

CURRICULUM DELL'ATTIVITÀ SCIENTIFICA E DIDATTICA

Informazioni di carattere generale

Nome: Massimo;

Cognome: Trovato;

Codice Fiscale: TRVMSM60T10C351S;

Nato a: Catania, il 10/12/1960;

Nazionalità: Italiana;

Residente in: via Muscatello n.4, 95125 Catania;

Telefono: 095432981, 3392517948;

Stato civile: coniugato;

Titoli conseguiti: Laurea in Fisica, Dottorato di Ricerca in Fisica;

Posizione attuale: Professore Straordinario nel settore scientifico disciplinare MAT-07 (Fisica Matematica), presso la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università di Catania;

Indirizzo ufficio: Dipartimento di Matematica e Informatica, Viale Andrea Doria, 6 – 95125 Catania, Italia. Tel. (+39) – 095 – 7383075, Fax (+39) – 095 – 330094;

E-mail: trovato@dmi.unict.it;

Web page: <http://www.dmi.unict.it/~trovato>.

1 Curriculum vitae ed attività scientifica

- 1) **Maturità scientifica** conseguita presso il liceo Scientifico di Catania Galileo Galilei.
- 2) **Laurea in Fisica conseguita** il 29 marzo 1993 presso l'Università di Catania, con la votazione di 110 su 110 e Lode.
- 3) **Vincitore del concorso relativo al "Premio di Laurea" per la migliore tesi svolta su argomenti di "Fisica, Ingegneria e Matematica" con applicazioni in microelettronica, istituito dalla SGS Thomson, presso l'Accademia Gioenia per l'anno 1993.**
Titolo della tesi: *Derivazione termodinamica di modelli idrodinamici per il trasporto di fluidi carichi* (relatore A. M. Anile).
- 4) **Vincitore del concorso per l'assegnazione di una borsa di studio annuale da parte del Consorzio per la Ricerca sulla Microelettronica nel Mezzogiorno "Co.Ri.M.Me" nel 1994.** Tale borsa é stata espletata dal 01/06/94 al 15/03/95. Tematica di ricerca : *Modelli Idrodinamici Estesi*.
- 5) **Vincitore del concorso nazionale, bandito dal CNR (n. 201.19.1) nel 1994 per l'assegnazione di 10 borse di studio, classificandosi al II posto nella graduatoria nazionale di merito con punti 29/30.** Tematica di ricerca: *Problemi di diffusione e Trasporto*. Coordinazione scientifica: Prof. A.M Anile.
- 6) **Vincitore sia del concorso di "Dottorato di ricerca in Fisica" nella sede universitaria di Palermo (classificandosi al II posto in graduatoria), che del concorso di "Dottorato di ricerca in Fisica" (X ciclo) nella sede universitaria di Catania nell'anno 1994, classificandosi al I posto in graduatoria con il punteggio di 119/120.** Essendo stato iscritto ed avendo regolarmente frequentato ha concluso il suddetto dottorato (Università di Catania) il 31/10/1997. **Ha sostenuto, con esito positivo, gli esami finali in data 09/05/1998 conseguendo il titolo di Dottorato presentando la dissertazione: "Applicazione della Termodinamica Estesa per la descrizione del trasporto dei portatori caldi nel silicio".** (Coordinatore Prof. F. Catara, Supervisore A. M. Anile).
- 7) **Nell'ambito del "Joint Study Agreement" No. 1012700 (stipulato con il Dipartimento di Matematica dell'Università di Catania) durante il periodo 11/04/97 - 17/06/97 ha svolto la propria attività di ricerca presso l'IBM Research Division, Thomas J. Watson Research Center (in Yorktown Heights, New York) lavorando nel gruppo "Exploratory Memory and Device Modeling" diretto dal Dr. Sandip**

Tiwari. Sotto la coordinazione il Dr. M. Fischetti è stato utilizzato il codice Monte Carlo *Damocles* per testare la validità di *Modelli Idrodinamici Estes* atti a descrivere il trasporto degli *hot-electrons* nei dispositivi sub-micrometrici, per studiare il *rumore*, le *fluttuazioni* e le *densità spettrali* degli *hot carriers* nei semiconduttori.

Su richiesta del Prof. A.M. Anile, lo *stage* ha avuto il supporto finanziario dal GNFM.

- 8) **Negli anni accademici 1997/98 e 1998/99 ha ricoperto il ruolo di docente a contratto presso la Facoltà di Ingegneria di Catania.**
- 9) **Vincitore del Concorso bandito il 19/11/98 (G.U. n. 93 del 27/11/98) dall'Università di Catania per un Assegno di Ricerca quadriennale, presso la Facoltà di Ingegneria nel settore scientifico disciplinare A03X (Fisica Matematica).** Tematica di ricerca: *Studio di modelli fisico matematici dei fenomeni dissipativi per fluidi complessi e plasm*i con particolare approfondimento al problema della determinazione di equazioni costitutive fuori dall'equilibrio termodinamico per plasm*i di stato solido (trasporto nei semiconduttori) e fluidi multifase.* L'incarico di Assegnista è stato espletato durante il periodo 2/11/99 - 31/08/00.
- 10) Vincitore del Concorso di Ricercatore in *Fisica Matematica* (A03X) nella sede Universitaria di Sassari presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. nell'anno 1999.
In base alla sentenza del TAR del 24/10/2001 (relativa al ricorso n.1227/2000) tutti gli atti del suddetto concorso sono stati annullati, per un *vizio di forma*. Il ruolo di **ricercatore presso l'Università di Sassari è stato quindi ricoperto dal sottoscritto a partire dal 8/06/2000 ai fini giuridici e dal 1/09/2000 ai fini economici fino al 29/03/2002.**
Durante gli Anni Accademici 2000/01 ed 2001/02 ha svolto i propri compiti didattici e scientifici presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN dell'Università di Sassari.
- 11) **Vincitore del Concorso indetto con il D.R. del 14/03/2002, dall'Università di Catania per un Assegno di Ricerca annuale, presso la Facoltà di Scienze MM. F.F. N.N. nel settore s.d. MAT/07 (Fisica Matematica).** Tematica di ricerca: *Modelli idrodinamici e problemi di stabilità in Termodinamica con applicazioni al trasporto nei semiconduttori.* L'incarico di Assegnista è stato espletato durante il periodo 1/07/2002 - 30/06/2003.
- 12) **Rinnovo del contratto per "conferimento di assegni per la collaborazione alla ricerca", stipulato in data 01 Luglio 2002, per un ulteriore anno dal 01/07/2003 al 30/06/2004.** L'assegno di ricerca è stato espletato dal 01/07/2003 al 01/01/2004.
- 13) **Vincitore del Concorso di Ricercatore in "Fisica Matematica" (Mat-07) nella sede**

Universitaria di Catania presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. nell'anno 2003.
Avendo preso servizio a partire dalla data 02/01/2004 **ha ricevuto la nomina di conferma nel 2007** presso codesta Università. Durante gli Anni Accademici 2003/04-2004/05-2005/06-2006/07-2007/08 ha svolto i propri compiti didattici e scientifici presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN dell'Università di Catania.

- 14) **Durante il periodo 21/05/2007 - 20/05/2008, ha proposto e coordinato un "progetto Giovani Ricercatori" finanziato dal Consiglio Scientifico del GNFM.**

Titolo del progetto: "Termodinamica Estesa: formulazione ed applicazione a modelli Classici e Quantistici".

Descrizione e collocazione del progetto:

- Formulazione quantistica della Termodinamica Estesa.
- Formulazione, nell'ambito della Termodinamica Estesa, di modelli idrodinamici per l'analisi di Piccolo Segnale nei materiali semiconduttori.
- Studio di problemi di conduzione di calore stazionario in Termodinamica Classica ed Estesa.

- 15) **Dal 19/06/2008 é stato nominato coordinatore di un nuovo "progetto Giovani Ricercatori", di durata annuale, finanziato dal Consiglio Scientifico del GNFM.**

Titolo del progetto: "Metodi analitici e numerici per lo studio di modelli classici e quantistici in Termodinamica Estesa e per l'analisi della stabilità in fluidodinamica."

Descrizione e collocazione del progetto:

- Formulazione classica e quantistica della Termodinamica Estesa: problema della chiusura ed analisi dei sistemi idrodinamici ottenuti.
- Analisi qualitativa e quantitativa, con metodi analitici e numerici, relativa a problemi di stabilità per: equazioni di reazione-diffusione; equazioni di Navier-Stokes-Fourier; Equazioni di bilancio in Termodinamica Estesa.

- 16) **Vincitore del Concorso di Professore di I fascia in "Fisica Matematica" (Mat-07) nella sede Universitaria di Catania presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. nell'anno 2010.**

- 17) **É stato referee per diverse riviste internazionali**, fra cui "Physica A", "Journal of Mathematical Analysis and Applications", "Proceedings of The Royal Society A" Recensionista dal 2009 per il "Mathematical Reviews" e dal 2010 per il "Zentralblatt MATH". É membro, dal 1997 ad oggi, del GNFM-INDAM.

- 18) Lingue conosciute: **Inglese**

1.1 Tematiche di ricerca

La sua attività di ricerca é stata svolta nell'ambito del settore MAT/07 *Fisica-Matematica* in relazione alle seguenti problematiche¹ :

- **Teoremi di rappresentazione per Funzioni Isotrope**
- **Termodinamica Estesa per fluidi carichi con applicazioni ai semiconduttori**
- **Problemi di stabilit  in Termodinamica Classica ed Estesa**
- **Termodinamica Estesa dei gas degeneri di Bose e Fermi**
- **Formulazione Quantistica della Termodinamica Estesa per la gas-dinamica**
- **Formulazione Quantistica della Termodinamica Estesa per la descrizione dei fenomeni di trasporto degli "hot carriers" nei semiconduttori**

In questi anni sono state sviluppate varie collaborazioni scientifiche con diversi centri di ricerca e sono stati pubblicati lavori con ricercatori dell'Universit  di Catania, di Lecce e di Bologna. In Particolare:

1) In collaborazione con:

- il *Dipartimento di Matematica di Catania* (Prof. A.M. Anile, Dr. G. Mascali, Dott. P. Falsaperla, Prof. S. Pennisi),
- il *Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York* (Dr. M. Fischetti),
- il *Dipartimento di Ingegneria dell'Innovazione e Nanotechnology National Laboratory of CNR-INFM, Universit  di Lecce* (Prof. L. Reggiani).

Sono state determinate "Basi Funzionali irriducibili" per Funzioni Isotrope scalari, vettoriali e tensoriali sia nel caso euclideo che in quello relativistico (vedi [1]-[2]).

Sono state analizzate le principali propriet  termodinamiche associate ad una miscela di fluidi carichi utilizzando il Principio di Entropia [3,4] e sono stati formulati ed analizzati diversi modelli idrodinamici (HD) per la descrizione del trasporto di carica nei dispositivi a semiconduttore (vedi [5-18],[20,22,24,30]).

A tale scopo utilizzando, per via sistematica, la *Termodinamica Estesa* ed il *Principio di Massima Entropia* sono stati sviluppati modelli di Fisica-Matematica per la studio dei fenomeni dissipativi degli *hot carriers* nei semiconduttori, per l'analisi di *Piccolo Segnale*, per l'analisi delle *Fluttuazioni* e delle corrispondenti *Densit  Spettrali*. Questi modelli sono stati formulati sia nell'ambito di una teoria lineare che nell'ambito di una teoria fortemente non lineare.   stata inoltre fatta una analisi critica ed una comparazione con i vari modelli HD noti in letter-

¹per una relazione dettagliata si veda la sezione 2

atura ed un confronto sia con i dati sperimentali che con simulazioni Monte Carlo (MC) fatte per equivalenti sistemi fisici (bulk e dispositivi n^+nn^+).

2) In collaborazione con:

- il *Dipartimento di Matematica di Catania* (Dr. S. Lombardo, Prof. G. Mulone),
- il *CIRAM di Bologna* (Prof. F. Brini).

Sono stati affrontati problemi di stabilità lineare e non lineare [23],[25-28] sia nell'ambito della Termodinamica Classica che in Termodinamica Estesa.

i) Si è sviluppato un criterio generale per la ricerca di opportune funzioni di Lyapunov per l'analisi della stabilità non lineare in Termodinamica Classica.

ii) È stato analizzato il problema di Bénard per un fluido comprimibile soggetto a rotazione e/o campo magnetico.

3) In *collaborazione* con:

- il *CIRAM di Bologna* (Prof. T. Ruggeri).

Sono state analizzate, per mezzo della Termodinamica Estesa, le principali proprietà termodinamiche dei gas degeneri [19,21] (di Bose e di Fermi) a basse temperature. Particolare attenzione è stata rivolta alle problematiche relative alla iperbolicità del sistema di equazioni differenziali associate al gas ed alla transizione di fase che conduce alla formazione di uno stato condensato per il gas di Bose.

4) In collaborazione con:

- il *Dipartimento di Ingegneria dell'Innovazione e Nanotechnology National Laboratory of CNR-INFN, Università di Lecce* (Prof. L. Reggiani)

È stata formulata una versione Quantistica della Termodinamica Estesa per la gasdinamica, includendo gli effetti delle statistiche di Bose e di Fermi nella formalizzazione di Wigner [29,31,33-35]. Si è così determinato un sistema "chiuso" di equazioni idrodinamiche "Estese" per un arbitrario numero di momenti scalari e vettoriali. Per ottenere la chiusura del suddetto sistema, è stato formulato un *Principio di Massima Entropia in ambito Quantistico* (QMEP) sviluppando *una teoria non locale* per un sistema di Fermioni e/o Bosoni. Il set di equazioni dei *momenti di Wigner* è stato ottenuto, nell'ambito della approssimazione di Hartree ed utilizzando uno sviluppo in serie di Moyal in potenze arbitrarie di \hbar^2 .

La Procedura di QMEP è stata utilizzata anche per formulare modelli Idrodinamici Quantistici atti a descrivere i fenomeni di trasporto nei dispositivi a semiconduttore [32]. Nella formulazione sono stati inclusi i processi collisionali sia di tipo elastico che di tipo dissipativo tra i portatori di carica ed i fononi.

Elenco delle pubblicazioni

- 1) S.Pennisi, M.Trovato.
On the irreducibility of Professor G.F.Smith's representations for isotropic functions.
Int. Journ. Engng. Science **25**, n. 8, 1059-1065 (1987). (Pergamon Journals) "Elsevier",
(Printed in Great Britain).
- 2) S.Pennisi, M.Trovato.
Mathematical characterization of functions underlying the principle of relativity.
Le Matematiche **XLIV** fasc.II,173-204, (1989). "Dipartimento di Matematica e Informatica
dell'Universitá di Catania", (Printed in Italy).
- 3) A.M. Anile, S.Pennisi, M.Trovato.
Extended thermodynamics of charge carrier transport in semiconductors.
Proceedings of the Fourth International Conference on Hyperbolic Problems: Theoretical, Ap-
plied, and Computational Aspects. A. Donato, F. Oliveri editors. Taormina, Italy, 1992. *Notes
on Numerical Fluid Mechanics*, Vol.**43**, 23-32, (1993). "Vieweg Publishing", Braunschweig,
(Printed in Germany).
- 4) S.Pennisi, M.Trovato.
Field equations for charge conducting fluids in electromagnetic fields.
Continuum Mechanics and Thermodynamics **7**, 489-520, (1995). "Springer" (Printed in: Berlin
Heidelberg, Germany). <http://dx.medra.org/10.1007/BF01175669>
- 5) A.M.Anile, M.Trovato.
Nonlinear closures for hydrodynamical semiconductor transport models.
Physics Letters A, **230**, 387-395 (1997). "Elsevier: North-Holland", (Printed in The Nether-
lands). [http://dx.medra.org/10.1016/S0375-9601\(97\)00278-8](http://dx.medra.org/10.1016/S0375-9601(97)00278-8)
- 6) M.Trovato, P.Falsaperla.
Full nonlinear closure for a hydrodynamic model of transport in silicon.
Physical Review B, **57** (8), 4456-4471 (1998). "The American Physical Society" (Printed in:
Woodbury, NY, USA). <http://dx.medra.org/10.1103/PhysRevB.57.4456>.
Vedi anche: *Erratum*, Physical Review B, **57**, 12617 (1998), (Printed in: Woodbury, NY,
USA).

- 7) P.Falsaperla, M.Trovato.
A new hydrodynamic model for hot carriers in silicon based on the maximum entropy principle. Proceedings del IV congresso nazionale della *Società italiana di matematica applicata e industriale* (SIMAI 98), Giardini Naxos, 1-5 Giugno 1998, , 241-244, (1998). "Società Italiana di Matematica Applicata e Industriale" (Printed in Italy).
- 8) M.Trovato, P.Falsaperla.
Hydrodynamic model for hot carriers in silicon based on the maximum entropy formalism. Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, SISPAD 98, Leuven Belgium, September 1998, K.De Meyer and S.Biesemans editors, 320-323, (1998). "Springer-Verlag Wien" (Printed in Austria).
- 9) P.Falsaperla, M.Trovato.
A Hydrodynamic model for transport in semiconductors without free parameters. VLSI Design, Vol. 8, 527-532 (1998). "OPA (Overseas Publishers Association) N.V. Published by licence under the Gordon and Breach Science Publisher imprint." (Printed in India).
<http://dx.medra.org/10.1155/1998/97416>
- 10) M.Trovato.
Applicazione della termodinamica estesa per la descrizione del trasporto dei portatori caldi nel silicio. Tesi di dottorato depositata presso le Biblioteche Nazionali di Roma e Firenze, (1998).
- 11) M.Trovato, L. Reggiani.
Maximum entropy principle for hydrodynamic transport in semiconductor devices. Journal of Applied Physics, 85 (8), 4050-4065 (1999)." American Institute of Physics" (Printed in: Woodbury, NY, USA). <http://dx.medra.org/10.1063/1.370310>
- 12) M.Trovato, P. Falsaperla, L. Reggiani.
Maximum entropy principle for nonparabolic hydrodynamic transport in semiconductor devices. Journal of Applied Physics, 86 (10), 5906 (1999). "American Institute of Physics" (Printed in: Woodbury, NY, USA). <http://dx.medra.org/10.1063/1.371610>
- 13) M. Trovato, L. Reggiani.
Maximum entropy principle within a total energy scheme: Application to hot-carrier transport in semiconductors. Physical Review B 61, (24), 16667-16681 (2000). "The American Physical Society" (Printed in: Woodbury, NY, USA). <http://dx.medra.org/10.1103/PhysRevB.61.16667>

- 14) M.Trovato.
Maximum entropy principle for hydrodynamic transport in semiconductors. Proceedings of the X International Conference on Waves and Stability in Continuous Media WASCOM 99, Vulcano (Eolie islands, Italy), June 7-12 1999, editors V. Ciancio, A. Donato, F. Oliveri, S. Rionero, 464-472 (2001). "World Scientific" Singapore, New jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore).
- 15) M.Trovato, L. Reggiani.
Maximum entropy principle within a total energy scheme for hot-carriers transport in semiconductor devices. VLSI Design, 13, 381-386 (2001). "OPA (Overseas Publishers Association) Gordon and Breach Science Publishing Group" (Luogo di pubbl.: Lausanne, Svizzera). <http://dx.medra.org/10.1155/2001/89617>
- 16) G.Mascali, M.Trovato.
An extended fluid-dynamical model describing electron transport in semiconductors. Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2000, Editors A.M. Anile, V. Capasso, A. Greco, 174-178 (2002). "Springer-Verlag" (Printed in: Berlin Heidelberg, Germany).
- 17) M.Trovato.
Hydrodynamic analysis for hot-carriers transport in semiconductors. Proceedings of the XI International Conference on Waves and Stability in Continuous Media WASCOM 2001, Porto Ercole, Italy. June 3-9 2001. editors R. Monaco, M. Pandolfi Bianchi, S. Rionero, 585-590, (2002). "World Scientific" Singapore, New jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore).
- 18) G.Mascali, M.Trovato.
A non-linear determination of the distribution function of degenerate gases with an application to semiconductors. Physica A, 310, 121-138 (2002). "Elsevier: North-Holland", (Printed in: Amsterdam, The Netherlands). [http://dx.medra.org/10.1016/S0378-4371\(02\)00789-6](http://dx.medra.org/10.1016/S0378-4371(02)00789-6)
- 19) T. Ruggeri, M. Trovato.
Hyperbolicity region for Fermi and Bose gases. Proceedings of the XII International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Villasimius 1-7 June 2003, editors R. Monaco, S. Pennisi, S. Rionero, T. Ruggeri, 463-469 (2004). "World Scientific", Singapore, New Jersey, (Printed in Singapore). http://dx.medra.org/10.1142/9789812702937_0053.
- 20) M.Trovato.
Hydrodynamic calculation for extended differential mobility in semiconductors.

- Trends and Applications of Mathematics to Mechanics, Editors S. Rionero, G. Romano, 269-285 (2005). "Springer", (Printed in Italy). http://dx.medra.org/10.1007/88-470-0354-7_20.
- 21) T. Ruggeri , M. Trovato.
Hyperbolicity in Extended Thermodynamics of Fermi and Bose gases.
 Continuum Mech. Thermodyn., **16**, 551-576 (2004). "Springer", (Printed in: Berlin Heidelberg, Germany). <http://dx.medra.org/10.1007/s00161-004-0180-6>.
- 22) M.Trovato.
Maximum entropy principle for hydrodynamic analysis of the fluctuations of moments for the hot carriers in semiconductors. Proceedings of the XIII International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Catania 19-25 June 2005, editors R. Monaco, G. Mulone, S. Rionero, T. Ruggeri, 530-535 (2006). "World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore). http://dx.medra.org/10.1142/9789812773616_0068
- 23) S. Lombardo, G. Mulone, M. Trovato.
A general analytical procedure to obtain optimal Lyapunov functions in Reaction-Diffusion Systems. Rendic. del Circ. Matemat. di Palermo, Serie II, Suppl. **78**, 173-185 (2006). Publisher: Palermo, "Circolo Matematico di Palermo", (Printed in Italy).
- 24) M. Trovato, L. Reggiani.
Maximum-entropy principle for static and dynamic high-field transport in semiconductors. Physical Review B **73**, 245209, 1-17 (2006). "The American Physical Society" (Printed in: Woodbury, NY, USA). <http://dx.medra.org/10.1103/PhysRevB.73.245209>
- 25) S. Lombardo, G. Mulone, M. Trovato.
Analysis of the Lorenz system and the Bénard problem with rotation via the canonical reduction method. Proceedings: Asymptotic Methods in Nonlinear Wave Phenomena. T. Ruggeri and M.Sammartino editors, 107-118, (2007). "World Scientific", Singapore, New jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore).
- 26) S. Lombardo, G. Mulone, M. Trovato.
Nonlinear stability of an epidemic model of the spatial spread of rabies among foxes via the canonical reduction method. Proceedings: Mathematical Physics Models and Engineering Sciences, Liguori editors, 325-334, (2008). "Liguori", (Printed in Italy).
- 27) S. Lombardo, G. Mulone, M. Trovato.
Nonlinear stability in reaction-diffusion systems via optimal Lyapunov functions.

- J. Math. Anal. Appl., **342**, 461-476, (2008). "Elsevier: Academic Press", (Luogo di pubbl. : Orlando FL. USA). <http://dx.medra.org/10.1016/j.jmaa.2007.12.024>
- 28) F. Brini, G. Mulone, M. Trovato.
On the magnetic Rayleigh-Bénard problem for compressible fluids.
Proceedings of XIV International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Baia Samuele 30 June - 7 July 2007. Editors: N. Manganaro, R. Monaco, S. Rionero, 66-71, (2008). "World Scientific", Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore). <http://www.worldscibooks.com/physics/6629.html>
- 29) M. Trovato.
On the formulation of the quantum Extended Thermodynamics by using the semiclassical interpretation of the Wigner function.
Proceedings of XIV International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Baia Samuele 30 June - 7 July 2007. Editors: N. Manganaro, R. Monaco, S. Rionero, 576-581, (2008). "World Scientific", Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore). <http://www.worldscibooks.com/physics/6629.html>
- 30) M. Trovato, P. Falsaperla.
Maximum-entropy principle for nonlinear hydrodynamic transport in semiconductors.
Continuum Mech. Thermodyn., **19**, 511-532, (2008). "Springer", (Printed in: Berlin Heidelberg, Germany). <http://dx.medra.org/10.1007/s00161-008-0070-4>
- 31) M. Trovato, L. Reggiani.
Quantum Maximum Entropy Principle and the Moments of the Generalized Wigner Function.
Journal of Physics: Conference Series (JPCS), **193**, 012013-1-012013-4, (2009).
<http://dx.medra.org/10.1088/1742-6596/193/1/012013>
- 32) M. Trovato.
On the formulation of Quantum Maximum Entropy Principle for the transport of hot carriers in the semiconductors. Proceedings of XV International Conference on Waves and Stability in Continuous Media, Mondello-Palermo Italy, 28 June-1 July 2009. Editors: A.M. Greco, S. Rionero, T. Ruggeri 353, (2010). "World Scientific", Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, (Printed in Singapore).
- 33) M. Trovato, L. Reggiani.
Statistics and Quantum Maximum Entropy Principle.
Il Nuovo Cimento C, **33**, 247-255, (2010). <http://dx.medra.org/10.1393/ncc/i2010-10570-8>

34) M. Trovato, L. Reggiani.

*Quantum hydrodynamic models from a maximum entropy principle*².

J. Physics A, Mathematical and Theoretical **43**, 102001-1-102001-11, (2010). ISSN: 1751-8113.

<http://dx.medra.org/10.1088/1751-8113/43/10/102001>

35) M. Trovato, L. Reggiani.

Quantum maximum entropy principle for a system of identical particles.

Physical Review E **81**, 021119-1-021119-11 (2010). "The American Physical Society" (Printed

in: Woodbury, NY, USA). ISSN: 1539-3755. <http://dx.medra.org/10.1103/PhysRevE.81.021119>

Partecipazioni e Comunicazioni³ a Congressi

- 1) (*) *Fifth International Workshop on Computational Electronics (IWCE 5)*, Notre Dame, Indiana, USA, May 28-30, 1997.
- 2) *Problemi attuali dell'Analisi Non Lineare*, Acicastello (CT), Italy, 12-14 Marzo, 1998.
- 3) (*) *Workshop sui Modelli Matematici per i semiconduttori*, CNR, presso la SGS Thomson, Stradale Primosole 50, Catania, Italy, Gennaio 1998.
- 4) (*) *IV congresso nazionale Società italiana di matematica applicata e industriale (SIMAI 98)*, Giardini Naxos (Italy), June 1-5, 1998.
- 5) (*) *International Conference on Simulation of Semiconductor Devices and Processes (SISPAD 98)*, Leuven (Belgium), September 2-4, 1998.
- 6) (*) *X International Conference on Waves and Stability in Continuous media (WASCOM 99)*, Vulcano (Eolie Islands - Italy), June 7-12, 1999.
- 7) (*) *VII International Workshop on Computational Electronics (IWCE 7)*, Glasgow (Scotland), May 22-25, 2000.
- 8) (*) *XI ECMI International Conference 2000* Torre Normanna, Altavilla Milicia (Palermo - Italy), September 26-30, 2000.

²Come riportato nella lettera inviata dall'editore agli autori (ed allegata al presente lavoro), questo articolo é stato "highly rated and recommended by referees"

³Con il simbolo (*) si indicano i congressi in cui è stata presentata una comunicazione

- 9) (*) *Assemblea Scientifica del GNFM*, Montecatini Terme (Italy), 2-3 Novembre, 2000.
- 10) *Assemblea Scientifica del GNFM*, Montecatini Terme (Italy), 25-27 Ottobre, 2001.
- 11) (*) *XI International Conference on Waves and Stability in Continuous media* (WASCOM 2001), Porto Ercole (Italy), June 3-9, 2001.
- 12) (*) *Assemblea Annuale MIUR-Progetto di ricerca 2000-2002, Problemi Matematici non lineari di propagazione e stabilità nei modelli del continuo*, Bressanone (Italy), 10-12 Gennaio 2002.
- 13) (*) *Symposium on Trends in Applications of Mathematics to Mechanics* STAMM 2002, Maiori (Salerno - Italy), September 29 - October 4 2002.
- 14) (*) *XII International Conference on Waves and Stability in Continuous media* (WASCOM 2003), Villasimius (Cagliari - Italy), June 1-7, 2003.
- 15) (*) *Annual Scientific Meeting MIUR - Research Project "Nonlinear Mathematical Problems of Wave Propagation and Stability in Models of Continuous Media"*, Bressanone (Italy), January 17-19, 2005.
- 16) (*) *XIII International Conference on Waves and Stability in Continuous media* (WASCOM 2005), Catania (Sicily - Italy), June 19-25, 2005.
- 17) (*) *Annual Scientific Meeting, Research Project PRIN 2005-2007 "Nonlinear Propagation and Stability in Thermodynamical Processes of Continuous Media"*, Bressanone (Italy), February 13-15, 2006.
- 18) (*) *XIV International Conference on Waves and Stability in Continuous media* (WASCOM 2007), Baia Samuele (Sicily - Italy), 30 June - 7 July, 2007.
- 19) *Kinetic equations: direct and inverse problems*, Mantova (Italy), 15-18 May 2008.
- 20) (*) *Symposium on Trends in Applications of Mathematics to Mechanics* (STAMM 2008), Levico, (Italy) September 22-25, 2008.
- 21) (*) *Second International Conference on New Trends in Fluid and Solid Models* (NTFSM 2009), Vietri sul Mare (Salerno, Italy), March 19th - 21st, 2009.
- 22) (*) *15th International Conference on Waves and stability in Continuous Media* (WASCOM 2009), Mondello (Palermo, Italy) 28th June–1st July, 2009.
- 23) (*) *XXI International Conference on Transport Theory* (ICTT21 2009), (Politecnico di Torino, Italy) July, 12 – 17, 2009.

- 24) (*) *16th International Conference on Electron Dynamics In Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures* (Edison16 2009), Montpellier (France), August 24 – 28, 2009.

Comunicazioni effettuate su invito presso Istituti e Dipartimenti di ricerca

- 1) *Chiusura lineare e non lineare nei modelli Idrodinamici Estesi per la descrizione del trasporto elettronico nei semiconduttori*, CNR presso la SGS Thomson, Stradale Primosole 50, Catania, Febbraio 1997 (su invito dei Prof. U. Campisano e A.M. Anile).
- 2) *A Hydrodynamic Model for hot carriers transport in semiconductors* presso l'IBM Research Division (New York), Maggio 1997 (su invito del Dr. M. Fischetti).
- 3) *Applicazione della Termodinamica Estesa per la descrizione del trasporto dei portatori nei semiconduttori*, presso l'Università di Bologna, CIRAM Via Saragoza 8, Marzo 1999 (su invito del Prof. T. Ruggeri).
- 4) *Principio di Massima Entropia con uno schema ad Energia totale: applicazione al trasporto dei portatori caldi nei semiconduttori ed analisi delle fluttuazioni. (Parte I, II, III)*. Ciclo di 3 seminari tenuti presso l'Università di Sassari, Dipartimento di Matematica e Fisica, via Vienna 2 Sassari, Settembre 2000 (su invito del Prof. T. Steger).
- 5) *Descrizione del trasporto di carica nei semiconduttori in Termodinamica Estesa*, presso l'Università degli studi di Catania, Dipartimento di Matematica ed Informatica, Aprile 2001 (su invito del Prof. G. Mulone).
- 6) *Modelli Idrodinamici Estesi basati sul Principio di Massima Entropia: Bulk e dispositivi*, presso l'Università degli studi di Firenze, Aula Seminari del Dipartimento di Matematica Applicata G. Sansone, Novembre 2002 (su invito del Prof. G. Frosali).
- 7) *Maximum entropy principle for static and dynamic high-field transport in semiconductors* presso l'Università degli studi di Cagliari, Dipartimento di Matematica, Aprile 2008 (su invito del Prof. S. Pennisi).

2 Relazione dettagliata sulla attività di ricerca

Come già detto nella sezione 1, l'attività di ricerca è stata svolta nell'ambito del settore MAT-07 *Fisica-Matematica* in relazione alle seguenti problematiche:

- **Teoremi di rappresentazione per Funzioni Isotrope**
- **Termodinamica Estesa per fluidi carichi con applicazioni ai semiconduttori**
- **Problemi di stabilità in Termodinamica Classica ed Estesa**
- **Termodinamica Estesa dei gas degeneri di Bose e Fermi**
- **Formulazione Quantistica della Termodinamica Estesa sia per la gas-dinamica che per la descrizione dei fenomeni di trasporto degli "hot carriers" nei semiconduttori**

2.1 Teoremi di rappresentazione e miscele di fluidi carichi

- 1) Nell'articolo [1] è stata studiata la *irriducibilità* di una base funzionale per funzioni isotrope scalari e la *irriducibilità* delle rappresentazioni per funzioni isotrope vettoriali e per funzioni isotrope tensoriali simmetriche ed antisimmetriche del secondo ordine. Nell'articolo [2] sono state determinate delle *formule di rappresentazione complete* per funzioni *scalari, vettoriali e tensoriali* soggette al *Principio di relatività*. I *teoremi di rappresentazioni irriducibili* si rendono necessari per la determinazione di *Funzioni Costitutive* formalmente *covarianti* per certe classi di trasformazioni (ad esempio per le *Funzioni Costitutive* soggette al *Principio di oggettività materiale* oppure al *Principio di relatività*).
- 2) Negli articoli [3],[4] è stato studiato, utilizzando la Termodinamica Estesa (con il *Principio di Entropia*), il comportamento di una miscela di tre fluidi (due carichi ed uno elettricamente neutro) che interagiscono reciprocamente sotto l'azione di un campo elettromagnetico. In [3] si è considerata una miscela di elettroni e lacune interagenti con un fluido elettricamente neutro (semiconduttore biologico) determinando le equazioni di bilancio per i singoli sottosistemi, le relative relazioni di chiusura soggette al *Principio di Entropia*, le densità ed i flussi di entropia dei singoli sottosistemi. In [4], considerando sempre una miscela a tre fluidi, ed utilizzando uno sviluppo non lineare rispetto alle condizioni di equilibrio termodinamico globale i singoli sottosistemi risulteranno essere accoppiati. Tali termini di accoppiamento potrebbero assumere un ruolo non trascurabile in corrispondenza di elevati valori dei campi elettromagnetici applicati. Sono state calcolate sia la densità che il flusso di entropia di non equilibrio dei singoli sottosistemi. Un'applicazione dei risultati ottenuti potrebbe riguardare una miscela (plasma solare) di elio, protoni ed elettroni, lo studio di processi elettrochimici o analogamente l'analisi del comportamento di plasmi da laboratorio.

2.2 Termodinamica Estesa per la descrizione del trasporto nei semiconduttori

Modellistica e problematiche

Negli ultimi anni l'equazione del trasporto di Boltzman (BTE) è stata il principale strumento per la modellizzazione di una varietà di problemi nell'ambito dei sistemi a molti corpi ed in particolare della materia condensata. Nel caso di processi che conducono il sistema fisico considerato verso configurazioni molto lontane dall'equilibrio la determinazione di una soluzione analitica della BTE si è mostrata un formidabile problema matematico fino ad ora irrisolto, che ha necessariamente sollecitato la ricerca di svariati approcci numerici capaci di descrivere in modo adeguato tali situazioni fisiche. Queste metodologie si sono rivelate, ad esempio, particolarmente adatte per l'analisi delle proprietà del trasporto nei *moderni dispositivi semiconduttori* dove una crescente miniaturizzazione ha richiesto una modellizzazione accurata dei fenomeni del trasporto.

In particolare una dettagliata descrizione dei portatori di carica in materiali quali *GaAs*, *InP* e *Si* si è resa necessaria per la progettazione dei moderni dispositivi ad alta frequenza come i *Transferred electron oscillators*, i *field-effect transistors*, i dispositivi *Switchers*, etc.

I metodi che attualmente descrivono nel modo più completo i problemi relativi agli *hot-electrons* nei semiconduttori, anche in condizioni estreme, sono i metodi cinetici Monte Carlo (MC). Tali simulazioni richiedono comunque *elevati tempi di calcolo* tanto da rendere inapplicabile tali metodologie come usuali prassi per la progettazione e l'analisi dei dispositivi. Queste problematiche hanno sollecitato, negli ultimi anni, la ricerca di strade alternative al MC che risultano essere da una parte sufficientemente accurate ma contemporaneamente meno dispendiose da un punto di vista computazionale.

Soluzioni delle problematiche

Una valida alternativa che permette di risolvere le difficoltà intrinsecamente presenti nei metodi cinetici è data dallo sviluppo di modelli fluido-dinamici basati sul *metodo dei momenti* della BTE. Chiaramente il passaggio da modelli cinetici a modelli idrodinamici comporta alcuni problemi, quali la chiusura (flussi e produzioni collisionali) della gerarchia di equazioni per i momenti della BTE. La teoria che al momento, si presenta come la più adeguata allo studio di fenomeni di non equilibrio è la *Termodinamica Estesa*. Essa fornisce una via sistematica per ottenere le *equazioni costitutive* presenti nella gerarchia dei momenti a partire da due approcci che sotto opportune condizioni risultano essere equivalenti:

1) Il *Principio di Entropia* (EP)

2) Il *Principio di Massima Entropia* (MEP).

In particolare il MEP permette di ricavare la funzione di distribuzione di non equilibrio, associata ai portatori, determinando in tal modo lo stato microscopico corrispondente ad un dato stato macroscopico. In questo caso lo stato microscopico viene ottenuto come soluzione del problema variazionale di massimizzare l'entropia del sistema sotto le costrizioni corrispondenti al valore di certe quantità medie che ne definiscono lo stato macroscopico. Nota la funzione di distribuzione, le funzioni costitutive incognite si ottengono integrando nello spazio \vec{k} la loro espressione cinetica. Tutte le *funzioni costitutive* determinate con questa procedura *non conterranno in tal modo alcun parametro libero*, ma avranno come unici parametri di input quelli presenti nei *kernel* collisionali, cioè gli stessi parametri fisici che vengono dati come input in tutti i modelli cinetici (MC, armoniche sferiche, etc...) realizzati sotto le stesse approssimazioni.

Un'altra conseguenza dei processi di miniaturizzazione (con lunghezze di scala tipicamente submicrometriche) è stata quella di incrementare la *operation frequency* dei moderni dispositivi elettronici (entro un range di frequenze dei *terahertz*). In questo caso una conoscenza accurata dei coefficienti di *piccolo segnale* (come le funzioni risposta, la mobilità differenziale, l'impedenza, etc..) risulta essere di fondamentale importanza per prevedere, in fase di progettazione, le performances dei dispositivi. In particolare la *Mobilità Differenziale* a.c. gioca un ruolo primario, poichè da una parte può essere misurata sperimentalmente (permettendo così un controllo dell'accuratezza del modello utilizzato) e d'altra parte è necessaria per valutare le possibilità di amplificazione e generazione dei segnali, di calcolare il *guadagno* ed i *coefficienti di assorbimento*, di stimare la *Temperatura di Rumore* utilizzando come conoscenza addizionale la *Densità Spettrale* delle fluttuazioni della velocità. Per analizzare la *Mobilità Differenziale* molti approcci possono essere trovati in letteratura, tipicamente basati sulla conoscenza di formule empiriche o simulazioni numeriche. In particolare i modelli analitici conosciuti sono usualmente ottenuti sulla base di molte approssimazioni che non possono essere applicate per valori elevati di campo elettrico ed in condizioni di *hot-carriers*.

Utilizzando la *Termodinamica Estesa* è possibile riformulare, in termini più generali la teoria per l'*analisi di piccolo segnale* a.c. e d.c. Infatti introducendo una *matrice di rilassamento generalizzata*, e definendo delle *Mobilità di Corda* e delle *Mobilità Differenziali* generalizzate è possibile determinare tutti i *coefficienti di piccolo segnale*, sia nel dominio temporale che in quello delle frequenze, anche in presenza di campi elettrici estremi ed in condizioni di *hot-carriers*.

Sottolineiamo infine che, in generale, questi nuovi approcci idrodinamici richiedono uno sviluppo di adeguati codici numerici in grado di descrivere le problematiche intrinsecamente presenti nei sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali di tipo iperbolico.

In particolare i modelli *Termodinamici Estes* descrittivi il trasporto degli *hot-electrons* si presentano

come sistemi *quasi-lineari* iperbolici per le variabili descrittive gli elettroni accoppiati con l'equazione di Poisson per la determinazione del potenziale elettrostatico. La parte iperbolica può sviluppare delle discontinuità di vario tipo anche se le condizioni iniziali sono regolari. Questa peculiarità richiede l'uso di metodi numerici di alto ordine e *shock capturing*. Inoltre nel nostro caso è impossibile determinare una espressione analitica per gli autovalori e gli autovettori della matrice jacobiana dei flussi. Questo rende molto difficile l'utilizzo dei comuni metodi per equazioni iperboliche che richiedono la conoscenza della struttura caratteristica del sistema stesso.

Principali obiettivi e risultati conseguiti

Il lavoro di ricerca è stato svolto utilizzando una applicazione *dinamica* del MEP e descrivendo per approssimazioni successive la *struttura a bande* dei materiali semiconduttori.

Banda Parabolica

Come primo approccio si è considerata una descrizione delle *bande di tipo Parabolica* introducendo un'equazione di stato e definendo il concetto di *Temperatura di Equilibrio Locale* per gli *hot-carriers* (**Temperature Scheme**).

Sulla base di questa approssimazione i principali risultati teorici e le loro applicazioni sono riportate nelle pubblicazioni [5-11], [16], [18], in particolare:

- 1) Nel caso specifico dei primi tredici momenti della BTE è stata calcolata una esplicita espressione analitica per la funzione di distribuzione (come funzione locale e non lineare delle variabili di non equilibrio) sia in condizioni di degenerazione ([5]) che in condizione di non degenerazione ([6],[11]).
- 2) Nota la funzione di distribuzione, tutte le funzioni costitutive (flussi e produzioni collisionali) sono state esplicitamente calcolate, a partire dalla loro espressione cinetica, utilizzando come unici parametri fisici di *input* quelli contenuti nei *kernel collisionali*. In questo modo, come nei modelli cinetici, i processi collisionali sono stati descritti accuratamente considerando i principali fenomeni di interazione (con i fononi acustici, ottici, impurezze etc..) associati rispettivamente alle transizioni intravalle ed intervalli ([6],[11]). Note le *funzioni costitutive* e calcolata la matrice Jacobiana dei flussi è stata determinata la zona di iperbolicità del sistema di equazioni differenziali ai vari ordini dello sviluppo ([6]).
- 3) Utilizzando una procedura iterativa sono state ottenute le relazioni di chiusura per gli *ordinari modelli idrodinamici*. In particolare sono state calcolate delle relazioni costitutive di tipo Navier-Stokes-Fourier per la parte a traccia nulla del tensore di stress e per il flusso di calore,

con una valutazione esplicita della conducibilità termica e del coefficiente di viscosità ([11]).

- 4) Con la Tesi di Dottorato [10], come riportato nella Presentazione del Collegio dei Docenti, “**Si apre la strada alla formulazione di una nuova serie di modelli idrodinamici completamente chiusi, privi di parametri liberi che potrebbero essere utilizzati come usuale prassi per la progettazione a l’analisi degli attuali dispositivi sub-micrometrici, anche in condizioni molto lontane dall’equilibrio e con dei rilevanti vantaggi sui costi computazionali.**

La tesi in oggetto è un lavoro di rassegna pubblicabile in quanto contiene:

- i) una sintesi originale e critica dei più importanti lavori apparsi in letteratura sull’argomento;*
- ii) una esposizione dei lavori del candidato, in parte pubblicati ed in parte in corso di pubblicazione su riviste internazionali;*
- iii) molti risultati teorici inediti in relazione alle problematiche del trasporto.**

*Sia dal punto di vista metodologico che da quello del contenuto **la tesi rappresenta un contributo originale è di rilevanza significativa nell’ambito della fisica teorica della materia dello stato condensato.***”

- 5) Nella pubblicazione [18] si è applicato il MEP considerando i primi 20 momenti della funzione di distribuzione per un gas degenere di Fermi-Dirac e di Bose-Einstein utilizzando uno sviluppo non-lineare attorno alla configurazione di equilibrio locale. I risultati ottenuti per le *Funzioni Costitutive* sono stati confrontati con analoghi risultati sperimentali e Monte Carlo.
- 6) Nelle pubblicazioni [7-11],[16] i modelli proposti sono stati utilizzati per determinare le proprietà termodinamiche degli *hot-electrons* sia nei materiali Bulk che nei dispositivi unipolari di tipo n^+nn^+ caratterizzati da differenti profili di drogaggio, differenti dimensioni delle regioni attive, differenti voltaggi applicati e differenti temperature reticolari.
- È stato sviluppato, nel caso unidimensionale, un adeguato codice numerico per sistemi iperbolici non omogenei utilizzando la generalizzazione di una procedura numerica (*shock capturing*) proposta da Nessyahu e Tadmor con l’inclusione dei termini di sorgente.
- Sono stati così ottenuti dei risultati numerici confrontabili sia con i dati sperimentali che con i dati ricavati da analoghe simulazioni MC (fatte sotto le stesse approssimazioni fisiche) con una riduzione dei tempi computazionali di vari ordini di grandezza.

Banda non Parabolica (Full Band)

Per una descrizione realistica del trasporto nei semiconduttori è necessaria una opportuna modellizzazione della struttura a bande. In particolare per alti valori di campo elettrico gli effetti *Full Band*

cambiano in modo rilevante sia le proprietà microscopiche che le proprietà macroscopiche dei portatori di carica. Negli articoli [12-15] e [17,20,22,24,30] gli effetti non Parabolici della struttura a bande, sono stati modellizzati, con un **total energy scheme**, introducendo per i portatori carica una massa variabile (funzione dell'energia media di singola particella) da determinare per mezzo di un *fit* dei dati sperimentali e/o dei dati MC per il materiale *Bulk*.

Sulla base di questa approssimazione i principali risultati teorici e le loro applicazioni sono:

- 1) Negli articoli [12,14,30], considerando soltanto i primi *tredici momenti* della BTE, è stato utilizzato il MEP per ottenere un set di equazioni a simmetria iperbolica, con una *chiusura non lineare* priva di parametri liberi, capace di descrivere sia la non Parabolicità della struttura a bande che i fenomeni tipicamente *non lineari* presenti negli attuali dispositivi submicrometrici. Viene inoltre fatta una analisi critica ed una comparazione con i vari modelli HD noti in letteratura ed un confronto sia con i dati sperimentali che con simulazioni Monte Carlo (MC) fatte per equivalenti sistemi fisici (bulk e dispositivi n^+nn^+).
- 2) Negli articoli [13,15] e [17,20,22,24], viene determinato ed analizzato il *primo Modello Idrodinamico Esteso*, presente in letteratura, per un *arbitrario numero di momenti* della BTE di *qualsiasi ordine tensoriale*. Considerando le interazioni collisionali (intravalle ed intervalle) degli elettroni con i fononi sia la *funzione di distribuzione* che i *coefficienti di trasporto*, in una approssimazione lineare, vengono determinati per via analitica.
A partire da questo modello esteso, con l'ausilio di metodi iterativi, vengono ottenuti dei *Modelli Idrodinamici Ridotti* caratterizzati da *differenti schemi di chiusura* che dipendono dal numero di momenti utilizzati. Si dimostra come alcuni fenomeni di *overshoot* degli *hot-carriers*, presenti in condizioni di forte non equilibrio, sono strettamente connessi [13] al numero dei momenti della BTE utilizzati nei modelli idrodinamici.
- 3) Negli articoli [13,15,17,20,22,24,30] viene sviluppato un approccio idrodinamico esteso, alternativo al Monte Carlo, per l'analisi di *Piccolo Segnale*, per l'analisi delle *Dissipazioni*, delle *Fluttuazioni* e delle corrispondenti *Densità Spettrali*. In particolare, l'evoluzione temporale delle *Funzioni Risposta*, associate ai *momenti* della BTE, fornisce utili informazioni sui fenomeni di *rilassamento* e sui fenomeni di *overshoot*. Analogamente l'evoluzione in frequenza della *Mobilità Differenziale ac*, associata ai corrispondenti *momenti*, fornisce utili informazioni sulla *amplificazione e generazione* di un segnale e sulla efficienza dei *dispositivi oscillanti*.

Risultati innovativi rispetto a quelli precedenti noti in letteratura:

In tutti i modelli presenti in letteratura, antecedenti alle pubblicazioni [6-10], la *chiusura* delle equa-

zioni idrodinamiche è stata sempre determinata introducendo delle *Funzioni Costitutive* fenomenologiche per i flussi e per le produzioni collisionali contenenti dei parametri liberi da determinare opportunamente. La presenza di questi parametri liberi è stata sempre una *assunzione questionabile*, in quanto, in generale tali parametri non sono costanti, ma devono essere di volta in volta determinati in funzione delle *condizioni di lavoro* (voltage applicati, profili di drogaggio, ampiezza delle *regioni attive*, temperature reticolari) o sulla base di simulazioni MC o per mezzo di dati sperimentali.

In particolare, nelle pubblicazioni [6],[10-13],[20,24,30] sono riportati dei *Modelli Idrodinamici* completamente chiusi, privi di qualsiasi parametro libero in grado di descrivere processi altamente non lineari. Con una applicazione *dinamica* del formalismo di Massima Entropia, si è *aperta la strada* ad una serie di *modelli* Idrodinamici fortemente *innovativi* e completamente *autoconsistenti* che possono essere utilizzati come usuale prassi per la progettazione e l'analisi degli attuali moderni dispositivi submicrometrici, anche in condizioni molto lontane dall'equilibrio e con dei *rilevanti vantaggi sui costi computazionali*.

2.3 Problemi di stabilità in Termodinamica Classica ed Estesa

Scopo dell'analisi dei modelli matematici lineari e non lineari, che descrivono un dato fenomeno del mondo reale, è quello di dare indicazioni sulla sua evoluzione temporale, sul suo comportamento asintotico, sulla eventuale stabilità di soluzioni stazionarie o periodiche. In tale contesto, la ricerca di classi di soluzioni stazionarie è un fondamentale punto di partenza sia per lo studio dell'evoluzione temporale di una generica perturbazione delle soluzioni che per l'analisi della stabilità.

In questo ambito, sono stati, quindi, studiati:

- **Problemi di stabilità non lineare** di particolari soluzioni base di equazioni a derivate parziali fra cui, alcune equazioni di reazione diffusione ed equazioni della fluidodinamica con l'obiettivo di trovare condizioni necessarie e sufficienti di stabilità non lineare.

Si è determinato un metodo operativo per la "costruzione di funzioni di Lyapunov ottimali", nel senso della coincidenza delle regioni di stabilità lineare e non lineare. A questo fine l'idea guida è stata quella di utilizzare, per sistemi differenziali a derivate parziali, un metodo di costruzione ottimale nell'ambito della teoria delle equazioni differenziali ordinarie: il "*metodo di riduzione canonica*" che trasforma un sistema differenziale lineare, con matrice dei coefficienti A , in forma canonica (diagonale o in forma generale di Jordan) mediante l'utilizzo degli autovalori e autovettori (o vettori generalizzati) della matrice A . Tale metodo è quindi basato sull'utilizzo dei risultati della stabilità - instabilità lineare con l'introduzione di un cambiamento di variabili, ottenuto mediante la risoluzione di un sistema differenziale ordinario associato al sistema differenziale a derivate parziali.

Lo studio della stabilità (con il metodo classico dell'energia) del sistema a derivate parziali, nelle nuove variabili, permette in modo canonico la costruzione di una funzione di Lyapunov ottimale, nel senso che i parametri critici non lineari, ottenuti con tale funzione, coincidono con i parametri critici della stabilità - instabilità lineare. Sono state così "costruite", in modo sistematico, classi di funzioni di Lyapunov ottimali per sistemi di equazioni differenziali ordinarie, per sistemi di equazioni di reazione-diffusione e per sistemi di equazioni in fluidodinamica (vedi [23],[25-27]).

- **Nell'ambito della stabilità lineare** si è studiato il problema di Bénard per un fluido comprimibile soggetto a rotazione e/o campo magnetico. In particolare sono state determinate le soluzioni stazionarie ed è stata affrontata l'analisi della stabilità per un plasma comprimibile elettroconduttore, soggetto ad un campo magnetico, utilizzando la Termodinamica Classica (teoria di Navier-Stokes-Fourier) e risolvendo il problema agli autovalori con metodi numerici di tipo spettrale (Chebyshev Tau, Chebyshev Collocation) [28]. È stato iniziato lo studio di problemi di conduzione di calore stazionario in un gas soggetto a gravità e posto in rotazione all'interno di due cilindri coassiali sia nell'ambito della Termodinamica Classica che nell'ambito della Termodinamica Estesa.

L'obiettivo che ci si prefigge è quello di trovare i parametri critici lineari e, successivamente, non lineari confrontando i risultati sia in ambito classico che in Termodinamica Estesa verificando la congettura che i risultati ottenuti nelle due teorie si differenziano quanto più il gas diventa rarefatto.

2.4 Termodinamica Estesa dei gas degeneri

Una interessante modellizzazione dei fenomeni di trasporto a basse temperature, nell'ambito della fisica dei plasmi, può essere ottenuta con l'ausilio della *Termodinamica Estesa dei gas Degeneri*. Con questo approccio è stato possibile analizzare le principali proprietà termodinamiche dei gas degeneri con particolare attenzione alle problematiche relative alla iperbolicità delle equazioni differenziali associate al gas ed ai fenomeni legati ai processi di *Transizione di Fase*. Si sono così ottenute [19,21]:

- Le relazioni di chiusura, nell'ambito della teoria dei primi 13 momenti, utilizzando sia una espansione lineare che una espansione non lineare della funzione di distribuzione.
- Le differenti regioni di iperbolicità associate al set di equazioni differenziali nei casi di un gas di Bose e di Fermi *debolmente e fortemente degeneri*.
- Delle espressioni analitiche per alcuni importanti coefficienti di trasporto nei casi di un gas *debolmente e fortemente degeneri* sia per bosoni che per fermioni.
- Le correlazioni che legano la formazione di uno stato condensato (superfluido) per un gas di Bose alla *perdita* di iperbolicità del sistema in prossimità della *Transizione di Fase*.

L'obiettivo che ci si prefigge è quello di studiare la formazione e la propagazione di fenomeni di shock a basse temperature nei gas degeneri.

2.5 Formulazione Quantistica della Termodinamica Estesa

- Partendo da una formulazione in seconda quantizzazione é stata utilizzata, per un sistema di particelle identiche, la *matrice densitá* ρ nello *spazio di Fock*, e la *matrice densitá ridotta* di singola particella $\hat{\rho}$ determinando, in corrispondenza, la funzione di *Wigner ridotta* e la sua equazione di evoluzione quantistica nell'approssimazione di Hartree [31,33-35].

Come particolari applicazioni possono essere considerati: i) un gas di Bosoni con *interazioni di contatto*, per la descrizione dei fenomeni caratteristici dei condensati di Bose. ii) Un gas di Fermioni, reciprocamente interagenti, nell'approssimazione di Hartree. iii) Un gas di Fermi nel Silicio (*portatori caldi*) *interagenti con fononi ottici ed acustici* con gli usuali Kernel collisionali semiclassici per le transizioni intravalle ed intervalle [32].

Con questo approccio si é generalizzata, in ambito quantistico, l'usuale Termodinamica Estesa determinando, un sistema "chiuso" di equazioni idrodinamiche "Estese" per un arbitrario numero di momenti scalari e vettoriali. Il set di equazioni dei momenti é stato ottenuto in forma generale, con uno sviluppo in serie di Moyal valutando tutti i termini di correzione, presenti nelle equazioni di bilancio, in potenze arbitrarie di \hbar^2 .

- Per ottenere la chiusura del suddetto sistema, é stato utilizzato il Principio di Massima Entropia in ambito Quantistico (QMEP). Si é quindi generalizzata la definizione di Entropia di Von Neumann seguendo la strategia proposta da Landau per introdurre il concetto di indistinguibilitá associata ad un gas di particelle identiche (Fermioni e/o Bosoni) in condizioni di non equilibrio.

In questo modo si é introdotta l'entropia in termini dei *numeri di occupazione* e, conseguentemente, come funzionale "globale" dell'operatore densitá ridotta $\hat{\rho}$ [29,31,33-35]. Si é quindi cercata l'espressione dell'operatore $\hat{\rho}$ che rende estemale il suddetto funzionale, sotto la condizione di vincolo che il sistema considerato possa essere descritto in modo fisicamente appropriato da un certo set di quantitá macroscopiche "locali" (momenti della funzione di Wigner).

- Determinata la forma funzionale dell'operatore $\hat{\rho}$ si é cercata la Funzione di Wigner ridotta calcolando la trasformata di Wigner di $\hat{\rho}$. Considerando una espansione di Moyal é stata calcolata esplicitamente la prima correzione quantistica rispetto alla descrizione classica includendo tutti gli effetti imputabili alle statistiche di Fermi e di Bose [34,35]. La funzione di Wigner cosí determinata contiene delle quantitá incognite, chiamate *moltiplicatori di Lagrange*, che possono essere ottenute *in senso quantistico* (con uno sviluppo in potenze di \hbar^2) a partire dalla conoscenza delle quantitá macroscopiche locali (e delle loro derivate spaziali) usate come vincoli nella procedura di QMEP.

- Nota la funzione di Wigner ridotta tutte le relazioni costitutive incognite presenti nelle equazioni idrodinamiche (sia in condizioni di equilibrio locale che di non equilibrio) sono state valutate esplicitamente fino alla prima correzione quantistica. In particolare, ogni sistema Idrodinamico quantistico (QHD) deve essere supplementato da due relazioni di equilibrio locale per il *potenziale chimico* e per l'*equazione di stato* che agiscono come *vincoli differenziali* per il QHD stesso. Queste relazioni differenziali possono essere valutate introducendo due differenti definizioni di Temperatura quantistica (si veda la nota 25 in [35]) che ammettono lo stesso limite classico (quando $\hbar \rightarrow 0$) e conducono a due approcci del tutto equivalenti [34,35] Con questa procedura tutti i modelli QHD noti in letteratura possono essere determinati come casi particolari del presente approccio che é stato esplicitamente sviluppato, per differenti regimi associati ad un gas di Fermi e/o di Bose, nell'ambito della formalizzazione di Wigner [35].

Futuri sviluppi:

- Il precedente formalismo basato sulla determinazione di una entropia informazionale quantistica potrà essere sviluppato, nell'ambito della Termodinamica Estesa, anche in relazione ad una teoria non locale che includa le *statistiche frazionarie*.
- Utilizzando un approccio in seconda quantizzazione potrà essere considerato un Principio Massima Entropia quantistico in grado di includere gli effetti dovuti allo spin delle particelle. Conseguentemente, questo metodo permetterà di descrivere vari sistemi fisici quali, *metalli ordinari, liquidi di Fermi, Metals-based spintronic devices* e così via.
- Verranno considerati modelli cinetici piú accurati per descrivere i fenomeni di interazioni nei sistemi di particelle identiche. In particolare si cercherà di formulare la Termodinamica Estesa quantistica corrispondente alla BBGKJ gerarchia quantistica per le matrici densità di vario ordine. Infatti, considerando termini, di ordine piú elevato, atti a descrivere le correlazioni fra un numero crescente di particelle nessun insieme esatto di equazioni cinetiche potrà essere ottenuto. Così , a causa della natura delle interazioni, deve essere determinata una gerarchia di equazioni cinetiche (la gerarchia quantistica BBGKY). Questa gerarchia dovrà essere troncata ad un certo livello e ciò potrà essere fatto sulla base di differenti schemi di approssimazione.

La formulazione della Termodinamica Estesa, corrispondente ad una teoria di BBGKJ opportunamente troncata, permetterà di descrivere tutte le dinamiche quantistiche nonlocali (nello spazio e nel tempo) ed in particolari tutti i processi non Markoviani (processi di memoria) delle collisioni, includendo in tal modo, nella rappresentazione di Wigner, gli effetti imputabili alla relazione di indeterminazione energia-tempo ed alla relazione di indeterminazione posizione-impulso.

3 Attività Didattica

- 1) Incaricato (tramite contratto) per l'A.A 1997/98, come docente di *Matematica II* nel corso di diploma in Ingegneria Elettrica, presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Catania.
- 2) Incaricato (tramite contratto) per l'A.A 1998/99, come docente di *Matematica II* nel corso di diploma in Ingegneria Elettrica, presso la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Catania.
- 3) Esercitazioni di *Istituzioni di Matematica*, per l'A.A 2000/01, nel corso di laurea di *Scienze Naturali* presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Sassari.
- 4) Docente (per supplenza) di *Matematica con esercitazioni* per l'A.A. 2001/02, nel corso di laurea in *Biotecnologie* presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Sassari.
- 5) Durante gli A.A 2003/04, 2004/05, 2005/06, 2006/07, 2007/08, ha svolto Esercitazioni e Complementi con numerosi Esami di profitto per le seguenti materie presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Catania:
 - Sistemi Dinamici (C.d.L. in Matematica per le Applicazioni).
 - Equazioni Differenziali della Fisica Matematica (C.d.L. specialistica in Matematica).
 - Fisica Matematica (C.d.L. in Matematica).
 - Ulteriori Abilità Informatiche (C.d.L. in Matematica e Matematica per le Applicazioni).
- 6) Docente durante l'A.A 2004/05 di un corso per il dottorato in "Matematica per le applicazioni". Il corso si è svolto per un totale di circa 30 ore in relazioni a tematiche inerenti i problemi del trasporto di carica nei solidi, teorie cinetiche, teorie macroscopiche con il seguente programma:
Elementi Introduttivi di Meccanica quantistica. Introduzione allo stato cristallino dei solidi. Tipi di struttura cristallina. Reticolo reciproco e reticolo diretto. Proprietà di simmetria. Invarianza traslazionale, rotazionale e corrispondenti operatori associati. Funzioni periodiche e zona ridotta di Brillouin. Modello dell'elettrone libero, potenziale chimico e livello di Fermi. Modello dell'elettrone quasi libero. Struttura a Bande. Metalli, semiconduttori ed isolanti. Massa efficace degli elettroni. Vari tipi di struttura a Bande per elettroni e lacune e loro modellizzazione. Dinamica ed eccitazioni Reticolari. Struttura a bande Fononiche e quantizzazioni delle eccitazioni reticolari. Fononi acustici ed ottici. Equazione del trasporto di Boltzmann ed equazioni dei momenti. Problemi di chiusura. Termodinamica classica e Termodinamica Estesa. Principio di Entropia. Principio di Massima Entropia per gas degeneri. Correlazioni tra i due principi.

- 7) Docente di *Matematica* per l'A.A. 2004/05, nel corso di laurea in *Tecnologie e Pianificazione per il Territorio e l'Ambiente* su affidamento della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Catania.
- 8) Docente di *Matematica* per l'A.A. 2005/06, nel corso di laurea in *Tecnologie e Pianificazione per il Territorio e l'Ambiente* su affidamento della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Catania.
- 9) Docente di *Matematica* per l'A.A. 2006/07, nel corso di laurea in *Tecnologie e Pianificazione per il Territorio e l'Ambiente* su affidamento della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Catania.
- 10) Docente di *Matematica* per l'A.A. 2007/08, nel corso di laurea in *Tecnologie e Pianificazione per il Territorio e l'Ambiente* su affidamento della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. di Catania.
- 11) Docente di *Fondamenti di Meccanica Teorica* per l'A.A. 2008/09, nel corso di laurea *Specialistica in Matematica* (I Semestre).
Docente di *Fondamenti di Meccanica Applicata alla Tecnologia* per l'A.A. 2008/09, nel corso di laurea *Specialistica in Matematica* (II Semestre).
- 12) Docente di *Fondamenti di Meccanica Teorica* per l'A.A. 2009/10, nel corso di laurea *Specialistica in Matematica* (I Semestre).
Docente di *Fondamenti di Meccanica Applicata alla Tecnologia* per l'A.A. 2009/10, nel corso di laurea *Specialistica in Matematica* (II Semestre).