



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

A.A. 2012/2013

Corso mono-disciplinare di: Teoria del trasporto e applicazioni

Docente:

Massimo Trovato

Stanza n.310 Tel. 0957383037

e-mail: trovato@dmi.unict.it

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

Obiettivi:

Il corso è complementare alla II parte (*Elementi di meccanica dei continui - Fluidi viscosi*) del corso di Istituzioni di Fisica Matematica (I anno magistrale). Il corso si propone di fornire i concetti e gli strumenti di calcolo propri della Fisica-Matematica per interfacciare in dettaglio la dinamica dei continui solidi e fluidi con la teoria cinetica ed i modelli microscopici. Rilevanti applicazioni verranno fatte per lo studio di problemi in fisica dello stato solido per il trasporto di fluidi carichi, (con applicazioni ai metalli ed ai semiconduttori). Il corso prevede la possibile risoluzione di concreti problemi numerici in fluidodinamica dei continui confrontando i risultati con equivalenti approcci cinetici e con i dati sperimentali disponibili in letteratura.

Contenuti:

Introduzione e richiami sui principali strumenti matematici utilizzati nel corso: Richiami di *Meccanica classica*. Equazioni di Lagrange e sistemi Lagrangiani. *Introduzione alla Meccanica quantistica*. Osservabili e Operatori. Trasformazioni unitarie ed operatori unitari. Osservabile Posizione. Trasformazioni di simmetria. Traslazioni infinitesime traslazioni finite. Osservabile impulso. Commutatore tra le componenti degli operatori posizione ed impulso. Relazione di indeterminazione. Operatore di evoluzione temporale. Traslazioni temporali infinitesime e finite. Operatore Hamiltoniano. Rappresentazione di Schrodinger. Rappresentazione di Heisenberg. Equazione di evoluzione temporale per gli operatori. Teoria delle perturbazioni.

Teoria del solido: Definizione di cristallo. Reticolo, base reticolare, simmetrie del cristallo. Traslazioni primitive, celle elementari, piani reticolari. Invarianza traslazionale. Operatore di Traslazione. Reticolo diretto, Reticolo reciproco, proprietà generali. 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 in un solido: Dinamica reticolare in un solido. Sviluppo della sua energia Potenziale attorno alla configurazione di equilibrio del solido. Approssimazione armonica. Reticolo monoatomico unidimensionale. Reticolo biatomico unidimensionale. Reticolo tridimensionale con n atomi per cella elementare. Energia cinetica ed energia potenziale in termini delle coordinate e degli impulsi generalizzati. Proprietà generali. Equazioni di Lagrange. Matrice delle forze. Quantizzazione delle osservabili "posizione" ed "impulso". Calcolo esplicito della Hamiltoniana. Proprietà generali. Studio delle eccitazioni elementari (Fononi) del cristallo biatomico unidimensionale: Operatore Numero di Fononi; calcolo dello spettro energetico. Fononi nei cristalli

tridimensionali: Approssimazione armonica, Equazioni di Lagrange; Matrice delle forze; Studio dello spettro energetico della Hamiltoniana. Approssimazione anarmonica. Processi non lineari in un solido. Interazione tra fononi di tipo “Normale” e di tipo “Umklapp” . Capacità termica dei solidi e conduzione del calore: Temperature basse, medie ed alte.

Fluidi carichi in un solido e struttura a bande. Modello degli portatori liberi di conduzione in un cristallo, energia di Fermi, Potenziale Chimico e proprietà generali. Potenziale periodico in un cristallo. Modello per i fluidi carichi quasi liberi. Sviluppo perturbativo. Descrizione tramite funzioni di Bloch. Determinazione della struttura a bande dei portatori di carica. Classificazione dei materiali in termini della propria struttura a Bande: Metalli, isolanti, semimetalli, semiconduttori. Sviluppo della relazione di dispersione delle bande energetiche attorno alle proprie posizioni estremali. Concetto di massa efficace, tensore di massa efficace inversa. Strutture a bande nei semiconduttori per Si, Ge, GaAs. Elettroni nelle bande di conduzione e Lacune nelle bande di valenza. Semiconduttori drogati. Modellizzazioni analitiche delle bande di conduzione e di valenza.

Equazione cinetica del Trasporto e dinamica dei mezzi continui fluidi. Cenni sulla equazione cinetica del trasporto di Boltzmann. Campi cinetici microscopici e corrispondenti quantità macroscopiche (momenti della funzione di distribuzione). Descrizione cinetica di un fluido. Deduzione delle equazioni Idrodinamiche per un fluido e/o una miscela di fluidi a partire dai momenti dell'equazione di Boltzmann. Chiusura ed equazioni costitutive. Fluidi comprimibili ed incomprimibili. Termodinamica Estesa (ET). Principio di oggettività materiale, separazione dei momenti in parti convettive e momenti centrali. Richiami di meccanica statistica e termodinamica dei sistemi continui. Entropia. *Principio di Entropia* in ET. *Principio di Massima Entropia* in ET. Formulazione dei due principi, connessioni ed equivalenza nel caso di un singolo fluido. Moltiplicatori di Lagrange, caso dei primi 13 momenti (*teoria lineare di Grad*) in fluidodinamica.

Dinamica dei fluidi carichi nei semiconduttori. 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 i fenomeni di interazioni. Interazione elettrone-fonone e transizioni intervalle ed intravalle. Calcolo esplicito delle produzioni collisionali e della chiusura per i flussi delle equazioni Idrodinamiche. Zona di Iperbolicità del sistema. Studio delle proprietà del Bulk e dei sistemi spazialmente non omogenei.

Risoluzioni numeriche e simulazioni. 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 ed interpretazione fisica. Analisi dei risultati numerici e confronto con: il Metodo Monte Carlo ed i dati sperimentali sia per materiali Bulk che per alcuni dispositivi elettronici 1D nel Silicio.

CFU: 9

Semestre: primo

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

Testi consigliati:

Richiami di Meccanica classica.

- 1) Appunti del Docente
- 2) H. Goldstein "Meccanica classica" Zanichelli 1971.
- 3) L.D. Landau E. M. Lifshits "Fisica teorica. Vol. 1: Meccanica" Editori Riuniti.

Introduzione alla Meccanica quantistica.

- 1) Appunti del Docente
- 2) S.A. Davidov "Meccanica Quantistica", Edit. MIR 1981.
- 3) J. J. Sakurai "Meccanica Quantistica Moderna" Zanichelli 1990.

Teoria del solido - Dinamica reticolare - Meccanica dei continui.

- 1) Appunti del Docente
- 2) J.M. Ziman "I Principi della Teoria dei Solidi", Tamburini Editore Milano 1975.
- 3) S.A. Davidov "Teoria del Solido", ed. MIR 1984.

Equazione del Trasporto - modelli Idrodinamici - Semiconduttori

- 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) M. Trovato, L. Reggiani . "Maximum entropy principle and hydrodynamic models in statistical mechanics". Rivista del Nuovo Cimento, **35**, pp. 99-266 (2012)