

# Von der (semi)klassischen zur quantisierten Boltzmann-Gleichung: Variationsprinzipien, Dichtematrizen und zellulären Automaten

WOLFGANG EISENBERG\*

## I. Einleitung

Durch meine studentische Entscheidung für die Leipziger Theoretische Physik, genauer für die Abteilung „Statistik irreversibler Prozesse“, lernte ich 1968 in einem Betreuergespräch den heutigen Jubilar, Professor Dr. rer. nat. habil. GÜNTER VOJTA, kennen. Wie sich jetzt, im Jahre 2008, nach 40 Jahren, rückblickend feststellen lässt, hatte ich mit seiner vorgeschlagenen Forschungsthematik „Lösungen der BOLTZMANN-Gleichung“ ein zentrales Thema meiner späteren wissenschaftlichen Laufbahn erstmals kennengelernt. Es war, wie sich in den vier Jahrzehnten zeigte, vielfältig verallgemeinerbar und zudem praktikabel, sowohl in der physikalischen Strukturierung als auch in der Lösungsmethodik. Obwohl mein folgender wissenschaftlicher Werdegang universitäre und außeruniversitäre Stationen beinhaltete, erweiterte und konkretisierte sich für mich genau die physikalische Forschungsthematik „Verallgemeinerte BOLTZMANN-Gleichungen und ihre Lösungen“, verknüpft mit den Lösungsmethoden der Variationsprinzipien, der Dichtematrizen und der zellulären Automaten (ZA). Die aktuellen Anwendungen der ZA-Methoden in den komplexen Systemen, z. B. auch Biosystemen, in der Zuverlässigkeitsanalyse und in der Energetik sind darin eingeschlossen. Über diese nachhaltig meine physikalische Entwicklung prägende Forschungsthematik soll hier in gebotener Kürze berichtet werden.

Mein Arbeitsthema wurde zu Beginn meiner Laufbahn, 1968, auf die Behandlung der klassischen BOLTZMANN-Gleichung fokussiert. Mit Hilfe des Variationsprinzips von KOHLER sollte numerisch die effektive Relaxationszeit der Teilchen für verschiedene und synchron ablaufende Streuprozesse bestimmt werden. In meinem Forschungsstudium in der Physik wurde die Forschungsthematik entsprechend erweitert. Mein erster Vortrag im Leipziger Theorieseminar zur Thematik

---

\* Dr. rer. nat. Wolfgang Eisenberg, Arnold-Sommerfeld-Gesellschaft e. V., Thaeerstr. 34, 04129 Leipzig

„Möglichkeiten der Pathintegralmethode“ diente der methodischen Erweiterung einer Behandlung der komplexen BOLTZMANN-Gleichung.

Zuvor hatte ich mich gegen ein Forschungsstudium in Berlin zum Thema „Trendbrüche“ entschieden. Das diese Entscheidung richtig war, bestätigte der mir gut bekannte BOLTZMANN-Verehrer und langjährige, vom Jubilar hochgeschätzte Mitarbeiter Doz. Dr. rer. nat. habil. WOLFGANG STILLER in seiner tiefeschürfenden und treffsicheren Biografie *Ludwig Boltzmann. Altmeister der klassischen Physik. Wegbereiter der Quantenphysik und Evolutionstheorie* [1] – nicht nur mit den informativen Abbildungen zum Anwendungsspektrum der BOLTZMANN-Gleichung (Abb. 1), die auch in der Leipziger Physikgeschichte keine unbedeutende Rolle spielte.

Für die Skizzierung der genannten primären Forschungsthematik nutze hier ich die kompakte Darstellung im Stil des sehr progressiv bewerteten *Teubner-Taschenbuches der statistischen Physik* (G. VOJTA, M. VOJTA [2]).



Abb. 1 – Fortsetzung auf nächster Seite



Abb. 1: Heutige Anwendungsgebiete der BOLTZMANN-Gleichung (aus [1], Bild 47, S. 181)

## II. Die semiklassische BOLTZMANN-Gleichung in der Halbleitertransporttheorie

### II.1 Die BOLTZMANN-Gleichung – die kinetische Grundgleichung

Die Dynamik der Ladungsträger in Halbleitern wird oft praktikabel im Rahmen einer semiklassischen Transporttheorie beschrieben. Ausgangspunkt ist die o. g. BOLTZMANN-Gleichung, die ursprünglich von LUDWIG BOLTZMANN (1846–1906) für die kinetische Beschreibung verdünnter Gase entwickelt wurde. Es hat sich im Laufe der Zeit herausgestellt, dass diese fundamentale Bilanzgleichung in verallgemeinerter Form in zahlreichen Bereichen der Physik und Chemie zur Beschrei-

bung unterschiedlichster Transportphänomene – im Rahmen der problemspezifischen Gültigkeitsgrenzen – erfolgreich angewendet werden kann.

In einem idealen Halbleiterkristall wird in der üblichen effektiven Einteilchen-Näherung der Wechselwirkungsanteil mit den Gitteratomen dem Elektron durch die Einführung einer effektiven Masse  $m_{\text{eff}}$  zugeschrieben, die sich i. Allg. von der Masse  $m_{\text{el}}$  des freien Elektrons unterscheidet. Diese Quasiteilchen werden durch bestimmte Eigenschaften, wie z. B. Anregungsenergie  $\hbar\omega/2\pi$  und Quasiimpuls  $\hbar\mathbf{k}/2\pi$  (PLANCK'sches Wirkungsquantum  $\hbar$ ) charakterisiert. Die verbleibende Wechselwirkung wird als schwache Kopplung an das Quasiteilchen in einer Störungstheorie 1. Ordnung beschrieben. Der Elektronenzustand in einem perfekten Halbleiterkristall ist ein BLOCH-Zustand  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{k}$  ist der Wellenzahlvektor. Die periodische Funktion  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  zum Bandindex  $n$  berücksichtigt dabei das periodische Kristallpotential.

Damit die Ladungsträgedynamik noch durch eine semiklassische Transporttheorie beschrieben werden kann, müssen bestimmte Bedingungen (Breite  $\Delta\mathbf{k}$ , geringe Variation von  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  bezüglich der Ortsvariablen  $\mathbf{r}$ , hinreichend große freie Flugzeiten) bezüglich des Wellenpaketes aus BLOCH-Zuständen erfüllt sein. Nicht berücksichtigt werden dabei aber die Übergänge zwischen zwei benachbarten Bändern durch das quantenmechanische Tunneln. Innerhalb dieser Gültigkeitsgrenzen wird die Dynamik der Ladungsträger in Halbleitern durch die semiklassische BOLTZMANN-Gleichung gut repräsentiert. In dieser Gleichung wird formal die zeitliche Änderung der Einteilchenverteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  mit einem kinetischen Anteil (Diffusionsterm – Ortsraum, und Driftterm – Impulsraum) und einem Stoßterm verknüpft, wobei  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{r}$  den Schwerpunkt des Wellenpaketes im zugeordneten Phasenraum kennzeichnen.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}}$$

Der Stoßterm

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}} = \frac{V_g}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1 \{ \omega(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) f(\mathbf{k}_1)(1-f(\mathbf{k})) - \omega(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) f(\mathbf{k})(1-f(\mathbf{k}_1)) \}$$

inhalte alle quantenmechanischen Einteilchen-Streuprozesse, darin bezeichnen  $V_g$  das Kristallvolumen und  $\omega(\mathbf{k}_1, \mathbf{k})$  die Übergangsraten. Die Übergangsraten werden mit der Störungsrechnung 1. Ordnung und FERMIS Goldener Regel bestimmt. Die Faktoren  $(1-f(\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{k}_1))$  berücksichtigen das PAULI-Prinzip. Bedeutsam werden diese Faktoren aber erst für hochdotierte, entartete Halbleiter und tiefe Temperaturen.

## II.2 Lösungsverfahren für die BOLTZMANN-Gleichung

Die BOLTZMANN-Gleichung hat sich in den genannten Gültigkeitsgrenzen als wichtigstes Hilfsmittel zur Beschreibung des Transports in Halbleitern mit großer Genauigkeit erwiesen. Dabei spielte die Suche nach den geeigneten Lösungsansätzen für die BOLTZMANN-Gleichung, die mathematisch eine nichtlineare Integrodifferentialgleichung ist, eine gewichtige Rolle. Zur Lösung dieser komplizierten Gleichung wurden verschiedene, auch zweckgebundene Näherungsmethoden entwickelt und angewandt – mit unterschiedlichem Erfolg.

Im (thermodynamischen) Gleichgewicht ist die Verteilungsfunktion bei einer Ankopplung an das Wärmebad die von ARNOLD SOMMERFELD und WOLFGANG

PAULI schon für Metalle benutzte FERMI-Verteilung:  $f_0(E_n) = Ce^{\left(\frac{E_n - E_F}{kT} + 1\right)^{-1}}$  im BLOCH'schen Bändermodell des Halbleiters (BOLTZMANN-Konstante  $k$ , Gittertemperatur  $T$ , Bandenergie  $E_n$ , FERMI-Energie  $E_F$ ). Im klassischen Grenzfall geht diese Verteilung in die normierte MAXWELL-BOLTZMANN'sche Verteilung

$f_0(E_n) = Ce^{-\frac{E_n}{kT}}$  über. Diese beiden Resultate sind unabhängig von den Stoßprozessen, da im Gleichgewicht der Stoßterm eine Null-Bilanz hat.

In der Relaxationszeitznäherung wird der komplexe Stoßterm approximiert durch einen einfachen Ausdruck:  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} = -\frac{f - f_0}{\tau}$ , wobei  $\tau$  eine effektive Relaxationszeit ist, die aus den Übergangsraten der einzelnen Streuprozesse berechnet wird. Dabei wird weiterhin angenommen, dass die Stöße unabhängig von der Verteilungsfunktion sind. Die Ladungsträger relaxieren dabei nach Abschaltung der äußeren Störung:  $f(\tau) = f(0) \exp(-t/\tau)$ .

Im Rahmen dieses Modells wird für den inhomogenen Transport in Halbleiterbauelementen in 1. Näherung eine Momentenentwicklung der BOLTZMANN-Gleichung benutzt. Zusätzlich wird der Stoßterm in dieser Momentenentwicklung durch den Relaxationszeitansatz approximiert, wobei unterschiedliche Relaxationszeiten für die jeweiligen Momente verwendet werden.

Mit den funktional bestimmten Relaxationszeiten  $\tau(i)$  kann unter geeigneten idealisierten Bedingungen eine effektive Relaxationszeit  $\tau$  bestimmt werden:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}.$$

Im Falle der Störstellenstreuung von Ladungsträgern in Halbleitern (flache Störstellen) sollte diese Form der Beschreibung ausreichend sein. Deshalb ist es auch beruhigend und rechtfertigt im Nachhinein ihre Anwendbarkeit, wenn im einfachsten Grenzfall das Ergebnis der BOLTZMANN-Gleichungs-Behandlung im KUBO-Formalismus bestätigt werden kann. Allerdings ist der KUBO-Formalismus quantenmechanisch besser begründet [3].

### III. (Verallgemeinerte) Dichtematrizen und verallgemeinerte BLOCH-Gleichungen

Durch den Weggang von Prof. G. VOJTA von Leipzig nach Dresden änderte sich die Situation in meiner Forschung noch einmal entscheidend. Um das Forschungsstudium erfolgreich abzuschließen zu können, musste die Thematik reformuliert und für das neu ausgewählte Arbeitsgebiet, die Theoretische Halbleiterphysik, konkretisiert werden. Das endgültige Dissertationsthema lautete daher auch: „Theoretische Untersuchungen zur Streuung der Ladungsträger an ionisierten Störstellen in Halbleitern“, die 1972 in Leipzig erfolgreich verteidigt wurde.

Um die Berechnung der Kenndaten von GaAs-Bauelementen, die beliebig entartet und kompensiert sein können, bei tiefen Temperaturen abschätzen und berechnen zu können, wurden Methoden zur Beschreibung des Ladungsträgertransports in Halbleitern benutzt, die geeignete Quantenkorrekturen enthielten. Die effektive Einteilchen-Näherung wurde in der Dissertation von mir mit der von Dozent Dr. rer. nat. KONRAD UNGER, meinem neuen Betreuer, in seiner Habilitation benutzten und weiterentwickelten Methode der (verallgemeinerten) Dichtematrizen aus (verallgemeinerten) BLOCH-Gleichungen abgeleitet [4]. Mit der Methode des effektiven Bandrandes konnten dabei auch die bei sehr hohen Dotierungen der Halbleiter auftretenden Zustandsdichteschwänze beschrieben werden. Um einen vergleichsweise einfachen Überblick über die Korrekturen zu erhalten, wurde zusätzlich eine Filterfunktion eingeführt.

Die analytischen Ergebnisse, insbesondere die erhaltenen Beweglichkeitsformeln, wurden in meiner Dissertation zur Analyse der Strom-Spannungs-Kennlinie einer p-i-n-Diode aus GaAs verwendet, um die Bedingungen für das mögliche Auftreten eines negativen differentiellen Widerstandes herauszufinden. Der angenommene Mechanismus einer Abhängigkeit der Abschirmlänge des Potentials der ionisierten Störstellen von der injizierten Ladungsträgerkonzentration konnte für GaAs die o. g. Bedingungen nicht erfüllen (zu große effektive Masse). Für InSb mit der deutlich kleineren effektiven Masse wären die Bedingungen allerdings zu erfüllen.

Auch hier sei die Forschungsthematik skizziert durch ein Autorreferat einer gemeinsamen Publikation (W. EISENBERG, K. UNGER, 1974 [5]): *Die Dielektrizitätsfunktion für ein freies Elektronengas mit beliebigem Entartungsgrad*. Demnach ist die kanonische Dichtematrix  $C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)$  wie folgt definiert ( $\beta = 1/kT$ ):

$$C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r}') \psi_i^*(\mathbf{r}) e^{-\beta E_i}.$$

Hierbei genügen die HARTREE-Einelektronenwellenfunktionen der Einteilchen-SCHRÖDINGER-Gleichung mit dem selbstkonsistentem Einteilchen-Potential  $V(\mathbf{r})$ :

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) \equiv H\psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}).$$

Die kanonische Dichtematrix  $C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)$  genügt der sogenannten BLOCH-Gleichung:  $HC + \frac{\partial}{\partial \beta} C = 0$  mit  $C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ . Die Diagonalelemente  $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta)$  liefern die gesamte Elektronendichte  $n(\mathbf{r})$  am Ort  $\mathbf{r}$  für ein nichtentartetes Elektronengas.

Die verallgemeinerte kanonische Dichtematrix  $D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta, \zeta)$  enthält bekanntlich einen anderen Besetzungsfaktor (FERMI-DIRAC-Besetzung):

$$D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta, \zeta) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}) \{1 + e^{-\beta(E_i - \zeta)}\}^{-1}.$$

Entsprechend liefern die Diagonalelemente  $D(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta)$  die gesamte Elektronendichte  $n(\mathbf{r})$  am Ort  $\mathbf{r}$  für ein entartetes Elektronengas. Für diese Dichtematrix  $D(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta)$  gilt eine verallgemeinerte BLOCH-Gleichung:

$$(H - \zeta) \frac{\partial D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \zeta)}{\partial \zeta} + \frac{\partial D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \zeta)}{\partial \beta} = 0$$

mit

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \lim_{\zeta \rightarrow -\infty} e^{-\beta \rho} D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta, \rho) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}).$$

Für die Berechnung wird ein Integralzusammenhang zwischen  $D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta, \zeta)$  und  $C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)$  benutzt:

$$D(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta, \zeta) = \int_0^\infty \gamma(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E) \frac{\partial}{\partial E} \left\{ -\frac{1}{1 + e^{\beta(E - \zeta)}} \right\} dE$$

$$\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} e^{\beta E} \frac{1}{\beta} C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta) d\beta$$

$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta)$  wird dabei iterativ aus der zur BLOCH-Gleichung gehörigen Integralgleichung bestimmt. In der linearen Näherung gilt für die Diagonalelemente in atomaren Einheiten ( $\hbar = m = e^2 = 1$ ):

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta) = C_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta) + C_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta),$$

$$C_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta) = (2\pi\beta)^{-3/2},$$

$$C_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta) = -(2\pi\beta)^{-3/2} \int d^3r_1 \frac{V(\mathbf{r}_1)}{2\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} e^{-\frac{2}{\beta}|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|^2}.$$

Entsprechend erhält man:

$$D(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta) = D_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta) + D_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta),$$

$$D_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta) = \frac{1}{2^{1/2}\pi^2} \int_0^\infty \frac{E^{1/2}}{1+e^{\beta(E-\zeta)}} dE,$$

$$D_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta) = -\frac{1}{4\pi^3} \int_0^\infty dE \int d^3r_1 \frac{V(\mathbf{r}_1) \sin(2^{3/2} \cdot E^{1/2} |\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|^2 (1+e^{\beta(E-\zeta)})}.$$

$C_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta)$  und entsprechend  $D_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta)$  liefern die Elektronendichten für das ungestörte Elektronengas ( $V \equiv 0$ ).

#### IV. Die dielektrische Funktion und die Filterfunktion

Wie gezeigt wurde, lässt sich der bekannte Ausdruck für die dielektrische Funktion eines entarteten freien Elektronengases mit der Methode der Dichtematrizen ableiten. Diese Methode ermöglicht gleichfalls die Berechnung der dielektrischen Funktion für ein beliebig entartetes Elektronengas. Die dielektrische Funktion wird durch eine sogenannte Filterfunktion charakterisiert, die die Quantenkorrekturen zur semiklassischen THOMAS-FERMI-Näherung beinhaltet (Abb.2).

Die Filterfunktion geht im Grenzfall hoher Entartung wieder in die LINDHARD'sche Formel über und lässt sich im Grenzfall der Nichtentartung durch eine GAUSS'sche Fehlerfunktion darstellen. Im Gebiet schwacher und mittlerer Entartung zeigt sie eine besonders starke Abhängigkeit vom Entartungsgrad.

Ein interessantes Beispiel von den vielfältigen Anwendungen der dielektrischen Funktion ist ihre Benutzung zur Berechnung des selbstkonsistenten Streupotentials einer ionisierten Störstelle in einem beliebig dotierten, kompensierten und entarteten Halbleiter. Denn in einem Elektronengas ruft ein äußeres Störpotential  $V_{\text{ion}}(\mathbf{r})$  einen Polarisationsanteil  $V_{\text{Pol}}(\mathbf{r})$  hervor, der sich über die POISSON-Gleichung aus der Abweichung der Elektronenkonzentration von der mittleren  $n_0$  ergibt:  $\Delta V_{\text{Pol}}(\mathbf{r}) = -4\pi(n(\mathbf{r}) - n_0)$ . In der linearen Näherung erhält man:  $n(\mathbf{r}) = n_0 + n_1 = D_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta) + D_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta)$ , so dass gilt:

$$\Delta V_{\text{Pol}}(\mathbf{r}) = 4\pi D_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta, \zeta).$$



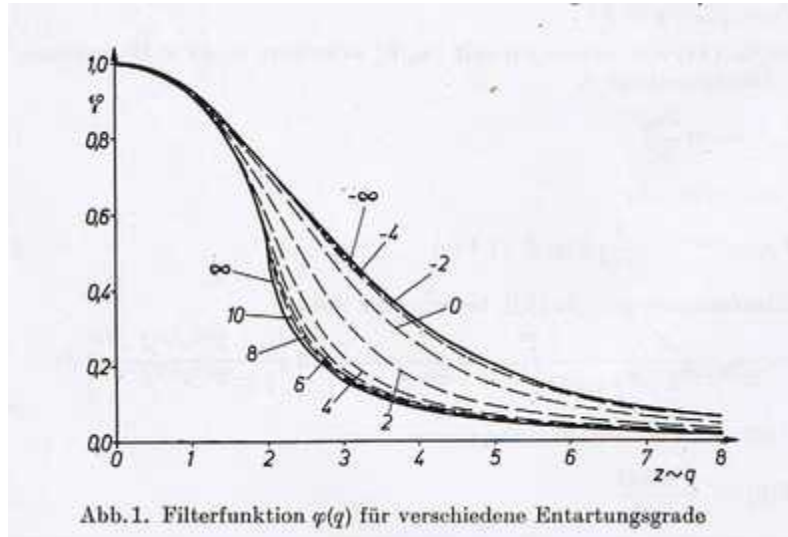


Abb. 1. Filterfunktion  $\varphi(q)$  für verschiedene Entartungsgrade

Abb. 2: Filterfunktion  $\varphi(q)$  für verschiedene Entartungsgrade (aus: [5], S. 128)

Für das effektive, selbstkonsistente Potential  $V(\mathbf{r})$  ergibt sich dann:

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) + V_{\text{Pol}}(\mathbf{r}).$$

Im FOURIER-Raum erhält man daraus mit der Filterfunktion  $\varphi(q, \beta, \zeta)$  und der Abschirmlänge  $L$ :  $V_{\text{Pol}}(q) = -\frac{1}{L^2 q^2} \varphi(q, \beta, \zeta) V(q)$  und auch die oben genannte dielektrische Funktion  $\varepsilon(q)$ :  $\varepsilon(q) = 1 + L^2 q^{-2} \varphi(q, \beta, \zeta)$ . Dabei gilt:  $L^{-2} = 4\pi \partial n_0 / \partial \zeta$  und  $V(q) = V_{\text{ion}}(q) / \varepsilon(q)$ .

Die Filterfunktion  $\varphi(q, \beta, \zeta)$  ist genau die gesuchte quantenmechanische Korrekturfunktion zur semiklassischen THOMAS-FERMI-Näherung  $\varepsilon_{\text{TF}}(q)$ :

$$\varepsilon_{\text{TF}}(q) = 1 + 1/(L^2 q^2).$$

Die Filterfunktion für beliebige Entartung  $\varphi(q, \beta, \zeta)$  ist in der Abbildung 2 dargestellt. Als Maßstabsfaktor wurde  $z = \beta(F_{-3/2}(x)/F_{-1/2}(x))^{1/2} q$  gewählt. Der Anfangsverlauf für kleine  $z$  hängt nicht vom Entartungsgrad ab. Für hohe Entartung ist  $z = qk_F^{-1}$ , für Nichtentartung  $\beta^{1/2} q$ .

Als zweckmäßig erwies sich bei vielen Anwendungen die Einführung einer effektiven Potentialmatrix  $U(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta)$ :  $C(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta) = C_0 \exp(-U(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \beta))$ . Denn die Bandränder können infolge der quantenmechanischen Ortsunschärfe den schneller veränderlichen Anteilen des Schwankungspotentials nicht mehr folgen. Die Bandränder werden einen glatteren Verlauf als das Potential selbst zeigen, wie die Abbildung 3 zeigt.

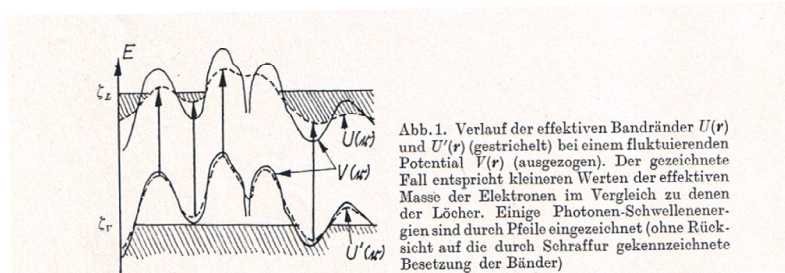



Abb. 3: Verlauf der effektiven Bandränder  $U(r)$  und  $U'(r)$  (gestrichelt) bei einem fluktuierenden Potential  $V(r)$  (ausgezogen) (aus: [4], S. 162)

## V. Zelluläre Automaten als alternative Methode in der Transporttheorie

Meine intensivere Beschäftigung mit der Lösungsmethode der zellulären Automaten für die BOLTZMANN-Gleichung begann schon in der Aufbauphase der 1998 in Leipzig gegründeten Arnold-Sommerfeld-Gesellschaft e. V. Mein Vortrag zu dieser Thematik im SOMMERFELD-Seminar und die Anmeldung eines Patentes (Abb. 4) standen am Beginn meiner Teilnahme an dieser Forschungsthematik „Zelluläre Automaten und deren Anwendungen“ in der ASG, die in den vergangenen zehn Jahren vielfältig ausgebaut wurde. Eine ausführlichere Begründung für diesen Methodenwechsel ist in meinem Artikel für das von Professor DIETMAR FEY (Institut für Informatik, Universität Jena) im Springer-Lehrbuch zum *Computational Science* (erscheint voraussichtlich 2009) der ASG-PII-Gruppe enthalten. Die Kooperation der ASG mit der nationalen Fachgruppe „Physik-Informatik-Informationstechnik“ (PII) der DPG, IT und IGT ist 2002 entstanden.

Die wichtigsten Argumente seien aber trotzdem hier kurz skizziert. Durch die zunehmende Miniaturisierung von Halbleiterbauelemente im Sub- $\mu\text{m}$ -Bereich sind zuverlässige Konzepte zur genauen Beschreibung des nichtlinearen Ladungsträgertransportes erforderlich. Ausgangspunkt ist im Rahmen einer semiklassischen kinetischen Transporttheorie die BOLTZMANN-Gleichung, eine mikroskopische Beschreibung im Phasenraum.

Makroskopische Bilanzgleichungen, auf denen sogenannte Drift-Diffusions-Modelle basieren, liefern im Sub- $\mu\text{m}$ -Bereich erhebliche Abweichungen von den experimentellen Ergebnissen. Die Ursache liegt in der Vielzahl physikalischer Nichtgleichgewichtsphänomene begründet. Diese sogenannten Kurzkanaleffekte können in diesen einfachen Modellen nicht berücksichtigt werden. Auch die darauf aufbauenden hydrodynamischen Gleichungen sind ohne zusätzliche Annahmen nicht in der Lage, den Ladungsträgertransport in den Halbleitern hinreichend genau beschreiben zu können.



⑩ BUNDESREPUBLIK  
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES  
PATENT- UND  
MARKENAMT

⑫ **Offenlegungsschrift**  
⑮ **DE 197 24 313 A 1**

⑚ Aktenzeichen: 197 24 313.4  
⑛ Anmeldetag: 10. 6. 87  
⑜ Offenlegungstag: 17. 12. 98

⑯ Int. Cl.<sup>8</sup>  
**G 06 F 15/80**

DE 197 24 313 A 1

---

⑰ Anmelder:  
Renner, Uwe, Dr., 04106 Leipzig, DE; Kiefer,  
Clemens, Dr., 04299 Leipzig, DE; Eisenberg,  
Wolfgang, Dr., 04129 Leipzig, DE

⑱ Erfinder:  
gleich Anmelder

---

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen

⑳ Zellulärer Automat

㉑ Die Erfindung bezieht sich auf zelluläre Automaten, die aus einer Vielzahl von flächenhaft oder räumlich angeordneten Prozessorzellen bestehen. Zur Reduzierung des Hardwareaufwandes wird die Tabelle extern und global zugänglich gespeichert. Sie wird als Informationsbitfolge synchron mit der Takbitfolge optoelektronisch mittels Lichtquellen und -empfängern übertragen. Die global gesendete Informationsbitfolge setzt sich aus Synchronwort, Tabelle und Leerwort zusammen. Jede Prozessorzelle bildet nach einer Rechenvorschrift aus den Eigenzustandsworten der Nachbarzellen das Nachbarzustandswort und ermittelt mit ihm aus der Tabelle das neue Eigenzustandswort. Das Eigenzustandswort wird im Zustandspeicher der Prozessorzelle abgelegt.



DE 197 24 313 A 1

BUNESDRUCKEREI 10.98 802 051/38/1 22

Abb. 4: Patent von Dr. U. RENNER, Dr. C. KIEFER, Dr. W. EISENBERG – Projektantrag 1997  
(Quelle: Deutsches Patent- und Markenamt)

Ende der 60er Jahre wurde insbesondere ein statistisches Verfahren, die sog. Monte-Carlo-Methode, erfolgreich zur exakten Lösung der BOLTZMANN-Gleichung im Halbleitertransport eingesetzt. Obwohl dieses Verfahren die zuverlässigsten Resultate für Bauelemente bis zu Abmessungen von einigen Nanometern liefert, stellt der numerische Aufwand einen großen Nachteil dar. Zu einer vollständigen Analyse des Ladungsträgertransportes in realistischen Bauelementen werden selbst auf Hochleistungsrechnern bis zu einigen Wochen Rechenzeit benötigt. Der Mehraufwand gegenüber den o. g. Drift-Diffusions-Modellen beträgt etwa zwei bis drei Größenordnungen.

Daher wurde schon in den 90er Jahren der Zugang zur exakten Lösung der BOLTZMANN-Gleichung mit einem Verfahren realisiert, das wegen seiner numerischen Effizienz bezüglich Rechenzeit und Parallelisierbarkeit diesen Nachteil überwindet, nämlich mit der Methode der zellulären Automaten. Unter den zellulären Automaten (ZA) ist ein vollständig diskretisiertes System zu verstehen, dessen Evolution sich nur in diskreten Zeitschritten auf einer fiktiven Mikrowelt mittels dynamischer Streuregeln vollzieht.

Ziel der ZA-Methode ist es, durch möglichst einfache Streuregeln die Dynamik auf einer makroskopischen Skala wiedergeben zu können, die den kontinuierlichen Bewegungsgleichungen genügt. Diese Methode ist in vielen naturwissenschaftlichen Bereichen zur Beschreibung von Transportphänomenen erfolgreich eingesetzt worden. In der für die komplexe Flugzeugtechnik und die Meteorologie so wichtigen Hydrodynamik ist es beispielsweise gelungen, durch die ZA-Methode nichtlineare Transportphänomene, sogenannte Turbulenzen, mit sehr einfachen Streuregeln qualitativ beschreiben zu können.

Gelingt nämlich eine Transformation nichtlinearer Differentialgleichungen auf lokale Streuregeln, die nur nächste Nachbarzellen berücksichtigen, lassen sich die ursprünglichen Gleichungen auf vielfaches Ausführen gleicher elementarer Rechenschritte, die parallel abgearbeitet werden können, zurückführen. Dies erklärt die effiziente Parallelisierbarkeit solcher Algorithmen. Durch die Diskretisierung in den Ortsraumzellen können zudem komplizierte Randbedingungen, die in Bauelementen eine wichtige Rolle spielen, in einfacher Weise behandelt werden. Der inhomogene Ladungsträgertransport in den Halbleiterbauelementen lässt sich durch die Einbeziehung der POISSON-Gleichung (verallgemeinertes BOLTZMANN-POISSON-Konzept) und der Multigrid-Methode selbstkonsistent behandeln.

Benutzt man darüber hinaus deterministische anstelle probabilistischer Streuregeln für die kinetischen Terme in der BOLTZMANN-Gleichung, dann sind auch quantitativ genaue und zuverlässige Berechnungen der Kenndaten von Bauelementen im Sub- $\mu\text{m}$ -(nm-)Bereich durchführbar. Auch die in der fiktiven Mikrowelt auftretenden Artefakte sind abschätzbar. Die Fehler sind nicht mehr nur a posteriori im Rahmen der eruierten Gültigkeitsgrenzen überprüfbar, sondern alle relevanten Fehler sind schon vorher, also a priori, abschätzbar. Damit kann man auch die auftretenden Fehler kontrollieren und minimieren.

Zu beachten ist allerdings: Solange keine Wechselwirkung (z. B. über die POISSON-Gleichung) oder transientes Verhalten vorliegt, garantiert das Ergodizitätstheorem im Rahmen der statistischen Ungenauigkeit gleiche Resultate für den Einteilchen- oder den Vielteilchenmodus der MC-Methode. Und in der MC-Methode können die Vielzahl der mikroskopischen Streuprozesse und die detaillierte Bandstruktur des Halbleiters berücksichtigt werden. Diese Methode liefert die exakte Verteilungsfunktion, mit der dann alle physikalisch relevanten Observablen ortsaufgelöst bestimmt werden können.

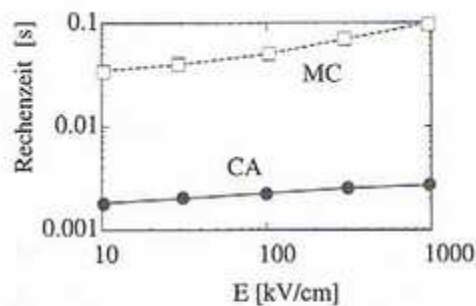
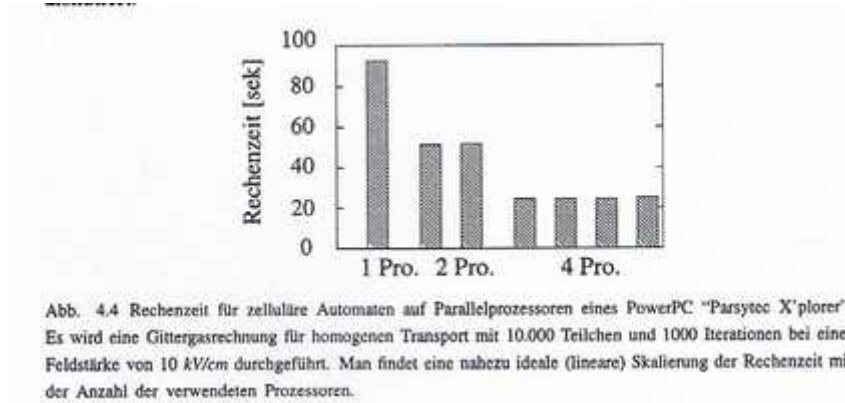


Abb. 4.3 Vergleich der Rechenzeit Monte-Carlo und Gittergasmethode als Funktion des elektrischen Feldes: Die Rechenzeiten pro Iteration beziehen sich auf homogenen Transport mit 10.000 Teilchen auf einer Cray Y-MP8/8-128 Serial 1004/445. Der Initialisierungsteil wird hierbei nicht berücksichtigt. Die Rechenzeiten der Monte-Carlo-Methode hängt wesentlich stärker von der Feldstärke ab, als bei der Gittergasrechnung. Es können bis zu 40mal kürzere Rechenzeiten gegenüber der Monte-Carlo-Methode erzielt werden.

Abb. 5: Vergleich der Rechenzeit Monte Carlo und Gittergasmethode als Funktion des elektrischen Feldes (aus: Rein, A.: *Zelluläre Automaten in der Transporttheorie. Konzepte und Anwendungen*. Diss. A der TU München, 1995, S. 44)

Allerdings hat die MC-Methode den erwähnten großen Nachteil: ihre numerische Ineffizienz für den inhomogenen Halbleitertransport. Denn für eine hinreichend gute Statistik benötigt man etwa 10 000–100 000 Teilchen. So sind selbst auf Hochleistungsrechnern Rechenzeiten von zwei Tagen für einen Arbeitspunkt einer Strom-Spannungs-Linie erforderlich. Um aber auch die mikroskopischen Lösungen der BOLTZMANN-Gleichung ohne enormen Rechenaufwand zu erhalten, wurden neuen Lösungsverfahren entwickelt und angewandt. Ein effizienter Ansatz wird hier vorgestellt, der die BOLTZMANN-Gleichung im Rahmen der Theorie der zellulären Automaten (ZA) exakt löst und die Rechenzeit um Größenordnungen reduziert. Darauf hat schon ACHIM REIN 1995 in seiner Dissertation an der Technischen Universität München *Zelluläre Automaten in der Transporttheorie. Konzepte und Anwendungen*, S. 44–45, hingewiesen (Abb. 5 und 6).



**Abb. 6:** Rechenzeit für zelluläre Automaten auf Parallelprozessoren eines Power PC „Parsytec X'plorer“ (aus: Rein, A.: *Zelluläre Automaten in der Transporttheorie. Konzepte und Anwendungen. Diss. A der TU München, 1995, S. 45*)

## VI. Verallgemeinerungen: die Quanten-BOLTZMANN-Gleichungen

Die „Quantum kinetic theory“ kann mit kinetischen Gleichungen (Bewegungs- und Evolutionsgleichungen) für Dichtematrizen, WIGNER-Funktionen nebst anderen Phasenraum-Quasiverteilungsfunktionen oder für thermodynamische GREEN-Funktionen aufgebaut werden.

Ausgangspunkt ist die quantenstatistische LIOUVILLE-Gleichung, die durch die geeigneten Erweiterungen, wie z. B. bestimmte Stoßintegrale, zu den irreversiblen verallgemeinerten BOLTZMANN-Gleichungen reformuliert werden. Eine Quanten-BOLTZMANN-Gleichung genügt für viele Zwecke, z. B. in weiten Gebieten der Halbleiter- und Festkörperphysik, aber auch in der Kern- und Elementarteilchentheorie, wobei eventuell das Argument der Verteilungsfunktion durch den Wellenzahlvektor zu ersetzen ist.

In der Quanten-BOLTZMANN-Gleichung sind drei Änderungen wesentlich [6]:

1. Die lokale Verteilung ist nicht die BOLTZMANN-, sondern die FERMI-/BOSE-Verteilung.
2. Die Einteilchen-Dynamik ändert sich nicht.
3. Einen neuen statistischen Effekt bedingt die Austausch-Wechselwirkung  $U$  der Teilchen.

Die Quantendynamik eines Quasiteilchens kann in erster Näherung durch die bekannte  $(\hbar/2\pi)^2/24$ -Korrektur berücksichtigt werden. Die Quanten-BOLTZMANN-Gleichung hat dann die folgende Gestalt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{24} U \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right)^3 f = J(f).$$

Das Wirksamwerden der Quantenstatistiken bedingt, dass im BOLTZMANN'schen Stoßintegral die Zahl (oder Wahrscheinlichkeit) der Übergänge zwischen den Zuständen der betrachteten Teilchen nicht nur von der Besetzungswahrscheinlichkeit eines Anfangszustandes (vor dem Stoß) abhängt, sondern auch vom angestrebten Endzustand. Gemäß dem PAULI-Prinzip tritt dann im Stoßintegral neben dem Faktor  $f(\mathbf{k})$  der Faktor  $[1 - f(\mathbf{k}')]$  für den Übergang  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$  auf. Die von ARNOLD SOMMERFELD in seiner Metalltheorie heuristisch ermittelte Quanten-BOLTZMANN-Gleichung sieht dann wie folgt aus:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \left( \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) = \int d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{p}' d^3 \mathbf{p}_1 J(f)$$

$$J(f) = W(\mathbf{k}, \mathbf{k}'_1 | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1) J_1(f)$$

$$J_1(f) = f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] f(\mathbf{k}'_1) [1 - f(\mathbf{k}_1)] - f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] f(\mathbf{k}_1) [1 - f(\mathbf{k}_1)].$$

Die Ähnlichkeit der Strukturen von BOLTZMANN- und Quanten-BOLTZMANN-Gleichung erlaubt den Schluss, dass auch diese mit der ZA-Methode zu lösen ist.

## VII. Modellierung, Simulation und Manipulation biologischer Membranfunktionen – mit mikrozellulären/nanozellulären Automaten

Das bekannte ZA-Konzept knüpft an das Computerkonzept von J. VON NEUMANN an. Für ihn war der Computer ein heuristisches Werkzeug, das erst im kombinierten Einsatz mit dem realen Experiment zum Simulationswerkzeug wird. Als ein prototypisches Beispiel sei die ZA-Anwendung zur Modellierung und Simulation der Clusterbildung in einer biologischen Membran genannt. Diese Cluster-Analyse wird durch die ZA-Methode radikal vereinfacht. In der einfachen Modellierung ist mindestens ein Mehrkomponenten-Lipid-Protein-System nötig. Die Biomembranen sind aber komplexe Systeme. Daher sind die für komplexe Systeme zugeschnittenen ZA ein geeignetes Mittel zu deren Beschreibung.

Die Modellierung der Biomembran ist mit einem Zustandsraum und einem konkreten biologischen Rahmen verknüpft. Der Zustandsraum umfasst verschie-

dene Lipidsorten und einen Proteintyp mit zwei Zuständen (aktiv, inaktiv). Deren Konkrete Funktionen sind Transport- und Ionenkanäle. Damit ist der Struktur-Funktionszusammenhang – Clusterbildung und Transportfunktion – in der Membranmodellierung enthalten. Ein einfaches ZA-Regelwerk kann für das Wechselspiel dieser Komponenten in diesem Kontext aufgestellt werden. Regelvariationen lassen sich relativ schnell formulieren, implementieren und in ihrer Brauchbarkeit bewerten.

Das wesentliche Kriterium ist dabei: Führen die Regeln auf eine Dynamik, die mit den experimentellen Befunden im Einklang sind?

Die Standardmodellierung benutzt die energetische und die thermodynamische Methode. Die Energiefunktion der Lipide (ihre innere Energie, Bindungsenergien benachbarter Lipide) ermöglicht die Ableitung der ZA-Regeln aus den thermodynamischen Übergangswahrscheinlichkeiten. Entscheidend ist der Vergleich der Lipidenergie mit dem bekannten typischen thermischen Energiebetrag  $kT$  (BOLTZMANN-Faktor). Die mathematische Modellierung benutzt hingegen für die modellierte Kunstmembran ein einfaches Regelsystem, das auf wenigen Annahmen zur homogenen oder inhomogenen Lipidumgebung und zur zugelassenen Proteinkooperation beruht. Schon bei einer Simulation mit 30·30 Elementen und den vom Pseudozufallsgenerator ausgewählten Anfangszuständen ergab sich iterativ eine Zeitreihe mit nichttrivialen dynamischen Effekten, die am realen Membranverhalten getestet wurden. Es zeigten sich die erwarteten deutlichen Bewegungseinschränkungen (Reaktionsraum) der Proteine auf die Schläuche in der Membran (Grenzbereich zwischen den Clustern).

Durch den Einsatz der geeignet BOLTZMANN-Gleichung mit den zugeschnittenen Modell-Relaxationsgliedern kann man solche Modelle erweitern, da die hinzugewonnene typische physikalische Information reformulierte ZA-Regeln ableiten lässt. Überzeugend sind dabei die einfachen Näherungen der BOLTZMANN-Gleichung, z. B. die Diffusion oder die Teilchen-Wanderung (mit oder ohne Sprung) im treibenden äußeren Kraftfeld.

Eine interessante und in der ASG behandelte Erweiterung der Modellierung und Simulation von Biomembranfunktionen ist die kontrollierte Manipulation dieser ZA der Biomembranen durch sogenannte MZA/NZA-Verbände [7]. Dabei soll mit den mikroskopischen/nanoskopischen Akteuren das Membranverhalten verändert werden. Parallel zum Membranzustandsmodell wird dabei untersucht, wie z. B. Löcher unter bestimmten Bedingungen in die Membran eingefügt oder repariert werden können. Hierbei arbeiten die mikrozellulären/nanozellulären Automaten (MZA/NZA) gegen den Trend des lokalen thermodynamischen Gleichgewichtes in der Membran – durch Hinzunahme externer oder erlernter Information.

Diese Akteure sind auch ZA, nämlich mikroskopische oder nanoskopische. Im Gegensatz zur festen Membranstruktur mit MOORE-Nachbarschaft [8] sollen diese aber eine lose Topologie besitzen, d. h., die Akteure können ihre Nachbarschaft



mit der Zeit ändern. In Kenntnis des lokalen Membranzustandes sollen sie – extern gesteuert – veranlasst werden, bestimmte Aktionen, z. B. Löcher „bohren“ oder als Enzymschere fungieren – nach einem einheitlichen Regelwerk ausführen. Damit kann auch ein kollektives, synergetisches Verhalten zustande kommen.

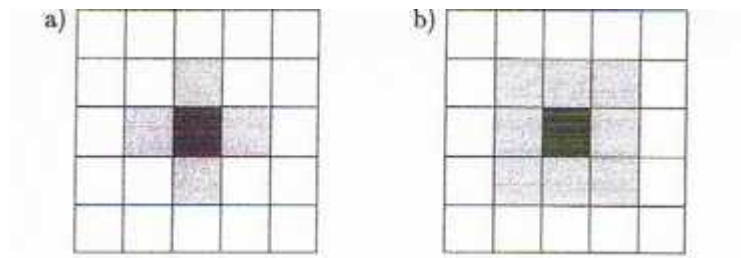


Abb. 7: ZA-Nachbarschaften – a) VON NEUMANN, b) MOORE (aus:[8], S. 36)

## VIII. Nanozelluläre Automaten, BOLTZMANN-Transport und die Zuverlässigkeit

Von Interesse für die ASG ist auch die hier dargestellte konzeptionelle Entwicklung einer einfachen evolutionären Beschreibung (bio)komplexer Systeme und ihrer Zuverlässigkeit. Sie wird inhaltlich ausgestaltet mit der Methode der zellulären Automaten und der auf der BOLTZMANN-Gleichung basierenden Transporttheorie.

Zuerst war es nur ein Vortrag zum erweiterten ZA-Thema „Simulation of bio-complex systems with NanoCellular Automata Swarms and their Reliability“ (EISENBERG, W.; RENNER, U.; ARNOLD, K.; BORAN, R.) auf dem ersten Internationalen Kongress zur Mikro- und Nanozuverlässigkeit in den Anwendungen der Schlüsseltechnologien (MicroNanoReliability 2007, Berlin, 2. –5. September – wird veröffentlicht).

In diesem Vortrag konnte ich in einem Ausblick auf eine Konzeption der Zuverlässigkeit hinweisen, die auf einer Analogie zur Struktur der Transportgleichung vom BOLTZMANN-Typ basiert. Denn es gibt eine enge mathematische Analogie zwischen dem physikalischen Transport in einem Medium und dem dynamischen Fehler- und Reparaturverhalten in einem System. Wichtig sind dabei die Ereignis- und die Stoßdichte. Die Ereignisdichte wird beschrieben durch die BOLTZMANN-Gleichung. Unterstützt werden diese Überlegungen zum Konzept der Zuverlässigkeit durch einen Vergleich der Berechnungsmodelle [9] (Abb. 8).

**Berechnung reparierbarer Systeme – Vergleich der Berechnungsmodelle**

In der Tabelle sind die Berechnungsmodelle in einer Übersicht zusammengestellt.

Modell	Einzelkomponente	Komplexe Struktur	Planmäßige Instandhaltung	Reparaturen	Instandhaltungsstrategie	Zustände der Komponenten	Komplexität, Abhängigkeiten	Ausfallverhalten	Reparaturverhalten	Beschreibungsart	Lösungsmöglichkeit	Zuverlässigkeit $R(t)$	Verfügbarkeit $A(t)$	Dauerverfügbarkeit $A_0(t)$
Periodische Instandhaltung	•	-	•	-	-	2	-	expon.	expon.	DGL-System	•	-	•	•
Markov	•	•	-	•	-	$n$	-	beliebig	beliebig	algebraisch	-	•	•	-
Boole-Markov	•	-	-	•	-	2	-	beliebig	-	Integralgleichung	numerisch	-	•	-
Gewöhnlicher Erneuerungsprozess	•	-	-	•	-	2	-	beliebig	beliebig	Integralgleichung	numerisch	-	-	•
Alternierender Erneuerungsprozess	•	-	-	•	-	2	-	beliebig	beliebig	Integralgleichung	numerisch	-	•	•
Semi-Markov-Prozess	•	•	-	•	-	$n$	-	beliebig	beliebig	Systemtransporgleichungen	MCC-Simulation	-	•	•
Systemtransporttheorie	•	•	•	•	•	$n$	•	beliebig	beliebig	algebraisch	analytisch	•	•	•

Abb. 8: Berechnung reparierbarer Systeme – Vergleich der Berechnungsmodelle (aus: [9])

Zumeist wird die Transportgleichung vom BOLTZMANN-Typ durch die Monte-Carlo-Methode gelöst. Aber wie oben schon gezeigt wurde, kann diese effektiver durch die ZA-Methode gelöst werden. Die Akzeptanz dieser konzeptionellen Entwicklungsidee in der Diskussion auf dem 1. Weltkongress für Mikro- und Nanozuverlässigkeit implizierte eine Weiterentwicklung des Konzeptes zur Zuverlässigkeitsanalyse, die dynamische Zuverlässigkeitsanalyse. Da die BOLTZMANN-Gleichung mit der ZA-Methode gelöst werden kann, ergibt sich zudem eine konsistente Beschreibung biokomplexer Systeme und ihrer dynamischen Zuverlässigkeit.

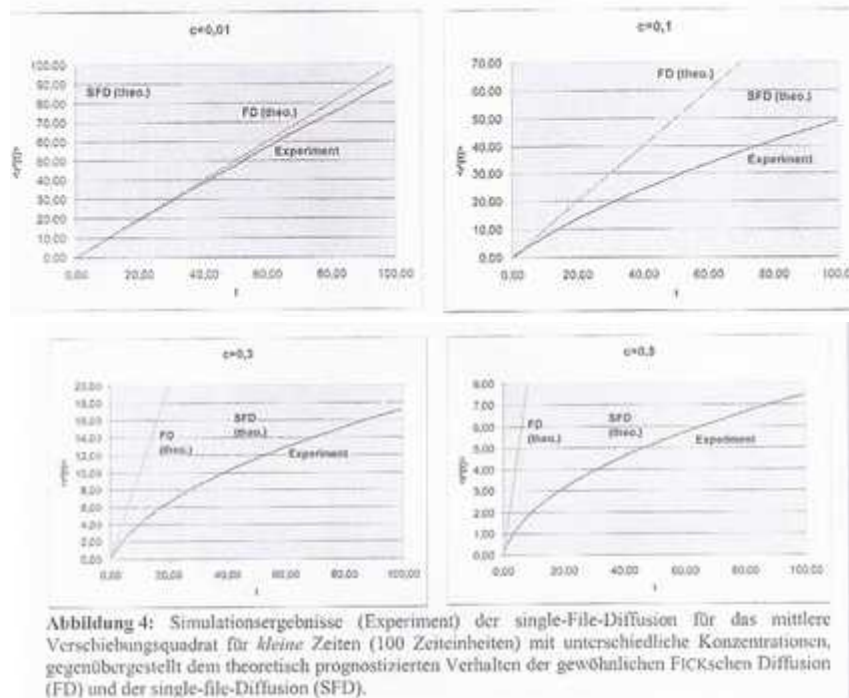


Abb. 9: Simulationsergebnisse (Experiment) der Single-File-Diffusion (aus: [10])

Der nächste Schritt war der Bericht *Ein ZA-basiertes Modell zur Simulation der Single-File-Diffusion mittels MPI in Cluster-Rechnern* auf dem 3. Workshop „Grid-Technologie für den Entwurf technischer Systeme“ (Fraunhofer-Institut für Integrierte Schaltungen, Dresden, 12. Oktober 2007). Eine Simulation für die Single-File-Diffusion mit der ZA-Methode wurde diskutiert und computertech-nisch ausgewertet. Es wurde klar, dass die ZA-Methode für qualitative und quanti-tative Analysen praktischer Probleme einsetzbar ist.

Im folgenden Schritt, im Vortrag „Simulation komplexer Systeme mit zellulären Automaten und ihre Zuverlässigkeit“ auf der MicroCar 2008 „Mikrowerkstoffe, Nanowerkstoffe für den Automobilbau“ (Leipzig, 27. Februar 2008), konnte ich über die ersten Resultate von ZA-Anwendungen für die Single-File-Diffusion berichten. Solch eine anomale Diffusion findet z. B. bei der heterogenen Katalyse statt (Zeolith). Das ZA-Modell war ein Sprung-Modell mit ca. 1 Million Teilchen. Die ZA-Zustände waren „leer“, „voll“, „geh nach links“, „geh nach rechts“ usw. Die Nachbarschaft wurde ausgedehnt auf zwei rechte und zwei linke Nachbarn. Die ZA-Regeln wurden kombinatorisch abgeleitet. Die Reduktion der Rechenzeit auf den Sekundenbereich ist auch interessant für das o. g. dynamische Zuverlässigkeitskonzept, insbesondere die Ergebnisse der Single-File-Diffusion bei kleinen Zeiten [10] (Abb. 9).

Der Vorteil der ZA-Methode sind Plausibilität und Flexibilität mit zusätzlichen Regeln, auch für Grenzeffekte. Es sind auch Modell-Erweiterungen denkbar, z. B. Asymmetrien bei angelegten äußeren Feldern.

Diese dynamische Zuverlässigkeitsanalyse auf der Basis der Transportgleichung vom BOLTZMANN-Typ und der zellulären Automaten kann Schritt für Schritt erweitert werden für biokomplexe Systeme, mit halbempirischen oder semiklassischen Anwendungen und anderen Methoden, wie z. B. die Methode der ereignisorientierte Simulationen.

## IX. Bilanz und Ausblick

Die Bilanz meiner bisherigen wissenschaftlichen Laufbahn ist geprägt worden durch ein vom Jubilar initiiertes, vielseitig anwendbares und verallgemeinerungswürdiges Forschungsthema „Die BOLTZMANN-Gleichung und ihre Lösungen“. Deshalb ist es auch beruhigend und rechtfertigt im Nachhinein die intuitive Entscheidung für diesen Forschungsweg, wenn im einfachsten Grenzfall, z. B. der Störstellenstreuung von Ladungsträgern in Halbleitern, das Ergebnis der BOLTZMANN-Gleichungs-Behandlung im KUBO-Formalismus bestätigt werden kann. Natürlich ist der KUBO-Formalismus quantenmechanisch besser begründet. Daher hat es die Weiterentwicklung und die stufenweise Verallgemeinerung der ursprünglichen Forschungsthematik gegeben: Von der (semi)klassischen zur quantisierten BOLTZMANN-Gleichung: Variationsprinzipien, Dichtematrizen und zelluläre Automaten.

Die Realisierung des Themas hat im Forschungsstudium begonnen und wurde im dezentralisierten und zufällig strukturierten „Großforschungszentrum“ im miteldeutschen Raum nach 1990 fortgesetzt. Dabei konnte physikalische Intuition mit Zielstrebigkeit, Ausdauer, Teamwork, weitsichtiger Betreuung, Unterstützung durch den Jubilar und günstigen oder deutlich weniger günstigen Entwicklungsbedingungen verknüpft werden. Leider konnte die im damaligen Wissenschafts-

zentrum Leipzig begonnene Projektentwicklung zur heterogenen Katalyse (RENNER, U.; EISENBERG, W.; VOJTA, G.) mit einem zur Entwicklung einer fraktionierten BOLTZMANN-Gleichung noch nicht fortgeführt werden. Das betrifft ebenso die Fuzzy-Darstellung dieser Thematik oder die mit der Analyse der Mehrfachpendel begonnene und jetzt wieder belebte Chaosforschung (siehe z. B. [11] Quantenchaos). Hoffnungsvoll erscheint mir die ZA-Forschung im Kontext der Beschreibung komplexer (Bio-)Systeme, der Zuverlässigkeitsanalyse und Energiesysteme.

## Literatur

- [1] Stiller, W.: *Ludwig Boltzmann : Altmeister der klassischen Physik. Wegbereiter der Quantenphysik und Evolutionstheorie.* – Leipzig: Johann Ambrosius Barth 1988
- [2] Vojta, G.; Vojta, M.: *Teubner-Taschenbuch der statistischen Physik.* – Stuttgart: Leipzig: B. G. Teubner 2000, S. 317 ff.
- [3] Czycholl, G.: *Theoretische Festkörperphysik : von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen.* Berlin [u. a.]: Springer-Verlag 2008, S. 305
- [4] Unger, K.: *Optische Übergänge in hochdotierten und gemischten Halbleitern: Die verallgemeinerte Bloch-Matrix.* – Annalen der Physik. 7. Folge, Band 27, Heft 2, 1971, S. 161–167 (J. A. Barth, Leipzig)
- [5] Eisenberg, W.; Unger, K.: *Die Dielektrizitätsfunktion für ein freies Elektronengas mit beliebigem Entartungsgrad.* – Annalen der Physik. 7. Folge, Band 31, Heft 2, 1974, S. 125–130 (J. A. Barth, Leipzig)
- [6] Eisenberg, W.: *Verallgemeinerte Boltzmann-Gleichungen und die zellulären Automaten*, Abschn. 3.4 *Verallgemeinerungen: Quanten-BOLTZMANN-Gleichungen (Quantum kinetic theory)*. In: *Synergie, Syntropie, nichtlineare Systeme* / hrsg. von Eisenberg, W., u. a. – Heft 3. Soft Computing, – Leipzig: Verlag im Wissenschaftszentrum 2000, S. 63
- [7] Eisenberg, W.; Renner, U.: *Systemmodellierung mit zellulären und mikrozellulären Automaten*. In: Eisenberg, W.; Fey, D.; Hofmann, H.; Herre, H.; Meiß, K.-M. (Hrsg.): *Modellierung in Physik und Informationssystemen und der Informationstechnik : Symposium 2003 / Arnold-Sommerfeld-Gesellschaft (ASG) und die Fachgruppe „Physik – Informatik – Informationstechnik“ (PII) der DPG, GI und ITG.* – Leipzig: Verlag im Wissenschaftszentrum 2004, S. 23
- [8] Renner, U.: *Zelluläre Automaten – ein ausgewählter Überblick*. In: *Synergie, Syntropie, nichtlineare Systeme* / hrsg. von Eisenberg, W., u. a. – Heft 3. Soft Computing. – Leipzig: Verlag im Wissenschaftszentrum 2000, S. 31

- [9] Bertsche, B.; Lechner, G.: *Zuverlässigkeit im Fahrzeug- und Maschinenbau. Ermittlung von Bauteil- und System-Zuverlässigkeiten.* – 3. A. – Berlin [u. a.]: Springer-Verlag, 2004, S. 396
- [10] Eisenberg, W.; Meiß, K.-M.; Boran, R.; Vogel, A.: *Simulation of Complex Systems with Cellular Automata and their Reliability.* In: *Micromaterials and Nanomaterials : a publication series of the Micro Materials Center Berlin at the Fraunhofer Institute IZM* (Berlin: DDP Goldenbogen). – 8/2008 – Micro materials nanomaterials for automotives MicroCar 2008, S. 90
- [11] Haake, F.: *Periodic-orbit theory of universality in quantum chaos.* *Physical Review E* 72, 046207 (2005)