



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI CATANIA  
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI  
CORSO DI LAUREA SPECIALISTICA IN MATEMATICA

A.A. 2008/2009

**Corso mono-disciplinare di: Fondamenti di Meccanica applicata alla Tecnologia**

**Docente:**

Massimo Trovato

tel. 0957383075

fax 0957337055

e-mail: trovato@dmi.unict.it

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

**Obiettivi:**

L'insegnamento si propone di fornire i concetti e gli strumenti di calcolo propri della Fisica-Matematica necessari per la comprensione critica di modelli matematici atti a descrivere:

*i*) i fenomeni di trasporto in gas-dinamica; *ii*) i fenomeni di trasporto in Fisica dello Stato Solido (con particolare riferimento al trasporto degli *hot carriers* ed al trasporto dei *Fononi* nei semiconduttori), confrontando i risultati numerici ottenuti a partire da questi modelli con quelli determinati sia da equivalenti approcci cinetici che dai dati sperimentali disponibili in letteratura.

**Contenuti:**

Strutture cristalline nei solidi: Definizione di cristallo. Reticolo, base reticolare, simmetrie del cristallo. Sistema cubico, tetragonale, ortorombico, monoclinico, triclinico, trigonale, esagonale. Traslazioni primitive, celle elementari, piani reticolari, indici di Miller. Vettori di base del reticolo diretto. Invarianza traslazionale. Operatore di Traslazione. Reticolo reciproco e suoi vettori di base. Proprietà del reticolo reciproco e suoi vettori di base. Distanze tra i piani reticolari. Cella unitaria di Wigner-Seitz. Applicazioni ed esempi. Prima zona di Brillouin. Autovalori ed autofunzioni dell'operatore di Traslazione. Vettori indipendenti nel Reticolo reciproco. Densità degli stati nel reticolo reciproco. Quasi-impulso e legge di conservazione del quasi-impulso. Teorema di Bloch.

Dinamica reticolare e Fononi: Dinamica reticolare in un cristallo. Sviluppo della sua energia Potenziale attorno alla configurazione di equilibrio del cristallo. Approssimazione armonica. Reticolo monoatomico unidimensionale. Reticolo biatomico unidimensionale. Energia cinetica ed energia potenziale in termini delle coordinate e degli impulsi generalizzati degli ioni reticolari. Proprietà generali. Equazioni di Lagrange. Matrice delle forze. Quantizzazione delle osservabili "posizione" ed "impulso". Introduzioni degli operatori di creazione ed annichilazione. Calcolo esplicito della Hamiltoniana. Proprietà generali. Studio delle eccitazioni elementari (Fononi) del cristallo biatomico unidimensionale. Operatore Numero di Fononi. Calcolo dello spettro energetico. Fononi come gas di Bosoni non interagenti. Studio esplicito dello spettro dei Fononi acustici e dei Fononi ottici nel caso unidimensionale ed analisi della relazione di dispersione nella prima zona di Brillouin. Fononi nei cristalli tridimensionali con  $n$  atomi per cella elementare. Approssimazione armonica. Equazioni di Lagrange. Matrice delle forze. Coordinate generalizzate. Quantizzazione. Studio dello spettro energetico della Hamiltoniana e bande per i Fononi ottici ed acustici nei cristalli tridimensionali. Approssimazione anarmonica. Processi di interazione tra fononi di tipo "Normale" e di tipo "Umklapp" in termini degli operatori di creazione e di annichilazione.

Portatori di carica e struttura a bande. Modello degli elettroni liberi di conduzione in un cristallo, energia di Fermi, Potenziale Chimico e proprietà generali. Potenziale periodico in un cristallo. Modello degli elettroni quasi liberi. Sviluppo perturbativo non degenerare all'interno della prima zona di Brillouin. Sviluppo perturbativo degenerare sulla frontiera della prima zona di Brillouin. Descrizione tramite funzioni di Bloch. Diffrazioni alla Bragg sui piani reticolari. Determinazione della struttura a bande dei portatori di carica. Classificazione dei materiali in termini della propria struttura a Bande. Struttura a bande nella zona *Ridotta* di Brillouin e sua rappresentazione *Estesa*. Sviluppo della relazione di dispersione delle bande energetiche attorno alle proprie posizioni estremali. Concetto di massa efficace, tensore di massa efficace inversa, Hamiltoniana efficace. Interpretazione fisica in termini dei fenomeni di diffrazione alla Bragg. Strutture a bande nei semiconduttori per Si, Ge, GaAs. Elettroni nelle bande di conduzione e Lacune nelle bande di valenza. Semiconduttori drogati. Superfici isoenergetiche e loro rappresentazioni nelle varie zone di Brillouin. Modellizzazioni analitiche delle bande di conduzione e di valenza.

Equazione del Trasporto nello Spazio delle Fasi, Termodinamica Estesa e modelli Idrodinamici. Cenni sulla equazione cinetica del trasporto di Boltzmann per la funzione di distribuzione. Campi cinetici e corrispondenti quantità macroscopiche (*momenti della funzione di distribuzione*). Equazioni Idrodinamiche dei *momenti*. Problema della chiusura. Termodinamica Estesa (ET) in gasdinamica. Principio di oggettività materiale, separazione dei momenti in parti convettive e momenti centrali. Principio di Entropia in ET. Principio di Massima Entropia in ET. Formulazione dei due principi, connessioni ed equivalenza nel caso di un singolo gas. Introduzione dei moltiplicatori di Lagrange e loro calcolo esplicito nel caso dei primi 13 momenti (*teoria lineare di Grad*) in gas-dinamica.

Applicazione della ET al trasporto degli hot-carriers nei semiconduttori. Modello con uno schema ad energia totale. Modellizzazione della struttura a bande per l'inclusione degli effetti full-band. Problema della chiusura nel caso dei 13 momenti. Caso lineare e non lineare. Modellizzazioni dei termini collisionali descriventi le interazioni tra elettroni e fononi. Transizioni intervallate ed intravallate nel Si. Fononi di tipo g e di tipo f. Calcolo esplicito delle produzioni collisionali e della chiusura per i flussi delle equazioni Idrodinamiche. Cenni sulla zona di Iperbolicità del sistema. Proprietà del trasporto per i semiconduttori Bulk e per i sistemi spazialmente non omogenei. Adimensionamento delle equazioni idrodinamiche. Implementazione con Matlab delle equazioni nel caso non stazionario per un sistema spazialmente omogeneo con il metodo Runge-Kutta. Utilizzo del pacchetto ODE 15s per problemi numerici stiff. Analisi dei fenomeni di overshoot nei risultati numerici. Cenni sulla analisi di piccolo segnale. Funzioni di risposta del sistema che, raggiunto lo stato stazionario, viene perturbato da un campo elettrico "impulsivo" e/o "oscillante". *Matrice di Risposta* e suoi autovalori, *Mobilità di Corda*, *Mobilità Differenziale* dc e ac. Cenni sui fenomeni di dissipazione degli hot-electrons descritti utilizzando: 1) un arbitrario numero di momenti della funzione di distribuzione nell'ambito di una teoria lineare, 2) i primi 13 momenti nell'ambito di una teoria non lineare. Studio, analisi dei risultati numerici, confronto con il Metodo Monte Carlo e con i dati sperimentali sia per materiali Bulk, che per alcuni dispositivi elettronici 1D al Si.

**CFU: 6**

**Semestre:** secondo

**Modalità di esame:** esame orale (ed eventuale tesina con applicazioni numeriche)

**Testi consigliati:**

*Strutture cristalline nei solidi.- Dinamica reticolare e Fononi. - Portatori di carica e struttura a bande*

- 1) Appunti del Docente
- 2) J.M. Ziman “ I Principi della Teoria dei Solidi”, Tamburini Editore Milano 1975.
- 3) C. Kittel, “Introduzione alla fisica dello stato solido”, ed. Boringhieri, Torino 1986.
- 4) S.A. Davidov "Teoria del Solido" , ed. MIR 1984.

*Equazione del Trasporto nello Spazio delle Fasi, Termodinamica Estesa e modelli Idrodinamici.*

- 1) Appunti del Docente
- 2) I. Muller, T. Ruggeri, “Rational Extended Thermodynamics”. Springer-Verlag (1998).
- 3) P. Markovich, P., A. Ringhofer, C. Schmeiser, “Semiconductor Equations”, Springer, (1989).
- 4) L. Reggiani, *Hot-Electron Transport In Semiconductors*, Topics in Applied Physics, Vol. 58 ~Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- 5) C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* \_Springer-Verlag, Vienna, 1989.