic level, only for classical and semiclassical fluids. The analogy between the Boltzmann and the Wigner formalisms suggests an extension of Monte Carlo or classical multigroups methods [1.13] to quantum systems.

The numerical solution of the multiband transport equations is instead still under study.

2. Hydrodynamic models for quantum systems

In the last few years, several models of semiconductor devices based on the quantum fluidodynamical (QFD) approach have been derived and analyzed [2.1,2.2,2.3]. A QFD equation follows from quantum mechanics and contains the "macroscopic" unknown functions typical of fluidodynamics, such as density, current, temperature, etc. The best known are the Madelung equations [2.4], which are a reformulation of the Schroedinger equation in terms of (probability) density and (probability) current.

QFD models can also be deduced, as it happens in classical fluidodynamics, from quantum kinetic equations, i.e. from the formulation of statistical quantum mechanics based on the Wigner formalism [2.5,2.6]. The advantage of this point of view is that, in principle, one can think of applying to the quantum case the same techniques usually applied to the classical case (such as BGK collisional terms, entropy closures [2.7], Chapman-Enskog procedures, etc.).

Our research interests in the last few years have been focused on the development of QFD models for quantum systems where two or more energy bands are involved (multiband Hamiltonians). An important example is the Kane Hamiltonian [2.8], suitable to describe, e.g., a resonant diode with interband effects (RITD). Recently a multi-band Hamiltonian, which is an interesting alternative to the Kane Hamiltonian, has been proposed by our group (Morandi and Modugno, [2.9, 2.10]). Another relevant example of multi-band system is given by the Rashba Hamiltonian [2.11], which plays a central role in the theory of modern spintronics.

Our first attempts to develop multiband QFD models have been performed in the framework of the Schroedinger formalism. It was applied to the Kane Hamiltonian [2.12] as well as to the Morandi and Modugno Hamiltonian [2.13].

In the meanwhile, a multiband Wigner-function approach has been developed [2.14-2.21] in order to pursue the kinetic approach to multiband QFD models.

References related to the present task show that the common research activities with Catania Unit and University of Modena are already active.

3. Asymptotic analysis of kinetic equations

The Wigner equation, being the quantum version of the Liouville equation, describes the reversible evolution of a system. In the case of a semiconductor device, this corresponds to considering an isolated system of electrons. One way for taking into account the interaction with an environment is that of including a classical collision term. The simplest one is the so called BGK operator, describing the collisional relaxation of the system to the thermodynamical equilibrium (see [3.1]). However, as in classical and semi-classical transport theory ([3.2]), it is desirable to have a reduction of the quantum kinetic model to a hydrodynamic one [3.3],[3.4], more suitable to rigorous numerical analysis [3.5]. In particular, it is possible, by using asymptotic analysis methods, to obtain hydrodynamical models corrected up to the second order in epsilon (mean free path), in order to evaluate the influence of the collisional term at a macroscopic level [3.6],[3.7].

The compressed Chapman-Enskog method [3.8] has proved to be a useful tool for a rigorous analysis of corrected hydrodynamical models: it makes indeed possible to study the convergence of the solution of the corrected equation to the exact hydrodynamical one, taking into account also the initial layer, which is typically left for a separate study in asymptotic analysis.

In the framework of kinetic problems related to biology, we study many phenomena that evolve on two different time scales: a slow one, related, e.g., to the demographical growth, and a fast one, related, e.g., to migration processes [3.10] (an example is given by flat fishes at the larval stage). In order to reduce the number of variables in the system, the so called aggregate systems have been largely studied in the literature; they allow to obtain a study of the asymptotic behaviour of populations, i.e., for large times. In this kind of problems, the different behaviour of individuals of the same species with respect to the age (age-structured population) [3.11, 3.13] has also to be taken into consideration. The mathematical models that we obtain take into account also the effect of light [3.12]. In some cases, the light can help the birth of new individuals (in the case of the photosynthesis process), while in other cases it can be of damage to them (for example, fish population problems related to the growth of algae).

4. BBGKY hierarchy and related problems

Exact description of a finite many-particle quantum ensemble is given by the Von Neumann equation for the density matrix, which is the correspondent of the Liouville equation in the classical case [4.1]. The Von Neumann equation is equivalent to the finite sequence of evolution equations which can be constructed in analogy to the derivation from the Liouville equation of the classical

BBGKY hierarchy for the reduced distribution functions [4.2].

The hard task consists in dealing with an infinite many-particle ensemble and with the connected problems of convergence. In this case, infinite BBGKY hierarchy is the right tool to use for an exact picture of the ensemble behaviour.

An alternative description is obtained constructing the dual BBGKY hierarchy for the evolution of observables, as already proposed in [4.3] for the classical case, that means assuming the Heisenberg picture of Quantum Mechanics.

2.4.a Riferimenti bibliografici

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI - REFERENCES

- [1.1] P. Markowich, Ch.A. Ringhofer, Ch. Schmeiser, *Semiconductor equations*, Springer Verlag, Wien, 1990
- [1.2] W.R. Frensley, *Wigner-Function Model of a Resonant-Tunneling Semiconductor Device*, *Phys.RevB*,36(3),1570-1580,1987
- [1.3] W.R. Frensley, *Boundary Conditions for Open Quantum Systems Driven far from Equilibrium*, *Rev. Modern Phys.*,62(3), 745-791, 1990.
- [1.4] N.C. Kluksdahl, A.M. Krizan, D.K. Ferry and C. Ringhofer, *Self-Consistent Study of the Resonant-Tunneling Diode*, *Phys. Rev. B*, 39(11),7720-7735, 1989
- [1.5] M. Sweeney and J. Xu, *Resonant Interband Tunnel Diodes*, *Appl. Phys. Lett.* 54(6), 546-548, 1989
- [1.6] L. Demeio, L. Barletti, P. Bordone and C. Jacoboni, *Wigner function for multiband transport in semiconductors*, *Transport Theory and Statistical Physics*, 32(3-4), 307-325 (2003)
- [1.7] L. Demeio, L. Barletti, A. Bertoni, P. Bordone and C. Jacoboni, *Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors*, *Physica B*, 314, 104-107 (2002)
- [1.8] L. Barletti, L. Demeio, *Wigner-function approach to multiband transport in semiconductor devices*, *Proc. VI Congresso SIMAI, Chia Laguna (CA-Italy) May 27-31, 2002*
- [1.9] L. Demeio, P. Bordone and C. Jacoboni, *Numerical and analytical applications of multiband transport in semiconductors*, *Proc. XXIII Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Whistler, BC, Canada, July 20-25, 2002*, pp. 92-98 (AIP Conference Proceedings vol. 663, New York, 2003)
- [1.10] L. Demeio, P. Bordone and C. Jacoboni, *Multi-band, non-parabolic Wigner-function approach to electron transport in semiconductors*, *Internal Report, Quaderno N. 3/2003 (Dipartimento di Scienze Matematiche, Università Politecnica delle Marche, April 2003, submitted to the J. of Stat. Phys.)*
- [1.11] L. Demeio, *Splitting-scheme Solution of the Collisionless Wigner Equation with Non-Parabolic Band Profile*, *Journal of Computational Electronics*, 2, 319-322 (2003)
- [1.12] L. Demeio, P. Bordone and C. Jacoboni, *Numerical simulation of an intervalley transition by the Wigner-function approach*, *Semiconductor Science and Technology*, 19, 1-3 (2004)
- [1.13] M. Galler, F. Schuerrer, *A deterministic solution method for the coupled system of transport equations for the electrons and phonons in polar semiconductors*, *J. Phys. A* 37 1479-1497 (2004)
- [2.1] A. Jungel, *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, Birkhauser, Basel, 2001
- [2.2] I. Gasser, P. Markowich, A. Unterreiter, *Quantum Hydrodynamics, in Modeling of Collisions (ed. P. Raviart)*, pp. 179-216, Gauthier-Villars, Paris, 1997
- [2.3] C. Gardner, *The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices SIAM J. Appl. Math.*54(2), 409-427(1994)
- [2.4] E. Madelung, *Quantentheorie in hydrodynamischer Form*, *Zeitschr. f. Phys.* 40, 322-326 (1926)
- [2.5] E. Wigner, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, *Phys. Rev.* 40, 749-759 (1932)
- [2.6] R. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin Inc., Reading MA, 1972
- [2.7] P. Degond, C. Ringhofer, *Quantum moment hydrodynamics and the entropy principle*, *J. Statist. Phys.* 112(3-4), 587-628 (2003).
- [2.8] E. Kane, *The K.P method*, in *Physics of III-V Compounds, Semiconductors and Semimetals (eds. R. Willardson and A. Beer)*, vol. 1 chp. 3, Academic Press, New York, 1966
- [2.9] G. Borgioli, O. Morandi, G. Frosali and M. Modugno, *Different approaches for multiband transport in semiconductors*, *Ukrainian Mathematical Journal*, vol.57, 6, pp. 742-748, 2005.
- [2.10] M. Modugno, O. Morandi, *A multiband envelope function model for quantum transport in a tunneling diode*, *Phys. Rev. B* 71, 235331 (2005)
- [2.11] Y. Bychkov, E. Rashba, *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, *JETP Lett.* 39(2), 78-81 (1984)
- [2.12] G. Ali', G. Frosali, *Quantum hydrodynamic models for the two-band Kane system*, *Nuovo Cimento* 120 B(12) (2005).
- [2.13] G. Ali', G. Frosali, C. Manzini, *On the drift-diffusion model for a two-band quantum fluid at zero temperature*, *Ukrainian Math. J.* 57(6), 723-730 (2005)
- [2.14] L. Demeio, L. Barletti, A. Bertoni, P. Bordone, C. Jacoboni, *Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors*, *Physica B* 314, 104-107 (2002)
- [2.15] G. Borgioli, G. Frosali, P. Zweifel, *Wigner approach to the two-band Kane model for a tunneling diode*, *Transport Theory Stat. Phys.* 32(3-4), 347-366 (2003)
- [2.16] L. Demeio, L. Barletti, P. Bordone, C. Jacoboni, *Wigner function for multiband transport in semiconductors*, *Transport Theory Stat. Phys.* 32(3-4), 307-325 (2003)
- [2.17] L. Demeio, P. Bordone, C. Jacoboni, *Numerical simulation of intervalley transitions by the Wigner-function approach*, *Semicond. Sci. Technol.* 19, S244-S246 (2004)
- [2.18] L. Barletti, *On the thermal equilibrium of a quantum system described by a two-band Kane Hamiltonian*, *Nuovo Cimento B*, 119(12), 1125-1140 (2004).
- [2.19] L. Barletti, *Quantum moment equations for a two-band k.p Hamiltonian*, *Boll. Unione Mat. Italiana Sez. B*, (8)8-B, 103-121 (2005)
- [2.20] L. Barletti, *A 'spinorial' Wigner function describing the two-band k.p dynamics of electrons in crystals*, in *Applied and Industrial Mathematics in Italy: (eds. M. Primicerio, R. Spigler, V. Valente)*, World Scientific, Singapore (2005)
- [2.21] G. Frosali, L. Demeio, L. Barletti, *Multiband Quantum Transport Models for Semiconductor Devices. Kinetic Equations: Direct and Inverse Problems. Proceedings del Convegno tenuto a Mantova, May 15-17 2005(to appear)*

- [3.1] A. Arnold, *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, *Commun. Partial Differ. Equations* 21(3-4), 473-506 (1996)
- [3.2] A. M. Anile, V. Romano, G. Russo, *Extended hydrodynamical model of carrier transport in semiconductors*, *SIAM J. Appl. Math.* 61(1), 74-101 (2000)
- [3.3] C. L. Gardner, *The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, *SIAM J. Appl. Math.* 54(2), 409-427 (1994).
- [3.4] A. Jungel, D. Matthes, *A derivation of the isothermal quantum hydrodynamic equations using entropy minimization*. *ZAMM, Z. Angew. Math. Mech.* 85(11), 806-814 (2005)
- [3.5] A. Jungel, R. Pinnau, *A positivity-preserving numerical scheme for a nonlinear fourth order parabolic system*, *SIAM J. Numer. Anal.* 39(2), 385-406 (2001)
- [3.6] C. D. Levermore, *Moment Closure Hierarchies for Kinetic Theories*, *J. Stat. Phys.*, 83, 331-407 (1996).
- [3.7] F. Poupaud, *Runaway Phenomena and Fluid Approximation Under High Fields in Semiconductor Kinetic Theory*, *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.*, 72(8), 3591-372 (1992)
- [3.8] J. R. Mika, J. Banasiak, *Singularly perturbed evolution equations with application to kinetic theory*, *singapore-World Scientific* (1995).
- [3.9] E. Wigner, *On the quantum correction for the thermodynamic equilibrium*, *Phys. Rev.* 40, 749-759 (1932)
- [3.10] R. Bravo De La Parra, O. Arino, E. Sánchez, P. Auger, *A model of an age-structured population with two time scales*, *Mathematical and Computer Modelling*, 31, 17-26, 2000
- [3.11] G. Busoni, S. Maticucci, *A problem of optimal harvesting policy in two-stage age-dependent populations*, *Mathematical Biosciences*, Vol. 143, pp. 1-33, 1997
- [3.12] G. Frosali, S. Totaro, *A scaled nonlinear mathematical model for interaction of algae with light: existence and uniqueness results*, *Transport Theory and Statistical Physics*, Vol. 26, No. 1&2, pp. 27-48, 1997
- [3.13] M. Lisi, S. Totaro, *The Chapman-Enskog procedure for an age-structured population model: initial, boundary and corner layer corrections*, *Math. Biosci.*, 196, 153-186 (2005)
- [4.1] R. Dautray and J.L. Lions, *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*, Vol.1, Springer-Verlag, Berlin 1992.
- [4.2] D.Y. Petrina, *Mathematical Foundations of Quantum Statistical Mechanics: Continuous Systems*, Springer-Verlag, Berlin 1995
- [4.3] G. Borgioli and V. Gerasimenko, *The dual BBGKY hierarchy for the evolution of observables*, *Rivista Matematica dell'Università di Parma*, vol.4, 6, pp.251-267, 2001.

2.5 Descrizione del programma e dei compiti dell'Unità di Ricerca

Testo italiano

1. Modelli multibanda per i dispositivi a semiconduttore
2. Modelli idrodinamici per sistemi quantistici
3. Studio asintotico di equazioni cinetiche
4. Gerarchia BBGKY e problemi connessi

1. Modelli multibanda per i dispositivi a semiconduttore

In questa parte del programma di ricerca, si vogliono continuare ed estendere le applicazioni del modello di trasporto multibanda non parabolico sviluppato dal nostro gruppo in [1.6,1.7,1.8,1.9,1.10]. Più in dettaglio, i punti che intendiamo affrontare nell'immediato futuro sono i seguenti:

- 1) Il calcolo, anche approssimato, delle proiezioni della funzione di Wigner sugli spazi di Floquet, per il quale è necessaria (anche in una dimensione) la conoscenza degli integrali dei prodotti della funzione di Wigner con le funzioni di Bloch, che sono funzioni rapidamente oscillanti; questo permetterebbe simulazioni di transizioni interbanda in sistemi spazialmente non omogenei. Qualche risultato preliminare, ristretto a popolazioni di portatori spazialmente omogenee, è già stato pubblicato in [1.9,1.10]. Intendiamo iniziare questo punto con la costruzione e l'utilizzo delle autofunzioni e degli autovalori (bande di energia) nel caso di potenziali unidimensionale semplici (ad esempio il modello di Kronig-Penney).
 - 2) Si vuole estendere a casi più complessi e realistici lo studio delle transizioni intervalley dovuto alle collisioni dei portatori con i fononi ottici, e già iniziato in [1.12]; sono di particolare interesse le applicazioni a quei sistemi costituiti da GaAs, il cui profilo di banda presenta minimi satelliti al minimo centrale. Inoltre, la formulazione cinetica di modelli quantistici multibanda suggerisce la possibilità di accoppiare metodi semiclassici in grado di trattare i fenomeni collisionali elettrone-fonone o lacuna-fonone, con modelli quantistici multibanda in grado di simulare fenomeni di tunneling interbanda. La giustificazione fisica alla base dell'impiego di tali modelli ibridi deriva dal fatto che i fenomeni di tunnel interbanda sono ben localizzati in zone dell'estensione di pochi filari atomici, mentre i fenomeni di rilassamento coinvolgono zone di estensione più ampia all'interno delle quali il moto è principalmente di tipo classico.
 - 3) Si vogliono apportare delle opportune modifiche all'algoritmo dello "Splitting Scheme", modifiche che permettano il suo utilizzo anche in presenza di potenziali continui a tratti (e.g., barriere di potenziale). In questi casi infatti, l'algoritmo non è applicabile nella versione presente, formulata nello spazio di Fourier, a causa degli errori di aliasing. Si esploreranno l'introduzione di filtri di alta frequenza e possibili formulazioni in basi alternative, come i polinomi di Hermite.
- Il completamento di questi punti permetterà di effettuare simulazioni accurate di una vasta gamma di dispositivi a semiconduttore mediante l'uso della funzione di Wigner.

2. Modelli idrodinamici per sistemi quantistici

Il nostro programma è indirizzato allo studio di sistemi multibanda ed i sistemi considerati sono selezionati per l'importanza nelle applicazioni. In particolare, siamo interessati ad estendere lo studio delle già menzionate Hamiltoniane di Kane e Morandi-Modugno nel caso in cui siano presenti più di due bande. Inoltre, ci occuperemo delle equazioni della spintronica (modello di Rashba), con modelli di superlattici di semiconduttori e con trasporto di elettroni in fogli di grafite e in nanotubi di

carbonio. Il principale obiettivo è lo sviluppo di modelli cinetici quantistici per tali sistemi e, come prodotto finale, la derivazione e l'analisi di modelli QFD multibanda.

A livello cinetico, molti aspetti della teoria multibanda sono sempre poco chiari. Fra tutti, l'individuazione delle "giuste" quantità fluidodinamiche, che portino a un'interpretazione fisica corretta e che siano consistenti con la matematica. Un grande avanzamento è stato recentemente fatto su questo punto e confidiamo di ottenere una maggiore consapevolezza nel futuro prossimo.

Un'altra questione cruciale è la descrizione di collisioni elastiche ed anelastiche (principalmente, elettroni- fononi ed elettroni-impurità) per i quali sono disponibili modelli semiclassici, ma solo a banda singola. Nella prima parte del nostro progetto, programmiamo di estendere tali modelli semiclassici al caso multibanda e, in seconda istanza, di affrontare il caso ben più difficile di una descrizione interamente quantistica.

A livello fluidodinamico, nel caso di versioni quantistiche, indagheremo l'uso delle tecniche di sviluppo di Chapman-Enskog e di Hilbert, per ottenere modelli di deriva-diffusione, energy-transport e idrodinamici.

Questo richiede un'analisi semiclassica della funzione di Wigner all'equilibrio locale, che sarà eseguita sia nel caso della statistica di Fermi-Dirac che di Maxwell-Boltzmann. Saranno applicate tecniche per una derivazione matematica rigorosa come l'espansione di Chapman-Enskog "compressa" di Mika e Banasiak al caso quantistico a banda singola e multibanda.

I risultanti modelli QFD saranno testati numericamente e applicati alla simulazione di dispositivi reali. La derivazione di un modello di deriva-diffusione unidimensionale a due bande, per un superreticolo di semiconduttori, sottoposto a un campo elettrico auto-consistente, è già a buon punto e anche i risultati numerici sono attesi a breve.

Questo settore di ricerca è in collaborazione con l'Università di Modena (Dip. di Fisica) e le Unità di Ricerca di Catania e Pavia.

3. Studio asintotico di equazioni cinetiche.

Si intende eseguire uno studio asintotico dell'equazione di Wigner modificata da un termine collisionale di rilassamento all'equilibrio termodinamico. Si considererà la funzione di equilibrio corretta al secondo ordine nella costante di Planck, derivata da Wigner (vedi [3.9], recentemente discussa in [1,4]), e la derivazione sarà nel caso di campo applicato forte.

Si userà la tecnica del metodo di Chapman-Enskog compresso [3.8] per ottenere un'equazione di deriva-diffusione quantistica corretta al secondo ordine nel numero di Knudsen, di cui si intende svolgere un'analisi rigorosa con la teoria dei semigrupp. È possibile in questo modo studiare efficacemente anche l'intervallo iniziale, che viene comunemente evitato in analisi asintotica [3.7].

Uno sguardo alla letteratura sulla crescita biologica attraverso modelli matematici mostra che un notevole sforzo è stato finora operato per descrivere le complesse interazioni che intervengono tra le diverse popolazioni cellulari e/o i fattori chimici. Tuttavia, una descrizione di sistemi biologi in termini del loro comportamento asintotico gode ancora di poca attenzione.

Per quanto riguarda quest'ultimo punto, ci poniamo l'obiettivo di studiare i fenomeni regolati da scale di tempi diverse con metodi alle perturbazioni singolari ed, in particolare, l'intenzione è quella di applicare metodi propri delle teorie cinetiche, come il metodo di Chapman-Enskog. Questo tipo di approccio ha il vantaggio di fornire, in maniera abbastanza sistematica, una descrizione dettagliata del comportamento della popolazione. È possibile infatti rendere lo studio asintotico uniforme su tutti gli intervalli di tempo e di età, introducendo le cosiddette correzioni di initial, boundary e corner layers. Queste permettono di ricavare le corrette condizioni iniziali e condizioni al contorno che la soluzione approssimata deve soddisfare.

Nel caso di popolazioni strutturate per età, si vogliono anche affrontare metodi di ottimizzazione. Sarà interessante valutare il caso della "politica del buon allevamento": in una popolazione di allevamento dove sono presenti uova e adulti, si cerca di massimizzare il guadagno, tenendo in considerazione sia i costi di cessione/abbattimento, sia il rischio di estinzione. Siccome il problema risulterà non lineare, sarà importante il corretto approccio analitico.

4. Gerarchia BBGKY e problemi associati

Il programma di ricerca proposto per questo settore riguarda lo studio di entrambe le gerarchie BBGKY (quella derivata dall'equazione di Von Neumann e quella duale), cioè lo studio di esistenza ed unicità di soluzioni sotto diverse ipotesi sull'Hamiltoniana.

In relazione con la ricerca su modelli matematici per dispositivi a semiconduttore, funzionanti in regime quantistico, intendiamo studiare se un'opportuna scelta dell'Hamiltoniana e delle necessarie approssimazioni possano aiutare a comprendere il livello di validità dei modelli (approssimati) di tipo Schrödinger impiegati nei dispositivi quantistici a semiconduttore e, di conseguenza, delle loro versioni pseudo-cinetiche (funzione di Wigner) ed idrodinamiche quantistiche.

Questo settore di ricerca è in collaborazione con l'Institute of Mathematics NASU di Kiev e l'Unità di Ricerca di Pavia.

Testo inglese

1. Multiband transport in semiconductors
2. Hydrodynamic models for quantum systems
3. Asymptotic analysis of kinetic equations
4. BBGKY hierarchy and related problems

1. Multiband transport in semiconductors

In this part of the research programme, we intend to continue with the applications of the multiband, non-parabolic transport model developed by our group in [1.6,1.7,1.8,1.9,1.10]. More specifically, the issues which we plan to address in the near future are the following:

- 1) the calculation of the projections of the Wigner function on the Floquet eigenspaces, which involves the calculations of rapidly oscillating functions, because of the presence of the Bloch functions in the integrand; this step would allow simulations of interband transitions in spatially inhomogeneous systems. Some preliminary result, restricted to spatially homogeneous carrier populations, has already been obtained in [1.9,1.10]. A possible starting point for this issue could be the construction and the use of the eigenfunctions and eigenvalues (energy bands) for some simple one-dimensional potentials (such as the Kronig-Penney model).
- 2) An extension to more complex and realistic cases of the study of intervalley transitions due to the collisions of the carriers with optical phonons already started in [1.12]; the applications to GaAs systems, whose band profile presents local minima ("satellite minima") beside the central one, are of particular interest.
- 3) The introduction of suitable modifications to the "Splitting Scheme" algorithm, which will allow its use also in the presence of

piecewise continuous potentials (e.g., barriers). In these cases, the algorithm cannot be used in its present version, which is formulated in the Fourier transformed space, because of the aliasing errors.

The finalization of these points will allow performing accurate simulations of a large class of semiconductor devices by the Wigner-function approach, albeit with approximate, Boltzmann-like collision terms.

2. Hydrodynamic models for quantum systems

Our research programme is focused on the quantum mechanical study of multiband systems. The systems that we consider are selected according to their importance for the applications. In particular, we are interested to extend the study of the Kane and Morandi-Modugno Hamiltonians, mentioned above, to the case where more than two bands are included.

Moreover, we shall be concerned with the equations of spintronics (Rashba model), with models of semiconductor superlattices and with electron transport on graphite sheets and carbon nanotubes. The main objective of the research is the development of quantum-kinetic models for such systems and, as a final product, the derivation and analysis of multiband QFD models.

At the kinetic level, many aspects of the multi-band theory are still unclear. Above all, the identification of the "proper" fluidodynamical quantities, leading to both a good physical interpretation and a mathematical consistency. Much progress has been done recently on this point and we are confident to get more insight in the near future.

Another central problem is that of describing elastic and inelastic collisions (mainly electron-phonon or electron-impurity collisions), for which semi-classical models are available, but only for the single-band case. In the first part of our project we plan to extend such semiclassical models to the multiband case and, in a second time, to tackle the much more difficult case of a fully quantum description.

At the fluidodynamics level, we shall investigate the use of quantum versions of the Chapman-Enskog and Hilbert expansion techniques in order to derive two-band drift-diffusion, energy-transport or hydrodynamical models. This requires a semi-classical analysis of the local-equilibrium Wigner functions, which we plan to perform in the case of both Maxwell-Boltzmann and Fermi-Dirac statistics. Mathematically rigorous derivation techniques, such as the "compressed Chapman-Enskog expansion" of Mika and Banasiak will also be tested in the quantum single-band and multi-band cases.

The resulting QFD models will be numerically tested and applied to the simulation of real devices. The derivation of a one-dimensional, two-band, drift-diffusion model of a semiconductor superlattice, subject to a self-consistent Poisson field, is already underway and numerical results are soon expected to come.

The forementioned research programs are in collaboration with University of Modena (Dept. of Physics) and with the Catania and Pavia Research Units.

3. Asymptotic analysis of kinetic equations

We plan to perform an asymptotic study of the Wigner equation, modified by a collisional term modelling relaxation to the thermodynamical equilibrium state. We shall consider the local-equilibrium state function, corrected to the second order in the scaled Planck constant, derived by Wigner (see [3.9], recently discussed in [1,4]), and the derivation will be performed in the case of a strong applied electric field.

We shall use the compressed Chapman-Enskog method [3.8], in order to recover a quantum drift-diffusion equation corrected to the second order in the Knudsen number and we plan to perform a rigorous analysis with the semigroup theory. It is possible to study also the initial layer, which is commonly avoided in asymptotic analysis [3.7].

Looking at the literature on biological growth by means of mathematical models, we can deduce that, up to now, a great effort has been done to describe the complex interactions among the different cellular populations and/or the chemical factors. However, a description of biological systems in terms of their asymptotic behaviour has not yet received much attention.

As far as this point is concerned, we want to study phenomena with two different time scales by means of singular perturbation methods and, in particular, we shall apply kinetic methods, like the Chapman-Enskog approach. This method is useful because it gives a detailed description of the population behaviour, in a systematic way. It is possible to make this asymptotic study uniform on any time and age interval, by introducing the so called initial, boundary and corner layers corrections. They permit to have the correct initial and boundary conditions, which the approximate solution has to satisfy.

In the case of age-structured populations, we want to consider also optimization methods. It will be interesting to analyse the case of "optimal harvesting policy": in a breeding population, with adults and eggs, we investigate the way to maximize the profit, taking into account the removal costs and the extinction risk. Since this is a nonlinear problem, the rigorous analytical approach will be important.

4. BBGKY hierarchy and related problems

The research program proposed for this area concerns a study of both hierarchies (i.e. existence and uniqueness of the solution under different assumptions on the Hamiltonian) is under investigation in our researches.

In connection with the study of mathematical models for quantum semiconductor devices we mean to investigate a suitable choice of the Hamiltonian and of the approximation assumptions, which are able to understand the level of validity of the approximate Schrödinger-like models employed in quantum semiconductor devices and, as a consequence, of the pseudo-kinetic (Wigner function) or quantum hydrodynamic version.

The forementioned research program is in collaboration with the Institute of Mathematics NASU in Kiev and with the Pavia Research Unit.

2.6 Descrizione delle attrezzature già disponibili ed utilizzabili per la ricerca proposta con valore patrimoniale superiore a 25.000 Euro

Testo italiano

Nessuna

Testo inglese

Nessuna

2.7 Descrizione delle Grandi attrezzature da acquisire (GA)

Testo italiano

Nessuna

Testo inglese

Nessuna

2.8 Mesi uomo complessivi dedicati al programma

		Numero	Mesi uomo 1° anno	Mesi uomo 2° anno	Totale mesi uomo
<i>Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca</i>		6	55	49	104
<i>Personale universitario di altre Università</i>		4	41	35	76
<i>Titolari di assegni di ricerca</i>		1	11	11	22
<i>Titolari di borse</i>	<i>Dottorato</i>	0			
	<i>Post-dottorato</i>	0			
	<i>Scuola di Specializzazione</i>	0			
<i>Personale a contratto</i>	<i>Assegnisti</i>	1	2	10	12
	<i>Borsisti</i>	0			
	<i>Altre tipologie</i>	0			
<i>Dottorati a carico del PRIN da destinare a questo specifico programma</i>		0	0	0	0
<i>Personale extrauniversitario</i>		1	11	9	20
TOTALE		13	120	114	234

PARTE III

3.1 Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca

Voce di spesa	Spesa in Euro	Descrizione obbligatoria dettagliata (in italiano)	Descrizione obbligatoria dettagliata (in inglese)
Materiale inventariabile	7.000	Materiale librario, hardware e software.	Books, hardware and software.
Grandi Attrezzature	0		
Materiale di consumo e funzionamento (comprensivo di eventuale quota forfetaria)	4.500	Quota spese Dipartimento, cancelleria, cartucce, ecc.	Department reimbursement, paper, stationery, refils. etc.
Spese per calcolo ed elaborazione dati			
Personale a contratto	18.100	La somma richiesta servirà per il rinnovo dell'assegno di ricerca della Dott.ssa Manzini per l'anno 2007	The requested money will cover the renewal of the research contract of Dott.ssa Manzini for the year 2007
Dottorati a carico del PRIN da destinare a questo specifico programma	0		
Servizi esterni			
Missioni	15.000	Missioni dei collaboratori, compreso i contatti con i collaboratori stranieri	Business trip expences, inclusive contacts with foreign coworkers
Pubblicazioni			
Partecipazione / Organizzazione convegni	4.000	Quote di iscrizione, organizzazione di convegni	Partecipation fee, organization of meetings
Altro	6000	Collaboratori stranieri, seminari esterni, spese per collaborazioni esterne	Foreign collaborations, seminars, inclusive contacts with foreign coworkers, etc.
TOTALE	54600		

Tutti gli importi devono essere espressi in Euro arrotondati alle centinaia

3.2 Costo complessivo del Programma di Ricerca

		Descrizione
Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca	54.600	
Fondi disponibili (RD + RA) comprensivi dell'8% max per spese di gestione	16.400	Fondi disponibili da fondi di ricerca di Ateneo (Dipartimento di Matematica "U.Dini", Dipartimento di Matematica Applicata "G.Sansone" e Dipartimento di Elettronica e Telecomunicazioni, e fondi di Dipartimento. Quota garantita dall'Ateneo, pari al 45% della somma da certificare.
Cofinanziamento di altre amministrazioni		
Cofinanziamento richiesto al MIUR	38.200	

3.3.1 Certifico la dichiarata disponibilità e l'utilizzabilità dei fondi di Ateneo (RD e RA)

SI

(per la copia da depositare presso l'Ateneo e per l'assenso alla diffusione via Internet delle informazioni riguardanti i programmi finanziati e la loro elaborazione necessaria alle valutazioni; D. Lgs, 196 del 30.6.2003 sulla "Tutela dei dati personali")

Firma _____

Data 21/04/2006 ore 12:16