Abschlußbericht

zum DFG-Einzelantrag Ga 452/2

Analytische Untersuchungen von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten

1 Arbeits- und Ergebnisbericht

1.1 Zielsetzung des Projekts

Thema dieses Programms ist die analytische Untersuchung von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen mit nichtglatten Daten. Derartige Differentialgleichungssysteme entstehen unter anderem bei der Modellierung verschiedener Teilprozesse bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen.

Das Basismodell (M3). Ausgangspunkt ist ein Basismodell (M3) (vgl. Tab. 1), das die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen mittels Diffusion, Reaktionen und der elektrischen Wechselwirkung der Teilchen beschreibt. Es sei Ω ein beschränktes Gebiet mit dem Rand $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D \cup \Gamma_0$ wobei $\operatorname{mes}\Gamma_0 = 0$, und ν sei der äußere Normalenvektor. Betrachtet werden M elektrisch geladene Spezies X_i (darunter Elektronen und Löcher) mit den Ladungszahlen q_i und Anfangsverteilungen U_i. Die Teilchendichten u_i und chemischen Potentiale $v_i = \ln(u_i/\overline{u}_i)$ ändern sich durch chemische Reaktionen, die in Ω oder auf dem Rand Γ stattfinden, durch Diffusion und zusätzlich durch eine Drift, die durch das innere elektrische Feld hervorgerufen wird. Hier ist $\overline{u}_i$ eine Referenzdichte. Ferner sei $\zeta_i := v_i + q_i v_0$ das elektrochemische Potential der i-ten Spezies, und v_0 bezeichne das elektrostatische Potential. Alle Funktionen sind geeignet skaliert. Betrachtet wird eine endliche Anzahl reversibler ladungserhaltender Reaktionen

$$\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_M X_M \rightleftharpoons \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_M X_M,$$

Für $\Sigma = \Omega, \Gamma$ sei $\mathcal{R}^\Sigma$ die Menge der Paare (α,β) der stöichiometrischen Koeffizienten $\alpha = (\alpha_1,\dots,\alpha_M)$, $\beta = (\beta_1,\dots,\beta_M)$, die zu den in Σ stattfindenden Reaktionen gehören. Die Reaktionsraten R_i^Σ zur Spezies X_i lauten gemäß dem Massenwirkungsgesetz

$$R_i^\Sigma = \sum_{(\alpha,\,\beta)\in\mathcal{R}^\Sigma} k_{\alpha\beta}^\Sigma(x, v_0,\dots,v_M)\Big(\prod_{k=1}^M e^{\zeta_k\alpha_k} - \prod_{k=1}^M e^{\zeta_k\beta_k}\Big)(\alpha_i-\beta_i), \quad i = 1,\dots,M,$$

mit kinetischen Koeffizienten $k_{\alpha\beta}^\Sigma$. Die Massenbilanzen für jede Spezies gekoppelt mit der Poissongleichung für das elektrostatische Potential führen auf das Anfangsrandwertproblem

$$\left.\begin{array}{rcll}
\dfrac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla\cdot(D_i u_i \nabla\zeta_i) + R_i^\Omega &=& 0 & \text{in } (0,\infty)\times\Omega,\\
\nu\cdot(D_i u_i\nabla\zeta_i) + R_i^\Gamma &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma,\\
u_i(0) &=& U_i & \text{in } \Omega,\ i=1,\dots,M,\\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla v_0) &=& f^\Omega + \displaystyle\sum_{i=1}^M q_i u_i & \text{in } (0,\infty)\times\Omega,\\
\nu\cdot(\varepsilon\nabla v_0) + \tau v_0 &=& f^\Gamma & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_N,\\
v_0 &=& v_D & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_D
\end{array}\right\} \qquad \text{(M3)}$$

mit Diffusionskoeffizienten D_i, der Dielektrizität ε und der Kapazität τ. In vielen Problemen aus der

		Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome	•••••••	Kontinuitätsgleichungen Fremdatome
		Kontinuitätsgleichungen Defekte	Kontinuitätsgleichungen Defekte	Kontinuitätsgleichungen Defekte		
	Kontinuitätsgleichungen n, p	Kontinuitätsgleichungen n, p				
nichtlineare Poissongleichung	Poissonglg. elektrostat. Potential	Poissonglg. elektrostat. Potential	nichtlineare (nichtlokale) Poissongleichung			
(M1)	(M2)	(M3)	(M4)	(M5)	(M6)	(M7)
Thermodynamisches Gleichgewicht	Van Roosbroeck System	**Basismodell**	n, p–Gleichgewicht (Diffusion, Rekombination schnell)	LEN–Modell	Reaktionen im Gleichgewicht schnelle oder langsame Diffusion (algebraische Glg., gewöhnliche Differentialglg., nichtlokale Gleichungen)	
Bauelemente–Modellierung (ca. 25 $^\mathrm{O}$ C)				**Technologie–Modellierung (ca. 700 – 1300 $^\mathrm{O}$ C)**		

Tab. 1 : Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen — Hierarchie der Modelle

Halbleitertechnologie hängen die physikalischen Parameter $\overline{u}_i$, D_i, $k^{\Sigma}_{\alpha\beta}$, ε, τ, f^{Σ} unstetig vom Ort ab. O.B.d.A. gelte $f^{\Gamma} = 0$, $v_D = 0$ und $\int_\Omega (f^\Omega + \sum_{i=1}^M q_i U_i)\,\mathrm{d}x = 0$.

Das reduzierte Modell (M4). In vielen Anwendungen kann das Modell (M3) zumindest näherungsweise vereinfacht werden, wenn die Temperatur (wie z. B. bei der Halbleitertechnologie–Modellierung) hoch ist. Die kinetischen Koeffizienten der Elektronen und Löcher sind dann im Vergleich zu denen der anderen Spezies so groß, dass man die Kontinuitätsgleichungen für diese Spezies weglassen kann. Man erhält $M-2$ Kontinuitätsgleichungen, die gekoppelt sind mit einer nichtlinearen Poissongleichung mit gemischten Randbedingungen und einer nichtlokalen Nebenbedingung zur Bestimmung des chemischen und elektrochemischen Potentials v_n und ζ_n der Elektronen:

$$\left.\begin{array}{rcll}
\dfrac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla\cdot(D_i u_i \nabla(v_i + q_i v_n)) + \widehat{R}_i^\Omega &=& 0 & \text{in } (0,\infty)\times\Omega, \\
\nu\cdot(D_i u_i \nabla(v_i + q_i v_n)) + \widehat{R}_i^\Gamma &=& 0 & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma, \\
u_i(0) &=& U_i & \text{in } \Omega,\ i = 1,\dots,M-2, \\
-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla v_n) + e_0(v_n) &=& \displaystyle\sum_{i=1}^{M-2} q_i u_i & \text{in } (0,\infty)\times\Omega, \\
\nu\cdot(\varepsilon\nabla v_n) + \tau v_n &=& \tau\zeta_n & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_N, \\
v_n &=& \zeta_n & \text{auf } (0,\infty)\times\Gamma_D, \\
\displaystyle\int_\Omega e_0(v_n)\,\mathrm{d}x &=& \displaystyle\int_\Omega \sum_{i=1}^{M-2} q_i u_i\,\mathrm{d}x & \text{auf } (0,\infty),
\end{array}\right\} \qquad \text{(M4)}$$

wobei $e_0(y) := \overline{n}e^y - \overline{p}e^{-y} - f^\Omega$ ist (zur Herleitung siehe [5]).

Ziele des Projekts. Im Rahmen des Projekts sollten Modellgleichungen für die Migration geladener Spezies in Heterostrukturen auf verschiedenen Modellierungsniveaus bezüglich ihrer thermodynamischen und analytischen Eigenschaften diskutiert werden. Für das Basismodell (M3) lagen zu Projektbeginn erste Untersuchungen vor, erfolgen sollte eine umfassende Behandlung der Modelle (M3) und (M4). Untersucht werden sollten weiterhin qualitative Eigenschaften von reduzierten Modellen, die aus dem Basismodell unter speziellen Annahmen über die Größenordnung kinetischer Koeffizienten entstehen (schnelle oder langsame Reaktionen bzw. Diffusion, lokale Elektroneutralität). Es handelt sich dabei um Systeme von Kontinuitätsgleichungen, einer nichtlinearen (nichtlokalen) Poissongleichung sowie von algebraischen Gleichungen und gewöhnlichen Differentialgleichungen (mit nichtlokalen Termen). Ein systematisches Verfolgen der Modellhierarchie (siehe auch Tab. 1) wurde angestrebt.

1.2 Stellungnahme zum Arbeitsplan

Die im Antrag formulierten möglichen Zielstellungen waren sehr umfangreich. Die gemäß dem Arbeitsplan vorrangig zu bearbeitenden Probleme wurden mit kleinen Abänderungen in Angriff genommen, zu denen hier Stellung bezogen wird. Die Auswahl von konkreten Detailproblemen richtete sich auch nach den Erfordernissen aus anderen, am Institut bearbeiteten Anwendungsprojekten, insbesondere einem BMBF-Projekt zur Modellierung und Simulation von Bauelementen der Leistungselektronik.

Die funktionalanalytischen Untersuchungen zu (M3) und (M4) erfolgten generell für den räumlich zweidimensionalen Fall. Das Hauptaugenmerk wurde aus Sicht der Anwendungen auf Probleme mit Boltzmann-Statistik gerichtet. Für Reaktionen maximal zweiter Ordnung wurden umfassende Ergebnisse erzielt. Spezielle Reaktionen höherer Ordnung (Clusterreaktionen) konnten ebenfalls behandelt werden.

Die Systematisierung der Modellreduktion auf vereinfachte Modelle (d.h. auf Modelle mit verringerter Anzahl von Gleichungen) bei speziellen Annahmen über die Größenordnung der kinetischen Koeffizienten erfolgte mit Hilfe des in Abschnitt 1.3.4 vorgestellten Reduktionsschemas. Aus praktischen Erwägungen war dabei jedoch nicht, wie ursprünglich geplant, das Modell (M5) (mit der Annahme lokaler Elektroneutralität) Ausgangspunkt dieser Klassifizierung , sondern das Modell (M3) mit Poissongleichung. Die weiter reduzierten Modelle sind dann auch Modelle (M6') bzw. (M7') mit Poissongleichung.

Speziell wurde eine Klasse von sogenannten Paardiffusionsmodellen auf verschiedenen Modellierungsniveaus untersucht. Hierzu liegen erste analytische Ergebnisse vor, auch für den Fall, dass nicht alle Spezies diffundieren.

1.3 Darstellung der erreichten Ergebnisse

1.3.1 Schwache Formulierung für die Probleme (M3) und (M4)

In den Abschnitten 2.3.1-2.3.3 werden Resultate aus [3, 4, 5, 6] kurz vorgestellt. Nach geeigneten Transformationen gelingt es, eine gemeinsame Formulierung der Modellgleichungen (M3) und (M4) zu finden.

Größe	(M3)	(M4)
K	M	$M-2$
$v=(v_0,\dots,v_K)$	$(v_0,v_1,\dots,v_M)$	$(v_n,v_1,\dots,v_{M-2})$
$u=(\sum_{i=1}^K q_iu_i,u_1,\dots,u_K)$	$(\sum_{i=1}^M q_iu_i,u_1,\dots,u_M)$	$(\sum_{i=1}^{M-2} q_iu_i,u_1,\dots,u_{M-2})$
U	$(\sum_{i=1}^M q_iU_i,U_1,\dots,U_M)$	$(\sum_{i=1}^{M-2} q_iU_i,U_1,\dots,U_{M-2})$
$e_0(y)$	$-f^\Omega$	$\overline{n}e^y-\overline{p}e^{-y}-f^\Omega$
π	0	gemäß (1.1)
$X=H\times H^1(\Omega)^K$	$H_0^1(\Omega\cup\Gamma_N)\times H^1(\Omega)^M$	$(H_0^1(\Omega\cup\Gamma_N)+\mathbb{R})\times H^1(\Omega)^{M-2}$

Dazu werden die Bezeichnungen aus der unten stehenden Tabelle benutzt. Das Funktional

$$\pi(w) = \begin{cases} (\operatorname{mes}\Gamma_D)^{-1} \displaystyle\int_{\Gamma_D} w \,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D \neq 0, \\ \|\tau\|^{-1}_{L^1(\Gamma_N)} \displaystyle\int_{\Gamma_N} \tau\, w \,\mathrm{d}\Gamma & \text{falls } \operatorname{mes}\Gamma_D = 0, \end{cases} \quad w \in H^1(\Omega), \tag{1.1}$$

dient der Berechnung von ζ_n im Modell (M4), es ist $\zeta_n = \pi(v_0)$. Mit geeigneten Operatoren A und E erhält man eine zu (M3) und (M4) gehörige funktionalanalytische Formulierung

$$\left.\begin{array}{c} u'(t) + A\,v(t) = 0,\ u(t) = Ev(t) \text{ f.f.a. } t \in \mathbb{R}_+\,; \quad u(0) = U, \\ u \in H^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, X^*),\ v \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, X) \cap L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{K+1})). \end{array}\right\} \tag{P}$$

Der Operator $A\colon W := X \cap L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{K+1}) \to X^*$ enthält die Difffusions- und Driftterme sowie die Volumen- und Randreaktionen. Im Operator $E\colon X \to X^*$ entspricht die 0−te Komponente $E_0\colon H \to H^*$ dem Poisson–Operator, die verbleibenden Komponenten korrespondieren zur Beziehung $u_i = \overline{u}_i \mathrm{e}^{\,v_i}$,

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

$$\langle Ev, \overline{v}\rangle := \langle E_0 v_0, \overline{v}_0\rangle + \int_\Omega \sum_{i=1}^K \overline{u}_i e^{v_i}\overline{v}_i\,\mathrm{d}x, \quad \overline{v} \in X.$$

Daneben wird ein voll implizites Einschrittverfahren zur Zeitdiskretisierung von (P) betrachtet. Seien $n \in \mathbb{N}$ und Z_n Zerlegungen des $\mathbb{R}_+$, $Z_n = \{t_n^0, t_n^1, \ldots, t_n^k, \ldots\}$, $t_n^0 = 0$, $t_n^k \in \mathbb{R}_+$, $t_n^{k-1} < t_n^k$, $k \in \mathbb{N}$ mit $t_n^k \to +\infty$ für $k \to \infty$. Dann lautet das zeitdisktetisierte Problem

$$u_n^k + (t_n^k - t_n^{k-1})A(v_n^k) = u_n^{k-1},\ u_n^k = Ev_n^k,\ v_n^k \in W,\ k \in \mathbb{N},\ u_n^0 = U. \tag{P$_n$}$$

1.3.2 Energetische Abschätzungen für die Probleme (M3) und (M4)

Invarianten. Es sei $\mathcal{S} := \operatorname{span}\{\alpha - \beta : (\alpha, \beta) \in \mathcal{R}^\Omega \cup \mathcal{R}^\Gamma\} \subset \mathbb{R}^K$ der zum Reaktionssystem gehörige stöchiometrische Unterraum. Dann erfüllen die Lösungen (u, v) von (P) die Invarianzeigenschaft

$$u(t) \in \mathcal{U} + U \quad \forall t \in \mathbb{R}_+,\ \mathcal{U} = \Big\{u \in X^* \colon u_0 = \sum_{i=1}^K q_i u_i,\ (\langle u_1, 1\rangle, \ldots, \langle u_K, 1\rangle) \in \mathcal{S}\Big\}.$$

Stationäre Zustände. Innerhalb der Kompatibilitätsklasse $\mathcal{U} + U$ besitzt das Problem (P) genau einen stationären Zustand (u^*, v^*) mit

$$Av^* = 0,\ u^* = Ev^*,\ u^* \in \mathcal{U} + U,\ v^* \in W. \tag{1.2}$$

Energetische Abschätzungen. Die Dissipationsrate $D(v) := \langle A\,v, v\rangle$ für $v \in W$, ist nicht negativ. Der Operator E ist ein strikt monotoner Potentialoperator mit dem stetigen, strikt konvexen und subdifferenzierbaren Potential $\Phi\colon X \to \mathbb{R}$. Die freie Energie $F\colon X^* \to \overline{\mathbb{R}}$ entspricht dem konjugierten Funktional zu Φ, das ebenfalls einfach, konvex und unterhalb stetig ist. Für $u \in H^* \times L^2_+(\Omega, \mathbb{R}^K)$ gilt

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

wobei v_0 die Lösung der Poissongleichung $E_0 v_0 = u_0$ ist (vgl. [5, Lemma 3.2]). Auf Lösungen von (P) gilt $v(t) \in \partial F(u)$ f.f.a. $t \in \mathbb{R}_+$, die Abbildung $t \mapsto F(u(t))$ ist absolutstetig, und mit der Brézis–Formel folgt für Lösungen von (P) und alle $\lambda \in \mathbb{R}_+$ die Identität

$$\mathrm{e}^{\,\lambda t_2} F(u(t_2)) - \mathrm{e}^{\,\lambda t_1} F(u(t_1)) = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{e}^{\,\lambda t}\big\{\lambda F(u(t)) - D(v(t))\big\}\,\mathrm{d}t, \quad 0 \le t_1 \le t_2. \tag{1.3}$$

Für $\lambda = 0$ resultiert hieraus, dass die freie Energie entlang von Lösungen (u, v) von (P) beschränkt ist und monoton fällt. Ferner gelten die Abschätzungen (vgl. [4, Theorem 3.2])

$$\|v_0(t)\|_{H^1} + \sum_{i=1}^{K} \|u_i(t) \ln u_i(t)\|_{L^1} + \int_0^t D(v(s))\,\mathrm{d}s \le c, \quad \|v_0(t)\|_{L^\infty} \le c \quad \forall t \in \mathbb{R}_+ .$$

Asymptotische Aussagen. Unter der Voraussetzung

$$\begin{aligned} \mathcal{M} :=\Big\{ &(a, v_0) \in \mathbb{R}_+^K \times H : \; a^\alpha = a^\beta \; \forall (\alpha, \beta) \in \mathcal{R}^\Omega \cup \mathcal{R}^\Gamma, \\ &(E_0 v_0, u_1, \dots, u_K) \in \mathcal{U} + U \text{ mit } u_i := \overline{u}_i \, a_i \, e^{-q_i v_0}, \, i = 1, \dots, K \Big\} \subset \operatorname{int} \mathbb{R}_+^K \times H, \end{aligned} \tag{1.4}$$

die für die interessierenden Probleme aus der Halbleitertechnologie auch erfüllt ist, wurde gezeigt, dass die Differenz der freien Energie zu ihrem Wert in der stationären Lösung nach oben durch die Dissipationsrate abgeschätzt werden kann,

$$F(u) - F(u^*) \le c_R D(v), \quad \forall v \in \{v \in W : F(Ev) - F(u^*) \le R, \, Ev - U \in \mathcal{U} + U\}.$$

Dieses Resultat liefert dann zusammen mit (1.3) auf Trajektorien des Systems (P) das exponentielle Fallen der freien Energie auf ihren Gleichgewichtswert

$$F(u(t)) - F(u^*) \le e^{-\lambda t}(F(U) - F(u^*)) \quad \forall t \in \mathbb{R}_+$$

und die weiteren asymptotischen Aussagen

$$\|v_0(t) - v_0^*\|_{H^1} + \sum_{i=1}^{K} \|u_i(t) - u_i^*\|_{L^1} \le c e^{-\lambda t/2} \quad \forall t \in \mathbb{R}_+ .$$

Aussagen für die zeitdiskretisierte Aufgabe. Für Lösungen (u_n, v_n) des zeitdiskretisierten Problems (P_n) gilt (wie auch für die kontinuierliche Aufgabe) die Invarianzeigenschaft $u_n(t) \in \mathcal{U}+U$ für alle $t \in \mathbb{R}_+$. Alle Probleme (P_n) besitzen den selben stationären Zustand (u^*, v^*) wie das Problem (P). Analog zu [3, Abschnitt 6] wurde gezeigt, dass die freie Energie entlang von Lösungen der diskretisierten Aufgabe monoton und exponentiell fällt, was die Stabilität des Näherungsverfahrens nach sich zieht.

1.3.3 Existenzaussagen für die Probleme (M3) und (M4)

Existenzresultat für eine Hilfsaufgabe. Zunächst wurde als Hilfsresultat ein Existenz- und Einzigkeitssatz für Elektro–Reaktions–Diffusionssysteme mit schwach nichtlinearen Quelltermen im Volumen und auf dem Rand auf beliebigen endlichen Zeitintervallen über Regularisierung, Zeitdiskretisierung und einen Auswahlsatz bewiesen (vgl. [5, Abschnitt 6]).

Allgemeines Existenzresultat. Unter der Voraussetzung, dass Volumen- bzw. Randquellterme in den Kontinuitätsgleichungen maximal zweiter bzw. erster Ordnung sind, besitzen die instationären Probleme (M3) und (M4) genau eine schwache Lösung. Diese Aussage folgt mit dem oben erwähnten Existenzresultat für das durch eine geeignete Regularisierung von (P) entstandene Problem. Es existieren Schranken für die Lösungen dieser regularisierten Aufgabe, die nicht vom Regularisierungslevel abhängen, sodass diese Lösungen bei hinreichend großem Abschneidelevel gleichzeitig Lösungen von (P) sind.

Globale Schranken und Asymptotik. Aussagen zur Regularität von Lösungen elliptischer Gleichungen mit gemischten Randbedingungen liefern bei geeigneten Annahmen über Ω und Γ (neben globalen L^∞–Schranken für v_0) eine höhere Integrierbarkeit für ∇v_0. A priori–Schranken für die Konzentrationen erhält man nach gewissen Anlaufschritten über Moser-Iteration. Wegen $U_i \ge c > 0$ können globale positive untere Schranken für die Konzentrationen u_i gefunden werden. Dazu wird ausgenutzt, dass aufgrund des exponentiellen Fallens der freien Energie die Größen $v_0 - v_0^*$ und $u_i/u_i^* - 1$ über $\mathbb{R}_+ \times \Omega$ und $\mathbb{R}_+ \times \Gamma$ integrabel sind. Man findet so eine globale Schranke für die L^1–Norm der chemischen Potentiale, die mittels Moser-Iteration auf eine positive untere Schranke für die Konzentrationen führt (siehe [4]). 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 die chemischen Potentiale in jeder L^p–Norm exponentiell ihren Gleichgewichten nähern.

Aussagen für die Probleme (M3) und (M4) mit Reaktionen höherer Ordnung. Motiviert durch Aufgaben aus der Halbleitertechnologie (siehe z.B. [1, 7, 8, 9]) wurden auch spezielle Reaktionen beliebig hoher Ordnung, sogenannte Clusterreaktionen,

$$\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_l X_l \rightleftharpoons X_j, \quad j \in \{l+1, \ldots, K\},$$

zugelassen. Unter der Annahme, dass die Clusterspezies X_j, $j \in \{l+1, \ldots, K\}$, außerdem nur an speziellen Reaktionen maximal zweiter Ordnung beteiligt sind, wurden analoge Resultate erzielt (siehe [6]).

1.3.4 Reduktion des Modells (M3) bei schnellen Teilkinetiken

Es werden Grenzmodelle zu (M3) und (M4) hergeleitet, die entstehen, wenn gewisse Teilkinetiken (Massenflüsse, Reaktionen) sehr schnell sind. Derartige Annahmen werden in der Halbleitertechnologie häufig gemacht, um die Anzahl der zu lösenden Kontinuitätsgleichungen zu verringern. Solche Ansätze führen u. a. zu zusätzlichen starken Nichtlinearitäten in den verbleibenden Gleichungen (siehe z.B. [9] oder die Reduktion eines Paardiffusionsmodells in [2, 11]).

Reduktion als Projektionsschema. Annahmen über sehr schnelle Volumen- oder Randreaktionen bzw. über sehr schnelle Diffusion einiger Spezies führen im Grenzfall dazu, dass der Vektor der Potentiale $v = (v_0, \ldots, v_K)$ nur in einem abgeschlossenen Teilraum von X liegt. Dieser kann durch einen geeigneten Banachraum $\widetilde{X}$ und einen geeigneten Operator

$$L \colon \widetilde{X} \to X \text{ linear, stetig, injektiv, } \operatorname{Im} L \text{ abgeschlossen in } X,\ \mathcal{U}^\perp \subset \operatorname{Im} L, \tag{1.5}$$

charakterisiert werden. Im Weiteren werden generell die Eigenschaften (1.5) für L vorausgesetzt. Für das Basisproblem (P) wird ein Projektionsschema angewendet, das nur Funktionen $v \in \operatorname{Im} L$, $v = L\widetilde{v}$, und Testfunktionen $h \in \operatorname{Im} L$, $h = L\widetilde{h}$, zulässt. Mit den Definitionen $\widetilde{u} := L^*u$, $\widetilde{A} = L^*AL$, $\widetilde{E} = L^*EL$ resultiert ein reduziertes Problem $(\widetilde{\mathrm{P}})$, das aus (P) unter den Annahmen für die Kinetik, wie sie der Operator L beschreibt, entsteht,

$$\left.\begin{aligned} \widetilde{u}'(t) + \widetilde{A}\,\widetilde{v}(t) = 0,\ \widetilde{u}(t) = \widetilde{E}\,\widetilde{v}(t) \text{ f.f.a. } t \in \mathbb{R}_+,\ \widetilde{u}(0) = L^*U, \\ \widetilde{u} \in H^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, \widetilde{X}^*),\ \widetilde{v} \in L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, \widetilde{X}),\ L\widetilde{v} \in L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, X) \cap L^\infty_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{M+1})). \end{aligned}\right\} \tag{$\widetilde{\mathrm{P}}$}$$

Übertragen der konvexen Struktur auf das reduzierte Problem. Man überträgt nun unter Ausnutzung der Eigenschaften (1.5) des Operators L Eigenschaften von (P) auf $(\widetilde{\mathrm{P}})$. Für Lösungen $(\widetilde{u}, \widetilde{v})$ von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ gilt die Invarianzeigenschaft

$$\widetilde{u}(t) - L^*U \in \widetilde{\mathcal{U}} \quad \forall t \in \mathbb{R}_+, \quad \widetilde{\mathcal{U}} := \left\{ \widetilde{u} \in \widetilde{X}^* \colon \widetilde{u} = L^*u,\ u \in \mathcal{U} \right\}.$$

Entsprechend werden stationäre Lösungen $(\widetilde{u}^*, \widetilde{v}^*)$ zu $(\widetilde{\mathrm{P}})$ mit dieser Eigenschaft gesucht

$$\widetilde{A}\widetilde{v}^* = 0,\ \widetilde{u}^* = \widetilde{E}\widetilde{v}^*,\ \widetilde{u}^* - L^*U \in \widetilde{\mathcal{U}},\ L\widetilde{v}^* \in W,\ \widetilde{v}^* \in \widetilde{X}. \tag{1.6}$$

Es gilt: (u^*, v^*) ist genau dann ein stationärer Zustand zu (P), wenn $(\widetilde{u}^*, \widetilde{v}^*)$ ein stationärer Zustand zu $(\widetilde{\mathrm{P}})$ ist und die Relationen $\widetilde{u}^* = L^*u^*$, $v^* = L\widetilde{v}^*$ erfüllt sind. Folglich existiert aufgrund der Aussagen über den stationären Zustand der Basisproblems genau ein stationärer Zustand zu $(\widetilde{\mathrm{P}})$ in Sinne von (1.6). Es werden Energiefunktionale eingeführt und die konvexe Struktur von (P) auf $(\widetilde{\mathrm{P}})$ übertragen. Seien $\widetilde{\Phi} \colon \widetilde{X} \to \mathbb{R}$ und $\widetilde{F} \colon \widetilde{X} \to \overline{\mathbb{R}}$,

$$\widetilde{\Phi}(\widetilde{v}) := \Phi(L\widetilde{v}), \quad \widetilde{F}(\widetilde{u}) := \widetilde{\Phi}^*(\widetilde{u}) = (\Phi L)^*(\widetilde{u}) = \sup_{\widetilde{v} \in \widetilde{X}} \left\{ \langle \widetilde{u}, \widetilde{v} \rangle - \Phi(L\widetilde{v}) \right\}.$$

Aufgrund der Eigenschaften von L und Φ ist das Funktional $\widetilde{\Phi}$ stetig, strikt konvex und subdifferenzierbar, es gilt $\partial\widetilde{\Phi}(\widetilde{v}) = \widetilde{E}\widetilde{v}$. Das konjugierte Funktional $\widetilde{F}$ kann wieder als freie Energie interpretiert werden. Für $\widetilde{u} \in \widetilde{X}$, in denen $\widetilde{F}$ subdifferenzierbar ist, gilt $\widetilde{F}(\widetilde{u}) = F(u)$ mit $u = \partial\Phi(L\widetilde{v})$, $\widetilde{u} = \widetilde{E}\widetilde{v}$. Die Dissipationsrate $\widetilde{D}\colon \widetilde{X} \cap \{\widetilde{v}\colon L\widetilde{v} \in W\} \to \mathbb{R}$ für das reduzierte System $(\widetilde{\mathrm{P}})$ wird definiert als

$$\widetilde{D}(\widetilde{v}) := D(L\widetilde{v}) = \langle AL\widetilde{v}, L\widetilde{v}\rangle_X = \langle L^*AL\widetilde{v}, \widetilde{v}\rangle_{\widetilde{X}} = \langle \widetilde{A}\widetilde{v}, \widetilde{v}\rangle_{\widetilde{X}},\ \widetilde{v} \in \widetilde{X} \cap \{\widetilde{v}\colon L\widetilde{v} \in W\}.$$

Wegen $D(v) \geq 0$ für alle $v \in W$ folgt die Relation $\widetilde{D}(\widetilde{v}) \geq 0$ für alle $\widetilde{v}$ mit $L\widetilde{v} \in W$.

Energetische Abschätzungen für $(\widetilde{\mathrm{P}})$. Das Funktional $\widetilde{F}$ ist eigentlich, konvex, unterhalb stetig, entlang von Lösungen $(\widetilde{u}, \widetilde{v})$ von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ gilt f.f.a. $t \in \mathbb{R}_+$ die Subdifferentialbeziehung $\partial\widetilde{F}(\widetilde{u}(t)) = \widetilde{v}(t)$. Aus der Brézis–Formel erhält man

$$e^{\lambda t}\big(\widetilde{F}(\widetilde{u}(t)) - \widetilde{F}(\widetilde{u}^*)\big) - \big(\widetilde{F}(L^*U) - \widetilde{F}(\widetilde{u}^*)\big) = \int_0^t e^{\lambda s}\Big\{\lambda\big(\widetilde{F}(\widetilde{u}(s)) - \widetilde{F}(\widetilde{u}^*)\big) - \widetilde{D}(\widetilde{v}(s))\Big\}\,\mathrm{d}s.$$

Für $\lambda = 0$ folgt so die Beschränktheit und das monotone Fallen der freien Energie entlang von Lösungen $(\widetilde{u}, \widetilde{v})$ von $(\widetilde{\mathrm{P}})$. Mit der Definition von $\widetilde{D}$ liefert die für (P) gewonnene Abschätzung der freien Energie $F(EL\widetilde{v}) - F(u^*)$ durch die Dissipationsrate $D(L\widetilde{v})$ dann ein $\lambda > 0$ derart, dass die freie Energie entlang von Lösungen von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ exponentiell fällt, womit die thermodynamische Korrektheit des reduzierten Problems $(\widetilde{\mathrm{P}})$ nachgewiesen ist.

Vergleich der Modelle (P) und $(\widetilde{\mathrm{P}})$. Es steht die Frage, inwieweit mit Hilfe von Lösungen $(\widetilde{u}, \widetilde{v})$ von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ Lösungen (u, v) von (P) approximiert werden können. Dazu werden aus $(\widetilde{u}, \widetilde{v}) \in \widetilde{X}^* \times \widetilde{X}$ Größen $(\breve{u}, \breve{v}) \in X^* \times X$ nach der Vorschrift

$$\breve{v} := L\widetilde{v}, \quad \breve{u} := EL\widetilde{v}$$

rekonstruiert. Aus dem stationären Zustand $(\widetilde{u}^*, \widetilde{v}^*)$ von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ wird der stationäre Zustand von (P) reproduziert, $(\breve{u}^*, \breve{v}^*) = (u^*, v^*)$. Auf Lösungen von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ gilt $\widetilde{F}(\widetilde{u}(t)) = F(\breve{u}(t))$ f.f.a. $t \in \mathbb{R}_+$, und aus den energetischen Abschätzungen für (P) und $(\widetilde{\mathrm{P}})$ gewinnt man f.f.a. $t \in \mathbb{R}_+$ die asymptotischen Abschätzungen

$$|F(\breve{u}(t)) - F(u(t))| \leq ce^{-\lambda t},\ \sum_{i=1}^{M} \|\breve{u}_i(t) - u_i(t)\|_{L^1} + \|\breve{v}_0(t) - v_0(t)\|_{H^1} \leq ce^{-\lambda t/2}.$$

Energetische Abschätzungen für das zeitdiskretisierte Problem zu $(\widetilde{\mathrm{P}})$. Auch für die zeitdiskretisierte Version von $(\widetilde{\mathrm{P}})$ lässt sich zeigen, dass die freie Energie entlang von Lösungen der diskretisierten Aufgabe monoton und exponentiell fällt.

1.3.5 Modellreduktion von (M3) zu (M4) als Projektionsschema

Seien im Modell (M3) die letzten zwei Spezies die Elektronen und Löcher $X_{M-1} = n$, $X_M = p$. Unter der Annahme , dass $D_{M-1}, D_M \to \infty$ und der kinetische Koeffizient der Elektronen-Löcher Generation/Rekombination $n + p \rightleftharpoons 0$ ebenfalls unendlich groß wird, muss $\nabla\zeta_{M-1} = \nabla\zeta_M = 0$ und $\zeta_n := \zeta_M = -\zeta_{M-1} = \mathrm{const}$ erfüllt sein. Damit hat der im Reduktionsschema auftretende Operator $L\colon H_0^1(\Omega \cup \Gamma_N) \times H^1(\Omega)^{M-2} \times \mathbb{R} \to H_0^1(\Omega \cup \Gamma_N) \times H^1(\Omega)^M$ die Form

$$v = L\widetilde{v} = (v_0, v_1, \ldots, v_{M-2}, v_0 + \zeta_n, -v_0 - \zeta_n), \quad \widetilde{v} = (v_0, v_1, \ldots, v_{M-2}, \zeta_n).$$

Durch geeignet gewählte Testfunktionen resultieren aus $\widetilde{u}' + L^*AL\widetilde{v} = 0$ und $\widetilde{u} = L^*EL\widetilde{v}$ die Gleichungen aus (M4), wenn man beachtet, dass $\nabla\zeta_n = 0$ und $v_n = v_0 + \zeta_n$ ist.

1.3.6 Hierarchie von Paardiffusionsmodellen

Als aus technologischer Sicht wichtiges Beispiel erfolgte eine Systematisierung von Paardiffusionsmodellen (vgl. auch [2, 11]) mit Hilfe des Reduktionsschemas aus Abschnitt 1.3.4.

a) Standardpaardiffusionsmodell. Im Fall, dass nur ein Dotand A mit der Ladung s vorliegt, sind in (M3) die Spezies $A^{(s)}$, $I^{(h)}$, $V^{(i)}$, $AI^{(s+j)}$, $AV^{(s+k)}$, n und p zu betrachten, wobei h, i, j, k die verschiedenen Ladungszustände der Interstitials I, der Vakanzen V, der Interstitial-Dotandenpaare AI und der Vakanzen-Dotandenpaare AV beschreiben. Es treten folgende Reaktionen auf:

(a) Generation/Rekombination von Defekten

$$I^{(h)} + V^{(i)} \rightleftharpoons -(h+i)n,$$
$$AI^{(s+j)} + V^{(i)} \rightleftharpoons A^{(s)} - (j+i)n, \quad AV^{(s+k)} + I^{(h)} \rightleftharpoons A^{(s)} - (k+h)n,$$
$$AI^{(s+j)} + AV^{(s+k)} \rightleftharpoons 2\,A^{(s)} - (j+k)n,$$

(b) Bildung/Zerfall von Dotand-Defekt-Paaren

$$A^{(s)} + I^{(h)} \rightleftharpoons AI^{(s+j)} + (j-h)n, \quad A^{(s)} + V^{(i)} \rightleftharpoons AV^{(s+k)} + (k-i)n,$$

(c) Ionisierung der Defekte

$$I^{(h)} \rightleftharpoons I(j) + (j-h)n, \quad V^{(i)} \rightleftharpoons V^{(k)} + (k-i)n,$$

(d) Ionisierung der Paare

$$AI^{(s+j)} \rightleftharpoons AI^{(s+h)} + (h-j)n, \quad AV^{(s+k)} \rightleftharpoons AV^{(s+i)} + (i-k)n,$$

(e) Generation/Rekombination von Elektronen und Löchern

$$n + p \rightleftharpoons 0.$$

Unter den Annahmen, dass die Kinetik der frei beweglichen Ladungsträger sehr schnell ist (schnelle Diffusion von Elektronen und Löchern und schnelle Reaktion (e)), entsteht nach Abschnitt 1.3.5 ein Standardpaardiffusionsmodell der Form (M4). Es enthält Kontinuitätsgleichungen für $A^{(s)}$, $I^{(h)}$, $V^{(i)}$, $AI^{(s+j)}$, $AV^{(s+k)}$, die mit einer nichtlinearen Poissongleichung für das chemische Potential v_n der Elektronen gekoppelt sind. Nach dem Reduktionsschema aus Abschnitt 1.3.4 wird das Standardpaardiffusionsmodell systematisch weiter reduziert.

b) Fünf-Spezies-Modell. Unter der Annahme, dass sämtliche Ionisierungsreaktionen aus (c) und (d) sehr schnell sind, erhält man (mit einem geeigneten Operator L) ein Paardiffusionsmodell mit den fünf Spezies I, V, AI, AV, A. Die zugehörigen Teilchendichten entsprechen nun den Gesamtteilchendichten (summiert über alle auftretenden Ladungszustände) der Interstitials u_I, der Vakanzen u_V, der Dotand-Interstitial-Paare u_{AI}, der Dotand-Vakanzen-Paare u_{AV} und der Dotanden u_A. Mit geeigneten Hilfsgrößen $a_i = u_i/p_i(v_n)$ haben die Stromausdrücke die Gestalt $j_i = -D_i(v_n)u_i\nabla \ln a_i$, $i = A, I, V, AI, AV$. Das reduzierte Modell enthält die fünf Kontinuitätsgleichungen

$$\begin{aligned}
{u_A}' + \nabla \cdot j_A &= -R_2 - R_3 + 2R_4 + R_5 + R_6,\\
{u_I}' + \nabla \cdot j_I &= R_1 + R_3 + R_5,\\
{u_V}' + \nabla \cdot j_V &= R_1 + R_2 + R_6,\\
{u_{AI}}' + \nabla \cdot j_{AI} &= R_2 - R_4 - R_5,\\
{u_{AV}}' + \nabla \cdot j_{AV} &= R_3 - R_4 - R_6
\end{aligned}$$

und eine nichtlineare Poissongleichung für das chemische Potential v_n der Elektronen, $\mathcal{E}_5(v_n, u) = 0$. Die verbleibenden Reaktionsraten sind in der folgenden Abbildung angegeben.

c) Drei-Spezies-Modell. Nimmt man nun zusätzlich an, dass die Paarbildungsreaktionen R_5 und R_6 ebenfalls schnell sind (d.h. im Standardpaardiffusionsmodell sind alle Reaktionen aus (b), (c), (d) als sehr schnell anzusehen), so resultiert ein Modell mit drei Pseudospezies. Es enthält Kontinuitätsgleichungen für die totalen Teilchendichten $u_A^{tot} = u_{AI} + u_{AV} + u_A$, $u_I^{tot} = u_I + u_{AI}$ und $u_V^{tot} = u_V + u_{AV}$ mit der verbleibenden Reaktion

$$R = (k_1(v_n) + k_2(v_n)a_A + k_3(v_n)a_A + k_4(v_n)a_A^2)(1 - a_V a_I) = k(a_A, v_n)(1 - a_V a_I)$$

und eine nichtlinearen Poissongleichung. Die Kontinuitätsgleichungen selbst sind stark gekoppelt.

d) Ein-Spezies-Modell. Im nächsten Schritt wird angenommen, dass die verbleibende Reaktion sowie die Diffusion der Defekte I und V sehr schnell sind (d.h. im Standardpaardiffusionsmodell sind alle Reaktionen (a), (b), (c) und (d) sowie die Diffusion von $I^{(h)}$ und $V^{(i)}$ als sehr schnell anzusehen). Es entsteht ein Modell mit nur einer Kontinuitätsgleichung für u_A^{tot} gekoppelt mit einer nichtlinearen Poisongleichung,

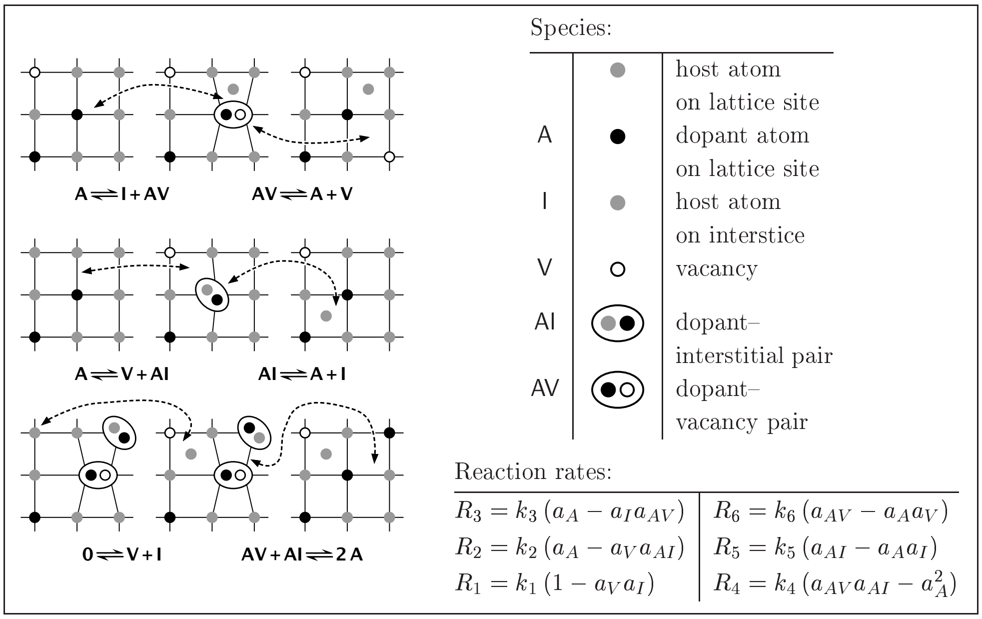
$$u_A^{tot\prime} - \nabla \cdot (\widetilde{D}_A(a_A, v_n)\nabla \ln a_A) = 0, \ \mathcal{E}_1(v_n, a_A) = 0,$$

wobei der Diffusionskoeffizient $\widetilde{D}_A(a_A, v_n)$ und die Poissongleichung nichtlokale Terme enthalten.

1.3.7 Analytische Untersuchungen zu Paardiffusionsmodellen

Das Standardpaardiffusionsmodell ist ein Modell der Form (M4), für das die Resultate aus den Abschnitten 2.3.1 bis 2.3.3 gelten. Für die in Abschnitt 1.3.6 geschilderte Hierarchie von Paardiffusionsmodellen folgen die Aussagen zu stationären Zuständen und die energetischen Abschätzungen in jeder Zwischenstufe aus den Aussagen für das Standardpaardiffusionsmodell gemäß dem Reduktionsschema aus Abschnitt 1.3.4. Aussagen zur Lösbarkeit des Fünf-Spezies-Modells für den Spezialfall einer homogenen glatt berandeten Struktur wurden in [12] bewiesen.

Gegenwärtig wird der Fall, dass einige Spezies (z.B. Dotanden) nicht diffundieren und dass Nullanfangswerte zugelassen werden, untersucht. Dazu muss eine andere funktionalanalytische Formulierung benutzt werden. Auch die energetischen Abschätzungen sind neu zu beweisen. Für das Fünf-Spezies-Modell wurden hierzu erste Ergebnisse erzielt (siehe [10]). An einem Existenzresultat wird derzeit gearbeitet.



1.3.8 Weiterführende Fragestellungen

Die im Projekt erfolgten Untersuchungen haben weitere Fragestellungen geliefert, die bis jetzt noch nicht ausreichend bearbeitet werden konnten, die aber weiter verfolgt werden sollten. Insbesondere ist die Behandlung von reversiblen Reaktionen beliebig hoher Ordnung im Hinblick auf Existenzaussagen vollständig offen. Diskutiert werden sollten die Modellgleichungen auch für den Fall, dass die Diffusionskoeffizienten vom Zustand abhängen. Generell sind hier für Einzigkeitsaussagen neue Beweisideen erforderlich, weil übliche Techniken versagen. Gegebenenfalls ist dafür auch mehr Regularität der Lösung nötig. Ferner sollten Formulierungen für Diffusionsmodelle in Heterostrukturen, die Nullanfangswerte zulassen, näher untersucht werden.

Während sich Aussagen über stationäre Zustände und energetische Abschätzungen für reduzierte Probleme $(\widetilde{\mathrm{P}})$ über das Schema aus Abschnitt 1.3.4 aus den Aussagen für (P) herleiten ließen, sind Existenzresultate und globale Abschätzungen für $(\widetilde{\mathrm{P}})$ nicht generell übertragbar. Hierzu sind für jedes reduzierte Modell spezielle Untersuchungen erforderlich. Die konkrete Struktur der Modellgleichungen erweist sich dabei oft als kompliziert. Es können starke Kopplungen unter der Zeitableitung oder im Diffusionsteil der resultierenden Gleichungssysteme auftreten. Häufig entstehen zusätzliche Nichtlinearitäten oder nichtlokale Terme in den Randbedingungen oder im Volumen. Der Nachweis von a priori-Abschätzungen und Existenzaussagen wäre für ausgewählte reduzierte Probleme zu erbringen. Speziell bereitet auch die funktionalanalytische Behandlung reduzierter Paardiffusionsmodelle in Heterostrukturen Schwierigkeiten, wenn die Referenzdichten vom Zustand abhängen.

Ausführlicher sollten Modelle weiter diskutiert werden, bei denen nicht alle Spezies diffundieren, ein Teil der Kontinuitätsgleichungen also gewöhnliche Differentialgleichungen sind, die dann über die Reaktionen und die Poissongleichung mit den anderen Kontinuitätsgleichungen gekoppelt sind. Interessant ist auch die Begründung eines Reduktionsschemas und seiner Folgerungen für den Fall, dass im Ausgangsmodell nicht alle Spezies diffundieren. Daran wird gegenwärtig gearbeitet.

1.4 Wirtschaftliche Verwertbarkeit der erzielten Resultate

Differentialgleichungssysteme mit nichtglatten Daten, wie sie innerhalb des Projekts umfassend untersucht wurden, entstehen unter anderem bei der Modellierung von verschiedenen Teilprozessen in der Fertigung von Halbleiterbauelementen. Aufgrund der zunehmenden Komplexität der Strukturen muss die Entwicklung leistungsstarker elektronischer Bauelemente durch numerische Simulation unterstützt werden. Diese wiederum erfordert die ständige Anpassung der Modelle und die mathematische Behandlung der Modellgleichungen. Die Diskussion der Modelle (M3) und (M4) hinsichlich thermodynamischer Korrektheit der Probleme selbst und ihrer zeitdiskretisierten Varianten, stationärer Lösungen, der Existenz eindeutiger Lösungen der transienten Aufgaben, sowie der Beschränktheitsaussagen lieferte dazu wertvolle Beiträge.

Im Projekt wurden Grenzfälle der Modellgleichungen für große und kleine Parameter diskutiert. Viele solche auf physikalischen Überlegungen beruhenden „Modellvereinfachungen“ sind aus Sicht der Simulation notwendig, bringen aber oft zusätzliche Schwierigkeiten bei der qualitativen Untersuchung der Modellgleichungen und deren numerischer Lösung. Es konnten dazu auf verschiedenen Modellierungsniveaus Resultate zu qualitativen Eigenschaften der Modellgleichungen erbracht werden.

Die durchgeführten Untersuchungen standen in enger Wechselwirkung mit dem am Institut innerhalb der Forschungsgruppe bearbeiteten BMBF–Projekt zur „Modellierung und Simulation von hochsperrenden Bauelementen für Schaltkreise der Leistungselektronik“.

1.5 Arbeitsgruppe und Kooperation

Die Bearbeitung des DFG-Projekts erfolgte durch die Projektmitarbeiterin Dr. A. Glitzky in Zusammenarbeit mit Dr. R. Hünlich, wissenschaftlicher Mitarbeiter am WIAS. Zu Fragen der Regularität elliptischer und parabolischer Gleichungen und zu Techniken für a priori–Abschätzungen wurde Prof. Dr. K. Gröger, Humboldt–Universität zu Berlin, konsultiert. Ferner gab es Zusammenarbeiten mit Dr. B. Heinemann, Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder), zu Fragen der Halbleitermodellierung, mit Dr. W. Merz, Universität München, zur analytischen Behandlung von Diffusionsmodellen und mit Dr. N. Strecker, Integrated Systems Engineering AG Zürich, zu Fragen der Technologiesimulation.

Literaturverzeichnis

1. 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.

2. K. Ghaderi and G. Hobler, *Simulation of phosphorus diffusion in silicon using a pair diffusion model with a reduced number of parameters*, J. Electrochem. Soc. **142** (1995), 1654–1658.

3. A. Glitzky and R. Hünlich, *Energetic estimates and asymptotics for electro–reaction–diffusion systems*, Z. Angew. Math. Mech. **77** (1997), 823–832.

4. ———, *Global estimates and asymptotics for electro–reaction–diffusion systems in heterostructures*, Applicable Analysis **66** (1997), 205–226.

5. ———, *Electro–reaction–diffusion systems in heterostructures*, Report 19, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 2000, http://www.wias-berlin.de/publications/reports/19.html.

6. ———, *Electro–reaction–diffusion systems including cluster reactions of higher order*, Math. Nachr. **216** (2000), 95–118.

7. E. Guerrero, H. Pötzl, R. Tielert, M. Grasserbauer, and G. Stingeder, *Generalized model for the clustering of As dopants in Si*, J. Electrochem. Soc. **129** (1982), 1826–1831.

8. A. Höfler, *Development and application of a model hierarchy for silicon process simulation*, Series in Microelectronics, vol. 69, Hartung–Gorre, Konstanz, 1997.

9. 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.

10. R. Hünlich and A. Glitzky, *On energy estimates for electro–diffusion equations arising in semiconductor technology*, Partial differential equations. Theory and numerical solution (W. Jäger, J. Nečas, O. John, K. Najzar, and J. Stará, eds.), Chapman & Hall/CRC Research Notes in Mathematics, vol. 406, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2000, pp. 158–174.

11. J. Lang and W. Merz, *Numerical simulation of single species dopant diffusion in silicon under extrinsic conditions*, Preprint SC 97–47, Konrad–Zuse–Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1997.

12. W. Merz, A. Glitzky, R. Hünlich, and K. Pulverer, *Strong solutions for pair diffusion models in homogeneous semiconductors*, Preprint SFB–438–9921, Technische Universität München, Universität Augsburg, 1999, http://www-lit.ma.tum.de/veroeff/html/SFB/992.34009.html.

2 Zusammenfassung

Behandelte Aufgabenstellungen. Ausgangspunkt ist ein Basismodell (M3), das den Transport elektrisch geladener Teilchen (Dotanden, Defekte, Elektronen und Löcher) in Halbleitern über die Mechanismen Drift, Diffusion, Volumen- und Randreaktionen beschreibt. Dieses Modell wurde auf gemischte Randbedingungen für die Poissongleichung erweitert und für Heterostrukturen untersucht. Unter der Annahme, dass die kinetischen Koeffizienten für die Elektronen und Löcher sehr groß sind im Vergleich zu denen der anderen beteiligten Spezies, wurde ein reduziertes Modell (M4) hergeleitet und diskutiert. Sind auch weitere kinetische Prozesse sehr schnell, so entstehen aus (M3) und (M4) neue Grenzmodelle, die analytisch zu untersuchen waren. Besondere Aufmerksamkeit wurde dabei der Systematisierung von Paardiffusionsmodellen und ihrer funktionalanalytischen Behandlung geschenkt. Die Auswahl der behandelten Aufgaben erfolgte in enger Abstimmung mit einem am Institut innerhalb der Forschungsgruppe angesiedelten Anwendungsprojekt zur Modellierung und Simulation von Bauelementen der Leistungselektronik.

Ergebnisse. Alle analytischen Resultate beziehen sich auf den räumlich zweidimensionalen Fall. Durch geeignete Transformation gelang es, eine allgemeine funktionalanalytische Formulierung zu finden, die sowohl (M3) als auch (M4) enthält. Somit konnten Aussagen zu stationären Zuständen, energetischen Abschätzungen, a priori–Abschätzungen, zu semidiskreten Näherungsverfahren und zur Existenz und Einzigkeit von schwachen Lösungen nach einem einheitlichen Vorgehen hergeleitet werden.

Mit einem allgemeinen Verfahren wurde für Probleme mit maximal quadratischen Quelltermen in den Volumenreaktionen die Existenz schwacher Lösungen gezeigt. Über diese Reaktionsordnung hinaus konnte auch für Modelle mit einer speziellen Klasse von Reaktionen höherer Ordnung, mit sogenannten Clusterreaktionen, die Existenz einer schwachen Lösung und deren globale Beschränktheit nachgewiesen werden.

Es wurde ein konsistentes Schema zur Herleitung von Grenzmodellen aus (M3) bei unterschiedlicher Größenordnung der kinetischen Koeffizienten gefunden. Dieses Verfahren sichert die Existenz genau einer stationären Lösung für die so reduzierte Aufgabe, liefert die thermodynamische Korrektheit der Grenzmodelle und überträgt sämtliche energetischen Abschätzungen. Dieses Schema wurde zur Reduktion von Paardiffusionsmodellen angewendet. Für den Fall einer homogenen Struktur wurde für ein sogenanntes Fünf-Spezies-Paardiffusionsmodell die eindeutige Lösbarkeit des entsprechenden Elektro-Reaktions-Diffusionssystems in homogenen Strukturen gezeigt.

Betrachtet wurden außerdem Modelle, die auch nicht diffundierende Spezies enthalten, bei denen die Kontinuitätsgleichungen gewöhnliche Differentialgleichungen sind, die über die Reaktionen mit den Kontinuitätsgleichungen für die diffundierenden Spezies gekoppelt sind. Für das Fünf-Spezies-Paardiffusionsmodell wurden bisher Resultate zu stationären Zuständen, energetischen Abschätzungen und zum asymptotischen Verhalten erzielt.