

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 semigrupperi, 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 70 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 had been 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 70 journal articles published in prestigious national and international journals, conference papers, and internal reports. He had 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. BIONDINI S.; FROSALI G.; MUGELLI F. (2004). *Quantum hydrodynamic equations for a two-band Wigner-Kane model* WASC0M2003 - 12th Int. Conference on Waves and Stability in Continuous Media. pp. 78-84 World Scientific, Singapore.
2. 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)
3. BORGIOLI G.; FROSALI G.; ZWEIFEL P.F. (2003). *Wigner approach to the two-band Kane model for a tunneling diode* TRANSPORT THEORY & STATISTICAL PHYSICS. (vol. 32(3&4) pp. 347-366)
4. 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 & STATISTICAL PHYSICS. (vol. 31(3) pp. 187-248)
5. 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)

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	7
2.	BARLETTI	Luigi	Dip. MATEMATICA	Ricercatore Universitario	MAT/07	10	8
3.	BORGIOLI	Giovanni	Dip. ELETTRONICA E TELECOMUNICAZIONI	Prof. Associato	MAT/07	11	8
4.	BUSONI	Giorgio	Dip. MATEMATICA	Prof. Ordinario	MAT/07	11	6
TOTALE						43	29

Altro personale

Nessuno

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.	DEMEIO	Lucio	Politecnica delle MARCHE	Dip. MATEMATICA	RU	MAT/07	11	9
2.	TOTARO	Silvia	SIENA	Dip. MATEMATICA	PO	MAT/07	10	7
TOTALE							21	16

Altro personale

Nessuno

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.	MUGELLI	Francesco	Dip. MATEMATICA APPLICATA	01/03/2004	1	9	2	
TOTALE							9	2

1.7.4 Titolari di borse

n°	Cognome	Nome	Dipartimento	Anno di inizio borsa	Durata(in anni)	Tipologia	Mesi Uomo	
							1° anno	2° anno
1.	CAMPRINI	MATTEO	Dip. ELETTRONICA E TELECOMUNICAZIONI	2001	3	Post-doc	5	5
2.	BIONDINI	STEFANO	Dip. ELETTRONICA E TELECOMUNICAZIONI	2002	3	Dottorato	8	8
3.	LISI	MERI	Dip. MATEMATICA	2002	3	Dottorato	10	8
4.	MORANDI	OMAR	Dip. ELETTRONICA E TELECOMUNICAZIONI	2003	3	Dottorato	10	9
TOTALE					12		33	30

1.7.5 Personale a contratto da destinare a questo specifico programma

Qualifica	Costo previsto	Mesi Uomo		Note
		1° anno	2° anno	
Assegnista	21.600	6	6	Contributo per assegno di ricerca
TOTALE		21.600	6	

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.	MANZINI	CHIARA	Scuola Normale Superiore di PISA	Dottorando	10	9
TOTALE					10	9

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 modeling 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

Testo italiano

EQUAZIONE DI BOLTZMANN QUANTISTICA ; FUNZIONE DI WIGNER ; SEMICONDUTTORI ; TRASPORTO MULTI-BANDA ; MODELLI IDRODINAMICI QUANTISTICI ; SIMULAZIONI NUMERICHE DI DISPOSITIVI A SEMICONDUTTORE ; TRASPORTO RADIATIVO ; TEORIA DEL TRASPORTO ; METODI FUNZIONALI

Testo inglese

QUANTUM BOLTZMANN EQUATION ; WIGNER FUNCTION ; SEMICONDUCTORS ; MULTI-BAND TRANSPORT ; QUANTUM HYDRODYNAMIC MODELS ; NUMERICAL SIMULATIONS OF SEMICONDUCTOR DEVICES ; RADIATIVE TRANSPORT ; TRANSPORT THEORY ; FUNCTIONAL METHODS

2.4 Base di partenza scientifica nazionale o internazionale

Testo italiano

1. Modelli matematici e numerici di dispositivi a semiconduttore.

1.1 Equazione di Wigner non lineare.

E' nota l'equivalenza tra la formulazione in termini di funzione di Wigner e quella, più tradizionale, in termini di matrice densità della meccanica quantistica statistica [45,52,14]. La formulazione Wigneriana, che potrebbe definirsi quanto-cinetica, ha il vantaggio di presentare un'analogia con le equazioni cinetiche classiche che permette di formulare versioni quantistiche di modelli classici, come ad esempio condizioni al bordo di tipo "inflow" [31], operatore collisionale di tipo BGK [31,4], equazioni di campo medio [39] ed equazioni di tipo Fokker-Planck [6], nonché di fornire una gerarchia di equazioni quanto-idrodinamiche [34,35]. Alcuni ricercatori del nostro gruppo si sono recentemente interessati a modelli non-lineari di questo tipo. In particolare si è studiata la buona posizione (di tipo L^2) del sistema di Wigner-Poisson su un dominio limitato unidimensionale con condizioni di "inflow" [49], del sistema di Wigner-Poisson in dominio limitato a dimensione 3 [50] e del sistema Wigner-Poisson-Fokker-Planck nell'intero spazio a dimensione 3.

1.2 Trasporto multi-banda in semiconduttori

E' noto che lo spettro dell'Hamiltoniana di una particella quantistica in un potenziale periodico (come nel reticolo di un semiconduttore) è uno spettro continuo decomponibile in intervalli detti bande di energia. In presenza di potenziali esterni applicati le proiezioni della funzione d'onda sugli autospazi relativi alle bande di energia (sottospazi di Floquet) risultano accoppiate dall'equazione di Schroedinger, rendendo possibili transizioni interbanda.

Nei dispositivi quantistici come il Resonant Tunneling Diode, la disponibilità di un'unica banda di energia per i portatori di carica è un'approssimazione solitamente più che soddisfacente [51,62,21]. Questa viene anche accompagnata dall'approssimazione di banda parabolica, che è soddisfacente quando i portatori rimangono nelle vicinanze del minimo della banda.

Ciò non è più vero quando l'architettura del dispositivo è tale da far sentire la presenza di ulteriori bande di energia disponibili, come nel caso dell'Interband Resonant Tunneling Diode, [58]. Per tali dispositivi è necessario ricorrere a modelli più raffinati, in cui ogni portatore di carica è in una sovrapposizione di differenti stati di banda. Sono di questo tipo i modelli di Kane [43] e di Kohn [48], ben noti nella letteratura fisica ma ancora poco studiati dal punto di vista quanto-cinetico e quanto-idrodinamico. Il nostro gruppo ha già affrontato lo studio di buona posizione per modelli cinetici multi-banda basati sulle proiezioni della funzione di Wigner sui sottospazi di Floquet [25,26], sull'Hamiltoniana di Kane [19] e sulle funzioni di involuppo di Wannier e Slater, [13]. Differenti proprietà fisico-matematiche dei suddetti modelli sono state confrontate [16] e un primo passo verso la costruzione di equazioni idrodinamiche multi-banda è stato compiuto con la derivazione di una gerarchia di equazioni dei momenti per l'Hamiltoniana di Kane, [15,1].

1.3 Modelli idrodinamici per sistemi quantistici.

I modelli idrodinamici hanno avuto sempre un ruolo importante nella modellistica dei semiconduttori, sia per la loro migliore implementazione numerica, sia per l'uso di grandezze macroscopiche [51]. Nei più recenti dispositivi quali gli RTD e RITD occorre però sviluppare ed utilizzare modelli pienamente quantistici perché tali sono i loro meccanismi di funzionamento.

Il nostro gruppo di ricerca ha utilizzato in passato il modello di Kane a due bande [41,42], modello che, partendo dall'equazione di Schrödinger ed approssimando l'Hamiltoniana con il metodo kP [62], fornisce un sistema di due equazioni accoppiate di tipo Schrödinger per le funzioni envelope [21] di elettroni e lacune. Di tale modello è stata presentata una riformulazione in termini di funzioni di Wigner [19], come un sistema di quattro equazioni integro-differenziali di tipo cinetico.

La modellistica idrodinamica è molto presente nella letteratura recente, con un approccio che deriva le equazioni dall'equazione di Wigner-Boltzmann con il metodo dei momenti e con sviluppi alla Chapman-Enskog [34,36,12]. Questa formulazione risulta interessante perchè permette di maneggiare una versione smussata dell'energia potenziale di banda, in genere discontinua. I termini quantistici si presentano nelle equazioni come perturbazione in modo che l'analisi del modello ottenuto risulta agevole nel limite semiclassico ed il trattamento numerico è relativamente semplice e in accordo con i dati sperimentali [37]. Le equazioni dell'idrodinamica quantistica, a partire dagli studi di Madelung negli anni '20, sono oggi di grande attualità nella comunità internazionale fisico-matematica [40].

1.4 Metodi numerici per la simulazione di dispositivi

Per la base di partenza scientifica valgono, anche su questo punto, le considerazioni generali del punto 1.2. Il modello multibanda non-parabolico elaborato dal nostro gruppo di ricerca in [25,26,16,27,28] è già stato affrontato numericamente in alcuni casi particolari con il metodo dello Splitting-Scheme ([24] e referenze ivi citate). Questo algoritmo è stato introdotto per la soluzione numerica di equazioni differenziali iperboliche e consiste nell'integrazione dell'equazione stessa lungo le curve caratteristiche nello spazio delle fasi. Una versione di questo metodo prevede che il calcolo venga effettuato nello spazio duale di Fourier rispetto al momento canonico ed in questa versione può essere esteso al caso di equazioni pseudodifferenziali, come l'equazione di Wigner. Lo Splitting-Scheme è, in generale, un metodo numerico molto più efficiente dei metodi tradizionali alle differenze finite [51,32,31], sia in termini di velocità di convergenza sia in termini di memoria richiesta. Mediante il suo utilizzo, 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 [24,29]. La soluzione numerica delle equazioni dei modelli multibanda è invece ancora in fase di studio.

2. Modelli e metodi cinetici con applicazioni alla fisica del mezzo interstellare e alla biomatematica

2.1 Modelli cinetici con applicazioni alla fisica del mezzo interstellare.

La materia interstellare è costituita essenzialmente da gas (la maggior parte idrogeno), molecole più complesse e "polveri", [54], concentrata in grandi nubi, con dimensioni dell'ordine delle decine di anni-luce e densità 10^3 - 10^6 particelle per cm cubo. Ci sono vari aspetti della fisica delle nubi interstellari che portano a modelli matematici di tipo cinetico, come il caso del trasporto radioattivo, [56]. Numerosi sono i risultati relativi a modelli cinetici, con presenza di ammassi più densi, detti "clumps", o nel caso relativo a fenomeni di coagulazione fra grani di polvere all'interno della nube, [23]. In questo ambito la nostra ricerca si è inizialmente indirizzata alla valutazione della densità di fotoni presenti all'interno della nebulosa, al quale si è poi aggiunto lo studio di problemi quasi-statici, [11,46]. In un secondo momento, lo studio si è rivolto a problemi inversi [44,9,10], che ci hanno permesso di ricavare dimensione, coefficiente di scattering e assorbimento, caratteristici di una nube interstellare, a partire dalla quantità di luce emessa dalla nube (far-field measures), [47].

Altri modelli di tipo cinetico riguardano l'evoluzione di una distribuzione di polveri soggette a coagulazione e/o a scambio di cariche. In accordo con i dati osservati [38], è stato elaborato un modello di una distribuzione di massa bimodale di grani di polvere piccoli e grandi, in cui le particelle piccole sono "spazzate via" progressivamente per coagulazione [8,23].

E' stato poi considerato un modello cinetico non-lineare di plasma polveroso [60], in cui elettroni e ioni coagulano con le polveri che, di conseguenza, si caricano per quantità discrete. Di tale modello è stata condotta un'analisi matematica nell'ipotesi di concentrazione dei parametri, grazie alla quale il problema si riconduce a una successione di infinite EDO [22].

2.2 Metodi cinetici per l'analisi asintotica in modelli di biomatematica

La maggior quantità di specie pescate in Europa è costituita da sogliole, o in generale dai cosiddetti "pesci piatti". Tuttavia, la mortalità in questo tipo di pesci durante lo stadio larva è elevatissima; per difendersi dai predatori e dalle maree, questi pesci effettuano una migrazione quotidiana verso la superficie e verso il fondo del mare. Molte ricerche sono state effettuate sia in laboratorio che direttamente sul "campo" e molti modelli sono stati proposti per tale dinamica [2,3].

Il nostro primo obiettivo è stato quello di studiare l'equazione di evoluzione del sistema [61] per una popolazione strutturata per età immaginando di suddividere la superficie del mare in N distinte fasce spaziali, caratterizzate da differenti coefficienti di mortalità e fertilità. Tramite la teoria dei semigrupp [7], abbiamo poi studiato il cosiddetto "modello aggregato" [20]. In particolare, abbiamo dimostrato che il comportamento della soluzione del sistema segue una crescita asincrona esponenziale [59]. Tuttavia, nel sistema sono presenti due processi che evolvono secondo due scale di tempi diversi: la scala veloce caratterizzata dal processo di migrazione e la scala lenta, rappresentata dal processo demografico. Questo ci ha indotto a studiare il problema esatto con metodi alle perturbazioni singolari. In particolare abbiamo usato un metodo classico della teoria cinetica, la procedura di Chapman-Enskog [53]. L'approccio basato su tale metodo è stato già usato in ambito biomatematico [33], e fornisce un'analisi rigorosa che porta ad approssimare la soluzione con l'accuratezza voluta e con una stima precisa dell'errore [30].

Testo inglese

1. Mathematical and numerical models of semiconductor devices

1.1 Nonlinear Wigner equation

It is well known that there is a complete equivalence between the two formulations of statistical quantum mechanics in terms of Wigner functions and in terms of density matrices, respectively [45,52,14].

However, the Wigner formulation ("quantum-kinetic") has the advantage of having a very close analogy with classical kinetic theory, which allows to formulate quantum versions of classical kinetic models such as inflow boundary conditions [31], BGK collisional operators [31],[4], mean-field equations [39] and Fokker-Planck like equations [6]. Moreover, it is possible to write a hierarchy of moment equations from which quantum-hydrodynamic equations can be deduced [34,35].

Some researchers of our group have been interested in nonlinear models of this kind. In particular, the well-posedness (in L^2) of the following systems has been studied: the Wigner-Poisson system on a bounded, unidimensional spatial domain with inflow conditions [49], the Wigner-Poisson system on a bounded domain in the 3D space [50] and the Wigner-Poisson-Fokker-Planck system on the whole 3D space.

1.2 Multi-band transport in semiconductors

It is well known that the spectrum of the Hamiltonian of a quantum particle moving in a periodic potential is a continuous spectrum which can be decomposed into intervals called "energy bands". In the presence of external potentials, the projections of the wave function on the energy eigenspaces (Floquet subspaces) are coupled by the Schrödinger equation, which makes it possible for interband transitions to occur.

In the standard semiconductor devices, like the Resonant Tunneling Diode, the single-band approximation, meaning that most of the current is carried by the charged particles of a single band [51,62,21], is usually satisfactory. Together with the single-band approximation, the parabolic-band approximation is also usually made, which is satisfactory as long as the carriers populate the region near the minimum of the band. This approximation is no longer valid when the architecture of the device is such that other

bands are available to the carriers, as it happens in the Resonant Interband Tunneling, [58]. For these devices, it is necessary to use more sophisticated models, in which the charge carriers can be found in a superposition of quantum states belonging to different bands. These are, for example, the models of Kane [43] and of Kohn [48], which are well known in the physics literature but still lacking a quantum-kinetic or quantum-hydrodynamic analysis.

Our research group has already studied the well-posedness of the multi-band kinetic models based on the projections of the Wigner function on the Floquet subspaces [25,26], on the Kane Hamiltonian [19] and on the Wannier-Slater envelope functions [13].

Several mathematical properties of these models have been studied [16], and a first step has been made towards the construction of multi-band hydrodynamical models with the derivation of a hierarchy of moment equations for the Kane Hamiltonian [15,1].

1.3 Hydrodynamic models for quantum systems

Hydrodynamic models have always played an important role in the modelling of semiconductors, both because of their simple numerical implementation and because of their using macroscopic variables [51]. Recently, a number of quantum hydrodynamical models, capable of simulating efficiently the new generation devices, have been introduced. In particular, the most recent devices need a full quantum mechanical treatment, because quantum effects play a vital role in their functioning. Our research group has used, in the past, the two-band Kane model [41,42], which, starting from the Schrödinger equation and adopting the kP approximation [62] for the Hamiltonian, yields a system of two Schrödinger-like coupled equations for the envelope functions of electrons and holes [21] di elettroni e lacune. The Kane model has also been formulated in terms of Wigner functions [19], as a system of four integro-differential equations of kinetic type.

Hydrodynamic modelling is widely discussed in the recent literature, with as rigorous approach which derives the hydrodynamic equations from the Wigner-Boltzmann equations by the moment method and with Chapman-Enskog type expansions [34,36,12]. This formulation is interesting because it deals with macroscopic physical quantities and, above all, it allows a smoothening of the band potential energy, which usually has sharp discontinuities. The quantum terms appear in the equations in the form of perturbations, which made the analysis in the semiclassical limit easy and the numerical approach simple and in agreement with experimental data [37].

The quantum hydrodynamical equations, initially studied by Madelung in the 20's, are much studied at present in the part of the mathematical-physics community which deals with quantum transport [40].

1.4 Numerical methods for the simulation of quantum devices

The multi-band non-parabolic model developed by our group [25,26,16,27,28] has already been subject of numerical investigations by means of the Splitting-Scheme algorithm [24] and references cited therein. This algorithm was introduced for the numerical solution of hyperbolic differential equations and consists of a numerical integration along the phase-space characteristics. A version of this algorithm makes use of the Fourier-transformed phase space (with respect to the momentum variable); in this version, the method can be generalized to pseudo-differential equations, such as the Wigner equation.

The Splitting-Scheme is a much more effective algorithm than the traditional, finite-differences based, methods employed so far [51,32,31], both in terms computing time and of memory requirements. By means of the Splitting-Scheme algorithm, some of the equations of our models for non-parabolic band profiles, under the single-band approximation, have been solved and some elementary intervalley transitions have been investigated [24,29]. The numerical solution of the multi-band equations is still under study.

2. Kinetic models with applications to interstellar physics and to biomathematics.

2.1 Kinetic models with applications to interstellar physics

The interstellar matter is composed by gases (mainly hydrogen), more complex molecules and "dusts" [54], concentrated in big clouds of dimensions of the order of tens of light years and densities from about 10^3 to 10^6 particles per cm^3 . Many aspects concerning the physics of interstellar clouds lead to mathematical models of kinetic type, like in the classic radiative transport [56]. In astrophysics field, there are many results related to models of kinetic type, concerning the presence of denser parts, called "clumps", or in the case related to the phenomenon of coagulation among dust grains inside the cloud [23].

In this topic, our research has been initially devoted to the evaluation of the density of the photons present in the considered cloud, in presence of one or more sources inside. Then, it has been studied the study of quasi-static problems, [11,46].

In a second time, our study had been devoted to inverse problems [44,9,10], to obtain dimension, scattering and absorption cross-sections, typical of an interstellar cloud, from the knowledge of the quantity of light emitted from the cloud itself (far field measures) [47].

Other kinetic models that have been developed and studied concern the evolution of a distribution of dust grains undergoing coagulation phenomena and/or charge exchange. In particular, according to observational data [38], we have developed a model for a bimodal mass distribution of dust grains ("small" and "large" particles) in which small particles are "swept out" by coagulation with large ones [8]. The obtained results yield a reasonable (and in accordance with the observational evidence) extinction of small particles extinction time [23].

Moreover, a non-linear kinetic model for a "dusty plasma" has been considered [60], in which electrons and ions undergo coagulation with dust grains. We have performed a well-posedness and asymptotic behaviour analysis of such model in the assumption of "parameter concentration", which allows to recast the problem into a system of infinitely many ODE's [22].

2.2 Kinetic methods for the asymptotic analysis in biomathematics models

The largest quantity of caught species is given by sole, or more in general by the so-called flatfish. Mortality for this kind of fish during the larval stage is very high and in order to defend themselves from the predators and to avoid tides, this type of fish makes a daily migration, towards the surface, and towards the seabed. Several researches have been done in laboratory as well as in "field" and many mathematical models have been proposed for such dynamics [2,3].

Our first aim was to study the system evolution equation [61] for an age-structured population, imaging to divide the sea depth into N spatial patches, characterized by different mortality and fertility rates. By means of the semigroup theory [7], we studied the so-called aggregated model [20], an approximation to the exact model, proving that the solution behaviour follows an asynchronous exponential growth [59].

However, in the system, there are two processes, which evolve at different time scales: the fast time scale, characterised by the migration process and the slow time scale represented by the demographic process. This led us to study the exact problem with singular perturbation methods. In particular, we considered a classic method of the kinetic theory, the Chapman-Enskog procedure, in the modified version, introduced in [53]. The approach based on such method has just been used in biomathematics topic [33] and provide a rigorous analysis which allows to approximate the solution with the needed accuracy and with a sharp error estimate [30].

2.4.a Riferimenti bibliografici

1. G.Ali, G.Frosali, *On the zero-temperature quantum hydrodynamic model for the two band Kane system*, preprint, 2004
2. O.Arino, C.Koutsikopoulos, A.Ramzi, *Element of a model of the evolution of the density of a sole population*, *Journ.Biol.Systems*, Vol. 4, 445, 1996
3. O.Arino, E.Sánchez, R. Bravo De La Parra, *A model of an age-structured population in a multipatch environment*, *Math.Comput. Modelling*, 27, 137-150, 1998
4. A.Arnold, *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, *Commun. Partial Differ. Equations* 21, 473-506, 1996
5. A.Arnold, E.Dhamo, C.Mancini, *On the three-dimensional Wigner-Poisson-Fokker-Planck problem*, Preprint 2004
6. A. Arnold, J.L.Lopez, P.A.Markowich, J.Soler, *An Analysis of Quantum Fokker-Planck Models: a Wigner Function Approach*, 2003 (to appear in *Rev. Mat. Iberoam.*)
7. Belleni Morante, *Applied semigroups and evolution equations*, Clarendon Press, Oxford, 1979
8. A.Belleni-Morante, L.Barletti, C.Cecchi-Pestellini, S. Aiello, *A Boltzmann-like model for interstellar dust coagulation*, *Confer. Sem. Mat. Univ. Bari* n.278, 2000
9. A.Belleni Morante, F.Mugelli, *An inverse problem in photon transport theory: identification of the boundary surface of an interstellar cloud - Conf. Sem. Mat. Univ. Bari* n.282, 2002
10. A.Belleni-Morante, F.Mugelli, *Identification of the boundary surface of an interstellar cloud from a measurement of the photon far-field*. *Math. Methods. Appl. Sci.* (to appear)
11. A.Belleni Morante, S.Totaro, *Photon transport in a time dependent region: a quasi-static approximation*, *Confer. Sem. Mat. Univ. Bari* n.276, 1999
12. N.Ben Abdallah, *On a multidimensional Schroedinger-Poisson scattering model for semiconductors*, *J.Math.Phys.* 41, 4241-4261, 1999
13. L.Barletti, *Wigner envelope functions for electron transport in semiconductor devices*, *Transport Theory Stat. Phys.* 32(3/4), 253-277, 2003
14. L.Barletti, *A mathematical introduction to the Wigner formulation of quantum mechanics*, *Boll. Unione Mat. Ital. B* 6-B(8), 693-716, 2003
15. L.Barletti, *Quantum moment equations for a two-band k.p Hamiltonian*, *Boll. Unione Matem. Ital. Sez B* (to appear)
16. L.Barletti, L.Demeio, *Wigner-function approach to multiband transport in semiconductor devices*, *Proc. VI Congresso SIMAI*, 2002
17. S.Biondini, G.Borgioli, G.Frosali, *Quantum hydrodynamic equations arising from the Wigner-Kane model*, 18th *Int. Conf. Transport Theory*, 2003
18. S.Biondini, G.Frosali, F.Mugelli, *Quantum hydrodynamic equations for a two band Wigner-Kane model*, *Proceedings WASCOM2003 World Scientific, Singapore*, 2004 pp.78-84
19. G.Borgioli, G.Frosali, P.F.Zweifel, *Wigner Approach to the Two-Band Kane Model for a Tunneling Diode*. *Transport Theory Stat. Phys.* 32(3-4), 347-366, 2003.
20. R.Bravo delaParra, P.Auger, E.Sánchez, *Aggregation methods in time discrete models*, *J. Biological Systems*, 3, 603-612, 1995
21. M.G.Burt, *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructure*, *J.Phys: Condens.Matter* 4, 6651-6690, 1992
22. G.Busoni, L.Barletti, *A kinetic model of a dusty plasma with discrete charges*, *Transport Theory Stat. Phys.* 32(2), 133-155, 2003
23. C.Cecchi Pestellini, L.Barletti, et al., *A kinetic model for dust coagulation*, *J. Quant. Spettrosc. Radiat. Transfer*, 70(1), 1-9, 2001.
24. L.Demeio, *Splitting-scheme Solution of the Collisionless Wigner Equation with Non-Parabolic Band Profile*, *J.Comput.Electronics*, 2, 319-322, 2003
25. L.Demeio, L.Barletti, P.Bordone, C.Jacoboni, *Wigner function for multiband transport in semiconductors*, *Transport Theory Stat. Physics*, 32(3-4), 307-325, 2003
26. L.Demeio, L.Barletti, A.Bertoni, P.Bordone, C.Jacoboni, *Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors*, *Physica B*, 314, 104-107, 2002
27. L.Demeio, P.Bordone and C.Jacoboni, *Numerical and analytical applications of multiband transport in semiconductors*, *Proc. XXIII Symposium R.G.D*, 2002, pp.92-98, *AIP Conf. Proceedings* v.663, New York, 2003
28. L.Demeio, P.Bordone and C.Jacoboni, *Multi-band, non-parabolic Wigner-function approach to electron transport in semiconductors*, *Internal Report 3/2003* (submitted to the *J.Stat.Phys.*)
29. L.Demeio, P.Bordone and C.Jacoboni, *Numerical simulation of an intervalley transition by the Wigner-function approach*, *Semiconductor Sci.Tech.*, 19, 1-3, 2004
30. S.Donati, M.Lisi, S.Totaro, *A mathematical model for a sole larval population with two time scales*, *Proceedings WASCOM 2003 World Scientific*, (to appear).
31. W.Frensley, *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, *Rev. Modern Phys.* 62(3), 745-791, 1990
32. W.Frensley, *Wigner-Function Model of a Resonant-Tunneling Semiconductor Device*, *Phys.Rev.B*, 36(3), 1570-1580, 1987
33. G.Frosali, S.Totaro, *A scaled nonlinear mathematical model for interaction of algae with light: existence and uniqueness results*, *Trans.Theory Stat.Phys.*, 26, 27-48, 1997.
34. C.Gardner, *The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, *SIAM J.Appl.Math.* 54(2), 409-427, 1994
35. I.Gasser, P.Markowich, A.Unterreiter, *Quantum hydrodynamics*, in *Modeling of Collisions*, Gauthier-Villars, Paris, 1997
36. C.Gardner, C.Ringhofer, *The Chapman-Enskog expansion and the quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, *VLSI Design* 10, 415-435, 2000
37. C.Gardner, C.Ringhofer, *Numerical simulation of the smooth quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, *Comp.Methods in Applied Mechanics and Engineering* 181, 393-401, 2000
38. S.S.Hong, G.M.Greenberg, *A unified model of interstellar grains: a connection between alignment efficiency, grain model size, and cosmic abundance*, *Astronomy & Astrophysics* 88, 194-202, 1980
39. R.Illner, *Existence, uniqueness and asymptotic behavior of Wigner-Poisson and Vlasov-Poisson systems: a survey*, *Transport Theory Stat. Phys.* 26(1/2), 195-207, 1997
40. A.Jungel, *Quasi-hydrodynamic Semiconductor Equations*, Birkhauser, Basel, 2001
41. E.C.Kane, *Energy Band Structure in p-Type Germanium and Silicon*, *J. Phys. Chem. Solids*, 1, 82-89, 1956
42. E.C.Kane, *Zener Tunneling in Semiconductors*, *J.Phys.Chem.Solids*, 12, 181-188, 1959

43. E.O.Kane, *The k.p method*, in *Physics of III-V Compounds, Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, New York, 1966
44. E.W.Larsen, *Solution of the three dimensional inverse transport problem*, *Transp. Theory Sta. Phys.*, 17, 147-167, 1988
45. P.L.Lions, T.Paul, *Sur les mesures de Wigner*, *Rev. Matematica Iberoamericana* 9(3), 553-618, 1993
46. M.Lisi, S.Totaro, *Quasi-static approximations of photon transport in an interstellar cloud*, *Proceedings WASCOM 2001 World Scientific*, 271-276, 2002
47. M.Lisi, S.Totaro, *Inverse problems related to photon transport in an interstellar cloud*, *Transp.Theory Stat.Phys.*, 32(3&4), 341-359, 2003
48. J.M.Luttinger, W.Kohn, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*. *Phys. Rev.* 97, 869-882, 1955
49. C.Manzini, L.Barletti, *An analysis of the Wigner-Poisson system with inflow boundary conditions*, *Nonlinear Analysis, Theory, Meth. Appl.* 2004 (to appear)
50. C.Manzini, *The three dimensional Wigner-Poisson problem with inflow boundary conditions*, *Quaderni SNS, Pisa, 2003 (submitted to J.Math.Anal.Appl.)*
51. P.Markowich, C.Ringhofer, C.Schmeiser, *Semiconductor equations*, Springer Verlag, Wien, 1990
52. P.Markowich, *On the equivalence of the Schroedinger and the quantum Liouville equations*, *Math. Meth. Appl. Sci.* 11, 459-469, 1989
53. J.Mika, J.Banasiak, *Singularly perturbed evolution equations with applications to kinetic theory*, World Scientific, Singapore, 1995.
54. D.E.Osterbrock, *Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei*, University Science Book, U.S.A., 1989.
55. B.Perthame, *Time decay, propagation of low moments and dispersive effects for kinetic equations*, *Comm. Part. Diff. Equat.* 21, 659-686, 1996
56. G.C.Pomraning, *The equation of radiation hydrodynamics*, Pergamon Press, Oxford, 1973.
57. S.Stringari, *Bose-Einstein condensation*, Clarendon Press, Oxford, 2003.
58. M.Sweeney, J.Xu, *Resonant Interband Tunnel Diodes*, *Appl.Phys.Lett.* 54, 546-548, 1989
59. H.R.Thieme, *Balanced exponential growth for perturbed operator semigroups*, *Advances in Mathematical Sciences and Applications* 10, 775-819, 2000
60. V.Tsytoich, U.De Angelis, *Kinetic theory of dusty plasmas*, *Physics of Plasmas* 6, 1093-1106, 1999, and 7, 554-563, 2000
61. G.F.Webb, *Theory of nonlinear age-dependent population dynamics*, Marcell Dekker, New York, 1985
62. T.Wenckebach, *Essentials of Semiconductor Physics*, Wiley, New York, 1999

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

Testo italiano

1. Modelli matematici e numerici di dispositivi a semiconduttore.

1.1 Equazione di Wigner non lineare.

In questa parte del programma si vogliono continuare ed estendere le ricerche sui modelli non-lineari quanto-cinetici basati sulla funzione di Wigner. In particolare si vuole studiare la buona posizione dei problemi di Wigner-Poisson e di Wigner-Poisson-Fokker-Planck posti su un dominio limitato tridimensionale con condizioni di tipo inflow, essendo evidente l'importanza che tali condizioni al contorno rivestono nel contesto della simulazione dei dispositivi elettronici. Si profila la possibilità di estendere a tali modelli tutta una serie di risultati già noti nel caso classico [55] mediante un'opportuna riscrittura [5] dell'operatore pseudo-differenziale che compare nell'equazione di Wigner [45],[52],[14]. Tuttavia tale estensione non è affatto banale, principalmente a causa della mancanza di non-negatività della funzione di Wigner.

In quest'ambito si inserisce anche il progetto di indagare la possibilità di usare la formulazione Wigneriana per studiare un'equazione di Schroedinger non-lineare, nota come equazione di Gross-Pitaevskii, di grande importanza per le sue connessioni con i condensati di Bose-Einstein [57].

In particolare studieremo per tale equazione alcuni problemi di tipo cinetico, del tipo di quelli sopra citati per l'equazione di Wigner standard.

1.2 Trasporto multi-banda in semiconduttori

Gli aspetti che intendiamo maggiormente sviluppare nello studio dei modelli di trasporto multi-banda sono l'analisi asintotica, l'analisi dell'equilibrio termodinamico e la derivazione di equazioni quanto-idrodinamiche (per quest'ultimo aspetto si rimanda al successivo punto 3).

Per quanto riguarda l'analisi asintotica, considereremo l'equazione di Schrödinger relativa a un'Hamiltoniana con potenziale periodico dipendente da un parametro piccolo, proporzionale al passo reticolare, più un potenziale macroscopico regolare (limite di omogeneizzazione). Si confronterà, nel limite in cui il parametro che tende a zero, tale equazione con quella relativa ad un'Hamiltoniana di tipo k.p, a infinite bande e con quella relativa ad un'Hamiltoniana a una sola banda con massa efficace. Si prevede di fornire una dimostrazione rigorosa, con stime precise della velocità di convergenza, del fatto che, in tale limite, la soluzione dell'equazione con potenziale periodico converge rapidamente alla soluzione dell'equazione k.p e quest'ultima converge alla soluzione di massa efficace.

Per quanto riguarda l'analisi dell'equilibrio termodinamico, studieremo l'equazione di Bloch per le Hamiltoniane multi-banda sopra descritte. L'equazione di Bloch ha la forma di un'equazione di "evoluzione" (rispetto all'inverso della temperatura) per la funzione di Wigner (o per la matrice densità) di un sistema all'equilibrio termodinamico. Si prevede uno studio della regolarità della soluzione e del suo sviluppo asintotico semi-classico mediante la teoria dei semigruppiani analitici.

Recentemente si è inoltre cominciato a focalizzare l'attenzione su modelli basati sull'Hamiltoniana di Kohn [48]. Tali modelli sembrano dimostrare ottime proprietà matematiche, una certa "docilità" numerica e una aderenza fisica superiore agli altri.

Prevediamo di sviluppare lo studio di tali modelli in tutti i loro aspetti: analitici, fisici e numerici.

1.3 Modelli idrodinamici per sistemi quantistici.

Le equazioni QHD possono essere dedotte, oltre che in maniera euristica, in due modi. Il primo consiste nell'utilizzo di un "ansatz WKB" per la funzione d'onda, nel riconoscere quantità idrodinamiche legate alla densità e al gradiente della fase e nello scrivere le equazioni per tali quantità. Passando poi a considerare combinazioni convesse di stati si scrivono equazioni per un fluido con temperatura non nulla.

Il secondo metodo consiste invece nello scrivere le equazioni dei momenti per la funzione di Wigner. Risulta che i due metodi portano alle stesse equazioni.

La nostra linea di ricerca in questo settore è soprattutto indirizzata alla costruzione di modelli idrodinamici multi-banda per dispositivi [18],[17]. La nostra intenzione è quindi quella di scrivere e analizzare equazioni QHD per i modelli multi-banda descritti sopra.

Inoltre cercheremo di individuare opportuni scalings che possano portare a equazioni "quantum drift-diffusion" a due bande. Relativamente alle equazioni di tipo Schrödinger da cui partire, si ha in programma di utilizzare i modelli di Kane [43] e di Kohn [48], ben noti nella letteratura fisica ma ancora poco studiati dal punto di vista quanto-cinetico e quanto-idrodinamico. Ci occuperemo inoltre del problema di chiudere le equazioni dei momenti con metodi basati sul principio di minima entropia quantistica. Sono previsti inoltre studi di tipo numerico per valutare la bontà dei modelli.

1.4 Metodi numerici per la simulazione di dispositivi

In questa parte del programma di ricerca, si vogliono continuare ed estendere le applicazioni numeriche del modello di trasporto multibanda non-parabolico sviluppato dal nostro gruppo in [25],[26],[16],[27],[28]. Più in dettaglio, i punti che intendiamo affrontare nell'immediato futuro sono:

- 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 [27],[28]. Intendiamo iniziare questo punto con la costruzione e l'utilizzo delle autofunzioni e degli autovalori (bande di energia) del potenziale unidimensionale di Kronig-Penney, che fornisce espressioni analitiche per le funzioni di Bloch.

- La soluzione numerica dell'equazione di evoluzione per la funzione di Wigner con il metodo dello "Splitting Scheme" in presenza di barriere di potenziale. Lo Splitting Scheme, nella sua versione nello spazio di Fourier, è difficilmente applicabile ai casi in cui sono presenti discontinuità nel potenziale, a causa degli errori di aliasing introdotti dalle trasformate di Fourier che ne sono parte integrante; per affrontare il problema, pensiamo di incorporare nell' algoritmo dei filtri delle alte frequenze e/o di utilizzare sviluppi della funzione di Wigner in funzioni base opportune (come, ad esempio, i polinomi di Hermite). Si affronterà dapprima l'equazione di Wigner in presenza di una singola banda parabolica.

- 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 [29]. Sono di particolare interesse le applicazioni a quei sistemi costituiti da GaAs, il cui profilo di banda presenta minimi satelliti oltre al minimo centrale.

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 e metodi cinetici con applicazioni alla fisica del mezzo interstellare e alla biomatematrica

2.1 Modelli cinetici con applicazioni alla fisica del mezzo interstellare.

In questo settore, le possibili applicazioni ancora da sviluppare sono molteplici. In particolare, grande interesse sembra rivolto allo studio di problemi inversi, principalmente per potere ricavare caratteristiche che riguardano le sorgenti di fotoni (per esempio, stelle) presenti all'interno di una nebulosa. In effetti, in natura, si ha che le sorgenti presenti all'interno di una nube possono essere diversamente distribuite: in maniera uniforme, puntuale, oppure in maniera stocastica.

Il nostro obiettivo di ricerca è dunque quello di poter modellizzare correttamente il maggior numero di situazioni possibili al fine di poter ricavare, tramite lo studio di problemi inversi, la sorgente, potendone definire intensità e collocazione. La difficoltà in questo tipo di problemi è proprio la rigorosa rappresentazione matematica della realtà fisica.

Nel caso più semplice si pensa di poter partire da una sorgente rappresentabile come una funzione continua dello spazio. Il caso diventa molto più complicato se si considera una sorgente puntuale, a causa della difficoltà della trattazione degli strumenti matematici in gioco (funzionale delta di Dirac), che non permettono più di andare a lavorare in spazi di Banach, ma di dover considerare spazi localmente convessi ed insieme di distribuzioni.

Lo scopo successivo è quello di studiare il caso ancora più generale in cui la sorgente è di tipo stocastico. Questo problema richiede l'utilizzo di mezzi propri del calcolo delle probabilità.

Nell'ambito dei modelli di coagulazione bimodali si prevede di migliorare il modello già esistente, [8], [23], considerando una descrizione più accurata dei fenomeni che includa l'interazione tra particelle grandi nonché il moto di quest'ultime (considerate immobili in [8], [23]). Il problema diventa così completamente non-lineare (mentre nel caso già esaminato ci si poteva ricondurre a un problema lineare).

Nell'ambito dei modelli di plasmii polverosi si tenterà di rimuovere l'ipotesi di concentrazione dei parametri, presente in [22]. Questo conduce allo studio un sistema non-lineare di infinite EDP, che prevediamo di affrontare con tecniche di teoria dei semigrupp.

2.2 Metodi cinetici per l'analisi asintotica in modelli di biomatematrica

Le applicazioni dei metodi cinetici in questo settore possono essere ancora numerose. L'obiettivo che ci prefiggiamo di affrontare è quello di poter rendere lo studio asintotico, effettuato con il metodo di Chapman-Enskog, uniforme su tutti i possibili intervalli di tempo e di età. In effetti, per poter avere uno studio completo del comportamento asintotico, dobbiamo andare a considerare le correzioni dovute a quelli che si chiamano initial layer, boundary layer e corner layer, che permettono di ricavare le corrette condizioni iniziali e condizioni al contorno che la soluzione approssimata deve soddisfare.

La giustificazione fisica della presenza di questi "layers" è dovuta essenzialmente al fatto che la popolazione dei nuovi nati va inevitabilmente ad influenzare il comportamento dell'intera popolazione, il cui movimento migratorio nelle N "fasce" spaziali, in cui abbiamo immaginata suddivisa la profondità del mare, tende a dovere essere nuovamente reso omogeneo. Il gap spaziale da dover studiare e correggere sarà proprio uguale al boundary layer e naturalmente il tempo necessario per poter colmare questo gap sarà proprio l'initial layer.

Un altro problema da considerare è chiedersi se il modello aggregato, spesso trovato in letteratura e già da noi analizzato, riesca ad approssimare correttamente l'intero sistema. Ci domandiamo, infatti, come l'eterogeneità dovuta ai differenti tassi di natalità e mortalità presenti nelle diverse fasce spaziali, possa influenzare l'intera aggregazione delle variabili in gioco.

Un passo importante sarà proprio verificare come il modello approssimato, studiato con il metodo alle perturbazioni singolari, si avvicini al modello aggregato.

Testo inglese**1. Mathematical and numerical models of semiconductor devices.****1.1 Nonlinear Wigner equation.**

In this part of the program we intend to continue and extend the research on non-linear quantum-kinetic models based on Wigner functions. In particular, our aim is to study the well-posedness of Wigner-Poisson and Wigner-Poisson-Fokker-Planck systems on a bounded 3D domain with inflow boundary conditions, this being important for the simulation of electronic devices.

It seems also that several results already known in the classical case [55] may be extended to these quantum mechanical models, by a suitable re-arrangement of the pseudo-differential operator [5] appearing in the Wigner equation [45],[52],[14]. However, these extensions are not trivial at all, mainly because of lack of non-negativity typical of Wigner functions.

In this part of the research programme we also intend to study the Wigner version of a non-linear Schroedinger equation, known as Gross-Pitaevskii equation, of considerable importance in view of its connection with Bose-Einstein condensates [57]. In particular, we shall investigate some kinetic-like problems for this equation, such as those mentioned above with reference to the standard Wigner equation.

1.2 Multi-band transport in semiconductors

The problems that we mostly intend to investigate in the topic of multi-band transport are asymptotic analysis, the analysis of thermodynamical equilibrium and the derivation of the quantum hydrodynamic equations (see point 3).

About asymptotic analysis, we shall consider the Schrödinger equation with a Hamiltonian with a periodic potential depending upon a small parameter, proportional to the lattice constant, and a macroscopic regular potential (homogenization limit). In the limit of the small parameter going to zero, we shall compare this equation with the equation that results from the k,p Hamiltonian with infinitely many energy bands and with the equation that results from the single-band, effective-mass approximation.

We intend to prove rigorously, with precise estimates of the rate of convergence, that in this limit the solution of the equation with periodic potential converges rapidly to the solution of the k,p equation and this last one, in turn, converges to the effective-mass solution.

About the analysis of the thermodynamical equilibrium, we shall study the Bloch equation for the multi-band Hamiltonians described above. The Bloch equation has the form of an "evolution" equation (with respect to the inverse temperature) for the Wigner function (or for the density matrix) of a system at thermodynamical equilibrium. We plan to carry out the study of the regularity of the solution and of its semiclassical asymptotic expansion by using the theory of analytical semigroups.

Recently, we have started focussing our attention on the models based on the Kohn Hamiltonian [48]. These models seem to show very good mathematical properties, they seem easy to implement numerically and are better suited than other models for the physical interpretation of their results. We intend to study the analytical, physical and numerical aspects of these models.

1.3 Hydrodynamic models for quantum systems.

The hydrodynamic equations can be derived, besides by a possible heuristic approach, mainly by two other ways. The first approach uses a WKB-like ansatz for the wave function, by identifying hydrodynamic quantities related to the density and to the gradient of the phase and then writing the equations for these quantities. Then, by considering convex combinations of states, one can write zero-temperature fluid equations. The second approach makes use of the moment equations for the Wigner function. The two approaches lead to the same equations.

Our research in this field is mainly devoted to the formulation of multi-band hydrodynamic models for semiconductor devices [18],[17]. Our plan is then to write and analyze the quantum hydrodynamic equations for the multi-band models described above. Moreover, we shall attempt at identifying suitable scalings that can lead to two-band quantum drift-diffusion equations.

We plan to start from the Schroedinger-like equations of the Kane [43] and of the Kohn [48] models, which are well-known in the physics literature but are still poorly studied in their quantum-kinetic and quantum-hydrodynamic aspects.

We shall also investigate the problem of closing the moment equations with methods based on the quantum minimal entropy principle. Numerical examples, aimed at demonstrating the validity of the models, will also be produced.

1.4 Numerical methods for the simulation of quantum devices.

In this part of the research programme we intend to continue and extend the numerical applications of the multi-band non-parabolic transport model developed by our group in [25],[26],[16],[27],[28]. In particular, the issues that we want to address in the near future are:

- The calculation (maybe only within a controlled approximation) of the Floquet projections of the Wigner function, for which the knowledge of the integrals of the products of the Wigner function with the (rapidly oscillatory) Bloch functions is needed, even for a one-dimensional system; this would allow the simulation of interband transitions for spatially inhomogeneous systems. Some partial result, limited to spatially homogeneous carrier populations, has already appeared in [27],[28]. We intend to start this point by constructing and using the eigenvalues and eigenfunctions of Kronig-Penney potential, which gives analytical expressions for the Bloch functions.

- The numerical solution of the Wigner equation by means of the Splitting-Scheme algorithm in the presence of potential barriers. The Splitting Scheme, in his Fourier-transformed version, is very hard to be used in those cases in which there are discontinuities in the potential, due to the aliasing errors introduced by the Fourier transforms; as a possible approach to this problem, we plan to include high-frequency filters in the algorithm, or to use expansions of the Wigner function in suitable basis functions (e.g. Hermite polynomials). The case of the Wigner equation in presence of a single parabolic well will be studied first.

- We intend to continue the study of intervalley transitions, started in [29], and due to the collisions of the carriers with the optical phonons; of particular interest are the GaAs systems, whose band profile exhibits satellite valleys, besides the central minimum. The finalization of these points will allow performing accurate simulations of a large class of semiconductor devices by the Wigner-function approach.

2. Kinetic models with applications to interstellar physics and to biomathematics.**2.1 Kinetic models with applications to interstellar physics.**

In this topic, there are many possible applications to be studied. In particular, much interest is devoted to the study of inverse problems, mainly to obtain features concerning photon sources (e.g. stars), which are inside a cloud. In fact, the sources inside a

cloud can be distributed in more different way: uniformly, punctually or stochastically.

The aim of our research is to be able to make a correct model for each one of the possible situations, in order to obtain, by means of the theory of semigroups, the intensity of the source and its location. In this kind of problem, the difficulty consists in giving a rigorous mathematical representation of the physical reality.

As a first step, we consider the source as a continuous function of the space variable. The problem becomes more complicated when we consider a source concentrated in a fixed point, because its mathematical representation (delta function) cannot be studied in classical Banach spaces, but in locally convex spaces, which are more difficult to deal with. The next step is to study the problem in a more general context, when the source is of stochastic type. This requires techniques of probability theory.

As far as the bimodal coagulation model is concerned, we intend to enhance the existing model, [8],[23], with the inclusion of self-interactions and motion of large particles (which were considered at rest in [8],[23]). In this way the problem becomes fully non-linear (while, in the already studied case, it was possible to recast the non-linear problem into a linear one).

As far as the "dusty plasma" model is concerned, we shall attempt to drop the assumption of parameter concentration, that was present in [22]. This leads to study a non-linear system of infinitely many PDE's that we intend to treat by means of semigroup theory techniques.

2.2 Kinetic methods for the asymptotic analysis in biomathematics models

There are further applications of kinetic methods to biomathematics problems. The aim of our research is to make the asymptotic study, we did by means of the Chapman-Enskog procedure, uniform in each possible time and age interval. In fact, in order to make a complete study of the asymptotic behaviour, we have to consider the so-called initial layer, boundary layer and corner layer corrections. These corrections allow to obtain the exact initial and boundary conditions the approximate solution has to satisfy.

The physical justification of these "layers" is mainly given by the presence of the new-borns, which affects the behaviour of the whole population, whose migration process among the N spatial patches has to be made homogeneous again. The spatial gap to be studied and corrected will be exactly the boundary layer and the time necessary to fill this gap will be the initial layer.

Another problem to be developed is to prove whether the aggregated model (known in literature and object of our previous analysis) can well approximate the whole model. In fact, we wonder if the heterogeneity due to the different natality and mortality rates, in each one of the patches, can affect the whole aggregation procedure.

An important step will be to understand in which way the approximated model, studied by means of singular perturbation methods, approaches the aggregated model.

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
Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca		4	43	29	72
Personale universitario di altre Università		2	21	16	37
Titolari di assegni di ricerca		1	9	2	11
Titolari di borse	Dottorato	3	28	25	53
	Post-dottorato	1	5	5	10

	<i>Scuola di Specializzazione</i>	0			
Personale a contratto	<i>Assegnisti</i>	1	6	6	12
	<i>Borsisti</i>	0			
	<i>Dottorandi</i>	0			
	<i>Altre tipologie</i>	0			
Personale extrauniversitario		1	10	9	19
TOTALE		13	122	92	214

3.1 Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca

Testo italiano

Voce di spesa	Spesa in Euro	Descrizione
Materiale inventariabile	5.800	Libri, hardware e software
Grandi Attrezzature		
Materiale di consumo e funzionamento	2.000	Quota spese Dipartimento, carta cancelleria, cartucce, ecc.
Spese per calcolo ed elaborazione dati		
Personale a contratto	21.600	Contributo per assegno di ricerca
Servizi esterni		
Missioni	15.000	Missioni dei collaboratori, compreso i contatti con i collaboratori stranieri
Pubblicazioni		
Partecipazione / Organizzazione convegni	2.000	Quote di iscrizione, organizzazione di convegni.
Altro	5.000	Collaboratori stranieri, seminari esterni, assegno di ricerca, ecc.
TOTALE	51.400	

Testo inglese

Voce di spesa	Spesa in Euro	Descrizione
Materiale inventariabile	5.800	Books, software and hardware
Grandi Attrezzature		
Materiale di consumo e funzionamento	2.000	Department reimbursement, paper, stationery, refils, etc.
Spese per calcolo ed elaborazione dati		
Personale a contratto	21.600	Contribution for person under contract
Servizi esterni		
Missioni	15.000	Business trip expences, inclusive contacts with foreign coworkers
Pubblicazioni		
Partecipazione / Organizzazione convegni	2.000	Participation fee, organization of meetings
Altro	5.000	Foreign collaborations, seminars, inclusive contacts with foreign coworkers, etc.
TOTALE	51.400	

3.2 Costo complessivo del Programma di Ricerca

Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca	51.400	
Fondi disponibili (RD)	8.500	Fondi disponibili da fondi di ricerca di Ateneo (Dipartimento di Matematica "U.Dini" e Dipartimento di Matematica Applicata "G.Sansone") e fondi di Dipartimento.
Fondi acquisibili (RA)	7.000	Quota garantita dall'Ateneo, pari al 45% della somma da certificare.
Cofinanziamento di altre amministrazioni		
Cofinanziamento richiesto al MIUR	35.900	

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

SI

Occorre precisare che la quota di cofinanziamento MIUR più la quota di cofinanziamento di altre amministrazioni cofinanziatrici del Programma di Ricerca non potrà superare il 70% per programmi Interuniversitari e il 50% per programmi Intrauniversitari del costo totale ammissibile del Programma stesso.

(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; legge del 31.12.96 n° 675 sulla "Tutela dei dati personali")

Firma _____

Data 17/03/2004 ore 17:37