Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen mit Anwendungen in der Halbleitertechnologie

Schlußbericht* zu einem Vorhaben im BMBF–Förderprogramm

Anwendungsorientierte Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Mathematik

Rolf Hünlich, Annegret Glitzky, Wilfried Röpke

Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis and Stochastik

Mohrenstraße 39, D–10117 Berlin

Report No. 13

ISSN 0946 – 8838

Berlin 1997

Schlagwörter: Systeme von Reaktions–Diffusionsgleichungen, Transport geladener Teilchen, Heterostrukturen, Existenz, Einzigkeit, Asymptotik, Konvergenz von Näherungsverfahren, Simulation von Prozessen der Halbleitertechnologie, Hetero–Bipolartransistoren.

*Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Forschung und Technologie unter dem Förderkennzeichen GA7FVB–1.0M840 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung

Im Vorhaben wurden Beiträge zur Modellierung und Simulation relevanter Teilprozesse bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen der Nanoelektronik geleistet. Behandelt wurden vorrangig Fragestellungen, die beim Verbundpartner, dem Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder), zur Entwicklung von SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren von Bedeutung waren. Schwerpunkte bildeten Fragen zur Diffusion von Fremdatomen in verspannten SiGe–Schichten sowie zu Feldeffekten bei der Diffusion elektrisch geladener Teilchen im Hochkonzentrationsfall. Gegenstand der analytischen und numerischen Untersuchungen waren verschiedene Klassen von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen, die relevante Aufgaben aus der Halbleitertechnologie auf verschiedenen Niveaus modellieren. Hier wurden neue Aussagen zur globalen Existenz, Einzigkeit und zum asymptotischen Verhalten der Lösungen erhalten. Weiterhin wurden Diskretisierungsschemata, die Konvergenz von Näherungsverfahren sowie die Reduktion der Modellgleichungen für singulär gestörte Fälle diskutiert.

Abstract

In the project we made a contribution to the modelling and simulation of relevant process steps in the fabrication of modern nanoelectronic semiconductor devices. Mainly we dealt with questions arising at the Institute of Semiconductor Physics Frankfurt (Oder) – our project partner – during the development of SiGe–heterojunction–bipolar transistors. We focussed our attention on problems concerning the diffusion of dopant atoms in strained SiGe–layers as well as on the diffusion of electrically charged species in the case of high doping. We forced our analytical and numerical investigations to various classes of electro–reaction–diffusion equations in heterostructures which model relevant processes in semiconductor technology at different levels. We found new results concerning existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions. Moreover we discussed discrete versions of these equations, we proved the convergence of some numerical schemes, and we considered reductions of the model equations in some singularly perturbed cases.

1 Kurze Darstellung

1.1 Motivierung und Aufgabenstellung

Der Markt für Systeme der drahtlosen Kommunikation wird in den nächsten 5 bis 10 Jahren rasant anwachsen. Die meisten der neuen Geräte werden dabei im Frequenzbereich von 1.8 bis 5 GHz eingesetzt werden. Die Transistoren, die Signale dieser Frequenzen verarbeiten müssen, sollten dann Grenzfrequenzen im Bereich von 30 bis 50 GHz besitzen. Da herkömmliche Si–Bipolartransistoren nur unter sehr hohem technischen Aufwand in diesen Bereich vorstoßen, stellen SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren (SiGe–HBTs), die diese Frequenzen schon bei mittlerer Skalierung erreichen, außerdem ein viel besseres Rauschverhalten aufweisen und gut in die Si–Schaltkreise integriert werden können, eine unbedingt zu verfolgende Alternative dar (s. auch [50]). Dies ist der Grund für die weltweite Forschung auf diesem Gebiet in den letzten fünf Jahren.

Beim Verbundpartner, dem Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) (IHP), hat sich die Forschung zum SiGe–HBT zum dominierenden Schwerpunkt entwickelt. Sie ist in das BMBF–Verbundprojekt LOTUS integriert, an dem die Daimler–Benz AG Ulm, die TU Ulm, die Ruhr-Universität Bochum, die TU Bremen und die TU Ilmenau beteiligt sind. Die inzwischen *am IHP präparierten SiGe–HBTs sind die drittschnellsten der Welt.* Im vergangenen Jahr *wurde die Materialforschung von reiner Forschung in Richtung einer Unterstützung der Technologie durch Ausbeuteerhöhung und Prozeßsimulation weiterentwickelt. Die Technologie wurde auf die Erarbeitung eines kostengünstigen CMOS–kompatiblen HBT–Moduls umorientiert* (Zitate aus [49]).

Die Entwicklung von SiGe–HBTs und anderen modernen Bauelementen der Nanoelektronik ist aus mehreren Gründen ohne den Einsatz von Simulationsprogrammen kaum durchführbar. Um dabei genügend sichere Aussagen zu erhalten, muß die Simulation auf hohem Niveau erfolgen, was durch die Qualität sowohl der zu Grunde liegenden Modelle als auch der Programme zur numerischen Lösung der entsprechenden Modellgleichungen bestimmt wird. Hieraus leiten sich vielfältige Fragestellungen für mathematische Untersuchungen ab. Modellentwicklung bedeutet auch die Entwicklung *mathematischer* Modelle und die analytische Untersuchung ihrer qualitativen Eigenschaften. Untersuchungen zur Numerik der Modellgleichungen bilden schließlich die Grundlage für die Codes, die in die Simulationsprogramme eingehen.

Besondere Bedeutung kommt hierbei der Modellierung und der Simulation des Transports von Fremdatomen und Punktdefekten in Halbleiterstrukturen zu. Ausgehend von unterschiedlichen physikalischen Modellvorstellungen über die kinetischen Prozesse in den einzelnen Materialien und auf den Grenzflächen zwischen verschiedenen Materialien lassen sich die Transportprozesse durch verschiedene Typen von Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen modellieren. Für den Zweck einer numerischen Simulation werden diese Modellgleichungen häufig in nicht immer konsistenter Weise vereinfacht. Sowohl die allgemeinen Modellgleichungen als auch ihre physikalisch sinnvollen und aus der Sicht einer effektiven Simulation auch notwendigen Vereinfachungen stellen aus mathematischer Sicht sehr anspruchsvolle Aufgaben dar, deren analytische und numerische Untersuchung nur in ersten Ansätzen vorlag. Ziel dieses Vorhabens war es, ausgewählte, für die Halbleitertechnologie relevante, instationäre Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen in analytischer und numerischer Hinsicht umfassend zu untersuchen, um die erzielten Ergebnisse für eine zuverlässige und effiziente Simulation einsetzen zu können. Insbesondere sollten die beim Verbundpartner benutzten Prozeßsimulatoren TEMO und DIOS entsprechend der Anforderungen des SiGe–HBT–Entwurfs weiterentwickelt werden.

Aus mathematischer Sicht ging es darum, verschiedene Modelle entsprechend ihrer mathematischen Struktur zu klassifizieren und für einzelne Modellklassen folgende Fragestellungen zu untersuchen:

- Korrektheit der Aufgabenstellung (Existenz, Einzigkeit),
- qualitative Eigenschaften der Lösungen (globale Beschränktheit, asymptotisches Verhalten),
- Reduktion der Gleichungen im Grenzfall sehr kleiner bzw. sehr großer Parameter,
- Diskretisierung der Gleichungen und qualitative Eigenschaften ihrer Lösungen,
- Konvergenz von Näherungsverfahren.

1.2 Wissenschaftlicher Stand zu Beginn des Vorhabens

In Vorbereitung und zu Beginn des Vorhabens wurden umfangreiche Literaturrecherchen auf der Grundlage der Datenbanken INSPEC/Physics und MATHSCI durchgeführt, die im Verlaufe des Vorhabens kontinuierlich fortgesetzt worden sind.

Die ersten Recherchen machten den Stand der Modellierung (siehe etwa [14, 45, 11]) deutlich, von dem, neben dem damaligen Stand der beim Verbundpartner benutzten Prozeßsimulatoren TEMO und DIOS, auszugehen war. TEMO ist ein 1D–Programm, das vor allem zur Modelldiskussion und Parameterverifikation benutzt wird. Mit dem 2D–Simulator DIOS [65] können komplette Technologien mit ihren verschiedenen Teilprozessen (z. B. Abscheiden und Ätzen von Schichten zur Strukturbildung, Einbringen von Dotanden durch Ionenimplantation, Umverteilung der Dotanden bei Temperung in inerter oder oxydierender Atmosphäre) simuliert werden. So lassen sich technologisch kritische Stellen, die oft einer experimentellen Untersuchung nicht zugänglich sind, überprüfen (z. B. Überlappungen von Schichten, Unterätzungen, vertikale und laterale Dotandenprofilverläufe). Die simulierte Struktur und Dotierung können dann als Eingabegrößen für den Bauelementesimulator ToSCA [25] benutzt werden.

Die Auswertung der mathematischen Fachliteratur machte deutlich, daß die relevanten Modellgleichungen aus Sicht der Spezifika des Vorhabens kaum behandelt worden waren (zu Einzelheiten s. Abschn. 2.3.2). Als nützlich erwiesen sich dagegen die in den vergangenen Jahren am WIAS erzielten Resultate (s. vor allem [23]) zu ähnlichen Modellgleichungen, die die Grundlage für die Bauelementesimulation bilden.

1.3 Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben begann am 1.1.1994 und endete zum 31.12.1996.

Im ersten Jahr des Vorhabens standen die physikalische und mathematische Modellierung, die Simulation und Modellverifikation für ausgewählte technologische Teilschritte sowie die mathematische Untersuchung vereinfachter, aber typischer Modellgleichungen im Vordergrund. Umfangreiche Literaturrecherchen machten die Vielfalt der diskutierten Modelle, aber auch die unzureichende mathematische Behandlung deutlich. Neue Fragestellungen ergaben sich aus der Einbeziehung innerer mechanischer bzw. elektrischer Felder. Hier wurden Fortschritte bei der Modellierung und Simulation der Diffusion von Fremdatomen in verspannten SiGe–Schichten erzielt (s. Abschn. 2.1.2 u. 2.2.1). Für ein spezielles Modell zur Beschreibung der Umverteilung elektrisch geladener Dotanden, das die Quasineutralitätsnäherung benutzt, wurden mathematische Ergebnisse zur globalen Existenz, Einzigkeit und zum asymptotischen Verhalten erzielt. Darüber hinaus konnten Aussagen über Eigenschaften und Konvergenz von impliziten bzw. semi–impliziten Zeitdiskretisierungsschemata gefunden werden (s. Abschn. 2.3.5).

1995 wurden die Untersuchungen zur Simulation der Diffusion von Bor in verspannten SiGe–Schichten fortgesetzt. Die Identifikation der Modellparameter erforderte die Entwicklung neuer Verfahren zur Auswertung der SIMS–Messungen. Nach umfangreichen Tests wurde das verifizierte Modell von DIOS übernommen, so daß auf diesem Modellniveau auch 2D–Simulationen durchgeführt werden konnten (s. Abschn. 2.1.1 u. 2.2.1). Weiterhin wurden Probleme behandelt, die auftreten, wenn Profile elektrisch geladener Dotanden mit hohen Konzentrationen eng benachbart sind. Es wurde untersucht, inwieweit in einer solchen Situation, zu der am IHP Experimente gemacht worden sind, die Simulationsprogramme noch gültige Aussagen liefern (s. Abschn. 2.2.2). Mathematische Untersuchungen waren einem allgemeinen Modell, beschrieben durch Kontinuitätsgleichungen für beliebig viele Sorten (geladener) Teilchen gekoppelt mit der Poissongleichung zur Berechnung des elektrostatischen Potentials, gewidmet. Hierzu wurden neue Ergebnisse bzgl. globaler Existenz, Einzigkeit, des asymptotischen Verhaltens und zeitlicher Diskretisierungen gewonnen (s. Abschn. 2.3.3).

Schwerpunkt der Arbeiten im letzten Jahr des Vorhabens war die Untersuchung eines reduzierten Modells, bei dem die Kinetik der freien Ladungsträger vereinfacht berücksichtigt wird. Hier sind die Kontinuitätsgleichungen für die verbleibenden Spezies mit einer nichtlinearen und nichtlokalen Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen zur Berechnung des elektrostatischen Potentials gekoppelt (s. Abschn. 2.2.3 u. 2.3.4). Auch hier wurden neue Resultate bezüglich globaler Existenz, Einzigkeit und des asymptotischen Verhaltens erzielt (s. Abschn. 2.3.4). Zur numerischen Simulation wurde ein 1D–Simulationsprogramm entwickelt, das gegenwärtig eingesetzt wird, um sowohl die B–Diffusion in SiGe–Schichten als auch die Diffusion mehrer hochdotierter Fremdatome zu simulieren. Die Ergebnisse sollen mit den vorliegenden Experimenten (s. Abschn. 2.2.1 u. 2.2.2) verglichen werden.

1.4 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Arbeiten zur Modellierung und Simulation erfolgten in enger Kooperation zwischen dem WIAS und dem IHP. Als vorteilhaft erwies sich, daß einer der Autoren (W. Röpke) zunächst (1994) am WIAS und dann am IHP tätig war, wo er sich vorrangig mit der Prozeßsimulation zu SiGe–HBTs befaßte. Darüberhinaus haben Ergebnisse und Leistungen vieler Kollegen des IHP in unserem Vorhaben Berücksichtigung gefunden, und zwar

zur Simulation: G. Fischer, B. Heinemann, F. Herzel, U. Jagdhold, W. Röpke (1995-97),

zur Schichtabscheidung: G. Lippert, T. Morgenstern, J. Osten, B. Tillack, D. Wolanski, P. Zeindl,

zur Technologie (stellvertretend für viele Mitarbeiter im Halbleiterlabor): K.-D. Bolze, K.-E. Ehwald, D. Knoll, D. Temmler,

zu Messungen: D. Krüger, R. Kurps (SIMS), P. Schley (elektr. Messungen).

Der Einsatz von DIOS zur Prozeßsimulation erfolgte in Zusammenarbeit mit N. Strecker (ETH Zürich). An der mathematischen Behandlung einiger Fragestellungen war K. Gröger (HU Berlin) beteiligt.

Allen genannten und ungenannten Helfern sei auch an dieser Stelle gedankt.

2 Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse

2.1 Technologiesimulation von SiGe–Hetero–Bipolartransistoren

2.1.1 Entwicklung von HBT–Strukturen

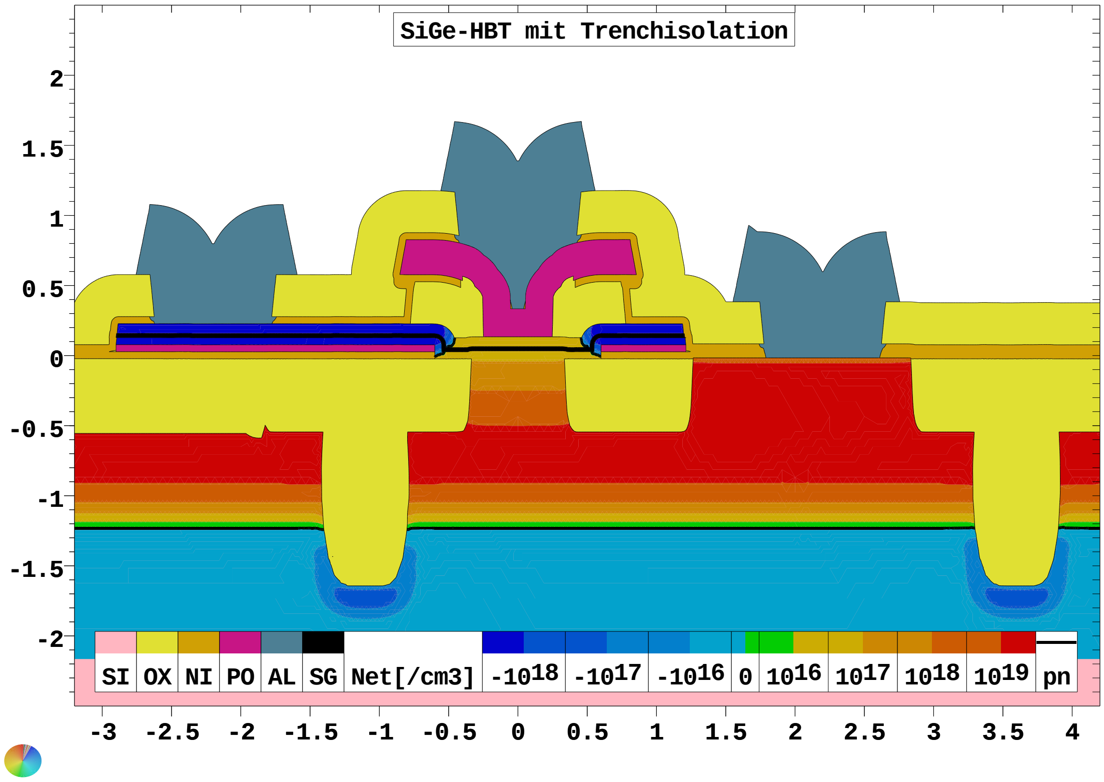
SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren unterscheiden sich von konventionellen Si–Homojunction–Bipolartransistoren dadurch, daß ihre Basis aus einer verspannten und mit Bor dotierten SiGe–Schicht besteht (typische Dicke 30 nm), in der mehrere vorteilhafte Effekte zur Wirkung kommen. Die durch den Germaniumeinbau hervorgerufene Verringerung des Bandabstandes führt zu günstigen energetischen Bedingungen für die beweglichen Ladungsträger, die einen kleinen Steuerstrom des Transistors ermöglichen. Die Bordotierung kann wegen der verringerten Diffusion in SiGe so hoch gewählt werden, daß sich ein geringer Basiswiderstand ergibt. Und schließlich erzeugt der steile Germaniumgradient in der Basis ein zusätzliches inneres elektrisches Feld, was die Bordiffusion weiterhin verringert und geringe Basisweiten, also kurze Laufzeiten der Ladungsträger, nach sich zieht. Die daraus folgenden Kenngrößen (hohe Grenzfrequenzen von etwa 50 bis 100 GHz, geringes Rauschen, niedrige Leistungsaufnahme) machen diese Transistoren für den Einsatz in der drahtlosen Nachrichtenübertragung besonders attraktiv.

Das Hauptziel des LOTUS–Projektes war die Herstellung eines integrationsfähigen SiGe–HBTs. Bezüglich seiner Leistungsfähigkeit hat sich die Sichtweise im Verlauf der Bearbeitungszeit erheblich geändert. Zuerst wurde ein Transistor angestrebt, der Grenzfrequenzen im Bereich der Rekordwerte um 100 GHz besitzen sollte. Das bedeutete, alle Bahn- und Anschlußwiderstände und die parasitären Kapazitäten genügend klein zu halten. Wegen der daraus resultierenden recht komplizierten Struktur (eine Simulation mit DIOS zeigt Abb. 1, oben) war seine Herstellung mit hohem technologischen Aufwand verbunden, seine Anwendung deshalb nur in Spezialschaltkreisen ratsam. Um jedoch eine Chance zu haben, für die Bauelementeentwicklung wirklich interessant zu werden, ist bald eine konsequente Ausrichtung auf die Anforderungen in der Schaltungstechnik der nächsten Jahre erfolgt, die darin bestehen,

- einen möglichst billigen Transistor herzustellen,
- den Aufwand bei Anpassung der Transistortechnologie an bestehende *main stream*–Technologien (vorrangig CMOS) zu minimieren,
- maximale Frequenzen um 50 GHz zu erzielen,
- die Funktion der Transistoren in typischen Musterschaltungen zu testen.

Für die Technologie bedeutete dies, mit möglichst wenigen Schablonen auszukommen und die Struktur selbst so genau herzustellen, daß Dotandenaktivierung und -umverteilung und Kontaktierung trotz der geringen, noch zugelassenen Temperungen in ausreichender Weise stattfinden konnten. Deshalb sind die aufwendige Trenchisolation aufgegeben und eine Doppelmesastruktur für den Transistor benutzt worden. Das Ergebnis der Prozeßsimulation für eine CMOS–kompatible Transistorstruktur zeigt Abb. 1, unten.

Eine effektive Anpassung und Optimierung der Transistoren und ihrer Technologie wäre ohne Einsatz der Prozeß- und nachfolgender Bauelementesimulation kaum möglich gewesen. Durch zahlreiche Rechnungen zur Realisierung verschiedener Transistorkonzepte konnten sowohl zur Strukturbildung als auch zu den Dotierungsverhältnissen viele Entscheidungshilfen geliefert werden. Strukturierungsprobleme wurden ausschließlich mit DIOS bearbeitet. Zur Bauelementesimulation, über die wir kurz in [47] berichtet haben, wurde ToSCA benutzt (s. hierzu [39, 42, 43]).



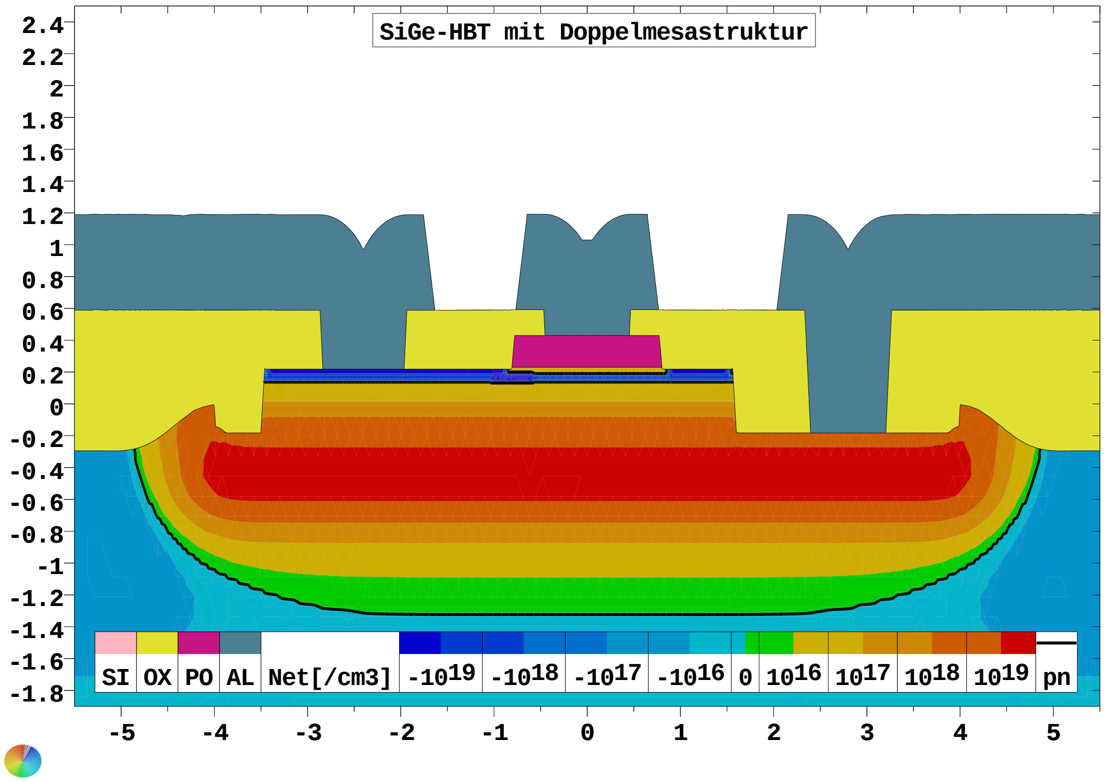


Abbildung 1: Oben – Querschnitt einer HBT–Struktur für mögliche Grenzfrequenzen um 100 GHz. Unten – Querschnitt einer CMOS–kompatiblen HBT–Struktur für Grenzfrequenzen um 50 GHz (Simulationen mit DIOS).

2.1.2 Dotandendiffusion in HBT–Strukturen

Der zweite wesentliche Anwendungsbereich der Prozeßsimulation ist die Beantwortung von Fragen zu den Dotierungsverhältnissen. Häufig muß wiederum die Bauelementesimulation angeschlossen werden, da das eigentliche Kriterium meist die Kennwerte der Bauelemente sind. Dies betrifft einmal den Dotierungsvorgang selbst (Forderungen an Dotandenverläufe bei der Abscheidung, Schatteneffekte und Maskierwirkung bei Implantation in strukturierte Oberflächen), die Aktivierung und Diffusion der Dotanden und vor allem Aussagen über Kopplungseffekte (Wechselwirkung von Dotanden, Einfluß des Schichtwachstums).

Für die stabile Arbeitsweise des SiGe–HBTs muß die Herstellung des gesamten Vertikalprofils gut beherrscht werden. Das Hauptproblem ist dabei die Diffusion des Bors in der SiGe–Schicht und über ihre Grenzen in das benachbarte Silizium. Zusätzlich sind die Einflüsse aus der Umgebung und durch den Prozeßablauf von Bedeutung.

Zur Dotandendiffusion in verspannten SiGe–Schichten gab es in der Literatur verschiedene Modellansätze, jedoch keine Implementierung in einen bekannten Prozeßsimulator. Ein anschauliches und in seiner Anwendung sehr praktikables Modell wird von Cowern et al. [11] vorgeschlagen. Es bildet die Basis für das Modell, das im Verlaufe des Vorhabens in den 1D-Simulator TEMO eingebaut wurde, und soll in Abschn. 2.2.1 etwas genauer beschrieben werden.

Weiterhin sind umfangreiche Simulationen zu den Emitter-, Kollektor- und Kontaktprofilen durchgeführt worden. Dabei war einmal deren Verlauf innerhalb der Struktur, aber auch ihr Einfluß auf das Borprofil in der Basis wichtig. Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in die Arbeiten [52, 38, 51, 40] eingeflossen. Ein Beispiel ist in Abb. 2 zu sehen.

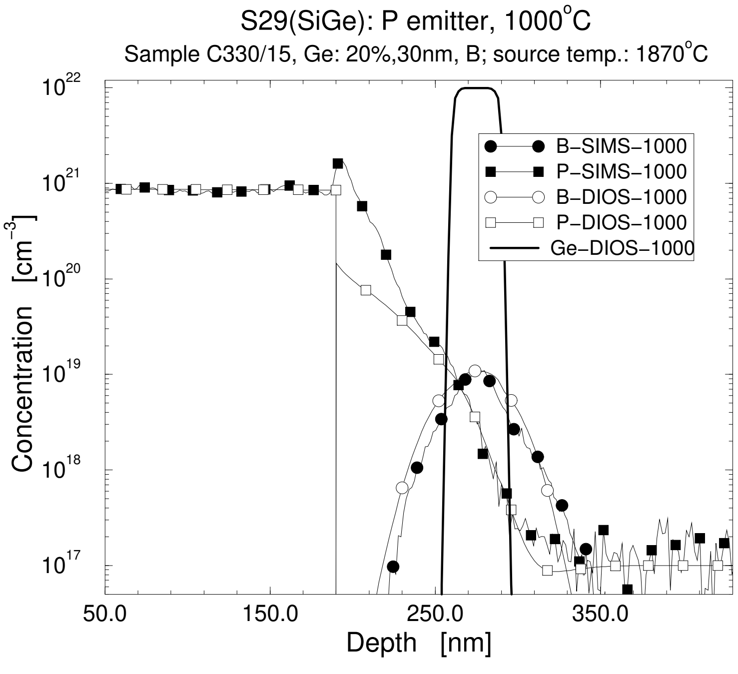


Abbildung 2: Emitter–Basis–Profile in einer SiGe–HBT–Teststruktur nach zu hoch gewählter Emittertemperung (P–Poly–Emitter). Vergleich von Messung (SIMS) und Simulation (DIOS).

2.2 Modellierungsfragen

2.2.1 Dotandendiffusion in SiGe–Schichten

Um diese zentrale Problematik des SiGe–HBTs zu behandeln, wurde das Modell von Cowern erweitert und in den Simulator TEMO implementiert. Darüber und über die ersten Parameteranpassungen und Anwendungsrechnungen haben wir in [60] berichtet.

Beschreibung des Modells:

Das Modell von Cowern et al. [11] benutzt den Umstand, daß die Verspannung eines Kristalls das Gleichgewicht der Eigenpunktdefekte stört. Ein Monokristall wird sich so verhalten, daß bei einer Druckspannung (Volumenkompression) die Interstitials nach außen wandern und im Innern ein Vakanzenüberschuß entsteht, im Falle einer Zugspannung erhält man die umgekehrten Verhältnisse. Für den Transport der atomaren Teilchen im verspannten Silizium bedeutet dies, daß im ersten Fall die Bewegung mittels Vakanzenkopplung bevorzugt und die über Interstitialkopplung benachteiligt ist; im zweiten Fall tritt der entgegengesetzte Zustand ein. Die SiGe–Schicht wird wie verspanntes Silizium behandelt, Ge wie ein Dotand. Für eine lineare Abhängigkeit der freien Enthalpie von der Verspannung, die durch die experimentellen Ergebnisse der Arbeit [11] bestätigt worden ist, wird für den Diffusionskoeffizienten der Dotanden eine einfache Beziehung angegeben.

Bei unserer Modellrealisierung sind für die spannungsunabhängigen Summanden in den Diffusionskoeffizienten die SUPREM IV–Ausdrücke [66] verwendet worden,

$$\begin{aligned} D = &\Big[D_{V^+}\frac{n_i}{n} + D_{V^0} + D_{V^-}\frac{n}{n_i} + D_{V^=}(\frac{n}{n_i})^2\Big] \exp\Big(-\frac{\Delta Q_{V,S}S}{kT}\Big) \\ &+ \Big[D_{I^+}\frac{n_i}{n} + D_{I^0} + D_{I^-}\frac{n}{n_i} + D_{I^=}(\frac{n}{n_i})^2\Big] \exp\Big(-\frac{\Delta Q_{I,S}S}{kT}\Big), \end{aligned}$$

wobei S den zur Ge–Konzentration C_{Ge} proportionalen *strain* bezeichnet. Die angegebene Aufteilung zwischen Vakanzen- und Interstitialkopplung hat aber zu Widersprüchen geführt. Wir haben deshalb postuliert, daß Bor nur mittels Interstitialkopplung diffundiert. Der Übergang Si/SiGe ist mit einer Verringerung der Bandlücke verbunden. Das dadurch entstehende innere Feld beeinflußt die Bewegung der Dotanden. Dieser Effekt wird im Cowern–Modell nicht beschrieben. Wir haben diese Bandlückenänderung gemäß

$$n_i = n_{i0} \exp\Big(-\frac{\Delta E_g}{2kT}\frac{C_{Ge}}{C_{Si,0}}\Big)$$

eingeführt [59], was bei der im Programm generell verwendeten Quasineutralitätsnäherung zu einer groben Berücksichtigung des inneren Feldes führt. Das Modell ist so aufgebaut, daß der *strain* durch beliebige Dotanden erzeugt werden kann.

Die relativ schwache Diffusion des Germaniums im Silizium ist mit Parametern aus [12, 13, 57] berechnet worden.

Verifikation und Anwendung:

Schon die ersten Vergleichsrechnungen zeigten, daß es unbedingt notwendig war, die gemessenen Profile (SIMS) bzgl. der systematischen Fehler des Meßvorganges zu korrigieren. Für diese Entfaltung der SIMS–Profile wurde im IHP ein Algorithmus erarbeitet, der den Meßvorgang durch dotandenabhängige Responsefunktionen charakterisiert [41]. Die relativ aufwendige Bestimmung dieser Funktionen ist bisher für Bor erfolgt, sollte aber auch für Ge und u. U. für die anderen

Dotanden nachgeholt werden. Alle für die Parameterbestimmung benutzten B–Profile wurden auf diese Weise behandelt. In Abb. 3 ist zu erkennen, daß diese Korrektur besonders für Profile mit geringer Ausdehnung wirksam wird.

Die Experimente zur Bestimmung der Responsefunktionen und andere Sonderversuche (z. B. B–Deltafunktionen in SiGe, Vergleiche von Epitaxieverfahren) wurden genutzt, um die Modellparameter zu verifizieren. Mit dem so identifizierten Modell sind eine Vielzahl von Rechnungen zu HBT-Problemen durchgeführt worden. Abbildung 4 zeigt einen Vergleich zwischen entfalteten SIMS–Kurven und simulierten Profilen bei zwei Temperaturen.

Inzwischen ist das Modell von N. Strecker in DIOS aufgenommen worden, so daß auf diesem Modellniveau 2D–Simulationen durchgeführt werden können.

Diskussion:

Da im HBT-Prozeß und auch bei den Sonderversuchen die Temperaturen bei den Abscheidungs- und Dotiervorgängen relativ niedrig lagen, ist bei Start der folgenden Temperungen (meist *rapid thermal annealing*) in der Regel mit Punktdefektverteilungen zu rechnen, die weit vom Gleichgewicht entfernt sind. Die damit verbundenen *transient enhanced diffusion*–Effekte stören bei der Bestimmung der Modellparameter, da im Modellsystem lokales Gleichgewicht vorausgesetzt wird, sind jedoch bei Betrachtung der Dotandenwechselwirkung der eigentliche Untersuchungsgegenstand. Für die Modellparameterverifikation sind deshalb immer Proben benutzt worden, die zwischen Schichtabscheidung und Temperung keine weiteren Beeinflussungen erfahren hatten, so daß es genügte, eine höhere Anfangsdefektdichte zu postulieren (und damit den präexponentiellen Faktor im Diffusionskoeffizienten zu ändern).

Auf Grund der zahlreichen Simulationsrechnungen können folgende Feststellungen getroffen werden:

- Solange das Bor nicht wesentlich aus dem SiGe herausdiffundiert, keine Wechselwirkung mit anderen Dotanden existiert und die Konzentrationswerte nicht deutlich die Eigenleitungsdichte übersteigen, ist die Beschreibung bei Verwendung der Parameter aus der Literatur gut.
- Die im Silizium üblichen und auch durch das Cowern–Modell beschriebenen Hochkonzentrationseffekte treten erst merklich bei Temperaturen oberhalb 1000 $^{\circ}$C auf.
- Die Wechselwirkung mit dem Arsen ist schwach, zumindest solange letzteres nicht mit wesentlichen Konzentrationen in der Basis erscheint, wodurch die Rechnungen für den As–Emitter relativ gut verifizierbar sind.
- Die Wechselwirkung mit Phosphor ist hingegen stark (*push*–Effekt) und wird auf diesem Modellniveau mit dem Fair/Tsai–Modell [15] beschrieben. Wegen des relativ einfachen Polysiliziummodells (P diffundiert aus dem hochdotierten Polysilizium aus) ist die Verifikation schwierig.
- Der Effekt des mit der Verringerung der Bandlücke verbundenen inneren Feldes scheint mit der Quasineutralitätsnäherung nicht ausreichend beschrieben zu sein.
- Die Eigenschaften der Epitaxieschicht (Eigendefektdichten, Fremdstoffgehalt) können nur unzureichend durch die Änderung der Diffusionskoeffizienten berücksichtigt werden.

Als Schlußfolgerung ergibt sich, daß für zukünftige Untersuchungen ein verbessertes Modell für die Dotandenbewegung in SiGe gebraucht wird. Dieses sollte auf dem Niveau der modernen Diffusionsmodelle im Siliziumeinkristall formuliert sein und folgende Effekte genauer berücksichtigen:

- die Wechselwirkung der Punktdefekte mit der Verspannung,
- das Relaxationsverhalten der SiGe–Schicht,
- das Auftreten von Traps für Punktdefekte (z. B. O, C),
- den Einfluß des elektrischen Felds am Übergang Si/SiGe (hierzu s. Abschn. 2.2.3).

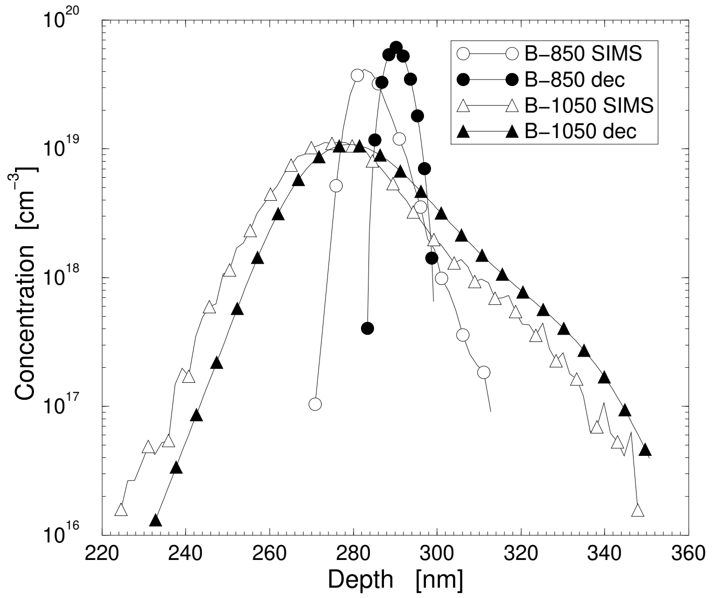


Abbildung 3: Vergleich der Meßkurve (SIMS) und der entfalteten Kurve (dec) für ein schmales und ein breiteres Bor–Profil.

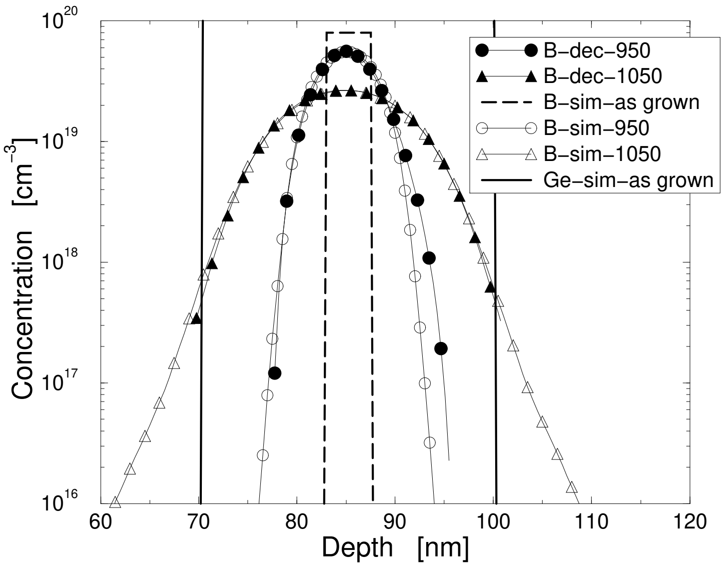


Abbildung 4: Entfaltete (dec) und simulierte (sim) Bor–Profile für zwei Temperaturen nach 30 sec Temperung.

2.2.2 Diffusion elektrisch geladener Teilchen bei hohen Konzentrationen

In modernen Bauelementen kommt es vor, daß Profile elektrisch geladener Dotanden mit hohen Konzentrationen eng benachbart sind. Hier taucht die Frage auf, ob durch deren elektrische Wechselwirkung zusätzliche Effekte entstehen und inwieweit diese durch die vorhandenen Simulationsprogramme beschrieben werden. Die auch in DIOS benutzten SUPREM III–Modelle sind im wesentlichen durch Versuche mit einzelnen Dotanden identifiziert worden, sagen aber für die beschriebene Situation kooperative Effekte (ähnlich einer ambipolaren Diffusion) voraus. Zur Klärung der Frage wurden am IHP gezielt Experimente durchgeführt, deren Auswertung das Auftreten dieses Phänomens qualitativ bestätigt hat. Für eine quantitative Analyse wurden am WIAS Simulationsrechnungen durchgeführt und mit den Meßdaten verglichen. Ergebnisse haben wir im Forschungsbericht [48] dokumentiert. Zusammenfassend kann gesagt werden, daß sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Simulation mit den gemessenen und geeignet reduzierten Daten nur dann ergeben hat, wenn Diffusionsparameter (insbesondere für As) gegenüber den Standardwerten geändert wurden.

Die erwähnten Simulationsrechnungen wurden mit DIOS durchgeführt, und zwar mit einer Variante des Einschichtmoduls, in die gegenüber der Standardversion einige Änderungen implementiert worden sind, um die hier vorliegende Dotandenkopplung effektiver zu simulieren. Ausgegangen wurde von dem in DIOS standardmäßig benutzten SUPREM III–Modell (siehe [65, 44]) mit folgenden Modifikationen:

- Mit den in DIOS implementierten Clustermodellen konnte das zusätzliche lokale B–Maximum (s. Abb. 6) auch bei Variation der Modellparameter nicht nachgewiesen werden. Deshalb wurden die Simulationen ohne Clusterbildung und ohne Respektierung einer Löslichkeitsgrenze vorgenommen.
- Die Messungen machen keine sicheren Aussagen über das Verhalten an der Substratgrenze. Deshalb wurden die Simulationen (mit Deckoxid) mit dem Einschichtmodul und homogenen Neumannbedingungen an der Substratgrenze gerechnet.
- Tab. 1 stellt die benutzten Parameter zusammen. P und B wurden mit einem festen Datensatz gerechnet. Bei As wurden vier Varianten benutzt: DIOS — Standardwerte von DIOS, TSUPREM — Standardwerte von TSUPREM–4, IHP — Parametersatz vom IHP für Simu-

	Variante	$D_0^\times$ cm^2 sec^{-1}	$D_\mathrm{w}^\times$ eV	D_0^- / D_0^+ cm^2 sec^{-1}	D_w^- / D_w^+ eV	D_0^{--} cm^2 sec^{-1}	D_w^{--} eV
P		3.85	3.66	4.44	4.0	44.2	4.37
B		0.037	3.46	0.72	3.46		
As	DIOS [65]	0.0066	3.44	12.0	4.05		
	TSUPREM [66]	0.0114	3.44	31.033	4.15		
	IHP	0.3	4.08	15.0	4.08		
	IHPV	0.3	4.08	7.5	4.08		

Tabelle 1: Diffusionsparameter.

lationen mit DIOS und TEMO, IHPV — eine Variante des letzten Datensatzes mit etwa halbiertem Diffusionskoeffizienten.

Einige Ergebnisse sind in den Abb. 5 – 7 dargestellt. Abbildung 5 zeigt das vertikale Profil von P, B, As für verschiedene Zeitpunkte in einer 1D–Situation, ein Vergleich mit geeignet reduzierten Meßdaten ist in Abb. 6 dargestellt. Abbildung 7 demonstriert laterale Effekte in einer 2D–Situation mit einer springenden Randbedingung.

Wie schon erwähnt, zeigen unsere Untersuchungen, daß die von den SUPREM III–Modellen prognostizierte Wechselwirkung von As, B und P bei geeigneter Verteilung dieser Dotanden durch den experimentellen Befund qualitativ bestätigt wird, daß aber diese Modelle die komplizierte Wechselwirkung in quantitativer Hinsicht nicht in allen Details beschreiben. Hierzu sind Modellerweiterungen, z. B. bezüglich folgender Sachverhalte, zu diskutieren:

1. Einfluß von Löslichkeitsgrenzen und Clusterbildung, gegebenenfalls auch von Paarbildungen der Dotanden (wie in [63, 64] beschrieben),

2. Auswirkung der Randbedingungen,

3. Kinetik der Punktdefekte zumindest in der Anfangsphase der Temperung,

4. Benutzung der Poissongleichung für das elektrostatische Potential anstelle der bisherigen Annahme der Quasineutralität (hierzu s. Abschn. 2.2.3),

5. Einsatz allgemeinerer Statistiken, insbesondere der Fermistatistik anstelle der bisher benutzten Boltzmannstatistik für Elektronen und Löcher.

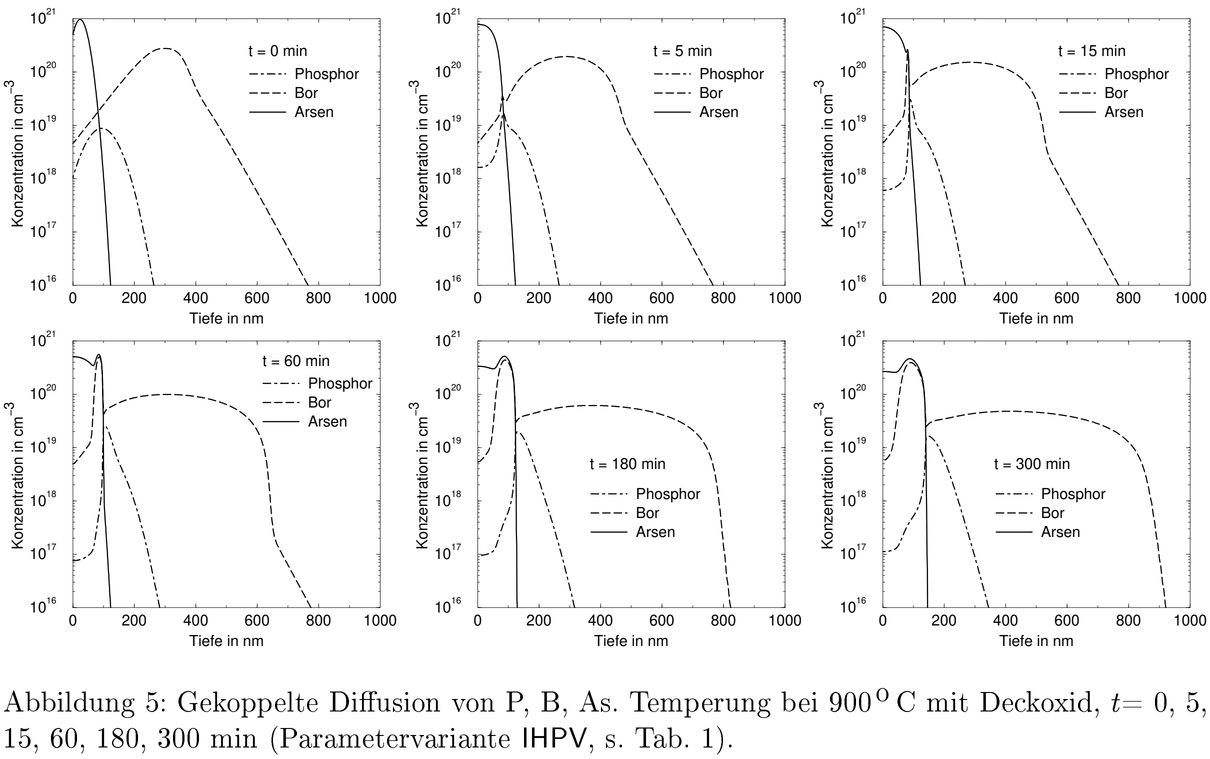


Abbildung 5: Gekoppelte Diffusion von P, B, As. Temperung bei 900° C mit Deckoxid, t= 0, 5, 15, 60, 180, 300 min (Parametervariante IHPV, s. Tab. 1).

Die Behandlung von Punkt 4 bildete einen Schwerpunkt des Vorhabens (s. Abschn. 2.2.3 und Abschn. 2.3). Als Erweiterung der Modellgleichungen erhält man verschiedene Varianten von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen, die mit der Poissongleichung gekoppelt sind.

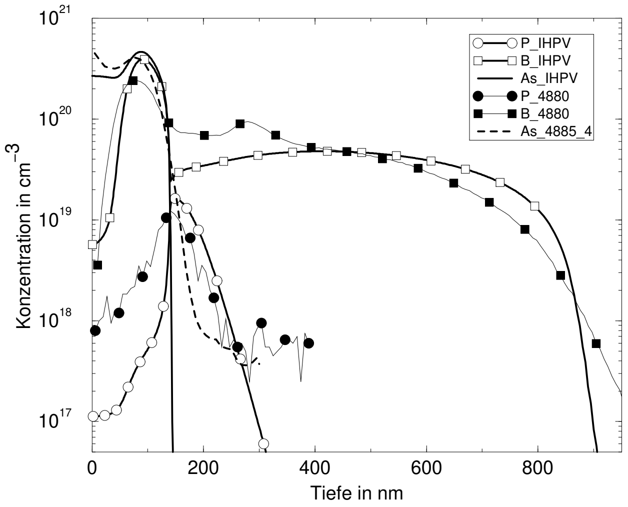


Abbildung 6: Gekoppelte Diffusion von P, B, As. Temperung bei 900 ^{0}C mit Deckoxid, t= 300 min. Vergleich der gemessenen SIMS–Profile (Serien 4880,4885) mit simulierten Profilen (Parametervariante IHPV).

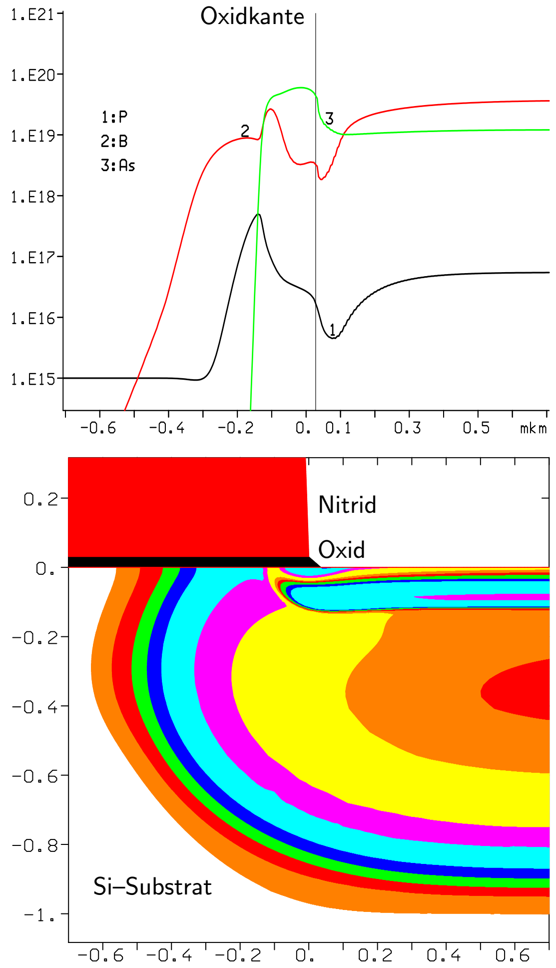


Abbildung 7: Diffusion von P, B, As in Si bei wechselnden Randbedingungen (inerte Temperung bei 900 ^{0}C, t=300 min). Das untere Bild zeigt das Si–Substrat, das teilweise durch eine Oxidschicht abgedeckt ist, über der eine Nitridschicht liegt. Gezeigt sind ferner Isoflächen für B. Oben ist die laterale Verteilung der Fremdatome 5 nm unterhalb der Substratobergrenze dargestellt. Deutlich sind die Folgen der starken Kopplung der Fremdatome und des nichtglatten Randbedingungswechsels zu erkennen.

2.2.3 Modelle mit Poissongleichung

Die im Vorhaben eingesetzten Simulationsprogramme DIOS und TEMO basieren auf Varianten der Modelle von SUPREM III, die lokale Elektroneutralität voraussetzen. Zur Klärung des Einflusses des inneren elektrischen Feldes in extremen Situationen ist auf diese Voraussetzung zu verzichten. Dann muß ein Randwertproblem für die Poissongleichung zur Berechnung des elektrostatischen Potentials herangezogen werden, das nach Elimination der Kontinuitätsgleichungen für die Elektronen und Löcher zusätzliche nichtlineare und nichtlokale Terme enthält. Die Herleitung der Modellgleichungen haben wir ausführlich in [31] dargestellt (s. Abschn. 2.3.4). Parallel zu den mathematischen Untersuchungen dieser Modellklasse haben wir das 1D–Simulationsprogramm ELDIF entwickelt, das derartige Aufgabenstellungen zu lösen gestattet. Es handelt sich hierbei um ein Experimentierprogramm, mit dem auf relativ einfache Weise verschiedene Diffusionsmodelle unter Einschluß der nichtlinearen, nichtlokalen Poissongleichung implementiert werden können. Das Programm befindet sich gegenwärtig in der Testphase und soll auch in Zukunft weiter benutzt und ausgebaut werden.

Ein Teilproblem, das bei der Entwicklung von ELDIF zu behandeln war, besteht in der Lösung des Randwertproblems für die Poissongleichung. Etwas vereinfacht läßt sich dieses Problem in geeignet skalierter Form wie folgt beschreiben (zur genaueren Formulierung s. Abschn. 2.3.4):

$$
\begin{aligned}
-\lambda^2\,\nabla\cdot(\varepsilon_{\mathrm{rel}}\nabla v_0)+e_0(v_0+\zeta) &= u_0 && \text{in } \Omega,\\
v_0 &= 0 && \text{auf } \Gamma_D,\\
\lambda^2\,\nu\cdot(\varepsilon_{\mathrm{rel}}\nabla v_0)+\tau v_0 &= 0 && \text{auf } \Gamma_N,\\
\int_\Omega e_0(v_0+\zeta)\,\mathrm{d}x &= \int_\Omega u_0\,\mathrm{d}x\,.
\end{aligned}
$$

Die integrale Nebenbedingung resultiert aus der Forderung der globalen Ladungsneutralität. Zu bestimmen sind das elektrostatische Potential v_0 und das elektrochemische Potential der Elektronen ζ. Ferner ist $e_0(y)=\overline{n}e^{y}-\overline{p}e^{-y}$; $\overline{n}$, $\overline{p}$ sind Referenzdichten, die in Heterostrukturen ebenso wie $\varepsilon_{\mathrm{rel}}$ und τ in nichtglatter Weise vom Ort abhängen. Die Elektronen- bzw. Löcherdichte ist durch

$$
n=\overline{n}e^{v_0+\zeta},\quad p=\overline{p}e^{-v_0-\zeta} \tag{1}
$$

gegeben. Dieses Randwertproblem ist in jedem Zeitpunkt zu lösen, wobei u_0 die zeitabhängige Nettokonzentration der anderen geladenen Spezies ist.

Bei typischen Prozeßtemperaturen ist die Debyelänge λ sehr klein (einige nm), so daß die Poissongleichung singulär gestört ist. In vielen technologischen Anwendungen läßt sie sich näherungsweise durch die Bedingung der lokalen Elektroneutralität

$$
e_0(v_0+\zeta)=u_0 \qquad \text{in } \Omega
$$

ersetzen. Das haben Rechnungen mit ELDIF bestätigt. In extremen Situation aber, wie sie z. B. in Abschn. 2.2.1 und in Abschn. 2.2.2 beschrieben worden sind, ist diese Näherung nicht immer ausreichend (s. auch [58]). Insbesondere bei Heteroübergängen in Nanostrukturen spielen die dabei vernachlässigten Grenzschichtphänomene eine größere Rolle, so daß hier doch die Poissongleichung zu lösen ist. Die Abb. 8 und 9 demonstrieren dies an einem Beispiel, das im Zusammenhang mit der SiGe–HBT–Problematik von Interesse ist.

Abbildung 8: Beispiel zur Lösung der nichtlinearen nichtlokalen Poissongleichung in einer Heterostruktur.

Betrachtet wird eine 1D–Struktur aus dem Material A (etwa Si) mit einer 25 nm dicken Schicht aus dem Material B (etwa Ge, SiGe). Die elektronischen Eigenschaften der Materialien werden folgendermaßen vorgegeben:

	A	B
E_g [eV]	0.851	0.507
E_i [eV]	E_0	$E_0 - 0.05$
n_i [cm^{-3}]	$1.925\,10^{18}$	$4.435\,10^{18}$
$\overline{n}$	$n_{i,A}$	$3.957\,n_{i,A}$
$\overline{p}$	$n_{i,A}$	$1.342\,n_{i,A}$
$\varepsilon_{\mathrm{rel}}$	12.0	16.0

Die Struktur ist dotiert mit einem Akzeptor (B) und einem Donator (etwa P) gemäß

$$U_1 = N_\Box \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\,\sigma_p^2}\right)$$

mit $N_\Box = 3.5\,10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$,

$$U_2 = \begin{cases} 10^{17}\,\mathrm{cm}^{-3} & \text{in A,} \\ 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-3} & \text{in B,} \end{cases}$$

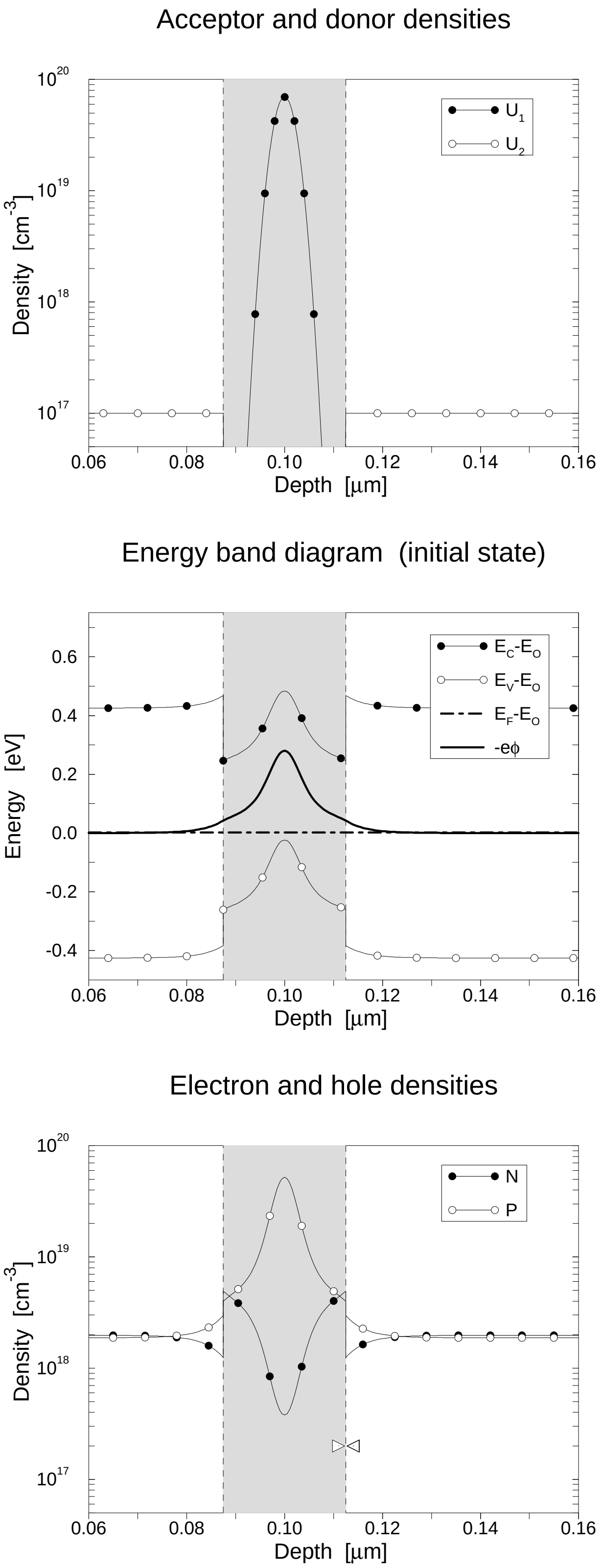
wobei projizierte Reichweite R_p und Standardabweichung σ_p der Akzeptorverteilung U_1 variiert worden sind. Dargestellt werden drei Varianten (alle Angaben in μm):

$R_p = 0.1$, $\sigma_p = 0.002$ (rechts),

$R_p = 0.1$, $\sigma_p = 0.006$ (S. 15, links),

$R_p = 0.1125$, $\sigma_p = 0.002$ (S. 15, rechts).

$\boxed{R_p = 0.1\,\mu\mathrm{m}, \sigma_p = 0.002\,\mu\mathrm{m}}$



$\boxed{R_p = 0.1\,\mu\mathrm{m}, \sigma_p = 0.006\,\mu\mathrm{m}}$ $\boxed{R_p = 0.1125\,\mu\mathrm{m}, \sigma_p = 0.002\,\mu\mathrm{m}}$

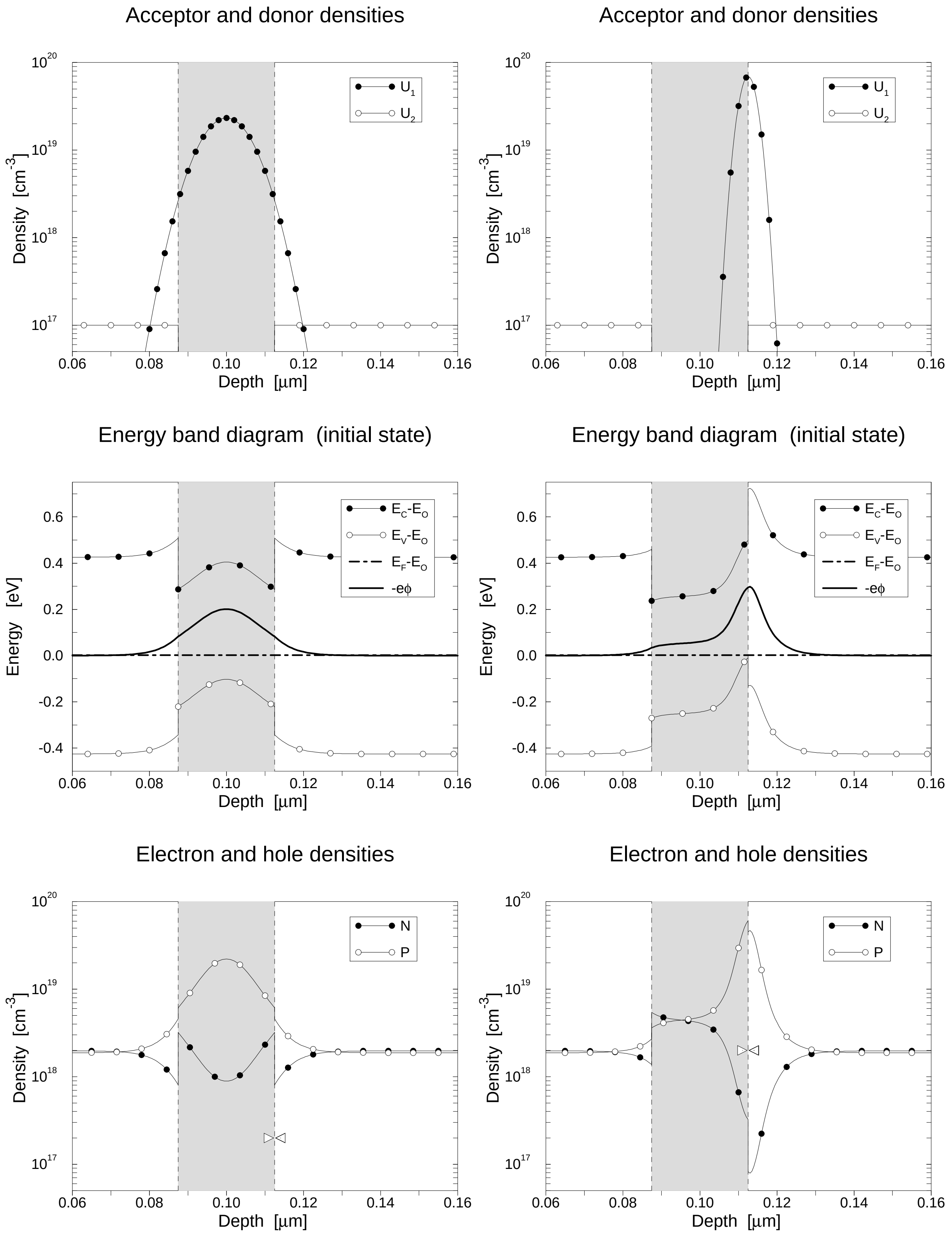


Abbildung 8 zeigt die Verteilung der Akzeptoren und Donatoren im Anfangszustand, das entsprechende Energieband–Diagramm der Heterostruktur sowie die zugehörigen Elektronen– und Löcherdichten, die sich aus (1) nach Lösung des Randwertproblems für die nichtlineare nichtlokale Poissongleichung ergeben. In Abb. 9 wird die Abhängigkeit technologisch relevanter Größen von den Parametern der Anfangsverteilung dargestellt. Außerdem werden die Ergebnisse mit denjenigen verglichen, die man bei Benutzung der Quasineutralitätsnäherung erhält. Hier treten deutliche Unterschiede auf, die in Nanostrukturen von Bedeutung sein können.

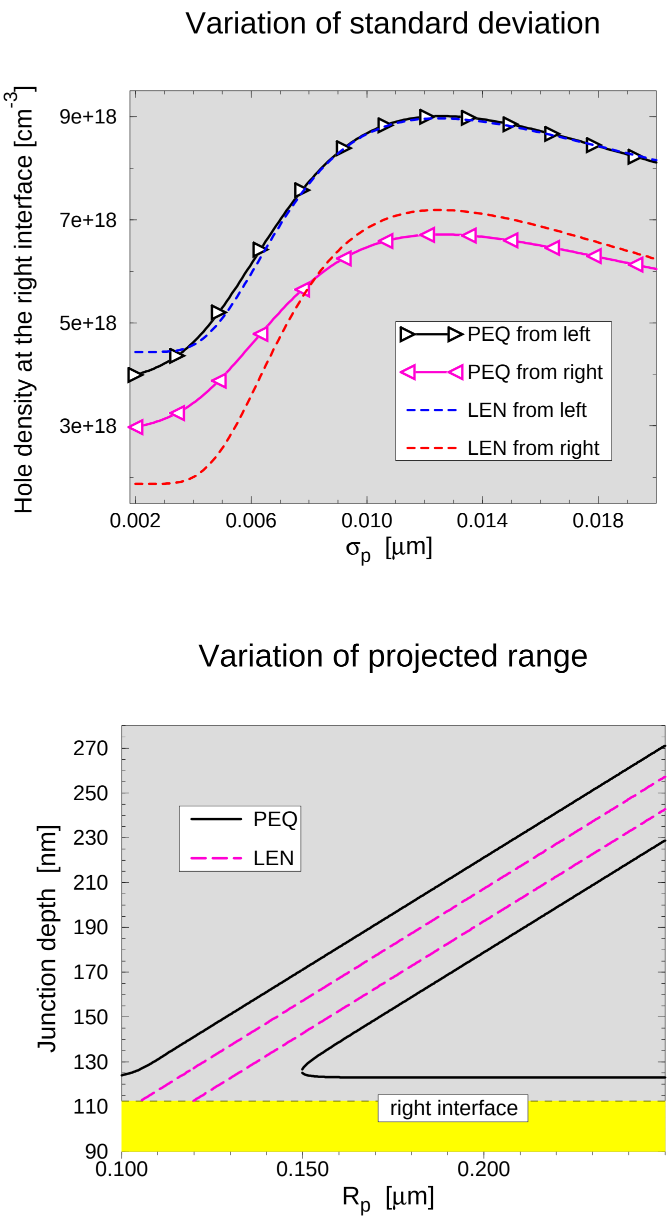


Abbildung 9: Vergleich zwischen den Modellen mit nichtlinearer, nichtlokaler Poissongleichung (PEQ) bzw. mit lokaler Ladungsneutralität (LEN) für Varianten der Situation von Abb. 8. Oben: Grenzwerte der Löcherdichte an der rechten Materialgrenze von links und von rechts bei Variation der Standardabweichung σ_p, $R_p = 0.1\,\mu m$. Unten: Lage der pn–Übergänge auf der rechten Seite der rechten Materialgrenze bei Variation der projizierten Reichweite R_p, $\sigma_p = 0.002\,\mu m$.

2.3 Analysis und Numerik von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen

2.3.1 Einleitung

Die Modellierung verschiedener Teilprozesse in der Fertigung von Halbleiterbauelementen führt auf Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten. Im Verlaufe des Vorhabens haben wir verschiedene Modellvarianten untersucht und bzgl. der Analysis und Numerik dieser Gleichungen neue Resultate erzielt.

Wir betrachten Differentialgleichungssysteme, die die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen durch Diffusion und Reaktionen unter Berücksichtigung ihrer elektrischen Wechselwirkung modellieren. Einen Überblick über solche Gleichungen, die innerhalb der Halbleitertechnologie relevant sind, sowie über verschiedene Grenzfälle, die vor allem aus Sicht der Simulation interessant sind, gewinnt man z. B. in [14, 45]. Tabelle 2 gibt eine Übersicht über verschiedene im Rahmen des Vorhabens diskutierte Modellvarianten. Zu erwartende Probleme bei der analytischen als auch numerischen Behandlung derartiger Gleichungen resultieren aus

- dem Vorliegen eines stark gekoppelten Systems nichtlinearer Kontinuitätsgleichungen,
- der Nichtgültigkeit des Maximumprinzips und lokalen *pile up*–Phänomenen,
- durch starke Nichtlinearitäten bedingten steilen Gradienten,
- nichtglatten kinetischen Koeffizienten,
- dem nichtglatten Wechsel der i. a. nichtlinearen Randbedingungen

		Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome
		Kontinuitätsgleichungen Defekte	Kontinuitätsgleichungen Defekte	Kontinuitätsgleichungen Defekte	
	Kontinuitätsgleichungen n, p	Kontinuitätsgleichungen n, p			
nichtlineare Poissongleichung	Poissongl. elektrostat. Potential	Poissongl. elektrostat. Potential	nichtlineare (nichtlokale) Poissongleichung		
(M1)	**(M2)**	**(M3)**	**(M4)**	**(M5)**	**(M6)**
Thermodynamisches Gleichgewicht	Van Roosbroeck System	**Basismodell**	n, p–Gleichgewicht (Diffusion, Rekombination schnell)	LEN–Modell	Defekt–Gleichgewicht (Diffusion, Reaktionen schnell)
Bauelemente–Modellierung (ca. 25 $^{\circ}$C)			**Technologie–Modellierung (ca. 700 – 1300 $^{\circ}$C)**		

Tabelle 2: Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen — Hierarchie der Modelle.

(vgl. hierzu auch Abb. 5 auf S. 11 sowie Abb. 7 auf S. 12).

Wir geben zunächst einen Überblick über die verschiedenen behandelten Modelle und beschreiben dann unsere erzielten Resultate zu den einzelnen Modellklassen. Abschließend formulieren wir einige weiterführende mathematische Fragestellungen, die sich aus unserem jetzigen Kenntnisstand ergeben.

2.3.2 Überblick über die Modellgleichungen

Das Basismodell (M3) ist ein allgemeines Modell für die Umverteilung beliebig vieler elektrisch geladener Spezies bei festen Grenzen. Wir bezeichnen mit u_i, q_i, v_i and ζ_i die Konzentration, den Ladungszustand, das chemische bzw. elektrochemische Potential der i–ten Spezies, mit v_0 das elektrostatische Potential und mit u_0 die Ladungsdichte der mobilen Spezies (siehe auch Tab. 3). Das zu untersuchende Differentialgleichungssystem besteht aus m Kontinuitätsgleichungen gekoppelt mit der Poissongleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + R_i^\Omega &= 0 && \text{in } (0,\infty) \times \Omega,\\
u_i &= \overline{u}_i e^{v_i}, && j_i = -D_i u_i \nabla \zeta_i,\\
\nu \cdot j_i &= R_i^\Gamma && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma,\\
u_i(0) &= U_i && \text{in } \Omega,\ i = 1, \ldots, m,\\
-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) &= f^\Omega + u_0 && \text{in } (0,\infty) \times \Omega,\\
v_0 &= v_0^\Gamma && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma_D,\\
\nu \cdot (\varepsilon \, \nabla v_0) + \tau v_0 &= f^\Gamma && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma_N.
\end{aligned} \tag{M3}$$

Für den Zusammenhang zwischen Konzentrationen und chemischen Potentialen wurde die Boltzmannstatistik benutzt. Die angegebenen Stromrelationen enthalten neben dem diffusiven Anteil einen vom elektrischen Feld erzeugten konvektiven Anteil. Ferner sind R_i^Ω (bzw. R_i^Γ) die Reak-

X_i, $i = 1, \ldots, m$	–	mobile Spezies
q_i	–	Ladungen
u_i	–	Konzentrationen
v_i	–	chemische Potentiale
$u_0 := \sum_{i=1}^m q_i \, u_i$	–	Ladungsdichte der mobilen Spezies
v_0	–	elektrostatisches Potential
$\zeta_i := v_i + q_i v_0$	–	elektrochemische Potentiale
$\nabla \zeta_i$	–	Triebkräfte
j_i	–	Massenflüsse
$a_i := e^{\zeta_i}$	–	elektrochemische Aktivitäten
R_i^Ω, R_i^Γ	–	Reaktionsraten

Tabelle 3: Bezeichnungen.

tionsraten im Volumen (bzw. am Rand), die für Reaktionen der Form

$$\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_m X_m \rightleftharpoons \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_m X_m$$

ausgehend vom Massenwirkungsgesetz als

$$R_i = \sum_{(\alpha,\,\beta)} k_{\alpha\beta} \Big(\prod_{k=1}^{m} e^{\zeta_k \alpha_k} - \prod_{k=1}^{m} e^{\zeta_k \beta_k} \Big) (\alpha_i - \beta_i)$$

angesetzt werden; α und β bezeichnen die stöchiometrischen Vektoren der entsprechenden Reaktionen. Schließlich sei hervorgehoben, daß die Bezugskonzentrationen $\overline{u}_i$, ebenso wie die Koeffizienten D_i, ε, τ, $k_{\alpha\beta}$ wegen der Heterostruktur in nichtglatter Weise vom Ort abhängen; die kinetischen Koeffizienten D_i, $k_{\alpha\beta}$ sind in der Regel auch noch vom Zustand abhängig.

Prinzipiell wird hier nur die Situation betrachtet, daß das entsprechende Reaktionssystem innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert und den Stöchiometrieraum definiert wird, genau ein Gleichgewicht besitzt, wobei die Gleichgewichtskonzentrationen positiv sind. Der zu (M3) gehörende stationäre Zustand ist dann gerade dieses thermodynamische Gleichgewicht.

Die analytischen und numerischen Resultate, die wir für das Modell (M3) gewonnen haben, werden in Abschn. 2.3.3 näher erläutert.

Ausgehend vom Basismodell (M3) lassen sich nun verschiedene Spezial– und Grenzfälle herleiten. Dazu wurden die Spezies in Tab. 2 in drei Gruppen (Fremdatome; Eigenpunktdefekte und Fremdatom–Defekt–Paare; Elektronen n und Löcher p) eingeteilt. Die kinetischen Koeffizienten D_i, $k_{\alpha\beta}$ hängen von der als Parameter vorgegeben Temperatur ab, und zwar für die drei Variablengruppen auf stark unterschiedlichen Skalen.

Bei Temperaturen im Bereich um 25 $^{\mathrm{O}}$C sind die Fremdatome und Defekte unbeweglich und reaktionsträge, also fest vorgegebene Ortsfunktionen. Dies ist der Gültigkeitsbereich von (M2), den klassischen van Roosbroeck–Gleichungen (Kontinuitätsgleichungen für Elektronendichte u_1 und Löcherdichte u_2 mit einem Generations–Rekombinationsterm gekoppelt mit der Poissongleichung), die den Betrieb von elektronischen Bauelementen als Bestandteil einer integrierten Schaltung modellieren. Mit den gleichen Ansätzen für die Statistik und die Stromrelationen wie bei (M3) haben diese die Form

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + k\,(e^{\zeta_1+\zeta_2} - 1) &= 0 && \text{in } (0,\infty) \times \Omega, \\
u_i &= \overline{u}_i e^{v_i}, && j_i = -D_i u_i \nabla \zeta_i, \\
\nu \cdot j_i &= 0 && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma, \\
u_i(0) &= U_i && \text{in } \Omega,\ i = 1,2, \\
-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) &= f^{\Omega} - u_1 + u_2 && \text{in } (0,\infty) \times \Omega, \\
v_0 &= v_0^{\Gamma} && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma_D, \\
\nu \cdot (\varepsilon\, \nabla v_0) + \tau v_0 &= f^{\Gamma} && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma_N,
\end{aligned} \tag{M2}$$

wobei hier bezüglich der Randbedingungen nur ein Spezialfall betrachtet werden soll, der genauso wie bei (M3) mit dem thermodynamischen Gleichgewicht verträglich ist.[1] Ausgehend von

[1]Natürlich sind aus Sicht der Bauelementemodellierung wesentlich allgemeinere Randbedingungen einschließlich Dirichletscher Bedingungen für die Kontinuitätsgleichungen von Interesse.

den grundlegenden Arbeiten von Mock [56], Gajewski [19] und Gröger [34] hat sich zu den van Roosbroeck–Gleichungen ein umfangreiches mathematisches Wissen entwickelt (siehe z. B. [20, 23] und die dort zitierte Literatur sowie [22, 26, 21, 16, 17, 18]). Da für die van Roosbroeck–Gleichungen ebenfalls die Problematik der Heterostruktur zu bewältigen ist, ließen sich einige Methoden, die bei der Behandlung der Halbleitergleichungen nützlich waren, auf das innerhalb des Vorhabens behandelte, umfassendere Problem (M3) verallgemeinern. Zu bemerken ist aber, daß solche analytischen Techniken, die explizit Gebrauch machen von Dirichletschen Randbedingungen in den Kontinuitätsgleichungen oder aber auch vom Vorhandensein der Elektronen–Löcher–Generation–Rekombination, die vergleichsweise analytisch gute Eigenschaften besitzt, auf die Behandlung von (M3) nicht anwendbar sind, so daß wir neue Techniken entwickeln und einsetzen mußten.

Bei dem hier betrachteten speziellen van Roosbroeck–System ist der stationäre Zustand ein thermodynamisches Gleichgewicht. Dann sind die elektrochemischen Potentiale ζ_1, ζ_2 der Elektronen bzw. Löcher konstant, die Generation–Rekombination ist im Gleichgewicht, und das elektrostatische Potential v_0 berechnet sich aus der nichtlinearen und nichtlokalen Poissongleichung

$$\begin{aligned} -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla(v_1-V_0))+e_0(\cdot,v_1-V_0) &= 0 && \text{in } (0,\infty)\times\Omega,\\ v_1-V_0 &= \pi(v_1-V_0) && \text{in } (0,\infty)\times\Gamma_D,\\ \nu\cdot(\varepsilon\nabla(v_1-V_0))+\tau(v_1-V_0) &= \tau\pi(v_1-V_0) && \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_N;\\ v_0 &= v_1-\pi(v_1-V_0), \end{aligned} \tag{M1}$$

wobei V_0 der Anfangswert des elektrostatischen Potentials zu (M2) ist und e_0 und π wie folgt definiert sind

$$e_0(x,y) := \overline{u}_1(x)\,e^{V_0(x)+y} - \overline{u}_2(x)\,e^{-(V_0(x)+y)} - U_1(x) + U_2(x),\ x\in\Omega,\ y\in\mathbb{R}, \tag{2}$$

$$\pi(w) = \begin{cases} (\operatorname{mes}\Gamma_D)^{-1}\displaystyle\int_{\Gamma_D} w\,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D \neq 0,\\ \|\tau\|^{-1}_{L^1(\Gamma_N)}\displaystyle\int_{\Gamma_N}\tau\,w\,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D = 0, \end{cases} \quad w\in H^1(\Omega) \tag{3}$$

(siehe hierzu auch [54, 61]). Die durch den Operator π beschriebene Nichtlokalität in der Poissongleichung (M1) resultiert aus der Forderung des Erhalts der globalen Ladungssumme.

Analog zu diesem Vorgehen kann (M3) zumindest näherungsweise vereinfacht werden, wenn die Temperatur wie bei der Technologie–Modellierung hoch ist. Dann sind die kinetischen Koeffizienten der freien Ladungsträger im Vergleich zu denen der anderen Spezies so groß, daß man die Elektronen und Löcher als im Gleichgewicht befindlich betrachten, ihre Dichten aus dem Statistikansatz, das elektrostatische Potential aus der nichtlinearen und nichtlokalen Poissongleichung berechnen und die Kontinuitätsgleichungen für u_1, u_2 weglassen kann. Die Herleitung und wesentliche Resultate zu diesem Modell (M4) werden in Abschn. 2.3.4 näher erläutert, da dieses Modell neben (M3) im Rahmen dieses Vorhabens vorrangig behandelt wurde.

Ein vor allem in Simulationsprogrammen häufig benutzter Weg zur Modellierung elektrischer Wechselwirkungen ist die Quasineutralitätsnäherung. Ausgehend von (M4) wird zusätzlich angenommen, daß in der betrachteten Struktur näherungsweise lokale Elektroneutralität (LEN) herrscht. Die Poissongleichung erweist sich als singulär gestört (siehe [54]) und wird durch die algebraische Beziehung

$$-\overline{u}_1 e^{v_1} + \overline{u}_2 e^{-v_1} + \sum_{i=3}^{m} q_i u_i + f^{\Omega} = 0$$

ersetzt. Einsetzen von v_0, $,u_1$, u_2 in die Strom- und Reaktionsterme für die anderen Spezies führt zu zusätzlichen Nichtlinearitäten in den verbleibenden Kontinuitätsgleichungen. Diese Herangehensweise entspricht der Modellklasse (M5) aus Tab. 2. Diese Modelle könnten weiter reduziert werden durch Annahmen, daß gewisse Spezies sehr langsam diffundieren, so daß ihre Diffusion vernachlässigt wird. Die Kontinuitätsgleichungen für solche Spezies wären dann gewöhnliche Differentialgleichungen. Ihre örtliche Variabilität resultiert aus Wechselwirkungen über Reaktionen mit diffundierenden Spezies. Oder man nimmt an, daß für gewisse Spezies (z. B. Defekte) die Diffusion und einige Reaktionen sehr schnell sind, so daß die Kontinuitätsgleichungen für diese Spezies näherungsweise durch algebraische Gleichungen ersetzt werden. Man erhält nun für die verbleibenden Fremdatome Kontinuitätsgleichungen mit zusätzlichen Nichtlinearitäten (siehe Modellklasse (M6)). Solche Modelle liegen den innerhalb dieses Vorhabens benutzten Simulationsprogrammen TEMO und DIOS zugrunde.

In der Literatur existieren Arbeiten zur funktionalanalytischen Behandlung von Spezialfällen der Modellklassen (M3) bis (M6), allerdings erfolgen diese Betrachtungen stets unter der wesentlichen Annahme der Glattheit der Koeffizientenfunktionen, die aus Sicht der Anwendungen aus der Halbleitertechnologie nicht vorausgesetzt werden kann. Hingegen sind, wie oben bereits erwähnt, Resultate zu den Modellen (M1) und (M2) auch im L^∞–Kontext bekannt, die in unsere Bearbeitung der hier zu behandelnden Probleme (M3) bis (M5) eingeflossen sind.

Ein anderes Anwendungsgebiet von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen sind Elektrolysevorgänge (siehe auch [61]). Hier stehen zum Teil andere Fragestellungen als in der Halbleitertechnologie im Vordergrund (zum Beispiel Abscheidevorgänge an den Elektroden). Mathematische Methoden zur Behandlung der entsprechenden Grundgleichungen können aber auch für die hier erörterte Thematik von Bedeutung sein.

In [4, 5] werden Modellgleichungen mit einer Elektroneutralitätsbedingung für glatte Daten und unter geeigneten Bedingungen an die Nichtlinearitäten in den Kontinuitätsgleichungen diskutiert. Ein Anwenden der dort benutzten Techniken auf die nichtglatte Datenstruktur in der Halbleitersituation scheint nicht ohne weiteres möglich zu sein.

Als Spezialfall des Basismodells (M3), allerdings mit modifizierten Randbedingungen und ohne Reaktionsterme, kann ein von Choi und Lui betrachtetes Elektrolysemodell angesehen werden. In [6, 8, 9] werden entsprechende Gleichungen für den räumlich eindimensionalen Fall mit konstanten Diffusionskoeffizienten und konstanter Dielektrizität hinsichtlich stationärer Zustände, Existenz und globaler Stabilität untersucht. In [7] wird unter Einbeziehung einer Dissoziations–Assoziationsreaktion in diesem Kontext das Langzeitverhalten der Lösungen eines Elektrophoresemodells diskutiert. Eine Übertragung von Ergebnissen auf Raumdimension zwei (und mit Einschränkungen auch drei), jedoch ohne Volumen- und Randreaktionen und wiederum mit konstanten Koeffizientenfunktionen, erfolgt in [10]. Eine Verallgemeinerung der verwendeten Techniken auf nichtglatte Daten und Lipschitzgebiete ist nicht zu erwarten.

In [46] wird für ein spezielles Modell zu (M5) mit ungeladenen Spezies, konstanten kinetischen Koeffizienten und glatten Gebieten globale Lösbarkeit gezeigt. Verwendet werden dabei *bootstrapping*–Methoden, um L^p–Abschätzungen zu gewinnen, sowie L^p–Regularitätsaussagen aus [53], um a priori–Abschätzungen zu erhalten.

In [55] wird auf dem Niveau von (M6) der Fall einer einzigen geladenen Spezies betrachtet, der auf eine Diffusionsgleichung mit einem nichtlinearen Diffusionskoeffizienten führt.

2.3.3 Ergebnisse für Modell (M3)

Unsere Untersuchungen beziehen sich generell auf die räumlich zweidimensionale Situation. Viele im folgenden verwendete Techniken, insbesondere für a priori–Abschätzungen und Regularitätsaussagen, sind speziell an diese Raumdimension angepaßt.

Unsere Resultate zum Modell (M3) findet man in [32, 28, 30, 31, 33]. Zunächst haben wir das Modell (M3) bei Randbedingungen dritter Art für die Poissongleichung ($\Gamma_N = \Gamma$) umfassend untersucht. Unter Benutzung der Variablen $u = (u_0, \dots, u_m)$ und $v = (v_0, \dots, v_m)$ lautet das Problem

$$\begin{aligned} u'(t) + Av(t) = 0,\ u(t) = Ev(t) \text{ f.f.a. } t \in \mathbb{R}_+,\ u(0) = U,& \\ u \in H^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, (H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1}))^*),& \\ v \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})) \cap L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})).& \end{aligned} \tag{P}$$

Dabei ist E ein nichtlinearer, monotoner Potentialoperator, der den Zusammenhang zwischen den Potentialen und den Dichten beschreibt. Der nichtlineare Operator A enthält die Diffusions–, Drift– und Reaktionsterme. Unter der Annahme

$$\sum_{i=1}^m \kappa_i \int_\Omega U_i \mathrm{d}x > 0\ \forall \kappa \in \mathcal{S}^\perp,\ \kappa \geq 0,\ \kappa \neq 0,$$

wobei $\mathcal{S}$ den von den Vektoren $\alpha - \beta$ aufgespannten stöchiometrischen Unterraum bezeichnet, besitzt die Aufgabe (P) genau einen stationären Zustand (u^*, v^*) innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert charakterisiert wird.

Ausgangspunkt für die Untersuchungen des instationären Problems (P) sind physikalisch motivierte Abschätzungen der freien Energie

$$F(u) = \int_\Omega \Big\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla v_0|^2 + \sum_{i=1}^m \Big\{ u_i (\ln \frac{u_i}{\overline{u}_i} - 1) + \overline{u}_i \Big\} \Big\} \mathrm{d}x + \int_\Gamma \frac{\tau}{2} v_0^2 \, \mathrm{d}\Gamma. \tag{4}$$

Zunächst erhalten wir, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems beschränkt bleibt und monoton fällt. Ein wesentliches neues Resultat ist eine Abschätzung der freien Energie durch die Energiedissipationsrate

$$D(v) = \sum_{i=1}^m \Big\{ \int_\Omega \Big\{ D_i \overline{u}_i \, e^{v_i} \, |\nabla \zeta_i|^2 + R_i \zeta_i \Big\} \, \mathrm{d}x + \int_\Gamma R_i^\Gamma \zeta_i \, \mathrm{d}\Gamma \Big\}.$$

Und zwar haben wir in [32] unter gewissen Voraussetzungen an das Reaktionssystem, die für relevante Probleme aus der Halbleitertechnologie erfüllt sind, die Abschätzung

$$F(Ev) - F(u^*) \leq c_R D(v) \tag{5}$$

für alle v, für die Ev in der Kompatibilitätsklasse liegt, die durch den Anfangswert U definiert wird, und für die $F(Ev) - F(u^*) \leq R$ gilt, bewiesen. Als Folgerung aus dieser Abschätzung erhalten wir, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems (P) exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert fällt. In [28] erweitern wir die genannten Resultate auf allgemeinere Statistiken, Stromrelationen und Reaktionsterme sowie auf eine nichtlineare Poissongleichung.

Analoge Aussagen gelten für ein implizites Zeitdiskretisierungsschema. Dazu verweisen wir auf unsere Arbeit [32]. Es seien $n \in \mathbb{N}$, ferner $\{t_n^0, \dots, t_n^k, \dots\}$ eine Diskretisierung von $\mathbb{R}_+$ und

$S_n^k := (t_n^{k-1}, t_n^k]$. Sei $C_n(\mathbb{R}_+, B)$ der Raum der stückweise konstanten Funktionen u_n von $\mathbb{R}_+$ nach B, u_n^k bezeichne den konstanten Wert der Funktion u_n auf dem Intervall S_n^k. Das implizite Zeitdiskretisierungsschema zum Problem (P) lautet dann

$$\begin{gathered}\Delta_n u_n(t) + Av_n(t) = 0,\ u_n(t) = Ev_n(t)\ \forall t \in \mathbb{R}_+, \\ v_n \in C_n(\mathbb{R}_+, H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})),\end{gathered} \tag{P$_n$}$$

wobei Δ_n der Differenzenoperator

$$(\Delta_n u_n)^k := \frac{1}{t_n^k - t_n^{k-1}} \left(u_n^k - u_n^{k-1} \right),\ u_n^0 := U$$

ist. Auch längs Trajektorien der zeitdiskreten Aufgabe (P$_n$) fällt die freie Energie monoton und exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert. Hieraus folgt, daß das implizite Zeitdiskretisierungsschema, ebenso wie die kontinuierliche Aufgabe selbst, Grundprinzipien der Thermodynamik genügt.

Erwähnt sei, daß wir die bisherigen Aussagen erhalten haben, ohne a priori–Schranken für Konzentrationen und Potentiale zu kennen. Im Gegenteil, wir verwenden diese Ergebnisse, um unter zusätzlichen Annahmen über die Anfangswerte und über die Ordnung der Reaktionen (Reaktionen der maximalen Ordnung zwei im Volumen bzw. eins auf dem Rand) solche a priori–Abschätzungen zu gewinnen. Zunächst folgern wir aus der globalen Beschränktheit der freien Energie mit Hilfe der Moser–Technik wie in [24] globale a priori–Abschätzungen für die Konzentrationen nach oben. Danach schließen wir, im Unterschied zu [24], aus dem exponentiellen Fallen der freien Energie, daß die L^1–Norm von $\ln u_i$ global beschränkt ist. Durch Moser–Iteration weisen wir damit die globale Beschränktheit der Konzentrationen nach unten durch eine positive, nur von den Daten des Problems abhängende Konstante nach.

Um die Lösbarkeit der Aufgabe (P) zu zeigen, haben wir das Problem durch „Abschneiden“ der Nichtlinearitäten in geeigneter Weise regularisiert und a priori–Abschätzungen für dieses regularisierte Problem hergeleitet, die nicht von dem Abschneidelevel abhängen. Die Lösbarkeit der regularisierten Aufgabe zeigten wir über Zeitdiskretisierung und einen Auswahlsatz. Ausführlicher findet man unsere Resultate zur Existenz, Eindeutigkeit und zu globalen Abschätzungen der Lösung der Aufgabe (P) in [30].

Die Tatsache, daß die Poissongleichung für relevante Probleme aus der Halbleitertechnologie singulär gestört ist, erfordert jedoch Vorsicht bei der Auswahl der Randbedingungen für das elektrostatische Potential v_0. Eindimensionale Testsimulationen zeigten deutlich, daß die Einbeziehung von Dirichletschen Randbedingungen nötig ist, um zusätzliche Grenzschichtphänomene zu vermeiden.

Alle Aussagen, die für die Modellgleichungen (M3) mit $\Gamma_N = \Gamma$ getroffen wurden, konnten wir auch für das System mit gemischten Randbedingungen in der Poissongleichung ($\operatorname{mes}\Gamma_D \neq 0$) verifizieren, siehe auch [31]. Die 0–te Komponente E_0 des Operators E ist dann eine Abbildung von $H_0^1(\Omega \cup \Gamma_N)$ nach $(H_0^1(\Omega \cup \Gamma_N))^*$, das Randintegral in (4) erstreckt sich nun nur über Γ_N. Wesentliche Hilfsmittel dabei waren Regularitäts- und Beschränktheitsaussagen für die Lösungen elliptischer Gleichungen mit nichtglatten Koeffizientenfunktionen und gemischten Randbedingungen (siehe [35, 36, 37]). Analog übertrugen wir die oben angeführten Resultate auf die zeitdiskretisierte Variante von (M3) im Falle gemischter Randbedingungen.

2.3.4 Ergebnisse für Modell (M4)

Unsere Resultate zum Modellproblem (M4) sind in den Arbeiten [31, 33] enthalten. Das reduzierte Modell (M4) ergibt sich aus dem Basismodell (M3) unter den Annahmen, daß

- die Diffusion von Elektronen n und Löchern p sehr schnell ist, D_1, $D_2 \longrightarrow +\infty$,
- für die Elektronen–Löcher–Generation–Rekombination $k(e^{\zeta_1+\zeta_2}-1)$ die Beziehung $k \longrightarrow +\infty$ gilt, so daß diese Reaktion im Gleichgewicht ist,
- die globale Ladungssumme erhalten bleibt,

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^m q_i u_i(t)\mathrm{d}x = \int_\Omega \sum_{i=1}^m q_i U_i \mathrm{d}x \quad \forall t \in \mathbb{R}_+.$$

Zur genauen Herleitung dieser reduzierten Modellgleichungen aus dem Basismodell (M3) verweisen wir auf unsere Arbeit [31]. Zu untersuchen ist das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla\cdot j_i + \widetilde{R}_i^\Omega &= 0 && \text{in } (0,\infty)\times\Omega,\\
\nu\cdot j_i &= \widetilde{R}_i^\Gamma && \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma,\\
u_i(0) &= U_i && \text{in } \Omega, \quad i=3,\ldots,m;\\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla(v_1-V_0)) + e_0(v_1-V_0) &= \sum_{i=3}^m q_i u_i && \text{in } (0,\infty)\times\Omega,\\
v_1 - V_0 &= \pi(v_1-V_0) && \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_D,\\
\nu\cdot(\varepsilon\nabla(v_1-V_0)) + \tau(v_1-V_0) &= \tau\pi(v_1-V_0) && \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_N;
\end{aligned} \tag{M4}$$

wobei V_0 der Anfangswert des elektrostatischen Potentials zum Problem (M3) ist, e_0 ist gegeben durch

$$e_0(x,y) := \overline{u}_1(x)\, e^{V_0(x)+y} - \overline{u}_2(x)\, e^{-(V_0(x)+y)} + \sum_{i=1}^m q_i U_i(x),\ x\in\Omega,\ y\in\mathbb{R}. \tag{6}$$

Der Operator π ist in (3) definiert und $\widetilde{R}_i^\Omega$, $\widetilde{R}_i^\Gamma$ sind geeignet umgerechnete Reaktionsterme. Die Konzentrationen der Elektronen und Löcher berechnen sich dann gemäß

$$u_1 = \overline{u}_1\, e^{v_1}, \quad u_2 = \overline{u}_2\, e^{-v_1}.$$

Das reduzierte Modell (M4) enthält damit $m-2$ Kontinuitätsgleichungen für alle beteiligten Spezies (außer Elektronen und Löcher), die mit einer nichtlinearen, nichtlokalen Poissongleichung gekoppelt sind. Die hier vorgeschlagene nichtlokale Randbedingung für die Poissongleichung garantiert den Erhalt der Gesamtladung. Häufig wird die Randbedingung ohne diesen nichtlokalen Term benutzt (z. B. in [45]); dann wird die Gesamtladung i. a. nicht erhalten bleiben.

Obwohl (M4) in der Poissongleichung einen nichtlinearen Term sowie in den zugehörigen Randbedingungen einen nichtlokalen Ausdruck enthält, haben die Gleichungen dieselbe prinzipielle Struktur wie die Modellgleichungen (M3). In den Variablen

$$\begin{aligned}
\widetilde{v} &= (\widetilde{v}_0,\ldots,\widetilde{v}_{\widetilde{m}}) &= (v_1-V_0, v_3+q_3V_0,\cdots,v_m+q_mV_0),\\
\widetilde{u} &= (\widetilde{u}_0,\ldots,\widetilde{u}_{\widetilde{m}}) &= (\sum_{i=3}^m q_iu_i, u_3,\cdots,u_m),
\end{aligned}$$

mit $\widetilde{m} := m-2$ und nach geeigneter Transformation der Koeffizientenfunktionen $\widetilde{k}_{\alpha\beta}$, die nun von $\pi(\widetilde{v}_0)$ abhängen, erhalten wir (nach Weglassen der Tilden) eine schwache Formulierung für (M4) analog der zu (M3)

$$\begin{gathered} u'(t) + Av(t) = 0,\ u(t) = Ev(t) \text{ f.f.a. } t \in \mathbb{R}_+,\ u(0) = U, \\ u \in H^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, (H \times H^1(\Omega, \mathbb{R}^m))^*), \\ v \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, H \times H^1(\Omega, \mathbb{R}^m)) \cap L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})), \end{gathered} \tag{P}$$

wobei

$$H := H^1_0(\Omega \cup \Gamma_N) + \mathbb{R} \subset H^1(\Omega) \tag{7}$$

und die 0–te Komponente $E_0\colon H \to H^*$ des Operators E, gegeben durch

$$\langle E_0 v_0, \overline{v}_0 \rangle := \int_\Omega \Big\{ \varepsilon \nabla v_0 \nabla \overline{v}_0 + e_0(\cdot, v_0)\overline{v}_0 \Big\}\,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_N} \tau(v_0 - \pi(v_0))(\overline{v}_0 - \pi(\overline{v}_0))\,\mathrm{d}\Gamma,\ \overline{v}_0 \in H,$$

wiederum ein stark monotoner Potentialperator ist.

Wenn wir die Größen H, π, e_0, τ und m etwas allgemeiner wählen, (vgl. [33]) stellt (P) eine schwache Formulierung sowohl für (M4) (mit H aus (7), π aus (3), e_0 aus (6), $m-2$ Spezies) als auch für (M3) (mit $H = H^1_0(\Omega \cup \Gamma_N)$, $\pi \equiv 0$, $e_0 \equiv 0$ und m Spezies) dar. In [33] haben wir für dieses allgemeinere Problem (P) die eindeutige Lösbarkeit und Eigenschaften der Lösung ausführlich diskutiert. Wir beschreiben hier kurz wesentliche Resultate.

Für (P) existiert innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert festgelegt wird, genau ein stationärer Zustand. Unter der Voraussetzung, daß $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ und daß Volumen- bzw. Randquellterme in den Kontinuitätsgleichungen maximal zweiter bzw. erster Ordnung sind, besitzt das instationäre Problem genau eine Lösung. Entlang dieser fällt die freie Energie

$$\begin{aligned} F(u) = &\int_\Omega \Big\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla v_0|^2 + e_0(v_0)v_0 - \int_0^{v_0} e_0(y)\mathrm{d}y + \sum_{i=1}^m \Big\{ u_i (\ln \frac{u_i}{\overline{u}_i} - 1) + \overline{u}_i \Big\} \Big\} \mathrm{d}x \\ &+ \int_{\Gamma_N} \frac{\tau}{2} (v_0 - \pi(v_0))^2\,\mathrm{d}\Gamma \end{aligned}$$

monoton. Aussagen zur Beschränktheit und Regularität von Lösungen elliptischer Gleichungen mit gemischten Randbedingungen liefern bei geeigneten Annahmen über Ω und Γ globale L^∞–Schranken für v_0 und eine höhere Integrierbarkeit für ∇v_0. Die Lösbarkeit von (P) zeigen wir über eine zweistufige Regularisierung. Für ein zunächst nur in den Reaktionen und Randtermen regularisiertes Problem benutzen wir Existenzaussagen für Diffusions–Konvektionssysteme mit schwach nichtlinearen Volumen- und Randtermen auf endlichen Zeitintervallen, die wir in [31], Kapitel 6 mittels einer weiteren Regularisierung, Zeitdiskretisierung und eines Auswahlsatzes gewonnen haben. Wir finden Schranken für die Lösungen der ersten regularisierten Aufgabe, die nicht vom Regularisierungslevel abhängen, so daß diese Lösungen bei hinreichend großem Abschneidelevel gleichzeitig Lösungen von (P) sind. Diese a priori–Schranken erhalten wir nach gewissen Anlaufschritten über Moser–Iteration. Die Abschätzungen nach oben sind unabhängig von der Länge des Zeitintervalls und übertragen sich daher global auf die Lösung von (P). Um globale positive untere Schranken für die Konzentrationen zu erhalten, zeigen wir zunächst ähnlich dem Vorgehen in [28], [32], daß sich unter denselben Voraussetzungen wie für (M3) die freie Energie nach oben durch die Dissipationsrate abschätzen läßt. Folglich fällt die freie Energie entlang der Lösung exponentiell auf ihren Gleichgewichtswert und die Größen $v_0 - v_0^*$, $u_i/u_i^* - 1$

sind über $\mathbb{R}_+ \times \Omega$ und $\mathbb{R}_+ \times \Gamma$ integrabel, wobei u_i^* und v_0^* Komponenten der stationären Lösung sind. Man findet eine zeitlich globale Schranke für die L^1–Norm der chemischen Potentiale, die mittels Moser–Iteration auf eine positive untere Schranke für die Konzentrationen führt (siehe [33]). Die globalen Abschätzungen für die Lösung von (P) und das exponentielle Fallen der freien Energie ergeben die stärkeren asymptotischen Aussagen, daß sich die Konzentrationen und chemischen Potentiale in jeder L^p–Norm exponentiell ihren Gleichgewichten nähern.

Als Vorteil von (M4) erweist sich, daß auch Reaktionen, an denen beliebig viele Elektronen oder Löcher beteiligt sind, aber die Reaktionsordnung bezüglich der verbleibenden Spezies den oben für (M3) formulierten Einschränkungen genügt, behandelt werden können.

2.3.5 Ergebnisse für Modell (M5)

Die Arbeiten [27, 29] beinhalten unsere Resultate zu Teilproblemen aus der Modellklasse (M5). Als Spezialfall für Modellgleichungen aus (M5) haben wir ein Modell betrachtet, bei dem (außer Elektronen und Löchern) nur eine Sorte von geladenen Fremdatomen auftritt, zugleich aber die Diffusion der Punktdefekte sowie verschiedene Reaktionen zwischen diesen und den Fremdatomen im Innern des Halbleiters und auf dem Rande Berücksichtigung finden.[2] Die Modellgleichungen (Kontinuitätsgleichungen für substantielle und interstitielle Fremdatome, für interstitielle Wirtsatome und Vakanzen, für Elektronen und Löcher, Poissongleichung für des elektrostatische Potential) reduzieren sich unter Gleichgewichtsannahmen für die Elektronen und Löcher sowie unter der Quasineutralitätsannahme auf folgendes System schwach gekoppelter Reaktions–Diffusionsgleichungen für die Konzentrationen der Fremdatome und Punktdefekte $u = (u_0, u_1, u_2, u_3)\colon \mathbb{R}_+ \times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^4_+$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + R_i^\Omega(u) &= 0 && \text{in } (0,\infty) \times \Omega, \\ \nu \cdot j_i &= R_i^\Gamma(u) && \text{auf } (0,\infty) \times \Gamma, \\ u_i(0) &= U_i && \text{auf } \Omega,\ i = 0, \dots, 3, \end{aligned} \tag{M5}$$

wobei die Ströme j_i und Aktivitäten a_i durch

$$j_i = -D_i\, u_i \nabla \ln a_i(u),\ a(u) = (g(u_0), u_1, u_2, u_3),$$

die Volumen– und Randreaktionen durch

$$\begin{aligned} R^\Omega(u) &= (-r_1(u), r_1(u), r_2(u), r_1(u) + r_2(u)), \\ R^\Gamma(u) &= (r_3(u) + r_4(u), r_5(u), r_6(u), r_7(u) - r_4(u)) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} &r_1(u) = \widetilde{k}_1(u_1 u_3 - k_1\, g(u_0)),\ r_2(u) = \widetilde{k}_2(u_2 u_3 - k_2), \\ &r_3(u) = \widetilde{k}_3(g(u_0) - k_3),\ r_4(u) = \widetilde{k}_4(g(u_0) - k_4 u_3), \\ &r_5(u) = \widetilde{k}_5(u_1 - k_5),\ r_6(u) = \widetilde{k}_6(u_2 - k_6),\ r_7(u) = \widetilde{k}_7(u_3 - k_7) \end{aligned} \tag{8}$$

gegeben sind. Neben Annahmen über die kinetischen Koeffizienten D_i, $\widetilde{k}_i$ sowie über die Funktion g (für die $g(y) = y\,(y + \sqrt{y^2+1})$ ein typisches Beispiel ist) wird vorausgesetzt, daß

$$\mathcal{R} \cap \left(\mathcal{S} + \overline{U}\right) = \{u^*\} \text{ mit } u^* > 0$$

[2] Die in Heterostrukturen vorliegenden Unstetigkeiten in den Konzentrationen wurden dort nicht betrachtet, können aber, wie neuere Überlegungen zeigen, bei geeigneter Umformulierung der Aufgabe berücksichtigt werden.

gilt, wobei $\mathcal{R}$ die Menge der simultanen Reaktionsgleichgewichte zu (8), $\mathcal{S}$ den stöchiometrischen Unterraum zu (8) und $\overline{U}$ den Mittelwert der Anfangsfunktion U bezeichnen. Es wurden notwendige und hinreichende Bedingungen an die Daten $\widetilde{k}$, k, U für die Gültigkeit dieser Annahme gefunden.

Mit Hilfe von Abschätzungen der freien Energie

$$F(u) = \int_\Omega f(u(x))\mathrm{d}x,\ f(u) = \begin{cases} \sum_{i=0}^3 \int_{u_i^*}^{u_i} (\ln a_i(y) - \ln a_i(u^*))\,\mathrm{d}y & u \geq 0, \\ +\infty & \text{sonst}, \end{cases}$$

und der Dissipation gelang es uns, die thermodynamische Korrektheit des Modells nachzuweisen: Längs Trajektorien des Systems (M5) strebt die freie Energie monoton fallend und exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert $F(u^*) = 0$,

$$F(u(t_2)) \leq F(u(t_1)),\ t_2 \geq t_1 \geq 0,\ F(u(t)) \leq F(U)\,\mathrm{e}^{-\lambda t},\ t \geq 0.$$

Gleichzeitig konnten dadurch erste a priori–Abschätzungen für Lösungen der Aufgabe hergeleitet werden. Zur Verbesserung dieser Abschätzungen mußten wir wegen der Nichtlinearitäten in den Randtermen übliche Iterationstechniken dahingehend modifizieren, daß als Testfunktionen in den einzelnen Gleichungen simultan unterschiedliche Potenzen der u_i benutzt wurden. Dies führt auf die Abschätzungen

$$\||u - u^*|^{(r+1)/2}\|_Z \leq c_r,\ r \geq 1,\ Z = L^2\left(\mathbb{R}_+, H^1(\Omega)\right) \cap L^\infty\left(\mathbb{R}_+, L^2(\Omega)\right).$$

die ausreichen, um mit der Methode von De Giorgi die L^∞–Schranken

$$\|u\|_{L^\infty(\mathbb{R}_+,L^\infty(\Omega))},\ \|u\|_{L^\infty(\mathbb{R}_+,L^\infty(\Gamma))} \leq c$$

zu gewinnen. Unter Benutzung üblicher Abschneidetechniken und Fixpunktargumente erhielten wir die globale Existenz von Lösungen zu (M5). Regularitätsaussagen für lineare parabolische Systeme von Gröger und Rehberg liefern die Einzigkeit. Die Aussage über das asymptotische Verhalten konnten wir zu

$$\|u(t) - u^*\|_{L^p(\Omega)} \leq c_p\,\mathrm{e}^{-\lambda_p t},\ t \geq 0,\ p \in [1, \infty)$$

verbessern.

Einen weiteren Schwerpunkt unserer Untersuchungen bildete die Begründung von Näherungsverfahren, speziell der Zeitdiskretisierung. Für ein implizites und ein semi–implizites Schema konnten wir, ebenfalls durch energetische Abschätzungen, die thermodynamische Korrektheit zeigen. Zugleich wurde deutlich, daß andere Diskretisierungsschemata (insbesondere explizite Verfahren) diese Eigenschaft nicht besitzen. Wir haben für dieses implizite und semi–implizite Näherungsverfahren die Konvergenz der Näherungslösungen gegen die Lösung von (M5) bewiesen. Dabei haben wir die globale Existenz von Lösungen der diskreten Aufgabe, deren Beschränktheit sowie weitere Regularitätseigenschaften der Lösung der kontinuierlichen Aufgabe benutzt. Die bewiesenen asymptotischen Aussagen implizieren die Stabilität des Verfahrens.

Die analytische Behandlung von (M5) (oder auch (M6)) im Fall mehrerer geladener Spezies erweist sich als äußerst schwierig. In der Formulierung in den Konzentrationen erhält man ein stark gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen, für dessen Ortsableitungsanteil ohne a priori–Abschätzungen keine Elliptizität nachgewiesen werden kann. Resultate von Amann [1, 2, 3] für quasilineare parabolische Systeme lassen sich wegen starker Voraussetzungen bezüglich der Glattheit auf die hier zu betrachtenden springenden Koeffizientenfunktionen nicht anwenden.

2.3.6 Offene Fragen und Probleme

Auf der Basis der in Abschn. 2.3.3 bis Abschn. 2.3.5 erzielten Ergebnisse und gewonnenen Erfahrungen wollen wir nun einige offen gebliebene Fragen zusammenstellen, die Ausgangspunkt für weitere mathematische Untersuchungen seien könnten.

1. Reaktionen höherer Ordnung: Existenzbeweise für die Lösbarkeit der Modellgleichungen in zwei Raumdimensionen bei allgemeinen Reaktionen wurden bis jetzt unter der Annahme geführt, daß die Ordnung der Quellterme aus Volumenreaktionen kleiner oder gleich zwei und aus den Randreaktionen kleiner oder gleich eins ist. Hier taucht die Frage auf, ob auch gewisse Klassen von Reaktionen höherer Ordnung behandelt werden können. Das in Abschn. 2.3.4 erwähnte zweistufige Regularisierungsverfahren zum Nachweis der Lösbarkeit der Modellgleichungen garantiert auch für Probleme mit Reaktionen höherer Ordnung (z. B. Clusterreaktionen) Existenzaussagen, sobald a priori–Abschätzungen für diese verfügbar sind.

2. Diskussion allgemeinerer Statistiken und Stromrelationen: Erörtert werden sollten Erweiterungsmöglichkeiten der Modelle bezüglich der Aufnahme zusätzlicher Nichtlinearitäten in die Gleichungen, was etwa allgemeinere Statistiken oder Stromrelationen betrifft. In [28] haben wir bereits Resultate zu energetischen Abschätzungen für solche erweiterten Modelle bereitgestellt.

3. (M5) und (M6) im Fall mehrerer geladener Spezies: Wünschenswert sind Fortschritte bei der analytischen Behandlung von (M5) und (M6) für den Fall, daß mehrere geladene Spezies (außer Elektronen und Löchern) betrachtet werden.

4. Weitere Reduktion der Modelle (M4) oder (M5): Gedacht ist an mögliche Reduktionen der Modelle unter zusätzlichen Annahmen über die Größenordnung von kinetischen Koeffizienten. Denkbar wäre z. B., daß alle Reaktionen, an denen geladene Spezies beteiligt sind, als im Gleichgewicht befindlich betrachtet werden, vgl. hierzu auch [45]. Derartige Ansätze führen zu zusätzlichen starken Nichtlinearitäten in den verbleibenden Gleichungen.

5. Simultane Behandlung von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen: Eine interessante Aufgabe dürfte die simultane Behandlung von partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen, wie sie bei weiterer Reduktion des Modells (M4) entstehen, sein.

6. Untersuchungen in 3–D: Völlig offen ist die Situation insbesondere auch bei Boltzmann–Statistik im räumlich dreidimensionalen Fall. Die Aussagen in Abschn. 2.3.3 u. 2.3.4 sind derzeit auf Beschränktheitsaussagen für die Lösungen elliptischer Gleichungen von Gröger [37] gestützt, wie sie in dieser Form nur im zweidimensionalen Fall vorliegen.

2.4 Veröffentlichungen

Im Verlaufe des Vorhabens entstanden die Arbeiten [27, 28, 29, 30, 32, 33, 38, 40, 41, 47, 51, 52, 62]. Weiterhin wurden Teilergebnisse in einem Report [31] und zwei internen Forschungsberichten des WIAS [48, 60] dokumentiert sowie auf Workshops und Fachtagungen (14 Beiträge) vorgestellt.

Literaturverzeichnis

[1] H. Amann, *Dynamic theory of quasilinear parabolic equations. I. Abstract evolution equations*, Nonlinear Anal. **12** (1988), 895–919.

[2] ———, *Dynamic theory of quasilinear parabolic equations. II. Reaction–diffusion systems*, Differ. Integral Equ. **3** (1990), 13–75.

[3] ———, *Dynamic theory of quasilinear parabolic equations. III. Global existence*, Math. Z. **202** (1989), 219–250.

[4] ———, *Nonhomogeneous linear and quasilinear elliptic and parabolic boundary value problems*, Function Spaces, Differential Operators and Nonlinear Analysis (H.-J. Schmeisser and H. Triebel, eds.), Teubner-Texte zur Mathematik, vol. 133, Teubner, Stuttgart - Leipzig, 1993, pp. 9–126.

[5] H. Amann and M. Renardy, *Reaction–diffusion problems in electrolysis*, Nonlinear Differ. Equ. Appl. **1** (1994), 91–117.

[6] Y. S. Choi and R. Lui, *Analysis of an electrochemistry model with zero–flux boundary conditions*, Applicable Analysis **49** (1993), 277–288.

[7] ———, *Long–time behaviour of solutions of an electrophoretic model with a single reaction*, IMA J. Appl. Math. **50** (1993), 239–252.

[8] ———, *Uniqueness of steady–state solutions for an electrochemistry model with multiple species*, J. Differential Equations **108** (1994), 424–437.

[9] ———, *Global stability of solutions of an electrochemistry model with multiple species*, J. Differential Equations **116** (1995), 306–317.

[10] ———, *Multi–dimensional electrochemistry model*, Arch. Rational Mech. Anal. **130** (1995), 315–342.

[11] N. E. B. Cowern, P.C. Zalm, P. van der Sluis, D. J. Gravesteijn, and W. B. de Boer, *Diffusion in strained Si(Ge)*, Phys. Rev. Letts. **72** (1994), 2585–2588.

[12] P. Dorner, W. Gust, B. Predel, and U. Roll, *Investigations by SIMS of the bulk impurity diffusion of Ge in Si*, Phil. Mag. A **49** (1984), 557–571.

[13] P. Fahey, S. S. Iyer, and G. J. Scilla, *Experimental evidence of both interstitial- and vacancy-assisted diffusion of Ge in Si*, Applied Physics Letters **54** (1989), 843–845.

[14] P. M. Fahey, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Point defects and dopant diffusion in silicon*, Reviews of Modern Physics **61** (1989), 289–384.

[15] R. B. Fair and J. C. C. Tsai, *A quantitative model for the diffusion of phosphorus in silicon and the emitter dip effect*, J. Electrochem. Soc. **124** (1977), 1107–1118.

[16] J. Frehse and J. Naumann, *An existence theorem for weak solutions of the basic stationary semiconductor equations*, Applicable Analysis **48** (1993), 157–172.

[17] ———, *Existence of weak solutions to the stationary semiconductor equations with avalanche generation*, Special topics in semiconductor analysis (J. Frehse and H. Gajewski, eds.), Bonner Mathematische Schriften, no. 258, 1994, pp. 3–16.

[18] ———, *On the existence of weak solutions to a system of stationary semiconductor equations with avalanche generation*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences **4** (1994), 273–289.

[19] H. Gajewski, *On existence, uniqueness and asymptotic behavior of solutions of the basic equations for carrier transport in semiconductors*, Z. Angew. Math. Mech. **65** (1985), 101–108.

[20] ———, *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern*, GAMM–Mitteilungen **16** (1993), 35–57.

[21] ———, *On the uniqueness of solutions to the drift–diffusion–model of semiconductor devices*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences **4** (1994), 121–133.

[22] H. Gajewski and K. Gärtner, *On the discretization of van Roosbroeck's equations with magnetic field*, Technical Report 94/14, ETH Integrated Systems Laboratory, Zurich, 1994.

[23] H. Gajewski and K. Gröger, *Initial boundary value problems modelling heterogeneous semiconductor devices*, Surveys on analysis, geometry and mathematical physics (B.-W. Schulze and H. Triebel, eds.), Teubner-Texte zur Mathematik, vol. 117, Teubner, Leipzig, 1990, pp. 4–53.

[24] ———, *Reaction–diffusion processes of electrically charged species*, Math. Nachr. **177** (1996), 109–130.

[25] H. Gajewski, B. Heinemann, R. Nürnberg, H. Langmach, G. Telschow, and K. Zacharias, *Der 2D–Bauelementesimulator ToSCA. Handbuch*, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin, 1986, 1991.

[26] H. Gajewski and U. Krause, *The drift–diffusion model for carrier transport in semiconductors — some open questions and numerical experiments*, Special topics in semiconductor analysis (J. Frehse and H. Gajewski, eds.), Bonner Mathematische Schriften, no. 258, 1994, pp. 17–31.

[27] A. Glitzky, K. Gröger, and R. Hünlich, *Existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions to equations modelling transport of dopants in semiconductors*, Special topics in semiconductor analysis (J. Frehse and H. Gajewski, eds.), Bonner Mathematische Schriften, no. 258, 1994, pp. 49–78.

[28] ———, *Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species*, Applicable Analysis **60** (1996), 201–217.

[29] ———, *Discrete–time methods for equations modelling transport of foreign–atoms in semiconductors*, Nonlinear Anal. **28** (1997), 463–487.

[30] A. Glitzky and R. Hünlich, *Electro–reaction–diffusion systems for heterostructures*, Free boundary problems, theory and applications (M. Niezgódka and P. Strzelecki, eds.), Pitman Research Notes in Mathematics, vol. 363, Addison Wesley Longman, 1996, pp. 305–313.

[31] ———, *Electro–reaction–diffusion systems in heterostructures*, Report, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin (in Vorbereitung).

[32] ———, *Energetic estimates and asymptotics for electro–reaction–diffusion systems*, Z. Angew. Math. Mech. **77** (1997), 823–832.

[33] ———, *Global estimates and asymptotics for electro–reaction–diffusion systems in heterostructures*, Applicable Analysis (to appear).

[34] K. Gröger, *Initial boundary value problems for semiconductor device theory*, Z. Angew. Math. Mech. **67** (1987), 345–355.

[35] ———, *A $W^{1,p}$–estimate for solutions to mixed boundary value problems for second order elliptic differential equations*, Math. Ann. **283** (1989), 679–687.

[36] ———, *Boundedness and continuity of solutions to linear elliptic boundary value problems in two dimensions*, Math. Ann. **298** (1994), 719–728.

[37] ———, *Boundedness and continuity of solutions to second order elliptic boundary value problems*, Nonlinear Anal. **26** (1996), 539–549.

[38] B. Heinemann, K.-E. Ehwald, P. Schley, G. Fischer, F. Herzel, D. Knoll, T. Morgenstern, W. Röpke, and W. Winkler, *Collector profile design of SiGe–HBTs for optimized static and high–frequency performance*, Proc. ESSDERC'95 (1995), 615–618.

[39] B. Heinemann, F. Herzel, and U. Zillmann, *Influence of low doped emitter and collector regions on high–frequency performance of SiGe–base HBTs*, Solid State Electr. **38** (1995), 1183–1189.

[40] B. Heinemann, D. Knoll, G. Fischer, D. Krüger, G. Lippert, J. Osten, H. Rücker, W. Röpke, P. Schley, and B. Tillack, *Control of steep boron profiles in Si/SiGe heterojunction bipolar transistors*, Proc. ESSDERC'97 (to appear).

[41] F. Herzel, K.-E. Ehwald, B. Heinemann, D. Krüger, R. Kurps, W. Röpke, and H.-P. Zeindl, *Deconvolution of narrow boron SIMS depth profiles in Si and SiGe*, Surface and interface analysis **23** (1995), 764–770.

[42] F. Herzel and B. Heinemann, *High–frequency noise of bipolar devices in consideration of carrier heating and low temperature effects*, Solid State Electr. **38** (1995), 1905–1909.

[43] F. Herzel, B. Heinemann, and H. Gajewski, *Small–signal analysis by means of transient excitations and its applications in bipolar transistor modelling*, Int. J. of High Speed Electronics and Systems (to appear).

[44] C. P. Ho, S. E. Hansen, and P. M. Fahey, *SUPREM III – A program for integrated circuit process modeling and simulation*, Technical Report SEL84–001, Stanford Electronics Laboratories, Stanford University, Stanford, 1984.

[45] A. Höfler and N. Strecker, *On the coupled diffusion of dopants and silicon point defects*, Technical Report 94/11, ETH Integrated Systems Laboratory, Zurich, 1994.

[46] S. L. Hollis, *On the question of global existence for reaction-diffusion systems with mixed boundary conditions*, Quart. Appl. Math. **51** (1993), 241–250.

[47] R. Hünlich, A. Glitzky, J. Griepentrog, and W. Röpke, *Zu einigen Fragen der Modellierung und Simulation bei der Entwicklung von SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren*, Mathematik — Schlüsseltechnologie für die Zukunft (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann, and H. Schunck, eds.), Springer, 1997, pp. 303–313.

[48] R. Hünlich, A. Glitzky, and W. Röpke, *Elektrische Wechselwirkung von As, B und P in Si*, Forschungsbericht, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 1996.

[49] Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder), *Jahresforschungsbericht 1996*.

[50] C. Kermarrec, T. Tewksbury, G. Dawe, R. Baines, B. Meyerson, D. Harame, and M. Gilbert, *New application opportunities for SiGe HBTs*, Microwave Journal (October 1994), 23–35.

[51] D. Knoll, B. Heinemann, K.-E. Ehwald, P. Schley, W. Röpke, K.-D. Bolze, J. Schlote, F. Herzel, and G. Fischer, *Comparison of P in situ spike doped with As implanted polysilicon emitters concerning Si/SiGe/Si HBT application*, Proc. ESSDERC'95 (1995), 627–630.

[52] D. Krüger, J. Schlote, W. Röpke, R. Kurps, and Ch. Quick, *Polycrystalline silicon layers for shallow junction formations: Phosphorus diffusion from in situ spike–doped chemical vapor deposited amorphus silicon*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **343** (1994), 691–696.

[53] O. A. Ladyzhenskaya, V. A. Solonnikov, and N. N. Ural'tseva, *Linear and quasilinear equations of parabolic type*, Nauka, Moscow, 1967 (Russian).

[54] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, and C. Schmeiser, *Semiconductor equations*, Springer, Wien - New York, 1990.

[55] W. Merz, K. Pulverer, and E. Wilczok, *Single species dopant diffusion in silicon. Numerical and analytical treatment*, The Mathematical Scientist (to appear).

[56] M. S. Mock, *An initial value problem from semiconductor device theory*, SIAM J. Math. Anal. **5** (1974), 597–612.

[57] A. Nylandsted Larsen, K. Kyllesbech Larsen, P. E. Andersen, and B. G. Svensson, *Heavy doping effects in the diffusion of group IV and V impurities in silicon*, Journal of Applied Physics **73** (1993), 691–698.

[58] P. Pichler, W. Jüngling, S. Selberherr, E. Guerrero, and H. Pötzl, *Simulation of critical IC–fabrication steps*, IEEE Trans. CAD **4** (1985), 384–397.

[59] A. Pruijmboom, C. E. Timmering, J. M. L. van Rooij-Mulder, D. J. Gravesteijn, W. B. de Boer, W. J. Kersten, J. W. Slotboom, C. J. Vriezena, and R. de Kruif, *Heterojunction bipolar transistors with $Si_{1-x}Ge_x$base*, ESSDERC '92, Microelectronic Engnrg. **19** (1992), 427–434.

[60] W. Röpke, *Diffusion von Bor in verspannten SiGe–Schichten*, Forschungsbericht, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 1994.

[61] I. Rubinstein, *Electro–diffusion of ions*, SIAM Studies in Applied Mathematics, vol. 11, SIAM, Philadelphia, 1990.

[62] J. Schlote, K. Tittelbach-Helmrich, B. Tillack, B. Kuck, and R. Hünlich, *Systematic classification of LPCVD processes*, Journal de Physique II **C5** (1995), C5–283–C5–290.

[63] S. Solmi, P. Maccagnani, and R. Canteri, *Codiffusion of arsenic and phosphorus implanted in silicon*, Journal of Applied Physics **74** (1993), 5005–5012.

[64] S. Solmi and S. Valmorri, *Experimental results and modeling of the codiffusion of donors and acceptors in Si*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **389** (1995), 65–70.

[65] N. Strecker, *The 2D process simulator DIOS. User manual. Version 3.6.*, ISE Integrated Systems Engineering AG, Zurich, 1995.

[66] Technology Modeling Associates, Inc., Palo Alto, USA, *TSUPREM–4. Version 6.1*, 1994.