

UNIVERSIDAD DE GRANADA
Facultad de Ciencias
Fecha14/7/03.....
ENTRADA NUM. 2231.....

COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MODELOS CINÉTICOS PARA PARTÍCULAS CARGADAS

UNIVERSIDAD DE GRANADA
01 JUL. 2003
COMISIÓN DE DOCTORADO

MARÍA JOSEFA CÁCERES GRANADOS

BIBLIOTECA UNIVERSITARIA
GRANADA
N.º Documento b14987600
N.º Copia i17832007



Biblioteca Universitaria de Granada



0105544E

La presente memoria, titulada "Comportamiento asintótico y simulación numérica de modelos cinéticos para partículas cargadas", ha sido realizada por María Josefa Cáceres Granados bajo la dirección del Dr. José Antonio Carrillo de la Plata, Investigador ICREA del Departament de Matemàtiques de la Universitat Autònoma de Barcelona, para obtener el título de Doctora en Ciencias Matemáticas por la Universidad de Granada.

V.B. Director

Handwritten signature of José Antonio Carrillo de la Plata. The signature is written in black ink and includes the name "José Antonio" written across the middle of the signature.

Fdo: José Antonio Carrillo de la Plata

La Doctoranda

Handwritten signature of María Josefa Cáceres Granados. The signature is written in black ink and is highly stylized and cursive.

Fdo: María Josefa Cáceres Granados

La presente memoria, titulada "Comportamiento asintótico y simulación numérica de modelos cinéticos para partículas cargadas", ha sido realizada por María Josefa Cáceres Granados bajo la dirección del Dr. José Antonio Carrillo de la Plata, Investigador ICREA del Departament de Matemàtiques de la Universitat Autònoma de Barcelona, para obtener el título de Doctora en Ciencias Matemáticas por la Universidad de Granada.

V.B. Director

La Doctoranda

Fdo: José Antonio Carrillo de la Plata

Fdo: María Josefa Cáceres Granados

*A mis padres,
A mis abuelos,
A Blanca.*

*Si yo pudiera enumerar cuánto debo a mis
grandes antecesores y contemporáneos,
no me quedaría mucho en propiedad.*

Goethe

Gracias a los miembros del Departamento de Matemática Aplicada por proporcionarme un lugar de trabajo que se ha convertido, sin darme cuenta, en mi segunda vivienda.

Gracias a Pascual Jara por ser mi tutor pese a que el destino me llevase a otro departamento.

Gracias a Juan Soler por comentarme la existencia de una beca que decidió mi futuro y marca mi presente.

Gracias a los profesores Anton Arnold y Armando Majorana por haber aceptado valorar esta tesis para la obtención de mención de Doctora Europea.

Gracias a los miembros del tribunal por aceptar pertenecer a él.

Gracias a los profesores Pierre Degond, Jean Dolbeault, Armando Majorana y Giuseppe Toscani por permitirme aprender de ellos en su lugar de trabajo. Así como a todos los miembros de los distintos departamentos con los que pude conversar y discutir durante mis estancias. Muchas gracias a todos por su hospitalidad y dedicación.

Gracias al profesor Thierry Goudon por colaborar conmigo en un ambiente de cordialidad extraordinaria.

Gracias Clement Mohout por las largas y agradables discusiones.

Gracias a "mis compañeros de pasillo" por tocar a la puerta de mi despacho cuando el aire olía a matemática saturada.

Gracias Oscar, gracias Pedro por permitirme aturdirlos con preguntas informáticas y soportar tanta filosofía barata.

Gracias Magda, gracias José por las disertaciones de medianoche.

Gracias a mi familia y amigos por entender mis ausencias y mis malas presencias. Muchas gracias.

Gracias José Antonio por enseñarme tanto, gracias por tu paciencia, gracias por estar siempre. Muchas gracias por todo.

*Gracias a todos aquellos
que se quedaron en mi vida,
a pesar de mis matemáticas
y a todos los que entraron
en ella por las matemáticas.*

Índice general

Índice de tablas	VII
Índice de figuras	IX
Capítulo 1. Introducción	1
1. Ecuaciones cinéticas	1
2. Método de disipación de entropía	4
3. Resultados analíticos	9
4. Simulación numérica para semiconductores	15
Bibliografía	21
Parte 1. Estudio analítico	23
Capítulo 2. Comportamiento asintótico de la ecuación de relajación lineal para partículas cargadas	25
1. Introducción	25
2. Demostración del comportamiento asintótico	30
3. Estimaciones uniformes en tiempo	44
4. Principio del máximo	50
5. Notas finales	53
Bibliografía	57
Capítulo 3. Estabilidad no lineal en L^p para un sistema de partículas cargadas confinado	59
1. Introducción	59
2. Nociones de solución y estados estacionarios	62
3. L^p -estabilidad no lineal	69
4. L^2 -estabilidad no lineal de estados estacionarios Maxwellianos	72
5. Resultados generales de estabilidad no lineal	74
6. Estados estacionarios dependientes de invariantes adicionales	75
7. Apéndice: una propiedad de convexidad de funciones L^1	78
Bibliografía	81

Capítulo 4. Comportamiento asintótico de una ecuación parabólica no lineal de cuarto orden	85
1. Introducción	85
2. Funcionales de entropía revisados	89
3. Convergencia al equilibrio	95
Bibliografía	105
Parte 2. Simulación numérica	107
Capítulo 5. La ecuación de Boltzmann en la teoría de semiconductores	109
1. Los electrones en un cristal semiconductor	109
2. Modelos cinéticos de transporte para semiconductores. La ecuación de Boltzmann	112
3. Modelos aproximados	117
Bibliografía	121
Capítulo 6. Leyes de conservación y métodos numéricos	123
1. Leyes de conservación	123
2. Métodos numéricos	124
Bibliografía	133
Capítulo 7. El límite de Child-Langmuir para semiconductores: una validación numérica	135
1. Introducción	135
2. Repaso del límite de Child-Langmuir	137
3. Simulaciones numéricas	141
4. Conclusiones	144
Bibliografía	157
Capítulo 8. Simulación numérica de dispositivos semiconductores basados en GaAs	159
1. Propiedades principales del transporte de electrones en GaAs	161
2. Cambio de variable	166
3. Esquema numérico	171
4. Simulaciones para el caso de bulk	175
5. Simulación del dispositivo completo	179
6. Conclusiones	186
7. Apéndice: cambio de coordenadas y adimensionalización de la ecuación de Boltzmann	187
Bibliografía	207

Índice de tablas

6.1.	Nodos y pesos para el método de Gauss-Legendre	131
7.1.	Unidades	146
7.2.	Parámetros para Silicio	146
7.3.	Parámetros para GaAs	146
7.4.	Validación del límite Child-Langmuir. Valores de ϵ	146
8.1.	Unidades	180
8.2.	Parámetros	181

Índice de figuras

7.1.	Si a 77K: curvas de corriente-voltaje y potenciales	147
7.2.	GaAs a 77K: curvas de corriente-voltaje y potenciales	148
7.3.	Error relativo de las curvas de corriente-voltaje	149
7.4.	GaAs a 300K: curvas de corriente-voltaje y potenciales	150
7.5.	Densidad de carga en un dispositivo de Si	151
7.6.	Densidad de carga en un dispositivo de GaAs	152
7.7.	Distribución en un dispositivo de Si a 77K	153
7.8.	Distribución en un dispositivo de Si a 300K	154
7.9.	Distribución en un dispositivo de GaAs a 77K	154
7.10.	Velocidad media, energía total, temperatura media y tercer momento en un dispositivo de Si	155
7.11.	Velocidad media, energía total, temperatura media y tercer momento en un dispositivo de GaAs	156
8.1.	Ocupación del electrón	177
8.2.	Energía del electrón	178
8.3.	Velocidad media del electrón versus campo eléctrico	179
8.4.	Velocidad media del electrón versus tiempo	180
8.5.	Modelo $N^+ - N_i - N^+$ de un diodo de GaAs	181
8.6.	Test 1. Campo y potencial eléctricos	182
8.7.	Test 2. Campo y potencial eléctricos	182
8.8.	Test 3. Campo y potencial eléctricos	183
8.9.	Test 1. Distribuciones para valle Γ 1.5 ps y 3 ps	196
8.10.	Test 1. Distribuciones para valle L 1.5 ps y 3 ps	197
8.11.	Test 1. Evolución de la función de distribución Γ en un punto	198
8.12.	Test 1. Evolución de las cantidades macroscópicas	199
8.13.	Test 2. Evolución de las cantidades macroscópicas	200
8.14.	Test 3. Evolución de las cantidades macroscópicas	201
8.15.	Test 1. Cantidades macroscópicas tras 3 ps	202

8.16.	Test 2. Cantidades macroscópicas tras 3 <i>ps</i>	203
8.17.	Test 3. Cantidades macroscópicas tras 3 <i>ps</i>	204
8.18.	Comparaciones concentración de impurezas	205

CAPÍTULO 1

Introducción

$S = k \log W$ esculpida en una lápida vigila la tumba de *Ludwig Boltzmann*, uno de los principales precursores de la Mecánica Estadística, parte de la Mecánica que estudia el paso del *mundo microscópico* al *macroscópico*, de la *reversibilidad* a la *irreversibilidad*.

Casi un siglo y medio ha pasado desde que este ilustre físico-matemático decidiera poner “patas arriba” el mundo científico con su célebre *fórmula de la entropía*, fórmula que estará en la sombra de esta Tesis.

Esta memoria tiene como objetivo el estudio del comportamiento asintótico de ecuaciones cinéticas para partículas cargadas, en una doble vertiente: por un lado nos ocupamos del estudio analítico de propiedades cualitativas de las soluciones; concretamente nos centramos en propiedades de estabilidad y convergencia asintótica y por otro lado, simulamos numéricamente ecuaciones cinéticas, que nos servirán para validar el uso de un límite asintótico y para resolver de modo determinista sistemas cinéticos. Así pues, esta memoria constará de dos partes: una primera parte dedicada al estudio analítico y una segunda parte en la que nos ocuparemos de la simulación numérica.

El estudio analítico de las ecuaciones cinéticas de esta memoria se basará principalmente en el uso del *método de disipación de entropía*.

Las simulaciones numéricas de esta Tesis se centrarán en el sistema de Boltzmann-Poisson en teoría de semiconductores y sus aproximaciones.

1. Ecuaciones cinéticas

La Mecánica Clásica resuelve satisfactoriamente el estudio de la evolución en el tiempo de una partícula. Pensemos por ejemplo en el movimiento de un electrón o una estrella. En cada instante de tiempo t , la partícula queda perfectamente determinada atendiendo a su posición y velocidad. Pero cuando se quiere estudiar la evolución de todo un conjunto de partículas (una nube de electrones, una galaxia . . .) la Mecánica Clásica resulta ineficaz, ya que estudiar en cada instante la posición y velocidad de cada partícula es una tarea ardua, dada la gran cantidad de variables que ello implica (seis veces el número de partículas consideradas). La Estadística aparece como la herramienta que dará solución a este problema: la dinámica del sistema vendrá caracterizada por una descripción estadística del

mismo. Nace de este modo la Mecánica Estadística. Su objeto de estudio no es la posición y velocidad de cada una de las partículas que constituyen el sistema, sino la función de distribución que determina la probabilidad de encontrar una partícula en una determinada posición, con una cierta velocidad y en un instante de tiempo dado. Las *ecuaciones cinéticas* aparecen en este marco como aquellas ecuaciones que rigen el comportamiento de la función de distribución del sistema.

La *función de distribución*, $f(t, x, v)$, gobierna la dinámica del conjunto de partículas, siendo f una función no negativa que depende del tiempo $t \in \mathbb{R}_0^+$, de la posición $x \in \mathbb{R}^N$ y de la velocidad $v \in \mathbb{R}^N$. $f(t, x, v) dx dv$ físicamente se interpreta como la probabilidad de encontrar partículas en el elemento de volumen $dx dv$ centrado en (x, v) , en un instante de tiempo t , en la posición x y con velocidad v . Para que todo tenga sentido debemos suponer que un dominio acotado en el espacio de fase contiene una cantidad de materia finita, es decir, $f \in L_{loc}^1(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$.

El movimiento del conjunto de partículas se ve afectado por dos hechos:

- Principio de Newton.
- Colisiones.

El principio de Newton nos dice que la función de distribución tiene que ser constante a lo largo de las trayectorias seguidas por las partículas. Estas trayectorias, según la segunda Ley de Newton, verifican:

$$\dot{X} = \frac{dX}{dt} = V, \quad \dot{V} = \frac{dV}{dt} = -\nabla_x \phi(t, X),$$

donde $E(t, x) = -\nabla_x \phi$ es el campo, originado por un potencial ϕ , que actúa sobre las partículas. Por tanto,

$$0 = \frac{d}{dt} f(t, X(t), V(t)) = \partial_t f + V(t) \cdot \nabla_x f + E(t, X) \cdot \nabla_v f,$$

verificándose así la ecuación de transporte:

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(t, x) \cdot \nabla_v f = 0.$$

Esta ecuación aparece en la literatura con el nombre de *ecuación de transporte* o *ecuación de evolución de Liouville* o *ecuación lineal de Vlasov*. Su pérdida de linealidad puede venir por dos caminos: por una relación del potencial con la función de distribución, lo que se traduce en un acoplamiento de esta ecuación de transporte con otra en la que se muestra la dependencia entre potencial y función de distribución, o por la inclusión de un término no lineal en el lado derecho.

De entre todos los conjuntos inmensos de partículas que son estudiados mediante la Mecánica Estadística (partículas cargadas, moléculas, estrellas, granos de arena . . .) en esta memoria nos concentraremos en las primeras, partículas cargadas, que si se prefiere, para fijar ideas, podemos imaginar como electrones. El resto de esta sección se dedicará a la presentación de las ecuaciones que dictarán la dinámica de los sistemas de partículas cargadas presentados en esta memoria.

El acoplamiento con otra ecuación, en nuestro caso, se deberá a la ecuación de Poisson, cuyo origen se entiende en la ley de Coulomb, que muestra la interacción entre partículas cargadas. El sistema obtenido es

$$(1.1.1) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(t, x) \cdot \nabla_v f = 0,$$

$$(1.1.2) \quad -\Delta_x \phi(t, x) = \rho(t, x), \quad \rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} f(t, x, v) dv,$$

conocido como **sistema de Vlasov-Poisson en plasma físico** o **sistema de Vlasov-Poisson en el caso electrostático**, donde $\rho(t, x)$ es la densidad espacial de partículas. El sistema de Vlasov-Poisson en el caso electrostático ocupará el Capítulo 3 de esta memoria, en el que estudiaremos una familia de estados estacionarios para la que probaremos su estabilidad no lineal.

La segunda posibilidad de pérdida de linealidad de la ecuación de Vlasov, es incluir un término (no nulo y no lineal) en el lado derecho de la igualdad. El término que se añade, $Q(f, f)$ se conoce como *término de colisión* y la ecuación (1.1.1) se transforma en

$$(1.1.3) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(t, x) \cdot \nabla_v f = Q(f, f).$$

En esta ecuación tenemos representados los dos fenómenos que gobiernan la evolución de la función de distribución: transporte y colisiones. El estudio del operador de colisión se debe a Boltzmann (que lo introdujo para dinámica de gases), por lo que se conoce con el nombre de *operador de colisión de Boltzmann*. La ecuación de Vlasov tiene en cuenta sólo interacciones de partículas a distancias grandes. El operador de colisión cubre este hueco, ya que modeliza las interacciones entre las partículas a distancias cortas y las interacciones de las propias partículas con el medio. Siendo estas últimas las más relevantes en *teoría de semiconductores*. Usando el **principio de exclusión de Pauli**: *dos electrones no pueden ocupar el mismo estado (posición y velocidad) en el mismo instante de tiempo*, se deriva la expresión no lineal de operador de colisión. Este operador en el estado (t, x, v) , ofrece un balance entre la suma de probabilidades de que cualquier estado (t, x, v') pase al estado (t, x, v) (término de ganancia) y la suma de las probabilidades de que el estado (t, x, v) pase a cualquiera de los estados (t, x, v') (término de pérdida), tras las interacciones. En muchos dispositivos de semiconductores la función de distribución de probabilidad f , es pequeña por lo que a menudo se desprecian los términos cuadráticos del operador de colisión, linealizando de este modo $Q(f) = Q(f, f)$.

En el Capítulo 2 consideraremos la siguiente aproximación lineal del operador Q ,

$$(1.1.4) \quad Q(f) = \frac{1}{\tau}(\rho M_\theta - f), \quad M_\theta(v) = \frac{e^{-v^2/2\theta}}{(2\pi\theta)^{N/2}},$$

conocido como **operador de relajación**. Entonces la ecuación (1.1.3) se reescribe como

$$(1.1.5) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(x) \cdot \nabla_v f = \frac{1}{\tau}(\rho M_\theta - f), \quad E(x) = -\nabla_x \phi(x),$$

que es lineal puesto que el potencial es dado y el operador de colisión es lineal. El comportamiento asintótico de esta ecuación será estudiado en el Capítulo 2.

Otras posibles aproximaciones de la ecuación de Boltzmann se obtienen, analizando las cantidades macroscópicas: *densidad*, *velocidad media* y *energía*, mediante los sistemas clásicos hidrodinámicos. Estos sistemas surgen como consecuencia del estudio de los *momentos* y la suposición de hipótesis que cierren el sistema. Los límites de tipo difusivo proporcionan otra familia de aproximaciones para la ecuación de Boltzmann

La última ecuación que estudiaremos, desde el punto de vista analítico, será una ecuación que modela la concentración de electrones en un dispositivo de semiconductores descrito a nivel cuántico, (concretamente un modelo de arrastre-difusión, "drift-diffusion") con temperatura cero y campo eléctrico despreciable,

$$(1.1.6) \quad \partial_t f = -(f(\log f)_{xx})_{xx}.$$

Analizaremos, en el Capítulo 4, el comportamiento asintótico para el problema de valores iniciales asociado a esta ecuación con condiciones frontera periódicas.

El nexo de unión entre estos tres problemas es el método de disipación de entropía, por lo que le dedicaremos la siguiente sección.

2. Método de disipación de entropía

Consideremos la ecuación de Boltzmann para dinámica de gases [9]:

$$(1.2.1) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f), \quad t \geq 0, x \in \mathbb{R}^N, v \in \mathbb{R}^N.$$

y el funcional de Boltzmann

$$(1.2.2) \quad H(f) = \int_{\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N} f \log f \, dx \, dv,$$

Entonces, se verifica

$$(1.2.3) \quad \frac{d}{dt} H(f(t, \cdot, \cdot)) = - \int_{\mathbb{R}^N} \left(- \int_{\mathbb{R}^N} Q(f, f) \log f \, dv \right) dx \leq 0.$$

La desigualdad (1.2.3) es el conocido **H-teorema de Boltzmann** [6], que nos dice que el funcional H es decreciente en tiempo, evidenciando de este modo, la irreversibilidad de la ecuación.

El H-teorema es otra forma de escribir la **segunda ley de la termodinámica**: *la entropía física de un sistema aislado no debería decrecer en tiempo*. La entropía física es el opuesto del funcional H . La ecuación de Liouville representa un sistema reversible, ya que la entropía es constante. Pero la presencia del operador de colisión provoca un incremento en la entropía física (una disminución en H) y como consecuencia el paso a la irreversibilidad.

¿Cómo puede ayudarnos el H-teorema en el estudio del comportamiento asintótico de nuestras ecuaciones?

En los sistemas con colisiones suele ser usual que evolucionen hacia un estado de equilibrio cuando avanza el tiempo. Los estados estacionarios aparecen como mínimos de ciertos funcionales, que llamaremos *funcionales de Lyapunov* o *funcionales de entropía*, bajo la restricción de la conservación de la masa:

$$\int_{\mathbb{R}^{2N}} f(t, x, v) d(x, v) = \int_{\mathbb{R}^{2N}} f(0, x, v) d(x, v), \quad \forall t \geq 0.$$

Desde el punto de vista matemático nos inquieta conocer la evolución de la solución hacia esos estados de equilibrio. La primera pregunta que nos hacemos es: *¿convergerá la solución hacia el estado estacionario? y de ser así, ¿con qué velocidad?*. Cuando a esta pregunta no podamos dar respuesta, nos conformaremos con estudiar la *estabilidad* de los estados estacionarios, es decir, acotar la distancia de la solución al estado estacionario, en todo instante, en términos de la proximidad del dato inicial a dicho estado.

Puesto que el funcional de entropía $H(f)$, es no negativo y el estado estacionario, que denotaremos f_∞ , es un mínimo de H encontramos que

$$H(f|f_\infty) = H(f) - H(f_\infty) \geq 0.$$

Por tanto, podemos “evitar la tentación matemática” de medir la “proximidad” de $f(t)$ al estado estacionario f_∞ , mediante la norma L^1 y considerar la cantidad $H(f|f_\infty)$, que llamaremos *entropía relativa de f a f_∞* como indicativo de la distancia de $f(t)$ a f_∞ . En este sentido podríamos decir que estamos estudiando una *convergencia en términos de la entropía relativa*.

Una vez decididos a estudiar la evolución del sistema en términos de la entropía relativa necesitamos analizar el comportamiento de este funcional, en el tiempo. Por tanto deberemos conocer

$$\frac{d}{dt}H(f|f_\infty) \quad \text{o equivalentemente,} \quad \frac{d}{dt}H(f).$$

Es usual denotar,

$$D(f) = -\frac{d}{dt}H(f),$$

Donde D es el *funcional de disipación de entropía* o *producción de entropía* y por supuesto no negativo. De este modo se recupera el H-teorema:

$$(1.2.4) \quad \frac{d}{dt}H(f|f_\infty) \leq 0$$

La desigualdad (1.2.4) nos informa de la disipación de la entropía, es decir, del no crecimiento de la misma. Recordemos que físicamente el funcional de entropía es de signo opuesto a la entropía que nosotros estamos considerando. Adoptamos esta notación porque es la extendida en el campo matemático.

Dado que f_∞ es el mínimo de la entropía, físicamente la desigualdad (1.2.4) debe interpretarse como un indicativo de la proximidad o lejanía de la solución, en el instante de tiempo t , al estado estacionario. Puesto que la entropía es decreciente si en un instante t_0 , $f(t_0)$ está lejos de f_∞ la desigualdad (1.2.4) nos dice que $H(f(t)|f_\infty)$ tiene que decrecer bastante hasta alcanzar el estado estacionario.

¿Cómo expresar matemáticamente esta idea?. Volvamos a observar (1.2.4), queremos cuantificar el decaimiento de la entropía relativa, por lo que nos gustaría tener una estimación mucho más exacta de $-D(f)$, necesitamos una cota superior, mucho más precisa que cero: *no se conserva la entropía, pero ... ¿cómo de irreversible se ha vuelto nuestro sistema?*. Nuestro problema se facilitaría si pudiésemos encontrar una relación del tipo

$$(1.2.5) \quad -D(f) \leq -F(H(f|f_\infty)),$$

Donde $F \mapsto F(E)$ es alguna función continua, estrictamente positiva cuando $E > 0$. Por tanto obtenemos la desigualdad diferencial:

$$(1.2.6) \quad \frac{d}{dt}H(f(t)|f_\infty) \leq -F(H(f(t)|f_\infty)),$$

que prueba que la relación de entropía de $f(t)$ a f_∞ se hace cero cuando el tiempo tiende a infinito.

La siguiente pregunta natural, es *¿con qué velocidad $f(t)$ tiende a f_∞ , en términos de la entropía relativa?* La respuesta depende de la bondad de F . Por ejemplo, una función F lineal traduciría (1.2.5) en

$$-D(f) \leq -\lambda H(f|f_\infty), \quad \lambda > 0$$

que nos daría una convergencia exponencial al estado de equilibrio y con la misma velocidad que $e^{-\lambda t}$ converge a cero. Una función "casi lineal" nos daría una convergencia "casi exponencial", concretamente, si

$$F(H(f|f_\infty)) = \lambda H(f|f_\infty)^{1+\epsilon}, \quad \lambda, \epsilon > 0,$$

entonces,

$$-D(f) \leq -\lambda H(f|f_\infty)^{1+\epsilon}, \quad \lambda, \epsilon > 0,$$

lo que implica una velocidad polinomial al estado de equilibrio, es decir, cuando el tiempo tiende a infinito, $f(t)$ converge a f_∞ con velocidad $O(t^{-1/\epsilon})$.

En resumen, lo que nos dice la desigualdad (1.2.5) es que la producción de entropía controla a la entropía relativa, de modo que podemos conocer de una forma precisa la evolución de la entropía relativa de $f(t)$ al estado de equilibrio f_∞ y de este modo medir la convergencia al equilibrio.

Pero, en la mente de un matemático, puede quedar un “pero” por haber medido la convergencia en términos del funcional de entropía, en lugar de la siempre bien conocida norma L^1 , pese a que los físicos traten de convencerlo de que, para ellos, ésa es una medida mucho “más correcta” que la norma L^1 . Afortunadamente para el matemático, es muy corriente que la convergencia entrópica implique convergencia en L^1 . Como sucede en el caso del funcional H , en el que se tiene la famosa **desigualdad de Csiszár-Kullback-Pinsker**, [1]

$$\frac{1}{2} \|f - g\|_{L^1}^2 \leq \int f \log \frac{f}{g} = H(f|g),$$

donde f y g son dos funciones de distribución arbitrarias, verificando $f, g \geq 0$, $\|f\|_{L^1} = \|g\|_{L^1} = 1$.

Lo que se ha hecho hasta aquí, es una argumentación puramente discursiva de la evolución de las soluciones de la ecuación de Boltzmann (1.2.1). Para referencias sobre argumentos rigurosos remitimos al siempre agradable libro de C. Villani, [12], en el que se pueden encontrar exquisitas disertaciones sobre todos los temas tratados hasta el momento en esta memoria. Este mismo razonamiento, que podemos entenderlo como el **método de disipación de entropía**, puede repetirse en situaciones distintas: ecuaciones cinéticas de tipo Boltzmann, medios granulares, ecuaciones de difusión no lineal, ...

Por otro lado, una amplia gama de funcionales de entropía, susceptibles de serles aplicado el método de disipación de entropía, pueden encontrarse en [2, 8]. Se prueban desigualdades que relacionan la entropía relativa con la producción de entropía, paso que como hemos visto, resulta crucial para el estudio de la evolución del sistema. Resaltamos aquí, por su interpretación física la **desigualdad logarítmica de Stam-Gross Sobolev**

$$I(f|M) \geq 2H(f|M),$$

donde M es una función Gaussiana usual e I es la **información relativa de Fisher**

$$I(f|M) = \int_{\mathbb{R}^N} f \left| \nabla_v \log \frac{f}{M} \right|^2,$$

que es la *producción de entropía* para la ecuación de Fokker-Planck lineal, D . Físicamente (salvo signo), la entropía que se obtiene es el funcional H de Boltzmann, pero en [2], podemos ver que toda una familia de funcionales nace de un modo natural. Así, en el Capítulo 2 usaremos la entropía cuadrática para estudiar la evolución de nuestro sistema. (Ver Sección 3, para más detalles).

Pero, ¿qué ocurre cuando no hay forma de relacionar la producción de entropía con la entropía relativa, al menos no de una forma tan buena como (1.2.5)? Esto será lo que sucederá en el Capítulo 2, en el que consideraremos una aproximación lineal no homogénea de la ecuación de Boltzmann. La dependencia en espacio hace que aparezcan estados de equilibrio *locales*, es decir, funciones de distribución que están en equilibrio con respecto a la variable de velocidad, pero no necesariamente en la variable de posición.

Para estos estados la producción de entropía es cero, por lo que no podemos esperar una desigualdad entre la entropía y la producción de entropía. Si en algún instante de tiempo dado, el sistema alcanza un estado de equilibrio local, en ese instante la producción de entropía es cero, lo que supondrá un retraso en el tránsito al estado de equilibrio global, ya que cada paso por un estado local supone una parada en el decrecimiento de la entropía.

Por otro lado, atendiendo a los términos de la ecuación (transporte y confinamiento y colisiones), encontramos que cuando el sistema alcanza un estado de equilibrio local, el efecto conjunto del transporte y el confinamiento lo obligará a salir de ese estado local de equilibrio, a no ser que ese estado sea efectivamente un estado de equilibrio global. El comportamiento asintótico del sistema se traduce en una lucha entre los efectos combinados, del transporte y el confinamiento y del operador de colisiones: las colisiones seleccionan los estados de equilibrio, y fuerzan al sistema a permanecer en esta situación, mientras que la parte de transporte y confinamiento, empuja al estado a salir del equilibrio local y continuar buscando el estado de equilibrio global.

¿Cómo podemos cuantificar ese efecto del transporte? La respuesta a esta pregunta la dieron Desvilletes y Villani, en un refinamiento del método de disipación de entropía, explicado arriba. Ellos mostraron este procedimiento aplicado al estudio del comportamiento asintótico de la ecuación lineal no homogénea de Fokker-Planck. El método es muy robusto, como prueba el hecho de que haya sido aplicado a diferentes sistemas. Nosotros lo usaremos en el Capítulo 2, para el estudio de la ecuación lineal de relajación con potencial confinante.

La idea de Desvilletes y Villani es cuantificar por separado la distancia de la solución, tanto a los equilibrios locales, como al equilibrio global. Esa distancia se mide por medio de la entropía relativa; entropía relativa de la solución al estado local, H_{loc} y entropía de la solución al estado de equilibrio global, H_{glo} . El paso

siguiente es buscar una relación entre estos funcionales, analizando un sistema de desigualdades diferenciales.

La primera desigualdad es la que estudia la disipación de entropía, cantidad que relacionamos con la entropía local:

$$-\frac{d}{dt}H_{glo} \geq \kappa H_{loc}.$$

Esta primera desigualdad claramente, nos está pidiendo que estudiemos la evolución en tiempo de H_{loc} y además nos informa de que cuando la disipación de entropía se hace cero, también es cero la entropía local y su derivada en tiempo. Por tanto, tenemos que irnos a estudiar la segunda derivada en tiempo de H_{loc} . Tras un estudio exhaustivo de $\frac{d^2}{dt^2}H_{loc}$ en el que suponen acotaciones de la solución, regularidad uniforme y condiciones para garantizar la desigualdad logarítmica de Sobolev obtenien la segunda desigualdad diferencial

$$\frac{d^2}{dt^2}H_{loc} \geq \kappa' H_{glo} - C_\epsilon H_{loc}^{1-\epsilon}, \quad \epsilon \in (0, 1)$$

Finalmente el sistema de desigualdades obtenido:

$$\begin{cases} -\frac{d}{dt}H_{glo} \geq \kappa H_{loc}. \\ \frac{d^2}{dt^2}H_{loc} \geq \kappa' H_{glo} - C_\epsilon H_{loc}^{1-\epsilon}, \quad \epsilon \in (0, 1) \end{cases}$$

prueba (resultado de Desvillettes y Villani) que la entropía global converge a cero con orden de convergencia $O(t^{1-1/\epsilon})$.

3. Resultados analíticos

En esta sección recogemos de una forma resumida los resultados que ya hemos esbozado anteriormente y que ocuparán la primera parte de esta memoria. Decir, como una nota preliminar que el objetivo de la primera parte de esta memoria, como ya hemos dicho, es el estudio analítico del comportamiento asintótico de ciertos sistemas cinéticos. Por ello, en todos nuestros problemas hacemos una recopilación previa de los resultados de existencia y propiedades conocidas, sin entrar en detalles exhaustivos.

3.1. Orden de convergencia para la ecuación de relajación lineal, con potencial confinante. Comenzaremos esta memoria con una aplicación directa del método de disipación de entropía explicado en la sección anterior. El objetivo del Capítulo 2 es el estudio del comportamiento asintótico de una ecuación de tipo Boltzmann lineal no homogénea. Donde el operador de colisión considerado es una aproximación lineal del operador real de Boltzmann. Concretamente trabajamos con el operador de relajación hacia la distribución Maxwelliana con media cero y temperatura del retículo fija (1.1.4). Supondremos la presencia de

un potencial confinante ϕ_e , que obligue al sistema a tener un estado estacionario. Consideramos el problema de valores iniciales:

$$(1.3.1) \quad \begin{cases} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(x) \cdot \nabla_v f = \frac{1}{\tau}(\rho M_\theta - f), & E(x) = -\nabla_x \phi_e(x). \\ f(0, x, v) = f_0(x, v) \end{cases}$$

Obtendremos el siguiente resultado

TEOREMA 1.3.1. *Bajo ciertas hipótesis para ϕ_e . Sea f_0 verificando*

$$(1.3.2) \quad a f_s \leq f_0 \leq A f_s,$$

para algún $0 < a < A$, $f_0 \in C^\infty(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, con todas sus derivadas acotadas. Sea f la solución de (1.3.1). Supongamos que f tiene todas sus derivadas $\partial_{x,v}^\alpha f$, $\alpha \in \mathbb{N}^{2N}$, acotadas uniformemente en tiempo. Entonces, para todo $\varepsilon > 0$ y $t > 0$

$$\|f(t) - f_s\|_{L^1(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)} \leq C_\varepsilon(f_0) t^{-1/\varepsilon}$$

donde $C_\varepsilon(f_0)$ depende de ε , del dato inicial y de las acotaciones de las derivadas de f y el estado estacionario es

$$f_s(x, v) = z e^{-\Phi_e(x)/\theta} M_\theta(v), \quad z = \left(\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\Phi_e(x)/\theta} dx \right)^{-1}.$$

La herramienta para demostrar este teorema será el método de disipación de entropía propuesto por Desvillettes y Villani en [10], explicado en la Sección 2. Las diferencias principales con [10] para el operador de Fokker-Planck son:

- La entropía elegida en nuestro caso, (frente a la entropía logarítmica usada para Fokker-Planck), es la entropía cuadrática:

$$\begin{cases} H_{glo}(f|f_s) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f - f_s|^2 \frac{1}{f_s} dv dx, \\ H_{loc}(f|\rho M_\theta) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta|^2 \frac{1}{f_s} dv dx \end{cases}$$

ρM_θ es un estado local.

La elección de esta entropía, en lugar de la físicamente usual, nos proporciona una simplicidad en los cálculos que con la entropía logarítmica parecían complicarse excesivamente. Además se tiene la siguiente relación entre ambas entropías,

$$H_{log}(f|f_s) \leq K H_{glo}(f|f_s)^{1/2}.$$

Por tanto la convergencia en la entropía cuadrática implica la convergencia en la entropía logarítmica.

- La desigualdad logarítmica de Sobolev se traduce, en nuestro caso, en la correspondiente desigualdad cuadrática que relaciona la entropía con la producción entrópica, [2].

- Las estimaciones uniformes en tiempo de las derivadas de la solución no son, en absoluto evidentes, y las hemos considerado como una hipótesis a priori para el desarrollo del estudio asintótico, dando una demostración de las mismas, sólo en el caso del potencial armónico.

Incluso en el caso de Fokker-Planck estas estimaciones no son triviales, donde el efecto regularizante de la velocidad de difusión permite una regularidad C^∞ , independientemente de la regularidad del dato inicial. Nuestro problema no es la regularidad y acotaciones de las derivadas, que se obtienen cuando se suponen el dato inicial y las características regulares, usando el lema de Gronwall, el problema aparece cuando las acotaciones las queremos independientes del tiempo.

3.2. Estabilidad no lineal de una familia de estados estacionarios del sistema de Vlasov-Poisson para partículas cargadas. En el Capítulo 3 nos ocupamos del estudio de la estabilidad no lineal de ciertas soluciones estacionarias para el sistema de Vlasov-Poisson en el caso electrostático, (ver Sección 1, como es usual consideramos dimensión 3, $N = 3$, aunque todo lo que se prueba es independiente de la dimensión), donde supondremos la presencia de un potencial externo confinante ϕ_e , que permita la existencia de estados estacionarios:

$$(1.3.3) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + E(t, x) \cdot \nabla_v f = 0, \quad E(t, x) = -(\nabla_x \phi + \nabla_x \phi_e).$$

Resultados de existencia de soluciones, son conocidos y se deben a Pfaffelmoser, Schaeffer, Hörst: *soluciones clásicas*, Arsen'ev, Hörst-Hunze, Lions-Perthame: *soluciones débiles*, (debemos decir que la soluciones de Lions y Perthame son conocidas como *soluciones fuertes*, aunque son soluciones en el sentido distribucional, ya que para ellas se dispone de más desigualdades de interpolación) y Diperna-Lions: *soluciones renormalizadas*. Nosotros trabajaremos en el marco de soluciones débiles y renormalizadas.

Por encima de los resultados de estabilidad que se presentarán en este capítulo, nos gustaría destacar la idea que subyace en todo el capítulo: la relación entre estados estacionarios y funcionales de entropía.

El problema surge, a raíz de cuestionarnos, la estabilidad para el estado Maxwelliano, estado que sabíamos asintóticamente estable en $L^1(\mathbb{R}^6)$ para el sistema de Vlasov-Poisson-Fokker-Planck (Bouchut-Dolbeault, Bonilla-Carrillo-Soler, Dolbeault). La herramienta a utilizar sería un funcional de Lyapunov, siendo para el estado Maxwelliano el candidato ideal la entropía. La desigualdad de Csiszár-Kullback nos daría la estabilidad de este estado en la norma L^1 . Las siguientes preguntas naturales eran: ¿qué ocurre en otras normas?, ¿qué tiene de "especial" el estado estacionario Maxwelliano para que el funcional de entropía ofrezca su estabilidad? Entonces nos encontramos, como algo natural, toda una familia de

estados estacionarios, para los que les podíamos asociar un funcional de Lyapunov que probaba su estabilidad en la norma L^p con $p \in [1, 2]$. Siendo además, esta relación entropía-estado estacionario explícita, ya que el estado estacionario es el mínimo del funcional de entropía.

El resultado principal en esta dirección podemos resumirlo como sigue:

TEOREMA 1.3.2. *Sea f una solución débil del sistema de Vlasov-Poisson considerado, con condición inicial f_0 . Bajo ciertas condiciones (sobre f_0 , σ y el potencial confinante, ϕ_e), que garantizan la existencia de solución del sistema y del estado estacionario, si $\inf_{s \in (0, +\infty)} \sigma''(s)/s^{p-2} > 0$ para algún $p \in [1, 2]$, entonces existe una constante explícita $C > 0$, que depende sólo de f_0 , tal que para cualquier $t > 0$, $f = f(t)$ satisface:*

$$\|f - f_\infty\|_{L^p}^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^6} [\sigma(f_0) - \sigma(f_\infty) - \sigma'(f_\infty)(f_0 - f_\infty)] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla(\phi_0 - \phi_\infty)|^2 dx$$

donde $(f_\infty(x, v) = \gamma(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e(x) + \phi_\infty(x)), \phi_\infty)$ es una solución estacionaria del sistema de Vlasov-Poisson, γ es la inversa generalizada de $-\sigma'$ (eventualmente extendida por 0) y σ es una función convexa (γ decreciente). ϕ_0 es el potencial inicial.

La distancia de la solución al estado estacionario, medida en la norma L^p , es acotada por la distancia del dato inicial al estado estacionario en términos de la entropía relativa. Donde al término de la derecha de la desigualdad, salvo la constante C , le llamaremos entropía relativa del dato inicial al estado estacionario. Este teorema nos da la estabilidad no lineal, en la norma L^1 , de la Maxwelliana, eligiendo $\sigma(s) = s \log s - s$. En este caso, el funcional de entropía es la suma de la entropía física y la energía del sistema.

La asociación entre dos familias, una de estados estacionarios y otra de funcionales de entropía, viene dada por la relación entre las funciones γ y σ .

El Teorema 1.3.2 no nos da información sobre la estabilidad del estado Maxwelliano para una norma distinta de L^1 , puesto que no se verifica la hipótesis sobre el ínfimo de $\sigma''(s)/s^{p-2}$ (donde $\sigma(s) = s \log s - s$). Este problema lo resolveremos "truncando" el funcional de entropía propuesto arriba, aprovechando la acotación uniforme de los estados estacionarios. Concretamente probamos

TEOREMA 1.3.3. *Bajo hipótesis que garantizan la existencia de solución y del estado estacionario Maxwelliano, se verifica que existe un funcional convexo \mathcal{F} , que alcanza su mínimo en $f = f_\infty$ y tal que cualquier solución débil del problema de valores iniciales (siendo f_0 el dato inicial) satisface*

$$\|f(t, \cdot) - f_\infty\|_{L^2}^2 \leq \mathcal{F}[f_0],$$

donde

$$f_\infty(x, v) = \frac{e^{-|v|^2/2}}{(2\pi)^{3/2}} \rho_\infty(x), \quad -\Delta\phi_\infty = \rho_\infty = \|f_0\|_{L^1} \frac{e^{-(\phi_\infty + \phi_e)}}{\int e^{-(\phi_\infty + \phi_e)} dx}.$$

Debemos notar que, aunque el enunciado de los teoremas se haya hecho con soluciones débiles algunos de nuestros resultados son extrapolables a soluciones renormalizadas (Diperna-Lions), noción de solución aún más débil que la de solución débil.

La referencia más relevante para este problema es [5]. En este trabajo Braasch, Rein y Vukadinović consideran soluciones clásicas, para el problema de Cauchy y estados estacionarios de soporte compacto en la variable de energía y dependientes de invariantes adicionales del movimiento de las partículas. La aportación de nuestro trabajo en esta dirección radica en una extensión de sus resultados a soluciones más generales: soluciones débiles y renormalizadas, y a estados estacionarios no necesariamente de soporte compacto en energía, por ejemplo el estado Maxwelliano. Así mismo, nuestros resultados son completamente extrapolables a estados estacionarios dependientes de energía y de otros invariantes del movimiento, sin necesidad de que esta dependencia se refleje en una factorización del estado (producto de dos funciones, una dependiente de energía y la otra del invariante adicional), como ocurría en [5]. Por último, obtenemos acotaciones de estabilidad en espacios L^q con $1 \leq q \leq 2$ (en [5] sólo se daban para $q = 2$).

3.3. Comportamiento asintótico de una ecuación de difusión no lineal de cuarto orden. El último capítulo de la primera parte de esta memoria, Capítulo 4, se dedicará al estudio del comportamiento asintótico de una ecuación parabólica no lineal de cuarto orden, donde la no linealidad es de tipo logarítmica. Concretamente estudiamos la evolución, en el tiempo, del siguiente problema:

$$(1.3.4) \quad f_t = -(f(\log f)_{xx})_{xx},$$

$$(1.3.5) \quad f(0, x) = f_0(x) \in H_+^1(S^1),$$

donde $x \in X$ y $t \in \mathbb{R}^+$, con $X = S^1$ parametrizada por una variable x que satisface $0 \leq x \leq 1$. La ecuación (1.3.4), bajo ciertas condiciones, puede ser escrita equivalentemente como

$$f_t = -f_{xxxx} + \left(\frac{f_x^2}{f} \right)_{xx},$$

esta ecuación surge como un límite asintótico en el estudio de un sistema cuántico con spin (Derrida-Lebowitz-Speer-Sphon), y también modela la concentración de electrones en una descripción cuántica para semiconductores con temperatura cero y campo eléctrico despreciable (Jüngel-Pinnau).

Los primeros en estudiar este problema fueron Bleher, Lebowitz y Speer en [4]. Probaron existencia local en tiempo para datos iniciales estrictamente positivos y existencia global (en tiempo) para datos iniciales “pequeños”. Mostrando, en este último caso, convergencia al estado estacionario $\bar{f}_0 = \int_{S^1} f_0$, sin estimar su velocidad de convergencia.

Siguiendo los resultados numéricos dados por Carrillo, Jüngel y Tang, uno puede conjeturar la convergencia exponencial hacia los estados estacionarios para las soluciones globales (en tiempo) del problema (1.3.4)-(1.3.5), con condiciones frontera periódicas.

En el Capítulo 4, probamos esta conjetura para datos iniciales “pequeños”. Concretamente,

TEOREMA 1.3.4. *Sea $f_0 \in H_+^1(S^1)$ tal que*

$$(H) \quad \int_{S^1} \frac{f_x^2(0, x)}{f^2(0, x)} dx < 12,$$

y sea $f(t, x)$ la solución de (1.3.4)-(1.3.5). Entonces:

- (a) *El problema de valores iniciales (1.3.4)-(1.3.5) tiene una única solución global en tiempo.*
- (b) $\int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} dx$ *converge exponencialmente a 0, cuando $t \rightarrow \infty$.*
- (c) $\|f(t) - \bar{f}_0\|_{H^1(S^1)}$ *converge exponencialmente a 0, cuando $t \rightarrow \infty$.*

La clave para probar este teorema es reescribir la ecuación (1.3.4) en términos del logaritmo de la solución:

$$(1.3.6) \quad \alpha_t = -(\alpha_{xxxx} + 2\alpha_x \alpha_{xxx} + \alpha_{xx} \alpha_x^2 + \alpha_{xx}^2) = -e^{-\alpha} (e^\alpha \alpha_{xx})_{xx}.$$

Donde $\alpha(t, x) = \log f(t, x)$. En este nuevo marco de trabajo, encontramos las condiciones idóneas para probar nuestro resultado y podemos recuperar el estudio hecho en [4] de funcionales de entropía.

El Teorema 1.3.4 nos proporciona una información adicional; para cualquier $p \in [1, 2]$, $\|f\|_{L^p(S^1)}$ converge exponencialmente hacia \bar{f}_0 . Para un rango inferior de p , en concreto para $1 \leq p \leq 4/3$, probaremos que esta convergencia exponencial hacia el equilibrio se mantiene sin necesidad de suponer (H), sin más que suponer condiciones sobre el dato inicial que garanticen la existencia global de solución. Este resultado lo recogemos en el siguiente teorema

TEOREMA 1.3.5. *Sea f una solución global del problema de valores iniciales (1.3.4)-(1.3.5), entonces, para $1 \leq p \leq 4/3$*

$$(1.3.7) \quad 0 \leq \int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \leq \left(\int_{S^1} f_0^p dx - \bar{f}_0^p \right) e^{-Kt},$$

donde $K = 64\pi^4(p-1)/p$.

La demostración de este teorema será, nuevamente una consecuencia de la comparación de la entropía con su producción entrópica, mediante desigualdades de tipo Poincaré. Este teorema, unido a desigualdades clásicas de Csiszar-Kullback prueba la convergencia exponencial en $L^1(S^1)$ de la solución hacia el estado estacionario.

4. Simulación numérica para semiconductores

La segunda parte de esta memoria la dedicamos a la simulación numérica de ecuaciones originadas en teoría de semiconductores. Con la intención de presentar una memoria completa, hemos considerado conveniente incluir dos capítulos introductorios, a lo que será propiamente el objetivo de esta segunda parte. En el Capítulo 5 damos un breve repaso de las propiedades básicas de la teoría de semiconductores y estudiamos la ecuación de Boltzmann para semiconductores. En el Capítulo 6 explicamos los métodos numéricos que serán utilizados en las simulaciones numéricas de los capítulos siguientes.

El sistema de Boltzmann-Poisson modela el flujo de electrones en un semiconductor. La implementación numérica de este sistema se ha basado, prácticamente hasta la actualidad, en métodos de tipo Monte Carlo (DSMC). Dado que la dimensión del espacio de definición del sistema de Boltzmann-Poisson es 7, el desarrollo de simulaciones numéricas resulta demasiado costoso. Para suplir este déficit, en la literatura, se han propuesto diversos métodos deterministas de cálculo de sistemas aproximados: modelos hidrodinámicos, límites de difusión, ecuaciones tipo arrastre-difusión (drift-diffusion), ecuaciones tipo Child-Langmuir, ...

Una primera reducción de la dimensión puede obtenerse considerando un sistema 1 dimensional en la variable de espacio, entonces la dimensión del problema se reduce a 5. La fenomenología propia del dispositivo facilitará el problema reduciéndolo a cuatro variables: tiempo, posición, energía y ángulo con respecto al eje de la dirección del campo de fuerza, debido a la simetría cilíndrica. Los primeros en desarrollar esta idea fueron Fatemi y Odeh (1993). Que escribieron el sistema de Boltzmann-Poisson, con aproximación parabólica de la banda de energía, en coordenadas esféricas y resolvieron la ecuación hiperbólica resultante por un método simple de primer orden en la dirección del viento para las variables del espacio de fase y métodos de tipo predictor-corrector para la evolución en tiempo. Recientemente (2001), Majorana y Pidotella, ofrecieron un nuevo cambio

de variable, aplicable al caso de aproximación de banda no parabólica. Carrillo, Gamba, Majorana y Shu [7] observan que el sistema obtenido tras el nuevo cambio de variables se puede escribir como una ley de conservación. Este cambio será el que utilizaremos en el Capítulo 8.

Paralelamente, métodos de alta resolución de leyes de conservación de tipo WENO (weighted essentially non-oscillatory) [11] han sido ampliamente analizados, estudiados y aplicados en dinámica de gases. Este potente método en el caso de diferencias finitas será el usado en nuestras simulaciones, para aproximar las derivadas en el espacio de fase, mientras que para la evolución en tiempo se empleará un método explícito TVD de tipo Runge-Kutta. El método WENO presenta la ventaja de que es aplicable a problemas en los que aparecen singularidades ofreciendo aproximaciones con alto orden de precisión uniforme, "esencialmente no oscilatorio", es decir, que la magnitud de las oscilaciones decae como $O(\Delta x^k)$, siendo k el orden de exactitud para la región regular. Las ventajas de las simulaciones deterministas aquí presentadas, frente a las computaciones mediante Monte Carlo, radican principalmente en la ausencia de "ruido" y la posibilidad de estudiar la evolución en tiempo del sistema antes de alcanzar el estado estacionario.

Dos son los trabajos numéricos presentados en esta memoria: en el Capítulo 7 validamos numéricamente el límite de Child-Langmuir para semiconductores, cuando el operador de colisión se aproxima por un operador de relajación, y en el Capítulo 8 implementamos un resolutor determinista del sistema 1 dimensional de Boltzmann-Poisson para un dispositivo de GaAs.

4.1. Validación numérica del límite de Child-Langmuir para semiconductores. Un modelo aproximado del sistema de Boltzmann-Poisson para semiconductores es el límite de Child-Langmuir. Las referencias más relevantes para nuestro trabajo en esta dirección pueden encontrarse en la tesis de N. Ben Abdallah, [3], en la que aparecen diversos artículos sobre el tema, algunos en colaboración con P. Degond, C. Schmeiser, S. Mas-Gallic y P. A. Raviart.

Consideramos un dispositivo unipolar con dos regiones de dopaje altas, N^+ a cada lado de una región de dopaje baja N^- , simbólicamente: $N^+ - N^- - N^+$. En las zonas N^+ , los electrones están en un estado termodinámico de cuasi-equilibrio, en la región de contacto entre la zona N^+ y N^- , la densidad de dopantes cae bruscamente causando un exceso de carga negativa en la región N^- (canal).

El flujo de electrones a lo largo del dispositivo se modela mediante la ecuación de relajación en tiempo:

$$(1.4.1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m} E(t, x) \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{1}{\tau} (M_T(v) \rho(f) - f),$$

$f = f(t, x, v)$ es la función de densidad para un electrón con posición $x \in [0, L]$ y velocidad $v \in \mathbb{R}$ en un tiempo $t \geq 0$, donde L es la longitud del canal del dispositivo. e y m son las unidades de carga y masa efectiva del electrón, respectivamente. El campo eléctrico $E = E(t, x)$ es auto-consistente, producido por el movimiento de los electrones en un "baño de iones" con densidad $C(x)$, llamado concentración de dopantes, E viene determinado por la ecuación de Poisson

$$(1.4.2) \quad \epsilon_0 \frac{d^2 \phi}{dx^2} = e(\rho(f) - C(x)), \quad E(t, x) = -\frac{d\phi}{dx},$$

con ϵ_0 la permitividad del material. $M_T(v)$ es la distribución Maxwelliana de equilibrio asociada a la temperatura del retículo.

Debemos hacer notar que la notación seguida en esta segunda parte difiere de la expuesta en la primera, ya que en la ecuación de relajación el signo que acompaña al campo eléctrico es el opuesto al considerado en la primera parte. Ambos sistemas son el mismo puesto que las ecuaciones de Poisson correspondientes también tienen signos opuesto. La razón de no unificar la notación se debe a que hemos adoptado la postura de mantener la notación usual en la literatura, para cada uno de los temas aquí planteados, con el fin de facilitar la lectura de las referencias relevantes para nuestros trabajos.

El límite de Child-Langmuir estudia el estado estacionario de la ecuación (1.4.1) y se ocupa sólo del comportamiento de los electrones en el canal del dispositivo, las zonas de dopaje alto son reemplazadas por apropiadas condiciones frontera.

En el régimen de Child-Langmuir, la energía de emisión térmica es pequeña comparada con el potencial aplicado, mientras que la corriente de inyección permanece finita

$$mV_{th}^2 \ll e\phi_L.$$

O equivalentemente, la velocidad media de los electrones inyectados en la fuente es pequeña comparada con su velocidad al alcanzar la zona de drenaje,

$$V_{th} \ll V_L.$$

Donde V_{th} es la velocidad térmica, V_L la velocidad balística al final del canal y ϕ_L el potencial aplicado. Bajo estas condiciones el parámetro de escala es $\epsilon = V_{th}/V_L$. Tras la adimensionalización del sistema (1.4.1)-(1.4.2) y el paso al límite $\epsilon \rightarrow 0$ se obtiene el sistema límite de Child-Langmuir.

En el Capítulo 7 validamos este límite mediante la comparación numérica con el sistema determinista. La comparación de las simulaciones del límite de Child-Langmuir y del sistema determinista, validan la ley de Child-Langmuir:

los resultados numéricos para Child-Langmuir son mejores (a la vista de los errores relativos) cuando la temperatura del retículo es baja y cuando el potencial aplicado es alto. Las comparaciones numéricas serán realizadas atendiendo al estudio de: potenciales, curvas de corriente-voltaje, densidades de carga, funciones de distribución y momentos. El bajo coste computacional del límite de Child-Langmuir y los resultados obtenidos, invitan a considerar la distribución y las curvas de corriente-voltaje de Child-Langmuir, como aproximaciones rápidas para las que sabemos el error que se está cometiendo.

4.2. Simulación numérica para un dispositivo de GaAs. En el Capítulo 8 presentamos un resolutor determinista del sistema 1 dimensional de Boltzmann-Poisson para un dispositivo de GaAs en semiconductores, para el que se considera una aproximación de las bandas de energía de tipo no parabólica, atendiendo a la dispersión de Kane. Se sigue una filosofía similar a la desarrollada por Carrillo, Gamba, Majorana y Shu [7] para un dispositivo de Silicio, con las siguientes diferencias sustanciales:

- En GaAs la banda de conducción más baja tiene un mínimo absoluto en el centro de la zona de Brillouin, Γ -punto y un mínimo local en 4 L -puntos a lo largo de las orientaciones cristalográficas. Los electrones se concentran principalmente entorno a estos puntos en los denominados *valles*. Los electrones en cada valle son tratados como poblaciones distintas y son descritas por funciones de distribución diferentes. Debido a las simetrías del cristal, la evolución de las distribuciones de los L -valles son iguales. Por tanto, a nivel cinético, la descripción semi-clásica está basada en dos ecuaciones de Boltzmann; una para el valle Γ y otra para el valle L . Por lo que se tiene un sistema de tres ecuaciones, puesto que las ecuaciones de Boltzmann, para cada uno de los valles, están acopladas con la ecuación de Poisson.
- En un dispositivo de Silicio los fenómenos de dispersión existentes son debidos a fonones acústicos y a fonones ópticos no polares. En GaAs aparecen nuevos fenómenos de dispersión: impurezas y fonones ópticos polares. Además en este material el mecanismo de dispersión debido a fonones ópticos no polares provoca el salto de electrones de un valle a otro, es un mecanismo de dispersión de tipo intervalo. Por tanto, el sistema queda doblemente acoplado: Poisson y operadores de scattering de intervalos.
- En la búsqueda de un método numérico que preserve la carga localmente necesitaremos desarrollar un método de integración mucho más exacto que el que fue empleado para Silicio, ya que en los nuevos fenómenos de dispersión aparecen funciones con singularidades integrables.

La evolución del flujo de electrones en un dispositivo de GaAs queda modelado por el siguiente sistema semi-clásico:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} \mathcal{E}_{\Gamma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_{\Gamma} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} f_{\Gamma} = Q_{\Gamma}(f_{\Gamma}, f_L) \\ \frac{\partial f_L}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_L} \mathcal{E}_L \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_L - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_L} f_L = Q_L(f_L, f_{\Gamma}) \\ \Delta \phi = \frac{e}{\epsilon_0} [\rho(t, \mathbf{x}) - C(\mathbf{x})], \end{cases}$$

f_{Γ} y f_L son, respectivamente, las funciones de distribución de los electrones en los valles Γ y L , $\rho = \rho_{\Gamma} + 4\rho_L$ es la densidad de carga total del sistema. Los operadores de colisión, los representamos de la siguiente manera:

$$Q(f_A) = Q(f_A, f_A) + \sum_B Q(f_A, f_B), \quad A, B = \Gamma, L,$$

donde, con esta notación, queremos poner de manifiesto la distinción entre fenómenos de scattering en el mismo valle (intravalles) y fenómenos de scattering que permiten el paso de electrones de unos valles a otros (intervalles). Los mecanismos de scattering considerados son: impurezas, fonón acústico, fonón óptico no polar y fonón óptico polar. Todos estos fenómenos de dispersión son de tipo intravalles, salvo el scattering debido al efecto del fonón óptico no polar.

Siguiendo el esquema numérico que decíamos al comienzo de esta sección (cambio de coordenadas de Majorana-Pidatella, reconstrucción de flujos mediante WENO en diferencias finitas, para la parte de transporte y evolución en tiempo con un esquema TVD Runge-Kutta), validamos nuestro resolutor ya que nuestros resultados están en total concordancia con las propiedades conocidas del material. Concretamente, constatamos las siguientes propiedades del material, mediante la simulación del sistema homogéneo ("bulk"):

- Distribución de los electrones en los valles Γ y L . La población de electrones en el valle Γ decrece a medida que aumenta el campo eléctrico, en favor de un incremento de la población en los valles L .
- Conductividad diferencial negativa (CDN) y saturación. La velocidad media del electrón, vista como función del campo eléctrico, decrece cuando el campo eléctrico supera un cierto valor umbral. Efecto que puede desaparecer si la concentración de impurezas es suficientemente elevada. Superado el valor umbral del campo, la velocidad decrece hasta presentar un efecto de saturación.
- La evolución en el tiempo de la velocidad media muestra un exceso sobre su valor de saturación. Este fenómeno se aprecia cuando el campo eléctrico aplicado es alto.

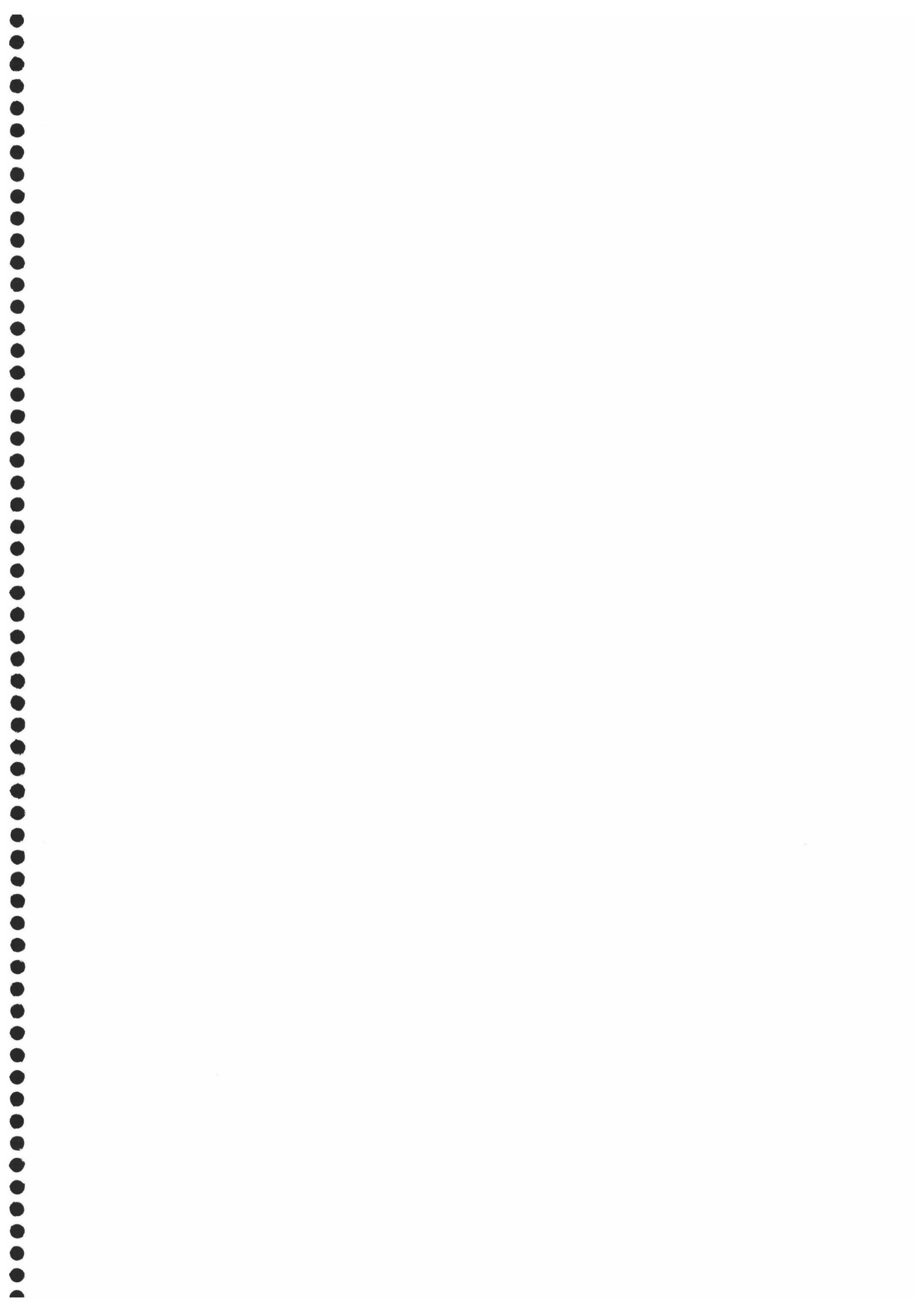
Finalmente, una vez estudiadas las propiedades del material, simulamos un dispositivo completo (caso no homogéneo), para el que estudiamos las funciones

de distribución de probabilidad en cada uno de los valles y las cantidades macroscópicas: densidad de carga, velocidad media, energía y momento.

Para concluir esta introducción sólo recordar de nuevo que esta memoria está estructurada en dos partes, claramente diferenciadas, la primera dedicada al estudio analítico de los tres problemas antes planteados, que desarrollamos en los tres siguientes capítulos y la segunda centrada en el estudio numérico de la ecuación de Boltzmann para semiconductores. En esta segunda parte se han incluido dos primeros capítulos introductorios (en el afán de presentar una memoria completa), uno a la ecuación de Boltzmann en teoría de semiconductores y otro dedicado a los métodos numéricos empleados en los dos capítulos centrales de la segunda parte: Capítulos 7 y 8. Cada capítulo incluye su propia bibliografía, se ha adoptado esta elección en la búsqueda de unidad en cada uno de los temas que se presentan en esta memoria.

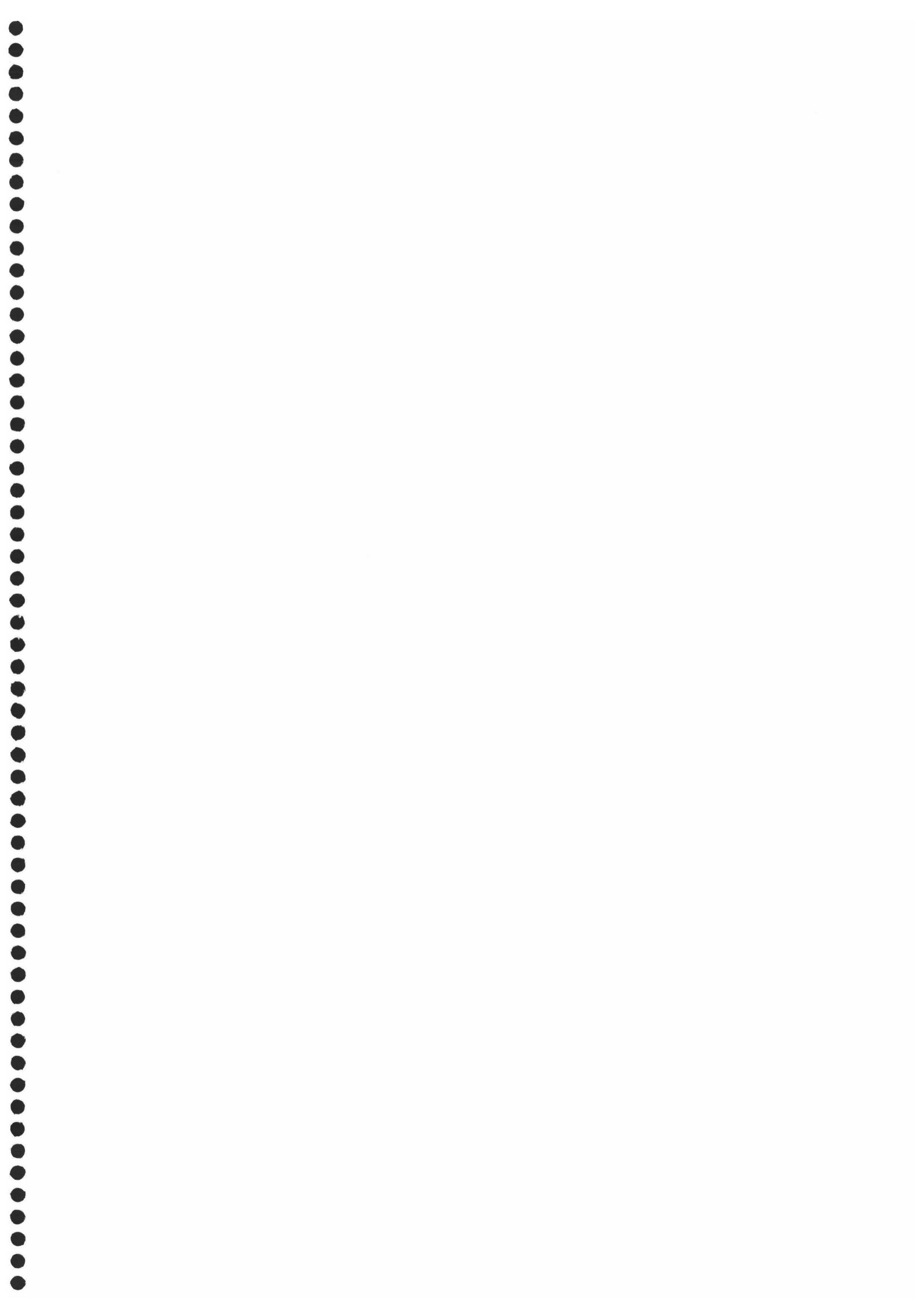
Bibliografía

- [1] A. ARNOLD, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, AND A. UNTERREITER, *On generalized Csiszár-Kullback inequalities*, *Monatsh. Math.*, 131, (2000), pp. 235–253.
- [2] A. ARNOLD, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *On convex Sobolev inequalities and the rate of convergence to equilibrium for Fokker-Planck type equations*, *Comm. Partial Differential Equations*, 26, (2001), pp. 43–100.
- [3] N. BEN ABDALLAH, *Etude de modèles asymptotiques de transport de particules chargées: Asymptotique de Child-Langmuir*, memoria de tesis doctoral.
- [4] P. M. BLEHER, J. L. LEBOWITZ, E. R. SPEER, *Existence and positivity of solutions of a fourth order nonlinear PDE describing interface fluctuations*, *Comm. Pure Appl. Math.*, 47, (1994), pp. 923–942.
- [5] P. BRAASCH, G. REIN, J. VUKADINOVIĆ, *Nonlinear stability of stationary plasmas—an extension of the energy-Casimir method*, *SIAM J. Appl. Math.* 59, (1999), pp. 831–844.
- [6] L. BOLTZMANN, *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. Sitzungberichte der Akademie der Wissenschaften*, 66, (1872), pp. 275–370; *Lectures on Gas Theory*. University of California Press, Berkeley, 1964. Traducido por S. G. Brush. Republicación de la Edición 1896–1898. Republicado por Dover Publications, 1995.
- [7] J. A. CARRILLO, I. M. GAMBA, A. MAJORANA, C.-W. SHU, *A WENO-Solver for the transients of Boltzmann-Poisson system for semiconductor devices: performance and comparisons with Monte Carlo methods*, *J. Comput. Phys* 184, (2003), pp. 498–525.
- [8] J. A. CARRILLO, R. J. McCANN, C. VILLANI, *Kinetic equilibration rates for granular media and related equations: entropy dissipation and mass transportation estimates*, para aparecer en *Revista Matemática Iberoamericana*.
- [9] C. CERCIGNANI, R. ILLNER, M. PULVIRENTI *The mathematical theory of dilute gases*, *Applied Mathematical Sciences*, 106, Springer-Verlag New York Berlin Heidelberg, 1991.
- [10] L. DESVILLETES, C. VILLANI, *On the trend to global equilibrium in spatially inhomogeneous entropy-dissipating systems: the linear Fokker-Planck equation* *Comm. Pure Appl. Math.* 54 (1), (2001), pp. 1–42.
- [11] C.-W. SHU, *Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*, B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu and E. Tadmor (Editor: A. Quarteroni), *Lecture Notes in Mathematics*, volume 1697, Springer, 1998, pp. 325–432.
- [12] C. VILLANI, *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*, 1, (2002) *Handbook of mathematical fluid mechanics*. Editado por Susan Friedlander y Denis Serre, publicado por North-Holland.



Parte 1

Estudio analítico



CAPÍTULO 2

Comportamiento asintótico de la ecuación de relajación lineal para partículas cargadas

En este capítulo estudiamos el comportamiento asintótico para una ecuación de Boltzmann lineal no homogénea, donde el operador de colisión considerado es una aproximación de relajación hacia la distribución Maxwelliana con media cero y temperatura del retículo fija. (Ver Capítulo 5 para semiconductores). Las partículas se mueven bajo la acción de un potencial externo que las confina (como sucederá en el Capítulo 3), es decir, existe una única densidad de probabilidad estacionaria. Valiéndonos del método de disipación de entropía y de estimaciones a priori de la solución independientes del tiempo, estudiaremos la convergencia hacia el equilibrio global y podremos dar una medida explícita de dicha convergencia. Concretamente, probaremos convergencia “casi exponencial”, entendiéndose, más rápida que cualquier función algebraica.¹

1. Introducción

Como decíamos anteriormente, el objetivo de este capítulo es investigar el comportamiento cuando el tiempo tiende a infinito de soluciones de la siguiente ecuación cinética:

$$(2.1.1) \quad \begin{cases} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \nabla_x \phi_e(x) \cdot \nabla_v f = Q(f) & \text{en } \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N, \\ f|_{t=0} = f_0 & \text{en } \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N, \end{cases}$$

donde el término de la derecha viene dado por el siguiente operador lineal simple de Boltzmann:

$$(2.1.2) \quad Q(f) = \frac{1}{\tau}(\rho M_\theta - f), \quad \rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} f(t, x, v) dv$$

M_θ es la Maxwelliana normalizada:

$$(2.1.3) \quad M_\theta(v) = \frac{e^{-v^2/2\theta}}{(2\pi\theta)^{N/2}}.$$

¹Los contenidos de este capítulo han sido desarrollados a modo de artículo en MARÍA J. CÁCERES, JOSÉ A. CARRILLO, THIERRY GOUDON, *Equilibration rate for the linear inhomogeneous relaxation-time Boltzmann equation*, Communications in Partial Differential Equations, Vol. 28, 5, (2003), pp. 969-989.

Esta ecuación describe la interacción de un sistema amplio de partículas cargadas, donde la incógnita $f(t, x, v) \geq 0$ es la densidad de partículas que ocupan la posición $x \in \mathbb{R}^N$ en el tiempo $t \geq 0$ y moviéndose con velocidad $v \in \mathbb{R}^N$. La parte de la derecha describe las interacciones que surgen entre las partículas, mientras que el término de la izquierda refleja el transporte de las partículas bajo la acción del campo eléctrico externo, dependiente del espacio, $E(x) = -\nabla_x \phi_e(x)$. Si supusiésemos que no se presentan interacciones entre las partículas, éstas se moverían a lo largo de las trayectorias, que se obtienen como soluciones del sistema autónomo de EDO:

$$\frac{d}{dt}X(t; x, v) = V(t; x, v), \quad \frac{d}{dt}V(t; x, v) = -\nabla_x \phi_e(X(t; x, v))$$

con condición inicial $X(0; x, v) = x, V(0; x, v) = v$: si $Q = 0$, entonces la solución viene dada por: $f(t, x, v) = f_0(X(-t; x, v), V(-t; x, v))$. En este capítulo, ϕ_e es un potencial externo que tiene un efecto confinante y para el que suponemos

$$(2.1.4) \quad \left\{ \begin{array}{l} \bullet \phi_e \geq 0, \phi_e \in C^\infty(\mathbb{R}^N), \\ \bullet \exp(-\phi_e(x)/\theta) \in L^1(\mathbb{R}^N), \\ \bullet \phi_e \text{ perturbación acotada de un potencial uniformemente convexo en } \mathbb{R}^N: \\ \phi_e = \phi_e^{uc} + \phi_e^{bp} \text{ de forma que} \\ \quad \text{existe } \lambda_1 > 0 \text{ tal que } (\partial_{x_i x_j}^2 \phi_e^{uc}(x))_{i,j=1,\dots,N} \geq \lambda_1 I, \forall x \in \mathbb{R}^N, \\ \text{y} \\ \quad \text{existen } a \text{ y } b \text{ tales que } 0 < a \leq \phi_e^{bp}(x) \leq b < \infty, \forall x \in \mathbb{R}^N. \end{array} \right.$$

La hipótesis de regularidad sobre el potencial será necesaria en el resultado principal de este capítulo, porque precisaremos estimaciones de regularidad sobre las soluciones vía propiedades de regularidad de las características. La segunda hipótesis nos garantiza la existencia de estados estacionarios no triviales, gracias al confinamiento de las partículas. La última condición proporcionará relaciones entre la entropía y su disipación.

El operador de colisión Q verifica la propiedad de preservación de masa: se tiene $\int_{\mathbb{R}^N} Q(f) dv = 0$. Podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que f es una densidad de probabilidad

$$(2.1.5) \quad \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f(t, x, v) dv dx = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f(0, x, v) dv dx = 1.$$

Recordemos (ver la Introducción de esta memoria, para más detalles sobre el método de disipación de entropía) que es el operador de colisión el causante de

la disipación de la entropía:

$$\int_{\mathbb{R}^N} Q(f) \frac{f}{M_\theta} dv = -\frac{2}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} M_\theta(v) M_\theta(v_*) \left(\frac{f}{M_\theta}(v) - \frac{f}{M_\theta}(v_*) \right)^2 dv_* dv.$$

Además los estados de equilibrio locales $f(t, x) = \rho(t, x) M_\theta(v)$ pertenecen al núcleo de Q , $\text{Ker}(Q)$, provocando una parada en el decrecimiento de la entropía.

En el caso homogéneo en espacio, es decir, $f(t, v)$

$$(2.1.6) \quad \partial_t f = Q(f) = \frac{1}{\tau} (M_\theta - f).$$

lo que inmediatamente prueba el comportamiento asintótico hacia el equilibrio. Puesto que la relación de disipación nos asegura:

$$-\int_{\mathbb{R}^N} Q(f) \frac{f}{M_\theta} dv = \frac{1}{\tau} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \frac{f^2}{M_\theta} dv - 1 \right) = \frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta|^2 \frac{1}{M_\theta} dv$$

y esto nos conduce a

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{f^2}{M_\theta} dv = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta|^2 \frac{1}{M_\theta} dv = -\frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta|^2 \frac{1}{M_\theta} dv.$$

Si combinamos esta relación con la desigualdad de Cauchy-Schwarz, obtenemos la convergencia exponencial a M_θ en la norma L^1

$$\int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta| dv \leq \left(\int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta|^2 \frac{1}{M_\theta} dv \right)^{1/2} \leq C_0 e^{-t/\tau},$$

donde C_0 depende sólo del dato inicial.

NOTA 2.1.1. La convergencia en L^1 se puede derivar fácilmente de (2.1.6) ya que basta multiplicar formalmente en la ecuación por el signo de $(f - M_\theta)$ para obtener

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta| dv = -\frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} |f - M_\theta| dv.$$

Además, la misma idea es aplicable al caso

$$\partial_t f + E \cdot \nabla_v f = Q(f).$$

Con E constante.

Sin embargo, en el caso no homogéneo en espacio, el operador de colisión empuja a la solución hacia un equilibrio local (distribución que está en equilibrio con respecto a la variable de velocidad, pero no necesariamente, con respecto a la variable espacial), mientras que sólo una distribución $\rho(t, x) M_\theta(v)$ satisface (2.1.1). Un estado de equilibrio local debe verificar

$$\partial_t \rho + v \cdot \nabla_x \rho + \rho \frac{v}{\theta} \cdot \nabla_x \phi_e = 0$$

y si lo que buscamos es un estado estacionario global tendremos:

$$\partial_t \rho = 0, \quad v \cdot \nabla_x \rho = -\rho \frac{v}{\theta} \cdot \nabla_x \phi_e.$$

Esto nos muestra, que el operador de transporte hace una selección entre todos los estados de equilibrio locales, así el estado global es:

$$(2.1.7) \quad f_s(x, v) = z e^{-\phi_e(x)/\theta} M_\theta(v), \quad z = \left(\int_{\mathbb{R}^N} e^{-\phi_e(x)/\theta} dx \right)^{-1}.$$

A la vista de lo cual nos surgen las siguientes cuestiones:

- 1) Cuando el tiempo avanza, ¿se va “pareciendo” la solución $f(t, x, v)$ al estado estacionario f_s ?
- 2) ¿Podríamos encontrar la velocidad de convergencia para alguna norma L^p ? En particular, ¿se acerca f exponencialmente a f_s ?

La primera pregunta se responde afirmativamente, existe convergencia al menos débilmente en L^1 de $f(t, \cdot)$ hacia f_s basada en argumentos estándar [9, 3, 4]. Sin embargo, para esta ecuación no homogénea, aparentemente simple, no se conoce la convergencia fuerte en L^1 ni el orden de convergencia en L^1 .

El orden de decaimiento, para ecuaciones de difusión lineales y no lineales, se han estudiado, recientemente, usando métodos de disipación de entropía [5, 7, 12, 17]. La estrategia es reminiscente de la seguida para ecuaciones de difusión lineales y de la demostración de la desigualdad logarítmica de Sobolev por Bakry-Emery, [1, 2]. Referimos a [16] para una revisión de todas estas técnicas y para más referencias sobre el tema. Sin embargo, en estos trabajos no fueron incluidos problemas cinéticos no homogéneos, principalmente, porque carecen de una estructura de flujo-gradiente. Este problema se resolvió en [10] gracias a una variación del método de disipación de entropía para la ecuación cinética no homogénea con operador de colisión de Fokker-Planck. Este será el método que nosotros usaremos para dar una velocidad de convergencia para (2.1.1). Ellos se ocuparon de problemas similares para el operador de difusión de Fokker-Planck

$$Q(f) = \operatorname{div}_v(\theta \nabla_v f + v f) = \operatorname{div}_v(\theta M_\theta \nabla_v(f/M_\theta)),$$

que comparte propiedades de disipación con el operador de Boltzmann (2.1.2). Desvilletes y Villani obtienen convergencia al estado estacionario f_s en L^1 con orden $\mathcal{O}(t^{-1/\varepsilon})$ para cualquier $\varepsilon > 0$. Posteriormente, en [11], extienden su estudio a el operador de Boltzmann no lineal. Finalmente, debemos mencionar que Fellner-Neumann-Schmeiser [13] aplican el método de [10] a una ecuación más simple, la ecuación del transporte de neutrones. Para una amplia información sobre el comportamiento asintótico en teoría cinética remitimos al lector al agradable libro de Villani [18].

Bajo los tediosos y “astutos” cálculos desarrollados en [10], debemos resaltar que el método es coherente con la interpretación física de la tendencia asintótica

hacia el equilibrio (ver [14]). El punto crítico se encuentra en el estudio cuidadoso de la competición entre el operador de colisión y el operador de transporte. Mientras el efecto disipativo empuja a la solución hacia un equilibrio local, el operador de transporte la expulsa fuera de la clase de equilibrio. Esta es la razón, por la que se introducen dos cantidades no negativas, a saber: $H(f|f_s)$ y $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, que nos dan una medida de la distancia de la solución f al equilibrio global y local, respectivamente. El primer paso consiste en dar una desigualdad diferencial entre estas dos cantidades:

$$-\frac{d}{dt}H(f|f_s) \geq \kappa \widetilde{H}(f|\rho M_\theta),$$

para algún $\kappa > 0$. Si f alcanza un equilibrio en el instante t_0 , (formalmente) se traduce en que $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$ y su derivada en tiempo se hacen cero. Por tanto, la información debemos buscarla en la segunda derivada en tiempo de $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$. De este modo, el segundo ingrediente de la demostración es probar que (salvo algunos cálculos) $\frac{d^2}{dt^2}\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$ se puede estimar como sigue,

$$\frac{d^2}{dt^2}\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \kappa' H(f|f_s) - R(f).$$

Para concluir basta obtener un control sobre el resto $R(f)$ en relación con $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$. En este paso necesitaremos estimaciones de regularidad sobre la solución f y el método de interpolación propuesto por Desvillettes-Villani que supone una pérdida en el exponente

$$R(f) \leq C(f, \varepsilon) \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}$$

para cualquier $\varepsilon > 0$ y $C(f, \varepsilon)$ depende de ε y de acotaciones uniformes sobre la derivadas de f . Este método nos conduce al siguiente sistema de desigualdades diferenciales

$$\begin{cases} -\frac{d}{dt}H(f|f_s) \geq \kappa \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \\ \frac{d^2}{dt^2}\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \kappa' H(f|f_s) - C(f, \varepsilon) \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon} \end{cases}$$

que probará la convergencia a cero de $H(f|f_s)$ con velocidad $O(t^{1-1/\varepsilon})$ (ver Teorema 2.2.1). Se concluye demostrando que $H(f|f_s)$ controla la norma L^1 de $f - f_s$. La idea de estudiar la segunda derivada en tiempo de la entropía relativa ha sido usada con mucho éxito en el análisis del comportamiento asintótico de ecuaciones de difusión no lineales [5, 6, 7, 12, 16, 17]. Siguiendo esta estrategia nuestro principal resultado lo enunciamos como sigue:

TEOREMA 2.1.2. *Sea f_0 verificando*

$$(2.1.8) \quad af_s \leq f_0 \leq Af_s,$$

para algún $0 < a < A$, $f_0 \in C^\infty(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, con todas sus derivadas acotadas. Sea f la solución de la ecuación (2.1.1). Supongamos que f tiene todas sus derivadas $\partial_{x,v}^\alpha f$, $\alpha \in \mathbb{N}^{2N}$, acotadas uniformemente en tiempo. Entonces, para todo $\varepsilon > 0$ y $t > 0$

$$\|f(t) - f_s\|_{L^1(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)} \leq C_\varepsilon(f_0)t^{-1/\varepsilon}$$

donde $C_\varepsilon(f_0)$ depende de ε , del dato inicial y de las acotaciones de las derivadas de f .

Este resultado ilustra la robustez del método introducido por Desvillettes-Villani, al demostrar nosotros, que no depende de la forma particular del funcional de entropía, ni de las propiedades regularizantes del operador de colisión, que no se pueden esperar en nuestro caso. Si bien, debemos notar, como punto desfavorable, la preservación de las estimaciones uniformes en tiempo de la solución. Esto llevó en [10] a complicados argumentos que involucraban el efecto regularizante del operador de colisión. En nuestro caso somos capaces de encontrar estas estimaciones para el caso particular de potencial confinante armónico (ver Sección 3).

Este capítulo lo estructuramos como sigue. En la Sección 2 nos centraremos en obtener el sistema de desigualdades diferenciales para las entropías relativas $H(f, f_s)$ y $\tilde{H}(f|\rho M_\theta)$. Suponiendo la regularidad de la solución y acotación uniforme en tiempo de las derivadas obtendremos el Teorema 2.1.2.

Las hipótesis supuestas en el Teorema 2.1.2, se abordarán en detalle en las Secciones 3 y 4. En la Sección 3 nos ocupamos de las estimaciones uniformes en tiempo cuando el potencial es armónico. Mientras que en la Sección 4 probamos las acotaciones globales de la solución que se reducen al principio del máximo. En la última sección analizaremos diversos comentarios y mejoras de los resultados del capítulo.

2. Demostración del comportamiento asintótico

Comenzamos definiendo las siguientes entropías relativas, que nos darán una medida de cómo de lejos está la solución f del equilibrio global y de un equilibrio local, respectivamente,

$$(2.2.1) \quad \begin{cases} H(f|f_s) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f - f_s|^2 \frac{1}{f_s} dv dx \\ \tilde{H}(f|\rho M_\theta) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta|^2 \frac{1}{f_s} dv dx \end{cases} .$$

Usando, tan sólo, estas definiciones podemos encontrar algunas relaciones entre estas cantidades, que nos serán de gran utilidad en lo sucesivo,

- $H(f|f_s)$ controla la norma L^1

$$\left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f - f_s| dv dx \right)^2 \leq H(f|f_s),$$

gracias a la desigualdad de Cauchy-Schwarz.

- $H(f|f_s)$ y $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$ pueden reescribirse como,

$$H(f|f_s) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{f^2}{f_s} - f_s \right) dv dx,$$

y

$$\begin{aligned} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) &= \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{\rho^2 M_\theta}{ze^{-\phi_e/\theta}} + \frac{f^2}{f_s} - 2 \frac{\rho f}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) dv dx \\ (2.2.2) \quad &= \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{f^2}{f_s} dv dx - \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &= H(f|f_s) + 1 - \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx. \end{aligned}$$

Donde la igualdad (2.2.2) nos proporciona una relación entre la distancia de f al estado de equilibrio y la distancia de f a un estado local. Donde, además, esa relación viene dada, en cierto sentido por la distancia, entre la densidad de f y la densidad de equilibrio que mide la cantidad

$$\int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx$$

El comportamiento asintótico de las soluciones de (2.1.1) será una consecuencia del Teorema 6.2 en [10], que estudia la evolución del sistema de desigualdades diferenciales:

$$(2.2.3) \quad \begin{cases} -x'(t) \geq \kappa_1 y(t) \\ y''(t) + \kappa_2 y^{1-\varepsilon}(t) \geq \kappa_3 x(t), \end{cases}$$

donde consideraremos $x(t) = H(f|f_s)$, $y(t) = \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, $\varepsilon \in (0, 1)$ y $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ constantes positivas.

TEOREMA 2.2.1. [10, Teorema 6.2] *Sean x e y dos funciones no negativas de C^2 , definidas en \mathbb{R}^+ que satisfacen (2.2.3). Entonces, existe una constante $C > 0$, que depende del dato inicial $x(0)$, las constantes κ_i y ε tal que*

$$x(t) \leq \frac{C}{t^{(1-\varepsilon)/\varepsilon}}$$

para todo $t > 0$.

Por tanto, la estructura de esta sección viene impuesta por el método, es decir, primero nos ocuparemos de la primera parte de (2.2.3); donde, en realidad obtendremos una igualdad, por lo que de hecho, calcularemos exactamente la derivada tercera de $H(f|f_s)$. Y en un segundo apartado trabajaremos con la segunda

desigualdad, que nos supondrá un esfuerzo mucho mayor. Finalmente resumiremos lo obtenido y probaremos el resultado buscado, Teorema 2.1.8. Antes de adentrarnos en las computaciones, merece la pena resaltar,

- La necesidad de suponer un potencial externo ϕ_e , perturbación acotada de un potencial uniformemente convexo viene de la intención de aplicar la desigualdad entropía-cuadrática de Sobolev (ver [1]).
- Como decíamos en la Introducción del capítulo, primero probaremos

$$\frac{d^2}{dt^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \kappa H(f|f_s) - R(f).$$

Para estimar el resto $R(f)$ en términos de $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, necesitaremos algunas propiedades de regularidad. En particular, en este paso de interpolación, usaremos estimaciones del dato inicial $0 < af_s \leq f_0 \leq Af_s$, para $a, A > 0$, propiedad que se prueba, se propaga a la solución (Sección 4), al igual que acotaciones uniformes sobre las derivadas $\partial_{x,v}^\alpha f$, $\alpha \in \mathbb{N}^{2N}$ (ver Lema 2.2.6, Proposición 2.2.4). Claramente, se dispone de estimaciones dependientes del tiempo, pero, como ocurría en [10], las acotaciones uniformes en tiempo no son para nada evidentes.

2.1. Derivada primera de la entropía relativa $H(f|f_s)$. Nuestro primer resultado prueba que la entropía relativa local $\widetilde{H}(f, \rho M_\theta)$ es exactamente la disipación de la entropía relativa global $H(f|f_s)$, es decir, su derivada en tiempo.

LEMA 2.2.2. *Sea f la solución de la ecuación (2.1.1). Entonces, la función*

$$t \mapsto H(f|f_s)$$

es no creciente: concretamente,

$$\frac{d}{dt} H(f|f_s) = -\frac{2}{\tau} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta).$$

Demostración. Recordemos que f_s pertenece al núcleo del operador diferencial de transporte $\nabla_x \phi_e \nabla_v - v \nabla_x$, es decir, $(v \cdot \nabla_x - \nabla_x \phi_e \cdot \nabla_v) f_s = 0$. Entonces, usando la Ecuación (2.1.1) e integrando por partes, encontramos que la disipación de $H(f|f_s)$ depende únicamente del operador de colisión, es decir,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(f|f_s) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{f^2}{f_s} dv dx = 2 \int_{\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N} \frac{f}{f_s} \partial_t f dv dx \\ &= \frac{2}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} (\rho M_\theta - f) \frac{f}{f_s} dv dx. \end{aligned}$$

El término de la derecha se puede reescribir como

$$-\frac{2}{\tau} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{f^2}{f_s} dv dx - \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \right),$$

con lo que se concluye el Lema usando (2.2.2). \square

Queremos señalar que existen otras muchas entropías disipativas para la ecuación (2.1.1). En concreto, consideremos:

- $h : s \in \mathbb{R}^+ \mapsto h(s) \in \mathbb{R}$, una función convexa que se hace cero para $s = 1$.
- f y g dos densidades de probabilidad en $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$.

Entonces, podemos “averiguar” lo lejos, o cerca, que está f de g usando

$$H(f|g) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} h\left(\frac{f}{g}\right) g \, dv \, dx.$$

Esta cantidad es no negativa, puesto que puede reescribirse como

$$\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} (h(f/g) - h(1) - h'(1)(f/g - 1)) g \, dv \, dx$$

donde el integrando es no negativo por convexidad.

Como ejemplos podemos considerar:

1. $h(s) = (s - 1)^2$ define la entropía con la que estamos trabajando en este capítulo.
2. $h(s) = s \log(s)$ define la entropía (física) usada en [10].

Usando integración por partes y la propiedad $(v \cdot \nabla_x - \nabla_x \phi_e \cdot \nabla_v) f_s = 0$, obtenemos la evolución de la entropía relativa de f con respecto al equilibrio f_s

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(f|f_s) &= \frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} (\rho M_\theta - f) h'(f/f_s) \, dv \, dx \\ &= -\frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} (\rho M_\theta - f) (h'(\rho M_\theta/f_s) - h'(f/f_s)) \, dv \, dx \leq 0. \end{aligned}$$

De este modo, cualquier entropía relativa, construida como arriba, es disipativa para la ecuación. Esta propiedad se satisface también para la ecuación de Fokker-Planck.

Cabría preguntarse la razón que nos indujo a elegir la entropía cuadrática. A lo que respondemos diciendo que esta elección nos ha parecido apropiada por la “simplicidad” de los cálculos que nos llevan al sistema de ecuaciones diferenciales (2.2.3). Por otro lado no parece sencillo obtener unas computaciones similares con la elección de la entropía que podría considerarse natural, desde el punto de vista físico, $s \log(s)$.

Además otra pregunta, que podría ser natural, es qué “medida” nos da la entropía física $H_{\log}(f|f_s)$, ¿converge a cero? ¿con qué velocidad?. La respuesta a estas preguntas la encontramos haciendo uso de la desigualdad $\log(x) \leq x - 1$ y

la desigualdad de Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} H_{\log}(f|f_s) &= \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f \log(f/f_s) \, dv \, dx \leq \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f (f/f_s - 1) \, dv \, dx \\ &\leq \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} |f/f_s - 1|^2 f_s \, dv \, dx \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f^2/f_s \, dv \, dx \right)^{1/2} \\ &\leq C H(f|f_s)^{1/2}. \end{aligned}$$

Donde podemos tomar

$$C = \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f_0^2/f_s \, dv \, dx \right)^{1/2}$$

puesto que $\left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f^2/f_s \, dv \, dx \right)^{1/2}$ hemos visto que es decreciente en tiempo. Entonces, nuestro resultado muestra que $H_{\log}(f|f_s)$ converge a 0 cuando el tiempo tiende a infinito con velocidad algebraica.

NOTA 2.2.3. *La entropía cuadrática acota a todas las entropías de la forma*

$$H_p(f|f_s) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} h(f/f_s) f_s \, dv \, dx,$$

donde $h(s) = s^p - 1$ con $1 < p < 2$, ya que por la desigualdad de Hölder tenemos

$$H_p(f|f_s) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f^p f_s^{1-p} \, dv \, dx - 1 \leq \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f^2 f_s^{-1} \right)^{p/2} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f_s \right)^{\frac{2}{2-p}} - 1.$$

Se tiene la relación:

$$H_p(f|f_s) \leq \left[(H(f|f_s) + 1)^{p/2} - 1 \right].$$

2.2. Derivada segunda de la entropía relativa $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$. Nos ocuparemos aquí de la segunda derivada de $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, que es exactamente, a la vista del Lema 2.2.2, la tercera derivada de la entropía relativa $H(f|f_s)$.

Nuestro objetivo es estimar inferiormente $\frac{d^2}{dt^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$ en términos de $H(f|f_s)$ y de un resto no positivo que involucra a las siguientes cantidades macroscópicas asociadas a f

$$(2.2.4) \left\{ \begin{array}{l} \text{Densidad macroscópica: } \rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} f(t, x, v) dv, \\ \text{Velocidad media: } \rho u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} v f(t, x, v) dv, \\ \text{Temperatura: } \rho(t, x) \frac{|u(t, x)|^2}{2} + \frac{N}{2} \rho T(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|v|^2}{2} f(t, x, v) dv, \\ \text{Tensor presión: } \rho u \otimes u(t, x) + \rho T(t, x) \mathbb{I} + \mathbb{D}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} (v \otimes v) f(x, v) dv, \end{array} \right.$$

donde \mathbb{I} representa la matriz $N \times N$ identidad $N \times N$, y dados dos vectores $a, b \in \mathbb{R}^N$, $a \otimes b$ denota la matriz $N \times N$ con coeficientes $a_i b_j$. Integrando por partes la ecuación (2.1.1) con respecto a la variable v , después de multiplicar por 1 y v respectivamente, obtenemos las siguientes relaciones macroscópicas

$$(2.2.5) \quad \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0$$

y

$$(2.2.6) \quad \partial_t(\rho u) + \text{Div}_x(\rho u \otimes u + \rho T \mathbb{I} + \mathbb{D}) + \rho \nabla_x \phi_e = -\frac{\rho u}{\tau}.$$

(Para una matriz campo valuada $A(x)$, denotamos $\text{Div}_x(A) = \sum_j \partial_{x_j} A_{ij} \in \mathbb{R}^N$). Entonces, probamos la siguiente afirmación.

PROPOSICIÓN 2.2.4. *Sea f una solución regular de (2.1.1). Entonces, existe $\lambda > 0$ tal que*

$$\frac{d^2}{dt^2} \tilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \lambda \theta H(f|f_s) - R(f)$$

donde el resto no negativo R es

$$(2.2.7) \quad \begin{aligned} R(f) &= \lambda \theta \tilde{H}(f|\rho M_\theta) + 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &+ \frac{4}{\theta} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{ze^{-\phi_e/\theta}} \left[\left| \frac{3\rho u}{\tau} \right|^2 + |\text{Div}_x(\rho u \otimes u)|^2 + |\text{Div}_x(\rho(T - \theta)\mathbb{I})|^2 + |\text{Div}_x \mathbb{D}|^2 \right] dx. \end{aligned}$$

Demostración. La prueba de este resultado se basa en la siguiente igualdad

$$(2.2.8) \quad \begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \tilde{H}(f|\rho M_\theta) &= \frac{4}{\tau^2} \tilde{H}(f|\rho M_\theta) + 2\theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &+ 2 \int_{\mathbb{R}^N} \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \cdot \left(\frac{3\rho u}{\tau} + \text{Div}_x(\rho u \otimes u + \rho(T - \theta)\mathbb{I} + \mathbb{D}) \right) dx \end{aligned}$$

que demostraremos más tarde. Supongamos por un momento que tenemos esta relación. Primero, la no negatividad de $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$ nos permite escribir

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) &\geq 2\theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &\quad + 2 \int_{\mathbb{R}^N} \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \cdot \left(\frac{3\rho u}{\tau} + \text{Div}_x(\rho u \otimes u + \rho(T - \theta)\mathbb{I} + \mathbb{D}) \right) dx \end{aligned}$$

Denotemos por I la última integral en el término de la derecha. Esta integral la podemos estimar como sigue

$$\begin{aligned} |I| &\leq \theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx \\ &\quad + \frac{4}{\theta} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{e^{\frac{\phi_e}{\theta}}}{z} \left(\left| \frac{3\rho u}{\tau} \right|^2 + |\text{Div}_x(\rho u \otimes u)|^2 + |\text{Div}_x(\rho(T - \theta)\mathbb{I})|^2 + |\text{Div}_x \mathbb{D}|^2 \right) dx \end{aligned}$$

donde hemos usado las sencillas desigualdades

$$\begin{cases} ab \leq \theta \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2\theta}, \\ (a + b + c + d)^2 \leq 4(a^2 + b^2 + c^2 + d^2). \end{cases}$$

Se sigue, entonces, que

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) &\geq \theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &\quad - \frac{4}{\theta} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{e^{\frac{\phi_e}{\theta}}}{z} \left[\left| \frac{3\rho u}{\tau} \right|^2 + |\text{Div}_x(\rho u \otimes u)|^2 + |\text{Div}_x(\rho(T - \theta)\mathbb{I})|^2 + |\text{Div}_x \mathbb{D}|^2 \right] dx \end{aligned}$$

Usando, ahora, el hecho de que ϕ_e es una perturbación acotada de un potencial uniformemente convexo, tenemos garantizada la siguiente desigualdad de Sobolev (ver Corolario 2.18 y Teorema 3.2 en [1] para la entropía cuadrática)

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx \geq \lambda \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} - ze^{-\phi_e/\theta} \right) dx$$

donde λ depende de λ_1 , a y b (ver Teorema 3.2 en [1]). Entonces, se concluye usando la relación (2.2.2) que nos dice que el término de la derecha es sencillamente $\lambda(H(f|f_s) - \widetilde{H}(f|\rho M_\theta))$. \square

Para que la demostración anterior sea cierta, sólo nos falta justificar (2.2.8). Teniendo en mente la definición de $H(f|f_s)$ y $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, y la relación (2.2.2), podemos

escribir

$$\frac{d^2}{dt^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) = \frac{d^2}{dt^2} H(f|f_s) - \frac{d^2}{dt^2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx$$

Entonces, (2.2.8) será una consecuencia de la siguiente afirmación,

LEMA 2.2.5. *Sea f una solución regular de (2.1.1). Entonces, tenemos*

$$(2.2.9) \quad \frac{d^2}{dt^2} H(f|f_s) = \frac{4}{\tau^2} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) - \frac{4}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho \nabla_x \cdot (\rho u)}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx.$$

y

$$(2.2.10) \quad \begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} &= 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx + \frac{2}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho \nabla_x \cdot (\rho u)}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &\quad - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \cdot \text{Div}_x (\rho u \otimes u + \mathbb{D} + \rho(T - \theta)\mathbb{I}) dx \\ &\quad - 2\theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 ze^{-\phi_e/\theta} dx. \end{aligned}$$

Demostración. Si en el Lema 2.2.2 introducimos la expresión (2.2.2), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} H(f|f_s) &= -\frac{2}{\tau} \frac{d}{dt} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) = -\frac{2}{\tau} \frac{d}{dt} \left(H(f|f_s) + 1 - \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \right) \\ &= -\frac{2}{\tau} \left(-\frac{2}{\tau} \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) - \frac{2}{z} \int_{\mathbb{R}^N} \rho e^{\frac{\phi_e}{\theta}} \partial_t \rho dx \right). \end{aligned}$$

Entonces, la conservación de la masa (2.2.5) da (2.2.9). Por otro lado, (2.2.5) también nos lleva a

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx = 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \partial_t \rho dx = -2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \nabla_x \cdot (\rho u) dx.$$

Derivando una vez más, obtenemos

$$(2.2.11) \quad \begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx &= 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx \\ &\quad - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho}{ze^{-\phi_e/\theta}} \nabla_x \cdot \left(-\frac{1}{\tau} \rho u - \rho \nabla_x \phi_e - \text{Div}_x \mathbb{P} \right) dx \end{aligned}$$

donde hemos usado (2.2.5) para el primer término y (2.2.6) para el segundo y \mathbb{P} representa el tensor presión siguiente

$$\mathbb{P}(t, x) = (\mathbb{D} + \rho T \mathbb{I} + \rho u \otimes u)(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} (v \otimes v) f(t, x, v) dv.$$

Puesto que $\nabla_x(\rho e^{\phi_e/\theta}) = e^{\phi_e/\theta}(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e)$, si integramos por partes en el último término de (2.2.11) obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{2}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho \nabla_x \cdot (\rho u)}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \rho \nabla_x \phi_e \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx \\ & - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \operatorname{Div}_x \mathbb{P} \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx. \end{aligned}$$

Escribimos el último término como sigue

$$\begin{aligned} & -2 \int_{\mathbb{R}^N} \operatorname{Div}_x (\mathbb{D} + \rho(T - \theta)\mathbb{I} + \rho u \otimes u) \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx \\ & - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\theta \nabla_x \rho}{z e^{-\phi_e/\theta}} \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) dx. \end{aligned}$$

Entonces, (2.2.11) se convierte en

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx &= 2 \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \cdot (\rho u)|^2}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx + \frac{2}{\tau} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho \nabla_x \cdot (\rho u)}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx \\ & - 2 \int_{\mathbb{R}^N} (\rho \nabla_x \phi_e + \theta \nabla_x \rho) \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx \\ & - 2 \int_{\mathbb{R}^N} \operatorname{Div}_x (\mathbb{D} + \rho(T - \theta)\mathbb{I} + \rho u \otimes u) \cdot \left(\nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right) \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx. \end{aligned}$$

Ahora bien, el tercer término de la expresión de la derecha se puede escribir como

$$-2\theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \rho + \frac{\rho}{\theta} \nabla_x \phi_e \right|^2 \frac{1}{z e^{-\phi_e/\theta}} dx = -2\theta \int_{\mathbb{R}^N} \left| \nabla_x \left(\frac{\rho}{z e^{-\phi_e/\theta}} \right) \right|^2 z e^{-\phi_e/\theta} dx,$$

lo que concluye la demostración. \square

Como decíamos al comienzo de la Sección, nos concentraremos ahora en estimar $R(f)$ en términos de $\tilde{H}(f|\rho M_\theta)$. Debemos recordar, que es precisamente en este punto en el que necesitamos suponer que todas las derivadas de la solución están uniformemente acotadas en tiempo y que el dato inicial verifica $0 < a f_s(x, v) \leq f_0(x, v) \leq A f_s(x, v)$, para $0 < a < A$. Bajo estas hipótesis obtenemos

LEMA 2.2.6. *Sea f una función regular en $\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^N \times \mathbb{R}_v^N$, que satisface*

$$(2.2.12) \quad \begin{cases} 0 < a f_s(x, v) \leq f(t, x, v) \leq A f_s(x, v) \\ \sup_{x, v} |\partial_{x, v}^\alpha f(t, x, v)| \leq C_p \quad \text{para cualquier } \alpha \in \mathbb{N}^{2N}, |\alpha| = p. \end{cases}$$

Entonces, para todo $\varepsilon \in (0, 1)$, existe una constante $C(\varepsilon, f)$ que depende de a, A y $C_0, \dots, C_{p(\varepsilon)}$ para algún $p(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ tal que se verifica

$$R(f) \leq C(\varepsilon, f) \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}.$$

Demostración. Debemos estimar todos los términos en $R(f)$ por expresiones de la forma

$$C(\varepsilon, f) \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon},$$

donde $C(\varepsilon, f)$ representa diversas constantes en cada término. Comenzamos centrándonos en los dos últimos términos en la definición (2.2.7) de $R(f)$. Estos términos pueden estimarse por expresiones de la forma

(2.2.13)

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{e^{\phi_e/\theta}}{z} dx, \int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{e^{\phi_e/\theta}}{z \rho^2} dx, \\ \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \rho|^2}{\rho^4 z e^{-\phi_e/\theta}} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 dx, \\ \int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{e^{\phi_e/\theta}}{z} dx, \int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{e^{\phi_e/\theta}}{z \rho^2} dx, \end{array} \right.$$

donde por $\varphi(v)$ denotamos cualquier polinomio en v de grado menor que 2. De este modo nuestro problema se traslada a estimar estas cantidades. Y esto puede hacerse siguiendo el proceso de interpolación descrito en la Sección 4 de [10]. Sin embargo, nosotros podemos aprovechar el trabajo que Desvillettes y Villani hicieron, para obtener nuestro propósito. Ya que nuestras estimaciones se reducen a las hechas por estos autores en esa Sección 4 (salvo constantes). En concreto, ellos prueban acotaciones para las cantidades

(2.2.14)

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx, \int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{1}{\rho^3} dx, \\ \int_{\mathbb{R}^N} \frac{|\nabla_x \rho|^2}{\rho^5} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 dx, \\ \int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx, \int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{1}{\rho^3} dx. \end{array} \right.$$

Debido a que suponemos $0 < af_s \leq f \leq Af_s$, tenemos $aze^{-\phi_e/\theta} \leq \rho \leq Aze^{-\phi_e/\theta}$, y entonces,

$$\left(Aze^{-\phi_e/\theta}\right)^{-1} \leq \rho^{-1} \leq \left(aze^{-\phi_e/\theta}\right)^{-1},$$

de este modo, los términos en (2.2.13) están dominados por las cantidades (2.2.14), y entonces, las interpolaciones no lineales desarrolladas en la Sección 4 de [10] nos conducen a acotaciones del tipo $C(\varepsilon, f) \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}$.

Debemos precisar que, en [10], los términos (2.2.14) son estimados por

$$C(\varepsilon, f)H_{\log}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon},$$

donde

$$H_{\log}(f|\rho M_\theta) = \int \int f \log \frac{f}{\rho M_\theta} dx dv.$$

Sin embargo, la propiedad crucial que se usa de H_{\log} en las demostraciones es

$$H_{\log}(f|\rho M_\theta) \geq b \int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{\rho} \left[\int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta| dv \right]^2 dx.$$

Y esta propiedad se mantiene para nuestro funcional de entropía, $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)$, puesto que,

$$(2.2.15) \quad \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{ze^{-\phi_e/\theta}} \left[\int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta| dv \right]^2 dx,$$

y usando $0 < af_s \leq f \leq Af_s$

$$(2.2.16) \quad \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq a \int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{\rho} \left[\int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta| dv \right]^2 dx.$$

De hecho, todas las cantidades (2.2.13) son estimadas en función de

$$\left(\int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{\rho} \left[\int_{\mathbb{R}^N} |f - \rho M_\theta| dv \right]^2 dx \right)^{1-\varepsilon}.$$

Por tanto, para concluir, sólo nos queda estimar el primer término de la definición (2.2.7) de $\widetilde{R}(f)$, nos resta obtener

$$\lambda \theta \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \leq C \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}$$

con C constante. Esto puede verse como una fácil consecuencia del : $af_s \leq f \leq Af_s$. Podemos escribir

$$\lambda \theta \widetilde{H}(f|\rho M_\theta) = \lambda \theta \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^\varepsilon \widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}.$$

Notemos que

$$\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) = \int_{\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N} \frac{f^2}{f_s} dv dx - \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\rho^2}{ze^{-\phi_e/\theta}} dx$$

puede estimarse como

$$\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \leq A^2 \int_{\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N} f_s dv dx - a^2 \int_{\mathbb{R}^N} ze^{-\phi_e/\theta} dx = A^2 - a^2$$

(el término de la derecha es > 0). Entonces, concluimos que

$$\lambda\theta\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \leq C\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon},$$

con $C = \lambda\theta(A^2 - a^2)^\varepsilon$. \square

NOTA 2.2.7. Para poder aplicar el lema anterior, debemos probar las hipótesis (2.2.12) para las soluciones de (2.1.1). La demostración de la primera hipótesis la posponemos a la Sección 4. En realidad, puede probarse el siguiente resultado:

Sea $f_0 : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ una densidad de probabilidad tal que para $a, A > 0$,

$$af_s(x, v) \leq f_0(x, v) \leq Af_s(x, v).$$

Sea f la única solución de la ecuación (2.1.1) con dato inicial f_0 . Entonces f satisface

$$af_s(x, v) \leq f(t, x, v) \leq Af_s(x, v).$$

Esto nos dice que si el dato inicial está acotado superior e inferiormente por un múltiplo de f_s estas estimaciones se preservan para todo tiempo. Para las estimaciones en tiempo de todas las derivadas de f el lector puede encontrar una prueba para el caso de potencial armónico en la Sección 3.

Para acabar esta sección vamos a mostrar brevemente los pasos desarrollados en [10] para estimar las cantidades (2.2.14), que prueban las acotaciones de las cantidades (2.2.13).

2.2.1. Esquema de la interpolación no lineal. Podría uno pensar que las acotaciones de las cantidades (2.2.13), o equivalentemente de las cantidades (2.2.14), son casi rutinarias, puesto que la entropía relativa de f al estado local ρM_θ acota la norma L^1 , pero como se remarcó en [10], debemos notar que $1/\rho$, y por supuesto $1/\rho_s$, típicamente son del orden $e^{|\mathbf{x}|^2/2}$. Por lo que sin más hipótesis sobre la densidad macroscópica, no resulta en absoluto evidente, ni siquiera, que las integrales de estas cantidades sean finitas.

La acotación de las cantidades (2.2.14) se sigue como consecuencia de cinco “proposiciones técnicas” de las que queremos resaltar aquí, sólo los puntos que nos parecen más significativos, ya que la realización de esas computaciones en nuestro caso no aporta ideas nuevas.

Las acotaciones vienen dadas por estimaciones de los momentos de f y M_θ , lo que denotamos por

$$\|f\|_{L_s^1} = \int_{\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N} f(x, v)(1 + |v|^2)^{s/2} dv dx$$

$$\|M_\theta\|_s = \int_{\mathbb{R}^N} M_\theta(v)(1 + |v|^2)^{s/2} dv$$

A continuación vamos a enunciar las cinco proposiciones, antes citadas,

PROPOSICIÓN 2.2.8. [10, Proposición 4.2] Si $|\varphi(v)| \leq 1 + |v|^2$, entonces

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx \leq 2H_{\log}(f|\rho M_\theta)^{\frac{1}{1+\epsilon}} \left(\|M_\theta\|_{2(1+\epsilon)/\epsilon}^2 + \|f\|_{L_{4(1+\epsilon)/\epsilon}^1} \right)^{\frac{\epsilon}{1+\epsilon}}$$

La demostración de esta desigualdad recae en la desigualdad de Csiszár-Kullback-Pinsker. Que en nuestro caso se traduce en la desigualdad (2.2.15), o si se prefiere usando las acotaciones de f en (2.2.16).

PROPOSICIÓN 2.2.9. [10, Proposición 4.3] Si $|\varphi(v)| \leq 1 + |v|^2$ y $af_s \leq f \leq Af_s$, entonces

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{1}{\rho^3} dx \leq 2H_{\log}(f|\rho M_\theta)^{\frac{1}{1+\epsilon}} \left(\frac{A}{a} \right)^2 (N+1)^2 \left(\|M_\theta\|_{2(1+\epsilon)/\epsilon}^2 + \|f\|_{L_{4(1+\epsilon)/\epsilon}^1} \right)^{\frac{\epsilon}{1+\epsilon}}$$

Para la prueba de esta desigualdad hay que ser un poco más cuidadoso, ya que el exponente es menor y no se puede seguir la misma idea que en la proposición anterior. Y es en este punto donde se necesitan las acotaciones superiores e inferiores de f .

Las acotaciones de las otras cantidades en (2.2.14) son más delicadas porque involucran derivadas de f para las que no sabemos su comportamiento en infinito.

PROPOSICIÓN 2.2.10. [10, Proposición 4.4] Si $|\varphi(v)| \leq 1 + |v|^2$ y $af_s \leq f \leq Af_s$ y tiene todas las derivadas de todos los ordenes acotadas. Entonces, para todo $\epsilon > 0$ existe $C_\epsilon(f)$, que depende del potencial, A , a y $\|f\|_{W^{k(\epsilon), \infty}(\mathbb{R}^{2N})}$ para algún $k(\epsilon) \in \mathbb{N}$, tal que

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx \leq C_\epsilon(f) \left[\int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx \right]^{1-\epsilon}$$

Es en este punto, como se puede comprobar a la vista de las hipótesis de la proposición, donde precisamos la segunda condición en (2.2.12), es decir, la acotación uniforme de las derivadas. La necesidad de ello, viene a su vez, del uso del siguiente resultado de regularidad debido a Desvillettes [8], (ver también [10, Proposición A.2]).

LEMA 2.2.11. (Desvillettes) Sea $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^D)$. Supongamos que

$$0 \leq \varphi(t, x) \leq A e^{-\Delta|x|^2}$$

para $A, \Delta > 0$ y que

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^D} |\partial^\alpha \varphi(x)| \leq K_p,$$

se mantiene para $\alpha \in \mathbb{N}^D$ y todo $|\alpha| = p \in \mathbb{N}$, entonces para cualquier $k \in \mathbb{N}$, $\varepsilon > 0$,

$$|\partial^\alpha \varphi| \leq C(k, \varepsilon) e^{-(\Delta-\varepsilon)|x|^2}, \quad |\alpha| = k$$

donde la constante $C(k, \varepsilon)$ depende de Δ y de un número finito de constantes K_i .

Por último, usando de nuevo este lema, se prueba

PROPOSICIÓN 2.2.12. [10, Proposición 4.5] Si $|\varphi(v)| \leq 1 + |v|^2$ y $af_s \leq f \leq Af_s$ y tiene todas las derivadas de todos los órdenes acotadas. Entonces, para todo $\varepsilon > 0$ existe $C_\varepsilon(f)$, que depende del potencial, A , a y $\|f\|_{W^{k(\varepsilon), \infty}(\mathbb{R}^{2N})}$ para algún $k(\varepsilon) \in \mathbb{N}$, tal que

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \frac{1}{\rho^3} dx \leq C_\varepsilon(f) \left[\int_{\mathbb{R}^N} \left[\nabla_x \int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx \right]^{1-\varepsilon}$$

Y

PROPOSICIÓN 2.2.13. [10, Proposición 4.6] Si $|\varphi(v)| \leq 1 + |v|^2$ y $af_s \leq f \leq Af_s$ y tiene todas las derivadas de todos los órdenes acotadas. Entonces, para todo $\varepsilon > 0$ existe $C_\varepsilon(f)$, que depende del potencial, A , a y $\|f\|_{W^{k(\varepsilon), \infty}(\mathbb{R}^{2N})}$ para algún $k(\varepsilon) \in \mathbb{N}$, tal que

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left[\frac{|\nabla_x \rho|^2}{\rho^5} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^4 \right] dx \leq C_\varepsilon(f) \left[\int_{\mathbb{R}^N} \left[\int_{\mathbb{R}^N} [f - \rho M_\theta] \varphi(v) dv \right]^2 \frac{1}{\rho} dx \right]^{1-\varepsilon}$$

Nuestra intención con estas cinco proposiciones era sólo mostrarle al lector, de una forma breve, los pasos seguidos para la obtención de la estimación del resto, $R(f)$. Destacando los puntos concretos en los que eran necesarias las hipótesis (2.2.12). Para detalles más puntuales consultar [10].

2.3. Final de la demostración del comportamiento asintótico. En los apartados anteriores hemos obtenido todas las herramientas necesarias para probar el Teorema 2.1.2. Ahora sólo nos queda recoger los frutos. El Lema 2.2.2, la Proposición 2.2.4 y el Lema 2.2.6 nos conducen directamente al deseado sistema de desigualdades diferenciales

$$\begin{cases} -\frac{d}{dt}H(f|f_s) = \frac{2}{\tau}\tilde{H}(f|\rho M_\theta) \\ \frac{d^2}{dt^2}\tilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \lambda\theta H(f|f_s) - C_\varepsilon(f)\tilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\varepsilon}. \end{cases}$$

Entonces, usando el Teorema 2.2.1, concluimos que, para cualquier $\varepsilon > 0$, existe una constante $C(\varepsilon, f) > 0$ tal que

$$H(f|f_s) \leq C(\varepsilon, f_0) t^{-1/\varepsilon}.$$

Concluimos la demostración con la estimación

$$\|f(t) - f_s\|_{L^1}^2 \leq H(f|f_s).$$

□

Antes de pasar a las secciones siguientes, en las que nos ocuparemos de verificar las hipótesis necesarias para aplicar el proceso de interpolación, queremos cerrar este estudio del comportamiento asintótico de nuestra ecuación, haciendo referencia al trabajo de Hérau-Nier [15]. Éste es un artículo reciente en el que los autores estudian el comportamiento asintótico de la ecuación de Fokker-Planck, probando una “mejoría” sobre el trabajo de Desvillettes y Villani [10], en el sentido de que obtienen orden de convergencia exponencial, mediante técnicas de teoría espectral para operadores lineales.

3. Estimaciones uniformes en tiempo

El Teorema 2.1.2 necesita estimaciones uniformes en tiempo de las derivadas en x, v , para cualquier orden, de la solución f . Nosotros somos capaces de justificar estas acotaciones para el caso particular de potencial armónico

$$\phi_e(x) = \lambda \frac{|x|^2}{2}.$$

Queremos hacer notar, que este tipo de estimaciones no son triviales en absoluto. Incluso, en el caso del operador de Fokker-Planck, para el que se obtiene una regularidad- C^∞ de la solución independientemente de la regularidad del dato inicial, debido al efecto regularizante de la velocidad de difusión, estas estimaciones uniformes en tiempo están lejos de ser evidentes, [10, Section 5]. Puesto que la ecuación (2.1.1) es puramente hiperbólica, podemos esperar este resultado para datos iniciales C^∞ con las derivadas de todos los órdenes acotadas.

De hecho, uno puede escribir $f(t, x, v)$ como una solución de una ecuación integral en términos de las características,

$$\frac{d}{dt}X(t; x, v) = V(t; x, v), \quad \frac{d}{dt}V(t; x, v) = -\nabla_x \phi_e(X(t; x, v))$$

con condiciones iniciales $X(0; x, v) = x, V(0; x, v) = v$. Entonces, la regularidad de las soluciones en (t, x, v) y las acotaciones dependientes del tiempo en L^∞ de las derivadas se prueban usando la regularidad del dato inicial y las características (debido a la regularidad del potencial externo) y al lema de Gronwall. Por tanto, la regularidad de la solución no es un problema, el problema lo encontramos cuando tratamos de evitar la dependencia en tiempo de las estimaciones.

Obtendremos las estimaciones uniformes en tiempo gracias a un delicado estudio de algunas integrales a lo largo de las características del sistema de EDO. Donde usaremos de modo decisivo el conocimiento de las soluciones del sistema de características, por trabajar con el potencial armónico.

Por tanto en esta sección nos centraremos en mostrar las estimaciones uniformes para el caso de potencial cuadrático. Con el fin de hacer más sencilla la sección, supondremos, sin pérdida de generalidad $\lambda = 1$, y probaremos

PROPOSICIÓN 2.3.1. *Sea $f \in C^0(\mathbb{R}_t^+; L^1(\mathbb{R}_x^N \times \mathbb{R}_v^N))$ una solución de la ecuación (2.1.1) con $\phi_e(x) = \frac{|x|^2}{2}$. Supongamos que el dato inicial f_0 tiene todas sus derivadas en x y v acotadas. Entonces f tiene todas sus derivadas en x y v acotadas uniformemente para $t \geq 0$.*

Demostración. La demostración se obtiene como consecuencia de 4 pasos sucesivos.

Paso 1. Aplicamos la transformada de Fourier con respecto a la variable x, v

$$\widehat{f}(t, \xi, \eta) = \mathfrak{F}_{x,v \rightarrow \xi, \eta} f(t, \xi, \eta) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-i(x \cdot \xi + v \cdot \eta)} f(t, x, v) dv dx$$

a la ecuación (2.1.1). Obteniendo

$$\frac{\partial \widehat{f}}{\partial t} - \xi \cdot \nabla_\eta \widehat{f} - \mathfrak{F}_{x,v \rightarrow \xi, \eta} (\nabla_x \phi_e(x) \cdot \nabla_v f) = \widehat{Q}(f) = \frac{1}{\tau} (\mathfrak{F}_{x \rightarrow \xi} \rho(t, \xi) \mathfrak{F}_{v \rightarrow \eta} M_\theta(\eta) - \widehat{f}),$$

donde

$$(2.3.1) \quad \mathfrak{F}_{v \rightarrow \eta} M_\theta(\eta) = e^{-\theta \eta^2 / 2},$$

$$(2.3.2) \quad \mathfrak{F}_{x \rightarrow \xi} \rho(t, \xi) = \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ix \cdot \xi} f(t, x, v) dv dx = \widehat{f}(t, \xi, 0),$$

y para el potencial armónico $\mathfrak{F}_{x,v \rightarrow \xi, \eta}(\nabla_x \phi_e(x) \cdot \nabla_v f) = -\eta \cdot \nabla_\xi \widehat{f}$. Por tanto, en variables de Fourier, (2.1.1) se convierte en

$$(2.3.3) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} + \eta \cdot \nabla_\xi - \xi \cdot \nabla_\eta \right) \widehat{f} = \frac{1}{\tau} (\widehat{f}(t, \xi, 0) e^{-\theta \eta^2 / 2} - \widehat{f}).$$

La hipótesis sobre la acotación de las derivadas en x y v para el dato inicial se reescribe en términos de la transformada de Fourier en:

$$(2.3.4) \quad |\widehat{f}_0(\xi, \eta)| \leq \frac{C_{k,0}}{(1 + \xi^2 + \eta^2)^k} \quad \text{para cualquier } k \in \mathbb{R}^+.$$

Lo que queremos es encontrar una estimación similar para la solución f , uniformemente con respecto al tiempo: concretamente, nuestro objetivo es probar, para cualquier $k \in \mathbb{N}$ la existencia de una constante C_k tal que

$$(2.3.5) \quad |\widehat{f}(t, \xi, \eta)| \leq \frac{C_k}{(1 + \xi^2 + \eta^2)^k}$$

se verifica para cualquier $(t, \xi, \eta) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$.

Paso 2. Consideramos las características asociadas a (2.3.3)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \Xi(t; \xi, \eta) = H(t; \xi, \eta) & \frac{d}{dt} H(t; \xi, \eta) = -\Xi(t; \xi, \eta) \\ \Xi(0; \xi, \eta) = \xi & H(0; \xi, \eta) = \eta \end{cases}$$

Entonces, podemos escribir

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left[e^{s/\tau} \widehat{f}(t+s, \Xi(s), H(s)) \right] &= \frac{1}{\tau} e^{s/\tau} \widehat{f}(t+s, \Xi(s), H(s)) + e^{s/\tau} \left[(\partial_t \widehat{f})(t+s, \Xi(s), H(s)) \right. \\ &\quad \left. + \frac{d}{dt} \Xi(s) \cdot (\nabla_\xi \widehat{f})(t+s, \Xi(s), H(s)) + \frac{d}{dt} H(s) \cdot (\nabla_\eta \widehat{f})(t+s, \Xi(s), H(s)) \right]. \end{aligned}$$

Entonces, obtenemos la fórmula de Duhamel para (2.3.3)

$$(2.3.6) \quad \begin{aligned} \widehat{f}(t, \xi, \eta) &= e^{-t/\tau} \widehat{f}_0(\Xi(-t; \xi, \eta), H(-t; \xi, \eta)) + \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} e^{-\theta H^2(\sigma-t; \xi, \eta)/2} \widehat{f}(\sigma, \Xi(\sigma-t; \xi, \eta), 0) d\sigma. \end{aligned}$$

Denotamos por A y B respectivamente, los sumandos en el término de la derecha, es decir, el término del dato inicial y el término del operador de colisión, respectivamente. Con esta expresión, la solución \widehat{f} puede verse como un punto fijo del

esquema iterativo

$$(2.3.7) \quad \begin{aligned} \widehat{f}_{n+1}(t, \xi, \eta) &= e^{-t/\tau} \widehat{f}_0(\Xi(-t; \xi, \eta), H(-t; \xi, \eta)) \\ &+ \frac{1}{\tau} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} e^{-\theta H^2(\sigma-t; \xi, \eta)/2} \widehat{f}_n(\sigma, \Xi(\sigma-t; \xi, \eta), 0) d\sigma \\ &= (A_n + B_n)(t, \xi, \eta) \end{aligned}$$

Puesto que el término de colisión B sólo involucra a la incógnita evaluada en $\eta = 0$, reduciremos primero (2.3.7) a esta situación, es decir, buscamos la relación de inducción para la densidad macroscópica. Y podemos obtener (2.3.5), para el caso particular $\eta = 0$, por inducción.

Paso 3. En este paso nos concentramos en (2.3.7) con $\eta = 0$. Suponemos que para cualquier $k, n \in \mathbb{N}$ existen constantes $C_{k,0} > 0$ (dependientes de k , pero no de n , hipótesis inicial) y $C_{k,n} > 0$ (dependiente de ambos k, n , hipótesis de inducción) tal que para todo $\xi \in \mathbb{R}^N$ se verifica

$$(2.3.8) \quad |\widehat{f}_0(\xi, 0)| \leq \frac{C_{k,0}}{(1 + \xi^2)^k}, \quad |\widehat{f}_n(t, \xi, 0)| \leq \frac{C_{k,n}}{(1 + \xi^2)^k}.$$

Nuestra meta es estimar A_n y B_n evaluadas en $(t, \xi, 0)$. Para el potencial armónico, recordamos que las características vienen dadas por

$$\Xi(t; \xi, \eta) = \xi \cos(t) + \eta \operatorname{sen}(t), \quad H(t; \xi, \eta) = -\xi \operatorname{sen}(t) + \eta \cos(t).$$

Por tanto, para $\eta = 0$, tenemos

$$(2.3.9) \quad \Xi(t; \xi, 0) = \xi \cos(t), \quad H(t; \xi, 0) = -\xi \operatorname{sen}(t).$$

Notamos también la conservación de la energía

$$(2.3.10) \quad \frac{d}{dt} \left[(\Xi^2(t; \xi, \eta) + H^2(t; \xi, \eta)) \right] = 0.$$

El término inicial se estima rápidamente

$$(2.3.11) \quad |A_n(t, \xi, 0)| \leq \frac{C_{k,0}}{(1 + \Xi^2(-t; \xi, 0) + H^2(-t; \xi, 0))^k} \leq \frac{C_{k,0}}{(1 + \xi^2)^k},$$

usando $|e^{-t/\tau}| \leq 1$ junto con (2.3.4), (2.3.9) y (2.3.10).

La estimación del término $B_n(t, \xi, 0)$ es bastante más complicada. Queremos probar una relación de inducción para las constantes $C_{k,n}$:

$$(2.3.12) \quad C_{k,n+1} = K + \frac{1}{2} C_{k,n},$$

donde K no depende de n . Deducimos de (2.3.12) que $\lim_{n \rightarrow \infty} C_{k,n} = 2K = C_k$.

La hipótesis de inducción (2.3.8) y (2.3.9) prueban

$$(2.3.13) \quad \begin{aligned} |B_n(t, \xi, 0)| &\leq C_{k,n} \int_0^t \frac{e^{(\sigma-t)/\tau}}{\tau} \frac{e^{-\theta\xi^2 \operatorname{sen}^2(\sigma-t)/2}}{(1 + \xi^2 \cos^2(\sigma-t))^k} d\sigma \\ &\leq C_{k,n} \int_{\mathbb{R}^+} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} \frac{e^{-\theta\xi^2 \operatorname{sen}^2(u)/2}}{(1 + \xi^2 \cos^2(u))^k} du. \end{aligned}$$

Si uno estima bruscamente esta integral, obtiene $C_{k,n+1} = K + \kappa C_{k,n}$, con $\kappa > 1$, lo que no ayuda. Por tanto, deberemos ser más cuidadosos en nuestras estimaciones del término de la derecha.

Sea $\varepsilon > 0$, que precisaremos más adelante. Dividimos el término de la derecha en (2.3.13) en dos trozos integrando de forma separada en dos dominios

$$\{u \geq 0, \operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}, \quad \{u \geq 0, \operatorname{sen}^2(u) > \varepsilon\}.$$

Denotamos las integrales correspondiente como $B_1(n, \varepsilon)$ y $B_2(n, \varepsilon)$, respectivamente. Tenemos

$$\begin{aligned} B_1(n, \varepsilon) &\leq C_{k,n} \int_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} \frac{du}{(1 + \xi^2 \cos^2(u))^k} \\ &\leq C_{k,n} \int_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} \frac{du}{(1 + (1 - \varepsilon)\xi^2)^k} \\ &\leq C_{k,n} \int_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} \frac{du}{(1 + \xi^2)^k (1 - \varepsilon)^k} \end{aligned}$$

usando sucesivamente los argumentos siguientes:

- i) $e^{-\theta\xi^2 \operatorname{sen}^2(\sigma-t)/2} \leq 1$,
- ii) Sobre el dominio de integración $\operatorname{sen}^2(u) = 1 - \cos^2(u) < \varepsilon$, por tanto $(1 + (1 - \varepsilon)\xi^2)^k < (1 + \cos^2(u)\xi^2)^k$,
- iii) La función $s \mapsto \frac{1+s}{1+(1-\varepsilon)s}$ es no decreciente en \mathbb{R}^+ por lo que se tiene $\frac{1+\xi^2}{1+(1-\varepsilon)\xi^2} \leq \frac{1}{1-\varepsilon}$.

Sea $I_\varepsilon = \int_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} du$. Usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz, obtenemos

$$\begin{aligned} I_\varepsilon &= \sum_{j=0}^{\infty} \int_{j\frac{\pi}{2}}^{(j+1)\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} \chi_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} du \\ &\leq \sum_{j=0}^{\infty} \left(\int_{j\frac{\pi}{2}}^{(j+1)\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-2u/\tau}}{\tau^2} du \right)^{1/2} \left(\int_0^{\frac{\pi}{2}} \chi_{\{\operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\}} du \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Sin embargo, notamos que

$$\operatorname{med}\left(\left\{u \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right], \operatorname{sen}^2(u) < \varepsilon\right\}\right) \leq c\sqrt{\varepsilon},$$

donde med representa la medida de Lebesgue. Se sigue que

$$I_\varepsilon \leq \sum_{j=0}^{\infty} \frac{e^{-j\pi/\tau}}{2\tau} (1 - e^{-\pi/\tau}) c^{1/2} \varepsilon^{1/4} = C \varepsilon^{1/4},$$

con $C = \frac{c^{1/2}}{2\tau}$. Deducimos que

$$(2.3.14) \quad B_1(n, \varepsilon) \leq C_{k,n} \frac{C\varepsilon^{1/4}}{(1-\varepsilon)^k} \frac{1}{(1+\xi^2)^k}.$$

Volvemos a

$$B_2(n, \varepsilon) \leq \int_{\{\sin^2(u) > \varepsilon\}} \frac{e^{-u/\tau}}{\tau} e^{-\theta\varepsilon\xi^2/2} du,$$

donde usamos $\sin^2(u) > \varepsilon$ sobre el dominio de integración y $1 + \xi^2 \cos^2(u) \geq 1$. Tomamos $k' > k$ y consideramos

$$K(\varepsilon) = \sup_{y \in \mathbb{R}^+} \{e^{-\theta\varepsilon y/2} (1+y)^{k'}\}.$$

Entonces, multiplicando y dividiendo por $(1+\xi^2)^{k'}$, tenemos

$$(2.3.15) \quad B_2(n, \varepsilon) \leq K(\varepsilon) \frac{1}{(1+\xi^2)^{k'}}$$

donde sabemos que

$$K(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{si } 2k' \leq \theta\varepsilon, \\ e^{\theta\varepsilon/2} e^{-k'} \left(\frac{2k'}{\theta\varepsilon}\right)^{k'} & \text{si } 2k' > \theta\varepsilon. \end{cases}$$

Como ε va a 0, uno está en el segundo caso y $K(\varepsilon)$ tiende a infinito. Esta dificultad motiva el siguiente razonamiento:

j) Elegimos $\varepsilon > 0$ tal que $\frac{C\varepsilon^{1/4}}{(1-\varepsilon)^k} < \frac{1}{4}$,

jj) Entonces, elegimos $R > 0$ tal que $\frac{K(\varepsilon)}{(1+R^2)^{k'-k}} < \frac{1}{4}$.

Combinando (2.3.11), (2.3.14) y (2.3.15) tenemos

$$|\widehat{f}_{n+1}(t, \xi, 0)| \leq \frac{1}{(1+\xi^2)^k} \left(C_{k,0} + C_{k,n} \left[\frac{C\varepsilon^{1/4}}{(1-\varepsilon)^k} + \frac{K(\varepsilon)}{(1+\xi^2)^{k'-k}} \right] \right).$$

Por tanto, obtenemos

$$(2.3.16) \quad \sup_{|\xi| \geq R} |\widehat{f}_{n+1}(t, \xi, 0)| \leq (C_{k,0} + C_{k,n}/2) \frac{1}{(1+\xi^2)^{k'}}$$

con nuestras elecciones para ε, R . Finalmente recordamos que, puesto que la ecuación preserva la masa total, $\sup_{\xi, \eta} |\widehat{f}(t, \xi, \eta)| \leq \|f_0\|_{L^1}$. Entonces, en particular, para

alguna constante $\beta > 0$ tenemos

$$\sup_{|\xi| \leq R} |\widehat{f}_{n+1}(t, \xi, 0)| \leq \beta \frac{(1 + R^2)^k}{(1 + \xi^2)^k}.$$

Combinando esta información con (2.3.16), deducimos que

$$\sup_{t, \xi} |\widehat{f}_{n+1}(t, \xi, 0)| \leq (C_{k,0} + \beta(1 + R^2)^k + C_{k,n}/2) \frac{1}{(1 + \xi^2)^k}$$

lo que desemboca en la relación esperada

$$C_{k,n+1} = C_{k,0} + \beta(1 + R^2)^k + \frac{1}{2}C_{k,n}.$$

Concluimos este paso con la siguiente afirmación: para cualquier $k \in \mathbb{N}$, existe una constante $C_k > 0$ tal que

$$(2.3.17) \quad \sup_{t, \xi} |\widehat{f}(t, \xi, 0)| \leq \frac{C_k}{(1 + \xi^2)^k}.$$

Paso 4. Para terminar la demostración, sólo nos resta volver al caso general $\eta \neq 0$. Con lo que sabemos de los tres pasos anteriores, podemos trabajar directamente sobre f , es decir, sin usar un razonamiento inductivo. De hecho, por la hipótesis sobre el dato inicial el primer término, denotado por A , en (2.3.6) obviamente satisface

$$|A(t, \xi, \eta)| \leq \frac{C_{k,0}}{(1 + \xi^2 + \eta^2)^{k'}}$$

mientras para el segundo término, denotado por B , obtenemos directamente

$$|B(t, \xi, \eta)| \leq \frac{D_k}{(1 + \xi^2 + \eta^2)^k}$$

donde hemos usado (2.3.17), para alguna constante $D_k > 0$. Concluimos que

$$(2.3.18) \quad \sup_{t, \xi, \eta} |\widehat{f}(t, \xi, \eta)| \leq \frac{C_{k,0} + D_k}{(1 + \xi^2 + \eta^2)^{k'}}$$

lo que finaliza la demostración.

4. Principio del máximo

En esta sección queremos probar la preservación de las acotaciones

$$(2.4.1) \quad af_s(x, v) \leq f(t, x, v) \leq Af_s(x, v)$$

para la solución (2.1.1), ver Nota 2.2.7. La demostración de este hecho la obtenemos por un razonamiento inductivo.

Consideramos las características para (2.1.1):

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}X(t; x, v) = V(t; x, v) & \frac{d}{dt}V(t; x, v) = -\nabla_x \phi_e(X(t; x, v)) \\ X(0; x, v) = x & V(0; x, v) = v \end{cases}$$

Reescribimos (2.1.1) como una EDO

$$\frac{d}{ds} \left(e^{s/\tau} f(t+s, X(s; x, v), V(s; x, v)) \right) = \frac{1}{\tau} e^{s/\tau} \rho M_\theta(t+s, X(s; x, v), V(s; x, v)).$$

Entonces, podemos escribir la fórmula de Duhamel

$$(2.4.2) \quad \begin{aligned} f(t, x, v) &= e^{-t/\tau} f_0(X(-t; x, v), V(-t; x, v)) \\ &+ \frac{1}{\tau(2\pi\theta)^{N/2}} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} \rho(\sigma, X(\sigma-t; x, v)) e^{-V^2(\sigma-t; x, v)/(2\theta)} d\sigma. \end{aligned}$$

Y obtenemos la solución f como el punto fijo del siguiente esquema inductivo

$$(2.4.3) \quad \begin{cases} f_{n+1}(t, x, v) = e^{-t/\tau} f_0(X(-t; x, v), V(-t; x, v)) \\ \quad + \frac{1}{\tau(2\pi\theta)^{N/2}} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} \rho_n(\sigma, X(\sigma-t; x, v)) e^{-V^2(\sigma-t; x, v)/(2\theta)} d\sigma \\ \rho_n(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} f_n(t, x, v) dv. \end{cases}$$

Nos concentramos, en la demostración detallada de $af_s \leq f_0$, la acotación superior se hace de un modo análogo. Notamos que $\frac{d}{dt} \left(2\phi_e(X(t; x, v)) + V^2(t; x, v) \right) = 0$ entonces se conserva la energía

$$\phi_e(X(t; x, v)) + \frac{V^2(t; x, v)}{2} = \phi_e(x) + \frac{v^2}{2}.$$

Por tanto, el estado estacionario verifica

$$(2.4.4) \quad f_s(X(-t; x, v), V(-t; x, v)) = f_s(x, v).$$

Puesto que $af_s(x, v) \leq f_0(x, v)$ y (2.4.4), tenemos

$$af_s(x, v) = f_s(X(-t; x, v), V(-t; x, v)) \leq f_0(X(-t; x, v), V(-t; x, v)).$$

Por otro lado, la hipótesis de inducción $f_n(t, x, v) \geq af_s(x, v)$ nos dice

$$\rho_n(t, x) \geq (2\pi\theta)^{N/2} aze^{-\phi_e(x)/\theta}.$$

De donde se sigue

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau(2\pi\theta)^{N/2}} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} \rho_n(\sigma, X(\sigma-t; x, v)) e^{-V^2(\sigma-t; x, v)/(2\theta)} d\sigma \\
& \geq \frac{1}{\tau(2\pi\theta)^{N/2}} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} (2\pi\theta)^{N/2} az e^{-\phi_e(X(\sigma-t; x, v))/\theta} e^{-V^2(\sigma-t; x, v)/(2\theta)} d\sigma \\
& \geq \frac{az}{\tau} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} e^{-(\phi_e(X(\sigma-t; x, v)) + V^2(\sigma-t; x, v)/2)/\theta} d\sigma \\
& \geq aze^{-(\phi_e(x) + v^2/2)/\theta} \frac{1}{\tau} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} d\sigma = af_s(x, v)(1 - e^{-t/\tau}),
\end{aligned}$$

usando la conservación de la energía. Concluimos que $af_s(x, v) \leq f_{n+1}(t, x, v)$. \square

De este modo hemos probado la preservación de la acotación que necesitábamos para situarnos en las hipótesis que mostraban la convergencia al equilibrio con velocidad algebraica. Pero este resultado puede verse, también, como una consecuencia de uno más general y que le ha dado el nombre a esta sección. Ya que la ecuación que ocupa a este capítulo verifica el principio del máximo. Que enunciamos como sigue

PROPOSICIÓN 2.4.1. *Sea $f \in C^0(\mathbb{R}_t^+; L^1(\mathbb{R}_x^N \times \mathbb{R}_v^N))$ una solución de la Ecuación (2.1.1). Entonces, si el dato inicial verifica $f_0 \geq 0$ (o $f_0 \leq 0$), esta propiedad se preserva para todo tiempo t : $f(t) \geq 0$ (o $f(t) \leq 0$).*

Demostración. Como hacíamos en la demostración de la propiedad del comienzo de esta sección (2.4.1), para probar este resultado, seguiremos un razonamiento inductivo. Recordemos el esquema inductivo (2.4.3) que se obtenía gracias a la fórmula de Duhamel (2.4.2)

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{n+1}(t, x, v) = e^{-t/\tau} f_0(X(-t; x, v), V(-t; x, v)) \\ \quad + \frac{1}{\tau(2\pi\theta)^{N/2}} \int_0^t e^{(\sigma-t)/\tau} \rho_n(\sigma, X(\sigma-t; x, v)) e^{-V^2(\sigma-t; x, v)/(2\theta)} d\sigma \\ \rho_n(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} f_n(t, x, v) dv. \end{array} \right.$$

Supongamos que el dato inicial verifica $f_0 \geq 0$ (para el caso negativo se haría de modo análogo). Supongamos también la hipótesis de inducción: $f_n \geq 0$ (y por tanto $\rho_n \geq 0$). Entonces, con estas dos hipótesis, tenemos que para todo $t \geq 0$ $f_{n+1}(t, x, v)$ está descompuesto en dos sumandos no negativos y consecuentemente concluimos $f_{n+1} \geq 0$. \square

La propiedad (2.4.1) es ahora una consecuencia de la proposición anterior ya que $g(t, x, v) = f(t, x, v) - cf_s(x, v)$ verifica la Ecuación (2.1.1), para cualquier constante c , entonces $g(t)$ mantiene el signo que tuviera el dato inicial, $g_0 = f_0 - cf_s$.

5. Notas finales

Para finalizar este capítulo deseamos resaltar diversas cuestiones que surgen, a la vista de los resultados obtenidos. Así mismo, planteamos las bases de trabajos futuros

- La acotación inferior del dato inicial, $af_s \leq f_0$ puede verse como algo natural ya que de este modo se garantiza la no nulidad de la densidad local ρ .
La acotación superior, $f_0 \leq Af_s$, si puede "tacharse de innatural", por lo que cabe preguntarse, si sería posible relajarla. Recordemos que esta hipótesis, venía impuesta por razones técnicas, como consecuencia de las herramientas utilizadas en el proceso de interpolación. Cuando se repasa con atención este proceso (ver Sección 2.2.1 y más concretamente [10]), encontramos que la hipótesis que realmente se necesita es la acotación uniforme de todos los momentos. Una condición simple que garantiza estas acotaciones es la hipótesis impuesta, $f_0 \leq Af_s$.
- La hipótesis sobre el dato inicial $f_0 \in C^\infty$, puede relajarse, obteniéndose entonces la siguiente reformulación del Teorema 2.1.2

TEOREMA 2.5.1. *Sea f_0 verificando*

$$af_s \leq f_0 \leq Af_s,$$

para algún $0 < a < A$, $f_0 \in C^n(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, $n \geq 2$, con todas sus derivadas acotadas. Sea f la solución de la ecuación (2.1.1). Supongamos que f tiene todas sus derivadas $\partial_{x,\nu}^\alpha f$, $|\alpha| \leq n$, acotadas uniformemente en tiempo. Entonces, para todo $\varepsilon > 0$ y $t > 0$

$$\|f(t) - f_s\|_{L^1(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)} \leq C_\varepsilon(f_0)t^{(1-n)/2}$$

donde $C_\varepsilon(f_0)$ depende de ε , del dato inicial y de las acotaciones de las derivadas de f .

La demostración de este resultado se sigue del mismo modo que en el Teorema 2.1.2, con la salvedad de la parte referente a la interpolación no lineal. Recordamos que la demostración es una consecuencia del Teorema 6.2 en [10], (Teorema 2.2.1). El sistema de desigualdades diferenciales (2.2.3) se escribe en este caso como,

$$\begin{cases} -\frac{d}{dt}H(f|f_s) = \frac{2}{\tau}\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \\ \frac{d^2}{dt^2}\widetilde{H}(f|\rho M_\theta) \geq \lambda\theta H(f|f_s) - C_\varepsilon(f)\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\frac{1}{n}}. \end{cases}$$

La diferencia con el sistema para el Teorema 2.1.2 está en $\widetilde{H}(f|\rho M_\theta)^{1-\frac{1}{n}}$, dicho teorema, recordemos, se obtenía como resultado de la estimación

del resto $R(f)$. En este caso, en el que el dato inicial verifica $f_0 \in C^n(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N)$, se puede seguir el esquema expuesto en 2.2.1, con la precisión de que las Propositiones 4.4, 4.5 y 4.6 en [10] (Propositiones 2.2.10, 2.2.12 y 2.2.13) recaerán en una “modificada Proposición A.2” de [10], siguiendo argumentos similares a los desarrollados por Desvillettes en [8, Apéndice B],

PROPOSICIÓN 2.5.2. *Sea $g \in C^n(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, $N \geq 1$, verificando:*

1. *Existen K_0 y $D > 0$ tales que :*

$$\forall x \in \mathbb{R}^N \quad |g(x)| \leq K_0 e^{-D|x|^2}.$$

2. *$\forall p \leq n$, p natural, existe $K_p > 0$ tal que:*

$$\forall x \in \mathbb{R}^N \quad \|\nabla^p g(x)\|_\infty \leq K_p.$$

Entonces, para todo $k \in \mathbb{N}$, $k \leq n$, $\epsilon > 0$, existe $L_{\epsilon,k} > 0$ (que depende de K_i , $0 \leq i \leq N(\epsilon, k)$ y D) tal que:

$$\forall x \in \mathbb{R}^N \quad \|\nabla^k g(x)\|_\infty \leq L_{\epsilon,k} e^{-(D-\epsilon)|x|^2}$$

Queremos hacer notar, que por supuesto, necesitamos imponer estimaciones uniformes a priori de la solución.

- Como se decía en la Sección 3, las estimaciones uniformes en tiempo no son en absoluto evidentes, frente a lo que en principio podría suponerse dada la “simplicidad” de la ecuación. Queremos señalar, que en este capítulo sólo hemos probado estas estimaciones para el caso concreto de trabajar con potencial armónico. Insertamos, de este modo, en nuestra carpeta de problemas abiertos-trabajos futuros la búsqueda de regularidad para potenciales más generales.
- El método de disipación de entropía nos ha mostrado la convergencia algebraica de la solución al estado estacionario. De la misma manera que le sucedía a la ecuación de Fokker-Planck lineal. En el caso de dicha ecuación (Fokker-Planck) con potencial confinante armónico se conoce la velocidad óptima de convergencia, siendo ésta exponencial. Desvillettes y Villani en su artículo nos dicen que este método es incapaz de recuperar dicha velocidad óptima. Y la razón de ello hay que buscarla en la interpolación. Para nuestra ecuación esta información no se conoce, pero cabe preguntarse si podría obtenerse. Hérau y Nier, [15], han probado convergencia exponencial para la ecuación de Fokker-Planck usando teoría espectral. ¿Qué información podría ofrecer la teoría espectral en nuestro problema? es una pregunta de no fácil respuesta, ya que Hérau y Nier utilizan de forma decisiva las propiedades de hipoeipticidad de los operadores lineales de la forma $\partial_t + v \cdot \nabla_x - \Delta_v$. El espectro de nuestro operador no es conocido, por lo que no es, en absoluto, evidente que las técnicas de teoría espectral

desarrolladas en [15] puedan llevarnos a la convergencia exponencial, de la solución de nuestro sistema hacia el estado estacionario.



Bibliografía

- [1] A. ARNOLD, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *On convex Sobolev inequalities and the rate of convergence to equilibrium for Fokker-Planck type equations*, Comm. Partial Differential Equations, 26 (1-2), (2001) pp. 43–100.
- [2] D. BAKRY, M. EMERY *Diffusions hypercontractives*. in *Séminaires de Probabilités, XIX, 1983-84, Lecture Notes in Math.*, Springer, 1985; Vol. 123, pp. 177-206.
- [3] N. BEN ABDALLAH, J. DOLBEAULT, *Entropies relatives pour le système de Vlasov-Poisson dans des domaines bornés (Relative entropies for the Vlasov-Poisson system in bounded domains)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. I, Math., 330, (2000), pp. 867–872.
- [4] N. BEN ABDALLAH, J. DOLBEAULT, *Relative entropies for kinetic equations in bounded domains*. Para aparecer en Arch. Rational Mech. Anal.
- [5] J. A. CARRILLO, A. JÜNGEL, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *Entropy dissipation methods for degenerate parabolic systems and generalized Sobolev inequalities*, Monatsh. Math., 133, (2001), pp. 1–82.
- [6] J. A. CARRILLO, R. J. McCANN, C. VILLANI, *Kinetic equilibration rates for granular media and related equations: entropy dissipation and mass transportation estimates*, para aparecer en Revista Matemática Iberoamericana.
- [7] J. A. CARRILLO, G. TOSCANI, *Asymptotic L^1 -decay of solutions of the porous medium equation to self-similarity*, Indiana Univ. Math. J., 49, (2000) pp. 113-141.
- [8] L. DESVILLETES, *About the regularizing properties of the non-cut-off Kac equation*, Comm. Math. Phys., 168 (2), (1995), pp. 417–440.
- [9] L. DESVILLETES, J. DOLBEAULT, *On long time asymptotics of the Vlasov-Poisson-Boltzmann equation*, Comm. Partial Differential Equations, 16 (2-3), (1991), pp. 451–489.
- [10] L. DESVILLETES, C. VILLANI, *On the trend to global equilibrium in spatially inhomogeneous entropy-dissipating systems: the linear Fokker-Planck equation*, Comm. Pure Appl. Math., 54 (1), (2001), pp. 1–42.
- [11] L. DESVILLETES, C. VILLANI, *On the trend to global equilibrium in spatially inhomogeneous entropy-dissipating systems: nonlinear models*. Sometido a publicación.
- [12] J. DOLBEAULT, M. DEL PINO, *Best constants for Gagliardo-Nirenberg inequalities and application to nonlinear diffusions*. J. Math. Pures Appl., 81 (9), (2002) pp. 847-875.
- [13] K. FELLNER, L. NEUMANN, C. SCHMEISER, *Convergence to global equilibrium for spatially inhomogeneous kinetic models of non-micro-reversible processes*. Para aparecer en Monatsh. Math.
- [14] H. GRAD, *On Boltzmann's H-Theorem*. J. Soc. Indust. Appl. Math., 13, (1965), pp. 259–277.
- [15] F. HÉRAU, F. NIER, *Isotropic hypoellipticity and trend to the equilibrium for the Fokker-Planck equation with high degree potential*. Sometido a publicación.
- [16] P. MARKOWICH, C. VILLANI, *On the trend to equilibrium for the Fokker-Planck equation: an interplay between physics and functional analysis*. Proceedings, VI Workshop on Partial Differential Equations, Part II. Rio de Janeiro, 1999; Mat. Contemp. 2000, 19, pp.1–29.
- [17] F. OTTO, *The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation*. Comm. Partial Differential Equations, 26, (2001), pp. 101–174.

- [18] C. VILLANI, *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory, 1*, (2002) *Handbook of mathematical fluid mechanics*. Editado por Susan Friedlander y Denis Serre, publicado por North-Holland.

CAPÍTULO 3

Estabilidad no lineal en L^p para un sistema de partículas cargadas confinado

En este capítulo estudiamos la estabilidad no lineal en L^p , con $1 \leq p \leq 2$, de ciertas soluciones estacionarias del sistema de Vlasov-Poisson para partículas cargadas en todo el espacio \mathbb{R}^6 . La herramienta principal es un funcional asociado a la entropía relativa, también llamado en la literatura funcional de energía-Casimir.¹

1. Introducción

Consideremos un gas de partículas cargadas descrito por una función de distribución $f(t, x, v) \geq 0$, que representa la densidad de probabilidad de partículas en la posición x , con velocidad v en el tiempo t . La ecuación de evolución de Liouville gobierna la evolución de f ,

$$(3.1.1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + E(t, x) \cdot \nabla_v f = 0$$

en $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, donde el campo eléctrico $E(t, x)$ viene dado por un potencial externo ϕ_e y un potencial de campo medio ϕ , de acuerdo a

$$(3.1.2) \quad E(t, x) = -e(\nabla_x \phi(t, x) + \nabla_x \phi_e(x)).$$

El potencial electrostático $\phi \geq 0$ es auto-consistente

$$(3.1.3) \quad \phi = K * \rho(f)$$

con $K = \frac{e}{4\pi\epsilon_0}|x|^{-1}$, donde $\rho(f)$ es la densidad espacial de partículas, definida por

$$\rho(f)(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv.$$

ϵ_0 y e son la permitividad del vacío y la carga elemental de las partículas, respectivamente. Sin pérdida de generalidad, en lo que sigue, las supondremos iguales a uno.

¹Los contenidos de este capítulo han sido desarrollados a modo de artículo en MARÍA J. CÁCERES, JOSÉ A. CARRILLO, JEAN DOLBEAULT, *Nonlinear stability in L^p for a confined system of charged particles*, SIAM J. Math. Anal, 34, (2002), pp. 478-494.

Consideraremos el problema de valores iniciales, correspondiente al dato inicial

$$(3.1.4) \quad f(0, x, v) = f_0(x, v) \geq 0.$$

Este sistema se conoce como *el sistema de Vlasov-Poisson para partículas cargadas*. El principal ingrediente que añadimos a la versión usual del sistema de Vlasov-Poisson es un potencial externo que confine las partículas y permita de este modo la existencia de estados estacionarios. Por ello nos referiremos a $\phi_e(x)$ como un *potencial confinante*.

El objetivo de este capítulo es establecer la estabilidad no lineal de ciertos estados estacionarios en $L^p(\mathbb{R}^6)$ con $p \in [1, 2]$ y con constantes explícitas, al menos en algunos casos (ver Sección 3). Para ello, usaremos una entropía, que en la literatura se puede encontrar bajo el nombre de *energía-Casimir*, *energía libre*, *entropía relativa* o *funcional de Lyapunov*. Estados estacionarios y funcionales de entropía estarán estrechamente relacionados. El estado estacionario surge como un mínimo (bajo ciertas condiciones) de la entropía y recíprocamente, el funcional de entropía viene determinado por la forma en energía de la solución estacionaria. Nuestro principal resultado corresponde a un p fijado por la entropía.

TEOREMA 3.1.1. *Sea ϕ_e una función acotada inferiormente en \mathbb{R}^3 con $\phi_e(x) \rightarrow +\infty$ cuando $|x| \rightarrow +\infty$, tal que $(x, s) \mapsto s^{3/2-1}\gamma(s + \phi_e(x))$ pertenece a $L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^3, L^1(\mathbb{R}))$, donde γ es la inversa de $(-\sigma')$, eventualmente extendida por 0, y σ es una función acotada inferiormente y estrictamente convexa de clase C^2 . Sea f una solución débil del sistema de Vlasov-Poisson correspondiente al dato inicial no negativo f_0 en $L^1 \cap L^{p_0}$, $p_0 = (12 + 3\sqrt{5})/11$, tal que $\sigma(f_0)$ y $(|\phi_e| + |v|^2)f_0$ pertenecen a $L^1(\mathbb{R}^6)$. Si $\inf_{s \in (0, +\infty)} \sigma''(s)/s^{p-2} > 0$ para algún $p \in [1, 2]$, entonces existe una constante explícita $C > 0$, que depende sólo de f_0 , tal que para cualquier $t > 0$, $f = f(t)$ satisfice*

$$\|f - f_\infty\|_{L^p}^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^6} [\sigma(f_0) - \sigma(f_\infty) - \sigma'(f_\infty)(f_0 - f_\infty)] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla(\phi_0 - \phi_\infty)|^2 dx$$

donde $(f_\infty(x, v) = \gamma(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e(x) + \phi_\infty(x)), \phi_\infty)$ es una solución estacionaria del sistema de Vlasov-Poisson y ϕ_0 viene dado por (3.1.3) cuando $t = 0$.

El valor de p_0 viene dado por el artículo [34] de Hörst y Hunze para poder definir las soluciones débiles (ver Sección 2 para más detalles). Debemos notar, que algunos de nuestros resultados pueden ser extendidos a nociones de solución, aún más débiles, como soluciones renormalizadas. Soluciones que fueron introducidas por Diperna y Lions en [26], como veremos más adelante.

También, señalamos que las hipótesis sobre σ en el Teorema 3.1.1 pueden ser trasladadas a condiciones sobre γ , si se prefiere. Pero como nuestros estados estacionarios se obtienen como mínimos de funcionales de entropía, que dependen de σ , consideramos más natural que las hipótesis recaigan sobre σ .

El segundo resultado importante en este capítulo, es un resultado de estabilidad en L^2 , que puede ser escrito como sigue en el caso de soluciones estacionarias Maxwellianas.

TEOREMA 3.1.2. *Bajo las mismas hipótesis que en el Teorema 3.1.1, salvo que ahora suponemos $p_0 = 2$ y $\sigma(s) = s \log s - s$, existe un funcional convexo \mathcal{F} que alcanza su mínimo en $f = f_\infty$ y tal que cualquier solución débil de (3.1.1)-(3.1.4) satisfice*

$$\|f(t, \cdot) - f_\infty\|_{L^2}^2 \leq \mathcal{F}[f_0].$$

Con las notaciones del Teorema 3.1.1, $p=1$, $\gamma(s) = e^{-s}$ y (f_∞, ϕ_∞) viene dada por

$$f_\infty(x, v) = \frac{e^{-|v|^2/2}}{(2\pi)^{3/2}} \rho_\infty(x)$$

con

$$-\Delta\phi_\infty = \rho_\infty = \|f_0\|_{L^1} \frac{e^{-(\phi_\infty + \phi_e)}}{\int e^{-(\phi_\infty + \phi_e)} dx}.$$

El Teorema 3.1.1 está basado, de alguna manera, en el método canónico de entropías relativas y soluciones estacionarias especiales, al menos para $p = 1$ o $p = 2$. Aquí, obtenemos resultados de estabilidad no lineal en L^p , $1 \leq p \leq 2$, para toda una familia de estados estacionarios. Así mismo, aprovechando la acotación uniforme de la solución estacionaria podemos introducir nuevas posibles elecciones del funcional de entropía y obtener resultados de estabilidad en L^q con $q \neq p$: por ejemplo $q = 2$ y $p = 1$ en el Teorema 3.1.2. Debemos notar que el Teorema 3.1.2 da un resultado de L^2 -estabilidad para estados estacionarios Maxwellianos, que no están incluidos en el Teorema 3.1.1 (ver Sección 4).

Ideas similares fueron usadas anteriormente en diversos contextos: para sistemas gravitacionales (sin confinamiento) en [42, 44, 30, 31, 32] usando el método de energía-Casimir y para sistemas en dominios acotados en [6, 7], usando estimaciones de entropía en las condiciones de contorno tipo Darrozès & Guiraud. Para el caso de confinamiento, referimos a [27], y también a [11, 10, 24] para modelos con un término de Fokker-Planck. Métodos de entropía han sido adaptados, recientemente para difusiones no lineales: ver por ejemplo, [2] en el caso lineal y [13, 14, 20, 39, 23, 22] en el caso no lineal, con aplicaciones a modelos acoplados con Poisson [2, 8, 9] (ver también referencias en ellos para trabajos anteriores). Las estimaciones de tipo Csiszár-Kullback son, en realidad, exactamente iguales en el marco cinético y parabólico.

La referencia más relevante para este capítulo, y por tanto en el caso del sistema de Vlasov-Poisson electrostático, es [12] (ver también [4, 5, 29] para resultados anteriores para plasma físico). En [12], Braasch, Rein y Vukadinović consideran soluciones clásicas con soporte compacto para el problema de Cauchy y soluciones estacionarias de soporte compacto en la variable de energía, dependientes de invariantes adicionales del movimiento de las partículas.

El objetivo y novedad de este capítulo reside en la extensión de sus resultados a soluciones más generales, a soluciones débiles y enfatizar en la relación entre la regularidad del dato inicial y los posibles funcionales y normas. Más precisamente, mejoramos y completamos los resultados en [12] en varias direcciones:

- Generalizamos los estados estacionarios, en dos sentidos: les permitimos no ser de soporte compacto en la variable de energía (estados estacionarios Maxwellianos), y la dependencia en energía y en otros invariantes del movimiento no son necesariamente mediante estados factorizados (ver Sección 6 para más detalles).
- Los Teoremas 3.1.1 y 3.1.2 son válidos tanto para soluciones débiles como renormalizadas.
- Y finalmente, obtenemos acotaciones de estabilidad en espacios L^q con $1 \leq q \leq 2$ (mientras que en [12] sólo se daban para $q = 2$).

Trabajaremos en el marco de soluciones débiles [34, 36] o renormalizadas [26, 38], incluyendo de este modo, el caso de soluciones clásicas. Como veremos, hay una clase natural de soluciones estacionarias y normas L^p con respecto a las cuales se puede estudiar la estabilidad, pero además consideraremos otras normas L^q . Por ejemplo, se sabe que los estados estacionarios Maxwellianos son asintóticamente estables en $L^1(\mathbb{R}^6)$ para el sistema de Vlasov-Poisson-Fokker-Planck (VPFP) [11, 10, 27, 24], lo que nos impulsa a pensar que estos estados sean estables para el sistema de Vlasov-Poisson en L^1 , por supuesto, pero también en otras normas. Esta cuestión motivó inicialmente nuestro estudio.

Este capítulo lo organizamos como sigue. Empezaremos discutiendo y dando un repaso de las nociones y propiedades de las soluciones del sistema de Vlasov-Poisson. En la Sección 2 introduciremos, la familia de soluciones estacionarias con la que trabajaremos a lo largo de este capítulo. La Sección 3 la dedicaremos a la demostración de una versión generalizada del Teorema 3.1.1. El Teorema 3.1.2 será probado en la Sección 4. En la Sección 5, estableceremos algunas relaciones entre los diversos resultados de estabilidad no lineal, dados en las secciones anteriores, y generalizaremos el Teorema 3.1.2. Finalmente, en la Sección 6, consideraremos estados estacionarios más generales dependientes de invariantes adicionales, para los cuales probaremos una extensión del Teorema 3.1.2.

2. Nociones de solución y estados estacionarios

2.1. Soluciones débiles y renormalizadas para el problema de Cauchy. Una *solución clásica* [41, 43, 33, 28] es una solución del problema de Cauchy (3.1.1)-(3.1.4) para la cual las derivadas existen en el sentido clásico y el término de fuerza E satisface una condición de Lipschitz. Nuestros resultados se aplicarán a nociones de solución más débiles. Por *solución débil* [3, 34, 36], se entiende una

solución en el sentido distribucional, para la cual el término de fuerza E no es suficientemente regular para aplicar la teoría clásica de características (más abajo precisaremos la noción de solución). Esencialmente, trabajaremos en el marco de *soluciones débiles* (\mathcal{W}) de Hörst & Hunze [34], y como caso especial, en el de Lions & Perthame [36] que abre un abanico más amplio de desigualdades de interpolación. Estas últimas soluciones son a veces llamadas *soluciones fuertes* [40] y serán denotadas por (\mathcal{S}). Para soluciones correspondientes a un dato inicial con muy baja regularidad, usaremos las *soluciones renormalizadas* (\mathcal{R}) de DiPerna & Lions [26, 38].

Antes de dar definiciones más precisas de solución, introducimos algunas notaciones y una hipótesis básica del dato inicial. Nos referiremos al problema de Cauchy para el sistema de Vlasov-Poisson con dato inicial f_0 como el *el problema de valores iniciales* (3.1.1)-(3.1.4). Suponemos

$$(H1) \quad f_0 \text{ es una función no negativa en } L^1(\mathbb{R}^6)$$

y denotamos por $M := \|f_0\|_{L^1}$ su masa. Sea ϕ_0 la solución de la ecuación de Poisson en el instante $t = 0$, correspondiente a $f = f_0$ en (3.1.3). A través de este capítulo, consideraremos soluciones globales en tiempo: $\mathbb{I} = [0, \infty)$ es el intervalo de tiempo. Como un paso preliminar, podemos enunciar el siguiente resultado (ver Apéndice a este capítulo para su demostración) que afirma que para cualquier dato inicial f_0 existe una función σ a la que se puede asignar un estado estacionario decreciente en energía, siempre claro está, que el potencial confinante lo permita. Queremos agradecer a Bernt Wennberg el comentario que nos hizo, en el marco del congreso *Asymptotic methods and applications in kinetic and quantum-kinetic theory* celebrado en Granada en septiembre del 2001, a partir del cual surgió el apéndice de este capítulo.

PROPOSICIÓN 3.2.1. *Para cualquier función no negativa f_0 en $L^1(\mathbb{R}^6)$, existe una función no negativa estrictamente convexa σ tal que $\lim_{s \rightarrow +\infty} \sigma(s)/s = +\infty$ y $\sigma(f_0) \in L^1(\mathbb{R}^6)$.*

Para obtener resultados de estabilidad, tendremos que imponer más restricciones sobre σ , que estarán estrechamente relacionadas con la elección de la entropía o, si se prefiere, con la elección de los estados estacionarios. Antes de entrar en ello, debemos definir de forma precisa las nociones de solución.

DEFINICIÓN 3.2.2. *Sea $p \in [1, \infty]$. Una función $f \in L^\infty(\mathbb{I}, L^p(\mathbb{R}^6))$ es una solución débil global de (3.1.1)-(3.1.4) con dato inicial f_0 si y sólo si:*

1. *f es continua en \mathbb{I} con valores en $L^s(\mathbb{R}^6)$, donde $s \in [1, p)$ ($s = 1$ si $p = 1$), con respecto a la topología $\sigma(L^p, L^{p'})$ (topología débil para $p < \infty$ y topología débil $*$ para $p = \infty$). p y p' son conjugados Hölder.*

2. $f(0, \cdot) = f_0$.

3. La función $(x, v) \mapsto f(t, x, v)E(t, x)$ es localmente integrable sobre \mathbb{R}^6 para todo $t \geq 0$ (puesto que $f(t) \in L^1(\mathbb{R}^6)$ para todo t fijo, $E(t, \cdot)$ está definido casi por doquier en \mathbb{R}^3 y es localmente integrable).

4. Para toda función test $\chi \in C_c^1(\mathbb{R}^6)$, la función $\varrho(t) := \int \chi(x, v) f(t, x, v) d(x, v)$ es continuamente diferenciable en \mathbb{I} y

$$\varrho'(t) = \int v \cdot \nabla_x \chi(x, v) f(t, x, v) d(x, v) + \int E(t, x) \cdot \nabla_v \chi(x, v) f(t, x, v) d(x, v).$$

Hacemos notar que una solución débil para $p > 1$ es una solución débil para todo $q \in [1, p]$. Siguiendo a Hörst & Hunze [34], tales soluciones débiles existen en el caso $\phi_e \equiv 0$ globalmente en tiempo si suponemos que f_0 satisface

(\mathcal{W}) $f_0 \geq 0$, $f_0 \in L^1(\mathbb{R}^6) \cap L^p(\mathbb{R}^6)$, $p \geq p_0 = (12 + 3\sqrt{5})/11 = 1,70075\dots$ y

$$\int_{\mathbb{R}^6} (|v|^2 + \phi_e(x)) f_0(x, v) d(x, v) < \infty.$$

También consideraremos el caso particular de las llamadas soluciones fuertes de Lions & Perthame [36]:

(\mathcal{S}) $f_0 \geq 0$, $f_0 \in L^1(\mathbb{R}^6) \cap L^\infty(\mathbb{R}^6)$, y para algún $m > 3$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} (|v|^m + \phi_e(x)) f_0(x, v) d(x, v) < \infty.$$

NOTA 3.2.3. En el caso (\mathcal{W}), $\nabla \phi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3)^3$ [34] como consecuencia de la desigualdad de interpolación: $\|\rho\|_{L^q} \leq C \|f\|_{L^p}^\theta \| |v|^2 f \|_{L^1}^{1-\theta}$ con $q = \frac{5p-3}{3p-1}$, $\theta \in (0, 1)$, y de la desigualdad de Hardy-Littlewood-Sobolev: $\|\nabla \phi\|_{L^r} \leq C \|\rho\|_{L^q}$ con $\frac{1}{q} - \frac{1}{r} = \frac{1}{3}$. El caso $p = p_0$ es obtenido imponiendo $r = p'$. Sin hipótesis sobre la energía inicial, es aún posible dar resultados de existencia global [15, 16]. También notamos que si se satisface (\mathcal{W}), $f_0 \log f_0 \in L^1(\mathbb{R}^6)$, como se verá en la Sección 4, siempre que $e^{-\beta \phi_e} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ para algún $\beta > 0$.

En este capítulo, también consideraremos nociones de solución aún más débiles.

DEFINICIÓN 3.2.4. Supongamos que

(\mathcal{R}) f_0 es una función no negativa en $L^1(\mathbb{R}^6)$ tal que $f_0 \log f_0 \in L^1(\mathbb{R}^6)$ y

$$\int_{\mathbb{R}^6} \left(\frac{1}{2} |v|^2 + \phi_e(x) \right) f_0(x, v) d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x \phi_0|^2 dx < \infty.$$

Diremos que $f \in C^0(\mathbb{I}, L^1(\mathbb{R}^6))$ es una solución renormalizada de (3.1.1)-(3.1.4) en \mathbb{I} con dato inicial f_0 si y sólo si

1. Las cantidades

$$\int_{\mathbb{R}^6} \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e(x) + \frac{1}{2}\phi(x, t) \right) f(x, v, t) d(x, v) \quad \text{y} \quad \int_{\mathbb{R}^6} f(x, v, t) \log f(x, v, t) d(x, v)$$

están acotadas superiormente, de forma uniforme en $t \geq 0$.

2. $\beta(f) = \log(1 + f)$ es una solución débil de

$$\frac{\partial}{\partial t} \beta(f) + v \cdot \nabla_x \beta(f) + E(t, x) \cdot \nabla_v \beta(f) = 0$$

considerada en el sentido distribucional, donde E es definido de acuerdo a (3.1.2) y (3.1.3).

En el caso $e^{-\beta \phi_e} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ para algún $\beta > 0$, soluciones débiles para $p > 1$ son también soluciones renormalizadas (ver Lema 3.4.1).

PROPOSICIÓN 3.2.5. Consideremos f_0 que verifica (\mathcal{R}) y supongamos que ϕ_e es un potencial no negativo tal que: $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \phi_e(x) = +\infty$. Si ϕ_e está en $W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^3)$, el problema de valores iniciales (3.1.1)-(3.1.4) admite una solución renormalizada global. Si además ϕ_e pertenece a $W_{loc}^{1,q}$ para $q \geq \frac{5p-3}{2(p-1)}$ y si se verifica (\mathcal{W}) , entonces (3.1.1)-(3.1.4) admite una solución débil.

Demostración. La demostración de este resultado no aporta ideas nuevas a las ya introducidas en [34, 36, 26, 38], por lo que no se muestra aquí. El resultado es una inmediata adaptación de las demostraciones presentadas en estas referencias, ya que se han supuesto las hipótesis necesarias, para ello, sobre el potencial confinante. Para soluciones renormalizadas, las características pueden ser definidas de acuerdo a [25, 35] siempre que ϕ_e esté en $W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^3)$. \square

Las soluciones débiles y renormalizadas tienen las siguientes propiedades:

1. La función de distribución toma valores no negativos para todo $t \geq 0$.
2. Conservación de la masa: para cualquier $t \geq 0$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} f(t, x, v) d(x, v) = \int_{\mathbb{R}^6} f_0(x, v) d(x, v) = M.$$

3. Energía cinética, energía potencial y entropía finitas: para cualquier $t \geq 0$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e(x) + \frac{1}{2}\phi(x) \right) f d(x, v) \leq \int_{\mathbb{R}^6} \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e(x) + \frac{1}{2}\phi_0(x) \right) f_0 d(x, v)$$

$$\text{y} \quad \int_{\mathbb{R}^6} f \log f d(x, v) \leq \int_{\mathbb{R}^6} f_0 \log f_0 d(x, v),$$

con igualdad en el caso de soluciones clásicas (ver Corolario 3.2.8 para una aplicación).

4. En el caso (S), para cualquier $t \geq 0$,

$$\|f(t, \cdot)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^6)} \leq \|f_0\|_{L^\infty(\mathbb{R}^6)}.$$

5. Además, si suponemos que

$$(H2) \quad \int_{\mathbb{R}^6} \sigma(f_0) d(x, v) < \infty$$

para alguna función continua estrictamente convexa $\sigma : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$, entonces para cualquier $t \geq 0$,

$$\int_{\mathbb{R}^6} \sigma(f) d(x, v) \leq \int_{\mathbb{R}^6} \sigma(f_0) d(x, v),$$

con igualdad en el caso de soluciones clásicas (ver Corolario 3.2.8 para una aplicación).

2.2. Soluciones estacionarias y funcionales de entropía. Antes de presentar las familias de soluciones estacionarias y funcionales de entropía que ocuparán este capítulo, introduciremos algunas notaciones. Para cualquier función $f \in L^1(\mathbb{R}^6)$, notamos por $\phi = \phi[f]$ a la solución de $-\Delta\phi = \int_{\mathbb{R}^3} f dv$ en $L^{3,\infty}(\mathbb{R}^3)$ dada por la convolución con la función de Green del Laplaciano. El operador ϕ es lineal y satisface:

$$\int_{\mathbb{R}^6} f \phi[g] d(x, v) = \int_{\mathbb{R}^6} g \phi[f] d(x, v).$$

Los estados estacionarios del sistema de Vlasov-Poisson aparecen como solución de un problema de punto fijo en $L^{3,\infty}(\mathbb{R}^3)$, concretamente

$$(3.2.1) \quad f_{\infty,\sigma}(x, v) = \gamma \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi[f_{\infty,\sigma}](x) + \phi_e(x) - \alpha \right)$$

donde α viene dada por la restricción

$$\int_{\mathbb{R}^6} \gamma \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi[f_{\infty,\sigma}](x) + \phi_e(x) - \alpha \right) dx dv = M$$

La solución del problema verifica formalmente la ecuación de Vlasov. Entonces, estos estados estacionarios existen si y sólo si verifican la ecuación de Poisson. Equivalentemente, los estados estacionarios existen si y sólo si, (considerando un cambio de coordenadas)

$$-\Delta\phi_{\infty,\sigma} = G_\sigma(\phi_{\infty,\sigma} + \phi_e - \alpha[\phi_{\infty,\sigma} + \phi_e]) \quad \text{con} \quad G_\sigma(\phi) = 4\pi \sqrt{2} \int_0^{+\infty} \sqrt{s} \gamma(s + \phi) ds$$

tiene una solución $\phi_{\infty,\sigma} = \phi[f_{\infty,\sigma}]$ tal que $\int_{\mathbb{R}^6} f_{\infty,\sigma} d(x, v) = M$. La constante α viene determinada de forma unívoca al menos para $\phi[f_{\infty,\sigma}]$ fijo, implícitamente por la

condición de conservación de la masa, es decir,

$$\int_{\mathbb{R}^3} G_\sigma(u - \alpha[u]) dx = M.$$

Bajo condiciones que vamos a detallar a continuación probaremos que tal solución estacionaria existe y es única (ver Lema 3.2.7).

Consideremos σ tal que γ es la inversa generalizada de $-\sigma'$ (eventualmente extendida por 0): σ es convexa (resp. estrictamente convexa) si y sólo si γ es monótona no creciente (resp. decreciente en su soporte). Con estas notaciones, suponemos que σ y ϕ_e verifican:

(H3) $\sigma \in C^2(\mathbb{R}^+) \cap C^0(\mathbb{R}_0^+)$ es una función estrictamente convexa, acotada inferiormente tal que

$$\lim_{s \rightarrow +\infty} \frac{\sigma(s)}{s} = +\infty.$$

(H4) $\phi_e : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ es una función medible acotada inferiormente tal que

$$\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \phi_e(x) = +\infty$$

y $x \mapsto G_\sigma(\phi_e(x)) = 4\pi \sqrt{2} \int_0^{+\infty} \sqrt{s} \gamma(s + \phi_e(x)) ds$ pertenece a $L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Las condiciones de crecimiento de ϕ_e y de decaimiento de γ serán referidas como *condiciones confinantes*. Adaptaremos las demostraciones dadas en [27] para el caso $\gamma(s) = e^{-s}$ y en [6, 7] para el caso de dominios acotados para probar la existencia de soluciones estacionarias $f_{\infty, \sigma}$. La existencia de $\alpha = \alpha(M)$ será una consecuencia de la demostración.

Sea $M > 0$ y consideremos en $L_M^1(\mathbb{R}^6) = \{f \in L^1(\mathbb{R}^6) : f \geq 0 \text{ c.p.d.}, \|f\|_{L^1} = M\}$ el funcional

$$K_\sigma[f] = \int_{\mathbb{R}^6} \left[\sigma(f) + \left(\frac{1}{2} |v|^2 + \phi_e(x) \right) f \right] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \phi[f]|^2 dx.$$

DEFINICIÓN 3.2.6. Dados f y g en $L_M^1(\mathbb{R}^6)$, se define la entropía relativa de f con respecto a g como

$$(3.2.2) \quad \Sigma_\sigma[f|g] := \int_{\mathbb{R}^6} [\sigma(f) - \sigma(g) - \sigma'(g)(f - g)] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x(\phi[f] - \phi[g])|^2 dx$$

LEMA 3.2.7. Bajo las Hipótesis (H3)-(H4), K_σ es un funcional estrictamente convexo acotado inferiormente en $L_M^1(\mathbb{R}^6)$. Alcanza un único mínimo global, $f_{\infty, \sigma}$, que tiene la forma (3.2.1) y es por tanto, una solución estacionaria del sistema de Vlasov-Poisson. Además $\Sigma_\sigma[f|f_{\infty, \sigma}]$ puede ser escrito como

$$(3.2.3) \quad \Sigma_\sigma[f|f_{\infty, \sigma}] = K_\sigma[f] - K_\sigma[f_\infty].$$

y $\sigma(f_{\infty,\sigma})$ y $\sigma'(f_{\infty,\sigma})f_{\infty,\sigma}$ pertenecen a $L^1(\mathbb{R}^6)$.

Demostración. La Hipótesis (H4) garantiza que $K_\sigma[f]$ está acotado inferiormente por la desigualdad de Jensen. Por la Condición (H3) K_σ es convexo, así que podemos pasar al límite en una sucesión minimizante gracias a la propiedad de semi-continuidad. El límite $f_{\infty,\sigma}$ pertenece a $L^1_M(\mathbb{R}^6)$ por el criterio de Dunford-Pettis. La ecuación (3.2.1) es la correspondiente a Euler-Lagrange (donde α entra como el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción sobre la norma L^1). La identidad (3.2.2) se sigue fácilmente por un cálculo directo usando (3.2.1). \square

Notamos que $\Sigma_\sigma[f|f_{\infty,\sigma}]$ es obviamente no negativa, puesto que $K_\sigma[f]$ alcanza su único mínimo en $f = f_{\infty,\sigma}$.

COROLARIO 3.2.8. *Consideremos una solución renormalizada o débil f de (3.1.1)-(3.1.4) bajo las Hipótesis (H1), (H2), (H3) y (H4). Entonces $\Sigma_\sigma[f(t)|f_{\infty,\sigma}] \leq \Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty,\sigma}]$.*

Demostración. Es una consecuencia de las acotaciones de la energía, potencial y entropía por sus correspondientes valores iniciales y de la propiedad $\int_{\mathbb{R}^6} \sigma(f) d(x, v) \leq \int_{\mathbb{R}^6} \sigma(f_0) d(x, v)$. Debemos notar que debajo de estas acotaciones subyacen argumentos clásicos de semi-continuidad. \square

Veamos algunos ejemplos de funciones σ a las que les asignamos su correspondiente estado estacionario.

EJEMPLO 3.2.9. 1) Sea $\sigma_q(s) = s^q$, con $\gamma_q(s) = (-s/q)_+^{1/(q-1)}$, para algún $q > 1$. Con las notaciones $f_{\infty,q} = f_{\infty,\sigma_q}$ y $\phi_{\infty,q} = \phi[f_{\infty,\sigma_q}]$, esta solución estacionaria satisface la ecuación no lineal de Poisson

$$-\Delta\phi_{\infty,q} = C_q \left(\alpha(M) - \phi_e - \phi_{\infty,q} \right)_+^{\frac{3}{2} + \frac{1}{q-1}}$$

donde $C_q = (2\pi)^{3/2} q^{-\frac{1}{q-1}} \Gamma(\frac{q}{q-1}) / \Gamma(\frac{5q-3}{2(q-1)})$.

2) El caso límite cuando $q \rightarrow 1$ corresponde a $\sigma_1(s) = s \log s - s$ y $\gamma_1(s) = e^{-s}$. En este caso obtenemos la solución estacionaria Maxwelliana

$$(3.2.4) \quad f_{\infty,1}(x, v) = m(x, v) = M \frac{e^{-\frac{1}{2}|v|^2}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{-(\phi_{\infty,1}(x) + \phi_e(x))}}{\int_{\mathbb{R}^3} e^{-(\phi_{\infty,1}(x) + \phi_e(x))} dx}$$

donde $\phi_{\infty,1}$ viene dada por la ecuación de Poisson-Boltzmann

$$(3.2.5) \quad -\Delta_x \phi_{\infty,1} = \int_{\mathbb{R}^3} m(x, v) dv = M \frac{e^{-(\phi_{\infty,1} + \phi_e)}}{\int_{\mathbb{R}^3} e^{-(\phi_{\infty,1} + \phi_e)} dx}$$

3) Un caso menos usual es

$$\sigma(t) = \begin{cases} 2 \int_1^{\sqrt{-\log t}} s^2 e^{-s^2} ds & \text{si } 0 < t \leq 1 \\ 0 & \text{si } t > 1 \end{cases}$$

lo que corresponde a: $\gamma(t) = e^{-t^2}$.

En las próximas secciones analizaremos estos ejemplos, que motivarán un tratamiento más general. Por simplicidad en la notación, escribiremos $\Sigma_q[f|f_{\infty,q}]$ en lugar de $\Sigma_{\sigma_q}[f|f_{\infty,\sigma_q}]$, para $q \geq 1$.

3. L^p -estabilidad no lineal

En esta sección, damos un resultado de L^p -estabilidad no lineal para $f_{\infty,\sigma}$, $1 \leq p \leq 2$, con mínimas condiciones de convexidad sobre el dato inicial y con constante de estabilidad explícita. Su demostración se basa en el siguiente resultado.

PROPOSICIÓN 3.3.1. Sean f y g dos funciones no negativas en $L^1(\mathbb{R}^6) \cap L^p(\mathbb{R}^6)$, $p \in [1, 2]$ y consideremos una función estrictamente convexa $\sigma : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ en $C^2(\mathbb{R}^+)$ \cap $C^0(\mathbb{R}_0^+)$. Sea $A = \inf \{\sigma''(s)/s^{p-2} : s \in (0, \infty)\}$. Si $A > 0$, entonces la siguiente desigualdad se mantiene:

$$(3.3.1) \quad \Sigma_{\sigma}[f|g] \geq 2^{-2/p} A \left[\max(\|f\|_{L^p}^{2-p}, \|g\|_{L^p}^{2-p}) \right]^{-1} \|f - g\|_{L^p}^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x(\phi[f] - \phi[g])|^2 dx.$$

Demostración. El caso $p = 1$ es la bien conocida desigualdad de Csiszár-Kullback (ver por ejemplo [1]) que vamos a adaptar al caso $p > 1$.

Supongamos en un primer momento que $f > 0$. Por medio de un desarrollo de Taylor de orden dos de σ deducimos que podemos escribir la entropía relativa para f y g como

$$(3.3.2) \quad \begin{aligned} \Sigma_{\sigma}[f|g] &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^6} \sigma''(\xi) |f - g|^2 d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x(\phi[f] - \phi[g])|^2 dx \\ &\geq \frac{A}{2} \int_{\mathbb{R}^6} \xi^{p-2} |f - g|^2 d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x(\phi[f] - \phi[g])|^2 dx \end{aligned}$$

donde ξ cae entre f y g . Si $p = 2$, el resultado es obvio. Consideremos entonces, $1 \leq p < 2$. Por la desigualdad de Hölder, para cualquier $h(x, v) > 0$ y para cualquier conjunto medible $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^6$, tenemos que

$$\int_{\mathcal{A}} |f - g|^p h^{-\alpha} h^{\alpha} d(x, v) \leq \left(\int_{\mathcal{A}} |f - g|^2 h^{p-2} d(x, v) \right)^{p/2} \left(\int_{\mathcal{A}} h^{\alpha s} d(x, v) \right)^{1/s}$$

con $\alpha = p(2-p)/2$, $s = 2/(2-p)$. Entonces

$$\left(\int_{\mathcal{A}} |f - g|^2 h^{p-2} d(x, v) \right)^{p/2} \geq \left(\int_{\mathcal{A}} |f - g|^p d(x, v) \right) \left(\int_{\mathcal{A}} h^p d(x, v) \right)^{(p-2)/2}.$$

Aplicamos esta fórmula a dos conjuntos diferentes.

i) En $\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 = \{(x, v) \in \mathbb{R}^6 : f(x, v) > g(x, v)\}$, usamos $\xi^{p-2} > f^{p-2}$ y tomamos $h = f$:

$$\left(\int_{\mathcal{A}_1} |f - g|^2 \xi^{p-2} d(x, v) \right)^{p/2} \geq \left(\int_{\mathcal{A}_1} |f - g|^p d(x, v) \right) \|f\|_{L^p}^{-(2-p)p/2}.$$

ii) En $\mathcal{A} = \mathcal{A}_2 = \{(x, v) \in \mathbb{R}^6 : f(x, v) \leq g(x, v)\}$, usamos $\xi^{p-2} \geq g^{p-2}$ y tomamos $h = g$:

$$\left(\int_{\mathcal{A}_2} |f - g|^2 \xi^{p-2} d(x, v) \right)^{p/2} \geq \left(\int_{\mathcal{A}_2} |f - g|^p d(x, v) \right) \|g\|_{L^p}^{-(2-p)p/2}.$$

Para probar (3.3.1) en el caso $f > 0$, sólo tenemos que juntar las dos desigualdades anteriores en (3.3.2) y usar la desigualdad $(a + b)^r \leq 2^{r-1}(a^r + b^r)$ para cualquier $a, b \geq 0$ y $r \geq 1$. Por otra parte para el caso $f \geq 0$, seguimos un argumento de densidad: aplicamos (3.3.1) a $f_\epsilon(x, v) = f(x, v) + \epsilon e^{-|x|^2 - |v|^2}$ y tomamos $\epsilon \rightarrow 0$ usando el teorema de la convergencia dominada de Lebesgue. \square

Esta proposición puede ser aplicada a soluciones débiles o renormalizadas para probar el primer resultado importante de este capítulo, que es una versión más detallada de la Proposición 3.1.1.

TEOREMA 3.3.2. *Sea f_0 verificando (H1), (H2) y suponemos (R) o (W). Supongamos (H3) y (H4). Si f es una solución débil o renormalizada de (3.1.1)-(3.1.4) con dato inicial f_0 , entonces*

$$\|\nabla\phi - \nabla\phi_{\infty,\sigma}\|_{L^2}^2 \leq 2\Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty,\sigma}]$$

Supongamos que $A = \inf\{\sigma''(s)/s^{p-2} : s \in (0, \infty)\}$ es positivo para algún $p \in [1, 2]$. Si $p = 1$, supongamos además que $e^{-\phi_e} \in L^1$. Entonces $f_0 \in L^p(\mathbb{R}^6)$ y

$$\|f(t) - f_{\infty,\sigma}\|_{L^p}^2 \leq C(f_0, \sigma) \Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty,\sigma}]$$

para cualquier $t \geq 0$, donde $C(f_0, \sigma)$ es una constante, que toma la forma explícita

$$C(f_0, \sigma) = \begin{cases} \frac{2^{2/p}}{A} \max(\|f_0\|_{L^p}^{2-p}, \|f_{\infty,\sigma}\|_{L^p}^{2-p}) & \text{si } p > 1 \\ \frac{4}{A}M & \text{si } p = 1 \end{cases}.$$

En el caso (S), $C(f_0, \sigma)$ está también acotada por $\frac{2^{2/p}}{A} M^{(2-p)/p} \mathcal{M}^{(2-p)(p-1)/p}$ con $\mathcal{M} = \max(\|f_0\|_{L^\infty}, \|f_{\infty,\sigma}\|_{L^\infty})$.

Demostración. La demostración es una consecuencia directa del Lema 3.2.7, Corolario 3.2.8 y Proposición 3.3.1 una vez que es conocido que $C(f_0, \sigma)$ es finita. Aunque probamos directamente una estimación de $\|f(t) - f_{\infty, \sigma}\|_{L^p}^2$ en términos de $\Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty, \sigma}]$, podemos notar que, para $p > 1$, dos integraciones dan la desigualdad

$$\sigma(s) - \sigma(s_0) - \sigma'(s_0)(s - s_0) \geq \frac{A}{p(p-1)} \left[s^p - s_0^p - p s_0^{p-1}(s - s_0) \right]$$

para cualquier $(s, s_0) \in (0 + \infty)^2$. Aplicado a f y $f_{\infty, \sigma}$, esto significa que sobre \mathbb{R}^6

$$(3.3.3) \quad \sigma(f) - \sigma(f_{\infty, \sigma}) - \sigma'(f_{\infty, \sigma})(f - f_{\infty, \sigma}) \geq \frac{A}{p(p-1)} \left[f^p - f_{\infty, \sigma}^p - p f_{\infty, \sigma}^{p-1}(f - f_{\infty, \sigma}) \right],$$

lo que prueba que f pertenece a $L^\infty(\mathbb{R}^+, L^p(\mathbb{R}^6))$ (para $\|f_0\|_{L^p}$, de acuerdo al Corolario 3.2.8 aplicado con $\sigma(s) = \sigma_p(s) = s^p$). La constante $C(f_0, \sigma)$ involucra a $\|f_0\|_{L^p}$, que está por tanto acotado en términos de $\sigma(f_0)$ y $f_0 \sigma'(f_0)$.

Si $p = 1$, la condición $e^{-\phi_e} \in L^1$ es equivalente a que $f_{\infty, \sigma}$ también pertenece a L^1 . En este caso, la desigualdad (3.3.3) es reemplazada por

$$\sigma(f) - \sigma(f_{\infty, \sigma}) - \sigma'(f_{\infty, \sigma})(f - f_{\infty, \sigma}) \geq A \left[f \log \left(\frac{f}{f_{\infty, \sigma}} \right) - (f - f_{\infty, \sigma}) \right].$$

La Proposición 3.3.1 aplicada a f y f_∞ nos da: por un lado,

$$\|\nabla \phi - \nabla \phi_{\infty, \sigma}\|_{L^2}^2 \leq 2 \Sigma_\sigma[f|f_{\infty, \sigma}]$$

y por el Corolario 3.2.8 podemos concluir

$$\|\nabla \phi - \nabla \phi_{\infty, \sigma}\|_{L^2}^2 \leq 2 \Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty, \sigma}].$$

Y por otro lado,

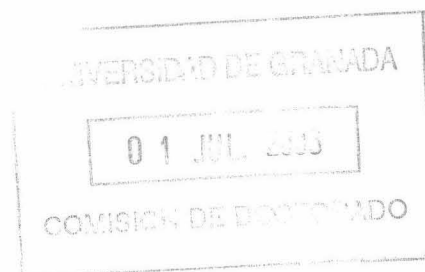
$$\|f(t) - f_{\infty, \sigma}\|_{L^p}^2 \leq \frac{2^{2/p}}{A} \left[\max \left(\|f\|_{L^p}^{2-p}, \|g\|_{L^p}^{2-p} \right) \right] \Sigma_\sigma[f|f_{\infty, \sigma}],$$

usando nuevamente el Corolario 3.2.8 y el Lema 3.2.7, que nos garantiza $\|f\|_{L^p} \leq \|f_0\|_{L^p}$, concluimos la demostración del teorema. \square

- NOTA 3.3.3. 1. Notamos que $A = p(p-1)$ si $\sigma = \sigma_p$, $p > 1$, y $A = 1$ si $p = 1$ y $C(f_0, \sigma_2) = 1$. La expresión de $C(f_0, \sigma)$ es óptima al menos para $\sigma = \sigma_p$ en el límite $\|f_0 - f_{\infty, \sigma}\|_{L^p} \rightarrow 0$ (ver [1] para una discusión el caso $p = 1$).
2. Para $p > 2$, por la desigualdad de Hölder, se mantiene la desigualdad en el sentido contrario:

$$\|f(t) - f_{\infty, \sigma}\|_{L^p}^2 + \|\nabla \phi - \nabla \phi_{\infty, \sigma}\|_{L^2}^2 \text{ controla a } \Sigma_\sigma[f_0|\sigma].$$

3. Para $p = 1$, recuperamos la desigualdad clásica de Csiszár-Kullback en la Proposición 3.3.1 y un resultado de estabilidad en L^1 (ver [1, 2]) que es natural en el marco de soluciones renormalizadas (si $f \log f$ pertenece a L^1 : ver Lema 3.4.1 abajo).



4. L^2 -estabilidad no lineal de estados estacionarios Maxwellianos

En [12], Braasch, Rein y Vukadinović introdujeron funcionales de Lyapunov modificados con el fin de probar L^2 -estabilidad para ciertos estados estacionarios (ver Sección 5 para más detalles). En esta sección extenderemos esta idea al caso Maxwelliano. El principal ingrediente es el siguiente: si bien, $\sigma''(s) = 1/s$ no está acotada inferiormente de forma uniforme por algo positivo (que sería la condición para aplicar directamente la Proposición 3.3.1 en L^2), $f_{\infty,1}$ está acotada en L^∞ por una constante \bar{s} , que es suficiente para considerar el ínfimo de σ'' en $(0, \bar{s})$.

En el caso Maxwelliano, notamos primero, que (H2) se puede seguir de las otras hipótesis.

LEMA 3.4.1. *Supongamos que $e^{-\beta\phi_e}$ pertenece a $L^1(\mathbb{R}^3)$ para algún $\beta > 0$. Sea f una función no negativa en $L^1 \cap L^q(\mathbb{R}^6)$, $q > 1$, tal que $(x, v) \mapsto (|v|^2 + \phi_e(x))f(x, v) \in L^1(\mathbb{R}^6)$. Entonces $f \log f$ pertenece a $L^1(\mathbb{R}^6)$.*

Demostración. Dependiendo del signo de $\log f$, vamos a considerar dos casos.

1) Definimos $g(x, v) = e^{-\frac{\beta}{2}|v|^2 - \beta\phi_e(x)}$. En $\mathcal{A} = \{(x, v) \in \mathbb{R}^6 : f(x, v) < 1\}$, usando la desigualdad de Jensen, tenemos

$$\begin{aligned} 0 &\geq \int_{\mathcal{A}} \left[f \log f + \beta \left(\frac{1}{2}|v|^2 + \phi_e \right) f \right] d(x, v) = \int_{\mathcal{A}} f \log \left(\frac{f}{g} \right) d(x, v) \\ &\geq \|f\|_{L^1(\mathcal{A})} \log \left(\frac{\|f\|_{L^1(\mathcal{A})}}{\|g\|_{L^1(\mathcal{A})}} \right). \end{aligned}$$

2) En $\mathbb{R}^6 \setminus \mathcal{A}$, concluimos usando el siguiente lema. \square

LEMA 3.4.2. *Sea f una función no negativa en $L^1 \cap L^q(\Omega)$, $q > 1$, para algún dominio arbitrario $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $d \geq 1$. Entonces,*

$$\int_{\Omega} f(z) \log f(z) dz \leq \frac{1}{q-1} \|f\|_{L^1(\Omega)} \log \left(\frac{\|f\|_{L^q(\Omega)}^q}{\|f\|_{L^1(\Omega)}} \right).$$

Demostración. Por la desigualdad de Hölder,

$$\|f\|_{L^r}^r \leq \|f\|_{L^1}^{\frac{q-r}{q-1}} \|f\|_{L^q}^{\frac{q(r-1)}{q-1}},$$

para $1 \leq r \leq q$. En $r = 1$, tenemos una igualdad, y por tanto, podemos derivar en la desigualdad con respecto a r en $r = 1$. \square

Sea ϕ_e y f_0 verificando, respectivamente, (H4) para $\sigma_1(s) = s \log s - s$, y (H1), (\mathcal{W}). Consideremos una solución débil o renormalizada f de (3.1.1)-(3.1.4) con

valor inicial f_0 y el correspondiente estado estacionario $f_{\infty,1} = m$ dado por (3.2.4)-(3.2.5). De acuerdo con el Teorema 3.3.2, m es L^1 -estable:

$$\Sigma_1[f|m] \geq \frac{1}{4M} \|f - m\|_{L^1}^2.$$

Probaremos ahora un resultado de L^2 -estabilidad para m usando un "funcional truncado" de forma apropiada, como en [12]. Sea $\mathcal{E}_1(x, v) := \frac{1}{2}|v|^2 + \phi_{\infty,1}(x) + \phi_e(x)$, el funcional de energía asociado al estado estacionario m . Por (H4),

$$\mathcal{E}_{\min} := \inf\{\mathcal{E}_1(x, v) : (x, v) \in \mathbb{R}^6\} \geq \inf\{\phi_e(x) : x \in \mathbb{R}^3\} > -\infty.$$

Denotamos $m = \varphi \circ \mathcal{E}_1$ con $\varphi(s) = \kappa e^{-s}$ donde

$$(3.4.1) \quad \kappa = \frac{M}{(2\pi)^{3/2}} \left[\int e^{-\phi_{1,\infty} - \phi_e} dx \right]^{-1}.$$

Consideramos $\bar{s} = \varphi(\mathcal{E}_{\min})$ y definimos

$$\tau_1(s) := \begin{cases} s \log s - s & \text{si } s \in [0, \bar{s}] \\ \frac{1}{2\kappa} e^{\mathcal{E}_{\min}} (s - \bar{s})^2 - (\mathcal{E}_{\min} - \log \kappa)(s - \bar{s}) + \bar{s} \log \bar{s} - \bar{s} & \text{si } s \in (\bar{s}, +\infty) \end{cases}$$

La función τ_1 es de clase $C([0, \infty)) \cap C^2((0, \infty))$, con $\min(\tau_1'') = e^{\mathcal{E}_{\min}}/\kappa > 0$. Puesto que $0 \leq m(x, v) \leq \varphi(\mathcal{E}_{\min}) = \bar{s}$ para algún $(x, v) \in \mathbb{R}^6$ y φ es decreciente, m es un mínimo del funcional de energía libre (o Casimir) modificado $\Sigma_{\tau_1}[f|m] = K_{\tau_1}[f] - K_{\tau_1}[m]$, donde

$$K_{\tau_1}[f] = \int_{\mathbb{R}^6} \left(\frac{1}{2} |v|^2 + \frac{1}{2} \phi + \phi_e \right) f d(x, v) + \int_{\mathbb{R}^6} \tau_1(f) d(x, v)$$

y podemos aplicar el Teorema 3.3.2 con $p = 2$. Esto prueba una versión refinada del Teorema 3.1.2. Puesto que f pertenece a L^2 , $\tau_1(f)$ tiene sentido en L^1 gracias al Lema 3.4.1. Debemos señalar que la construcción de τ_1 ha sido hecha de forma que $K_{\tau_1}[m] = K_{\sigma_1}[m]$, y entonces se puede aplicar el Corolario 3.2.8. En este contexto, es natural trabajar con soluciones débiles mejor que con renormalizadas.

TEOREMA 3.4.3. *Supongamos (H1), (H3), (H4) para $\sigma = \sigma_1$ y (W) para $p = 2$. Consideremos la solución dada por (3.2.4)-(3.2.5). Con las notaciones anteriores, cada solución débil f de (3.1.1)-(3.1.4) con dato inicial $f_0 \in L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^6)$ verifica*

$$\Sigma_{\tau_1}[f_0|m] \geq \Sigma_{\tau_1}[f(t)|m] \geq \frac{1}{2\bar{s}} \|f(t) - m\|_{L^2}^2 \quad \forall t \geq 0.$$

NOTA 3.4.4. 1. *Una versión más simple del Teorema 3.4.3 se mantiene para las soluciones que satisfacen (S). Ya que no es necesario modificar σ , puesto que $\sigma_1''(s) = \frac{1}{s}$ está acotado inferiormente en $(0, \max(\|f_0\|_{L^\infty}, \|m\|_{L^\infty})]$ por $\max(\|f_0\|_{L^\infty}, \|m\|_{L^\infty})^{-1}$.*

2. El Teorema 3.4.3 puede ser generalizado a cualquier solución estacionaria $f_{\infty, \sigma}$ y cualquier norma L^q con $p \neq q \in (1, 2]$: ver la próxima sección.
3. Notamos que en el caso Maxwelliano el valor de κ definido por (3.4.1) es $e^{-\alpha(M)}$ donde $\alpha = \alpha(M)$ es la constante en (3.2.1) que fija la retricción de la masa.

5. Resultados generales de estabilidad no lineal

En esta sección, generalizamos los resultados de estabilidad de las Secciones 3-4 a L^q , $1 \leq q \leq 2$, y a estados estacionarios arbitrarios $f_{\infty, \sigma}$. Generalizaremos las técnicas usadas en el resultado de L^2 -estabilidad de Braasch, Rein and Vukadinović en [12], que puede ser resumido como sigue. Sea γ una función C^1 en \mathbb{R} tal que $\gamma' < 0$ en $(-\infty, \mathcal{E}_{\text{máx}})$ y $\gamma \equiv 0$ en $[\mathcal{E}_{\text{máx}}, +\infty)$ y se define σ como una primitiva de $-(\gamma^{-1})$, que está bien definida al menos en algún subintervalo en \mathbb{R}^+ (ver por ejemplo [14] para más detalles). Entonces $f_{\infty, \sigma}$ es un estado estacionario de soporte compacto que es L^2 -estable para las soluciones débiles y renormalizadas de (3.1.1)-(3.1.4).

Para $q > p$, la principal idea es de nuevo acotar $\sigma''(s)/s^{q-2}$ inferiormente sólo en el intervalo $(0, \bar{s} = \|f_{\infty, \sigma}\|_{L^\infty})$ y modificar σ en $(\bar{s}, +\infty)$. En este caso, establecemos una consecuencia útil de la Proposición 3.3.1. Sea $\mathcal{E}_\sigma(x, v) := \frac{1}{2}|v|^2 + \phi_{\infty, \sigma}(x) + \phi_e(x)$ y $\mathcal{E}_{\text{mín}} := \inf\{\mathcal{E}_\sigma(x, v) : (x, v) \in \mathbb{R}^6\}$, que es finito por la hipótesis (H4). Con las notaciones de las Secciones 2-3, $f_{\infty, \sigma} = \gamma \circ (\mathcal{E}_\sigma - \alpha)$, donde α es tal que $\|f_{\infty, \sigma}\|_{L^1} = M$. Tomamos $\bar{s} = \gamma(\mathcal{E}_{\text{mín}} - \alpha)$ y definimos

$$\tau_\sigma(s) := \begin{cases} \sigma(s) & \text{si } s \in [0, \bar{s}] \\ \psi(s) & \text{si } s \in (\bar{s}, +\infty) \end{cases}$$

con $\psi(s) = \frac{\sigma''(\bar{s})}{\sigma_q''(\bar{s})}\sigma_q(s) + \left(\sigma'(\bar{s}) - \frac{\sigma''(\bar{s})}{\sigma_q''(\bar{s})}\sigma_q'(\bar{s})\right)(s - \bar{s}) + \sigma(\bar{s}) - \frac{\sigma''(\bar{s})}{\sigma_q''(\bar{s})}\sigma_q(\bar{s})$ y $\sigma_q(t) = t^q$. Con el funcional de Lyapunov truncado $\Sigma_{\tau_\sigma}[f|f_{\infty, \sigma}] = K_{\tau_\sigma}[f] - K_{\tau_\sigma}[f_{\infty, \sigma}]$, inmediatamente obtenemos el siguiente variante de la Proposición 3.3.1.

COROLARIO 3.5.1. Sean f y g dos funciones no negativas en $L^1(\mathbb{R}^6) \cap L^q(\mathbb{R}^6)$, $q \in [1, 2]$ y consideramos una función estrictamente convexa $\sigma : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ en $C^2(\mathbb{R}^+) \cap C^0(\mathbb{R}_0^+)$. Con las notaciones anteriores, sea $B = \inf\{\sigma''(s)/s^{q-2} : s \in (0, \bar{s})\}$. Si $B > 0$, entonces existe una constante $C > 0$ tal que

$$\Sigma_{\tau_\sigma}[f|g] \geq C \|f - g\|_{L^q}^2 + \frac{1}{2} \|\nabla\phi - \nabla\phi_{\infty, \sigma}\|_{L^2}^2.$$

Como en la Sección 4, esta estimación puede ser aplicada para obtener resultados de estabilidad no lineal.

TEOREMA 3.5.2. Sea f_0 que verifica (H1), (H2) y (\mathcal{R}) o (\mathcal{W}) . Supongamos que σ y ϕ_e satisfacen (H3) y (H4). Supongamos que $\inf\{\sigma''(s)/s^{p-2} : s \in (0, \bar{s})\}$ es positivo para algún

$p \in [1, 2]$, donde \bar{s} es definido como arriba. Entonces $f_{\infty, \sigma}$ es L^q -no linealmente estable tanto para soluciones débiles como renormalizadas de (3.1.1)-(3.1.4) para cualquier $q \in (1, 2]$, siempre que $f_0 \in L^q(\mathbb{R}^6)$ si $q > p$.

Demostración. El caso $q = p$ es recogido por el Teorema 3.3.2. Para $q > p$, la demostración es una fácil aplicación del Corolario 3.5.1: $f_{\infty, \sigma}$ es L^q -estable en el sentido de que existe una constante $C > 0$ tal que para cualquier $t \geq 0$,

$$\|f(t) - f_{\infty, \sigma}\|_{L^q} \leq C \Sigma_{\tau_\sigma}[f_0|f_{\infty, \sigma}].$$

El caso $1 < q < p$ es un consecuencia de la desigualdad de Hölder y el Teorema 3.3.2:

$$\|f(t) - f_{\infty, \sigma}\|_{L^q} \leq (2M)^{\frac{p-q}{q(p-1)}} (C(f_0, \sigma) \Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty, \sigma}])^{\frac{p(q-1)}{2q(p-1)}}.$$

□

El caso $p = q = 1$ es recogido por el Teorema 3.3.2. Sólo el caso $1 = q < p$ se deja abierto. En el caso $q > p$, notamos que la norma L^q está acotada en términos de $\Sigma_{\tau_\sigma}[f_0|f_{\infty, \sigma}]$ y no en términos de $\Sigma_\sigma[f_0|f_{\infty, \sigma}]$. (Como ocurría, también en el Teorema 3.4.3, con $p = 1, q = 2$).

6. Estados estacionarios dependientes de invariantes adicionales

En las secciones anteriores, tratamos estados estacionarios que dependían sólo de la energía. Nuestro análisis de la estabilidad puede ser extendido a soluciones estacionarias que dependan adicionalmente de otros invariantes del movimiento. Para evitar pesados enunciados, sólo mencionaremos la generalización del Teorema 3.4.3. Para enfatizar la conexión con los anteriores resultados, abusaremos del uso de las mismas notaciones.

Consideramos el sistema de EDO

$$\dot{X} = V, \quad \dot{V} = -\nabla_x \phi(t, X) - \nabla_x \phi_e(X)$$

que describe las características de la ecuación de Vlasov (3.1.1). Supondremos que tanto ϕ como ϕ_e son localmente Lipschitz (soluciones clásicas), o al menos en $W_{loc}^{1,1}$ (usando la características generalizadas de DiPerna & Lions, ver [25, 35]). Una función $I : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^m$, es un *invariante del movimiento* si y sólo si

$$\frac{d}{dt} I(X(t), V(t)) = 0$$

en un sentido apropiado. Ejemplos clásicos de invariantes son, por ejemplo, el momento angular $I(x, v) = x \times v$ en el caso de un movimiento de fuerza central (es decir, si $\phi + \phi_e$ es radialmente simétrico), su módulo, o una de sus componentes: $I(x, v) \cdot v$, en el caso asimétrico con eje de dirección $v \in S^2$, correspondiente a un sistema invariante bajo rotaciones del eje v . Referencias sobre resultados de

existencia de soluciones clásicas con simetrías pueden encontrarse en [28] (para soluciones estacionarias ver [18]).

Consideramos soluciones estacionarias de la forma

$$(3.6.1) \quad f_{\infty, \sigma}(x, v) = \mu \left(E(x, v) - \alpha_M [\phi_{\infty, \sigma}, \phi_e, I], I(x, v) \right)$$

donde α_M es una constante que será determinada por $\|f_{\infty, \sigma}\|_{L^1} = M$, E es la energía y I es un invariante del movimiento. Notamos que E depende de $\phi_{\infty, \sigma} = \phi[f_{\infty, \sigma}]$. Por simplicidad, suponemos que I es una cantidad escalar.

En [12], Braasch, Rein & Vukadinović consideran el caso en el que μ puede ser factorizado como

$$\mu(E, I) = \gamma(E - \alpha) \nu(I) \quad \forall (E, I) \in \mathbb{R}^2,$$

donde γ es de soporte compacto y $\alpha \in \mathbb{R}$. Si γ satisface (H3) y (H4) y si ν es una función C^1 uniformemente positiva, nuestros resultados anteriores pueden ser extendidos fácilmente. En esta sección, vamos a considerar estados estacionarios generales correspondientes a funciones μ que no serán necesariamente factorizados en términos de dos funciones γ y ν (tal extensión ha sido ya considerada por Guo y Rein en [32] para sistemas gravitacionales) o no necesariamente de soporte compacto en E .

Para garantizar la existencia de estas soluciones estacionarias, tenemos que suponer las siguientes hipótesis sobre μ y ϕ_e , que son generalizaciones de (H3) y (H4) de la Sección 2.

(H3') Sea $\sigma : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\frac{\partial \sigma}{\partial s}(s, I) = -\mu^{-1}(s, I)$ y supongamos que para cualquier $I \in \mathbb{R}$ fijo, $\sigma(\cdot, I)$ tiene una $C^0(\mathbb{R}_0^+) \cap C^2(\mathbb{R}^+)$ regularidad, está acotada inferiormente, es estrictamente convexo y tal que $\lim_{s \rightarrow +\infty} \sigma(s, I)/s = +\infty$. Aquí μ^{-1} es la inversa generalizada de $s \mapsto \mu(s, I)$, para I fijo.

(H4') El potencial externo $\phi_e : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ es una función medible acotada inferiormente tal que $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \phi_e(x) = +\infty$ y

$$x \mapsto \int_{\mathbb{R}^3} \mu \left(\frac{1}{2} |v|^2 + \phi_e(x), I(x, v) \right) dv$$

pertenece a $L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

La solución estacionaria $f_{\infty, \sigma}$ se caracteriza por ser el único punto crítico no negativo de un funcional estrictamente convexo K_σ , con

$$K_\sigma[f] = \int_{\mathbb{R}^6} \left[\sigma(f, I) + \left(\frac{1}{2} |v|^2 + \phi_e(x) \right) f \right] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \phi[f]|^2 dx,$$

bajo la restricción $\int_{\mathbb{R}^6} f_{\infty, \sigma} d(x, v) = M$ para algún $M > 0$ dado. Como en la Sección 2, α_M en (3.6.1) es el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción de la masa y está unívocamente determinado por la condición $\int_{\mathbb{R}^6} f_{\infty, \sigma} d(x, v) = M$. Para

σ , asociamos un funcional de entropía relativa definido por

$$\begin{aligned}\Sigma_\sigma[f|f_{\infty,\sigma}] &:= K_\sigma[f] - K_\sigma[f_{\infty,\sigma}] \\ &= \int_{\mathbb{R}^6} [\sigma(f, I) - \sigma_\infty - \frac{\partial \sigma_\infty}{\partial s} (f - f_{\infty,\sigma})] d(x, v) + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_x(\phi[f] - \phi_{\infty,\sigma})|^2 dx\end{aligned}$$

con $\sigma_\infty = \sigma(f_{\infty,\sigma}, I)$ y $\phi_{\infty,\sigma} = \phi[f_{\infty,\sigma}]$.

Si existe una función $A_\sigma(I) > 0$ tal que $\frac{\partial^2 \sigma}{\partial s^2}(s, I) \geq A_\sigma(I)$ para algún $(s, I) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}$, desarrollando por Taylor se sigue que

$$\Sigma_\sigma[f|f_{\infty,\sigma}] \geq \int_{\mathbb{R}^6} A_\sigma(I) |f - f_{\infty,\sigma}|^2 d(x, v),$$

que prueba un resultado de "peso" L^2 -estabilidad. Exactamente como antes, podemos usar un argumento de "cortar" y obtener una generalización del Teorema 3.4.3.

Sea $\mathcal{E}_\sigma(x, v) := \frac{1}{2}|v|^2 + \phi_{\infty,\sigma}(x) + \phi_e(x)$ y $\mathcal{E}_{\min} := \inf\{\mathcal{E}_\sigma(x, v) : (x, v) \in \mathbb{R}^6\}$, que es finito por la hipótesis (H4'). Con notaciones evidentes, $f_{\infty,\sigma} = \mu(\mathcal{E}_\sigma(\cdot) - \alpha_M, I(\cdot, \cdot))$. Tomamos $\bar{s}(I) = \mu(\mathcal{E}_{\min} - \alpha_M, I)$ y definimos para cualquier $I \in \mathbb{R}$

$$(3.6.2) \quad \tau_\sigma(s, I) := \begin{cases} \sigma(s, I) & \text{si } s \in [0, \bar{s}(I)] \\ \psi(s, I) & \text{si } s \in (\bar{s}(I), +\infty) \end{cases}$$

con $\psi(s, I) = \frac{\sigma''(\bar{s}, I)}{\sigma_2''(\bar{s})} \sigma_2(s) + \left(\sigma'(\bar{s}, I) - \frac{\sigma''(\bar{s}, I)}{\sigma_2''(\bar{s})} \sigma_2'(\bar{s}) \right) (s - \bar{s}) + \sigma(\bar{s}, I) - \frac{\sigma''(\bar{s}, I)}{\sigma_2''(\bar{s})} \sigma_2(\bar{s})$, $\bar{s} = \bar{s}(I)$ y $\sigma_2(s) = s^2$. Con el funcional de Lyapunov truncado $\Sigma_{\tau_\sigma}[f|f_{\infty,\sigma}] = K_{\tau_\sigma}[f] - K_{\tau_\sigma}[f_{\infty,\sigma}]$, inmediatamente tenemos el siguiente invariante del Teorema 3.4.3.

TEOREMA 3.6.1. *Sea I una función en $C^1(\mathbb{R}^6)$ y supongamos que ϕ_e, μ verifican (H3')-(H4'). Supongamos además que*

$$B_\sigma(I) = \inf\{s \in [\mathcal{E}_{\min} - \alpha_M, \mu^{-1}(0, I)] : \frac{\partial^2 \sigma}{\partial s^2}(s, I) > 0 \text{ para todo } I \in \mathbb{R}.$$

Sea f_0 una función no negativa en $L^1(\mathbb{R}^6) \cap L^2(\mathbb{R}^6, B_\sigma(I(x, v)) d(x, v))$, tal que $(x, v) \mapsto \sigma(f_0(x, v), I(x, v))$ pertenece a $L^1(\mathbb{R}^6)$ y consideramos una solución débil (resp. renormalizada) del sistema de Vlasov-Poisson con condición inicial f_0 que satisface (\mathcal{W}) (resp. (\mathcal{R})). Entonces para cualquier $t \geq 0$

$$\Sigma_{\tau_\sigma}[f_0|f_{\infty,\sigma}] \geq \Sigma_{\tau_\sigma}[f(t)|f_{\infty,\sigma}] \geq \int_{\mathbb{R}^6} B_\sigma(I(x, v)) |f(t, x, v) - f_{\infty,\sigma}(x, v)|^2 d(x, v).$$

Estimaciones con peso L^q pueden también ser establecidas, si se reemplaza σ_2 por σ_q en (3.6.2), bajo la condición $\inf\{s \in [\mathcal{E}_{\min} - \alpha, \mu^{-1}(0, I)] : s^{2-q} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial s^2}(s, I) > 0$ para algún $I \in \mathbb{R}$.

NOTA 3.6.2. La Ecuación (3.1.1) es un caso especial (aproximación de banda parabólica) (ver segunda parte de esta memoria) del sistema de Vlasov-Poisson para semiconductores

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v(p) \cdot \nabla_x f + F(t, x) \cdot \nabla_p f = 0,$$

en $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, con $v(p) = \nabla_p \epsilon(p)$. Si suponemos que ϵ es una función no negativa C^1 tal que $e^{-\epsilon(p)} \in L^1(\mathbb{R}^3)$, entonces usando abusivamente las mismas notaciones que para (3.1.1) (que corresponde a un caso especial $\epsilon(p) = \frac{1}{2}p^2$), se puede por ejemplo, probar que existe una solución estacionaria de tipo Maxwelliana dada por

$$m(x, p) = M \frac{e^{-\epsilon(p)-q(\phi(x)+\phi_e(x))}}{\int_{\mathbb{R}^6} e^{-\epsilon-p(\phi+\phi_e)} d(x, p)},$$

donde ϕ es dado por (3.1.3) con $\rho(f)(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, p) dp$. Resultados de estabilidad no lineal para m y estados estacionarios más generales pueden fácilmente ser obtenidos usando las ideas anteriores. Los modelos realísticos incluyen colisiones, que normalmente determinan una clase especial de soluciones estacionarias (y el funcional de Lyapunov apropiado es entonces decreciente incluso para soluciones clásicas). Referimos a [37, 37, 6, 7, 17, 19] para más detalles sobre el tema.

7. Apéndice: una propiedad de convexidad de funciones L^1

Sea f_0 una función no negativa en $L^1(\Omega)$ para algún dominio Ω en \mathbb{R}^d , $d \geq 1$ (no necesariamente acotado). Es directo chequear que $\sigma(f_0) \in L^1(\Omega)$ si σ es una función convexa de C^2 en \mathbb{R}^+ tal que $s \mapsto \sigma(s)/s$ es acotada (considerar por ejemplo $\sigma(s) = 2s + e^{-s} - 1$). El resultado de la Proposición 3.2.1, que es un caso especial de la siguiente proposición, es mucho más fuerte.

PROPOSICIÓN 3.7.1. Sea $(E, d\mu)$ un espacio medible. Para cualquier función no negativa f_0 en $L^1(E, d\mu)$, existe una función no negativa estrictamente convexa σ de clase C^2 tal que $\lim_{s \rightarrow +\infty} \sigma(s)/s = +\infty$ y $\sigma(f_0) \in L^1(E, d\mu)$.

Este resultado es más o menos estándar. Vamos a dar una demostración por completitud del capítulo, que se basa en el siguiente lema elemental.

LEMA 3.7.2. Consideramos una sucesión $\{\alpha_n\}$ con $\alpha_n > 0$ para todo n y $\sum \alpha_n < \infty$. Entonces existe una sucesión creciente $\{\beta_n\}$ con $\beta_n > 0$ para algún $n \in \mathbb{N}$, y $\lim_{n \rightarrow \infty} \beta_n = +\infty$ tal que $\sum \alpha_n \beta_n < \infty$.

Demostración del Lema 3.7.2. Probamos este resultado dando una construcción explícita de β_n . Sea $\epsilon_n = \sum_{m \geq n} \alpha_m$ y tomamos $\beta_n = \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_n}}$:

$$\alpha_n \beta_n = (\epsilon_n - \epsilon_{n+1}) \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_n}} \leq \sqrt{\epsilon_n} - \sqrt{\epsilon_{n+1}},$$

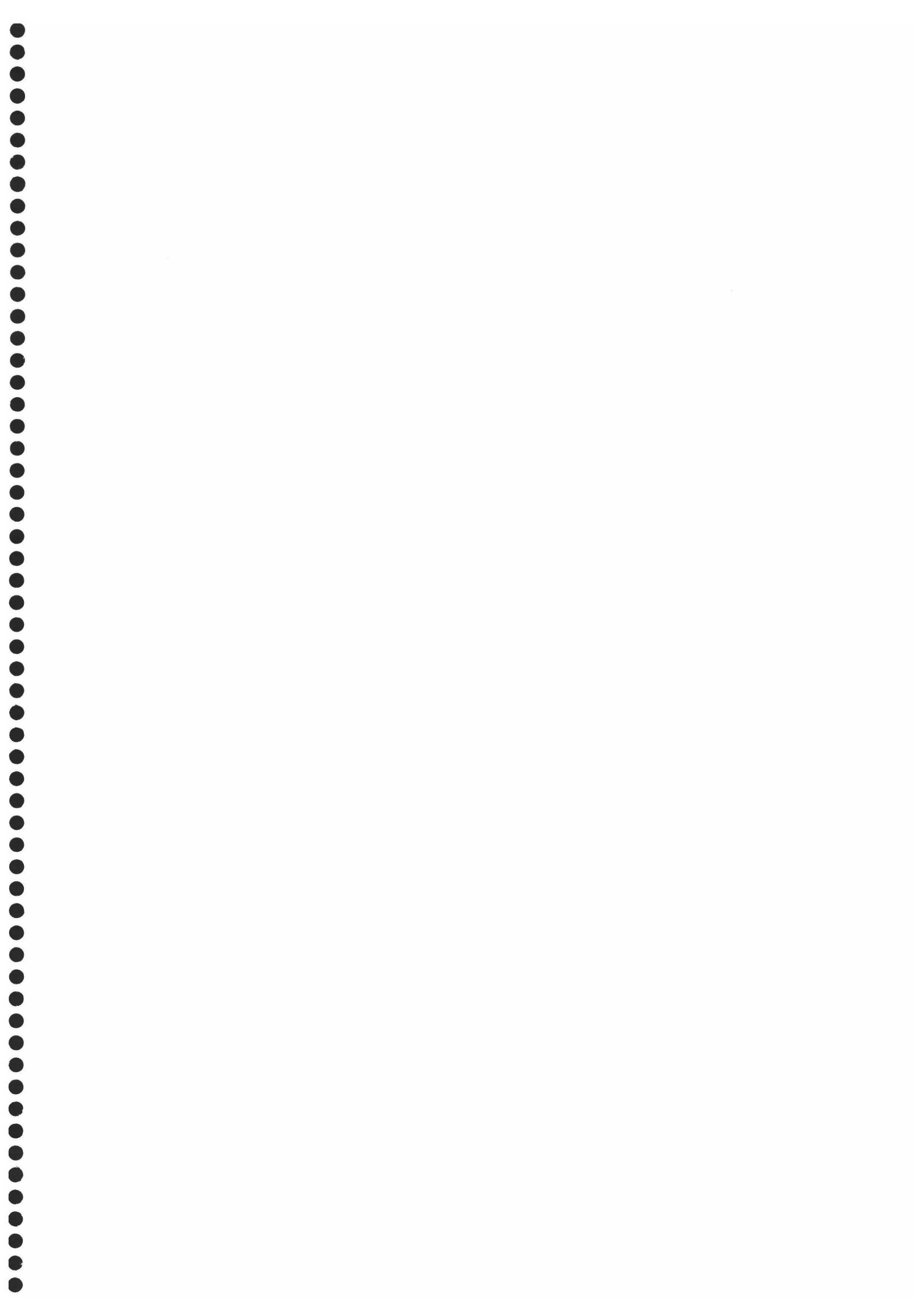
lo que inmediatamente de $\sum_{m \geq n} \alpha_m \beta_m \leq \sqrt{\epsilon_n}$. \square

Demostración de la Proposición 3.7.1. Sea $\alpha_n = \int_{n \leq f_0 < n+1} f_0 d\mu$ y tomamos β_n dado por el Lema 3.7.2. Se puede encontrar una función convexa σ con $s \mapsto \sigma(s)/s$ no decreciente, tal que $\sigma(n+1) = (n+1)\beta_n$. Entonces

$$\int_{n \leq f_0 < n+1} \sigma(f_0) d\mu \leq \int_{n \leq f_0 < n+1} f_0 d\mu \cdot \frac{\sigma(n+1)}{n+1} = \alpha_n \beta_n,$$

lo que finaliza la demostración. \square

NOTA 3.7.3. De la Proposición 3.7.1, es claro que no hay una función convexa óptima σ correspondiente a un dato inicial dado f_0 (volver a aplicar la Proposición a $\sigma(f_0)$). Para cualquier σ , uno puede sin embargo, asociar una función γ . ¿Hay alguna condición óptima de crecimiento de ϕ_e , de forma que ambas, solución estacionaria y entropía relativa estén bien definidas? Por otra parte, si la condición de crecimiento no se satisface, ¿es posible dar alguna estimación de la dispersión (como en el caso $\phi_e \equiv 0$, o $(x - x_0) \cdot \nabla \phi_e \geq 0$ para algún $x_0 \in \mathbb{R}^3$ dado)?



Bibliografía

- [1] A. ARNOLD, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *On generalized Csiszár-Kullback inequalities*, Monatsh. Math., 131, (2000), pp. 235–253.
- [2] A. ARNOLD, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *On convex Sobolev inequalities the rate of convergence to equilibrium for Fokker-Planck type equations*, Comm. Partial Differential Equations, 26, (2001), pp. 43–100.
- [3] A.A. ARSEN'EV, *Global existence of a weak solution of Vlasov's system of equations*, Sov. Math., Dokl., 14, (1973), pp. 1763–1765, traducido de Dokl. Akad. Nauk SSSR, 213, (1973), pp. 761–763.
- [4] J. BATT, P.J. MORRISON, G. REIN, *A rigorous stability result for the Vlasov-Poisson system in three dimensions*, Ann. Mat. Pura Appl. (4) 164, (1993), pp. 133–154.
- [5] J. BATT, P.J. MORRISON, G. REIN, *Linear stability of stationary solutions of the Vlasov-Poisson system in three dimensions*, Arch. Rational Mech. Anal. 130, (1995), pp. 163–182.
- [6] N. BEN ABDALLAH, J. DOLBEAULT, *Entropies relatives pour le système de Vlasov-Poisson dans des domaines bornés (Relative entropies for the Vlasov-Poisson system in bounded domains)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. I, Math. 330, (2000), pp. 867–872.
- [7] N. BEN ABDALLAH, J. DOLBEAULT, *Relative entropies for kinetic equations in bounded domains*, Para aparecer en Arch. Rational Mech. Anal.
- [8] P. BILER, J. DOLBEAULT, *Long time behavior of solutions to Nernst-Planck Debye-Hückel drift-diffusion systems*, Annales Henri Poincaré 1 (2000), pp. 461–472.
- [9] P. BILER, J. DOLBEAULT, P. MARKOWICH, *Large time asymptotics of nonlinear drift-diffusion systems with Poisson coupling*, Transport Theory Statistical Physics 30 no. 4-6, (2001), pp. 521–536.
- [10] L.L. BONILLA, J.A. CARRILLO, J. SOLER, *Asymptotic behaviour of the initial boundary value problem for the three-dimensional Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system*, SIAM J. Appl. Math. 57 (1997), pp. 1343–1372.
- [11] F. BOUCHUT, J. DOLBEAULT, *On long time asymptotics of the Vlasov-Fokker-Planck equation and of the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system with Coulombic Newtonian potentials*, Differential Integral Equations 8, (1995), pp. 487–514.
- [12] P. BRAASCH, G. REIN, J. VUKADINOVIĆ, *Nonlinear stability of stationary plasmas—an extension of the energy-Casimir method*, SIAM J. Appl. Math. 59, (1999), 831–844.
- [13] J. A. CARRILLO, G. TOSCANI, *Asymptotic L^1 -decay of solutions of the porous medium equation to self-similarity*, Indiana Univ. Math. J. 49, (2000), pp. 113–141.
- [14] J. A. CARRILLO, A. JUNGEL, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *Entropy dissipation methods for degenerate parabolic problems generalized Sobolev inequalities*, Monatsh. Math. 133, (2001), pp. 1–82.
- [15] F. CASTELLA, *Effets dispersifs dans les équations de Schrödinger et de Vlasov*, Séminaire sur les Equations aux Dérivées Partielles, 1997-1998, Exp. No. XXIV, 14 pp., École Polytechnique, Palaiseau (1998).
- [16] F. CASTELLA, *Propagation of space moments in the Vlasov-Poisson equation further results*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Lin. 16, (1999), pp. 503–533.

- [17] C. CERCIGNANI, I.M. GAMBA, C.L. LEVERMORE, *A high field approximation to a Boltzmann-Poisson system in bounded domains*, Applied Math Letters 4, (1997), pp. 111–118.
- [18] P. DEGOND, *Spectral theory of the linearized Vlasov-Poisson equation*, Trans. Amer. Math. Soc. 294, (1986), pp. 435–453.
- [19] P. DEGOND, F. POUPAUD, B. NICLOT, F. GUYOT, *Semiconductor modelling via the Boltzmann equation in “computational aspect of VLSI design with an emphasis on semiconductor device simulation”*, Lectures in Applied Mathematics 25, (1990), pp. 51–73.
- [20] M. DEL PINO, J. DOLBEAULT, *Generalized Sobolev inequalities and asymptotic behaviour in fast diffusion and porous media problems*, Sometido a publicación. Ceremade no. 9905 (1999), 1–45 & TMR “Asymptotic Methods in Kinetic Theory” no. 50.
- [21] M. DEL PINO, J. DOLBEAULT, *Best constants for Gagliardo-Nirenberg inequalities and application to nonlinear diffusions*, J. Math. Pures Appl., 9, 81, (2002), pp. 847–875.
- [22] M. DEL PINO, J. DOLBEAULT, *Non linear diffusions and optimal constants in Sobolev type inequalities: asymptotic behaviour of equations involving the p -Laplacian*, C. R. Math. Acad. Sci. Paris, 334, 5, (2002), pp. 365–370.
- [23] M. DEL PINO, J. DOLBEAULT, *Asymptotic behaviour of nonlinear diffusions*, Ceremade no. 0127 (2001), pp. 1–8. Para aparecer en Math. Res. Letters.
- [24] L. DESVILLETES, C. VILLANI, *On the trend to global equilibrium in spatially inhomogeneous entropy-dissipating systems. Part I: the linear Fokker-Planck equation*, Comm. Pure Appl. Math. 54, (2001), pp. 1–42.
- [25] R.-J. DiPERNA, P.-L. LIONS, *Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces*, Invent. Math. 98, (1989), pp. 511–547.
- [26] R.-J. DiPERNA, P.-L. LIONS, *Solution globales d’équations du type Vlasov-Poisson*, C. R. Acad. Sc. Paris 307, (1988), pp. 655–658.
- [27] J. DOLBEAULT, *Free energy and solutions of the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system: external potential and confinement (large time behavior and steady states)*, J. Math. Pures et Appliquées. 78, (1999), pp. 121–157.
- [28] R.T. Glassey, *The Cauchy problem in kinetic theory*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [29] Y. GUO, *Stable magnetic equilibria in collisionless plasmas*, Comm. Pure Appl. Math. 50, (1997), pp. 891–933.
- [30] Y. GUO, *Variational method for stable polytropic galaxies*, Arch. Ration. Mech. Anal. 150, (1999), pp. 209–224.
- [31] Y. GUO, G. REIN, *Existence and stability of Camm type steady states in galactic dynamics*, Indiana Univ. Math. J. 48, (1999), pp. 1237–1255.
- [32] Y. GUO, G. REIN, *Stable steady states in stellar dynamics*, Arch. Ration. Mech. Anal. 147, (1999), no. 3, pp. 225–243.
- [33] E. HÖRST, *Global strong solutions of Vlasov’s equations, necessary and sufficient conditions for their existence*, P.D.E., Banach Center Publications 19, Warsaw, (1987), pp. 143–153.
- [34] E. HÖRST, R. HUNZE, *Weak solutions of the initial value problem for the unmodified nonlinear Vlasov equation*, Math. Methods Appl. Sc. 6, (1984), pp. 262–279.
- [35] P.-L. LIONS, *Sur les équations différentielles ordinaires et les équations de transport*, C.R. Acad. Sci. Paris Sér. I 326, (1998), pp. 833–838.
- [36] P.-L. LIONS, B. PERTHAME, *Propagation of moments and regularity for the Vlasov-Poisson system*, Invent. Math., 105, (1991), pp. 415–430.
- [37] P.A. MARKOWICH, C.A. RINGHOFER C. SCHMEISER, *Semiconductor equations*, Springer, New York, 1990.
- [38] S. MISCHLER, *On the trace problem for solutions of the Vlasov equation*, Comm. Partial Differential Equations 25, (2000), pp. 1415–1443.

- [39] F. OTTO, *The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation*, Comm. Partial Differential Equations 26, (2001), pp. 101–174.
- [40] B. PERTHAME, *Time decay, propagation of low moments and dispersive effects for kinetic equations*, Commun. Partial Differ. Equations 21, (1996), pp. 659–686.
- [41] K. PFAFFELMOSE, *Global classical solutions of the Vlasov-Poisson system in three dimensions for general initial data*, J. Diff. Eqns. 95, (1992), pp. 281–303.
- [42] G. REIN, *Non-linear stability for the Vlasov-Poisson system—the energy-Casimir method*, Math. Methods Appl. Sci. 17, (1994), pp. 1129–1140.
- [43] J. SCHAEFFER, *Global existence of smooth solutions to the Vlasov-Poisson system in three dimensions*, Comm. Partial Differential Equations, 16, (1991), pp. 1313–1335.
- [44] G. WOLANSKY, *On nonlinear stability of polytropic galaxies*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire 16, (1999), pp. 15–48.



CAPÍTULO 4

Comportamiento asintótico de una ecuación parabólica no lineal de cuarto orden

En este capítulo estudiamos el comportamiento asintótico de soluciones del problema de valores iniciales, con condiciones frontera periódicas, para una ecuación de difusión degenerada no lineal de cuarto orden con una no-linealidad logarítmica. Para un dato inicial suficientemente pequeño y estrictamente positivo, probamos que una solución positiva se aproxima exponencialmente a su valor medio cuando el tiempo tiende a infinito. Estos resultados son obtenidos como consecuencia del análisis de la ecuación que verifica el logaritmo de la solución.¹

1. Introducción

Estudiamos el comportamiento asintótico para soluciones $f = f(t, x)$ del problema de valores iniciales con condiciones frontera periódicas siguiente:

$$(4.1.1) \quad f_t = -(f(\log f)_{xx})_{xx},$$

$$(4.1.2) \quad f(0, x) = f_0(x) \in H_+^1(S^1),$$

donde $x \in X$ y $t \in \mathbb{R}^+$, con $X = S^1$ parametrizada por una variable x que satisface $0 \leq x \leq 1$.

La ecuación (4.1.1), bajo condiciones de regularidad, puede ser escrita equivalentemente como

$$f_t = -f_{xxxx} + \left(\frac{f_x^2}{f} \right)_{xx}.$$

Esta ecuación surge como un límite asintótico en el estudio de un sistema cuántico con spin [6], donde f describe el límite asintótico de probabilidades para una variable aleatoria.

La Ecuación (4.1.1) modela también, la concentración de electrones en una descripción cuántica de un dispositivo semiconductor, (concretamente, un modelo de arrastre-difusión) con temperatura cero y campo eléctrico despreciable [7]. En

¹Los contenidos de este capítulo han sido desarrollados a modo de artículo en MARÍA J. CÁCERES, JOSÉ A. CARRILLO, GIUSEPPE TOSCANI, *Long-time behavior for a nonlinear fourth order parabolic equation.*, sometido a publicación

este contexto f representa la densidad de electrones en el cristal del semiconductor. Para el caso bidimensional la ecuación se lee

$$f_t = -2\operatorname{div}\left(f\nabla\left(\frac{\Delta\sqrt{f}}{\sqrt{f}}\right)\right)$$

o, equivalentemente (suponiendo soluciones regulares no nulas)

$$f_t = -\sum_{i,j}\partial_i\partial_j\left(f\partial_i\partial_j\log(f)\right).$$

La expresión $\Delta\sqrt{f}/\sqrt{f}$ es el denominado *potencial cuántico de Bohm*.

Los primeros en estudiar este problema fueron Bleher, Lebowitz y Speer en [1]. Probaron existencia local en tiempo para datos iniciales estrictamente positivos y existencia global (en tiempo) para datos iniciales “pequeños”. Mostrando, en este último caso, convergencia al estado estacionario $\int_{S^1} f_0$, sin velocidad de convergencia.

Siguiendo los resultados numéricos dados en [3], uno puede conjeturar la convergencia exponencial hacia los estados estacionarios para las soluciones globales (en tiempo) del problema (4.1.1)-(4.1.2), con condiciones periódicas (ver también [2, 5, 9]). De hecho, recientemente, esta conjetura se ha probado en [9] usando diferentes técnicas para (4.1.1) con las condiciones frontera introducidas en [7, 8].

En lo referente al problema de Cauchy para (4.1.1), en [2, 5] se notó que la Ecuación (4.1.1) es un caso particular de una clase de ecuaciones de difusión de cuarto orden, que admiten soluciones auto-semejantes. Estas soluciones se pueden definir gracias a un problema de minimización que involucra a la entropía física y vienen dadas por un núcleo de calor modificado. En [2, 5] se argumentó, formalmente, este hecho y en [3] se investigó numéricamente que esta propiedad podría dar un decaimiento algebraico de las soluciones de (4.1.1) hacia la correspondiente solución auto-semejante en la norma L^1 .

En este capítulo, probamos, bajo apropiadas condiciones de “pequeñez” para el dato inicial, velocidad de equilibrio exponencial de las soluciones de (4.1.1) con condiciones frontera periódicas.

En lugar de trabajar directamente con (4.1.1)-(4.1.2), trasladaremos el marco de trabajo al problema de valores iniciales en términos de $\log f$. Si denotamos $\alpha(t, x) = \log f(t, x)$, $\alpha = \alpha(t, x)$ satisface la siguiente ecuación

$$(4.1.3) \quad \alpha_t = -\left(\alpha_{xxxx} + 2\alpha_x\alpha_{xxx} + \alpha_{xx}\alpha_x^2 + \alpha_{xx}^2\right) = -e^{-\alpha}(e^\alpha\alpha_{xx})_{xx}.$$

El problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) nos conduce, de este modo, al problema de valores iniciales (4.1.3) con condición inicial

$$(4.1.4) \quad \alpha(0, x) = \alpha_0(x) = \log f_0(x).$$

La Ecuación (4.1.3) es una pieza clave en el análisis de (4.1.1)-(4.1.2). En realidad, todos los funciones de Lyapunov estudiados en [1] se recuperan fácilmente en nuestro "ambiente de trabajo". Además, la forma de (4.1.3) permite reconocer condiciones bajo las cuales el problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) se estabiliza exponencialmente.

Es interesante notar que la Ecuación (4.1.1) puede escribirse equivalentemente de muchas maneras, que pueden resultar fructíferas para la obtención de distintos resultados. Así en [1] se consideró la ecuación que surge al tomar $f = w^2$,

$$w_t = -w_{xxxx} + \frac{w_{xx}^2}{w}.$$

Hacemos notar también, que bajo nuestro conocimiento, la forma (4.1.3) no había sido utilizada antes.

DEFINICIÓN 4.1.1. Dado $f_0 \in H_+^1(S^1)$ diremos que $f \in C_+([0, T]; H^1)$ es una solución débil del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) en el intervalo $[0, T]$ si verifica:

$$(4.1.5) \quad f(t) = e^{-At} f_0 + \partial_x^2 \int_0^t e^{-A(t-s)} \frac{f_x^2(s)}{f(s)} ds,$$

donde $A = \partial_x^4$ y e^{-At} es el correspondiente semigrupo en L^2 . Los Lemas 4.8 y 4.9 en [1] garantizan el sentido del integrando en (4.1.5).

Antes de enunciar los principales resultados de este capítulo, resumimos los resultados de existencia dados por Bleher, Lebowitz y Speer en [1], puesto que serán el punto de partida para nuestro análisis.

TEOREMA 4.1.2. [1, Teorema 4.2] Sea $f_0 \in H_+^1(S^1)$. Entonces:

- (a) **Existencia local y unicidad de una solución débil:** Para algún $T > 0$ existe una única solución débil $f = f(t, x)$ del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2), tal que $f \in C_+([0, T]; H^1(S^1))$.
- (b) **Regularidad de soluciones:** Si $f \in C_+([0, T]; H^1(S^1))$ es una solución débil del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2), entonces $f \in C((0, T]; H^r(S^1))$ para todo r ; además, f es una solución clásica de (4.1.1)-(4.1.2) en $H^r(S^1)$ para todo r .

Sea $I = [0, T(f_0))$ el intervalo maximal en el que la solución del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) existe. Puesto que las soluciones débiles son

en realidad soluciones clásicas, por el teorema anterior, de ahora en adelante trabajaremos con soluciones clásicas y no volveremos a referir a la Definición 4.1.5

TEOREMA 4.1.3. [1, Teorema 5.1] *Sea $f_0 \in H_+^1(S^1)$ y $f \in C_+([0, T(f_0)); H^1(S^1))$ la solución débil del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) definido en un intervalo maximal semi-abierto. Si $T(f_0) < \infty$, entonces $h = \lim_{t \nearrow T(f_0)} f(t)$ existe en C^1 , pero la solución límite h se hace cero, al menos, en algún punto de S^1 .*

Los Teoremas 4.1.2 y 4.1.3 muestran que la preservación de la positividad de la solución implica existencia global. Esta propiedad es la clave del principal resultado de este capítulo.

En lo que sigue, denotaremos por \bar{f} el valor medio de f en S^1 ,

$$\bar{f} = \int_{S^1} f(x) dx.$$

Probaremos

TEOREMA 4.1.4. *Sea $f_0 \in H_+^1(S^1)$ tal que*

$$(H) \quad \int_{S^1} \frac{f_x^2(0, x)}{f^2(0, x)} dx < 12,$$

y sea $f(t, x)$ la solución de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces:

- (a) *El problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) tiene una única solución global en tiempo.*
- (b) $\int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} dx$ converge exponencialmente a 0, cuando $t \rightarrow \infty$.
- (c) $\|f(t) - \bar{f}_0\|_{H^1(S^1)}$ converge exponencialmente a 0, cuando $t \rightarrow \infty$.

El teorema 4.1.4 nos proporciona una información adicional; para cualquier $p \in [1, 2]$, $\|f\|_{L^p(S^1)}$ converge exponencialmente hacia \bar{f}_0 . Para un rango inferior de p , en concreto para $1 \leq p \leq 4/3$ probaremos que esta convergencia exponencial hacia el equilibrio se mantiene sin necesidad de suponer (H), sin más que suponer condiciones sobre el dato inicial que garanticen la existencia global de solución. Este resultado lo recogemos en el siguiente teorema

TEOREMA 4.1.5. *Sea f una solución global del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2), entonces, para $1 \leq p \leq 4/3$*

$$(4.1.6) \quad 0 \leq \int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \leq \left(\int_{S^1} f_0^p dx - \bar{f}_0^p \right) e^{-Kt},$$

donde $K = 64\pi^4(p - 1)/p$.

La desigualdad de Jensen muestra la positividad del término de la derecha de (4.1.6). La desigualdad clásica de Csiszar–Kullback (ver Capítulo 3, [10]),

$$(4.1.7) \quad \left(\int_{S^1} |f - \bar{f}| dx \right)^2 \leq \frac{4\bar{f}_0}{p(p-1)} \left(\int_{S^1} f^p dx - \bar{f}^p \right),$$

probará, entonces, convergencia exponencial en $L^1(S^1)$ de la solución hacia el estado de equilibrio con velocidad $K/2$.

El capítulo lo organizamos con sigue. En la Sección 2, mediante la Ecuación (4.1.3), recuperaremos la monotonía en tiempo de los funcionales de Lyapunov estudiados en [1] usando técnicas distintas. En la Sección 3 nos ocuparemos de la demostración de los resultados del comportamiento asintótico para datos iniciales pequeños (Teorema 4.1.4) y del L^p - decaimiento exponencial (Teorema 4.1.5).

2. Funcionales de entropía revisados

En [1] se estudió toda una familia de funcionales monótonos en tiempo, de la forma $\Psi(f, f_x)$. Siendo f la solución de (4.1.1)-(4.1.2). En esta sección obtenemos la monotonía de estos funcionales como una consecuencia fácil de la Ecuación (4.1.3). Puesto que las soluciones débiles con las que trabajamos son en realidad clásicas, Teorema 4.1.2 los resultados aquí presentado son completamente rigurosos y pueden incluso extrapolarse a todo \mathbb{R} , siempre que f y sus derivadas decaigan suficientemente rápido en infinito, para garantizar el uso correcto de la integración por partes.

Además de la Ecuación (4.1.3)

$$\alpha_t = -(\alpha_{xxxx} + 2\alpha_x \alpha_{xxx} + \alpha_{xx} \alpha_x^2 + \alpha_{xx}^2) = -e^{-\alpha} (e^\alpha \alpha_{xx})_{xx},$$

una pieza clave en esta sección será la ecuación,

$$(4.2.1) \quad (\alpha_x)_t = -(\alpha_{xxxx} + 2\alpha_x \alpha_{xxx} + 4\alpha_{xx} \alpha_{xxx} + \alpha_x^2 \alpha_{xxx} + 2\alpha_x \alpha_{xx}^2).$$

La Ecuación (4.1.3) se puede obtener en dos líneas:

$$\alpha_t = \log f_t = \frac{f_t}{f} = -\frac{(f(\log f)_{xx})_{xx}}{f} = -\left(\alpha_{xx} \frac{f_{xx}}{f} + 2\alpha_x \alpha_{xxx} + \alpha_{xxxx} \right),$$

y

$$\alpha_{xx} = \left(\frac{f_x}{f} \right)_x = \frac{f_{xx}}{f} - \left(\frac{f_x}{f} \right)^2, \quad \frac{f_{xx}}{f} = \alpha_{xx} + (\alpha_x)^2.$$

Para la segunda igualdad en (4.1.3) sólo se usa que $\alpha = \log f$ y consecuentemente $e^\alpha = f$. La Ecuación (4.2.1) se obtiene de (4.1.3) derivando con respecto a la variable x .

2.1. Funcionales que dependen de α . Los funcionales $\int_{S^1} f^p dx$, $\int_{S^1} f \log f dx$ y $\int_{S^1} \log f dx$ se pueden fácilmente reescribir en términos de $\log f$. Obteniéndose, de este modo, como funcionales de α , $\int_{S^1} \phi(\alpha) dx$. Así, para $\alpha(t, x)$ la solución de nuestro problema, resulta interesante estudiar la derivada en tiempo de $\int_{S^1} \phi(\alpha(t, x)) dx$.

PROPOSICIÓN 4.2.1. *Sea $\phi \in C^\infty(\mathbb{R})$ y $\alpha = \log f$, donde f es una solución clásica (positiva) de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces*

$$(4.2.2) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \phi(\alpha) dx &= \int_{S^1} \alpha_{xx}^2 [\phi'(\alpha) - \phi''(\alpha)] dx \\ &+ \frac{1}{3} \int_{S^1} \alpha_x^4 [\phi''(\alpha) - 2\phi'''(\alpha) + \phi^{(iv)}(\alpha)] dx, \end{aligned}$$

donde la prima denota la diferenciación de $\phi(\cdot)$ con respecto a su argumento.

Demostración. Diferenciando con respecto al tiempo tenemos

$$\frac{d}{dt} \int_{S^1} \phi(\alpha) dx = \int_{S^1} \phi'(\alpha) \alpha_t dx = - \int_{S^1} \phi'(\alpha) [\alpha_{xxxx} + 2\alpha_x \alpha_{xxx} + \alpha_{xx} \alpha_x^2 + \alpha_{xx}^2] dx.$$

Si ahora integramos por partes podemos reducir el orden de las derivadas con respecto a x de α en los tres primeros términos. Obteniendo así, para el primer término

$$\begin{aligned} - \int_{S^1} \phi'(\alpha) \alpha_{xxxx} dx &= \int_{S^1} \phi''(\alpha) \alpha_x \alpha_{xxx} dx = - \int_{S^1} [\phi'''(\alpha) \alpha_x^2 \alpha_{xx} + \phi''(\alpha) \alpha_{xx}^2] dx = \\ &- \int_{S^1} \left[\phi'''(\alpha) \frac{(\alpha_x^3)_x}{3} + \phi''(\alpha) \alpha_{xx}^2 \right] dx = \int_{S^1} \phi^{(iv)}(\alpha) \frac{\alpha_x^4}{3} dx - \int_{S^1} \phi''(\alpha) \alpha_{xx}^2 dx. \end{aligned}$$

Para el segundo

$$\begin{aligned} -2 \int_{S^1} \phi'(\alpha) \alpha_x \alpha_{xxx} dx &= 2 \int_{S^1} [\phi''(\alpha) \alpha_x^2 \alpha_{xx} + \phi'(\alpha) \alpha_{xx}^2] dx = \\ 2 \int_{S^1} \left[\phi''(\alpha) \frac{(\alpha_x^3)_x}{3} + \phi'(\alpha) \alpha_{xx}^2 \right] dx &= -2 \int_{S^1} \phi'''(\alpha) \frac{\alpha_x^4}{3} dx + 2 \int_{S^1} \phi'(\alpha) \alpha_{xx}^2 dx. \end{aligned}$$

Y finalmente el tercer término

$$- \int_{S^1} \phi'(\alpha) \alpha_{xx} \alpha_x^2 dx = - \int_{S^1} \phi'(\alpha) \frac{(\alpha_x^3)_x}{3} dx = \int_{S^1} \phi''(\alpha) \frac{\alpha_x^4}{3} dx.$$

Lo que nos da la expresión buscada (4.2.2). \square

Este resultado nos permite encontrar de una forma rápida funcionales que varíen monótonamente en tiempo. Ya que dado ϕ basta examinar el signo de las expresiones $\phi'(\alpha) - \phi''(\alpha)$ y $\phi''(\alpha) - 2\phi'''(\alpha) + \phi^{(iv)}(\alpha)$.

Como un primer ejemplo, trivial, podemos considerar $\phi(\alpha) = \alpha$, con lo que $\phi' \equiv 1$ y $\phi'' \equiv \phi''' \equiv \phi^{(iv)} \equiv 0$, transformándose la Ecuación (4.2.2) en

$$(4.2.3) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} \log f \, dx = \int_{S^1} \alpha_{xx}^2 \, dx,$$

cuyo signo es evidentemente positivo (si obviamos la soluciones constantes, que lógicamente nos darían una evolución constante en tiempo). De este modo obtenemos

COROLARIO 4.2.2. *Sea f una solución clásica (positiva) de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces, $\int_{S^1} \log f(t, x) \, dx$ es no decreciente en tiempo.*

Consideremos ahora $\phi(\alpha) = \exp(p\alpha)$, $p > 0$, o, equivalentemente, $\phi(\alpha) = f^p$, entonces la Proposición 4.2.1 se reescribe como

COROLARIO 4.2.3. *Sea f una solución clásica (positiva) de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces*

$$(4.2.4) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p \, dx = p(1-p) \left[\int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_{xx}^2 \, dx + \frac{p(1-p)}{3} \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^4 \, dx \right].$$

Además, $\int_{S^1} f^p \, dx$ es no decreciente para $0 < p < 1$, no creciente para $1 < p \leq \frac{3}{2}$ y constante para $p = 1$.

Demostración. La demostración de este corolario recae en el estudio de los signos de los dos sumandos del término de la derecha en (4.2.4). Para el caso $0 < p \leq 1$ el resultado se sigue fácilmente. El caso elaborado es cuando p está en el intervalo $(1, \frac{3}{2}]$, ya que en este caso los sumandos tienen signos opuestos. Veamos pues, en detalle, este segundo caso.

La demostración se concluye si probamos que el término de la derecha en (4.2.4) no es positivo para $1 < p \leq \frac{3}{2}$. Afirmación que será una consecuencia de la siguiente desigualdad,

$$(4.2.5) \quad \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_{xx}^2 \geq \frac{p^2}{9} \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^4 \, dx, \quad \forall p \geq 0.$$

Esta desigualdad se prueba haciendo uso de un fácil y por ello, bonito truco: *para cualquier constante $d \in \mathbb{R}$, tenemos la evidente desigualdad*

$$(4.2.6) \quad 0 \leq \int_{S^1} e^{p\alpha} [\alpha_{xx} + d\alpha_x^2]^2 \, dx,$$

Podemos trabajar astutamente y enmascarar la "evidencia", desarrollando el cuadrado e integrando por partes la integral que involucra al producto $\alpha_x \alpha_{xx}$, y usando argumentos similares a los empleados en la demostración de la Proposición 4.2.1, obtenemos la desigualdad

$$(4.2.7) \quad \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_{xx}^2 \geq \left(\frac{2}{3} dp - d^2 \right) \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^4 \, dx.$$

La función $u = u(d) = \frac{2}{3}dp - d^2$ alcanza el valor máximo en $d = p/3$, donde $u(p/3) = p^2/9$. Puesto que (4.2.7) se verifica para cualquier $d \in \mathbb{R}$, podemos tomar $d = p/3$, lo que prueba (4.2.5).

Volvamos, entonces, a nuestro problema, recordemos: probar que el término de la derecha en (4.2.4) no es positivo para $1 < p \leq \frac{3}{2}$.

Para $p > 1$, $p(1 - p) < 0$. Entonces, para terminar lo que debemos mostrar es que

$$(4.2.8) \quad \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_{xx}^2 dx \geq \frac{p(p-1)}{3} \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^4 dx.$$

Por (4.2.5) esta desigualdad la tendremos si $p^2/9 \geq p(p-1)/3$, lo que nos obliga a $p \leq 3/2$. Señalemos que bajo la hipótesis $f_0 \neq \bar{f}_0$ obtenemos $\frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p dx < 0$, puesto que en este caso (4.2.6) es estricta.

□

NOTA 4.2.4. La demostración del Corolario 4.2.3 es bastante diferente de la que fue dada en [1]. En [1] se prueba que $\frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p dx$ puede acotarse por la integral de una forma cuadrática semi-definida cuando $1 < p < 3/2$.

Además, la ecuación (4.2.4) nos da una información adicional como se podrá ver en la última sección, proporcionando una velocidad de decaimiento explícito de la solución en la norma L^p .

Como un tercer ejemplo de funcionales dependientes de α consideramos $\phi(\alpha) = \alpha e^\alpha$. De este modo, recuperamos la monotonía en tiempo del funcional $\int_{S^1} f \log f dx$.

COROLARIO 4.2.5. Sea f una solución clásica (positiva) de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces

$$(4.2.9) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} f \log f dx = - \int_{S^1} \alpha_{xx}^2 e^\alpha dx \leq 0.$$

Demostración. Si $\phi(\alpha) = \alpha e^\alpha$,

$$\phi'(\alpha) = e^\alpha(1 + \alpha), \quad \phi''(\alpha) = e^\alpha(2 + \alpha), \quad \phi'''(\alpha) = e^\alpha(3 + \alpha), \quad \phi^{(iv)}(\alpha) = e^\alpha(4 + \alpha).$$

Por tanto,

$$\phi'(\alpha) - \phi''(\alpha) = -e^\alpha, \quad \phi''(\alpha) - 2\phi'''(\alpha) + \phi^{(iv)}(\alpha) = 0.$$

□

NOTA 4.2.6. Pese a la aparente simplicidad de la expresión (4.2.2) no hemos podido encontrar funcionales que nos permitan dilucidar su evolución en tiempo, atendiendo al signo del término de la derecha de la ecuación.

Las elecciones naturales $\phi(\alpha) = \alpha^q e^{p\alpha}$ no parecen dar un signo y con ello ofrecer nuevos funcionales (además de los ya conocidos, eligiendo $q = 1, p = 0, q = 1, p = 1, q = 0, p < 1$ o $q = 0, 1 < p \leq 3/2$).

2.2. Funcionales que dependen α y α_x . En esta sección se consideran funcionales que dependen de f_x y conjuntamente de f y f_x .

Como caso particular de funcionales dependientes de f_x estudiaremos la evolución en tiempo del funcional $\int_{S^1} \alpha_x^2 dx$, que será el ingrediente principal para la demostración de la convergencia exponencial de la solución al estado estacionario (ver la próxima sección).

Un ejemplo importante de funcionales que dependen conjuntamente de f y su derivada f_x es la información de Fisher,

$$I(f) = \int_{S^1} \frac{f_x^2}{f} dx.$$

Con esta familia, recuperaremos también, todos los funcionales que se consideraron en [1].

Comenzamos estudiando funcionales que dependen sólo de α_x .

PROPOSICIÓN 4.2.7. Sea $\phi \in C^\infty(\mathbb{R})$. Entonces

$$(4.2.10) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \phi(\alpha_x) dx &= \int_{S^1} \phi''(\alpha_x) (\alpha_x^2 \alpha_{xx}^2 - \alpha_{xxx}^2) dx - \int_{S^1} \phi'''(\alpha_x) \alpha_x \alpha_{xx}^3 dx + \\ &+ \frac{1}{3} \int_{S^1} \phi^{(iv)}(\alpha_x) \alpha_x^4 dx. \end{aligned}$$

Demostración.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \phi(\alpha_x) dx &= \int_{S^1} \phi'(\alpha_x) (\alpha_x)_t dx = \\ &- \int_{S^1} \phi'(\alpha_x) (\alpha_{xxxxx} + 2\alpha_x \alpha_{xxxx} + 4\alpha_{xx} \alpha_{xxx} + \alpha_x^2 \alpha_{xxx} + 2\alpha_x \alpha_{xx}^2) dx, \end{aligned}$$

donde usamos (4.2.1). Nuevamente, varias integraciones por partes nos permiten reducir el orden de las derivadas y probar (4.2.10). Puesto que los cálculos son muy similares a los ya hechos en la Proposición 4.2.1 no los volvemos a repetir aquí. \square

El ejemplo más importante de este resultado, es el que nos da la elección $\phi(r) = r^2$, que recogemos en el siguiente corolario

COROLARIO 4.2.8. Sea f la solución de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces

$$(4.2.11) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \alpha_x^2 dx = - \int_{S^1} \alpha_{xxx}^2 dx + \int_{S^1} \alpha_x^2 \alpha_{xx}^2 dx.$$

Por último consideraremos funcionales que dependen conjuntamente de α y α_x . En particular, estudiaremos la evolución en tiempo de funcionales $\phi(\alpha, \alpha_x) = \phi_1(\alpha)\phi_2(\alpha_x)$, donde $\phi_1(s) = e^s$ y $\phi_2(s) = s^2$. Esta familia incluye, entre otros, la información de Fisher, cuya monotonía en tiempo se sigue fácilmente en nuestro ambiente de trabajo.

PROPOSICIÓN 4.2.9. *Sea f una solución de (4.1.1)-(4.1.2). Entonces*

$$\frac{d}{dt} \int_{S^1} \frac{f_x^2(t)}{f(t)} dx = -2 \int_{S^1} e^\alpha (\alpha_x \alpha_{xx} + \alpha_{xxx})^2 dx,$$

por tanto la información de Fisher

$$I(f)(t) = \int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f(t, x)} dx$$

es no creciente en tiempo.

Demostración. Usaremos, en este caso, la segunda igualdad en (4.1.3).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \frac{f_x^2(t)}{f(t)} dx &= \frac{d}{dt} \int_{S^1} e^\alpha \alpha_x^2 dx = \int_{S^1} e^\alpha (\alpha_x^2 \alpha_t + 2\alpha_x \alpha_{xt}) dx = \\ &= \int_{S^1} [e^\alpha \alpha_x^2 - (2e^\alpha \alpha_x)_x] \alpha_t dx = \int_{S^1} [e^\alpha \alpha_x^2 - 2e^\alpha (\alpha_x^2 + \alpha_{xx})] \alpha_t dx = \\ &= \int_{S^1} e^\alpha (\alpha_x^2 + 2\alpha_{xx}) e^{-\alpha} (e^\alpha \alpha_{xx})_{xx} dx = - \int_{S^1} e^\alpha (\alpha_x^2 + 2\alpha_{xx})_x (\alpha_x \alpha_{xx} + \alpha_{xxx}) dx. \end{aligned}$$

Lo que concluye la demostración. Por supuesto, la primera igualdad en (4.1.3) también nos conduciría a nuestro objetivo, pero hemos optado por la segunda para aprovechar las ventajas que ofrece la función exponencial. \square

NOTA 4.2.10. *La demostración anterior se puede generalizar para probar que los funcionales*

$$I^p(f) = \int_{S^1} [f_x^2(t, x)/f(t, x)]^p dx$$

son no crecientes en tiempo si $1 \leq p \leq 3/2$. En términos de α , estos funcionales adquieren la forma $\int_{S^1} e^{p\alpha} [\alpha_x^2]^p dx$, que nos permiten cálculos explícitos. Sin embargo, en este caso, la demostración en términos de α no supone ninguna simplificación esencial respecto a la prueba dada en [1].

Para concluir esta sección queremos hacer notar, que el objetivo de la misma ha sido mostrar que la monotonía en tiempo de los distintos funcionales considerados en [1], se puede ver desde una óptica general, como una consecuencia del marco de trabajo que surge al estudiar la Ecuación (4.1.3).

Además, hemos obtenido un funcional convexo, (4.2.11), cuya monotonía en tiempo está garantizada para datos iniciales suficientemente pequeños. Hecho, que nos permitirá obtener un resultado nuevo de convergencia exponencial hacia el equilibrio para la solución de (4.1.1)-(4.1.2), con velocidad explícita.

3. Convergencia al equilibrio

Para el problema de contorno con condición inicial (4.1.1)-(4.1.2) los estados de equilibrio $f_\infty > 0$ son dados por constantes, puesto que por

$$\frac{d}{dt} \int_{S^1} \log f \, dx = \int_{S^1} \alpha_{xx}^2 \, dx,$$

estos estados son tales que

$$(\log f_\infty)_{xx} = 0,$$

y entonces

$$f_\infty(x) = e^{C_3 x + C_4}.$$

Y por las condiciones frontera, obtenemos que f_∞ debe ser constante ($f_\infty(x) = e^{C_4}$). Y puesto que la solución de equilibrio tiene que tener masa igual a \bar{f}_0 se concluye que $f_\infty(x) = \bar{f}_0$.

Como consecuencia del trabajo realizado por Bleher, Lebowitz y Speer (Teoremas 4.1.2 y 4.1.3) basta probar que la solución se mantiene positiva para garantizar la existencia global de la solución. De este modo nuestro esfuerzo se concentrará en buscar condiciones sobre el dato inicial que preserven la positividad de la solución. Veremos que condiciones bajo las cuales el funcional $\int_{S^1} \alpha_x^2(t) \, dx$ es no creciente en tiempo serán suficientes para asegurar la positividad, y por ende la existencia global y la convergencia exponencial, con velocidad explícita, al estado estacionario.

Antes de seguir adelante, recordamos algunas conocidas desigualdades y embebimientos de Sobolev (con constantes óptimas), que usaremos en lo sucesivo.

LEMA 4.3.1. Si $g \in W^{1,1}$ y $\bar{g} = 0$, entonces

$$(4.3.1) \quad \|g\|_{C^0} \leq \frac{1}{2} \|g_x\|_{L^1}$$

$$(4.3.2) \quad \|g\|_{C^0} \leq \frac{1}{2\sqrt{3}} \|g_x\|_{L^2}$$

$$(4.3.3) \quad \|g\|_{L^2} \leq \frac{1}{2\pi} \|g_x\|_{L^2}$$

En la siguiente proposición damos una condición, bajo la cual, el funcional $\int_{S^1} \alpha_x^2(t) dx$ es no creciente en tiempo. Esta condición será suficiente para obtener existencia global y convergencia exponencial hacia el equilibrio.

PROPOSICIÓN 4.3.2. *Sea el valor inicial f_0 que satisface $f_0 \neq \bar{f}_0$ y la condición (H). Entonces, la solución del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2) verifica $f \in C(I; H^1(S^1)_+)$, y*

$$\int_{S^1} \left(\frac{f_x}{f} \right)^2 (t) dx < 12,$$

para todo $t \in I$.

Demostración. (4.3.1) en el Lema 4.2.8 aplicado a $\alpha_{xx}(t)$ nos da que para cada $t \in I$,

$$(4.3.4) \quad |\alpha_{xx}(t)|^2 \leq \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_{xxx}^2(t) dx.$$

Usando esta acotación en (4.2.9) tenemos

$$(4.3.5) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \alpha_x^2(t) dx \leq - \left(\int_{S^1} \alpha_{xxx}^2(t) dx \right) \left(1 - \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_x^2(t) dx \right).$$

La demostración se concluye por un argumento de conexión. Sea

$$F(t) = \int_{S^1} \left(\frac{f_x}{f} \right)^2 (t, x) dx$$

y

$$A = \{t \in I \text{ tal que, } F(s) < 12, \forall s \in [0, t]\}.$$

A es no vacío puesto que

$$1 - \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx > 0$$

por la hipótesis (H). Por tanto $0 \in A$. Obviamente, A es un conjunto abierto relativo a I , puesto que F es continua.

Sea $t^* \in \bar{A} \cap I$. Si $t^* \leq t_n$ para algún n , $t^* \in A$ y se acaba la demostración. Entonces, sea $\{t_n\}$ una sucesión creciente en I , tal que $\{t_n\} \rightarrow t^*$, $t^* \in I$. Entonces, $\forall n$ $F(t_n) < 12$.

La condición $f_0 \neq \bar{f}_0$ implica (por la unicidad de la solución) que $f(t) \neq \bar{f}_0$, $\forall t \in I$. Entonces,

$$\int_{S^1} \alpha_{xxx}^2(s) > 0,$$

puesto que de no ser así, $f(t) = \bar{f}_0$ en contradicción con la afirmación anterior. Por tanto, para todo n , $\frac{d}{dt} \int_{S^1} \alpha_x^2(s) dx < 0 \forall s \in [0, t_n]$ puesto que en este intervalo

$F(s) < 12$. Luego para todo n , F es decreciente en $[0, t_n]$ y como $\{t_n\} \rightarrow t^*$ concluimos que $F(t^*) < F(0) < 12$.

Probamos así, que $t^* \in A$ y que A es un conjunto cerrado relativo a I . Por tanto, $A = I$. \square

Con este resultado estamos en condiciones de probar el principal teorema de este capítulo, Teorema 4.1.4. Hacemos notar antes, que vamos a evitar la condición inicial, $f_0 = \bar{f}_0$, ya que en este caso $f(t) = \bar{f}_0, t \geq 0$ y no hay nada que probar. Enunciamos pues, de una forma más precisa el Teorema 4.1.4, antes de dar su demostración.

TEOREMA 4.3.3. *Consideremos un dato inicial f_0 que satisfaga $f_0 \in H_+^1(S^1)$ y la condición (H). Si $f(t, x)$ es la solución de (4.1.1)-(4.1.2), entonces*

(a) $T(f_0) = \infty$.

(b) $\int_{S^1} f_x^2(t, x) / f^2(t, x) dx$ converge exponencialmente a 0, cuando t tiende a infinito, y se verifica

$$\int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} dx \leq M_1 e^{-M_2 t},$$

donde $M_1 = 12 \left(12 / \int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx - 1 \right)^{-1} > 0$ y $M_2 = 2(2\pi)^4$.

(c) $\|f(t) - \bar{f}_0\|_{H^1(S^1)}$ converge exponencialmente a 0, cuando t tiende a infinito, y para una constante dada $C = C(f_0)$ se verifica

$$(4.3.6) \quad \|f(t) - \bar{f}_0\|_{H^1(S^1)}^2 \leq CM_1 e^{-M_2 t}.$$

Con

$$C = \left(\frac{1}{4\pi^2} + 1 \right) \exp \left(2 + 2 \max \left\{ |\log \bar{f}_0|, \left| \int_{S^1} \log f_0 \right| \right\} \right).$$

Demostración. (a) se prueba por un argumento de contradicción. Supongamos que $T(f_0) < \infty$. Por el Teorema 4.1.3, esto nos diría que la función límite $h = \lim_{t \nearrow T(f_0)} f(t)$ en C^1 tiene que hacerse cero en algún punto.

Por el Lema 4.3.1 aplicado a $\log f(t)$, para todo $t \in I$ tenemos

$$(4.3.7) \quad \left\| \log f(t) - \int_{S^1} \log f(t) dx \right\|_{L^\infty(S^1)} \leq \frac{1}{2\sqrt{3}} \|(\log f(t))_x\|_{L^2(S^1)} < 1.$$

Donde la última desigualdad es una consecuencia de la Proposición 4.3.2. Entonces,

$$(4.3.8) \quad \|\log f(t)\|_{L^\infty(S^1)} < 1 + \left| \int_{S^1} \log f(t) dx \right|.$$

El lado derecho de esta desigualdad se puede acotar usando la desigualdad de Jensen, aplicada a la función convexa $-\log r$,

$$(4.3.9) \quad -\log \int_{S^1} f(t) dx \leq - \int_{S^1} \log f(t) dx.$$

Por el Corolario 4.2.2,

$$(4.3.10) \quad \int_{S^1} \log f_0 dx \leq \int_{S^1} \log f(t) dx \leq \log \int_{S^1} f(t) dx = \log \int_{S^1} f_0 dx.$$

Entonces, $\|\log f(t)\|_{L^\infty(S^1)}$ está uniformemente acotado en $t \in I$, lo que contradice el hecho de que h se haga cero en algún punto de S^1 .

Para demostrar (b) aplicamos el Lema 4.3.1

$$\alpha_{xx}^2 \leq \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_{xxx}^2 dx,$$

y

$$(2\pi)^4 \int_{S^1} \alpha_x^2 dx \leq \int_{S^1} \alpha_{xxx}^2 dx.$$

Así, de (4.2.11) llegamos a la desigualdad

$$(4.3.11) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{S^1} \alpha_x^2 dx \leq -(2\pi)^4 \int_{S^1} \alpha_x^2 dx \left[1 - \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_x^2 dx \right].$$

La Proposición 4.3.2 garantiza que $1 - \frac{1}{12} \int_{S^1} \alpha_x^2 dx > 0$.

Si denotamos $y(t) = \int_{S^1} \alpha_x^2(t, x) dx$, podemos reescribir (4.3.11) como la desigualdad diferencial logística

$$(4.3.12) \quad \frac{dy}{dt} \leq -2(2\pi)^4 y \left(1 - \frac{1}{12} y \right),$$

Tomando $z = ye^{2(2\pi)^4 t}$, (4.3.12) se traduce en

$$(4.3.13) \quad \frac{dz}{dt} \leq \frac{2(2\pi)^4}{12} z^2 e^{-2(2\pi)^4 t}.$$

Integrando la desigualdad diferencial (4.3.13) y volviendo a las variables originales encontramos,

$$(4.3.14) \quad \begin{aligned} \int_{S^1} \alpha_x^2 dx &\leq e^{-2(2\pi)^4 t} \left(\frac{1}{\int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx} - \frac{1}{12} + \frac{e^{-2(2\pi)^4 t}}{12} \right)^{-1} \\ &= 12e^{-2(2\pi)^4 t} \left(\frac{12}{\int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx} - 1 + e^{-2(2\pi)^4 t} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Usando, una vez más, la acotación $\int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx < 12$, obtenemos,

$$(4.3.15) \quad \int_{S^1} \alpha_x^2 dx \leq 12e^{-2(2\pi)^4 t} \left(\frac{12}{\int_{S^1} \alpha_x^2(0) dx} - 1 \right)^{-1}.$$

Y la desigualdad (4.3.15) prueba (b).

Finalmente, para demostrar (c) hacemos uso, nuevamente, del Lema 4.3.1 para obtener

$$(4.3.16) \quad \int_{S^1} |f(t, x) - \bar{f}|^2 dx \leq \frac{1}{4\pi^2} \int_{S^1} f_x^2(t, x) dx.$$

A continuación,

$$(4.3.17) \quad \int_{S^1} f_x^2(t, x) dx = \int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} f^2(t, x) dx \leq \sup_{x \in [0, 1]} f^2(t, x) \left(\int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} dx \right).$$

Entonces

$$\|f(t) - \bar{f}\|_{H^1(S^1)} \leq \left(\frac{1}{4\pi^2} + 1 \right) \sup_{x \in [0, 1]} f^2(t, x) \left(\int_{S^1} \frac{f_x^2(t, x)}{f^2(t, x)} dx \right).$$

Debemos notar que $\sup_{x \in [0, 1]} f^2(t, x)$ está uniformemente acotado para todo $t \in I$, puesto que en la demostración de (a) probamos que $\|\log f(t)\|_{L^\infty(S^1)}$ está uniformemente acotado en tiempo. Si $|\log f(t, x)| \leq D$, $f^2(t, x) \leq e^{2D}$. Por (4.3.8) y (4.3.10), $|\log f(t, x)|$ puede ser acotado por $D = 1 + \max\{|\log \bar{f}_0|, |\int_{S^1} \log f_0|\}$. Lo que prueba (4.3.6), puesto que podemos definir $C = (\frac{1}{4\pi^2} + 1)e^{2D}$. Para concluir, sólo debemos recordar que $\bar{f} = \bar{f}_0$ y, como consecuencia de (b), $\|f(t) - \bar{f}\|_{H^1(S^1)}^2$ tiende exponencialmente a 0 cuando $t \rightarrow \infty$. \square

NOTA 4.3.4. Las condiciones para el valor inicial, $f_0 \in H_+^1(S^1)$ y (H) se pueden reemplazar por $f_0 \in H^1(S^1)$, $f_0 \neq 0$, $f_0 \geq 0$ y (H), puesto que estas hipótesis implican $f_0 > 0$. En realidad, si $f_0 \neq 0$ podemos considerar $z \in [0, 1]$ tal que $f_0(z) \neq 0$. Entonces, para todo $x \in [0, 1]$,

$$|\log f_0(x) - \log f_0(z)| = \left| \int_z^x (\log f_0)_y dy \right| \leq \int_z^x |(\log f_0)_y| dy \leq \int_0^1 |(\log f_0)_y| dy.$$

Usando la desigualdad de Hölder obtenemos,

$$\int_0^1 |(\log f_0)_y| dy \leq \left(\int_0^1 |(\log f_0)_y|^2 dy \right)^{1/2}.$$

Como suponemos (H),

$$|\log f_0(x) - \log f_0(z)| \leq 2\sqrt{3},$$

por tanto,

$$|\log f_0(x)| \leq 2\sqrt{3} + |\log f_0(z)|.$$

De esta manera, como $f_0(z) \neq 0$, $\log f_0$ está acotado, lo que prueba que $f_0 > 0$.

NOTA 4.3.5. La condición

$$(4.3.18) \quad \|f_{0,x}\|_{L^2} < \sqrt{3}\bar{f}_0$$

implica (H). Esto se sigue fácilmente del Lema 4.3.1, puesto que,

$$f_0 > \bar{f}_0 - \|f_0 - \bar{f}_0\|_{L^\infty} \geq \bar{f}_0 - \frac{1}{2\sqrt{3}}\|f_{0,x}\|_{L^2} > \frac{\bar{f}_0}{2}.$$

Así, obtenemos

$$\int_{S^1} \frac{f_{0,x}^2}{f_0^2} dx < \frac{4}{\bar{f}_0^2} \int_{S^1} f_{0,x}^2 dx = \frac{4}{\bar{f}_0^2} \|f_{0,x}\|_{L^2}^2 < 12.$$

Queremos hacer notar que la condición (4.3.18) es más fuerte que la condición (ii) dada en el Teorema 5.2 en [1],

$$(4.3.19) \quad \|f_{0,x}\|_{L^2} < \frac{4\bar{f}_0}{\sqrt{3}},$$

que implica la existencia global. Con esta nota lo que queremos señalar es que para nuestro teorema necesitamos ponernos en un marco un poco más restrictivo, es decir, no probamos convergencia exponencial hacia el equilibrio en todo el conjunto de valores iniciales, para los cuales está garantizada la existencia global.

Este teorema prueba que para $1 < p \leq 2$, $\|f\|_{L^p(S^1)}$ converge exponencialmente a $\|\bar{f}_0\|_{L^p(S^1)}$. Pero para ello tenemos que suponer que el dato inicial está "suficientemente próximo" al estado estacionario.

En lo que sigue de este capítulo, probaremos que para $1 < p \leq 4/3$ ese resultado es cierto, sin necesidad de suponer la hipótesis (H), bastará garantizar la existencia global, que se tiene asegurada bajo alguna de las condiciones dadas en [1]. Desigualdades clásicas de Csiszar-Kullback [10] implicarán convergencia exponencial en L^1 hacia la solución estacionaria con velocidad explícita.

TEOREMA 4.3.6. Sea f una solución global del problema de valores iniciales (4.1.1)-(4.1.2), tal que para algún $1 \leq p \leq 4/3$, $\|f_0\|_{L^p(S^1)}$ es acotado. Entonces

$$(4.3.20) \quad \int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \leq \left[\int_{S^1} f_0^p dx - \bar{f}_0^p \right] e^{-Kt},$$

donde

$$K = \frac{64\pi^4(p-1)}{p}.$$

Demostración. Para la prueba de este resultado se sigue una filosofía similar a la desarrollada recientemente en [10] para estudiar el comportamiento asintótico de la ecuación de películas finas.

Concluiremos el último capítulo de la primera parte de esta memoria, volviendo a usar el método de disipación de entropía. Recordemos que en la sección anterior, habíamos estudiado el decaimiento en tiempo de $\int_{S^1} f^p dx$, (4.2.4). Allí usamos (4.2.4) sólo para concluir que $\int_{S^1} f^p dx$ es no creciente si $1 \leq p \leq \frac{3}{2}$. Es decir, el funcional $\int_{S^1} f^p dx$, para ese rango de p , es un funcional de entropía. De este modo, el estudio en detalle de la producción de entropía (el valor absoluto del término de la derecha en (4.2.4)) nos proporcionará información más precisa sobre el decaimiento del funcional. La idea es probar que la producción de entropía,

$$A_p(\alpha) = p(p-1) \left[\int_{S^1} \alpha_{xx}^2 e^{p\alpha} dx + \frac{p(1-p)}{3} \int_{S^1} \alpha_x^4 e^{p\alpha} dx \right]$$

para alguna constante explícita c verifica,

$$\int_{S^1} \left[\left(f^{\frac{p}{2}} \right)_{xx} \right]^2 dx \leq c A_p(\alpha).$$

Finalmente, diversas desigualdades de Poincare nos llevarán a (4.3.20).

Un cálculo directo prueba que, que para todo $p > 0$, una función f regular en $C^2(S^1)$, verifica:

$$(4.3.21) \quad \int_{S^1} \left[\left(f^{\frac{p}{2}} \right)_{xx} \right]^2 dx = \frac{p^2}{4} \int_{S^1} e^{p\alpha} \left(\alpha_{xx}^2 - \frac{p^2}{12} \alpha_x^4 \right) dx.$$

Efectivamente, puesto que

$$\int_{S^1} \left[\left(f^{\frac{p}{2}} \right)_{xx} \right]^2 dx = \int_{S^1} \left[\left(e^{\frac{p\alpha}{2}} \right)_{xx} \right]^2 dx,$$

tenemos,

$$(4.3.22) \quad \int_{S^1} \left[\left(f^{\frac{p}{2}} \right)_{xx} \right]^2 dx = \int_{S^1} \left[\left(\frac{p}{2} \alpha_x e^{\frac{p\alpha}{2}} \right)_x \right]^2 dx = \frac{p^2}{4} \int_{S^1} \left[\alpha_{xx} e^{\frac{p\alpha}{2}} + \frac{p}{2} \alpha_x^2 e^{\frac{p\alpha}{2}} \right]^2 dx =$$

$$\frac{p^2}{4} \int_{S^1} e^{p\alpha} \left[\alpha_{xx}^2 + \frac{p^2}{4} \alpha_x^4 + p \alpha_{xx} \alpha_x^2 \right] dx = \frac{p^2}{4} \int_{S^1} e^{p\alpha} \left(\alpha_{xx}^2 - \frac{p^2}{12} \alpha_x^4 \right) dx,$$

donde en el último paso usamos la igualdad

$$p \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^2 \alpha_{xx} dx = \frac{p}{3} \int_{S^1} e^{p\alpha} (\alpha_x^3)_x dx = -\frac{p^2}{3} \int_{S^1} e^{p\alpha} \alpha_x^4 dx.$$

Ahora es inmediato comparar la fórmula (4.3.21) con la producción de entropía. Afirmamos, en realidad, para $1 < p \leq \frac{4}{3}$

$$(4.3.23) \quad A_p(\alpha) \geq \frac{4(p-1)}{p} \int_{S^1} [(f^{\frac{p}{2}})_{xx}]^2 dx.$$

Por (4.2.4) y (4.3.21), probar (4.3.23) es equivalente a demostrar

$$p(p-1) \left[\int_{S^1} \alpha_{xx}^2 e^{p\alpha} dx + \frac{p(1-p)}{3} \int_{S^1} \alpha_x^4 e^{p\alpha} dx \right] \geq \frac{4(p-1)p^2}{p} \int_{S^1} e^{p\alpha} \left(\alpha_{xx}^2 - \frac{p^2}{12} \alpha_x^4 \right) dx,$$

o, simplificando la constante,

$$\int_{S^1} \alpha_{xx}^2 e^{p\alpha} dx + \frac{p(1-p)}{3} \int_{S^1} \alpha_x^4 e^{p\alpha} dx \geq \int_{S^1} e^{p\alpha} \left(\alpha_{xx}^2 - \frac{p^2}{12} \alpha_x^4 \right) dx.$$

Esto, por supuesto, es cierto cuando,

$$-(p-1) \geq -\frac{p}{4},$$

y entonces $1 \geq 3p/4$ o equivalentemente $\frac{4}{3} \geq p$.

Para acabar la demostración aplicamos las siguiente desigualdades de Poincaré, que nos permitirán relacionar $\int_{S^1} [(f^{\frac{p}{2}})_{xx}]^2 dx$ con $\int_{S^1} f^p dx$, (ver Lema 4.3.1):

$$(4.3.24) \quad \int_{S^1} [(f^{\frac{p}{2}})_x]^2 dx \leq \frac{1}{4\pi^2} \int_{S^1} [(f^{\frac{p}{2}})_{xx}]^2 dx$$

$$(4.3.25) \quad \int_{S^1} \left[f^{\frac{p}{2}} - \int_{S^1} f^{\frac{p}{2}} dx \right]^2 dx \leq \frac{1}{4\pi^2} \int_{S^1} [(f^{\frac{p}{2}})_x]^2 dx.$$

Entonces de (4.3.23) se obtiene

$$(4.3.26) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p dx \leq -\frac{64\pi^4(p-1)}{p} \int_{S^1} \left[f^{\frac{p}{2}} - \int_{S^1} f^{\frac{p}{2}} dx \right]^2 dx$$

o equivalentemente

$$(4.3.27) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p dx \leq -\frac{64\pi^4(p-1)}{p} \left[\int_{S^1} f^p - \left(\int_{S^1} f^{\frac{p}{2}} dx \right)^2 \right].$$

Puesto que $1 \leq p \leq 4/3$, $p/2 < 1$. Por la desigualdad de Hölder tenemos

$$\int_{S^1} f^{\frac{p}{2}} dx \leq \left(\int_{S^1} f^{\frac{p}{2 \cdot \frac{p}{2}}} dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{S^1} 1^{\frac{2-p}{2}} dx \right)^{\frac{2-p}{2}} = \bar{f}_0^{p/2}$$

y

$$\bar{f}_0^p = \left(\int_{S^1} f dx \right)^p \leq \left(\int_{S^1} f^p dx \right) \left(\int_{S^1} 1^{p'} dx \right)^{\frac{p}{p'}} = \int_{S^1} f^p dx.$$

Por tanto,

$$(4.3.28) \quad \frac{d}{dt} \int_{S^1} f^p dx \leq -\frac{64\pi^4(p-1)}{p} \left[\int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \right] \leq 0.$$

La desigualdad (4.3.28) se puede escribir como

$$(4.3.29) \quad \frac{d}{dt} \left(\int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \right) \leq -\frac{64\pi^4(p-1)}{p} \left[\int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \right],$$

lo que implica

$$(4.3.30) \quad \int_{S^1} f^p dx - \bar{f}_0^p \leq \left[\int_{S^1} f_0^p dx - \bar{f}_0^p \right] e^{-Kt},$$

donde

$$K = \frac{64\pi^4(p-1)}{p}.$$

□

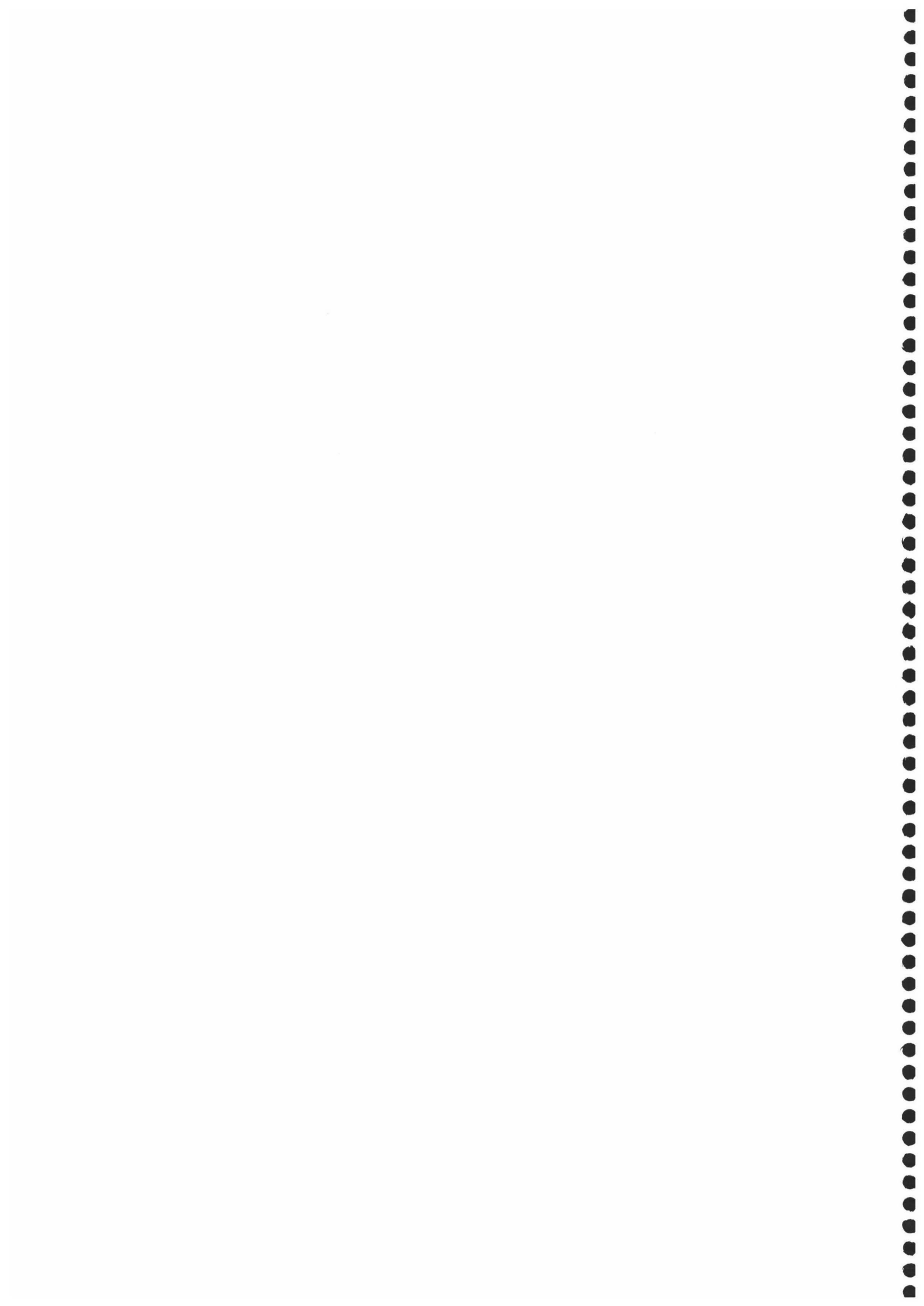
NOTA 4.3.7. El Teorema 4.3.3 es cierto para otras condiciones frontera, como pueden ser condiciones frontera de flujo, que son condiciones que garantizan la conservación de la masa ($\int_{S^1} f_t dx = 0$),

$$f_x(t, 0) = f_x(t, 1) = f_{xxx}(t, 0) = f_{xxx}(t, 1) = 0.$$

En este caso, las condiciones son directamente trasladadas a α

$$\alpha_x(t, 0) = \alpha_x(t, 1) = \alpha_{xxx}(t, 0) = \alpha_{xxx}(t, 1) = 0.$$

Sin embargo el Teorema 4.3.6 no se puede garantizar con esta demostración.



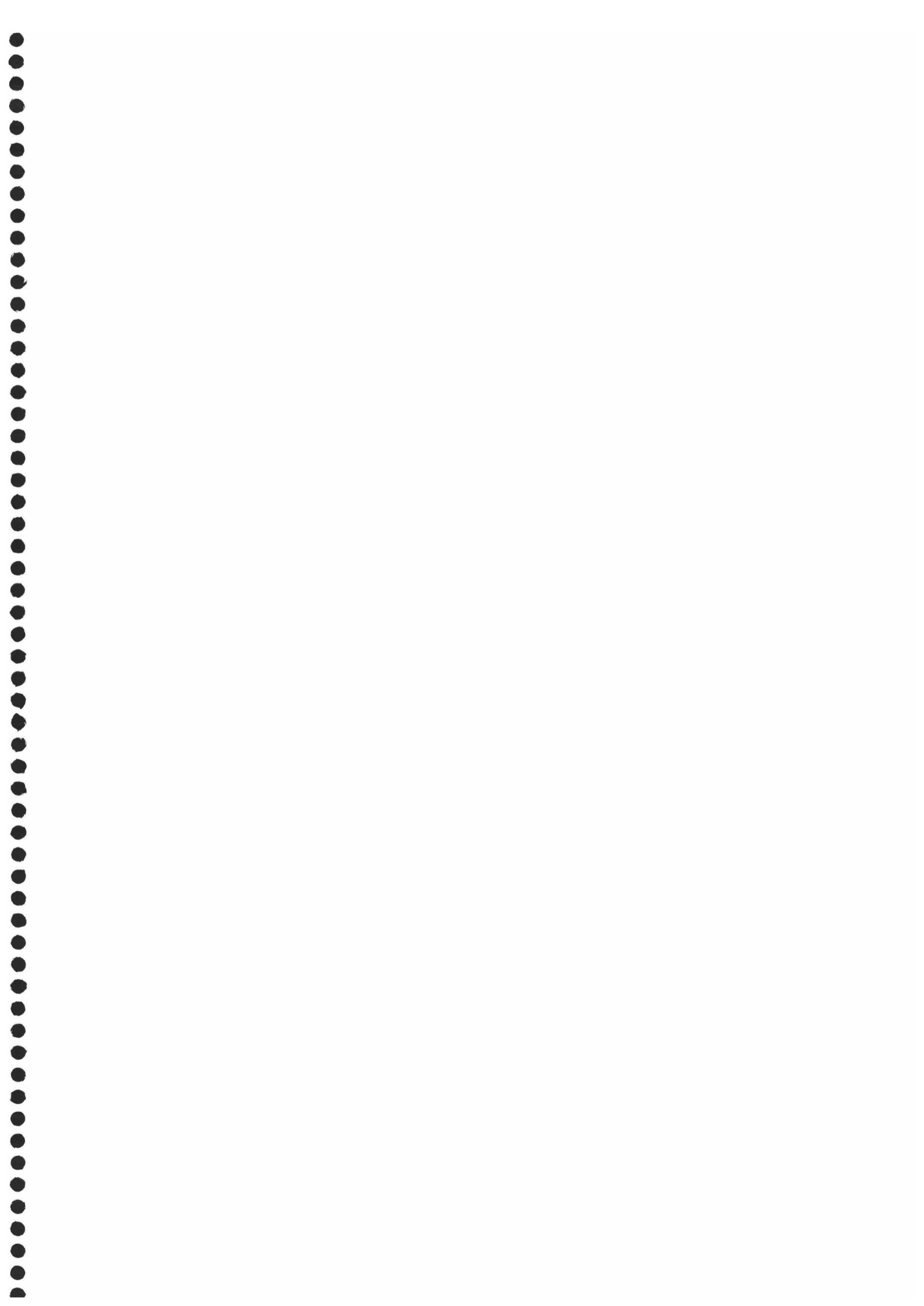
Bibliografía

- [1] P. M. BLEHER, J. L. LEBOWITZ, E. R. SPEER, *Existence and positivity of solutions of a fourth order nonlinear PDE describing interface fluctuations*, *Comm. Pure Appl. Math.*, 47, (1994), pp. 923–942.
- [2] J. A. CARRILLO, A. JÜNGEL, P. MARKOWICH, G. TOSCANI, A. UNTERREITER, *Entropy dissipation methods for degenerate parabolic problems and generalized Sobolev inequalities*, *Monatsh. Math.*, 133,(2001), pp. 1–82 .
- [3] J. A. CARRILLO, A. JÜNGEL, S. TANG, *Positive entropy schemes for a nonlinear fourth-order parabolic equation*, *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 1, (2003), pp. 1-20.
- [4] J. A. CARRILLO, G. TOSCANI, *Asymptotic L^1 -decay of solutions of the porous medium equation to self-similarity*, *Indiana Univ. Math. J.*, 49, (2000) pp. 113-141 .
- [5] J. A. CARRILLO, G. TOSCANI, *Long-time asymptotics for strong solutions of the thin film equation*, *Comm. Math. Phys.*, 225, (2002), pp. 551-571.
- [6] B. DERRIDA, J. L. LEBOWITZ, E. SPEER, H. SPOHN, *Fluctuations of a stationary nonequilibrium interface*, *Phys. Rev. Lett.*, 67, (1991), pp. 165–168.
- [7] A. JÜNGEL, R. PINNAU, *Global non-negative solutions of a nonlinear fourth-order parabolic equation for quantum systems*, *SIAM J. Math. Anal.*, 32, (2000), pp.760–777 .
- [8] A. JÜNGEL, R. PINNAU, *A positivity preserving numerical scheme for a nonlinear fourth-order parabolic system*, *SIAM J. Numer. Anal.*, 39,(2001), pp. 385–406 .
- [9] A. JÜNGEL, G. TOSCANI, *Decay rates of solutions to a nonlinear fourth-order parabolic equation*, para aparecer en *Z. Angew. Math. Phys.*, (2002).
- [10] J. L. LOPEZ, J. SOLER, G. TOSCANI, *Time rescaling and asymptotic behavior of some fourth order degenerate diffusion equations*, *Comput. Math. Appl.*, 43, (2002), pp. 721-736.



Parte 2

Simulación numérica



CAPÍTULO 5

La ecuación de Boltzmann en la teoría de semiconductores

Este capítulo es el primero, de los dos, que consideraremos previos a los que serán los capítulos propiamente de esta segunda parte de nuestro trabajo. El objetivo de esta segunda parte es la simulación numérica de ecuaciones cinéticas originadas en la teoría de semiconductores. Ésta es la razón, por la que hemos considerado interesante, introducir este capítulo en el que damos un breve repaso de las propiedades básicas de la teoría de semiconductores, centrándonos en el análisis de la teoría de bandas y de la dinámica de los electrones. Mientras que la segunda parte de este capítulo, la empleamos en el estudio de la ecuación que modeliza el comportamiento de los electrones en un semiconductor: *la ecuación de Boltzmann*, para más detalles véase [10, 14].

1. Los electrones en un cristal semiconductor

1.1. Teoría de bandas. En un cristal semiconductor los electrones se mueven en presencia de un potencial periódico $V(x)$, originado por el potencial del núcleo del átomo y los propios electrones. $V(x)$ es periódico con el mismo período que la red cristalina:

$$V(x + d_1 \mathbf{a} + d_2 \mathbf{b} + d_3 \mathbf{c}) = V(x),$$

donde \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} son los vectores de la base del retículo, L y d_1 , d_2 y d_3 son enteros. Los posibles estados del electrón para un potencial periódico $V(x)$, Ψ y las energías \mathcal{E} en la red cristalina se relacionan mediante el problema de valores propios para la ecuación de Schrödinger

$$(5.1.1) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi(x) = \mathcal{E} \Psi(x),$$

donde \hbar es la constante de Planck dividida por 2π , m es la masa del electrón y $x = (x_1, x_2, x_3)$. Esta ecuación fue tratada por primera vez por Bloch y las soluciones para un potencial perfectamente periódico tienen la siguiente forma:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x) = u_{\mathbf{k},j}(x) e^{i\mathbf{k}\cdot x}.$$

$u_{\mathbf{k},j}(x)$ es periódica en x con el mismo período que $V(x)$

$$u_{\mathbf{k},j}(x + d_1 \mathbf{a} + d_2 \mathbf{b} + d_3 \mathbf{c}) = u_{\mathbf{k},j}(x),$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda del electrón y j es el índice de bandas. El autovalor de energía $\mathcal{E}_{\mathbf{k},j}$ tiene la misma periodicidad que el retículo recíproco:

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{G},j} = \mathcal{E}_{\mathbf{k},j}$$

para

$$\mathbf{G} = l_1 \mathbf{a}^* + l_2 \mathbf{b}^* + l_3 \mathbf{c}^*$$

donde l_1, l_2 y l_3 son enteros y $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*$ y \mathbf{c}^* son los vectores de la base dual de $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$, salvo normalización

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = 2\pi \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = 0.$$

Un subconjunto conexo $Z \subseteq \mathbb{R}^3$ se dice que es una *celda primitiva* del retículo L , si satisface:

- (i) El volumen de Z es igual al volumen del paralelepípedo generado por los vectores de la base del retículo L , es decir, $|\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})|$.
- (ii) \mathbb{R}^3 se puede cubrir con la unión de traslaciones de Z con vectores del retículo: $\mathbb{R}^3 = \cup_{\mathbf{x} \in L} \mathbf{T}_{\mathbf{x}} Z$.

Análogamente podemos definir una celda primitiva del retículo \hat{L} . Se define (la primera) *zona de Brillouin* B , como la celda primitiva del retículo \hat{L} , formada por los puntos más próximos al origen, de dicho retículo.

Por tanto, no se pierde información si nos reducimos a vectores de ondas en la zona de Brillouin B , puesto que:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{G},j} &= \mathcal{E}_{\mathbf{k},j}, & \mathbf{k} \in B, & \mathbf{G} \in \hat{L} \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G},j} &= \Psi_{\mathbf{k},j}, & \mathbf{k} \in B, & \mathbf{G} \in \hat{L} \end{aligned}$$

para todo entero j .

La función $\mathcal{E}_j = \mathcal{E}_{\mathbf{k},j}$ es continua en B y conocida como la *j-ésima banda de energía* del cristal. Entonces, la *velocidad media* del electrón es

$$v_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k},j}.$$

En la práctica el potencial del retículo, V no se conoce exactamente, por lo que deben considerarse aproximaciones del diagrama de banda para cada material dado. Para los materiales más usuales, Silicio (Si) y Arsenuro de Galio (GaAs), la estructura de bandas es conocida gracias a los experimentos y el estudio numérico de las soluciones de la ecuación de onda (ver [1, 6, 7]). Por tanto, supondremos que las bandas de energía, y consecuentemente las velocidades medias, son funciones conocidas de \mathbf{k} . Existe una región en la que no se encuentran estados de energía permitidos, es decir, existe una región prohibida de energías, esta región se conoce como *hueco de energía* (*energy gap*). Los estados electrónicos son permitidos por encima y por debajo de este *hueco de energía*, donde las bandas superiores se

denominan *bandas de conducción*, mientras que las inferiores son conocidas como *bandas de valencia*. La energía que separa el mínimo de las bandas de conducción y el máximo de las bandas de valencia se denomina *banda de hueco de energía* (*band gap energy* E_g). Los semiconductores en los que el mínimo de la banda de conducción mas baja y el máximo de la banda de valencia más alta, están en el mismo punto en el k-espacio, se denominan *directos*, en caso contrario el semiconductor se dice *indirecto*. Nuestros materiales usuales: Si y GaAs, son ejemplos de semiconductores indirectos y directos, respectivamente. Destacamos en esta dirección, un propiedad adicional de GaAs, que será utilizada ampliamente en el Capítulo 8: en GaAs se alcanza el mínimo en la banda de conducción mínima en diversos puntos, no entramos en más detalles, porque los necesarios para la comprensión del Capítulo 8 serán dados allí, y en cualquier caso, referimos a [14], para un desarrollo más extenso.

Hasta este punto, hemos utilizado el término *semiconductor* sin dar una definición del mismo. Atendiendo a las dimensiones de la banda de energía prohibida los materiales se pueden dividir en: *aislantes* y *semiconductores*. Cuando la banda de energías prohibidas es grande comparada con las energías térmicas (del orden de varios electronvoltios) la excitación a la siguiente banda de energía no se podrá producir por lo que la corriente no fluirá. Nos encontramos, por tanto, con un material aislante. Mientras que si, la banda prohibida no es muy grande (igual o inferior a un electronvoltio) algunos electrones pueden ser excitados a través de la banda prohibida a temperatura ambiente de modo que puede fluir una pequeña corriente (los electrones pasan de la banda de valencia a la banda de conducción). El aumento de la temperatura conlleva un incremento de la excitación electrónica y por consiguiente el tránsito de electrones. Este comportamiento es típico de un semiconductor.

El modelo de banda viene determinado por los *parámetros de banda* que son dados por los niveles de energía de los extremos de la banda y las relaciones entre la energía del electrón \mathcal{E}_k y el momento del cristal k (relaciones $\mathcal{E} - k$). Cerca del mínimo la banda de conducción normalmente es aproximada por una función cuadrática de k (el mínimo de la banda se alcanza en $k = 0$)

$$(5.1.2) \quad \mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m^*}.$$

Así la inversa de la *masa efectiva* es

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_k}{\partial k^2}$$

y $\hbar k$ es el *momento del cristal*. Los electrones se comportan como electrones en un espacio libre, excepto por el cambio en la masa. \mathcal{E}_k mide la *energía cinética* del electrón desde la banda mínima.

Para campos aplicados altos, la aproximación parabólica no recoge bien el comportamiento de la energía de los electrones. En este caso la relación de la dispersión de Kane se ajusta mejor

$$(5.1.3) \quad \mathcal{E}_k(1 + \alpha\mathcal{E}_k) = \frac{\hbar^2|k|^2}{2m^*}$$

donde α es el *factor de no-parabolicidad* y viene dado por

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m}\right)^2,$$

Esta relación nos muestra que el factor de no-parabolicidad es aproximadamente igual a la inversa del hueco de energía, $1/E_g$.

1.2. Dinámica de los electrones. Para describir el movimiento de los electrones en un cristal suponemos que éstos se comportan como electrones en un espacio libre, salvo por el cambio de masa. De este modo la descripción de la dinámica de los electrones viene determinada por la Mecánica Clásica. Esta suposición no supone una restricción importante siempre que la energía potencial de los electrones varíe lentamente en comparación con el potencial del cristal, de modo que los efectos de la Mecánica Cuántica pueden ignorarse.

Siguiendo la dinámica clásica, la energía total (Hamiltoniano), es decir, energía cinética más energía potencial, $H = \mathcal{E}_k + U$, rige el movimiento de un electrón. Las ecuaciones del movimiento, se traducen en:

$$(5.1.4) \quad \frac{dx}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k H.$$

$$(5.1.5) \quad \frac{dk}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \nabla_x H$$

2. Modelos cinéticos de transporte para semiconductores. La ecuación de Boltzmann

Partiendo de las ecuaciones del movimiento antes mostradas (5.1.5)-(5.1.4) obtendremos la ecuación que modeliza el comportamiento de los electrones en un semiconductor: *la ecuación de Boltzmann*. Un paso previo para alcanzar este fin, será la obtención de la ecuación de Liouville, que se ocupará de la descripción del transporte de los electrones. Pero el movimiento de los electrones en el cristal de un retículo, no viene marcado sólo por el transporte, sino que deben tenerse en cuenta también, las colisiones que éstos presentan con el propio cristal. Así, la

ecuación de Liouville deberá ser complementada con un factor más, que rija estas colisiones.

2.1. La ecuación semi-clásica de Liouville. Supongamos que las partículas no presentan "interacciones" con el ambiente, o si se prefiere, que se mueven en el vacío. Como hemos dicho en la sección anterior, en un semiconductor los iones del retículo del cristal inducen un potencial periódico, que afecta sustancialmente al movimiento de los electrones. Puesto que el periodo del potencial del retículo es muy pequeño (del orden de magnitud de 10^{-8} cm), es necesario hacer uso de la Mecánica Cuántica para modelar la influencia de éste en el transporte de los electrones. Por ello, la ecuación de Liouville que tiene en cuenta los efectos cuánticos del retículo del cristal se conoce con el nombre de *ecuación semi-clásica de Liouville* o *ecuación semi-clásica del transporte*.

La ecuación de Liouville o del transporte

$$(5.2.1) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \frac{e}{m} E \cdot \nabla_v f = 0$$

describe el movimiento de un electrón en el vacío sometido a la acción de un campo eléctrico, E . $f = f(t, x, v)$ es la densidad de probabilidad de encontrar el electrón en la posición $x \in \mathbb{R}^3$, con velocidad $v \in \mathbb{R}^3$ en el instante t . Para la deducción de esta ecuación se supone que la segunda ley de Newton rige el movimiento:

$$\mathcal{F} = -eE \quad \mathcal{F} = m\dot{v}.$$

donde \mathcal{F} es la fuerza electrostática, e es la carga elemental de un electrón y por supuesto $\dot{x} = v$. Se determina, así, la trayectoria de los electrones en el espacio posición-velocidad. Si además suponemos que se verifica:

$$x(0) = x_0 \quad v(0) = v_0,$$

tenemos un problema de valores iniciales para la trayectoria $T(t; x_0, v_0) = (x(t), v(t))$ que pasa por el punto (x_0, v_0) en el instante inicial, $t = 0$. Suponiendo que la densidad de probabilidad no cambia a lo largo de la característica T , se deduce la ecuación clásica de Liouville, ya que, f viene determinada por su valor en el instante inicial, $t = 0$,

$$f(t, T(t; x, v)) = f(0, x, v) \quad \forall t, x, v.$$

Y diferenciando esta expresión respecto de t obtenemos la expresión (5.2.1).

Cuando tenemos en cuenta la Mecánica Cuántica *la ecuación semi-clásica de Liouville* de un conjunto de M electrones se lee:

$$(5.2.2) \quad \partial_t f + \sum_{i=1}^M v(k_i) \cdot \nabla_{x_i} f + \frac{1}{\hbar} \mathcal{F} \cdot \nabla_k f = 0,$$

donde $x \in \mathbb{R}^{3M}$ (abusamos de la notación y volvemos a utilizar la variable x , pero en esta ocasión el espacio de definición es de dimensión $3M$), $k_i \in B$ para $i = 1, \dots, M$ y $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_M) = -eE$. Esta ecuación se deduce de las ecuaciones del movimiento (5.1.5)-(5.1.4), siguiendo una filosofía similar a la esbozada para la versión clásica.

2.2. La ecuación de Boltzmann. En la sección anterior hemos presentado la ecuación que rige el movimiento de un conjunto de M electrones. A esta ecuación se le pueden objetar dos dificultades: Por un lado, que el modelado del campo de fuerzas debe tener en cuenta tanto interacciones "a distancias cortas" como "a distancias largas", algo que no es posible. Y por otra parte, la objeción, quizá más importante, es que la dimensión del espacio de fases de un conjunto de M partículas es $6M$, lo cual supone una gran dificultad en el campo de la simulación numérica.

Para conseguir una reducción en la dimensión de la ecuación de Liouville se procede usualmente de la siguiente manera, [10]: primero se deriva un sistema de ecuaciones para las densidades de posición-velocidad de subconjuntos de d electrones, con d variando entre 1 y M . Suponiendo interacciones débiles entre cada dos partículas e integrando la ecuación de Liouville con respecto a las coordenadas de posición y velocidad de $M-d$ partículas para $d = 1, \dots, M$, se obtiene el llamado *sistema jerarquía BBGKY* (de Bogoliubov [2], Born y Green [3], Kirkwood [5] y Yvon [15]). El paso siguiente es construir una función simple, tomando el límite formal $M \rightarrow \infty$, que depende de una variable de posición con tres coordenadas y de una variable de velocidad con otras tres coordenadas. La construcción se basa en la suposición de que cada conjunto pequeño de electrones se mueve de modo independiente. De este modo, la solución obtenida representa la densidad del electrón en el espacio de fase $\mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_v^3$. La solución que se obtiene es la solución de la denominada *ecuación de Vlasov*. Esta ecuación puede ser considerada como la ecuación de Liouville para una partícula junto con una relación de campo (medio) autoconsistente. Es una ecuación macroscópica que describe el movimiento de un conjunto de partículas que tienen interacciones débiles. Pero cuando el transporte de electrones se produce en un semiconductor en una escala de tiempo suficientemente grande, el movimiento de estas partículas se ve fuertemente influenciado por fuerzas de rango corto, las denominados *scattering* o *colisiones de las partículas*. Donde estas colisiones son más importante con el propio cristal del retículo que entre las partículas. Es por ello que la ecuación de Vlasov no es buena para el modelado del movimiento, un factor nuevo debe tenerse en cuenta, el factor de colisión. La ecuación que surge con este término adicional es la denominada *ecuación de Boltzmann* para semiconductores. La ecuación de Boltzmann fue derivada por L. Boltzmann en 1872 como modelo de la dinámica de gases.

2.2.1. *La ecuación de Vlasov.* Consideremos un conjunto de M electrones con igual masa y supongamos las siguientes hipótesis:

1. El contacto de los electrones con el cristal del retículo del semiconductor no influye en el movimiento de la nube de electrones.
2. El campo de fuerza \mathcal{F} que actúa sobre el conjunto no depende del vector de velocidad.
3. El movimiento se produce por la actuación de un campo eléctrico externo y por las fuerza de interacción entre dos partículas.

Siguiendo “la filosofía” que antes hemos enunciado se deriva la ecuación de Vlasov, que reduce el espacio de fases de dimensión $6M$ a dimensión 6:

$$(5.2.3) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \frac{e}{m^*} E_{ef} \cdot \nabla_v f = 0$$

con $x \in \mathbb{R}^3$ (volvemos a abusar de la notación y en esta ocasión el espacio es de dimensión 3), $v \in \mathbb{R}^3$, $t > 0$,

$$E_{ef}(t, x) = E_{ext}(t, x) + \int_{\mathbb{R}^3} \rho(t, x_*) E_{int}(x, x_*) dx_*,$$

donde F_{ext} es campo eléctrico externo y F_{int} es el campo que se produce por la interacción de dos partículas.

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv$$

es la densidad de partículas en la posición x en el instante t .

Puesto que $f(t, x, v)$ se interpreta como la probabilidad de que una partícula se encuentre en la posición x con velocidad v en el instante t , es natural esperar que

$$0 \leq f(t, x, v) \leq 1, \quad (t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3.$$

Esta restricción natural se demuestra fácilmente como una consecuencia del movimiento de las partículas a través de las características, si se supone cierta para el dato inicial, es decir,

$$0 \leq f(0, x, v) \leq 1, \quad (x, v) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$$

esta propiedad se mantiene en todo instante t y se satisface el principio de Pauli puesto que una función de distribución mayor que 1 se interpreta como una ocupación múltiple del estado (x, v) en el instante t . La ecuación de Vlasov es no lineal y con una no linealidad de tipo cuadrático.

Partiendo de la ecuación de Liouville semi-clásica se deriva la *ecuación de Vlasov semi-clásica*:

$$(5.2.4) \quad \partial_t f + v(k) \cdot \nabla_x f - \frac{e}{\hbar} E_{ef} \cdot \nabla_k f = 0$$

con $x \in \mathbb{R}^3$, $k \in B$, $t > 0$,

$$E_{ef}(t, x) = E_{ext}(t, x) + \int_{\mathbb{R}^3} \rho(t, x_*) E_{int}(x, x_*) dx_*,$$

donde la densidad de partículas es

$$\rho(t, x) = \int_B f(t, x, k) dk.$$

Se suponen condiciones de contorno de tipo periódicas en k :

$$(5.2.5) \quad f(t, x, k) = f(t, x, -k), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad k \in \partial B, \quad t > 0.$$

2.2.2. *El efecto de las colisiones: La ecuación de Boltzmann.* El "déficit" que presenta la ecuación de Vlasov; despreciar las interacciones entre las partículas y con el propio cristal, será "subsanoado" por la ecuación de Boltzmann. A la ecuación de Vlasov se le añadirá un término nuevo en, $Q(f)$, operador de colisión. Así la ecuación de Boltzmann se lee como sigue:

$$(5.2.6) \quad \partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \frac{e}{m^*} E_{ef} \cdot \nabla_v f = Q(f),$$

con

$$(5.2.7) \quad Q(f)(t, x, v) = \int_{\mathbb{R}^3} [s(x, v', v) f'(1 - f) - s(x, v, v') f(1 - f')] dv',$$

donde denotamos $f = f(t, x, v)$, $f' = f(t, x, v')$ y s es la probabilidad de scattering, es decir, $s(x, v', v) dv'$ es la probabilidad de transición de un electrón con posición x que pasa de tener velocidad v' en el elemento de volumen dv' a tener velocidad v . $Q(f)$ representa la suma de todas las partículas que tras la colisión pasan del estado (x, v') al estado (x, v) en el instante t menos la suma de todas las que pasan del estado (x, v) a (x, v') en el instante t .

Análogamente la ecuación de Boltzmann semi-clásica se escribe como:

$$(5.2.8) \quad \partial_t f + v(k) \cdot \nabla_x f - \frac{e}{\hbar} E_{ef} \cdot \nabla_k f = Q(f)$$

con $x \in \mathbb{R}^3$, $k \in B$, $t > 0$, con

$$(5.2.9) \quad Q(f)(t, x, k) = \int_{\mathbb{R}^3} [s(x, k', k) f'(1 - f) - s(x, k, k') f(1 - f')] dk',$$

donde denotamos $f = f(t, x, k)$, $f' = f(t, x, k')$. Se consideran las condiciones frontera (5.2.5).

Para resultados sobre existencia y propiedades de la solución de la ecuación de Boltzmann en teoría de semiconductores referimos a [13, 11, 12, 8, 9].

2.3. La ecuación de Poisson. La fuerza de Coulomb es la fuerza de largo alcance, más importante, que actúa entre dos electrones:

$$E_{int}(x, y) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{x - y}{|x - y|^3}$$

para $x, y \in \mathbb{R}^3$, $x \neq y$, ϵ_0 es la constante de permitividad del medio. Entonces, recordando la expresión del campo de fuerzas efectivo, descubrimos que el término correspondiente al campo originado por la interacción de Coulomb, se puede escribir como

$$-\partial_x V_0 * \rho \quad \text{con} \quad V_0(z) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0|z|},$$

que es una aproximación media de campo y constituye la ecuación de Poisson,

$$\epsilon_0 \Delta V_0 = e \rho.$$

Si se supone también que el campo externo está generado por iones de carga $+e$, presentes en el material, entonces, nuevamente la ley de Coulomb nos dice que

$$-\epsilon_0 \Delta V_{ext} = e C.$$

Donde $C(t, x)$ es la densidad de los iones del material. Entonces obtenemos, uniendo los dos campos, la ecuación de Poisson

$$-\epsilon_0 \Delta V_{ef} = e(C - \rho)$$

o equivalentemente

$$\epsilon_0 \Delta V_{ef} = e(\rho - C).$$

3. Modelos aproximados

La ecuación de Boltzmann se desarrolla en un espacio de dimensión 7. Como hemos visto hemos conseguido una reducción sustancial en la dimensión del espacio en consideración, hemos pasado de dimensión $6M + 1$ a una muy "sugere" dimensión 7. Pero desafortunadamente esta dimensión es aún demasiado elevada si queremos dar resultados numéricos.

Esta es la razón por la que surge la necesidad de encontrar modelos que reflejen el movimiento de partículas en un semiconductor, pero que consideren un espacio de dimensión inferior. Buscamos por tanto, ecuaciones más simples que sigan mantiene una fiel concordancia con la realidad física.

3.1. Aproximación tiempo de relajación. Una primera aproximación de la ecuación de Boltzmann viene de prescindir de los términos cuadráticos del operador de colisión Q , (5.2.7).

$$(5.3.1) \quad Q_L(f)(t, x, k) = \int_{\mathbb{R}^3} [s(x, k', k)f' - s(x, k, k')f] dk'.$$

Esta aproximación es completamente lícita cuando se trabaja en teoría de semiconductores ya que en este caso la densidad de partículas es pequeña,

$$0 \leq f(t, x, k) \ll 1.$$

Se puede deducir (ver, por ejemplo [10]) que el operador de colisión se puede reescribir como:

$$(5.3.2) \quad Q_L(f)(t, x, k) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(x, k', k) [M(k)f' - M(k')f] dk',$$

donde

$$M(k) = N^* \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_k}{k_B T}\right), \quad N^* = \left(\int_B \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_k}{k_B T}\right) dk\right)^{-1},$$

distribución Maxwelliana y ϕ es simétrica respecto a k y k' de forma que

$$s(x, k, k') = \phi(x, k', k) M(k).$$

Si el dato inicial se toma próximo a un múltiplo de la Maxwelliana es natural aproximar f' en (5.3.2) por $\rho(t, x) M(k')$, donde ρ es la función de densidad, es decir, $\rho(x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, k) dk$ y por tanto Q_L se traduce en:

$$(5.3.3) \quad Q_R(f)(t, x, k) = -\frac{1}{\tau(x, k)} (f(t, x, k) - M(k) \rho(t, x)),$$

donde se ha usado la relación existente entre la probabilidad de scattering y el tiempo de relajación:

$$\tau(x, k) = \left(\int_B s(x, k, k') dk'\right)^{-1}$$

3.2. Sistema clásico hidrodinámico. El modelo hidrodinámico es un sistema de ecuaciones hiperbólicas que se derivan de la ecuación de Boltzmann haciendo uso del *método de momentos*. Este método consiste en considerar los momentos de la ecuación de Boltzmann y obtener un sistema cerrado de ecuaciones para la evolución de la densidad, la velocidad media y la energía, suponiendo una hipótesis que cierre este sistema. Estos modelos se derivan del método de clausura de momentos de Grad, en el que se supone que la función de distribución es una traslación de la Maxwelliana y otras consideraciones que supone la ley del flujo de calor de Fourier combinado con la ley de Franz-Wiederman para la temperatura local del dispositivo.

$$(5.3.4) \quad \partial_t \rho - \frac{1}{e} \operatorname{div}_x J = 0$$

$$(5.3.5) \quad \partial_t J - \frac{1}{e} \operatorname{Div}_x \left(\frac{J \otimes J}{\rho} \right) - \frac{ek_B}{m^*} \nabla_x (T\rho) - \frac{e^2}{m^*} \rho E_{ef} = -\frac{J}{\tau_p}$$

$$(5.3.6) \quad \partial_t(\rho W) - \operatorname{div}_x \left(\frac{m^* |J|^2}{2e^3 \rho^2} + \frac{5 k_B}{2} T J \right) = J \cdot E_{ef} - \frac{1}{\tau_w} \left(\frac{m^* |J|^2}{2e^2 \rho} + \frac{3}{2} \rho k_B (T - T_L) \right),$$

donde

$$J = -e \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv = -e \rho u$$

es la densidad de corriente,

$$W = \frac{m^*}{2} |u|^2 + \frac{3}{2} k_B T$$

es la energía, $T(t, x)$ es la temperatura del electrón, T_L la temperatura del retículo y τ_p y τ_w son respectivamente, los tiempos de relajación del momento y de la energía. En ocasiones a la Ecuación (5.3.6) se le añade un término adicional, llamado término de conducción de calor.

3.3. Ecuaciones de drift-diffusion. Como un límite difusivo de la aproximación tiempo de relajación se puede obtener la ecuación de difusión estándar para el caso isoterma, que gobierna la evolución de la densidad,

$$(5.3.7) \quad \partial_t \rho - \frac{1}{e} \operatorname{div} \mu_0 (k_B T_0 \nabla \rho + e \rho E_{ef}) = 0,$$

donde μ_0 es la movilidad del electrón y T_0 la temperatura.

3.4. El límite de Child-Langmuir. Para finalizar este capítulo vamos a señalar un último sistema aproximado de la ecuación de Boltzmann, que ocupará el capítulo siguiente: el límite de Child-Langmuir. Este límite tiene diversas aplicaciones, una de ellas en teoría de semiconductores. Y será ésta la aplicación en la que nos centraremos.

El límite de Child-Langmuir consiste en considerar el parámetro

$$\epsilon = \frac{V_{th}}{V_L},$$

que relaciona dos velocidades: térmica y balística, suponiendo que el parámetro verifica: $\epsilon \ll 1$. Entonces, se hace un cambio de escala en la ecuación y se toma el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Para el sistema resultante se puede dar una expresión de la función de distribución atendiendo a las trayectorias de los electrones.

No nos extendemos más aquí, porque este límite será estudiado en más detalle en el Capítulo 7, en el que lo validaremos numéricamente comparando con resultados deterministas.

Bibliografía

- [1] N. C. ASHCROFT, N. D. MERMIN, *Solid state physics*, Holt-Sounders, New York (1976).
- [2] N.N. BOGOLIUBOV, *Problems of a dynamical theory in statistical physics*, In: Studies in statistical mechanics, Vol. I (J. de Boer, G. E. Uhlenbeck, eds.). North-Holland, Amsterdam (1962), p.5.
- [3] M. BORN, H. S. GREEN, *A general kinetic theory of fluids*, Cambridge university press, Cambridge (1949).
- [4] A. JÜNGEL, *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, Progress in Nonlinear Differential Equations, Birkhäuser, (2001).
- [5] J. G. KIRKWOOD, *J. Chem. Phys.* 14, 180 (1946).
- [6] C. KITTEL, *Introduction to solid state physics*, J. Wiley & Sons, New York (1968).
- [7] O. MADELUNG, *Semiconductors, group IV elements and III-V compounds*, Berlin: Springer-Verlag, (1991).
- [8] A. MAJORANA, S. A. MARANO, *Space homogeneous solutions to the Cauchy problem for semiconductor Boltzmann equations*, SIAM J. Math. Anal., Vol. 28, 6, (1997), pp. 1294-1308.
- [9] A. MAJORANA, C. MILAZZO, *Space homogeneous solutions of the linear semiconductor Boltzmann equation*, J. Math. Anal. Appl., 259, (2001), pp. 609-629.
- [10] P. A. MARKOWICH, C. A. RINGHOFER, C. SCHMEISER, *Semiconductor equations*, Springer-Verlag Wien New York 1990.
- [11] F. J. MUSTIELES, *Global existence of solutions for the nonlinear Boltzmann equations of semiconductor physics*, Rev. Mat. Iberoamer., 6, (1990), pp. 43-59.
- [12] F. J. MUSTIELES, *Global existence of weak solutions for a system of nonlinear Boltzmann equations of semiconductor physics*, Math. Methods Appl. Sci., 14, (1991), pp. 139-153.
- [13] F. POUPAUD, *On a system of nonlinear Boltzmann equations of semiconductor physics*, SIAM J. Appl. Math., 50, (1990), pp. 1593-1606.
- [14] K. TOMIZAWA, *Numerical simulation of sub micron semiconductor devices*, Boston, Artech House, 1993.
- [15] J. YVON, *La théorie statistique des fluides*, Actualités scientifiques et industrielles, No 203. Hermann, Paris (1935).

CAPÍTULO 6

Leyes de conservación y métodos numéricos

En este capítulo queremos dar un breve repaso de los métodos numéricos empleados para las simulaciones numéricas que presentamos en los dos capítulos siguientes. El núcleo central de las computaciones numéricas de este trabajo recae en la simulación determinista de la ecuación de Boltzmann o aproximaciones de ésta (aproximación del término de colisión por el operador de relajación y el límite asintótico de Child-Langmuir). La herramienta principal utilizada es el método en diferencias finitas de tipo WENO para leyes de conservación. La explicación de este método será la pieza central de este capítulo.

1. Leyes de conservación

Un sistema de leyes de conservación escalares viene dado por la siguiente ecuación:

$$(6.1.1) \quad \partial_t u(t, x) + \partial_x f(u(t, x)) = 0,$$

donde $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ es un vector m -dimensional de cantidades que se conservan, o variables de estados, como, masa, momento y energía en un problema de dinámica de gases. De forma más precisa, decir que se conservan estas variables es decir que $\int_{-\infty}^{\infty} u_j(t, x) dx$ se mantiene constante para todo tiempo t , donde esta integral representa la cantidad total de la variable de estados j -ésima. Las funciones u_j son las distribuciones espaciales de las variables de estado en el tiempo t , que a su vez cambian cuando se evoluciona en tiempo. La ecuación (6.1.1) nos indica que conocido el valor de $u(t, x)$ en un punto y tiempo dados podemos determinar el flujo de cada variable de estado en (t, x) .

$f(u)$ se conoce como la función flujo del sistema de leyes de conservación. Lógicamente para conocer el comportamiento del sistema dinámico debemos suponer una hipótesis de partida. Y para situarnos en problemas reales, es natural suponer que trabajamos en un dominio espacial acotado y por tanto debemos imponer condiciones frontera.

Trabajaremos con sistemas hiperbólicos, por lo que supondremos que la ecuación (6.1.1) es hiperbólica. Es decir, la matriz jacobiana de la función de flujo, que por simplicidad denotamos como $f'(u)$, verifica que, para cada valor de u , sus autovalores son reales y la matriz es diagonalizable.

Trabajaremos en dimensión tres por lo que debemos generalizar lo anterior,
 (6.1.2) $\partial_t u(t, x, y, z) + \partial_x f(u(t, x, y, z)) + \partial_y g(u(t, x, y, z)) + \partial_z h(u(t, x, y, z)) = 0,$
 donde $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^m$ y las funciones de flujo son $f, g, h : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Nosotros trabajaremos con un tipo particular de leyes de conservación, las leyes escalares. Es decir, consideramos el caso $m = 1$, así, $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ y $f, g, h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Las leyes de conservación tiene una importancia sustancial en el mundo científico en general, puesto que engloban cantidades que se conservan que pueden ser formuladas como ecuaciones en derivadas parciales. Sin embargo, sólo se conocen la solución explícita de un número pequeño de problemas. Es en este momento, donde cobra importancia el análisis numérico. No podemos dar una solución exacta al problema pero podemos valernos de una potente herramienta que nos permita determinar propiedades cualitativas de la solución que buscamos. Los métodos numéricos disponibles para abordar este problema son múltiples, [4].

En los dos capítulos siguientes los esquemas numéricos empleados para la simulación de los correspondientes sistemas cinéticos son idénticos. Si bien en el Capítulo 8 un análisis previo del sistema será desarrollado, formulando el sistema de Boltzmann-Poisson como un sistema en coordenadas cilíndricas. Y será a este nuevo sistema al que se le aplicará el esquema numérico que a continuación detallaremos.

2. Métodos numéricos

Las ecuaciones cinéticas se resuelven con un esquema conservativo de diferencias finitas WENO de alto orden [2] junto con una discretización en tiempo Runge-Kutta TVD de tercer orden [6].

2.1. Esquema WENO. El esquema WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) es un esquema numérico desarrollado originalmente para leyes de conservación hiperbólicas y para ecuaciones relacionadas con ecuaciones Hamilton-Jacobi. Es un esquema de diferencias finitas con orden alto de precisión apropiado para problemas con soluciones regulares salvo en un conjunto finito de puntos. Entendemos por regulares aquellas funciones que son diferenciables tantas veces como el método lo precise.

La idea clave se localiza en el nivel de aproximación, donde se usa un procedimiento no lineal de forma que automáticamente se elige la malla localmente más regular, evitando de este modo, al máximo, oscilaciones debidas a aproximaciones lagrangianas de discontinuidades durante la interpolación.

“La evolución histórica” del método WENO, se puede encontrar en un detallado artículo de C. W. Shu, [5]. Señalamos aquí, solamente, que el “antecesor” del método WENO es el método ENO (Essentially Non-Oscillatory).

Para funciones regulares, salvo en un conjunto finito de puntos, la idea del esquema ENO propuesta en [1] es considerar un método de alto orden de precisión uniforme, “esencialmente no oscilatorio”, es decir, que la “magnitud” de las oscilaciones decaiga como $O(\Delta x^k)$, cuando k es el orden de exactitud para la región regular. La estrategia para este fin, es buscar una “malla local adaptativa”, evitando incluir, en la medida de lo posible, celdas con discontinuidades y de forma que en la malla local la función sea lo más regular posible, en comparación con otra posible elección de malla local. La construcción de la malla local se hace atendiendo a la comparación entre ciertas diferencias divididas de Newton, que son las que miden la regularidad de la función en la malla local.

Los esquemas WENO surgen como una mejora a los métodos ENO, ya que uno de los inconvenientes que se le podría reprochar a ENO, es la elección de la malla de entre todas las posibles, ¿cómo se sabe que la elección que se hace es la correcta? WENO evita esa pregunta considerando toda la familia de “mallas candidatas”, creadas siguiendo el esquema ENO. Concretamente se elige una combinación convexa de todas esas posibles mallas, con pesos no lineales.

En los siguientes capítulos utilizaremos el método WENO de quinto orden para aproximar las derivadas que aparecerán en la parte del flujo del esquema conservativo. Genéricamente, en este desarrollo, las denotaremos por $\partial_x f(u(t, x))$. (Ver capítulos siguientes para aplicaciones).

Consideremos una malla

$$(6.2.1) \quad a = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = b,$$

definimos, entonces, para todo $i = 1, 2, \dots, N$,

$$(6.2.2) \quad I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \quad \text{celda } i\text{-ésima},$$

$$(6.2.3) \quad x_i = \frac{x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}}{2} \quad \text{centro de la celda } i\text{-ésima}$$

y

$$(6.2.4) \quad \Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \quad \text{tamaño de la celda } i\text{-ésima}.$$

Denotaremos el *tamaño máximo de la celda* como,

$$(6.2.5) \quad \Delta x = \max_{1 \leq i \leq N} \Delta x_i.$$

En lo que sigue supondremos que la malla es uniforme, es decir,

$$\Delta x = \Delta x_i, \quad \forall i = 1, \dots, N.$$

Entonces

$$(6.2.6) \quad \frac{\partial}{\partial x} f(u(t, x_i)) \approx \frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}),$$

donde el flujo numérico

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{f}(u_{i-r}, \dots, u_{i+s}),$$

(siendo $u_i(t)$ la aproximación numérica al valor del punto $u(t, x_i)$), satisface las siguientes condiciones:

- \hat{f} es una función Lipschitz continua en todos sus argumentos.
- \hat{f} es consistente con el flujo físico: $\hat{f}(u, \dots, u) = f(u)$.

El teorema de Lax-Wendroff [3] nos dice que si el esquema conservativo

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}})$$

converge, lo hace a una solución débil de

$$u_t(t, x) + f_x(u(t, x)) = 0$$

En la reconstrucción del flujo debe tenerse en cuenta la dirección del viento (“up-winding”). El modo más sencillo y menos costoso es considerar la *velocidad de Roe*

$$(6.2.7) \quad \bar{v}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{f(u_{i+1}) - f(u_i)}{u_{i+1} - u_i}.$$

Si $\bar{v}_{i+\frac{1}{2}} \geq 0$, entonces “el viento sopla” desde la izquierda a la derecha, por el contrario, si $\bar{v}_{i+\frac{1}{2}} < 0$ el “viento sopla” de derecha a izquierda. En nuestros sistemas estas velocidades mantendrán siempre el mismo signo, es decir, no dependerán de la variable sobre la que estamos buscando la aproximación. En sistemas en los que esto no ocurre debe considerarse un esquema más elaborado, considerando el flujo descompuesto en dos términos en función del signo de su derivada: parte positiva y parte negativa. Una de las más simples descomposiciones posibles es la dada por Lax-Friedrichs, (ver [5]).

Supongamos, sin pérdida de generalidad, que $\bar{v}_{i+\frac{1}{2}} \geq 0$, en el otro caso se sigue de forma análoga. El procedimiento para reconstruir el flujo numérico es como sigue (método 5-WENO).

$$\hat{f}_{i+1/2} = \omega_1 \hat{f}_{i+1/2}^{(1)} + \omega_2 \hat{f}_{i+1/2}^{(2)} + \omega_3 \hat{f}_{i+1/2}^{(3)}$$

donde $f_{i+1/2}^{(m)}$ son los tres flujos de tercer orden en tres mallas diferentes. Vienen dados por

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^{(1)} &= \frac{1}{3}f_{i-2} - \frac{7}{6}f_{i-1} + \frac{11}{6}f_i, \\ f_{i+1/2}^{(2)} &= -\frac{1}{6}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1}, \\ f_{i+1/2}^{(3)} &= \frac{1}{3}f_i + \frac{5}{6}f_{i+1} - \frac{1}{6}f_{i+2}, \end{aligned}$$

siendo ω_m los pesos no lineales

$$\omega_m = \frac{\tilde{\omega}_m}{\sum_{l=1}^3 \tilde{\omega}_l}, \quad \tilde{\omega}_l = \frac{\gamma_l}{(\varepsilon + \beta_l)^2},$$

con los pesos lineales γ_l

$$\gamma_1 = \frac{1}{10}, \quad \gamma_2 = \frac{3}{5}, \quad \gamma_3 = \frac{3}{10},$$

y los indicadores de regularidad β_l

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{13}{12}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 + \frac{1}{4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(f_{i-1} - f_{i+1})^2 \\ \beta_3 &= \frac{13}{12}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3f_i - 4f_{i+1} + f_{i+2})^2. \end{aligned}$$

Si la función que se aproxima es regular en la malla r , entonces

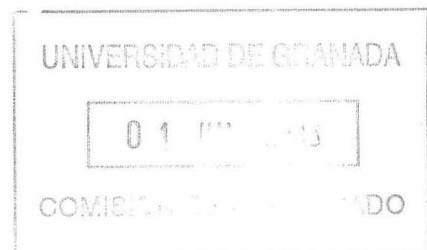
$$\beta_r = O(\Delta x^2),$$

mientras que, si la función presenta una discontinuidad en la malla r ,

$$\beta_r = O(1).$$

Finalmente, ε es un parámetro que se considera para evitar que el denominador sea 0 en nuestros cálculos tomaremos $\varepsilon = 10^{-6}$. De esta modo obtenemos la aproximación de $\partial_x f(u(x, t))$ utilizando un esquema WENO de diferencias finitas de quinto orden (debe entenderse de quinto orden en los puntos regulares). Como se ve, es un proceso simple en el que los parámetros son fácilmente computables, por lo que el algoritmo numérico resultante también lo será.

Para acabar con la descripción del método WENO, sólo decir que en general no es TVD ("Total Variation Diminishing", variación total decreciente) y que no conserva la positividad de la solución cuando se parte de un dato inicial positivo. Pero esta "falta" del método WENO, no es en ningún caso "significativa", la pérdida de positividad se presenta en las regiones de grandes saltos de la



solución, concretamente cerca de las zonas de contacto donde se ha considerado una función paso para el modelado de la densidad de dopaje (ver capítulo anterior y siguientes). Los valores negativos que aparecen en estas regiones son prácticamente cero y no producen oscilaciones espúreas, en absoluto.

2.2. Esquema numérico para la ecuación de Poisson. Para que los electrones se muevan será necesario someterlos al efecto de un campo eléctrico. En nuestras simulaciones supondremos que este campo eléctrico es generado por un potencial eléctrico. Y para ello acoplaremos la ecuación de Boltzmann con la ecuación de Poisson (ver capítulo anterior). Por tanto, numéricamente tendremos que resolver una ecuación del tipo

$$(6.2.8) \quad u_{xx} = -g,$$

$$(6.2.9) \quad u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b.$$

Para ello usaremos un sencillo esquema de diferencias finitas centradas. Considerando una partición del intervalo $[a, b]$, igualmente espaciada:

$$a = x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_N = b,$$

$$\Delta x = \Delta x_i = x_i - x_{i-1} = \frac{b-a}{N}, \quad i = 1, \dots, N,$$

obtenemos

$$(6.2.10) \quad \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{(\Delta x)^2} \approx -g(x_i)$$

para $i = 1, 2, \dots, N-1$. El sistema (6.2.10) es un sistema triangular de $N-1$ ecuaciones con otras tantas incógnitas, lo que podemos escribir de una forma más clara usando la notación matricial:

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{(\Delta x)^2} & -\frac{1}{(\Delta x)^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{(\Delta x)^2} & \frac{2}{(\Delta x)^2} & -\frac{1}{(\Delta x)^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{(\Delta x)^2} & \frac{2}{(\Delta x)^2} & -\frac{1}{(\Delta x)^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{1}{(\Delta x)^2} & \frac{2}{(\Delta x)^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ u(x_3) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(x_1) \\ g(x_2) \\ g(x_3) \\ \vdots \\ g(x_{N-1}) \end{pmatrix}$$

Este sistema lo podemos resolver por medio de la eliminación gaussiana con sustitución regresiva. Proporcionando, de este modo, una aproximación numérica al problema (6.2.8)-(6.2.9).

Podría haberse considerado otra posible aproximación numérica, por ejemplo, la integración, numérica, directa de la ecuación (6.2.8), sujeta a la condición (6.2.9).

2.3. Método Runge-Kutta TVD. Para la evolución en tiempo utilizaremos un método Runge-Kutta TVD de tercer orden [6]. Consideremos el siguiente problema de valores iniciales:

$$u_t = L(u), \quad u(0) = u_0.$$

En los capítulos siguientes, L será la aproximación de las derivadas espaciales más el término de colisión, si lo hubiese.

Resolveremos este problema mediante el método de Runge-Kutta TVD de tercer orden:

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n, t^n) \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}, t^n + \Delta t) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}, t^n + \frac{1}{2}\Delta t), \end{aligned}$$

Para garantizar resultados de estabilidad, necesitamos imponer condiciones usuales CFL (Courant, Friedrichs y Lewy)

$$\Delta t \leq CFL \frac{\Delta x}{|f'(u)|'}$$

donde $|f'(u)|'$ representa el máximo de la función f' en la malla computacional.

2.4. Integración numérica: regla de Gauss-Legendre. Para la obtención de los resultados experimentales de los capítulos siguientes serán necesarias realizar diversas integraciones numéricas. Cuando el problema no requiera "mayor precisión" usaremos la *regla del rectángulo*, que no detallamos aquí por su simplicidad y puede encontrarse en cualquier libro elemental de análisis numérico.

En otras ocasiones (ver Capítulo 8), la regla del rectángulo no será suficiente y necesitaremos una aproximación más precisa. Este problema lo resolveremos usando la regla de Gauss-Legendre, que cuando se consideran N nodos es exacta para funciones polinomiales de grado menor o igual que $2N - 1$.

TEOREMA 6.2.1. (Regla de Gauss-Legendre con N nodos). Si g es una función continua en $[-1, 1]$, entonces

$$(6.2.11) \quad \int_{-1}^1 g(x) dx = \sum_{k=1}^N \alpha_{N,k} g(x_{N,k}) + \frac{2^{2N+1}(N!)^4}{(2N+1)[(2N)!]^2} \cdot \frac{f^{(2N)}(\eta)}{(2n)!} \quad -1 < \eta < 1$$

donde los nodos $x_{N,k}$ y los pesos $\alpha_{N,k}$ están tabulados, ver Tabla 6.1 para algunos valores de N .

Normalmente el intervalo de integración no será $[-1, 1]$, sino un intervalo general $[a, b]$. Para este intervalo se puede trasladar la regla dada en el teorema anterior resultando

TEOREMA 6.2.2. (**Regla general de Gauss-Legendre con N nodos**). Si g es una función continua en $[a, b]$, entonces

$$(6.2.12) \quad \int_a^b g(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^N \alpha_{N,k} g(t_{N,k}),$$

donde los nodos $t_{N,k}$ son los trasladados de $x_{N,k}$

$$t_{N,k} = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_{N,k}$$

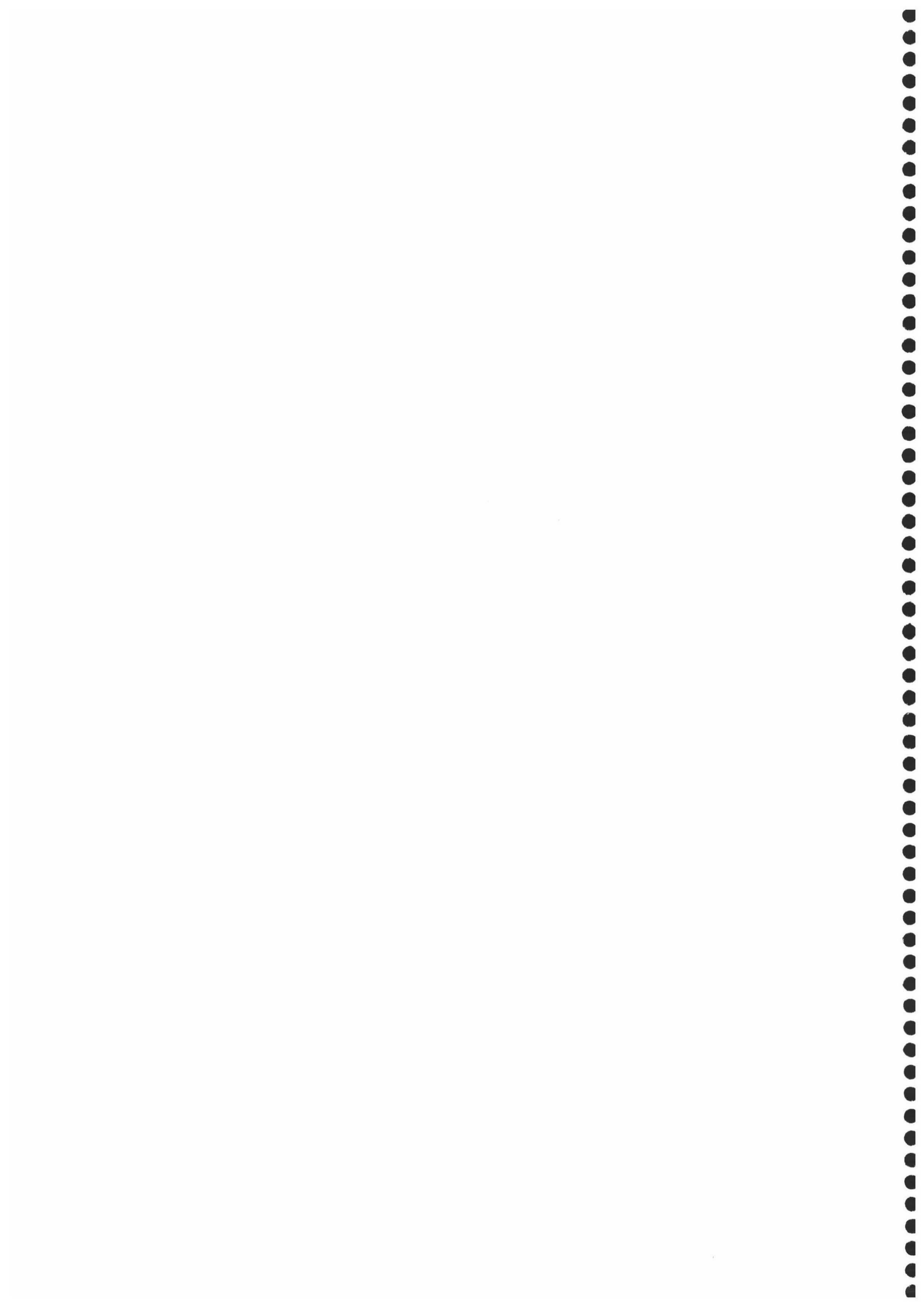
y los pesos $\alpha_{N,k}$ son los correspondientes a los nodos $x_{N,k}$, ver Tabla 6.1 para algunos valores de N .

2.5. Esquema numérico para la simulación del sistema BP. Para finalizar este capítulo queremos recoger los pasos que se seguirán en la programación de las simulaciones de los capítulos siguientes. Hemos querido representar por el sistema de BP, el sistema de Boltzmann-Poisson. Donde por la ecuación de Boltzmann entenderemos la ecuación de transporte igualada al operador de colisión, pudiendo ser este último una aproximación del término de dispersión, como explicábamos en el capítulo anterior.

1. Lectura de parámetros e inicialización.
2. Condiciones frontera.
3. Aproximación de la función de densidad, mediante una regla simple de integración.
4. Cálculo del campo eléctrico, resolviendo la ecuación de Poisson, por medio del esquema anterior.
5. Aproximación de las derivadas espaciales, mediante un esquema de tipo WENO. Cada variable se considera por separado, mientras las otras son vistas como constantes.
6. Evaluación del término de colisión.
7. Imposición de las condiciones CFL y evolución en tiempo con el esquema RK. Y vuelta al paso 2.

N	Nodos, $x_{N,k}$	Pesos, $\alpha_{N,k}$
2	-0.5773502692 0.5773502692	1.0000000000 1.0000000000
3	± 0.7745966692 0.0000000000	0.5555555556 0.8888888888
4	± 0.8611363116 ± 0.3399810436	0.3478548451 0.6521451549
5	± 0.9061798459 ± 0.5384693101 0.0000000000	0.2369268851 0.4786286705 0.5688888888
6	± 0.9324695142 ± 0.6612093865 ± 0.2386191861	0.1713244924 0.3607615730 0.4679139346
7	± 0.9491079123 ± 0.7415311856 ± 0.4058451514 0.0000000000	0.1294849662 0.2797053915 0.3818300505 0.4179591837
8	± 0.9602898565 ± 0.7966664774 ± 0.5255324099 ± 0.1834346425	0.1012285363 0.2223810345 0.3137066459 0.3626837834
16	± 0.989400935 ± 0.9445750231 ± 0.8656312024 ± 0.7554044083 ± 0.61787624440 ± 0.4580167776 ± 0.28160355078 $\pm 0.9501250984e-1$	0.2715245941e-1 0.6225352394e-1 0.9515851168e-1 0.1246289712 0.1495959888 0.1691565194 0.1826034150 0.1894506104

TABLA 6.1. Nodos y pesos para el método de Gauss-Legendre.



Bibliografía

- [1] A. HARTEN, B. ENGQUIST, S. OSHER, S. CHAKRAVARTHY, *Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, III*, Journal of Computational Physics, 71, (1987), pp.231-303.
- [2] G. JIANG, C.-W. SHU, *Efficient implementation of weighted ENO schemes*, J. Comput. Phys., 126, (1996), pp. 202–228.
- [3] P. D. LAX, B. WENDROFF, *Systems of conservation laws*, Communications in Pure and Applied Mathematics, 13, (1960), pp. 217-237.
- [4] R. J. LEVEQUE, *Numerical Methods for conservation laws*, Birkhauser Verlag, Basel, 1990.
- [5] C.-W., SHU, *Essentially Non-Oscillatory and Weighted Esentially Non-Oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations, B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu and E. Tadmor (Editor: A. Quarteroni), Lecture Notes in Mathematics, volume 1697, Springer, 1998, pp. 325-432.
- [6] C.-W., SHU, S. OSHER, *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes*, J. Comput. Phys., 77, (1988), pp. 439-471.



CAPÍTULO 7

El límite de Child-Langmuir para semiconductores: una validación numérica

El sistema de Boltzmann-Poisson modela el flujo de electrones en un semiconductor, como vimos en el Capítulo 5. En ese mismo capítulo consideramos como modelo aproximado del sistema de Boltzmann-Poisson el límite asintótico de Child-Langmuir. El objetivo del presente Capítulo es validar este límite, mediante la comparación numérica con el sistema determinista.

El núcleo de scattering es aproximado por un simple operador de relajación en tiempo. El límite asintótico de Child-Langmuir proporciona una aproximación de las curvas características de corriente-voltaje por medio de un cambio de escala, cuando la velocidad balística es mucho más grande que la velocidad térmica. Discutiremos la validación del régimen de Child-Langmuir mediante un detallado estudio numérico, en el que mostraremos comparaciones entre las simulaciones para el sistema de Boltzmann-Poisson y las ecuaciones asintóticas de Child-Langmuir. Para ello consideraremos un diodo $N^+ - N^- - N^+$ en dos materiales distintos: Silicio (Si) y Arsenuro de Galio (GaAs).

La notación empleada en este capítulo es la usual en la literatura del límite de Child-Langmuir. Hemos mantenido esta notación con el fin de facilitar las consultas bibliográficas referentes al límite de Child-Langmuir.¹

1. Introducción

Consideramos el sistema cinético, para semiconductores, 1 dimensional con relajación en tiempo (ver Capítulo 5 y [16] para más detalles),

$$(7.1.1) \quad \frac{\partial F}{\partial t} + V \frac{\partial F}{\partial X} - \frac{e}{m} E(t, X) \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{1}{\tau} (M_T(V) \rho(F) - F),$$

$F = F(t, X, V)$ es la función de densidad para un electrón con posición $X \in [0, L]$ y velocidad $V \in \mathbb{R}$ en un tiempo $t \geq 0$, donde L es la longitud del canal del dispositivo. e y m son las unidades de carga y masa efectiva del electrón, respectivamente. El campo eléctrico $E = E(t, X)$ es auto-consistente, producido por el movimiento

¹Los contenidos de este capítulo han sido desarrollados a modo de artículo en MARÍA J. CÁCERES, JOSÉ A. CARRILLO, PIERRE DEGOND, *The Child-Langmuir limit for semiconductors: a numerical validation*, ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, Vol. 36, 6, (2002), pp. 1161-1176.

de los electrones en un “baño de iones” con densidad $C(X)$, llamada concentración de dopantes. E viene determinado por la ecuación de Poisson

$$(7.1.2) \quad \epsilon_0 \frac{d^2 \phi}{dX^2} = e(\rho(F) - C(X)), \quad E(t, X) = -\frac{d\phi}{dX},$$

con ϵ_0 la permitividad del material y

$$(7.1.3) \quad \rho(F)(t, X) = \int_{\mathbb{R}} F(t, X, V) dV, \quad J(t, X) = \int_{\mathbb{R}} VF(t, X, V) dV,$$

son, respectivamente, la densidad de partícula y el flujo de electrones, es decir, los dos primeros momentos de la función de distribución $F(t, X, V)$. El tiempo de relajación τ se supone constante y está relacionado con la movilidad μ , mediante la expresión $\mu = \frac{e}{m}\tau$. T es la temperatura del retículo, M_T es Maxwelliana de equilibrio asociada a esta temperatura

$$M_T(V) = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\tau k_B T}{m}}} \exp\left(-\frac{mV^2}{2k_B T}\right)$$

y k_B es la constante de Boltzmann.

La ley de Child-Langmuir se ocupa, originariamente, de la descripción de un flujo de electrones en un diodo vacío cuando la energía de las partículas emitidas en el cátodo es pequeña comparada con el voltaje aplicado. Child, Langmuir y Compton realizaron un análisis de este problema en [15, 1930] en el caso de un diodo plano vacío 1 dimensional y probaron la ley de Child-Langmuir: *bajo estas hipótesis, la corriente que fluye a través del diodo depende no del número de electrones extraídos sino sólo del “bias” aplicado y de la geometría del diodo*. Después de 60 años, en 1991, se obtuvo esta ley, en [11], como una solución límite del problema perturbado del sistema de Vlasov-Poisson 1 dimensional. La ley de Child-Langmuir tiene aplicaciones muy diversas, siendo una de ellas, en la que nos centraremos, en semiconductores [1, 4, 7, 9]. La Sección 2 de este capítulo la dedicaremos a una revisión del límite de Child-Langmuir (CL) en un diodo unipolar $N^+ - N^- - N^+$. El transporte balístico ha sido estudiado con propósitos prácticos en [2, 18, 19].

El objetivo de este capítulo es dar una validación numérica del límite asintótico CL para el sistema cinético 1 dimensional con tiempo de relajación. Para ello, mostraremos simulaciones numéricas para el límite CL y las compararemos con los resultados numéricos obtenidos de las computaciones deterministas del sistema cinético. Estas simulaciones deterministas numéricas fueron dadas en [10], donde los autores analizaron y compararon con distintas aproximaciones clásicas del sistema de Boltzmann-Poisson (sistemas hidrodinámicos, drift-diffusion), y fueron validadas con resultados Monte Carlo (DSMC) para un dispositivo de Silicio en

[12]. Las simulaciones deterministas están basadas en el uso de esquemas Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) [14, 17] (Capítulo 6). En este capítulo desarrollamos simulaciones numéricas para el mismo dispositivo en dos materiales diferentes: Si y GaAs. Numéricamente observaremos que los resultados son mejores a medida que incrementamos el potencial aplicado, "bias" o disminuimos la temperatura del retículo. Ratificando así, las simulaciones numéricas la ley de Child-Langmuir.

Compararemos también, la función de distribución del sistema cinético con la función de distribución propuesta por el límite CL [5]. Finalmente, comparemos momentos de la solución cinética y de la solución del límite CL.

El capítulo lo estructuramos como sigue: en la Sección 2 damos un breve repaso de los conocimientos necesarios para trabajar con el límite de Child-Langmuir. En la Sección 3 nos centramos en las comparaciones numéricas del límite de Child-Langmuir con la solución de la ecuación de Boltzmann. Por último, en la Sección 4 presentamos las conclusiones que se derivan de las simulaciones numéricas de la sección anterior.

2. Repaso del límite de Child-Langmuir

Consideremos un dispositivo unipolar $N^+-N^- - N^+$, es decir, un dispositivo con dos regiones de dopaje altas N^+ a cada lado de una región de dopaje bajo N^- . En la zona N^+ , los electrones están en un estado termodinámico de cuasi-equilibrio y tienen una densidad aproximadamente igual a N^+ , es decir, $F(X, V) = N^+ M_T(V - V_0)$ con una pequeña velocidad media V_0 , por lo que el potencial electrostático es prácticamente constante en las zonas N^+ .

En la región de contacto entre la zona N^+ y N^- , la densidad de dopaje "cae dramáticamente" causando un exceso de carga negativa en la región N^- cerca del contacto, dando lugar a una barrera del potencial, denominado potencial "built-in".

Dado que nuestro objetivo en este capítulo es la validación numérica del límite de CL con respecto a la simulación del sistema de Boltzmann-Poisson y no el estudio del mismo, presentamos en esta sección sólo una breve descripción de este límite, (para más detalles ver [1, 3, 4, 6, 7]). Una demostración de la convergencia del límite de CL para el operador de tiempo de relajación se puede encontrar en [4, 6]. El límite de CL describe la función estacionaria en el canal del dispositivo, reemplazando las zonas N^+ por condiciones frontera apropiadas en las uniones N^+-N^- . Por lo tanto, trabajaremos sólo con el canal o región N^- representada en el intervalo $[0, L]$. Así, los contactos están localizadas en $X = 0$, para el lado de la fuente y $X = L$, para el lado del drenaje.

Puesto que estamos interesados en los estados estacionarios, consideramos el sistema estacionario asociado a (7.1.1), es decir,

$$(7.2.1) \quad V \frac{\partial F}{\partial X} + \frac{e}{m} \frac{d\phi}{dX} \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{1}{\tau} (M_T(V)\rho(F) - F)$$

donde

$$\frac{d^2\phi}{dX^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (\rho(F) - C(X)).$$

Para tener en cuenta las zonas N^+ , suponemos las siguientes condiciones frontera: los electrones son inyectados siguiendo una cierta función de distribución, $G(V)$, en la zona de contacto N^+-N^- sobre el lado de la fuente, y no se inyectan electrones en la zona de contacto $N^- - N^+$ sobre el lado del drenaje, más concretamente,

$$(7.2.2) \quad F(0, V) = G(V) \quad V > 0, \quad F(L, V) = 0 \quad V < 0.$$

G se supone coincidir con la distribución de equilibrio termodinámico de los electrones de la fuente:

$$G(V) = N^+ M_T(V)$$

Consideramos el diodo con un potencial aplicado,

$$(7.2.3) \quad \phi(0) = 0, \quad \phi(L) = \phi_L > 0.$$

En el régimen de CL, la energía de emisión térmica es pequeña comparada con el potencial aplicado, mientras que la corriente de inyección permanece finita [11],

$$mV_{th}^2/2 \ll e\phi_L.$$

O equivalentemente, la velocidad media de los electrones inyectados en la fuente es pequeña comparada con su velocidad cuando alcanzan la zona de drenaje.

$$V_{th} \ll V_L,$$

donde $V_{th} = \sqrt{k_B T/m}$ es la velocidad térmica y $V_L = \sqrt{2e\phi_L/m}$ es la velocidad balística al final del canal.

Bajo estas hipótesis, introducimos el siguiente parámetro de escala

$$(7.2.4) \quad \epsilon = \frac{V_{th}}{V_L} = \sqrt{\frac{k_B T}{2e\phi_L}} \ll 1.$$

L , V_L y ϕ_L serán la longitud, la velocidad y el potencial característicos. Introducimos unidades auxiliares de densidad N_L , densidad de corriente J_L y función de distribución F_L , como sigue

$$N_L = \frac{\epsilon_0 \phi_L}{eL^2}, \quad F_L = \frac{N_L}{V_L}, \quad J_L = eN_L V_L, \quad \tau_L = \frac{L}{V_L},$$

y usamos la siguiente escala:

$$(7.2.5) \quad \begin{cases} X = Lx, & V = V_L v, & \phi = \phi_L \varphi^\epsilon, & \tau = \tau_L \tilde{\tau} \\ \rho(F) = N_L n^\epsilon, & J = -J_L j^\epsilon, & F = F_L f^\epsilon, & C(X) = N_L n_D \end{cases}$$

Según esta escala, el tiempo de relajación tiene el mismo orden de magnitud que el tiempo de tránsito del electrón en la zona N^- . Además, introducimos una función adimensional $g(v)$ y expresamos $G(V)$ de acuerdo a

$$(7.2.6) \quad F_L^{-1} G(V) = \frac{1}{\epsilon^2} g\left(\frac{V}{V_{th}}\right) = \frac{1}{\epsilon^2} g\left(\frac{v}{\epsilon}\right),$$

lo que significa que V_{th} es la velocidad característica asociada a G , y el factor ϵ^2 asegura que la corriente de inyección J_G es independiente de ϵ , $J_G = J_L j_g$, donde j_g es la corriente de inyección adimensional. Por otra parte, (7.2.6) da la siguiente relación $\frac{N^+}{N_L} = \frac{1}{\epsilon}$. Esto es coherente con la hipótesis de que la densidad en la zona N^+ es alta.

Después del cambio de escala (7.2.5), el sistema puede escribirse como:

$$(7.2.7) \quad v \frac{\partial f^\epsilon}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{d\varphi^\epsilon}{dx} \frac{\partial f^\epsilon}{\partial v} = \frac{1}{\tilde{\tau}} \left[n^\epsilon \frac{1}{\epsilon} M_0\left(\frac{v}{\epsilon}\right) - f^\epsilon \right],$$

$$(7.2.8) \quad \frac{d^2 \varphi^\epsilon}{dx^2} = n^\epsilon(x) - n_D, \quad x \in [0, 1],$$

$$(7.2.9) \quad n^\epsilon(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^\epsilon(x, v) dv,$$

$$(7.2.10) \quad \varphi^\epsilon(0) = 0, \quad \varphi^\epsilon(1) = 1,$$

$$(7.2.11) \quad f^\epsilon(0, v) = \frac{1}{\epsilon^2} g\left(\frac{v}{\epsilon}\right) \quad v > 0, \quad f^\epsilon(1, v) = 0 \quad v < 0$$

donde

$$(7.2.12) \quad M_0(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) \quad \text{y} \quad g(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}}.$$

Finalmente, pasando formal al límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ (ver [5, 6] para detalles), obtenemos

$$(7.2.13) \quad v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dx} \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{1}{\tilde{\tau}} (n\delta(v) - f),$$

$$(7.2.14) \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = n(x) - n_D, \quad x \in [0, 1], \quad n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v) dv$$

$$(7.2.15) \quad \varphi(0) = 0, \quad \varphi(1) = 1,$$

donde $\delta(v)$ es la función delta de Dirac centrada en 0. Entonces, teniendo en cuenta las trayectorias de los electrones se puede obtener una expresión de la función de distribución $f(x, v)$,

$$(7.2.16) \quad f(x, v) = n_1(x)\delta[v - \sqrt{\varphi(x)}] + \int_0^x \bar{n}_2(x, y)\delta[v - \sqrt{\varphi(x) - \varphi(y)}] dy,$$

donde $n_1(x)$ es la densidad de partículas que “circulan” por la característica principal y $\bar{n}_2(x, y)dy$ es la densidad de partículas que se “mueven” por la rama de características que se extienden entre los puntos $(y, 0)$ y $(y + dy, 0)$. $n_1(x)$ y $\bar{n}_2(x, y)$ verifican un sistema de ecuaciones integro-diferenciales (ver [6]).

Como se decía anteriormente, la falsa barrera de potencial en el contacto $N^+ - N^-$ es grande en el caso de semiconductores. En el límite de CL la barrera de potencial desaparece. La condición (7.2.6) no conduce a una densidad suficientemente grande como para tener en cuenta las densidades de dopaje experimentales. Entonces, para tener una barrera de potencial del orden de 1, es necesario modelar el potencial “built-in”. Este modelado puede verse en [9]. La idea es considerar otra escala en la condición de inyección, de modo que produzca un barrera de potencial en el contacto de la fuente, y una caída de potencial en el contacto de drenaje. El problema límite que resulta está relacionado con el problema límite presentado anteriormente por una traslación del potencial por el valor $-\beta$, donde β es la barrera de potencial.

Por tanto, en las simulaciones numéricas, que presentamos en la siguiente sección, trabajamos con la ley simple (7.2.6), pero tendremos en cuenta la influencia del potencial “built-in”.

En el estado de equilibrio el potencial “built-in” viene dado por la relación

$$V_{bi} = U_{th} \log \frac{N^+}{N^-},$$

donde $U_{th} = k_B T / e$ es el voltaje térmica.

Por tanto, el potencial “built-in” escalado es $\beta = V_{bi} / \phi_L$. Este es el valor de β usado en las simulaciones numéricas. Referimos a [9] para modelar el potencial “built-in” fuera del equilibrio.

NOTA 7.2.1. La escala (7.2.5) coincide con la escala balística introducida [10]. Para más detalles referimos a [10], donde se muestra un repaso de los diferentes límites de escala para el sistema de relajación. En ese trabajo, el tiempo de relajación fue considerado como una función del campo eléctrico produciendo una velocidad de saturación finita. En nuestro caso el tiempo de relajación es constante y entonces, la velocidad media como función del campo eléctrico en el caso homogéneo no tiene límite superior.

En el capítulo siguiente se verá, que en el caso de GaAs, considerando la ecuación de Boltzmann con fenómenos de dispersión ocasionados por: impurezas, fonones acústicos y fonones ópticos polares y no-polares, la velocidad media, vista como función del campo eléctrico, no es monótona.

3. Simulaciones numéricas

Esta sección constituye la parte central de este capítulo: la validación numérica del límite asintótico de Child-Langmuir para el sistema cinético 1 dimensional de tiempo de relajación (7.1.1)-(7.1.2). Compararemos las simulaciones numéricas para el límite CL con las computaciones para el sistema cinético. El estudio numérico consiste en la comparación de: curvas características de intensidad-voltaje, potenciales, densidades, funciones de distribución, velocidades, energías, temperaturas y momentos de tercer orden para diferentes potenciales aplicados, materiales (Si y GaAs) y temperaturas (77K y 300K).

El método numérico para las simulaciones deterministas fue dado en [10]. Resaltamos sólo que la principal herramienta utilizada es el esquema de diferencias finitas WENO [14, 17]. La dependencia en tiempo del problema se resuelve usando el método Runge-Kutta (ver Capítulo 6, para una explicación en detalle). Este método se puede aplicar gracias a la estabilidad de las aproximaciones WENO de las derivadas. La evolución en el tiempo de la densidad y la corriente será usada como indicativo de nuestro criterio de parada, en el sentido siguiente: corremos las simulaciones hasta que el tiempo de variación de la densidad y la corriente se estabilizan, entendiendo que, numéricamente hablando, en ese momento alcanzamos el estado de equilibrio. El potencial autoconsistente ϕ es actualizado en cada paso resolviendo la ecuación de Poisson (7.1.2).

El esquema numérico, para la aproximación del potencial y de la corriente, en el caso de CL fue proporcionado por N. Ben Abdallah en [5]. Está basado en un método de tiro para resolver el problema de contorno (7.2.14)-(7.2.15).

La aproximación numérica para f viene dada por la expresión (7.2.16), donde debemos estimar $\delta(v)$. Sustituiremos $\delta(v)$ por $\frac{1}{\lambda} M_0(\frac{v}{\lambda})$ con λ suficientemente pequeño, y la resultante función de distribución dada por (7.2.16) será denotada por h^λ . Notamos que λ podría ser elegida igual a ϵ dado por la relación (7.2.4) puesto que ϵ es suficientemente pequeño (ver la tabla 7.4).

Para las simulaciones numéricas de CL trabajamos sólo con la región del canal N^- , mientras que la simulación determinista del sistema de Boltzmann-Poisson se desarrolla en todo el dispositivo, $N^+ - N^- - N^+$. Ambas simulaciones son realizadas en el mismo dispositivo para dos materiales diferentes: Silicio y Arsenuro de Galio.

El espacio de velocidad se ha cortado, considerando $[-a, a]$ suficientemente grande, de forma que fuera de este intervalo la función de distribución es "prácticamente cero". Consideramos $a = 3,5 \times 10^8 \text{ cm/s}$, que está en la misma escala que V_L y V_{th} , y ambas velocidades son más pequeñas que a . Recordamos las dos siguientes constantes, bien conocidas: la constante de Boltzmann $k_B = 0,138046 \cdot 10^{-22} \text{ J/K}$ y la carga elemental del electrón $e = 0,1602 \cdot 10^{-18} \text{ C}$. La Tabla 7.1 muestra las unidades que usaremos en el resto del capítulo.

3.1. Modelos de dispositivos para Silicio y GaAs. Para nuestras simulaciones consideramos una estructura uno dimensional $N^+-N^- - N^+$ de longitud de canal $L = 0,4\mu m$, donde el dominio del dispositivo es $\Omega = [-0,1\mu m, 0,5\mu m]$, para dos materiales diferentes; Si y GaAs. Se considera un potencial aplicado ϕ_L que aumenta de $0,1V$ a $2V$ con incrementos uniformes de $0,1V$.

3.1.1. Modelo de dispositivo para Silicio. Para el dispositivo del test de Si, el perfil del dopaje viene dado por $C(x)$, que es una función paso con valor de densidad $5 \times 10^{17} cm^{-3}$ en $-0,1 \leq x \leq 0$ y en $0,4 \leq x \leq 0,5$; y $2 \times 10^{15} cm^{-3}$ en $0 < x < 0,4$. En la Tabla 7.2, damos los parámetros usuales para Si, donde recordamos la relación entre μ y τ , $\mu = \frac{e}{m} \tau$.

3.1.2. Modelo de dispositivo para GaAs. Para el dispositivo del test de GaAs, el perfil del dopaje viene dado por $C(x)$, que es una función paso con valor de densidad $10^{18} cm^{-3}$ en $-0,1 \leq x \leq 0$ y en $0,4 \leq x \leq 0,5$; y $2 \times 10^{15} cm^{-3}$ en $0 < x < 0,4$. En la Tabla 7.3, damos los parámetros usuales para GaAs que consideramos en las simulaciones.

3.2. Resultados numéricos.

3.2.1. Curvas de corriente-voltaje y potenciales. En las Figuras 7.1-7.2 mostramos las comparaciones entre las curvas características de intensidad-voltaje y los potenciales para diferentes potenciales aplicados. La figura 7.1 es para un dispositivo de Silicio y la Figura 7.2 para un dispositivo de GaAs, ambas a $77K$ de temperatura. Para el límite de CL, el potencial "built-in" fue tenido en cuenta, y por ello el potencial de CL se aproxima más al potencial de la ecuación cinética en la región central de canal. Tanto para las curvas de intensidad-voltaje como para los potenciales, observamos que las simulaciones para el límite de CL son mejores cuando el potencial aplicado ϕ_L , es mayor. Este hecho se mantiene en ambos materiales, Si y GaAs.

En la Figura 7.3 mostramos el error relativo para las curvas de corriente-voltaje, es decir,

$$(7.3.1) \quad Er = \frac{|J_{CL}(\phi_L) - J_D(\phi_L)|}{J_D(\phi_L)},$$

donde $J_{CL}(\phi_L)$ y $J_D(\phi_L)$ denotan la corriente dada por las simulaciones numéricas para el límite de CL y el sistema determinista, con voltaje aplicado, ϕ_L .

La Figura 7.3 muestra también el error relativo Er , para los dos materiales que estamos considerando. En la figura derecha de abajo damos una comparación entre el error relativo para Si y GaAs a $77K$ de temperatura, lo que muestra que el error Er para GaAs es mayor que Er para Si. Sin embargo, para potenciales altos, los errores relativos para ambos materiales son bastante similares. Por tanto, atendiendo a la comparación entre los errores en los dos materiales, podríamos decir que a una temperatura de $77K$, las simulaciones numéricas para las curvas de corriente-voltaje para Si son más exactas que en GaAs.

Recordamos que en el régimen de CL, se supone: $mV_{th}^2/2 \ll e\phi_L$, por lo que, podemos esperar peores resultados para simulaciones a temperatura ambiente (300K) que a 77K.

En la Figura 7.4 consideramos, para el dispositivo de GaAs, las curvas de intensidad-voltaje para el límite de CL y las comparamos con las simulaciones deterministas a 77K y 300K de temperatura.

La Figura 7.3 muestra el error relativo de las curvas características para GaAs a 77K y 300K de temperatura, lo que prueba que el Er es bastante mayor para 300K que para 77K de temperatura, incluso cuando el potencial aplicado es $\phi_L = 2V$. Para los potenciales, de la misma forma, los resultados son peores que a 77K de temperatura aunque mejoran cuando el potencial es más elevado.

3.2.2. *Densidades de carga y funciones de distribución.* En las Figuras 7.5-7.6 mostramos la densidad de carga para un potencial $\phi_L = 1$ a 77K y 300K de temperatura. En estas figuras se observa que el régimen de CL es bastante mejor para el centro del canal, siendo incluso mejor, para el final de la zona central. Por otra parte, en estas figuras, podemos verificar de nuevo que el límite de CL es mejor para bajas temperaturas.

Las Figuras 7.7-7.8 muestran la distribución estacionaria normalizada a 77K y 300K de temperatura, en $x = 0,18 \mu m$ y $x = 0,34 \mu m$, para el dispositivo de Silicio. En estos puntos podemos esperar resultado más "ajustados" puesto que en el intervalo $[0,15\mu m, 0,35\mu m]$ los resultados son más exactos para la densidad (ver Figura 7.5). Estas computaciones se han realizado sustituyendo la función delta de Dirac por $\frac{1}{\epsilon}M_0(\frac{v}{v_L})$, tomando $\epsilon = \frac{V_{th}}{V_L}$ o equivalentemente $\epsilon = \sqrt{k_B T / 2e\phi_L}$. La Tabla 7.4 muestra ϵ para diferentes temperaturas y potenciales aplicados, estos valores fueron los usados en las Figuras 7.7-7.8. Se observa que para 300K de temperatura, ϵ es alto, por lo que podemos esperar resultados poco exactos para CL. El valor de ϵ a 300K y $\phi_L = 2V$ es muy similar al valor de ϵ a 77K de temperatura y un potencial aplicado de 0,5V.

En las Figuras 7.7-7.8 observamos que las funciones de distribución presentan dos picos, de acuerdo con la velocidad térmica y la velocidad balística $\sqrt{2e\phi(X)/m}$. Ambos picos son capturados por el límite de CL. Sin embargo, el pico que corresponde a la velocidad balística está mejor capturado. Por tanto, es mejor cuando la velocidad balística es alta, es decir, para potenciales altos, (podemos comparar, en la Figura 7.7, los resultados para $\phi_L = 0,5V$ y $\phi_L = 2V$). De nuevo, comparando los resultados para distintas temperaturas, vemos que las simulaciones a 300K de temperatura (Figura 7.8) no son tan buenos como para 77K (Figura 7.7).

En la Figura 7.9 mostramos la distribución normalizada para el dispositivo de GaAs, a 77K de temperatura en los puntos $x = 0,18\mu m$ y $x = 0,34\mu m$, para dos potenciales aplicados diferentes, $\phi_L = 0,5V$ y $\phi_L = 1V$. De nuevo usamos la Maxwelliana para aproximar la función delta (ver la Tabla 7.4 para el valor de ϵ). Para GaAs, la velocidad balística es mayor, por tanto el pico balístico es más

importante que el pico de la velocidad térmica. El límite de CL captura el pico balístico y con $\phi_L = 1V$ podemos observar, también, que el límite CL "trata de capturar la cola térmica". Por tanto, podemos decir que el transporte en GaAs es más balístico que en Si.

3.2.3. *Momentos.* En las Figuras 7.10 y 7.11 estudiamos los tres primeros momentos de la función de distribución, mostrando: la velocidad media, la energía total, la temperatura media y el tercer momento, es decir,

$$u = \frac{J}{\rho(F)}, \quad \frac{\int_{\mathbb{R}^3} |V|^2 F dV}{2\rho(F)} m + e\phi(X), \quad \frac{\int_{\mathbb{R}^3} (V - u)^2 F dV}{e\rho(F)} m, \quad \text{y} \quad \int_{\mathbb{R}^3} V^3 F dV.$$

En las Figuras 7.10-7.11 comparamos los momentos de las simulaciones deterministas con dos posibles aproximaciones numéricas para los momentos del límite de CL: primero, aproximando la distribución CL (7.2.16) reemplazando $\delta(v)$ por la Maxwelliana de varianza ϵ^2 , *Child-Langmuir ϵ* ; segundo, directamente evaluando los momentos operando en (7.2.16), *Límite de Child-Langmuir*. La última aproximación de momentos es la aproximación numérica real para el límite de CL, puesto que tenemos en cuenta la función de distribución límite, (7.2.16).

Tanto para Si como para GaAs, la temperatura considerada fue 77K y $\phi_L = 1V$. Las figuras muestran, que en general, *CL ϵ* es más exacto que el *Límite CL* excepto para la energía total. Puesto que la energía potencial es la misma para *CL ϵ* y *Límite CL*, se puede esperar resultados similares para la energía total.

En el caso de la temperatura media, *CL ϵ* es mejor que el *Límite CL* para Si, mientras para GaAs ocurre lo contrario, es decir, el *Límite CL* aproxima mejor que *CL ϵ* .

El tercer momento para GaAs muestra una aproximación, bastante mala, con el *Límite CL*. Sin embargo, *CL ϵ* da una estimación más precisa. Para Si estas grandes diferencias entre el *Límite CL* y *CL ϵ* desaparecen.

4. Conclusiones

Por medio de un detallado estudio numérico comparativo validamos el límite asintótico de Child-Langmuir para el sistema cinético 1 dimensional de tiempo de relajación constante. Las comparaciones son hechas con el sistema de Boltzmann-Poisson para diodos $N^+ - N^- - N^+$ en Si y GaAs.

Para nuestras simulaciones consideramos el mismo dispositivo para diferentes materiales: Si y GaAs. Comprobamos que para una temperatura de 77K la curva característica de corriente-voltaje para el límite de CL en Si es mejor que en GaAs, aunque, para potenciales aplicados altos, los resultados para ambos materiales tienden a ser similares. Si bien, a 300K de temperatura los resultados son peores para Si que para GaAs.

Las simulaciones numéricas para las densidades prueban que la región en la que la exactitud de los resultados es mayor es la parte central de canal. Así para $x = 0,18\mu m$ y $x = 0,34\mu m$, la función de distribución normalizada captura el pico correspondiente a las velocidades balística y térmica (recordemos que la escala de Child-Langmuir es una escala balística, Nota 7.2.1). Además, nuestras simulaciones muestran que el pico balístico se captura mejor que el térmico. Finalmente, hemos comparado los momentos de la función de distribución obtenida a través de la solución límite de CL, con simulaciones deterministas. Produciendo, en general, mejores resultados sustituyendo en la solución límite de CL la función delta de Dirac por un Maxwelliana apropiada.

El tiempo de computación para el límite de Child-Langmuir es prácticamente instantáneo, comparado con el tiempo de computación para sistema de Boltzmann-Poisson (unos 20 minutos); nuestras simulaciones se han desarrollado en un Pentium II 50 MHz. Esta gran diferencia de tiempo nos hace pensar que las simulaciones de límite de CL pueden ser útiles para proporcionar "test" iniciales para las curvas características de corriente-voltaje y para la solución del sistema estacionario de Boltzmann-Poisson vía (7.2.16) con un coste computacional muy bajo. Por ejemplo, la función de distribución del límite de CL puede ser tomado como un dato inicial más exacto en el esquema directo para resolver el sistema estacionario de Boltzmann-Poisson, lo que podría acelerar la computación. Por otra parte, los resultados del límite de CL pueden considerarse como una herramienta rápida para computar las curvas características de corriente-voltaje si nos permitimos un cierto error relativo de acuerdo con la Figura 7.3. Hacemos notar que el límite de CL es válido para situaciones (temperaturas bajas, potenciales aplicados altos) en las que otras aproximaciones, como drift-diffusion o simulaciones hidrodinámicas, podrían no ser aplicables.

Concluimos diciendo que las simulaciones numéricas están en concordancia con los resultados que uno espera si se tiene en mente que la ley de Child-Langmuir es mejor para potenciales aplicados altos o para retículos de temperatura bajas.

En esta línea de trabajo pretendemos continuar con el estudio del límite asintótico de Child-Langmuir para semiconductores, pero en el caso 3 dimensional en velocidad y donde la ecuación que modeliza el movimiento de los electrones sea la ecuación de Boltzmann y no una aproximación. En esta dirección nos planteamos un objetivo doble: demostración de la convergencia al límite de CL y nuevamente, validación numérica del mismo.

$x: \mu m$	Potencial: V
Temperatura: K	Velocidad media: $10^7 cm/s$
Densidad: cm^{-3}	Corriente: $10^2 A/cm^2$
Energía: eV	Tercer momento: $10^{21} s^{-3}$
Temperatura media: eV	Función de distribución normalizada: $10^{-7} s/cm$

TABLA 7.1. Unidades.

$m = 0,26 \times 0,9109 \cdot 10^{-30} Kg$	$\mu = 1323 \frac{cm^2}{Vs}$
$\epsilon_0 = 11,7 \times 8,85419 \cdot 10^{-14} F cm^{-1}$	$\tau \approx 1,956 \cdot 10^{-13} s$

TABLA 7.2. Parámetros para Silicio.

$m = 0,065 \times 0,9109 \cdot 10^{-30} Kg$	$\mu = 34903,4 \frac{cm^2}{Vs}$
$\epsilon_0 = 13,2 \times 8,85419 \cdot 10^{-14} F cm^{-1}$	$\tau = 12,9 \cdot 10^{-13} s$

TABLA 7.3. Parámetros para GaAs.

ϕ_L	0,5	1	2
ϵ a 77K	0,0815	0,0576	0,0407
ϵ a 300K	0,1608	0,1137	0,0804

TABLA 7.4. Valores de ϵ .

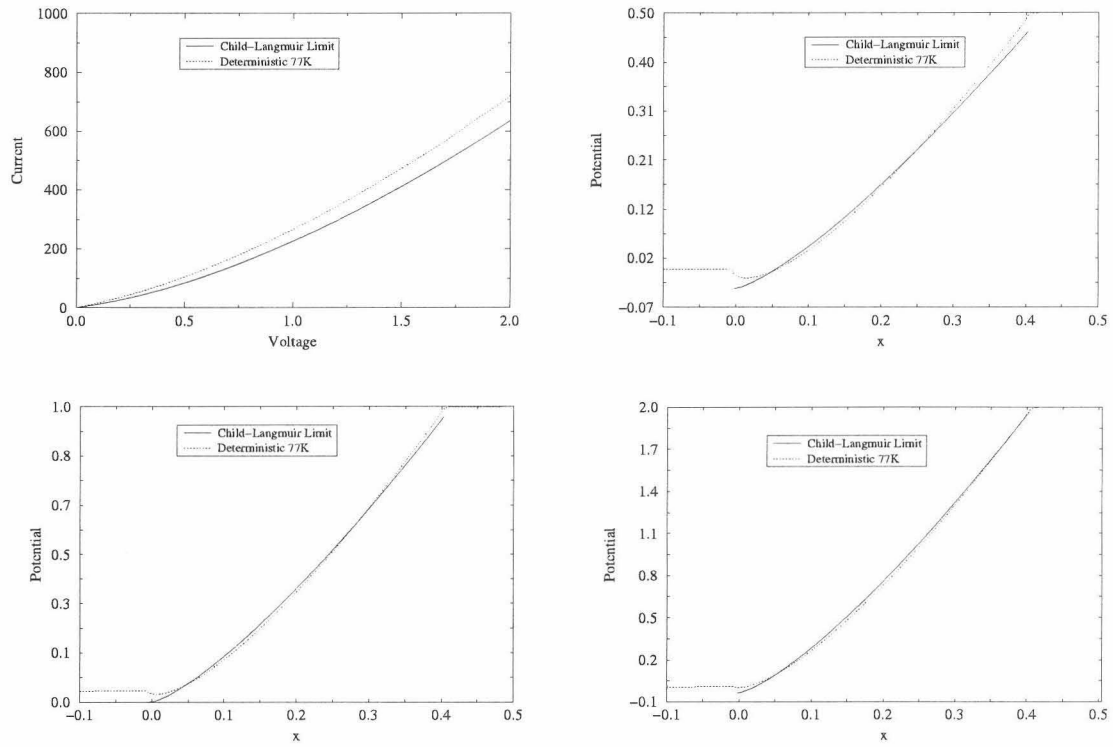


FIGURA 7.1. Para el dispositivo de Silicio, a 77K de temperatura, comparación numérica de las curvas de corriente-voltaje (arriba a la izquierda) y de los potenciales para tres diferentes ϕ_L ; 0,5V (arriba a la derecha), 1V (abajo a la izquierda), 2V (abajo a la derecha). La influencia de la barrera de potencial (built-in potential), se ha tenido en cuenta para CL.

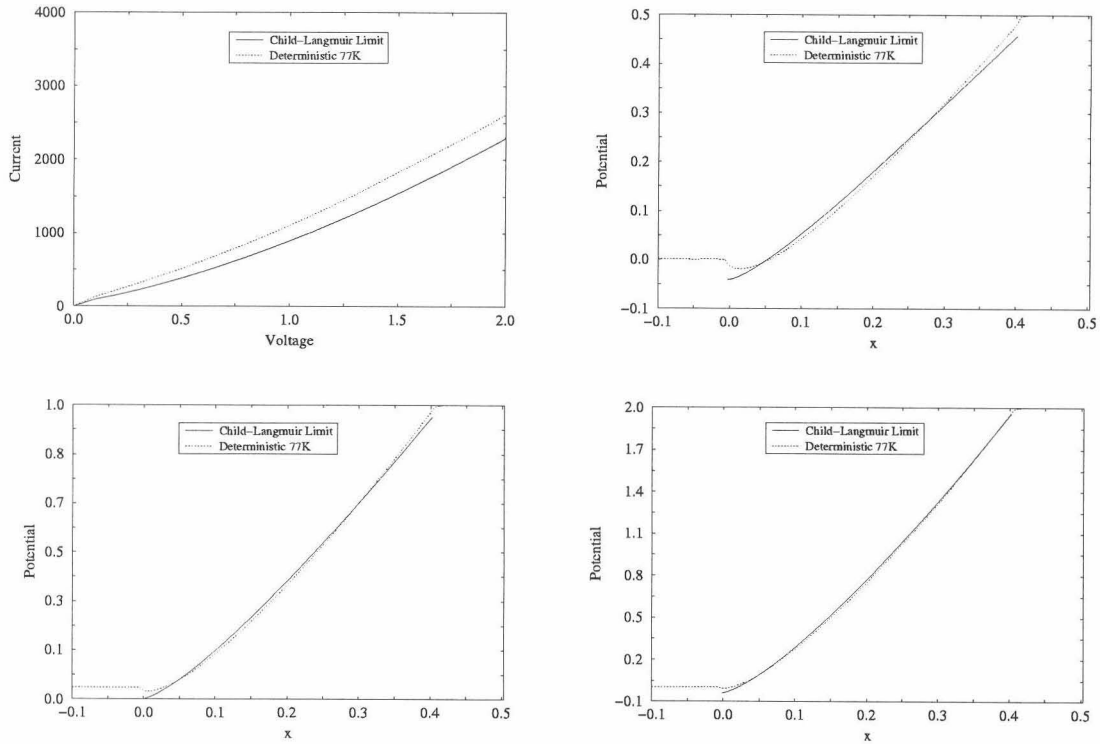


FIGURA 7.2. Para el dispositivo de GaAs, a 77K de temperatura, comparación numérica de las curvas de corriente-voltaje (arriba a la izquierda) y de los potenciales para tres diferentes ϕ_L ; 0,5V (arriba a la derecha), 1V (abajo a la izquierda), 2V (abajo a la derecha). La influencia de la barrera de potencial (built-in potential), se ha tenido en cuenta para CL.

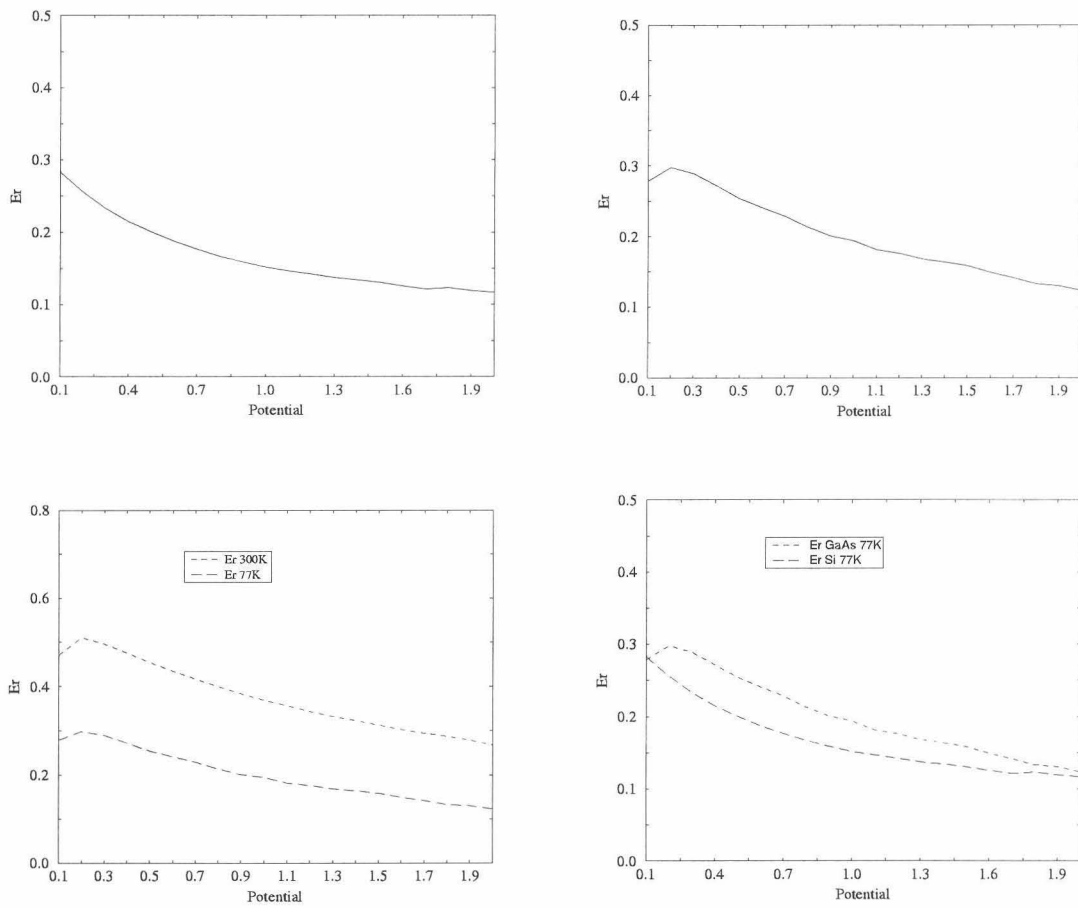


FIGURA 7.3. Error relativo de las curvas características de corriente-voltaje del límite de CL para Si a 77K de temperatura (arriba a la izquierda), para GaAs a 77K de temperatura (arriba a la derecha), comparación para GaAs a 77K de temperatura y a 300K de temperatura (abajo a la izquierda), comparación para Si y para GaAs a 77K de temperatura (abajo a la derecha).

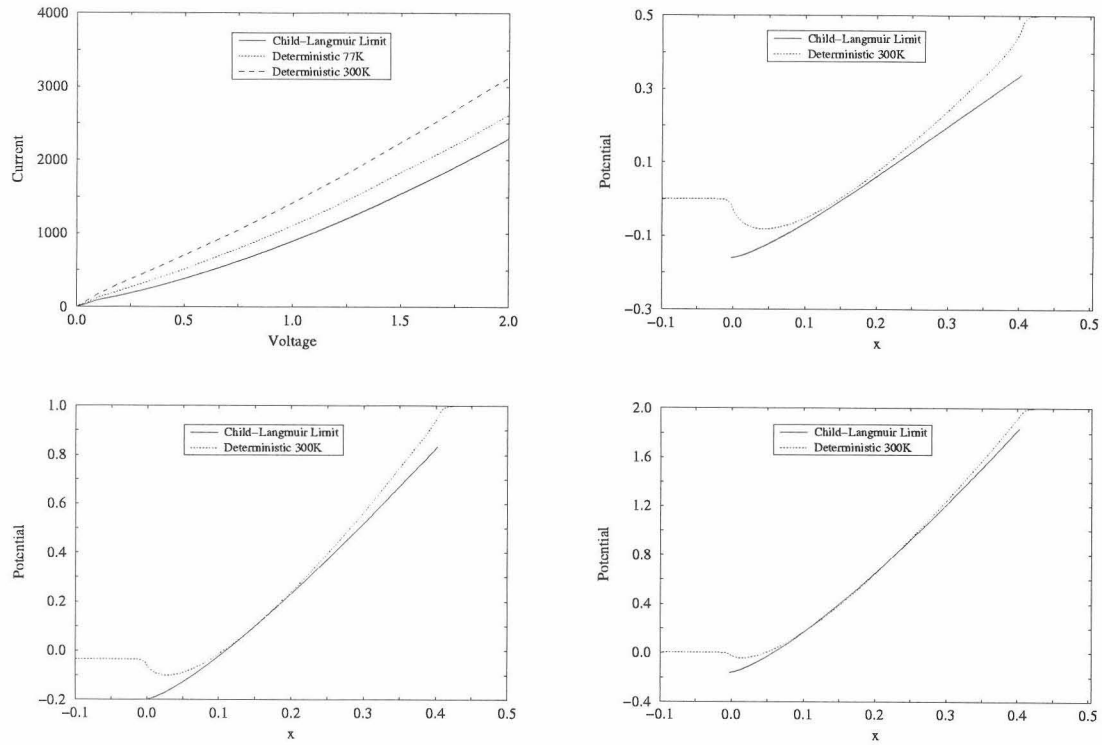


FIGURA 7.4. Para el dispositivo de GaAs, a 300K de temperatura, comparación numérica de las curvas características de corriente-voltaje (arriba a la izquierda) y los potenciales de tres diferentes ϕ_L ; 0,5V (arriba a la derecha), 1V (abajo a la izquierda), 2V (abajo a la derecha). La influencia de la barrera de potencial (built-in potential), se ha tenido en cuenta para CL.

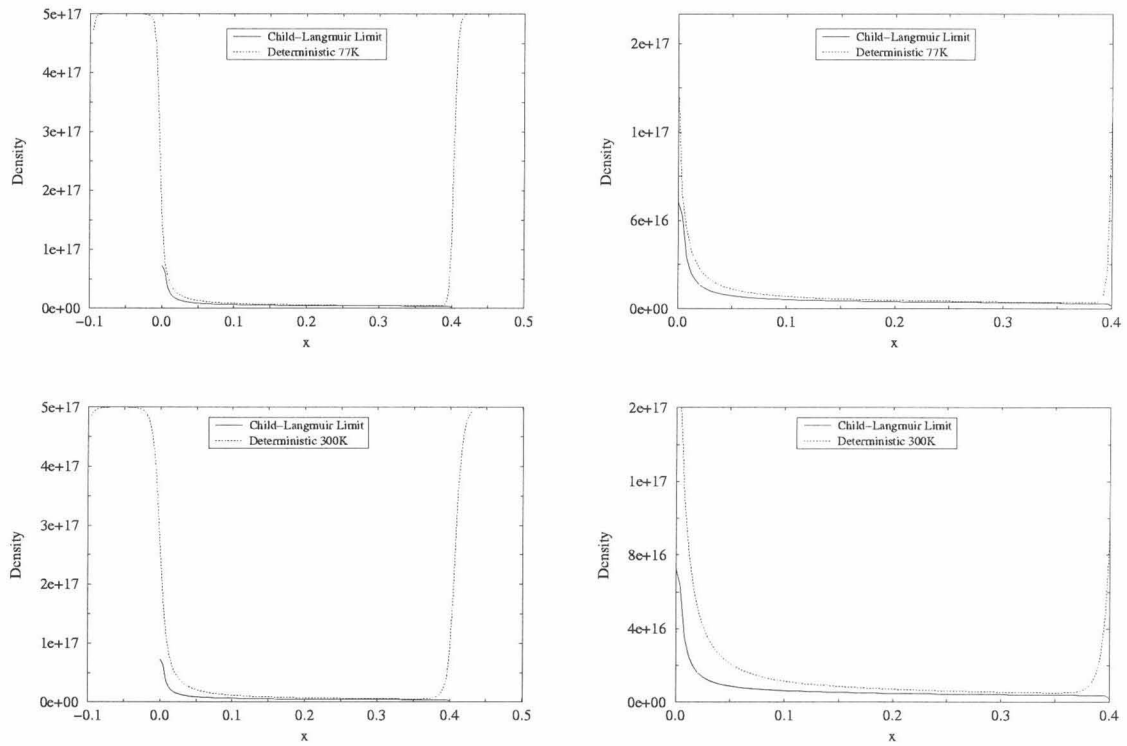


FIGURA 7.5. Para Silicio con un potencial aplicado de 1V, comparación numérica de la densidad de carga a 77K de temperatura (arriba) y a 300K de temperatura (abajo).

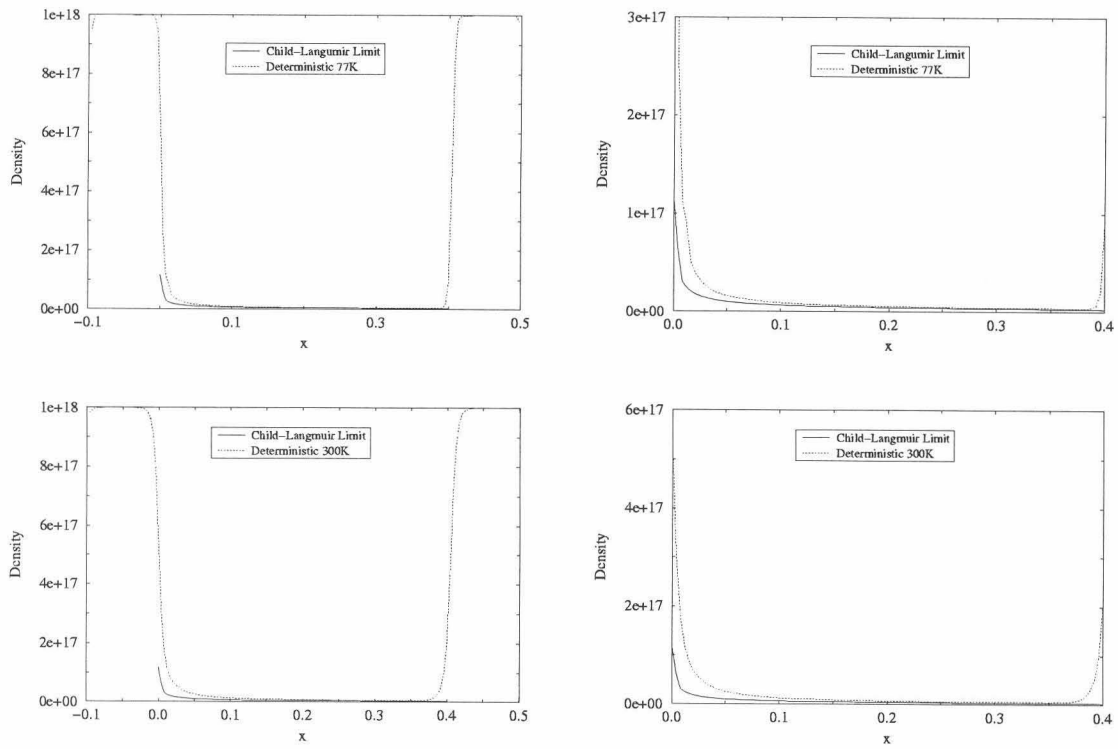


FIGURA 7.6. Para GaAs con un potencial aplicado de 1V, comparación numérica de la densidad de carga a 77K de temperatura (arriba) y a 300K de temperatura (abajo).

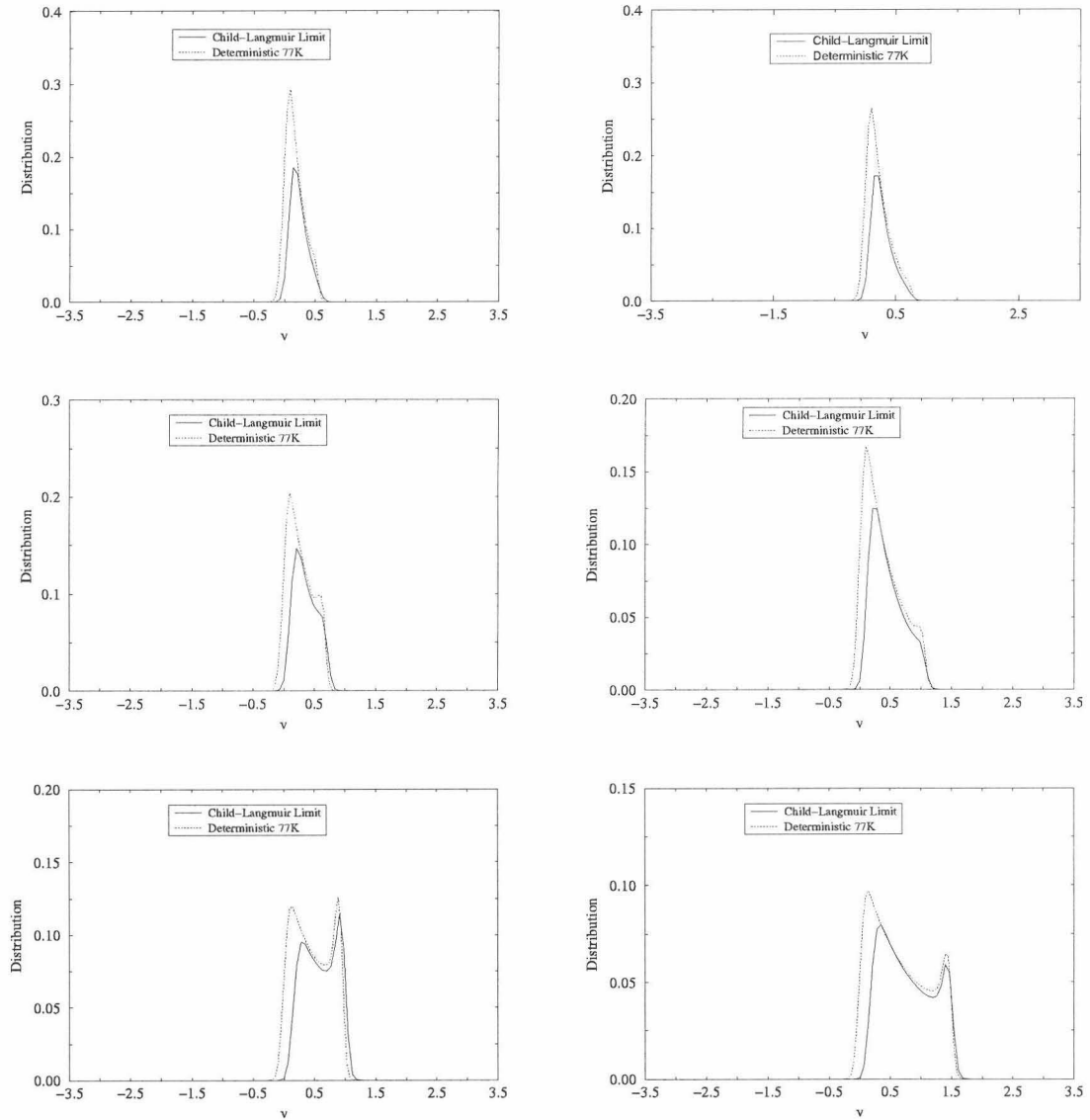


FIGURA 7.7. Para Silicio, a 77K de temperatura, comparación numérica de distribuciones normalizadas estacionarias, en varios puntos fijos de x para diferentes potenciales aplicados $0,5V$; en $x = 0,18\mu m$ (arriba a la izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (arriba a la derecha), $1V$; en $x = 0,18\mu m$ (centro a la izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (centro a la derecha) y $2V$; en $x = 0,18\mu m$ (abajo a la izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (abajo a la derecha).

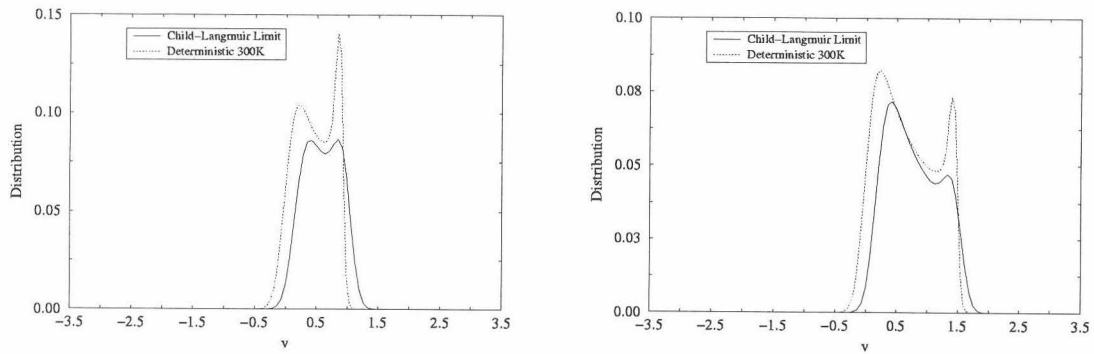


FIGURA 7.8. Para Silicio, a 300K de temperatura, comparación numérica de las distribuciones normalizadas para $\phi_L = 2V$ en $x = 0,18\mu m$ (izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (derecha).

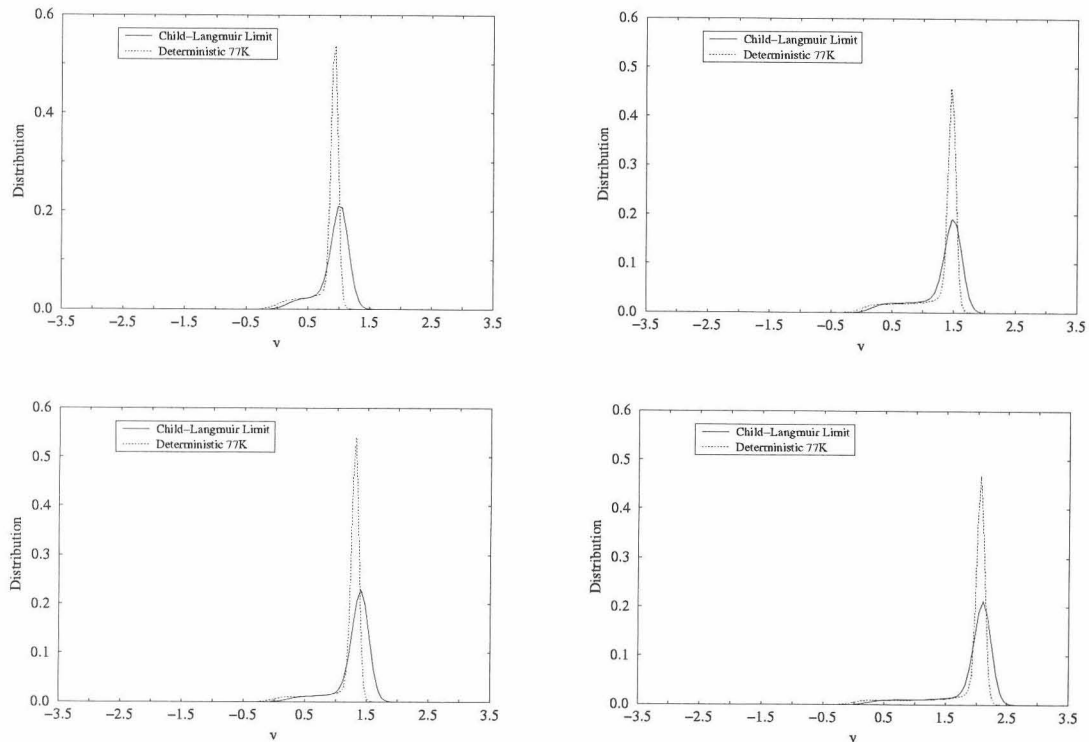


FIGURA 7.9. Para GaAs, a 77K de temperatura, comparación numérica de las distribuciones estacionarias, en varios puntos fijos x para diferentes potenciales aplicados: 0,5V; en $x = 0,18\mu m$ (arriba a la izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (arriba a la derecha) y 1V; en $x = 0,18\mu m$ (abajo a la izquierda) y en $x = 0,34\mu m$ (abajo a la derecha).

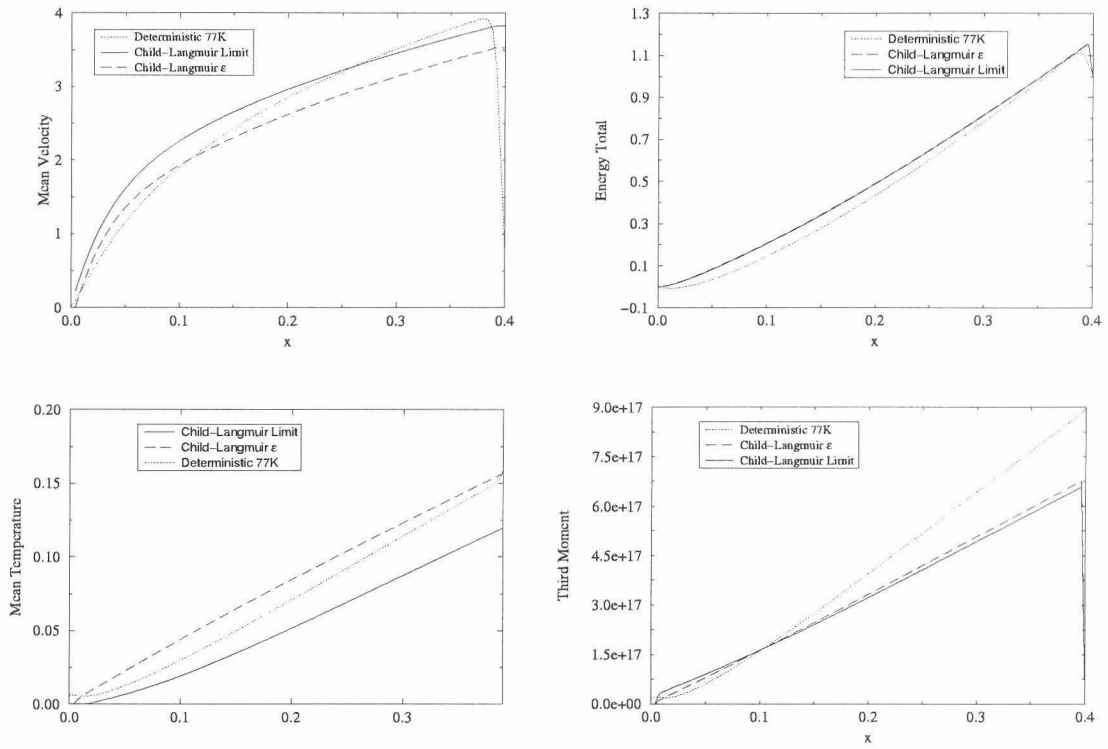


FIGURA 7.10. Para Silicio, a 77K de temperatura y un potencial aplicado $\phi_L = 1V$, comparaciones numéricas de la velocidad media (arriba a la izquierda), la energía total (arriba a la derecha), la temperatura media (abajo a la izquierda) y el tercer momento (abajo a la derecha).

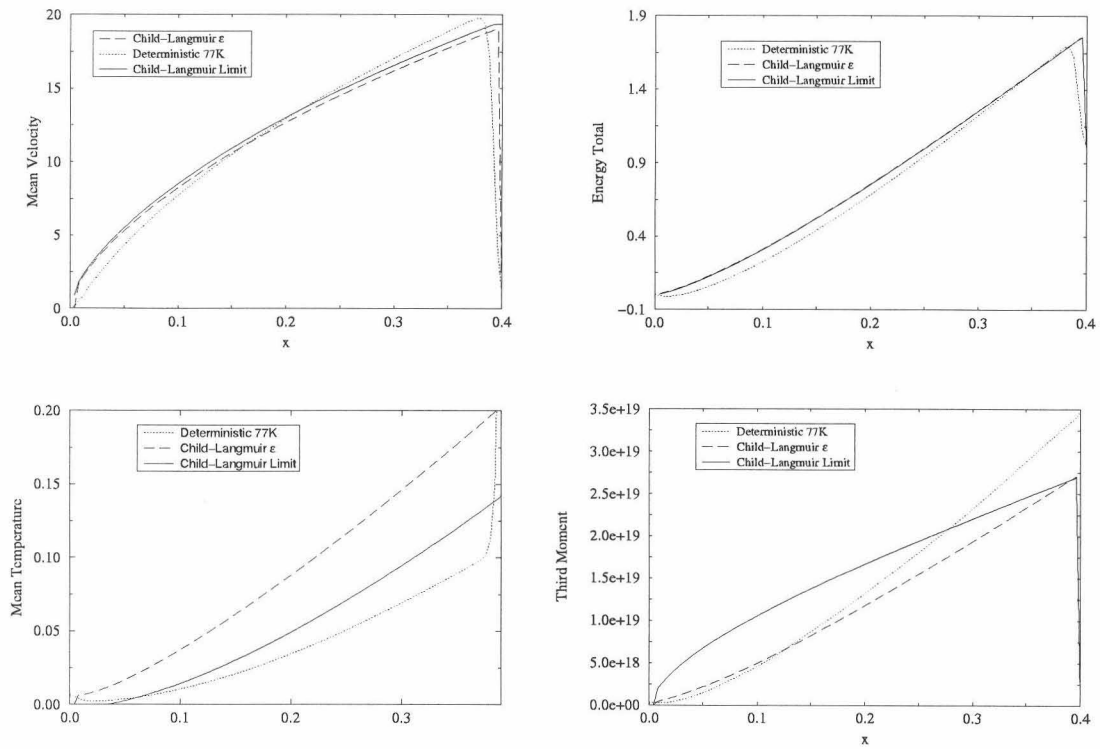


FIGURA 7.11. Para GaAs, a 77K de temperatura y un potencial aplicado $\phi_L = 1V$, comparación numérica de la velocidad media (arriba a la izquierda), la energía total (arriba a la derecha), la temperatura media (abajo a la izquierda) y el tercer momento (abajo a la derecha).

Bibliografía

- [1] F. ALABAU, K. HAMDACHE, Y.J. PENG, *Asymptotic analysis of the transient Vlasov-Poisson system for a plane diode*, *Asymptot. Anal.* 16, 1, (1998), pp. 25–48.
- [2] H.U. BARANGER, J.W. WILKINS, *Ballistic structure in the electron distribution function of small semiconducting structures: General features and specific trends*, *Physical Review B*, 36, (1987), pp. 1487-1502.
- [3] N. BEN ABDALLAH, *The Child-Langmuir regime for electron transport in a plasma including a background of positive ions*, *Math. Models Methods Appl. Sci.* 4, 3, (1994), pp. 409-438.
- [4] N. BEN ABDALLAH, *Convergence of the Child-Langmuir asymptotics of the Boltzmann equation of semiconductors*, *SIAM J. Math. Anal.* 27, 1, (1996), pp. 92-109.
- [5] N. BEN ABDALLAH, *Etude de modèles asymptotiques de transport de particules chargées: Asymptotique de Child-Langmuir*, Memoria de tesis doctoral.
- [6] N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND, *The Child-Langmuir law for the Boltzmann equation of semiconductors*, *SIAM J. Math. Anal.* 26, (1995), pp. 364-398.
- [7] N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND, *The Child-Langmuir law in the kinetic theory of charged particles: semiconductors models. Mathematical problems in semiconductor physics* (Rome, 1993), 76–102, Pitman Res. Notes Math. Ser., 340, Longman, Harlow, 1995.
- [8] N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND, F. MÉHATS, *The Child-Langmuir asymptotics for magnetized flows*, *Asymptot. Anal.* 20, 2, (1999), pp. 97-13.
- [9] N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND, C. SCHMEISER, *On a mathematical model of hot-carrier injection in semiconductors*, *Math. Meth. in the Appl. Sci.*, 17, (1994), pp. 1193-1212.
- [10] J. A. CARRILLO, I. M. GAMBA, C.-W. SHU, *Computational macroscopic approximations to the 1-D relaxation-time kinetic system for semiconductors*, *Physica D*, 146, (2000), pp. 289-306.
- [11] P. DEGOND, P. A. RAVIART, *An asymptotic analysis of the one-dimensional Vlasov-Poisson system: the Child-Langmuir law*, *Asymptotic Anal.*, 4, (1991), pp. 187-214.
- [12] J. A. CARRILLO, I. M. GAMBA, O. MUSCATO, C.-W. SHU, *Comparison of Monte Carlo and deterministic simulations of a silicon diode*, aceptado en IMA series.
- [13] P. DEGOND, P. A. RAVIART, *On a penalization of the Child-Langmuir emission condition for the one-dimensional Vlasov-Poisson equation*, *Asymptotic Anal.*, 6, (1992), pp. 1-27.
- [14] G. JIANG, C.-W. SHU, *Efficient implementation of weighted ENO schemes*, *J. Comput. Phys.*, 126, (1996), pp. 202-228.
- [15] I. LANGMUIR, K. T. COMPTON, *Electrical discharges in gases: Part II, fundamental phenomena in electrical discharges*, *Rev. Mod. Phys.*, 3, (1931), pp. 191-257.
- [16] P.A. MARKOWICH, C.A. RINGHOFER, C. SCHMEISER, *Semiconductor Equations*, Springer, New York, 1990.
- [17] C.-W. SHU, *Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*, B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu and E. Tadmor (Editor: A. Quarteroni), Lecture Notes in Mathematics, volume 1697, Springer, (1998), pp. 325-432.

- [18] M.S. SHUR, L.F. EASTMAN, *Ballistic transport in semiconductors at low temperature for low-power high-speed logic*, IEEE Trans. Electron Dev. ED-26, (1979), pp. 1677-1683.
- [19] M.S. SHUR, L.F. EASTMAN, *Near ballistic transport in GaAs devices at 77K*, Solid-State Electron, 24, (1991), pp. 11-18.

CAPÍTULO 8

Simulación numérica de dispositivos semiconductores basados en GaAs

En este capítulo ¹ ofreceremos un resolutor determinista del sistema 1dimensional de Boltzmann-Poisson para un dispositivo de GaAs en semiconductores. Seguiremos una filosofía similar a la desarrollada en [1] para un dispositivo de Silicio, con la diferencia sustancial de que en nuestro caso los electrones se encuentran en diversos valles, por lo que tenemos un sistema de tres ecuaciones: dos correspondientes a la ecuación de Boltzmann en cada uno de los valles y la tercera, la ecuación de Poisson, que nos proporciona el acoplamiento entre ambas.

Como decíamos en el Capítulo 5, si queremos resolver numéricamente este sistema harían falta 4 variables, puesto que estamos en un sistema 1 dimensional (más una variable de tiempo). Pero la fenomenología propia del dispositivo en cuestión nos permite reducirnos a tres variables: posición, energía y ángulo con respecto al eje de la dirección del campo de fuerza, debido a la simetría cilíndrica. Los primeros en desarrollar esta idea fueron Fatemi y Odeh (1993), [6]. Que escribieron el sistema de Boltzmann-Poisson, con aproximación parabólica de la banda, en coordenadas esféricas y resolvieron la ecuación hiperbólica resultante por métodos simples de primer orden en la dirección del viento (“upwinding”) para las variables espacio-momento y métodos de tipo predictor-corrector para la evolución en tiempo. Este método presentaba un problema: la singularidad del cambio de variables, que resuelven prescindiendo de un entorno pequeño en los puntos singulares. Recientemente (2001) Majorana y Pidatella [9], ofrecen un nuevo cambio de variable aplicable al caso de banda no parabólica. Con este nuevo cambio el sistema de Boltzmann-Poisson se transforma en una ley de conservación más simple que el sistema obtenido en [6]. Ley de conservación que resuelven mediante la combinación de un método de caja en las variables de energía y ángulo y métodos clásicos de discretización a favor del viento para ecuaciones de advección (o de transporte) en la variable espacial.

¹Los contenidos de este capítulo constituyen un trabajo en colaboración con los profesores José Antonio Carrillo y Armando Majorana.

causa inestabilidades que provocan emisiones electromagnéticas. Una diferencia más con Silicio, es la presencia de fenómenos de dispersión debidos a fonones óptico polares, típicos de semiconductores polares.

La estructura de este capítulo será como sigue: en la Sección 1 estudiaremos las principales propiedades del transporte de electrones en GaAs; analizaremos las bandas de energía y los fenómenos de scattering. En la Sección 2 analizaremos el cambio de variable propuesto por Majorana y Piddatella, para nuestro sistema, recogiendo los detalles de cálculo en un apéndice al capítulo. La Sección 3 será una rápida enumeración del esquema numérico que se seguirá en las secciones siguientes, ya que el detalle de los métodos empleados fue recogido en el Capítulo 6. Como un primer paso en el análisis del dispositivo estudiaremos el material, mediante la simulación del bulk, Sección 4. Finalmente simularemos el dispositivo completo, Sección 5 e incluiremos en la última sección las conclusiones que se derivan del análisis de nuestras simulaciones.

Sólo nos resta decir que, este último capítulo, marca también el principio de nuevos trabajos en esta dirección: comparación con la simulación directa de Monte Carlo para todo el dispositivo, generalización al caso 2D,

1. Propiedades principales del transporte de electrones en GaAs

Una introducción general a la teoría de semiconductores fue dada en el Capítulo 5 por lo que nos centraremos aquí, sólo, en el estudio de las propiedades que se presenta durante el transporte de electrones en un dispositivo de GaAs. Analizaremos la estructura de las bandas de energía y desglosaremos, en detalle, los fenómenos de scattering que disturban el movimiento de los electrones a lo largo de sus trayectorias.

1.1. Bandas de energía. Debido a que los electrones se encuentra en su mayoría, en la banda de conducción más baja, dejando prácticamente despobladas las otras bandas, los dispositivos que consideraremos sólo serán descritos por esta banda. Además en esta banda, los electrones se encuentran, principalmente, en los entornos de la energía local mínima, en los denominados *valles*.

La banda de conducción más baja en el caso de GaAs tiene un mínimo absoluto en el centro de la zona de Brillouin, Γ -punto y mínimos locales en los 4 L -puntos a lo largo de las orientaciones cristalográficas. Existen, también, otros mínimos que tienen importancia sólo bajo campos eléctricos altos, pero que aquí despreciaremos.

Como explicábamos en el Capítulo 5, la energía en cada valle se representa por medio de aproximaciones analíticas, siendo las más comunes la parabólica y la relación de dispersión de Kane. Esta última será la que consideraremos,

Este cambio de variables será el utilizado y nos facilitará enormemente la simulación del dispositivo, principalmente por dos razones: transforma el sistema de Boltzmann-Poisson en una ley de conservación y el término de colisión resultante puede evaluarse fácilmente. Esta ley de conservación es lineal si nos olvidamos de la ecuación de Poisson. La resolveremos usando un potente método en diferencias finitas: el esquema de quinto orden WENO (recordemos que debe entenderse de quinto orden en los puntos regulares), para las aproximaciones de las derivadas en el espacio de fases y evolucionaremos en tiempo mediante un método explícito TVD de Runge-Kutta de tercer orden (ver Capítulo 6). Las razones para usar estos robustos métodos se deben a: por un lado, evitar las oscilaciones que se presentan en los alrededores de las regiones en las que existen “abruptos” gradientes espaciales (debidos a la presencia de concentraciones de dopantes discontinuas, con gran salto en la discontinuidad), cuando se consideran métodos de alto orden en la dirección del viento. Y por otro parte, la búsqueda de un resolutor rápido en tiempo con vistas a evitar métodos que requieran mucho espacio de memoria y con ello poder extrapolar en trabajos futuros los resultados al caso 2D, como se ha hecho en el caso de Si [2]

Podemos encontrar resultados que analizan el material, simulando el sistema homogéneo, “bulk”: mediante el principio de máxima entropía, [10] y por medio de la simulación directa de Monte Carlo [11]. En este último podemos encontrar también simulaciones para las cantidades macroscópicas: densidad y velocidad. El método de partículas fue usado en [3, 4, 5] para ofrecer simulaciones deterministas del sistema de Boltzmann. Tanto las simulaciones mediante Monte Carlo como las resultantes usando el método de partículas son bastante “ruidosas” y no ofrecen una aproximación explícita de la función de distribución. A cambio de reducir el “ruido” tenemos un coste computacional adicional. El esquema numérico que nosotros consideramos en este capítulo permite, con un coste más bajo, resolver el sistema sin “ruido” y proporcionar una aproximación determinista de la función de distribución.

Antes de pasar al desarrollo del capítulo en sí, nos gustaría resaltar algunas propiedades del material con el que estamos trabajando: Arsenuro de Galio (GaAs). GaAs es un semiconductor compuesto comúnmente usado para generar radiaciones de microondas. Su principal peculiaridad es la *conductividad diferencial negativa*, que consiste en la presencia de un campo umbral, que marca el comportamiento de la velocidad media: la velocidad, vista como función del campo eléctrico, experimenta un rápido crecimiento cuando el campo eléctrico varía entre cero y ese campo umbral, y pasado éste la velocidad decrece estrepitosamente hasta alcanzar la velocidad de saturación. Este fenómeno no se observa en Silicio, ya que en este material la velocidad media es una función creciente del campo eléctrico. La falta de monotonía de la velocidad en función del campo eléctrico

obteniendo la siguiente relación entre la energía \mathcal{E}_A y el vector de onda \mathbf{k}_A :

$$(8.1.1) \quad \mathcal{E}_A(\mathbf{k}_A) = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}_A|^2}{m_A^* + \sqrt{(m_A^*)^2 + 2\alpha_A m_A^* \hbar^2 |\mathbf{k}_A|^2}} \quad A = \Gamma, L$$

donde recordamos que α_A es el *factor de no parabolicidad*.

Los electrones en cada valle son tratados de forma distinta. Son considerados como poblaciones diferentes, siguiendo por tanto, distintas funciones de distribución. A nivel cinético, cada una de estas poblaciones queda descrita por una ecuación de Boltzmann

$$(8.1.2) \quad \frac{\partial f_\Gamma}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_\Gamma} \mathcal{E}_\Gamma \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\Gamma - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_\Gamma} f_\Gamma = Q_\Gamma(f_\Gamma, f_L)$$

$$(8.1.3) \quad \frac{\partial f_L}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_L} \mathcal{E}_L \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_L - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}_L} f_L = Q_L(f_L, f_\Gamma).$$

La ecuación de Poisson nos proporciona una relación entre ambas poblaciones

$$(8.1.4) \quad \Delta V = \frac{e}{\epsilon_0} [\rho(t, \mathbf{x}) - C(\mathbf{x})],$$

$$(8.1.5) \quad \mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} V,$$

donde $f_A(t, \mathbf{x}, \mathbf{k}_A)$ es la función de distribución de electrones en el valle A y \mathbf{k}_A es el vector de onda correspondiente, e es la carga elemental del electrón, \mathbf{E} el campo eléctrico, \hbar la constante de Planck reducida, ϵ_0 la constante dieléctrica y C la concentración de dopantes, que tiene en cuenta la concentración de impurezas de los iones aceptores y de los donadores. ρ es la densidad total de electrones, que viene dada por la suma de las densidades en los distintos valles:

$$(8.1.6) \quad \rho(t, \mathbf{x}) = Z_{L\Gamma} \rho_\Gamma(t, \mathbf{x}) + Z_{\Gamma L} \rho_L(t, \mathbf{x}),$$

donde hemos adoptado la notación ρ_Γ , ρ_L para referirnos a las densidades en los valles Γ y L , respectivamente, es decir,

$$\rho_\Gamma(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f_\Gamma(\mathbf{k}_\Gamma) d\mathbf{k}_\Gamma, \quad \rho_L(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f_L(\mathbf{k}_L) d\mathbf{k}_L.$$

Y $Z_{\Gamma L}$ es la degeneración del valle Γ a los valles L y $Z_{L\Gamma}$ la degeneración de los valles L al valle Γ , (ver Tabla 8.2), los cuatro valles L son considerados iguales debido a la simetría del cristal. V es el potencial eléctrico.

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_A} \mathcal{E}_A$$

es la velocidad de los electrones en el valle A.

Los términos de la derecha en las ecuaciones (8.1.2)-(8.1.3) son los factores de colisión que modifican el transporte de los electrones. Los fenómenos de *scattering* que intervienen en el movimiento los estudiamos en detalle a continuación.

1.2. Fenómenos de scattering. Para denotar de una forma conjunta la expresión del operador de colisión en ambos valles vamos a adoptar la siguiente notación:

$$Q_C(f_A, f_B),$$

donde A, B, C pueden ser Γ o L .

Los electrones, cuando se mueven en un semiconductor, sufren diversos mecanismos de scattering que les desvían de las trayectorias que seguirían, si sólo se viesen afectados por el operador de transporte. Estos fenómenos podemos dividirlos en dos grupos: *intravalles* o *intervalles*. *Intravalles* si bajo la influencia de los scattering los electrones pueden permanecer en su mismo valle e *intervalles* si los electrones sufren un "salto" a otro valle. Por ello podemos adoptar la notación:

$$Q(f_A) = Q(f_A, f_A) + \sum_B Q(f_A, f_B),$$

que representa el operador de colisión en el valle A , descompuesto en scatterings de intravalles y scatterings de intervalles.

Los fenómenos de scattering que detallaremos a continuación son obtenidos gracias a la *regla de oro de Fermi* [7, 8]. No tendremos en cuenta los fenómenos de scattering electrón-electrón porque son relevantes sólo bajo concentraciones de dopantes muy altos. Tampoco consideraremos los scatterings derivados de las imperfecciones estacionarias del cristal.

Tendremos en cuenta los siguientes mecanismos de scattering:

- impurezas,
- fonón acústico,
- fonón óptico no polar,
- fonón óptico polar.

Atendiendo a la clasificación que formulábamos al comienzo, encontramos que todos los fenómenos de scattering considerados son intravalles, excepto el fonón óptico no polar.

Estos fenómenos de scattering se ven reflejados en el operador de colisión. Considerando una aproximación no degenerada, es decir, una linealización del operador con respecto a las funciones de distribución (ver Capítulo 5), podemos

escribir esquemáticamente los dos sumandos $Q(f_A)$ como sigue:

$$(8.1.7) \quad Q_A^{(\gamma)}(f_A, f_A) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[S^{(\gamma)}(\mathbf{k}'_A, \mathbf{k}_A) f_A(\mathbf{k}'_A) - S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) f_A(\mathbf{k}_A) \right] d\mathbf{k}'_A,$$

$$(8.1.8) \quad Q_A^{(\gamma)}(f_A, f_B) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A) f_B(\mathbf{k}_B) - S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) f_A(\mathbf{k}_A) \right] d\mathbf{k}_B.$$

donde $S^{(\gamma)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo de un estado \mathbf{k} a un estado \mathbf{k}' . Usaremos γ para denotar los distintos tipos de scattering. Los primeros términos de (8.1.7) y (8.1.8) representa la ganancia, mientras que los segundos la pérdida de electrones con vector de ondas \mathbf{k} .

Por el principio de equilibrio microscópico ("detailed balance") tenemos

$$S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A) = S^{(\gamma)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}'_B + \Delta_{AB}}{K_B T}\right),$$

donde K_B es la constante de Boltzmann, T la temperatura del retículo y $\Delta_{AB} = \mathcal{E}_{0A} - \mathcal{E}_{0B}$ la diferencia entre los mínimos de energía de los valles, (ver Tabla 8.2).

1.2.1. *Scattering causados por impurezas.* En un dispositivo de un semiconductor, con regiones altamente dopadas, el movimiento de los electrones se ve sustancialmente afectado por las impurezas ionizadas que se distribuyen aleatoriamente.

La probabilidad de transición para el scattering por impurezas, que es un mecanismo elástico de interacción es,

$$S^{(imp)}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) = \frac{K_{imp}}{(|\mathbf{k}_A - \mathbf{k}'_A|^2 + \beta^2)^2} \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A),$$

con

$$K_{imp} = \frac{N_I Z^2 e^4}{4\pi \hbar \epsilon_0^2} \quad \beta = \sqrt{\frac{e^2 N_I}{\epsilon_0 k_B T}},$$

donde K_{imp} es un parámetro físico, β es la longitud inversa de Debye y δ es la función delta de Dirac. N_I es la concentración de impurezas y Ze la carga. (Ver Tabla 8.2).

1.2.2. *Scattering causados por fonones.* El movimiento de los electrones en un semiconductor puede verse afectado también, por la perturbación de la periodicidad del potencial del cristal. Un desplazamiento pequeño de un ion en el cristal produce, por ejemplo, un pequeño cambio en el potencial del cristal, y la desviación del potencial del cristal de su periodicidad podría expresarse teóricamente, en términos de la amplitud de las vibraciones del retículo. Pero, debido a la dificultad para conocer el propio potencial del cristal, esta desviación de la periodicidad se expresa de un modo bastante fenomenológico, mediante el *método de deformación del potencial*. La onda natural de la vibración del retículo llamada *fonón* influye

sobre el movimiento de los electrones. Este tipo de interacción *electrón-fonón* es uno de los fenómenos de dispersión dominante en los dispositivos semiconductores pequeños. Los electrones, en estos dispositivos, pueden adquirir niveles de energía altos cuando se someten a un campo eléctrico alto. Entonces se producen procesos de scattering debidos a la emisión espontánea de fonones.

Hay dos clases de fonones: acústicos y ópticos. Para el caso acústico, los átomos vecinos se desplazan en el mismo sentido, siendo la tensión del desplazamiento la causante del espaciamiento del retículo. Para los fonones ópticos, los átomos vecinos se desplazan en sentido opuesto, por tanto, el desplazamiento produce directamente, un cambio en el espaciamiento del retículo. Hacemos notar que en la literatura este tipo de scattering pueden encontrarse bajo el nombre de *scattering de deformación del potencial*.

GaAs es un material semiconductor compuesto, y en este tipo de semiconductores, además de scattering de deformación del potencial (acústico y óptico) están presentes otras interacciones "fuertes". Estas interacciones son debidas a la polarización de las ondas. El desplazamiento del retículo causado por los fonones perturba el momento dipolar entre los átomos, lo que provoca un campo eléctrico que dispersa las cargas. Los scattering polares pueden ser debidos tanto a fonones acústicos como ópticos, denominados, respectivamente, *scattering piezoeléctricos* y *polar ópticos*. Este último es un fenómeno de scattering dominante en los dispositivos de semiconductores compuestos. Mientras que la contribución del primero es marginal a temperatura ambiente en semiconductores muy puros.

La probabilidad de transición para scatterings producidos por fonones acústicos en su aproximación elástica, válida cuando la energía térmica es mucho más grande que la del fonón que interviene en el scattering, es

$$S^{(ac)}(k_A, k'_A) = K_{ac} \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A),$$

con

$$K_{ac} = \frac{k_B T \Xi_d^2}{4\pi^2 \hbar \rho_0 v_s^2},$$

donde K_{ac} es un parámetro físico (ver Tabla 8.2) y δ es la función delta de Dirac.

Para interacciones con fonones no-polar óptica, la velocidad de transición viene dada por la suma de un término de absorción y un término de emisión,

$$S^{(np)}(k_A, k_B) = Z_{AB} K_{np} \left[n_{np} \delta(\mathcal{E}_B - \mathcal{E}_A - \hbar\omega_{np}^+) + (1 + n_{np}) \delta(\mathcal{E}_B - \mathcal{E}_A + \hbar\omega_{np}^-) \right],$$

con

$$K_{np} = \frac{(D_t K)^2}{8\pi^2 \rho_0 \omega_{np}}, \quad n_{np} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{np}/(k_B T)) - 1}$$

$$\hbar\omega_{np}^+ = \hbar\omega_{np} + \Delta_{AB}, \quad \hbar\omega_{np}^- = \hbar\omega_{np} - \Delta_{AB}.$$

Donde K_{np} es un parámetro físico, $\hbar\omega_{np}$ es la energía óptica no-polar del fonón, n_{np} es la distribución de Bose-Einstein de equilibrio del fonón no-polar óptica y Z_{AB} es la degeneración del valle final, es decir, el valle que el electrón alcanza después del scattering, con respecto al inicial (ver Tabla 8.2).

En GaAs, los fonones no-polar ópticos contribuyen a la transferencia de electrones entre los valles L y entre Γ -valles y L -valles.

La probabilidad de transición para el proceso inelástico de intravalle ocasionado por fenómenos de scattering ópticos polares es

$$S^{(p)}(k_A, k'_A) = K_p \frac{G(k_A, k'_A)}{|k_A - k'_A|^2} \left[n_p \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A - \hbar\omega_p) + (1 + n_p) \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A + \hbar\omega_p) \right],$$

con

$$K_p = \frac{\hbar\omega_p q^2}{8\pi^2 \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad n_p = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_p / (k_B T)) - 1}.$$

Donde K_p es un parámetro físico, $\hbar\omega_p$ es la energía óptico polar del fonón, n_p es el número de equilibrio térmico óptico polar del fonón y $G(k_A, k'_A)$ es el denominado factor de "solapación" viene dado por

$$G(k_A, k'_A) = \left[a_A a'_A + c_A c'_A \cos(k_A, k'_A) \right]^2,$$

con

$$a_A = \sqrt{\frac{1 + \alpha_A \mathcal{E}_A}{1 + 2\alpha_A \mathcal{E}_A}}, \quad a'_A = \sqrt{\frac{1 + \alpha_A \mathcal{E}'_A}{1 + 2\alpha_A \mathcal{E}'_A}},$$

$$c_A = \sqrt{\frac{\alpha_A \mathcal{E}_A}{1 + 2\alpha_A \mathcal{E}_A}}, \quad c'_A = \sqrt{\frac{\alpha_A \mathcal{E}'_A}{1 + 2\alpha_A \mathcal{E}'_A}}.$$

(ver Tabla 8.2 valores de los parámetros).

2. Cambio de variable

Consideramos el cambio de variable:

$$(8.2.1) \quad k_A = \frac{\sqrt{m_A^* k_B T}}{\hbar} \sqrt{2 w_A (1 + \alpha_A w_A)} \left(\sqrt{1 - \mu_A^2} \cos \phi_A, \sqrt{1 - \mu_A^2} \sin \phi_A, \mu_A \right),$$

donde $\bar{\alpha}_A = k_B T \alpha_A$, w_A es la variable de energía adimensional, μ_A es el coseno del ángulo entre el vector de onda k_A y el eje z y ϕ_A es el ángulo polar. Nuestro dispositivo será considerado en la dirección z con $\mathbf{x} = (x, y, z)$, puesto que suponemos que tanto el dopaje como el potencial y por tanto, el campo de fuerza, se consideran aplicados en la dirección z . Debido a la simetría cilíndrica, la función

de distribución es independiente del ángulo ϕ y por otro lado, el operador de colisión puede calcularse explícitamente, en estas nuevas variables, ya que la energía $\mathcal{E}_A = k_B T w_A$ se convierte en una variable, en el nuevo sistema de coordenadas.

NOTA 8.2.1. Cuando el factor de no parabolicidad es cero, $\alpha_A = 0$, el cambio de variable de arriba es realmente un cambio a coordenadas esféricas. Recuperando de ese modo el cambio considerado en [6].

2.1. Adimensionalización. Consideramos t_* el tiempo característico y l_* la longitud característica. Denotamos con $\bar{\cdot}$ las variables y parámetros adimensionales:

$$\begin{aligned} t &= t_* \bar{t} & \mathbf{x} &= l_* \bar{\mathbf{x}} \\ k_A &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{m_A^* k_B T} \bar{k}_A & \frac{\mathcal{E}(k_A)}{k_B T} &= \bar{\mathcal{E}}_A(\bar{k}_A) = \frac{\|\bar{k}_A\|^2}{1 + \sqrt{1 + 2\bar{\alpha}_A \|\bar{k}_A\|^2}} \\ E(t, \mathbf{x}) &= \frac{\sqrt{m_X^* k_B T}}{e t_*} \bar{E}(\bar{t}, \bar{\mathbf{x}}) & V(t, \mathbf{x}) &= \frac{l_* \sqrt{m_X^* k_B T}}{e t_*} \bar{V}(\bar{t}, \bar{\mathbf{x}}) \\ C(\mathbf{x}) &= \left(\frac{\sqrt{m_X^* k_B T}}{\hbar} \right)^3 \bar{C}(\bar{\mathbf{x}}) \\ \alpha_p &= \frac{\hbar \omega_p}{k_B T} & a_p &= \frac{n_p + 1}{n_p} = \exp(\alpha_p) \\ \alpha_{np} &= \frac{\hbar \omega_{np}}{k_B T} & a_{np} &= \frac{n_{np} + 1}{n_{np}} = \exp(\alpha_{np}) \\ \Delta_{AB} &= k_B T \bar{\Delta}_{AB} & \bar{\alpha}_A &= k_B T \alpha_A \end{aligned}$$

Como podremos ver más adelante (en la ecuación de Poisson), necesitamos introducir una masa característica m_X^* . Esta masa podría ser elegida como m_T^* o m_L^* . En nuestras simulaciones hemos considerado como m_X^* la masa del electrón, (ver Tabla 8.2).

NOTA 8.2.2. La función de densidad de probabilidad es adimensional, puesto que, la constante de dimensión correspondiente es:

$$\frac{\text{constante de dimensión de densidad}}{(\text{constante de dimensión de vector de onda})^3} = \frac{\left(\frac{\sqrt{m_A^* k_B T}}{\hbar} \right)^3}{\left(\frac{\sqrt{m_A^* k_B T}}{\hbar} \right)^3}.$$

Por tanto $f_A(t, \mathbf{x}, k_A) = \bar{f}_A(\bar{t}, \bar{\mathbf{x}}, \bar{k}_A)$

Denotaremos por F_A a la incógnita f_A en términos de las nuevas variables. Consideramos el jacobiano del cambio de variables:

$$(8.2.2) \quad s_A(w_A) = \sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)} (1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A)$$

salvo la constante $\left(\frac{\sqrt{m_A^* k_B T}}{\hbar}\right)^3$.

La nueva incógnita será:

$$(8.2.3) \quad \Phi_A(t, z, w_A, \mu_A) = F_A(t, z, w_A, \mu_A) s_A(w_A).$$

Las variables son:

$$z \in [0, L], \quad w_A \in [0, w_{max}], \quad \mu_A \in [-1, 1].$$

Donde w_{max} es el valor máximo de energía que consideraremos, para nuestras simulaciones, y será ajustado en los experimentos numéricos, de forma que

$$F_A(t, z, w_A, \mu_A) \approx 0 \quad \text{para } w_A \geq w_{max}, \quad \forall t, z, \mu_A.$$

Y además esta elección se hará también independiente del valle. Es decir, consideraremos el mismo valor máximo en energía para los valles Γ y L .

NOTA 8.2.3. 1. El vector de onda adimensional se escribe como

$$\bar{k}_A = \sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)} \left(\sqrt{1 - \mu_A^2} \cos \phi_A, \sqrt{1 - \mu_A^2} \sin \phi_A, \mu_A \right)$$

y por tanto $\|\bar{k}_A\|^2 = 2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)$. Por lo que la energía adimensional se escribe como

$$\bar{\epsilon}_A(\bar{k}_A) = \frac{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}{1 + \sqrt{1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}} = \frac{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}{1 + \sqrt{(1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A)^2}} = w_A.$$

Y como anunciábamos la variable w_A es la energía adimensional.

2. Puesto que la función $s_A(w_A)$ es proporcional al jacobiano del cambio de variable, podremos evaluar momentos de la función de distribución usando directamente Φ_A .

2.2. La ecuación de Boltzmann tras la adimensionalización y el cambio de variable. Tras los tediosos cálculos desarrollados en el apéndice a este capítulo (ver (8.7.6) y (8.7.24)), podemos reescribir la ecuación de Boltzmann como sigue,

$$(8.2.4) \quad \frac{1}{t_*} \left[\frac{\partial \Phi_A}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial}{\partial z} (a_1 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial w_A} (a_2 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial \mu_A} (a_3 \Phi_A) \right] = \bar{Q}(\Phi_A).$$

O equivalentemente

$$(8.2.5) \quad \frac{\partial \Phi_A}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (a_1 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial w_A} (a_2 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial \mu_A} (a_3 \Phi_A) = t_* \bar{Q}(\Phi_A).$$

Donde

$$a_1 = a_1(w_A, \mu_A) = c_{1,A} \frac{\mu_A \sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A},$$

$$a_2 = a_2(w_A, \mu_A) = -c_{2,A} \bar{E} \mu_A \frac{\sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A},$$

$$a_3 = a_3(w_A, \mu_A) = -c_{3,A} \bar{E} \frac{1 - \mu_A^2}{\sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}.$$

Y

$$c_{1,A} = \frac{t_*}{l_*} \sqrt{\frac{k_B T}{m_A^*}}, \quad c_{2,A} = \sqrt{\frac{m_X^*}{m_A^*}}, \quad c_{3,A} = K_{ac} \frac{t_* (m_A^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{\hbar^3}.$$

$\bar{Q}(\Phi_A)$ es el operador de colisión tras la adimensionalización y el cambio de variables (ver (8.7.24)).

El coeficiente a_1 es regular. Y si suponemos que el campo eléctrico, \bar{E} , es dado y regular, entonces el coeficiente a_2 lo es, también. (Se entiende la regularidad en las variables w_A y μ_A). Por el contrario, el coeficiente a_3 presenta una singularidad cuando la energía es 0, $w_A = 0$. Teniendo en cuenta la expresión de (8.2.2) la podemos reescribir como

$$a_3 = a_3(w_A, \mu_A) = -c_{3,A} \bar{E} \frac{(1 - \mu_A^2)(1 + 2 \alpha_A w_A)}{s_A(w_A)} \quad A = \Gamma, L.$$

Esperamos que el factor $s_A(w_A)$ en la definición de Φ_A compense esta singularidad.

Como condición inicial para Φ_A , es decir, para la función de distribución en cada valle, $A = \Gamma, L$, consideraremos una distribución Maxwelliana localmente a temperatura T :

$$\Phi_A(0, z, w_A, \mu_A) = \mathcal{M} \bar{C}(z) M_A(w_A) \quad A = \Gamma, L,$$

donde,

$$M_A(w_A) = s_A(w_A) e^{w_A - \bar{E}_{0A}} \quad A = \Gamma, L$$

y \mathcal{M} es una constante elegida para que la densidad del dato inicial sea igual a la concentración de dopantes $\bar{C}(z)$.

2.3. La ecuación de Poisson tras la adimensionalización y el cambio de variable. Recordemos la ecuación de Poisson:

$$\Delta V = \frac{e}{\epsilon_0} [\rho(t, \mathbf{x}) - C(\mathbf{x})].$$

El término de la derecha verifica la siguiente relación entre las variables dimensionales y adimensionales:

$$\Delta_{\bar{\mathbf{x}}} \bar{V}(\bar{t}, \bar{\mathbf{x}}) = \frac{e t_* l_*}{\sqrt{m_X^* k_B T}} \Delta_{\mathbf{x}} V(t, \mathbf{x})$$

De este modo, para obtener la expresión de la ecuación de Poisson en las nuevas variables y adimensionalizada, basta adimensionalizar la densidad y escribirla en las nuevas variables. Que recordando (8.1.6) se traduce en la adimensionalización de ρ_Γ y ρ_L :

$$\begin{aligned} \rho_\Gamma(t, \mathbf{x}) &= \left(\frac{\sqrt{m_\Gamma^* k_B T}}{\hbar} \right)^3 \int_0^\infty dw_\Gamma \int_0^{2\pi} d\phi_\Gamma \int_{-1}^1 d\mu_\Gamma \Phi_\Gamma(t, z, w_\Gamma, \mu_\Gamma) \\ &= 2\pi \left(\frac{\sqrt{m_\Gamma^* k_B T}}{\hbar} \right)^3 \int_0^\infty dw_\Gamma \int_{-1}^1 d\mu_\Gamma \Phi_\Gamma(t, z, w_\Gamma, \mu_\Gamma). \end{aligned}$$

Análogamente para L :

$$\rho_L(t, \mathbf{x}) = 2\pi \left(\frac{\sqrt{m_L^* k_B T}}{\hbar} \right)^3 \int_0^\infty dw_L \int_{-1}^1 d\mu_L \Phi_L(t, z, w_L, \mu_L).$$

Recordemos, finalmente, la adimensionalización para la densidad de dopaje:

$$C(\mathbf{x}) = \left(\frac{\sqrt{m_X^* k_B T}}{\hbar} \right)^3 \bar{C}(\bar{\mathbf{x}}).$$

Tenemos, entonces, todos los ingredientes necesarios para obtener la expresión de la ecuación de Poisson deseada:

$$\begin{aligned} \Delta_z \bar{V}(\bar{t}, z) &= c_p \left(c_\Gamma \int_0^\infty dw_\Gamma \int_{-1}^1 d\mu_\Gamma \Phi_\Gamma(\bar{t}, z, w_\Gamma, \mu_\Gamma) \right. \\ (8.2.6) \quad &+ \left. c_L \int_0^\infty dw_L \int_{-1}^1 d\mu_L \Phi_L(\bar{t}, z, w_L, \mu_L) - \bar{C}(z) \right) \end{aligned}$$

donde

$$c_p = \frac{e^2 t_* l_* m_X^* k_B T}{\epsilon_0 \hbar^3}, \quad c_\Gamma = 2\pi Z_{L\Gamma} \left(\frac{m_\Gamma^*}{m_X^*} \right)^{3/2}, \quad c_L = 2\pi Z_{L\Gamma} \left(\frac{m_L^*}{m_X^*} \right)^{3/2}.$$

3. Esquema numérico

La ecuación (8.2.5), para cada uno de los valles, la resolvemos numéricamente con un esquema conservativo de diferencias finitas WENO de quinto orden en las variables de transporte, con una discretización en tiempo Runge-Kutta TVD (ver Capítulo 6).

Consideramos un malla, común para ambos valles (Γ y L), que discretice el dominio de computación:

$$(8.3.1) \quad \begin{aligned} z_i &= (i - 1/2)\Delta z; & i &= 1, 2, \dots, N_z, \\ w_j &= (j - 1/2)\Delta w; & j &= 1, 2, \dots, N_w, \\ \mu_k &= -1 + (k - 1/2)\Delta\mu; & k &= 1, 2, \dots, N_\mu, \end{aligned}$$

donde $\Delta z = L/N_z$, $\Delta w = w_{max}/N_w$ y $\Delta\mu = 2/N_\mu$ son los pasos de la malla en cada dirección, w_{max} se elige como un múltiplo entero de $\alpha_n = \alpha_{np}$ (llamaremos a esta cantidad α , por simplicidad en la notación) y Δw como $\alpha/n_{multiplo} \cdot n_{multiplo}$ es un entero relacionado con la resolución en la dirección de w para el operador de colisión. Esta elección es necesaria para poder dar una evaluación explícita del operador de colisión, es decir, que los puntos de evaluación sean punto de la malla. Debemos notar que el entero $n_{multiplo}$ debe elegirse de forma que se tengan en cuenta todos los procesos de dispersión.

Notemos, también, que hemos evitado en la malla los puntos frontera $w = 0$ y $\mu = 1, -1$, soslayando así los puntos singulares.

La implementación numérica la hacemos por medio de una aproximación dimensión a dimensión de las derivadas espaciales usando el método WENO de quinto orden (Capítulo 6), es decir, aproximamos con esta técnica $\frac{\partial}{\partial z}(a_1 \Phi_A)$, considerando las variables w_A y μ_A fijas y de forma análoga actuamos con $\frac{\partial}{\partial w_A}(a_2 \Phi_A)$ y $\frac{\partial}{\partial \mu_A}(a_3 \Phi_A)$. Esta simulación la desarrollamos para cada uno de los valles, $A = \Gamma, L$.

Consideraremos las siguientes condiciones frontera, para cada uno de los valles, que fueron usadas anteriormente para simulaciones en Si, [1] (adoptamos la notación Φ para denotar, tanto a Φ_Γ como a Φ_L para facilitar la escritura):

- En $z = 0$ y $z = L$, consideramos condiciones frontera usuales de entrada y salida de flujo. Si $a_1 \geq 0$, entonces

$$\Phi_{1-i,j,k} = \Phi_{i,j,k}, \quad \Phi_{N_x+i,j,k} = \Phi_{N_x,j,k}, \quad i = 1, \dots, 3,$$

en otro caso si $a_1 < 0$, entonces

$$\Phi_{1-i,j,k} = \Phi_{1,j,k}, \quad \Phi_{N_x+i,j,k} = \Phi_{N_x-i+1,j,k}, \quad i = 1, \dots, 3,$$

es decir, se imponen condiciones frontera de reflexión para la entrada de flujos y de tipo Neumann para la salida de flujos.

- En $w = 0$, la condición de contorno no es realmente física, un “punto fantasma” en (w, μ) para w negativo es, en la práctica, un punto físico en $(-w, -\mu)$. Consideramos las condiciones frontera:

$$\Phi_{i,1-j,k} = \Phi_{i,j,N_\mu+1-k}, \quad j = 1, \dots, 3,$$

Puesto que μ aparece linealmente en a_2 , el flujo numérico $\hat{h}_{1/2}$ en la dirección de j en $w = 0$ para un μ dado debería ser exactamente el mismo valor de signo opuesto que el flujo $\hat{h}_{1/2}$ en la dirección j en $w = 0$ para $-\mu$, si se considerara una fórmula numérica de flujo lineal y central. Pero, debido a que usamos un método WENO “influenciado por la dirección del viento”, estas igualdades no se mantienen. Por ello, para forzar la conservación de la carga, promediamos estos dos flujos en $w = 0$ y usamos un flujo promedio para μ y $-\mu$ con signos opuestos.

- En $w = w_{max}$ se consideran condiciones de salida de flujo, con condiciones de contorno tipo Neumann

$$\Phi_{i,N_w+j,k} = \Phi_{i,N_w,k}, \quad j = 1, \dots, 3,$$

e imponemos $\hat{h}_{N_w+1/2} = 0$ para el último flujo numérico, para garantizar la conservación de la carga.

- En $\mu = -1$ y $\mu = 1$, tenemos las condiciones frontera:

$$\Phi_{i,j,1-k} = \Phi_{i,j,k}, \quad \Phi_{i,j,N_\mu+k} = \Phi_{i,j,N_\mu-k+1}, \quad k = 1, \dots, 3,$$

motivadas por el significado físico de $\mu = \cos(\theta)$. Explícitamente imponemos $\hat{h}_0 = \hat{h}_{N_\mu+1/2} = 0$ para los flujos numéricos primero y último para garantizar la conservación de la carga.

La ecuación de Poisson (8.2.6), para el potencial \bar{V} y el campo eléctrico $-\partial_z \bar{V}$, la resolvemos mediante el método numérico explicado en el Capítulo 6 para dicha ecuación. Con la condición frontera dada V_{bias} , (como se hacía en el Capítulo 7).

Como se decía en el Capítulo 6, para garantizar la estabilidad del método de Runge-Kutta, necesitamos imponer las condiciones usuales CFL, que para nuestro problema concreto escribimos como:

$$\Delta t \leq CFL \left(\frac{\Delta z}{\max(|a_1|)} + \frac{\Delta w}{\max(|a_2|)} + \frac{\Delta \mu}{\max(|a_3|)} \right)$$

El máximo se toma sobre todos los puntos de la malla. Nótese que se considera el máximo en $|a_3|$ sobre una malla que no contiene el punto $w = 0$. Debemos recordar, que estamos trabajando con un sistema de tres ecuaciones, puesto que consideramos dos valles distintos. Si bien, la malla la hemos considera común a

ambos valles, la condición CFL arriba escrita, es diferente para cada uno de los valles, ya que los flujos, a_1, a_2, a_3 dependen del valle. Por tanto, en nuestras simulaciones consideraremos una condición CFL común a los dos valles. Concretamente elegimos Δt como sigue:

Sean,

$$t_\Gamma = \left(\frac{\Delta z}{\max(|a_1|)} + \frac{\Delta w}{\max(|a_2|)} + \frac{\Delta \mu}{\max(|a_3|)} \right), \quad \text{para el valle } \Gamma.$$

$$t_L = \left(\frac{\Delta z}{\max(|a_1|)} + \frac{\Delta w}{\max(|a_2|)} + \frac{\Delta \mu}{\max(|a_3|)} \right), \quad \text{para el valle } L.$$

Entonces, para un cierto valor CFL,

$$\Delta t = CFL/t,$$

donde $t = \max(t_\Gamma, t_L)$

Para acabar con los detalles del esquema numérico simulado, queremos mencionar las dificultades que presenta el operador de colisión:

- Estamos considerando fenómenos de scattering de intervalo y de intravalles. Por lo que tenemos un “doble acoplamiento” para los valles: operador de colisión y ecuación de Poisson.
- Pese a que la elección de la malla ha sido hecha con el fin de que las evaluaciones del operador de dispersión sean puntos de la malla. La necesidad de obtener un método numérico conservativo nos ha llevado ser muy precisos en las estimaciones. La parte de ganancia del operador de colisión, es una integración en la variable μ que puede ser aproximada con una simple integración numérica, empleando la regla del rectángulo o del punto medio, para todos los scatterings, salvo en el caso de impurezas y fonones polares. Para ellos, la expresión en el término de ganancia involucra a dos funciones, respectivamente: I_4 y I_5 (ver apéndice al capítulo) que presentan singularidades que impiden la conservación de la carga cuando estas integrales se estiman mediante reglas de integración simples. Para estos fenómenos de scattering debemos considerar unas reglas de integración mucho más precisas. Concretamente usamos la regla de Gauss-Legendre, que explicamos en el Capítulo 6.
- Explícitamente (consideramos sólo uno de los términos de \bar{Q} , el resto serían análogos) y adoptado la notación $g^+(s) = g(s)$ si $s \geq 0$ y cero en otro caso,

$$c_{5,A} s_A(w_A) \int_{-1}^{+1} d\mu'_A I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_A),$$

puesto que estamos con una ley de conservación,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 d\mu_A \int_0^{+\infty} dw_A c_{5,A} s_A(w_A) \int_{-1}^{+1} d\mu'_A I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_A) \\ &= \int_{-1}^1 d\mu_A \int_0^{+\infty} dw_A c_{5,A} s_A(w_A + \alpha_p) N_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p) \Phi_A(w_A, \mu_A). \end{aligned}$$

Que es una consecuencia de

$$\int_{-1}^{+1} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) d\mu_A = N_{5,A}^+(w_A - \alpha_p, w_A)$$

(independiente de μ'_A) o equivalentemente

$$\int_{-1}^{+1} I_{5,A}(w_A + \alpha_p, w_A, \mu_A, \mu'_A) d\mu_A = N_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p).$$

Por tanto, numéricamente tenemos que encontrar un método que nos preserve la carga. Para ello tomamos la siguiente aproximación

$$\begin{aligned} & c_{5,A} s_A(w_A) \int_{-1}^{+1} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_A) d\mu'_A \\ (8.3.2) \quad & \approx c_{5,A} s_A(w_A) \sum_{j=1}^n \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_{A,j}) \int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) d\mu'_A. \end{aligned}$$

donde

$$\mu'_{A,j} := -1 + (j - 0,5)\Delta\mu_A, \quad I_j = [-1 + (j - 1)\Delta\mu_A, -1 + j\Delta\mu_A], \quad j = 1, 2, \dots, n$$

El siguiente paso, es evaluar la integral

$$\int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) d\mu'_A$$

con gran exactitud.

La conservación de la carga, numéricamente, la obtenemos integrando (8.3.2) con respecto a μ . Mediante la regla del punto medio tenemos,

$$\begin{aligned} & c_{5,A} s_A(w_A) \Delta\mu_A \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_{A,j}) \int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_{A,k}, \mu'_A) d\mu'_A \\ &= c_{5,A} s_A(w_A) \Delta\mu_A \sum_{j=1}^n \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_{A,j}) \sum_{k=1}^n \int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_{A,k}, \mu'_A) d\mu'_A \end{aligned}$$

Por tanto, tendremos *la conservación exacta*, si

$$(8.3.3) \quad \sum_{k=1}^n \int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A - \alpha_p, w_A, \mu_{A,k}, \mu'_A) d\mu'_A = N_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p).$$

Si la igualdad anterior se mantuviese estaríamos diciendo que la parte de la izquierda es independiente de j . No podemos esperar que sea cierta esa igualdad ya que la parte de la izquierda es una aproximación numérica de la parte de la derecha. Pero numéricamente podemos "tomarla como igualdad" siempre que la regla de integración considerada sea lo "suficientemente exacta". Con este objetivo en nuestras simulaciones implementamos una integración Gaussiana "combinada" con 6, 8 y 16 nodos, para las integrales

$$\int_{I_j} I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_{A,k}, \mu'_A) d\mu'_A.$$

Para obtener realmente un método numérico conservativo deberíamos reemplazar en el término de pérdida del operador de colisión la función $N_{5,A}$ por los correspondientes valores del término de ganancia correspondiente, concretamente de la forma que nos dice la igualdad (8.3.3).

4. Simulaciones para el caso de bulk

Un paso previo en el análisis del dispositivo de un semiconductor es la simulación del bulk. Que físicamente representa el dispositivo con un dopaje uniforme y sometido a un campo eléctrico constante. Matemáticamente, se traduce en un modelo homogéneo, es decir, la solución $f_A(t, \mathbf{x}, \mathbf{k}_A)$, "pierde" la dependencia en \mathbf{x} y se escribe $f_A(t, \mathbf{k}_A)$ y por lo tanto, el campo eléctrico es constante y se elimina el acoplamiento con Poisson.

Los resultados que se obtienen, tras la simulación de este "simple" modelo, proporcionan información sobre los coeficientes de transporte que se usan en los modelos hidrodinámicos.

En los resultados de esta sección, consideraremos dos concentraciones de impurezas distintas, $N_I = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $N_I = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y se tendrán en cuenta todos los fenómenos de scattering explicados anteriormente. Mostraremos la ocupación del electrón en cada uno de los valles, la energía y velocidad medias del electrón como funciones del campo eléctrico sometido y la evolución en el tiempo de la velocidad media. Los resultados numéricos confirmarán los siguientes fenómenos físicos conocidos, validando de este modo nuestro resolutor:

- La población de electrones en el valle Γ decrece a medida que se incrementa el campo eléctrico, en favor de un aumento de la población en los valles L . Se produce un tránsito de electrones del valle Γ a los valles L . Este

hecho, como veremos repercutirá en el comportamiento de la energía media del electrón, que crecerá rápidamente hasta alcanzar un cierto valor, después del cual seguirá creciendo de un modo más reposado.

- Como sospecharon Ridley, Watkins y Hilsun en los años 60, en un semiconductor de GaAs, la velocidad media del electrón decrece cuando el campo eléctrico al que está sometido el dispositivo supera un cierto valor umbral. Este fenómeno se conoce como *conductividad diferencial negativa*, (CDN), es decir, existe un rango de pendientes negativas para la velocidad, vista como función del campo eléctrico. Ello es debido a que la masa efectiva del electrón en el valle Γ es mucho más pequeña que en los valles L , lo que favorece el tránsito de electrones del valle Γ a los valles L .

Atendiendo a la concentración de impurezas, se observa también, que tanto la pendiente de las curvas para campos bajos (movilidad de campo baja), como el pico de la velocidad media del electrón disminuyen con el incremento de la concentración de impurezas. Por tanto, un incremento significativo en la concentración de impurezas puede conseguir la desaparición del fenómeno de CDN.

- A medida que se incrementa el campo eléctrico la velocidad media tiende a estabilizarse. La velocidad media presenta un *efecto de saturación*.
- La evolución en el tiempo de la velocidad media muestra un exceso sobre su valor asintótico, que es el valor alcanzado en el estado estacionario. Este fenómeno se aprecia cuando el campo eléctrico aplicado es alto y se debe a que el tiempo de relajación del momento es más pequeño que el tiempo de relajación de la energía (ver Capítulo 5).

Los dos últimos fenómenos se presentan también en semiconductores de materiales diferentes, por ejemplo Silicio. Sin embargo, los dos primeros son característicos del GaAs.

En la Figura 8.1 representamos la ocupación en cada valle: ρ_{Γ}/ρ y $4\rho_L/\rho$ (recordamos que los 4 valles L son considerados iguales), para las dos concentraciones de impurezas que estamos considerando. En estas figuras podemos apreciar el traspaso de electrones del valle Γ al valle L . Vemos que ambas figuras son bastante parecidas, si bien, en el caso de impurezas altas la inversión de las poblaciones se produce cuando el campo eléctrico es un poco superior, aunque la diferencia es mínima ya que vemos que ese punto está próximo a 8 kV/cm en ambas figuras.

En la Figura 8.2 estudiamos los fenómenos, que antes comentábamos, referentes a la energía media del electrón. Comprobamos que la forma de la curva de energía es similar para las distintas impurezas consideradas, "proximidad" que queda manifiesta en la figura de abajo en la que se comparan ambas curvas. En dicha figura apreciamos que la energía media disminuye a medida que aumenta

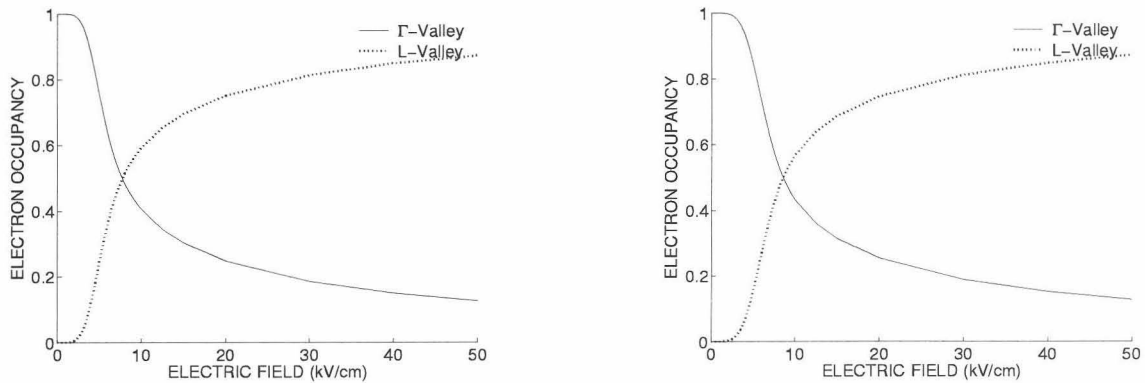


FIGURA 8.1. Ocupación del electrón versus campo eléctrico en el valle Γ y en el valle L para un GaAs bulk a $300K$ de temperatura. En la figura de la izquierda se ha considerado una concentración de impurezas de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Mientras que la concentración en la figura de la derecha ha sido $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

la concentración de impurezas. En ambos caso, la energía tiene un rápido crecimiento, cuando se incrementa el campo eléctrico aplicado, hasta alcanzar una energía aproximada de $0,3 \text{ eV}$. A partir de aquí la energía continua aumentando, pero de una forma mucho más reposada.

En la gráfica en la que comparamos las energías con concentraciones de impurezas distintas vemos que la energía, hasta la que el crecimiento es rápido, es muy similar, en ambas curvas, aunque inferior cuando se consideran impurezas altas. Ese punto marca la diferencia entre ambas curvas, para campos por debajo del necesitado para alcanzar esa energía, la energía es inferior con impurezas más altas y pasado ese campo ambas energías son prácticamente iguales.

Este comportamiento se debe al paso de electrones del valle Γ a los valles L y esta relacionado con la velocidad de relajación de la energía debida al scattering por fonones ópticos no polares en los valles L , que es mucho más elevada que la debida al scattering por fonones óptico polares del valle Γ .

La velocidad media la estudiamos en las Figuras 8.3-8.4. En la Figura 8.3 se refleja el efecto de *conductividad diferencial negativa* que anunciábamos antes. Nuevamente el paso de electrones de un valle a los otros (del Γ a los L) provoca este efecto. La velocidad crece de un modo abrupto cuando el campo aplicado aumenta hasta un cierto valor umbral (aproximadamente 4 kV/cm), a partir del cual decrece rápidamente hasta alcanzar un equilibrio, produciéndose un *efecto de saturación*. Comprobamos también la influencia de las concentraciones de impurezas en la velocidad. Observamos, que tanto el pico de la velocidad como la pendiente de las curvas para campos bajos son menores cuando la concentración de impurezas

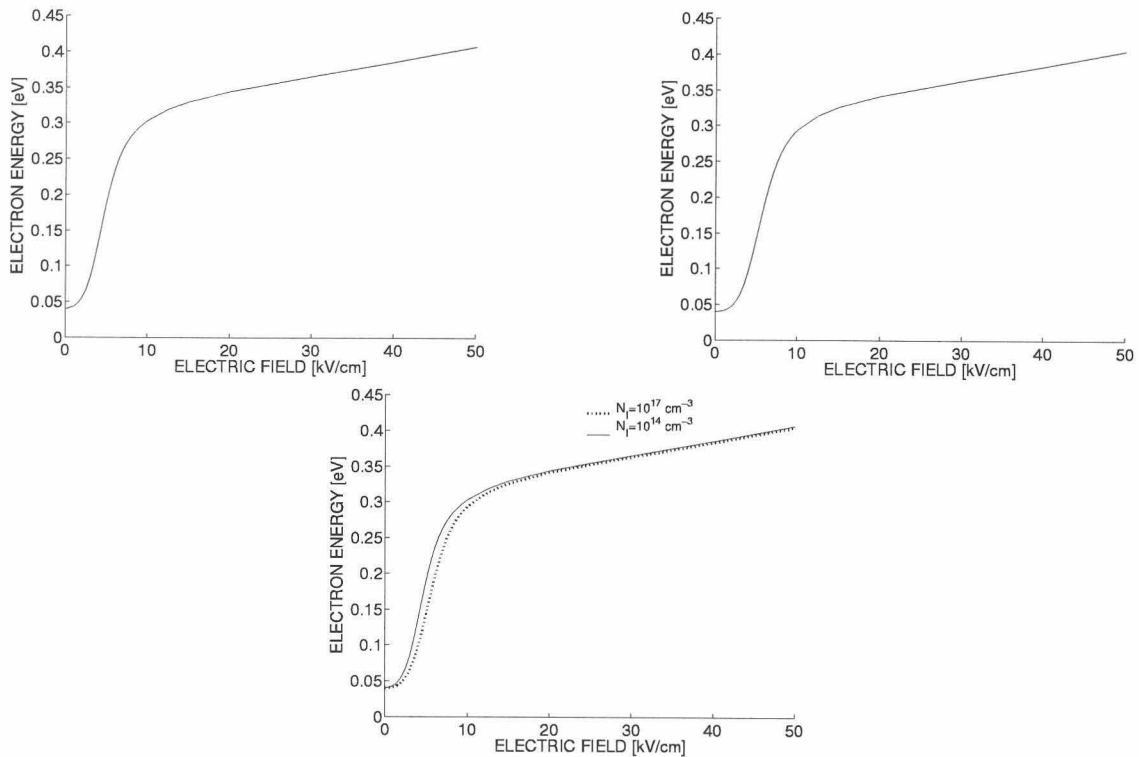


FIGURA 8.2. Energía media del electrón versus campo eléctrico para un GaAs bulk a 300K de temperatura. En la figura de la izquierda (arriba) se ha considerado una concentración de impurezas de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Mientras que la concentración en la figura de la derecha (arriba) ha sido $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. En la figura de abajo se comparan ambas energías.

es más alta. De este modo, se puede intuir que un incremento suficiente en la concentración de impurezas eliminará el rango de pendientes negativas de la curva de la velocidad media como función del campo eléctrico.

Finalmente, en la Figura 8.4 analizamos la evolución de la velocidad media con el tiempo. En estas dos figuras apreciamos un comportamiento similar en dispositivos con las dos concentración de impurezas que estamos considerando, como cabía esperar a la vista de las gráficas anteriores. En ellas observamos el exceso de velocidad.

Comparamos la evolución de la energía para campos eléctricos aplicados distintos: 2, 5, 10 y 20 kV/cm . Se comprueba que el exceso de velocidad se presenta cuando el campo aplicado es superior, aproximadamente, a 3 kV/cm , siendo el fenómeno más explícito a medida que aumenta el campo aplicado. Este fenómeno se debe a la disparidad entre los tiempos de relajación del momento y de la

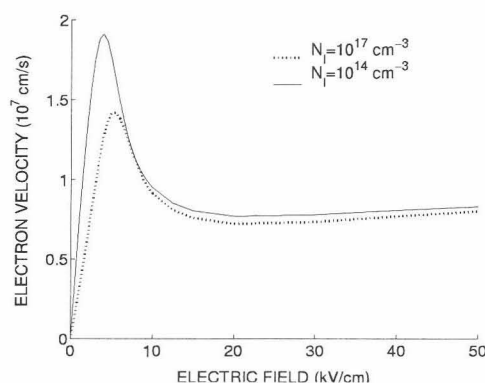


FIGURA 8.3. Velocidad media del electrón versus campo eléctrico para un GaAs bulk a 300K de temperatura, con concentraciones de impurezas de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

energía, como funciones de la energía. El exceso en la velocidad se aprecia cuando el campo eléctrico aplicado es tan alto que los electrones pueden alcanzar la región de energía alta, donde el tiempo de relajación del momento es más pequeño que el tiempo de relajación de la energía. Transcurrido un tiempo, la energía se hace efectiva de forma que la distribución se expande y decrece la velocidad de desplazamiento.

Debemos señalar que las curvas presentadas anteriormente (velocidad-campo) podrían no ser aplicables a dispositivos pequeños. Puesto que el tiempo de tránsito de los electrones en un dispositivo es comparable, o menor que, su tiempo de relajación, cuando el dispositivo es del orden de submicrómetros, los electrones fríos inyectados en el dispositivo podrían no alcanzar la velocidad estacionaria, después de atravesar el dispositivo. Más detalles pueden encontrarse en [11]. En esta referencia podemos ver gráficas de la velocidad media en función de la distancia a la fuente, que hacen entender mejor este fenómeno. Se muestra que para Silicio el exceso de velocidad se presenta a una distancia inferior a $0.1 \mu\text{m}$, mientras que para Arsenuro de Galio esa distancia aumenta hasta $1 \mu\text{m}$.

En [11] se muestran resultados numéricos para el GaAs bulk usando Monte Carlo y en [10] las simulaciones se desarrollan mediante un modelo hidrodinámico basado en el principio de máxima entropía. Nuestros resultados están en total concordancia con los datos en ambas referencias.

5. Simulación del dispositivo completo

Superado el primer paso: análisis del bulk, estamos en condiciones de estudiar el comportamiento de los electrones en el dispositivo completo. Diversos dispositivos podrían ser considerados, y para cada uno obtendríamos una fenomenología

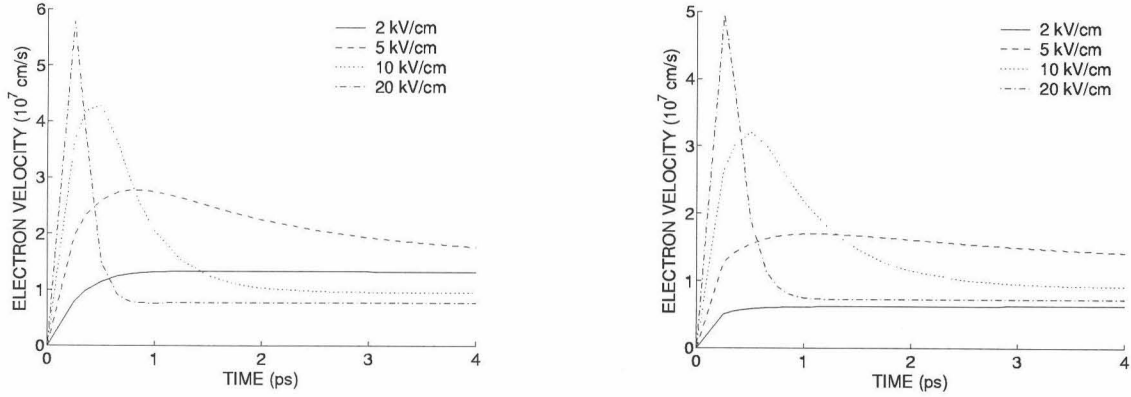


FIGURA 8.4. Evolución de la velocidad media del electrón para un GaAs bulk a 300K de temperatura, sometido a distintos campos eléctricos. En la figura de la izquierda se ha considerado una concentración de impurezas de $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Mientras que la concentración en la figura de la derecha ha sido $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

$x: \mu m$	Potencial: V
Temperatura: K	Velocidad: 10^7 cm/s
Densidad: cm^{-3}	Energía: eV
Momento: $\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$	

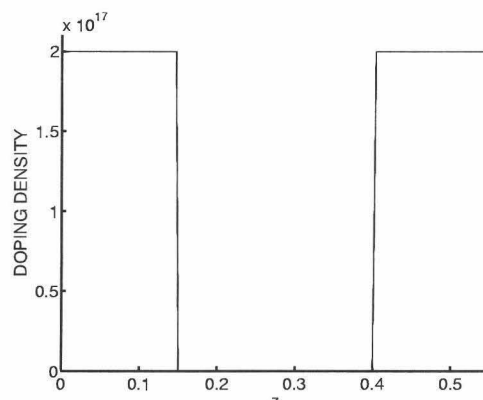
TABLA 8.1. Unidades

diferente, si bien todos siguen unas pautas similares. En nuestras simulaciones hemos trabajado con un modelo $N^+ - N_i - N^+$ como mostramos en la Figura 8.5. Este diodo consta de una zona activa, capa- N_i (capa intrínseca), custodiada por dos capas- N^+ (cátodo y ánodo) severamente dopadas ($2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) de $0.15 \mu m$ de longitud. La capa intrínseca tiene una longitud del $0.25 \mu m$. Y la concentración intrínseca es la concentración propia del material, cuando las impurezas son bajas y la concentración en la capa de valencia es igual a la concentración en la banda de conducción. Este valor común es la concentración intrínseca:

$$N_i = \left(\frac{2\pi k_B T \sqrt{m_n m_p}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T} \right),$$

donde m_n y m_p son respectivamente las masas efectivas de los electrones y los huecos y recordamos E_g es la energía gap. Por tanto, el dispositivo tiene una longitud de $0.55 \mu m$ con dos contactos en $0.15 \mu m$ y $0.4 \mu m$.

Nuestras simulaciones se centrarán en este dispositivo al que aplicaremos un potencial de 0.75 V a distintas temperaturas: temperatura ambiente, 300 K y una temperatura de 77 K . En la Figura 8.6 mostramos el potencial y el campo eléctricos

FIGURA 8.5. Modelo $N^+ - N_i - N^+$ de un diodo de GaAs.

cuando el $V_{bias}=0.75 V$ y la temperatura es de $300 K$, después de que transcurran $3 ps$.

m	masa del electrón	$9,1095 \cdot 10^{-31} Kg$
m_{Γ}^*	masa efectiva del electrón en el valle Γ	$0,067 \times m$
m_L^*	masa efectiva del electrón en el valle L	$0,35 \times m$
ρ_0	densidad del retículo	$5360 Kg/m^3$
v_s	velocidad del sonido longitudinal	$5240 m/s$
α_{Γ}	factor de no parabolicidad en el valle Γ	$0,611 eV^{-1}$
α_L	factor de no parabolicidad en el valle L	$0,242 eV^{-1}$
ϵ_r	constante dieléctrica relativa	12,90
ϵ_{∞}	constante dieléctrica relativa en el rango de frecuencia óptico	10,92
ϵ_v	constante dieléctrica en el vacío	$8,85419 \times 10^{-12} F/m$
Ξ_d	deformación acústico-fonón del potencial	$7 eV$
$D_t K$	deformación óptica no polar del potencial	$10^{11} eV/m$
$\hbar\omega_{np}$	energía óptica no polar del fonón	$0,032 eV$
$\hbar\omega_p$	energía óptica polar del fonón	$0,032 eV$
$\mathcal{E}_{0\Gamma}$	energía mínima en el valle Γ	$0 eV$
\mathcal{E}_{0L}	energía mínima en el valle L	$0,32 eV$
$Z_{\Gamma L}$	degeneración del valle Γ a los valles L	4
$Z_{L\Gamma}$	degeneración de los valles L al valle Γ	1
Z_{LL}	degeneración de los valles L a L	3
N_i	concentración intrínseca	$1,79 \times 10^6 cm^{-3}$

TABLA 8.2. Parámetros.

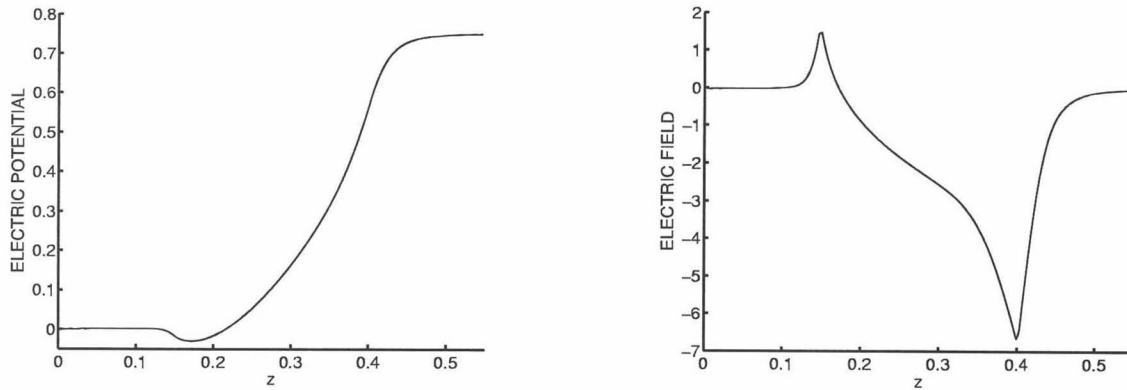


FIGURA 8.6. Potencial y campo eléctricos para el diodo con un $V_{bias}=0.75$ V y 300 K de temperatura. Unidades: z en μm , campo eléctrico en $V/\mu m$.

En la Figura 8.7 consideramos el potencial y el campo eléctricos cuando sometemos al dispositivo al mismo V_{bias} pero en este caso lo suponemos a una temperatura de 77 K.

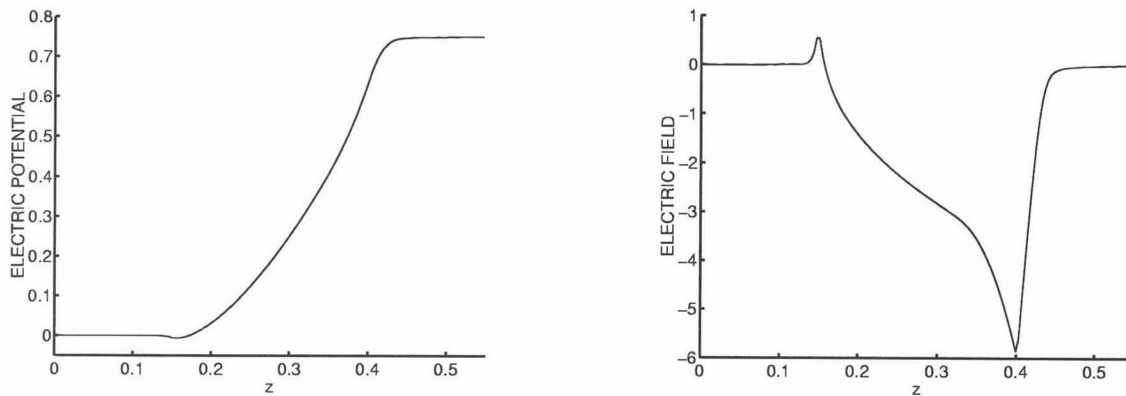


FIGURA 8.7. Potencial y campo eléctricos para el diodo con un $V_{bias}=0.75$ V y 77 K de temperatura. Unidades: z en μm , campo eléctrico en $V/\mu m$.

Por otro lado, disminuirémos el potencial aplicado, considerando $V_{bias}=0.25$ V a temperatura ambiente, para observar los efectos que un potencial bajo provocan en nuestro dispositivo. En la Figura 8.8 mostramos el campo y el potencial eléctricos para estas condiciones.

En las figuras siguientes mostraremos la evolución de las funciones de distribución, tanto en el valle Γ como en el valle L . Observaremos estas funciones tras 1.5 ps y después de 3 ps. Y nos fijaremos en la función en distintos puntos

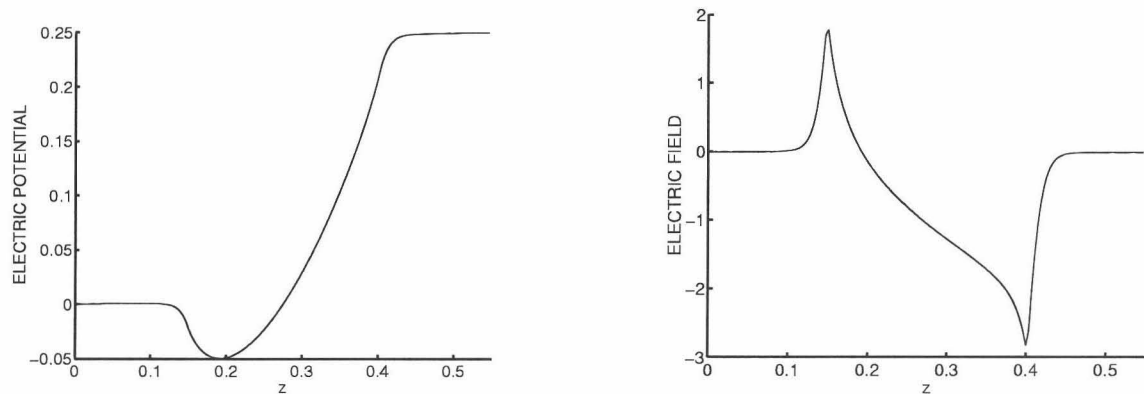


FIGURA 8.8. Potencial y campo eléctricos para el diodo con un $V_{bias}=0.25\text{ V}$ y 300 K de temperatura. Unidades: z en μm , campo eléctrico en $\text{V}/\mu\text{m}$.

del dispositivo: un poco antes de alcanzar el primer contacto, en la mitad del dispositivo, justo antes de alcanzar el segundo contacto y pasado este segundo contacto.

Analizaremos las cantidades macroscópicas mostrando la evolución en tiempo de las mismas, en la que observaremos que tras 3 ps , todas ellas tienden a estabilizarse. Finalmente, presentaremos estas cantidades macroscópicas transcurridos 3 ps .

Las Figuras 8.6, 8.7 y 8.8 nos darán una idea de cómo será el movimiento de los electrones, ya que es el campo eléctrico, junto con el operador de scattering, el que rige este movimiento. Observando los campos eléctricos de los tres modelos que estudiaremos, apreciamos un campo, por supuesto, mayor cuando el potencial aplicado aumenta, pero además, el campo es mayor cuanto mayor es la temperatura considerada. Algo que tampoco debe sorprendernos ya que en el Capítulo 7, vimos que la barrera del potencial está estrechamente relacionado con la temperatura.

5.1. Funciones de distribución de probabilidad. Como ocurría para un dispositivo de Si, con un canal de 50 nm y un potencial aplicado alto, [1], las funciones de distribución, en ciertos puntos del dispositivo, estarán lejos de ser una Maxwelliana trasladada, como le ocurría a los dispositivos de Si, con un canal más grande (400 nm). En nuestro caso, encontraremos ciertos lugares en el dispositivo, en el que la función de distribución de probabilidad, en ambos valles presentará una fuerte asimetría, demostrando así rasgos puramente cinéticos.

Las Figuras 8.9 y 8.10 podemos imaginarlas como una secuencia en la que vamos viendo la evolución de la función de distribución de probabilidad a lo largo del dispositivo y hacemos fotos instantáneas en las posiciones: $z = 0,102667 \mu m$, $z = 0,275 \mu m$, $z = 0,399667 \mu m$ y $z = 0,44 \mu m$, tanto para el valle Γ como para el valle L . Esta "película" la observamos en dos instantes de tiempo distintos: $1.5 ps$ y $3 ps$. A la vista del dispositivo considerado observamos que los puntos escogidos para las fotos instantáneas son: un "poco antes" de alcanzar el primer contacto ($0.14 \mu m$), en mitad del canal, "justo antes" de llegar al segundo contacto ($0.4 \mu m$) y pasado el segundo contacto.

En estas gráficas observamos un comportamiento similar: en $z = 0,102667 \mu m$ y $z = 0,44 \mu m$ (antes del primer contacto y después del segundo) las funciones de distribución de probabilidad en ambos valles son prácticamente Maxwellianas. Sin embargo, en mitad del canal y justo antes de atravesar el segundo contacto la distribución de probabilidad se separan por completo de un estado Maxwelliano, presentando rasgos puramente cinéticos (recordamos que $\mu = 1$ es la dirección del campo de fuerzas y $\mu = -1$ es la opuesta).

En la figura 8.11 observamos la evolución en el tiempo de la función de distribución de probabilidad en el valle Γ , justo antes de abandonar el canal, es decir, antes de pasar por el segundo contacto. Mostramos la distribución en los tiempos: $1, 1.5, 2, 2.5, 3 ps$.

5.2. Cantidades macroscópicas. Acabaremos, analizando las cantidades macroscópicas:

$$\rho(t, \mathbf{x}) = Z_{L\Gamma} \rho_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) + Z_{\Gamma L} \rho_L(t, \mathbf{x}),$$

densidad media,

$$u(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{\hbar \rho(t, \mathbf{x})} \left(Z_{L\Gamma} \int_{\mathbb{R}} \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} \mathcal{E}_{\Gamma}(\mathbf{k}_{\Gamma}) f_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_{\Gamma} + Z_{\Gamma L} \int_{\mathbb{R}} \nabla_{\mathbf{k}_L} \mathcal{E}_L(\mathbf{k}_L) f_L(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_L \right),$$

velocidad media,

$$Z_{L\Gamma} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{E}_{\Gamma}(\mathbf{k}_{\Gamma}) f_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_{\Gamma} + Z_{\Gamma L} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{E}_L(\mathbf{k}_L) f_L(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_L$$

energía y

$$\frac{1}{\hbar} \left(Z_{L\Gamma} \int_{\mathbb{R}} \nabla_{\mathbf{k}_{\Gamma}} \mathcal{E}_{\Gamma}(\mathbf{k}_{\Gamma}) f_{\Gamma}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_{\Gamma} + Z_{\Gamma L} \int_{\mathbb{R}} \nabla_{\mathbf{k}_L} \mathcal{E}_L(\mathbf{k}_L) f_L(t, \mathbf{x}) d\mathbf{k}_L \right)$$

momento.

En las Figuras 8.12, 8.13 y 8.14 presentamos la evolución en tiempo de estas cantidades. Y en las Figuras 8.15, 8.16 y 8.17 mostramos las cantidades macroscópicas transcurridos 3 ps.

A la vista de las figuras que muestran la evolución en tiempo vemos que las cantidades se estabilizan incluso antes de transcurrir los 3 ps. A 300 K vemos que el momento se estabiliza siendo constante después de 3 ps. Cuando la temperatura es de 77 K observamos unos resultados “peores” ya que el momento no ha terminado de estabilizarse, necesita un poco más de tiempo.

Cuando el potencial aplicado es de 0.75 V observamos en la velocidad una onda al final del canal que viaja de izquierda a derecha, subsistiendo levemente tras los 3 ps. Una situación similar ocurre con la densidad. Este fenómeno se debe a una acumulación de los electrones en la región activa, cerca del ánodo (capa N^+). Los electrones en la capa activa se enmarcan dentro de tres categorías:

- Electrones en el valle Γ que viajan de una forma más o menos balística hacia el ánodo.
- Electrones en el valle Γ que alcanza niveles de energía altos en el capa N^+ del ánodo, suficientes para ser transferidos a los valles L , donde los electrones se dispersan en todas las direcciones con una probabilidad alta y son posteriormente devueltos al valle Γ .
- Electrones en los valles L , con niveles de energía por encima de la mínima del valle L , que se dispersan (hacia atrás) parcialmente desde el ánodo hasta la región con energía superior a la mínima en la capa activa.

Esta disposición de los electrones nos permite entender las Figuras 8.15, 8.16 y 8.17. Observemos las Figuras con $V_{bias}=0.75 V$ (Figuras 8.15 y 8.16), podemos observar que la velocidad media alcanza su valor máximo aproximadamente en $z = 0,3 \mu m$ y comienza a decrecer rápidamente hacia el ánodo. Si examinamos las gráficas correspondientes a las densidades, encontramos que es precisamente, cerca de $z = 0,3 \mu m$, donde la carga se acumula. Cuando el potencial aplicado en el ánodo es de 0.25 V la acumulación de carga desaparece, como podemos comprobar en la Figura 8.17. En realidad, [11], cuando el potencial aplicado en el ánodo es superior, aproximadamente, a 0.3 V, siempre se produce una acumulación de carga cerca de la región N^+ , aunque con variaciones en las formas de las curvas. Si comparamos los resultados con distintas temperaturas; 77 K y 300 K, vemos que los resultados son similares, si bien apreciamos una disminución de la velocidad media y leve expansión en la energía, cuando la temperatura es mayor. El decrecimiento de la velocidad se debe principalmente al incremento de la velocidad de scattering por fonones ópticos polares a temperatura de 300 K, que es un factor de scattering dominante para electrones por debajo 0.3 eV.

Para todos los resultados mostrados anteriormente se ha considerado una concentración de impurezas de 10^{14} cm^{-3} . En la Figura 8.18 comparamos las cantidades macroscópicas para dos dispositivos iguales en los que las concentraciones de impurezas han sido 10^{14} cm^{-3} y 10^{17} cm^{-3} . Observamos que se obtiene resultados muy similares. Queremos señalar que son las concentraciones de impurezas bajas las que presentan mayores problemas en el desarrollo de un método numérico conservativo.

6. Conclusiones

En este último capítulo hemos presentado un resolutor determinista para el sistema 1 dimensional de Boltzmann-Poisson en un dispositivo de GaAs. Se ha seguido la misma filosofía que la desarrollada por Carrillo, Gamba, Majorana y Shu para un dispositivo de Silicio, [1]: cambio de variables desarrollado por Majorana y Pidotella, [9], que en el caso en el que la aproximación de banda de energía es parabólica, se reduce al cambio a esféricas empleado por Fatemi y Odeh [6]. Transformación, entonces, de la ecuación de Boltzmann en una ley de conservación, que se resuelve numéricamente mediante un método en diferencias finitas WENO de alto orden.

Desde el punto de vista matemático, y haciendo referencia simplemente, al aspecto numérico, el problema presentado en este capítulo difiere del estudio desarrollado para Silicio en:

- Los electrones se consideran distribuidos en diversos valles, por lo que el sistema que en Silicio lo formaban dos ecuaciones (Boltzmann y Poisson), se escribe, en nuestro caso con una ecuación de Boltzmann más.
- A los dos fenómenos de scattering de Si: acústico y fonón óptico no polar, añadimos scatterings causados por impurezas y por fonones óptico polares. Siendo, además, el scattering por fonones ópticos no polares, en este caso, de tipo intervale. De este modo las ecuaciones de Boltzmann para cada valle se encuentra acopladas, además de por la ecuación de Poisson, por medio de este scattering.
- La estimación del operador de colisión debe ser mucho más precisa que en Si, requiriendo un método de integración de más exactitud. La causa reside en la presencia de funciones con singularidades en los términos de ganancia. Y en la búsqueda de un método numérico que preserve la carga total.

Desde el punto de vista físico la diferencia, evidente, es el material considerado. Trabajamos con un material compuesto en el que se presenta fenómenos que no ocurrían en el caso de Si como, distribución de los electrones en diversos valles (hecho que hemos estudiado mediante las gráficas de ocupación) y la

conductividad diferencial negativa. Estas propiedades las hemos podido testar numéricamente, simulando el sistema homogéneo (bulk).

Finalmente, una vez conocidas las propiedades del material, hemos estudiado un dispositivo $N^+ - i - N^+$, analizando la función de distribución de probabilidad en cada uno de los valles y las cantidades macroscópicas, transcurridos 3 ps. Y como decíamos al comienzo del capítulo, con este punto y final, abrimos nuevamente nuestra carpeta de trabajos futuros y anotamos: comparación con la simulación directa de Monte Carlo y extrapolación al caso 2-dimensional.

7. Apéndice: cambio de coordenadas y adimensionalización de la ecuación de Boltzmann

El objetivo de este apéndice es desarrollar los cálculos que traducen las ecuaciones de Boltzmann (8.1.2)-(8.1.3) en las ecuaciones (8.2.5)

7.1. Operador de transporte.

■ ADIMENSIONALIZACIÓN.

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{k_A} \mathcal{E}_A \cdot \nabla_x f_A = \frac{1}{l_*} \sqrt{\frac{k_B T}{m_A^*}} \cdot \nabla_{\bar{k}_A} \bar{\mathcal{E}}_A \cdot \nabla_{\bar{x}} \bar{f}_A = \frac{1}{l_*} \sqrt{\frac{k_B T}{m_A^*}} \cdot \frac{\bar{k}_A}{1 + 2 \bar{\alpha}_A \bar{\mathcal{E}}_A} \cdot \nabla_{\bar{x}} \bar{f}_A.$$

Si llamamos $c_{1,A} = \frac{t_*}{l_*} \sqrt{\frac{k_B T}{m_A^*}}$, obtenemos

$$\frac{1}{\hbar} \nabla_{k_A} \mathcal{E}_A \cdot \nabla_x f_A = \frac{c_{1,A}}{t_*} \cdot \frac{\bar{k}_A}{1 + 2 \bar{\alpha}_A \bar{\mathcal{E}}_A} \cdot \nabla_{\bar{x}} \bar{f}_A.$$

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{k_A} f_A = -\frac{1}{t_*} \sqrt{\frac{m_X^*}{m_A^*}} \bar{\mathbf{E}} \cdot \nabla_{\bar{k}_A} \bar{f}_A.$$

Denotando por $c_{2,A} = \sqrt{\frac{m_X^*}{m_A^*}}$,

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{k_A} f_A = -\frac{c_{2,A}}{t_*} \bar{\mathbf{E}} \cdot \nabla_{\bar{k}_A} \bar{f}_A.$$

Por tanto, el operador de transporte adimensional se escribe como

$$(8.7.1) \quad \frac{1}{t_*} \left(\frac{\partial \bar{f}_A}{\partial \bar{t}} + c_{1,A} \cdot \frac{\bar{k}_A}{1 + 2 \bar{\alpha}_A \bar{\mathcal{E}}_A} \cdot \nabla_{\bar{x}} \bar{f}_A - c_{2,A} \bar{\mathbf{E}} \cdot \nabla_{\bar{k}_A} \bar{f}_A \right).$$

■ CAMBIO DE COORDENADAS.

$$c_{1,A} \cdot \frac{\bar{k}_A}{1 + 2 \bar{\alpha}_A \bar{\mathcal{E}}_A} \cdot \nabla_{\bar{x}} \bar{f}_A = c_{1,A} \cdot \frac{\mu_A \sqrt{2 w_A (1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2 \bar{\alpha}_A w_A} \cdot \nabla_z F_A.$$

Recordemos que estamos considerando el caso 1 dimensional siguiendo la dirección del campo eléctrico. Para evitar una notación pesada usaremos

indistintamente \bar{E} para denotar, $\bar{E} = (0, 0, \bar{E})$ y \underline{E} . En coordenadas esféricas encontramos que

$$(8.7.2) \quad \bar{E} \cdot \nabla_{\bar{k}_A} \bar{f}_A = \bar{E} \cdot \left(\frac{\partial F_A}{\partial w_A} \frac{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \mu_A + \frac{\partial F_A}{\partial \mu_A} \frac{1 - \mu_A^2}{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}} \right).$$

Puesto que

$$\nabla_{\bar{k}_A} |\bar{k}_A|^2 = \nabla_{\bar{k}_A} [2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)],$$

y por tanto

$$2\bar{k}_A = 2(1 + 2\bar{\alpha}_A w_A) \nabla_{\bar{k}_A} w_A.$$

Obteniendo de este modo

$$\nabla_{\bar{k}_A} w_A = \frac{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \left(\sqrt{1 - \mu_A^2} \cos \phi_A, \sqrt{1 - \mu_A^2} \sin \phi_A, \mu_A \right),$$

y consecuentemente

$$(8.7.3) \quad \frac{\partial w_A}{\partial \bar{k}_{A3}} = \frac{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \mu_A.$$

Donde se ha supuesto la notación $\bar{k}_A = (\bar{k}_{A1}, \bar{k}_{A2}, \bar{k}_{A3})$.

Por otro lado, de

$$\frac{\partial \bar{k}_{A3}}{\partial \bar{k}_{A3}} = \frac{\partial}{\partial \bar{k}_{A3}} \left(\mu_A \sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)} \right)$$

deducimos

$$1 = \sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)} \frac{\partial \mu_A}{\partial \bar{k}_{A3}} + \mu_A \frac{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A}{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}} \frac{\partial w_A}{\partial \bar{k}_{A3}}$$

y por tanto,

$$1 = \sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)} \frac{\partial \mu_A}{\partial \bar{k}_{A3}} + \mu_A^2,$$

$$(8.7.4) \quad \frac{\partial \mu_A}{\partial \bar{k}_{A3}} = \frac{1 - \mu_A^2}{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}.$$

Así obtenemos (8.7.2) sustituyendo (8.7.3) y (8.7.4).

Por tanto, tras el cambio de coordenadas y la adimensionalización el operador de transporte lo reescribimos como:

$$(8.7.5) \quad \frac{1}{t_*} \left(\frac{\partial F_A}{\partial \bar{t}} + c_{1,A} \frac{\mu_A \sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \cdot \frac{\partial}{\partial z} F_A \right) - \frac{c_{2,A} \bar{E}}{t_*} \cdot \left(\frac{\partial F_A}{\partial w_A} \frac{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \mu_A + \frac{\partial F_A}{\partial \mu_A} \frac{1 - \mu_A^2}{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}} \right).$$

Finalmente si multiplicamos la expresión anterior por $s_A(w_A)$ obtenemos

$$(8.7.6) \quad \frac{1}{t_*} \left[\frac{\partial \Phi_A}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial}{\partial z} (a_1 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial w_A} (a_2 \Phi_A) + \frac{\partial}{\partial \mu_A} (a_3 \Phi_A) \right].$$

Donde

$$\begin{aligned} a_1 &= a_1(w_A, \mu_A) = c_{1,A} \frac{\mu_A \sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A}, \\ a_2 &= a_2(w_A, \mu_A) = -c_{2,A} \bar{E} \mu_A \frac{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}{1 + 2\bar{\alpha}_A w_A} \\ a_3 &= a_3(w_A, \mu_A) = -c_{3,A} \bar{E} \frac{1 - \mu_A^2}{\sqrt{2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A)}}. \end{aligned}$$

7.2. Operador de colisión. Debido a la presencia de la delta de Dirac, δ en el operador de colisión consideraremos conjuntamente el cambio a coordenadas esféricas y el proceso de adimensionalización.

$$(8.7.7) \quad \begin{aligned} S_A(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) &= \left[K_{ac} + \frac{K_{imp}}{(|\mathbf{k}_A - \mathbf{k}'_A|^2 + \beta^2)^2} \right] \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A) \\ &+ K_P \frac{G(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A)}{|\mathbf{k}_A - \mathbf{k}'_A|^2} \left[n_p \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A - \hbar\omega_p) + (1 + n_p) \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A + \hbar\omega_p) \right] \\ &+ Z_{AA} K_{np} \left[n_{np} \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A - \hbar\omega_{np}) + (1 + n_{np}) \delta(\mathcal{E}'_A - \mathcal{E}_A + \hbar\omega_{np}) \right] \end{aligned}$$

(8.7.7) lo reescribimos como:

$$(8.7.8) \quad \begin{aligned} S_A(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) &= \left[K_{ac} + \frac{K_{imp} \hbar^4 (m_A^* k_B T)^{-2}}{[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2]^2} \right] \delta(k_B T(w'_A - w_A)) \\ &+ K_p \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} n_p \\ &\cdot \left[\delta(k_B T(w'_A - w_A - \alpha_p)) + a_p \delta(k_B T(w'_A - w_A + \alpha_p)) \right] \\ &+ Z_{AA} K_{np} n_{np} \left[\delta(k_B T(w'_A - w_A - \alpha_{np})) + a_{np} \delta(k_B T(w'_A - w_A + \alpha_{np})) \right] \end{aligned}$$

$\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)$ es la correspondiente función adimensionalizada de $G(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A)$ escrita en las nuevas variables y

$$\begin{aligned} \varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) &= q_A(w_A) + q_A(w'_A) - 2\sqrt{q_A(w_A) q_A(w'_A)} \\ &\cdot \left(\sqrt{1 - \mu_A^2} \sqrt{1 - \mu_A'^2} \cos(\phi_A - \phi'_A) + \mu_A \mu'_A \right), \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}
 q_A(w_A) &= 2w_A(1 + \bar{\alpha}_A w_A), \quad \beta_A = \frac{\hbar \beta}{\sqrt{m_A^* k_B T}}. \\
 S_A(k_A, k'_A) dk'_A &= \left[K_{ac} + \frac{K_{imp} \hbar^4 (m_A^* k_B T)^{-2}}{[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2]^2} \right] \delta(k_B T(w'_A - w_A)) \\
 &+ K_p \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} n_p \\
 &\cdot [\delta(k_B T(w'_A - w_A - \alpha_p)) + a_p \delta(k_B T(w'_A - w_A + \alpha_p))] \\
 &+ Z_{AA} K_{np} n_{np} \\
 &\cdot [\delta(k_B T(w'_A - w_A - \alpha_{np})) + a_{np} \delta(k_B T(w'_A - w_A + \alpha_{np}))] \\
 (8.7.9) \quad &\frac{(m_A^* k_B T)^{3/2}}{\hbar^3} dw'_A d\mu'_A d\phi'_A.
 \end{aligned}$$

Y utilizando las propiedades de la delta de Dirac,

$$\begin{aligned}
 S_A(k_A, k'_A) dk'_A &= \left[K_{ac} + \frac{K_{imp} \hbar^4 (m_A^* k_B T)^{-2}}{[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2]^2} \right] \delta(w'_A - w_A) \\
 &+ K_p \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} n_p \\
 &\cdot [\delta(w'_A - w_A - \alpha_p) + a_p \delta(w'_A - w_A + \alpha_p)] \\
 &+ Z_{AA} K_{np} n_{np} [\delta(w'_A - w_A - \alpha_{np}) + a_{np} \delta(w'_A - w_A + \alpha_{np})] \\
 (8.7.10) \quad &\frac{(m_A^* k_B T)^{3/2}}{k_B T \hbar^3} dw'_A d\mu'_A d\phi'_A.
 \end{aligned}$$

Con el fin de obtener una escritura más cómoda introduciremos las siguientes constantes

$$\begin{aligned}
 c_{3,A} &= K_{ac} \frac{t_*(m_A^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{\hbar^3} \\
 c_{4,A} &= K_{imp} \frac{t_* \hbar}{k_B T \sqrt{m_A^* k_B T}} \\
 c_{5,A} &= K_p \frac{t_* n_p \sqrt{m_A^*}}{\hbar \sqrt{k_B T}} \\
 c_{6,A} &= Z_{AA} K_{np} \frac{t_*(m_A^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{\hbar^3},
 \end{aligned}$$

con lo que

$$\begin{aligned}
 S_A(k_A, k'_A) dk'_A &= \left[c_{3,A} + c_{4,A} \frac{1}{\left[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2 \right]^2} \right] \delta(w'_A - w_A) \\
 &+ c_{5,A} \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} \\
 &\cdot \left[\delta(w'_A - w_A - \alpha_p) + a_p \delta(w'_A - w_A + \alpha_p) \right] \\
 &+ c_{6,A} \left[\delta(w'_A - w_A - \alpha_{np}) + a_{np} \delta(w'_A - w_A + \alpha_{np}) \right] \\
 (8.7.11) \quad &\frac{1}{t_*} dw'_A d\mu'_A d\phi'_A.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S(k_A, k_B) &= K_{np} \left[n_{np} \delta(\mathcal{E}_B - \mathcal{E}_A - \hbar\omega_{np} - \Delta_{AB}) \right. \\
 (8.7.12) \quad &\left. + (1 + n_{np}) \delta(\mathcal{E}_B - \mathcal{E}_A + \hbar\omega_{np} - \Delta_{AB}) \right].
 \end{aligned}$$

Tras la adimensionalización y el cambio de coordenadas

$$\begin{aligned}
 S(k_A, k_B) &= K_{np} n_{np} \left[\delta(k_B T (w_B - w_A - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB})) \right. \\
 (8.7.13) \quad &\left. + a_{np} \delta(k_B T (w_B - w_A + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB})) \right].
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S(k_A, k_B) dk_C &= K_{np} n_{np} \left[\delta(k_B T (w_B - w_A - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB})) \right. \\
 &+ a_{np} \delta(k_B T (w_B - w_A + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB})) \left. \right] \\
 &\cdot \frac{(m_C^* k_B T)^{3/2}}{\hbar^3} dw_C d\mu_C d\phi_C. \\
 (8.7.14)
 \end{aligned}$$

Y finalmente,

$$\begin{aligned}
 S(k_A, k_B) dk_C &= K_{np} n_{np} \left[\delta(w_B - w_A - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) \right. \\
 &+ a_{np} \delta(w_B - w_A + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) \left. \right] \\
 &\cdot \frac{(m_C^* k_B T)^{3/2}}{k_B T \hbar^3} dw_C d\mu_C d\phi_C. \\
 (8.7.15)
 \end{aligned}$$

Notando

$$c_{7,C} = K_{np} n_{np} \frac{t_* m_C^*{}^{3/2} \sqrt{k_B T}}{\hbar^3},$$

obtenemos

$$S(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) d\mathbf{k}_C = c_{7,C} \left[\delta(w_B - w_A - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) + a_{np} \delta(w_B - w_A + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) \right] \frac{1}{t_*} dw_C d\mu_C d\phi_C.$$

(8.7.16)

Para concluir con la adimensionalización y el cambio de coordenadas del operador de colisión, sólo nos resta calcular

$$\int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) d\mathbf{k}'_A, \int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}'_A, \mathbf{k}_A) f_A(\mathbf{k}'_A) d\mathbf{k}'_A, \int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A) d\mathbf{k}'_A, \int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) f_A(\mathbf{k}_A) d\mathbf{k}'_A.$$

Cantidades que se obtienen fácilmente a partir de (8.7.11) y (8.7.16). Adoptado la notación $g^+(s) = g(s)$ si $s \geq 0$ y cero en otro caso, obtenemos,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} S_A(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) d\mathbf{k}'_A &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \left[c_{3,A} + c_{4,A} \frac{1}{[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2]^2} \right] \\ &\cdot \delta(w'_A - w_A) \\ &+ c_{5,A} \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} \\ &\cdot \left[\delta(w'_A - w_A - \alpha_p) + a_p \delta(w'_A - w_A + \alpha_p) \right] \\ &+ c_{6,A} \left[\delta(w'_A - w_A - \alpha_{np}) + a_{np} \delta(w'_A - w_A + \alpha_{np}) \right] \\ &\frac{s_A(w'_A)}{t_*} dw'_A d\mu'_A d\phi'_A \\ &= \left[4\pi c_{3,A} s_A(w_A) + 4\pi c_{4,A} \frac{s_A(w_A)}{\beta_A^2 (4q_A(w_A) + \beta_A^2)} \right. \\ &+ c_{5,A} \left[N_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p) s_A(w_A + \alpha_p) \right. \\ &+ a_p N_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p) s_A^+(w_A - \alpha_p) \left. \right] \\ &+ c_{6,A} 4\pi \left[s_A(w_A + \alpha_{np}) + a_{np} s_A^+(w_A - \alpha_{np}) \right] \left. \right] \frac{1}{t_*}. \end{aligned}$$

Donde se ha realizado un cálculo explícito de las integrales y donde

$$N_{5,A}(w_A, w'_A) = \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{\bar{G}(\bar{\mathbf{k}}_A, \bar{\mathbf{k}}'_A)}{|\bar{\mathbf{k}}_A - \bar{\mathbf{k}}'_A|^2} d\mu'_A d\phi'_A.$$

No entramos en el detalle de las computaciones de estas integrales

$$(8.7.18) \quad N_{5,A}(w_A, w'_A) = 2\pi \left[2\hat{B} (2\hat{A}\hat{D} - \hat{B}\hat{C}) \hat{D}^{-2} + \hat{D}^{-3} (\hat{A}\hat{D} - \hat{B}\hat{C})^2 \log \left| \frac{\hat{C} + \hat{D}}{\hat{C} - \hat{D}} \right| \right],$$

donde

$$\hat{A} = \bar{a}_A \bar{a}'_A, \quad \hat{B} = \bar{c}_A \bar{c}'_A, \quad \hat{C} = q_A(w_A) + q_A(w'_A), \quad \hat{D} = -2 \sqrt{q_A(w_A) q_A(w'_A)}.$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} S_A(k'_A, k_A) f_A(k'_A) dk'_A &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \left[c_{3,A} + c_{4,A} \frac{1}{[\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A) + \beta_A^2]^2} \right] \\ &\quad \delta(w'_A - w_A) \\ &\quad + c_{5,A} \frac{\bar{G}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A)}{\varphi(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A, \phi_A, \phi'_A)} \\ &\quad \cdot [\delta(w'_A - w_A - \alpha_p) + a_p \delta(w'_A - w_A + \alpha_p)] \\ &\quad + c_{6,A} [\delta(w'_A - w_A - \alpha_{np}) + a_{np} \delta(w'_A - w_A + \alpha_{np})] \\ &\quad \frac{s_A(w'_A) F_A(w'_A, \mu'_A)}{t_*} dw'_A d\mu'_A d\phi'_A \\ &= \int_{-1}^1 [2\pi c_{3,A} s_A(w_A) F_A(w_A, \mu'_A) \\ &\quad + c_{4,A} I_{4,A}(w_A, \mu_A, \mu'_A) F_A(w_A, \mu'_A) s_A(w_A) \\ &\quad + c_{5,A} [I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) F_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_A) s_A^+(w_A - \alpha_p) \\ &\quad + a_p I_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) F_A(w_A + \alpha_p, \mu'_A) s_A(w_A + \alpha_p)] \\ &\quad + c_{6,A} 2\pi [F_A^+(w_A - \alpha_{np}, \mu'_A) s_A^+(w_A - \alpha_{np}) \\ &\quad + a_{np} F_A(w_A + \alpha_{np}, \mu'_A) s_A(w_A + \alpha_{np})] \frac{1}{t_*} d\mu'_A. \end{aligned} \tag{8.7.19}$$

Donde

$$I_{4,A}(w_A, \mu_A, \mu'_A) = \int_0^{+\infty} dw'_A \int_0^{2\pi} d\phi'_A \frac{1}{(|\bar{k}_A - \bar{k}'_A|^2 + \beta_A^2)^2} \delta(w'_A - w_A)$$

y se prueba

$$(8.7.20) \quad I_{4,A}(w_A, \mu_A, \mu'_A) = \frac{2\pi [2q_A(w_A)(1 - \mu_A \mu'_A) + \beta_A^2]}{[4q_A^2(w_A)(\mu_A - \mu'_A)^2 + \beta_A^4 + 4\beta_A^2 q_A(w_A)(1 - \mu_A \mu'_A)]^{3/2}}.$$

$$I_{5,A}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A) = \int_0^{2\pi} d\phi'_A \frac{\bar{G}(\bar{k}_A, \bar{k}'_A)}{|\bar{k}_A - \bar{k}'_A|^2}$$

y se prueba

$$(8.7.21) \quad I_{5,A}(w_A, w'_A, \mu_A, \mu'_A) = 2\pi \frac{B_* (B_* C_* - 2A_* D_*) (\sqrt{C_*^2 - D_*^2} + C_*)^{-1} + A_*^2}{\sqrt{C_*^2 - D_*^2}},$$

con

$$A_* = \bar{a}_A \bar{a}'_A + \bar{c}_A \bar{c}'_A \mu_A \mu'_A, \quad B_* = \bar{c}_A \bar{c}'_A \sqrt{1 - \mu_A^2} \sqrt{1 - \mu'^2_A}$$

$$C_* = q_A(w_A) + q_A(w'_A) - 2 \sqrt{q_A(w_A) q_A(w'_A)} \mu_A \mu'_A$$

$$D_* = -2 \sqrt{q_A(w_A) q_A(w'_A)} \sqrt{1 - \mu_A^2} \sqrt{1 - \mu'^2_A}.$$

$$(8.7.22) \quad \int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A) d\mathbf{k}_A = 4\pi c_{7,A} \left[s_A^+(w_B + \alpha_{np} + \bar{\Delta}_{BA}) + a_{np} s_A^+(w_B - \alpha_{np} + \bar{\Delta}_{BA}) \right] \frac{1}{t_*}$$

$$(8.7.23) \quad \int_{\mathbb{R}^3} S(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) f_A(\mathbf{k}_A) d\mathbf{k}_A = 2\pi c_{7,A} \int_{-1}^1 \left[F_A^+(w_B - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}, \mu_A) s_A^+(w_B - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) \right. \\ \left. + a_{np} F_A^+(w_B + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}, \mu_A) s_A^+(w_B + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{AB}) \right] \frac{1}{t_*} d\mu_A$$

Finalmente, si multiplicamos por $s_A(w_A)$ y unimos las piezas, antes calculadas, el operador de colisión se reescribe como:

$$\begin{aligned}
t_* \bar{Q}(\Phi_A) &= s_A(w_A) \int_{-1}^1 \left\{ 2\pi c_{3,A} \Phi_A(w_A, \mu'_A) + c_{4,A} I_{4,A}(w_A, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A(w_A, \mu'_A) \right. \\
&+ c_{5,A} \left[I_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A^+(w_A - \alpha_p, \mu'_A) \right. \\
&+ \left. a_p I_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p, \mu_A, \mu'_A) \Phi_A(w_A + \alpha_p, \mu'_A) \right] \\
&+ \left. c_{6,A} 2\pi \left[\Phi_A^+(w_A - \alpha_{np}, \mu'_A) + a_{np} \Phi_A(w_A + \alpha_{np}, \mu'_A) \right] \right\} d\mu'_A \\
&- \left\{ 4\pi c_{3,A} s_A(w_A) + 4\pi c_{4,A} \frac{s_A(w_A)}{\beta_A^2 (4q_A(w_A) + \beta_A^2)} \right. \\
&+ c_{5,A} \left[N_{5,A}(w_A, w_A + \alpha_p) s_A(w_A + \alpha_p) + a_p N_{5,A}^+(w_A, w_A - \alpha_p) s_A^+(w_A - \alpha_p) \right] \\
&+ \left. c_{6,A} 4\pi \left[s_A(w_A + \alpha_{np}) + a_{np} s_A^+(w_A - \alpha_{np}) \right] \right\} \Phi_A(w_A, \mu_A) \\
&+ Z_{AB} s_A(w_A) c_{7,B} 2\pi \int_{-1}^1 \left[\Phi_B^+(w_A - \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{BA}, \mu_B) \right. \\
&+ \left. a_{np} \Phi_B^+(w_A + \alpha_{np} - \bar{\Delta}_{BA}, \mu_B) \right] d\mu_B \\
(8.7.24) \quad &- Z_{AB} c_{7,B} 4\pi \left[s_B^+(w_A + \alpha_{np} + \bar{\Delta}_{AB}) + a_{np} s_B^+(w_A - \alpha_{np} + \bar{\Delta}_{AB}) \right] \Phi_A(w_A, \mu_A).
\end{aligned}$$

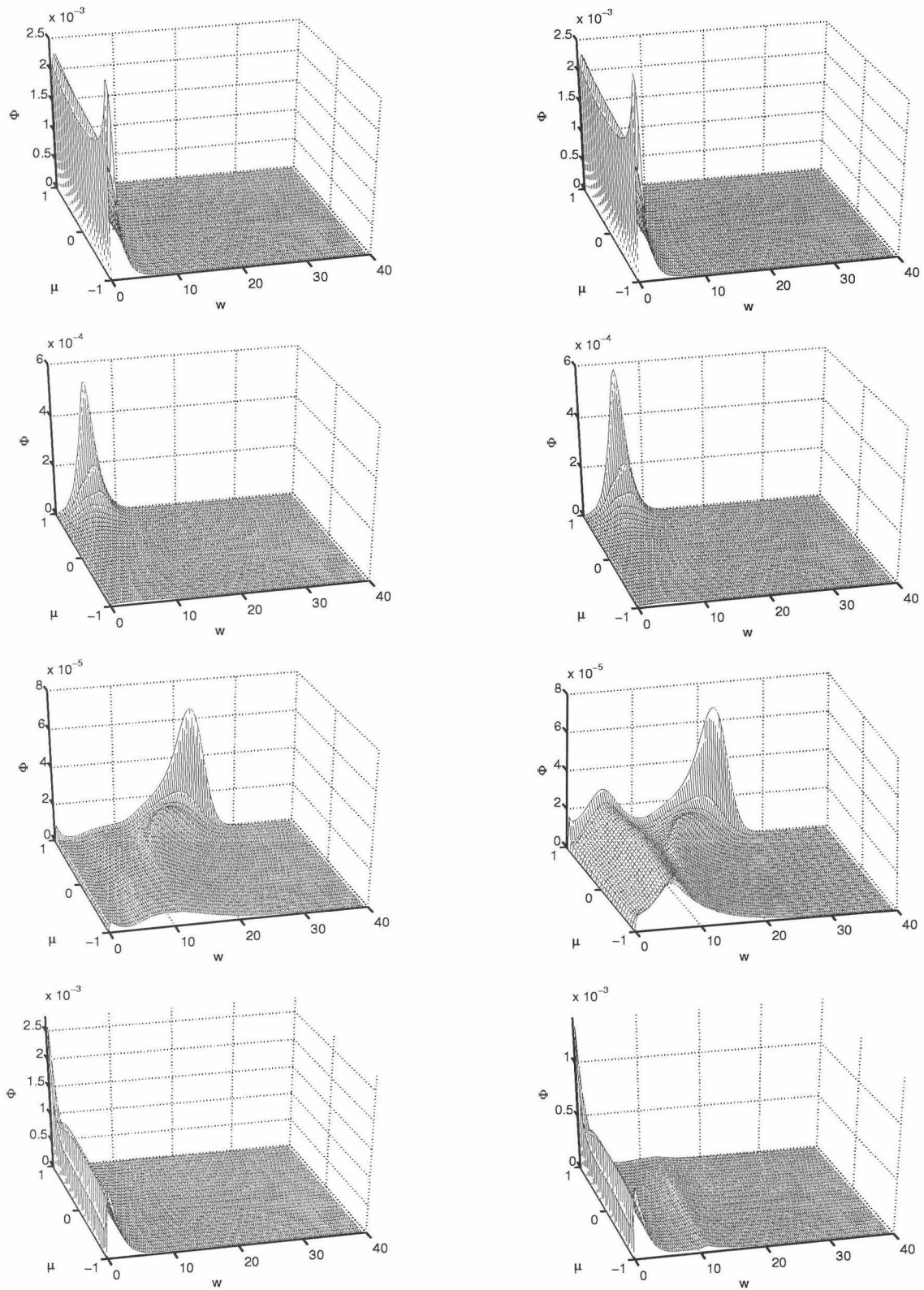


FIGURA 8.9. Función de distribución en el valle Γ para un potencial aplicado de $0.75 V$, a $300 K$ de temperatura, tras $1.5 ps$ (columna de la izquierda) y tras $3 ps$ (columna de la derecha), en distintos puntos del dispositivo (de arriba a abajo): $z = 0,102667 \mu m$, $z = 0,275 \mu m$, $z = 0,399667 \mu m$ y $z = 0,44 \mu m$.

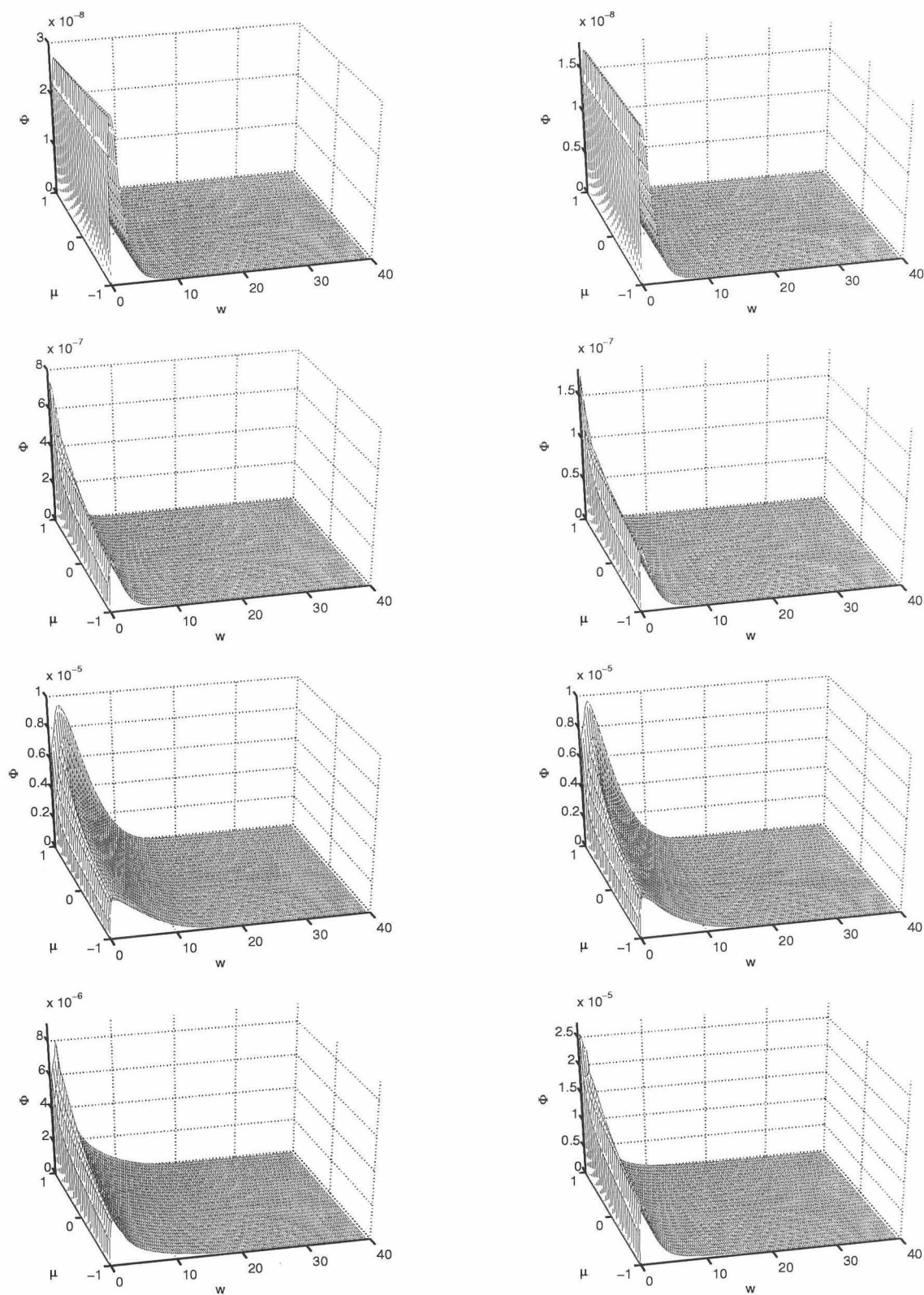


FIGURA 8.10. Función de distribución en el valle L para un potencial aplicado de $0.75 V$, a $300 K$ de temperatura, tras $1.5 ps$ (columna de la izquierda) y tras $3 ps$ (columna de la derecha), en distintos puntos del dispositivo (de arriba a abajo): $z = 0,102667 \mu m$, $z = 0,275 \mu m$, $z = 0,399667 \mu m$ y $z = 0,44 \mu m$.

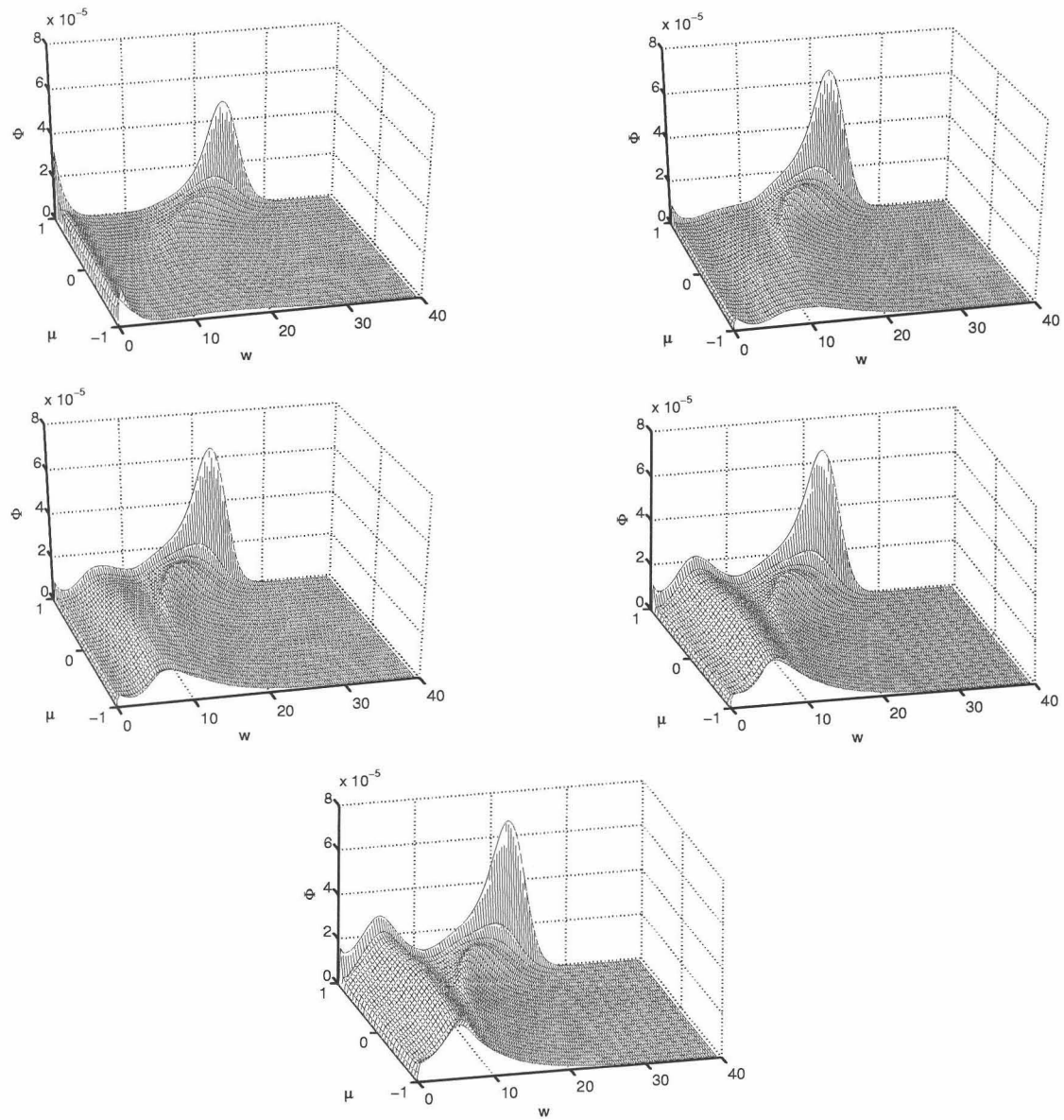


FIGURA 8.11. Evolución en el tiempo de la función de distribución en el valle Γ para un potencial aplicado de 0.75 V, a 300 K de temperatura, en el punto $z = 0,399667 \mu\text{m}$. $t = 1, 1.5, 2, 2.5, 3$ ps.

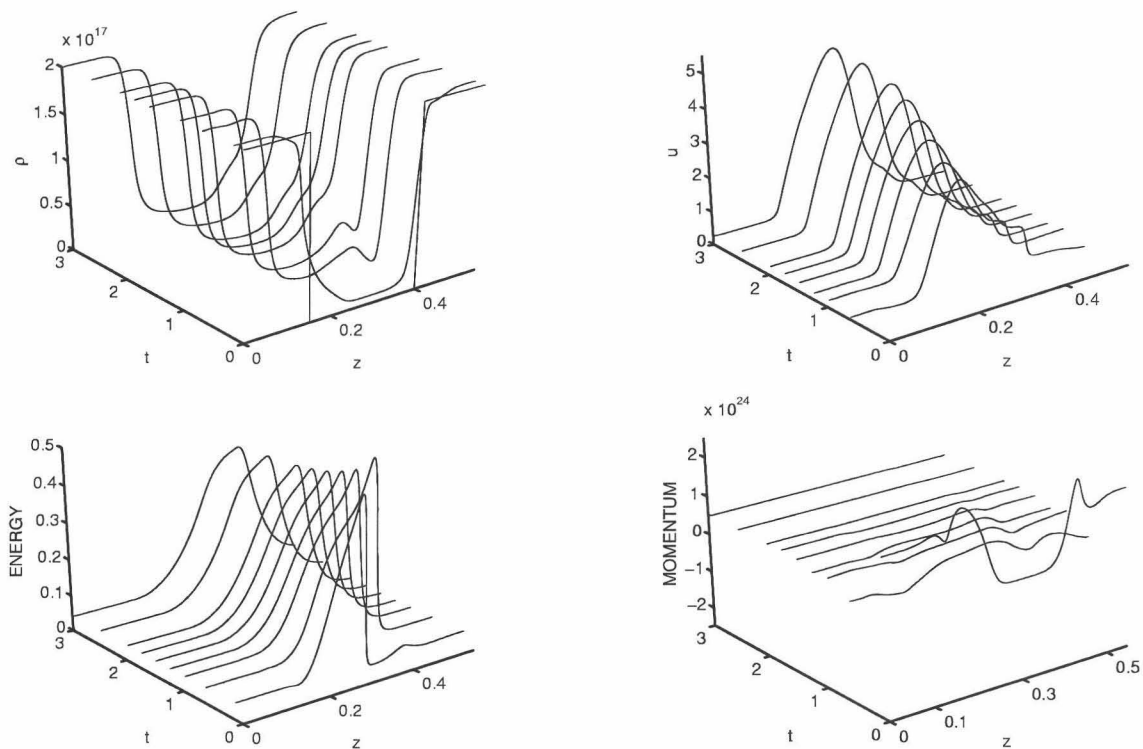


FIGURA 8.12. Evolución de las cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de 0.75 V y la temperatura de 300 K. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad (10^7 cm/s), energía (eV) y momento ($\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$).

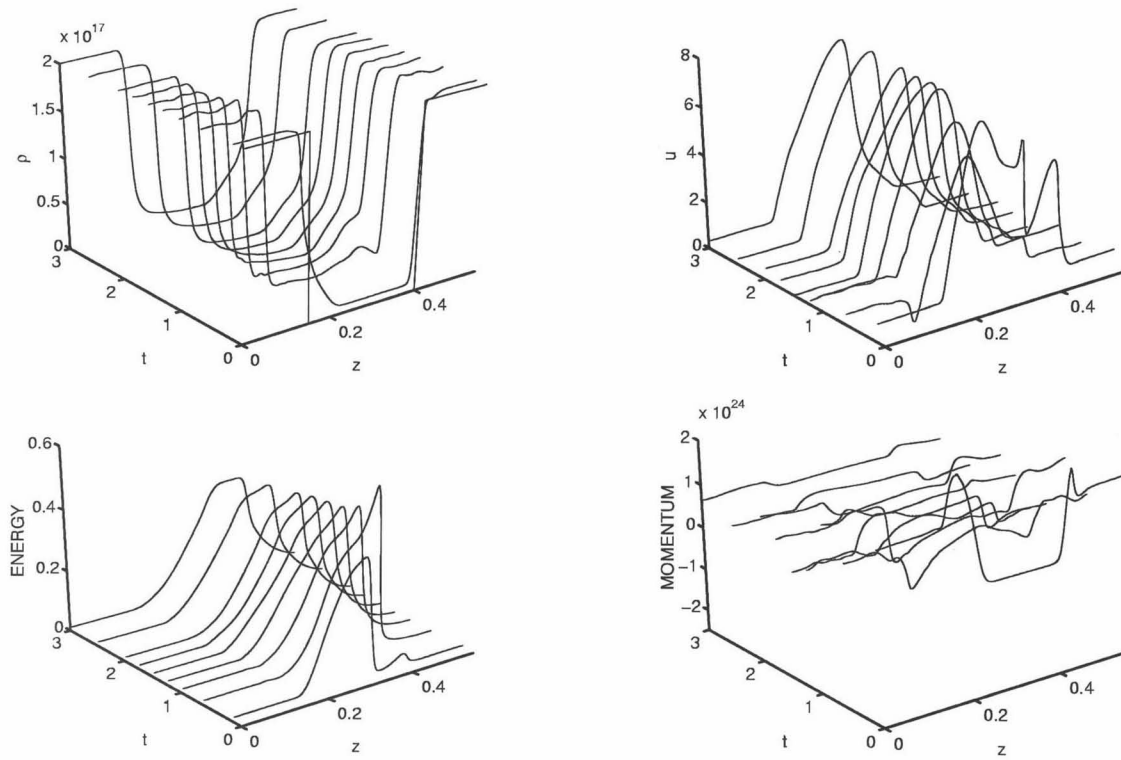


FIGURA 8.13. Evolución de las cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de $0.75 V$ y la temperatura de $77 K$. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad ($10^7 cm/s$), energía (eV) y momento ($cm^{-2} s^{-1}$).

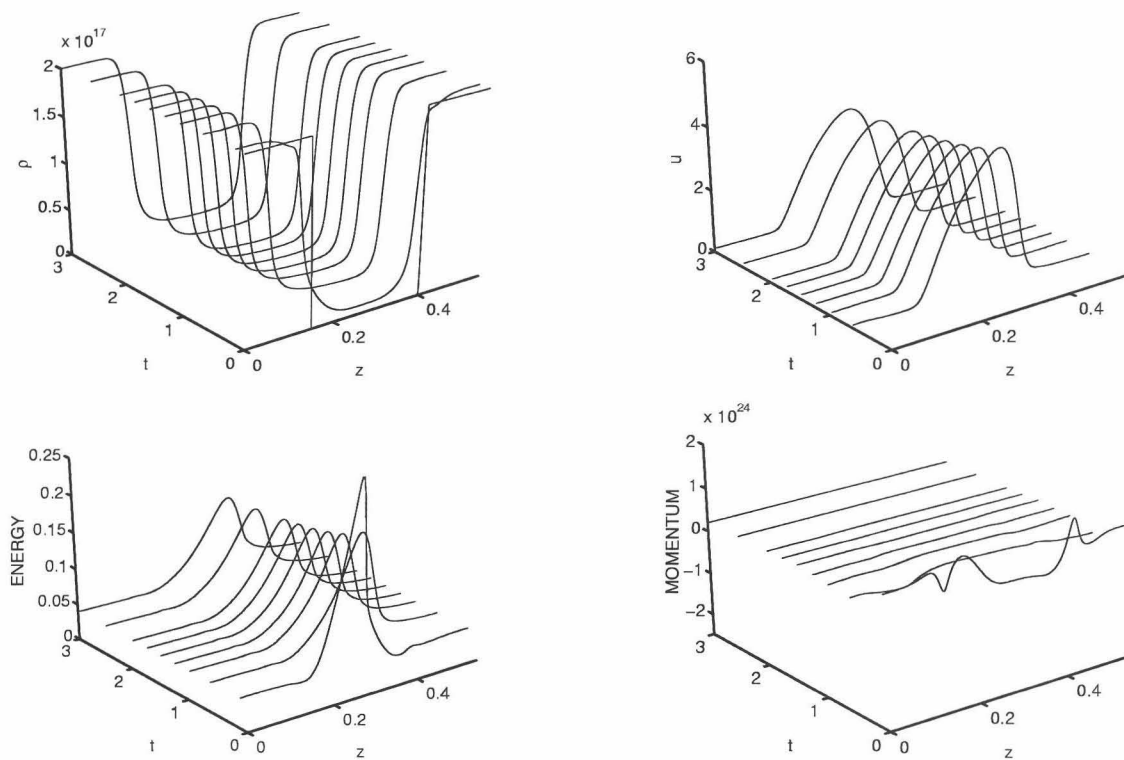


FIGURA 8.14. Evolución de las cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de 0.25 V y la temperatura de 300 K. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad ($10^7 cm/s$), energía (eV) y momento ($cm^{-2} s^{-1}$).

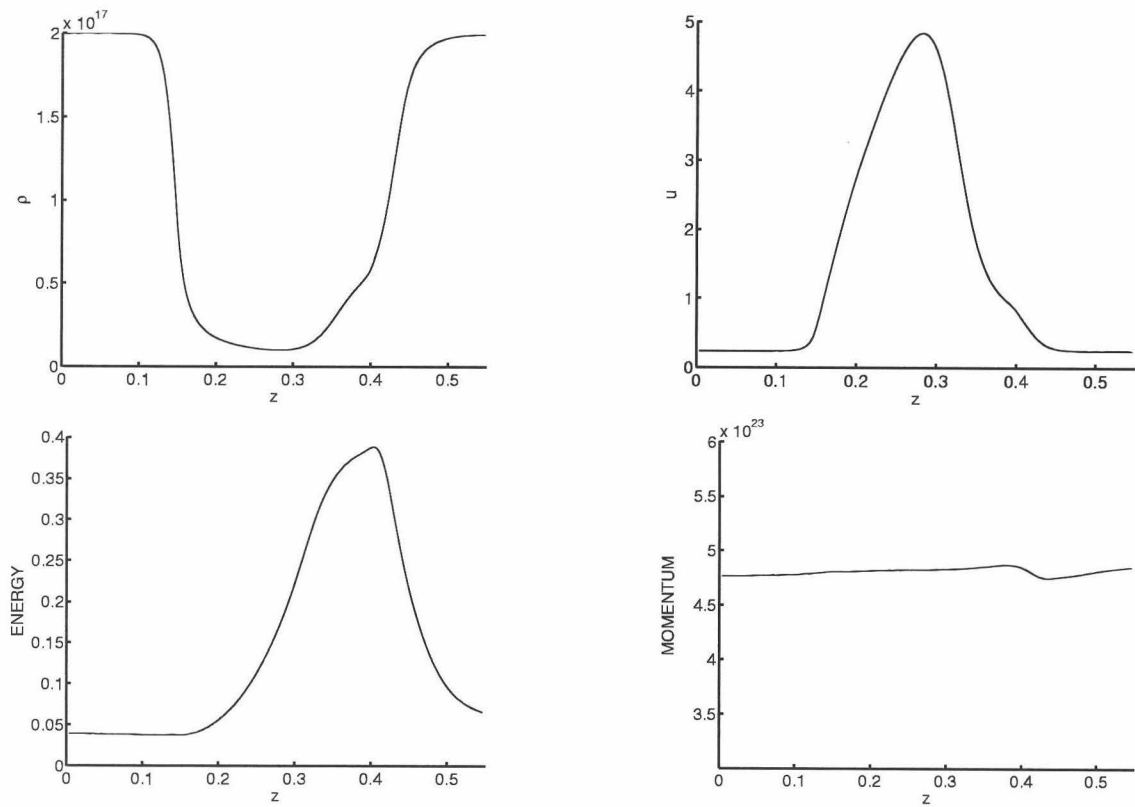


FIGURA 8.15. Cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de 0.75 V y la temperatura de 300 K , tras 3 ps . De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad (10^7 cm/s), energía (eV) y momento ($\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$).

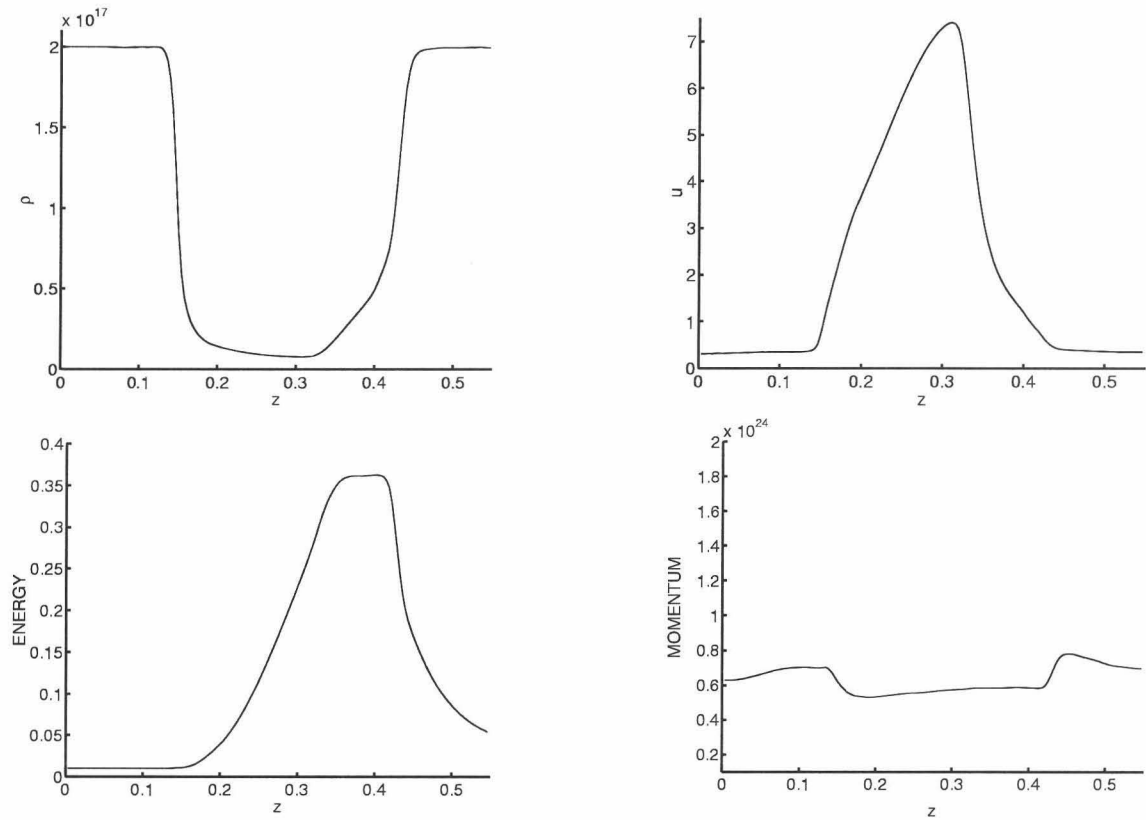


FIGURA 8.16. Cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de $0.75 V$ y la temperatura de $77 K$, tras $3 ps$. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad ($10^7 cm/s$), energía (eV) y momento ($cm^{-2} s^{-1}$).

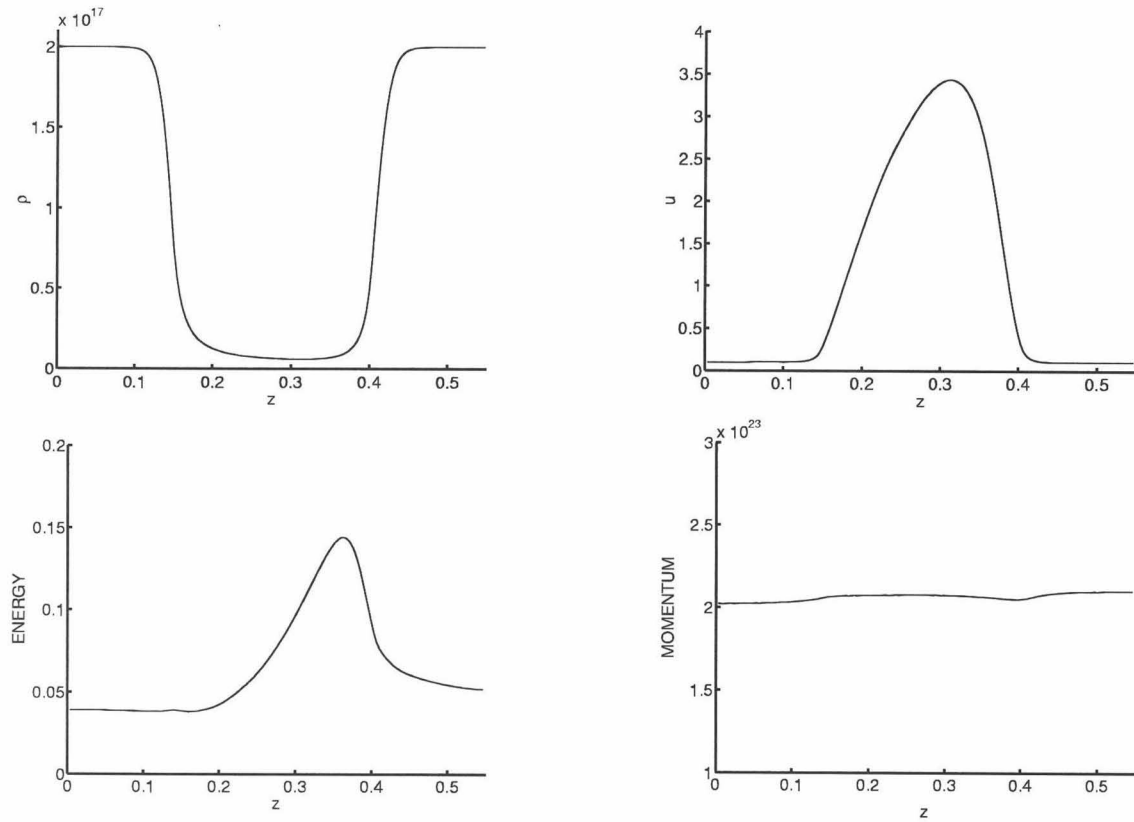


FIGURA 8.17. Cantidades macroscópicas del dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ cuando el potencial aplicado es de 0.25 V y la temperatura de 300 K, tras 3 ps. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad (10^7 cm/s), energía (eV) y momento ($\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$).

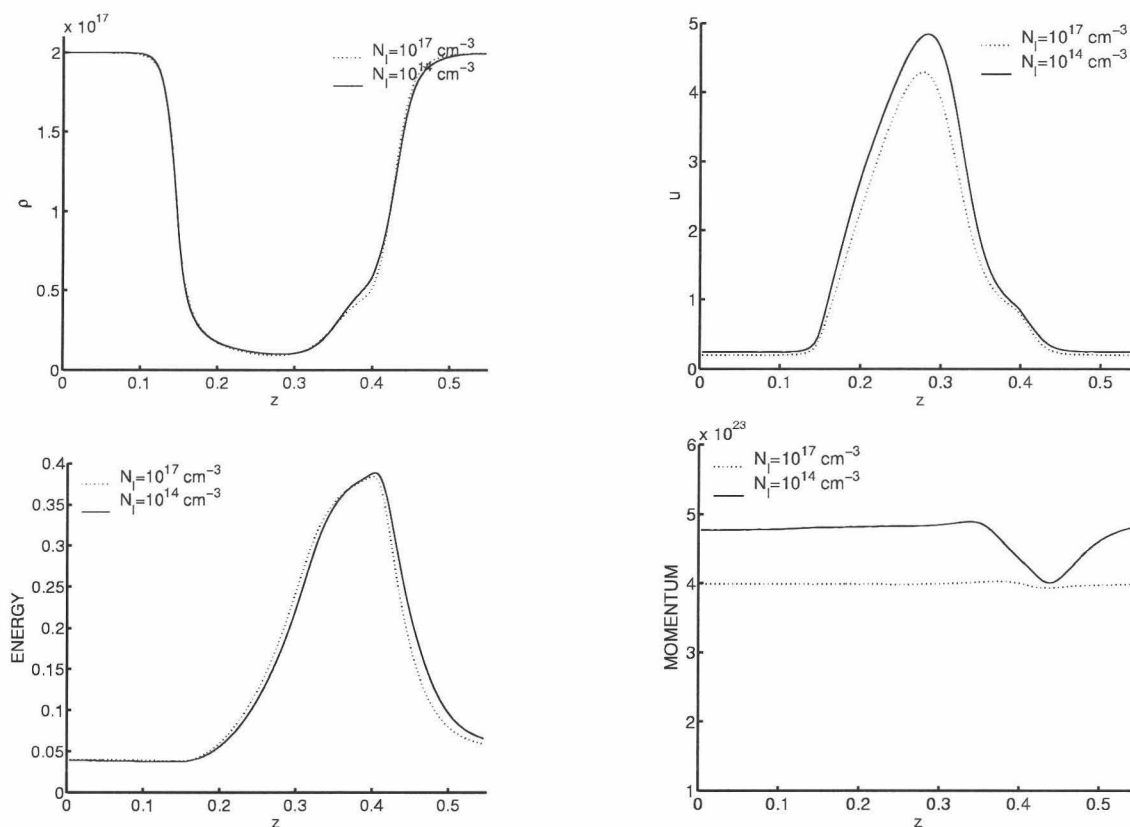
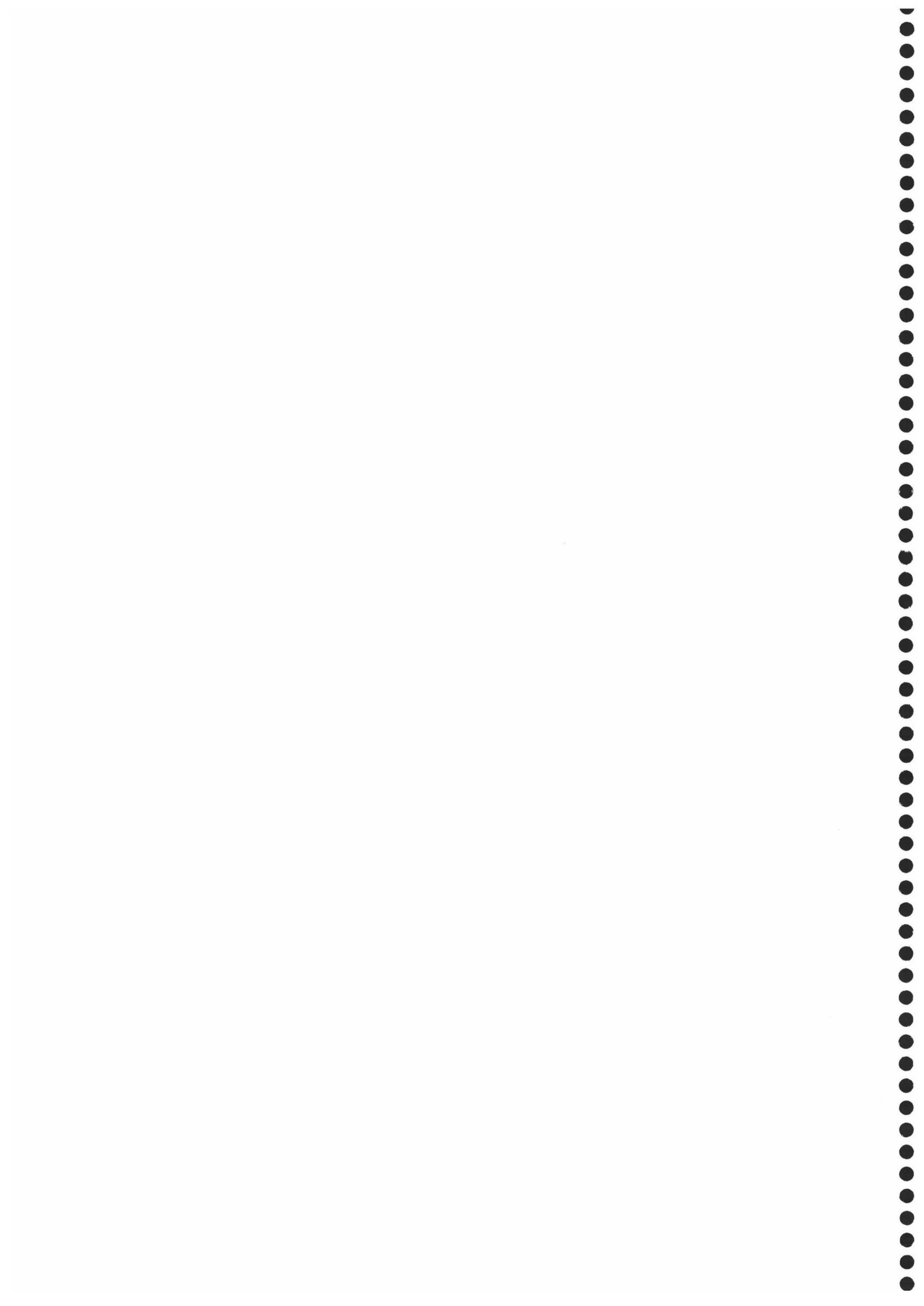


FIGURA 8.18. Comparaciones de las cantidades macroscópicas para diversas concentraciones de impurezas, para un dispositivo $N^+ - N_i - N^+$ con potencial aplicado de 0.75 V y 300 K de temperatura. De arriba a abajo y de izquierda a derecha: densidad (cm^{-3}), velocidad (10^7 cm/s), energía (eV) y momento ($\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$).



Bibliografía

- [1] J. A. CARRILLO, I. M. GAMBA, A. MAJORANA, C.-W. SHU, *A WENO-Solver for the transients of Boltzmann-Poisson system for semiconductor devices: performance and comparisions with Monte Carlo methods*, J. Comput. Phys 184, (2003), pp. 498-525.
- [2] J. A. CARRILLO, I. M. GAMBA, A. MAJORANA, C.-W. SHU, *A direct solver for 2D non-stationay Boltzmann-Poisson systems for semiconductor devices: a MESFET simulation by WENO-Boltzmann schemes*, para aparecer en J. computational Electronics.
- [3] P. DEGOND, F. DELAURENS, F. J. MUSTIELES, *Semiconductor modelling via the Boltzmann equation*, Comput. Meth. Appl. Sci. Eng., (1990), pp. 311-324.
- [4] F. DELAURENS, F. J. MUSTIELES, *A deterministic particle method for solving kinetic trasnport equations: the semiconductor Boltzmann equation case*, SIAM J. Appl. Math., 52, (1992), pp. 973-998.
- [5] P. DEGOND, B. NICLOT, F. POUPAUD, *Deterministic particle simulations the Boltzmann transport equation of semiconductors*, J. Comp. Phys., 78, (1988), pp. 313-349.
- [6] E. FATEMI, F. ODEH, *Upwind finite difference solution of Boltzmann equation applied to electron transport in semiconductor devices*, J. Comput. Phys. 108, (1993), pp. 209-217.
- [7] C. JACOBONI, P. LUGLI, *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*, Wien- New York, Spring-Verlang 1989.
- [8] C. JACOBONI, L. REGGIANI, *The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semicon-ductor with application to covalent materials*, Review Modern Phys. 55: pp. 645-705. 1983.
- [9] A. MAJORANA, R. PIDATELLA, *A finite difference scheme solving the Boltzmann-Poisson system for semiconductor devices*, J. Comput. Phys. 174, (2001), pp. 649-668.
- [10] G. MASCALI, V. ROMANO, *Hydrodynamical model of charge transport in GaAs based on the maximum entropy principle*, Continuum Mechanics and Thermodynamics, 14, (2002), pp.405-423.
- [11] K. TOMIZAWA, *Numerical simulation of sub micron semiconductor devices*, Boston, Artech House, 1993.