Abschlussbericht

zum DFG-Einzelantrag HU 868/2

Zur Analysis von thermodynamischen Modellen des Stoff-, Ladungs- und Energietransports in heterogenen Halbleitern

1 Arbeits- und Ergebnisbericht

1.1 Zielsetzung des Projekts

Thema dieses Projekts sind analytische Untersuchungen zu Systemen von nichtlinearen Reaktions–Diffusionsgleichungen für elektrisch geladene Teilchen. Derartige Differentialgleichungssysteme entstehen unter anderem bei der Modellierung verschiedener Teilprozesse bei der Herstellung und beim Einsatz von Halbleiterbauelementen. Dabei ist die Behandlung von Heterostrukturen, nichtglatten Rändern und gemischten Randbedingungen erforderlich.

Der erste Schwerpunkt befasst sich mit einem allgemeinen Modell für den Stoff- und Ladungstransport (Diffusionsmodelle) und dessen Reduktion für den Fall, dass einige kinetische Prozesse sehr schnell sind. Dieses Reduktionsschema wird zur Herleitung einer Hierarchie von Paardiffusionsmodellen aus der Halbleitertechnologie angewendet. Der zweite Schwerpunkt widmet sich thermodynamischen Modellen, in denen die betrachteten Reaktions-Diffusionsgleichungen stark mit einer Energiebilanzgleichung gekoppelt sind (Energiemodelle).

1.1.1 Diffusionsmodelle

Das folgende Modell beschreibt die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen mittels Diffusion, Reaktionen und der elektrischen Wechselwirkung der Teilchen. Dabei wird angenommen, dass die Temperatur ein äußerer orts- und zeitunabhängiger Parameter ist. Sei Ω ein beschränktes Gebiet im $\mathbb{R}^2$ mit dem Rand $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D \cup \Gamma_0$, wobei das Oberflächenmaß von Γ_0 Null ist, ν sei der äußere Normalenvektor. Betrachtet werden m elektrisch geladene Spezies X_i mit den Ladungszahlen q_i und Anfangsverteilungen U_i. Ihre Teilchenzahldichten u_i und ihre chemischen Potentiale v_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.

Die Teilchenzahldichten und chemischen Potentiale seien durch die Boltzmann-Statistik

$$u_i = \overline{u}_i \, \mathrm{e}^{\,v_i}, \quad i = 1, \dots m, \tag{1.1}$$

verknüpft, wobei $\overline{u}_i$ gegebene Referenzdichten sind. Die Größe $u_0 := \sum_{i=1}^m q_i u_i$ entspricht der Ladungsdichte, die als zusätzlicher Quellterm in die Gleichung zur Berechnung des elektrostatischen Potentials v_0 eingeht. Ferner bezeichne $\zeta_i := v_i + q_i v_0$ das elektrochemische Potential der i-ten Spezies. Dabei sind alle Funktionen geeignet skaliert.

Betrachtet wird eine endliche Anzahl reversibler Reaktionen der Form

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

Dabei bezeichnen $\mathcal{R}^\Omega$ bzw. $\mathcal{R}^\Gamma$ die Menge der Paare $(\alpha, \beta) = ((\alpha_1, \dots, \alpha_m), (\beta_1, \dots, \beta_m))$ der stöchiometrischen Koeffizienten, die zu den im Gebiet Ω bzw. auf dem Rand Γ stattfindenden Reaktionen gehören. Die Reaktionsraten R_i^Σ der Spezies X_i lauten entsprechend dem Massenwirkungsgesetz

$$R_i^\Sigma = \sum_{(\alpha,\beta)\in\mathcal{R}^\Sigma} k_{\alpha\beta}^\Sigma(x, v_0, v_1, \cdots, v_m)\Big(\mathrm{e}^{\sum_{k=1}^m \alpha_k\zeta_k} - \mathrm{e}^{\sum_{k=1}^m \beta_k\zeta_k}\Big)(\alpha_i - \beta_i), \quad i = 1, \dots, m. \tag{1.2}$$

$\alpha_m), (\beta_1, \ldots, \beta_m))$ der stöchiometrischen Koeffizienten, Dabei sind die kinetischen Koeffizienten $k^{\Sigma}_{\alpha\beta}$ vorgegebene Funktionen, $\Sigma = \Omega,\ \Gamma$. Der Gradient des elektrochemischen Potentials ζ_i ist die Triebkraft für die Teilchenstromdichte der i-ten Spezies

$$j_i = -D_i(\cdot, v_0, \ldots, v_m)\, u_i \nabla\zeta_i, \quad i = 1, \ldots m,$$

mit gegebenen Diffusionskoeffizienten D_i.

Die Bilanzierung der Teilchenzahlen für jede Spezies gekoppelt mit einer Poissongleichung für das elektrostatische Potential v_0 führen auf das Anfangsrandwertproblem

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

wobei die Dielektrizität ε und die Kapazität τ vorgegeben sind. In vielen Anwendungen aus der Halbleitertechnologie hängen die physikalischen Parameter $\overline{u}_i,\ D_i,\ k^{\Sigma}_{\alpha\beta},\ \varepsilon$ und τ in nichtglatter Weise vom Ort ab, die kinetischen Koeffizienten $D_i,\ k^{\Sigma}_{\alpha\beta}$ hängen, wie oben bereits angegeben, auch vom Zustand ab. Für eine Variationsformulierung von (D) in der Sprache der Potentiale $v = (v_0, v_1, \ldots, v_m)$ und Dichten $u = (u_0, u_1, \ldots, u_m)$ sind grundlegende Ergebnisse in unseren Arbeiten [5, 6, 7, 8] enthalten.

1.1.2 Einbeziehung von Energietransport (Energiemodelle)

In den bisher betrachteten Modellen wurde die implizit enthaltene Temperatur T als vorgegebener konstanter Parameter betrachtet. Im Betrieb von Halbleiterbauelementen (und auch in ihrer Technologie, z.B. bei schnellen thermischen Ausheilverfahren) spielen aber thermische und thermoelektrische Effekte eine wichtige Rolle, so dass auch der Energietransport zu modellieren ist. Das kann durch konsequente Anwendung von Prinzipien der irreversiblen Thermodynamik (s. z.B. [12, 15]) geschehen. Ausgangspunkt ist das Drift-Diffusionsmodell (D), wobei nun die Beziehungen zwischen Teilchenzahldichten und chemischen Potentialen, die Referenzdichten $\overline{u}_i$ und die kinetischen Koeffizienten $D_i,\ k^{\Sigma}_{\alpha\beta}$ von T abhängen. Das Gleichungssystem muss um eine neue Zustandsgleichung und eine neue Bilanzgleichung, z.B. für die Dichte der inneren Energie e erweitert werden. Man erhält die Differentialgleichungen

$$\left.\begin{array}{rcl}
\dfrac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i & = & -R_i^{\Omega}, \quad i = 1, \ldots, m, \\
\dfrac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot j_e & = & v_0 \displaystyle\sum_{i=1}^{m} q_i\, \nabla \cdot j_i, \\
-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) & = & f^{\Omega} + \displaystyle\sum_{i=1}^{m} q_i u_i
\end{array}\right\} \text{ in } (0,\infty) \times \Omega, \tag{E}$$

dabei werden die Zustandsgleichungen

$$u_i = \overline{u}_i(x,T)\, \mathrm{e}^{(\zeta_i - q_i v_0 + E_i(x,T))/T}, \quad i = 1, \ldots, m, \quad e = e(x, u_1, \ldots, u_m, T)$$

verwendet. Die Reaktionsraten R_i^{Ω} lauten

$$R_i^{\Omega} = \sum_{(\alpha,\beta) \in \mathcal{R}^{\Omega}} r^{\Omega}_{\alpha\beta}(x,u,T) \Big(\mathrm{e}^{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i \zeta_i / T} - \mathrm{e}^{\sum_{i=1}^{m} \beta_i \zeta_i / T} \Big) (\alpha_i - \beta_i), \quad i = 1, \ldots, m.$$

Für die Teilchenstromdichten j_i und die innere Energiestromdichte j_e benutzen wir den Ansatz

$$
\begin{aligned}
j_i &= -\sum_{j=1}^{m} \sigma_{ij}(x,u,T)\big(\nabla\zeta_j + P_j(x,u,T)\nabla T\big), \quad i = 1,\dots,m, \\
j_e &= -\kappa(x,u,T)\nabla T + \sum_{i=1}^{m}(\zeta_i + P_i(x,u,T)T)j_i
\end{aligned}
\tag{1.2}
$$

wobei die Leitfähigkeiten σ_{ij}, κ die folgenden Eigenschaften erfüllen

$$
\sigma_{ij} = \sigma_{ji}, \quad \sum_{i,j=1}^{n} \sigma_{ij}(x,u,T)t_i t_j \geq \sigma_0(u,T)\sum_{j=1}^{m} t_i^2 \quad \forall t \in \mathbb{R}^m, \quad \kappa(x,u,T) \geq \kappa_0(u,T) \tag{1.3}
$$

mit $\sigma_0(u,T)$, $\kappa_0(u,T) > 0$ für alle nicht-degenerierten Zustände u, T. Hinzu kommen geeignete Rand- und Anfangsbedingungen.

1.1.3 Ziele des Projekts

Für die vorgestellten Modelle für den Stoff-, Ladungs- und Energietransport in heterogenen Halbleiterstrukturen (E) und (D) sowie für aus (D) hervorgehende reduzierte Modelle, die unter der Annahme von schnellen kinetischen Teilprozessen entstehen, waren im wesentlichen folgende Ziele zu verfolgen:

• Untersuchung struktureller Eigenschaften. Mit Methoden der konvexen Analysis sollte die Existenz thermodynamischer Gleichgewichte untersucht werden, Energiefunktionale gefunden werden und die thermodynamische Korrektheit der Modelle nachgewiesen werden.

• Gefragt war nach (lokalen, globalen) Existenzaussagen zu schwachen Lösungen der Modellprobleme und deren Eindeutigkeit.

• Für den Fall, dass die Daten (eindeutiges) thermodynamisches Gleichgewicht zulassen, sollten das Verhalten der Lösung für große Zeiten untersucht, Aussagen zu globalen Abschätzungen und weitere Aussagen zum asymptotischen Verhalten bewiesen werden.

1.2 Stellungnahme zum Arbeitsplan

Aufbauend auf früheren Resultaten [5, 6, 7, 8] standen bei der analytischen Behandlung des Reaktions-Diffusionssystems (D) folgende Probleme im Vordergrund:

- Behandlung von Problemen mit Nullanfangswerten,
- Diskussion von Heterostrukturen mit nichttrivialen Übergangsbedingungen,
- zustandsabhängige Diffusionskoeffizienten,
- Untersuchungen zur Nichtgleichgewichtssituation, wenn die Daten so abgeändert werden, dass sie kein thermodynamisches Gleichgewicht zulassen,
- Diskussion der Situation, dass nicht alle beteiligten Spezies Drift-Diffusionsprozessen unterliegen und die entsprechenden Kontinuitätsgleichungen dann gewöhnliche Differentialgleichungen werden,
- Untersuchung von Problemen mit schneller Kinetik für Teilprozesse.

Das hierbei entwickelte Reduktionsschema sollte auf die Reduktion von Paardiffusionsmodellen angewendet werden mit den Zielen:

- Beschreibung einer konsistenten Hierarchie von Paardiffusionsmodellen,
- Existenzaussagen und globale Eigenschaften von Paardiffusionsmodellen.

Generelle Fragestellungen bei der Untersuchung von Energiemodellen (E) waren:

- mathematische Modellierung,

- konvexe Struktur,
- analytische Behandlung stationärer Energiemodelle,
- erste Untersuchungen zur instationären Aufgabe.

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 im Abschnitt 2.3 ausführlich Stellung genommen wird.

1.3 Darstellung der erreichten Ergebnisse

Generell wird in diesem Projekt der räumlich zweidimensionale Fall betrachtet.

1.3.1 Diffusionsmodelle

Nullanfangswerte, zustandsabhängige Diffusionskoeffizienten, gewöhnliche Differentialgleichungen. Eine schwache Formulierung der Aufgabe (D) in den Potentialen $v = (v_0, \dots, v_m)$ und den Dichten $u = (u_0, \dots, u_m)$, wie sie auch in [5, 6, 7, 8] verwendet wurde, lautet

$$u'(t) + Av(t) = 0, \quad u(t) = Ev(t), \quad t > 0, \quad u(0) = U. \tag{D}$$

Die gleichzeitige Verwendung von u und v ist für Heterostrukturen wichtig, weil hier v_i glatt ist, aber nicht u_i ($v_i(t) \in H^1(\Omega)$, $u_i(t) \in H^1(\Omega)^*$). Die Umkehrung der Relation (1.1), $v_i = \ln(u_i/\overline{u}_i) = \ln b_i$ mit den chemischen Aktivitäten $b_i = u_i/\overline{u}_i$, $i = 1, \dots, m$, ist nur für positive Dichten korrekt erklärt. Um nun das Modell (D) auch mit Anfangswerten behandeln zu können, die auf Mengen positiven Maßes verschwinden (z.B. auf einem Teil der Heterostruktur), lag es nahe, statt der v_i die (auch glatten) b_i zu benutzen und so zu einem umformulierten Problem ($\mathcal{D}$) zu kommen:

$$u'(t) + A(b(t), v_0(t) = 0, \quad u(t) = Bb(t), \quad E_0(v_0(t), u(t)) = 0, \quad t > 0, \quad u(0) = U. \tag{$\mathcal{D}$}$$

Außerdem werden jetzt auch *immobile* Spezies zugelassen, die nicht diffundieren, die entsprechenden Kontinuitätsgleichungen sind dann gewöhnliche Differentialgleichungen. Die Diffusionskoeffizienten der anderen *mobilen* Spezies sollen von allen Zustandsgrößen abhängen. Das Problem ($\mathcal{D}$) erweist sich als ein Spezialfall eines verallgemeinerten Elektro-Reaktions-Diffusionssystems ($\mathcal{P}$) (siehe Abb. 1). Die erforderlichen analytischen Untersuchungen zum Problem ($\mathcal{P}$) wurden in [2, Kapitel 8] durchgeführt und werden im Teilabschnitt 2.3.3 des Berichts kurz erläutert. Damit sind die hier genannten Aufgabenstellungen für (D) voll erfüllt worden.

Schnelle Kinetik von Teilprozessen. Wie im Antrag zu diesem Projekt geschildert, führen schnelle Kinetiken für Teilprozesse (schnelle Volumen- oder Randreaktionen oder schnelle Diffusion) dazu, dass die Vektoren v der Potentiale nur noch in einem abgeschlossenen Teilraum des Ausgangsraumes liegen, die mit Hilfe eines stetigen, linearen Operators L und Vektoren $\widetilde{v}$ als $v = L\widetilde{v}$ geschrieben werden können. Setzt man $\widetilde{u} = L^*u$, so erhält man gemäß eines Projektionsverfahrens aus dem Problem (D) das reduzierte Problem

$$\widetilde{u}'(t) + L^*AL\widetilde{v}(t) = 0, \quad \widetilde{u}(t) = L^*EL\widetilde{v}(t), \quad t > 0, \quad \widetilde{u}(0) = L^*U, \tag{DR}$$

(siehe [2, Kapitel 4]). Auf der Basis des Reduktionsschemas konnten energetische Aussagen (stationäre Zustände, monotones und exponentielles Fallen der freien Energie) für die reduzierten Modellgleichungen gewonnen werden (vgl. [2, Kapitel 6]).

Nichtgleichgewichtssituation. Aussagen zur Nichtgleichgewichtssituation, d.h. für Systeme (D) mit geänderten Daten, die kein thermodynamisches Gleichgewicht zulassen (z.B. Änderung der Randbedingungen so, dass Dirichletwerte für Teilchenzahldichten auf Teilen des Randes vorgegeben werden, die nicht mit dem thermodynamischen Gleichgewicht verträglich sind), sind bisher nur für das stationäre Problem erhalten worden. In einer Umgebung von Daten, die thermodynamisches Gleichgewicht zulassen, konnte die Existenz einer eindeutigen stationären Lösung nachgewiesen werden. Diese Aussage resultiert als Spezialfall der Untersuchungen zum Energiemodell (E) (vgl. Teilabschnitt 2.3.4) in [4], wenn man annimmt, dass die Temperatur ein konstanter Parameter ist und die Energiebilanzgleichung weggelassen wird. Untersuchungen zum instationären Fall stehen noch aus.

Offene Fragen, Ausblick. Als Konsequenz aus Diskussionen mit Prof. F. Otto im Jahr 2000 wurde die Problematik, die im Projekt behandelten Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme als Gradientenflüsse interpretieren zu wollen, nicht weiter verfolgt. Die Untersuchung von Heterostrukturen mit nichttrivialen Übergangsbedingungen an Grenzflächen im Sinne von Flussparameterbedingungen ist bisher nicht erfolgt, sollte aber weiter verfolgt werden. Nach wie vor offen ist die analytische Behandlung von Elektro-Reaktions-Diffusionsproblemen in Heterostrukturen in höheren Raumdimensionen oder ohne Einschränkung der Reaktionsordnung.

1.3.2 Reduktion von Paardiffusionsmodellen

Das in [2, Kapitel 4] vorgestellte Reduktionsschema wurde auf ein allgemeines Paardiffusionsmodell angewendet. Gestartet wird mit einem Ausgangs-Paardiffusionsmodell (PD), welches ein Spezialfall des Elektro-Reaktions-Diffusionssystems (D) ist. Auf der Grundlage physikalisch motivierter Annahmen über die Größenordnung der kinetischen Koeffizienten wurde dieses Modell stufenweise nach dem angegebenen Projektionsschema reduziert (vgl. [2, Kapitel 5]). Die Hierarchie der vorgestellten Paardiffusionsmodelle enthält mit dem Ausgangs-Paardiffusionsmodell (PD) fünf Modellklassen (siehe auch Abb. 1). Das Modell, das unter der alleinigen Annahme einer schnellen Kinetik der freien Ladungsträger entsteht, wird Basis-Paardiffusionsmodell (PD B) genannt. Nach weiterer Reduktion entstehen ein Fünf-Spezies-Paardiffusionsmodell (PD 5), ein Drei-Spezies-Modell (PD 3) und schließlich ein Ein-Spezies-Modell (PD 1). Abb. 2 gibt einen Überblick über die verschiedenen Modellierungsstufen. Innerhalb der Hierarchie der Modelle

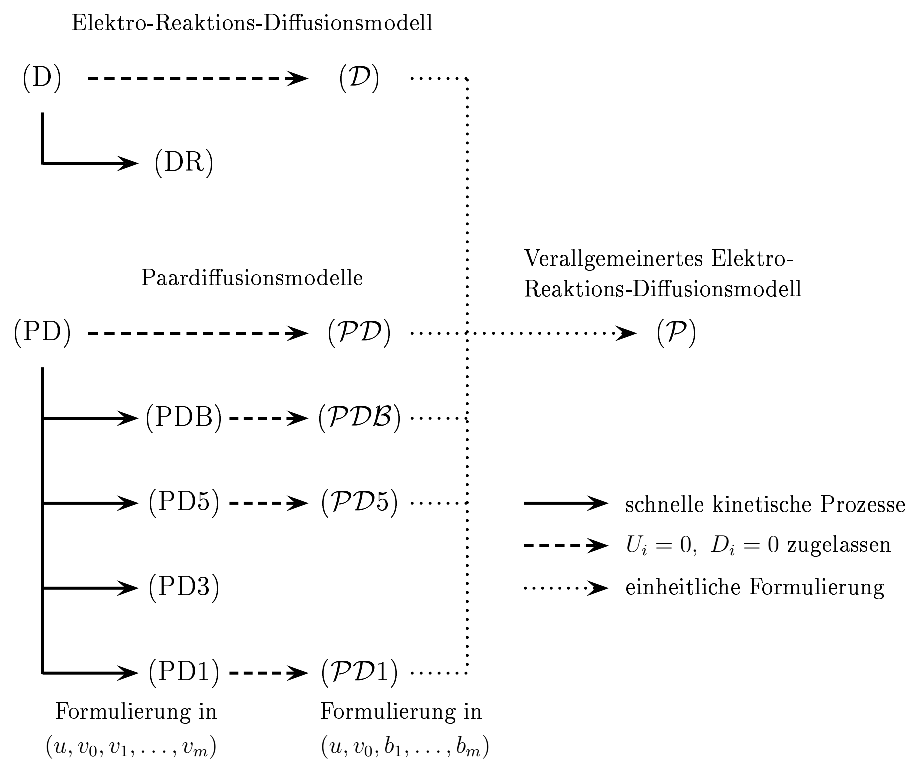

Abbildung 1: Übersicht zu den betrachteten Modellgleichungen

wird deutlich, dass die Zahl der enthaltenen Kontinuitätsgleichungen mit fortschreitender Reduktion der Modelle von (PD) zu (PDB) zu (PD5) zu (PD3) zu (PD1) abnimmt, dafür aber zunehmend nichtlokale Nebenbedingungen auftauchen, die Poissongleichung nichtlinear wird und die kinetischen Koeffizienten nichtlinear (auch nichtlokal) vom Zustand abhängen.

Energetische Abschätzungen. Entsprechend der Überlegungen aus [2, Kapitel 6] lässt sich die konvexe Struktur des Ausgangs-Paardiffusionsmodells (PD) auf die reduzierten Probleme (PDB), (PD5), (PD3) und (PD1) übertragen. Wir erhalten Aussagen zu stationären Zuständen der reduzierten Probleme und das monotone und exponentielle Fallen der freien Energie entlang von Lösungen dieser Aufgaben. Dazu werden die entsprechenden Resultate für das Ausgangsproblem (PD) ausgenutzt. Anschließend erfolgte ein Vergleich prolongierter Lösungen der reduzierten Probleme mit Lösungen von (PD).

Umformulierung der Modellgleichungen. Die Modellgleichungen (D), (PD), (PDB), (PD5) und (PD1) wurden mit dem Ziel umformuliert, einerseits eine Formulierung zu finden, die es gestattet, für

Abbildung 2: Übersicht zur Hierarchie der Paardiffusionsmodelle

einen Großteil der in diesem Projekt betrachteten Probleme Lösbarkeitsaussagen, globale Abschätzungen und Aussagen zum asymptotischen Verhalten der Lösungen einheitlich zu beweisen. Andererseits sollte es diese Formulierung ermöglichen, auf die Forderung strikt positiver Anfangswerte zu verzichten und Spezies zuzulassen, die nicht diffundieren. Analog der Umformulierung des Problems (D) zu ($\mathcal{D}$) erhalten wir Probleme ($\mathcal{PD}$), ($\mathcal{PDB}$), ($\mathcal{PD}5$) und ($\mathcal{PD}1$) (vgl. Abb. 1). Da eine entsprechende Umformulierung des Problems (PD3) aufgrund der starken Kopplung in den Stromtermen nicht dieselben strukturellen Eigenschaften wie die anderen umformulierten Probleme besitzt, wurde das Drei-Spezies-Modell in diesem Zusammenhang nicht weiter behandelt. Das Paardiffusionsmodell ($\mathcal{PD}\,5$) wurde von uns zunächst gesondert in den Arbeiten [9, 10, 14, 16, 17] untersucht, wobei sich die beiden letztgenannten Arbeiten ausschließlich mit der glatten Situation befassen. [14] lieferte die grundlegenden Ideen für die energetischen Abschätzungen, die in [9] aufgegriffen wurden, um globale Abschätzungen zu beweisen. [10] enthält den Lösbarkeitsnachweis.

1.3.3 Ein verallgemeinertes Elektro-Reaktions-Diffusionssystem.

Es wurde festgestellt, dass sich alle Probleme ($\mathcal{D}$), ($\mathcal{PD}$), ($\mathcal{PDB}$), ($\mathcal{PD}5$) und ($\mathcal{PD}1$) als Spezialfälle einer Aufgabe ($\mathcal{P}$) erweisen (siehe Abb. 1), die wir ausführlich funktionalanalytisch untersucht haben. Diese neuen analytischen Resultate stellen ein wesentliches Ergebnis des Projekts dar. Die verallgemeinerten Modellgleichungen von ($\mathcal{P}$) bestehen aus Kontinuitätsgleichungen für mobile und immobile Spezies, einer nichtlinearen Poissongleichung und nichtlokalen Nebenbedingungen. In der Variationsformulierung von ($\mathcal{P}$) (siehe [2, S. 95]) wurden die Poissongleichung und die nichtlokalen Nebenbedingungen zu einer verallgemeinerten Poissongleichung zusammengefasst. Die analytischen Untersuchungen für das Problem ($\mathcal{P}$) sind in [2, Kapitel 8] ausführlich dargelegt.

Energetische Abschätzungen. Zunächst wurden Eigenschaften der verallgemeinerten Poissongleichung nachgewiesen und ein geeignetes Energiefunktional eingeführt. Danach wird die Beschränktheit dieses Energiefunktionals auf Lösungen gezeigt. Ferner werden Invarianten und stationäre Zustände des Systems ($\mathcal{P}$) bestimmt. Auch für den Fall, dass immobile Spezies existieren, gelingt es, eine Abschätzung der freien Energie durch die Dissipationsrate herzuleiten, mit deren Hilfe das exponentielle Fallen der freien Energie auf ihren Gleichgewichtswert entlang von Lösungen von ($\mathcal{P}$) nachgewiesen werden kann. Hieraus ergeben sich einige Schlussfolgerungen, die für den Nachweis globaler Schranken der Lösungen von ($\mathcal{P}$) von essentieller Bedeutung sind. Globale obere Schranken für die Teilchenzahldichten wurden nach zwei Anlaufschritten über Moser-Iteration erhalten.

Globale Lösbarkeit. Der Lösbarkeitsnachweis der Aufgabe ($\mathcal{P}$) erfolgt durch eine zweistufige Regularisierung von ($\mathcal{P}$) durch Probleme ($\mathcal{P}_N$) und ($\mathcal{P}_M$). Für das nur in den Reaktionstermen der Kontinuitätsgleichungen regularisierte Problem ($\mathcal{P}_N$) werden A-priori-Abschätzungen hergeleitet, die vom Regularisierungslevel N unabhängig sind. Anschließend wird ($\mathcal{P}_N$) in den Drift-Diffusionstermen weiter regularisiert zu einem Problem ($\mathcal{P}_M$). Die Lösbarkeit dieser Aufgabe ($\mathcal{P}_M$) wurde mit einer zweistufigen Fixpunktiteration (Banachscher Fixpunktsatz für Gleichungen der immobilen Spezies, Schauderscher Fixpunktsatz für Gleichungen der mobilen Spezies) bewiesen. Anschließend erfolgten Abschätzungen für die Lösungen von ($\mathcal{P}_M$), die nicht vom Regularisierungslevel M abhängen. Mit diesem Wissen wird die Existenz von Lösungen der Probleme ($\mathcal{P}_N$) und ($\mathcal{P}$) nachgewiesen.

Untere Schranken. Unter der Annahme, dass die Anfangswerte U strikt positiv sind, wurden globale untere Abschätzungen der Lösungen von ($\mathcal{P}$) erzielt. Außerdem wurden weitere Aussagen zur Asymptotik der Lösungen der Aufgabe ($\mathcal{P}$) verifiziert.

Schlussfolgerungen. Die für das Problem ($\mathcal{P}$) gewonnenen Resultate wurden auf die Modellprobleme angewendet. Damit wurde nachgewiesen, dass die Aufgaben ($\mathcal{D}$), ($\mathcal{PD}$), ($\mathcal{PDB}$), ($\mathcal{PD}5$) und ($\mathcal{PD}1$) unter geeigneten Voraussetzungen an die Daten lösbar sind, ihre Lösungen global beschränkt sind und sich exponentiell ihrem (in der Kompatibilitätsklasse) eindeutigen Gleichgewicht nähern (siehe [2, Kapitel 9]). Ein Vergleich der Paardiffusionsmodelle auf verschiedenen Niveaus der Modellhierarchie wurde durchgeführt. Außerdem wurde die Problemformulierung in Dichten und Potentialen mit der Formulierung in Dichten und Aktivitäten verglichen. Sind alle Anfangswerte nach unten durch positive Konstanten beschränkt und sind alle betrachteten Spezies mobil, so kann aus der Lösbarkeit der Aufgaben ($\mathcal{D}$), ($\mathcal{PD}$), ($\mathcal{PDB}$), ($\mathcal{PD}5$) bzw. ($\mathcal{PD}1$) auch die Lösbarkeit der Aufgaben (D), (PD), (PDB), (PD5) bzw. (PD1) gefolgert werden. Analog lassen sich Aussagen zu qualitativen Eigenschaften der Lösungen und ihrer Asymptotik übertragen.

Offene Fragen, Ausblick. Für das Problem (PD3) wurden bisher nur die im Teilabschnitt 2.3.2 geschilderten energetischen Abschätzungen und Aussagen zum stationären Problem erhalten. Aufgrund der starken Kopplung der Gleichungen in (PD3) ist die bisher verwendete Technik der Moseriteration zum Erhalt von Schranken für Lösungen nicht anwendbar. Deshalb fehlen für das instationäre Problem (PD3) derzeit noch Existenzaussagen und Aussagen zur globalen Beschränktheit der Lösung. Hierzu müssen andere Beweistechniken gefunden werden.

1.3.4 Energiemodelle

Mathematische Modellierung, konvexe Struktur. Ausgehend von einem allgemein akzeptierten Ausdruck für die freie Energie wurden in [1, 13] Energiemodelle für Halbleiterheterostrukturen deduktiv hergeleitet. Die entstehenden Systeme von Evolutionsgleichungen besitzen eine Lyapunov-Funktion. Dabei wird benutzt, dass die entsprechende Entropiebilanzgleichung eine nichtnegative Entropieproduktionsrate besitzt.

Stationäres Multispezies-Energiemodell. Im Projekt wurden Untersuchungen für stationäre Energiemodelle durchgeführt. Gestartet wurde von Daten, die thermodynamisches Gleichgewicht zulassen. Anschließend wurde für kleine Störungen der Daten die Existenz und Einzigkeit stationärer Lösungen nachgewiesen.

Das stationäre Energiemodell lautet

$$\left.\begin{aligned} \nabla\cdot j_i &= \sum_{(\alpha,\beta)\in\mathcal{R}^\Omega} (\beta_i-\alpha_i)R^\Omega_{\alpha\beta}, \quad i=1,\dots,m,\\ \nabla\cdot j_e &= 0,\\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla v_0) &= f+\sum_{i=1}^m q_i u_i \end{aligned}\right\}\quad \text{in } \Omega\subset\mathbb{R}^2, \tag{1.1}$$

weil die rechte Seite der Energiebilanzgleichung in (E) verschwindet (da die Reaktionen ladungserhaltend sind). Hinzu kommen geeignete Randbedingungen. Für die Stromdichten machen wir den Ansatz (1.2). Es zeigt sich, dass zwischen den Strömen $(j_1,\dots,j_m,j_e)$ und den verallgemeinerten Triebkräften $(\nabla[\zeta_1/T],\dots,\nabla[\zeta_m/T],-\nabla[1/T])$ die Onsager-Bedingungen erfüllt sind. Mit den neuen Variablen $\lambda=(\lambda_1,\dots,\lambda_{m+2})=(\zeta_1/T,\dots,\zeta_m/T,-1/T,v_0)$ und geeigneten Funktionen H_i schreiben sich die Zustandsgleichungen in der Form

$$u_i(x)=H_i(x,\lambda),\quad i=1,\dots,m.$$

Auch die Reaktionsraten $R^\Omega_{\alpha\beta}$ werden in der Variablen λ ausgedrückt,

$$R^\Omega_{\alpha\beta}(x,\lambda)=r^\Omega_{\alpha\beta}(x,H_1(\lambda),\dots,H_m(\lambda),-1/\lambda_{m+1})\left(\mathrm{e}^{\sum_{i=1}^m\alpha_i\lambda_i}-\mathrm{e}^{\sum_{i=1}^m\beta_i\lambda_i}\right),\quad (\alpha,\beta)\in\mathcal{R}^\Omega.$$

Damit wird das stationäre Energiemodell ein stark gekoppeltes nichtlineares elliptisches System

$$
-\nabla\cdot\begin{pmatrix} a_{11}(\lambda) & \cdots & a_{1,m+1}(\lambda) & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0 \\ a_{m,1}(\lambda) & \cdots & a_{m,m+1}(\lambda) & 0 \\ a_{m+1,1}(\lambda) & \cdots & a_{m+1,m+1}(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \nabla\lambda_1 \\ \vdots \\ \nabla\lambda_m \\ \nabla\lambda_{m+1} \\ \nabla\lambda_{m+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{(\alpha,\beta)\in\mathcal{R}^\Omega} (\beta_1-\alpha_1)R^\Omega_{\alpha\beta}(\lambda) \\ \vdots \\ \sum\limits_{(\alpha,\beta)\in\mathcal{R}^\Omega} (\beta_m-\alpha_m)R^\Omega_{\alpha\beta}(\lambda) \\ 0 \\ f+\sum_{k=1}^m q_k H_k(\lambda) \end{pmatrix}. \tag{1.2}
$$

Das zusätzliche Argument x in den Koeffizientenfunktionen wurde hier weggelassen. Wenn die Dirichlet- bzw. Neumannrandstücken Γ_D bzw. Γ_N für alle Größen dieselben sind (und keine Randreaktionen betrachtet werden), lassen sich die Randbedingungen in der Variablen λ formulieren

$$
\begin{array}{c} \lambda_i = \lambda_i^D, \quad i=1,\dots,m+2, \text{ auf } \Gamma_D, \\ \nu\cdot\sum_{j=1}^{m+1} a_{ij}(\lambda)\nabla\lambda_j = g_i, \quad i=1,\dots,m+1, \quad \nu\cdot(\varepsilon\nabla\lambda_{m+2}) = g_{m+2} \text{ auf } \Gamma_N. \end{array} \tag{1.3}
$$

Wir setzen voraus, dass $\Omega\cup\Gamma_N$ regulär im Sinne von [11] ist und dass die Randwerte λ_i^D, $i=1,\dots,m+2$, Spuren von $W^{1,p}(\Omega)$-Funktionen sind, $p>2$. Gesucht wird nach Lösungen von (1.2), (1.3) in der Form $\lambda=\Lambda+\lambda^D$. Unter schwachen Voraussetzungen an die Koeffizientenfunktionen $a_{ij}(x,\lambda)$ und $\varepsilon(x)$ (die Heterostrukturen zulassen) wurden $W^{1,q}$–Formulierungen ($q\in(2,p]$),

$$
F(\Lambda,\lambda^D,f,g)=0, \quad \Lambda\in W_0^{1,q}(\Omega\cup\Gamma_N)^{m+2}
$$

für das Gleichungssystem gefunden.

Wenn die Randwerte λ_i^{D*}, $i=1,\dots,m+1$, Konstanten mit $\lambda_{m+1}^{D*}<0$ sind und einem simultanen Gleichgewicht aller Reaktionen entsprechen, d.h.

$$
\sum_{i=1}^m \alpha_i\lambda_i^{D*} = \sum_{i=1}^m \beta_i\lambda_i^{D*} \quad \forall(\alpha,\beta)\in\mathcal{R},
$$

und wenn λ_{m+2}^{D*}, f^*, $g^*=(0,\dots,0,g^*_{n+2})$ beliebig vorgegeben sind, dann existiert eine eindeutige Lösung Λ^* von $F(\Lambda^*,\lambda^{D*},f^*,g^*)=0$. $\lambda^*=\Lambda^*+\lambda^{D*}$ ist ein thermodynamisches Gleichgewicht von (1.2), (1.3). Der Operator F ist stetig differenzierbar und seine Linearisierung im Gleichgewicht $\frac{\partial F}{\partial\Lambda}(\Lambda^*,\lambda^{D*},f^*,g^*)$ ist ein Fredholm-Operator vom Index Null. Diese Eigenschaften folgen aus Resultaten in [18] und Regularitätsresultaten aus [11] für Systeme elliptischer Gleichungen mit gemischten Randbedingungen. Ferner ist diese Linearisierung injektiv und der Satz über implizite Funktionen liefert für λ^D nahe λ^{D*}, f nahe f^* und g nahe g^* die Existenz einer eindeutigen Lösung Λ nahe Λ^* für die Gleichung $F(\Lambda,\lambda^D,f,g)=0$. Somit existiert in einer Umgebung von λ^* eine lokal eindeutige, Hölder stetige Lösung $\lambda=\Lambda+\lambda^D$ von (1.2), (1.3).

Die Beweise für die lokale Existenz- und Einzigkeitsaussage für das stationäre Energiemodell (1.2), (1.3) sind im Arbeitspapier [4] zu finden. Erwähnenswert ist, dass Kreuzterme bezüglich aller Spezies und der Temperatur im Modell enthalten sind.

Stationäres Energiemodell mit realistischen Definitionsbereichen. Zum Abschluss des Projekts wurde exemplarisch ein stationäres Energiemodell aus der Bauelemente-Modellierung, das als Spezies nur Elektronen und Löcher enthält, untersucht. Dabei wurde die eher der Realität entsprechende Annahme gemacht, dass die Kontinuitätsgleichungen nur auf einem Teilgebiet $\Omega_0 \subset \Omega$ des Definitionsgebiets Ω der Energiebilanzgleichung und der Poissongleichung zu betrachten sind (vgl. Abb. 3). Hier entspricht Ω_0 dem Gebiet mit Halbleitermaterial, Ω enthält zusätzlich die Bereiche Ω_1 mit Isolatormaterial. Metalle wurden als Dirichlet-Kontakte am Rand modelliert. Für das resultierende stationäre Energiemodell wurden ebenfalls lokale Existenz- und Einzigkeitsaussagen erhalten. Auch hierbei wurde der Satz über implizite Funktionen benutzt. Dazu musste aber das $W^{1,p}$-Regularitätsresultat aus [11] für Systeme elliptischer Gleichungen für den Fall erweitert werden, dass die zugrundeliegenden Gebiete für die einzelnen Gleichungen unterschiedlich sein können. Diese Ergebnisse wurden im Arbeitspapier [3] formuliert.

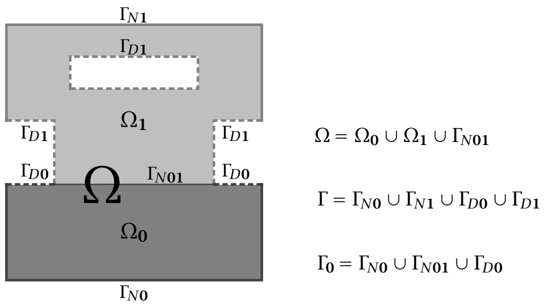

Abbildung 3: Spezielle Halbleiterstruktur

Offene Fragen, Ausblick. Wünschenswert sind auch entsprechende Resultate für stationäre Energiemodelle in höheren Raumdimensionen. Die besonderen Schwierigkeiten bei der analytischen Untersuchung von Energiemodellen liegen in der starken Kopplung der Gleichungen (im Hauptteil) und einer Temperaturabhängigkeit der kinetischen Koeffizienten, die auch entarten kann. Deshalb sollten auch physikalisch sinnvoll vereinfachte Modelle, die aber die wesentlichen Effekte beinhalten, betrachtet werden. Das instationäre Problem wurde nicht mehr in Angriff genommen, muss aber Gegenstand weiterer Untersuchungen sein.

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 auf den verschiedenen Modellierungsstufen hinsichtlich thermodynamischer Korrektheit der Probleme, stationärer Lösungen, der Existenz (eindeutiger) Lösungen der stationären und transienten Aufgaben, sowie der Beschränktheitsaussagen lieferte dazu wertvolle Beiträge.

Im Projekt wurden Grenzfälle der Modellgleichungen für große und kleine Parameter diskutiert. 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. Zu einigen aus Sicht der Anwendungen relevanten Modellen konnten wichtige Resultate zu qualitativen Eigenschaften erbracht werden.

In Bezug auf die Modellierung und die Behandlung stationärer Energiemodelle sind wichtige mathematische Vorarbeiten für ein beim BMBF beantragtes Projekt mit dem Chiphersteller Communicant - Semiconductor Technologies AG und dem Institut für Innovative Mikroelektronik (IHP GmbH), Frankfurt (Oder) zum Thema „Modellierung und Simulation thermischer Effekte in Hochgeschwindigkeits-Heterobipolartransistoren“ geleistet worden.

1.5 Arbeitsgruppe und Kooperation

Die Bearbeitung des Projekts erfolgte durch die Projektmitarbeiterin Dr. A. Glitzky in Zusammenarbeit mit dem Antragsteller Dr. R. Hünlich. An der Formulierung von Energiemodellen für Halbleiterbauelemente waren Prof. H. Gajewski und Dr. G. Albinus (beide WIAS), an ihrer numerischen Umsetzung im Programmsystem WIAS-TeSCA Prof. H. Gajewski beteiligt. Zu Fragen der Regularität elliptischer und parabolischer Gleichungen in Heterostrukturen und zu Techniken für a priori–Abschätzungen wurden Prof. Dr. K. Gröger und Dr. L. Recke (Humboldt–Universität zu Berlin) konsultiert. Ferner gab es Zusammenarbeiten mit Dr. B. Heinemann (Institut für Innovative Mikroelektronik, IHP GmbH, Frankfurt (Oder)) zu Fragen der Halbleitermodellierung und mit Dr. W. Röpke (Motorola GmbH) zu Fragen der Technologiesimulation und zu Energiemodellen. Mit Dr. W. Merz (Universität München bzw. Erlangen-Nürnberg) wurde hinsichtlich der analytischen Behandlung von Diffusionsmodellen in homogenen Strukturen kooperiert.

1.6 Qualifikation des wissenschaftlichen Nachwuchses im Zusammenhang mit dem Projekt

Die Projektmitarbeiterin Dr. Annegret Glitzky hat in der Projektlaufzeit große Teile ihrer Habilitationsschrift verfasst und sich im Dezember 2001 an der Humboldt-Universität zu Berlin habilitiert.

2 Zusammenfassung

Behandelte Aufgabenstellungen. In diesem Projekt wurden Gleichungen analytisch untersucht, die die Umverteilung elektrisch geladener Teilchen in Halbleiter–Isolatorstrukturen modellieren. Die zu Grunde liegenden Transport- und Wechselwirkungsprozesse umfassen Diffusions- und Wärmeleitungsvorgänge, Volumen- und Oberflächenreaktionen und elektrische Wechselwirkungen. Spezifische Besonderheiten wie Heterostrukturen, nichtglatte Ränder und gemischte Randbedingungen waren zu berücksichtigen.

Ein erster Themenkomplex war die Behandlung eines allgemeinen Elektro–Reaktions–Diffusionsmodells und seine Reduktion für den Fall, dass einige kinetische Mechanismen schnell sind. Insbesondere wurden Paardiffusionsmodelle hierarchisch abgeleitet und in wichtigen Zwischenstufen analytisch untersucht. Ein weiterer Schwerpunkt bestand in der Behandlung eines thermodynamischen Energiemodells, bei dem die Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen stark mit einer Bilanzgleichung für die innere Energie gekoppelt sind. Hier wurde hauptsächlich der stationäre Fall betrachtet.

Wesentliche Hilfsmittel für die analytischen Untersuchungen in diesem Projekt waren Methoden der konvexen Analysis, a priori–Abschätzungen und Regularitätsaussagen für lineare elliptische und parabolische Gleichungen in nichtglatten Situationen sowie der Satz über implizite Funktionen.

Ergebnisse. Alle analytischen Resultate beziehen sich auf den räumlich zweidimensionalen Fall.

A) Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme:
Ausgegangen wurde von einem allgemeinen Elektro-Reaktions-Diffusionssystem (D), das Kontinuitätsgleichungen für alle beteiligten Spezies und eine Poissongleichung für das elektrostatische Potential enthält. Dieses Problem konnte unter der Annahme einer schnellen Kinetik von Teilprozessen (schnelle Diffusion einiger Spezies, ausgewählte schnelle Reaktionen) reduziert werden. Die konvexe Struktur des Ausgangsproblems (D) überträgt sich auf die reduzierte Aufgabe, womit energetische Abschätzungen für das Problem (D) entsprechende Aussagen für das reduzierte Problem nach sich ziehen. Dieses Reduktionsschema wurde zur schrittweisen Reduktion von Paardiffusionsmodellen, die für die Technologiemodellierung relevant sind, eingesetzt. Es entstand eine strenge Hierarchie von Paardiffusionsmodellen. Mit fortschreitendem Reduktionsniveau enthalten diese Modelle zunehmend nichtlokale Nebenbedingungen und die Abhängigkeit der kinetischen Koeffizienten vom Zustand wird immer komplexer.

Sowohl für das Problem (D) als auch für die verschiedenen Paardiffusionsmodelle wurden folgende spezifische Erfordernisse berücksichtigt: Kinetische Koeffizienten hängen vom Zustand ab, Anfangswerte können auf Teilgebieten Null sein, einige der betrachteten Spezies unterliegen keinen Drift-Diffusionsprozessen (deren Kontinuitätsgleichungen sind dann gewöhnliche Differentialgleichungen). Eine Umformulierung der verschiedenen Modellgleichungen auf eine einheitliche Form ($\mathcal{P}$) ermöglichte es, diese speziellen Anforderungen einzubeziehen, aber auch mehrere dieser Modellklassen gleichzeitig funktionalanalytisch untersuchen zu können. Es wurden Aussagen zur Existenz, zur globalen Beschränktheit und zur Asymptotik von Lösungen von ($\mathcal{P}$) bewiesen.

B) Energiemodelle:
Im Projekt wurden stationäre Energiemodelle (E) betrachtet. Das aus Kontinuitätsgleichungen für alle Spezies, einer Poissongleichung für das elektrostatische Potential und einer Energiebilanzgleichung bestehende nichtlineare elliptische Differentialgleichungssystem ist stark gekoppelt. Für Randbedingungen, die mit thermodynamischem Gleichgewicht verträglich sind, existiert eine Gleichgewichtslösung. In der Nähe derartiger thermodynamischer Gleichgewichte konnte die Existenz und Einzigkeit von Lösungen des stationären Energiemodells (E) nachgewiesen werden. Schließlich wurde dieses Resultat verallgemeinert auf den Fall, dass die Poissongleichung und die Energiebilanzgleichung auf einem größeren Gebiet als die stationären Kontinuitätsgleichungen zu formulieren sind. Dazu mussten neue Regularitätsresultate für derartige Systeme bewiesen werden.

Literaturverzeichnis

1. G. Albinus, H. Gajewski, and R. Hünlich, *Thermodynamic design of energy models of semiconductor devices*, Nonlinearity **15** (2002), 367–383.

2. A. Glitzky, *Elektro-Reaktions-Diffusionssysteme mit nichtglatten Daten*, Habilitationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin, 2001, Logos-Verlag, Berlin, 2002.

3. A. Glitzky and R. Hünlich, *Stationary solutions of a two-dimensional energy model for semiconductor devices*, in Vorbereitung.

4. ______, *Stationary solutions of two-dimensional heterogeneous energy models with multiple species*, in Vorbereitung.

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

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

7. ______, *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.

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

9. ______, *Global properties of pair diffusion models*, Adv. Math. Sci. Appl. **11** (2001), 293–321.

10. A. Glitzky and R. Hünlich, *Global existence result for pair diffusion models*, Preprint 784, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 2002.

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

12. R. Haase, *Thermodynamik der irreversiblen Prozesse*, Fortschritte der physikalischen Chemie, vol. 8, Steinkopff Verlag, Darmstadt, 1963.

13. R. Hünlich, G. Albinus, H. Gajewski, A. Glitzky, W. Röpke, and J. Knopke, *Modelling and simulation of power devices for high-voltage integrated circuits*, Preprint 578, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 2000.

14. 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 Research Notes in Mathematics, vol. 406, Boca Raton, 2000, pp. 158–174.

15. D. Kondepudi and I. Prigogine, *Modern thermodynamics*, John Wiley & Sons, Chichester, 1998.

16. W. Merz and A. Glitzky, *Single dopant diffusion in semiconductor technology*, Preprint SFB-438-0011, Technische Universität München, Universität Augsburg, 2000.

17. W. Merz, A. Glitzky, R. Hünlich, and K. Pulverer, *Strong solutions for pair diffusion models in homogeneous semiconductors*, Nonlinear Anal.: Real World Applications **2** (2001), 541–567.

18. L. Recke, *Applications of the Implicit Function Theorem to quasi-linear elliptic boundary value problems with non-smooth data*, Comm. Partial Differential Equations **20** (1995), 1457–1479.