

Experimentelle Physik

**Numerische Simulation des Ionenverhaltens in
Elektron-Zyklotron-Resonanz-Ionenquellen**

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von
Christian F. Vitt
aus Münster-Hiltrup

- 2002 -

Dekan:	Prof. Dr. J. Pollmann
Erster Gutachter:	Prof. Dr. H. J. Andrä
Zweiter Gutachter:	Priv.-Doz. Dr. A. Khoukaz
Tag der mündlichen Prüfung:	26., 28.11. und 04.12.2002
Tag der Promotion:	04.12.2002

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	5
2.1	Aufbau von EZR-Ionenquellen am Beispiel der ECRIS 3	6
2.1.1	Plasmakammer	6
2.1.2	Magnetfeld	7
2.1.3	Extraktion	11
2.1.4	Weitere Maßnahmen zur Leistungssteigerung	12
2.2	Ladungszustandsverteilung im Gleichgewicht	13
2.3	Plasmatransport und elastische Stöße	15
2.3.1	Einzelteilchenbewegung in Magnetfeldern	15
2.3.2	Coulomb-Stöße	19
2.4	Energieaustausch zwischen Plasmateilchen	23
2.4.1	Ionenheizung durch hochenergetische Elektronen	24
2.4.2	Temperaturausgleich unter den Ionen	27
2.5	Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in kalten, magnetisierten Plasmen	27
3	Modell zur Berechnung der räumlichen Ladungszustandsverteilung	33
3.1	Modelle und Simulationen anderer Autoren	33
3.2	Grundprinzip des hier vorgestellten Modells	36
3.2.1	Ratengleichungssystem	37
3.2.2	Diskretisierung	38
3.2.3	Zeitintegration	39
3.2.4	Einschränkungen	40
3.3	Elektronen	41

3.3.1	Lebenszyklen der Elektronen	41
3.3.2	Modellierung der Elektronen	43
3.3.3	Dichteverteilung der heißen Elektronen	47
3.3.4	Energieverteilung der heißen Elektronen, EEDF	52
3.4	Neutralgasteilchen	54
3.4.1	Räumliche Dichteverteilung	56
3.4.2	Bestimmung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten per Monte-Carlo-Simulation	57
3.4.3	Vereinfachungen für das Simulationsprogramm	59
3.5	Ladungsändernde Prozesse	60
3.5.1	Ionisationsprozesse	60
3.5.2	Rekombinationsprozesse	70
3.5.3	Ladungsaustausch, CX	74
3.6	Transport der Ionen	84
3.6.1	Stoßdominierter Transport im Plasmakernbereich	86
3.6.2	Elektrostatistischer Ioneneinschluß im Plasmakernbereich	96
3.6.3	Quasi-stoßfreier Ionentransport außerhalb des Plasmakernbe- reiches	100
3.6.4	Zusammenfassung der Transportbeschreibung	107
3.7	Extraktion der Ionen	108
3.8	Temperatur der Ionen	109
3.9	Zusammenfassung des Berechnungsmodells	111
4	Ergebnisse	117
4.1	Probleme beim Vergleich von Experiment und Simulation	117
4.2	Neutralteilchensimulationen	120
4.3	Beispielsimulation	132
4.3.1	Zeitliche Entwicklung	133
4.3.2	Räumliche Dichteverteilungen	143
4.3.3	Wandauftreffverteilungen der Ionen	151
4.3.4	Ladungszustandsverteilungen und extrahierte Ströme	152
4.3.5	Einschlußzeiten der Ionen	154
4.3.6	Mittlere freie Weglängen entlang der Zylinderachse	154
4.4	Konvergenztests	158

4.4.1	Verkleinerung der Zeitschrittweite	158
4.4.2	Verkleinerung der Zellen	160
4.5	Variation der Gaszufuhr	172
4.6	Relevanz der beteiligten Prozesse	180
4.6.1	Überblick	180
4.6.2	Zweifache Elektronenstoßionisation, 2-EII	182
4.6.3	Ladungsaustausch, CX	185
4.6.4	Ionentemperatur und stoßbedingter Ioneneinschluß	187
4.6.5	Quasineutralität und elektrostatischer Ioneneinschluß	192
4.7	Bedeutung der Elektronendichte	196
4.8	Mikrowellenleistung und mittlere Elektronenenergie	200
4.9	Vergleich mit experimentellen Daten und abschließende Diskussion	202
4.9.1	Beispiel experimenteller Daten	202
4.9.2	Optimalbetrieb der ECRIS 3	204
5	Zusammenfassung und Ausblick	211
A	Stöße zwischen Gasteilchen, Formalismus und Notation	215
B	Parallelgeschwindigkeitsverteilung bei stoßfreiem Ionentransport	217
B.1	Trajektorien im Phasenraum	218
B.2	Geschwindigkeit entlang der Trajektorie $\vec{x}(s)$ im Phasenraum	220
B.3	Dichteverteilung im Phasenraum.	221
C	Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung	227
D	Das Simulationsprogramm	229
D.1	Programmablauf	229
D.1.1	Initialisierung der CSD	230
D.1.2	Berechnung der mittleren Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ und der Verteilung $\Omega_{s,c,k}$ der Transportverluste auf die Nachbarzellen k für die PKB-Zellen mittels Monte-Carlo-Simulation	231
D.1.3	Berechnung der lokalen Parallelgeschwindigkeitsverteilung im quasi-stoßfreien Fall	232
D.1.4	Berechnung der zeitlichen Entwicklung	235
D.2	Programmein- und -ausgabe	238

D.2.1	Verzeichnis- und Dateiübersicht	238
D.2.2	Graphikausgabeformate	242
D.2.3	Darstellung der räumlichen Verteilungen: zr- und xy-Plots . .	243
D.2.4	Simulationsparameter	244
E	Abkürzungsverzeichnis	249

Kapitel 1

Einleitung

Seit Anfang der 1970er Jahre werden Ionenquellen, die auf dem Prinzip der Elektron-Zyklotron-Resonanz (EZR) basieren, entwickelt und mit steigender Tendenz eingesetzt, um Strahlen hochgeladener Ionen zu erzeugen.

Ionen werden in der physikalischen Forschung unter anderem zur Untersuchung von Kern- und Elementarteilchenreaktionen aufeinander geschossen. In der Halbleiterindustrie verwendet man hochgeladene Ionen bei der Chip-Herstellung z.B. zur Bearbeitung von Oberflächen (Sputtern) sowie zur Dotierung von Halbleiterstrukturen mit bestimmten Elementen, und in der Medizin werden Tumore durch Beschuß mit Ionen behandelt. Bei all diesen Verfahren wird allgemein die (möglichst hohe) Ladung der extrahierten Ionen genutzt, um sie in elektrischen Feldern zu beschleunigen.

Die Pionierarbeiten auf dem stark experimentellen Feld der EZR-Ionenquellen wurden von GELLER geleistet, der die ersten EZR-Ionenquellen in Betrieb nahm [Gel96]. Nachdem die Vorzüge der Quellen dieses Typs gegenüber den bis dahin gängigen Ionenquellen (hohe Ströme hochgeladener Ionen bei geringem Verschleiß und Wartungsbedarf) in der wissenschaftlichen Gemeinschaft allgemeiner bekannt wurden, setzte deren Entwicklung weltweit auch in anderen Laboratorien ein.

Dabei konnten die Wissenschaftler und Ingenieure anfangs auf Erkenntnisse aus der Fusionsforschung zurückgreifen, z.B. bzgl. des magnetischen Plasmaeinschlusses. Weitergehende Fortschritte wurden dann aber vor allem auf der Basis von Trial-and-Error-Versuchen erzielt. Das Verständnis der komplexen Vorgänge in den Quellen beschränkte sich dabei auf die Kenntnisse einiger beteiligter Prozesse, deren quantitative Bedeutung anhand der zu dieser Zeit erst seit einigen Jahren untersuchten Wirkungsquerschnitte grob abgeschätzt werden konnte.

Mit zunehmender Verfügbarkeit und Leistungsfähigkeit von Computern wurden Anfang der 1980er Jahre erste rechenbare Modelle entwickelt [Wes82], die Einblicke in das Zusammenwirken der verschiedenen Prozesse in EZR-Plasmen gaben. Dennoch wurden die Leistungssteigerungen der Quellen hauptsächlich durch die technische

Weiterentwicklung (auch des zum Bau der Quellen benötigten Equipments wie Mikrowellentechnik, supraleitende Spulen und Permanentmagnete) vorangetrieben.

In der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. ANDRÄ am Institut für Kernphysik in Münster, in der die vorliegende Arbeit angefertigt worden ist, werden EZR-Ionenquellen seit 1994 entwickelt, um damit Grundlagenexperimente zu hochgeladenen Ionen an Oberflächen durchzuführen [Duc99, Mro01]. In dieser Zeit entstanden sechs verschiedene EZR-Ionenquellen [Stü95, Vit96, Rü97, Mü00, Täs02, Alb02].

Dabei wurde von Beginn an Wert auf ein tiefgehendes Verständnis der Quellen gelegt, immer mit dem Ziel, die Leistung der in Betrieb befindlichen und der nächsten geplanten Quelle zu steigern. Die ersten computertheoretischen Schritte dazu wurden innerhalb der Arbeitsgruppe von LEONHARDT unternommen [Leo95]. Er begann damit, Trajektorien von Elektronen in dem statischen Magnetfeld, das das Plasma einschließt, und dem elektromagnetischen Wechselfeld, das die Elektronen heizt, zu simulieren. Darauf aufbauend konnte HEINEN die Simulationen so weit ausbauen, daß damit insbesondere Dichteprofil, Energieverteilung und mittlere Einschlußzeit der EZR-geheizten Elektronen in Abhängigkeit vom verwendeten Magnetfeld und dem Mikrowellenfeld bestimmt werden können [Hei97, HRD⁺98, HVA99, HRO⁺99, Hei02].

Da die Elektronen an den drei wichtigsten Prozessen der Plasmen in diesen Ionenquellen beteiligt sind (EZR, Ionisation der Atome und Ionen, elektrostatischer Einschluß der Ionen), kommt ihnen eine zentrale Bedeutung zu. Daher konnten allein ihre Simulationen schon früh Aussagen z.B. über die Güte potentieller Magnetfeldkonfigurationen liefern, die während der Planung neuer Quellen hilfreich waren.

Hierbei blieben jedoch zwangsläufig alle Effekte unberücksichtigt, die auf der Physik der Ionen beruhen. So kann man in den extrahierten Ionenströmen beispielsweise starke Abhängigkeiten von den verwendeten Gasen und deren Zufuhraten beobachten, die anhand der Elektronensimulationen nicht erklärt werden können.

Auch unter dem Aspekt der Quellenentwicklung kann man beispielsweise zwar das Magnetfeld bzgl. des Elektroneneinschlusses und ihrer Heizung optimieren, das bedeutet jedoch nicht zwangsläufig auch ein Optimum für die extrahierten Ionenströme. Denn die Ionen müssen zwar eingeschlossen werden, um möglichst hoch ionisiert werden zu können, dennoch sollen sie das Plasma auch verlassen können und zwar möglichst in Richtung der Extraktion.

Zu Beginn der vorliegenden Arbeit gab es in der Literatur bereits Ratengleichungsmodelle (siehe Abschnitt 3.1), mit denen die Ladungszustandsverteilungen der Dichten und der extrahierten Ströme begründet werden können. Diese Ansätze beschreiben bisher alle jedoch nur die über das ganze Plasma räumlich gemittelten Werte und berücksichtigen das das Plasma einschließende, stark inhomogene

Magnetfeld nur sehr vereinfacht.

Mit der neuen Kenntnis des 3-dimensionalen räumlichen Dichteprofils und der Energieverteilung der EZR-geheizten Elektronen aus HEINENS Simulationen war inzwischen jedoch die wichtigste Voraussetzung dafür gegeben, auch die räumlichen Dichteverteilungen der Ionen zu ermitteln, und dabei das vollständige räumliche Magnetfeld zu berücksichtigen. Aus diesen Ionendichteverteilungen lassen sich wiederum die extrahierten Ströme abbilden und unter verschiedenen Bedingungen vergleichen.

Die Beschreibung und Berechnung der in drei Dimensionen orts aufgelösten Dichteverteilungen der Atome und Ionen wurde aus diesen Gründen zum Ziel der vorliegenden Arbeit.

Aufbau der Arbeit

Im Anschluß an diese Einleitung werden in Kapitel 2 die Grundlagen zusammengestellt, die zum Verständnis benötigt werden. Dazu gehören der technische Aufbau der simulierten ECRIS 3 (*electron cyclotron resonance ion source*), eine Kurzdarstellung der wichtigsten Prozesse und Effekte sowie einige theoretische Grundlagen aus der Plasmaphysik.

In Kapitel 3 erfolgt die Beschreibung des Modells, mit dem die 3-dimensionalen Dichteverteilungen berechnet wurden. Hier werden auch die dabei relevanten atomphysikalischen Prozesse genauer erläutert. Die Dokumentation des damit eng verbundenen Simulationsprogramms ist in Anhang D zusammengestellt.

In Kapitel 4 sind die wichtigsten Simulationsergebnisse zusammengefaßt.

Der Hauptteil der Arbeit schließt in Kapitel 5 mit Zusammenfassung und Ausblick ab.

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel wird ein Überblick über die Funktionsweise und den Aufbau von EZR-Ionenquellen am Beispiel der in dieser Arbeit simulierten ECRIS 3 gegeben. Die ECRIS 3 ist die Ionenquelle, die in der Arbeitsgruppe, in der die vorliegende Arbeit entstand, am längsten eingesetzt wurde¹. Ihre Details wurden von RÜTHER und MÜLLER beschrieben [Rü97, Mü00].

Des Weiteren werden die physikalischen Grundlagen zusammengestellt, die für das Modell zur Berechnung der räumlichen Ladungszustandsverteilung in Kapitel 3 benötigt werden.

Physikalisches Grundprinzip der ECRIS

Alle EZR-Plasmen beruhen auf der speziellen – auch den Namen gebenden – Art der Energiezufuhr und der Plasmazündung: Ungebundene Elektronen², die sich in einem statischen Magnetfeld auf Helixbahnen mit der nur von der Magnetfeldstärke abhängigen Zyklotronfrequenz bewegen, gewinnen in einem elektromagnetischen Wechselfeld derselben Frequenz im statistischen Mittel Energie; man spricht von der *Elektron-Zyklotron-Resonanz-Heizung* (EZRH, siehe Abschnitt 2.1.2).

Die so geheizten Elektronen ionisieren schrittweise Atome und Ionen durch Einzelstoß, wodurch weitere Elektronen frei werden. Auf diese Weise baut sich lawinenartig ein Plasma auf, dessen Ionisationsgrad so lange zunimmt, bis die den Ionisationsgrad begrenzenden Prozesse (Neutralisation an den Wänden und Verlust durch die Extraktion) im Gleichgewicht mit den Ionisationsprozessen sind (siehe Abschnitt 3.5).

Die dem Plasma entkommenden Ionen können teilweise mittels eines elektrostatischen Feldes extrahiert und zu einem Strahl gebündelt werden (siehe Abschnitt 2.1.3).

¹Inzwischen ist sie von ECRIS 5 abgelöst worden, die noch leistungsfähiger ist [Täs02, Alb02].

²Jedes reale Gas hat immer einen von Null verschiedenen (aber meist vernachlässigbaren) Ionisationsgrad, der durch thermische Ionisierung bedingt ist (siehe SAHA-Gleichung [Che74, Jan92]). Bei Raumtemperatur trägt jedoch vor allem kosmische Strahlung zur Ionisation bei.

2.1 Aufbau von EZR-Ionenquellen am Beispiel der ECRIS 3

Aus dem oben beschriebenen Funktionsprinzip ergibt sich für alle ECRIS ein ähnlicher Aufbau aus Plasmakammer, Magnetfeld, Mikrowelle und Extraktion.

2.1.1 Plasmakammer

Bei der Plasmakammer handelt es sich um einen metallischen Hohlzylinder, der (bei ECRIS 3 durch die Extraktionsöffnung) evakuiert wird, damit die optimalen Gasdrücke (etwa 10^{-5} bis 10^{-4} Pa) über die Gaszufuhr eingestellt werden können. Bei allen in dieser Arbeitsgruppe entwickelten ECRIS [Stü95, Vit96, Rü97, Täs02] ist die Plasmakammer immer auch als Hohlraumresonator für die eingestrahlte Mikrowelle realisiert. Diese kann somit eine stehende elektromagnetische Welle mit hohen Feldstärken bilden. Bei ECRIS 3 hat die Plasmakammer eine Länge von 86 mm und einen Radius von 19,5 mm, woraus sich ein Volumen von $102,7 \text{ cm}^3$ ergibt. Bei 6,7 GHz Mikrowellenfrequenz können darin die H_{113} - und E_{012} -Resonatormoden angeregt werden [Rü97, Kap. 3.2].

Die regelbare Gaszufuhr erfolgt durch eine kleine Öffnung in der Zylinderstirnfläche gegenüber der Extraktionsöffnung.

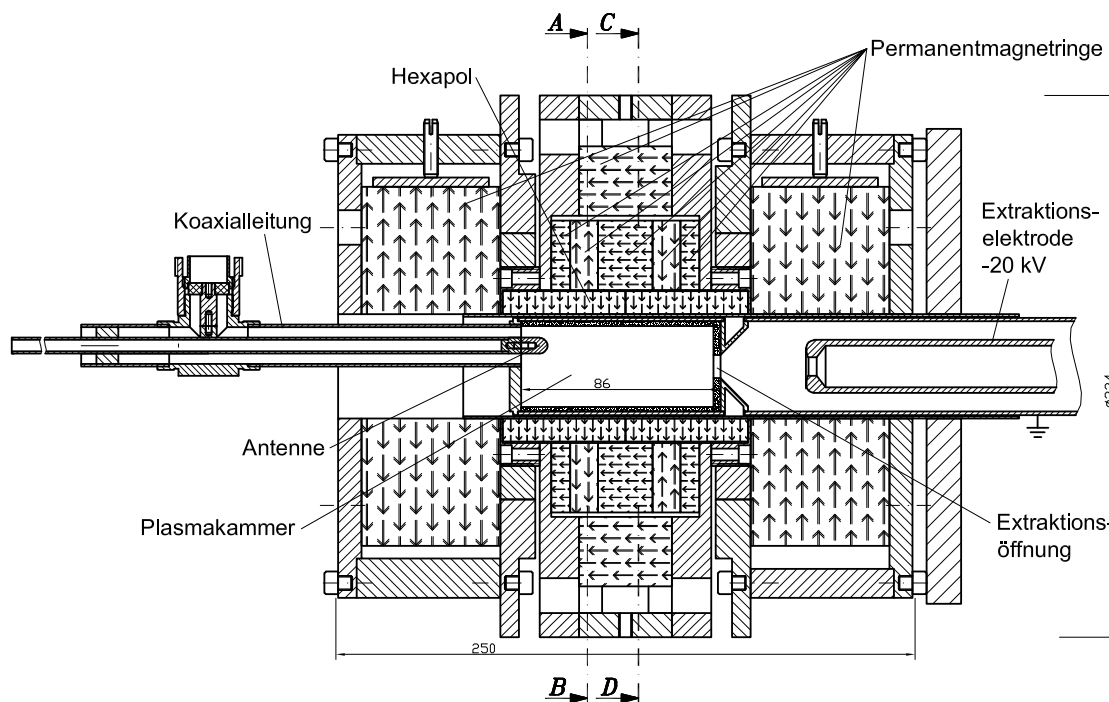


Abbildung 2.1: Seitenansicht der ECRIS 3. Die Gaszufuhr (nicht eingezeichnet) in die Plasmakammer befindet sich auf der Seite der Antenne. Die Pfeile in den Permanentmagneten kennzeichnen die Magnetisierungsrichtung.

Experimentell hat es sich als vorteilhaft erwiesen, die Zylinderwand innen mit Quarzglas abzudecken. Die dadurch höheren extrahierten Ströme werden auf eine vermehrte Sekundärelektronenproduktion (siehe Abschnitt 3.3.1.1) zurückgeführt.

2.1.2 Magnetfeld

Elektron-Zyklotron-Resonanz. Das Magnetfeld erfüllt zwei Hauptaufgaben. Zum einen ist es die Grundlage für die EZR, die verantwortlich für das Heizen der ungebundenen Elektronen ist. Sie beruht darauf, daß sich Elektronen (Masse m_e , Ladung $-e$) wie alle geladenen Teilchen im Magnetfeld durch die LORENTZ-Kraft auf Helixbahnen bewegen, deren Umlaufkreisfrequenz

$$\omega_{cyc} = \frac{e}{m_e} B \quad (2.1)$$

unabhängig von der nichtrelativistischen Geschwindigkeit lediglich mit der Magnetfeldstärke B variiert. Wirkt auf so gyrierende Elektronen eine Mikrowelle mit der Frequenz

$$f_{rf} = \frac{\omega_{cyc}}{2\pi} = \frac{e}{2\pi m_e} B, \quad (2.2)$$

so werden die Elektronen mit passender Phase durch das elektrische Feld der Mikrowelle in ihrer Bewegung senkrecht zum Magnetfeld beschleunigt. Elektronen in Antiphase werden zwar abgebremst, statistisch überwiegt jedoch der positive Effekt,

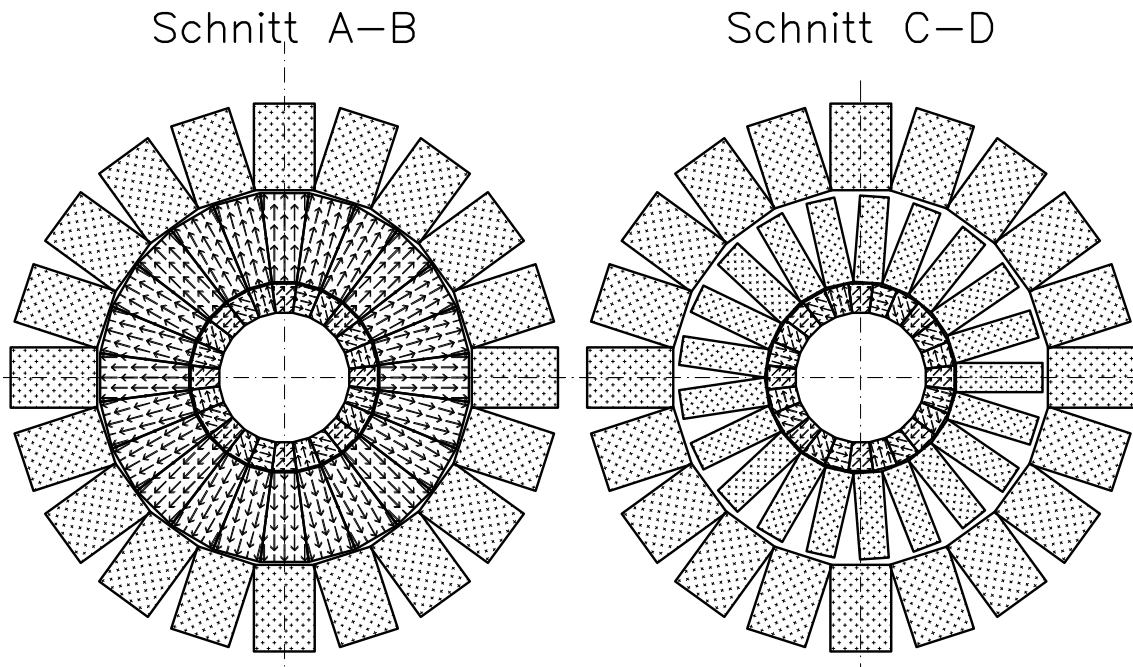


Abbildung 2.2: Querschnitte A-B und C-D (vergleiche Abbildung 2.1) durch die Magnetstrukturen der ECRIS 3. Die Pfeile markieren die Magnetisierungsrichtung der Permanentmagnete. Die mit kleinen Kreuzen gekennzeichneten Elemente sind axial, d.h. senkrecht zur Bildebene, magnetisiert. Der Hexapol, das ist der innerste Ring, ist als sogenannte HALBACH-Struktur realisiert worden [Gel96, Kap. 6.3.3].

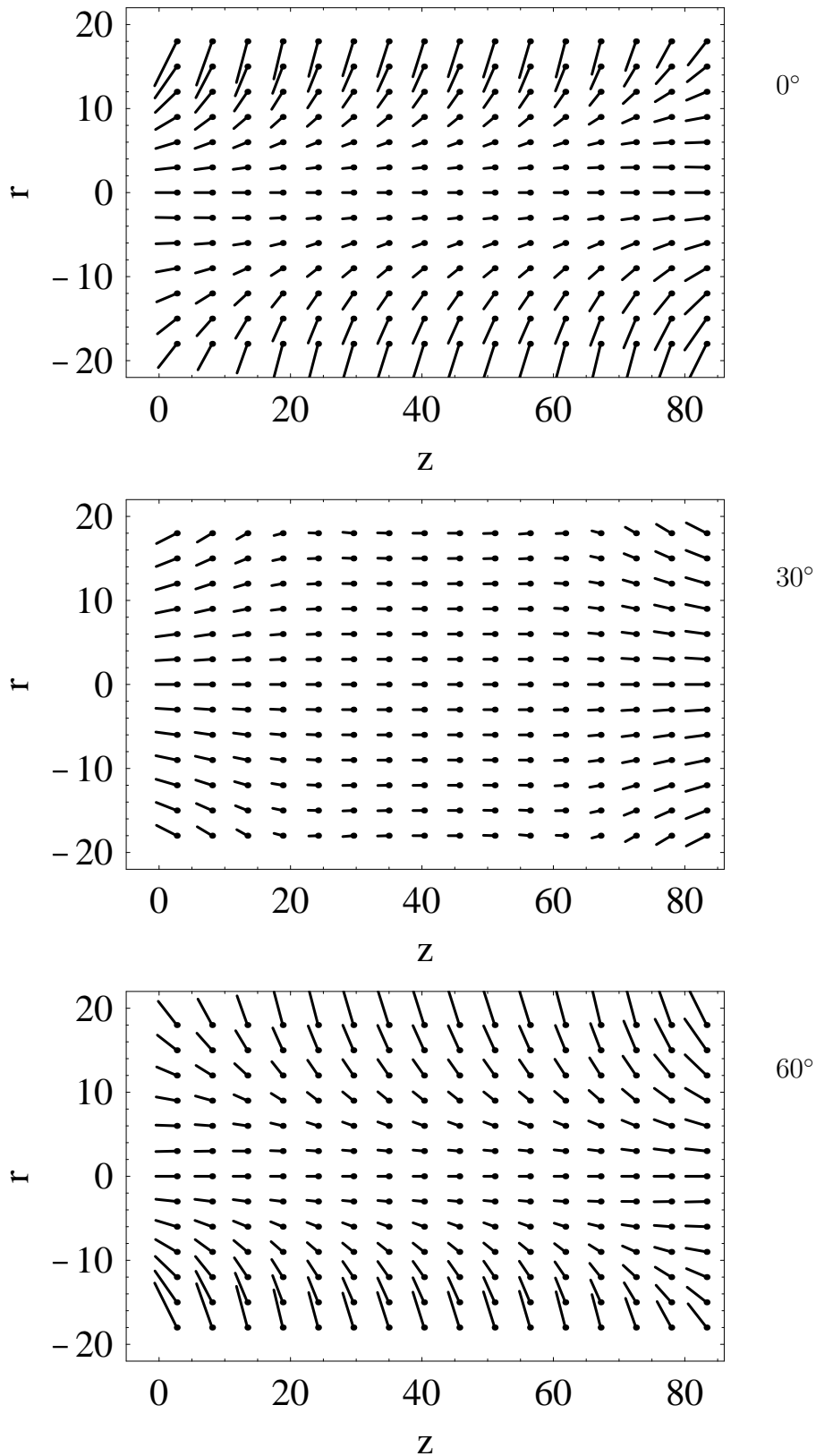


Abbildung 2.3: Projektionen des Magnetfeldes in drei zr -Ebenen der Plasmakammer mit den Azimutalwinkeln (Definition siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38) $\phi = 0, 30$ und 60° , wie in Abbildung 2.4 markiert. Die Plasmakammer hat eine Länge von 86 mm und einen Radius von 19,5 mm.

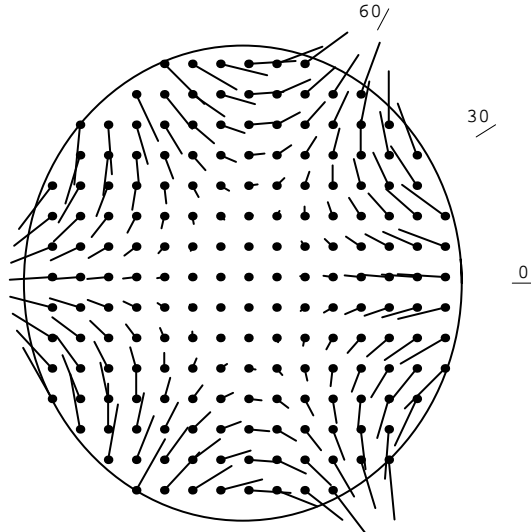


Abbildung 2.4: Projektion des Magnetfeldes der ECRIS 3 im Querschnitt (xy -Ebene) in der Mitte der Plasmakammer (Radius 19,5 mm) bei $z = 43$ mm. Die drei Winkelmarkierungen (0, 30, 60) kennzeichnen, durch welche Ebene die Längsschnitte in Abbildung 2.3 gezogen wurden.

so daß auch vom *stochastischen Heizen* gesprochen wird. Näheres hierzu siehe [Hei02, Kap. 2.3], [Gel96, Kap. 1.5.3 und 2.3].

Abhängig vom Verlauf des Feldes und der Mikrowellenfrequenz nimmt die Resonanzzone, das ist der Raumbereich, in dem die Resonanzbedingung (2.2) erfüllt ist, eine spezifische Gestalt an. Bei klassischen, sogenannten Minimum-B-Konfigurationen wie der ECRIS 1, in denen die Feldstärke entlang der Symmetrieachse kein Plateau wie in Abbildung 2.5, sondern einen parabelähnlichen Verlauf hat [Vit96], bilden die

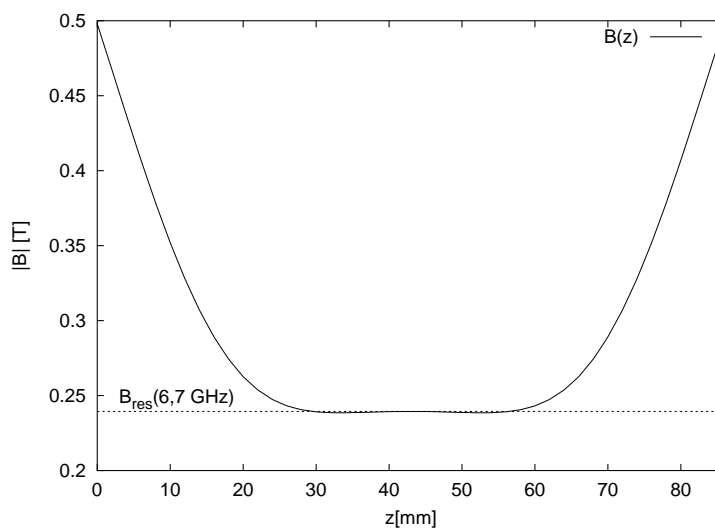


Abbildung 2.5: Magnetfeldstärke der ECRIS 3 in der Plasmakammer entlang der Symmetrieachse. Das Magnetfeld wurde so gestaltet, daß bei der gegebenen Resonatorfrequenz von 6,7 GHz in einem möglichst großen Volumen die EZR-Bedingung (2.3) erfüllt ist.

Punkte mit der Resonanzfeldstärke

$$B_{res}(f_{rf}) := 2\pi \frac{m_e}{e} f_{rf} \quad (2.3)$$

eine Hyperfläche etwa in der Form eines Ellipsoids. Senkt man die Mikrowellenfrequenz, so schrumpft die Resonanzfläche, bis sie bei $B_{res} = B_{min}$ punktförmig wird.

Zu heizende Elektronen passieren derartige Resonanzflächen auf ihrer Helixbahn jedoch immer nur für kurze Augenblicke. Von ALTON und SMITHE wurde daher vorgeschlagen [AS94], das Magnetfeld so zu formen, daß im Kammerinneren ein möglichst großes Volumen mit homogenem Feld entsteht (siehe Abbildung 2.5), in dem sich die Elektronen möglichst lange aufhalten, um geheizt zu werden. Dieses Konzept wurde in der ECRIS 3 erfolgreich umgesetzt [Rü97, Mü00]. (Allerdings unterscheidet sich die ECRIS 3 von der von ALTON und SMITHE vorgeschlagenen Konfiguration dadurch, daß der radiale Einschluß durch einen Hexapol (s.u.) realisiert wurde³.)

Aufgrund der Form des Magnetfeldverlaufes entlang der Symmetrieachse wird sie im Gegensatz zur Minimum-B-Konfiguration auch als Plateau-Quelle, kurz PECRIS 3, bezeichnet [Mü00].

Plasmaeinschluß. Der Plasmaeinschluß ist die zweite Aufgabe der Magnetfelder. Er beruht allgemein auf zwei Effekten: der Bindung geladener Teilchen an eine Feldlinie (siehe Abbildung 2.9 auf Seite 17) und der Beschleunigung ihres Führungszentrums in Richtung schwächeren Magnetfeldes (siehe Abschnitt 2.3.1).

Axial wird das Plasma durch nach außen ansteigende Feldstärken in Form sogenannter *Spiegelfelder* eingeschlossen (siehe Abschnitt 2.3.1.2). Diese werden allgemein entweder durch ringförmig angeordnete Permanentmagnete mit radialer Magnetisierung (so auch in der ECRIS 3, siehe die beiden äußersten Ringe in den Abbildungen 2.1 und 2.2) oder durch stromdurchflossene, z.T. supraleitende Spulen oder Kombinationen beider erzeugt, die koaxial zur Zylinderachse der Plasmakammer angebracht werden. Dadurch wird ein rotationssymmetrisches Feld erzeugt, das auch in Nähe der Symmetrieachse hauptsächlich parallel zu dieser verläuft (siehe Abbildung 2.9 auf Seite 17). Genau auf der Symmetrieachse verschwinden die dazu senkrechten Magnetfeldkomponenten.

Die Stärke eines so erzeugten Feldes nimmt von der Symmetrieachse aus *in radialer Richtung* ab und ein Teil der Feldlinien läuft unerwünschterweise auf die Zylindermantelwände der Plasmakammer. Daher werden zur Verstärkung⁴ des Einschlusses in radialer Richtung um die Zylindermantelfläche herum magnetische

³ALTON und SMITHE untersuchten mit ihren PIC-Simulationen (siehe Abschnitt 3.1) mehrere Multipolstrukturen, die primär für den radialen Einschluß benötigt werden (s.u.). Sie kommen zum Schluß, daß die Anzahl der im homogenen Magnetfeldbereich eingeschlossenen Elektronen mit der Zahl der Multipole ansteigt [AS94]. HEINEN kam jedoch bzgl. des totalen Einschlusses zu entgegengesetztem Ergebnis [Hei97, Kap. V.3]

⁴Ein gewisser, aber unzureichender, radialer Einschluß erfolgt schon dadurch, daß die geladenen Plasmateilchen durch das Magnetfeld auf Helixbahnen gezwungen werden (siehe Abschnitt 2.3.1).

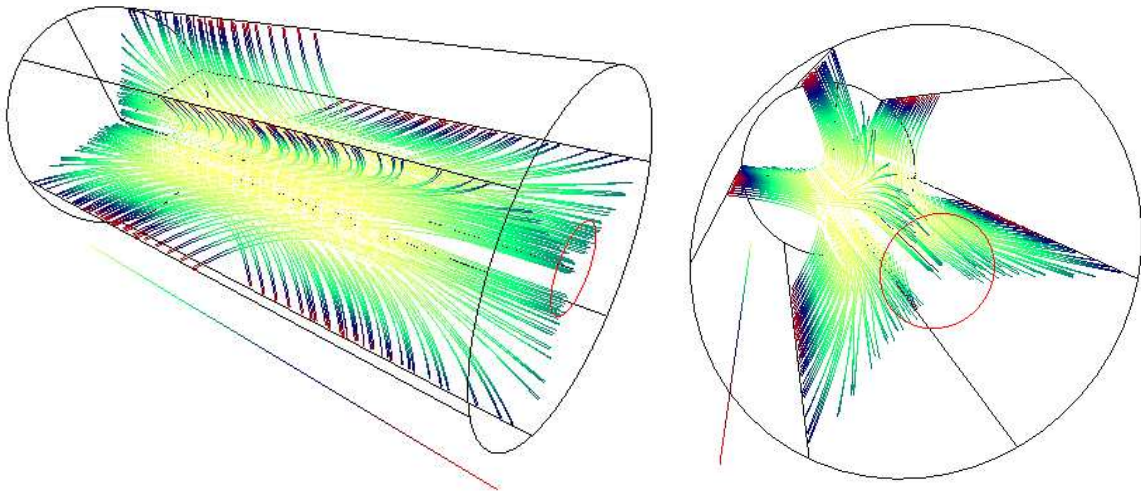


Abbildung 2.6: Screenshots der 3-dimensionalen interaktiven VRML-Computervisualisierung (siehe Anhang D.2.2), in der die Feldlinien, die den Plasmakernbereich durchlaufen, innerhalb der Plasmakammer dargestellt sind. Die beiden schwarzen Kreise markieren die Zylinderstirnflächen der Plasmakammer. Die schwarzen Verbindungsgeraden zwischen diesen kennzeichnen die Lage der Pole der Hexapolstruktur, auf welche die Feldlinien in radialer Richtung auch zulaufen. Jeweils unten links neben der Plasmakammer ist eine Farbskala als Gerade eingezeichnet. Die (abgesehen von der Verzerrung durch die 2D-Projektion) lineare Skala kodiert die Magnetfeldstärke entlang der Feldlinien, die bei 0,24 T (gelb) beginnt und über grün und blau bis 0,76 T (rot) läuft. Der rote Kreis markiert die Extraktionsöffnung.

Multipolstrukturen (siehe den Hexapol in Abbildung 2.2) angebracht. Dadurch steigt die Feldstärke entlang der Feldlinien, die unvermeidbar auf die Zylindermantelwände treffen, in diese Richtung an (siehe Abbildungen 2.4 und 2.6), so daß ein Teil der dort entlang flüchtenden Teilchen reflektiert wird.

Abbildung 2.2 zeigt zwei Querschnitte durch die Magnetstruktur der ECRIS 3, die nur aus Permanentmagneten (NdFeB-Legierungen der Vacuumschmelze GmbH, Hanau, Typ VACODYM 344/370 HR [Vac96]) besteht und mit einer Hexapolstruktur für den radialen Plasmaeinschluß versehen ist. In Abbildung 2.3 und 2.4 sind Projektionen der Vektoren des superponierten, stark inhomogenen Gesamtfeldes dargestellt. Abbildung 2.6 zeigt zwei perspektivische Darstellungen einiger Feldlinien, die aus dem zentralen Plasmabereich herausführen. Bei allen Darstellungen handelt es sich um die berechneten Felder.

2.1.3 Extraktion

Die Extraktion der Ionen erfolgt durch eine koaxiale Öffnung in einer der Stirnflächen der zylindrischen Plasmakammer, der sogenannten *Plasmaelektrode*. Hinter dieser befindet sich die rohrförmige *Extraktionselektrode* (siehe Abbildung 2.1), die gegenüber der Plasmakammer und der Plasmaelektrode auf einem (bei ECRIS 3 ca. 20 kV großen) negativen elektrischen Potential liegt. Dadurch bildet sich vor allem im Raum zwischen diesen Elektroden ein elektrisches Feld, das die

Ionen, die dort hinein gelangen, aus der Plasmakammer heraus in Richtung der Extraktionselektrode beschleunigt. In die Plasmakammer reicht dieses Feld jedoch maximal nur wenige Zehntelmillimeter hinein, so daß nur Ionen extrahiert werden, die (zufällig) in diesen Extraktionsbereich gelangen.

Durch die Geometrie der beiden Elektroden, deren Abstand und die Extraktionsspannung kann Einfluß auf die Qualität des extrahierten Ionenstrahls genommen werden. Indirekt können diese Parameter auch den Elektronenhaushalt des Plasmas durch die Generation von Sekundärelektronen beeinflussen, die durch auftreffende Ionen aus der Extraktionselektrode geschlagen werden.

2.1.4 Weitere Maßnahmen zur Leistungssteigerung

Die Konstruktionselemente Plasmakammer, Magnetfeld und Mikrowelle verlangen beim Quellenentwurf gegenseitige Abstimmung. So gibt es bei gegebener Dimensionierung der Plasmakammer nur diskrete Resonatorfrequenzen und -moden, wovon die ausgewählten gut zum Magnetfeld passen müssen. Das heißt, daß die Platteaufeldstärke der Mikrowellenfrequenz entsprechen sollte und daß in den Bäuchen der stehenden Mikrowelle die elektrische Feldkomponente für eine effektive EZRH möglichst senkrecht zum statischen Magnetfeld sein sollte. Gleichzeitig muß der Plasmaeinschluß so gut sein, daß er die Ionen lange genug einschließt, daß diese möglichst oft ionisiert werden, sie andererseits aber auch – möglichst in Richtung der Extraktion – entkommen läßt. Allein die optimale Form des Magnetfeldes ist bei der Planung einer EZR-Ionenquelle (bisher) nur vage abzuschätzen. Daher wird dieses, wenn möglich, auch mit Spulen erzeugt, um während des Betriebes experimentell optimieren zu können.

Bei der Erzeugung großer Ströme hochgeladener Ionen spielen die Elektronen immer die entscheidendste Rolle, da praktisch nur durch ihre Stöße mit den Atomen und Ionen der Ionisationsgrad des Plasmas gesteigert wird (siehe Abschnitt 3.5.1). Wichtig sind daher Elektronenenergien mehrerer 100 eV (siehe Wirkungsquerschnitte in Abbildung 3.11 auf Seite 61) und vor allem eine möglichst hohe Elektronendichte.

Primär werden Elektronen durch die Elektronenstoßionisation im Plasma erzeugt. Zur Steigerung ihrer Dichte werden aber noch weitere Techniken angewendet. Dazu gehört die direkte Injektion aus **Elektronenkanonen** [OUZ99, Täs02]. Vorteil dieser Technik ist, daß Elektronenstrom und -energie optimiert werden können. Der technische Aufwand ist jedoch nicht zu unterschätzen [Täs02].

Als passive Elektronenquelle dient immer auch die Plasmakammerwand, von der Sekundärelektronen durch auftreffende Plasmateilchen emittiert werden. Durch die Abdeckung mit einem Quarzglaszylinder konnten schon in ECRIS 1 Verbesserungen der extrahierten Ströme um Faktor 2 bis 3 erzielt werden [Vit96]. An anderen Quellen wurden auch Erfolge durch die **Beschichtung der Zylinderwände** vor allem mit SiO_2 und Al_2O_3 erzielt [XL94, Mel99, KNH⁺02], [Gel96, Kap. 6.2.5.2]. Diese

Materialien haben relativ hohe Sekundärelektronenemissionskoeffizienten⁵.

Eine dritte experimentell erfolgreiche Möglichkeit zur Steuerung des Elektronenhaushaltes ist der Einsatz der sogenannten **Biased Disk**. Hierbei handelt es sich im allgemeinen um eine Metall(kreis)scheibe⁶, die zentral auf der Gaseinlaßseite der Plasmakammer gegenüber der Extraktionsöffnung angebracht ist und auf ein eigenes, variables elektrisches Potential gelegt wird. Mit zunehmender negativer Spannung gegenüber der Plasmakammer werden erstens Elektronen, die dem Plasma sonst in dieser Richtung entkämen, dorthin zurück reflektiert, und zweitens Sekundärelektronen beim Auftreffen von Ionen oder hochenergetischen Elektronen ausgelöst [MSH⁺02].

Eine neueres Verfahren stellt die **Multifrequenz-EZR-Heizung** dar. Durch das Einstrahlen weiterer Frequenzen unterhalb der Zyklotronfrequenz

$$\omega_0 = \frac{e}{m_e} B_{plateau}$$

können auch sehr hochenergetische Elektronen geheizt werden, die aufgrund ihrer relativistischen Massenzunahme nicht mehr in Resonanz mit der primären Mikrowellenfrequenz $2\pi\omega_0$ sind [HRO⁺99].

Die obigen Techniken finden alle in der 18 GHz-PECRIS 5 Verwendung, die derzeit in dieser Arbeitsgruppe entwickelt wird [Täs02, Alb02].

2.2 Ladungszustandsverteilung im Gleichgewicht

Die Plasmateilchen in einer ECRIS (Elektronen, neutrale Atome und Moleküle sowie positiv geladene Ionen) unterliegen einer Vielzahl von statistischen Prozessen, die häufig mit Ladungsänderungen verbunden sind. Dazu gehören verschiedene Ionisations- und Rekombinationsprozesse sowie der Ladungsaustausch zwischen Ionen und Neutralteilchen. (Die Details dieser atomphysikalischen Prozesse werden im Rahmen der Modellbeschreibung in Kapitel 3.5 erläutert.)

Nach dem Einschalten der Mikrowelle werden die in jedem Gas (unter Normalbedingungen in vernachlässigbarer Menge) vorhandenen Elektronen EZR-geheizt und beginnen, nachdem sie genügend Energie gewonnen haben, durch Stöße weitere Elektronen aus den Hüllen der Atome, Moleküle und Ionen zu schlagen. Hierdurch wird eine Lawine ausgelöst, in deren Folge die Elektronendichte und der Ionisationsgrad des Plasmas ansteigen. Dies wird jedoch zunehmend kompensiert, so daß das Plasma nicht vollständig ionisiert werden kann. Diese Kompensation

⁵ XIE und LYNEIS geben als nicht genauer spezifizierten 'secondary emission coefficient' für SiO₂ den Wert 4 und für Al₂O₃ die Zahl 9 an [XL94]. Gleiche Werte findet man auch in [Stö94, Tab. 30.3/6] für die maximale Sekundärelektronenausbeute pro Geschoßelektron. Für reines Si gibt [Stö98, Tab. 30.3/5] den Wert 1,1 an. Weitere Werte findet man in [Wea84, Tab. E-357].

⁶MIRONOV *et al.* haben aus ihrem Experiment, bei dem sie vor der Kreisscheibe zusätzlich eine Ringelektrode mit eigenem elektrischen Potential montierten, geschlossen, daß die genaue Form der Elektrode nicht sehr entscheidend sein sollte [MSH⁺02].

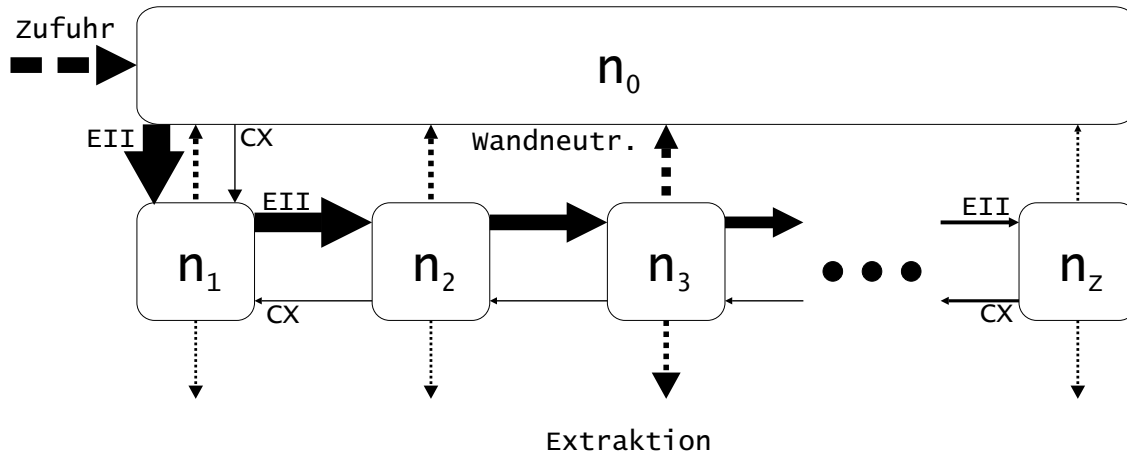


Abbildung 2.7: Die wichtigsten Übergänge zwischen den Dichten n_z der verschiedenen Ionenpezies der Ladungszustände z einer einzigen Gassorte mit der Atomzahl Z , gemittelt über das gesamte Plasma. Durch Elektronenstoßionisation (*electron impact ionization*, EII) werden Teilchen (weiter-)ionisiert. Der wichtigste *ladungsändernde* Prozeß, der dem entgegenwirkt, ist der Ladungsaustausch (*charge exchange*, CX). Dominanter sind jedoch mit dem Abtransport (gestrichelte Pfeile) verbundene Verluste der Ionen durch Neutralisation an der Plasmakammerwand und durch Extraktion. Der Teilchenverlust durch Extraktion wird durch die Neutralgaszufuhr kompensiert. Ladungsändernde Prozesse mit mehr als einfacher Änderung der Ladungszahl sind ebenfalls möglich, der Einfachheit halber jedoch nicht eingezeichnet. Im Gleichgewicht ist für jede dieser Dichten die Summe der Zu- und Abflüsse gleich Null.

erfolgt zu einem sehr geringen Teil durch Rekombinationsprozesse, vor allem aber durch den stetigen Plasmaabtransport an die Wände, wo die Ionen neutralisiert werden, und in die Extraktion. Typischerweise stellt sich daher nach einigen zehn Millisekunden ein Gleichgewicht zwischen den Prozessen, die die Dichte einer bestimmten Teilchenspezies auf- bzw. abbauen, und somit auch zwischen den verschiedenen Teilchendichten ein.

Abbildung 2.7 zeigt schematisch die mit den wichtigsten Prozessen verbundenen Übergänge zwischen den Dichten n_z der Ionisationszustände z einer einzigen Gassorte mit der Kernladungszahl Z .

Die Ladungszustandsverteilung (*charge state distribution*, CSD) – darunter wird allgemein das (zahlenmäßige) Verhältnis der Teilchendichten⁷ der verschiedenen Atome, Moleküle und Ionen im Plasma verstanden – spiegelt sich auch im Spektrum der extrahierten Ströme wieder. Abbildung 2.8 auf der nächsten Seite zeigt ein solches Spektrum, das typisch für die ECRIS 3 ist. Deutlich zu erkennen ist die Vielzahl verschiedener Ionenspezies.

Die CSD und das Extraktionsspektrum hängen empfindlich von experimentellen Parametern wie Mikrowellenfrequenz und -leistung, Gaszufuhr und Gasgemisch sowie dem genauen Magnetfeld ab.

Die Modellierung der orts aufgelösten CSD und ihre Abbildung auf die extrahierten Ströme der verschiedenen Ladungszustände stehen im Zentrum dieser Arbeit.

⁷Gelegentlich findet man diese Bezeichnung auch für die extrahierten Ströme.

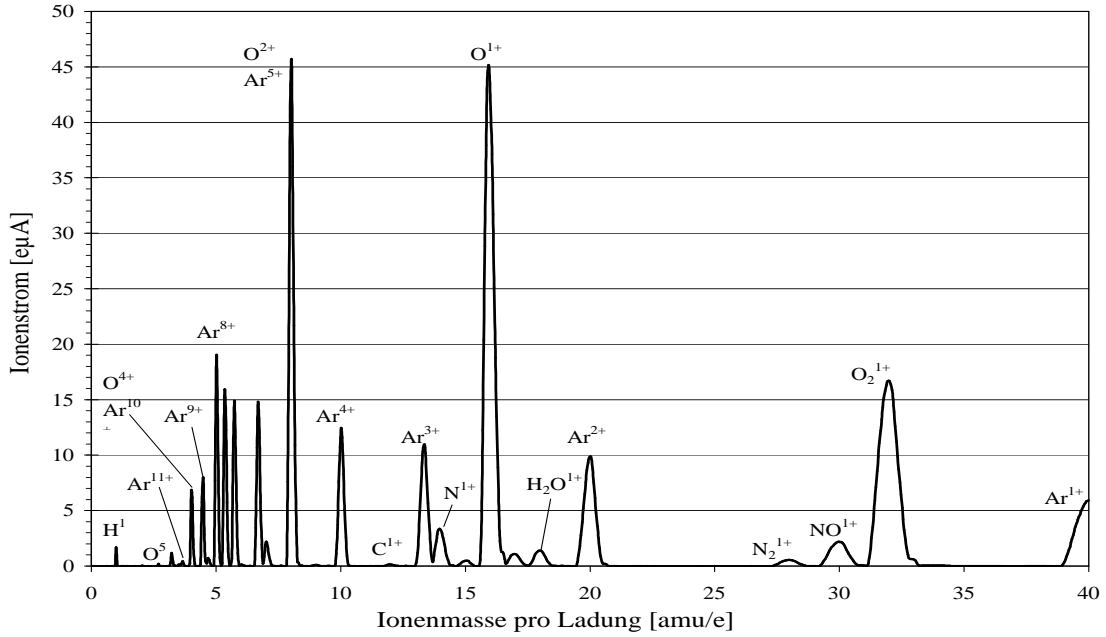


Abbildung 2.8: Typisches Extraktionsspektrum der auf Ar^{8+} optimierten ECRIS 3 im CW-Betrieb. Freundlichst von L. MÜLLER aus [Mü00] zur Verfügung gestellt.

2.3 Plasmatransport und elastische Stöße

Neben den ladungsändernden Prozessen spielt der Transport der Plasmateilchen eine maßgebliche Rolle für die Ladungszustandsverteilung des Plasmas. Da die Bewegung elektrisch geladener Teilchen in Feldern in Lehrbüchern der Plasmaphysik im allgemeinen detailliert hergeleitet wird (siehe z.B. [Ses73, Che74, BS92, GR98, Keg98]), werden hier nur die Ergebnisse zusammengestellt, die zum Verständnis des in Kapitel 3 vorgestellten Modells benötigt werden.

2.3.1 Einzelteilchenbewegung in Magnetfeldern

Die in der vorliegenden Arbeit behandelten Plasmen sind stets durch Magnetfelder $\vec{B}(\vec{r})$ eingeschlossen. Um deren Einfluß zu verstehen, soll zunächst vereinfachend die COULOMB-Wechselwirkung der geladenen Teilchen vernachlässigt werden. Auf Teilchen der Ladung q und Geschwindigkeit \vec{v} wirkt dann die LORENTZ-Kraft

$$\vec{F} = q \cdot \vec{v} \times \vec{B} \quad (2.4)$$

Einfache analytische Betrachtungen der Bewegungsgleichung zeigen, daß dies zu einer Spiralbahn führt, die man geeigneterweise in eine Kreisbewegung um die Magnetfeldlinie und eine Längsbewegung des sogenannten *Führungszentrums* (*guiding center*) zerlegt:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_{gc}(t) + \vec{r}_{cycl}(t)$$

2.3.1.1 Homogenes Magnetfeld

Im homogenen Magnetfeld bewegt sich das Führungszentrum mit konstanter Geschwindigkeit gradlinig, parallel zu \vec{B} durch den Raum, und die Kreisbewegung bleibt konstant. In einem kartesischen Koordinatensystem, in dem das Magnetfeld parallel zur z-Achse liegt, gilt für die Position $\vec{r} \equiv (x, y, z)$ eines Teilchens [GR98, Gl. (2.11)]:

$$x = x_{gc} + r_c \cdot \sin(\omega t + \varphi_0) \quad (2.5)$$

$$y = y_{gc} \pm r_c \cdot \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (2.6)$$

$$z = z_{gc} = z_0 + v_{z0} \cdot t \quad (2.7)$$

mit

$$v_{\perp} = \sqrt{v_{x0}^2 + v_{y0}^2} \quad \text{Rotationsgeschwindigkeit} \quad (2.8)$$

$$\varphi_0 = \mp \arctan \frac{v_{y0}}{v_{x0}} \quad \text{Startphase [GR98, s. bei Gl. (2.8)]} \quad (2.9)$$

$$\omega = \frac{|q|}{m} |\vec{B}| \quad \text{LARMOR- oder Zyklotronfrequenz} \quad (2.10)$$

$$r_c = \frac{v_{\perp}}{\omega} \quad \text{Gyrations- oder Zyklotronradius} \quad (2.11)$$

Bei den Symbolen \pm und \mp steht das obere jeweils für positiv und das untere für negativ geladene Teilchen. Des weiteren sind (x_0, y_0, z_0) der Startort und (v_{x0}, v_{y0}, v_{z0}) die Geschwindigkeit des Teilchens zur Zeit $t = 0$. Bei x_{gc} , y_{gc} und z_{gc} handelt es sich um die Koordinaten des Führungszentrums. Generell gilt für dessen Koordinaten in der Rotationsebene

$$x_{gc} = x \pm \frac{v_y}{\omega} \quad (2.12)$$

$$y_{gc} = y \mp \frac{v_x}{\omega} \quad (2.13)$$

Da sich im Falle eines homogenen Magnetfeldes einfach zeigen läßt, daß sie zeitlich konstant sind, kann in (2.5) auch konkret

$$x_{gc} = x_0 \pm \frac{v_{y0}}{\omega}$$

$$y_{gc} = y_0 \mp \frac{v_{x0}}{\omega}$$

eingesetzt werden. Das Führungszentrum bewegt sich also mit konstanter Geschwindigkeit

$$\vec{v}_{gc} = \dot{\vec{r}}_{gc} = (0, 0, v_{z0}) \quad (2.14)$$

2.3.1.2 Inhomogene Magnetfelder, insbesondere Spiegelfelder

In inhomogenen Feldern wie in der simulierten ECRIS 3 ist die Bewegungsgleichung eines geladenen Teilchens nicht mehr analytisch exakt zu lösen. In den Fällen jedoch,

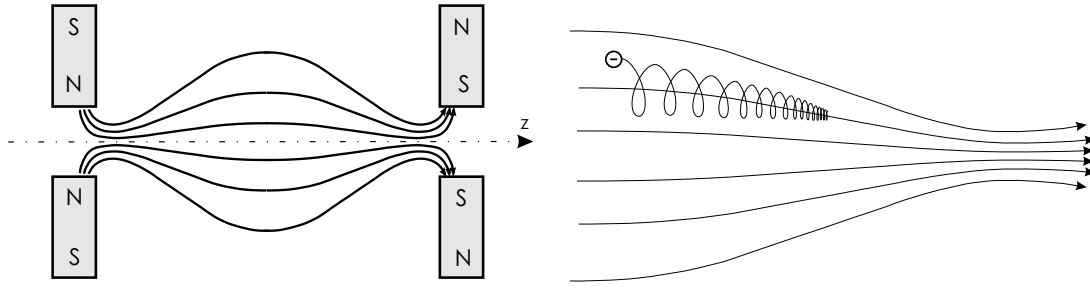


Abbildung 2.9: Links: Skizze des Verlaufs der Magnetfeldlinien eines Spiegelfeldes für den axialen Plasmaanschluß, das wie in ECRIS 3 von zwei Ringen aus Permanentmagneten um die z-Achse (wie z.B. die beiden axial äußersten Ringe der ECRIS 3 in Abbildung 2.1 auf Seite 6) erzeugt wird. Rechts: Skizze zur Darstellung der Abbremsung eines elektrisch geladenen Teilchens, dessen Führungszentrum sich (in einem Spiegelfeld) in Richtung stärker werdender Feldstärke bewegt.

in denen sich das Feld über Distanzen in der Größenordnung des Zyklotronradius r_c nur vernachlässigbar ändert, d.h.

$$r_c \cdot |\vec{\nabla} B| \ll B, \quad (2.15)$$

kann die ALFVÉNSche Näherung zu Hilfe genommen werden, die darauf beruht, daß man die Teilchenbewegung wieder in eine Gyration- und eine Driftbewegung zerlegt und dann nur eine genäherte Bewegungsgleichung für das Führungszentrum löst [Keg98]. Dabei lassen sich drei Spezialfälle der Feldinhomogenitäten isoliert betrachten, deren Ergebnisse (Gradientendrift, Krümmungsdift, Spiegelung) im allgemeinen Fall überlagert werden können [GR98].

Spiegelfelder. Von besonderer Bedeutung für die ECRIS-Plasmen sind die sogenannten Spiegelfelder (siehe Abbildung 2.9), bei denen der Magnetfeldgradient quasi parallel zur Magnetfeldrichtung verläuft. Sie werden durch Stromspulen oder ringförmige Permanentmagnetanordnungen wie in Abbildung 2.9 erzeugt.

Durch seine Rotationsbewegung um die Feldlinie stellt ein geladenes Teilchen stets auch einen Kreisstrom $I = |q| \omega / (2\pi)$ um die Fläche $A = \pi r_c^2$ dar, dem das magnetische Moment [BS92, Gl. (2.136)]

$$\mu := I \cdot A = \frac{m v_{\perp}^2}{2B} = \frac{W_{\perp}}{B} \quad (2.16)$$

zugeordnet werden kann. Hierbei handelt es sich um eine adiabatische Invariante [BS92], d.h., daß das magnetische Moment in statischen (oder sich im Vergleich zu ω nur langsam ändernden) Feldern und bei langsamen Driftbewegungen als zeitlich konstant betrachtet werden kann.

Aus der Konstanz sowohl von μ als auch der kinetischen Energie $W = W_{\parallel} + W_{\perp}$ in magnetischen Feldern folgt mit (2.16) aus

$$W_{\parallel} = W - \mu B, \quad (2.17)$$

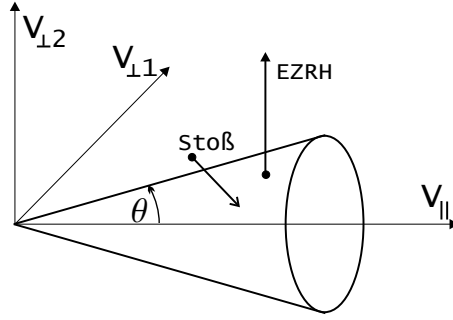


Abbildung 2.10: Der Verlustkegel im Geschwindigkeitsraum für einen Ort \vec{r} im magnetischen Spiegelfeld. Alle geladenen Teilchen deren Geschwindigkeitsvektoren bei \vec{r} innerhalb dieses Kegels liegen, können nicht gespiegelt werden und entkommen dem Plasma, sofern sie nicht vorher aus dem Kegel herausgestoßen werden. Elektronen werden durch die EZR-Heizung, die hauptsächlich die Geschwindigkeit senkrecht zum Magnetfeld erhöht, aus dem Fluchtkegel heraus geholt. Durch Stöße können sie aber auch wieder hineingelangen. Der Öffnungswinkel θ ist durch (2.19) bestimmt.

daß die Parallelgeschwindigkeit $v_{||} = \sqrt{2W_{||}/m}$ mit zunehmender Magnetfeldstärke abnehmen muß. Bewegt sich ein geladenes Teilchen also in Richtung zunehmender Feldstärke (und hat dabei gleichzeitig eine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu \vec{B}), so wird immer mehr seiner kinetischen Translationsenergie $W_{||}$ in Rotationsenergie W_{\perp} umgewandelt.

Mit dieser Abbremsung in Feldlinienrichtung ist die Kraft $F_{||}$ verbunden. Aus der LORENTZ-Kraft ergibt sich, gemittelt über eine Umdrehung, unabhängig vom Vorzeichen und Betrag der Teilchenladung [GR98, Gl. (3.19)]

$$\langle F_{||} \rangle = -\mu \frac{\partial B}{\partial s} = -\frac{m v_{\perp}^2}{2B} \frac{\partial B}{\partial s}, \quad (2.18)$$

wobei $\partial B/\partial s$ der Gradient der Feldstärke entlang der Feldlinie ist. Diese Kraft bleibt auch erhalten, wenn $v_{||} = 0$ erreicht ist, da es bei Existenz eines Feldgradienten immer auch eine Feldkomponente senkrecht zur Feldlinie gibt.

Damit ein geladenes Teilchen tatsächlich gespiegelt wird, muß nach (2.17) die Magnetfeldstärke entlang der Feldlinie mindestens so groß werden, daß $W_{||}$ verschwindet. Daraus läßt sich umgekehrt bei gegebener Feldstärke B an einem Ort \vec{r} und maximaler Feldstärke B_{max} entlang der Feldlinie durch \vec{r} das Spiegelkriterium [Che74, Gl. (2-46)]

$$\sin^2 \theta \geq \frac{B(\vec{r})}{B_{max}} \quad (2.19)$$

aufstellen, wobei $\theta \equiv \arctan(v_{\perp}/v_{||})$ der Winkel zwischen der Teilchengeschwindigkeit $\vec{v} \equiv (v_{||}, v_{\perp})$ und \vec{B} ist. Diese Bedingung definiert im Geschwindigkeitsraum den sogenannten *Verlustkegel* (siehe Abbildung 2.10), dessen Öffnungswinkel also durch das Verhältnis zwischen der lokalen und der entlang der Feldlinie maximalen Magnetfeldstärke gegeben ist. Alle geladenen Teilchen am Ort \vec{r} , deren Geschwindigkeitsvektor in diesem Kegel liegt, können – unabhängig von ihrer Ladung und ihrer Masse – vom Magnetfeld in ihrer Parallelbewegung nicht vollständig abgebremst werden und treffen auf die Wand. Als Gütemaß eines Spiegelfeldes für dessen

magnetischen Einschluß wird daher oft das Verhältnis zwischen maximaler und minimaler Feldstärke, das sogenannte *Spiegelverhältnis*, angegeben.

Der Anteil P_{loss}^{mirr} der Teilchen einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung, die sich im Verlustkegel befinden, ist dann gleich dem Verhältnis des Raumwinkels, der vom Verlustkegel erfaßt wird, und dem Raumwinkel 2π des Halbraumes⁸:

$$P_{loss}^{mirr} = 1 - \cos \theta \quad (2.20)$$

Mit (2.19) und $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ folgt daraus als Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein zufälliges, geladenes Teilchen aus einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung, das sich in einem magnetischen Spiegelfeld der maximalen Feldstärke B_{max} an einem Ort der Feldstärke B befindet und eine positive Geschwindigkeitskomponente in Richtung B_{max} hat, dem Spiegelfeld entkommen wird⁹:

$$P_{loss}^{mirr}(B, B_{max}) = 1 - \sqrt{1 - \frac{B}{B_{max}}}. \quad (2.21)$$

2.3.1.3 Magnetische und elektrische Felder

Existiert neben einem magnetischen auch ein elektrostatisches Feld \vec{E} , so ergibt die Lösung der LORENTZ-Kraft (2.4) für die Geschwindigkeit des Führungszentrums [GR98, Gl. (2.21)]

$$\vec{v}_{gc} = v_{||} \frac{\vec{B}}{B} + \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{B^2}, \quad (2.22)$$

wobei $v_{||}$ die Teilchengeschwindigkeit parallel zum Magnetfeld ist. Sie reagiert auf die zu \vec{B} parallele Komponente $E_{||}$ von \vec{E} gem.

$$\frac{dv_{||}}{dt} = \frac{q}{m} E_{||}. \quad (2.23)$$

Der zweite Term von (2.22) wird als $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift bezeichnet. Da er unabhängig von Ladung und Masse der Teilchen ist, driftet also das gesamte Plasma durch elektrostatische Felder mit derselben Geschwindigkeit. Die Ladungstrennung erfolgt nur entlang \vec{B} .

2.3.2 Coulomb-Stöße

Neben dem Einfluß des statischen Magnetfeldes \vec{B} erfährt ein Plasmateilchen der Ladung q am Ort \vec{r} durch jedes andere geladene Teilchen i der Ladung q_i am Ort \vec{r}_i

⁸Eine Berechnungsmöglichkeit für (2.20) läuft über die Kugeloberfläche $O = 2\pi Rh$ eines Kugelabschnittes (siehe [BS96, Tab. 0.5, S. 12 unten]). Dabei ist $R = 1$ der Kugelradius und $h = R(1 - \cos \theta)$ die Höhe des Abschnittes.

⁹Weitere Voraussetzung ist natürlich, daß dieses Teilchen keine geschwindigkeitsändernde Stöße mehr erfährt.

permanent die COULOMB-Kräfte

$$\vec{F}_i = \frac{q q_i}{4\pi \epsilon_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3}, \quad (2.24)$$

so daß (bei Abwesenheit weiterer elektrischer Felder) mit (2.4) insgesamt die Kraft

$$\vec{F} = q \cdot \vec{v} \times \vec{B} + \frac{q}{4\pi \epsilon_0} \sum_i q_i \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} \quad (2.25)$$

auf dieses Teilchen wirkt.

Während die LORENTZ-Kraft (2.4) bei Bekanntheit aller Daten eines einzelnen Teilchens bestimmbar ist, ist der exakte Einfluß aller anderen geladenen Teilchen aufgrund ihrer hohen Anzahl ($\gg 10^{14}$) und der Unkenntnis ihrer genauen Positionen \vec{r}_i mit (2.24) auch numerisch nicht individuell zu verfolgen. Daher wird in der Plasmaphysik die COULOMB-Wechselwirkung mit Hilfe aus der Streutheorie bekannter Methoden statistisch beschrieben.

Einzelstöße

Einen ersten Ansatz dazu bietet die RUTHERFORD-Streuformel [Kne90]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left[\frac{q q'}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{4 m v^2/2} \right]^2 \sin^{-4}(\Theta/2) \quad (2.26)$$

für den differentiellen Wirkungsquerschnitt $(d\sigma/d\Omega)$ der Ablenkung eines geladenen Teilchens (Masse m , Ladung q , Geschwindigkeit v) um den Winkel Θ (in das Raumwinkelement $d\Omega$) am COULOMB-Feld eines Targets der Ladung q' mit der im Vergleich zum Projektil sehr viel schwereren Masse $M \gg m$. Ist die Targetmasse nicht wesentlich größer als die des Projektils, so gilt (2.26) auch im Schwerpunktsystem, wenn man m durch die reduzierte Masse $\mu := m \cdot M/(m + M)$ und v durch den Betrag der Relativgeschwindigkeit ersetzt [MK92].

Das Integral von (2.26) über den gesamten Raumwinkel $\Omega = 4\pi$ (entsprechend den Ablenkungswinkeln Θ von 0 bis π), d.h. der totale Wirkungsquerschnitt, divergiert jedoch aufgrund der unbegrenzten Reichweite der COULOMB-Kraft, so daß dieser klassische (differentielle) Wirkungsquerschnitt beim Versuch, den Einfluß der COULOMB-Wechselwirkung zu quantifizieren, nur eine unbefriedigende Hilfe bleibt¹⁰.

In vielen Lehrbüchern, z.B. [Che74, GR98], findet man für COULOMB-Stöße daher auch geometrische Wirkungsquerschnitte, die darauf beruhen, daß der Bahnparameter b_0 bestimmt wird, bei dem eine Ablenkung von 90° stattfindet (siehe Abbildung

¹⁰Die RUTHERFORD-Streuformel (2.26) kann trotz der Divergenz für $\Theta \rightarrow 0$ zur Abschätzung von Stoßwahrscheinlichkeiten herangezogen werden, wenn man nur Ablenkungswinkel berücksichtigt, die größer als ein Mindestwinkel Θ_{min} sind. Sinnvoll für Θ_{min} ist dann der Ablenkungswinkel, der zu dem Stoß gehört, bei welchem der Stoßparameter gleich der DEBYE-Länge ist, da noch weiter entfernte Begegnungen aufgrund der DEBYE-Abschirmung ohne Wirkung auf die Stoßpartner bleiben.

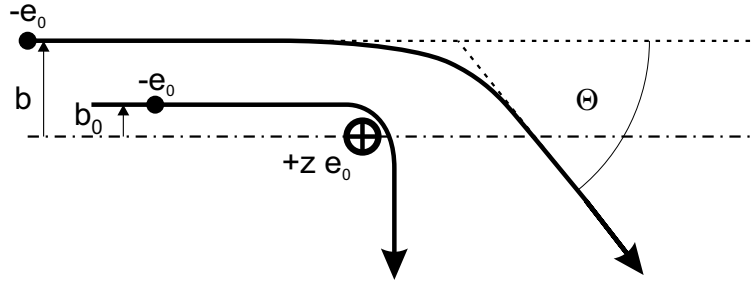


Abbildung 2.11: Skizze zweier Elektronentrajektorien, die mit unterschiedlichem Bahnparameter b auf ein z -fach geladenes Ion treffen und von diesem abgelenkt werden. Bei $b = b_0$ beträgt die Ablenkung $\Theta = 90^\circ$.

2.11). Für Elektronen (Masse m_e , Geschwindigkeit v) ergibt sich so für den Stoß an einem im Vergleich zum Elektron unendlich schweren Target mit der Ladungszahl z [GR98, Gl. (11.4)]:

$$\sigma_{90} := \pi b_0^2 = \frac{z^2 e^4}{16\pi \epsilon_0^2 m_e^2 v^4} = \frac{z^2 e^4}{64\pi \epsilon_0^2 E^2} \quad (2.27)$$

Dieser Wirkungsquerschnitt erfaßt damit nur Stöße mit Ablenkwinkeln, die größer 90° sind. Für ein Elektron, das sich durch z -fach geladene Ionen der Dichte n_i bewegt, folgt aus (2.27) mit (A.1) die Stoßrate

$$\tau_{90}^{-1} = n_i \sigma_{90} v = \frac{z^2 n_i e^4}{16\pi \epsilon_0^2 m_e^2 v^3} \quad (2.28)$$

Viele Stöße mit kleinen Ablenkungen, SPITZER-Stöße

In einer statistischen Behandlung der Stöße mit Ablenkwinkeln $\Theta < 90^\circ$, d.h. mit Bahnparametern $b > b_0$, hat SPITZER jedoch herausgestellt, daß die kumulative Wirkung vieler solcher Stöße größer als die einzelner Stöße mit $\Theta \geq 90^\circ$ ist [Spi56].

Betrachtet man sehr viele Testelektronen mit anfänglich gleicher Geschwindigkeit \vec{v} , die statistisch an quasi ruhenden Ionen stoßen (kurz ei-Stöße), so ist deren mittlere¹¹ Ablenkung $\langle \Delta v_\perp \rangle$ senkrecht zur ursprünglichen Flugrichtung gleich Null, da die Ablenkrichtungen symmetrisch verteilt sind. Im Gegensatz dazu wächst die mittlere *quadratische* Ablenkung $\langle (\Delta v_\perp)^2 \rangle$ mit der Zeit an, bis sich eine zeitlich konstante Geschwindigkeitsverteilung eingestellt hat¹².

Für $\langle (\Delta v_\perp)^2 \rangle$ hat SPITZER die Änderung pro Zeiteinheit¹³ $d\langle (\Delta v_\perp)^2 \rangle / dt$ berechnet, indem er über Stöße mit Bahnparametern von b_0 bis zur DEBYE-Länge mittelt.

Hat $\langle (\Delta v_\perp)^2 \rangle$ das Quadrat der Anfangsgeschwindigkeit $v = v_0$ erreicht, so ist dies gleichbedeutend mit einer mittleren, kumulierten Ablenkung von 90° . Die dazu

¹¹Die Mittelung erfolgt hier über die Teilchen, nicht über die Stöße.

¹²Hier werden jedoch nur Zeiten betrachtet, die kleiner als die zur Gleichgewichtsherstellung benötigte Zeit aber größer als die mittlere stoßfreie Zeit sind.

¹³SPITZER selber verwendet für $d\langle (\Delta v_\perp)^2 \rangle / dt$ das Symbol $\langle (\Delta w_\perp)^2 \rangle$, woraus aber die Zeitnormierung nicht zu erkennen ist. Vergleiche auch [GR98, (11.10)].

benötigte Zeit t_{ei} ist dann definiert über [Spi56, Gl. (5-21)]

$$\frac{d\langle(\Delta v_{\perp})^2\rangle}{dt} \cdot t_{ei} = v_0^2. \quad (2.29)$$

Das Inverse dieser Zeit kann man auch als Stoßfrequenz oft sogenannter SPITZER-Stöße interpretieren, in denen also die kumulative Wirkung vieler kleiner Ablenkungen zusammengefaßt wird. Aus SPITZERS Gleichungen (5-4), (5-13), (5-14) und (5-21) ergibt sich für ei-Stöße¹⁴

$$t_{ei}^{-1} = \frac{z^2 n_i e^4 \ln \Lambda}{2\pi \epsilon_0^2 m_e^2 v^3}, \quad (2.30)$$

wobei Λ etwa das Verhältnis zwischen DEBYE-Länge und b_0 ist. Sein Logarithmus $\ln \Lambda$, oft als COULOMB-Logarithmus bezeichnet, ändert sich nur sehr langsam mit den Plasmaparametern. Für die hier untersuchten EZR-Plasmen mit charakteristischen Dichten in der Größenordnung 10^{11} cm^{-3} und Elektronentemperaturen $T_e \approx 10^4 \text{ eV} \approx 10^8 \text{ K}$ gilt [Spi56, Tab. 5.1]

$$\ln \Lambda \approx 20. \quad (2.31)$$

Damit sind die Stoßraten der ei-SPITZER-Stöße für Elektronen an Ionen um den Faktor $8 \cdot \ln \Lambda \approx 160$ größer als die der Einzelstöße mit Ablenkungswinkeln größer 90° !

In den simulierten EZR-Plasmen stoßen die Elektronen mit verschiedenen Ionenspezies i , so daß sich die einzelnen Stoßfrequenzen aufaddieren. Daher muß zur Berechnung der totalen Stoßrate in (2.28) und (2.30) für $z^2 n_i$ die Summe

$$n_{++} := \sum_i z_i^2 n_i \quad (2.32)$$

eingesetzt werden.

Die Behandlung von ee- und ii-Stößen ist mathematisch deutlich aufwendiger, da die jeweiligen Stoßpartner wegen der gleichen Massen nicht mehr als ortsfest betrachtet werden können. Für ii-Stöße zwischen gleichen Ionen der Masse M , Ladung z , Dichte n_i und Temperatur T_i führen GOLDSTON und RUTHERFORD den Leser auf SPITZERS Überlegungen basierend in großen Schritten zu dem nach ihren Worten "üblichen Ausdruck" der *mittleren* ii-Stoßrate [GR98, Gl. (11.24), beachte Fußnote¹⁵]:

$$\langle \nu_{ii} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi^3 M (k T_i)^3}} \frac{z^4 n_i e^4 \ln \Lambda}{12 \epsilon_0^2} \quad (2.33)$$

Da in dieser Arbeit aber auch Ionen unterschiedlicher Masse und Ladung behandelt werden sollen, wird (2.33) zu

$$t_{ii}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3 \mu (k T_i)^3}} \frac{z^2 z_1^2 n_1 e^4 \ln \Lambda}{12 \epsilon_0^2} \quad (2.34)$$

¹⁴Man beachte beim Vergleich, daß SPITZER die Größen in elektromagnetischen Einheiten angibt [Spi56, S. 1].

¹⁵Man beachte beim Vergleich, daß GOLDSTON und RUTHERFORD die BOLTZMANN-Konstante k stets weglassen und Temperaturen in Joule angeben [GR98, S. 11].

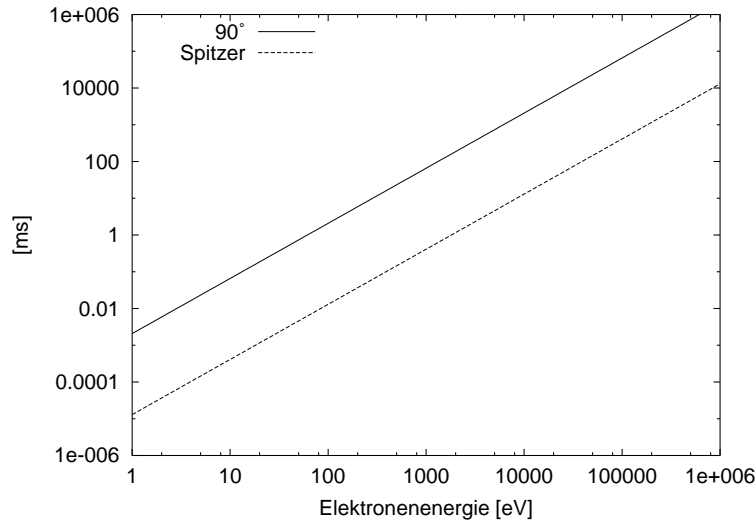


Abbildung 2.12: Mittlere Zeit zwischen ei-Einzelstößen mit Ablenkungen größer 90° (τ_{90} , durchgezogen) und ei-SPITZER-Stößen (t_{ei} , gestrichelt), jeweils bei $n_{++} = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$.

als die mittlere Stoßrate z -fach geladener Ionen an z_1 -fach geladenen Ionen (Masse m_1 , Dichte n_1) verallgemeinert. Dabei sind T_i die gemeinsame Ionentemperatur und $\mu = m \cdot m_1 / (m + m_1)$ deren reduzierte Masse. Für gleiche Ionen ($z = z_1$, $m = m_1$) geht (2.34) wieder in (2.33) über.

Die totale ii-Stoßrate für die kumulativen 90° -Stöße einer Ionenspezies z ergibt sich aus der Summe der Stoßraten mit den verschiedenen Ladungszuständen z_1 der Stoßpartner. Mit nur einer Gassorte kann man die totale Stoßrate mit (2.32) wieder als Funktion von n_{++} betrachten:

$$t_{ii,total}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\pi^3} M (k T_i)^3} \frac{z^2 n_{++} e^4 \ln \Lambda}{12 \epsilon_0^2} \quad (2.35)$$

2.4 Energieaustausch zwischen Plasmateilchen

Für die Beschreibung der Transportprozesse werden die Temperaturen der Ionen benötigt. Während die Elektronen durch die EZRH im statistischen Mittel Energie gewinnen [Gel96, Kap. 1.5.3 und 2.3], werden die Ionen durch elastische Stöße mit hochenergetischen Elektronen und durch die bei Ladungsaustauschprozessen gewonnenen Energien (siehe Abschnitt 3.5.3) geheizt.

Da diese Heizungsmechanismen vom Ladungszustand der Ionen abhängig sind und die Ionen miteinander wechselwirken, bedarf es zusätzlich der Betrachtung des Temperatenausgleiches der Ionen untereinander.

2.4.1 Ionenheizung durch hochenergetische Elektronen

Trifft ein Elektron (Masse m_e , Geschwindigkeit v_e) auf ein ruhendes Ion (Masse m_i , Ladung z , Geschwindigkeit $v_i = 0$), so wird es von seiner Bahn abgelenkt (siehe Abbildung 2.11 auf Seite 21) und überträgt dabei einen sehr geringen Teil ΔE seiner Energie an das Ion. Zwischen Ablenkwinkel ϑ (im Schwerpunktsystem¹⁶) und Stoßparameter b sowie der anfänglichen Elektronenenergie $E_e = m_e v_e^2/2$ besteht mit der potentiellen Energie

$$E_p(r) = -z e^2 / (4\pi \epsilon_0 r) \quad (2.36)$$

und der kinetischen Stoßenergie

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \mu v_e^2 = \frac{1}{2} \frac{m_i \cdot m_e}{m_i + m_e} v_e^2 = \frac{\mu}{m_e} E_e \approx E_e \quad (2.37)$$

nach [Dem94, Gl. (4.37b)] der Zusammenhang

$$\tan\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = -\frac{z e^2}{8\pi \epsilon_0} \frac{m_e}{\mu} \frac{1}{b \cdot E_e}. \quad (2.38)$$

Für die übertragene Energie und den Ablenkwinkel läßt sich der Zusammenhang

$$\Delta E(\vartheta) = 2 \frac{m_i \cdot m_e}{(m_i + m_e)^2} E_e (1 - \cos \vartheta) \quad (2.39)$$

zeigen¹⁷.

Energietransfer durch Einzelstöße

Betrachtet werden zuerst nur Stöße mit $\vartheta \geq 90^\circ$, da diese bei einem Einzelstoß die größte Wirkung haben. Für $\vartheta = 90^\circ$ gilt:

$$\Delta E(90^\circ) = 2 \frac{m_i \cdot m_e}{(m_i + m_e)^2} E_e \approx 2 \frac{m_e}{m_i} E_e. \quad (2.40)$$

Hierzu gehört nach (2.38) der Bahnparameter

$$b_0 = \frac{z e^2}{8\pi \epsilon_0} \frac{m_e}{\mu} E_e^{-1} = \frac{z e^2}{4\pi \epsilon_0 \mu v_e^2}. \quad (2.41)$$

¹⁶Ablenkwinkel im Laborsystem sind stets kleiner als im Schwerpunktsystem. Aufgrund der hohen Ionenmassen fallen Labor- und Schwerpunktsystem hier jedoch praktisch zusammen, so daß der Unterschied für die Elektronenablenkwinkel vernachlässigbar ist.

¹⁷Die Herleitung kann mit Hilfe eines NEWTON-Diagrammes (siehe [Dem94, Kap. 4.2.5]) erfolgen. Die Ionengeschwindigkeit \vec{v}_{is} im Schwerpunktsystem ist darin bekannt, und ihr Betrag bleibt beim elastischen Stoß unverändert; \vec{v}_{is} wird lediglich um ϑ um die Schwerpunktschwindigkeit gedreht. Der Betrag des Verbindungsvektors zwischen alter und neuer Ionengeschwindigkeit ist gleich dem Geschwindigkeitsbetrag des Ions im Laborsystem nach dem Stoß und kann mit dem Kosinussatz berechnet werden.

Für $\vartheta \rightarrow 180^\circ$ (bzw. $b \rightarrow 0$) steigt der Energieübertrag dann monoton, aber langsam bis auf

$$\Delta E(180^\circ) = 2 \cdot \Delta E(90^\circ) \quad (2.42)$$

an. Somit wird bei allen Stößen mit einem Stoßparameter $b < b_0$ mindestens die Energie $\Delta E(90^\circ)$ übertragen. Zur Abschätzung der Verlustleistung eines Elektrons durch derartige Stöße kann analog zu (2.27) der geometrische Wirkungsquerschnitt

$$\sigma^E(E_e) := \pi b_0^2 \quad (2.43)$$

definiert werden. Ein Elektron, das sich durch Ionen der Dichte n_i bewegt, hat damit nach (A.1) die Stoßrate

$$\tau^{-1} = n_i \sigma^E v_e \quad (2.44)$$

und verliert dadurch Energie mit

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right)_{90^\circ} &:= -\tau^{-1} \cdot \Delta E(90^\circ) \\ &= -\frac{n_i z^2 e^4}{32\pi \epsilon_0^2} \frac{m_i \cdot m_e^2}{(m_i + m_e)^2 \mu^2} \sqrt{\frac{2m_e}{E_e}} \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\approx -\frac{n_i z^2 e^4}{32\pi \epsilon_0^2 m_i} \sqrt{\frac{2m_e}{E_e}}. \quad (2.46)$$

Kumulativer Energietransfer durch ei-SPITZER-Stöße

Für die elastischen ei-Stöße mit Ablenkwinkeln $\vartheta < 90^\circ$ (d.h. Stoßparameter $b > b_0$), bei denen die pro Stoß übertragene Energie mit größer werdendem ϑ schnell gegen 0 geht, muß wieder über viele derartige Stöße gemittelt werden (siehe [GR98, Kap. 11.4]).

Im Grenzfall kleiner Ablenkwinkel gilt für die Energieänderung bei einem Stoß [GR98, Gl. (11.37)]:

$$\frac{1}{2} m_i |\Delta \vec{v}_i|^2 = \frac{m_e^2}{2 m_i} (\Delta v_{e\perp})^2. \quad (2.47)$$

Für viele der betrachteten ei-Stöße leiten GOLDSTON und RUTHERFORD für die mittlere quadratische Ablenkung der Elektronengeschwindigkeit $v_{e\perp}$ in senkrechter Richtung zur ursprünglichen Flugrichtung *pro Zeiteinheit* den Ausdruck^{18,19} [GR98, Gl. (11.38) bzw. (11.11). Beachte Fußnote 18.]

$$\frac{d \langle (\Delta v_{e\perp})^2 \rangle}{dt} = \frac{n_i z^2 e^4 \ln \Lambda}{2 \pi \epsilon_0^2 m_e^2 v_e} \quad (2.48)$$

¹⁸In der zitierten Buchausgabe [GR98] befindet sich in Gleichung (11.38) ein Druckfehler, der aus (11.11) übernommen wurde und sich in der Abhängigkeit der rechten Seite von v (hier v_e) manifestiert. Für Gleichung (11.43), die durch Einsetzen von (11.38) in (11.42) entsteht, wurde jedoch offenbar wieder die richtige Form von (11.38) verwendet.

¹⁹Diesen Ausdruck erhält man auch aus (2.29) mit (2.30).

her, wobei $\ln \Lambda$ wieder der COULOMB-Logarithmus ist (siehe (2.30)). Mit (2.47) hat ein Elektron dann die durchschnittliche Energieverlustrate

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right)_{Spi} &= - \frac{m_e^2}{2 m_i} \frac{d \langle (\Delta v_{e\perp})^2 \rangle}{dt} \\ &= - \frac{n_i z^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m_i} v_e^{-1} \ln \Lambda \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\approx 4 \ln \Lambda \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right)_{90^\circ}. \quad (2.50)$$

Der Vergleich mit (2.46) zeigt, daß die Stöße mit kleinen Ablenkwinkeln kumulativ um den Faktor $4 \ln \Lambda \approx 80$ effektiver sind als einzelne Stöße mit großen Ablenkwinkeln und letztere für den ei-Energietransfer daher eine vernachlässigbare Rolle spielen.

Änderung der Iontemperatur durch ei-SPITZER-Stöße. In einem Volumenelement ΔV mit der Elektronen-Energiedichte $W_e = \bar{E}_e \cdot n_e$ wird insgesamt die Leistung

$$\frac{\partial W_e}{\partial t} \Delta V = n_e \Delta V \int_0^\infty \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right) f(v) dv \quad (2.51)$$

an die z -fach geladenen Ionen abgegeben, wobei $f(v)$ die Geschwindigkeitsverteilung der heißen Elektronen ist. Für die Ionen-Energiedichte W_i muß aufgrund der Energie(dichte)erhaltung gelten:

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = - \frac{\partial W_e}{\partial t}. \quad (2.52)$$

Geht man bei den Ionen von einer MAXWELL-Verteilung (siehe Anhang C) aus, so folgt mit der mittleren Energie $\bar{E}_i = 3/2 k T_i$ sowie (2.49) und (2.52) für die Iontemperatur

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_i}{\partial t} &= \frac{2}{3k} n_i^{-1} \frac{\partial W_i}{\partial t} = - \frac{2}{3k} n_i^{-1} \frac{\partial W_e}{\partial t} \\ &= - \frac{2}{3k} \frac{n_e}{n_i} \int_0^\infty \left(\frac{\partial E_e}{\partial t} \right) f(v_e) dv_e \\ &= \frac{2}{3k} \frac{e^4}{4\pi \epsilon_0^2} \frac{n_e z^2}{m_i} \ln \Lambda \int_0^\infty v_e^{-1} f(v_e) dv_e. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Sind die Elektronen mit der Temperatur T_e MAXWELL-verteilt, wird daraus (vergleiche [GR98, Gl. (11.45) u. (11.46)] unter Beachtung von Fußnote²⁰):

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k^3 T_e}} \frac{n_e z^2 e^4}{3\pi \epsilon_0^2 m_i} \ln \Lambda. \quad (2.54)$$

Dieser Zusammenhang gilt aber aufgrund der obigen Annahme ruhender Ionen nur solange, wie deren Energien wesentlich kleiner als die der Elektronen sind.

²⁰Beim Vergleich von Gleichung (2.54) mit (11.45) und (11.46) aus [GR98] muß beachtet werden, daß GOLDSTON und RUTHERFORD die BOLTZMANN-Konstante k stets weglassen und Temperaturen in Joule angeben [GR98, S. 11].

2.4.2 Temperatúrausgleich unter den Ionen

Auf der Basis von Stößen mit kleinen Ablenkwinkeln beschreibt SPITZER auch den Temperatúrausgleich zwischen zwei Ionenpopulationen.

Für eine Gruppe von MAXWELL-verteilten, sogenannten *Testteilchen* (Ladung z , Masse A in atomaren Masseneinheiten amu, Temperatur T in K), die mit einer ebenfalls MAXWELL-verteilten Gruppe sogenannter *Feldteilchen* (z_1 , A_1 , T_1 analog und Dichte n_1 in cm^{-3}) wechselwirken, kommt er zu dem Ergebnis [Spi56, Gl. (5-30)]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_1 - T}{t_{eq}} \quad (2.55)$$

mit der Relaxationszeit

$$t_{eq} = 5,87 \frac{A A_1}{n_1 z^2 z_1^2 \ln \Lambda} \left(\frac{T}{A} + \frac{T_1}{A_1} \right)^{3/2} \text{ sec} \quad (2.56)$$

2.5 Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in kalten, magnetisierten Plasmen

Die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in Plasmen stellt einen umfangreichen Themenkomplex dar, der in dieser Arbeit lediglich zur Abschätzung einer oberen Grenze für die Elektronendichte herangezogen wird. Daher werden in diesem Kapitel auch nur die wichtigsten Ergebnisse zusammengestellt, die zum Verständnis späterer Überlegungen benötigt werden. Für einen detaillierteren Einstieg siehe z.B. [Jan92], zum Nachschlagen eignet sich auch [MG92].

Elektromagnetische Wellen werden in ihrer Ausbreitung durch die freien Ladungsträger, insbesondere durch die Elektronen beeinflusst. Analytische Betrachtungen dieser Problematik sind nur für wenige Spezialfälle möglich. Die folgenden Betrachtungen setzen folgende Annahmen voraus [Jan92]:

- Das Plasma ist homogen und unendlich ausgedehnt.
- Das Magnetfeld ist homogen.
- Das Plasma ist kalt, d.h. die von der elektromagnetischen Welle verursachten Teilchengeschwindigkeiten müssen klein gegen die thermischen Geschwindigkeiten der Teilchen und diese wiederum klein gegen die Phasengeschwindigkeit der Welle sein.
- Die Elektronen sind stoßfrei.

Des weiteren spielt die Ausbreitungsrichtung \vec{k} relativ zum Magnetfeld \vec{B} eine wichtige Rolle. Für die Richtungen parallel und senkrecht findet man die folgenden analytischen Lösungen der Wellengleichung²¹:

²¹Für andere Winkel zwischen \vec{k} und \vec{B} lassen sich numerische Lösungen finden.

- In paralleler Richtung die
 - R-Welle (rechtszirkular) und die
 - L-Welle (linkszirkular).
- In senkrechter Richtung die
 - O-Welle (ordentliche Welle mit $\vec{E} \parallel \vec{B}$) und die
 - X-Welle (außerordentliche Welle mit $\vec{E} \perp \vec{B}$).

Die Ausbreitungseigenschaften dieser Spezialwellen sind abhängig von der Magnetfeldstärke $B \equiv |\vec{B}|$, der Frequenz $\omega = 2\pi f$ der Welle sowie der Elektronendichte n_e , die über folgende charakteristische Frequenzen miteinander gekoppelt sind:

- Elektronenzyklotronfrequenz nach (2.10) (mit Elektronenmasse m_e)

$$\omega_{ce} = \frac{e}{m_e} B \quad (2.57)$$

- Ionenzyklotronfrequenz nach (2.10) (mit Ionenmasse m_i , Ladung $z \cdot e$)

$$\omega_{ci} = \frac{z \cdot e}{m_i} B \quad (2.58)$$

- Plasmafrequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e \cdot e^2}{\epsilon_0 \cdot m_e}} \quad (2.59)$$

Dielektrizitätskonstanten und Ausbreitungseigenschaften

Alle vier Spezialwellen haben individuelle Dielektrizitätskonstanten $\epsilon_{R,L,O,X}$, die sich aus den Termen [Jan92, Gl. (2.5.4) bis (2.5.7)]

$$\epsilon_l = 1 - \frac{\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2}{\left(1 + \frac{\omega_{ce}}{\omega}\right)\left(1 - \frac{\omega_{ci}}{\omega}\right)} \quad (2.60)$$

$$\epsilon_r = 1 - \frac{\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2}{\left(1 - \frac{\omega_{ce}}{\omega}\right)\left(1 + \frac{\omega_{ci}}{\omega}\right)} \quad (2.61)$$

$$\epsilon_{||} = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \quad (2.62)$$

$$\epsilon_{\perp} = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \frac{1 - \frac{\omega_{ce}}{\omega} \frac{\omega_{ci}}{\omega}}{\left(1 - \frac{\omega_{ce}}{\omega}\right)\left(1 + \frac{\omega_{ci}}{\omega}\right)} \quad (2.63)$$

zu [Jan92, Gl. (2.5.18) bis (2.5.21)]

$$\epsilon_R = \epsilon_r, \quad \epsilon_L = \epsilon_l, \quad \epsilon_O = \epsilon_{||}, \quad \epsilon_X = \epsilon_r \cdot \epsilon_l / \epsilon_{\perp} \quad (2.64)$$

zusammensetzen.

Die Dielektrizitätskonstanten ϵ sind jeweils über [Jan92, Gl. (2.4.11)]

$$n_{br} \equiv n_{Re} - i \cdot n_{Im} \equiv \sqrt{\epsilon} \quad (2.65)$$

mit dem verallgemeinerten, komplexen Brechungsindex n_{br} verbunden. Ihre Bedeutung für die Wellenausbreitung wird an der mathematischen Beschreibung der Ausbreitung ebener Wellen mittels Phasenfaktoren der Form

$$\exp \left(i \left(\omega \cdot t - \frac{\omega}{c} n_{Re} \cdot x \right) - \underbrace{\frac{\omega}{c} n_{Im} \cdot x}_{\text{Dämpfung}} \right) \quad (2.66)$$

deutlich:

- Im Normalfall $0 < \epsilon < \infty$, $n_{Re} > 0$, $n_{Im} = 0$ breitet sich die Welle mit der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega \sqrt{\epsilon}} \quad (2.67)$$

ungedämpft aus.

- Im Grenzfall $\epsilon = 0$, $n_{br} = 0$ (sogenannter Cut-off) werden Wellenlänge und Phasengeschwindigkeit der Welle unendlich, es beginnt der Bereich der Totalreflexion²².
- Wird $\epsilon < 0$ und somit $n_{Im} \geq 0$, erfolgt ebenfalls Totalreflexion. In dem räumlichen Bereich des Cut-offs erfolgt die Ausbreitung nur noch gedämpft mit der Eindringtiefe

$$\delta := \frac{c}{\omega \cdot n_{Im}} . \quad (2.68)$$

- Im Grenzfall $\epsilon \rightarrow \infty$ (man spricht von Resonanz) geht die Wellenlänge gegen null und es kommt zum Energieaustausch zwischen Welle und den geladenen Plasmateilchen.

Von diesen Fällen sind im folgenden der Cut-off $\epsilon = 0$ und der Bereich $\epsilon \leq 0$ von besonderem Interesse, da der Cut-off bei Erreichen bestimmter Elektronendichten einsetzt. Da sich das Plasma von diesem Moment an seine eigene Grundlage wegdämpft, liefert der Cut-off der Mikrowelle eine obere Grenze für die Elektronendichte (s.u.).

²²Falls das Volumen, in dem die Cut-off-Bedingung gilt, nicht wie vorausgesetzt unendlich ausgedehnt ist, handelt es sich lediglich um eine Teilreflexion der Welle.

CMA-Diagramm

Die Frequenzen ω , für welche die Cut-off- bzw. die Resonanzbedingungen bei gegebener Elektronendichte n_e (oder äquivalent Plasmafrequenz) erfüllt sind, lassen sich einfach berechnen. Im hier relevanten Grenzfall $\omega \gg \omega_{ci}$ ergeben sich die Cut-off-Bedingungen²³

- $\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 = 1$ für die O-Welle,
- $\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 = 1 - \frac{\omega_{ce}}{\omega}$ für die R- und die X-Welle sowie
- $\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 = 1 + \frac{\omega_{ce}}{\omega}$ für die L- und die X-Welle.

Unter den Resonanzbedingungen ist hier nur

- $\frac{\omega_{ce}}{\omega} = 1$ für die R-Welle

von Interesse. Für die weiteren sei auf [Jan92, Kap. 2.5.6] verwiesen.

Diese Bedingungen lassen sich in einem sogenannten CMA²⁴-Diagramm (siehe Abbildung 2.13) darstellen. Die R-Resonanz ist darin als durchgezogene horizontale Linie eingezeichnet, während die drei Cut-off-Bedingungen gestrichelt sind. Durch diese Linien wird die gesamte Fläche in Bereiche unterteilt, in denen jeweils nur bestimmte der vier diskutierten Spezialwellen ausbreitungsfähig sind.

Für die hier benötigten Zwecke (Abschätzung einer oberen Grenze für n_e bei gegebenem ω und B) ist es praktisch, mit der kritischen Dichte

$$n_c := \frac{\epsilon_0 \cdot m_e}{e^2} \omega^2 \quad (2.69)$$

und der Resonanzfeldstärke B_{res} nach (2.3) die Identitäten

$$\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \equiv \frac{n_e}{n_c} \quad (2.70)$$

$$\frac{\omega_{ce}}{\omega} \equiv \frac{B}{B_{res}} \quad (2.71)$$

zu verwenden.

Unterhalb der kritischen Dichte n_c (gleichzeitig Cut-off-Dichte der O-Welle) und oberhalb der Resonanzfeldstärke B_{res} (Bereich 1) breiten sich alle vier Spezialwellen ungedämpft aus (RLOX). Steigt dann die Elektronendichte bei konstantem ω bis n_c an, so wird der O-Cut-off erreicht und nur R-, L-, und X-Welle bleiben ungedämpft ausbreitungsfähig (Bereich 2). Wächst n_e weiter, bis der L-X-Cut-off überschritten wird, werden auch L- und X-Welle reflektiert (Bereich 3).

Dieser Weg ist in Abbildung 2.13 durch die drei aneinander gehängten Pfeile skizziert.

²³Dazu müssen lediglich die Nullstellen von (2.64) bestimmt und $\omega \gg \omega_{ci}$ angewendet werden.

²⁴Benannt nach CLEMMOW, MULLALY und ALLIS.

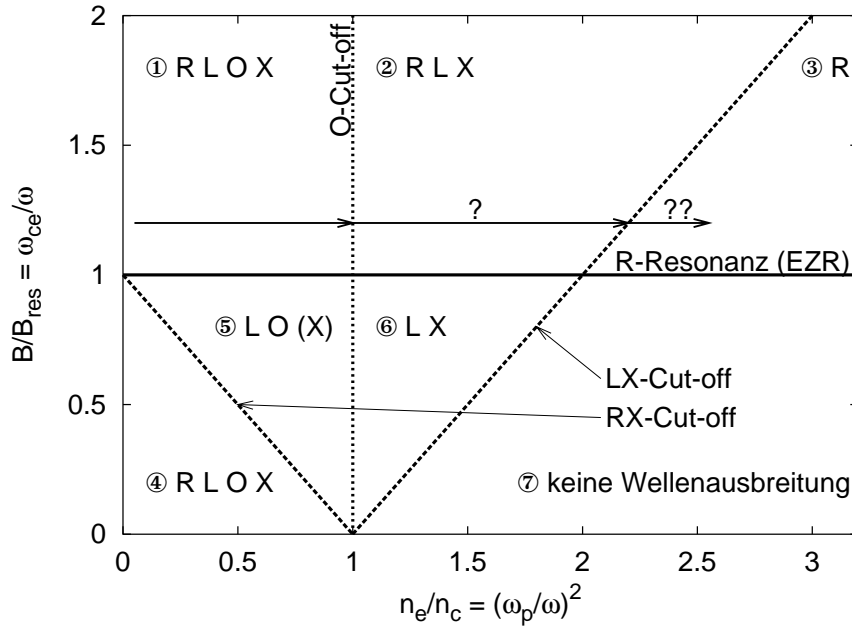


Abbildung 2.13: CMA-Diagramm mit den Cut-off- und Resonanzbedingungen der vier Spezialwellen für $\omega \gg \omega_{ci}$. Die Grenzlinien unterteilen die B - n_e -Ebene in Bereiche (hier 1 bis 7), in denen nur bestimmte (in den Flächen angegebene) Spezialwellen ungedämpft ausbreitungsfähig sind. Die drei Pfeile von den Bereichen 1 bis 3 skizzieren den Weg entlang dessen sich das Plasma im Zentrum der ECRIS 3 nach seiner Zündung zeitlich entwickeln kann. (Da im Zentrum der ECRIS 3 Resonanzbedingung $B = B_{res}$ und $B \geq B_{res}$ herrscht, liegt dieser Weg – anders als eingezeichnet – knapp über der R-Resonanz.) Mit zunehmender Elektronendichte werden immer mehr Spezialwellen durch den Cut-off weggedämpft. Die obere Grenze für die tatsächliche Elektronendichte n_e in ECRIS 3 bedarf der Diskussion (siehe Abschnitt 3.3.3.1). (Die hier gewählte Darstellung unterscheidet sich etwas von den sonst üblichen, siehe z.B. [Jan92, Abb. 2.5.39, S. 132] oder [MG92, Bild 2, S 21]. Da hier nur der Bereich $\omega \gg \omega_{ci}$ relevant ist, kann als Ordinate ω_{ce}/ω anstelle von $\omega_{ce}\omega_{ci}/\omega^2$ verwendet werden.)

Liegt ω über der Resonanzfrequenz ω_{ce} (Bereiche 4 bis 7), so erleiden mit anwachsendem n_e ebenfalls immer mehr Wellentypen Cut-off und werden reflektiert²⁵.

Anwendung auf die ECRIS 3. Bei der in dieser Arbeit behandelten ECRIS 3 ist ω im Normalbetrieb vorgegeben, so daß die EZR-Resonanz ($\omega_{ce}/\omega = 1$) und die kritische Dichte n_c (und somit gleichzeitig die Cut-off-Bedingung der O-Welle) fest sind.

Dadurch, daß ω bei optimalem Betrieb auf die Plateaufeldstärke abgestimmt ist (siehe Abbildung 2.5 auf Seite 9), die gleichzeitig minimale Magnetfeldstärke ist, gilt stets $\omega_{ce}/\omega \geq 1$. Das bedeutet, daß für Mikrowellen in ECRIS 3 nur der Bereich auf und oberhalb der EZR-Resonanz im CMA-Diagramm von Interesse ist. (Anders ist die Situation für Standard-EZR-Quellen mit Minimum-B-Struktur, bei denen die Feldstärke im Plasmazentrum unterhalb der Resonanzfeldstärke liegt!)

²⁵Eine Ausnahme findet sich in Bereich 5, der eigentlich noch durch eine X-Resonanz zweigeteilt ist, so daß mit zunehmendem n_e die X-Welle wieder ausbreitungsfähig wird.

Eindringtiefe bei Cut-off

Wie oben schon erwähnt, wird eine elektromagnetische Welle im Falle des Cut-offs ($\epsilon \leq 0$, $n_{Im} \geq 0$) nicht sofort reflektiert. Vielmehr dringt sie, wie am Phasenfaktor (2.66) ersichtlich, noch in den Raumbereich ein, wird dabei jedoch exponentiell gedämpft.

Die Länge δ , auf der die Amplitude auf $1/e$ -tel abfällt, wird als Eindringtiefe bezeichnet. Für die O- und die L-Welle ergeben sich aus (2.68) und $n_{Im} = \sqrt{-\epsilon}$

$$\delta_O = \frac{c}{\sqrt{\omega_p^2 - \omega^2}} \quad \text{für } \omega < \omega_p, \quad (2.72)$$

$$\delta_L = \frac{c}{\sqrt{\frac{1}{2}\omega_p^2 - \omega^2}} \quad \text{für } \omega < 2\omega_p \quad \text{und} \quad \omega = \omega_{ce}. \quad (2.73)$$

Abbildung 3.6 auf Seite 50 zeigt diese beiden Eindringtiefen für $\omega = 2\pi \cdot 6,7$ GHz als Funktion der Elektronendichte, die ja über (2.59) mit ω_p verknüpft ist.

Kapitel 3

Modell zur Berechnung der räumlichen Ladungszustandsverteilung

3.1 Modelle und Simulationen anderer Autoren

Seit EZR-Ionenquellen Verwendung finden, existiert das Bedürfnis eines tieferen Verständnisses des Zusammenwirkens der physikalischen Mechanismen, die EZR-Quellen so erfolgreich funktionieren lassen, nicht zu letzt um deren Leistungsfähigkeit weiter zu steigern. Mit zunehmender Verfügbarkeit und Leistung von Computern wurden schon früh rechenbare Modelle entwickelt, die sich neben ihrer Komplexität und ihrem Unabhängigkeitsgrad von nicht-experimentellen Parametern, die durch den Simulator abgeschätzt werden müssen, vor allem in ihrem Ansatz unterscheiden. Die bisherigen in der Literatur bekannten Modelle und Simulationen lassen sich (daher) wie folgt kategorisieren:

- Elektronentrajektorienimulationen
- Ionentrajektorienimulationen
- Particle-in-Cell-Simulationen
- Ratengleichungssysteme zur Ladungszustandsverteilung

Elektronentrajektorienimulationen

Die Elektronen spielen in zweifacher Hinsicht die wichtigste Rolle in EZR-Plasmen. Erstens erfolgt durch ihre Stöße mit den Atomen und Ionen die Ionisation derselben, und zweitens wird durch sie der Einschluß der Ionen elektrostatisch erhöht.

Da die Elektronen schon weit unter ihren in EZR-Plasmen typischen Energien als quasi-stoßfrei betrachtet werden können (siehe Abschnitt 3.3.2), bieten sich Trajektorienberechnungen in den statischen Magnetfeldern und der vor allem

elektrischen Komponente der eingestrahlten Mikrowelle an. Derartige Simulationen wurden von JONGEN sowie VÁMOSI und BIRI *et al.* [VB94, BVSSB95] durchgeführt. In der Arbeitsgruppe, in der diese Arbeit entstand, haben sich LEONHARD [Leo95] und HEINEN [Hei97, HRD⁺98, HVA99, HRO⁺99, Hei02] mit Elektronensimulationen beschäftigt. Mit ihnen lassen sich vor allem Informationen über die Abhängigkeiten der räumlichen Elektronendichteverteilung, der räumlichen Energiedichteverteilung und des Elektronenenergiespektrums von der verwendeten Magnetfeldstruktur und der Mikrowelle, d.h. Frequenz, Resonatormode und Leistung, gewinnen.

Ionentrajektorienimulationen

Auf die gleiche Weise wie bei den Elektronen lassen sich auch stoßfreie Ionentrajektorien in gegebenen ECRIS-Magnetfeldern berechnen. BIRI *et al.* stellten so die Empfindlichkeit der extrahierten Ströme auf den genauen Verlauf des Magnetfeldes an den Rändern fest¹ [BVSSB95], und BATYGIN *et al.* zeigten, wie sich, ausgehend von einer homogenen Verteilung der Startpositionen innerhalb der Resonanzfläche ihrer simulierten Quelle, zunehmend eine durch die Hexapolstruktur geprägte Dichteverteilung einstellt [Bat97].

Im Plasmazentrum werden die Ionenbahnen jedoch stark durch Stöße mit anderen Ionen beeinflusst, was sich auch in den Dichteverteilungen deutlich bemerkbar macht². Daher sind stoßfreie Ionentrajektorienberechnungen nur begrenzt aussagekräftig.

PIC-Simulationen

Eine in der Plasmaphysik weit verbreitete Erweiterung der obigen Einzelteilchensimulationen sind sogenannte *Particle-in-Cell*-Simulationen. Deren grundlegende Idee ist es, sehr viele Teilchen einer Spezies (jeweils Elektronen und Ionen) zu sogenannten Super- oder Makroteilchen zusammenzufassen³, die zwar jeweils dementsprechend größere Masse, aber immer konstantes Ladungs- zu Masse-Verhältnis haben. Diese werden dann – repräsentativ für die Einzelteilchen – gem. ihrer Bewegungsgleichungen und unter Berücksichtigung der dabei selbstkonsistent bestimmten elektromagnetischen Felder verfolgt [BL91]. Auf diese Weise können u.a. Dichteverteilungen, durch die Teilchen bedingte innere elektromagnetische Felder und Energieverteilungen gewonnen werden. Dabei werden zum Teil auch Effekte durch elastische Stöße berücksichtigt.

Im Zusammenhang mit EZR-Plasmen werden PIC-Methoden besonders häufig für EZR-Entladungen angewendet, die nicht primär zur Produktion hochgeladener

¹Dabei berücksichtigten sie auch ii-Stöße. Leider geben sie jedoch nicht an, wie sie diese behandelten.

²Den starken Einfluß der ii-Stöße auf den Ioneneinschluß (und somit die CSD) zeigt beispielsweise Abbildung 3.28 auf Seite 94 mit den mittleren Einschlußzeiten verschiedener Ar-Ionen in einer kleinen Volumenzelle in Abhängigkeit von der Stoßpartnerdichte.

³DOUGAR-JABON *et al.* simulieren z.B. $1,6 \cdot 10^{15}$ Teilchen mit $2 \cdot 10^5$ Superteilchen [DJUSD02].

Ionen, sondern als allgemeine Plasmaquelle für technische Anwendungen wie Oberflächenbehandlungen eingesetzt werden [GG95, LJMS99].

Aber auch einige ECRIS-Plasmen wurden mit PIC-Modellen simuliert, vor allem um die EZRH zu studieren und die Energieverteilung der Elektronen zu berechnen. Aufgrund des hohen Bedarfs an Computerleistung wurden diese Simulationen anfangs nur 2-dimensional, rotationssymmetrisch durchgeführt [Gro92, AS94, Gro96]. Auf diese Weise konnten ALTON *et al.* ohne experimentelle Tests ihre Idee entwickeln, statt der klassischen Minimum-B-Konfigurationen ein Magnetfeld mit im Zentrum konstanter Feldstärke einzusetzen [AS94] (siehe Abschnitt 2.1.2).

Jüngere PIC-Modelle sind mittlerweile auch 3-dimensional [DJUSD02]. Aufgrund des sehr hohen Zeitbedarfs für die Rechnungen wurden PIC-Simulationen bisher nur mit einfach geladenen Ionen durchgeführt⁴. SHIRKOV *et al.* entwickeln aber auch schon Codes für mehrere Ionenspezies, die Übergänge zwischen diesen durch ladungsändernde Prozesse berücksichtigen [SAP⁺02].

Ratengleichungssysteme zur Ladungszustandsverteilung

Abgesehen von SHIRKOVs PIC-Simulationen, die aber noch in der Entwicklung sind [SAP⁺02], kann man mit den obigen Simulationsverfahren beispielsweise nicht die Intensitätsverteilung im Spektrum der extrahierten Ströme (siehe z.B. Abbildung 2.8 auf Seite 15) erklären. Wie in Kapitel 2.2 erläutert, werden die Dichten der verschiedenen Ionenspezies (und somit auch deren extrahierte Ströme) einerseits durch Ionisationsprozesse auf- und andererseits durch Rekombination, Ladungsaustausch sowie Verluste an die Wand und die Extraktion abgebaut (siehe Abbildung 2.7 auf Seite 14). Kennt man die Prozeßraten⁵ der einzelnen Spezies, so läßt sich für jede Teilchendichte die Summe aller sie betreffenden Prozeßraten aufstellen. Da sich die Teilchendichten im Gleichgewicht nicht mehr ändern, müssen die Prozeßratensumme dann gleich Null sein. Damit erhält man ein Ratengleichungssystem für die Dichten von Elektronen, Neutralteilchen und die verschiedenen Ionenspezies, das sich in einfachen Fällen analytisch, ansonsten aber iterativ lösen läßt.

Aufgrund der über lange Zeit nur ungenau bekannten räumlichen Plasmastruktur und des mathematischen Aufwandes wurden derartige Gleichungssysteme nur 0-dimensional, d.h. für über das ganze Plasma gemittelte Dichten, aufgestellt. Die wahrscheinlich erste Veröffentlichung hierzu stammt von BLIMAN *et al.* [BCT81]. Als *der* Klassiker unter diesen Modellen kann jedoch die Arbeit von H.I. WEST betrachtet werden [Wes82], die auf Ansätzen von JONGEN basiert und in praktisch jeder Arbeit dieser Thematik zitiert wird. Neben dem Vergleich mit experimentellen

⁴Wegen des hohen Rechenaufwandes wird oft nur über mehrere tausend Zyklen der Plasmaschwingungen gerechnet. DOUGAR-JABON *et al.* z.B. rechnen $3 \cdot 10^6$ Zeitschritte mit jeweils $\Delta t = f_{cyc}^{-1}/250 = 1/(14 \text{ GHz} \cdot 250) \approx 3 \cdot 10^{-13} \text{ s}$, wodurch sie auf eine Gesamtsimulationszeit von weniger als 10^{-6} s kommen [DJUSD02]. Zum Vergleich: zur Einstellung des in dieser Arbeit berechneten CSD-Gleichgewichtes müssen üblicher Weise einige 10 ms abgedeckt werden.

⁵Die Prozeßraten sind mathematisch die partiellen zeitlichen Änderungen der Teilchendichten durch die betrachteten Prozesse (siehe Anhang A).

Daten von den ECRIS SUPERMAFIOS B und MICROMAFIOS stellte bereits WEST anhand seiner Simulationen die Bedeutung der durch eine Absenkung des elektrischen Potentials (siehe Abbildung 3.3 auf Seite 43) hervorgerufenen Erhöhung der Ioneneinschlußzeiten heraus.

In WESTs Simulation mußten neben experimentellen, variablen Parametern auch die Neutralteilchendichte, die Elektronentemperaturen und die Iontemperatur vom Simulator abgeschätzt und vorgegeben werden. Spätere Autoren verfeinerten dieses Modell zum Teil unter anderem dadurch, daß auch solche Größen selbstkonsistent im Modell bestimmt wurden⁶. Beiträge hierzu wurden vor allem von SHIRKOV [SMMZ91, Shi92b, Shi92a, Shi93, Shi94, SZ95, Shi96, SZ96, SN98, Shi00], aber auch WHALEY und GETTY [WG90], PEŠIĆ und VUKOVIĆ [PV90], KATO *et al.* [KMI93], ZHAO *et al.* [ZEK94, ZEK95], DOUGAR-JABON *et al.* [DJUK96] sowie MELIN *et al.* [MDGH99] geliefert. Diese Arbeiten unterscheiden sich *in ihrer Grundlage* hauptsächlich durch die Ansätze zu bestimmten Teilaspekten und durch die modellierten ECRIS.

Resultierend aus den in den Plasmakammern der ECRIS stark inhomogenen Magnetfeldern herrschen für die Plasmateilchen jedoch lokal stark unterschiedliche Bedingungen. Die Elektronen werden nur an Orten geheizt, an denen die Resonanzbedingung (2.2) erfüllt ist. Daraus folgend werden sie auf einen zentralen Raumbereich konzentriert (siehe Abbildung 4.22a und 4.23a ab Seite 144), der ebenfalls magnetfeldabhängig ist.

Im Gegensatz dazu erfahren die Neutralteilchen keinen direkten Einfluß seitens des B-Feldes. Aufgrund ihrer im Vergleich zu den Plasmakammermaßen langen mittleren freien Weglängen (siehe Abschnitt 4.3.6) fliegen sie gradlinig von Wand zu Wand. Lediglich wenn sie durch den Bereich hoher Elektronendichte kommen, besteht für sie eine Chance ionisiert zu werden, so daß sich dort im Gegensatz zu den Elektronen und Ionen eine Absenkung ihrer Dichte einstellt (siehe Abbildung 4.22d und 4.23d). Der Transport der Ionen wiederum ist stark von der Rate der elastischen Stöße abhängig, die wiederum von den lokalen Ionendichten abhängt.

Diese und weitere räumliche Effekte, die letztlich immer Folge der genauen Form des Magnetfeldes sind, und deren Bedeutung experimentell an der Empfindlichkeit des extrahierten Ionenspektrums auf kleine Änderungen der Magnetfelder deutlich wird, können von (diesen) 0-dimensionalen Modellen nicht erfaßt werden⁷.

3.2 Grundprinzip des hier vorgestellten Modells

Ziel der Simulationen ist die Bestimmung der räumlichen Verteilung der verschiedenen Plasmateilchen, die sich nach der Zündung im dynamischen Gleichgewicht für

⁶Eine wichtige Erweiterung besteht z.B. in der Kopplung des Ratengleichungssystems für die Teilchendichten mit Gleichungen zur selbstkonsistenten Bestimmung der Iontemperatur [Shi92a].

⁷In die 0-dimensionalen Ratengleichungsmodelle gehen als Parameter des Magnetfeldes im allgemeinen lediglich die axiale und radiale Ausdehnung des zentralen Plasmas sowie das Spiegelverhältnis (siehe Erläuterung zu (2.19)) ein.

$t \rightarrow \infty$ einstellt, um davon vor allem die extrahierten Ionenströme abzubilden.

Dazu wird ein orts aufgelöstes Ratengleichungssystem für die Teilchendichten aufgestellt, das die zeitliche Entwicklung einer anfangs vorgegebenen Verteilung bis zur Konvergenz beschreibt.

3.2.1 Ratengleichungssystem

Die Dichteverteilungen der Elektronen und der schweren Teilchenspezies s sind Funktionen, die vom Ort und der Zeit abhängen:

$$n_e = n_e(\vec{r}, t) \quad \text{Elektronen,} \quad (3.1)$$

$$n_s = n_s(\vec{r}, t) \quad \text{Spezies } s. \quad (3.2)$$

Der Teilchenindex s wird in dieser Arbeit allgemein als 2-Tupel benutzt, das sowohl die Gassorte als auch den Ladungszustand z spezifiziert, um auch Gasgemische behandeln zu können. Bei einem Gemisch aus Helium und Argon kann s z.B. die Werte (He,0), (He,1), (He,2) und (Ar,0) bis (Ar,18) annehmen. An manchen Stellen wird auf die Angabe der Gassorte verzichtet, wenn dies unzweideutig möglich ist. Der Einfachheit halber wird in diesen Fällen lediglich der Ladungszustand z angegeben.

Ist eine Quelle noch nicht gezündet, so sind Elektronen- und Ionendichten fast gleich Null, während die Neutralteilchen vom Gaseinlaß und Abpumpen abhängige, von Null verschiedene Dichten haben, die auf makroskopischer Skala zeitlich konstant sind. Wird dann die Mikrowelle eingeschaltet, werden die wenigen ungebundenen Elektronen geheizt und der Ionisationsvorgang beginnt. Dadurch steigen Elektronen- und Ionendichten so lange an, bis die Konkurrenzprozesse so groß werden, daß sich ein Gleichgewicht einstellt.

Mathematisch läßt sich diese zeitliche Entwicklung durch ein System von $N_s + 1$ gekoppelten (nichtlinearen) Differentialgleichungen beschreiben, wobei N_s die Anzahl der schweren Teilchenspezies s ist:

$$\dot{n}_e(\vec{r}, t, \dots) \equiv \frac{d}{dt} n_e(\vec{r}, t, \dots) =: R_e(\vec{r}, t, \dots), \quad (3.3)$$

$$\dot{n}_s(\vec{r}, t, \dots) \equiv \frac{d}{dt} n_s(\vec{r}, t, \dots) =: R_s(\vec{r}, t, \dots), \quad \forall s. \quad (3.4)$$

Neben den Abhängigkeiten von Ort und Zeit gehen in die Raten R_e und die R_s natürlich auch äußere Parameter wie z.B. Temperatur, Magnetfeld etc., aber auch die momentanen Dichteverteilungen selbst ein.

Die Funktionen $R_{e,s}$, die also angeben, wie schnell sich die jeweiligen Dichten ändern, sind durch die verschiedenen Plasmaprozesse p determiniert und lassen sich nach diesen aufsplitten:

$$R_s = \left(\frac{dn_s}{dt} \right) = \sum_{\text{Prozeß } p} \left(\frac{\partial n_s}{\partial t} \right)^{(p)}. \quad (3.5)$$

Analoges gilt für R_e .

Der Bestimmung der Prozeßraten $(\partial n_s / \partial t)^{(p)}$ widmen sich die Kapitel 3.3 bis 3.7.

3.2.2 Diskretisierung

Kennt man alle Prozeßraten $(\partial n_s / \partial t)^{(p)}(t)$, läßt sich im Prinzip die zeitliche Entwicklung der Ladungszustandsverteilung durch Integration von (3.3) und (3.4) verfolgen. Aufgrund der Kopplung und der Komplexität von R_e und den R_s ist dies jedoch nur in numerischer Näherung möglich.

Zellaufteilung des Plasmakammervolumens

Dazu wird das Volumen der Plasmakammer durch ein Raster in N_{cell} Zellen aufgeteilt (siehe Abbildung 3.1) und für jede Teilchenspezies in jeder Zelle c eine Variable $n_{s,c}$ (für die Elektronen $n_{e,c}$) definiert, die einen Näherungswert für die Dichte $n_s(\vec{r}_c)$ bzw. $n_e(\vec{r}_c)$ zu einem bestimmten Zeitpunkt repräsentiert, wobei \vec{r}_c der Mittelpunkt der Zelle c sei.

Die Rasterung erfolgt unter Ausnutzung der gegebenen Zylindersymmetrie nach folgendem Schema:

- Axial wird der Plasmakammerzylinder (Länge L , Radius R) in N_z flache Zylinder gleicher Dicke $\Delta z = L/N_z$ zerlegt.
- Diese werden jeweils in radialer Richtung durch äquidistante, konzentrische Kreisschnitte in N_r "Zwiebelringe" (genauer Hohlzylinder) aufgeteilt, deren radiale Dicke jeweils $\Delta r = R/N_r$ beträgt.
- In azimuthaler Richtung wird die Aufteilung der einzelnen Ringe von innen nach außen gem. der folgenden rekursiven Vorschrift vorgenommen:

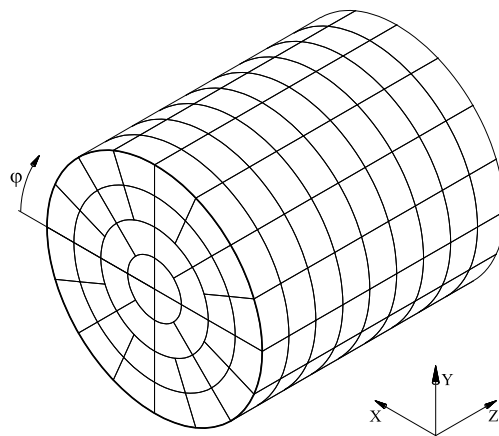


Abbildung 3.1: Beispiel einer Zellaufteilung der Plasmakammer mit $(N_z, N_r, N_{\varphi 0}) = (9, 4, 4)$ (siehe Text).

- Der innerste Ring einer Scheibe ist ein Zylinder (Länge Δz , Radius Δr). Er wird durch vom Zentrum aus radial verlaufende Schnitte in $N_{\varphi 0}$ gleich große "Tortenstücke" zerlegt, wobei der erste Schnitt bei $\varphi = 0$ liegt (siehe Beispiel in Abbildung 3.1 mit $N_{\varphi 0} = 4$). Alle so erhaltenen Zellen haben das Volumen $V_0 = \pi (\Delta r)^2 \Delta z / N_{\varphi 0}$.
- Der nächste, weiter außen liegende Ring wird zuerst nur an denselben Winkelpositionen wie der innere Vorgänger zerlegt. Die Volumina der so entstandenen Zellen sind stets größer als die der Zellen des Vorgänger-ringes. Überschreiten sie das 1,5-fache von V_0 , so werden die Zellen genau noch einmal in azimuthaler Richtung halbiert.
- Die noch weiter außen liegenden Ringe werden wie im letzten Schritt behandelt.

Durch dieses Verfahren ist gewährleistet, daß erstens die Volumina der Zellen verschiedener Ringe nicht zu sehr variieren und zweitens zu einer Zelle immer genau eine Nachbarzelle in Richtung zur Symmetrieachse existiert. In radialer Richtung nach außen hat eine Zelle entweder eine oder zwei Nachbarzellen.

Diskretisierung der Differentialgleichungen

Durch diese Zellaufteilung können die Gleichungen (3.4) in ein System von $N_s \cdot N_{cell}$ Differentialgleichungen für die Dichten $n_{s,c}$ an den N_{cell} Stützpunkten \vec{r}_c überführt werden:

$$\frac{d}{dt} n_{s,c} = R_s(\vec{r}_c, t, \dots), \quad \forall s, c. \quad (3.6)$$

Je höher die Anzahl N_{cell} der Zellen bzw. Stützpunkte ist, desto besser nähern sich die Lösungen von (3.6) der Lösung von (3.4) an:

$$\lim_{N_{cell} \rightarrow \infty} n_{s,c}(t \rightarrow \infty) \rightarrow n_s(\vec{r}_c, t \rightarrow \infty). \quad (3.7)$$

Analoges ließe sich auch für die Elektronendichteverteilung $n_e(\vec{r})$ aufstellen. Es sei aber schon hier darauf hingewiesen, daß diese nach einem anderen Prinzip determiniert werden (siehe Kapitel 3.3). Daher wird bis dahin nur noch von den Dichten der schweren Plasmateilchen die Rede sein.

3.2.3 Zeitintegration

Um die Stützpunkte $n_{s,c}$ der Dichteverteilungen $n_s(\vec{r})$ im Gleichgewicht für $t \rightarrow \infty$ näherungsweise zu bestimmen, muß das Gleichungssystem (3.6) numerisch gelöst werden. Dazu wird eine Startverteilung vorgegeben, bei der es sich um die bekannte Verteilung vor der Plasmazündung, aber auch um eine (schlechte) Abschätzung handeln kann. Mit dieser Startverteilung stellt (3.6) ein typisches Anfangswertproblem dar.

Zu dessen Lösung wird das EULER-Verfahren [PTVF92] eingesetzt, bei dem sich die Dichten $n_{s,c}(t_0 + \Delta t)$ nach einem Zeitschritt Δt aus den Dichten zum Zeitpunkt t_0 wie folgt ergeben:

$$n_{s,c}(t_0 + \Delta t) = n_{s,c}(t_0) + \dot{n}_{s,c}(t_0) \cdot \Delta t. \quad (3.8)$$

Details der Implementation sind in Anhang D.1.4 festgehalten.

3.2.4 Einschränkungen

Simulierte Teilchenspezies

Zu den Spezies eines typischen ECRIS-Plasmas zählen neben Elektronen, neutralen Atomen und deren Ionen auch molekulare, zum Teil ionisierte Verbindungen (siehe Extraktionsspektrum in Abbildung 2.8). Diese Spezies werden hier ignoriert, da die Berücksichtigung der mit ihnen verbundenen Prozesse wie Dissoziation, Verbindung mit anderen Neutralteilchen oder Radikalen einen Mehraufwand bzgl. Datenorganisation und Prozeßbeschreibung bedeuten würde, der zur Zeit in keinem Verhältnis zu den zu erwartenden Ergebnissen steht.

Daher wird für molekulare Gase vereinfachend angenommen, daß diese im Plasma sofort dissoziieren und nur atomar vorliegen.

Genauigkeit der Zeitentwicklung

Einige der in den folgenden Abschnitten aufgestellten Prozeßraten $(\partial n_s / \partial t)^{(p)}$ können nur für den Fall aufgestellt werden, daß sich das gesamte System schon

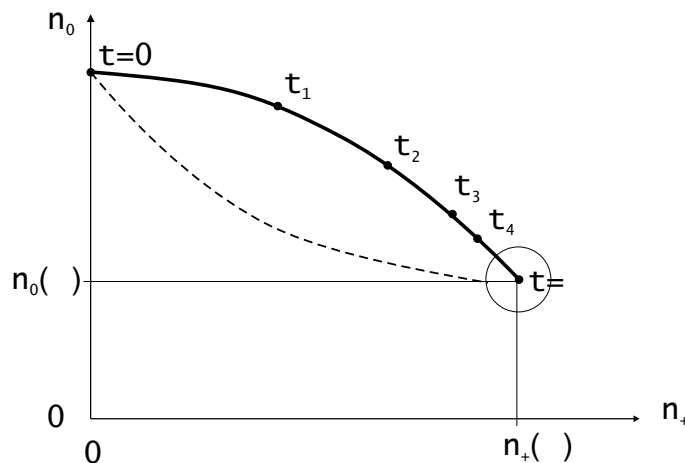


Abbildung 3.2: Skizze zur tatsächlichen (durchgezogene Linie) und simulierten (gestrichelte Linie) zeitlichen Entwicklung der CSD, beispielhaft dargestellt in der Ebene, die durch die mittlere Neutraleilchendichte n_0 und die mittlere Dichte positiver Ladungen $n_+ \equiv \sum_s z_s \cdot n_s$ aufgespannt wird. Der tatsächliche und der simulierte Weg im $(N_s \cdot N_{cell})$ -dimensionalen, von den Dichten $n_{s,c}$ aufgespannten Raum können *zwischenzeitlich* stärker voneinander abweichen. Die Annäherung an den Gleichgewichtszustand $t \rightarrow \infty$ erfolgt immer langsamer. Wird eine vorgegebene Änderungsrate unterschritten, so bricht die Simulation ab.

im dynamischen Gleichgewicht befindet⁸. Je näher das System jedoch dem Gleichgewicht kommt, desto kleiner werden die Fehler der angesetzten Prozeßraten und die Abweichung von der tatsächlichen Entwicklung des Systems.

Ein mathematischer Konvergenzbeweis dieser Aussage, ist (hier) aufgrund der Komplexität des untersuchten Systems nicht möglich. Die durchgeführten Simulationen und Tests (siehe Abschnitt 4.4) bestätigen dies jedoch.

Der simulierte Weg des Systems durch den Raum der Stützpunkte $n_{s,c}$ wird also zwischen dem Start bei $t = 0$ und der Konvergenz für $t \rightarrow \infty$ von dem tatsächlichen abweichen (siehe Abbildung 3.2). Dennoch kann die Darstellung der *simulierten* zeitlichen Entwicklung von bestimmten Daten (siehe Abschnitt 4.3.1) zum qualitativen Verständnis der Vorgänge beitragen.

3.3 Elektronen

Die Elektronen sind in EZR-Plasmen von zentraler Bedeutung. Denn zum einen ist die Elektronenstoßionisation der dominante Ionisationsprozeß, und zum anderen beeinflussen die Elektronen den Ionentransport (siehe Abschnitt 3.6.2).

3.3.1 Lebenszyklen der Elektronen

3.3.1.1 Generation

Es gibt mehrere Mechanismen durch welche ungebundene Elektronen in ECRIS-Plasmen entstehen.

Ionisation. Der darunter wichtigste ist die in Abschnitt 3.5.1.1 detaillierter beschriebene Elektronenstoßionisation (3.32), bei der hochenergetische Elektronen gebundene Elektronen aus den Hüllen der Atome und Ionen herausschlagen.

Daneben besteht prinzipiell noch die Möglichkeit der Photoionisation (siehe Abschnitt 3.5.1.3), die jedoch in den hier simulierten Plasmen eine vernachlässigbare Rolle spielt.

Sekundärelektronen von den Wänden. Als Elektronenquelle dient auch die Plasmakammerwand. Wenn Elektronen oder Ionen auf diese treffen, können Sekundärelektronen aus dieser herausgelöst werden, die dann durch das relativ zur Wand positive Plasmapotential (siehe Abbildung 3.3) in das Plasma hinein beschleunigt werden.

⁸Hierzu gehören zum Beispiel die Transportraten, die von der Ionentemperatur abhängen. Da deren Berechnung sehr rechenintensiv ist, wird die Ionentemperatur von Anfang an auf den im Gleichgewicht erwarteten Wert gesetzt.

Der dritte Mechanismus, dessen Bedeutung als Elektronenlieferant für EZR-Plasmen quantitativ bisher noch nicht untersucht wurde, ist die Autoionisation von (hoch-)geladenen Ionen während ihrer Neutralisation an der Plasmakammerwand. Während sich ein Ion langsam der Wand nähert, beginnt es, Elektronen aus dem Festkörper einzufangen. Dieser Einfang erfolgt (u.a. abhängig vom Abstand zur Oberfläche) bevorzugt in hoch angeregte RYDBERG-Zustände. Die Abregung erfolgt allgemein kaskadenartig, und die dabei frei werdende Energie kann an schwächer gebundene Elektronen übertragen werden. Übersteigt sie deren Bindungsenergie, wird letzteres ionisiert (AUGER-Effekt). Auf diese Weise kann ein sich der Wand näherndes Ion geradezu ein Elektronenfeuerwerk verursachen, bevor es komplett neutralisiert ist.

Weitere Sekundärelektronen entstehen durch den Aufprall von extrahierten Ionen auf die Extraktionselektrode. Wenn sie in die Plasmakammer zurückgelangen, entspricht ihre kinetische Energie der Extraktionsspannung (bei ECRIS 3 im allgemeinen 20 kV).

3.3.1.2 Aufenthalt in der Plasmakammer

Abhängig vom Ort ihrer Freisetzung können die Elektronen in EZR-Plasmen zwei unterschiedliche Lebensläufe haben. Werden sie im Inneren der Plasmakammer erzeugt, gelangen sie mit gewisser Wahrscheinlichkeit in die Resonanzzone, in der sie erstmalig geheizt werden. Im allgemeinen gewinnen sie dabei hauptsächlich Rotationsenergie, wodurch sich auch ihr Einschluß im Spiegelfeld verbessert (siehe Abschnitt 2.3.1.2). Mit zunehmender Energie werden sie in die Lage versetzt, Atome und Ionen zu ionisieren.

Gleiches gilt für (Sekundär-)Elektronen, die dort an der Plasmakammerwand freigesetzt wurden, von wo die Magnetfeldlinien in die Resonanzzone laufen. Sie werden aufgrund des positiven Plasmapotentials (siehe Abbildung 3.3) entlang der Feldlinien ins Kammerinnere beschleunigt, bevor sie ebenfalls EZR-geheizt werden.

Elektronen, die an Orten entstehen, von denen aus keine Feldlinien in die Resonanzzone führen, unterliegen hauptsächlich der LORENTZ-Kraft sowie dem elektrischen Feld, das sich aufgrund der Raumladungen einstellt. Simulationen von HEINEN ohne elektrostatische Felder zeigen, daß es Bereiche zwischen den Polen des Hexapols gibt, in denen sie länger gefangen bleiben können [Hei02].

3.3.1.3 Verlust

Da Elektron-Ion-Rekombinationen im Plasma vernachlässigbar sind (siehe Abschnitt 3.5.2), erfolgt der Elektronenabbau durch Teilchenverluste an die Wand.

Die geheizten Elektronen werden nach (2.18) mit höherer Rotationsenergie immer besser im magnetischen Spiegelfeld eingeschlossen, und der Einfluß anderer geladener Teilchen auf sie nimmt mit höherer Energie ab (siehe Abschnitt 2.3.2). Ihre Verluste können daher nur zustande kommen, wenn sie von der Mikrowelle wieder

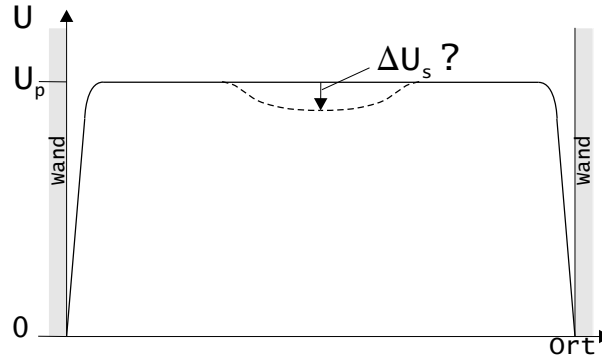


Abbildung 3.3: Skizze des Verlaufs des elektrischen Potentials U im Plasmabehälter für einfache, magnetfeldfreie Plasmen (durchgezogene Linie). Es wird dadurch erklärt, daß die im Vergleich zu den Ionen schnelleren Elektronen das Plasma anfänglich auch schneller als die Ionen verlassen. Dadurch baut sich ein elektrisches Gegenfeld auf, bis die permanenten Ladungsverluste von Elektronen und Ionen gleich groß sind [Che74, Kap. 8.2.1]. Da E-Felder in Plasmen im allgemeinen jedoch auf Strecken der DEBYE-Länge abgeschirmt werden, kann dieses Feld nur in der sogenannten Wandschicht existieren, die nur einige DEBYE-Längen dick ist.

In ECRIS-Plasmen werden die geheizten Elektronen örtlich stark konzentriert, was zu einer lokalen Absenkung U_s (gestrichelte Linie) des Plasmapotentials U_p führen kann [Wes82, Gel96], deren genauer Verlauf jedoch unbekannt ist. Nur durch eine solche Potentialabsenkung können die Ionen lange genug eingeschlossen werden und zu den beobachteten Strömen führen [Wes82] (siehe auch Abschnitt 4.6.5).

abgebremst werden oder durch Stöße in den Verlustkegel des Spiegelfeldes (siehe Abbildung 2.10 auf Seite 18) gestreut werden. Danach können sie immer noch sehr hohe Energien im keV-Bereich besitzen, die sie erst in der Kammerwand (teilweise durch die zu beobachtende Bremsstrahlung) abgeben⁹. Das Plasmapotential (siehe Abbildung 3.3) im Bereich von 10 bis 20 V spielt dabei für sie keine Rolle.

Ungeheizte Elektronen können dagegen nur dann entkommen, wenn sie sich im Fluchtkegel befinden und ihre kinetische Energie größer als das Plasmapotential ist. Umgekehrt kann daher ihre Temperatur durch das Plasmapotential abgeschätzt werden.

3.3.2 Modellierung der Elektronen

Schon früh wurde in der Arbeitsgruppe mittels Einzeltrajektorienimulationen von Elektronen [Leo95, Hei97, HRD⁺98, HVA99, Hei02] begonnen, deren Dichte- und Energieverteilungen zu ermitteln. Dabei zeigte sich, daß die EZR-geheizten, hochenergetischen Elektronen bereits in wenigen 100 μs stabile räumliche Verteilungen annehmen, die in erster Näherung als unabhängig vom sonstigen Zustand des Plasmas angesehen werden können [Hei02]. Daher bietet es sich an, die so ermittelten Dichteverteilungen für das hier entwickelte Ratenmodell zu nutzen.

⁹Ein geringer Teil der Bremsstrahlung stammt natürlich auch aus dem Plasma. Die dortigen Teilchendichten reichen jedoch nicht aus, um die beobachteten Intensitäten zu erklären.

3.3.2.1 Kurzbeschreibung der Elektronensimulationen von Heinen

Um die gesuchten Verteilungen der Elektronen zu ermitteln, wird wie folgt vorgegangen [Hei02, Kap. 5.3]: Mehrere 10.000 Elektronen werden nacheinander an zufälligen, homogen verteilten Orten innerhalb der Plasmakammer mit Geschwindigkeitsvektoren gestartet, deren Betrag einer Energie von 10 eV entspricht¹⁰, und deren Richtungen zufällig und isotrop verteilt sind. Die einzelnen Elektronenbahnen werden dann mit Hilfe des BORIS-Algorithmus [BL91, Kap. 15-4] unter Einfluß des statischen Magnetfeldes und des elektrischen Wechselfeldes einer angenommenen Resonatormode verfolgt, bis eine der folgenden Abbruchbedingungen erfüllt ist:

- Die maximale Simulationszeit von typischerweise $t_{max} = 5$ ms ist erreicht.
- Das Elektron trifft auf die Wand.
- Das Elektron ist auf unter 1 eV abgebremst worden¹¹.

Des weiteren wird der Einfluß verschiedener impulsändernder Stöße (elastische und ionisierende) mittels Monte-Carlo-Techniken erfaßt. Zur Ermittlung der gewünschten Verteilungen werden die relevanten Daten der Teilchen in äquidistanten Zeitschritten registriert.

Physikalische Parameter der Simulationen sind vor allem das äußere Magnetfeld, die Resonatormode und die zugehörige Amplitude der elektrischen Feldstärke, die anhand von Resonatorgüte und eingestrahelter Mikrowellenleistung abgeschätzt wird [Hei97, Kap. III.2.2.3, S. 57].

3.3.2.2 Unterteilung der Elektronen in zwei Populationen

Derartige Trajektorienberechnungen sind jedoch nur dann aussagekräftig, wenn die mittleren stoßfreien Zeiten der Teilchen deutlich größer als die Zeiten für mehrere Zyklotron-Umläufe sind. Da dies aber nur für Elektronen mit kinetischen Energien ab 1 eV gilt¹², werden die Bahnberechnungen von Elektronen, die nicht innerhalb von 50 ns die Resonanzzone durchlaufen haben, abgebrochen und ignoriert [Hei02, Kap. 5.3].

Aufgrund dieses Auswahlkriteriums beschränkt sich der Gültigkeitsbereich der Elektronensimulationen auf eine Teilmenge der Elektronen. Die nicht erfaßten Elektronen mit Energien kleiner 10 eV sind stoßdominiert und streben ein thermisches Gleichgewicht an.

Dieser Auswahl wird auch im Rahmen des hier vorgestellten Modells durch die Unterscheidung zweier Elektronenpopulationen Rechnung getragen. Der Einfachheit

¹⁰Bei dieser Energie sind die Stoßraten so klein (siehe Abschnitt 2.3.2), daß die Elektronen während mehrerer Zyklotronbewegungen als stoßfrei betrachtet werden können.

¹¹Dies tritt aber fast nicht auf [Hei].

¹²Die Wirkungsquerschnitte sowohl für RUTHERFORD-Streuung als auch für SPITZER-Stöße sind umgekehrt proportional zum Quadrat der Stoßenergie (siehe Abschnitt 2.3.2).

halber werden diese beiden in dieser Arbeit durchweg als *heiß* bzw. *kalt* bezeichnet (auch wenn letztere bei Betrachtung des Spektrums der ersten Gruppe genaugenommen ultrakalt sind). Ebenso wäre es möglich, von *simulierten* oder *geheizten* auf der einen und *Hintergrund-* oder *thermischen* Elektronen auf der anderen Seite zu sprechen.

Entsprechende Unterscheidungen verschiedener Elektronenpopulationen werden auch von anderen Autoren gemacht [Wes82, MBB⁺90, WG90, BBG⁺92, SZ95, ZEK95, DJUK96, MDGH99, DKGB00],[Gel96, Abschnitte 1.2.6 u. 1.4.6].

Die Eigenschaften der beiden Gruppen und ihre Implikationen für das Modell werden im folgenden zusammengestellt.

Die heißen Elektronen

- sind definitionsgemäß von der Mikrowelle geheizt worden,
- sind nicht thermisch, d.h. nicht MAXWELL-verteilt (siehe Abschnitt 3.3.4),
- haben eine stark anisotrope Geschwindigkeitsverteilung, da von der Mikrowelle nur die Komponenten senkrecht zum Magnetfeld geheizt werden,
- sind aufgrund der hohen Transversalgeschwindigkeiten besonders gut vom magnetischen Spiegelfeld eingeschlossen (siehe Abschnitt 2.3.1),
- haben Energien bis zu einigen 100 keV [Hei02],
- haben aufgrund ihrer hohen Energien fast vernachlässigbare Stoßfrequenzen (siehe Abschnitt 2.3.2),
- sind daher von den anderen Plasmakomponenten entkoppelt,
- zeigen in den Simulationen scharf begrenzte räumliche Verteilungen [Hei02],
- halten die Ionen räumlich fest (siehe Abschnitt 3.6.2) und
- ionisieren Atome und Ionen (siehe Abschnitt 3.5.1).

Die kalten Elektronen

- sind noch nicht in Resonanz mit der Mikrowelle gewesen oder wieder abgebremst,
- haben Energien $T_i \leq T_{e,cold} \ll T_{e,hot}$ im Bereich des Plasmapotentials¹³ (Elektronen mit kleinerer Energie können das Plasmapotential nicht überwinden, siehe Abbildung 3.3.),
- haben durch die COULOMB-Wechselwirkung hohe Stoßraten untereinander und mit den Ionen,
- streben untereinander und mit den Ionen ein thermisches Gleichgewicht an und haben daher eine MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung,

¹³Bei der hier simulierten ECRIS 3 liegt das Plasmapotential zwischen 5 und 20 V [Rü97, Kap. 8.1.3].

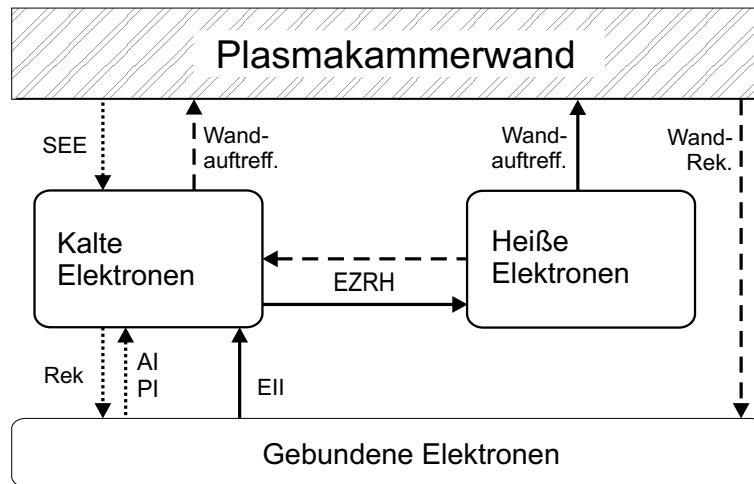


Abbildung 3.4: Übergänge zwischen den zwei idealisierten Elektronenpopulationen des Modells durch die verschiedenen Prozesse. Die Pfeiltypen kennzeichnen, ob die zugehörigen Transferraten im Modell direkt (durchgezogen) oder indirekt (gestrichelt) berücksichtigt werden bzw. als vernachlässigbar (gepunktet) ignoriert werden. EZRH: EZR-Heizung. EII: Elektronenstoßionisation. PI: Photoionisation. AI: Autoionisation. Rek: Rekombination. SEE: Sekundärelektronenemission.

- folgen den Ionen bei räumlichem Ladungsungleichgewicht (siehe Abschnitt 3.6.2) und
- sind bzgl. Elektronenstoßionisation vernachlässigbar (siehe Abschnitt 3.5.1.1).

Zur weiteren Verdeutlichung der Unterschiede der beiden Elektronenpopulationen sind in Abbildung 3.4 die durch die beteiligten Prozesse bedingten Übergangsraten zwischen diesen beiden Populationen und den beiden Elektronenreservoirs dargestellt, die in Form gebundener Elektronen in den Atomhüllen der schweren Plasmateilchen und in der Plasmakammerwand vorliegen. Die kalten Elektronen werden durch Ionisation und Sekundärelektronenemission (SEE) an der Plasmakammerwand erzeugt. Durch die EZRH geht ein Großteil von ihnen zu den heißen Elektronen über. Weitere Verluste sind durch Rekombination mit Ionen und durch den Plasmatransport an die Wände gegeben, wobei die Rekombination mit den Ionen vernachlässigt werden kann (siehe Abschnitt 3.5.2). Für die heißen Elektronen ist die Rekombination mit Ionen aufgrund der hohen Energien noch unwahrscheinlicher, so daß es für sie nur zwei Verlustkanäle gibt: erstens Streuung in den Verlustkegel des magnetischen Spiegelfeldes (siehe Abschnitt 2.3.1) und zweitens Abbremsung durch die Mikrowelle. (Letzteres ist jedoch vernachlässigbar [Hei].)

Der Vollständigkeit halber ist noch der mit der Rekombination von Ionen an der Wand (siehe Abschnitt 3.5.2) verbundene Übergang von Elektronen aus der Plasmakammerwand in die Atomhüllen der Ionen eingezeichnet, die jedoch bzgl. der heißen und kalten Elektronenpopulation nicht von Interesse ist.

3.3.3 Dichteverteilung der heißen Elektronen

Die Einzelelektronensimulationen können (ohne zusätzliche Annahmen) prinzipbedingt keine absolute Dichteverteilung, sondern nur ein Dichteprofil $\rho_e(\vec{r})$ der heißen Elektronen liefern. Dieses Profil wird aufgrund der von HEINEN festgestellten geringen Abhängigkeit von den anderen Plasmakomponenten als zeitlich konstant angenommen, so daß der Separationsansatz

$$n_{e,hot}(\vec{r}, t) \equiv \bar{n}_{e,hot}(t) \cdot \rho_e(\vec{r}) \quad (3.9)$$

gemacht werden kann. Dabei ist $\bar{n}_{e,hot}$ die über das Plasmakammervolumen V gemittelte Dichte, und das Profil ist gemäß

$$V^{-1} \cdot \iiint_V \rho_e(\vec{r}) d^3r \equiv 1 \quad (3.10)$$

normiert.

3.3.3.1 Zeitliche Entwicklung der mittleren Dichte

Um die zeitliche Entwicklung von $\bar{n}_{e,hot}$ zu beschreiben und den Gleichgewichtswert zu finden, werden, wie in Abschnitt 3.2.1 erläutert, Gewinn- und Verlustraten $(d\bar{n}_{e,hot}/dt)^\pm$ angesetzt und daraus die totale Änderungsrate

$$R_e(\dots) = \left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt} \right)^+ - \left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt} \right)^- \quad (3.11)$$

bestimmt.

Gewinnrate

Für die Abschätzung der Zuwachsrates $(d\bar{n}_{e,hot}/dt)^+$ wird vereinfachend angenommen, daß alle durch Ionisation frei gewordenen Elektronen quasi sofort¹⁴ von der Mikrowelle aufgeheizt werden. Dann ist $(d\bar{n}_{e,hot}/dt)^+$ durch die Ionisationsraten der verschiedenen ionisierbaren Teilchenspezies s nach (3.56) gegeben:

$$\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt} \right)^+ = \left(\frac{\partial \bar{n}_{e,hot}}{\partial t} \right)^{ecrh} \quad (3.12)$$

$$\approx V^{-1} \cdot \int_V \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} \right)^{ei}(\vec{r}) d^3r \quad (3.13)$$

$$\stackrel{(3.56)}{=} V^{-1} \cdot \sum_k \sum_s \langle \sigma_{s \rightarrow s'}^{ei} \cdot u \rangle \int_V n_{e,hot}(\vec{r}) \cdot n_s(\vec{r}) d^3r. \quad (3.14)$$

¹⁴Daß die Elektronenheizung im Vergleich zu den Ionisationszeiten schnell ist, zeigen die Simulationen. Die Energieverteilungen stellen sich in wenigen 100 μ s ein [Hei02], während die CSD einige 10 ms bis zum Gleichgewicht benötigt (siehe Abschnitt 4.3.1).

Völlig unberücksichtigt bleiben hierbei alle Sekundärelektronen, für deren Bedeutung es eine Reihe experimenteller Hinweise gibt.

Da aber die heiße Elektronendichte in den Simulationen meist nach oben limitiert werden muß (siehe unten), und das Hauptaugenmerk der Simulation weniger auf die zeitliche Entwicklung als vielmehr auf die Situation im Gleichgewicht gerichtet ist (siehe Abschnitt 3.2.4), soll diese Abschätzung der Zuwachsrates hier genügen.

Verlustrate

Die Dichte der heißen Elektronen wird abgebaut, weil diese durch Stöße in den Verlustkegel des Magnetfeldes geraten können (siehe Abschnitt 2.3.1.2) und dann auf die Plasmakammerwände treffen. Die damit verbundene Verlustrate kann durch die makroskopische Einschlußzeit $\tau_{e,hot}$ beschrieben werden:

$$\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^- = -\frac{\bar{n}_{e,hot}}{\tau_{e,hot}}. \quad (3.15)$$

Der Wert von $\tau_{e,hot}$ wird in HEINENS Elektronensimulationen bestimmt und in den CSD-Simulationen als Simulationsparameter (`csd.tau_eHot`, siehe Anhang D.2.4) vorgegeben.

Limitierung der Dichte durch Mikrowellen-Cut-off

Wie in Kapitel 2.5 erläutert, können sich elektromagnetische Wellen vorgegebener Frequenz ω in magnetisierten Plasmen nur dort ungedämpft ausbreiten, wo die Elektronendichte unterhalb wellentyp-spezifischer Cut-off-Dichten liegt. Da die Mikrowelle aber für die EZR-Heizung der ionisierenden Elektronen verantwortlich ist, schneidet sich das Plasma bei Cut-off seine eigene Grundlage ab. Somit führt der Mikrowellen-Cut-off zu einer Begrenzung von n_e .

Aufgrund der experimentellen Beobachtungen [Vit96, Rü97, Mü00] wird davon ausgegangen, daß die Plasmakammern der in dieser Arbeitsgruppe entwickelten Quellen im Optimalbetrieb als Resonator für die eingestrahlte Mikrowelle fungieren, weswegen die geometrischen Maße der Plasmakammern auch darauf abgestimmt wurden. Da das Magnetfeld in der Plasmakammer stark inhomogen ist, breiten sich die elektromagnetischen Wellen darin mit sich kontinuierlich änderndem Winkel zwischen \vec{k} und \vec{B} aus. Damit findet ein stetiger Wechsel des Wellentyps statt. Hinzukommend ändert eine Welle ihren Typ bei Reflexion an der Resonatorwand.

Kritische Dichte. Damit sich tatsächlich eine stehende Welle ausbilden kann, müssen sich alle Wellentypen im Resonator ausbreiten können. Da bei steigendem n_e als erstes bei $n_e = n_c$ aus (2.69) der Cut-off der O-Welle erreicht wird (siehe Abbildung 2.13 auf Seite 31), wird n_c vielfach als obere Grenze für die Elektronendichte angesetzt. Sie wird auch als *kritische Dichte* bezeichnet, da sie

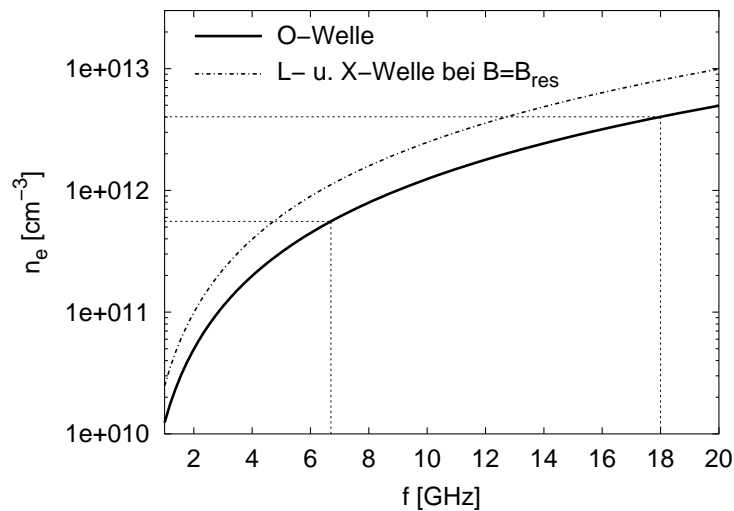


Abbildung 3.5: Cut-off-Dichten der O- sowie der L- und X-Welle (die letzten zwei für den Fall $B = B_{res}$) in Abhängigkeit von der Mikrowellenfrequenz. Markiert sind die Werte der O-Welle für ECRIS 3 bei 6,7 GHz und der im Aufbau befindlichen ECRIS 5 bei 18 GHz. Für eine hohe Elektronendichte ist es also vorteilhaft, mit einer möglichst hohen Mikrowellenfrequenz zu arbeiten.

im Gegensatz zu den Cut-off-Dichten aller anderen Wellentypen unabhängig von der Magnetfeldstärke ist (siehe Abbildung 2.13 auf Seite 31).

Wie in Abschnitt 4.7 gezeigt werden wird, können mit dieser Dichte (für 6,7 GHz liegt die kritische Dichte bei ca. $5,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$) jedoch im Rahmen der in dieser Arbeit entwickelten Simulation nicht die experimentell beobachteten Werte der extrahierten Ströme erreicht werden¹⁵. Nimmt man an, daß im hier entwickelten Modell und in der darauf aufgebauten Simulation kein Fehler dafür verantwortlich ist, muß man in Betracht ziehen, daß die Elektronendichte doch erst bei größeren Werten als der kritischen Dichte limitiert ist. Dazu sei folgendes bedacht.

Störung durch den Cut-off. Beim zeitlichen Anstieg von n_e wird der Cut-off zuerst am Ort des Elektronendichtemaximums erreicht. Steigt n_e weiter an, so wird aus diesem Punkt ein größer werdendes Volumen, in das die elektromagnetische Welle nur noch gedämpft eindringt und von dem aus ein mit n_e zunehmender Teil der Welle reflektiert wird. (Da das Cut-off-Volumen eine endliche Größe hat, kann ein Teil der Welle dieses Volumen auch transmittieren.)

Somit muß das Cut-off-Volumen als Störung der idealen stehenden Welle betrachtet werden, und es stellt sich die Frage, wie groß dieses Volumen werden darf, damit die Mikrowelle bzgl. der EZR-Heizung nicht zu stark gestört wird.

Abbildung 3.6 zeigt die Eindringtiefen $\delta_{O,L}$ der O- und der L-Welle nach (2.72) und (2.73) bei 6,7 GHz in Abhängigkeit von n_e . Selbst bei zweifacher Überschreitung der kritischen Dichte liegt δ_O noch bei mehr als 7 mm (und der L-Cut-off setzt dann

¹⁵Bei diesen Simulationen wurde $\bar{n}_{e,hot}$ so limitiert, daß das räumliche, absolute Maximum von $n_{e,hot}(\vec{r})$ etwa den Wert der kritischen Dichte erreichte.

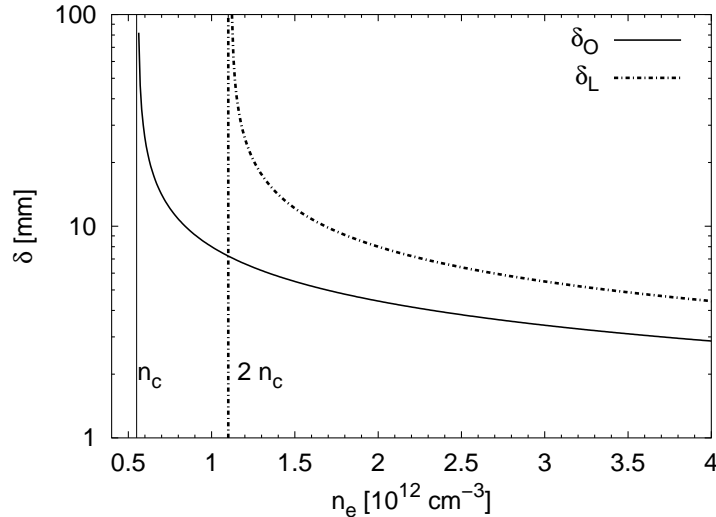


Abbildung 3.6: Eindringtiefen $\delta_{O,L}$ nach (2.72) und (2.73) für die O- und die L-Welle mit 6,7 GHz in Abhängigkeit von der Elektronendichte n_e .

erst ein, siehe Abbildung 2.13 auf Seite 31)!

Abweichung von der idealisierten Beschreibung. Weiter muß bedacht werden, daß die in Kapitel 2.5 dargelegte Beschreibung der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in magnetisierten Plasmen mit ihren vorausgesetzten Idealisierungen hier nur als allererster Ansatz dienen kann, da die simulierten Plasmen diese Voraussetzung nur schwach erfüllen. Drei Punkte sind hervorzuheben:

- Die Dichte des EZR-Plasmas und auch das Magnetfeld sind nicht homogen. Dadurch erfolgt auch schon vor Erreichen des Cut-offs eine Brechung der Wellen am Plasma, die die Ausbildung einer idealen Resonanzmode stört.
- Ist die EZR-Resonanz (wie gewollt) tatsächlich in einem endlichen Volumen gegeben, so gehen die Wellenlänge und die Phasengeschwindigkeit der R-Welle in diesem Resonanzvolumen gegen null. Im Rahmen der idealisierten Beschreibung müßte daher schon ohne Cut-off eine massive Störung der Resonanzeigenschaften vorliegen.

Daß dies nicht der Fall ist, könnte dadurch erklärt werden, daß die tatsächliche Wechselwirkung zwischen Elektronen und Welle schwächer ist als in der idealisierten Herleitung der Beschreibung. Dort wurde nämlich vorausgesetzt, daß die (thermischen) Elektronengeschwindigkeiten kleiner als die Phasengeschwindigkeit der Welle ist. Letztere geht aber in der Resonanz gegen null! Somit könnte ein großer Anteil der R-Wellen-Leistung von den Elektronen unbeeinflusst (quasi wie im Vakuum) durch das Resonanzvolumen propagieren. Aus der Perspektive der Mikrowelle entspricht die reduzierte Wechselwirkung einer effektiv kleineren Elektronendichte.

Entsprechendes könnte auch für die O-Welle bzgl. ihres Cut-offs gelten.

- Berücksichtigt man Stöße der Elektronen in der Beschreibung der Wellenausbreitung, gehen die Dielektrizitätskonstanten von den realen aus (2.60) in komplexe Größen über [Jan92, Gl. (2.5.9), (2.5.10), S. 112]. Das hat zur Folge, daß mit $n_{Re} \neq 0$ und $n_{Im} \neq 0$ gem. (2.66) immer sowohl Transmission und Dämpfung gleichzeitig gegeben sind. Damit verschmieren die mathematisch scharfen Cut-off- und Resonanzbedingungen [Jan92, Kap. 2.5.10].

Fazit. Aufgrund dieser Überlegungen sollte klar geworden sein, daß die effektive obere Grenze für n_e nicht unbedingt durch den Cut-off der idealen O-Welle gegeben sein muß. Zur genaueren Abschätzung wären numerische Berechnungen zur Wellenausbreitung notwendig.

Daß allerdings eine Grenzdichte für das Plasma existiert, zeigen Messungen an ECRIS 3, bei denen die Resonanzbreite $\Delta f(p_{ext})$ in Abhängigkeit vom Gasdruck p_{ext} gemessen wurde [Mü00, Abb. 3.21, S. 43]: Mit zunehmendem Gasdruck (und entsprechend zunehmender Elektronendichte) wurde nach einem erst langsamen Anstieg dieser Breite bei einem bestimmten Wert $p_{ext,0}$ ein Sprung nach oben und dann wieder ein langsamer Anstieg beobachtet.

Leider konnte als Maß für die Elektronendichte allerdings nur der Druck p_{ext} in der Kammer hinter der Extraktionsöffnung gemessen werden. Wie gut die Sprungdichte $p_{ext,0}$ mit der kritischen Dichte n_c übereinstimmt, ist nur mit einer Genauigkeit abzuschätzen, die hier nicht ausreicht.

Um den Cut-off in der Simulation zu berücksichtigen, kann die maximale (über das Plasmakammervolumen gemittelte) Dichte $\bar{n}_{e,hot}^{max}$ der heißen Elektronen ebenfalls als Parameter (`csd.n_eHot_mean_max`, siehe Anhang D.2.4) festgelegt werden. Dieser Wert wird von der Simulation nicht überschritten.

Netto-Änderungsrate

Somit wird für die heißen Elektronen angesetzt:

$$\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right) = \left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^+ + \left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^- \quad (3.16)$$

$$= \begin{cases} \left(\frac{\partial\bar{n}_{e,hot}}{\partial t}\right)^{ecrh} - \frac{\bar{n}_{e,hot}}{\tau_{e,hot}} & \text{für } \bar{n}_{e,hot} < \bar{n}_{e,hot}^{max} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.17)$$

Es sei aber noch einmal darauf hingewiesen, daß dies vor allem aufgrund der fehlenden Berücksichtigung von Sekundärelektroneneffekten nur eine erste Abschätzung ist!

3.3.3.2 Plasmazündkriterium

Damit ein Plasma zündet, muß die Zuwachsrate der heißen Elektronen betragsmäßig größer als deren Verlustrate sein:

$$\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^+ > \left|\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^-\right|. \quad (3.18)$$

Nimmt man wie oben beschrieben an, daß alle durch Elektronenstoßionisation (*electron impact ionization*, EII) frei gewordenen Elektronen instantan auf typische Elektronenenergien geheizt werden, so ist die Zuwachsrate der heißen Elektronen bei der Plasmazündung gleich der Ionisationsrate der Neutralteilchen nach (3.35)

$$\left(\frac{d\bar{n}_{e,hot}}{dt}\right)^+ = \left(\frac{\partial n_0}{\partial t}\right)^{eii} = n_0 \bar{n}_e \langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle. \quad (3.19)$$

Mit (3.15) und (3.19) folgt dann aus (3.18) das Zündkriterium

$$n_0 > (\langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle \tau_{e,hot})^{-1}. \quad (3.20)$$

Die rechte Seite von (3.20) hängt dabei nur von der Energieverteilung der Elektronen und deren mittlerer Einschlußzeit $\tau_{e,hot}$ ab. Somit erklärt (3.20) den experimentell immer gegebenen Mindestdruck, der selbst bei optimaler Mikrowellenleistung, die die elektronischen Größen bestimmt, in der Plasmakammer herrschen muß, damit die Quelle zündet. Dieser kann aber durch Elektroneninjektion, z.B. mit Hilfe einer Elektronenkanone, oder durch Zufuhr leichter ionisierbarer Gase noch reduziert werden.

Brennt die Quelle bereits, kann der Betriebsdruck oft noch unter den Druck gesenkt werden, bei dem die Quelle zündete, bevor das Plasma erlischt, da ihm durch Sekundärelektronenemission von den Wänden und der Extraktionselektrode sowie durch Autoionisationsprozesse angeregter Ionen (siehe Abschnitt 3.5) zusätzliche Elektronen zugeführt werden.

3.3.4 Energieverteilung der heißen Elektronen, EEDF

Befinden sich Teilchen im thermischen Gleichgewicht, wird deren Gesamtenergie durch binäre Stöße untereinander ganz spezifisch in der von MAXWELL und BOLTZMANN beschriebenen Weise auf diese verteilt (siehe Anhang C).

Ganz anders dagegen ist die Situation der heißen Elektronen. Diesen wird durch die EZRH (im statistischen Mittel) permanent Energie zugeführt. Energieabgabe erfolgt bei Stößen mit Atomen, Ionen und Elektronen¹⁶, durch Synchrotronstrahlung sowie beim Auftreffen auf die Plasmakammerwand, was den dominanten Verlustkanal

¹⁶Bei ee-Stößen findet eine auf die gesamte Population bezogene Energieabnahme nur dann statt, wenn mindestens eines von zwei stoßenden Elektronen dadurch in den Verlustkegel (siehe Abbildung 2.10 auf Seite 18) gerät.

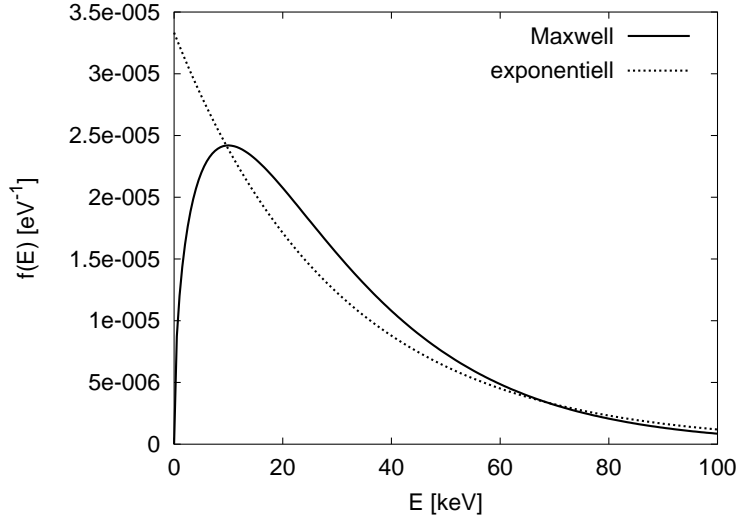


Abbildung 3.7: Vergleich einer exponentiell fallenden und einer MAXWELLSchen EEDF ($T_e = 20$ keV) gem. (3.21) und (C.7), die beide eine mittlere Energie von 30 keV haben.

darstellt [Hei02, Kap. 3.3]. Da die COULOMB-Stöße zwischen den Plasmateilchen mit zunehmender Energie abnehmen (siehe Abschnitt 2.3.2), sind diese Stöße immer weniger in der Lage, die MAXWELL-Verteilung (wieder) herzustellen.

Der genaue Verlauf der Elektronen-Energieverteilung (*electron energy distribution function*, EEDF) stellt sich somit aus dem Gleichgewicht zwischen EZR-Heizung auf der einen und den Energieverlustprozessen auf der anderen Seite ein.

Des weiteren ist die EEDF aufgrund der ei-Stöße nicht unabhängig von den Ionendichten. Dies wird auch experimentell beobachtet. PERRET *et al.* haben an der QUADRUMAFIOS-Quelle Messungen zum Verständnis der EEDF durchgeführt und dabei bestätigt, daß die Gesamtenergie aller Elektronen als auch deren mittlere Energie, die dort im Bereich einiger 10 keV lag, mit zunehmender Plasmadichte sinkt [PGKM99].

Die Elektronensimulationen von HEINEN liefern EEDFs, die sich analytisch am einfachsten durch eine Exponentialfunktion

$$f(E) = \bar{E}^{-1} \exp(-E/\bar{E}) \quad (3.21)$$

mit der mittleren Energie \bar{E} nähern lassen [Hei02]. Der physikalisch falsche Verlauf im Grenzbereich $E \rightarrow 0$ (jede Geschwindigkeits- und Energieverteilung einer Teilchenmenge ohne Drift muß hier gegen 0 gehen) wird für Energien kleiner der Ionisationsenergie (15,8 eV für Ar) übergangen, da der Verlauf der EEDF in diesem Energiebereich nur von marginaler Bedeutung ist¹⁷. Oberhalb dieser

¹⁷Die EEDF geht lediglich in die Ratenkoeffizienten der Elektronenstoßionisation (siehe Abschnitt 3.5.1) ein. Da es sich hierbei gem. (A.5) um einen mit der EEDF gewichteten Mittelwert des Produktes aus Ionisationsquerschnitt und Elektronengeschwindigkeit handelt, und die Wirkungsquerschnitte für Energien unterhalb der der Ionisationsenergien verschwinden, spielt der Verlauf der EEDF *unterhalb dieser Schwelle* bei mittleren Elektronenenergien im Bereich einiger keV praktisch keine Rolle.

Schwellenenergie wird die von HEINEN simulierte EEDF, wie gesagt, jedoch am besten durch eine exponentiell fallende Kurve parametrisiert.

Auf spätere Ergebnisse vorweggreifend sei aber darauf hingewiesen, daß der Energiebereich $15 \leq E \leq 100$ eV sich als besonders wichtig herausstellt, da in diesem Bereich die Ionisationswirkungsquerschnitte für Ar^{z+} -Ionen mit $z \leq 10$ ihre Maxima haben (siehe Abbildung 3.11 auf Seite 61 und folgende).

In vielen Arbeiten wird auch für die hochenergetischen Elektronenpopulationen der Einfachheit halber eine MAXWELLSche EEDF nach (C.7) angenommen. Wie oben erläutert, gibt es hierfür jedoch keine physikalische Grundlage.

3.4 Neutralgasteilchen

Die Neutralgasteilchen (NT) stellen den Anfang in der Folge der durch die Elektronenstoßionisation (EII) durchschrittenen Ladungszustände der Ionen dar (siehe Abbildung 2.7 auf Seite 14), so daß Änderungen ihrer Dichte deutlichen Einfluß auf alle Dichten der geladenen Plasmakomponenten haben. Eine gute Beschreibung ihrer Dichteverteilung ist daher für die räumliche CSD wichtig.

Lebenszyklus der Neutralteilchen

Der Aufenthalt der NT in der Plasmakammer beginnt mit dem Eintritt durch die Gaszufuhröffnung oder die Extraktionsöffnung. In der Plasmakammer bewegen sich die NT dann gradlinig von Wand zu Wand, bis sie entweder

- durch Stoß mit einem hochenergetischen Elektron ionisiert werden (EII, siehe Abschnitt 3.5.1),
- die Plasmakammer durch die Extraktionsöffnung wieder verlassen,
- durch Stoß mit einem Ion ionisiert werden (Ladungsaustausch, siehe Abschnitt 3.5.3) oder
- durch elastischen Stoß mit einem anderen NT von ihrer Bahn abgelenkt werden.

Die letzten zwei Prozesse können im folgenden jedoch vernachlässigt werden, da die zugehörigen mittleren freien Weglängen bei den für eine ECRIS typischen Teilchendichten mehrere Größenordnungen länger als die Ausmaße der Plasmakammer sind (siehe Abbildung 4.33 auf Seite 156).

Wird ein NT ionisiert, so wird das neue Ion (nach eventuell weiteren Ionisationsschritten) irgendwann entweder extrahiert oder trifft mit noch größerer Wahrscheinlichkeit auf die Kammerwand. Wird es dabei neutralisiert, beginnt für das neue NT das gleiche Szenario wie oben, nur mit einer anderen Startposition.

Da die NT im Plasma keine Energieänderungen erfahren, ist ihre Temperatur durch die Plasmakammerwand gegeben.

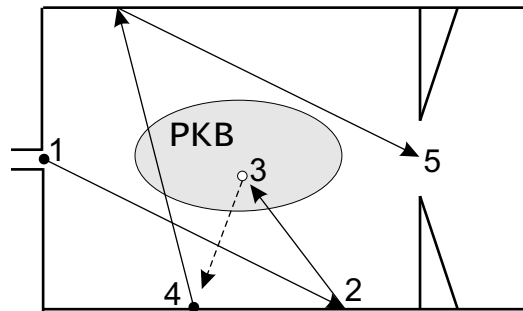


Abbildung 3.8: Schematischer Lebenszyklus der Neutralteilchen in der Plasmakammer. 1: Einlaß durch die Gaszufuhröffnung. 2: mehrfache Reflexion an der Kammerwand. 3: Ionisation im Plasmakernbereich (PKB, Definition siehe Kapitel 3.6). 4: Neutralisation des Ions an der Plasmakammerwand. 5: Entkommen durch die Extraktionsöffnung. (Ein Teil der als NT eingetretenen Teilchen verläßt die Kammer natürlich als Ion durch die Extraktion.)

Reflexion an der Plasmakammerwand

Trifft ein NT auf die Plasmakammerwand, so wird es nicht unbedingt sofort wieder reflektiert. Es besteht vielmehr eine endliche Wahrscheinlichkeit, zuerst an der Wandoberfläche als Adsorbat haftenzubleiben [WAW88, HG94, Ede98]. Das Teilchen löst sich erst wieder, wenn es zufällig genügend Energie aus den Gitterschwingungen der Wand oder von einem anderen auftreffenden NT oder Ion übertragen bekommt, um sich aus der Bindung zu lösen.

Hat sich auf diese Weise auf der Wand eine gewisse Adsorbatschicht ausgebildet, stellt sich ein Gleichgewicht zwischen haftenbleibenden und sich wieder lösenden NT ein, so daß man sich die NT-Dynamik auch als Folge sofortiger Wandreflexionen vorstellen darf.

Für die Teilchenbahn gilt jedoch nicht das aus der Optik bekannte Reflexionsgesetz (Einfallswinkel = Ausfallswinkel). Vielmehr ergibt sich der Ausfallswinkel bei jeder Reflexion zufällig, weil durch die zwischenzeitliche Wandhaftung die Bedeutung des Einfallswinkels verloren geht, und weil die Wand allgemein nicht atomar glatt ist, sondern auf mikroskopischer Skala durch die gegebene Rauigkeit eher einem Gebirge gleicht.

Als Verteilung der Ausfallswinkel Θ , das sind die Winkel zwischen den makroskopischen Wandnormalen und den Ausfalltrajektorien, wird in der Literatur [Ede98, Kap. 5.1]

$$f(\Theta) = \cos \Theta \quad (3.22)$$

angegeben (siehe Abbildung 3.9).

Daß die NT also hauptsächlich senkrecht von der Wand wieder wegfliegen, hat zur Folge, daß die NT vom Zylindermantel auf die Zylinderachse fokussiert werden (siehe Abbildungen 4.4, 4.6, 4.8 und 4.10 ab Seite 125)!

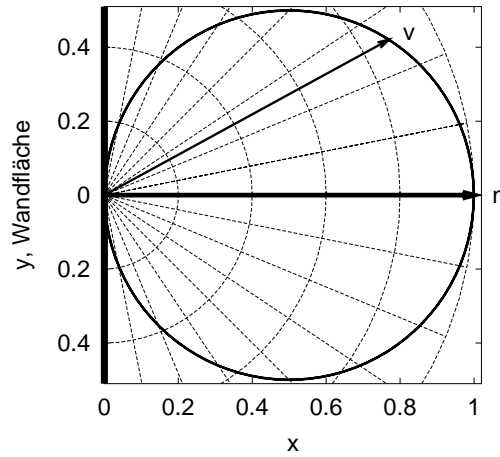


Abbildung 3.9: Polardiagramm der Zufallsverteilung (3.22) der Winkel Θ , mit der die NT von der Wand reflektiert werden. Θ ist der Winkel zwischen der Wandnormalen \vec{n} und der Flugrichtung \vec{v} .

3.4.1 Räumliche Dichteverteilung

Zur Bestimmung der räumlichen NT-Dichteverteilung einer Gassorte werden zuerst nur die NT betrachtet, die durch die Gaseinlaßöffnung kommen. Ist I_{inlet} die Zahl der NT, die von dort pro Zeiteinheit starten, und τ_{inlet} deren mittlere Zeit, bis sie ionisiert werden oder durch die Extraktionsöffnung entkommen, so folgt aus dem Gleichgewicht zwischen der Verlustrate N_{inlet}/τ_{inlet} und I_{inlet} für die Zahl der Teilchen, die sich im zeitlichen Mittel gleichzeitig in der Kammer befinden:

$$N_{inlet} = I_{inlet} \cdot \tau_{inlet} \cdot \quad (3.23)$$

Durch die eine Startposition, die ortsabhängige Ionisationswahrscheinlichkeit und den Verlust durch die Extraktionsöffnung stellt sich ein räumliches Dichteprofil $\rho_{inlet}(\vec{r})$ der betrachteten NT ein, das nur von der Kammergeometrie, der Temperatur der NT und der räumlichen Dichteverteilung der heißen Elektronen abhängig ist. Es sei so normiert, daß bei Integration über das Kammervolumen V

$$\int_V \rho_{inlet}(\vec{r}) d^3r = 1 \quad (3.24)$$

ist, und $\rho_{inlet}(\vec{r})$ somit eine Wahrscheinlichkeitsdichte darstellt. Dann ist die ortsabhängige Dichte der NT einer bestimmten Gassorte, die also durch die Gaszufuhröffnung mit der Rate I_{inlet} eintreten und durch EII oder die Extraktionsöffnung im Mittel nach der Zeit τ_{inlet} verloren gehen, durch

$$n_{inlet}(\vec{r}) = I_{inlet} \cdot \tau_{inlet} \cdot \rho_{inlet}(\vec{r}) \quad (3.25)$$

gegeben.

Diese Dichteverteilung ist in ihrem räumlichen Profil (zumindest bei höheren Elektronendichten) stark durch den Ort des Teilchenursprunges, hier also die Gaseinlaßöffnung, geprägt (siehe z.B. die Abbildungen 4.3 und 4.4 ab Seite 124). Wie oben

beschrieben, kommen *neue* NT aber nicht nur aus der Gaseinlaßöffnung, sondern auch von den Bereichen der Plasmakammerwand, auf die die Ionen auftreffen und neutralisieren. Das sind die Bereiche, wo die Fluchtschläuche des magnetischen Einschlußfeldes die Kammerwand schneiden (siehe Abbildung 4.1 auf Seite 120). Betrachtet man alle Teilchen, die von einem kleinen Flächenelement dieser Bereiche kommen, so ergibt sich für diese wieder eine eigene Dichteverteilung.

Da die von der Gaszufuhröffnung und von den verschiedenen Wandflächenelementen stammenden NT praktisch nicht miteinander wechselwirken, überlagern sich deren Dichten. Somit kann man die Kammerwand in N_W Wandflächenelemente unterteilen und für die NT, die vom j -ten Flächenelement kommen, analog zu I_{inlet} , τ_{inlet} und $\rho_{inlet}(\vec{r})$ die Größen I_j , τ_j und $\rho_j(\vec{r})$ definieren. Damit gilt dann für die totale NT-Dichte:

$$n(\vec{r}) = I_{inlet} \cdot \tau_{inlet} \cdot \rho_{inlet}(\vec{r}) + \sum_{j=1}^{N_W} I_j \cdot \tau_j \cdot \rho_j(\vec{r}). \quad (3.26)$$

3.4.2 Bestimmung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten per Monte-Carlo-Simulation

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten $\rho_{inlet}(\vec{r})$ und $\rho_j(\vec{r})$ sowie die mittleren Aufenthalts- bzw. Lebensdauern τ_{inlet} und τ_j in der Plasmakammer lassen sich bei gegebener Elektronendichteverteilung $n_{e,hot}(\vec{r})$ in sehr guter Näherung per Monte-Carlo-Simulation bestimmen. Dazu werden pro Profil N (\approx einige 100 000) NT nach folgendem Schema simuliert:

1. Wahl einer zufälligen Startposition auf der das Profil charakterisierenden Startfläche. (Für die Teilchen vom Gaseinlaß wird eine Kreisfläche mit einem vorgegebenen Radius von 2 mm angesetzt.) Insgesamt sind die N Startpunkte homogen darauf verteilt.
2. Wahl einer zufälligen Geschwindigkeit, deren Richtung einer Winkelverteilung gem. (3.22) unterliegt und deren Betrag aus der MAXWELL-Verteilung (C.1) mit der Wandtemperatur T stammt.
3. Bestimmung a) des nächsten Auftreffpunktes auf die Plasmakammerwand (bzw. die Extraktionsöffnung), b) der auf der Strecke dorthin durchflogenen Zellen c (siehe Abbildung 3.10) sowie c) der jeweiligen Durchflugzeiten t_c .
4. Pro durchflogener Zelle c wird, falls dort die Elektronendichte größer Null ist, ausgewürfelt, ob das NT in dieser ionisiert wird: Gemäß (A.4) ergibt sich als mittlere Stoßrate für die Ionisation:

$$\tau_{eii}^{-1} = n_{e,hot}(c) \cdot \langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle. \quad (3.27)$$

Dabei sind $n_{e,hot}(c)$ die Dichte der heißen Elektronen in der Zelle c und $\langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle$ gem. (A.3) der Ratenkoeffizient der EII. Für Teilchen, die dieser

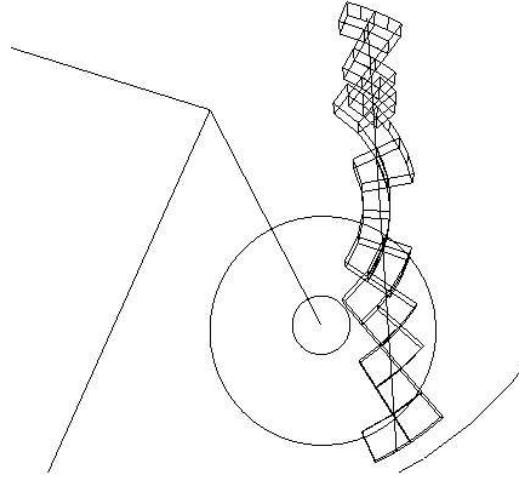


Abbildung 3.10: Trajektorie eines Neutralteilchens mit den von ihm durchflogenen Zellen. Im Hintergrund erkennt man die Plasmaelektrode mit der Extraktionsöffnung, aus der die z -Achse herausführt. An deren anderen Ende liegt der Koordinatenursprung des Systems mit eingezeichneter x - und y -Achse (nach links unten bzw. links oben zeigend).

Derartige 3-dimensionale VRML-Graphiken (siehe Anhang D.2.2, hier handelt es sich nur um einen Screenshot) haben sich in der Entwicklungsphase des Simulationsprogrammes zur visuellen Kontrolle als besonders geeignet erwiesen.

Stoßrate ausgesetzt sind, ergibt sich als Lebensdauerverteilung

$$f(\tau) = \frac{1}{\tau_{eii}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{eii}}\right). \quad (3.28)$$

Aus dieser läßt sich, wie bei [PTVF92] beschrieben, eine zufällige Lebensdauer t_r auswürfeln. Falls t_r kleiner als die Durchflugszeit t_c ist, wird dies so interpretiert, daß eine EII stattfand.

5. Für jede durchflogene Zelle c wird dann eine zu dieser Zelle gehörige Variable T_c um die Durchflugszeit t_c (bzw. t_r im Falle der Ionisation) erhöht.
6. Falls das NT auf der simulierten Geraden ionisiert wurde oder am Ende in die Extraktionsöffnung flog, wird das nächste NT verfolgt. Ansonsten wiederholt sich das Prozedere von 2. an.

Auf diese Weise erhält man für jede Zelle c die von den N NT dort akkumulierte Zeit T_c . Da die Wahrscheinlichkeit, ein bestimmtes, aber zufälliges Teilchen in einer bestimmten Zelle zu finden, proportional zu der Zeit ist, die sich die Ensembleteilchen darin aufhalten (vgl. [Fü81]), ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte für die NT in der Zelle c (mit Volumen V_c) aus den T_c durch einfache Normierung¹⁸:

$$\rho_{inlet,j}^{(c)} \approx \frac{T_c}{V_c \cdot \sum_c T_c}. \quad (3.29)$$

Die für (3.25) und (3.26) benötigten mittleren Aufenthaltsdauern τ ergeben sich ebenfalls aus den T_c :

$$\tau_{inlet,j} \approx N^{-1} \cdot \sum_c T_c. \quad (3.30)$$

¹⁸Die notierten Indizes $inlet, j$ sind nicht als Paar, sondern exklusiv zu verstehen.

3.4.3 Vereinfachungen für das Simulationsprogramm

Simulationstechnisch ist der oben dargelegte theoretische Ansatz mit zwei Problemen behaftet, deren Lösung in diesem Abschnitt erläutert wird.

Ferner sei erwähnt, daß die NT, die durch die Extraktionsöffnung in die Plasmakammer gelangen, vernachlässigt bleiben. Der Grund dafür liegt in der unbekanntenen Verteilung der Flugrichtungen, mit der sie in die Kammer gelangen. (Diese ist abhängig von der komplexen Geometrie aller Oberflächen hinter der Öffnung, siehe Abbildung 2.1 auf Seite 6.) Bei den im experimentellen Betrieb relevanten Gaszufuhrdaten ist der Anteil der hier übergangenen NT jedoch vernachlässigbar.

Gruppierung der Wandflächenelemente

Das erste Problem besteht darin, daß die Zahl N_W der Wandflächenelemente, an denen durch Neutralisation NT entstehen, auch bei relativ grober Aufteilung der drei Plasmakammerwände zu groß wird, um in angemessener Zeit für alle N_W Flächenelemente Monte-Carlo-Simulationen durchzuführen.

Zur Vereinfachung werden daher bestimmte Flächenelemente – natürlich nur solche, an denen überhaupt neue NT erzeugt werden – sinnvoll zusammengefaßt, um für jede solche Gruppe nur ein Profil (pro simulierter Elektronendichte) und eine mittlere Aufenthalts- bzw. Lebensdauer zu ermitteln¹⁹. Derzeit werden vier Gruppen unterschieden, die mit u indiziert werden:

- $u = 1$: Die Flächenelemente auf dem Zylindermantel. Diese liegen alle unter den Polen des Hexapols.
- $u = 2$: Die Flächenelemente auf der Zylinderstirnfläche auf der Gaseinlaßseite.
- $u = 3$: Die Flächenelemente auf der Plasmaelektrode.

Die Flächenelemente der Stirnseiten ($u = 2$ und 3) bilden dabei die von allen Hexapolquellen bekannten Sterne.

Um eine einheitliche Notation zu erhalten, wird der oben benutzte Index *inlet* durch

- $u = 0$ für die Gaseinlaßöffnung
- ersetzt. Damit geht (3.26) in

$$n(\vec{r}) = \sum_{u=0}^3 I_u \cdot \bar{\tau}_u \cdot \rho_u(\vec{r}) \quad (3.31)$$

über.

Mit dieser Gruppierung verliert man natürlich an Genauigkeit. Gemessen an dem eingesparten Programmier- und Rechenaufwand sowie den anderen Unsicherheiten im Rahmen dieses komplexen CSD-Modells, wird dieser Genauigkeitsverlust jedoch als verhältnismäßig klein eingeschätzt.

¹⁹Dementsprechend müssen während der eigentlichen CSD-Simulation natürlich auch die N_W Neutralisationsströme I_j zu einem Gesamtstrom I_u aufaddiert werden.

Interpolation zwischen simulierten Elektronendichten

In den CSD-Simulationen, in denen die Elektronendichte zeitlich nicht konstant bleibt, ändern sich mit dieser natürlich auch die $\rho_u(\vec{r})$ sowie die $\bar{\tau}_u$.

Um nicht für jede sich zwischenzeitlich neu einstellende Elektronendichte neue NT-Monte-Carlo-Simulationen durchführen zu müssen, werden vor der CSD-Simulation nur für N_e unterschiedliche Elektronendichten die NT simuliert. Die Werte für dazwischenliegende Elektronendichten werden dann durch Interpolation ermittelt.

Dabei kommt zugute, daß sich die Dichteverteilungen der heißen Elektronen nach dem Separationsansatz (3.9) nur durch den räumlichen Mittelwert $\bar{n}_{e,hot}$ unterscheiden.

3.5 Ladungsändernde Prozesse

In diesem Kapitel werden die atomphysikalischen Prozesse behandelt, die die Übergänge zwischen den verschiedenen Ladungszuständen verursachen (siehe Abbildung 2.7 auf Seite 14), und ihre Bedeutung für die CSD diskutiert. Die dafür benutzte Notation ist in Anhang A erläutert.

Bezüglich der zeitlichen Entwicklung der CSD ist es sinnvoll, die atomphysikalischen Prozesse nach ihrem Einfluß auf die CSD, also vor allem die Ionisation und die Rekombination, zu unterscheiden. An dritter Stelle ist der Ladungsaustausch zu diskutieren.

3.5.1 Ionisationsprozesse

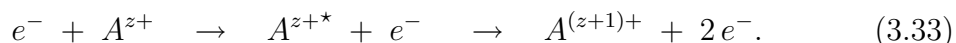
Die wichtigen Prozesse, die zur Erhöhung des Ladungszustands von Atomen und Ionen führen, sind die Elektronenstoßionisation (*electron impact ionization*, EII) und die Photoionisation (PI).

3.5.1.1 Einfache Elektronenstoßionisation, S-EII

Bei der S-EII (*single electron impact ionization*) trifft ein Elektron auf ein Atom oder Ion, wobei genügend Energie auf ein Hüllenelektron übertragen wird, so daß dieses die Hülle verläßt und es damit zu einer Erhöhung des Ladungszustands des primären Atoms/Ions kommt:



Aus theoretischer Sicht sind dabei die *direkte* und die *indirekte* Ionisation zu unterscheiden. Bei der indirekten erfolgt der Ionisationsprozeß über den Zwischenschritt einer Elektronenanregung mit anschließender Autoionisation (AUGER-Prozeß):



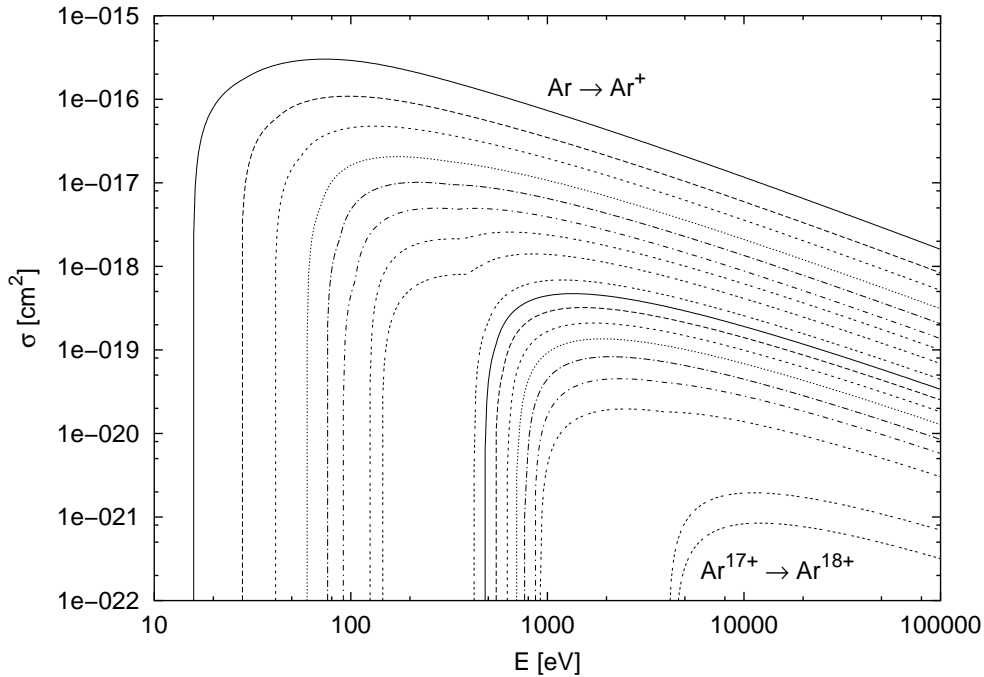


Abbildung 3.11: Mit der LOTZ-Formel (3.34) berechnete S-EII-Querschnitte von Ar und seinen Ionen.

Diese Unterscheidung ist unter anderem deshalb wichtig, weil die quantenmechanischen Berechnungen von Wirkungsquerschnitten meist nur die direkte Ionisation berücksichtigen (können), die aber auch die dominante Rolle spielt [TS99]. Die totalen Wirkungsquerschnitte – nur diese werden experimentell gemessen – werden daher von theoretischen Berechnungen oft leicht unterschätzt [Cra81].

Allgemein steigen die EII-Querschnitte (siehe Abbildung 3.11) ab der Ionisationsenergie an, um dann hinter dem Maximum bei etwa zwei- bis dreifacher Ionisationsenergie langsam wieder abzufallen. Mit zunehmender Ladung z sinken die Wirkungsquerschnitte.

Es gibt eine Reihe (semi-)empirischer Formeln für den S-EII-Querschnitt²⁰. Wohl am häufigsten²¹ trifft man in der Literatur jedoch auf die Formel von LOTZ [Lot67, Lot68a, Lot69, Lot70]:

$$\sigma = \sum_{i=1}^N a_i q_i \frac{\ln(E/P_i)}{E P_i} \{1 - b_i \exp[-c_i (E/P_i) - 1]\}, \quad E \geq P_i. \quad (3.34)$$

Die Summe läuft hier über alle nl -Unterschalen der Elektronenhülle, in denen sich Elektronen des nicht angeregten Atoms/Ions befinden. Meist reicht es jedoch aus, nur über die zwei oder drei äußersten Unterschalen zu summieren [Lot68a]. Dabei

²⁰Eine umfangreiche Übersicht wurde z.B. von YOUNGER und MÄRK [YM85] zusammengestellt.

²¹Dies gilt für Vergleiche experimenteller Daten (siehe z.B. die umfangreiche Sammlung am National Institute of Fusion Science (NIFS) in Japan [NIF01, TK87]) als auch für neueste Vorschläge empirischer Formeln, die noch genauer an experimentelle Werte oder theoretische Berechnungen angepaßt sind (siehe beispielsweise [BRY00]).

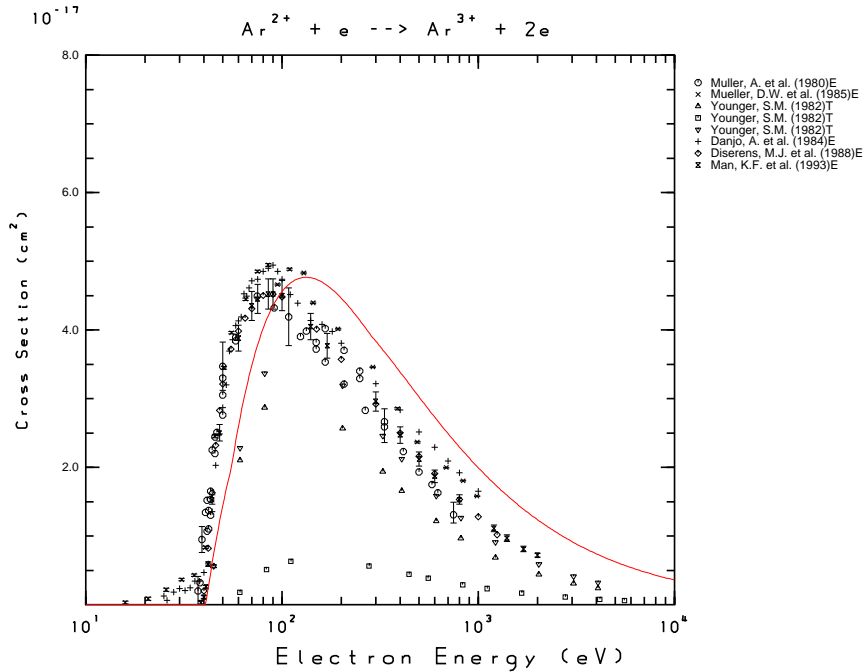


Abbildung 3.12: Meßwerte des S-EII-Querschnitts von Ar^{2+} im Vergleich mit dem nach LOTZ berechneten Verlauf (durchgezogene Linie). Quelle: AMDIS-Datenbank [NIF01]. Mit freundlicher Genehmigung des National Institute of Fusion Science (NIFS), Japan [NIF01].

steht $i = 1$ für die äußerste Schale. E in eV ist die Energie des einfallenden Elektrons, P_i in eV die Bindungsenergie der Elektronen der i -ten Unterschale, q_i die Anzahl gleichwertiger Elektronen in der i -ten Unterschale, und a_i , b_i sowie c_i sind für jedes Ausgangsatom bzw. -ion individuelle, tabellierte Konstanten (siehe [Lot68a, Tab. 1, 2]).

Der Vergleich mit experimentellen Daten, die meist aktueller als diejenigen sind, die LOTZ zur Verfügung standen²², zeigt, daß die LOTZ-Formel bei Ar- sowie O-Atomen und -Ionen dazu neigt, die gemessenen Werte im Bereich von der Schwellenenergie bis etwa zur Energie mit dem maximalen Wirkungsquerschnitt zu unterschätzen und sie im höherenergetischen Bereich zu überschätzen (siehe [TK87] und beispielsweise Abbildung 3.12 für die Ionisation von Ar^{2+}).

Da die Wirkungsquerschnitte letztlich aber nur über die Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \rangle$ in die CSD-Berechnungen eingehen, und die Unsicherheit über den genauen Verlauf der EEDF größer als diese Abweichungen ist, wird die LOTZ-Formel in ihrer Genauigkeit als ausreichend betrachtet und auch in dieser Arbeit verwendet. Für die benötigten Bindungsenergien P_i wurde auf die Werte zurückgegriffen, mit denen auch LOTZ in [Lot68a] gearbeitet hat, und die in [Lot68b] tabelliert sind.

Da von den kalten Elektronen bei angenommenen Temperaturen von wenigen eV nur ein sehr geringer Anteil Energien oberhalb der kleinsten Ionisationsenergien (15.7 eV für Ar) hat, bleiben sie bzgl. der EII unberücksichtigt. Gemäß (A.10) ergibt sich dann

²²Für die hohen Ladungszustände gab es Ende der 1960er Jahre großteils noch keine Messungen.

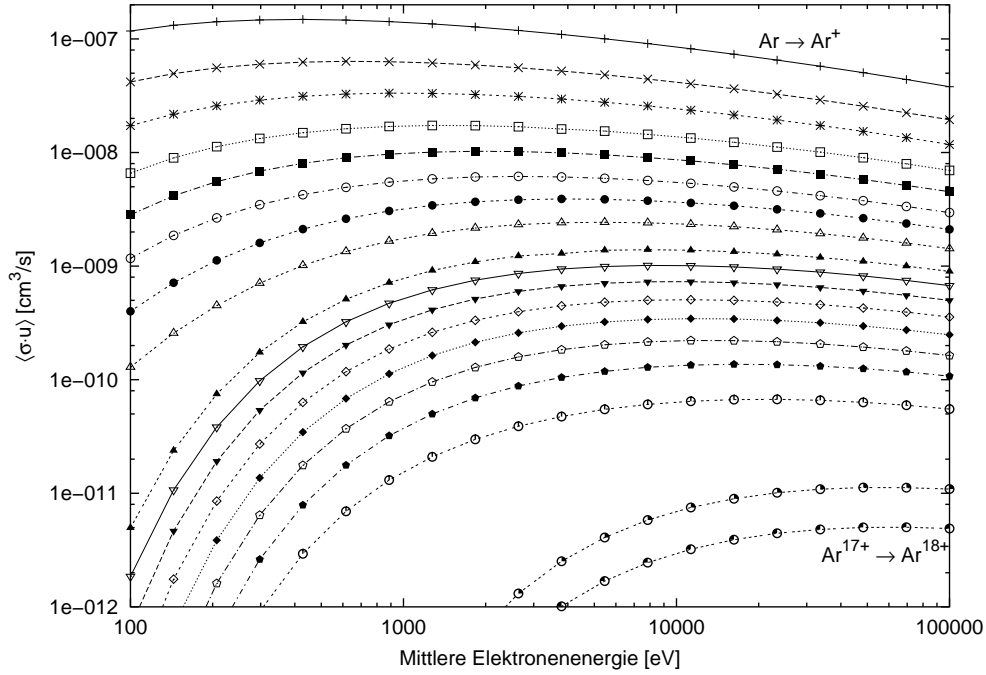


Abbildung 3.13: S-EII-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z+k}^{eii} \cdot u \rangle_{exp}$ von Ar und seinen Ionen in Abhängigkeit von der mittleren Elektronenenergie einer exponentiell fallenden EEDF.

die S-EII-Reaktionsrate:

$$R_{z \rightarrow z+1}^{eii} = n_{e,hot} \cdot n_z \cdot \langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \rangle, \quad \text{für } 0 \leq z \leq Z - 1. \quad (3.35)$$

Dabei werden die Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \rangle$ nach (A.5) mit der EEDF $f_{e,hot}(E)$ der heißen Elektronen (siehe Abschnitt 3.3.4) berechnet:

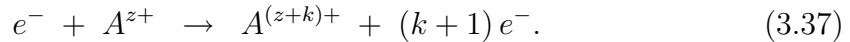
$$\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \rangle = \int_0^\infty \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii}(E) \cdot v(E) \cdot f_{e,hot}(E) dE. \quad (3.36)$$

Energieabhängigkeit der S-EII-Ratenkoeffizienten

Der exakte Wert der $\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \rangle$ hängt gem. (3.36) natürlich vom Verlauf der EEDF ab. Da in dieser Arbeit aber immer mit exponentiell fallenden EEDFs gerechnet wird (siehe Abschnitt 3.3.4), ist in Abbildung 3.13 deren Abhängigkeit von der mittleren Elektronenenergie dargestellt.

3.5.1.2 Mehrfache Elektronenstoßionisation, M-EII

Durch Elektronenstoß können auch mehrere Elektronen aus der Atomhülle geschlagen werden:



Im Vergleich zur S-EII spielen bei der M-EII indirekte Ionisationen, in denen zuerst ein Elektron aus einer inneren Schale herausgeschlagen und dann beim

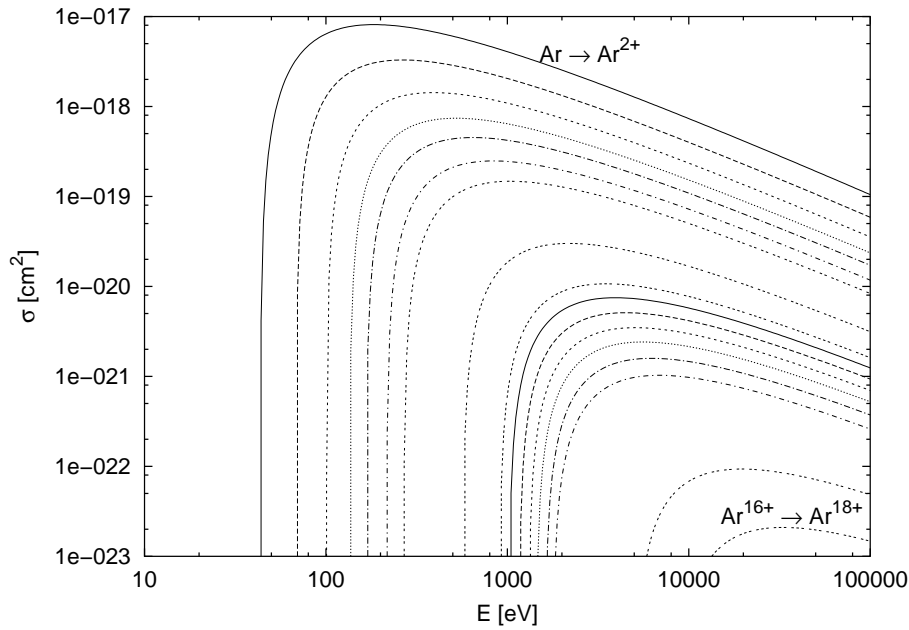
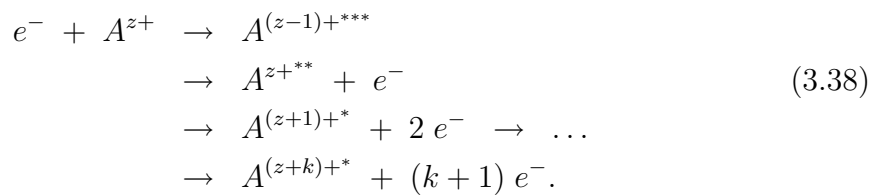


Abbildung 3.14: Wirkungsquerschnitte für die 2-EII von Ar und seinen Ionen nach der Formel (3.39) von SHEVELKO und TAWARA.

Wiederauffüllen durch AUGER-Übergänge zusätzlich ein schwächer gebundenes ionisiert wird, eine zunehmende (oft dominante) Rolle [TS99]. Des weiteren werden auch resonante Prozesse beobachtet, bei denen ein oder mehrere Elektronen innerer Schalen hoch angeregt werden, wobei das einfallende Primärelektron so viel Energie verliert, daß es in einen ebenfalls hoch angeregten Zustand eingefangen wird. Bei deren Abregung kann es schließlich zu Autoionisationen kommen [BDS⁺97, TS99]:



Aufgrund der Komplexität der möglichen Prozeßvarianten und vor allem wegen der dabei zu berücksichtigenden Wechselwirkung der mehr als drei geladenen Teilchen im Ausgangskanal sind rein quantenmechanische Berechnungen für M-EII-Querschnitte hoch kompliziert²³ [DBM00, ST95]. Es gibt aber semiempirische Formeln für die M-EII-Querschnitte für einige Atome und auch Ionen (siehe z.B. [ST95, DBM00] bzw. [BDS⁺97, TS99, PR99]).

²³Besonders schwierig werden M-EII-Berechnungen, wenn die Targets keine Atome sind, da dann die Coulomb-Wechselwirkung im Eingangskanal berücksichtigt werden muß.

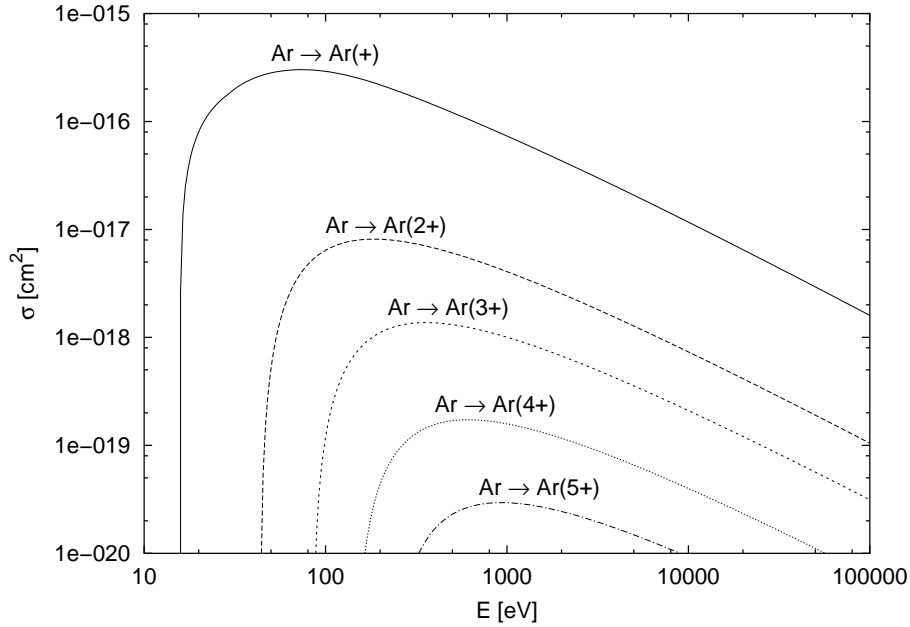


Abbildung 3.15: EII-Querschnitte von neutralem Ar nach LOTZ für die S-EII sowie SHEVELKO und TAWARA für M-EII.

In dieser Arbeit wird die Formel von SHEVELKO und TAWARA [BDS⁺97]²⁴

$$\sigma_k(E) = \frac{a(k) N^{b(k)}}{(I_k/\text{Ryd})^2} \left(\frac{u}{u+1} \right)^c \cdot \frac{\ln(u+1)}{u+1} [10^{-18} \text{cm}] \quad (3.39)$$

mit

$$u := E/I_k - 1$$

$$1 \text{ Rydberg} = 13,6 \text{ eV}$$

verwendet. Dabei sind $k \geq 2$ die Anzahl der herausgeschlagenen Elektronen, I_k die minimale Bindungsenergie²⁵ in eV, um die k am schwächsten gebundenen Elektronen aus der Atomhülle zu entfernen, N die Anzahl der Targetelektronen und $a(k)$ sowie $b(k)$ tabellierte Fitparameter (siehe [BDS⁺97, Tab. 1]) und $c = 1.0$ für neutrale bzw. $c = 0.75$ für geladene Targets.

Diese Formel ist von denen, die in der jüngeren Literatur zu finden sind, die am universellsten einsetzbare. (Die Formel von DEUTSCH und MÄRK [DBM00] ist auf neutrale Targetatome beschränkt, und PATTARD und ROST [PR99] geben die für ihre Formel notwendigen Fitparameter nur für einige wenige ausgewählte Targets an.)

Die Verläufe der M-EII-Querschnitte zeigen ein ähnliches Verhalten wie die der

²⁴In der zitierten Arbeit [BDS⁺97] von BÉLENGER *et al.* wird die Formel (3.39) – dem Titel entsprechend – nur für *Doppelionisation* mit experimentellen Daten verglichen. Dennoch wird sie dort auch für noch größere Ionisationsschritte vorgeschlagen. Mit Meßwerten für Mehrfachionisation wird die Formel, allerdings nur für neutrale Atome, von SHEVELKO und TAWARA in [ST95] verglichen.

²⁵Die Autoren empfehlen für die Bindungsenergien u.a. die (schon für die S-EII benutzten) Werte von LOTZ [Lot68b].

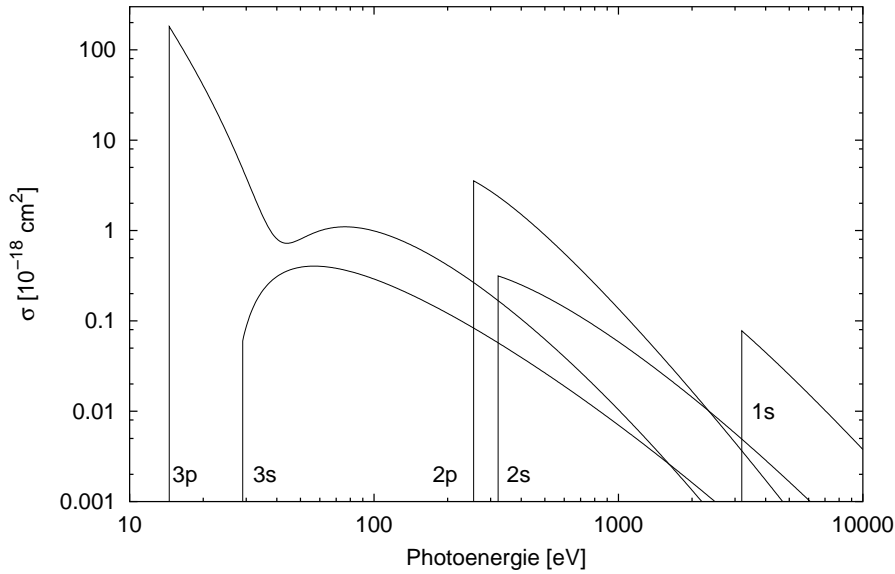


Abbildung 3.16: Photoionisationsquerschnitte für die einzelnen Unterschalen von neutralem Argon, berechnet nach VERNER *et al.* [VY93].

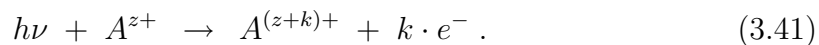
S-EII (vergleiche Abbildungen 3.11 und 3.14). Mit jedem weiteren *gleichzeitig* zu ionisierenden Elektron fällt der Wirkungsquerschnitt etwa um eine Größenordnung (siehe Abbildung 3.15). In den Abweichungen zwischen (3.39) und den Meßwerten, von denen es im Vergleich zur S-EII nur sehr wenige gibt, ist kein allgemeiner Trend zu erkennen. Die Meßwerte der Zweifachionisation von neutralem Ar werden z.B. um das Maximum herum (etwa von 100 bis 1000 eV) bis um etwa Faktor 4 unterschätzt [BDS⁺97, Fig. 1], während die Werte für die Zwei- bis Fünffachionisation zwischen der Schwellenenergie und dem Maximum überschätzt werden [ST95, Fig. 3]. Für $E \rightarrow \infty$ scheinen die theoretischen Werte langsamer abzufallen und dabei geringfügig größer als die Meßwerte zu sein.

Die M-EII-Reaktionsraten ergeben sich schließlich analog zu (3.35):

$$R_{z \rightarrow z+k}^{eii} = n_{e,hot} \cdot n_z \cdot \langle \sigma_{z \rightarrow z+k}^{eii} \cdot u \rangle, \quad \text{für } 0 \leq z \leq Z - k. \quad (3.40)$$

3.5.1.3 Photoionisation

Unter Photoionisation (PI) werden die Prozesse verstanden, bei denen ein Photon auf ein z -fach geladenes Teilchen ($z \geq 0$) trifft und seine Energie $h\nu$ auf Elektronen aus der Hülle überträgt, so daß $k \geq 1$ von ihnen ionisiert werden:



Im folgenden wird gezeigt, daß die PI für die betrachteten Plasmen vernachlässigt werden kann. Da die PI-Querschnitte mit größerem k kleiner werden, beschränkt sich die folgende Diskussion auf den Fall $k = 1$.

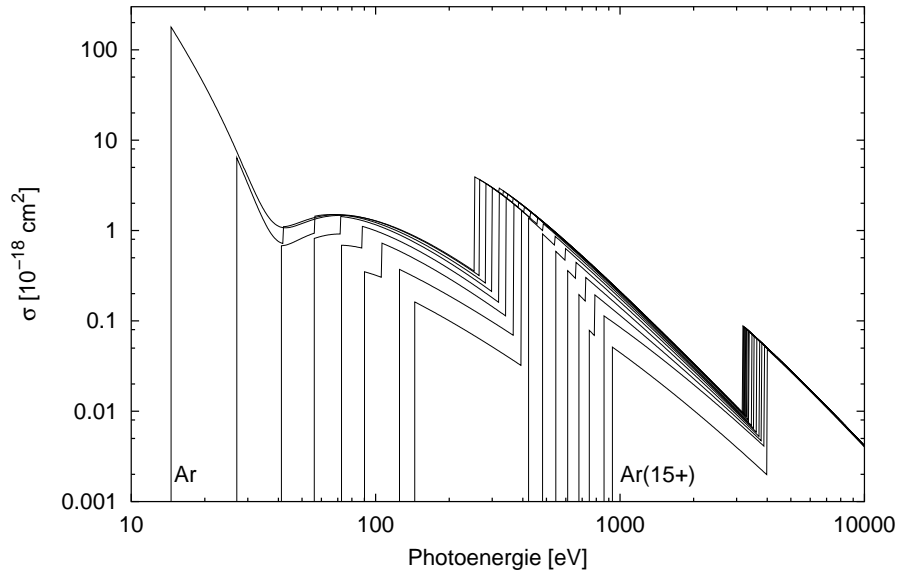


Abbildung 3.17: Totale Photoionisationsquerschnitte für Ar^{z+} von $z = 0$ bis 15, berechnet nach VERNER *et al.* [VY93].

VERNER und YAKOVLEV haben für die partiellen PI-Querschnitte für Atome und Ionen von He bis Zn für alle Unterschalen nl die Fitfunktion

$$\sigma_{nl}(E) = \sigma_0(nl, Z, N) \cdot F(y) \quad (3.42)$$

mit

$$F(y) = [(y-1)^2 + y_w^2] \cdot y^{-Q} \left(1 + \sqrt{y/y_a}\right)^{-P} \quad (3.43)$$

$$y = E/E_0(nl, Z, N)$$

$$Q = 5,5 + l - 0,5P \quad (3.44)$$

$$Z = \text{Kernladungszahl}$$

$$N = \text{Zahl der Elektronen in der Elektronenhülle}$$

zusammen mit den auf 28 Seiten tabellierten Fitparametern P , y_a , y_w , $\sigma_0(nl, Z, N)$ und $E_0(nl, Z, N)$ veröffentlicht [VY93]. Zur Datenreduktion haben sie die $\sigma_0(nl, Z, N)$ und $E_0(nl, Z, N)$ in einem zweiten Schritt durch zwei weitere analytische Ausdrücke gefittet, deren Fitparameter nur noch zwei Seiten Platz beanspruchen.

Die über diesen zweiten Weg berechneten partiellen Wirkungsquerschnitte für die einzelnen Orbitale von neutralem Ar sind in Abbildung 3.16 dargestellt. Im allgemeinen nehmen sie, sobald die erforderliche Bindungsenergie überschritten wurde, mit der Energie schnell ab. Oberhalb der jeweiligen Schwellenenergien sind die PI-Querschnitte innerer *Hauptschalen* stets größer als die der äußeren Schalen.

Ihre größten Ungenauigkeiten haben diese Wirkungsquerschnitte in der Nähe der Schwellenenergie der äußersten Schale von neutralen oder nur schwach ionisierten Targets [VFKY96]. Neuere Berechnungen von VERNER *et al.* zeigen für neutrales

Ar für $E \leq 30$ eV eine deutlich schwächere Energieabhängigkeit von $\sigma_{3s}(E)$ [VFKY96, Fig. 1]: Von $\sigma_{3s}(16 \text{ eV}) \approx 3 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ steigt die Kurve sehr langsam auf ihr absolutes Maximum $\sigma_{3s}(22 \text{ eV}) \approx 4 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ an, was deutlich unter dem in Abbildung 3.16 dargestellten Wert liegt. Für $22 \text{ eV} \leq E \leq 45 \text{ eV}$ liegen die aktuelleren Daten dann allerdings bis um etwa Faktor 2 oberhalb der in Abbildung 3.16 geplotteten Werte. Für noch höhere Energien gehen die Kurven ineinander über.

Auf diesen Querschnitten existieren noch Peaks, die von der resonanten Anregung von Elektronen innerer Schalen stammen, welche sich anschließend über einen AUGER-Prozeß wieder stabilisieren. Diese Effekte sind in den Berechnungen von VERNER und YAKOVLEV [VY93] unberücksichtigt. Für die folgenden Betrachtungen sind sie jedoch vor allem aufgrund des resonanten Charakters uninteressant.

Die sich aus den partiellen PI-Querschnitten ergebenden totalen PI-Querschnitte sind für neutrales Ar und Ar^+ bis Ar^{15+} in Abbildung 3.17 dargestellt. Mit zunehmender Ladung z steigt die Schwellenenergie zwar an, die totalen Wirkungsquerschnitte nehmen bei fester Photoenergie mit z jedoch nur geringfügig ab. Dies hängt damit zusammen, daß die partiellen Wirkungsquerschnitte der Unterschalen *pro Schalenelektron* mit z anwachsen [DKP89]. Quantenmechanisch ist dies auf die mit z ansteigenden Bindungsenergien der Elektronen und die daraus bei gleicher Photoenergie resultierende kleinere Fluchtgeschwindigkeit des ionisierten Elektrons zurückzuführen.

Abschätzung der PI-Raten

Anders als bei der Elektronenstoßionisation und auch den in den nächsten Abschnitten beschriebenen Stoßprozessen ist die Flußdichte der Projektile, hier die der Photonen, so nicht bekannt. Es führt aber die folgende Überlegung zum Ziel.

Die Wahrscheinlichkeit P , mit der ein Target B bei *einer* Photoemission vom Emitter A im Abstand R ionisiert wird, ist gleich dem Verhältnis zwischen zugehörigem Wirkungsquerschnitt σ und der Oberfläche der Kugel mit dem Radius R :

$$P = \frac{\sigma}{4\pi R^2}, \quad \text{für } R \gg \sqrt{\sigma/\pi}. \quad (3.45)$$

Emittiert A mit der Rate f_0 , so ist die PI-Rate von B:

$$f_{PI} = f_0 P = \frac{f_0 \sigma}{4\pi R^2}. \quad (3.46)$$

Existieren nun viele Emittter mit der homogenen Dichte n , so ist die Zahl dN der Emittter im Abstand R bis $R + dR$ gleich dem Produkt der Dichte n und dem Kugelschalenvolumen, also

$$dN(R) = n 4\pi R^2 dR. \quad (3.47)$$

Durch Integration über R erhält man somit die totale PI-Rate für ein einzelnes Target, das sich im Zentrum einer Kugel befindet, die mit Emitttern A der Dichte n

gefüllt ist, die jeweils Photonen mit der Frequenz f_0 emittieren:

$$f_{PI,tot} = f_0 \int_{R_{min}}^{R_{max}} P dN(R) = f_0 \int n \cdot \sigma \cdot dR \quad (3.48)$$

$$= f_0 n \sigma (R_{max} - R_{min}) \quad (3.49)$$

$$< f_0 n \sigma R_{max}. \quad (3.50)$$

Die nach (3.45) mit R^{-2} abnehmende Ionisationswahrscheinlichkeit durch einen einzigen Emittor wird also genau durch die mit R^2 anwachsende Emittorzahl kompensiert.

Setzt man für n die maximale Dichte aller schweren Plasmateilchen von 10^{11} cm^{-3} , für R_{max} den Wert von 10 cm und für *alle* Photonen (d.h. über den gesamten Energiebereich) den Ionisationsquerschnitt auf 10^{-16} cm^2 , so kommt man auf eine obere Grenze von

$$f_{PI,tot} < 10^{-4} \cdot f_0. \quad (3.51)$$

Da die Plasmakammer zylindersymmetrisch ist und nur eine Länge von 8,6 cm hat, handelt es sich hierbei schon um eine Abschätzung deutlich zugunsten der PI!

Nimmt man weiter an, daß alle Atome und Ionen, die als Emittor in Frage kommen, (unabhängig davon, wo sie sich befinden) mit etwa zehnmal größerer Häufigkeit durch Elektronenstoß angeregt als ionisiert werden, so erhält man als Abschätzung für die Emissionsrate der einzelnen Atome und Ionen

$$f_0 = 10 \cdot f_{EII}. \quad (3.52)$$

Selbst mit diesen großzügig zugunsten der PI angesetzten Werten bleibt die PI-Rate $f_{PI,tot}$ nach (3.51) und (3.52) drei Größenordnungen unter der EII-Rate.

Die Photoionisation ist somit für das CSD-Gleichgewicht vernachlässigbar²⁶.

3.5.1.4 Dichteänderungen durch Elektronenstoßionisation

Für die Neutralgasatome *einer* Sorte bedeuten S-EII ($k = 1$) und M-EII ($2 \leq k \leq k_{max}$) mit den Reaktionsraten (3.35) und (3.40) einen Verlust mit der Rate

$$\left(\frac{\partial n_0}{\partial t} \right)^{eii} = - \sum_{k=1}^{k_{max}} R_{0 \rightarrow k}^{eii} \quad (3.53)$$

$$= -n_{e,hot} \cdot n_0 \cdot \sum_{k=1}^{k_{max}} \langle \sigma_{0,k}^{eii} \cdot u \rangle \leq 0. \quad (3.54)$$

Die Ionen dieser Gassorte profitieren einerseits von der Ionisation niedrigerer Ladungszustände, andererseits werden sie aber auch weiter ionisiert. Bei der

²⁶Allerdings kann in Bereichen, in denen aufgrund fehlender heißer Elektronen keine EII stattfindet, die PI natürlich dazu führen, daß dort (wenn auch nur marginal) überhaupt ionisiert wird.

Summation über die Anzahl k der pro Stoß freigesetzten Elektronen ist darauf zu achten, daß nicht alle Ladungszustände an allen k -fach Ionisationen beteiligt sein können²⁷:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n_z}{\partial t}\right)^{eii} &= \sum_{\substack{k=1 \\ z-k \geq 0}}^{k_{max}} R_{z-k \rightarrow z}^{eii} - \sum_{\substack{k=1 \\ z+k \leq Z}}^{k_{max}} R_{z \rightarrow z+k}^{eii} \\ &= n_{e,hot} \cdot \left(\sum_{\substack{k=1 \\ z-k \geq 0}}^{k_{max}} n_{z-k} \langle \sigma_{z-k,z}^{eii} \cdot u \rangle - \sum_{\substack{k=1 \\ z+k \leq Z}}^{k_{max}} n_z \langle \sigma_{z,z+k}^{eii} \cdot u \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Des weiteren erhöht sich natürlich auch die Elektronendichte mit

$$\left(\frac{\partial n_e}{\partial t}\right)^{eii} = n_{e,hot} \cdot \sum_s \left(n_s \sum_{\substack{k \\ z_s+k \leq Z_s}}^{k_{max}} \langle \sigma_{s \rightarrow s'}^{eii} \cdot u \rangle \right) \geq 0. \quad (3.56)$$

Hier müssen im allgemeinen verschiedene Gassorten berücksichtigt werden, weswegen die Summe nicht über z , sondern allgemeiner über alle ionisierbaren Teilchenspezies s (siehe Abschnitt 3.2.1) läuft. Dabei sind z_s der zu s zugehörige Ladungszustand und Z_s die entsprechende Kernladungszahl.

3.5.2 Rekombinationsprozesse

Den Ionisationsprozessen stehen unter anderem Elektron-Ion-Rekombinationsprozesse gegenüber, die insbesondere in ausgedehnten (astrophysikalischen) Plasmen das Ladungszustandsgleichgewicht herstellen²⁸. Für die hier simulierten Plasmen kleiner geometrischer Ausmaße mit geringen Dichten und leichten Atomen zeigt sich jedoch, daß diese Rekombinationsprozesse *im Plasmainternen* vernachlässigt werden können, und statt dessen die Rekombination an den Plasmakammerwänden der primär begrenzende Prozeß ist.

Elektron-Ion-Rekombinationsprozesse in einem Plasma unterscheiden sich durch die Art, in der die überschüssige Energie des anfänglich ungebundenen Elektrons abgegeben wird, das von einem Ion eingefangen wurde. Am wichtigsten sind die strahlende Rekombination (*radiative recombination*, RR), die dielektrische Rekombination (DR) und die Rekombination durch Drei-Körper-Stöße (*three body recombination*, TBR).

²⁷So können beispielsweise $\text{Ar}^{17,18+}$ nicht mehr zweifach ionisiert werden, und Ar^+ nur durch Einfachionisation entstehen.

²⁸Ein sehr ausführlicher Überblick über Elektron-Ion-Rekombinationsprozesse und deren Forschungsstand existiert von HAHN [Hah97].

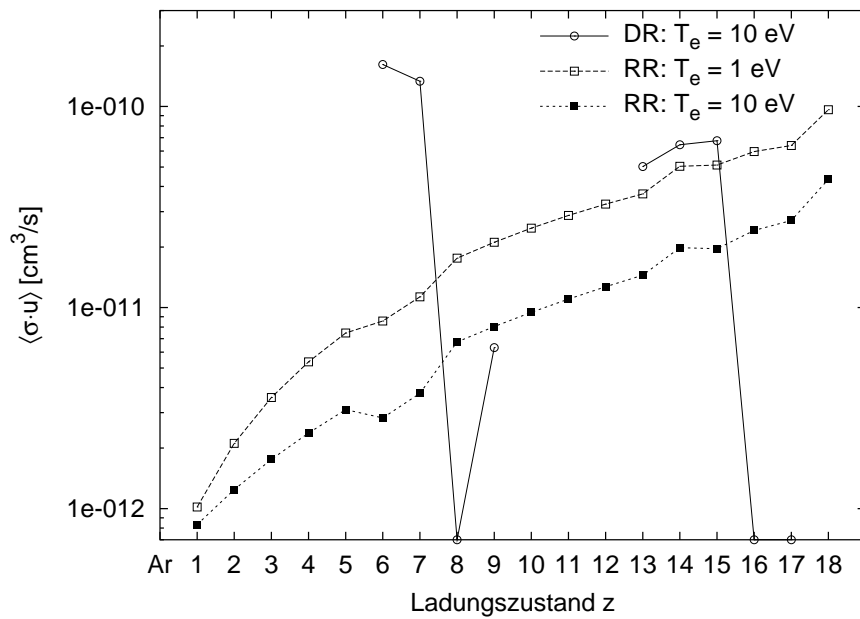
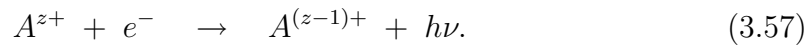


Abbildung 3.18: Ratenkoeffizienten für strahlende (RR) und dielektrische (DR) Rekombination von Ar-Ionen nach [Hah93, MH90]. Für die DR von Ar^+ bis Ar^{5+} sowie Ar^{10+} bis Ar^{12+} sind keine Werte tabelliert, die Werte für $\text{Ar}^{8,16,17+}$ sind jeweils Null.

3.5.2.1 Strahlende Rekombination, RR

Bei der RR wird die beim Einfang des Elektrons frei gewordene Energie in Form eines Photons emittiert:



In Plasmen sehr niedriger Temperatur und geringer Dichte ist die RR der primäre Rekombinationsprozeß. Bei hohen Temperaturen sinkt ihre Bedeutung schnell [PS95].

Der Abschätzung der Bedeutung der RR für die CSD liegt eine Veröffentlichung von MCLAUGHLIN und HAHN [MH90] zugrunde, in der empirische Formeln für RR-Querschnitte und RR-Ratenkoeffizienten vorgeschlagen werden. Diese basieren auf einer Modifikation der Formel von KRAMER (siehe [Hah97, Kap. 3.1]) für den RR-Querschnitt in spezifische Endzustände des eingefangenen Elektrons²⁹. Angenehmerweise liefern sie (allerdings nur als Wertetabelle) auch den totalen, über alle möglichen Endzustände summierten Wirkungsquerschnitt $\sigma_{z \rightarrow z-1}^{RR}$ und den resultierenden Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z-1}^{RR} \cdot u \rangle$. Darin gehen nur noch der anfängliche Ladungszustand des Ions sowie die Elektronentemperatur ein. Für die Ratenkoeffizienten erwarten die Autoren eine Genauigkeit von $\pm 30\%$.

Die so ermittelten Ratenkoeffizienten für Ar-Ionen bei $T_e = 1$ und 10 eV sind in Abbildung 3.18 dargestellt. Berechnet man damit gem. (A.4) die Stoßrate für einen

²⁹Während in KRAMERS Formel nur die Hauptquantenzahl n des eingefangenen Elektrons eingeht, berücksichtigen MCLAUGHLIN und HAHN auch die experimentell beobachtete Abhängigkeit von der Drehimpulsquantenzahl l .

nackten Ar-Kern, der sich nur durch kalte Elektronen (mit $T_e = 1$ eV) mit einer Dichte von 10^{12} cm $^{-3}$ bewegt, so ergibt sich eine mittlere stoßfreie Zeit von

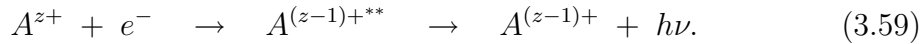
$$\tau = (n_e \langle \sigma \cdot u \rangle)^{-1} \approx (10^{12} \text{ cm}^{-3} \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s})^{-1} = 10 \text{ ms.} \quad (3.58)$$

Da diese erstens größer als die mittleren Einschlußzeiten der Ionen (siehe Kapitel 4) ist, zweitens die tatsächliche kalte Elektronendichte mindesten eine Größenordnung kleiner ist, drittens die Temperatur der kalten Elektronen eher bei 10 eV liegt und viertens der Ratenkoeffizient zu niedrigeren Ladungszuständen noch kleiner wird, kann die strahlende Rekombination für die Berechnung der CSD also vernachlässigt werden. Zu demselben Schluß kommen neben anderen auch WHALEY und GETTY [WG90].

In einigen Ausgabe-Plots der Simulationen (z.B. Abbildung 4.33 auf Seite 156) sind die entsprechenden Daten der RR zur Kontrolle auf der Basis der tatsächlichen (und daher im Vergleich zur obigen Abschätzung noch unkritischeren) Werte dargestellt.

3.5.2.2 Dielektrische Rekombination, DR

Bei der DR wird ein freies Elektron unter gleichzeitiger Anregung eines gebundenen Elektrons eingefangen, wodurch ein zweifach angeregtes Ion entsteht. Dieses regt sich dann innerhalb kurzer Zeiten (10^{-11} bis 10^{-14} s) durch Photoemission ab³⁰:



Da das involvierte, anfänglich gebundene Elektron nur diskrete Energiezustände annehmen kann, findet die DR auch nur bei diskreten Energien des Primärelektrons statt. Die Wirkungsquerschnitte haben eine dementsprechende Struktur (siehe z.B. [BBB⁺99]) und übersteigen bei den Resonanzen allgemein die RR-Werte [Hah97].

Weil aufgrund dieser Resonanzbedingung die Daten der Elektronenhülle und der Zwischenzustand selbst in die Berechnungen der Wirkungsquerschnitte eingehen, kann keine einfache Formel für den totalen Wirkungsquerschnitt aufgestellt werden, in die als Parameter hauptsächlich Kernladungszahl und Elektronenzahl des Ausgangsions eingehen. Auch die Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z-1}^{DR} \cdot u \rangle$, die das über die EEDF *gemittelte* Produkt des jeweiligen Wirkungsquerschnittes und der Elektronengeschwindigkeit sind (siehe Anhang A), weisen noch *ionenspezifische* Abhängigkeiten von der EEDF auf.

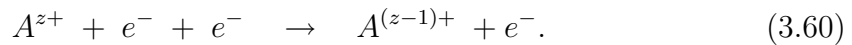
Für einige wenige Ionen gibt es Messungen, viel häufiger stützt man sich aber auf quantenmechanische Berechnungen. HAHN hat anhand von Fits durch die bekannten Werte für einige Elemente und deren Ionen empirische Formeln für die Ratenkoeffizienten aufgestellt [Hah93]. Die seinen Tabellen entnommenen Werte der totalen Ratenkoeffizienten für Ar-Ionen für die Elektronentemperatur von 10 eV sind in Abbildung 3.18 dargestellt.

³⁰Auch die Autoionisation ist ein möglicher Abregungsprozeß, jedoch handelt es sich dabei letztlich um keine Rekombination.

Deren Maximalwerte entsprechen denen der RR von Ar^{18+} . Daher gilt die Abschätzung (3.58) auch für die DR. Die dielektrische Rekombination kann also ebenfalls vernachlässigt werden³¹.

3.5.2.3 Drei-Körper-Stoß-Rekombination, TBR

Der dritte in Frage kommende Rekombinationsmechanismus gibt die überschüssige Energie an einen dritten Stoßpartner, meist ein Elektron, ab:



Es handelt sich hierbei also um den zeitinversen Prozeß zur Elektronenstoßionisation. Der Einfang erfolgt vorzugsweise in schwach gebundene RYDBERG-Zustände [Hah97].

Da die TBR erst bei Elektronentemperaturen weit unter 1 eV eine Bedeutung hat [GSZ⁺97, PS99, Hah00], bleibt sie wie alle bisher angesprochenen Rekombinationsprozesse im CSD-Modell unberücksichtigt.

3.5.2.4 Neutralisation an der Wand

Gelangt ein Ion in die Plasmarandschicht, so wird es dort aufgrund des zur Wand hin abfallenden Plasmapotentials (siehe Abbildung 3.3 auf Seite 43) zur selbigen hin beschleunigt. Das dabei ablaufende Szenario atomphysikalischer Prozesse - dazu gehören z.B. der Transfer von Elektronen aus dem Festkörper, Autoionisationen durch AUGER-Übergänge, strahlende Abregung etc. - ist äußerst komplex und vom Wandmaterial sowie dem betrachteten Ion abhängig. So werden die Rekombinationen an elektrisch leitenden Wänden anders als an Isolatoren ablaufen und Edelgase mit geringerer Wahrscheinlichkeit an der Wand haften bleiben als sonstige Atome.

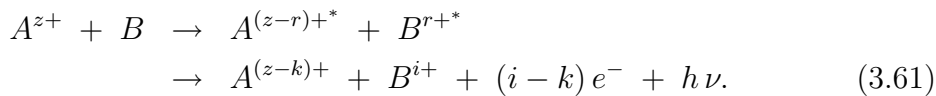
Der Einfachheit halber wird in der vorliegenden Arbeit angenommen, daß jedes Ion beim Auftreffen auf die Wand vollständig neutralisiert und dann wieder von der Wand reflektiert wird.

Da die Plasmarandschicht wesentlich dünner als die Maße der verwendeten Zellen ist, wird sie als unendlich dünn betrachtet, so daß die Teilchenströme auf die Wand direkt aus dem in Abschnitt 3.6 vorgestellten Transportmodell resultieren.

³¹Aufgrund des erläuterten resonanten Charakters des DR-Prozesses reagieren die Wirkungsquerschnitte empfindlich auf äußere Felder, die die Energieniveaus der Elektronenzustände verschieben. Daher ist es fraglich, inwieweit Berechnungen für idealisierte Systeme noch in realen Plasmen Gültigkeit haben, in denen die Ionen durch die COULOMB-Wechselwirkung mit den anderen Plasmateilchen permanent wechselnden E-Feldern ausgesetzt sind (siehe hierzu [Hah97, Kap. 6]). Ebenso gibt es experimentell beobachtete Effekte in Magnetfeldern. Diese fallen jedoch schwächer aus und scheinen z.B. für Au^{25+} bei den angenommenen Elektronen-Temperaturen von minimal 1 eV und bei Magnetfeldstärken, die denen der simulierten Quellen entsprechen, vernachlässigbar [HUS⁺99].

3.5.3 Ladungsaustausch, CX

Ein weiterer zu beachtender atomarer Prozeß ist der Ladungsaustausch (*charge exchange*, CX) bei dem mindestens ein Elektron aus der Hülle eines Atoms in die eines Ions wechselt. Aufgrund der repulsiven COULOMB-Kräfte zwischen Ionen findet der CX hauptsächlich zwischen Ionen und neutralen Atomen statt. Da die Elektronen meist in angeregte Zustände des Projektilions wechseln [BR92], folgen allgemein Abregungsprozesse. Dazu gehören Photoemissionen und beim Transfer *mehrerer* Elektronen vor allem AUGER-Prozesse [BR92]. Stammen die Elektronen aus inneren Schalen des Targetatoms, so kann sich auch dieses über Autoionisationen stabilisieren. Somit stellt sich der CX in seiner allgemeinsten Form wie folgt dar [ACRS94, Gl. (7)]:



Dabei sind also r die Zahl der im ersten Schritt von B nach A transferierten Elektronen, k die Zahl der letztlich vom Projektilion eingefangenen Elektronen und i der endgültige Ladungszustand des Rückstoßions. Für sie gilt: $k \leq r \leq i$.

Der Vorgang des CX ist atomphysikalisch äußerst komplex. Wenn sich das Ion dem Neutralteilchen nähert, wird dieses polarisiert, was zu einer gegenseitigen Anziehung führt, die mit der Ladung des Ions zunimmt. Sind Stoßparameter und Relativgeschwindigkeit klein genug, kann es sogar zum gegenseitigen Umkreisen (sogenannter *Orbiting-Effekt*) kommen [OSS⁺97, SON97].

Nach den einfachen semiklassischen Over-barrier-Modellen für den **einfachen CX** mit $r = 1$ senkt sich während der Ion-Atom-Annäherung das COULOMB-Potential, das das Transferelektron zwischen den beiden sieht, kontinuierlich ab [RSW80, MFB81]. Auch die Energieniveaus im Atom und im Ion werden durch den zunehmenden Einfluß der (abgeschirmten) Kernladung des jeweiligen Stoßpartners abgesenkt. Wenn sich die beiden soweit angenähert haben, daß a) das Transferelektron das COULOMB-Potential überwinden kann, und b) zu dem von dem Elektron im Atom eingenommenen Zustand auch im Ion ein unbesetzter Zustand derselben Energie existiert, gibt es eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Elektron resonant zum Ion wechselt und dort auch noch ist, wenn die Transferbedingungen nicht mehr erfüllt sind.

Dies erklärt auch, daß der CX zustandselektiv ist, d.h., daß das Elektron nur in bestimmte (bei mehrfachgeladenen Ionen im allgemeinen angeregte) Zustände des Ions eingefangen wird, was auch experimentell untersucht wird [Hub80, HAB⁺85, Kam88, SKY⁺93, YKF93].

War das Ion im Eingangskanal mindestens zweifach geladen, so sehen die beiden Ionen im Ausgangskanal ein repulsives COULOMB-Potential, weswegen es sich (im Rahmen dieser Modelle) um einen exothermen Prozeß handelt³². Die dabei

³²Bei höheren Stoßenergien sind auch endotherme Übergänge möglich, bei denen das transferierte Elektron nach dem Stoß weniger stark gebunden ist als vorher [Hub80].

frei werdende Energie ΔE^{cx} ist gleich der Differenz der Bindungsenergien des Transferelektrons weit vor und nach dem Austausch, wenn die Bindung unbeeinflusst vom jeweils anderen Ion ist [MFB81].

Der **mehrfache CX**³³ kann als Folge einzelner Transfers während der Ion-Atom-Begegnung verstanden werden [BAC⁺85, Nie86], dem anschließend Abregungsprozesse – meist Autoionisationen – folgen. So haben ALI *et al.* bei ihren Messungen von $\text{Ar}^{z+} + \text{Ar}$ ($z = 5$ bis 17) bis zu 8-fach geladene Rückstoßionen und bei den Projektilionen Ladungsänderungen bis zu $k = 5$ beobachtet [ACRS94].

3.5.3.1 Wirkungsquerschnitte

In den letzten 30 Jahren wurde eine enorme Fülle an experimentellen Daten zusammengetragen, die größtenteils jedoch bei Stoßenergien im keV- bis MeV-Bereich ermittelt wurden. Bei diesen Messungen wurde bis auf wenige Ausnahmen immer wieder festgestellt, daß die CX-Querschnitte nicht oder zumindest nicht signifikant energieabhängig sind (siehe z.B. die Meßkurven von KLINGER *et al.* [KMS75, Fig. 5]). Auch die oben genannten semiklassischen Modelle [RSW80, MFB81, BAC⁺85, Nie86, ACRS94], die für langsame Stöße, d.h. Relativgeschwindigkeiten kleiner der BOHRschen Elektronengeschwindigkeit, aufgestellt wurden, sind – allerdings auch aufgrund der zugrunde liegenden experimentellen Daten – energieunabhängig.

Verhalten bei fast thermischen Energien. Für die hier simulierten Plasmen werden jedoch die Werte für Stoßenergien vom thermischen Bereich ($300 \text{ K} \triangleq 0,025 \text{ eV}$) bis hin zu einigen eV benötigt. Für diesen Energiebereich stellt sich die Frage, ob die Wirkungsquerschnitte dort noch quasi energieunabhängig sind, oder ob und inwieweit sie aufgrund des stärkeren Einflusses der Polarisierung des Targetatoms für $E \rightarrow 0$ anwachsen.

Leider waren zu dieser Fragestellung in der Literatur keine Messungen mit Stößen zwischen mehrfach geladenen Ar-Ionen und Ar-Atomen bei diesen Energien zu finden³⁴. Daher wurde versucht, aus entsprechenden Messungen mit anderen Stoßpartnern, die in der Nähe des relevanten Energiebereiches durchgeführt wurden, allgemeine Zusammenhänge zu erschließen, um eventuell von diesen auf die hier betrachteten Stoßsysteme extrapolieren zu können.

Es fanden sich Veröffentlichungen, in denen die Stoßenergie bis zu $0,0125 \cdot z \text{ eV/amu}$ herunter ging (Details siehe Tabelle 3.1). Ihre Auswertung konnte eine generelle Zunahme der CX-Querschnitte für $E \rightarrow 0$ jedoch nicht

³³Einen ausführlichen Überblick zusammen mit einer guten Darstellung des erweiterten Overbarrier-Modells für mehrfachen CX haben BARAT und RONCIN veröffentlicht [BR92]. Besonders lesenswert ist dazu auch das Paper von ALI *et al.* [ACRS94].

³⁴Lediglich für den resonanten CX zwischen Ar^+ und Ar, der im Vergleich zu anderen CX-Stoßprozessen auch quantenmechanisch einfacher zu behandeln ist, existieren Daten zum Energieverlauf des Wirkungsquerschnittes [CC97]. Er steigt in diesem Fall für E (bzw. v) $\rightarrow 0$ monoton von $8 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ bei 10^8 cm/s auf $(4 \text{ bis } 5) \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ bei 10^6 cm/s an.

Autor	Stoßpartner	Vermessener Energiebereich	Verhalten von $\sigma_{z \rightarrow z-k}^{CX}$ für $E \rightarrow 0$
SOEJIMA <i>et al.</i> [SLO ⁺ 92]	$C^{4+} + H_2$	(0,33 - 666) eV/amu	- $k = 1$: Keine signifikante Energieabhängigkeit.
			/ $k = 2$: Abfall von $6 \cdot 10^{-15}$ auf $2 \cdot 10^{-15}$ cm ² .
			/ $k = 1$: Abfall von $4 \cdot 10^{-15}$ auf $2 \cdot 10^{-15}$ cm ² .
	$C^{4+} + O_2$		/ $k = 2$: Abfall von 10^{-15} auf 10^{-16} cm ² .
			/ $k = 3$: Abfall von $3 \cdot 10^{-16}$ auf $2 \cdot 10^{-17}$ cm ² .
			/ $k = 1$: Abfall von $5 \cdot 10^{-15}$ auf $2 \cdot 10^{-15}$ cm ² .
KRAVIS <i>et al.</i> [KSO ⁺ 95]	$Ar^{z+} + H_2$, $z = 6, 7, 8,$ $9, 11$	$E_{c.m.} = (0,2 - 400)$ eV $\triangleq (0,1 - 200)$ eV/amu	/ $k = 2$: Abfall von 10^{-15} auf $8 \cdot 10^{-17}$ cm ² .
			/ $k = 3$: Abfall von $2 \cdot 10^{-16}$ auf $2,5 \cdot 10^{-17}$ cm ² .
			\ $k = 1$: Etwa Verdopplung der Werte von 10 nach 10^{-1} eV/amu. Aber der relative Anstieg nimmt mit z ab. Für $E > 10$ eV/amu gute Übereinstimmung mit M&S. Ansonsten M&S um bis zu Faktor 5 zu klein.
	$Ar^{z+} + Ne$, $z = 4 - 9$	(0,0125 - 25)· z eV/amu	\ $k = 2$: Stärkere Energieabhängigkeit als bei $k = 1$, aber qualitativ ähnlich.
			Für $E \approx 10^{-1}$ eV/amu gute Übereinstimmung mit M&S.
			- $k = 1$: Keine signifikante Energieabhängigkeit. Gute Übereinstimmung mit M&S.
SUZUKI <i>et al.</i> [SON97]			V $k = 2$: Lokale Minima bei etwa 1 eV/amu.

Tabelle 3.1: Zusammenstellung von Veröffentlichungen mit energieabhängigen Wirkungsquerschnitten für die Änderung k der Projektilladung bei sehr langsamen CX-Stößen. In der letzten Spalte ist stichwortartig das Verhalten der jeweiligen Wirkungsquerschnitte für $E \rightarrow 0$ dokumentiert. Das Zeichen in der Spalte davor symbolisiert dieses ebenfalls. Wenn in der Veröffentlichung angegeben, wurde auch der Vergleich mit dem Skalierungsgesetz (3.62) von MÜLLER und SALZBORN (M&S) festgehalten.

bestätigen. Neben Wirkungsquerschnitten, die nicht signifikant von der Energie abhängen [SLO⁺92, SON97], gibt es solche, die zur unteren Meßgrenze hin abfallen [SLO⁺92], aber auch solche, die schwach (d.h. maximal um den Faktor 5) ansteigen [KSO⁺95, SON97].

Die untere Grenze der Projektilenergie war bei KRAVIS *et al.* [KSO⁺95] und SUZUKI *et al.* [SON97] durch die Energieschärfe der verwendeten Ionenquelle gegeben³⁵, so daß die Meßpunkte mit der jeweils niedrigsten Projektilenergie einen Mittelwert über auch wesentlich langsamere Ionen darstellen. Somit tasten die Experimentatoren schon in den genannten Energiebereich hinein, für den hier Werte benötigt werden. Bemerkenswerterweise wird der relative Anstieg der Wirkungsquerschnitte für $E \rightarrow 0$ bei den Messungen von KRAVIS *et al.* mit zunehmender Projektilladung z kleiner, was entgegengesetzt zu den Erwartungen eines Polarisierungseffektes steht.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß es bei den betrachteten Stoßsystemen kein einheitliches Verhalten der Wirkungsquerschnitte für $E \rightarrow 0$ gibt, von dem man auf die fehlenden Daten schließen könnte. Wenn überhaupt, steigen die untersuchten CX-Querschnitte im Vergleich zu den Werten, die sie bei höheren Energien haben, wo sie nur marginal energieabhängig sind, auf das maximal Fünffache an.

Skalierungsgesetz von Müller und Salzborn. Schon 1977 haben MÜLLER und SALZBORN auf der Basis von 268 experimentellen Wirkungsquerschnitten für Stöße zwischen Ne^{z+} , Ar^{z+} , Kr^{z+} und Xe^{z+} mit $z = 2$ bis 8 auf der einen und H_2 , N_2 , O_2 , CH_4 sowie CO_2 auf der anderen Seite die Abhängigkeiten von der Projektilladung z sowie der Zahl k der transferierten Elektronen zwischen 1 und 4 numerisch untersucht. Daraus stellten sie für den Projektilladungsänderungsquerschnitt³⁶ das folgende Skalierungsgesetz auf [MS77]:

$$\sigma_{z \rightarrow z-k} = A_k \cdot z^{\alpha_k} \cdot I^{\beta_k} \text{ cm}^2. \quad (3.62)$$

Dabei sind A_k , α_k und β_k für $k = 1$ bis 4 die in Tabelle 3.2 auf der nächsten Seite aufgeführten Konstanten und I das erste Ionisationspotential des Targetatoms in eV.

Es fällt auf, daß von dem einfangenden Ion lediglich die Ladung eingeht.

Die nach (3.62) berechneten Wirkungsquerschnitte für CX-Stöße von z -fach geladenen Ionen an Sauerstoff- und Argonatomen sind – auch über den in der Auswertung erfaßten Bereich von $z = 2$ bis 8 hinaus – in Abbildung 3.19 dargestellt. Innerhalb dieses Gültigkeitsbereiches fallen sie mit zunehmender Zahl k transferierter Elektronen ab. Bei immer höheren z übersteigen die *so berechneten* Wirkungsquerschnitte

³⁵Alle in Tabelle 3.1 auf der vorherigen Seite zitierten Messungen wurden an derselben Apparatur am Department of Physics an der Metropolitan University in Tokio durchgeführt. KRAVIS *et al.* und SUZUKI *et al.* geben die Energieschärfe der verwendeten sogenannten *mini-EBIS* mit $0,4 \cdot z$ eV an. SOEJIMA *et al.* machen diesbezüglich keine Angabe.

³⁶Dieser Wirkungsquerschnitt läßt die Zahl r der tatsächlich transferierten Elektronen und auch die endgültige Ladung i des Rückstoßions (siehe (3.61)) unberücksichtigt.

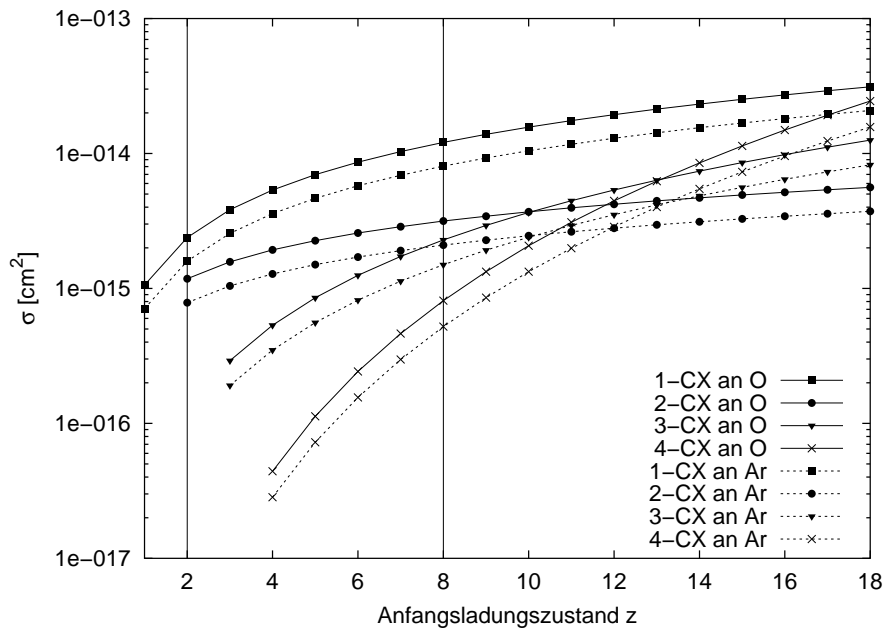


Abbildung 3.19: Wirkungsquerschnitte für die Änderung k der Projektilladung beim Ladungsaustausch mit O- oder Ar-Atomen nach MÜLLER und SALZBORN [MS77]. Der Gültigkeitsbereich beschränkt sich eigentlich auf die Anfangsladungszustände 2 bis 8 und die im Text genannten Targetmoleküle. Siehe dazu auch Abbildung 3.20 auf der nächsten Seite.

für $k + 1$ zunehmend diejenigen mit kleinerem k .

MÜLLER und SALZBORN selbst hielten die Extrapolation der Daten mit $k = 1$ über den Gültigkeitsbereich hinaus aufgrund der Nähe zu theoretischen Voraussagen für eventuell gerechtfertigt. Für mehrfachen Elektronenaustausch standen keine theoretischen Ansätze zur Verfügung, so daß die Frage der Gültigkeit der Extrapolation über $z = 8$ hinaus damals offen blieb [MS77].

Inzwischen existieren neben den damaligen Messungen von KLINGER, MÜLLER und SALZBORN für $z = 2$ bis 7 [KMS75] auch experimentelle Daten für noch höhere Ladungszustände [BAC⁺85, VPFK93, ACRS94], die zum Vergleich mit (3.62) in Abbildung 3.20 zusammengestellt sind³⁷.

³⁷ Die Experimentatoren haben mit folgenden Stoßenergien gearbeitet: KLINGER, MÜLLER und SALZBORN [KMS75]: 5 bis 15 z keV. BÁRÁNY *et al.* [BAC⁺85]: 1,8 z keV. VANCURA *et al.* [VPFK93]: 2,3 z keV. ALI *et al.* [ACRS94]: 400 keV. COPELAND *et al.* haben den Wirkungsquer-

k	A_k	α_k	β_k
1	$(1,43 \pm 0,76) \cdot 10^{-12}$	$1,17 \pm 0,09$	$-2,76 \pm 0,19$
2	$(1,08 \pm 0,95) \cdot 10^{-12}$	$0,71 \pm 0,14$	$-2,80 \pm 0,32$
3	$(5,50 \pm 5,8) \cdot 10^{-14}$	$2,10 \pm 0,24$	$-2,89 \pm 0,39$
4	$(3,57 \pm 8,9) \cdot 10^{-16}$	$4,20 \pm 0,79$	$-3,03 \pm 0,86$

Tabelle 3.2: Fit-Parameter des Skalierungsgesetzes (3.62) von MÜLLER und SALZBORN mit ihren Standardabweichungen [MS77].

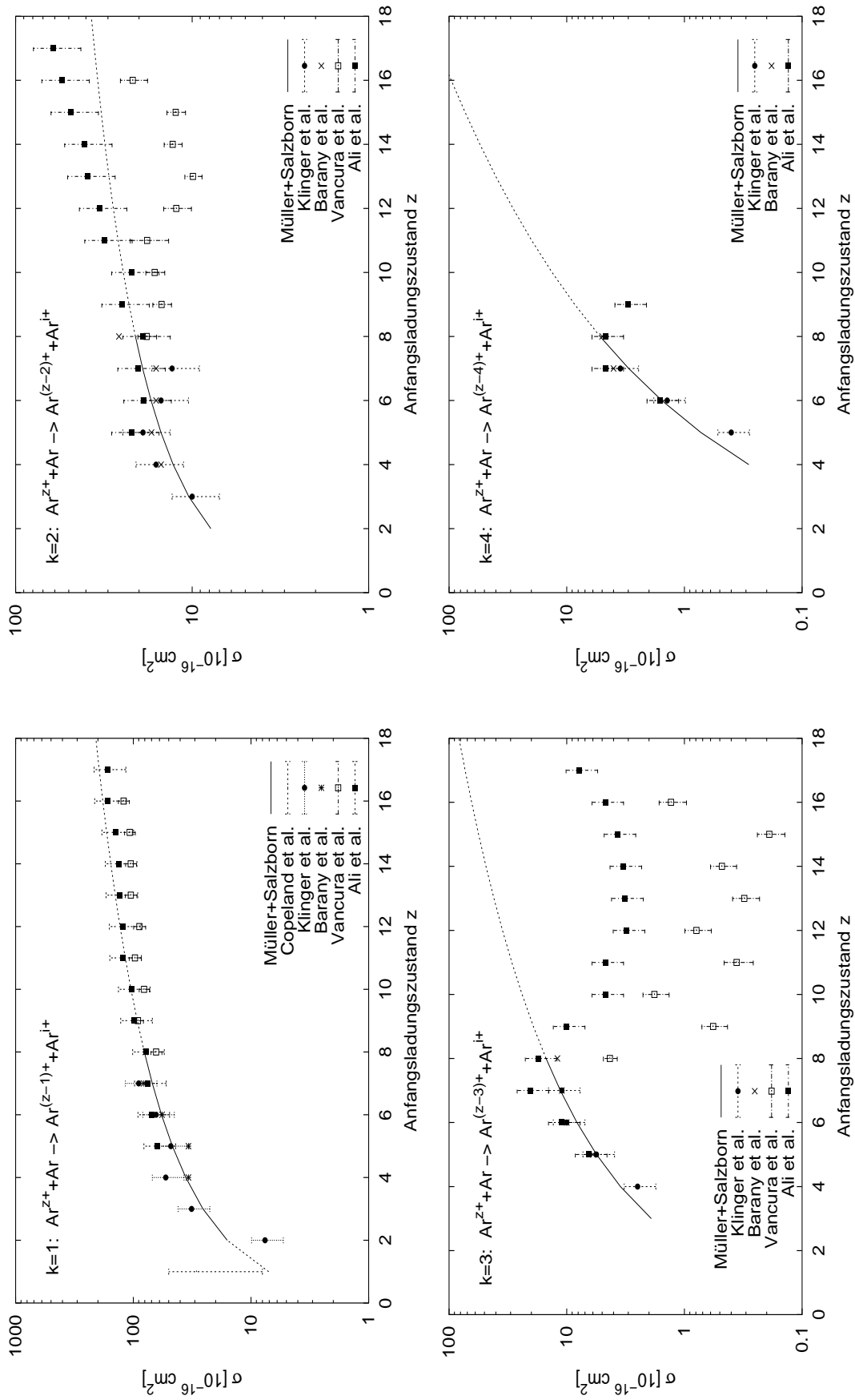


Abbildung 3.20: Experimentelle CX-Querschnitte für die Ladungsänderung k von Ar^{z+} -Projektilen beim Stoß mit Ar-Atomen verglichen mit dem Skalierungsgesetz (3.62) von MÜLLER u. SALZBORN (durchgezogene Linie im Gültigkeitsbereich nach [MS77], außerhalb gestrichelt). Siehe auch Fußnote 37.

Für den einfachen CX ($k = 1$) stimmt das Skalierungsgesetz für $z \geq 3$ sehr gut mit den Meßwerten überein. Der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{2 \rightarrow 1}^{cx}$ wird jedoch um mehr als das Doppelte überschätzt³⁸. Dagegen wird $\sigma_{1 \rightarrow 0}^{cx}$ stark unterschätzt. (Letzteres ist für die CSD von Plasmen mit nur einer Gassorte jedoch irrelevant, da sich diese hierdurch effektiv nicht ändert³⁹.)

Für den zweifachen CX ($k = 2$) ist die Übereinstimmung zwischen Skalierungsgesetz und den meisten Meßreihen im Rahmen ihrer angegebenen Unsicherheiten sehr gut. Die Werte von VANCURA *et al.* scheinen hier aus der Reihe zu fallen, was aber an dieser Stelle nicht beurteilt werden kann.

Beim drei- und vierfachen CX beschreibt (3.62) auch die neueren Meßdaten im Rahmen seines ursprünglichen Gültigkeitsbereiches für $z \leq 8$ ausgesprochen gut. Die Extrapolation zu höheren z scheint jedoch auf keinen Fall gerechtfertigt zu sein, da sich für $z > 8$ ein anderer Trend in den Meßdaten abzeichnet.

Abschließend läßt sich also festhalten, daß es bei sehr niedrigen Stoßenergien noch eine gewisse Unsicherheit über die CX-Querschnitte zwischen Ar-Ionen und Ar-Atomen gibt, die sich aber im Rahmen dieser Arbeit nicht in einem einfachen Modell mit zufriedenstellender Gewißheit beheben läßt. Aus pragmatischen Gründen wird daher von einer vernachlässigbaren Energieabhängigkeit der CX-Querschnitte ausgegangen, wie sie auch von anderen Autoren explizit angenommen wird⁴⁰ [ACRS94, BR92, PS95].

Da das Skalierungsgesetz von MÜLLER und SALZBORN für $k \leq 2$ für alle z und für $k \geq 3$ mit $z < 9$ gute Abschätzungen liefert, wird es hier für die Berechnung der Projektilladungsänderungsquerschnitte verwendet.

Für $k = 3$ mit $z \geq 9$ und $k = 4$ mit $z = 9$ werden die Meßwerte von ALI *et al.* genommen. Für $k = 3$ mit $z = 18$ wird 10^{-15} cm^2 eingesetzt⁴¹.

Für $k = 4$ mit $z \geq 9$ konnten die zitierten Autoren keine Werte mehr messen. Damit bei Bedarf dennoch mit nicht verschwindenden Werten gerechnet werden kann, wird hierfür der praktisch verschwindende Wert von 10^{-18} cm^2 eingesetzt⁴².

schnitt für den resonanten CX von Ar^+ zwischen 10^6 und 10^8 cm/s (entspricht etwa 20 eV bis 200 keV) quantenmechanisch berechnet und mit Werten weiterer Autoren verglichen [CC97]; als Fehlerbalken ist dafür der ganze Wertebereich eingezeichnet, der von dem theoretischen Verlauf und den dort referierten Meßwerten eingenommen wird.

³⁸Interessanterweise fällt der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{2 \rightarrow 1}^{cx}$ auch insofern aus der Reihe der von KLINGER *et al.* vermessenen Werte, als daß er die stärkste Energieabhängigkeit aufweist: Für $E \rightarrow 0$ fällt er von $\sigma_{2 \rightarrow 1}^{cx}(36 \text{ keV}) \approx 9 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ auf $\sigma_{2 \rightarrow 1}^{cx}(10 \text{ keV}) \approx 6 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ab.

³⁹Wenn ein einfach geladenes Ion mit einem Neutralteilchen der gleichen Gassorte eine Ladung austauscht, wechseln die beiden nur ihre Identität, so daß es zu keiner Änderung in den Dichten der beteiligten Spezies kommt.

⁴⁰ALI *et al.*, die Stöße bei $v = 0,632 \text{ a.u.}$ gemessen haben [ACRS94], zweifeln an der Energieunabhängigkeit sogar eher für größere als für kleinere Energien. Sie schreiben: "Although it is widely believed that charge exchange cross sections are weakly dependent on the collision velocity for $v < 1 \text{ a.u.}$, such a belief is based on measurements the majority of which involved $v < 0.5 \text{ a.u.}$ Extending the measurements to higher velocities is therefore essential in order to remove any doubts."

⁴¹Hierbei handelt es sich mehr um eine Formalität, da die Dichte von Ar^{18+} in allen durchgeführten Simulationen verschwindend klein ist.

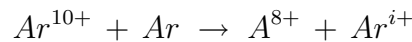
⁴²Über die weiter unten erläuterte Skalierungsmöglichkeit können die CX-Querschnitte indivi-

3.5.3.2 Berücksichtigung der Ladung i des Rückstoßions

In den bisherigen Abschnitten dieses Kapitels wurde lediglich der Wirkungsquerschnitt für die *endgültige* Änderung k der Projektilladung betrachtet. Zur genaueren Spezifizierung des Stoßsystems wird er im folgenden mit $\sigma_{A^{(z-k)+}}^{A^{z+},B}$ symbolisiert. Dabei sind oben die Stoßpartner *vor* und unten das auslaufende Projektil *nach* dem Stoß angegeben. Für diesen Wirkungsquerschnitt existieren Messungen sowie das empirische Skalierungsgesetz (3.62) von MÜLLER und SALZBORN. Daß das Ion zwischenzeitlich noch mehr Elektronen eingefangen und einen Überschuß durch Autoionisationen wieder abgegeben haben kann, ist implizit in diesen Querschnitten enthalten.

Bisher völlig unberücksichtigt ist aber die endgültige Ladung i des Rückstoßions. Das ist das ehemalige Targetatom, das gem. (3.62) zuerst $r \geq k$ Elektronen an das Projektilion abgegeben hat und durch anschließende Autoionisation ebenfalls weitere Elektronen verloren haben kann. Ist es letztlich i -fach geladen, so haben die Stoßpartner durch die Autoionisationen zusammen insgesamt $i - k$ Elektronen an das Vakuum abgegeben (siehe (3.61)).

Wären die Autoionisationen in ihrer Zahl vernachlässigbar, so wäre die Frage der Ladung des Rückstoßions trivialerweise mit $i = k$ und somit auch der Einfluß auf die CSD gelöst. Daß dieser Aspekt aber bedeutend sein kann, mag daran gemessen werden, daß nach den Messungen von ALI *et al.* z.B. bei dem Prozeß



im Mittel $(i - k) = 2,5$ Elektronen abgegeben werden. Es wurden sogar Rückstoßionen mit bis zu $i = 8$ beobachtet [ACRS94]. Allgemein steigt bei Ar die Zahl der durch Autoionisation verlorenen $(i - k)$ Elektronen bei $z = 9$ besonders stark an, da dann beim Elektronentransfer Vakanzen in der L-Schale der Projektilionen entstehen.

Mit Hilfe von Koinzidenzmessungen, in denen die endgültigen Ladungen sowohl des Projektil- als auch Rückstoßions analysiert wurden, haben ALI *et al.* die sogenannten *phänomenologischen Wirkungsquerschnitte* $\sigma_{A^{(z-k)+},B^{i+}}^{A^{z+},B}$ bestimmen können⁴³ [ACRS94]. Ihre Summe über i ergibt einfacherweise den Projektilladungsänderungsquerschnitt

$$\sigma_{A^{(z-k)+}}^{A^{z+},B} = \sum_{i=k}^{i_{max}} \sigma_{A^{(z-k)+},B^{i+}}^{A^{z+},B}, \quad (3.63)$$

wobei i_{max} nach ALI *et al.* für Ar z.B. bei 8 liegt.

Somit ist man (zumindest für Ar) in der Lage, die CX-Prozesse nicht nur nach den Stoßpartnern und der Projektilladungsänderung k , sondern zusätzlich auch

duell auf andere Werte gesetzt werden. Dafür dürfen die Ausgangswerte nicht Null sein.

⁴³Ihr um ein Schema für die Autoionisationsfolge erweitertes Over-barrier-Modell kann diese erstaunlich gut erklären.

nach der Ladung i des Rückstoßions aufzulösen und jede einzelne Kombination zu berücksichtigen.

Aus softwaretechnischen Gründen, die auch in der zeitlichen Entwicklung des Simulationsprogrammes liegen, wird jedoch weiter mit dem Projektilladungsänderungsquerschnitt in Kombination mit Koeffizienten $\gamma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B}$ gearbeitet, die der Simulation übergeben werden (siehe Tabelle D.1 auf Seite 239) und über

$$\sigma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} = \gamma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} \cdot \sigma_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} \quad \text{für } i \geq k \quad (3.64)$$

definiert sind. Die $\gamma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B}$ stellen somit den Anteil von $\sigma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B}$ an $\sigma_{A(z-k)+}^{A^{z+},B}$ dar. Werden für diese Parameter keine Werte angegeben, so werden sie wie folgt gesetzt:

$$\gamma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i > k. \end{cases} \quad (3.65)$$

Dies ist gleichbedeutend mit vernachlässigbaren Autoionisationen als Folge der CX-Prozesse.

3.5.3.3 Dichteänderungen durch Ladungsaustausch

Mit $\sigma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B}$ als CX-Querschnitt für (3.61) folgt somit nach (A.10) für die zugehörige Reaktionsrate

$$R_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} = n_{A^{z+}} \cdot n_B \cdot \left\langle \sigma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} \cdot u \right\rangle \quad (3.66)$$

$$= \gamma_{A(z-k)+,B^{i+}}^{A^{z+},B} \cdot R_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} \quad (3.67)$$

mit

$$R_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} = n_{A^{z+}} \cdot n_B \cdot \left\langle \sigma_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} \cdot u \right\rangle. \quad (3.68)$$

Der Ratenkoeffizient $\left\langle \sigma_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} \cdot u \right\rangle$ wird dabei gem. (A.3) mit der Verteilung der Relativgeschwindigkeiten $f(u)$ berechnet.

Faßt man nun alle CX-Prozesse zusammen, so folgt daraus für die Neutralteilchendichte einer Sorte B:

$$\left(\frac{\partial n_B}{\partial t} \right)^{cx} = - \sum_k \sum_A \sum_{z=k}^{Z_A} n_{A^{z+}} \cdot n_B \cdot \left\langle \sigma_{A(z-k)+}^{A^{z+},B} \cdot u \right\rangle, \quad (3.69)$$

wobei Z_A die Kernladungszahl der Sorte A ist.

Eine beliebige Ionenspezies C^{j+} kann nach (3.61) in bis zu dreifacher Weise durch CX betroffen sein: erstens als Projektil C^{j+} , das mit einem Neutralteilchen stößt, wodurch $n_{C^{j+}}$ abgebaut wird, zweitens als ehemaliges Projektil $C^{(j+k)+}$, das sich k Elektronen einfängt, und drittens als Rückstoßion C^{j+} .

Somit ergibt sich in der Summe

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial n_{C^{j+}}}{\partial t}\right)^{cx} &= - \sum_k \sum_B n_{C^{j+}} \cdot n_B \cdot \left\langle \sigma_{C^{(z-k)^+}}^{C^{j+},B} \cdot u \right\rangle \\
&\quad + \sum_k \sum_B n_{C^{(j+k)^+}} \cdot n_B \cdot \left\langle \sigma_{C^{(j+k)^+}}^{C^{j+},B} \cdot u \right\rangle \\
&\quad + \sum_A \sum_{z=j}^{Z_A} \sum_{k=1}^j n_{A^{z+}} \cdot n_C \cdot \left\langle \sigma_{A^{(z-k)^+}, C^{j+}}^{A^{z+},C} \cdot u \right\rangle.
\end{aligned} \tag{3.70}$$

Die Summen über k in (3.69) und (3.70) laufen dabei im allgemeinen von 1 bis k_{max} , der maximalen Anzahl transferierter Elektronen. Allerdings müssen dabei nach (3.61) stets die Bedingungen $z - k \geq 0$ und $k \leq Z_B$ berücksichtigt werden, die die obere Grenze kleiner als k_{max} werden lassen können.

3.5.3.4 Vergleich mit der einfachen Elektronenstoßionisation

Da CX der wichtigste *atomphysikalische* Prozeß ist, der die Dichten höher geladener Ionen abbaut, und die S-EII der dominanteste Ionisationsprozeß ist, soll hier schon ein erster Vergleich der Bedeutung der beiden Prozesse für die CSD erfolgen. Die dafür am besten geeigneten Größen für eine Ionenspezies A^{z+} sind die Reaktionsraten der beiden Prozesse

$$R_{z \rightarrow z+1}^{eii} \stackrel{(3.35)}{=} n_{A^{z+}} \cdot n_{e,hot} \cdot \left\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \right\rangle \tag{3.71}$$

$$\text{und} \quad R_{A^{(z-1)^+}}^{A^{z+},B} = n_{A^{z+}} \cdot n_A \cdot \left\langle \sigma_{A^{(z-1)^+}}^{A^{z+},A} \cdot u \right\rangle. \tag{3.72}$$

Wenn die Dichten der jeweiligen Stoßpartner, also heiße Elektronen für den einen und Neutralteilchen für den anderen Prozeß, gleich groß sind, genügt ein Vergleich der Ratenkoeffizienten, die in Abbildung 3.21 auf der nächsten Seite dargestellt sind. Bei den S-EII-Ratenkoeffizienten $\left\langle \sigma_{z \rightarrow z+1}^{eii} \cdot u \right\rangle$ für Ar handelt es sich um diejenigen aus Abbildung 3.13 auf Seite 63, die mit einer exponentiellen EEDF mit einer mittleren Energie von etwa 10 keV berechnet wurden. Die CX-Ratenkoeffizienten $\left\langle \sigma_{A^{(z-1)^+}, A^+}^{A^{z+},A} \cdot u \right\rangle$ können bei Energieunabhängigkeit als Produkt von Wirkungsquerschnitt und mittlerer Relativgeschwindigkeit \bar{u} geschrieben werden:

$$\left\langle \sigma \cdot u \right\rangle \stackrel{(A.3)}{=} \int_0^\infty \sigma \cdot u \cdot f(u) du \approx \sigma \int_0^\infty u \cdot f(u) du = \sigma \cdot \bar{u}. \tag{3.73}$$

In Abbildung 3.21 wurden die Ratenkoeffizienten für 1-fachen CX an Ar-Atomen mit $\bar{u} = 2500$ (und 400 m/s) geplottet. Diese Werte entsprechen den mittleren Geschwindigkeiten von MAXWELL-verteilten Ar-Teilchen mit einer Temperatur von 1 eV (bzw. 300 K).

Abbildung 3.21 zeigt somit, daß bei vergleichbaren Dichten von heißen Elektronen und Neutralteilchen ab $z = 8$ der CX einen größeren Einfluß auf die Ionendichten als die S-EII zu nehmen beginnt. Tatsächlich ist die Elektronendichte im Plasmazentrum aber etwa eine Größenordnung größer als die Neutralteilchendichte (siehe

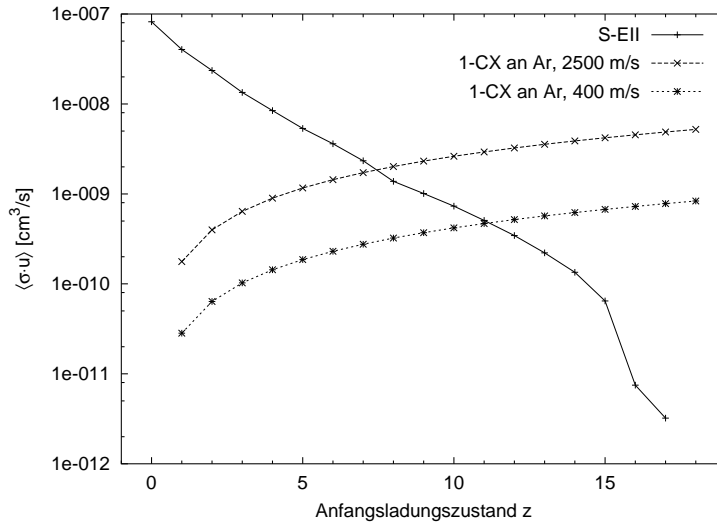


Abbildung 3.21: Vergleich der S-EII-Ratenkoeffizienten von Ar-Ionen mit denen für die einfache Projektilladungsänderung durch CX mit Ar-Atomen (siehe Text).

z.B. Abbildung 4.30 auf Seite 153), so daß die S-EII- und 1-CX-Raten dort erst bei $z = 15$ vergleichbar werden.

Die Fragestellung nach der Bedeutung des CX für die CSD wird noch einmal anhand der Simulationsergebnisse in Abschnitt 4.6.3 diskutiert.

3.6 Transport der Ionen

Der Iontentransport spielt für die Ladungszustandsverteilung eine zentrale Rolle, da es im Plasmainneren keine Rekombinationsprozesse gibt, die die Ionisationsprozesse deutlich kompensieren (siehe Abschnitt 3.5.2), und da auch der Ladungsaustausch letztlich nur von geringer Bedeutung ist (siehe Abschnitt 4.6.3). Die Ladungszustandsverteilung stellt sich daher als Gleichgewicht hauptsächlich zwischen der Elektronenstoßionisation und dem Ionenabtransport zu den Wänden sowie zur Extraktion ein.

Trennung zwischen stoßdominiertem und quasi-stoßfreiem Iontentransport. Die Bewegungsgleichung eines Ions in einem Magnetfeld, das gleichzeitig statistischen Einflüssen wie elastischen Stößen ausgesetzt ist, läßt sich wie folgt formulieren:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q \cdot \vec{v} \times \vec{B} + \vec{F}_{stat}(t). \quad (3.74)$$

Der erste Summand ist dabei die LORENTZ-Kraft, während $\vec{F}_{stat}(t)$ die durch die Stöße resultierenden Kräfte symbolisiert. Da es sich hierbei um zufällige Ereignisse handelt, ist $\vec{F}_{stat}(t)$ prinzipiell nicht exakt bekannt. Lediglich statistische Aussagen

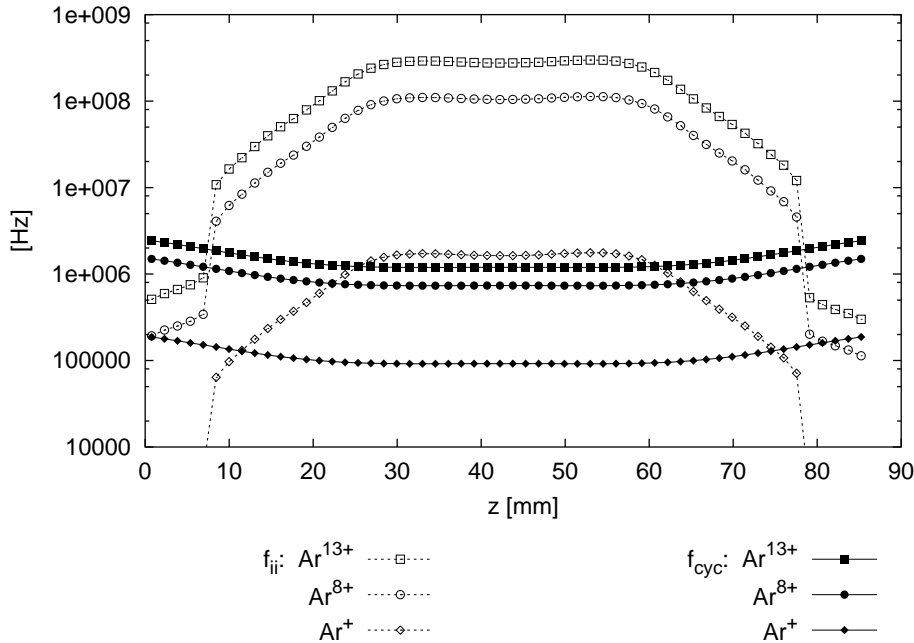


Abbildung 3.22: Vergleich zwischen den Zyklotronfrequenzen f_{cyc} und den ii-Stoßfrequenzen f_{ii} von $\text{Ar}^{1,8,13+}$ entlang der Zylindersymmetrieachse. Es wird deutlich, daß räumlich zwischen zwei Bereichen des Ionentransportes (stoßdominierter im Zentrum und quasi-stoßfreier im Außenbereich) unterschieden werden muß. Diese Daten stammen aus der Beispielsimulation in Kapitel 4.3.

lassen sich darüber machen, wenn die zugrundeliegenden Einzelprozesse bekannt sind.

Abhängig von der ii-Stoßrate $f_{ii}(n_{++})$ gem. (2.35) gibt es zwei Grenzfälle der Ionenbewegung:

1. $f_{ii} \rightarrow 0$, wenn $n_{++} \rightarrow 0$: Das betrachtete Ion bewegt sich stoßfrei und seine Bewegung wird vollständig durch die LORENTZ-Kraft bestimmt.
2. $f_{ii} \rightarrow \infty$, wenn $n_{++} \rightarrow \infty$: Die LORENTZ-Kraft ist vernachlässigbar. Das Ion vollführt durch die Stöße einen Random-Walk.

Ob die LORENTZ-Kraft oder die elastischen Stöße die Ionenbewegung dominieren, läßt sich durch den Vergleich der im Mittel zwischen zwei Stößen zurückgelegten Strecke und der Länge der Zyklotronumlaufbahn oder äquivalent durch die Stoßrate f_{ii} und die Zyklotronfrequenz f_{cyc} bestimmen. Für diese gilt in den zwei Grenzfällen entweder $f_{ii} \ll f_{cyc}$ bzw. $f_{ii} \gg f_{cyc}$. Abbildung 3.22 mit einem Vergleich von f_{ii} und f_{cyc} für einige Ladungszustände entlang der z-Achse der Quelle greift hier auf typische Simulationsergebnisse vorweg und zeigt, daß es im Inneren einen relativ gut definierten Raumbereich mit stoßdominiertem Ionentransport gibt, während die Bewegung weiter außen schnell quasi-stoßfrei wird.

Derart unterschiedliche Bewegungstypen können nicht mit nur einem Ansatz beschrieben werden, so daß in dieser Arbeit zwischen zwei idealisierten Transportregimen unterschieden wird:

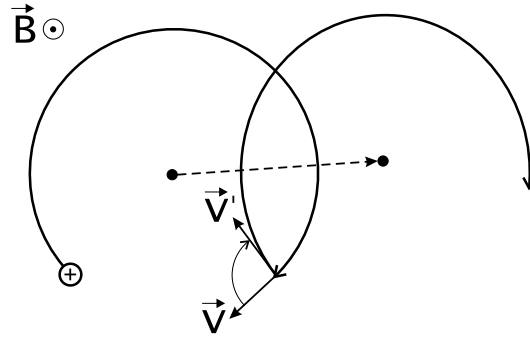


Abbildung 3.23: Versetzung Δr (gestrichelte Linie) des Führungszentrums \bullet eines Ions \oplus im homogenen Magnetfeld \vec{B} , dessen Geschwindigkeit beim Stoß von \vec{v} nach \vec{v}' gedreht wird.

- stoßdominierter Transport im hier sogenannten *Plasmakernbereich* (PKB) und
- quasi-stoßfreier Transport außerhalb des PKBs.

Der Übergang zwischen diesen zwei Grenzfällen ist real natürlich fließend. Eine mathematische Trennung der beiden Raumbereiche könnte man für jede Spezies individuell z.B. anhand der Beziehung $f_{ii} = f_{cyc}$ vornehmen.

Es sei hier jedoch schon vorweg gesagt, daß eine ionenspezifische Identifikation des PKBs in der softwaretechnischen Implementation dieses Modells (siehe Anhang D) nicht erfolgt.

3.6.1 Stoßdominierter Transport im Plasmakernbereich

3.6.1.1 Ionenbewegung als Random-Walk

Da die Stöße statistischer Natur sind, stellt die stoßdominierte Ionenbewegung einen 3-dimensionalen Random-Walk dar. Mathematische Beschreibungen von Random-Walk-Problemen laufen letztlich auf die Bestimmung einer typischen Schrittweite hinaus, aus der z.B. folgt, wie schnell eine anfangs räumlich konzentrierte Dichteverteilung auseinanderläuft (siehe z.B. [Rei87]).

Beim Ionentransport im Magnetfeld wird dafür häufig die Versetzung $\Delta r \approx r_c$ des Führungszentrums bei einem einzelnen Stoß (siehe Abbildung 3.23) herangezogen [GR98], die typischerweise in der Größenordnung des LARMOR-Radius r_c nach (2.11) liegt. Diese Abschätzung eignet sich jedoch nur für den Fall $f_{ii} \leq f_{cyc}$, der hier schon als stoßfrei betrachtet wird.

Denn wenn die Stoßrate deutlich über die Umlauffrequenz anwächst, wird zwar *das Führungszentrum* eines Ions bei jedem Stoß nach wie vor in der Größenordnung des LARMOR-Radius versetzt. Effektiv tanzt das Führungszentrum jedoch nur um den echten Aufenthaltsort des Teilchens herum, da sich dieser zwischen zwei sehr kurz aufeinander folgenden Stößen im Vergleich zu Δr nicht fortbewegt hat. In diesem Grenzfall ergibt sich die Random-Walk-Schrittweite somit aus dem Produkt von

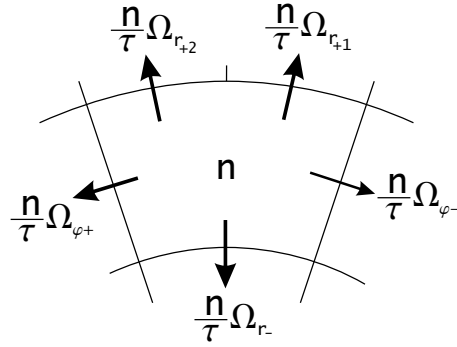


Abbildung 3.24: Die Verlustraten der Teilchen mit der Dichte n durch Transport in eine Nachbarzelle (bzw. Richtung) k werden hier mathematisch durch die totale Einschlußzeit τ und die Ω_k beschrieben. Aufgrund des für die Zellaufteilung gewählten zylindrischen Koordinatensystems werden die Richtungen k mit z_{\pm} , φ_{\pm} , r_{-} und $r_{+1,2}$ bezeichnet. Falls Zellen in radialer Richtung nach außen nur genau eine Nachbarzelle haben (siehe z.B. die des dritten Ringes in Abbildung 3.1 auf Seite 38), wird nur r_{+1} verwendet.

Teilchengeschwindigkeit und mittlerer Zeit zwischen zwei Stößen, da die Bewegung dann als näherungsweise linear betrachtet werden kann.

Aus Mangel an einer geschlossenen analytischen Formulierung dieses Problems, die einen ausreichend großen Wertebereich möglicher Stoßraten abdeckt, wurde daher zu Monte-Carlo-Simulationen übergegangen, mit denen für jede PKB-Zelle und jede Ionenspezies die Einschlußzeit τ und die Verteilungen Ω_k der Abtransporte auf die Nachbarzellen k (siehe Abbildung 3.24) bei gegebenen Ionendichten n_{++} bestimmt werden. Derartige Monte-Carlo-Simulationen sind bzgl. ihrer mathematischen Formulierung zwar relativ einfach, haben aber den Nachteil, daß sie im Vergleich zu einer analytischen Formel einen deutlich höheren Programmieraufwand haben und für eine ausreichende Genauigkeit wesentlich mehr Rechenzeit beanspruchen (siehe Abschnitt D.1.2).

3.6.1.2 Monte-Carlo-Simulation eines einzelnen Ions.

Zur numerischen Trajektorienverfolgung eines Ions, dessen Startort und -geschwindigkeit gegeben sind, bietet sich eine Trennung der determinierten und der stochastischen Einflüsse gem. der Bewegungsgleichung (3.74) an. Der Einfluß des Magnetfeldes wird in diesen Simulationen mit dem in der Literatur bekannten BORIS-Algorithmus [BL91] bestimmt. Die Berücksichtigung der statistischen Geschwindigkeitsänderungen durch ii-Stöße basiert, wie im folgenden dargestellt, auf Arbeiten von CHANDRASEKHAR sowie SPITZER [Spi56] und wurde in ähnlicher Weise bereits von TAKIZUKA und ABE [TA77] verwendet.

Wie schon in Abschnitt 2.3.2 erläutert, konnte SPITZER zeigen, daß die kumulative Wirkung vieler Stöße mit kleinen Ablenkwinkeln größer als die einzelner Stöße mit großen Ablenkwinkeln ist [Spi56], so daß auch hier nur erstere berücksichtigt werden.

Trifft ein einzelnes Ion (Masse m , Ladung $Z \cdot e$, Geschwindigkeit \vec{v}) auf ein

Ion aus einer Menge sogenannter *Feldteilchen* (Masse m_1 , Ladung $Z_1 \cdot e$, Dichte n_1 , Temperatur T), so ist dies mit einer kleinen Geschwindigkeitsänderung $\Delta\vec{v}$ verbunden, die man geeigneterweise in die Komponenten parallel und senkrecht zur *Ausgangsrichtung* (Diese ist nicht zu verwechseln mit der Magnetfeldrichtung!) unterteilt:

$$\Delta\vec{v} = \Delta\vec{v}_{\parallel} + \Delta\vec{v}_{\perp}. \quad (3.75)$$

Aufgrund der verschiedenen möglichen Bahnparameter, Auftreffrichtungen und -geschwindigkeiten, die $\Delta\vec{v}$ bestimmen, existiert für die Beträge $\Delta v_{\parallel} \equiv |\Delta\vec{v}_{\parallel}|$ und $\Delta v_{\perp} \equiv |\Delta\vec{v}_{\perp}|$ jeweils eine spezifische Verteilung, deren genauer Verlauf (an dieser Stelle) unbekannt ist, aber auch nicht benötigt wird (siehe weiter unten).

Nach der Zeit t_N , in der ein Testteilchen N Stöße mit Geschwindigkeitsänderungen $\Delta\vec{v}_i$ erfahren hat, hat sich dessen Geschwindigkeit um die zufällige Größe

$$\Delta\vec{v}(t_N) = \sum_{i=1}^N \Delta\vec{v}_i = \Delta\vec{v}_{\parallel}(t_N) + \Delta\vec{v}_{\perp}(t_N) \quad (3.76)$$

geändert. Das Testteilchen vollführt also einen Random-Walk auch im Geschwindigkeitsraum (siehe [Spi56, Abb. 5.2, S. 70]). Das bedeutet, daß die *Wahrscheinlichkeitsdichten* für $\Delta\vec{v}_{\parallel}(t_N)$ und $\Delta\vec{v}_{\perp}(t_N)$ ebenfalls zeitabhängig sind und mit größer werdendem t_N immer breiter werden⁴⁴.

SPITZER hat die Änderungsraten berechnet, mit denen sich die Mittelwerte $\langle\Delta v_{\parallel}\rangle(t)$ und $\langle\Delta v_{\perp}\rangle(t)$ sowie die Varianzen $\langle(\Delta v_{\parallel})^2\rangle(t)$ und $\langle(\Delta v_{\perp})^2\rangle(t)$ zeitlich entwickeln [Spi56]. Dabei berücksichtigte er Stöße mit Bahnparametern zwischen b_0 , dem Bahnparameter mit einer Ablenkung von 90° (siehe Abschnitt 2.3.2), und der DEBYE-Länge sowie die Bewegung im Schwerpunktsystem. Für Ionen kommt er zu dem Ergebnis [Spi56, S. 73, 74]

$$\langle\Delta v_{\perp}\rangle \equiv 0 \quad (3.77)$$

$$\frac{d}{dt} \langle(\Delta v_{\perp})^2\rangle = A_D \cdot l_1 \frac{\Phi(l_1 v) - G(l_1 v)}{(l_1 v)} \quad (3.78)$$

$$\frac{d}{dt} \langle\Delta v_{\parallel}\rangle = -A_D \cdot l_1^2 \left(1 + \frac{m}{m_1}\right) G(l_1 v) \quad (3.79)$$

$$\frac{d}{dt} \langle(\Delta v_{\parallel})^2\rangle = A_D \cdot l_1 \frac{G(l_1 v)}{(l_1 v)}. \quad (3.80)$$

⁴⁴Für sehr große t konvergieren diese Verteilungen natürlich und werden dann zeitunabhängig. Die hier betrachteten Zeiten seien aber so klein, daß dies unbedeutend ist.

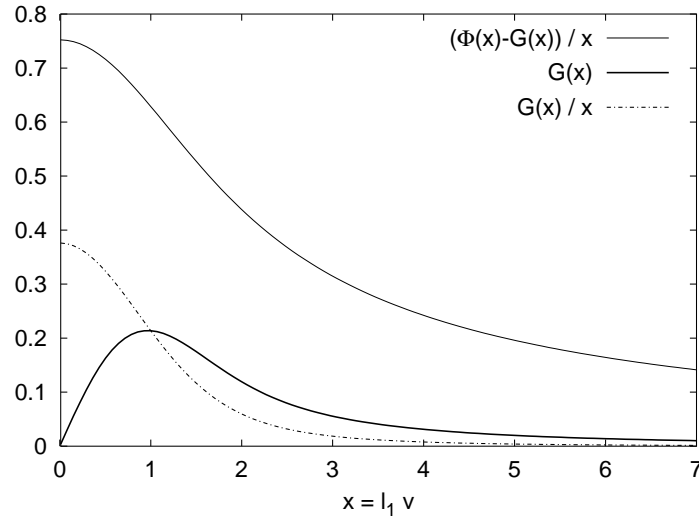


Abbildung 3.25: Darstellung der geschwindigkeitsabhängigen Terme in (3.78) bis (3.80). x ist nach (3.86) ungefähr die auf die mittlere Feldteilchengeschwindigkeit normierte Geschwindigkeit des Testteilchens.

Dabei sind

$$A_D = \frac{8\pi \tilde{e}^4 Z^2 Z_1^2 n_1 \ln \Lambda}{m^2} \quad (3.81)$$

$$\Phi(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x e^{-y^2} dy \quad \text{die Fehler-Funktion} \quad (3.82)$$

$$G(x) = \frac{\Phi(x) - x \cdot \Phi'(x)}{2x^2} \quad (3.83)$$

$$l_1^2 = \frac{m_1}{2\tilde{k}T} \quad (3.84)$$

$$\ln \Lambda = \ln \left[\frac{3}{2Z Z_1 \tilde{e}^3} \left(\frac{\tilde{k}^3 T^3}{\pi n_e} \right)^{1/2} \right] \quad \text{der COULOMB-Logarithmus} \quad (3.85)$$

Des weiteren ist zu beachten, daß diese Formeln in cgs- und elektrostatischen (e.s.u) Einheiten notiert sind. Das heißt, Dichten sind in cm^{-3} , die Massen in g und Geschwindigkeiten in cm/s zu verwenden. Für die benutzten Naturkonstanten sind die Werte

$$\begin{aligned} \tilde{e} &= 4,803 \cdot 10^{-10} \quad \text{e.s.u} \quad (\text{Elementarladung}) \\ \tilde{k} &= 1,38 \cdot 10^{-16} \quad \text{erg/degree} \quad (\text{BOLTZMANN-Konstante}) \end{aligned}$$

einzusetzen [Spi56, S. 99].

Daß die Änderung Δv_{\perp} der Geschwindigkeit senkrecht zur Ursprungsrichtung im Mittel gem. (3.77) verschwindet, folgt direkt daraus, daß die Teilchen mit immer gleicher Wahrscheinlichkeit nach links und rechts bzw. oben und unten abgelenkt werden.

In paralleler Richtung führen die Stöße nach (3.79) *im Mittel* stets zu einer Abbremsung, da die als MAXWELL-verteilt angenommenen Feldteilchen im Mittel ruhen. CHANDRASEKHAR und SPITZER sprechen daher von *dynamischer Reibung*. Dennoch kann ein Testteilchen bei einem Stoß auch Parallelgeschwindigkeit gewinnen, wenn es von einem noch schnelleren Teilchen gestoßen wird, das sich etwa in die gleiche Richtung bewegt.

Abbildung 3.25 zeigt die Verläufe der geschwindigkeitsabhängigen Terme von (3.78) bis (3.80) als Funktion von $x \equiv l_1 v$. Mit der Definition (3.84) von l_1 und der mittleren Feldteilchengeschwindigkeit \bar{v}_1 gem. (C.3) kann man auch

$$x = \frac{2}{\pi} \frac{v}{\bar{v}_1} \approx 1,13 \cdot \frac{v}{\bar{v}_1} \quad (3.86)$$

schreiben, so daß x also praktisch die Testteilchengeschwindigkeit v in Einheiten der mittleren Feldteilchengeschwindigkeit \bar{v}_1 ist.

Erwartungsgemäß gibt es für $v \rightarrow 0$ keine dynamische Reibung. Diese wächst mit v erst an und erreicht bei $v \approx \bar{v}_1$ ihr Maximum, um für noch größere v wieder an Bedeutung zu verlieren.

Die Varianzen $\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ und $\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$, d.h. die Fluktuationen der beiden Geschwindigkeitskomponenten, werden für $v \rightarrow 0$ maximal und nehmen mit zunehmender Teilchengeschwindigkeit erwartungsgemäß ab, da auch die Einzelstoßablenkungen immer kleiner werden⁴⁵.

Auswürfeln zufälliger Geschwindigkeitsänderungen. Um nun in der Einzelteilchensimulation die während *eines* kleinen, aber endlichen Zeitschrittes Δt *kumulierten* Effekte (der hier betrachteten statistischen Ablenkungen mit kleinen Winkeln) zu simulieren, kann man pro Zeitschritt zufällige Geschwindigkeitsänderungen $\Delta \tilde{v}_{\parallel} = \Delta \tilde{v}_{\parallel}(\Delta t)$ und $\Delta \tilde{v}_{\perp} = \Delta \tilde{v}_{\perp}(\Delta t)$ auswürfeln.

Dabei wird ausgenutzt, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $w_{\perp}(\Delta \tilde{v}_{\perp})$ und $w_{\parallel}(\Delta \tilde{v}_{\parallel})$, aus denen die benötigten Werte $|\Delta \tilde{v}_{\parallel}|$ und $|\Delta \tilde{v}_{\perp}|$ ausgewürfelt werden,

- GAUß-förmig angesetzt werden können (siehe unten),
- deren Mittelwerte und Varianzen für $\Delta t = 0$ gleich null sind, und
- die zeitlichen Änderungen der Mittelwerte und Varianzen für kleine Δt durch (3.77) bis (3.80) gegeben sind.

Es wird wie folgt vorgegangen:

1. Geschwindigkeitsänderung $\Delta \tilde{v}_{\perp}$ senkrecht zur aktuellen Bewegungsrichtung:

- (a) Den Betrag der Geschwindigkeitsänderung $\Delta \tilde{v}_{\perp} \in \mathbb{R}$ würfelt man aus der GAUßförmigen Wahrscheinlichkeitsdichte $w_{\perp}(\Delta \tilde{v}_{\perp})$, die den Mittelwert

$$\langle \Delta v_{\perp} \rangle = 0 \quad (3.87)$$

⁴⁵Nach SPITZER liefert (3.80) jedoch für Geschwindigkeiten v , die die mittlere Feldteilchengeschwindigkeit \bar{v}_1 stark überschreiten, zu große Werte für die Streuung in paralleler Richtung [Spi56, S. 74-75].

und mit (3.78) bis (3.85) die Varianz

$$\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle = \frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle \cdot \Delta t \quad (3.88)$$

hat (siehe Beispiel in Abbildung 3.26).

Daß $w_{\perp}(\Delta \tilde{v}_{\perp})$ als GAUßsche Verteilung angesetzt werden darf, obwohl die Verteilung der Geschwindigkeitsänderungen pro Stoß unbekannt ist (siehe (3.75) oben), folgt aus dem Zentralen Grenzwertsatz (siehe unten).

- (b) Die Richtung der zufälligen Geschwindigkeitsänderung kann mit Hilfe eines Einheitsrichtungsvektor $\vec{n}_1 \in \mathbb{R}^3$ konstruiert werden, der (technisch sehr einfach) aus einer isotropen Zufallsverteilung gewürfelt wird⁴⁶.

Indem man davon die zu \vec{v} parallele Komponente abzieht, erhält man einen zufälligen, aber zu \vec{v} senkrechten (nicht normierten) Vektor

$$\vec{n}_2 := \vec{n}_1 - \frac{\vec{n}_1 \cdot \vec{v}}{|\vec{v}|^2} \cdot \vec{v}. \quad (3.89)$$

- (c) Eine zufällige Geschwindigkeitsänderung $\Delta \tilde{\vec{v}}_{\perp}$ während Δt mit den gewünschten Eigenschaften ist dann z.B.

$$\Delta \tilde{\vec{v}}_{\perp} := \Delta \tilde{v}_{\perp} \cdot \frac{\vec{n}_2}{|\vec{n}_2|}. \quad (3.90)$$

2. Geschwindigkeitsänderung $\Delta \tilde{v}_{\parallel}$ parallel zur aktuellen Bewegungsrichtung:

- (a) Analog zu (1.a) würfelt man den Betrag $\Delta \tilde{v}_{\parallel} \in \mathbb{R}$ aus der GAUß-Verteilung $w_{\parallel}(\Delta \tilde{v}_{\parallel})$, die mit (3.79) den – aufgrund der dynamischen Reibung (s.o.) jedoch negativen – Mittelwert

$$\langle \Delta v_{\parallel} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Delta v_{\parallel} \rangle \cdot \Delta t < 0 \quad (3.91)$$

und mit (3.80) die Varianz

$$\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle = \frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle \cdot \Delta t \quad (3.92)$$

hat (siehe Beispiel in Abbildung 3.26).

Auch hier ist $w_{\parallel}(\Delta \tilde{v}_{\parallel})$ als GAUßsche Verteilung durch den Zentralen Grenzwertsatz (siehe unten) begründet.

- (b) Damit erhält man als zufällige Änderung der Parallelgeschwindigkeit während Δt :

$$\Delta \tilde{v}_{\parallel} := \Delta \tilde{v}_{\parallel} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|}. \quad (3.93)$$

⁴⁶Einzige Bedingung für \vec{n}_1 ist, daß er nicht (anti-)parallel zu \vec{v} ist, d.h. $|\vec{n}_1 \cdot \vec{v}| < |\vec{v}|$. Ansonsten ergäbe (3.89) für \vec{n}_2 den Nullvektor.

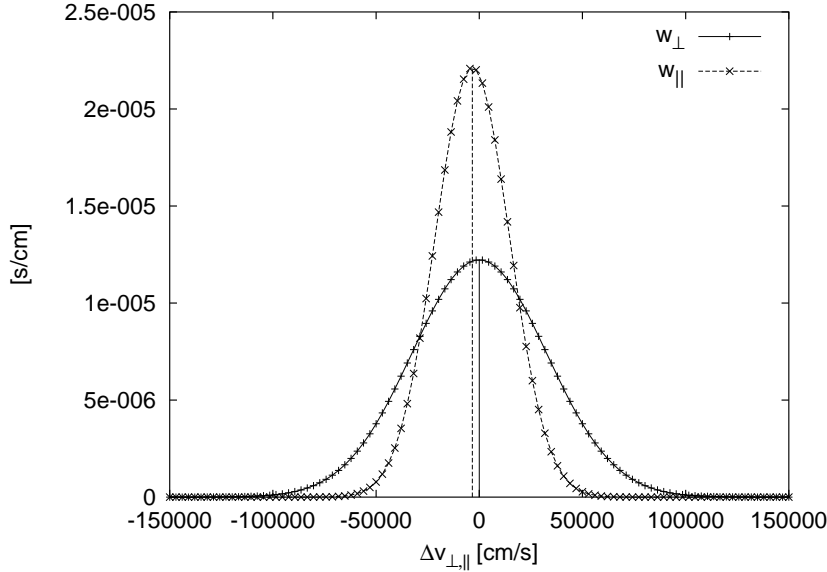


Abbildung 3.26: Beispiele für die Wahrscheinlichkeitsdichten $w_{\perp} = w_{\perp}(\Delta\tilde{v}_{\perp})$ und $w_{\parallel} = w_{\parallel}(\Delta\tilde{v}_{\parallel})$, mit denen die kumulative Wirkung von Ablenkungen mit kleinen Winkeln für ein Ar^{8+} -Ion bei einer Schrittweite von $\Delta t = 10^{-9}$ s simuliert wird, das sich mit einer Geschwindigkeit von 250.000 cm/s (das ist etwa die mittlere Geschwindigkeit eines MAXWELL-verteilten Ar-Gases bei einer Temperatur von 1 eV) durch Ar-Ionen mit der Dichte $n_{++} \equiv \sum_z z^2 \cdot n_z = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bewegt. Man sieht, daß die mittlere Abbremsung in paralleler Richtung relativ klein ist. Des weiteren sind die mittleren Ablenkungen $\Delta\tilde{v}_{\perp}$ senkrecht zur Bewegungsrichtung größer als die $\Delta\tilde{v}_{\parallel}$ in paralleler Richtung.

Legitimation der Gauß-Verteilungen $w_{\perp}(\Delta\tilde{v}_{\perp})$ und $w_{\parallel}(\Delta\tilde{v}_{\parallel})$. Auf den ersten Blick haben die angesetzten Wahrscheinlichkeitsdichten $w_{\perp}(\Delta\tilde{v}_{\perp})$ und $w_{\parallel}(\Delta\tilde{v}_{\parallel})$ nur die zwei statistischen Eigenschaften des Mittelwertes und der Varianz mit den tatsächlichen – bisher nicht besprochenen – Verteilungen gemeinsam. Daß es sich bei letzteren tatsächlich um GAUßsche Wahrscheinlichkeitsdichten handelt, folgt jedoch aus dem Zentralen Grenzwertsatz [Sch00, Rei87].

Danach sind Zufallszahlen y einer Zufallsgröße Y , die sich additiv aus den N Zufallsgrößen X_1, \dots, X_N gemäß

$$y = \sum_{i=1}^N x_i \quad (3.94)$$

zusammensetzt, für große N näherungsweise GAUß-verteilt. Für Mittelwert und Varianz gelten dabei

$$\bar{y} = N \cdot \bar{x} \quad (3.95)$$

$$\overline{\Delta y^2} = N \cdot \overline{\Delta x^2}. \quad (3.96)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte der X_i ist dazu lediglich vorausgesetzt, daß für sie der Mittelwert \bar{x} und die Varianz $\overline{\Delta x^2}$ definiert sind. Es muß sich nicht notwendigerweise um eine GAUßsche Wahrscheinlichkeitsdichte handeln!

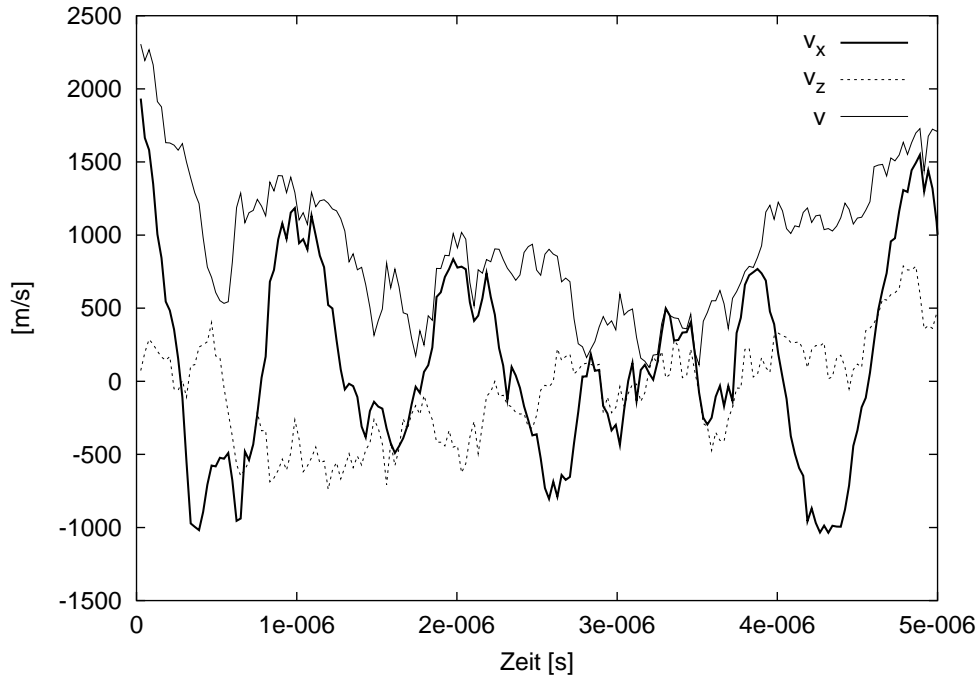


Abbildung 3.27: Typischer zeitlicher Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten v_x und v_z sowie des Geschwindigkeitsbetrages $|\vec{v}|$ eines Ar^{8+} , das sich in einem Magnetfeld $\vec{B} = B_z \cdot \vec{e}_z$ der Stärke 0,25 T und durch eine Stoßpartnerdichte von $n_{++} = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ bewegt. Da \vec{B} parallel zur z -Richtung angesetzt wurde, ist v_x (fett) eine der zwei Komponenten der Rotationsbewegung. Ihre Periodizität ist aufgrund der nicht zu hohen Stoßrate gerade noch zu erkennen. (Die stoßfreie Umlaufperiode beträgt für Ar^{8+} bei 0,25 T etwa $1,3 \mu\text{s}$.) Mit ansteigender Dichte n_{++} wird der Einfluß des Magnetfeldes auf die Geschwindigkeitsänderungen gegenüber den Fluktuationen durch Stöße immer geringer. Bei Werten von $n_{++} > 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, die für gut optimierte EZR-Quellen typisch sind, ist er bereits vernachlässigbar, so daß der Ionentransport diffusiv und isotrop ist.

Nach jedem Integrationsschritt mit dem BORIS-Algorithmus kann man also gem. dem obigen Algorithmus eine zufällige Geschwindigkeitsänderung vornehmen. Zur Demonstration dieses Verfahrens ist in Abbildung 3.27 der so simulierte Zeitverlauf der Geschwindigkeit eines Ar^{8+} -Ions dargestellt.

3.6.1.3 Bestimmung der mittleren Transportdaten

Zur Ermittlung der benötigten Transportdaten einer Zelle⁴⁷ c und einer Ionenspezies s werden ausreichend viele Monte-Carlo-Simulationen einzelner Teilchen wie eben beschrieben durchgeführt. Ihre Startpunkte werden dazu zufällig, aber isotrop verteilt in der Zelle festgelegt. Die Startgeschwindigkeiten sind ebenfalls isotrop im Geschwindigkeitsraum verteilt und unterliegen der zugehörigen MAXWELL-Verteilung mit der durch den Simulationsparameter `transp.ions_temp_eV` festgelegten Iontemperatur. Jede Einzelsimulation endet beim Verlassen der Zelle.

⁴⁷Es sei schon hier darauf hingewiesen, daß aufgrund des extrem hohen Rechenzeitbedarfs derzeit nicht für jede betroffene Zelle Simulationen durchgeführt werden können. Zur Lösung dieses Problems siehe Abschnitt D.1.2.

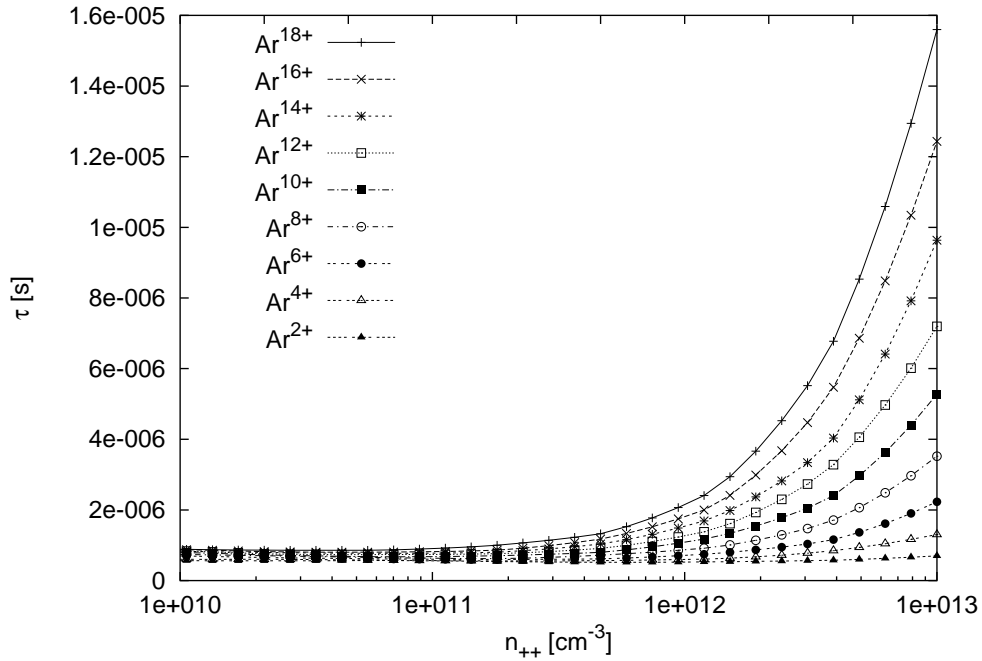


Abbildung 3.28: Per Monte-Carlo-Simulation gewonnene Einschlußzeiten τ der Ar-Ionen ($T_i = 1$ eV) in einer PKB-Zelle in Abhängigkeit von der Dichte n_{++} . Simuliert wurde nur für die (auf der logarithmischen Skala äquidistanten) n_{++} , die am oberen Rand markiert sind. Dazwischen liegende Kurvenpunkte werden quadratisch interpoliert. Es handelt sich um die repräsentative Zelle (siehe Abschnitt D.1.2) für den dritten Ring von Innen aus der Plasmakammeraufteilung mit 12255 Zellen (siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161), deren Längenmaße etwa 2 mm betragen.

Zur softwaretechnischen Implementation und der aufgrund des enormen Rechenbedarfs erforderlichen Vereinfachungen dieser Monte-Carlo-Simulationen siehe Abschnitt D.1.2.

Einschlußzeit $\tau_{s,c}$. Zur Bestimmung der mittleren Einschlußzeit $\tau_{s,c}$ werden die einzelnen Aufenthaltsdauern in der Zelle registriert. In Abbildung 3.28 sind beispielsweise die so erhaltenen Mittelwerte für verschiedene Ladungszustände in Abhängigkeit von n_{++} dargestellt.

Verteilung $\Omega_{s,c,k}$. Des weiteren wird gezählt, wie häufig die simulierten Teilchen durch welche Zellwände k ausgetreten sind. Daraus folgen die Anteile

$$\Omega_{s,c,k} = \frac{\text{Zahl der Teilchen (Spezies } s), \text{ die die Zelle } c \text{ in Richtung } k \text{ verließen}}{\text{Gesamtzahl der simulierten Teilchen der Spezies } s} \quad (3.97)$$

Abbildung 3.29 zeigt beispielsweise die Ω_k von $Ar^{3,14+}$ in Abhängigkeit von n_{++} . Aufgrund des zur z-Achse parallelen Magnetfeldes (siehe Abschnitt D.1.2) dominieren vor allem bei kleinen Stoßraten auch die Verluste in die Richtungen $k = z_{\pm}$. Diese Dominanz nimmt mit größerem Ladungszustand z zu, da die Zyklotronradien der

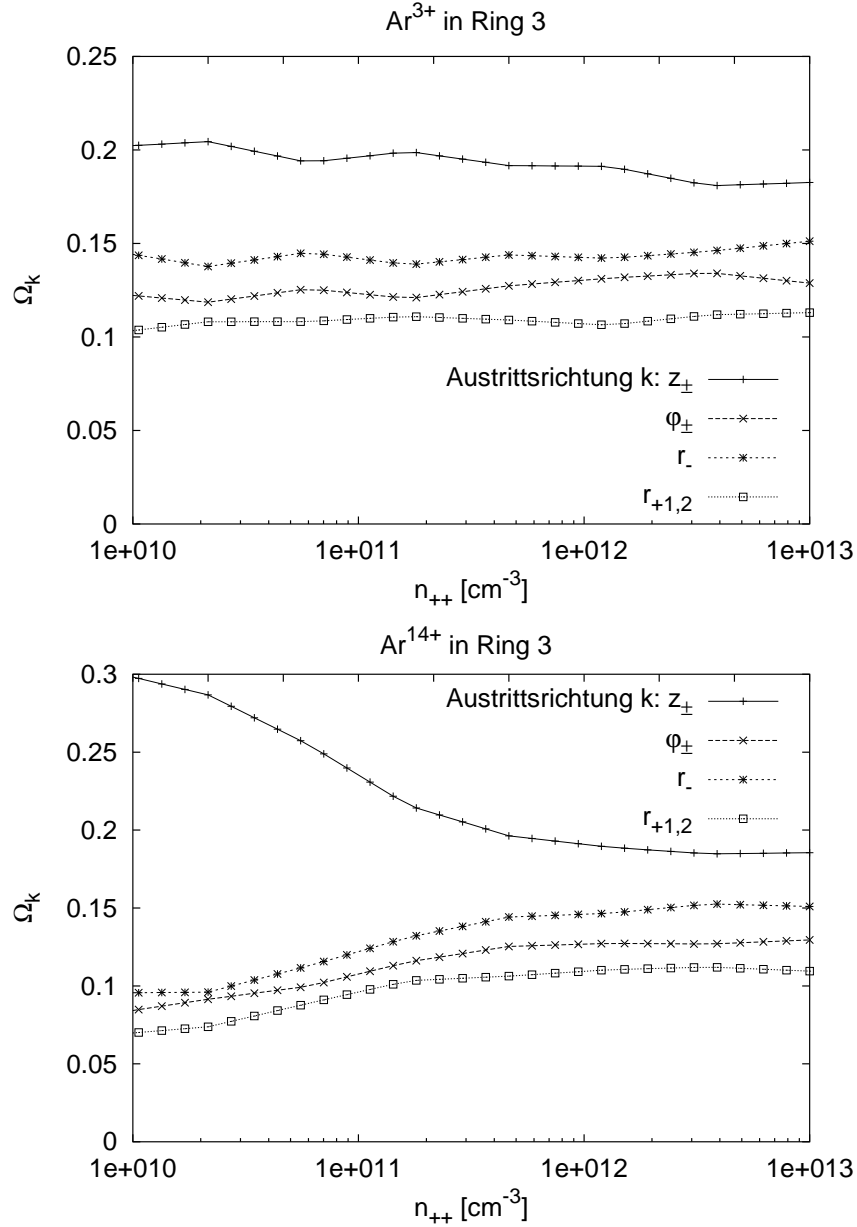


Abbildung 3.29: Per Monte-Carlo-Simulation berechnete typische Verteilungen Ω_k der Abtransporte auf die Nachbarzellen (bzw. Richtungen) k in Abhängigkeit von n_{++} . Zur Bezeichnung der Richtungen k mit z_{\pm} usw. siehe Abbildung 3.24. Wie in Abschnitt D.1.2 erläutert, wird zur Reduzierung der Rechenzeit nur in repräsentativen Zellen simuliert, die jeweils für einen Ring der Zellstruktur (siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38) definiert werden. In ihnen wird ein zur z -Achse paralleles Magnetfeld angesetzt. Aufgrund dieser Ausrichtung gelten $\Omega_{z_-} = \Omega_{z_+}$, $\Omega_{\varphi_-} = \Omega_{\varphi_+}$ und $\Omega_{r_{+1}} = \Omega_{r_{+2}}$. Des Weiteren wird nur für eine bestimmte Anzahl von Werten für n_{++} simuliert. Hier sind es auf der logarithmischen Skala 10 äquidistante n_{++} , die an der oberen Abszisse markiert sind. An den dazwischen liegenden Punkten wird (über der logarithmischen Abszisse) linear interpoliert. Die leichten Schwankungen der Kurven beruhen auf der nur endlichen Zahl (hier 5000) von Einzelsimulationen pro n_{++} und Ionenspezies. Zur vollständigen Simulation aller benötigter Punkte, d.h. 18 Ar-Ionenzustände in 4 repräsentativen Zellen für 10 n_{++} mit jeweils 5000 Einzelsimulationen, waren 30 PC's mit 800 MHz Taktfrequenz etwa 20 Stunden beschäftigt. Zur Diskussion der Verläufe siehe Abschnitt 3.6.1.3.

Ionen mit z^{-1} abnehmen⁴⁸ und somit weniger Teilchen die simulierte Zelle durch die Rotationsbewegung in den Richtungen φ_{\pm} , r_{-} und $r_{+1,2}$ senkrecht zum Magnetfeld verlassen.

Mit zunehmender Stoßrate f_{ii} , die gem. (2.35) proportional zu $z^2 \cdot n_{++}$ ist, sinkt der Einfluß des Magnetfeldes auf die Ionentrajektorien, so daß die Ω_k im Grenzfall $f_{ii} \gg f_{cyc}$ nur noch von der Geometrie der Zelle abhängen.

3.6.1.4 Dichteänderung durch den Abtransport

Mit der Einschlußzeit τ und der Verteilung Ω_k (die bei allen Größen gleichen Indizes s und c werden hier weggelassen) folgt für die Dichteänderung durch den Teilchenabtransport aus dem stoßdominierten (*collisional*) PKB durch die Zellwand k :

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)^{collTr \rightarrow k} = -\Omega_k \frac{n}{\tau} \leq 0. \quad (3.98)$$

Der *totale* Einfluß des Ionentransportes auf die Teilchendichte einer Zelle c ist dann (der Teilchenindex s ist hier wieder weggelassen):

$$\left(\frac{\partial n_c}{\partial t}\right)^{collTr} = \sum_{\substack{\text{Zellwände} \\ k}} \left(\frac{\partial n_c}{\partial t}\right)^{collTr \rightarrow k} - \sum_{\substack{\text{Nachbar-} \\ \text{zellen } c'}} \underbrace{\left(\frac{\partial n_{c'}}{\partial t}\right)^{collTr \rightarrow k(c)}}_{\substack{\text{Abtransport aus } c' \\ \text{durch die mit } C \text{ gemein-} \\ \text{same Zellwand } k(c)}} \cdot \frac{V_{c'}}{V_c}. \quad (3.99)$$

Dabei ist zu berücksichtigen, daß zwei benachbarte Zellen unterschiedliche Volumina V_c bzw. $V_{c'}$ haben können. Dies ist der Fall, wenn die beiden in radialer Richtung benachbart sind.

Für Zellwände, die gleichzeitig Grenzfläche zwischen PKB und dem Bereich außerhalb des PKBs sind, nimmt der rechte Term in (3.99) eine andere Gestalt an (siehe Abschnitt 3.6.3.3).

3.6.2 Elektrostatischer Ioneneinschluß im Plasmakernbereich

Eine allgemeine Eigenschaft von Plasmen ist deren Streben nach makroskopischer Quasineutralität (QN). Sobald örtliche Ladungsüberschüsse entstehen, werden die damit verbundenen elektrischen Felder auf Distanzen der DEBYE-Länge abgeschirmt, so daß Plasmen in ihrem Inneren makroskopische Ladungsneutralität anstreben [Che74]. (Eine notwendige Ausnahme hiervon stellt die Plasmagrenzschicht

⁴⁸Bei einer Magnetfeldstärke von 0,25 T haben Ar^{8+} -Ionen mit $v_{\perp} = 1000$ m/s (typische Geschwindigkeit bei $T_i = 1$ eV) gem. (2.11) einen Zyklotronradius von etwa 0,2 mm. Die Zellen – hier wurde mit einer Plasmakameraaufteilung von 12255 Zellen simuliert – haben lineare Ausmaße von etwa 2 mm (siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161).

(siehe Abbildung 3.3 auf Seite 43) dar, die hier jedoch vernachlässigt wird, da sie wesentlich kleiner als die linearen Maße der Zellen ist.)

Die Ladungsdichte ρ ist im Rahmen dieses Modells mit der Dichte der positiven Ladungen

$$n_+ := \sum_s z_s n_s \quad (3.100)$$

durch

$$\begin{aligned} \rho &\equiv e(n_+ - n_e) \\ &= e(n_+ - n_{e,hot} - n_{e,cold}) \end{aligned}$$

gegeben, wobei s die Ionenspezies (Ladung $q_s \equiv z_s \cdot e$) spezifiziert. Da $n_{e,cold}$ nicht negativ sein kann und ρ bei QN verschwinden muß, kann $n_{e,hot}$ nicht größer als die Dichte der positiven Ladungen n_+ sein:

$$n_+ \geq n_{e,hot}. \quad (3.101)$$

Startet man jedoch Simulationen, mit dem wie bisher beschriebenen Ionentransportmodell⁴⁹, das E-Feld-Freiheit und somit QN voraussetzt, so stellt man allgemein fest, daß der Ionenabfluß vom Plasmazentrum zu den Wänden so groß wird, daß die QN (3.101) im Plasmainternen verletzt wird! Des weiteren erreichen die höher geladenen Ladungszustände nicht die erforderlichen Dichten, um die gemessenen extrahierten Ströme zu erklären, da die Einschlußzeiten der Ionen zu klein sind, um im PKB ausreichend oft ionisiert zu werden.

Tritt ein solcher Überschuß negativer Ladungen physikalisch ein, so baut sich ein E-Feld auf, das dem Ungleichgewicht entgegenwirkt, indem es einerseits den Abtransport der Ionen und andererseits die Dichte der Elektronen reduziert.

Einfluß auf die heißen Elektronen

Daß der Einfluß solcher Felder zumindest auf die heißen Elektronen vernachlässigbar ist, läßt sich anhand der folgenden energetischen Betrachtung zeigen. Ein Elektron, das im Zentrum des Plasmas bei der Feldstärke B_0 die kinetische Energie $E_0 = E_{i0} + E_{\perp 0}$ hat, wird auf seinem Weg entlang der Magnetfeldlinie nach außen durch den magnetischen Spiegel abgebremst (siehe Abschnitt 2.3.1). Im Umkehrpunkt bei B_{max} ist dabei die gesamte kinetische Energie in Rotationsenergie E_{\perp} transformiert worden. Damit folgt a) aus der adiabatischen Konstanz des magnetischen Moments μ und b) aus der Erhaltung der kinetischen Energie im Magnetfeld:

$$\mu \stackrel{(2.16)}{\equiv} \frac{E_{\perp}}{B} \stackrel{a)}{=} \frac{E_{\perp 0}}{B_0} \stackrel{a,b)}{=} \frac{E_{i0} + E_{\perp 0}}{B_{max}}. \quad (3.102)$$

Die letzte Identität liefert dann die Translationsenergie E_{i0} , die ein Elektron mit bekannter Rotationsenergie $E_{\perp 0}$ bei gegebenen B_0 und B_{max} mindestens haben muß,

⁴⁹Dies geschieht, indem in der Parameterdatei für die Simulation (siehe Anhang D.2.4) der Parameter `csd.regard_quasiNeutrality` auf 0 gesetzt wird.

damit es dem Spiegelfeld entkommt⁵⁰:

$$E_{\parallel 0} = E_{\perp 0} \left(\frac{B_{max}}{B_0} - 1 \right). \quad (3.103)$$

Das Spiegelverhältnis B_{max}/B_0 ist bei der hier simulierten ECRIS 3 etwa zwei oder größer (siehe Abbildung 2.5 auf Seite 9), so daß für ein Elektron, das dem Spiegelfeld entkommen können soll, gelten muß:

$$E_{\parallel 0} > E_{\perp 0}. \quad (3.104)$$

Nun zeigen die Elektronensimulationen, daß die mittleren Elektronenenergien bei einigen keV liegen und praktisch nur in Rotationsbewegung stecken. Die Translationsenergie beträgt allgemein nur maximal 10% der Rotationsenergie [Hei]. Damit die durch einen negativen Ladungsüberschuß entstehenden E-Felder einen deutlichen Einfluß auf den Elektroneneinschluß haben, müßten die damit verbundenen elektrischen Potentialdifferenzen in etwa so groß sein, daß sie die fehlende Translationsenergie liefern, d.h., sie müßten ebenfalls im kV-Bereich liegen. Übliche Potentialdifferenzen, die sich in EZR-Plasmen aufbauen können, liegen typischerweise bei einigen 10 V [XL94] und somit weit unterhalb dieses Wertes.

Somit kann der Einfluß eines Ladungsungleichgewichtes auf die *heißen* Elektronen vernachlässigt werden.

Einfluß auf die kalten Elektronen

Die kalten Elektronen, die sich eventuell innerhalb des PKBs befinden, werden durch ein gegenüber dem Plasmaußenbereich negatives elektrisches Potential entlang der Feldlinien aus dem Plasmainneren heraus beschleunigt, oder sie gehen in die Population der heißen Elektronen über, sofern sie mit der Mikrowelle in Resonanz geraten.

Einfluß auf die Ionen

Auf die Ionen wirkt ein Elektronenüberschuß im Plasmainneren attraktiv und auch der magnetische Einschluß übt nach innen gerichtete Kräfte aus. Da es für die Ionen keinen entgegengesetzt gerichteten Effekt gibt, und die heißen Elektronen praktisch keine Reaktion zeigen, wird ein Überschuß heißer Elektronen gegenüber positiven Ladungen nur durch die Ionen korrigiert.

In einer exakten Beschreibung der durch die QN-Verletzung verursachten Regulationsprozesse wäre es eigentlich notwendig, das durch das Ladungsungleichgewicht entstehende E-Feld durch Lösung der POISSON-Gleichung zu bestimmen, und dessen

⁵⁰Diese Energie kann auch als Potentialhöhe interpretiert werden, die zu der Feldstärke B_{max} und der anfänglichen Rotationsenergie $E_{\perp 0}$ gehört, und gegen die ein Teilchen von B_0 aus anlaufen muß.

Einfluß auf den Transport zu berücksichtigen. Dies verlangt jedoch einen hohen Modellierungs- und Rechenaufwand, so daß vorerst der folgende, mathematisch einfachere Behandlungsansatz vorgeschlagen wird.

Ansatz. Durch einen negativen Ladungsüberschuß wachsen die Einschlußzeiten (ausgehend von ihrem Wert im E-Feld-freien Fall) an, und zwar umso stärker, je größer die Ladung z_s ist.

Zur Ladungsabhängigkeit der Einschlußzeiten der Ionen (durch elektrostatische Felder) existieren verschiedene Überlegungen anderer Autoren, z.B. [Pas74, RC80, Wes82, DJUK96]. Diese betrachten aber immer die Gesamtheit aller Ionen (d.h. die räumlichen Mittelwerte) einer Spezies.

Es gibt auch Messungen zu den Einschlußzeiten. So bestimmten DOUYSET *et al.* an der 10 GHz CAPRICE-Quelle aus dem Verhältnis zwischen Ionendichten im Plasma, die aus RÖNTGEN-Spektren ermittelt wurden, und extrahierten Strömen Einschlußzeiten, die eine lineare z -Abhängigkeit aufweisen [DKGB00].

Es sei aber noch einmal betont, daß sowohl diese theoretischen Ansätze als auch die Messungen das Plasma immer nur 0-dimensional, d.h. über den ganzen Raum gemittelt, betrachten. Die räumlichen Abhängigkeiten können sie so, wie hier benötigt, nicht berücksichtigen!

Aufgrund der Unkenntnis über den genauen makroskopischen Potentialverlauf, aber in Anlehnung an die experimentellen Ergebnisse von DOUYSET *et al.* wird in dieser Arbeit zusammen mit der QN-Bedingung (3.101) für jede Zelle c des PKBs folgender Ansatz gemacht:

$$\tau_{s,c} = \tau_{s,c}^{E=0} + \underbrace{\xi_c \cdot z_s^\kappa}_{\geq 0}. \quad (3.105)$$

Dabei ist $\tau_{s,c}^{E=0}$ die stoßbedingte Einschlußzeit der Spezies s im E-Feld-freien Fall, wie sie sich im PKB aus der Monte-Carlo-Simulation (siehe Abschnitt 3.6.1) ergibt. Der Exponent $\kappa \geq 0$ wird während der Simulation konstant gehalten. Er dient als experimenteller⁵¹ Simulationsparameter dazu, die Bedeutung der Einschlußzeit besser untersuchen zu können (siehe Abschnitt 4.6.5). Mit $\kappa = 1$ wird die von DOUYSET *et al.* beobachtete Linearität der totalen Einschlußzeiten auf die einzelnen Zellen übertragen.

Die Steigungsfaktoren ξ_c werden während der Simulation für jede betroffene Zelle c dynamisch, wie im folgenden erläutert, aus der QN-Bedingung (3.101) bestimmt, so daß die QN gerade nicht verletzt wird.

Es seien

$$R_{s,c}^{E=0} := \left| \left(\frac{\partial n_{s,c}}{\partial t} \right)^{collTr} \right| \quad (3.106)$$

$$= \frac{n_{s,c}}{\tau_{s,c}^{E=0}} \quad (3.107)$$

⁵¹ *Experimentell* bezieht sich hier nicht auf den Versuchsaufbau, sondern auf die Simulation als Experiment.

die Verlustrate der Ionenspezies s (mit Ladungszustand $z_s \geq 1$) durch den Abtransport aus der Zelle c im E-Feld-freien Fall und

$$R_{+,c}^{E=0} := \sum_s R_{s,c}^{E=0} \cdot z_s \quad (3.108)$$

die entsprechende Verlustrate aller positiven Ladungen.

Ferner sei $R_{+max,c}^{QN}$ die maximale Transportverlustrate positiver Ladungen, durch welche die QN in der Zelle c nicht verletzt wird. Das ist im Gleichgewicht die Differenz zwischen der totalen Zugewinnrate positiver Ladungen der Zelle und der Nettoänderungsrate der heißen Elektronen.

Gilt $R_{+max,c}^{QN} \geq R_{+,c}^{E=0}$, so wird die QN durch den E-Feld-freien Abtransport gar nicht beeinträchtigt, und es bleibt $\tau_{s,c} = \tau_{s,c}^{E=0}$ für alle s , d.h. $\xi_c = 0$.

Im hier eigentlich betrachteten Fall $R_{+max,c}^{QN} \leq R_{+,c}^{E=0}$ kann ξ_c dann aus dem Ansatz bestimmt werden, daß durch den verbesserten Einschluß nur genau so viele positive Ladungen abtransportiert werden, daß die QN gerade nicht verletzt wird:

$$\sum_s \frac{n_{s,c} \cdot z_s}{\tau_{s,c}^{E=0} + \xi_c \cdot z_s^\kappa} \stackrel{!}{=} R_{+max,c}^{QN} \quad (3.109)$$

Dabei ist ξ_c die einzige Unbekannte und kann somit numerisch bestimmt werden (siehe z.B. [PTVF92]).

Ist die QN in einer PKB-Zelle bereits verletzt, so wird der Abtransport gleich Null gesetzt.

Bemerkungen. Der hier beschriebene Ansatz zur Erhaltung der QN im Rahmen des Iontentransportmodells stellt lediglich einen ersten Ansatz dar, um dieses Problem zumindest qualitativ richtig zu erfassen. Bevor die QN bei einer gegebenen räumlichen CSD durch den hohen Ionenabtransport verletzt wird, wird also ohne Bestimmung des damit verbundenen makroskopischen elektrischen Feldes lediglich der Abtransport von Ionen aus den betroffenen Zellen z -abhängig reduziert.

Neben der Unsicherheit über die Qualität von (3.105) hat dieser Ansatz auch die Schwäche, daß als Reaktion auf das mit dem heißen Elektronenüberschuß verbundene E-Feld lediglich der Abtransport reduziert, aber nicht auch der Zufluß aus der Umgebung erhöht wird. Das kann bedeuten, daß der Einfluß auf die Umgebung leicht verfälscht wird.

3.6.3 Quasi-stoßfreier Iontentransport außerhalb des Plasmakernbereiches

In den Raumbereichen, in denen sich nur vernachlässigbar viele heiße Elektronen befinden, bestimmen die Ionen (sofern dort vorhanden) den Plasmatransport. Die kalten Elektronen, die dort dann die QN gewährleisten, passen sich mit ihrer Dichte

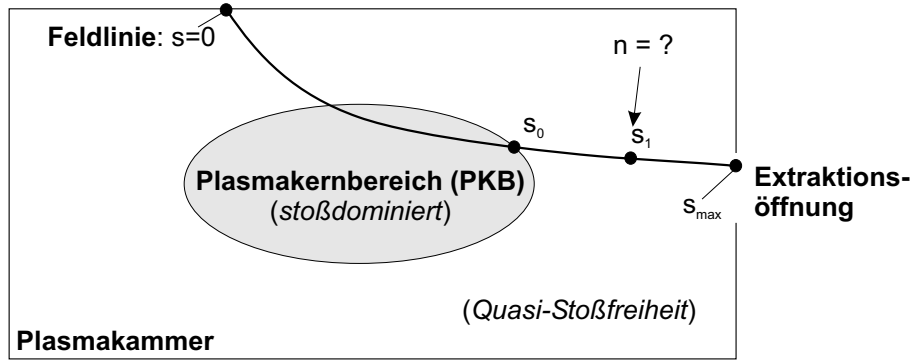


Abbildung 3.30: An einem Punkt $\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_B(s_1)$ außerhalb des PKBs wird die Teilchendichte durch die Transporteigenschaften entlang der durch \vec{r}_1 verlaufenden Feldlinie $\vec{r}_B(s)$ sowie durch die Dichte am Punkt $\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_B(s_0)$ bestimmt, wo die Feldlinie aus dem PKB austritt. Ein typischer Feldstärkeverlauf entlang der Feldlinie ist in Abbildung 3.31 dargestellt.

aufgrund ihrer wesentlich kleineren Massen aber vergleichbaren Energien der Dichte der positiven Ladungen an.

Da außerhalb des PKB kein elektrostatischer Ioneneinschluß durch die heißen Elektronen gegeben ist, können die Ionen schneller entkommen, weswegen ihre Dichten dort kleiner als im PKB sind. Dadurch wiederum reduziert sich (diesen Effekt verstärkend) ihr stoßbedingter Einschluß. Letztlich haben die Ionen außerhalb des PKBs so geringe Stoßraten (siehe Abbildung 3.22 auf Seite 85), daß sie als stoßfrei betrachtet werden.

Die Stoßraten werden so klein, daß die für den Ionentransport im PKB verwendete Monte-Carlo-Beschreibung aus Abschnitt 3.6.1 außerhalb des PKBs nicht mehr anwendbar ist⁵². Vernachlässigt man elastische Stöße der Ionen ganz, kommt man aber zu einer analytischen Beschreibung, wie im folgenden gezeigt wird.

3.6.3.1 Drei Szenarien der Ionen, die dem PKB entkommen

Ohne Stöße und Effekte durch die Magnetfeldkrümmung bewegen sich die Führungszentren der Ionen in der ALFVÉNSchen Näherung nur 1-dimensional entlang der Feldlinien (siehe Abschnitt 2.3.1). Somit findet man außerhalb des PKBs nur an den Orten \vec{r}_1 Ionen, von wo aus Magnetfeldlinien in den PKB hineinlaufen. Damit umgekehrt ein Ion stoßfrei bei \vec{r}_1 ankommt, muß es genau an dem Punkt \vec{r}_0 , wo die Feldlinie durch \vec{r}_1 den PKB schneidet, aus dem PKB heraustreten (siehe Abbildung 3.30).

Es sei nun $\vec{r}_B(s)$ die durch \vec{r}_1 verlaufende Magnetfeldlinie, die anhand der Strecken-

⁵²Insbesondere kann keine (isotrope) MAXWELL-Verteilung mehr angesetzt werden.

koordinate⁵³ s parametrisiert wird, und es gelten (beachte Fußnote 53!)

$\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_B(s_1) \equiv$ der Punkt außerhalb des PKB, an dem n bestimmt werden soll, und

$\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_B(s_0) \equiv$ der Punkt, an dem die Feldlinie $\vec{r}_B(s)$ aus dem PKB tritt,

mit $s_0 \leq s_1$ (siehe Abbildung 3.30).

Startet ein einzelnes Ion bei \vec{r}_0 in Richtung \vec{r}_1 , so bewegt es sich aufgrund der gegebenen Magnetfeldkonfigurationen, die das Plasma durch nach außen ansteigende Feldstärken einschließen, in Richtung stärker werdenden Feldes (siehe Abbildung 3.31). Abhängig von der Geschwindigkeitskomponente v_{\perp} senkrecht zu \vec{B} wird es dabei durch den Magnetfeldgradienten gem. (2.18) in seiner Bewegung entlang $\vec{r}_B(s)$ abgebremst.

Bei zu schwacher Abbremsung trifft es bei $\vec{r}_B(s_{max})$ mit $s_0 \leq s_1 \leq s_{max}$ auf die Kammerwand oder die Extraktion (Szenario 1).

Bei stärkerer Abbremsung kehrt es (aufgrund der auch bei $v_{\parallel} = 0$ anhaltenden Kraft) bei s_{mirr} zwischen s_1 und s_{max} die Parallelbewegung um, d.h. es wird gespiegelt, und läuft wieder entlang $\vec{r}_B(s)$ zurück in den PKB (Szenario 2).

Ist der Magnetfeldgradient noch stärker, kann es sogar sein, daß das Ion schon vorher gespiegelt wird und \vec{r}_1 gar nicht erst erreicht (Szenario 3).

Da diese idealisierte, stoßfreie Bewegung vollkommen determiniert ist, läßt sich die Dichte einer bestimmten Ionenspezies an einem Punkt \vec{r}_1 außerhalb des PKBs allein

⁵³Hier ist s nicht mit dem Index für die Ionenspezies zu verwechseln! In diesem Abschnitt 3.6.3 wird durchgehend immer eine bestimmte, aber nicht weiter angegebene Ionenspezies betrachtet.

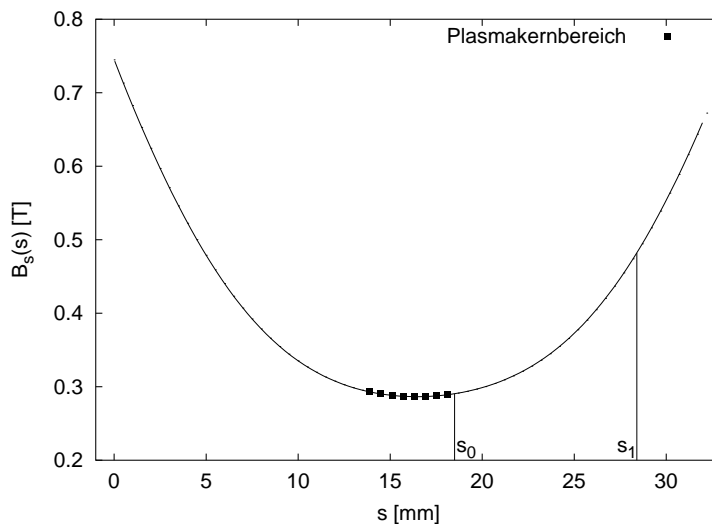


Abbildung 3.31: Typischer Verlauf der Feldstärke entlang einer Magnetfeldlinie in ECRIS 3 (siehe Abbildung 3.30). Der Abschnitt der Feldlinie, der durch den PKB verläuft, ist mit Kästchen ■ gekennzeichnet. Abhängig von dem Magnetfeldgradienten und der Geschwindigkeitskomponente senkrecht zum Magnetfeld gibt es für ein Ion, das bei s_0 in Richtung s_1 startet, drei Szenarien: Es wird vor s_1 , hinter s_1 oder gar nicht gespiegelt.

aus der Verlustrate im PKB bei \vec{r}_0 und dem Magnetfeldlinienverlauf $\vec{r}_B(s)$ von \vec{r}_0 durch \vec{r}_1 bis zur Kammerwand bzw. Extraktion berechnen. (Dies setzt natürlich voraus, daß es außerhalb des PKBs keine Ladungsänderungen mehr gibt. Diese Bedingung ist in sehr guter Näherung erfüllt, da es außerhalb des PKBs keine heißen Elektronen für die EII mehr gibt und der CX letztlich auch außerhalb des PKBs vernachlässigt werden kann, siehe Abbildung 4.33 auf Seite 156.)

Die Dichten der Ionenspezies sind mit dieser Idealisierung mathematisch also lediglich ein Bild des Zustands des PKB! Das bedeutet, daß sich die zeitliche Integration der CSD auf den PKB beschränken kann. Nur wenn die Dichten außerhalb des PKB wirklich benötigt werden, daß ist allgemein nur bei der (graphischen) Datenausgabe der Fall, werden sie tatsächlich berechnet.

3.6.3.2 Berechnung der Ionendichte außerhalb des PKB

Es sei also \vec{r}_1 ein Ort außerhalb des PKBs, und die durch \vec{r}_1 verlaufende Feldlinien $\vec{r}_B(s)$ schneide bei \vec{r}_0 zum ersten Mal den PKB (siehe Abbildung 3.30). Des weiteren seien $B_0 \equiv B_s(s_0)$ sowie $B_1 \equiv B_s(s_1)$ die Magnetfeldstärken bei \vec{r}_0 sowie \vec{r}_1 und B_{max} die maximale Feldstärke entlang der Feldlinie von \vec{r}_0 über \vec{r}_1 bis zur Wand. (Meistens liegt dieses Feldstärkemaximum an der Wand, d.h. $B_{max} = B_s(s_{max})$. Bei stark verschobener Plasmakammer, siehe Abschnitt 4.9.1, kann es jedoch auch davor liegen, siehe z.B. Abbildung D.2 auf Seite 233, für die $B_{max} = B_s(s_{extr})$ gilt.)

Die Dichte $n(s_1)$ einer bestimmten (aber im folgenden nicht mehr spezifizierten) Ionenspezies am Ort \vec{r}_1 setzt sich dann aus den Teilchen zusammen, die sich in positive s-Richtung (d.h. von \vec{r}_0 nach \vec{r}_1) bewegen und denen, die hinter s_1 gespiegelt wurden und zurücklaufen:

$$n(s_1) = n_+(s_1) + n_-(s_1). \quad (3.110)$$

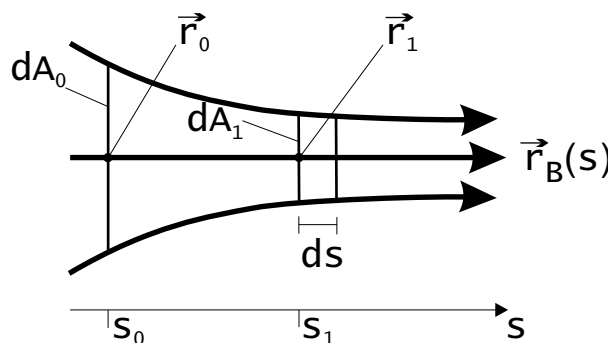


Abbildung 3.32: Skizze zur Berechnung der Ionendichte am Ort $\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_B(s_1)$ außerhalb des PKBs. Das infinitesimal kleine Flächenelement dA_1 bei \vec{r}_1 ist senkrecht zu $\vec{B}(\vec{r}_1)$. Das Flächenelement dA_0 , das senkrecht zu $\vec{B}(\vec{r}_0)$ ist, ist exakt so groß, daß genau die durch dA_1 laufenden Feldlinien auch durch dA_0 verlaufen.

Dichte $n_+(s_1)$ der hinlaufenden Ionen. Es sei dA_1 ein infinitesimal kleines Flächenelement bei \vec{r}_1 , das senkrecht zur Feldlinie orientiert ist (siehe Abbildung 3.32). Alle Teilchen, die dA_1 durchlaufen, sind ursprünglich von einem Flächenelement dA_0 bei \vec{r}_0 gestartet. Dieses ist senkrecht zur Feldlinie bei \vec{r}_0 . Da die Feldliniendichte jedoch ortsabhängig ist und alle Feldlinien durch dA_1 auch durch dA_0 verlaufen müssen, haben die beiden Flächenelemente im allgemeinen unterschiedliche Größen. Es gilt:

$$\frac{dA_1}{dA_0} = \frac{(\text{Feldliniendichte bei } s_1)^{-1}}{(\text{Feldliniendichte bei } s_0)^{-1}} = \frac{B_1^{-1}}{B_0^{-1}} \quad (3.111)$$

$$\Leftrightarrow dA_1 = dA_0 \cdot \frac{B_0}{B_1} \quad (3.112)$$

Ein Teilchen, das sich bei s_1 mit der Parallelgeschwindigkeit $v_{i+}(s_1) > 0$ bewegt, benötigt für ein kurzes Wegelement ds parallel zur Magnetfeldlinie die Zeit

$$d\tau = ds/v_{i+}(s_1) \quad (3.113)$$

Treten nun die Ionen mit der Rate $d\Phi_{1+}$ und mit der mittleren Geschwindigkeit $\bar{v}_{i+}(s_1) > 0$ durch dA_1 in das Volumenelement $dA_1 \cdot ds$ ein, so befinden sich nach der Zeit $ds/\bar{v}_{i+}(s_1)$ genau

$$dN = d\Phi_{1+} \frac{ds}{\bar{v}_{i+}(s_1)} \quad (3.114)$$

Teilchen in dem Volumenelement. Da dann im zeitlichen Mittel pro auslaufendem Teilchen wieder eines durch dA_1 eintritt, ergibt sich die Dichte

$$n_+(s_1) = \frac{dN}{dA_1 \cdot ds} = \frac{d\Phi_{1+}}{dA_1 \cdot \bar{v}_{i+}(s_1)} \quad (3.115)$$

$$= \frac{d\Phi_{1+}}{dA_0} \cdot \frac{B_1}{B_0} \cdot (\bar{v}_{i+}(s_1))^{-1} \quad (3.116)$$

Die Rate $d\Phi_{1+}$ mit der die Teilchen von s_0 kommend durch dA_1 treten, ist gleich der Rate $d\Phi_{0+}$, mit der Teilchen bei s_0 von dA_0 starten, multipliziert mit dem Anteil $P_{loss}(B_0, B_1)$ der Teilchen nach (2.21), die sich bei s_0 in dem durch B_0 und B_1 definierten Fluchtkegel (siehe Abschnitt 2.3.1.2) befinden:

$$d\Phi_{1+} = d\Phi_{0+} \cdot P_{loss}(B_0, B_1) \quad (3.117)$$

$$\Rightarrow n_+(s_1) = \frac{d\Phi_{0+}}{dA_0} \cdot \frac{B_1}{B_0} \cdot \frac{P_{loss}(B_0, B_1)}{\bar{v}_{i+}(s_1)}. \quad (3.118)$$

Dichte $n_-(s_1)$ der zurücklaufenden Teilchen. Die Rate $d\Phi_{1-}$ der Teilchen, die bei s_1 auch wieder zurücklaufen, ist gleich $d\Phi_{1+}$ abzüglich des Anteils der bei s_0 gestarteten, die auch von B_{max} nicht gespiegelt werden und somit gegen die Wand laufen:

$$\begin{aligned} d\Phi_{1-} &= d\Phi_{1+} - d\Phi_{0+} \cdot P_{loss}(B_0, B_{max}) \\ &= d\Phi_{0+} [P_{loss}(B_0, B_1) - P_{loss}(B_0, B_{max})] \end{aligned} \quad (3.119)$$

Ansonsten gilt für diese Teilchen (3.115) entsprechend, woraus folgt:

$$n_-(s_1) = \frac{d\Phi_{1-}}{dA_1 \cdot |\bar{v}_{1-}(s_1)|} \quad (3.120)$$

$$= \frac{d\Phi_{0+}}{dA_0} \cdot \frac{B_1}{B_0} \cdot \frac{P_{loss}(B_0, B_1) - P_{loss}(B_0, B_{max})}{|\bar{v}_{1-}(s_1)|} \quad (3.121)$$

Totale Dichte. Aus (3.110) mit (3.118) und (3.120) wird somit

$$n(s_1) = \frac{d\Phi_{0+}}{dA_0} \cdot \frac{B_1}{B_0} \cdot \left(\frac{P_{loss}(B_0, B_1)}{\bar{v}_{1+}(s_1)} + \frac{P_{loss}(B_0, B_1) - P_{loss}(B_0, B_{max})}{|\bar{v}_{1-}(s_1)|} \right) \quad (3.122)$$

Die Rate der pro Flächeneinheit bei \vec{r}_0 aus dem PKB austretenden Teilchen $d\Phi_{0+}/dA_0$ wird während der Simulation aus dem (in den Abschnitten 3.6.1 und 3.6.2 beschriebenen) Transportmodell für den PKB bestimmt.

Die mittleren Geschwindigkeiten $\bar{v}_{1+}(s_1)$ und $\bar{v}_{1-}(s_1)$ dagegen müssen etwas aufwendiger berechnet werden. In Anhang B wird gezeigt, wie man für einen beliebigen⁵⁴ Punkt \vec{r}_1 außerhalb des PKBs die Verteilung $f_{s_1}(v_{1i})$ der Geschwindigkeiten parallel zum Magnetfeld berechnen kann. Neben Stoßfreiheit und vernachlässigbaren Effekten durch die Feldlinienkrümmung, wird dabei lediglich angenommen, daß die Teilchen mit einer 3-dimensionalen MAXWELL-Verteilung in den Halbraum der Geschwindigkeiten starten, der vom PKB wegführt. Mit dieser gelten

$$\bar{v}_{1+}(s) = \int_0^\infty v_{1i} f_s(v_{1i}) dv_{1i} \geq 0 \quad (3.123)$$

$$\bar{v}_{1-}(s) = \int_{-\infty}^0 v_{1i} f_s(v_{1i}) dv_{1i} \leq 0. \quad (3.124)$$

Um eine Vorstellung der sich konkret ergebenden Verteilungen und deren Ortsabhängigkeiten zu vermitteln, ist in Abbildung 3.33 gezeigt, wie sich beispielsweise die Geschwindigkeitsverteilung in der ECRIS 3 entlang der Zylinderachse vom PKB bis hin zur Extraktion entwickelt. (Bei den Kurven in dieser Abbildung handelt es sich genau genommen um die nicht normierten Funktionen $g_s(v_{1i})$ aus (B.15). Durch Normierung gem. (B.16) wird aus ihnen $f_{s_1}(v_{1i})$.)

Aufgrund der Symmetrieeigenschaften des Magnetfeldes verläuft auf der Zylinderachse auch genau eine Magnetfeldlinie. Somit kann die Streckenkoordinate s mit der z -Koordinate gleichgesetzt werden.

Im PKB wurde hier eine Temperatur von $T_i = 1$ eV angenommen. In Abbildung 3.33 stellt $f_{s_0}(v_{1i})$ die zugehörige 1-dimensionale MAXWELL-Verteilung⁵⁵ dar, die sich

⁵⁴Einzige Voraussetzung für die Punkte außerhalb des PKBs, an denen die Parallelgeschwindigkeitsverteilung berechnet werden soll, ist natürlich, daß von dort die Feldlinie in den PKB führt.

⁵⁵In einigen Lehrbüchern (z.B. [BS92]) wird unter "der MAXWELLSchen Geschwindigkeitsverteilung" lediglich die Verteilung der *Beträge* der 3-dimensionalen Geschwindigkeitsvektoren, also (C.1), verstanden. Wie von REIF [Rei87] werden in dieser Arbeit auch die 1-dimensionalen Verteilungen der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten so bezeichnet. Bei ihnen handelt es sich um GAUß-Verteilungen [Rei87, Kap. 7.10].

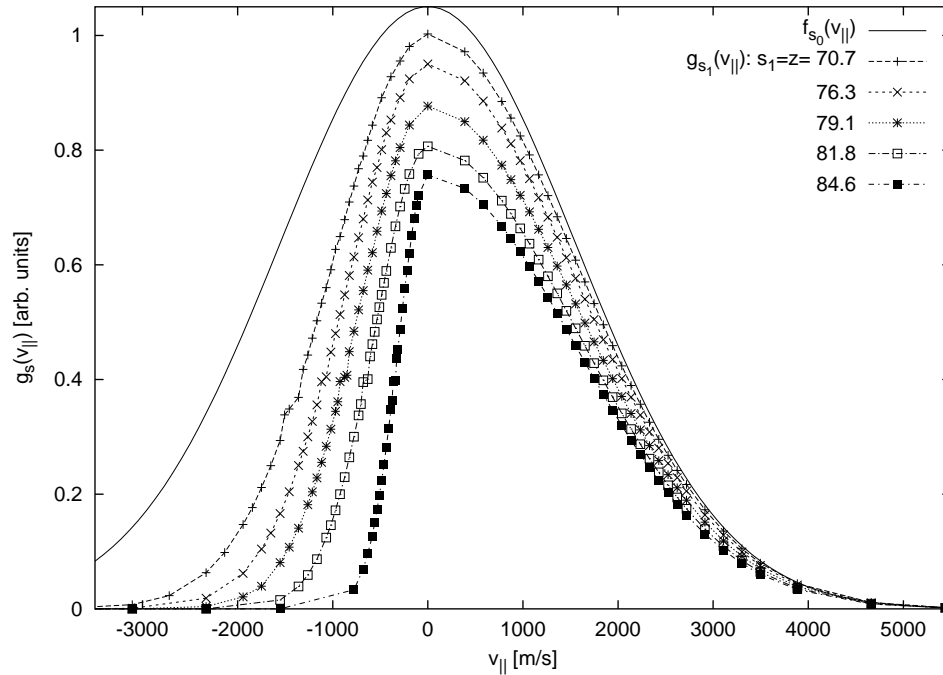


Abbildung 3.33: Beispiel für die (noch nicht normierte) Verteilung der Geschwindigkeiten parallel zur Magnetfeldlinie (hier gleichzeitig z-Achse, weswegen $s_1 = z$ gilt) an verschiedenen Orten s_1 auf der Zylinderachse der ECRIS 3. (Hierbei handelt es sich genauer um $g_{s_1}(v_{||})$ aus (B.15), das nach Normierung in $f_{s_1}(v_{||})$ mündet.) Des weiteren ist $f_{s_0}(v_{||})$ die angesetzte 1-dim. MAXWELL-Verteilung für Ar-Teilchen mit $T_i = 1$ eV am Austrittspunkt der Zylinderachse aus dem PKB. Positive $v_{||}$ bedeuten Bewegung in Richtung der Extraktion und somit stärkerer Magnetfeldstärke.

im thermischen Gleichgewicht für alle mikroskopischen Geschwindigkeitskomponenten einstellt. Mit dieser Verteilung (allerdings nur mit positiven Geschwindigkeiten $v_{||}$) starten alle Ionen, wie oben beschrieben, aus dem PKB heraus in Richtung stärkerer Feldstärke (und gleichzeitig zur Extraktion bei $z = 86$ mm).

Mit größerem s bzw. z werden die Ionen immer stärker abgebremst, wodurch sich die Verteilungen immer stärker auf kleinere Geschwindigkeiten konzentrieren. Da auch immer mehr von ihnen vor Erreichen von $s_{max} = 86$ mm gespiegelt werden, nimmt die Fläche unter den Kurven ab. Des weiteren sinkt der Anteil negativer Geschwindigkeiten an der Gesamtverteilung, da anteilig immer weniger Ionen reflektiert werden.

3.6.3.3 Magnetischer Einschluß

In den vorherigen Abschnitten des Kapitels 3.6 wurde also erläutert, wie die Verlustraten durch den Transport aus den Zellen des PKB heraus berechnet werden, und es wurde festgestellt, daß die Dichten außerhalb des PKBs gem. (3.122) im mathematischen Sinne lediglich ein Bild der Dichten am Rand des PKBs sind. (Die Ionendichte determiniert $d\Phi_{0+}$ und das Magnetfeld bestimmt über die restlichen Größen in (3.122) die mathematische Abbildung.)

Dadurch kann die zeitliche Integration der CSD auf den PKB reduziert werden.

Mit der Beschreibung in den Abschnitten 3.6.1 und 3.6.2 werden bisher aber lediglich der stoßbedingte sowie der elektrostatische Einschluß im PKB erfaßt. Der magnetische Einschluß durch das Feld außerhalb des PKBs geht noch nicht ein. Die bisherigen Überlegungen dieses Abschnitts 3.6.3 erlauben nun aber auch eine einfache Behandlung dieses Effektes.

Betrachtet werden müssen lediglich diejenigen Zellen des PKBs und ihre Wände k , die am PKB-Rand liegen. (Die Angabe der betrachteten Zelle c und der Ionenspezies s entfällt er Einfachheit halber im folgenden.) Der Teilchendichteverlust $(\partial n / \partial t)^{collTr \rightarrow k} \leq 0$ einer solchen Zelle durch die Wand in Richtung k ist durch (3.98) und (3.105) gegeben.

Im Rahmen der idealisierten Trennung zwischen PKB und dem Bereich außerhalb des PKBs starten die Teilchen von dieser Wand mit einer MAXWELLSchen Geschwindigkeitsverteilung, und folgen der Feldlinie, bis sie entweder gespiegelt werden oder gegen die Wand laufen und dort neutralisieren.

Der Anteil der nicht gespiegelten Teilchen ist durch die Verlustwahrscheinlichkeit $P_{loss}(B_0, B_{max})$ nach (2.21) gegeben, wobei B_0 die Magnetfeldstärke an der Zellwand k und B_{max} die maximale Feldstärke der Feldlinie(n) ist, die durch die Zellwand k in Richtung der Plasmakammerwand laufen. Da die gespiegelten Teilchen (im Rahmen der ALFVÉNSchen Näherung) wieder an der selben Zellwand ankommen, von der sie aus dem PKB gestartet waren, berücksichtigt

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)^{mirr \rightarrow k} := - \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)^{collTr \rightarrow k} [1 - P_{loss}(B_0, B_{max})] \geq 0 \quad (3.125)$$

den durch den magnetischen Einschluß hervorgerufenen Ionenrückfluß.

3.6.4 Zusammenfassung der Transportbeschreibung

Der Iontentransport in der Plasmakammer ist so stark von den lokalen Plasmadichten abhängig, daß verschiedene Transportregime unterschieden werden müssen. In dieser Arbeit wird daher zwischen dem Plasmakernbereich (PKB) und dem Außenbereich differenziert. Stark idealisiert wird im PKB stoßdominierter, diffusiver Transport und außerhalb stoßfreier Transport angesetzt.

Für die Ionen s und die Zellen c des PKBs werden (im Simulationsablauf vor der eigentlichen Zeitintegration) per Monte-Carlo-Verfahren Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ sowie die Wahrscheinlichkeiten $\Omega_{s,c,k}$, die Zelle c durch eine bestimmte Zellwand k zu verlassen, ermittelt. Diese hängen von der Zellgeometrie, dem lokalen Magnetfeldverlauf, der Iontentemperatur und vor allem über die Stoßfrequenz von der (in (2.32) definierten) Plasmadichte n_{++} ab.

Aufgrund des dazu enormen Rechenbedarfs können nicht alle Zellen mit ihren individuellen Magnetfeldern simuliert werden, so daß nur für repräsentative Zellen Simulationen erfolgen.

Die Ionendichten an Orten \vec{r}_1 außerhalb des PKBs sind direkt aus dem Verlauf der Magnetfeldlinie durch \vec{r}_1 und dem Teilchenverlust des PKB an der Stelle \vec{r}_0 , wo die betrachtete Feldlinien den PKB schneidet, berechenbar.

Dadurch reduziert sich die CSD-Zeitintegration auf die Zellen des PKBs.

Der durch die Spiegelfelder erzeugte magnetische Einschluß des Plasmas wird dadurch berücksichtigt, daß an den Randflächenelementen des PKB der über $\tau_{s,c}$ und $\Omega_{s,c,k}$ berechnete Teilchenverlust um den Anteil reduziert wird, der durch die Spiegelung wieder zurückfließt.

In den Simulationen zeigt sich, daß der Einschluß der Ionen im PKB, der also durch die (per Monte-Carlo-Simulation gewonnenen) stoßbedingten Einschlußzeiten sowie den magnetischem Einschluß gegeben ist, zu schwach ist, um die Quasineutralitätsbedingung des Plasmas zu erfüllen. Daraus folgt, daß es einen zusätzlichen elektrostatischen Einschluß geben muß. Dieser wird in der Simulation dadurch gewährleistet, daß für jede betroffene Zelle die ionenspezifischen Einschlußzeiten mit dem Ansatz (3.105) genau so weit erhöht werden, daß die Teilchenverluste durch Abtransport die Quasineutralität gerade nicht verletzen.

3.7 Extraktion der Ionen

Da das Extraktionsfeld vom Plasma auf einer Distanz in der Größenordnung der DEBYE-Länge abgeschirmt wird, die vor der Extraktionsöffnung mit Werten unter 1 mm wesentlich kleiner als die Plasmakammerlänge oder auch als der Abstand der Extraktion zum Plasmakernbereich ist⁵⁶, werden praktisch nur diejenigen Ionen extrahiert, die (zufällig) in die schmale Zone unmittelbar vor der Extraktionsöffnung gelangen. Da hinzukommend die Extraktionszone aufgrund fehlender Rechnerleistung zur Zeit noch nicht räumlich aufgelöst werden kann (die Kantenlängen der Zellen liegen bei 1 bis 3 mm, siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161), werden die extrahierten Teilchenströme mit denen gleichgesetzt, die nach dem Transportmodell aus 3.6 auch ohne Extraktionsfeld auf die Extraktionsöffnung gelangen.

Dazu wird wie folgt vorgegangen: Von jeder Zellwandfläche $\Delta A_{c,k}$ (c indiziert die Zelle, k die Wandfläche von c), die Randflächenelement des PKBs ist, wird repräsentativ diejenige Feldlinie aus dem PKB heraus in Richtung Plasmakammerwand verfolgt, die durch das geometrische Zentrum von $\Delta A_{c,k}$ verläuft (siehe Abbildung 3.34).

Die Plasmakammerwand ist durch die Zellstruktur ebenfalls in Wandflächenelemente

⁵⁶Vor der Extraktion fällt die Plasmadichte im Vergleich zum Plasmakernbereich stark ab (siehe Abschnitt 4.3.2). Bei den Elektronen vor der Extraktion kann es sich nur um kalte handeln, da sich dort nach HEINENS Simulationen praktisch keine heißen aufhalten. Die Temperatur der kalten ist etwa gleich der Ionentemperatur. Mit $n=10^9 \text{ cm}^3$ und $T=1 \text{ eV}$ erhält man für die DEBYE-Länge mit [Ses73, Gl. (3.10)]:

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T}{n e^2}} \approx 0,25 \text{ mm.}$$

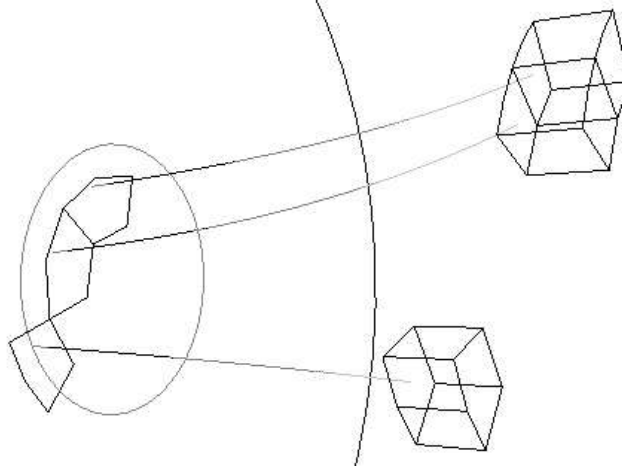


Abbildung 3.34: Screenshot einer 3-dimensionalen VRML-Graphik (siehe Anhang D.2.2) zur Kontrolle der Berechnungen zur Extraktion. Gezeigt sind hier drei Zellen, die am Rand des PKB liegen. Die durch die Zentren ihrer Randflächen $\Delta A_{c,k}$ verlaufenden Magnetfeldlinien münden in der kreisförmigen Extraktionsöffnung. Von den drei Flächenelementen $\Delta W_{c,k}$ auf Stirnwand der Plasmakammer liegen zwei vollständig in der Extraktionsöffnung ($\Delta W_{c,k}^{extr} = \Delta W_{c,k}$), während eines nur überlappt ($\Delta W_{c,k}^{extr} < \Delta W_{c,k}$).

ΔW aufgeteilt. Unter diesen sei $\Delta W_{c,k}$ dasjenige Flächenelement, auf das die von $\Delta A_{c,k}$ ausgehende Feldlinie trifft. Diesem $\Delta W_{c,k}$ werden darauf alle von $\Delta A_{c,k}$ ausgehenden, aber nicht gespiegelten Ionen-Teilchenströme $I_{c,k,z}^{particle}$ zugeordnet. Schneidet $\Delta W_{c,k}$ die kreisförmige Extraktionsöffnung mit der Teilfläche $\Delta W_{c,k}^{extr} \leq \Delta W_{c,k}$, so wird der von $\Delta A_{c,k}$ ausgehende Teilchenstrom $I_{c,k,z}^{particle}$ flächenanteilig dem extrahierten, elektrischen Strom I_z zugerechnet.

Die totalen extrahierten Ströme folgen dann aus der Summe über alle Randflächenelemente $\Delta A_{c,k}$ des PKB, die wie oben beschrieben mit der Extraktionsöffnung verbunden sind:

$$I_z = z \cdot e \sum_{c,k} \frac{\Delta W_{c,k}^{extr}}{\Delta W_{c,k}} \cdot I_{c,k,z}^{particle} \quad (3.126)$$

3.8 Temperatur der Ionen

In die Berechnung der Transportraten der Ionen in Kapitel 3.6 ging die Ionentemperatur ein, die bisher als gegeben betrachtet wurde. In diesem Kapitel wird ihre Berechnung erläutert.

Im Gegensatz zu den Elektronen, die ihre Energie durch die EZRH gewinnen, werden die Ionen aufgrund ihrer wesentlich kleineren Zyklotronfrequenz (2.10) nicht von der Mikrowelle geheizt. Ausgehend von der Neutralteilchentemperatur T_0 wird ihnen primär durch die heißen Elektronen Energie zugeführt (siehe Abschnitt 2.4). Da dieser Energietransfer nach (2.49) quadratisch von der Ionenladung $z e_0$ abhängt, läßt sich auf den ersten Blick annehmen, daß die Ionenpopulationen individuelle Temperaturen T_z haben, die mit z ansteigen.

Es zeigt sich aber, daß die charakteristischen Zeiten t_{eq} , in denen Ionenpopulationen Temperaturunterschiede ausgleichen (siehe Abschnitt 2.4.2), für die hier simulierten Plasmen deutlich kleiner als die jeweiligen Einschlußzeiten sind. Nach (2.56) ergibt sich beispielsweise mit den typischen Werten $n_1 = 10^{11} \text{ cm}^3$, $z = z_1 = 1$, $T = T_1 = 1 \text{ eV}$, $\ln \lambda = 20$ für Ar-Ionen ($A = A_1 = 40$) als obere Grenze ein Wert von nur

$$t_{eq} = 65,6 \mu\text{s}. \quad (3.127)$$

Typische Ioneneinschlußzeiten liegen über 1 ms, so daß die Ionen also praktisch eine einzige Ionentemperatur T_i und pro Gassorte g je eine MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung (C.1) besitzen.

Diese gemeinsame Temperatur kann man, wie im folgenden gezeigt, aus der Bilanzgleichung (3.129) für die totale Energiedichte

$$W_i = \bar{E}_i \sum_s n_s = \frac{3}{2} k T_i \sum_s n_s \quad (3.128)$$

bestimmen, wobei hier über alle Ionenspezies s summiert wird. Sie wird durch folgende Prozesse erhöht (\oplus) bzw. abgebaut (\ominus):

- \oplus Heizung durch die hochenergetischen Elektronen,
- \oplus Ionisation von Neutralteilchen mit der mittleren Energie $\bar{E}_0 = \frac{3}{2} k T_0$,
- \oplus exotherme Prozesse wie der Ladungsaustausch (siehe Abschnitt 3.5.3),
- \ominus Teilchenverlust.

Im Gleichgewicht verschwindet die Summe der zugehörigen Prozeßraten:

$$\left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{ei-heat} + \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)_{0 \rightarrow z}^{eii} + \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{cx} = - \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{loss} \quad (3.129)$$

Dabei ergeben sich die Prozeßraten wie folgt: Geht man bei der ei-Heizung von MAXWELL-verteilten Elektronen der Temperatur T_e aus, so folgt gem. Abschnitt 2.4.1:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{ei-heat} &= \sum_s \left(\frac{\partial W_s}{\partial t} \right)^{ei-heat} = \frac{3}{2} k \sum_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial t} \right)^{ei-heat} \cdot n_s \\ &\stackrel{(2.54)}{=} \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k T_e}} \frac{e^4 \ln \lambda n_e}{2\pi \epsilon_0^2} \sum_s \frac{z_s^2 n_s}{m_s}. \end{aligned} \quad (3.130)$$

Die Zufuhr durch k -fache Ionisation von Neutralteilchen ergibt sich aus deren mittlerer Energie $\bar{E}_0 = 3 k T_0/2$ und deren Ionisationsraten $R_{g,0 \rightarrow g,k}^{eii}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{eii} &= \bar{E}_0 \sum_g \sum_{k=1}^{k_{max}^{eii}} R_{g,0 \rightarrow g,k}^{eii} \\ &\stackrel{(3.40)}{=} \frac{3}{2} k T_0 n_{e,hot} \sum_g n_{g,0} \sum_{k=1}^{k_{max}^{eii}} \langle \sigma_{g,0 \rightarrow g,k}^{eii} \cdot u \rangle. \end{aligned} \quad (3.131)$$

Die Summation läuft dabei über alle Gassorten g (mit den Neutralteilchendichten $n_{g,0}$) und die bei einem einzelnen Stoß frei werdenden Elektronen k .

Entsprechend erhält man die mit dem Ladungsaustausch (CX)

$$A^{z+} + B \rightarrow A^{(z-k)+} + B^{i+} + \Delta E_{CX}(A, B, z, k, i) \quad (3.61)$$

verbundene Zufuhr rate der Energiedichte aus der pro CX im Mittel frei werdenden Energie $\overline{\Delta E}_{CX}$ und der totalen CX-Reaktionsrate:

$$\left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{cx} = \overline{\Delta E}_{CX} \cdot R_{total}^{CX}. \quad (3.132)$$

Die totale CX-Reaktionsrate ergibt sich aus allen möglichen Prozeßkombinationen⁵⁷ mit Hilfe von (3.66):

$$R_{total}^{CX} := \sum_B \sum_{k=1}^{k_{max}^{cx}} \sum_A \sum_z R_{A^{(z-k)+}, B^{i+}}^{A^{z+}, B}. \quad (3.133)$$

Aus dem permanenten Verlust der Ionen durch Abtransport folgt auch die Verlust rate der Energiedichte:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W_i}{\partial t} \right)^{loss} &= -\bar{E}_i \sum_s \frac{n_s}{\tau_s} \\ &= -\frac{3}{2} k T_i \sum_s \frac{n_s}{\tau_s}. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Setzt man nun (3.130), (3.131), (3.132) und (3.134) in (3.129) ein, stellt diese nach T_i um und rechnet vereinfachend mit nur einer Gassorte, so erhält man

$$T_i = \frac{2}{3} \frac{n_{e,hot} \left(\frac{3}{2} k T_0 n_0 \sum_k \langle \sigma_{0 \rightarrow k}^{eii} \cdot u \rangle + \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k T_e}} \frac{e^4 \ln \lambda}{2\pi \epsilon_0^2} \sum_s \frac{z_s^2 n_s}{m_s} \right) + \overline{\Delta E}_{CX} R_{total}^{CX}}{k \cdot \sum_s \frac{n_s}{\tau_s}}. \quad (3.135)$$

Im Rahmen des Simulationsprogrammes (siehe Anhang D) wird die Iontemperatur bisher jedoch nur als fester Parameter übergeben. Eine dynamische Anpassung aller davon abhängigen Größen erfolgt nicht! Am Ende der Simulation wird T_i nach (3.135) mit den mittleren Ionendichten im PKB berechnet und muß im nachhinein mit dem Input-Wert verglichen werden.

3.9 Zusammenfassung des Berechnungsmodells

Zur numerischen Berechnung der in drei Dimensionen orts aufgelösten Dichteverteilungen der einzelnen Ladungszustände in EZR-Ionenquellen wird das Plasmakammervolumen unter Ausnutzung der gegebenen Zylindersymmetrie in ein System von Einzelzellen aufgeteilt.

⁵⁷Man beachte in (3.133), daß einige Kombinationen (z.B. $k > z$) nicht möglich sind (siehe Abschnitt 3.5.3.3).

Für jede dieser Zellen und jeden Ladungszustand werden a) die durch atomphysikalische Prozesse verursachten Übergangsraten zwischen den Ladungszuständen innerhalb einer jeden Zelle und b) die durch Teilchentransport bedingten Übergangsraten zwischen benachbarten Zellen berechnet, um daraus die für einen kleinen Zeitschritt resultierenden Änderungen der Dichten in allen Zellen und für alle Ladungszustände zu bestimmen. Ausgehend von einer (vorgegebenen) Startverteilung wird dies solange wiederholt, bis die Dichten zeitlich konvergieren.

Unter den atomphysikalischen Prozessen, die zu Ladungszustandsänderungen führen, werden Ein- und Mehrfachionisation durch Elektronenstoß, bis zu vierfacher Ladungsaustausch sowie die vollständige Neutralisation von Ionen an den Plasmakammerwänden berücksichtigt. Für Photoionisation sowie Rekombination zwischen freien Elektronen und Ionen kann gezeigt werden, daß diese vernachlässigbar sind.

Bei der Berechnung der durch Teilchentransport verursachten Transferraten zwischen benachbarten Zellen wird für die Ionen zwischen zwei Transportregimen unterschieden. Im Plasmakernbereich kann die Ionenbewegung aufgrund der hohen Stoßraten als Random-Walk betrachtet werden. Die Einschlußzeiten der Ladungszustände und die Verteilung der Verluste durch Abtransport auf die Nachbarzellen werden hierfür mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen bestimmt.

Außerhalb des Plasmakernbereiches wird aufgrund der wesentlich niedrigeren Dichten geladener Teilchen von quasi-stoßfreier Bewegungen entlang der Feldlinie ausgegangen. Auf der Grundlage der Einzelteilchenbewegungsbeschreibung in der ALFVÉNSchen Näherung ist es dann möglich, die am Rand des Plasmakernbereiches bekannte Verteilung der Parallelgeschwindigkeiten auf diejenige an einem beliebigen Punkt auf der Feldlinie außerhalb des Plasmakernbereiches abzubilden und dort zusammen mit den lokalen Verlustraten des Plasmakernbereiches die Ionendichten zu berechnen.

Die für die Ionisation, aber auch für den Plasmatransport und somit für die gesamte ECRIS elementaren Elektronen werden in zwei Populationen aufgeteilt, die sich primär dadurch unterscheiden, ob sie von der Mikrowelle geheizt wurden, oder ob sie (unter anderem mit den Ionen) im thermischen Gleichgewicht sind. Von den in dieser Arbeit sogenannten *heißen Elektronen* ist aus separaten Simulationen von HEINEN das Dichteprofil bekannt, das als unabhängig vom Plasmazustand angesehen wird. Ihre absolute Dichte wird durch Skalierung dieses Profils mit einer mittleren Dichte festgelegt, für welche eigene Änderungsraten berechnet werden. Dazu gehören ein an die Elektronenstoßionisation gekoppelter Zuwachsterm und eine durch eine Einschlußzeit definierte Verlustrate. Des weiteren ist die Dichte der heißen Elektronen durch den Cut-off-Effekt der Mikrowelle nach oben begrenzt.

Aufgrund der im Vergleich zu den Ionen sehr hohen kinetischen Energien der heißen Elektronen sind diese wesentlich stärker durch das Magnetfeld eingeschlossen. Daher wird ihr Dichteprofil in dem Sinne als hart betrachtet, als daß eventuelle durch sie hervorgerufene negative Ladungsüberschüsse von den Ionen ausgeglichen werden müssen, um die Quasineutralität zu erhalten. Diese Bedingung wird im Rahmen des Ionentransportmodells in der Weise erfaßt, daß die Transferraten der Ionen aus

einer jeden Zelle heraus ggf. limitiert werden, so daß der erläuterte Überschuß nicht entsteht.

Die kalten Elektronen folgen aufgrund ihrer geringen Masse den Ionen, die den Plasmakernbereich verlassen, und gewährleisten damit dort die Quasineutralität, wo es weniger heiße Elektronen als positive Ladungen gibt. Unter dem Gesichtspunkt der Quasineutralität sind somit die Ionen an die heißen Elektronen und die kalten Elektronen an die Ionen gekoppelt.

Die Dichteverteilung der Neutralteilchen wird aus der gewichteten Überlagerung von vier Dichteprofilen berechnet, die charakteristisch für den Ursprungsort der NT (Gaseinlaßöffnung oder eine der drei Plasmakammerwände) sind. Dabei werden die Gaszufuhr rate, die Raten der durch Neutralisation der Ionen an den Wänden generierten Neutralteilchen und die Dichteverteilung der heißen Elektronen berücksichtigt. Die Dichteprofile der Neutralteilchen werden per Monte-Carlo-Verfahren ermittelt.

Die extrahierten Ströme werden unmittelbar aus dem Ionen transport auf die Extraktionsöffnung abgeleitet. Auf eine Berücksichtigung des elektrostatischen Extraktionsfeldes kann verzichtet werden, da dieses auf Distanzen abgeschirmt wird, die wesentlich kleiner sind, als die Auflösung des verwendeten Zellsystems.

Zur Abschätzung der Iontemperaturen wurde ein einfaches Energiebilanzgleichungssystem aufgestellt.

Einflüsse der berücksichtigten Prozesse auf das Plasma

In der in Anhang D beschriebenen softwaretechnischen Implementation dieses Modells muß neben den experimentellen Parametern (Gaszusammensetzung und -zufuhr rates, Magnetfeldkonfiguration, Plasmakammergeometrie) und Daten der heißen Elektronen (räumliches Dichteprofil, Energieverteilung, Einschlußzeit, Cut-off-Dichte) nur die Iontemperatur vorgegeben werden, um daraus selbstkonsistent die räumlichen Dichteverteilungen der schweren Plasmateilchen sowie die daraus ableitbaren Größen (extrahierte Ströme, Wandauftreffverteilungen) zu berechnen⁵⁸.

Abbildung 3.35 stellt schematisch die gegenseitigen Einflüsse der wichtigsten makroskopischen Größen durch die modellierten Prozesse dar. Gleichzeitig macht sie deutlich, welche Größen in der Simulation selbstkonsistent bestimmt werden. In Kurzform werden die Effekte zusammengefaßt:

- 1: Durch die Gaszufuhr mit dem Teilchenstrom $I_{inlet} \equiv I_0$ wird die Neutralgasdichte n_0 aufgebaut, (3.25).
- 2: Die Elektronenstoßionisation baut n_e auf und n_0 ab, (3.54), (3.56).

⁵⁸Es zeigt sich später, daß das die Dichte der heißen Elektronen bestimmende Gleichgewicht in dem Elektronenmodell noch nicht ausreichend beschrieben ist. (Die Sekundärelektroneneffekte an den Wänden als Elektronenlieferanten sind darin unberücksichtigt.) Daher muß die Elektronendichte eigentlich noch vorgegeben werden.

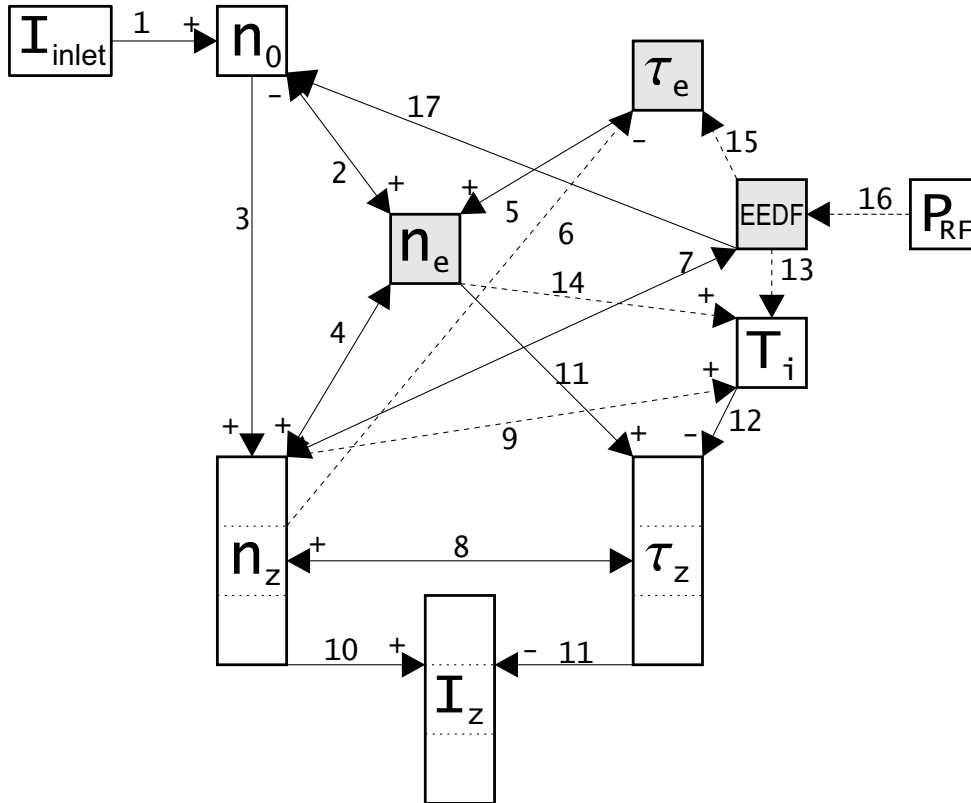


Abbildung 3.35: Die wichtigsten gegenseitigen Abhängigkeiten der makroskopischen Größen, die den Plasmazustand beschreiben/bestimmen. Ein Pfeil von Größe A nach B ist wie "A beeinflusst B" zu lesen. Nur die mit durchgezogenen Pfeilen markierten Abhängigkeiten werden in der Simulation berücksichtigt. Ist an der Pfeilspitze ein Plus- oder Minuszeichen angegeben, so gibt dies die *allgemeine* Richtung der Änderung von B bei Erhöhung von A an. Dies muß jedoch nicht für jeden Plasmazustand gelten! Die Nummern an den Pfeilen dienen zur Identifizierung im Text.

- 3: Gleichzeitig werden durch die Elektronenstoßionisation die Ionen (Dichten n_z) produziert, (3.55). Bei relativ geringer Neutralteilchendichte n_0 wirkt eine Erhöhung von n_0 positiv auf alle n_z . Wird ein bestimmter Wert von n_0 überschritten, führen noch mehr Neutralteilchen zu einer Erhöhung der Dichten niedrig geladener Zustände, während die der hochgeladenen abnehmen (siehe Abschnitt 4.5).
- 4: Je größer n_e ist, desto stärker ist auch die Elektronenstoßionisation, die die n_z aufbaut, (3.55).
- 5: Mit größerer Elektroneneinschlußzeit τ_e sind die Elektronenverluste geringer, (3.15).
- 6: Durch die ei-COULOMB-Stöße ist τ_e begrenzt.
- 7: Einerseits bestimmt die EEDF die Ionisationsraten. Andererseits wird die EEDF durch die Stöße der Elektronen mit den Ionen beeinflusst. Letzteres wird hier vernachlässigt, da die EEDF als konstant vorgegeben wird.
- 8: Durch höhere Ioneneinschlußzeiten τ_z sind die Ionenverluste reduziert, wodurch sich ihre Dichten n_z allgemein erhöhen. Umgekehrt beeinflussen die n_z

auch ihre Einschlußzeiten. Mit größeren n_z nimmt einerseits der stoßbedingte Einschluß zu (siehe Abbildung 3.28 auf Seite 94), der elektrostatische (bei gleichbleibender Elektronendichte) jedoch ab.

- 9: Mit größeren Ionendichten nimmt der Energietransfer von den hochenergetischen Elektronen auf die Ionen zu, (3.135).
- 10: Allgemein nehmen die extrahierten Ströme I_z mit den zugehörigen Dichten n_z zu.
- 11: Der *direkte* Einfluß höherer Ioneneinschlußzeiten τ_z auf die extrahierten Ströme ist negativ, da die Ionenverluste in die Extraktion sinken. Über den Umweg 8 und 10 ist er effektiv allgemein jedoch positiv.
- 12: Durch eine höhere Iontemperatur T_i verringert sich der stoßbedingte Ioneneinschluß (siehe Abschnitt 4.6.4).
- 13: Im Bereich der typischen Energien der heißen Elektronen sinkt ihr Energieübertrag auf die Ionen mit größerer mittlerer Energie \bar{E}_e , (3.135).
- 14: Mit größerem n_e wächst der Energieübertrag auf die Ionen, (3.135).
- 15: Bei größeren Energien sind die Elektronen besser im magnetischen Spiegelfeld eingeschlossen.
- 16: Mit stärkerer Mikrowellenleistung P_{RF} wächst die Elektronentemperatur an.
- 17: Die EEDF bestimmt den Abbau der Neutralteilchen durch EII.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Probleme beim Vergleich von Experiment und Simulation

Das Ideal einer ECRIS-Totalsimulation ist sicherlich, wenn dieser nur die experimentellen Parameter vorgegeben werden müßten und das Simulationsprogramm daraufhin alle abhängigen (Meß-) Größen selbstkonsistent bestimmen könnte.

Das mit dieser Arbeit entwickelte Simulationsprogramm (siehe Anhang D) ist natürlich noch weit davon entfernt und der (quantitative) Vergleich der Simulationsergebnisse mit denen des Experimentes ist nicht ohne Schwierigkeiten. Hierfür gibt es die folgenden Gründe.

Quellenbetrieb, Meßgenauigkeit, Reproduzierbarkeit

Die Probleme beginnen beim Quellenbetrieb und den Messungen selbst. Zum einen sind einige experimentelle Parameter der ECRIS 3 (vor allem die Gaszufuhr, aber z.B. auch die Mikrowellenfrequenz) nur mit einer Meßunsicherheit wieder herzustellen, die deutlich größer ist als die Toleranzen, die während des Betriebes nur vernachlässigbare Änderungen in den extrahierten Strömen verursachen. Vor allem die Gaszufuhrrate, auf welche das Plasma besonders empfindlich reagiert, ist als experimenteller Parameter nur ungenau bekannt¹.

Zum anderen gibt es eine immer wieder beobachtete Langzeitabhängigkeit der extrahierten Ströme. Bei täglicher Neuoptimierung einer Quelle beobachtet man ein sich langsam über viele Tage bis Wochen stetig änderndes Spektrum der extrahierten

¹Als Maß für die Gaszufuhr konnte lediglich der elektrische Strom gemessen werden, mit dem das die Zufuhr regelnde Thermo-Leak-Ventil gesteuert wurde, siehe [Rü97]. RÜTHER hat versucht, die Gaszufuhr aus den (für Helium und Luft) vom Hersteller angegebenen Durchflußvolumina pro Zeiteinheit zu berechnen [Rü97, Kap. 4.1.4]. Dabei blieb jedoch unberücksichtigt, daß diese auch vom Vordruck abhängig sind, der von den Experimentatoren nicht besonders beachtet wurde.

Ströme². Die (soweit wiederherstellbar) gleichen experimentell kontrollierbaren Parameter liefern zu anderen Zeitpunkten i.a. andere Meßwerte. Aus diesen Gründen sind die Messungen nicht reproduzierbar.

Wenige experimentelle Beobachtungsgrößen

Der nächste Punkt ist die geringe Zahl der Meßgrößen. Für die Bestimmung von Dichten und Energieverteilungen im Plasmainneren der ECRIS 3 gab es keine experimentellen Möglichkeiten. Die eigentlichen Meßgrößen waren immer die extrahierten Ströme der verschiedenen Ladungszustände. Dazu wurde der extrahierte Ionenstrom durch einen Separationsmagneten geführt, der die Ionenspezies nach ihrem Verhältnis von Masse zu Ladung trennte. Der Strahl der zu messenden Spezies wurde dann durch eine Blende auf ein Blech geführt. Tatsächlich gemessen wurde dabei der Strom der Elektronen, die über dieses Blech an die zu neutralisierenden Ionen abfließen. Leider ist dieser – so wie hier durchgeführt – im allgemeinen größer als der Strom der Ionenladungen, die am Blech neutralisiert werden, da hierbei auch zusätzliche Sekundärelektronen vom Blech gelöst werden³.

Somit besteht einerseits durch Verluste auf dem Weg von der Extraktion bis zum Blech andererseits aber auch durch die Sekundärelektronen eine mehrere 10 bis einige 100% große Unsicherheit über die tatsächlich aus der Quelle extrahierten Ströme.

Als zweites wurde der Gasdruck in der Kammer hinter der Extraktionsöffnung gemessen. Unter anderem kann aufgrund der komplexen Geometrie dieser Kammer damit jedoch nur in grober Abschätzung auf die in der Plasmakammer herrschenden Neutralgasdrücke geschlossen werden⁴.

Des weiteren bestand die Möglichkeit die Energieverteilung der extrahierten und separierten Ionen in einer angeschlossenen Apparatur zu vermessen und über diese auf das Plasmapotential in der Quelle zu schließen (siehe Abschnitt 4.6.4). Hiervon wurde jedoch nicht systematisch Gebrauch gemacht.

Als letzte, qualitative Beobachtungsgröße können die vom Plasma auf den Zylinderwänden hinterlassenen Spuren hinzugezogen werden.

Unvollständigkeit des Modells

Das in Kapitel 3 vorgestellte Modell zur Berechnung der räumlichen CSD wurde auf Grundlage der in der Literatur beschriebenen und quantifizierbaren Effekte sowie

²In der ersten Zeit nach dem Zusammenbau einer Quelle steigen die maximal extrahierbaren Ströme langsam an, erreichen ein Maximum und fallen auf ein dann nur geringfügig schwankendes Niveau ab, das mehrere 10% unter dem Maximum liegen kann. Dieses Verhalten wird auf langsame Wandreinigungseffekte zurückgeführt, die praktisch nicht zu kontrollieren sind und die Sekundärelektronenproduktion beeinflussen.

³Dieser Sekundärelektronenstrom könnte kompensiert werden, indem man das Blech elektrisch positiv vorspannt. Dies wurde bei ECRIS 3 jedoch nur gelegentlich realisiert.

⁴Diese Abschätzungen sind nur ohne gezündetes Plasma möglich. Schlüsse auf die Situation im Betrieb der Quelle anhand dieser Messung zu ziehen, ist völlig unmöglich.

den aus den Elektronensimulationen gewonnenen Erkenntnissen entwickelt.

Dabei sind bisher (abgesehen von der Neutralisation der Ionen) Wandeffekte wie die Freisetzung von Sekundärelektronen während der Ionenneutralisation völlig unberücksichtigt geblieben. Der Grund dafür liegt zum einen darin, daß ihre Bedeutung anfänglich als nur sehr gering eingeschätzt wurde, zum anderen aber auch darin, daß diese Effekte schwer zu quantifizieren sind.

Entwicklungsstand des Simulationsprogrammes

An dritter Stelle sind Schwächen des Simulationsprogrammes zu nennen. Dazu gehört die nur zum Teil selbstkonsistente Berechnung einiger Plasmagrößen. Insbesondere die Ionentemperatur T_i , die EEDF sowie die Elektroneneinschlußzeit $\tau_{e,hot}$ müssen für das Plasma im zu bestimmenden Gleichgewicht vorgegeben werden (siehe Abschnitt 3.9 mit Abbildung 3.35 auf Seite 114) und a posteriori überprüft werden.

Des weiteren ist das Modell zwar für die Simulation mehrerer Gase entwickelt, im Programm ist es jedoch aus Zeitmangel an einigen Stellen bisher nur für eine einzige Gassorte implementiert. Bisher ist daher nur das in der Arbeitsgruppe am häufigsten verwendete Argon simuliert worden. Es ist jedoch allgemein bekannt [ZEK95, Gel96, NMW97, Mel99], daß durch die Zugabe weiterer Gase die Produktion hochgeladener (Ar-) Ionen um mehr als eine Größenordnung verbessert werden kann⁵. (Zur Erläuterung dieses Effektes siehe Abschnitt 4.9.)

Optimierungsprozeß

Als letztes ist der Prozeß der Optimierung der Betriebsparameter zu beachten. Eine ECRIS wird vom Operateur üblicherweise optimiert, indem dieser die Betriebsparameter (Gaszufuhrdaten, Mikrowellenfrequenz und -leistung, Magnetfeldkonfiguration) so lange variiert, bis er keine weiteren Verbesserungen mehr beobachtet. Bei jeder Parameterveränderung bekommt er über die Meßinstrumente quasi sofort die Antwort, ob die Änderung in der richtigen Richtung erfolgte

Wie oben beschrieben, können die experimentellen Parameter jedoch dabei nicht gut gemessen werden, um sie dann als bekannte Optimalparameter in der Simulation zu verwenden. Vielmehr müssen sie in der Simulation erneut gefunden werden. Und dabei liegen die Antwortzeiten mindestens bei einigen Stunden bis zu einigen Tagen. Die Optimierung der Simulationsergebnisse ist dadurch wesentlich aufwendiger.

Aus diesen Gründen können die Simulationsergebnisse beim jetzigen Stand von Modell und Simulationsprogramm – abgesehen vom Spezialfall eines einzigen Betriebsgases – bisher nur zu qualitativen Aussagen und zur Ermittlung von Größenordnungen interessanter Parameter herangezogen werden.

⁵Aus diesem Grund brannte das Plasma in ECRIS 3 fast immer mit Sauerstoff als Mischgas, dessen Neutralgasanteil allgemein einige 100% größer als der des Argons ist (siehe Spektrum der extrahierten Ströme in Abbildung 2.8 auf Seite 15).

4.2 Neutralteilchensimulationen

Wie in Abschnitt 3.4.3 beschrieben, werden zur Ermittlung der totalen NT-Dichteverteilung Monte-Carlo-Simulationen für vier verschiedene Ursprungsorte bzw. -bereiche u der NT (Gaseinlaßöffnung, Zylinderstirnfläche auf der Gaseinlaßseite, Zylindermantelfläche, Plasmaelektrode) bei jeweils mehreren mittleren Elektronendichten $\bar{n}_{e,hot}$ durchgeführt.

Das Resultat einer jeden solchen Simulation ist die räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\rho_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ sowie die mittlere Lebens- bzw. Aufenthaltsdauer $\tau_u(\bar{n}_{e,hot})$ in der Plasmakammer. Die totale NT-Dichte ergibt sich daraus durch (über die ortsabhängigen Neutralisationsraten gewichtete) Überlagerung und Interpolation der relevanten NT-Profile (siehe Abschnitt 3.4.3).

Abbildung 4.1 zeigt die Flächenelemente⁶ auf den drei Plasmakammerwänden, von denen aus die simulierten NT starten. Das sind die Bereiche, an denen die Feldlinien aus dem PKB auf die Wände treffen. Da die Ionen diesen folgen (siehe Abschnitt 3.6.3), sind nur diese Flächen in Folge der Ionenwandneutralisation Quellen neuer NT.

Simuliert wurde für Werte der mittleren Elektronendichte $\bar{n}_{e,hot}$ von 0 , 10^9 , $2 \cdot 10^9$, \dots , $5 \cdot 10^9$ und 10^{10} , $2 \cdot 10^{10}$, \dots , 10^{11} cm^{-3} mit dem in den Abbildungen 4.22a

⁶Aus technischen Gründen sind in Abbildung 4.1 die 3-dimensionalen *Zellen* eingezeichnet, deren Kontaktflächen mit den Plasmakammerwänden die hier eigentlich darzustellenden Startflächen bilden.

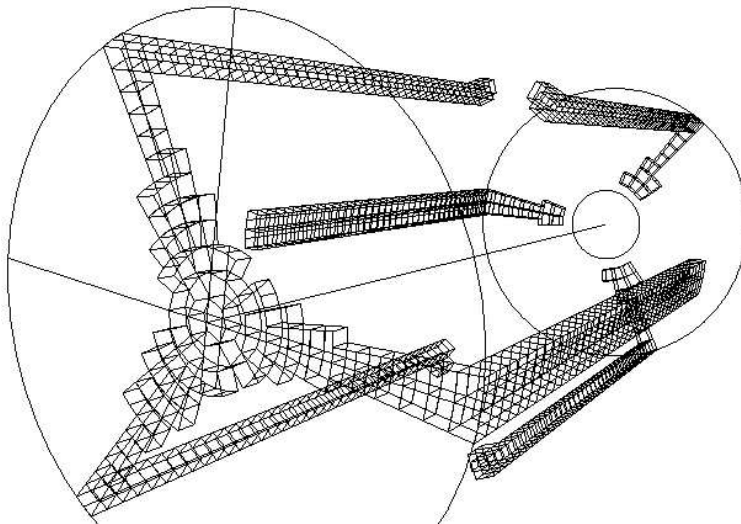


Abbildung 4.1: Perspektivische Darstellung der Zellen, die Wandkontakt haben und dort liegen, wo die Feldlinien aus dem Plasmakernbereich auf die Kammerwände treffen. Von den Kontaktflächen dieser Zellen mit den drei Kammerwänden werden die simulierten NT gestartet. Die vordere Stirnfläche ist diejenige auf der Gaseinlaßseite, bei der hinteren handelt es sich um die Plasmaelektrode mit der Extraktionsöffnung. Von der Zylindermantelfläche starten die NT nur unter den Polen des Hexapols.

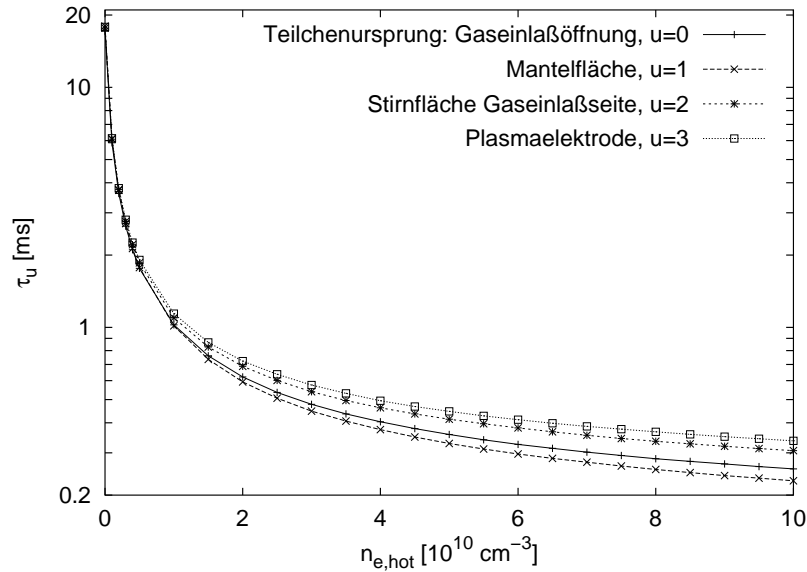


Abbildung 4.2: Simulierte mittlere Aufenthalts- bzw. Lebensdauer der NT in der Plasmakammer in Abhängigkeit von der mittleren Dichte der heißen Elektronen.

und 4.23a ab Seite 144 dargestellten Dichteprofil heißer Elektronen. (Zur Skalierung der Abbildung 4.22a siehe Fußnote⁷.)

Mittlere Aufenthalts- bzw. Lebensdauer

In Abbildung 4.2 sind die resultierenden mittleren Lebens- bzw. Aufenthaltsdauern $\tau_u(\bar{n}_{e,hot})$ nach (3.30) dargestellt⁸. Tabelle 4.1 auf der nächsten Seite stellt die wichtigsten Werte einander gegenüber. Ist noch kein Plasma gezündet ($\bar{n}_{e,hot} = 0$), sind die Aufenthaltsdauern in der Kammer nur durch zufälliges Entkommen durch die Extraktionsöffnung begrenzt und mit fast 18 ms sehr groß. (Ein Ar-Gasteilchen mit $v = 400$ m/s, das ist nach (C.3) etwa die mittlere Geschwindigkeit bei 300° K, benötigt nur 0,215 ms, um die Zylinderlänge von 86 mm zurückzulegen.) Sobald sich das Plasma entwickelt, stellt die EII einen weiteren Verlustkanal dar, so daß die τ_u schon bei nur $\bar{n}_{e,hot} = 10^9$ cm⁻³ auf fast ein Drittel abfallen. Mit noch größerer Elektronendichte sinken die τ_u immer weiter bis sie gegen die Zeit konvergieren, die die NT im Mittel für ihren Weg vom Startpunkt bis zur PKB benötigen (siehe Abbildung 3.8 auf Seite 55).

⁷In Abbildung 4.22a auf Seite 144 sind die Teilchendichtewerte in cm⁻³ aufgetragen, wobei sich bei Mittelung über die Plasmakammer ein Wert von $2 \cdot 10^{10}$ cm⁻³ ergibt. Da das Profil der heißen Elektronen als fix betrachtet wird, kann die Ordinate in der Abbildung linear reskaliert werden, um die hier verwendeten Elektronendichteverteilungen zu bekommen.

⁸Von den vier Simulationen im Grenzfall $\bar{n}_{e,hot} = 0$ ist natürlich nur diejenige für die NT, die durch die Gaseinlaßöffnung eintreten, physikalisch sinnvoll, da es bei $\bar{n}_{e,hot} = 0$ keine durch Neutralisation an den Wänden erzeugte NT gibt. Trotzdem hilft dieser Grenzfall beim Verständnis der Simulationsergebnisse.

$\bar{n}_{e,hot}$ [cm ⁻³]	$\bar{\tau}_u(\bar{n}_{e,hot})$ [ms]			
	Gaseinlaß $u = 0$	Mantelfläche $u = 1$	Stirnfläche $u = 2$	Plasmaelektrode $u = 3$
0	17,13	(17,75)	(17,84)	(17,94)
10 ⁹	5,88	6,11	6,12	6,09
2 · 10 ⁹	3,62	3,80	3,78	3,72
3 · 10 ⁹	2,65	2,79	2,79	2,70
4 · 10 ⁹	2,10	2,23	2,24	2,14
5 · 10 ⁹	1,76	1,88	1,90	1,78
10 ¹⁰	1,02	1,12	1,14	1,01
2 · 10 ¹⁰	0,62	0,71	0,87	0,60
5 · 10 ¹⁰	0,36	0,43	0,45	0,33
10 ¹¹	0,26	0,32	0,34	0,23

Tabelle 4.1: Mittlere Aufenthalts- bzw. Lebensdauern $\bar{\tau}_u(\bar{n}_{e,hot})$ der NT aus den Monte-Carlo-Simulationen für die vier angesetzten Startbereiche (Index u), die in Abbildung 4.2 graphisch dargestellt sind.

Profil der NT, die beim Gaseinlaß starten

Im folgenden werden die von den NT-Simulationen gelieferten Dichteprofile gezeigt. Als *Profil* $\hat{\rho}_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ werden hier die auf ihren räumlichen Mittelwert (im Plasmakammervolumen V) normierten Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten nach (3.24) bezeichnet⁹:

$$\hat{\rho}_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r}) := \frac{\rho_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})}{V^{-1} \cdot \int_V \rho_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r}) d^3r} \quad (4.1)$$

$$\stackrel{(3.24)}{=} \rho_u(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r}) \cdot V. \quad (4.2)$$

(Die $\hat{\rho}_u$ sind somit dimensionslos.)

Die Abbildungen 4.3 und 4.4 zeigen die Profile $\hat{\rho}_{u=0}(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die aus der Gaseinlaßöffnung kommen ($u = 0$), für die drei mittleren Elektronendichten 0, 10⁹ und 2 · 10¹⁰ cm⁻³. (Zur Erzeugung dieser Plots siehe Anhang D.2.3!)

Die NT aus der Gaseinlaßöffnung bilden einen Strahl, für dessen Winkelverteilung relativ zur Symmetrieachse die Verteilung (3.22) angesetzt wurde (siehe Abschnitt 3.4.3). Somit fliegt ein Teil dieser NT, sofern sie nicht ionisiert werden, geradewegs durch die Extraktionsöffnung wieder aus der Kammer heraus.

Im Fall $\bar{n}_{e,hot} = 0$ halten sich die nicht sofort entkommenden NT durch ihre wiederholten Wandreflexionen im Vergleich zu der Zeit für den einmaligen Kammerdurchflug (ca. 0,215 ms, siehe oben) sehr lange (knapp 18 ms) in der Kammer auf. Im Mittel werden sie also einige hundert Mal reflektiert, wodurch sie schnell ihren Ursprung "vergessen". Für die Profile der vier Ursprungsbereiche u bedeutet dies, daß diese sich im Fall $\bar{n}_{e,hot} = 0$ nur geringfügig unterscheiden, wie der Vergleich der jeweiligen Plots a) in den Abbildungen 4.3 bis 4.10 zeigt.

Zu erkennen sind die Dichteerhöhung direkt vor der Gaseinlaßöffnung bei $(z, r) = (0, 0)$ und die Dichteabsenkung vor der Extraktionsöffnung bei $(z, r) = (86 \text{ mm}, 0)$. Dies sind die Quelle bzw. die Senke für die NT.

⁹Die verwendete Gleichung (3.24) gilt auch für alle $u \geq 1$.

Die beobachtete Dichtekonzentration auf der z -Achse ist *nicht* primär auf den entlang der Achse verlaufenden Teilchenstrahl zurückzuführen. Dazu ist die mittlere Flugzeit der NT als gerichtetes Strahlteilchen (0,215 mm, s.o.) zu kurz im Vergleich zur im Mittel insgesamt in der Kammer verbrachten Zeit. Der Grund für die Konzentration auf der z -Achse liegt vielmehr in der Winkelverteilung $f(\Theta) = \cos \Theta$ nach (3.22), mit der die NT nach der Wandreflexion relativ zur Wandnormalen von der Wand wegfliegen: Durch die Vorzugsrichtung parallel zur Wandnormalen (siehe Abbildung 3.9 auf Seite 56) werden die NT, die von der Zylinder*mantel*fläche kommen, gewissermaßen auf die Symmetrieachse fokussiert.

Des weiteren läßt sich auch in axialer Richtung eine geringe Dichteerhöhung in der Mitte beobachten. Diese läßt sich dadurch erklären, daß die Teilchen, die von der Zylinder*mantel*fläche kommen, (wieder aufgrund der Vorzugsrichtung parallel zur Wandnormalen) mit großer Wahrscheinlichkeit auf der gegenüberliegenden Seite des Mantels auftreffen. Die Axialbewegung stellt dabei praktisch einen Random-Walk dar, für den die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Schrittweite nach links genauso groß wie die nach rechts ist. In einem unendlich langen Rohr (mit unendlich lang eingeschlossenen Teilchen) würde dies allein jedoch zu einer axial konstanten Dichteverteilung führen. Sobald ein NT jedoch in der simulierten Zylinderkammer, auf eine der beiden Stirnwandflächen trifft, wird es (da es wieder dominant parallel zur Wandnormalen, dann also der Zylinderachse, von der Wand wegfliegt) in axialer Richtung einen relativ großen Schritt weg von der Stirnfläche machen. In diesem Sinne stellen die beiden Stirnflächen Senken für die NT dar, was die Dichteabnahme vor diesen erklärt.

Sobald die NT durch EII ionisiert werden, ist der PKB eine Senke für die NT. Schon bei $\bar{n}_{e,hot}$ von nur 10^9 cm^{-3} fällt die Dichteerhöhung auf der Zylinderachse leicht ab. Da alle simulierten Teilchen von der Gaseinlaßöffnung starten, ist der Anteil der Zeit, die die NT unmittelbar davor verbrachten, an der simulierten Gesamtzeit größer geworden, wodurch dieser Bereich auch im Profil gem. (3.29) an Bedeutung gewinnt.

Bei $\bar{n}_{e,hot} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, das ist der Wert, der in folgenden Abschnitten oft als oberes Limit für $\bar{n}_{e,hot}$ angesetzt wird (siehe Abschnitt 3.3.3.1), ist die von den Elektronen "gefressene" Dichteabsenkung deutlich zu erkennen. Die Dichte ist dort unter den Mittelwert abgesunken. Unmittelbar vor der Gaseinlaßöffnung ist sie auf das 50fache des Mittelwertes angestiegen. (Die mittleren freien Weglängen der NT für diese Dichte können Abbildung 4.33 auf Seite 156 entnommen werden.)

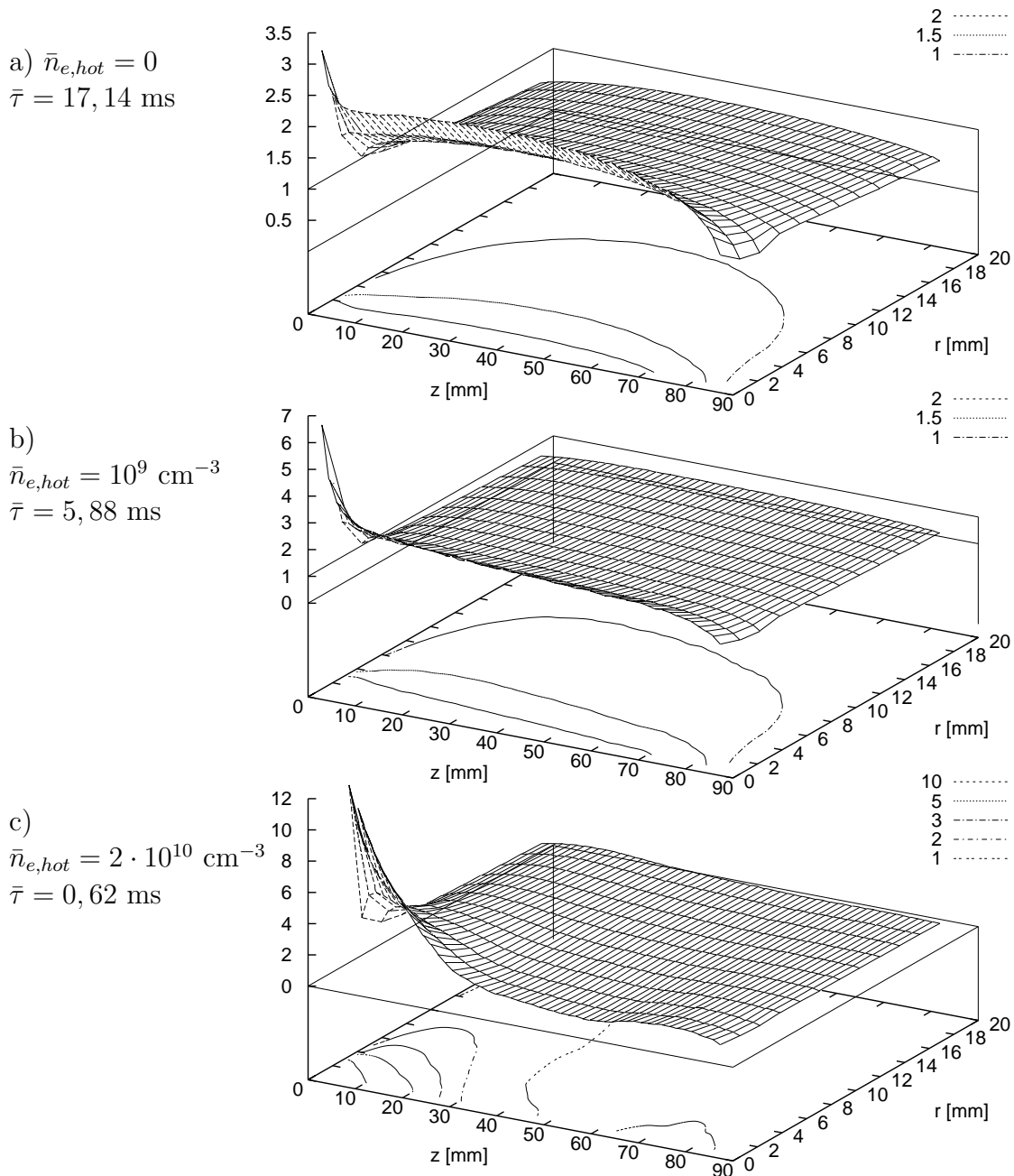


Abbildung 4.3: z -Plots (siehe Anhang D.2.3) der Dichteprofile $\hat{\rho}_0(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von der Gaseinlaßöffnung starten, für drei verschiedene mittlere Elektronendichten.

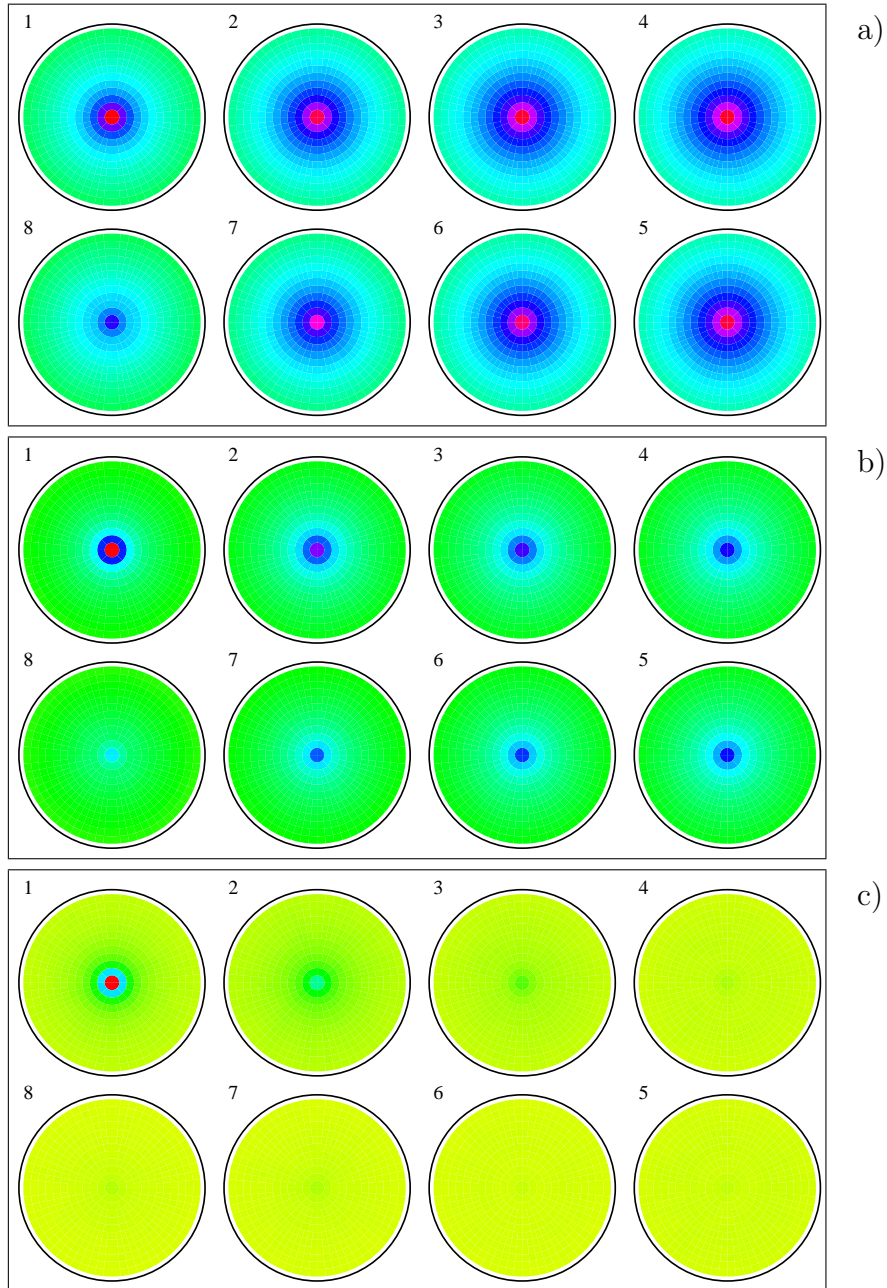


Abbildung 4.4: Die zu den zr -Plots in Abbildung 4.3 gehörigen xy -Plots (siehe Anhang D.2.3 auch mit der hier verwendeten Farbskala) der Dichteprofile $\hat{\rho}_0(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von der Gaseinlaßöffnung starten.

Profil der NT, die vom Zylindermantel starten

Für die NT, die nach Ionenneutralisation unter den Polen des Hexapols von der Zylindermantelfläche starten ($u = 1$), sind in Abbildung 4.5 und 4.6 die Dichteprofile $\hat{\rho}_1(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ für drei verschiedene $\bar{n}_{e,hot}$ dargestellt.

Das Profil für $\bar{n}_{e,hot} = 0$ ähnelt sehr stark dem der NT von der Gaseinlaßöffnung und ist fast zylindersymmetrisch, weil der Teilchenursprung aufgrund der langen mittleren Aufenthaltszeit $\bar{\tau}_1(0) \approx 18$ ms eine vernachlässigbare Rolle spielt.

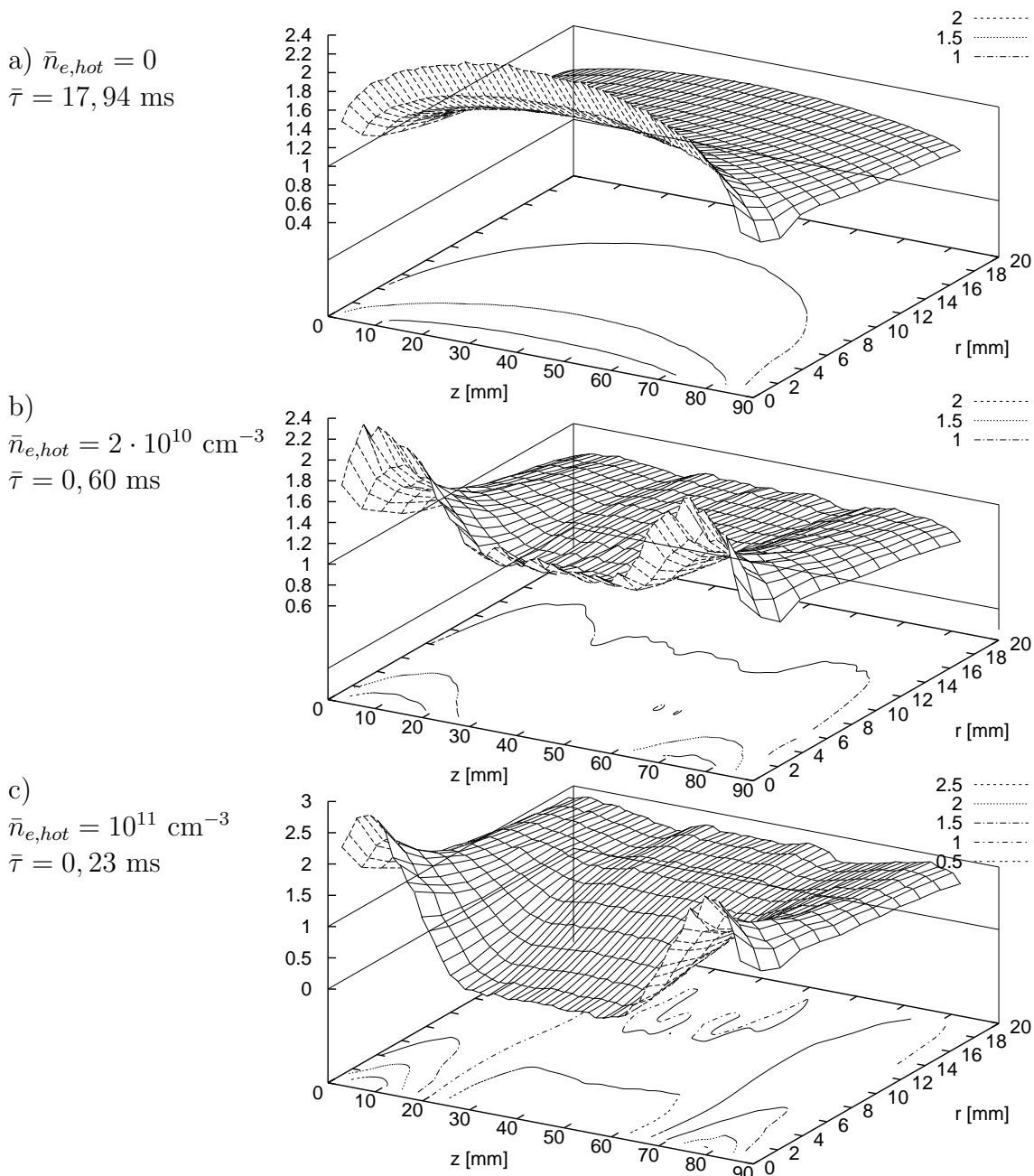


Abbildung 4.5: z -Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_1(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von den Flächenelementen auf der Zylindermantelwand starten, für drei verschiedene mittlere Elektronendichten.

Bei $\bar{n}_{e,hot} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ fällt $\bar{\tau}_1$ auf 0,71 ms ab, so daß es erstens zu einer Dichteabsenkung im PKB auf Durchschnittsniveau (=1) kommt und sich zweitens auch die Startorte der NT in der räumlichen Verteilung deutlich abzeichnen (siehe Abbildung 4.6b).

Aber erst mit $\bar{n}_{e,hot} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ wird die EII so bedeutend, daß die NT-Dichte auf der Achse fast verschwindet.

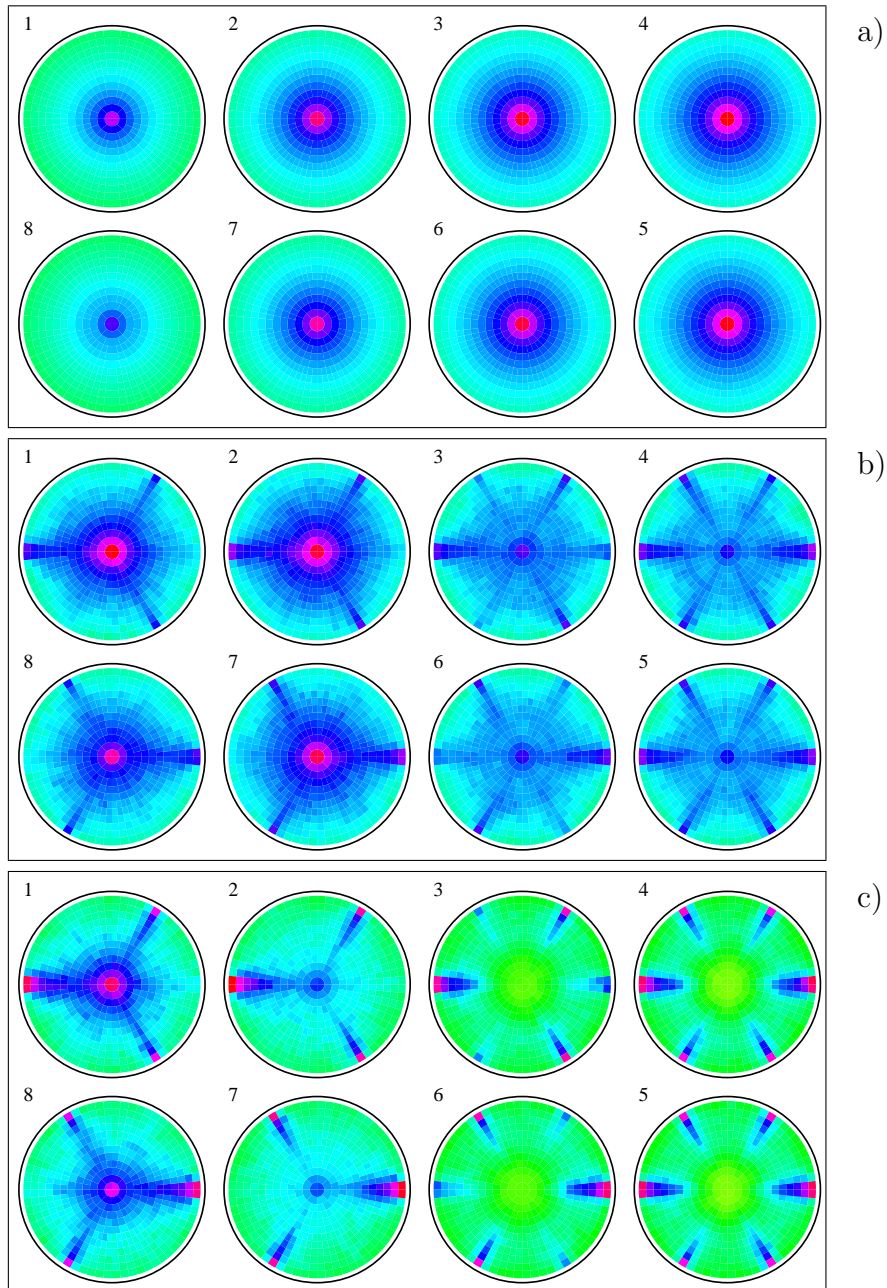


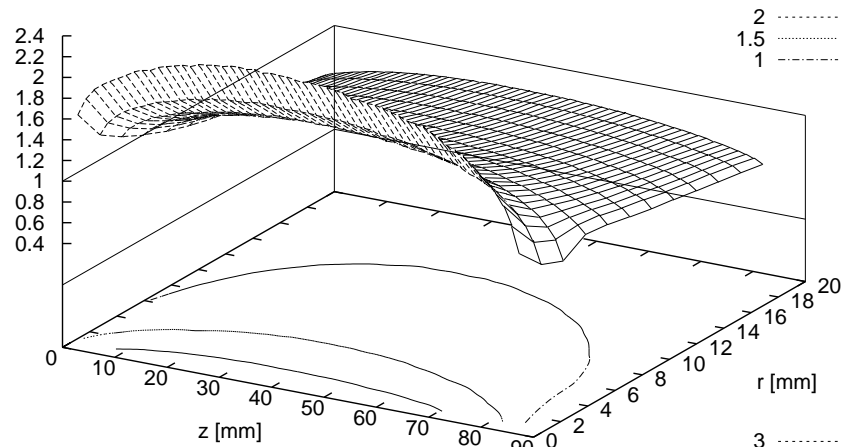
Abbildung 4.6: Die zu den zr-Plots in Abbildung 4.5 gehörigen xy-Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_1(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von der Zylindermantelfläche starten.

Profil der NT, die von der Stirnfläche auf der Gaseinlaßseite starten

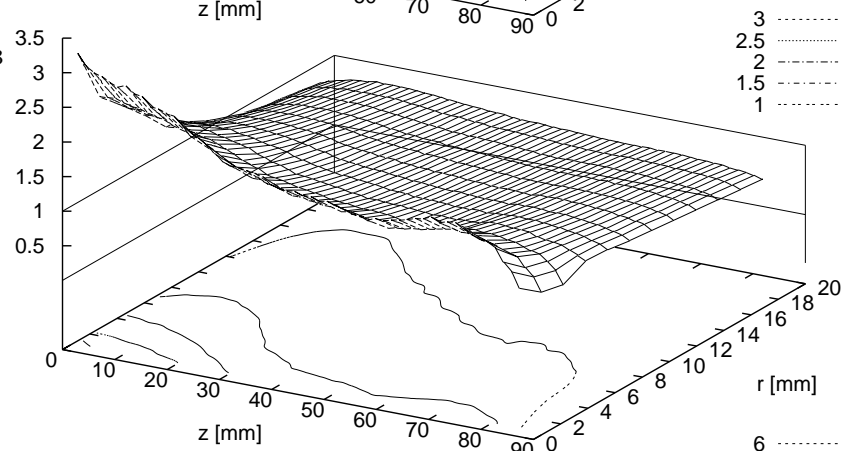
Aus dem gleichen Grund wie bei $\hat{\rho}_1(\vec{r})$ spielt der Ursprung der NT im Fall $\bar{n}_{e,hot} = 0$ praktisch keine Rolle für das Profil $\hat{\rho}_2(\vec{r})$ der NT, die von dem Stern auf der Zylinderstirnfläche (siehe Abbildung 4.1) der Gaseinlaßseite ($u = 2$) stammen (siehe Abbildung 4.7 und 4.8).

Erst bei größeren Elektronendichten zeichnet sich der typische Stern der Aufprallverteilung der Ionen auf die Stirnfläche auch im Dichteprofil der so erzeugten NT

a) $\bar{n}_{e,hot} = 0$
 $\bar{\tau} = 17,75$ ms



b) $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^9$ cm⁻³
 $\bar{\tau} = 1,88$ ms



c) $\bar{n}_{e,hot} = 2 \cdot 10^{10}$ cm⁻³
 $\bar{\tau} = 0,71$ ms

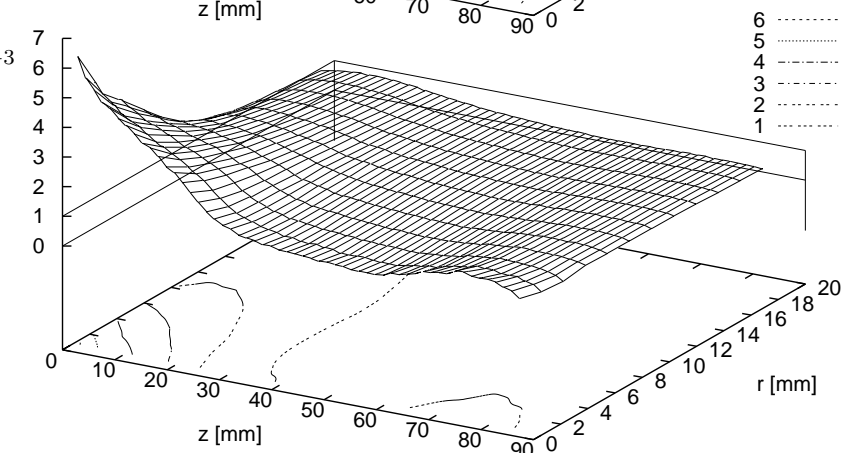


Abbildung 4.7: z -Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_2(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von den Flächenelementen der Zylinderstirnfläche auf der Gaseinlaßseite starten, für drei verschiedene mittlere Elektronendichten.

ab. Mit zunehmender axialer Entfernung von der Stirnfläche verliert dieser jedoch seine Konturen und das Profil nähert sich der Rotationssymmetrie.

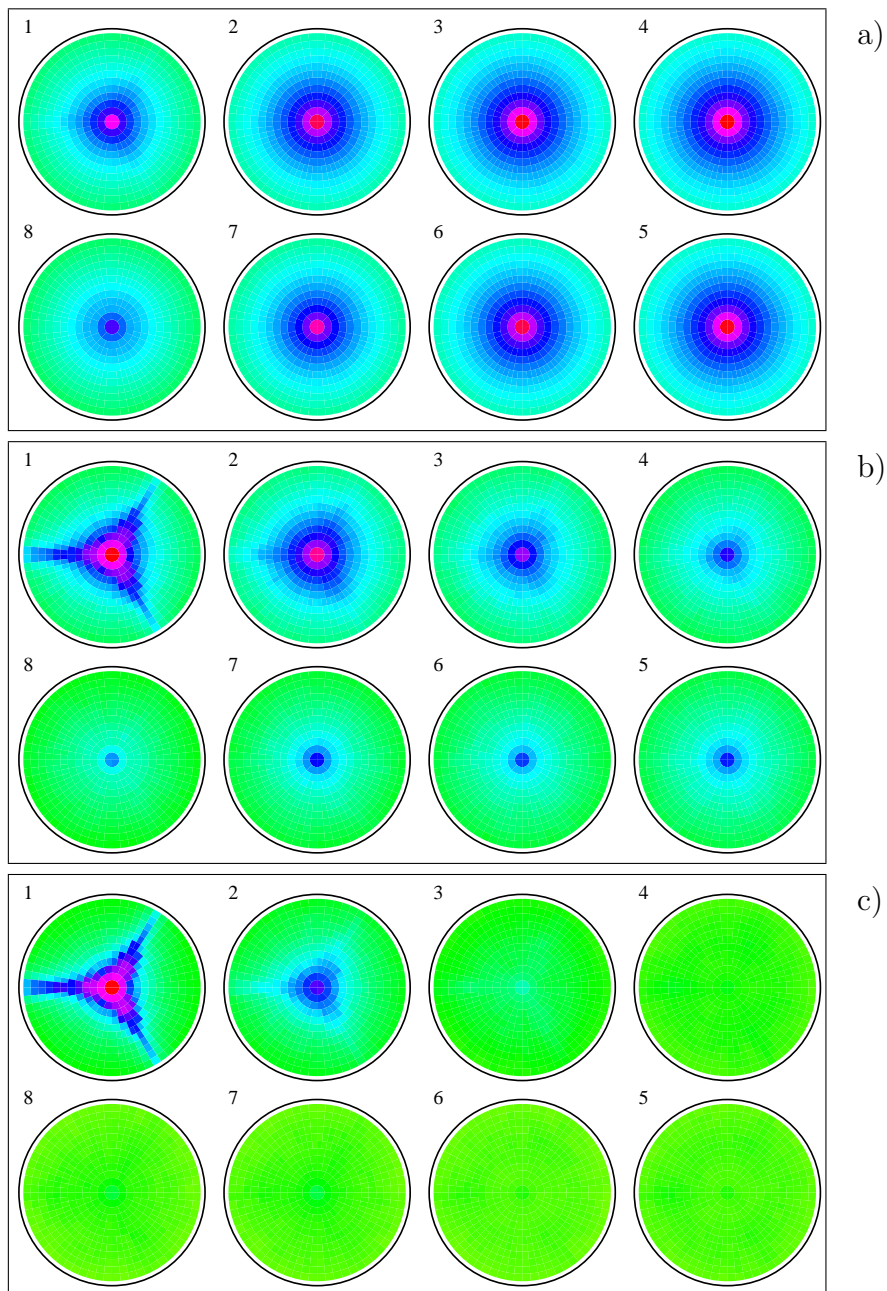


Abbildung 4.8: Die zu den zr -Plots in Abbildung 4.7 gehörigen xy -Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_2(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von der Zylinderstirnfläche auf der Gaseinlaßseite starten.

Profil der NT, die von der Plasmaelektrode starten

Für die NT von der Plasmaelektrode ($u = 3$) gilt abgesehen von der Spiegelsymmetrie¹⁰ fast das Gleiche wie für die NT von der Stirnfläche auf der Gaseinlaßseite. Es gibt lediglich einen kleinen Unterschied durch die Extraktionsöffnung, von der keine NT starten und die zusätzlich eine Senke darstellt.

¹⁰Genau genommen darf bei dieser Symmetriebetrachtung nicht die 30°-Drehung um die Rotationsachse vergessen werden.

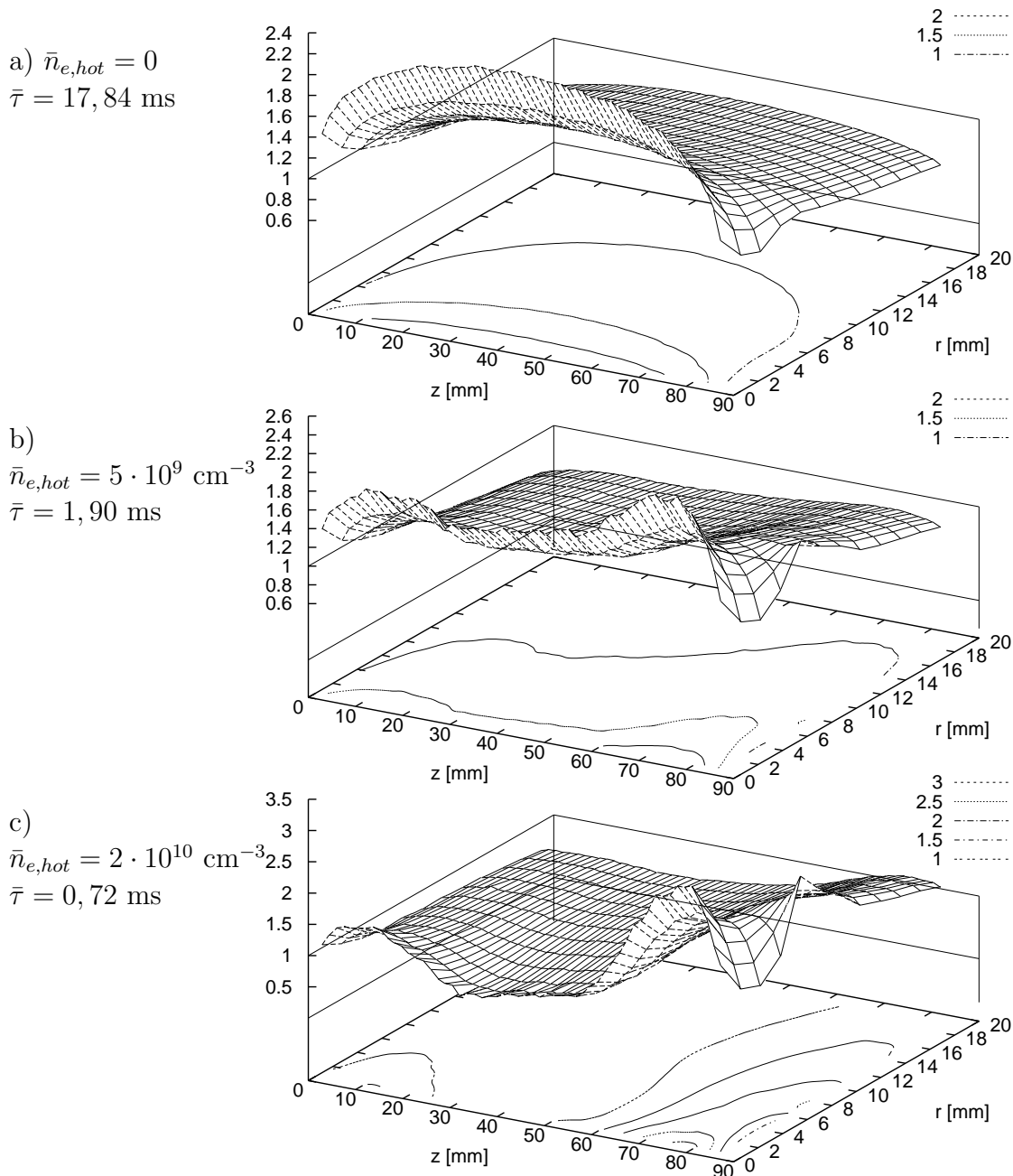


Abbildung 4.9: z -Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_3(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von den Flächenelementen auf der Plasmaelektrode starten, für drei verschiedene mittlere Elektronendichten $n_{e,hot}$.

Da auch die Neutralisationsströme auf den beiden Stirnflächen vergleichbar sind, mag sich die Frage stellen, ob die Trennung der beiden Profile überhaupt nötig ist. Es sei jedoch daran erinnert, daß die Unterschiede größer werden, wenn man mit verschobener Magnetfeldstruktur arbeitet.

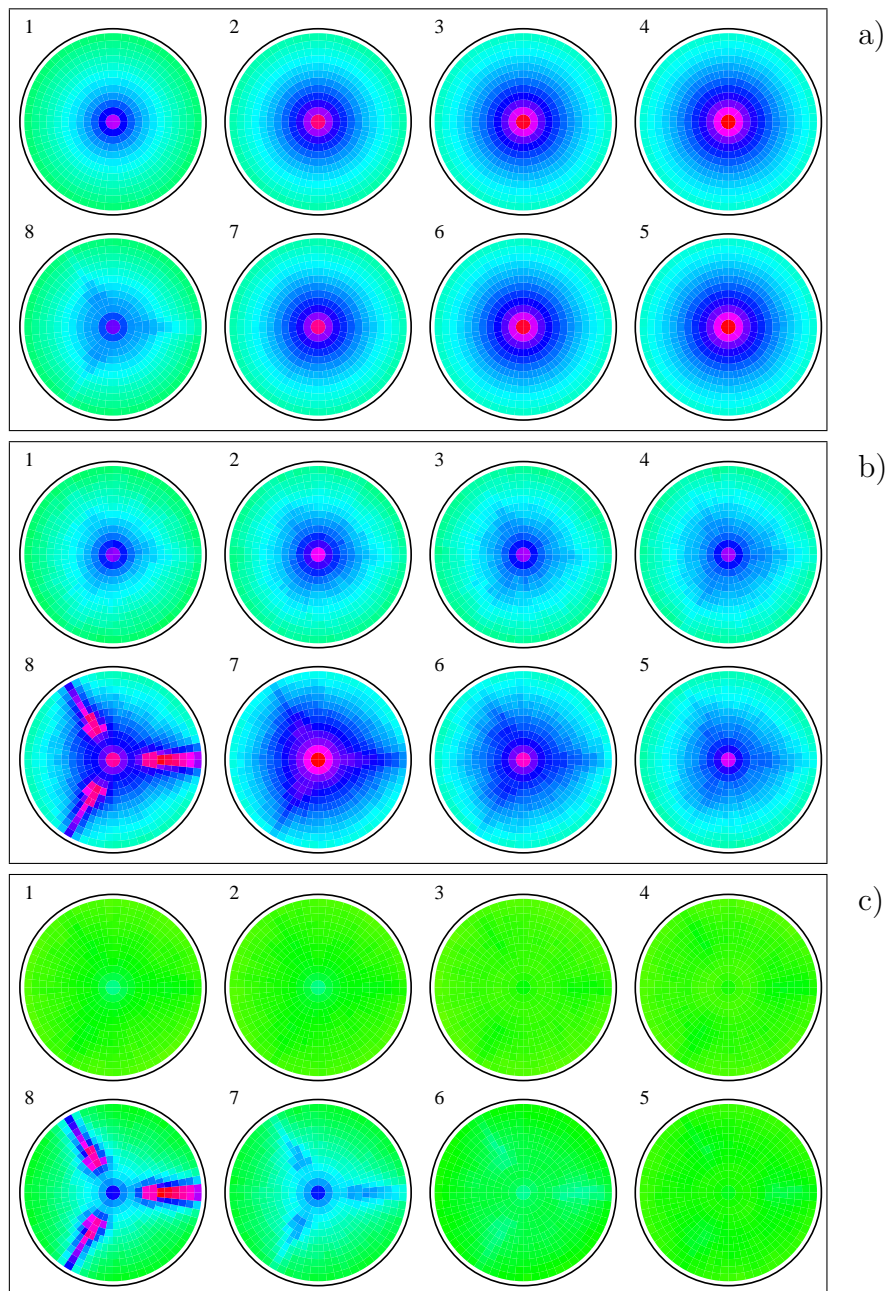


Abbildung 4.10: Die zu den zr -Plots in Abbildung 4.9 gehörigen xy -Plots der Dichteprofile $\hat{\rho}_3(\bar{n}_{e,hot}; \vec{r})$ der NT, die von der Plasmaelektrode starten.

4.3 Beispielsimulation

Zur Einführung wird eine Simulation vorgestellt, anhand derer erläutert wird, wie welche Daten in jeder Rechnung ermittelt werden.

Simuliert wurde die ECRIS 3, bei der die Permanentmagnetstruktur relativ zur Plasmakammer in axialer Richtung zentral positioniert ist, d.h. die Mittelpunkte von Plasmakammer und Magnetstruktur fallen zusammen¹¹.

Die Simulation lief mit Argon als Betriebsgas und die Plasmakammer wurde in 12255 Zellen aufgeteilt. (Die damit verbundenen geometrischen Zelldaten sind der Tabelle 4.6 auf Seite 161 zu entnehmen.)

Das Dichteprofil der heißen Elektronen stammt aus einer Simulation von HEINEN, in der eine H_{113} -Mikrowellenmode mit einer Amplitude von 15 V/cm für deren elektrische Feldkomponente angenommen wurde. Hierbei handelt es sich um den Wert mit optimalem Elektroneneinschluß [Hei]. Zur Berücksichtigung der elastischen ei-Stöße hat HEINEN im PKB für die mittlere Elektronendichte $2.77 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ angesetzt. Dies ist die halbe Cut-off-Dichte $n_{e,cut}$ der O-Welle nach (2.69) bei

¹¹An dieser Stelle sei angemerkt, daß dies nicht die für maximale Ströme optimale Positionierung ist (siehe Abschnitt 4.9).

Simulationstechnische Parameter	
<code>csd.t_step</code>	10^{-7} s
<code>csd.t_record</code>	$5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$
<code>csd.t_max</code>	0 (= keine Begrenzung)
<code>csd.maxRelChange_per_ms</code>	0.001
Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd_init.ElectronDensityDistribFile</code>	<code>ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_028448.asc</code>
<code>csd_init.n_eHot_mean</code>	10^{15} m^{-3}
<code>ElectronEnergyDistribFile</code>	<code>eedf/exp_2e4.asc</code>
<code>csd.tau_eHot</code>	10^{-3} s
<code>csd.n_eHot_mean_max</code>	$2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$
Prozessparameter	
<code>csd.kmax_cx</code>	4
<code>csd.kmax_eii</code>	2
Experimentelle Parameter	
<code>cavity.radius</code>	0.0195 m
<code>cavity.length</code>	0.086 m
<code>extraction.radius</code>	0.005 m
<code>gasInletAperture.radius</code>	0.002 m
<code>f_rf</code>	$6.7 \cdot 10^9 \text{ Hz}$
Gasparameter	
<code>csd_init.GasesCnt</code>	1
<code>csd_init.GasType_1</code>	18 (= Ar)
<code>csd.GasFlow_1</code>	$1.5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.neutrals.temp_K</code>	300 K
<code>transp.ions.temp_eV</code>	0.25 eV
<code>transport.adopt_data</code>	0.05
<code>transport.kappa_tauQN</code>	1
<code>transport.collmc_npp_min</code>	$5e+016$
<code>transport.collmc_npp_max</code>	$5e+018$
<code>transport.collmc_npp_samplesCnt</code>	6

Tabelle 4.2: Die wichtigsten Parameter der in diesem Abschnitt dokumentierten Simulation. Die jeweilige Bedeutung ist in Anhang D.2.4 dokumentiert.

6,7 GHz. Für die Ionen wurde dabei als mittlerer Ladungszustand $\bar{z} = 8$ und für die Dichte $n_i = 0,5 n_{e, cut} / \bar{z}$ angesetzt, was die ei-Stoßrate bestimmt.

Die EII-Ratenkoeffizienten sind mit einer exponentiell fallenden EEDF mit einem Mittelwert von 20 keV berechnet worden. Hierbei handelt es sich um eine typische EEDF, wie sie von HEINENS Elektronensimulationen geliefert wird.

Für die Ionen wurde eine Temperatur von 0,25 eV angesetzt. Dieser Wert stimmt gut mit dem Wert von 0,29 eV überein¹², der sich nach (3.135) aus den resultierenden Dichten im dynamischen Gleichgewicht ergibt¹³.

Die weiteren Simulationsparameter sind in Tabelle 4.2 zusammengestellt.

4.3.1 Zeitliche Entwicklung

Zur Demonstration eines (typischen) Simulationsverlaufes werden in diesem Abschnitt einige der während der Simulation protokollierten Daten zeitabhängig dargestellt. Aufgrund der in Abschnitt 3.2.4 erläuterten Einschränkungen bzgl. der Genauigkeit der Prozeßraten *vor* Erreichen des dynamischen Gleichgewichtes erheben diese Daten nicht den Anspruch, mit der tatsächlichen Entwicklung übereinzustimmen! Sie tragen jedoch zu einem qualitativen Verständnis der Vorgänge in der Quelle bei.

Alle hier gezeigten Graphiken zur zeitlichen Entwicklung werden vom Simulationsprogramm automatisch generiert. Hierbei handelt es sich um die ASCII-Datei 'doc\t.plt', die von GNUPLOT (siehe Anhang D.2.2) interpretiert werden kann.

4.3.1.1 Teilchendichten

Abbildung 4.11 zeigt die über die gesamte Plasmakammer gemittelten Teilchendichten der heißen Elektronen (also $\bar{n}_{e, hot}$ aus (3.9)), der positiven Ladungen $n_+ := \sum_z z \cdot n_z$ und der bis 11-fach geladenen Ar-Spezies \bar{n}_0 bis \bar{n}_{11} .

Die Simulation startet gem. Parameter `csd_init.n_eHot_mean` mit der über die Plasmakammer gemittelten Dichte der heißen Elektronen von $\bar{n}_{e, hot} = 10^9 \text{ cm}^{-3} = 10^{15} \text{ m}^{-3}$. Wie in Anhang D.1.1 erläutert, werden die Dichten von Ar^+ auf dieselben Werte wie die der heißen Elektronen und die der mehrfach geladenen Ionen auf Null gesetzt, damit von Beginn der Simulation an die Quasineutralität gewährleistet ist. Die Startdichte der NT ergibt sich wie in Anhang D.1.1 beschrieben.

Nach dem Start wachsen die mittleren Dichten der heißen Elektronen sowie der

¹²Wie in Abschnitt 3.8 hingewiesen, wird die Ionentemperatur während der Simulation als bekannt angenommen und nicht dynamisch verfolgt. Der sich am Ende der Simulation im dynamischen Gleichgewicht aus der CSD ergebende Wert muß daher mit dem Input-Parameter verglichen werden und möglichst gut übereinstimmen.

¹³Die Effekte $\overline{\Delta E_{CX}} \cdot R_{total}^{CX}$ durch endothermen Ladungsaustausch wurden dabei in (3.135) vernachlässigt.

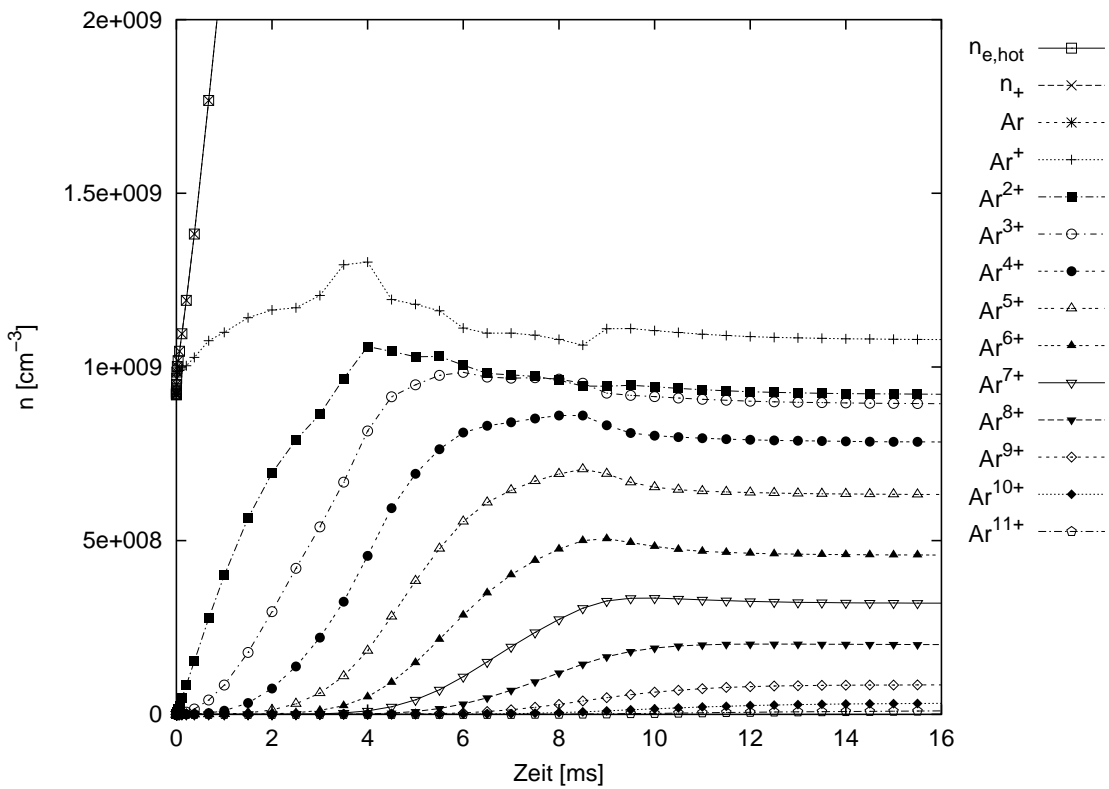
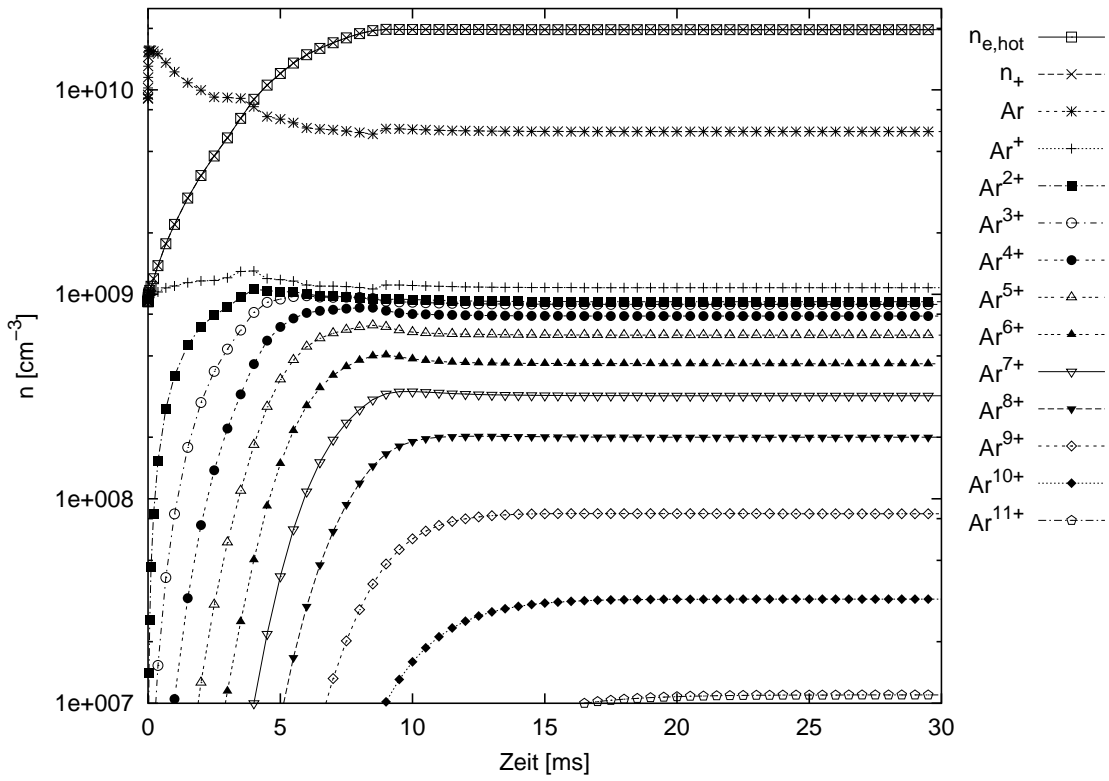


Abbildung 4.11: Zeitliche Entwicklung der über die ganze Cavity gemittelten Dichten der Ladungszustände. Unten: Vergrößerter Ausschnitt mit linearer Ordinate. (Die Dichten $n_{e,hot}$ und n_+ fallen praktisch zusammen.)

Ionenspezies anfangs nahezu exponentiell an. Nach 4 bis 10 ms erreichen *hier*¹⁴ die Ladungszustände mit $3 \leq z \leq 7$ ein Maximum und fallen dann wieder leicht ab, um danach ein stabiles Niveau einzunehmen. Die Dichten höher geladener Ionen nähern sich nach dem anfänglich exponentiellen Wachstum asymptotisch ihrem Endwert, der gleichzeitig auch ihr Maximum ist. Je größer die Teilchenladung ist, desto später erreichen die Dichten ihren Endwert.

4.3.1.2 Prozeßraten

In den Abbildungen 4.12 bis 4.20 sind jeweils von einer Teilchenspezies deren Dichte sowie deren Prozeßraten gezeigt. Dabei handelt es sich stets um die über die Plasmakammer gemittelten Werte $\bar{n}(t)$ und¹⁵ $(\partial n / \partial t)^{Prozess}(t)$. Grundsätzlich sind in jedem Plot die Prozeßraten auf der linken und die Dichte (als durchgezogene Linie ohne Punktmarkierung) auf der rechten Ordinate linear aufgetragen. In den Beschriftungen der Prozeßratenverläufe wird allgemein mit (+) bzw. (-) gekennzeichnet, ob diese die betrachtete Dichte auf- oder abbauen. Für ladungsändernde Prozesse wie Elektronenstoßionisation (EII) oder Ladungsaustausch (CX), durch die die Teilchendichten sowohl auf- als auch abgebaut werden, sind zusätzlich die Stoßpartner im Eingangskanal mit angegeben.

Heiße Elektronen

Abbildung 4.12 zeigt die Prozeßraten der heißen Elektronen. Dabei handelt es sich um die (nach (3.13) an die totale Ionisationsrate gekoppelte) EZRH-Zuwachsrate $(\partial n_{e,hot} / \partial t)^{ecrh}(t)$ [im Plot mit EZRH(+) gekennzeichnet] und den durch die Einschlußzeit $\tau_{e,hot}$ (Simulationsparameter `csd.tau_eHot`) definierten Verlustterm [im Plot: Verlust(-)] aus (3.17).

Beide steigen anfangs betragsmäßig mit der Dichte $\bar{n}_{e,hot}$ an. Da diese jedoch durch den Parameter `csd.n_eHot_mean_max` auf $\bar{n}_{e,hot}^{max} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ limitiert ist, wird bei Erreichen dieses Wertes nach etwa 8 ms die Elektronendichte konstant gehalten. (Diese Limitierung ist durch den Mikrowellen-Cut-off begründet, siehe Abschnitt 3.3.3.1. Bei diesem Wert von $\bar{n}_{e,hot}^{max}$ ergibt sich für die heißen Elektronen ein absolutes Maximum von etwa $4,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ (siehe Abbildung 4.28), das somit in der Nähe der Cut-off-Dichte $n_{e,cut} = 5,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ der O-Welle für 6,7 GHz liegt.)

Die beiden weiterhin berechneten und protokollierten Prozeßraten haben von diesem Moment an gem. (3.17) keinen Einfluß mehr auf die Simulation! (Es sei denn, die Zufuhr rate fele betragsmäßig wieder unter die Verlustrate.) Ihre Werte haben lediglich informativen Charakter. Denn nimmt man z.B. an, daß die Zuwachsrate korrekt ist, so folgt in diesem Beispiel, daß die Verlustrate betragsmäßig unterschätzt (und somit die Einschlußzeit überschätzt) wird, da die Summe der beiden [Tot. Änderung],

¹⁴Ist die anfängliche Neutralgasdichte kleiner, ionisiert das Plasma entsprechend langsamer.

¹⁵Die über die Plasmakammer gemittelten $(\partial n / \partial t)^{Prozess}(t)$ sind nicht mit aus den Dichtemittelwerten berechneten Prozeßraten $(\partial \bar{n} / \partial t)^{Prozess}(t)$ zu verwechseln!

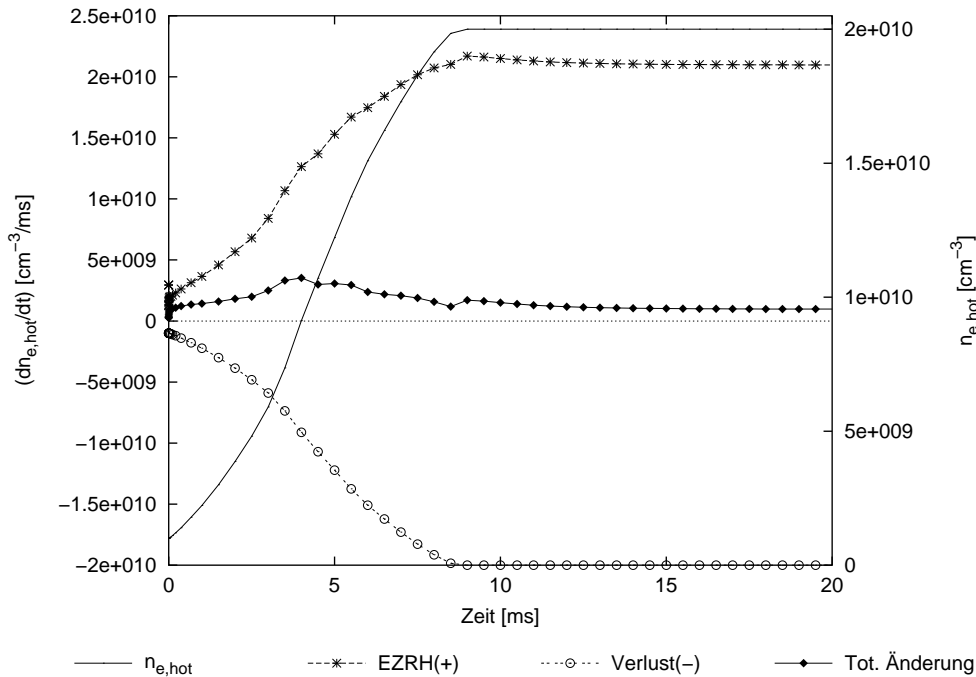


Abbildung 4.12: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten der heißen Elektronen (linke Ordinate) sowie deren mittlere Dichte (rechte Ordinate). Zur Tatsache, daß die totale Änderungsrate trotz konstanter Dichte nicht verschwindet, siehe Text.

die im Gleichgewicht eigentlich verschwinden muß, noch größer Null ist. An dieser Stelle wird erneut deutlich, daß die Beschreibung *der zeitlichen Entwicklung* der heißen Elektronen in Abschnitt 3.3.3 lediglich als allererste Näherung verstanden werden darf!

Daß die EZRH-Gewinnrate, die nach (3.13) an die totale Ionisationsrate gekoppelt ist, nach Erreichen ihres Maximums wieder leicht abfällt, ist darauf zurückzuführen, daß der mittlere Ladungszustand im Plasma trotz konstanter Dichte der heißen Elektronen weiter ansteigt, und somit aufgrund kleiner werdender mittlerer EII-Querschnitte die totale Ionisationsrate abnimmt.

Neutrales Ar

Die mittlere Neutralteilchendichte \bar{n}_0 und ihre Prozeßraten sind in Abbildung 4.13 dargestellt. Wie in Kapitel 3.4 erläutert, setzt sich die NT-Dichte gem. (3.31) allgemein aus vier Komponenten u zusammen, die sich durch den Ort des Teilchenursprungs (Gaseinlaßöffnung oder eine der drei Plasmakammerwände) unterscheiden. Bis zum Zeitpunkt der *physikalischen* Plasmazündung ($n_e(\vec{r}) \equiv 0$) gibt es allerdings keine aus der Wandneutralisation von Ionen stammenden NT ($I_u = 0$ für $u \neq 0$), so daß die NT-Dichte nur durch die NT aus der Gaseinlaßöffnung ($u = 0$) bestimmt wird. Gemäß (3.23) ergibt sich mit der Gaszufuhr $I_0 = 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, der mittleren NT-Aufenthaltsdauer $\bar{\tau}_0(0) = 17,13 \text{ ms}$ und dem Plasmakammervolumen $V = \pi \cdot 1,95^2 \cdot 8,6 \text{ cm}^3$ die mittlere NT-Dichte

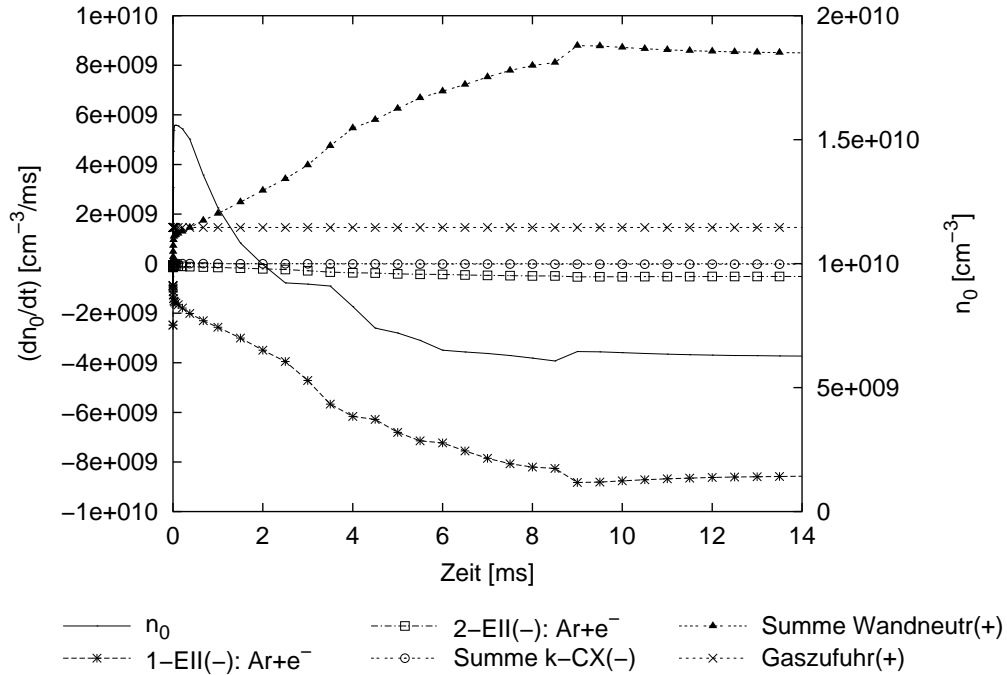


Abbildung 4.13: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der Dichte (rechte Ordinate) der neutralen Ar-Atome.

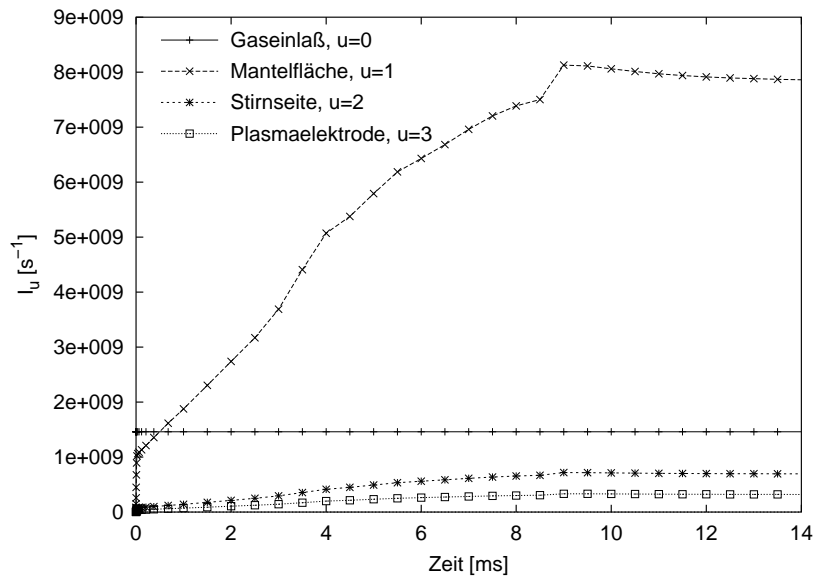


Abbildung 4.14: Zeitliche Entwicklung der NT-Zufuhraten I_u der vier NT-Profile u (siehe Abschnitt 3.4.3).

von $\bar{n}_{u=0}(0) = 1,92 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Daß die Anfangsdichte in der Simulation unter diesem Wert liegt, ist dadurch verursacht, daß die Simulation tatsächlich mit $\bar{n}_{e,hot} = 10^9 \text{ cm}^{-3}$ anstelle von 0 startet. Dadurch ist $\bar{\tau}_0(\bar{n}_{e,hot})$ schon etwa dreimal kleiner als $\bar{\tau}_0(0)$ (siehe Tabelle 4.1 auf Seite 122).

Mit einsetzender EII wird die Dichte der NT, die von der Gaseinlaßöffnung starten, reduziert. Etwas verzögert setzt dann die Neutralisation der Ionen an den

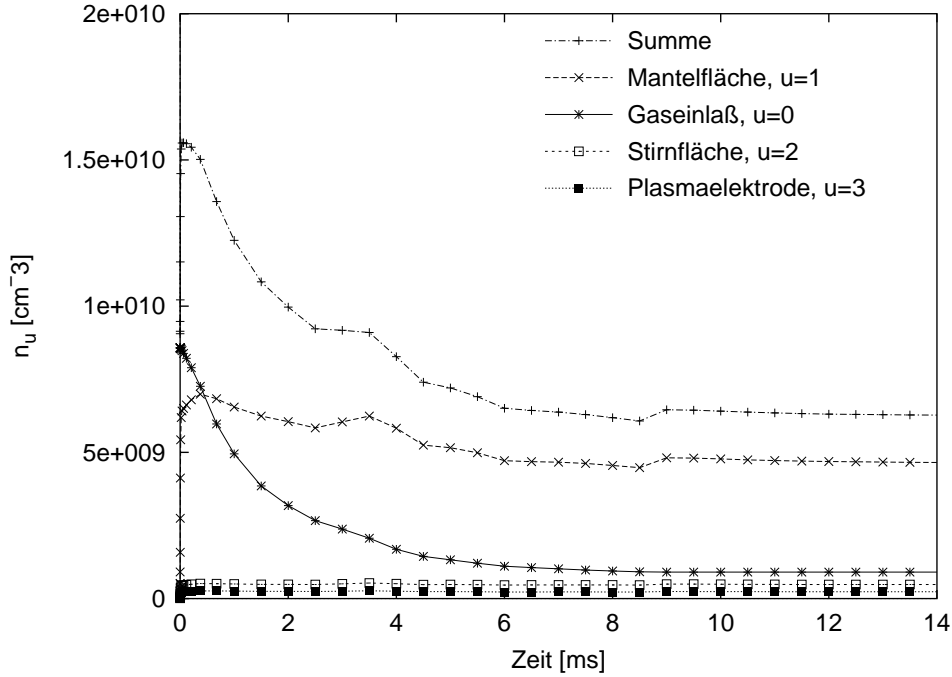


Abbildung 4.15: Zeitliche Entwicklung der Beiträge \bar{n}_u der vier NT-Profile u (siehe Abschnitt 3.4.3) zur totalen Ar-NT-Dichte. Bei der vorgegebenen Gaszufuhr $I_0 = 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ergibt sich vor der Plasmazündung eigentlich eine mittlere NT-Dichte von $\bar{n}_{u=0}(0) = 1,92 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ (siehe Text).

Wänden ein, die den Verlust durch Ionisation teilweise kompensiert. Netto kommt es jedoch solange zu einem Abbau, bis die Ionisationsrate gleich der Summe der NT-Zufuhrraten ist¹⁶.

Wie Abbildung 4.14 zeigt, sind die zwei bedeutendsten Prozesse für die NT die 1-EII [1-EII(-), die die NT reduziert, und auf der Zufuhrseite die Neutralisation der Ionen an den Plasmakammerwänden [Summe Wandneutr(+)]. Diese Zufuhrrate übersteigt schon nach weniger als 1 ms diejenige durch den direkten Gaseinlaß [Gaszufuhr(+)].

Der Abbau durch 2-EII spielt kaum eine Rolle und die abbauende Wirkung des CX (summiert über alle k und alle Ionenspezies, siehe (3.61)) [Summe k-CX(-)] ist vernachlässigbar.

Abbildung 4.15 stellt die Entwicklung der Beiträge

$$n_u = I_u \cdot \bar{\tau}_u(\bar{n}_{e,hot})/V \quad (4.3)$$

der vier NT-Profile u zur totalen NT-Dichte dar. Der Beitrag der NT, die aus der

¹⁶Bei sehr genauer Betrachtung erkennt man in der Simulation allerdings einen (der erwarteten Dichteabnahme widersprechenden) sehr kurzen anfänglichen Anstieg der NT-Dichte. Dieser ist jedoch lediglich simulationstechnisch durch eine zu niedrig *berechnete* NT-Anfangsdichte bedingt. Denn zu Beginn der Simulation sind die bei $\bar{n}_{e,hot} = 10^9 \text{ cm}^{-3}$ physikalisch schon existierenden Neutralisationsraten $I_u > 0$ für $u \neq 0$ noch unbekannt und somit auf Null gesetzt.

Ihre Berechnung bedarf mindestens eines Zeitschrittes der CSD-Integration. Abbildung 4.14 mit der zeitlichen Entwicklung der NT-Zufuhrraten I_u zeigt für I_1 ganz am Anfang ($t < 0,05 \text{ ms}$) einen sehr schnellen Anstieg, der dann abknickt. Dies beruht darauf, daß sich die richtigen Werte aus den künstlichen Anfangswerten in der Zeit vor dem Abknicken numerisch erst noch einstellen müssen. Entsprechendes gilt für die NT-Dichtebeiträge $\bar{n}_u = I_u \cdot \bar{\tau}_u/V$ in Abbildung 4.15.

Gaseinlaßöffnung stammen ($u = 0$), stellt zu Beginn den Hauptteil dar. Er sinkt dann aber aufgrund der ansteigenden Dichte heißer Elektronen bis zum Erreichen ihres Maximalwertes bei ca. 8 ms aufgrund der kleiner werdenden mittleren Aufenthaltszeit $\bar{\tau}_0(\bar{n}_{e,hot})$ immer weiter ab. Nach weniger als 1 ms überwiegt der Beitrag der NT, die in Folge der Ionenneutralisation von der Zylinderwand ($u = 1$) stammen.

Obwohl auch $\bar{\tau}_1(\bar{n}_{e,hot})$ mit $\bar{n}_{e,hot}$ sinkt (siehe Abbildung 4.2 auf Seite 121) bleibt ihr absoluter Anteil durch die steigende Ionenneutralisation I_1 (siehe Abbildung 4.14) an der Zylinderwand auf hohem Niveau.

Die NT, die von den beiden Stirnflächen der Plasmakammer stammen ($u = 2, 3$), bleiben *gemittelt über das Plasmakammervolumen* von geringer Bedeutung.

Ar-Ionen.

Die Abbildungen 4.16 bis 4.20 geben die zeitliche Entwicklung der Prozeßraten und der Dichten der Ar-Ionen mit $z=1, 2, 6, 13$ und 18 wieder.

Unter den Zufuhraten dominiert bei allen Ladungszuständen die 1-EII-Rate $R_{z-1 \rightarrow z}^{eii}$ nach (3.35) [1-EII(+)]; bei Ar^{18+} sogar die 2-EII-Rate $R_{16 \rightarrow 18}^{eii}$ nach (3.40) [2-EII(+)].

Auch unter den Verlustaten hat die EII zumindest bei den niedrig geladenen Zuständen (hier $z \leq 5$) den größten Beitrag. Für größere z stellt die Neutralisation an den Wänden [Wandneutr.-] den stärkeren Verlustkanal dar.

Über die gesamte Plasmakammer gemittelt hat der CX praktisch keine Bedeutung. In den Plots wurden alle k-CX-Raten nach (3.68), die Ar^{z+} ab- bzw. aufbauen, aufgrund ihrer kleinen Einzelbeiträge wie folgt zusammengefaßt¹⁷:

$$\text{Summe k-CX(-)} = \sum_k R_{\text{Ar}^{(z-k)+}, \text{Ar}^{z+}} \quad \text{und} \quad (4.4)$$

$$\text{Summe k-CX(+)} = \sum_k R_{\text{Ar}^{z+}, \text{Ar}^{(z+k)+}}. \quad (4.5)$$

Selbst bei Ar^{14+} stellt die 1-EII noch einen größeren Verlust als die Summe aller k-CX dar, und auch bei Ar^{18+} ist die Bedeutung immer noch klein im Vergleich zu den Verlusten durch Neutralisation an der Wand. Der Grund hierfür liegt zum einen an den im Vergleich zur EII für $z \leq 7$ kleineren CX-Ratenkoeffizienten $\left\langle \sigma_{\text{Ar}^{(z-k)+}, \text{Ar}^{z+}} \cdot u \right\rangle$ (siehe Abbildung 3.21 auf Seite 84), zum anderen aber auch daran, daß im PKB, wo die Ionendichten hoch sind, die Neutralteilchendichte im Vergleich zum restlichen Volumen relativ klein ist und umgekehrt (siehe Abbildungen 4.22 und 4.23, jeweils b und d). Für die ortsabhängigen CX-Raten

$$R_{\text{Ar}^{(z-k)+}, \text{Ar}^{z+}} = n_{\text{Ar}^{z+}} \cdot n_{\text{Ar}} \cdot \left\langle \sigma_{\text{Ar}^{(z-k)+}, \text{Ar}^{z+}} \cdot u \right\rangle \quad (3.68)$$

verhalten sich $n_{\text{Ar}^{z+}}$ und n_{Ar} in ihrer Ortsabhängigkeit also stets gegenläufig. Im Gegensatz dazu variieren die Dichten der Ionen und der heißen Elektronen räumlich

¹⁷In den folgenden zwei Gleichungen steht links die jeweilige Bezeichnung aus den Plots.

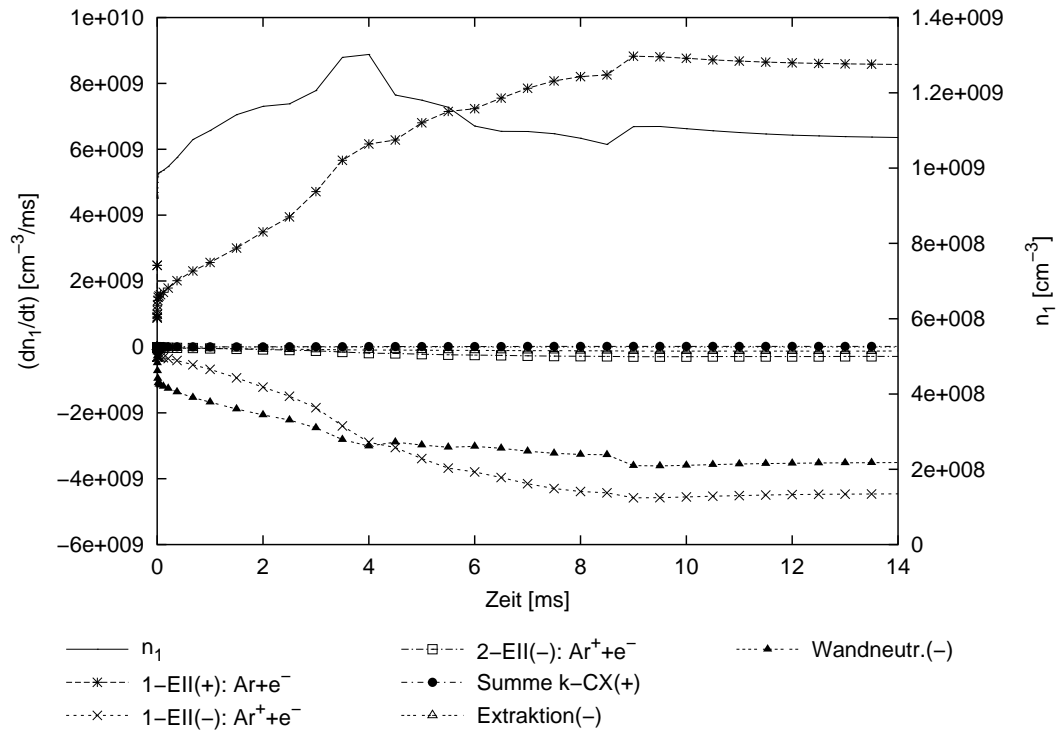


Abbildung 4.16: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte (rechte Ordinate) der Ar^+ -Ionen.

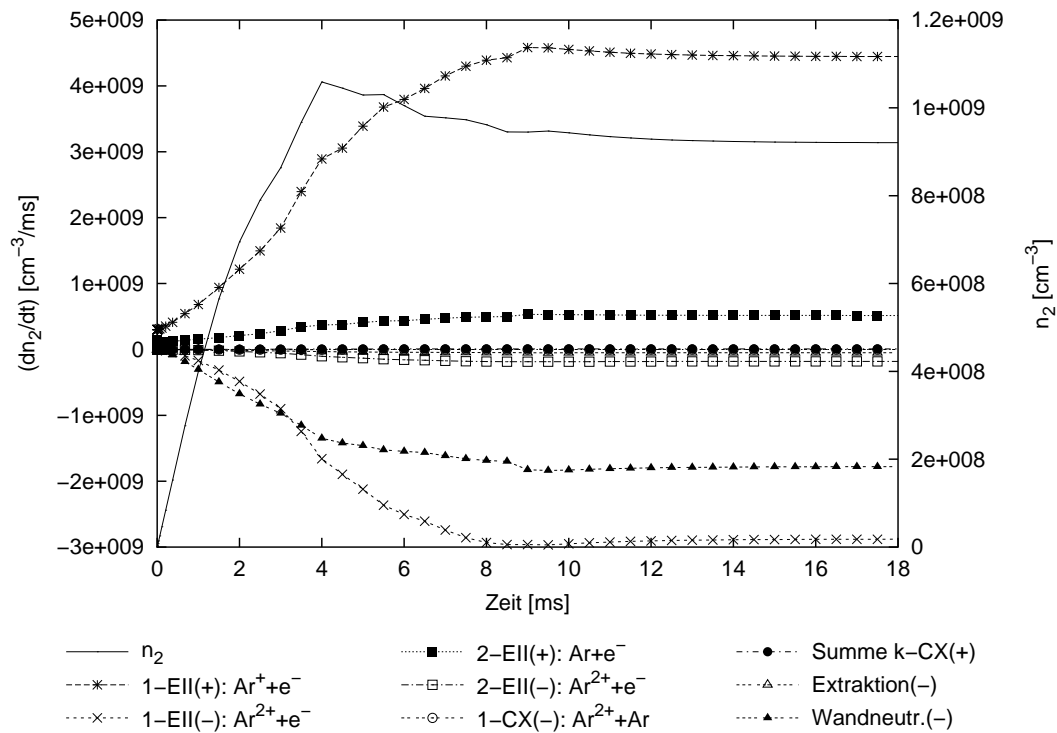


Abbildung 4.17: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte (rechte Ordinate) der Ar^{2+} -Ionen.

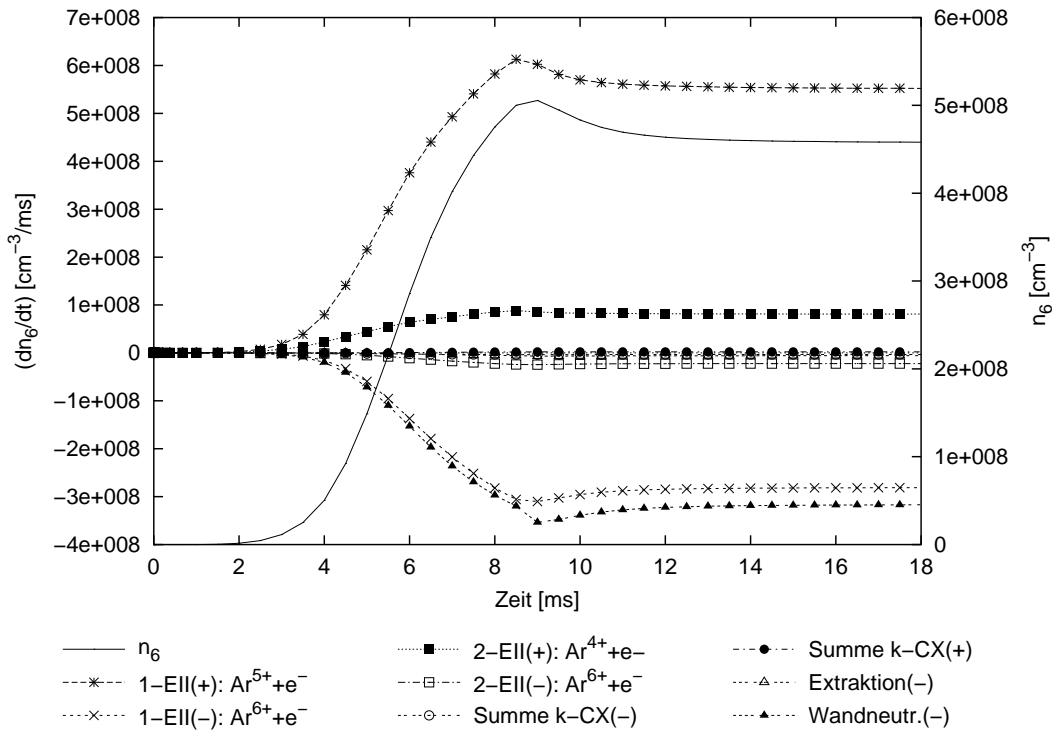


Abbildung 4.18: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte (rechte Ordinate) der Ar^{6+} -Ionen.

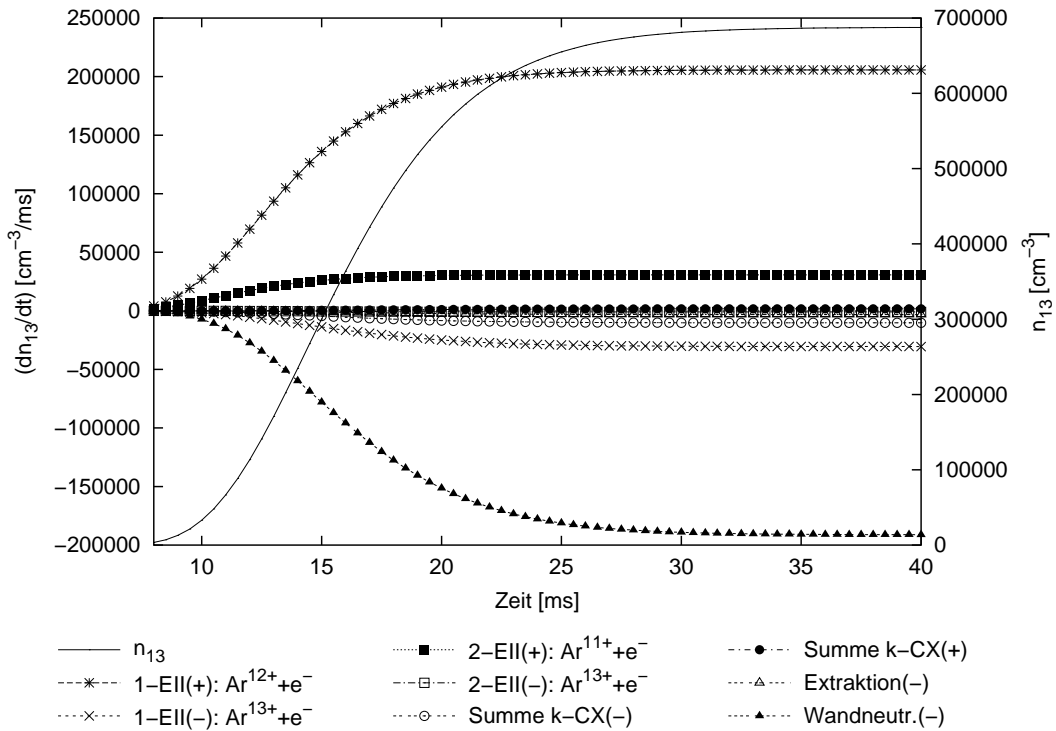


Abbildung 4.19: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte (rechte Ordinate) der Ar^{13+} -Ionen.

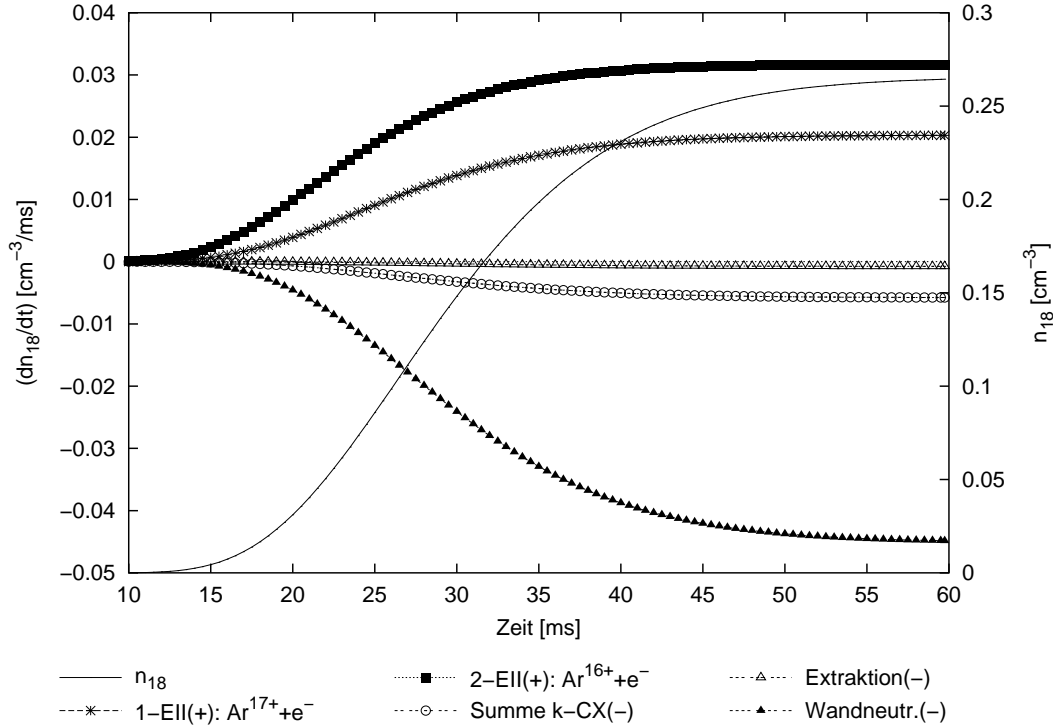


Abbildung 4.20: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten (linke Ordinate) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte (rechte Ordinate) der Ar^{18+} -Ionen.

ähnlich (siehe Abbildungen 4.22a und b), so daß deren Produkt in den EII-Raten

$$R_{\text{Ar}^{z+} \rightarrow \text{Ar}^{(z+k)+}}^{eii} = n_{\text{Ar}^{z+}} \cdot n_{e, \text{hot}} \cdot \langle \sigma_{\text{Ar}^{z+} \rightarrow \text{Ar}^{(z+k)+}}^{eii} \cdot u \rangle \quad (4.6)$$

gemittelt über die Plasmakammer größer als $n_{\text{Ar}^{z+}} \cdot n_{\text{Ar}}$ ist.

Betrachtet man jedoch *ein einzelnes* hochgeladenes Ar-Ion, so wird außerhalb des PKB dessen Wahrscheinlichkeit für CX größer als die für EII (siehe mittlere freie Weglängen in Abbildung 4.33 auf Seite 156).

4.3.1.3 Extrahierte Ströme

In Abbildung 4.21 sind die extrahierten elektrischen Ströme von Ar^+ bis Ar^{11+} zeitabhängig aufgetragen. Dies sind die primären Meßgrößen. Ihre Berechnung ist in Abschnitt 3.7 erklärt.

Die Kurven zeigen qualitativ ähnliche Verläufe wie die entsprechenden Dichteverläufe in Abbildung 4.11 auf Seite 134. Für niedrige z (hier $z \leq 7$) nehmen sie kurz ein Maximum an, um dann auf ihr Gleichgewichtsniveau abzufallen. Für größere z steigen sie erst exponentiell an und nähern sich schließlich asymptotisch ihrem Endwert, der gleichzeitig das Maximum darstellt.

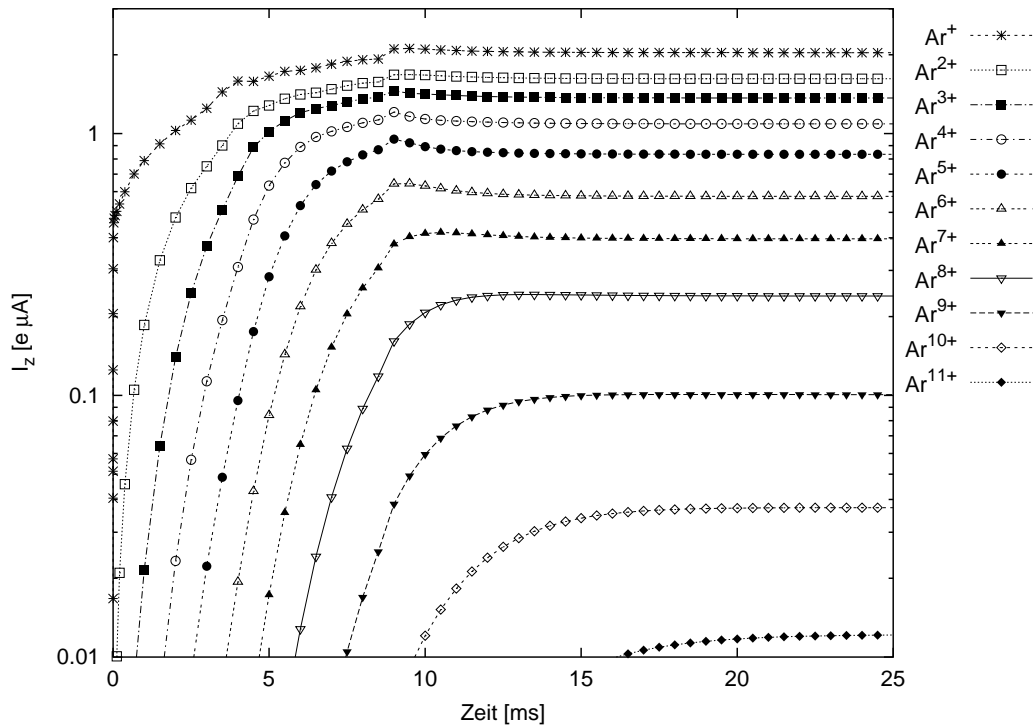


Abbildung 4.21: Zeitliche Entwicklung der extrahierten Ströme (Simulationsparameter siehe Tabelle 4.2 auf Seite 132).

4.3.2 Räumliche Dichteverteilungen

Die 3-dimensionalen räumlichen Verteilungen sind im folgenden wie schon die NT-Dichteprofile in Abschnitt 4.2 jeweils in zwei verschiedenen Darstellungen gezeigt. Zum Verständnis dieser zr - und xy -Plots und vor allem zur Farbkodierung der xy -Plots siehe Anhang D.2.2.

Heiße Elektronen. Die räumliche Verteilung der heißen Elektronen findet sich in den Abbildungen 4.22a und 4.23a. Das Profil – nicht jedoch die Amplitude – dieser Verteilung stammt aus einer Simulation von HEINEN und ist, wie in Kapitel 3.3 erläutert, eine fixe Größe, die der Simulation vorgegeben wird.

Die heißen Elektronen konzentrieren sich auf einen im Vergleich zum Plasmakammervolumen relativ kleinen Bereich um die Zylinderachse. Wenn auch nur schwach, so erkennt man doch die typische Azimutalwinkelabhängigkeit, die durch das Magnetfeld mit dem Hexapol verursacht wird. Das sie nicht stärker ausgeprägt ist, hängt mit den hohen Geschwindigkeiten der heißen Elektronen zusammen, durch welche sie gut eingeschlossen und auf den homogenen Bereich des Magnetfeldes konzentriert sind [Hei02].

Dichte der positiven Ladungen. In den Abbildungen 4.22b und 4.23b ist $n_+ := \sum_z z \cdot n_z$ als Gesamtmaß für die Ionenverteilung gezeigt. Diese ähnelt der

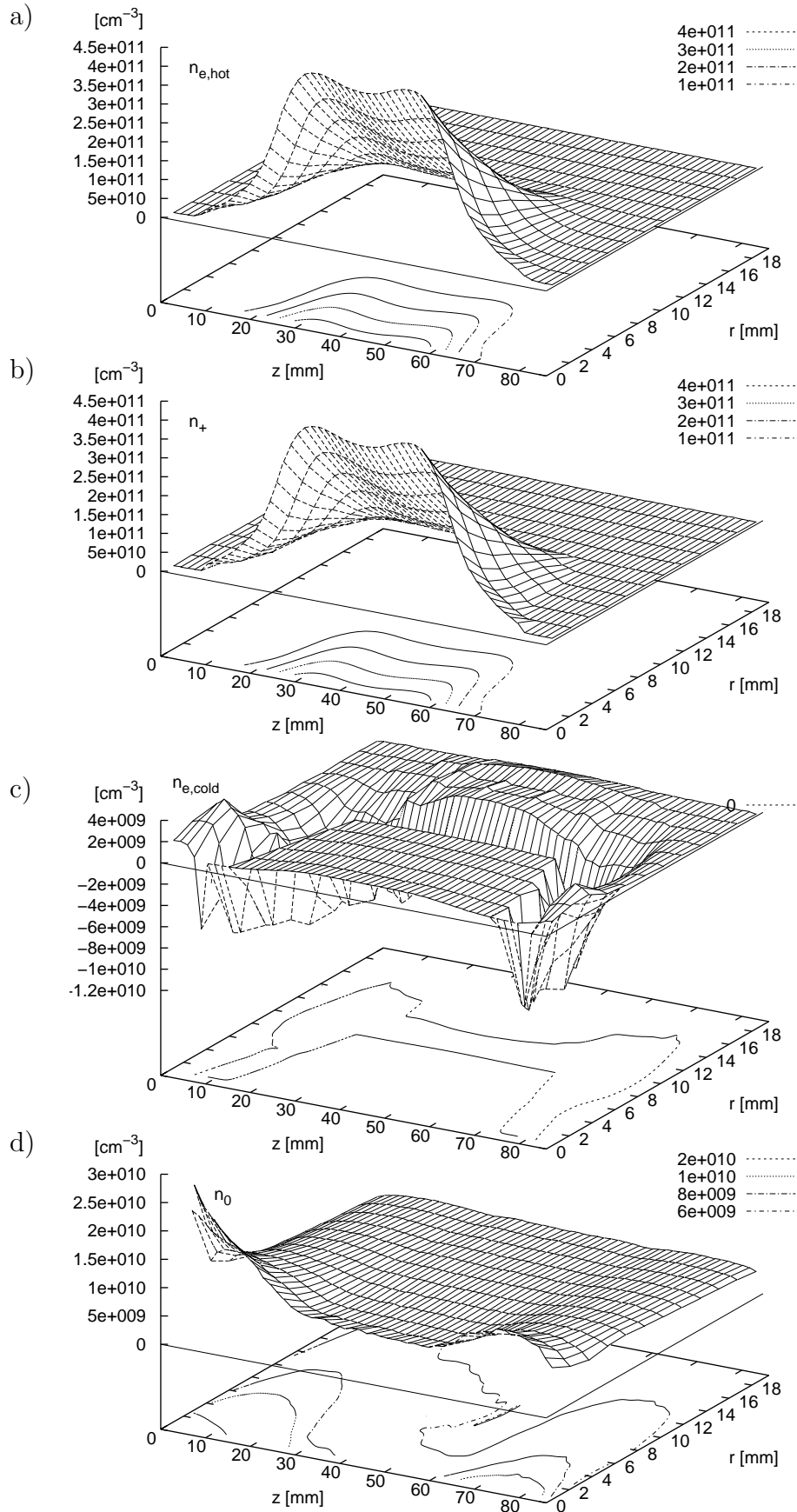


Abbildung 4.22: zr -Plots (siehe Anhang D.2.2) der Dichteverteilungen a) der heißen Elektronen, b) der positiven Ladungsverteilung, c) der kalten Elektronen und d) der neutralen Ar-Atome.

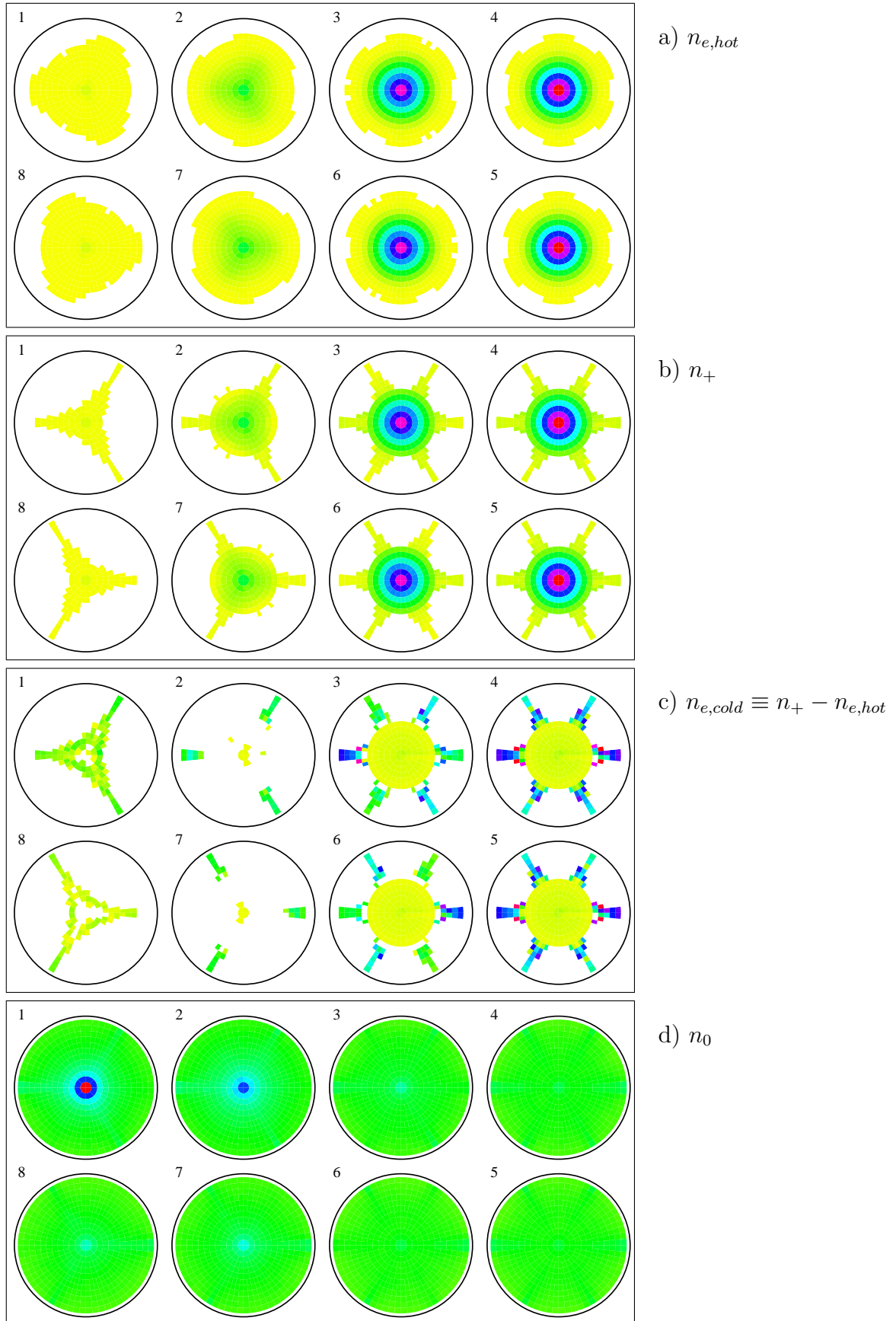


Abbildung 4.23: xy-Plots (siehe Anhang D.2.2) der Dichteverteilungen a) der heißen Elektronen, b) der positiven Ladungsverteilung, c) der kalten Elektronen und d) der neutralen Ar-Atome.

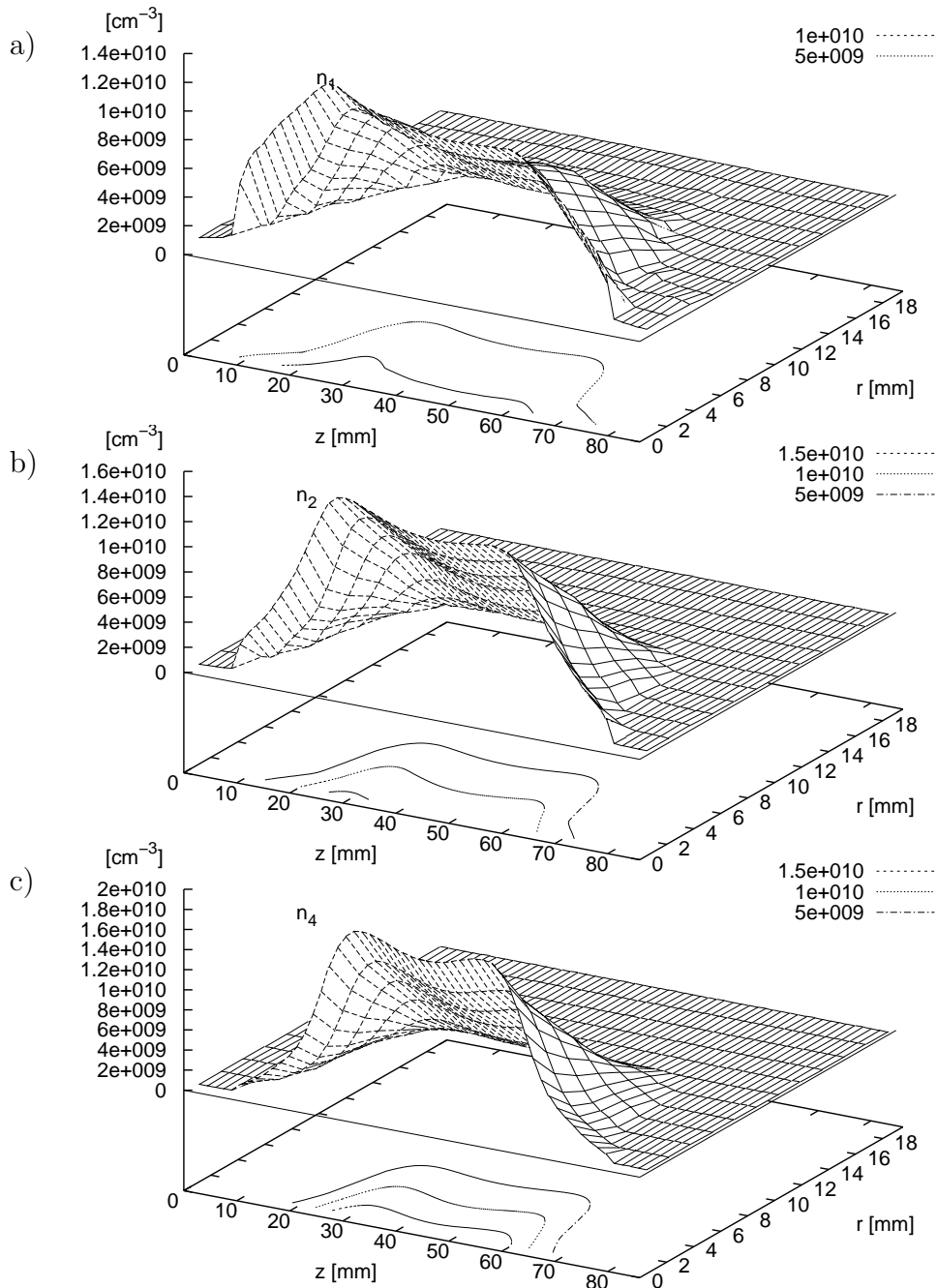


Abbildung 4.24: zr-Plots der Dichteverteilungen von Ar^{1,2,4+}.

der heißen Elektronen, ist aber vor allem axial etwas stärker ausgedehnt. Da die Ionen im Gegensatz zu den heißen Elektronen aber entlang der Feldlinien auch aus dem Plasmakernbereich entkommen, ist hier die Hexapolstruktur stark ausgeprägt.

Kalte Elektronen. Die kalten Elektronen in Abbildung 4.22c und 4.23c folgen nach dem in Kapitel 3.3 vorgestellten Elektronenmodell instantan den Überschüssen positiver Ionenladungen gegenüber denen der heißen Elektronen. Daher müssen sie in der Simulation nicht explizit berücksichtigt werden und ihre Dichte ergibt sich

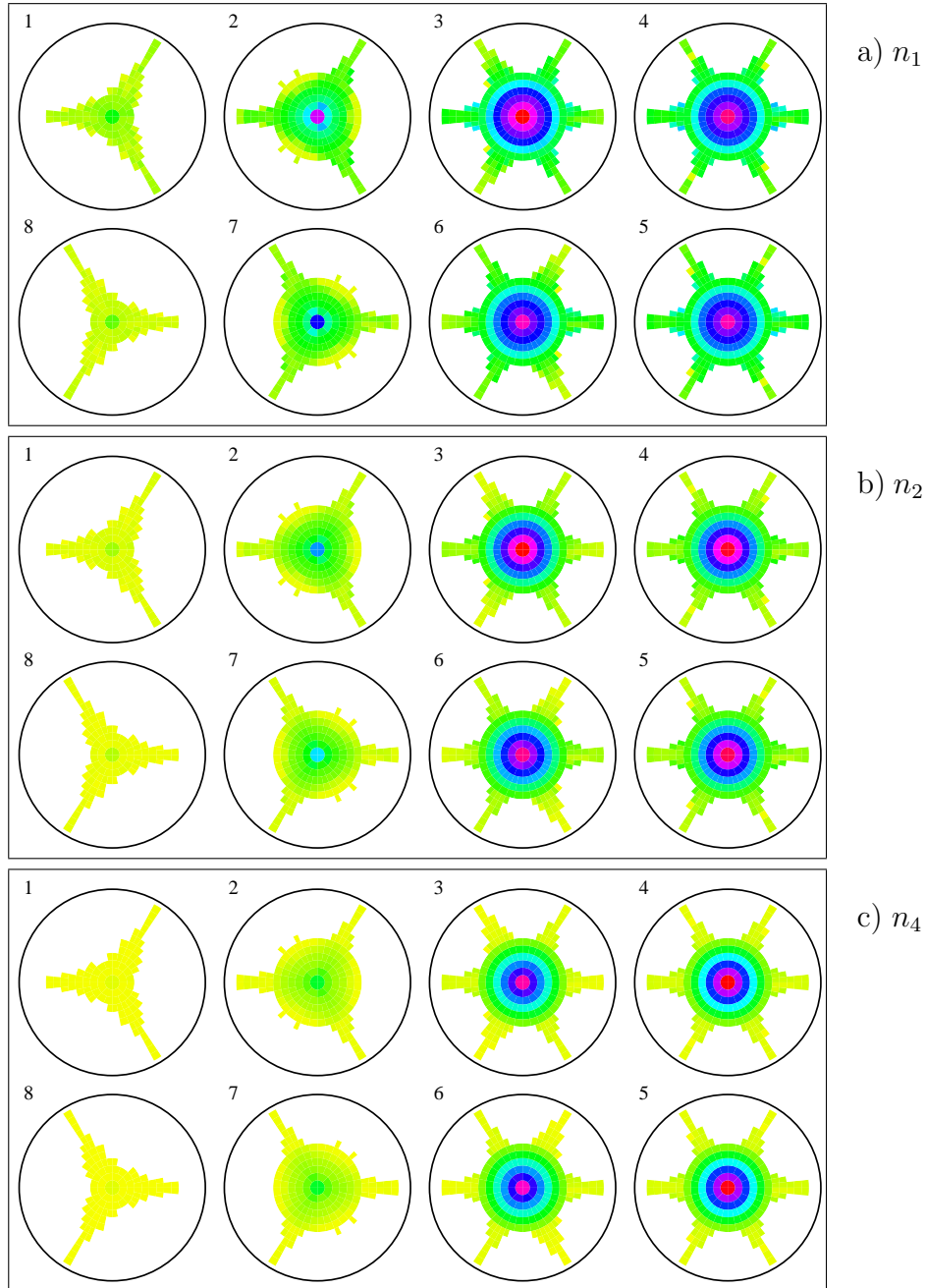


Abbildung 4.25: xy-Plots der Dichteverteilungen von $\text{Ar}^{1,2,4+}$.

als Differenz zwischen n_+ und $n_{e,hot}$:

$$n_{e,cold}(\vec{r}) \equiv n_+(\vec{r}) - n_{e,hot}(\vec{r}) . \quad (4.7)$$

Somit stellen auch die Plots 4.22c und 4.23c die "Differenz" der entsprechenden Plots b) und a) dar! Demnach halten sich die kalten Elektronen hauptsächlich in äußeren Randbereichen auf, sind jedoch zahlenmäßig im Vergleich zu den heißen vor allem im Zentrum nur von geringer Bedeutung.

Man erkennt in Abbildung 4.22c einen geschlossenen Bereich mit $n_{e,cold} < 0$. (Dieser wird von der ($n_{e,cold} = 0$)-Isolinie umfaßt und ähnelt in seiner Form dem

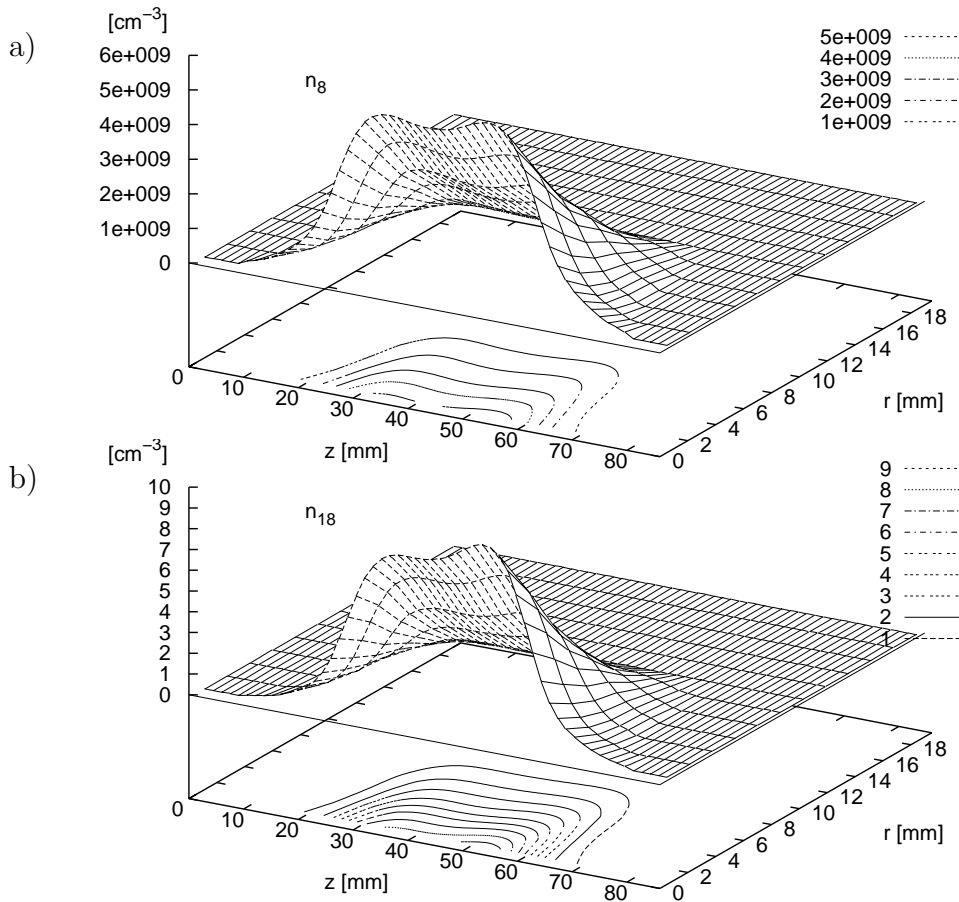


Abbildung 4.26: zr-Plots der Dichteverteilungen von $\text{Ar}^{8,18+}$.

Buchstaben H.) In diesem Bereich ist *numerisch* die Quasineutralität (3.101) verletzt. Dies hängt damit zusammen, daß es sich hier um Bereiche außerhalb des PKBs handelt und für diese in der Simulation die QN nicht überprüft oder gar gewährleistet wird. (Wie in Kapitel 3.6.3 beschrieben, stellen die Ionendichten außerhalb des PKBs immer nur ein Abbild des Zustandes der CSD *im PKB* dar. Aufgrund der dort vergleichsweise kleinen Werte von $n_{e,hot}$ wurde vereinfachend angenommen, daß die QN dort nicht verletzt wird.) Hierbei handelt es sich um eine Schwäche des Modells, die aber als quantitativ vernachlässigbar bewertet wird.

Neutralteilchen. Die resultierende NT-Dichte in den Abbildungen 4.22d und 4.23d zeigt, abgesehen von dem absoluten Maximum (fast $6 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$) vor der Gaseinlaßöffnung bei $z = r = 0$, eine schwächer ausgeprägte Ortsabhängigkeit als alle anderen Dichten. Erwartungsgemäß ist das absolute Minimum im Zentrum im PKB zu finden, wo die Ar-Atome durch die EII und – wenn auch in wesentlich geringerem Maße – durch den CX^{18} abgebaut werden. Der resultierende Dichtegradient wird noch dadurch verstärkt, daß bestimmte Bereiche der Kammerwände aufgrund der dort stattfindenden Neutralisation der Ionen als Neutralteilchenquelle wirken

¹⁸In der Simulation wird der CX bei der Bestimmung der NT-Dichte sogar vernachlässigt (siehe Kapitel 3.4).

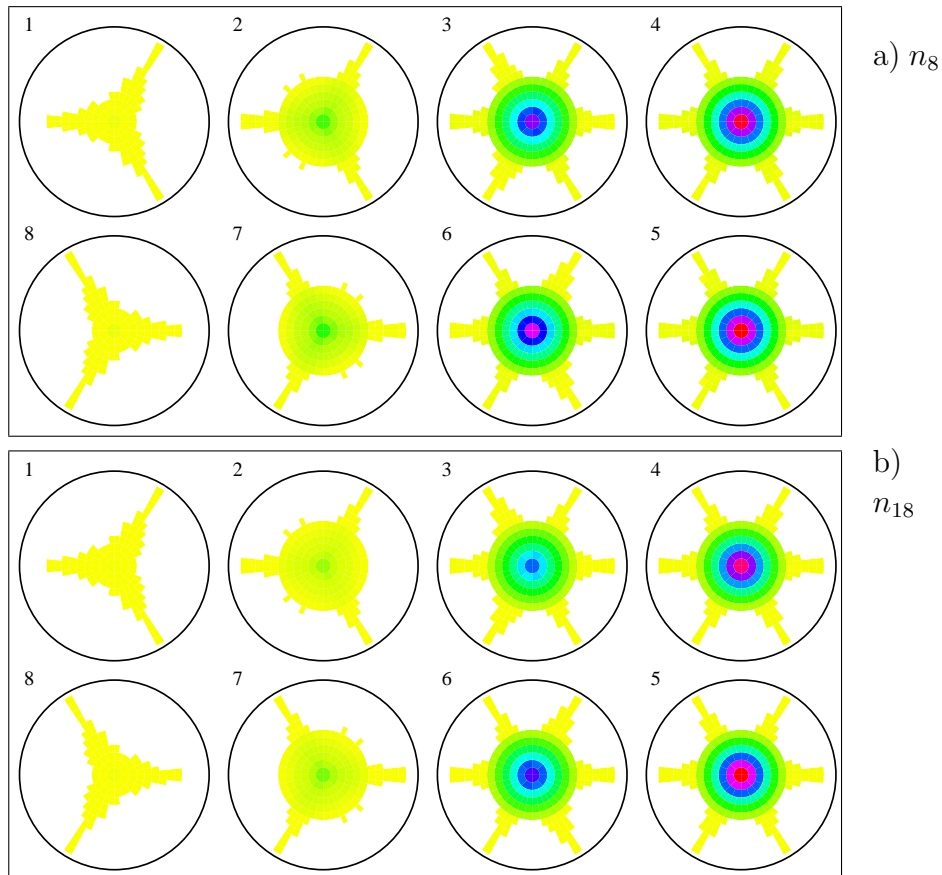


Abbildung 4.27: xy-Plots der Dichteverteilungen von $\text{Ar}^{8,18+}$.

(siehe Kapitel 4.2).

Ar-Ionen. In den Abbildungen 4.24 bis 4.27 mit den räumlichen Verteilungen der Dichten von $\text{Ar}^{1,2,4,8,18+}$ erkennt man die in den Simulationen der ECRIS 3 mit zunehmendem z allgemein zu beobachtende radiale Konzentration der Dichten auf die Zylinderachse. Radial nach außen fällt $n_{e,hot}$ im Vergleich zu den Dichten n_1 bis n_3 schneller ab, so daß die außen liegenden Ionen dort mit deutlich geringeren Raten weiterionisiert werden. Die höher geladenen Ionen werden auch auf der z -Achse immer langsamer weiterionisiert. Ihre Dichten sind, da sie nur durch EII erzeugt werden können, immer stärker an die der heißen Elektronen, aber auch an die des jeweils niedrigeren Ladungszustands gekoppelt.

Die zr -Plots der CSD finden sich für jede Simulation in der Datei '`doc\zr.plt`', die von GNU PLOT (siehe Anhang D.2.2) interpretiert werden kann. Bei den xy -Plots handelt es sich um individuelle POSTSCRIPT-Dateien im Verzeichnis '`doc\xy\`' (siehe Tabelle D.2 auf Seite 241).

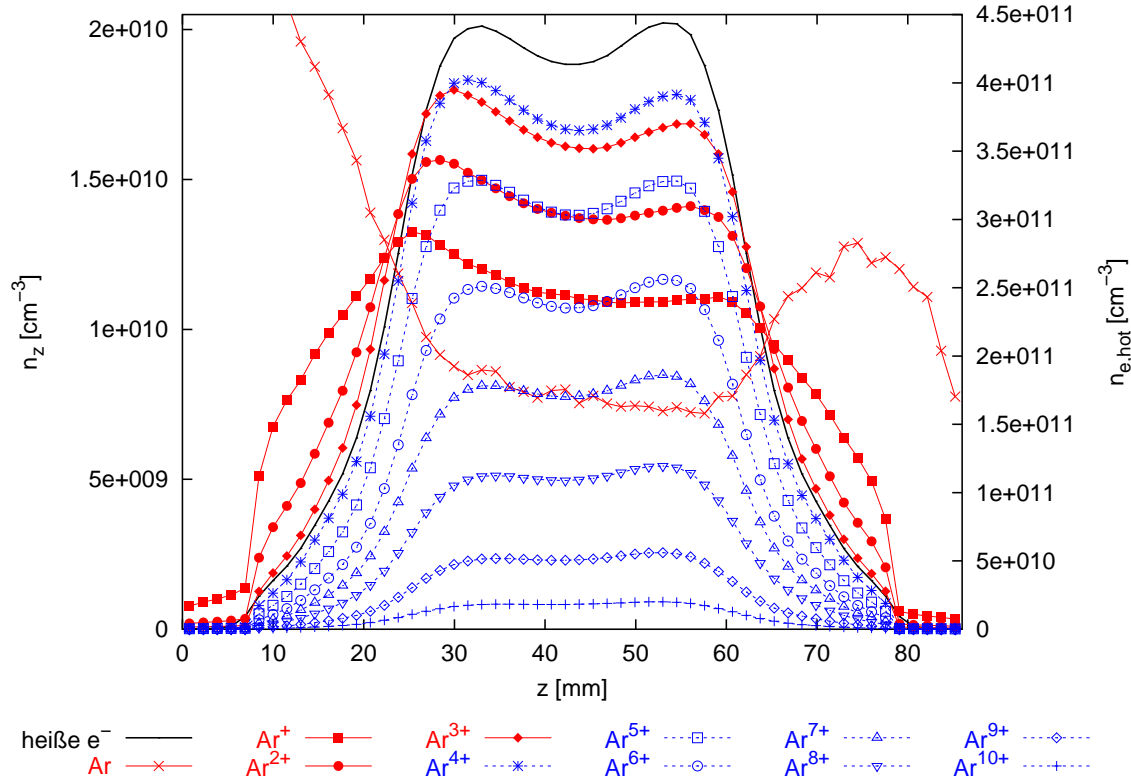


Abbildung 4.28: Verläufe der Dichten der heißen Elektronen (rechte Ordinate) und 0 bis 10-fach geladenen Ar-Spezies (linke Ordinate) auf der z -Achse.

Teilchendichten auf der Zylinderachse.

Zum quantitativen Vergleich der Dichten sind deren Verläufe entlang der z -Achse in Abbildung 4.28 aufgetragen. Hierzu wurden für jeden Koordinatenindex i_z die Werte der $N_{\phi 0}$ Zellen, die an der Achse liegen (radialer Koordinatenindex $i_r = 0$, siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38), zu

$$n_z(i_z) := N_{\phi 0}^{-1} \cdot \sum_{i_{\phi 0}=0}^{N_{\phi 0}-1} n(i_z, 0, i_{\phi 0}) \quad (4.8)$$

zusammengefaßt.

In den Außenbereichen $z \leq 25$ mm und $z \geq 65$ mm fallen die Dichten mit größer werdender Ladung ab. Im Inneren dagegen dominiert Ar^{4+} . Und sowohl in der Ladungszustandsfolge $z_s = 4, 3, \dots, 0$ als auch $z_s = 5, \dots, 18$ nimmt die Dichte wieder ab (vergleiche auch Abbildung 4.30 auf Seite 153 mit den Mittelwerten).

Betrachtet man die beiden lokalen Maxima auf der Symmetrieachse, so beobachtet man, daß für $z \leq 4$ das der Gaseinlaßseite näher gelegene Maximum auch das absolute ist, während für $z \geq 5$ das andere überwiegt. Dies ist *indirekt* Folge der ortsabhängigen Neutralteilchendichte, die auf der Gaseinlaßseite größer ist. Dadurch sind dort auch die EII-Raten der Neutralteilchen sowie der niedrig geladenen Ionen größer, was letztlich zu einer Änderung der ladungsspezifischen, elektrostatischen,

lokalen Einschlußzeit der Ionen und somit zu einer Verschiebung in der CSD führt (siehe Abschnitt 4.5). Der von den Neutralteilchen abhängige CX spielt diesbezüglich praktisch keine Rolle!

4.3.3 Wandauftreffverteilungen der Ionen

Folgt man den Feldlinien, die aus dem PKB herausführen, bis zur Plasmakammerwand, so findet man die Orte, wo auch die Ionen auf die Wand treffen und neutralisieren.

In Abbildung 4.29 sind die Auftreffraten Γ , mit denen die Ar^+ auf die Flächenelemente der Plasmakammerwände treffen, dargestellt. Links ist die Verteilung auf der abgerollten Zylindermantelwand, rechts oben auf der Stirnwand der Extraktionsseite und rechts unten auf der Gaseinlaßseite ist abgebildet; das xy -Koordinatensystem liegt dabei genau wie bei den xy -Plots der räumlichen Verteilungen (siehe Beschreibung auf Seite 243) in der Papierebene.

Auch die Farbkodierung der Auftreffraten erfolgt analog zu den xy -Plots mit der Farbwertfunktion $g(x)$ gem. (D.13), mit $x = \Gamma^{wall} / \Gamma_{max}^{wall}$ und $\epsilon = 0,05$. Dabei werden die Bilder der beiden Stirnflächen mit demselben Maximum $\Gamma_{max}^{wall} = \Gamma_{max, stirn}^{wall}$ erstellt. Die Mantelflächenabbildung muß jedoch aufgrund der im Vergleich zu den Stirnflächen wesentlich kleineren Auftreffraten mit dem eigenen Maximum $\Gamma_{max}^{wall} = \Gamma_{max, mantel}^{wall}$ normiert werden. Ein quantitativer Vergleich zwischen den Auftreffraten auf die Mantelfläche einerseits und auf die Stirnflächen andererseits ist daher anhand dieser Konturplots nicht möglich!

Zur Bestimmung der lokalen Auftreffraten Γ wurden alle Feldlinien bis zur Plasmakammerwand verfolgt, die durch die geometrischen Zentren derjenigen Zellwandflächen laufen, die eine Grenzfläche des PKBs sind. Für jede dieser Grenzflächen folgt

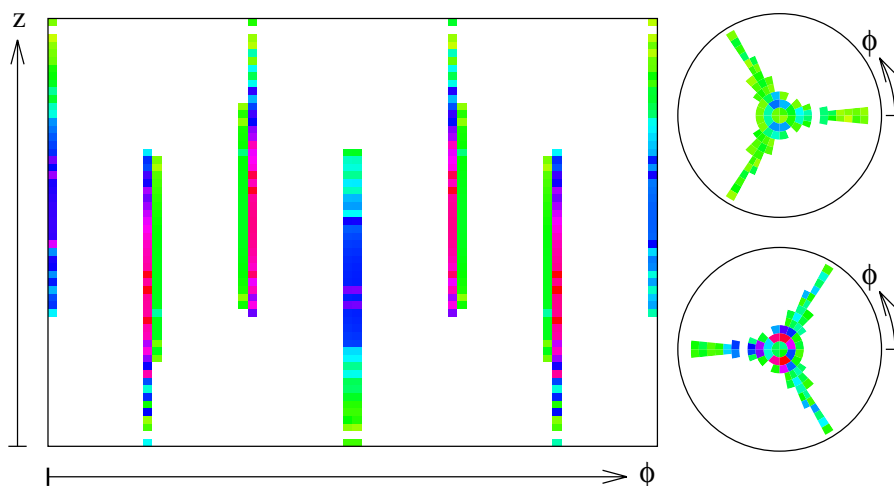


Abbildung 4.29: Wandauftreffverteilungen von Ar^+ . Links die abgerollte Zylindermantelflächen, rechts oben die Stirnfläche der Extraktionsseite und rechts unten die der Gaseinlaßseite. Die Verteilungen der anderen Ionenspezies sind so ähnlich, daß sie hier nicht gezeigt werden.

aus dem Ionentransportmodell im PKB gem. (3.98) die Rate, mit der die Ionen einer bestimmten Spezies durch diese Fläche austreten und mit (2.21) der Anteil $P_{loss}^{mirr}(B, B_{max})$, der davon auf die Wand trifft. (Dabei ist B die Magnetfeldstärke an der Grenzfläche und B_{max} diejenige an der Stelle, an der die betrachtete Feldlinie auf die Plasmakammerwand trifft.) Dieser Teilchenstrom wird dem Flächenelement der Kammerwand zugeordnet, auf das die verfolgte Feldlinie trifft¹⁹.

Auf der Mantelfläche sind deutlich die aus den Experimenten bekannten Wandspuren zu erkennen. Diese sechs Streifen liegen genau unter den Polen des Hexapols (vergleiche Abbildung 2.6 auf Seite 11). Abhängig von der Polarität sind sie abwechselnd leicht zur Extraktions- bzw. Gaseinlaßseite verschoben.

Auf der Mantelfläche sind nur geringe Unterschiede zwischen den verschiedenen Ar-Ionen zu erkennen. Dies beruht darauf, daß es in den azimutalen Abhängigkeiten der Dichteverteilungen keine Unterschiede zwischen den Ionensorten gibt und der stoßfreie Transport entlang der Feldlinien gemäß (2.18) ebenfalls ladungsunabhängig ist. Daß die Maxima der Streifen von Ar^+ zur Gaseinlaßseite verschoben sind, ist Folge der dort erhöhten Teilchendichte (siehe Abbildung 4.24a).

Die Wandauftreffverteilungen werden von CSD.EXE automatisch als POSTSCRIPT-Dateien generiert, die sich im Verzeichnis 'doc\wall_impct' finden (siehe Tabelle D.2 auf Seite 241).

4.3.4 Ladungszustandsverteilungen und extrahierte Ströme

Zur Zusammenfassung der komplexen räumlichen Dichteverteilungen wurden in Abbildung 4.30 (linke Ordinate) von allen Dichteverteilungen jeweils 1. der über die ganze Plasmakammer gemittelte Wert, 2. der über den PKB gemittelte Wert sowie 3. der Maximalwert als Funktion der Teilchenspezies aufgetragen. Zum Vergleich der resultierenden extrahierten elektrischen Ionenströme I_z^{extr} sind diese gegen die rechte Ordinate aufgetragen. Die Abszissenbeschriftungen *hot* und *cold* stehen für die heißen und kalten Elektronen.

Die maximalen extrahierten Ströme liefert in dieser Simulation Ar^+ . Danach fallen die Ströme mit z .

Dies ist damit keine typische Verteilung der ECRIS 3. Wenn diese (unter gleichzeitigem Einsatz von Sauerstoff als Mischgas) für Ar^{8+} optimiert wird, liegt dort allgemein auch das Maximum der Verteilung. Zu dieser Problematik siehe die Diskussion in Abschnitt 4.9.

Ferner sind in Abbildung 4.31 die I_z^{extr} mit den elektrischen Strömen I_z^{neutr} verglichen, die auf die Wände treffen und dort neutralisiert werden. Aufgrund der axialen Symmetrie des Magnetfeldes und der im Vergleich zur Plasmaelektrode kleinen Extraktionsöffnung müssen die I_z^{neutr} immer größer als die I_z^{extr} sein. Dennoch zeigt sich, daß ein beträchtlicher Strom (hauptsächlich radial) an die

¹⁹Dieses Berechnungsverfahren entspricht dem der Bestimmung der extrahierten Ströme, siehe Abschnitt 3.7.

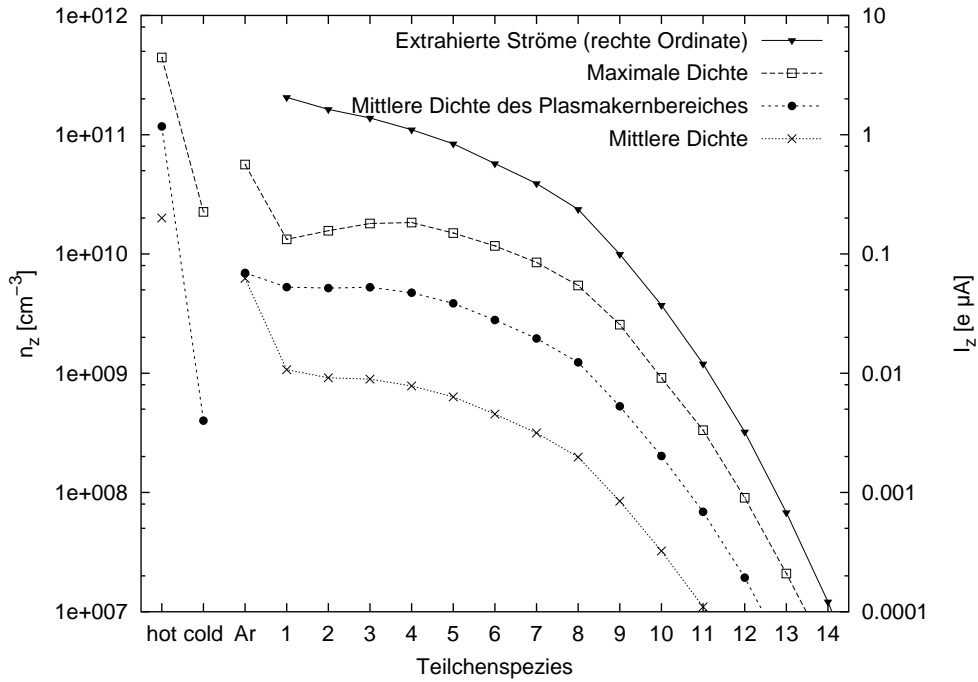


Abbildung 4.30: Teilchensortenspezifische Darstellung der extrahierten elektrischen Ströme (rechte Ordinate), der maximalen Teilchendichten, der mittleren Dichten im PKB sowie der über die gesamte Plasmakammer gemittelten Dichten (jeweils linke Ordinate). Die Abszissenbeschriftungen *hot* und *cold* beziehen sich auf die beiden Elektronenpopulationen.

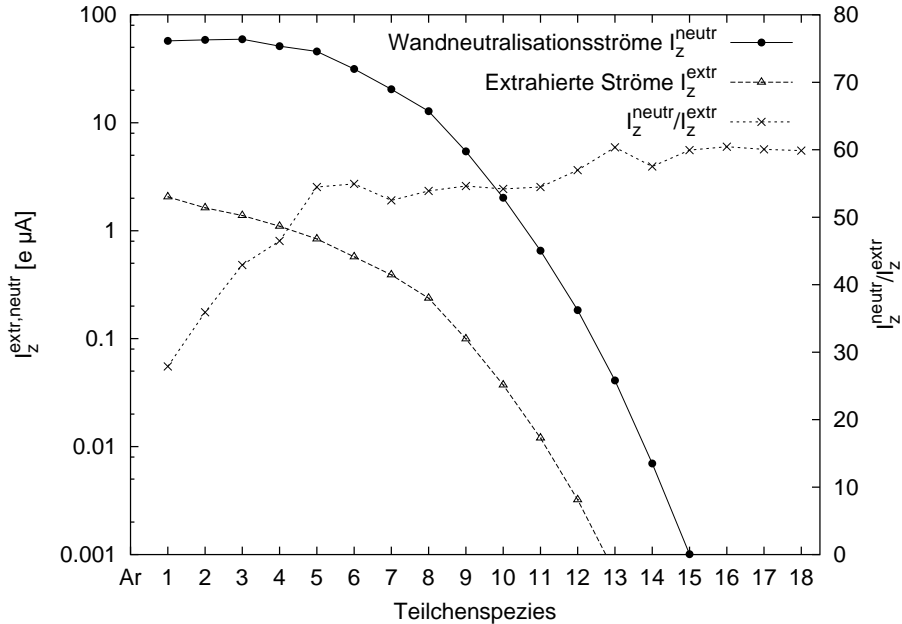


Abbildung 4.31: Vergleich der elektrischen Ströme I_z^{extr} und I_z^{neutr} der Ionen, die die Plasmakammer durch Extraktion verlassen bzw. durch Neutralisation an den Wänden abgebaut werden.

Zylinderwände gelangt. Mit einem stärkeren radialen Einschluß könnten diese Ströme zugunsten der I_z^{extr} reduziert werden. Allerdings hätte dies auch zur Folge, daß die Sekundärelektronenproduktion an der Wand (siehe Abschnitt 3.3.1.1)

reduziert würde. Da diese im Modell noch erfaßt ist, kann der Nettoeffekt eines stärkeren radialen Einschusses auf die I_z^{extr} hier noch nicht abgeschätzt werden.

4.3.5 Einschlußzeiten der Ionen

Die Einschlußzeiten der Ionen sind zum Verständnis der Bedeutung der verschiedenen Prozesse wichtige Größen.

Allgemein lassen sich Verlustprozesse p mit bekannter Verlustrate $(\partial n / \partial t)^{(p)} < 0$ einer Teilchendichte n anhand der über

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)^{(p)} = - \frac{n}{\tau^{(p)}} \quad (4.9)$$

definierten Prozeßzeit $\tau^{(p)}$ charakterisieren.

Die in Abbildung 4.32 dargestellten Einschlußzeiten τ_z^{loss} werden dementsprechend aus der totalen Teilchenauffretrate ϕ_z^{loss} auf die Wandflächen (inklusive Extraktionsöffnung) und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte \bar{n}_z berechnet:

$$\tau_z^{loss} = \frac{\bar{n}_z}{\phi_z^{loss} / V} . \quad (4.10)$$

Dabei stammt ϕ_z^{loss} aus der Summation der Auftreffraten Γ (siehe Abschnitt 4.3.3) der betrachteten Spezies über alle Wandflächenelemente der Plasmakammerwand oder Extraktionsöffnung.

Diese Einschlußzeiten τ_z sind nicht mit den mittleren Aufenthaltszeiten zu verwechseln, die sich ein z -fach geladenes Ion seit seiner ersten Ionisation von 0 nach 1 im Plasma befunden hat, bis es extrahiert wird oder an die Wand läuft! Die Zeit, die sich die z -fach geladenen Ionen im Mittel in den niedrigeren Zuständen befunden haben, spielt bei den τ_z keinerlei Rolle. Die τ_z charakterisieren lediglich den Verlustprozeß und beantworten die Frage, wie lange ein z -fach geladenes Ion *nach seiner Ionisation von $z - k$ nach z* im Mittel eingeschlossen bleibt, wenn es nicht vorher seine Ladung wieder ändert.

Als Maß für die Zeit, die ein anfänglich neutrales Teilchen im Mittel benötigt, bis es z -fach geladen ist, könnte man die Summe der mittleren Ionisationszeiten (siehe Tabelle 4.8 auf Seite 181) heranziehen.

Weitere charakteristische Prozeßzeiten werden in der Datei 'doc\mean.txt' ausgegeben und in Abschnitt 4.6 miteinander verglichen.

4.3.6 Mittlere freie Weglängen entlang der Zylinderachse

Neben den Plots zur zeitlichen Entwicklung der über das Plasmakammervolumen gemittelten Prozeßraten wie in Abschnitt 4.3.1 werden zum quantitativen, orts-abhängigen Vergleich der Bedeutung der verschiedenen atomaren Prozesse für jede schwere Teilchenspezies die Prozeßraten (hier nicht dargestellt) sowie die mittleren

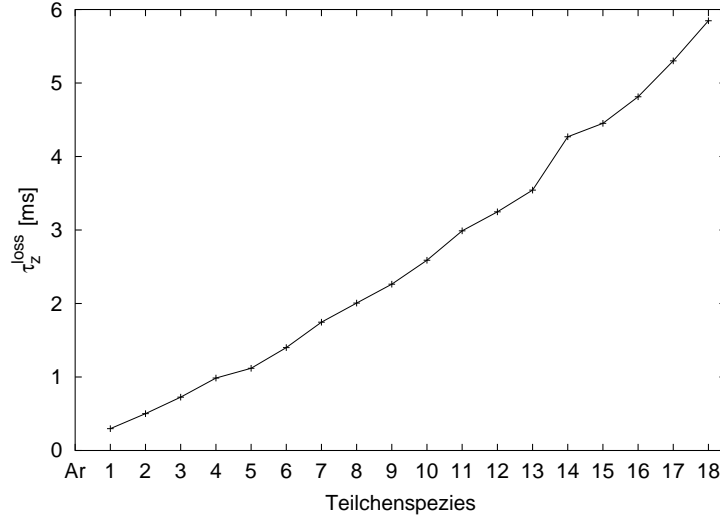


Abbildung 4.32: Einschlußzeiten der Ionen nach (4.10).

freien Weglängen für die Teilchen, die sich in unmittelbarer Nähe der Zylinderachse befinden, aufgezeichnet.

Die mittlere freie Weglänge (MFWL) l_A einer Teilchensorte A für Stöße einer bestimmten Art mit Teilchen der Sorte B berechnet sich allgemein gem. (A.6) und (A.7) aus der mittleren Geschwindigkeit \bar{v}_A und der Stoßrate $f_{A \rightarrow B} = \langle \tau_A \rangle^{-1}$, welche allgemein wiederum aus der Stoßpartnerdichte n_B und dem Ratenkoeffizienten $\langle \sigma \cdot u \rangle$ bestimmt werden kann:

$$l_A = \frac{\bar{v}_A}{f_{A \rightarrow B}} = \frac{\bar{v}_A}{n_B \cdot \langle \sigma \cdot u \rangle}. \quad (4.11)$$

In den folgenden Abbildungen sind der Übersicht halber die Stöße gleichen Typs zusammengefaßt. Dazu werden allgemein die Stoßraten der zusammenzufassenden Stöße aufaddiert und die MFWL mit dieser totalen Stoßrate berechnet.

Für die Neutralteilchen wird die MFWL l^{nn} für elastische Stöße mit anderen Neutralteilchen [in den Plots kurz mit nn-Stöße gekennzeichnet] durch Summation über die Gassorten B gemäß

$$l_A^{nn}(z) = \bar{v}_A \cdot \sum_B [n_B(z) \langle \sigma^{nn} \cdot u \rangle]^{-1} \quad (4.12)$$

berechnet. Als grobe Schätzung für den Stoßquerschnitt wird dazu $\sigma^{nn} = \pi \cdot (2 \text{ a.u.})^2 \approx 3,5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ angesetzt. Die mittlere Relativgeschwindigkeit wird der Einfachheit halber aus den mittleren Relativgeschwindigkeiten \bar{v}_A und \bar{v}_B der beiden Neutralteilchenspezies gemittelt: $\langle u \rangle = (\bar{v}_A + \bar{v}_B)/2$. Damit stellt die so berechnete MFWL $l_A^{nn}(z)$ nur eine ungenaue Abschätzung dar. Da diese Werte aber nicht in die Simulation eingehen und sowieso wesentlich größer als alle anderen MFWL'n sind, wird auf eine genauere Berechnung verzichtet.

Die MFWL l^{eii} von Neutralteilchen und auch Ionen A^{i+} bis zur EII unabhängig von der Ladungszustandsänderung k [in den Plots kurz EII] ergibt sich aus der Summation

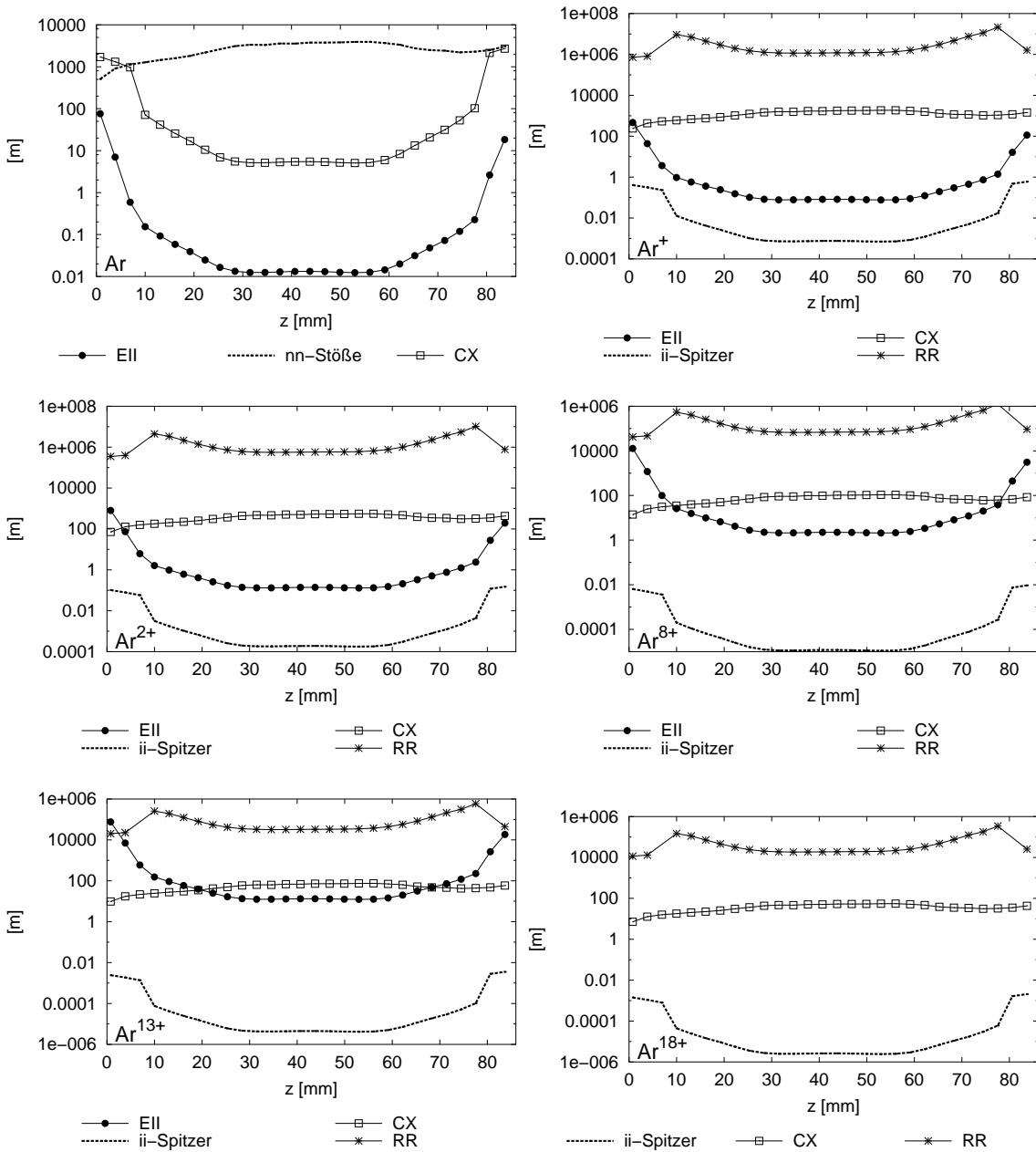


Abbildung 4.33: Mittlere freie Weglängen jeweils einer Teilchensorte pro Plot für die wichtigsten atomaren Stöße entlang der z -Achse, d.h. bei $r \equiv 0$.

aller k -EII-Stoßfrequenzen:

$$l_{A^{i+}}^{eii}(z) = \bar{v}_A \cdot \sum_k [n_{e,hot}(z) \cdot \langle \sigma_{A^{i+} \rightarrow A^{(i+k)+}}^{eii} \cdot u \rangle]^{-1}. \quad (4.13)$$

Ähnlich ergibt sich die MFWL l_A^{cx} von Neutralteilchen A für Stöße mit einem beliebigen Ion B^{i+} , an das das Neutralteilchen beliebig viele Elektronen aus seiner

Hülle durch CX verliert, aus der Summation über alle k-CX-Stoßraten²⁰:

$$l_A^{cx}(z) = \bar{v}_A \cdot \sum_k \sum_B \sum_i \left[n_{B^{i+}}(z) \cdot \left\langle \sigma_{B^{(i-k)+}}^{B^{i+},A} \cdot u \right\rangle \right]^{-1}. \quad (4.14)$$

Die Ionen A^{i+} sind am CX immer als Elektronenempfänger beteiligt. Daher ergeben sich ihre MFWL'n $l_{A^{i+}}^{cx}$ aus der Summation über die verschiedenen Neutralteilchensorten B:

$$l_{A^{i+}}^{cx}(z) = \bar{v}_{A^{i+}} \cdot \sum_k \sum_B \left[n_B(z) \cdot \left\langle \sigma_{A^{(i-k)+}}^{A^{i+},B} \cdot u \right\rangle \right]^{-1}. \quad (4.15)$$

Als Wahrscheinlichkeitsmaß der elastischen Stöße der Ionen einer Sorte A^{i+} mit allen anderen Ionen werden die MFWL'n $l_{A^{i+}}^{ii-Spitzer}$ mittels der ii-Spitzer-Stoßraten aus (2.34) berechnet:

$$l_{A^{i+}}^{ii-Spitzer}(z) = \bar{v}_{A^{i+}} \cdot \sum_B \sum_{j+} \tau_{A^{i+},B^{j+}}^{-1}(z). \quad (4.16)$$

Dabei ist $\tau_{A^{i+},B^{j+}}^{-1}(z)$ nach (2.34)

$$\tau_{A^{i+},B^{j+}}^{-1}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3 \mu (k T_i)^3}} \frac{n_{B^{j+}}(z) i^2 j^2 e^4 \ln \Lambda}{12 \epsilon_0^2}. \quad (4.17)$$

Schließlich wurde für die Ionen auch die strahlende Rekombination [RR] berücksichtigt:

$$l_{A^{i+}}^{rr}(z) = \frac{\bar{v}_{A^{i+}}}{n_{e,cold}(z) \cdot \left\langle \sigma_{i \rightarrow i-1}^{rr} \cdot u \right\rangle}. \quad (4.18)$$

Die Ratenkoeffizienten $\left\langle \sigma_{i \rightarrow i-1}^{rr} \cdot u \right\rangle$ wurden dazu mit der empirischen Formel von MCLAUGHLIN und HAHN (siehe Abschnitt 3.5.2) für $T_e = 1$ eV berechnet.

Die Abbildung 4.33 zeigt die MFWL'n von Ar und $Ar^{1,2,8,13,18+}$ entlang der Zylinderachse. Da die hier dokumentierte Simulation nur mit dem Arbeitsgas Ar lief, vereinfachen sich die Summationen über die Gassorte B in (4.12), (4.14) und (4.15) zu einem einzigen Summanden mit $B = A$ für Ar.

Unter den Ionen nimmt die MFWL für EII mit zunehmender Ladung zu und die Bedeutung somit ab. Daß z.B. Ar^{8+} mit einer EII-MFWL von hier mehreren Metern selbst im PKB noch teilweise ionisiert wird, hängt vor allem damit zusammen, daß diese im PKB aufgrund der hohen Stoßraten (MFWL für ii-Spitzer-Stöße unter 0,1 mm) nur noch einen Random-Walk vollführen und somit ein Teil von ihnen genügend Zeit im PKB verbringt, um doch von einem Elektron getroffen zu werden. Des weiteren wird der Einschluß elektrostatisch erhöht.

Die schon oben mehrfach erläuterte schwache Bedeutung des CX für die CSD zeigt sich auch hier wieder. Zwar wird CX in den Randgebieten, wo die heißen Elektronen

²⁰Bei der Summation muß wieder darauf geachtet werden, daß nicht alle Kombinationen von k , B , und i erlaubt sind (siehe die Bemerkung im Anschluß an (3.70)).

praktisch verschwinden, wichtiger als EII. Absolut sind aber CX-MFWL'n auf der Symmetrieachse von 10 m und mehr eine lange Strecke im Vergleich zu den von den Ionen (vor allem außerhalb des PKB) zurückzulegenden Strecken.

Die strahlende Rekombination hat eine noch marginalere Bedeutung.

4.4 Konvergenztests

Die in der Modellbeschreibung genutzte Vorstellung infinitesimal kleiner Größen kann in der numerischen Integration nur durch möglichst kleine, aber immer endlich große Intervalle genähert werden. Mit immer kleineren Intervallbreiten müssen die Ergebnisse jedoch konvergieren.

In diesem Kapitel werden die Tests zur Konvergenz bzgl. der Zellgrößen und Zeitschrittweite zusammengefaßt.

4.4.1 Verkleinerung der Zeitschrittweite

Zum Konvergenztest für $\Delta t \rightarrow 0$ wurde eine Simulationsserie mit immer kleiner werdendem Parameter `csd.t_step` durchgeführt. Die anderen Simulationsparameter unterscheiden sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 nur geringfügig durch die in Tabelle 4.3 aufgeführten.

Simulationstechnische Parameter	
<code>csd.t_step</code>	in Schritten von 10^{-6} s bis 10^{-8} s
Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd.n_eHot_mean_max</code>	$2.5 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	$2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.ions_temp_eV</code>	0.4 eV

Tabelle 4.3: Simulationsparameter, in denen sich die in diesem Abschnitt dokumentierte Simulationsreihe von der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 (siehe Tabelle 4.2 auf Seite 132) unterscheidet.

Beginnend mit $\Delta t = 10^{-6}$ s wurde bis zum Erreichen des Konvergenzkriteriums von $0,1\% \text{ ms}^{-1}$ (Simulationsparameter `csd.maxRelChange_per_ms`) gerechnet. Daraufhin wurde `csd.t_step` halbiert, während alle anderen Simulationsparameter unverändert blieben, und mit dem vorigen Endergebnis weitergerechnet, bis erneut das Konvergenzkriterium erreicht war. Dies wurde bis zu $\Delta t = 10^{-8}$ s mit den in Tabelle 4.4 aufgeführten Werten für Δt wiederholt.

Exemplarisch ist in Abbildung 4.34 die so simulierte zeitliche Entwicklung der über die Plasmakammer gemittelten Dichte \bar{n}_6 von Ar^{6+} dargestellt. Nach jeder Verkleinerung von Δt fällt \bar{n}_6 etwas ab; die Änderungen werden jedoch von Mal zu Mal kleiner. Daß \bar{n}_6 dabei *absinkt*, hängt mit dem in Anhang D.1.4 erläuterten "Trick" in der Berechnung der Transport-Verluste pro Zeiteinheit zusammen. Durch diesen wird die Transport-Verlustrate für große Δt effektiv unterschätzt (siehe

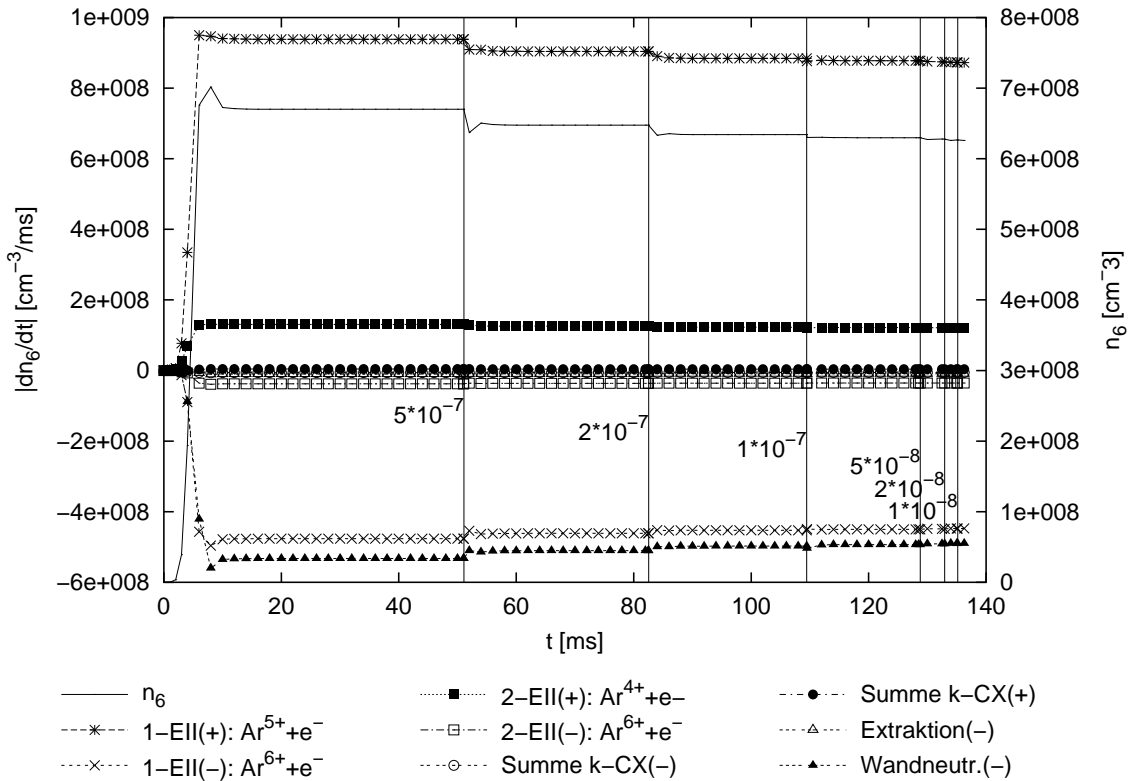


Abbildung 4.34: Zeitliche Entwicklung der Prozeßraten und der über die Plasmakammer gemittelten Dichte von Ar^{6+} (vgl. mit Abbildung 4.18 auf Seite 141, zur Erläuterung der Daten siehe Abschnitt 4.3.1.2). Zu den markierten Zeiten wurde die Zeitschrittweite Δt der Integration verkleinert (siehe Tabelle 4.4).

Abbildung D.3 auf Seite 238), so daß sie bei kleiner werdendem Δt ansteigt. Wie \bar{n}_6 verhalten sich qualitativ auch fast alle anderen Ionenspezies, einzige

Δt [s]	$1 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-8}$
ab t [ms]	0	51,08	82,54	109,46	128,78	132,94	135,16
Dauer [ms]	51,08	31,46	26,92	19,32	4,16	2,22	1,11
Ar^+ : I [e μA]	2,5860	2,6593	2,7029	2,7174	2,7253	2,7309	2,7329
ΔI [%]		2,83	1,64	0,54	0,29	0,21	0,07
Ar^{8+} : I [e μA]	0,4153	0,4038	0,3972	0,3951	0,3938	0,3930	0,3930
ΔI [%]		-2,78	-1,63	-0,52	-0,33	-0,21	-0,02
Ar^{13+} : I [e μA]	0,00104	0,00107	0,00108	0,00109	0,00108	0,00108	0,00108
ΔI [%]		2,74	1,62	0,47	-0,36	-0,12	0,00

Tabelle 4.4: Daten der Simulationsserie zum Konvergenztest für $\Delta t \rightarrow 0$. Als Beispielwerte sind die extrahierten elektrischen Ströme von $\text{Ar}^{1,8,13,+}$ aufgeführt. Mit ΔI ist jeweils die relative Änderung von I in Bezug zur vorherigen Simulation mit nächst größerem Δt gemeint.

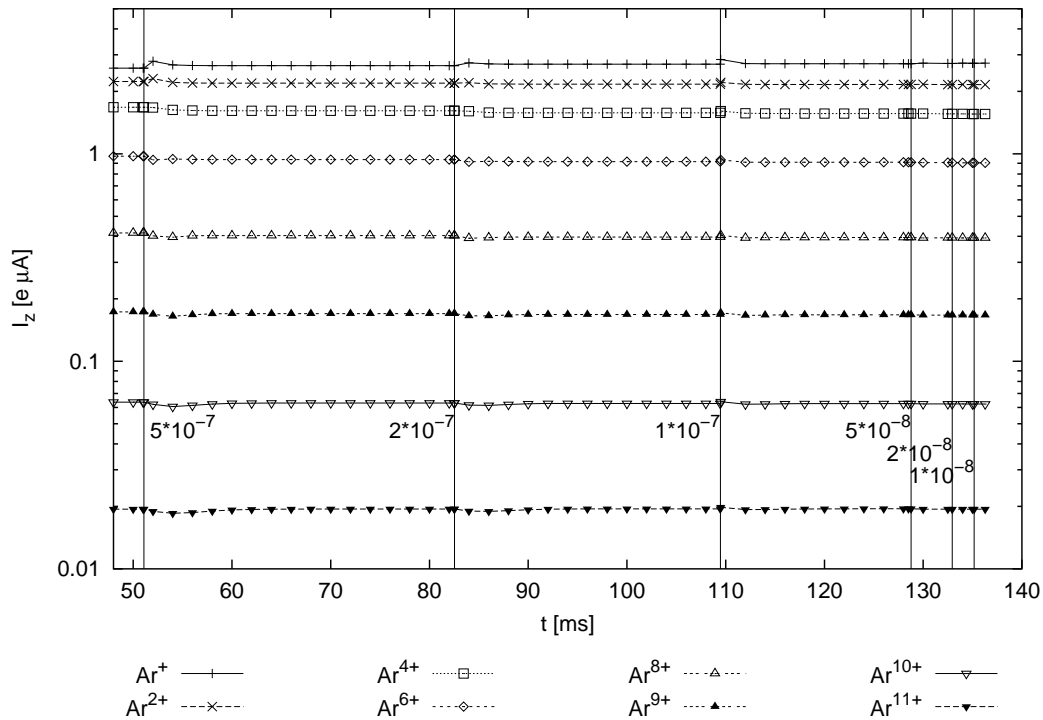


Abbildung 4.35: Konvergenz der extrahierten Ströme I_z bei Verkleinerung der Integrationszeit-schrittweite Δt .

Ausnahmen ist²¹ Ar^+ (siehe Abbildung 4.35).

Ein entsprechendes Verhalten zeigen auch die extrahierten Ströme (siehe Abbildung 4.35), so daß sich empirisch die Konvergenz der CSD für $\Delta t \rightarrow 0$ feststellen läßt.

Wie in Anhang D.1.4 erläutert, wurden die meisten der Simulationen tatsächlich in der hier dargestellten Weise durchgeführt, um möglichst schnell das Ergebnis im dynamischen Gleichgewicht zu bekommen. Im allgemeinen wurden die Simulationsreihen dann nach Konvergenz mit $\Delta t = 5 \cdot 10^{-8}$ s beendet.

4.4.2 Verkleinerung der Zellen

Zur Demonstration des Konvergenzverhaltens der Simulation bei Verkleinerung der Zellen werden hier vier Simulationen mit verschiedenen Zellstrukturen (siehe Tabelle 4.6) vorgestellt. Bis auf eine 30% größere Gaszufuhr und die Ionentemperatur von 1 eV gleichen die Simulationsparameter (siehe Tabelle 4.5) denen der Beispielsimulation aus Kapitel 4.3.

²¹Ursache für den kurzzeitigen Anstieg bei Ar^+ ist die starke Abhängigkeit von neutralem Ar, dessen Dichte durch die kurzzeitig anwachsende Neutralisation der Ionen an den Wänden ebenfalls in kurzer Zeit ansteigt.

Profil der heißen Elektronen

In den Abbildungen 4.36 und 4.37 sind die zr - und xy -Plots (siehe Anhang D.2.3) der Dichteverteilungen der heißen Elektronen in den verwendeten Plasmakammeraufteilungen gezeigt, die ja den jeweiligen Input der Simulation darstellen. Abbildung 4.43 oben links auf Seite 169 zeigt die entsprechenden Dichteverläufe entlang der z -Achse.

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd_init.ElectronDensityDistribFile</code>	<code>ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_005859.asc , ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_012255.asc , ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_028448.asc oder ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_098814.asc</code>
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	$2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.ions_temp_eV</code>	1 eV

Tabelle 4.5: Parameter der Simulationsreihe zur Konvergenz bei kleiner werdenden Zellen, die sich von der Beispielsimulation aus Kapitel 4.3 (siehe Tabelle 4.2 auf Seite 132) unterscheidet.

	N_{cell}	N_z, N_r	$N_{\phi 0}, N_{\phi 1}, \dots, N_{\phi(N_r-1)}$	$\sum_i N_{\phi_i}$	Speicherbedarf (s.u.)	$\Delta z, \Delta r$ [mm]	Δ_3 : Min, Mean, Max [mm]
s	5859	31, 08	3, 6, 12, 24, 24, 24, 48, 48	189	46 kB	2.775, 2.438	2.07, 2.95, 3.83
m	12255	43, 10	3, 6, 12, 24, 24, 24, 48, 48, 48, 48	285	95 kB	2.0, 1.95	1.66, 2.20, 3.01
l	28448	56, 12	4, 8, 16, 32, 32, 32, 64, 64, 64, 64, 64, 64	508	223 kB	1.536, 1.625	1.04, 1.37, 1.91
xl	98814	86, 20	3, 6, 12, 24, 24, 24, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96	1149	772 kB	1.0, 0.975	0.79, 1.09, 1.53
xxl	759036	172, 39	3, 6, 12, 24, 24, 24, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 96, 192, ...	4413	5.8 MB	0.5, 0.5	0.40, 0.54, 0.77

Tabelle 4.6: Übersicht der untersuchten Plasmakammeraufteilungen s bis xl . In der Aufteilung xxl liegen nur die originalen Dichteprofile der heißen Elektronen aus HEINENS Simulationen vor. Simulationen sind mit ihr wegen des enormen Speicherbedarfs nicht mehr möglich. N_{cell} : Gesamtzahl der Zellen. N_z, N_r : Zahl der Plasmakammerunterteilungen in axialer und radialer Richtung (siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38). N_{ϕ_i} : Zahl der Unterteilungen des i -ten Ringes in azimuthaler Richtung. $\Delta z, \Delta r$: Ausdehnung aller Zellen in axialer und radialer Richtung. Δ_3 : Längenmaß für die Ausdehnung der Zellen in azimuthaler Richtung, siehe (4.19). Der angegebene Speicherbedarf gilt für eine Struktur, die pro Zelle genau eine Variable vom Typ *double* (8 Byte) speichert. Der dazu ebenfalls benötigte Speicher zur Datenorganisation ist noch nicht eingerechnet. Allein für die Variablen mit den Dichtewerten sind bei einer Ar-Simulation 20 derartige Datenstrukturen erforderlich.

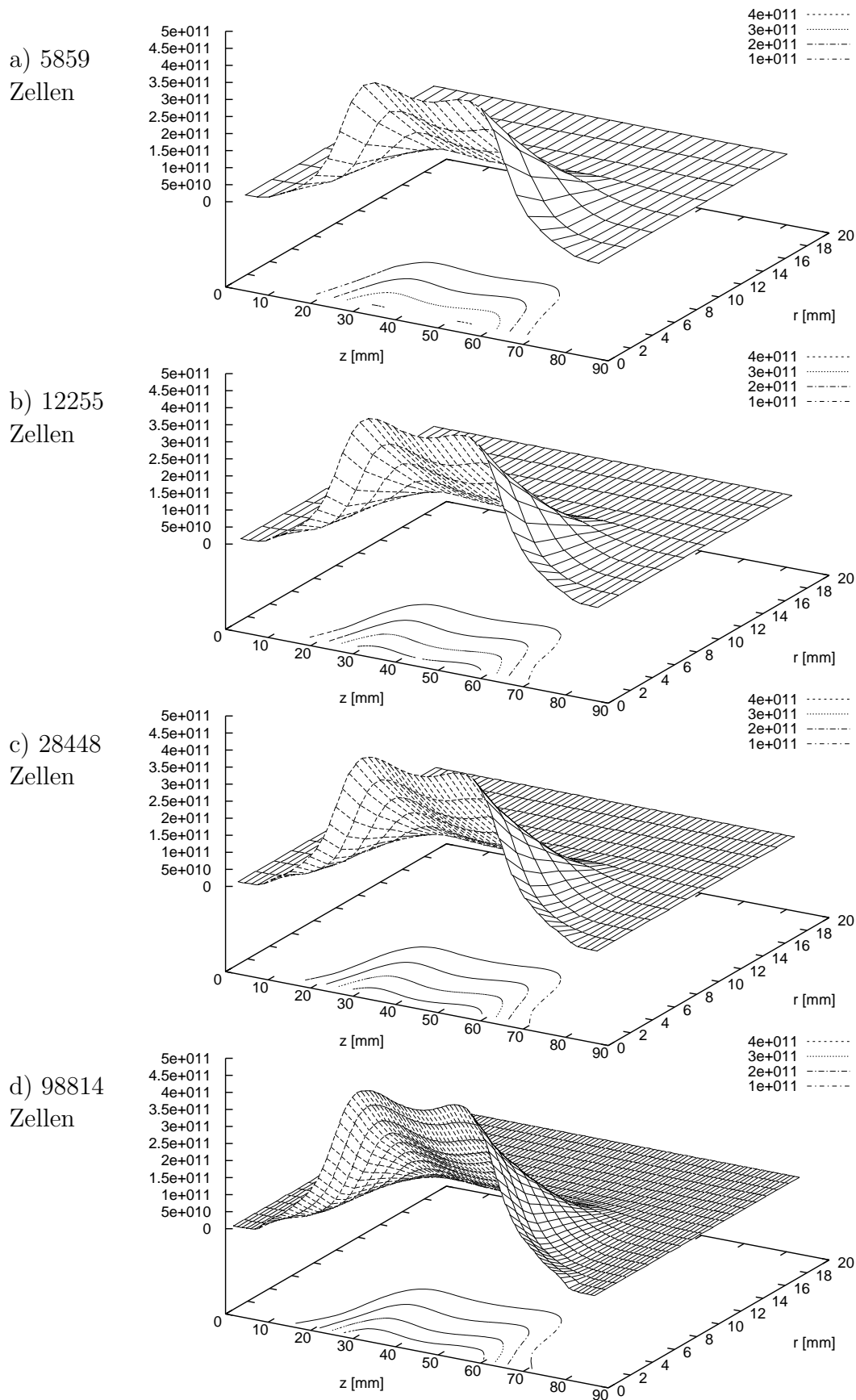


Abbildung 4.36: zr -Plots der Dichteverteilungen der heißen Elektronen bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen. Die Ordinaten messen in cm^{-3} .

Heiße Elektronen

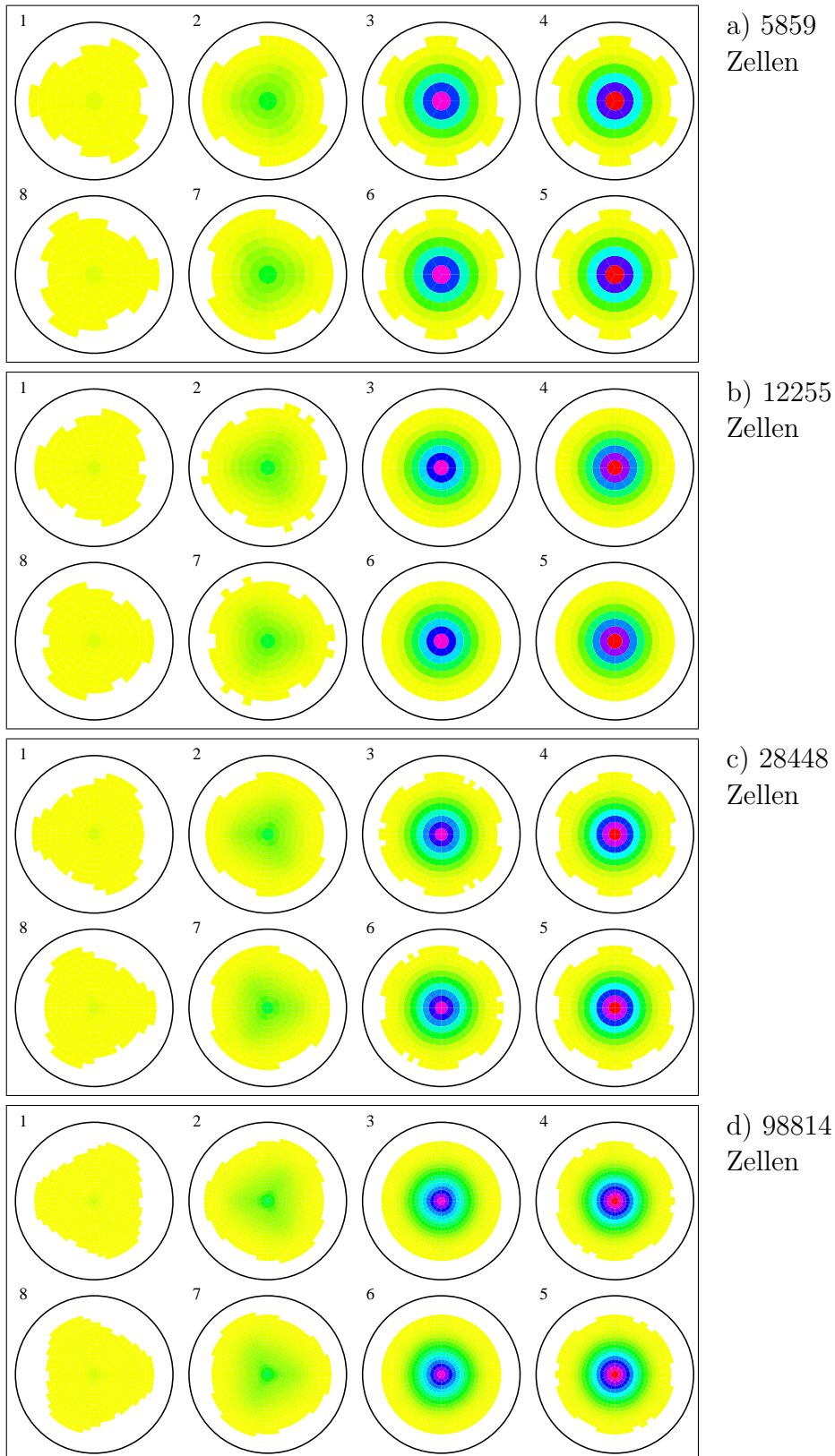


Abbildung 4.37: xy-Plots der Dichteverteilung der heißen Elektronen bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen.

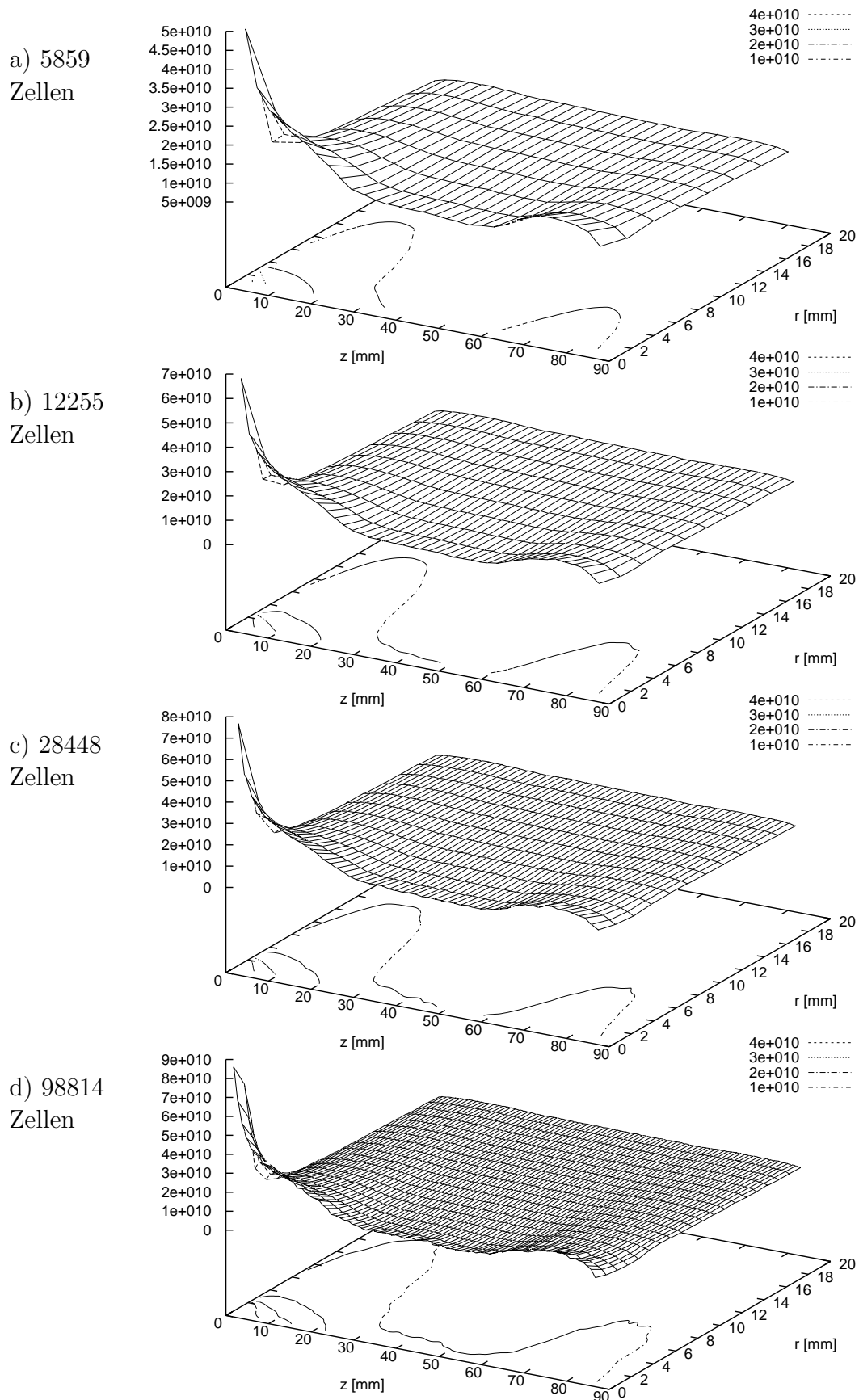


Abbildung 4.38: z - r -Plots der Dichteverteilungen der Ar bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen. Die Ordinaten messen in cm^{-3} .

Ar

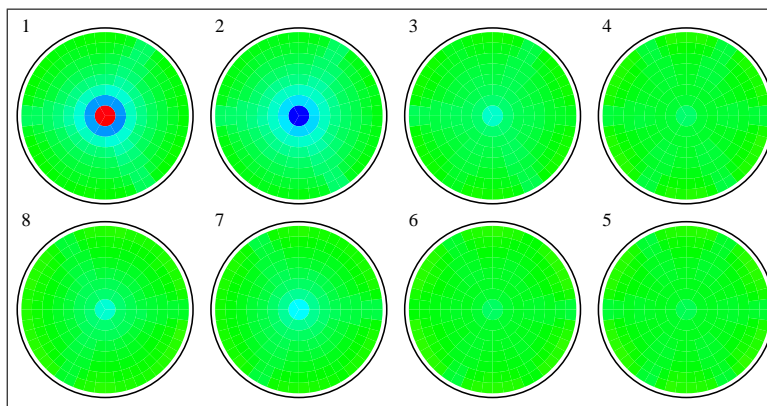
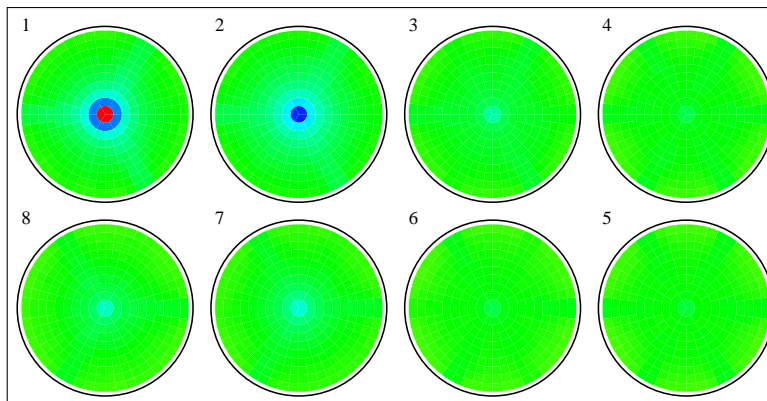
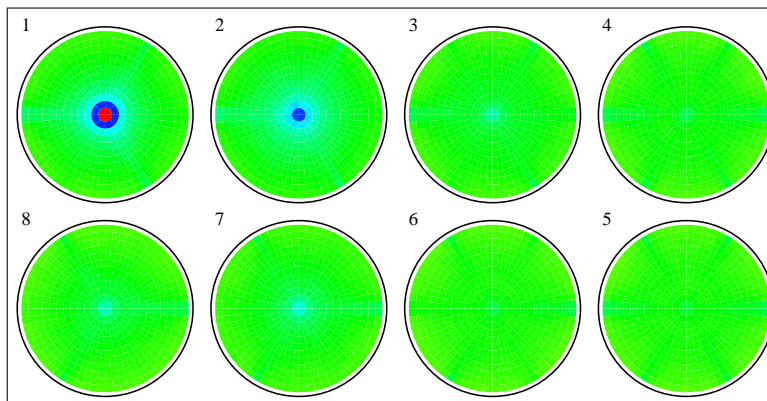
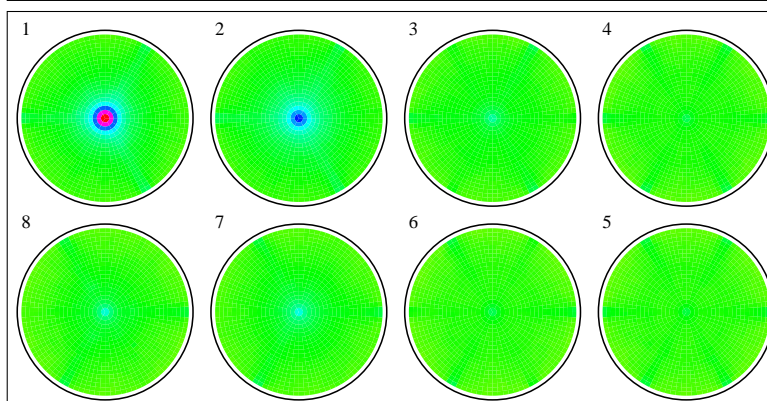
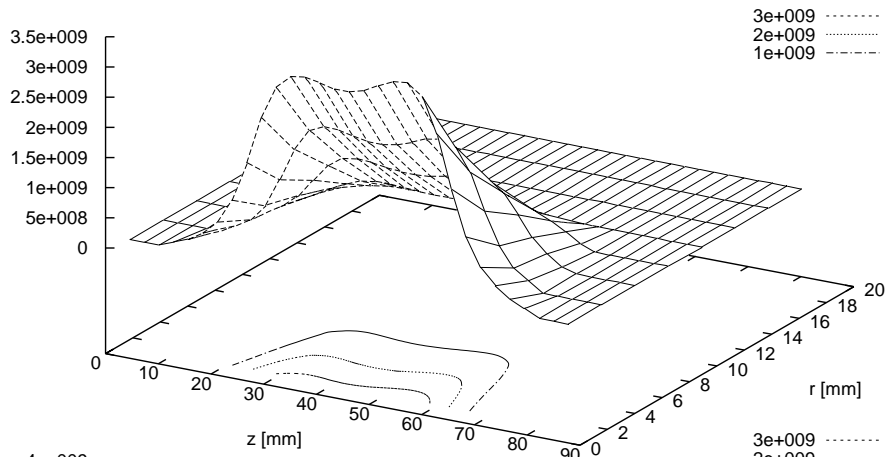
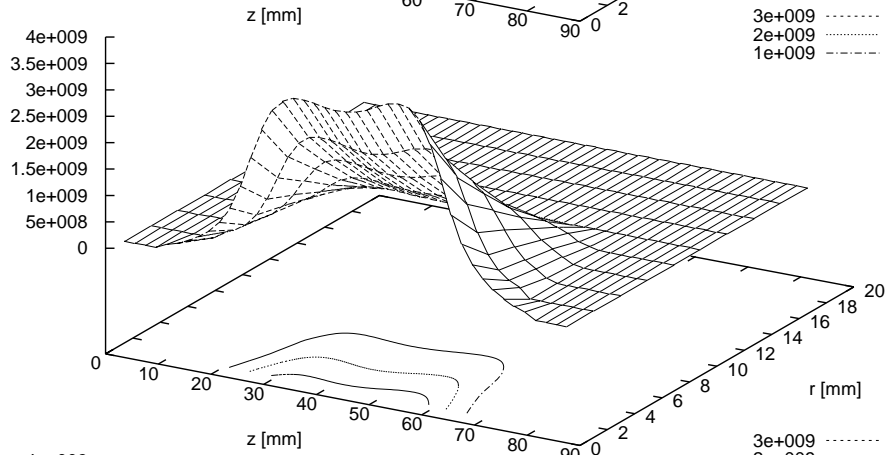
a) 5859
Zellenb) 12255
Zellenc) 28448
Zellend) 98814
Zellen

Abbildung 4.39: xy-Plots der Dichteverteilung der Ar bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen.

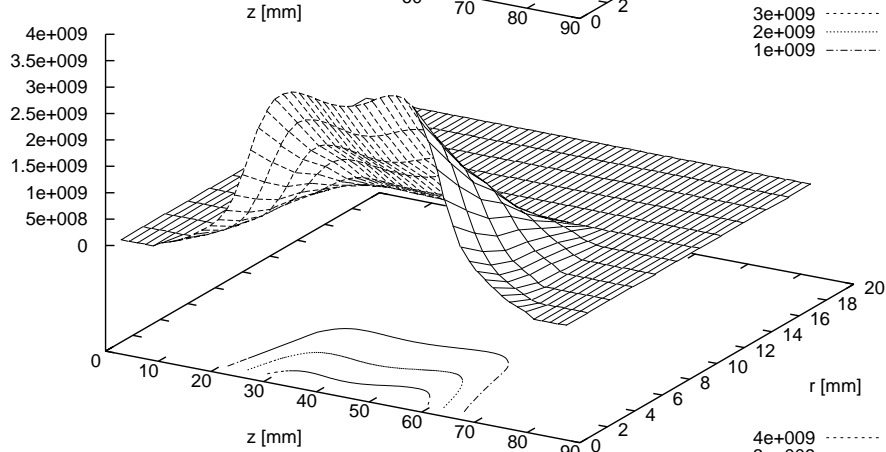
a) 5859
Zellen



b) 12255
Zellen



c) 28448
Zellen



d) 98814
Zellen

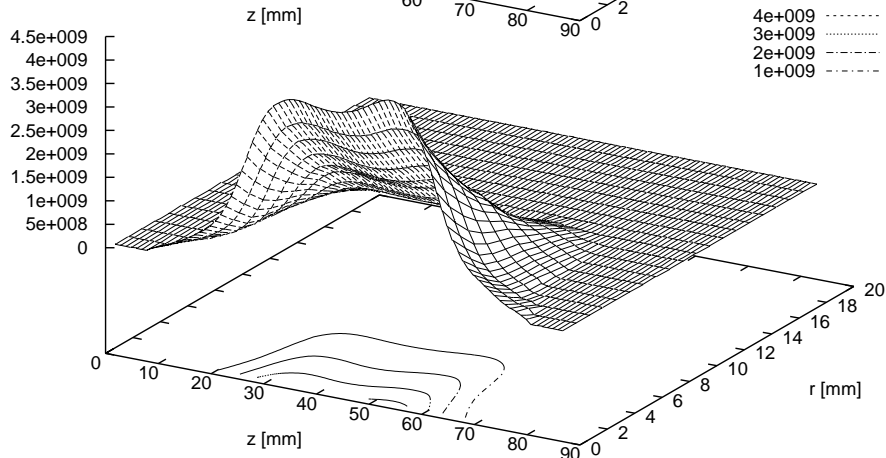


Abbildung 4.40: zr-Plots der Dichteverteilungen der Ar^{8+} bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen. Die Ordinaten messen in cm^{-3} .

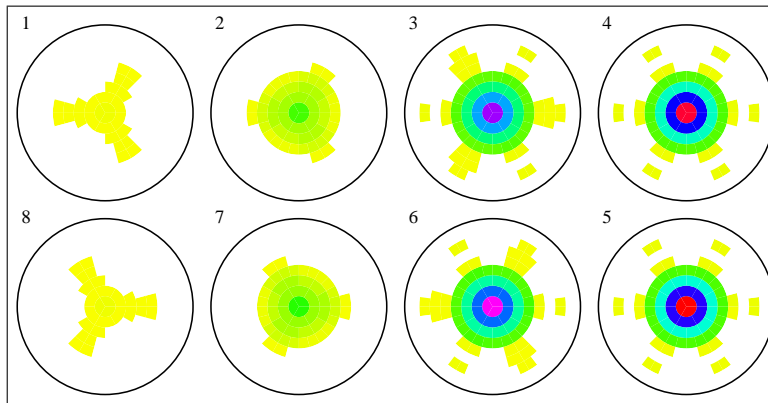
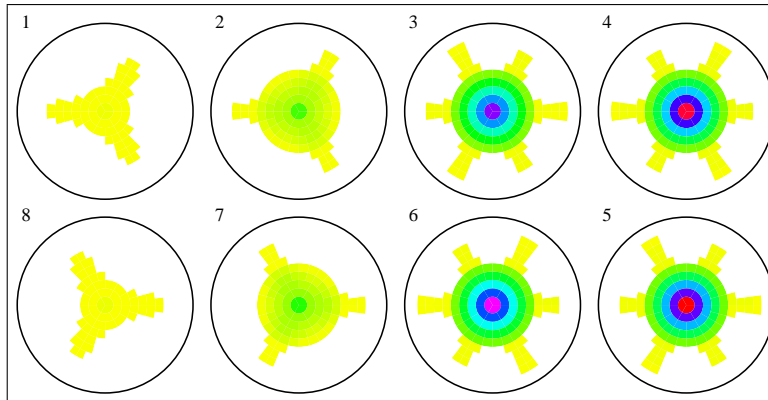
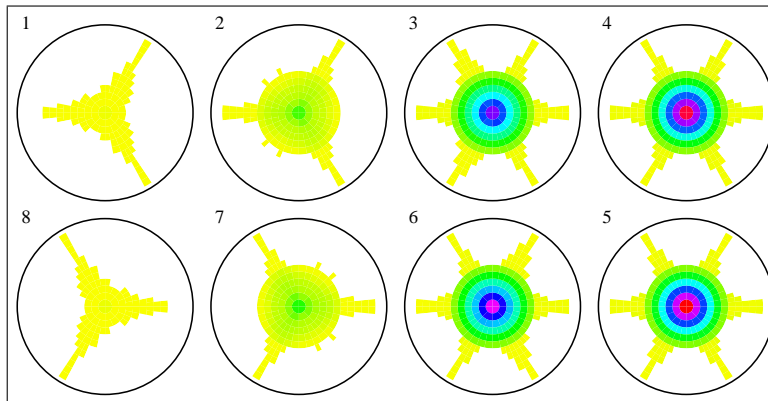
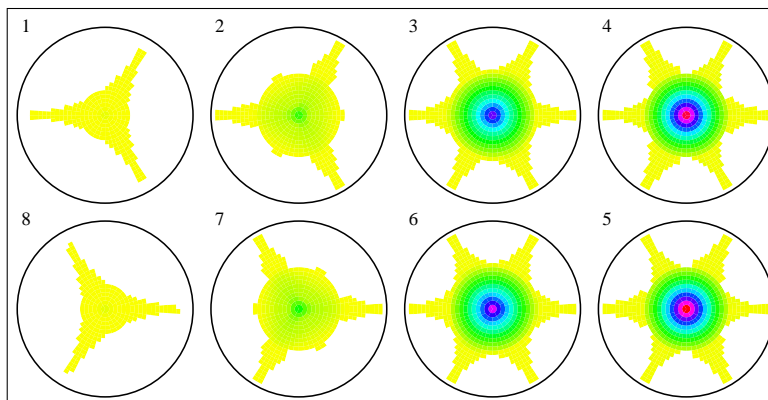
Ar^{8+} a) 5859
Zellenb) 12255
Zellenc) 28448
Zellend) 98814
Zellen

Abbildung 4.41: xy-Plots der Dichteverteilung der Ar^{8+} bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen.

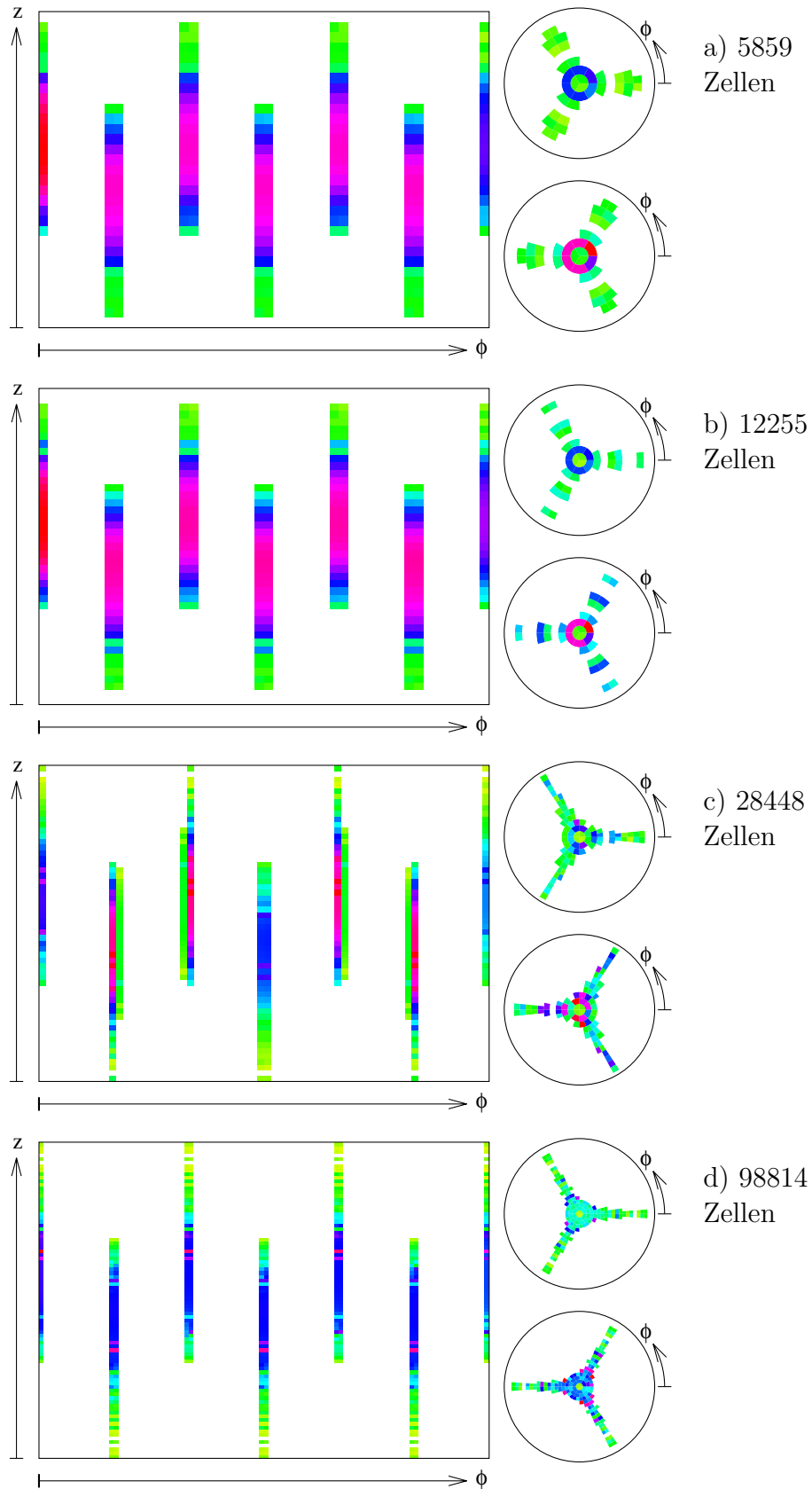


Abbildung 4.42: Wandauffreffverteilungen der Ar^{8+} -Ionen bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen.

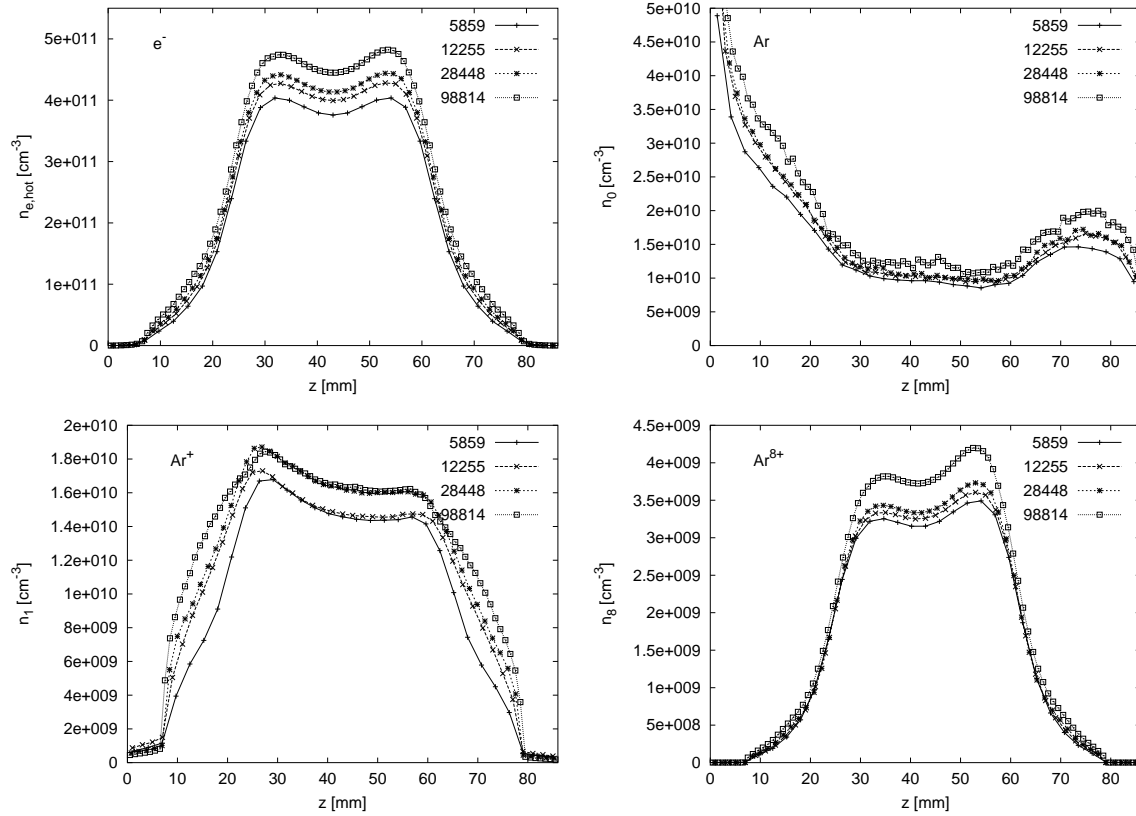


Abbildung 4.43: Dichte der heißen Elektronen sowie von $Ar^{0,1,8+}$ auf der z -Achse, jeweils bei verschiedenen Plasmakammeraufteilungen. Die Zahlen in den Legenden geben die Gesamtzahl der Zellen einer Aufteilung an (siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161).

Originär wurde das Dichteprofil von HEINENS Simulationen in der in Tabelle 4.6 mit *xxl* bezeichneten, noch höher aufgelösten Aufteilung geliefert. In dieser haben alle Zellen in axialer und radialer Richtung eine Ausdehnung von $\Delta z = \Delta r = 0,5$ mm. Für die Ausdehnungen in azimuthaler Richtung (diese hängen von der radialen Position der Zelle ab) ergeben sich als *Längenmaß* für die dritte Dimension

$$\Delta_3 := V/(\Delta z \cdot \Delta r) \quad (4.19)$$

Werte zwischen 0,40 und 0,77 mm mit einem Mittelwert von 0,54 mm (siehe letzte Spalte in Tabelle 4.6), wobei V das Zellvolumen ist. Somit sind die Zellen in allen drei Dimensionen weitestgehend ähnlich stark ausgedehnt.

Da mit dieser hoch aufgelösten Zellstruktur mit ca. 760000 Zellen bei Simulationen mit vielen Teilchenspezies schnell die benötigten Speicherkapazitäten der zur Verfügung stehenden Computer gesprengt werden (siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161), wurde diese Originalverteilung auf die immer weniger gut auflösenden Strukturen *xl*, *l*, *m* und *s* abgebildet, indem für jede Zelle j der neuen Struktur die Teilchenzahl anteilig aus den Dichten der Zellen i der alten Struktur, mit denen j geometrisch überlappt, berechnet wird. Nach Division mit dem Volumen von j hat man die räumlich gemittelte Dichte in Zelle j .

Mit kleinerer Zellenanzahl geht natürlich immer mehr von der Struktur der Vertei-

lung verloren, das Profil der heißen Elektronen ist jedoch selbst in der Auflösung s (5859 Zellen) noch gut repräsentiert.

Beim Vergleich der z -Plots der heißen Elektronen in Abbildung 4.43 und 4.36 kann man jedoch beobachten, daß die Dichte entlang der z -Achse mit höherer Zellenanzahl leicht anwächst. Diese Zunahme ist nur darauf zurückzuführen, daß lokale Extrema einer (stetigen) Funktion bei Mittelwertbildung über bestimmte Intervalle mit zunehmender Intervallbreite immer schwächer werden. Der über die ganze Plasmakammer gebildete Mittelwert ist jedoch bei allen vier Plasmakammeraufteilungen gleich!

Profile der Neutralgasteilchen und der Ionen

Nach den heißen Elektronen sind die Dichteverteilungen der NT (Abbildung 4.38 und 4.39) sowie von Ar^{8+} als Beispiel für die Ionen (Abbildung 4.40 und 4.41) bei den unterschiedlichen Plasmakammeraufteilungen dargestellt.

Mit kleineren Zellen werden (anfangs erwartungsgemäß) immer mehr Details und feinere Strukturen deutlich. Da dies jedoch auch noch beim Übergang von 28448 auf 98814 Zellen der Fall ist, kann man bei kritischer Betrachtung noch nicht wirklich von Konvergenz sprechen. Leider sind aber noch höher auflösende Simulationen mit den derzeit zur Verfügung stehenden Mitteln nicht möglich²².

Allerdings liefern die durchgeführten Simulationen keine Ergebnisse, die gegen die erwartete Konvergenz sprechen.

PKB-Dichten und extrahierte Ströme

Zum quantitativen Vergleich sind in Abbildung 4.44 die über den PKB gemittelten Dichten sowie die extrahierten Ströme aus den Simulationen aufgetragen. (Die Werte der Rechnung mit 12255 Zellen sind dabei lediglich der Übersichtlichkeit halber ausgelassen worden. Ihre Werte liegen immer zwischen denen der Simulationen mit 5859 und 28448 Zellen.)

Während bei den PKB-Dichten kaum Unterschiede zwischen den verschiedenen Plasmakammeraufteilungen zu finden sind, so liegen die extrahierten Ströme der größten Aufteilung (5859 Zellen) um bis zu 100% über denen der Simulationen mit anderen Aufteilungen. Dies ist Folge des Berechnungsverfahrens der extrahierten Ströme (siehe Abschnitt 3.7) das bei so großen Zellen zu ungenau wird.

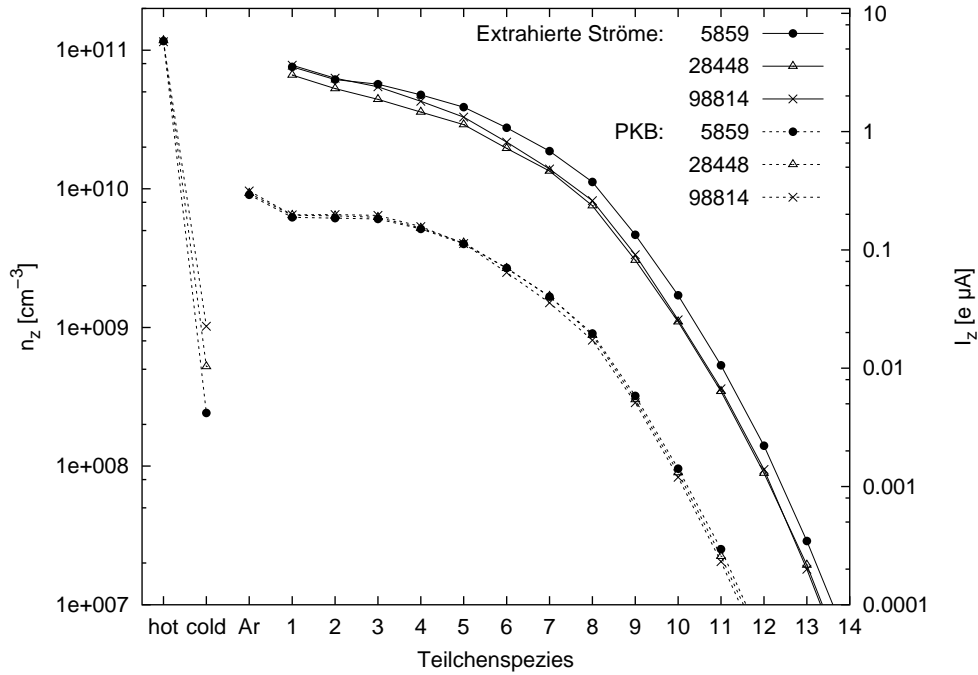


Abbildung 4.44: Teilchendichten im PKB (gestrichelte Linien, linke Ordinate) und extrahierte Ströme (durchgezogene Linien, rechte Ordinate) bei unterschiedlich hohen Zellaufteilungen. In der Legende jeweils angegeben ist die Gesamtzahl der Zellen (siehe Tabelle 4.6 auf Seite 161).

Ioneneinschlußzeiten

Bei den totalen Einschlußzeiten der Ionen τ_z^{loss} (siehe Abbildung 4.45) zeigen sich erst bei hohen Ladungszuständen ($z \geq 10$) deutlichere Unterschiede zwischen den

²²Für die Simulation mit 98814 Zellen wird schon ein PC mit mindestens 512 MB Speicher benötigt, damit dieser nicht hauptsächlich mit dem Umladen von virtuellen Speicherseiten zwischen

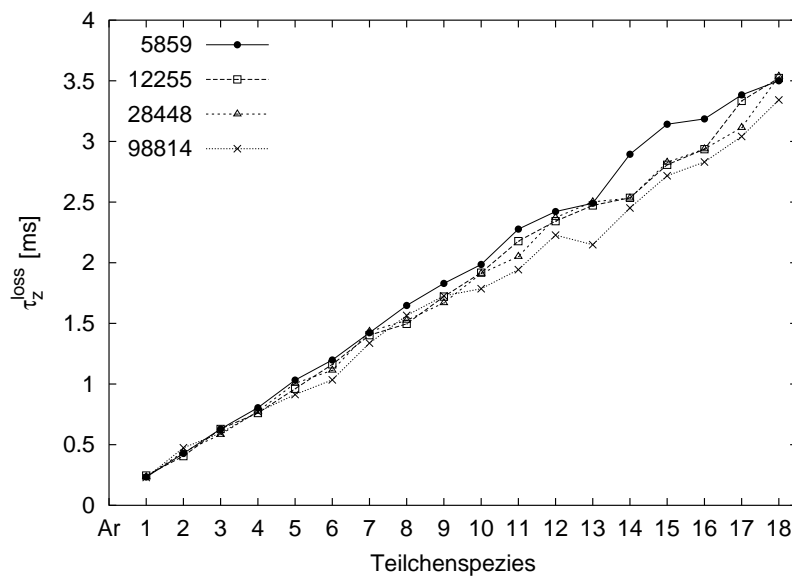


Abbildung 4.45: Einschlußzeiten der Ionen nach (4.10) bei Verkleinerung der Zellgrößen.

PKB-Aufteilungen, die aber immer noch klein sind. Daß die Unterschiede mit z größer werden, hängt mit der starken Abhängigkeit der Dichte eines Ladungszustandes z von der des Zustandes $z - 1$ (siehe Abbildung 2.7 auf Seite 14) zusammen.

Da die τ_z^{loss} Folge der einzelnen Einschlußzeiten $\tau_{z,c}$ aller Zellen c im PKB und aller Ladungszustände z sind (siehe Abschnitt 3.6.1 und 3.6.2), wird die hier fast zu beobachtende Unabhängigkeit der τ_z^{loss} von der Plasmakammeraufteilung als Indiz dafür gewertet, daß die Transportbeschreibung (mittels der $\tau_{z,c}$) für dieses Problem geeignet ist, und daß die Implementation ohne größere Fehler ist.

Wandauftreffverteilungen

Des weiteren sind in Abbildung 4.42 die Wandauftreffverteilungen der Ar^{8+} auf die Plasmakammerwände dargestellt, die mit besserer Plasmakammeraufteilung erwartungsgemäß immer genauer werden.

Fazit

Die hier gezeigten Simulationsergebnisse können noch nicht die gewünschte Konvergenz bei Verkleinerung der Zellgröße bestätigen, da es zum Teil immer noch deutliche Änderungen der resultierenden Daten bei weiterer Erhöhung der Zellaufteilung gibt. Sie legen jedoch nahe, daß bei weiterer Verbesserung der Plasmakammeraufteilung mit Konvergenz zu rechnen ist, und daß es in der mathematischen Beschreibung sowie im Simulationsprogramm keine größeren Fehler mehr gibt, die mit diesem Test entdeckt werden könnten.

Für Simulationen, in denen auf die räumlichen Ergebnisse weniger Wert gelegt wird, ist eine Aufteilung von 12255 Zellen ausreichend.

4.5 Variation der Gaszufuhr

Beim Betrieb der EZR-Ionenquellen beobachtet man eine starke Empfindlichkeit der extrahierten Ströme auf die Zufuhrraten (bzw. Neutralgasdrücke) der verwendeten Gase [Vit96, Kap. 5.3.1]. Allgemein stellt man experimentell fest, daß die Ströme der niedrig geladenen Ionen von relativ hohen Gasdrücken profitieren, während diese bei hochgeladenen Ionen mit sinkenden Drücken ansteigen. Reduziert man jedoch die Gaszufuhr zu stark, fallen auch wieder die Ströme der hochgeladenen Ionen, bevor das Plasma ganz erlischt.

In einer Reihe von Einzelsimulationen mit verschiedenen Ar-Zufuhrraten I_{inlet} (hierbei handelt es sich um *Teilchenströme*, nicht zu verwechseln mit den elektrischen,

RAM und Festplatte beschäftigt ist. Der dazu verwendete PC (CPU: AMD Athlon XP 1700+) war mit der vollständigen Simulation dann etwa 3 Wochen beschäftigt.

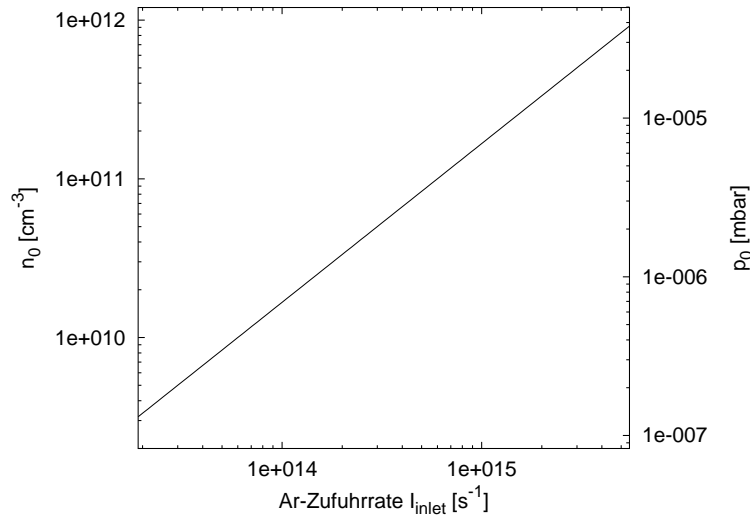


Abbildung 4.46: Zusammenhang zwischen Ar-Zufuhr I_{inlet} und Neutralteilchendichte \bar{n}_0 nach (3.23) bzw. -druck p_0 vor der Plasmazündung bei einer mittleren Aufenthaltsdauer der neutralen Ar-Teilchen von 17,13 ms (siehe Tabelle 4.1 auf Seite 122).

extrahierten Strömen!) wurde versucht, dieses Verhalten der extrahierten Ströme zu reproduzieren.

In Abbildung 4.49 sind die aus diesen Simulationen folgenden extrahierten Ströme der verschiedenen Ladungszustände in Abhängigkeit von I_{inlet} gezeigt. Es wurden Rechnungen mit Werten für I_{inlet} (Simulationsparameter `csd.GasFlow_1`) von $2 \cdot 10^{13}$ bis $5 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt. Die zugehörigen Neutralteilchendichten gem. (3.23) sowie -drücke vor der Plasmazündung sind in Abbildung 4.46 dargestellt. Bis auf die hier angesetzte Iontentemperatur von 0,4 eV gleichen alle anderen Simulationsparameter den Werten der Beispielsimulation aus Kapitel 4.3.

Bei der Gaszufuhr von $I_{inlet} = 2 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ konnte das Plasma noch nicht zünden. Abbildung 4.47 zeigt die zugehörige zeitliche Entwicklung der heißen Elektronen mit deren Prozeßraten. Die Generationsrate der heißen Elektronen ist (nach ca. 1 ms) kleiner als die durch die Einschlußzeit von $\tau_{e,hot} = 1 \text{ ms}$ definierte Verlustrate, so daß das (nur aufgrund der künstlichen Initialisierung existierende) Plasma erlischt.

Erst bei der Zufuhr von $4 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ist das Zündkriterium (3.20) erfüllt²³.

Oberhalb der zündkritischen Gaszufuhr zeigt sich dann auch in den Simulationen qualitativ das oben beschriebene, experimentell zu beobachtende Bild (siehe Abbildungen 4.50 und 4.49): Die niedrig geladenen Zustände profitieren von hohen Gaszufuhrleistungen, die hochgeladenen haben bei niedriger Zufuhr ein Optimum.

Die Grenze zwischen den niedrig geladenen Zuständen, die (zumindest im hier getesteten Wertebereich für I_{inlet}) von (jeder) Erhöhung von I_{inlet} profitieren, und der höher geladenen Zustände, deren Ströme mit zunehmendem I_{inlet} irgendwann

²³Mit $\langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{ei} \cdot u \rangle = 6,87 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$ und $\tau_{e,hot} = 1 \text{ ms}$ ergibt sich danach eine Mindestneutralteilchendichte von $1,45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$.

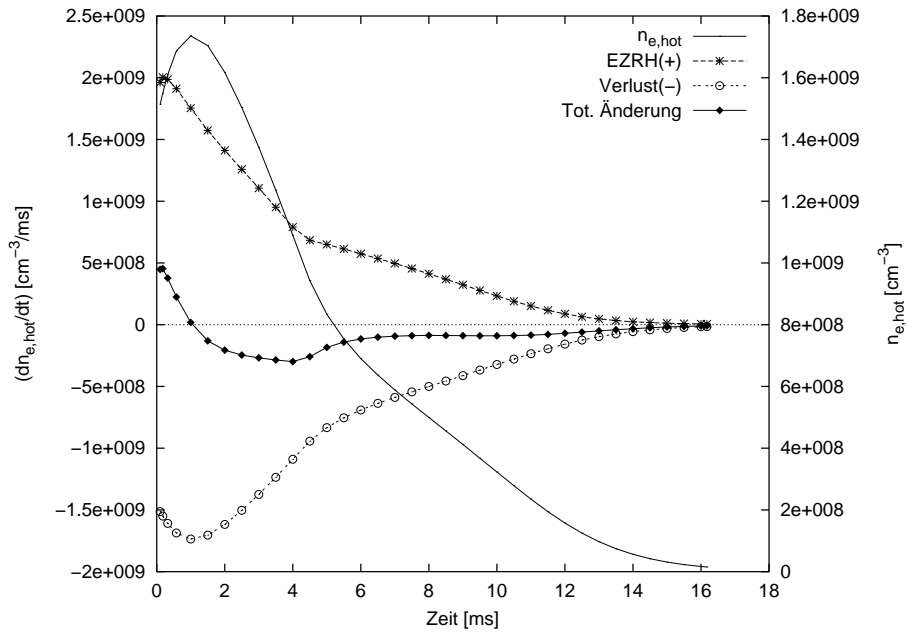


Abbildung 4.47: Simulierter zeitlicher Verlauf der über die Plasmakammer gemittelten Dichte $\bar{n}_{e,hot}$ der heißen Elektronen (durchgezogene Linie ohne Markierungen an rechter Ordinate) und deren Prozeßraten (an der linken Ordinate) aus der Simulation mit $I_{inlet} = 2 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$. (Zur Erläuterung der Daten siehe Beschreibung von Abbildung 4.12 auf Seite 136.) Aufgrund der geringen Neutralteilchendichte ist das Zündkriterium (3.18) nicht erfüllt, und das Plasma erlischt.

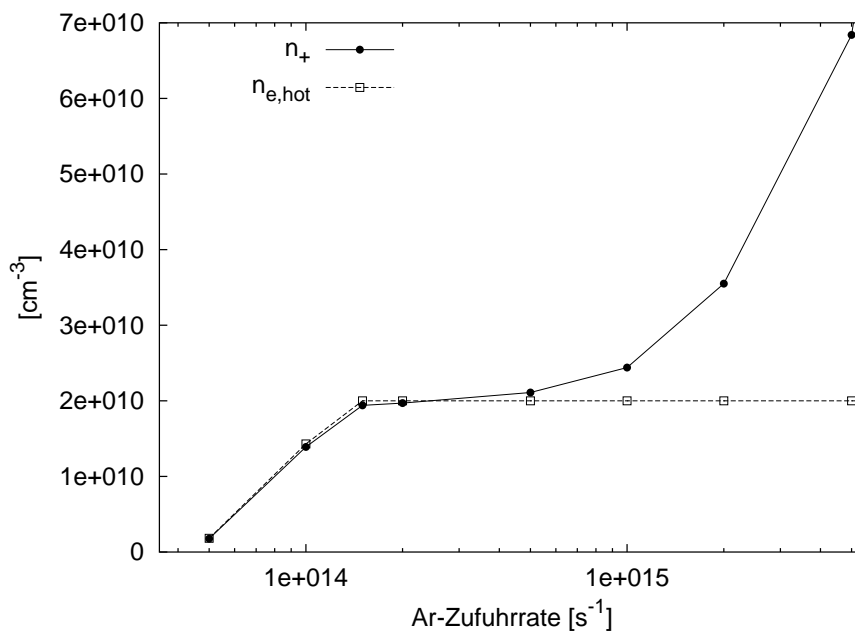
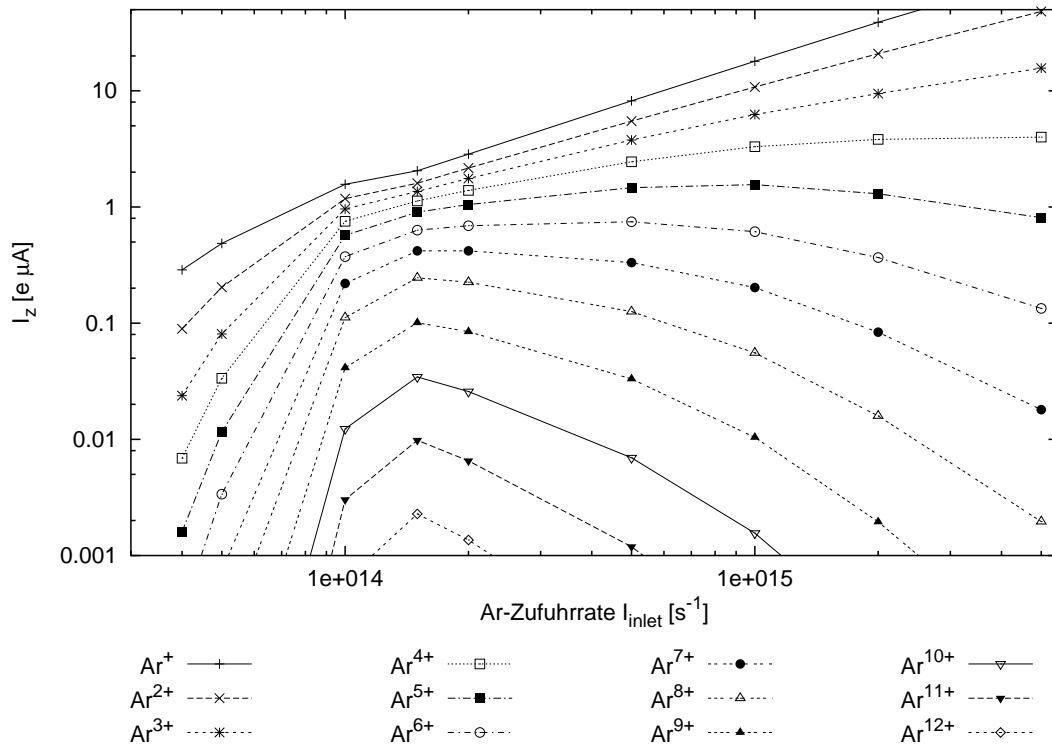
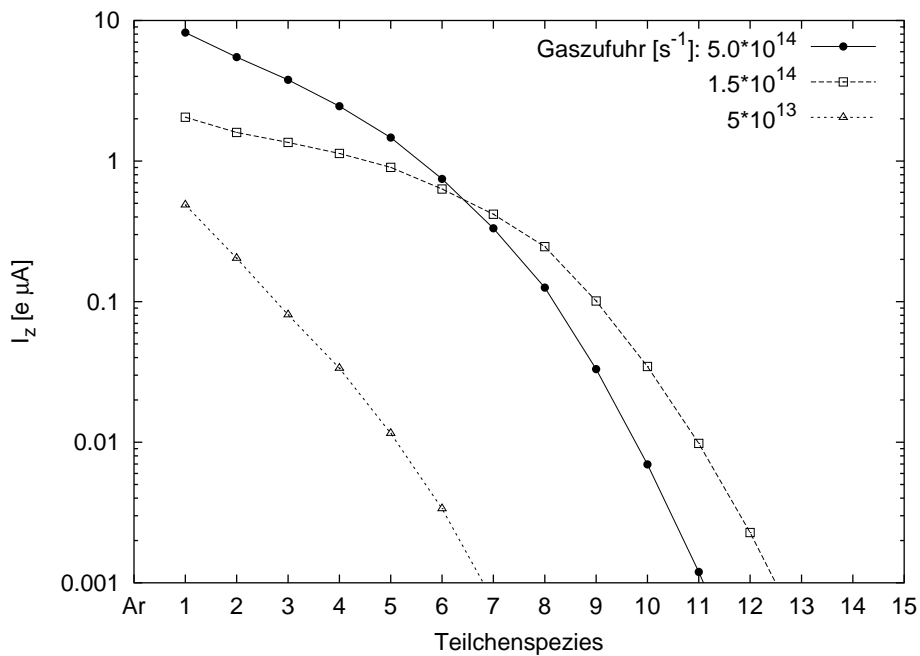


Abbildung 4.48: Dichte $\bar{n}_{e,hot}$ der heißen Elektronen sowie \bar{n}_+ der positiven Ladungen, jeweils gemittelt über die gesamte Plasmakammer in Abhängigkeit von der Gaszufuhr I_{inlet} . Bei $I_{opt} \approx 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ erreicht $\bar{n}_{e,hot}$ die durch den Simulationsparameter `csd.n.eHot.mean_max` vorgegebene Begrenzung.

Abbildung 4.49: Extrahierte Ströme in Abhängigkeit von der Gaszufuhr I_{inlet} .Abbildung 4.50: Extrahierte Ar-Ströme bei sehr kleiner, für hochgeladene Ionen optimaler und maximal simulierter Ar-Zufuhr I_{inlet} . (Entsprechende Daten, allerdings bei anderen Simulationsparametern, werden auch in Abbildung 4.71 auf Seite 205 gezeigt.)

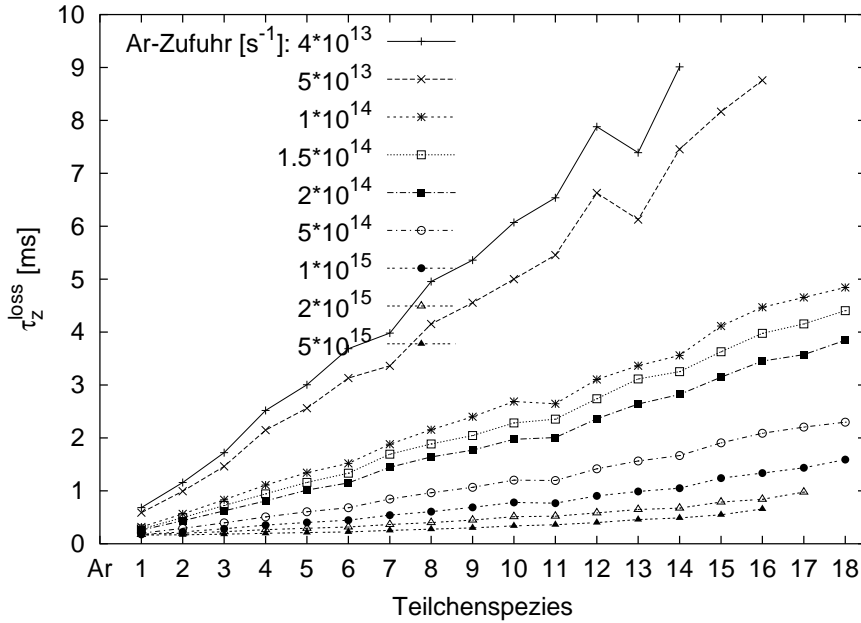


Abbildung 4.51: Einschlußzeiten der Ionen gem. (4.10) für verschiedene Gaszufuhrsraten I_{inlet} .

wieder sinken, liegt hier zwischen $z = 4$ und $z = 5$. Für $z \geq 7$ haben alle extrahierten Ströme etwa bei $I_{inlet} \approx 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ihr Maximum. Für $z \leq 4$ steigen alle Ströme monoton mit I_{inlet} an.

Erklärung für das unterschiedliche Verhalten der niedrig- bzw. hochgeladenen Ionen

Die beobachteten Anstiege aller extrahierten Ströme bis mindestens $I_{inlet} = I_{opt} \approx 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ erklären sich durch die mit I_{inlet} ebenfalls anwachsende Dichte $\bar{n}_{e,hot}$ der heißen Elektronen (siehe Abbildung 4.48). Je größer $\bar{n}_{e,hot}$ ist²⁴, desto stärker die EII, desto größer die Ionendichten und die extrahierten Ströme.

Bei I_{opt} allerdings erreicht $\bar{n}_{e,hot}$ die durch den Simulationsparameter `csd.n_eHot.mean_max` vorgegebene obere Grenze $\bar{n}_{e,hot}^{max}$, die physikalisch durch den Cut-off-Effekt begründet ist (siehe ab Seite 48).

Warum jedoch sinken die Ströme der hochgeladenen Ionen bei weiterer Erhöhung der Gaszufuhr? Die naheliegendste Antwort hierauf scheint der Ladungsaustausch zu sein, der mit zunehmender Neutralteilchendichte an Bedeutung gewinnt und die Ladungszustände der Ionen reduziert (siehe Abschnitt 3.5.3). Wie in Abschnitt 4.6.3 gezeigt wird, spielt dieser Prozeß aber nur eine geringe Rolle! Daß die Gasteilchen

²⁴An dieser Stelle sei noch einmal darauf hingewiesen, daß sich im Bereich $\bar{n}_{e,hot} < \bar{n}_{e,hot}^{max}$ (das bedeutet $I_{inlet} < I_{opt}$) der in einer Simulation einstellende Wert für $\bar{n}_{e,hot}$ aus den in Abschnitt 3.3.3.1 beschriebenen Gewinn- und Verlustraten der heißen Elektronen einstellt. Gerade die Abschätzung der Gewinnraten ist jedoch nur recht grob. Damit ist auch der Anstieg der Ströme bis I_{opt} nur sehr qualitativ zu bewerten!

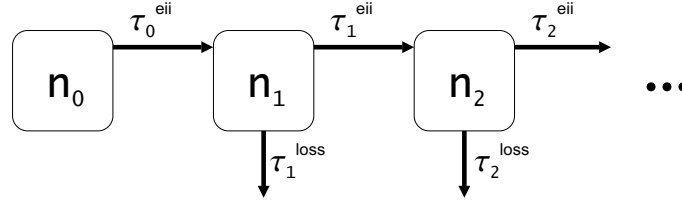


Abbildung 4.52: Vereinfachte Darstellung der durch die mittleren Ionisationszeiten τ_z^{eii} bzw. Einschlußzeiten τ_z^{loss} charakterisierten Übergangsraten, die das Gleichgewicht zwischen den Teilchendichten n_z herstellen. EII und Teilchenabtransport sind die quantitativ wichtigsten Prozesse. Vergleiche auch mit Abbildung 2.7 auf Seite 14.

nicht alle vollständig ionisiert werden, sondern daß sich eine Gleichgewichtsverteilung einstellt, muß somit hauptsächlich durch den Verlust von Ionen aus dem Plasma an die Wände und in die Extraktion bedingt sein!

Ein Blick auf die Einschlußzeiten der Ionen in Abbildung 4.51 bestätigt dies: Mit größer werdendem I_{inlet} sinken die Einschlußzeiten aller Ionen!

Wieso führt dies aber zu einem Anstieg niedrig geladener Zustände, bei den höher geladenen jedoch zum Abfall? Dies erklärt die folgende vereinfachte mathematische Betrachtung. Dabei werden nur die zwei wichtigsten Prozesse, S-EII und Nettoabtransport, berücksichtigt, die in einem Volumenelement das Gleichgewicht zwischen den Dichten einstellen. Mehrfache EII, CX und weitere ansonsten in den Simulationen berücksichtigte Prozesse sind zum Verständnis nicht erforderlich. Die Neutralteilchendichte n_0 wird als gegeben betrachtet.

Bei gegebener Neutralteilchendichte n_0 und konstanter Dichte $n_{e,hot}$ der heißen Elektronen folgt n_1 aus dem Gleichgewicht der folgenden Prozesse (siehe Abbildung 4.52):

- Zufuhr durch EII von Neutralteilchen mit der Rate

$$R_{0 \rightarrow 1}^{eii} = n_0 \cdot n_{e,hot} \langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle \quad (4.20)$$

$$= \frac{n_0}{\tau_0^{eii}}, \quad (4.21)$$

wobei $\tau_0^{eii} = (n_{e,hot} \langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle)^{-1}$ gem. (A.4) die mittlere Ionisationszeit der Neutralteilchen ist,

- Verlust durch Abtransport mit der Rate

$$R_1^{loss} = \frac{n_1}{\tau_1^{loss}} \quad (4.22)$$

- Verlust durch Weiterionisation mit der Rate

$$R_{1 \rightarrow 2}^{eii} = n_1 \cdot n_{e,hot} \langle \sigma_{0 \rightarrow 1}^{eii} \cdot u \rangle \quad (4.23)$$

$$= \frac{n_1}{\tau_1^{eii}}, \quad (4.24)$$

Da im Gleichgewicht

$$\frac{n_0}{\tau_0^{eii}} = \frac{n_1}{\tau_1^{loss}} + \frac{n_1}{\tau_1^{eii}} \quad (4.25)$$

gelten muß, folgt für die einfach geladenen Teilchen:

$$n_1 = \frac{n_0}{\tau_0^{eii}(1/\tau_1^{loss} + 1/\tau_1^{eii})}. \quad (4.26)$$

Analog ergibt sich für die höher geladenen Zustände z die rekursive Formel²⁵

$$n_z = \frac{n_{z-1}}{\tau_{z-1}^{eii}(1/\tau_z^{loss} + 1/\tau_z^{eii})}. \quad (4.27)$$

Blieben bei Variation von n_0 alle charakteristischen Zeiten τ_z^{eii} und τ_z^{loss} konstant, so wären nach (4.27) alle Dichten proportional zu n_0 . Tatsächlich nehmen jedoch alle Einschlußzeiten τ_z^{loss} bei zunehmender Gaszufuhr ab (siehe Abbildung 4.51). Die Erklärung dazu folgt weiter unten.

Eine Erhöhung von n_0 um den Faktor $s_0 > 1$ hat dann, d.h. verbunden mit einer Absenkung der Einschlußzeiten τ_z^{loss} , für niedrig geladene Zustände eine Dichtezunahme, für die höher geladenen aber eine Dichteabnahme zur Folge, wie im folgenden gezeigt wird.

Durch die Erhöhung von n_0 um den Faktor s_0 ergibt sich die Dichte

$$n'_0 = s_0 \cdot n_0. \quad (4.28)$$

Analog seien die Änderungen der Dichten der anderen Ladungszustände z durch entsprechende Faktoren s_z gemäß

$$n'_z = s_z \cdot n_z \quad (4.29)$$

charakterisiert. Des weiteren mögen alle Einschlußzeiten τ_z^{loss} der Ionen durch die Neutralteilchendichteerhöhung auf einen Wert

$$\tau_z^{loss'} \leq \tau_z^{loss} \quad (4.30)$$

sinken. Aus (4.26) und (4.29) folgt dann für die 1-fach geladenen Ionen

$$n'_1 = s_1 \cdot n_1 = \frac{s_0 \cdot n_0}{\tau_0^{eii}(1/\tau_1^{eii} + 1/\tau_1^{loss'})}. \quad (4.31)$$

Das bedeutet (mit n_1 aus (4.26)):

$$s_1 = s_0 \underbrace{\frac{1/\tau_1^{eii} + 1/\tau_1^{loss}}{1/\tau_1^{eii} + 1/\tau_1^{loss'}}}_{<1} < s_0. \quad (4.32)$$

Wegen $\tau_z^{loss'} < \tau_z^{loss}$ bedeutet dies, daß n_1 im Vergleich zu n_0 nur unterproportional ansteigt²⁶!

²⁵Für die vollständig ionisierten Spezies mit $z = Z$ muß in (4.27) $\tau_Z^{eii} = \infty$ gesetzt werden.

²⁶Ist $\tau_z^{loss'}$ klein genug, gilt sogar $s_1 < 1$, so daß $n'_1 < n_1$.

Dies setzt sich für höher geladene Zustände fort. Allgemein läßt sich für $1 \leq z \leq Z$ zeigen:

$$s_z = s_{z-1} \frac{1/\tau_z^{eii} + 1/\tau_z^{loss}}{1/\tau_z^{eii} + 1/\tau_z^{loss'}} \quad (4.33)$$

$$= s_0 \prod_{i=1}^z \frac{1/\tau_i^{eii} + 1/\tau_i^{loss}}{1/\tau_i^{eii} + 1/\tau_i^{loss'}} \quad (4.34)$$

$$< s_{z-1} . \quad (4.35)$$

Somit gilt:

$$s_0 > s_1 > s_2 > \dots > s_Z . \quad (4.36)$$

Während s_0 (definitionsgemäß) noch größer als eins ist, so gibt es im allgemeinen einen Ladungszustand $z_0 \geq 1$, von welchem an die Änderungsfaktoren s_z kleiner oder gleich eins werden, d.h.

$$s_0 > \dots > 1 \geq s_{z_0} > \dots > s_Z . \quad (4.37)$$

Das bedeutet, daß alle Ladungszustände $z < z_0$ von der Erhöhung der Neutralgaszufuhr um den Faktor s_0 profitieren, während alle mit $z \geq z_0$ dadurch abgebaut werden. Die s_z für $z \geq 1$ und somit auch z_0 hängen natürlich von n_0 , von s_0 sowie von allen charakteristischen Zeiten τ_z^{eii} und τ_z^{loss} ab²⁷. Im Falle der hier dargestellten Simulationen ergibt sich $z_0 = 7$, wenn man mit der zu $I_{inlet} \approx 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ gehörenden Neutralteilchendichte n_0 beginnt.

Somit erklärt der bei höherer Gaszufuhr schlechter werdende Ioneneinschluß das ladungsabhängige Verhalten, auch wenn die Einschlußverschlechterung selbst (näherungsweise) ladungsunabhängig ist.

Erklärung der Verschlechterung des Ioneneinschlusses

Offen ist nur noch, wieso die Einschlußzeiten τ_z^{loss} mit zunehmender Neutralgaszufuhr kleiner werden, nachdem die Cut-off-Dichte erreicht wurde?

Die τ_z^{loss} sind nach (4.9) bzw. (4.10) als das Verhältnis von Ionendichte und Dichteänderungsrate durch Nettoteilchenabtransport definiert:

$$\tau_z^{loss} = \frac{n_z}{|(\partial n_z / \partial t)^{loss}|} . \quad (4.38)$$

Im hier vorgestellten Modell wird davon ausgegangen, daß sich im Gleichgewicht eine bestimmte Elektronendichte(-verteilung) $n_{e,hot}$ einstellt, die aufgrund der Quasineutralität (QN) von der Dichte n_+ der positiven Ladungen kompensiert wird (siehe Abschnitt 3.6.2).

²⁷Im allgemeinen Fall gehen auch die hier der Einfachheit halber vernachlässigten Prozesse wie Mehrfache EII und CX mit ihren charakteristischen Zeiten ein.

Es zeigt sich (siehe Abschnitt 4.3.1.2), daß der Abtransport von Ionen aus dem Plasmakernbereich hin zu den Wänden während des Plasmaaufbaus, d.h. solange die heiße Elektronendichte noch ansteigt, durch den elektrostatischen Einschluß eingeschränkt ist. Ist der Endwert von $n_{e,hot}$ dann erreicht, so können alle durch EII *zusätzlich* produzierten Ladungen abfließen, wobei sich für die Dichten n_z eine bestimmte Verteilung einstellt.

Wird nun die Gaszufuhr erhöht, so steigen die EII-Raten und somit auch der Abtransport aus dem PKB, d.h. $(\partial n_z / \partial t)^{loss}$, an, während n_+ nur schwach anwächst (siehe Abbildung 4.48 auf Seite 174). Auch wenn dies nicht unbedingt für *alle* n_z gelten muß, steigen somit letztlich die Abtransporte stärker als die Dichten, so daß die τ_z^{loss} gem. (4.38) sinken.

4.6 Relevanz der beteiligten Prozesse

4.6.1 Überblick

Nachdem im Rahmen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 schon die Prozeßraten und mittleren freien Weglängen der die CSD beeinflussenden Prozesse verglichen wurden, soll in diesem Kapitel detaillierter auf deren Bedeutung eingegangen werden.

Dazu sind in Tabelle 4.8 auf der nächsten Seite für alle Ladungszustände z aus der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 neben deren Dichten \bar{n}_z jeweils links die Gewinn- und rechts die Verlustraten $\overline{(\partial n / \partial t)^{(p)}}$ (siehe Tabelle 4.7) durch die in der Simulation berücksichtigten Prozesse p zusammengestellt. Dazu gehören 1- und 2-EII, 1- bis 4-CX sowie die Ionenverluste durch Extraktion und Neutralisation an den Plasmakammerwänden. Alle Werte wurden, wie in Abschnitt 4.3.1.2 beschrieben, über die gesamte Plasmakammer gemittelt.

Ferner wurden die mit den Verlustraten $\overline{(\partial n / \partial t)^{(p)} < 0}$ verbundenen charakteristischen Prozeßzeiten

$$\tau^{(p)} = -\bar{n} / \overline{(\partial n / \partial t)^{(p)}}$$

unterhalb der Verlustraten notiert, wodurch auch ein Vergleich zwischen verschiedenen Ladungszuständen möglich wird.

Die Tabelle 4.8 bestätigt, daß die EII allgemein der stärkste Aufbauprozess ist. Unter den Verlustprozessen dominiert für kleine z (hier $z \leq 4$) ebenfalls die EII, während bei den höher geladenen der Verlust durch Abtransport überwiegt.

Prozeß	Gewinnrate	Verlustrate	Referenz
k -EII	$n_{e,hot} \cdot n_{z-k} \cdot \langle \sigma_{z-k \rightarrow z}^{eii} \cdot u \rangle$	$n_{e,hot} \cdot n_z \cdot \langle \sigma_{z \rightarrow z+k}^{eii} \cdot u \rangle$	(3.40)
k -CX	$n_0 \cdot n_{z+k} \cdot \langle \sigma_{z+k \rightarrow z}^{cx} \cdot u \rangle$	$n_0 \cdot n_z \cdot \langle \sigma_{z \rightarrow z-k}^{cx} \cdot u \rangle$	(3.66)

Tabelle 4.7: Berechnung der Gewinn- und Verlustraten durch k -EII und k -CX für Ar^{z+} in Tabelle 4.8 auf der nächsten Seite.

Zufuhr					Abtransport					Abfluß								
$\overline{(\partial n_z / \partial t)(p)}$ [cm ⁻³ /ms]					\bar{n}_z [cm ⁻³]					$\overline{(\partial n_z / \partial t)(p)}$ [cm ⁻³ /ms]								
1-EII	2-EII	1-CX(Ar)	2-CX(Ar)	3-CX(Ar)	4-CX(Ar)	Ar	1-EII	2-EII	1-CX(Ar)	2-CX(Ar)	3-CX(Ar)	4-CX(Ar)	1-EII	2-EII	1-CX(Ar)	2-CX(Ar)	3-CX(Ar)	4-CX(Ar)
						Ar	8.5e+9	5.1e+8	1.4e+7	4.2e+6	1.5e+6	2.9e+5	8.5e+9	5.1e+8	1.4e+7	4.2e+6	1.5e+6	2.9e+5
8.5e+9		1.2e+6	7.6e+5	2.3e+5	3.8e+4	6.2e+9	7.3e-1	1.2e+1	4.3e+2	1.5e+3	4.2e+3	2.9e+4	7.3e-1	1.2e+1	4.3e+2	1.5e+3	4.2e+3	2.9e+4
4.4e+9	5.1e+8	1.9e+6	8.4e+5	3.0e+5	6.0e+4	Ar ⁺	4.4e+9	2.9e+8					4.4e+9	2.9e+8				
						1.1e+9	2.4e-1	3.7e+0					2.4e-1	3.7e+0				
						Ar ²⁺	2.9e+9	1.8e+8	1.2e+6				2.9e+9	1.8e+8	1.2e+6			
						9.2e+8	3.2e-1	5.1e+0	7.9e+2				3.2e-1	5.1e+0	7.9e+2			
2.9e+9	2.9e+8	2.3e+6	7.9e+5	3.1e+5	8.0e+4	Ar ³⁺	1.8e+9	1.2e+8	1.9e+6	7.6e+5			1.8e+9	1.2e+8	1.9e+6	7.6e+5		
						8.9e+8	5.1e-1	7.2e+0	4.8e+2	1.2e+3			5.1e-1	7.2e+0	4.8e+2	1.2e+3		
1.8e+9	1.8e+8	2.5e+6	6.5e+5	3.0e+5	8.8e+4	Ar ⁴⁺	1.0e+9	8.1e+7	2.3e+6	8.4e+5			1.0e+9	8.1e+7	2.3e+6	8.4e+5		
						7.8e+8	7.5e-1	9.6e+0	9.4e+2	9.4e+2			7.5e-1	9.6e+0	9.4e+2	9.4e+2		
1.0e+9	1.2e+8	2.2e+6	5.1e+5	2.5e+5	2.2e+4	Ar ⁵⁺	5.5e+8	4.3e+7	2.5e+6	7.9e+5	3.0e+5	3.8e+4	5.5e+8	4.3e+7	2.5e+6	7.9e+5	3.0e+5	3.8e+4
						6.3e+8	1.1e+0	1.5e+1	2.6e+2	8.0e+2	2.1e+3	1.7e+4	1.1e+0	1.5e+1	2.6e+2	8.0e+2	2.1e+3	1.7e+4
5.5e+8	8.1e+7	1.8e+6	3.5e+5	7.2e+4	2.7e+1	Ar ⁶⁺	3.2e+8	2.8e+8	2.2e+7	6.5e+5	7.6e+3	6.0e+4	3.2e+8	2.8e+8	2.2e+7	6.5e+5	7.6e+3	6.0e+4
						4.5e+8	1.6e+0	2.1e+1	2.1e+2	7.0e+2	1.4e+3	8.0e+4	1.6e+0	2.1e+1	2.1e+2	7.0e+2	1.4e+3	8.0e+4
2.8e+8	4.3e+7	1.4e+6	1.6e+5	1.3e+4	9.3e+0	Ar ⁷⁺	1.8e+8	1.3e+8	5.0e+6	5.1e+5	3.0e+5	8.0e+4	1.8e+8	1.3e+8	5.0e+6	5.1e+5	3.0e+5	8.0e+4
						3.2e+8	1.7e+0	2.4e+0	1.7e+2	6.2e+2	1.0e+3	4.0e+3	1.7e+0	2.4e+0	1.7e+2	6.2e+2	1.0e+3	4.0e+3
1.3e+8	2.2e+7	6.7e+5	6.8e+4	4.4e+3	2.6e+0	Ar ⁸⁺	9.9e+7	5.0e+7	1.4e+6	3.5e+5	2.5e+5	8.8e+4	9.9e+7	5.0e+7	1.4e+6	3.5e+5	2.5e+5	8.8e+4
						2.0e+8	2.0e+0	1.4e+2	1.5e+2	5.6e+2	7.9e+2	2.3e+3	2.0e+0	1.4e+2	1.5e+2	5.6e+2	7.9e+2	2.3e+3
5.0e+7	5.0e+6	2.9e+5	2.5e+4	8.1e+2	5.9e-1	Ar ⁹⁺	3.7e+7	1.6e+7	4.6e+5	1.6e+5	7.2e+4	2.2e+4	3.7e+7	1.6e+7	4.6e+5	1.6e+5	7.2e+4	2.2e+4
						8.5e+7	5.2e+0	1.9e+2	1.3e+2	5.2e+2	1.2e+3	3.9e+3	5.2e+0	1.9e+2	1.3e+2	5.2e+2	1.2e+3	3.9e+3
1.6e+7	1.4e+6	1.1e+5	7.3e+3	1.9e+2	1.1e-1	Ar ¹⁰⁺	1.2e+7	4.5e+6	1.3e+5	6.8e+4	1.3e+4	2.7e+1	1.2e+7	4.5e+6	1.3e+5	6.8e+4	1.3e+4	2.7e+1
						3.2e+7	7.2e+0	2.6e+2	1.1e+2	4.8e+2	2.5e+3	1.2e+6	3.2e+7	7.2e+0	2.6e+2	1.1e+2	4.8e+2	2.5e+3
4.5e+6	4.6e+5	3.4e+4	1.7e+3	3.7e+1	1.6e-2	Ar ¹¹⁺	3.7e+6	1.1e+6	3.1e+4	2.5e+4	4.4e+3	9.3e+0	3.7e+6	1.1e+6	3.1e+4	2.5e+4	4.4e+3	9.3e+0
						1.1e+7	1.0e+1	3.6e+2	1.0e+2	4.5e+2	2.5e+3	1.2e+6	1.1e+7	1.0e+1	3.6e+2	1.0e+2	4.5e+2	2.5e+3
1.1e+6	1.3e+5	8.4e+3	3.5e+2	5.8e+0	1.4e-3	Ar ¹²⁺	9.5e+5	2.1e+5	6.2e+3	7.3e+3	8.1e+2	2.6e+0	9.5e+5	2.1e+5	6.2e+3	7.3e+3	8.1e+2	2.6e+0
						3.1e+6	1.5e+1	5.0e+2	9.1e+1	4.2e+2	3.8e+3	1.2e+6	3.1e+6	1.5e+1	5.0e+2	9.1e+1	4.2e+2	3.8e+3
2.1e+5	3.1e+4	1.7e+3	5.2e+1	6.7e-1	2.1e-5	Ar ¹³⁺	1.9e+5	3.1e+4	9.7e+2	1.7e+3	1.9e+2	5.9e-1	1.9e+5	3.1e+4	9.7e+2	1.7e+3	1.9e+2	5.9e-1
						6.9e+5	2.2e+1	7.1e+2	8.3e+1	4.0e+2	3.7e+3	1.2e+6	6.9e+5	2.2e+1	7.1e+2	8.3e+1	4.0e+2	3.7e+3
3.1e+4	6.2e+3	2.7e+2	4.9e+0	1.6e-2	2.4e-7	Ar ¹⁴⁺	3.1e+4	3.8e+3	1.3e+2	3.5e+2	3.7e+1	1.1e-1	3.1e+4	3.8e+3	1.3e+2	3.5e+2	3.7e+1	1.1e-1
						1.3e+5	3.5e+1	1.0e+3	7.6e+1	3.8e+2	3.6e+3	1.2e+6	1.3e+5	3.5e+1	1.0e+3	7.6e+1	3.8e+2	3.6e+3
3.8e+3	9.7e+2	2.6e+1	7.5e-2	2.4e-4		Ar ¹⁵⁺	4.2e+3	2.6e+2	1.9e+0	5.2e+1	5.8e+0	1.6e-2	4.2e+3	2.6e+2	1.9e+0	5.2e+1	5.8e+0	1.6e-2
						1.8e+4	7.2e+1	9.9e+3	7.0e+1	3.6e+2	3.2e+3	1.2e+6	1.8e+4	7.2e+1	9.9e+3	7.0e+1	3.6e+2	3.2e+3
2.6e+2	1.3e+2	4.1e-1	9.0e-4			Ar ¹⁶⁺	3.5e+2	3.3e+0	3.3e-2	4.9e+0	6.7e-1	1.4e-3	3.5e+2	3.3e+0	3.3e-2	4.9e+0	6.7e-1	1.4e-3
						1.7e+3	5.0e+2	5.0e+4	6.5e+1	3.4e+2	2.5e+3	1.2e+6	1.7e+3	5.0e+2	5.0e+4	6.5e+1	3.4e+2	2.5e+3
3.3e+0	1.9e+0	5.1e-3				Ar ¹⁷⁺	4.6e+0	2.2e-2	4.1e-1	7.5e-2	1.6e-2	2.1e-5	4.6e+0	2.2e-2	4.1e-1	7.5e-2	1.6e-2	2.1e-5
						2.5e+1	1.1e+3		6.0e+1	3.3e+2	1.5e+3	1.2e+6	2.5e+1	1.1e+3		6.0e+1	3.3e+2	1.5e+3
2.2e-2	3.3e-2					Ar ¹⁸⁺	4.9e-2		5.1e-3	9.0e-4	2.4e-4	2.4e-7	4.9e-2		5.1e-3	9.0e-4	2.4e-4	2.4e-7
						2.9e-1	5.8e+0		5.6e+1	3.2e+2	1.2e+3	1.2e+6	2.9e-1	5.8e+0		5.6e+1	3.2e+2	1.2e+3

Tabelle 4.8: Über die Plasmakammer gemittelte Änderungsraten $\overline{(\partial n_z / \partial t)(p)}$ der mittleren Dichten \bar{n}_z durch die berücksichtigten Prozesse p . Die Werte stammen aus der Beispielsimulation aus Kap. 4.3. Auf der linken Hälfte stehen spaltenweise Gewinn- und auf der rechten die Verlustraten; unter letzteren die charakteristischen Prozesszeiten. Pro Spezies sind die größte Gewinn- und die betragsmäßig größte Verlustrate fett hervorgehoben.

In Abschnitt 3.5.3.4 wurden die 1-EII- und 1-CX-Ratenkoeffizienten miteinander verglichen (siehe Abbildung 3.21 auf Seite 84), was bei der Annahme, daß die Elektronen- und die Neutralteilchendichte gleich groß sind, erste Abschätzungen über die relative Bedeutung der beiden Prozesse erlaubte. An dieser Stelle sind nun aber auch diese beiden Dichten genauer bekannt.

Der Vergleich hier zeigt, daß der 1-CX erst für $z \geq 15$ stärker zum Abbau von \bar{n}_z beiträgt als 1-EII. Für $z \leq 7$ ist sogar die 2-EII wichtiger als 1-CX, ganz zu schweigen von 2-, 3-, und 4-CX.

Somit kommt dem CX (für die mittleren Dichten) nur eine untergeordnete Bedeutung zu. Für die hochgeladenen Spezies stellt der Abtransport den entscheidenden Verlustkanal dar.

4.6.2 Zweifache Elektronenstoßionisation, 2-EII

Vergleicht man die Raten von 1- und 2-EII in Tabelle 4.8, so sind letztere immer mindestens eine Größenordnung kleiner. Es stellt sich jedoch die Frage, ob sich die Effekte der 2-EII von Ladungszustand zu Ladungszustand akkumulieren und wie wichtig die Berücksichtigung von 2-EII effektiv ist, oder ob die 2-EII zugunsten kürzerer Rechenzeiten vernachlässigt werden kann?

Dazu sind hier die Ergebnisse von Simulationen gegenübergestellt, bei denen einmal nur die 1-EII (Simulationsparameter `csd.kmax_eii=1`) und dann sowohl 1-EII als auch 2-EII berücksichtigt wurden (`csd.kmax_eii=2`). Da der Vergleich dieses Simulationspaares stark von den Betriebsparametern abhängt, werden hier drei Simulationspaare vorgestellt, die sich in der Ar-Gaszufuhr, dem wichtigsten experimentellen Parameter (siehe Abschnitt 4.5), unterscheiden.

Bei dem ersten Simulationspaar lag die Ar-Zufuhr mit $I_{inlet} = 1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ etwa 30% unter dem Optimalwert ($I_{opt} \approx 1,5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ für die höher geladenen Zustände), bei dem gerade die maximale Dichte der heißen Elektronen $\bar{n}_{e,hot}^{max}$ erreicht wird. Insbesondere dadurch, daß die durch die 2-EII zusätzliche Elektronenfreisetzung dann nach (3.13) auch eine höhere Elektronendichte zur Folge hat (siehe Tabelle 4.10 unten), macht sich die 2-EII, wie in Abbildung 4.53 zu erkennen ist, mit jedem höheren Ladungszustand immer stärker bemerkbar.

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd_init.ElectronDensityDistribFile</code>	<code>ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_012255.asc</code>
Prozeßparameter	
<code>csd.kmax_eii</code>	1 bzw. 2
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	$1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ bzw. $5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.ions_temp_eV</code>	1 eV

Tabelle 4.9: Simulationsparameter der in diesem Abschnitt dokumentierten Simulationen, die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

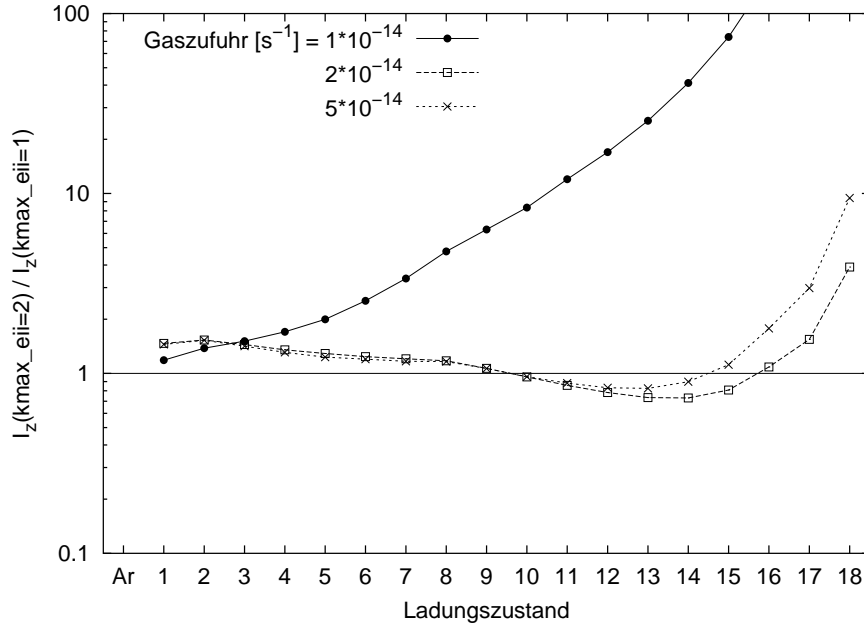


Abbildung 4.53: Verhältnis zwischen den extrahierten Strömen bei Berücksichtigung sowohl von 1-EII als auch von 2-EII (Simulationsparameter $k_{\max_eii}=2$) und den extrahierten Strömen bei Vernachlässigung der 2-EII ($k_{\max_eii}=1$) jeweils bei drei verschiedenen Gaszufuhrdaten.

Liegt die Gaszufuhr wie in den beiden anderen Simulationspaaren so hoch, daß $\bar{n}_{e,hot}^{max}$ schon erreicht ist, zeigt sich ein deutlich anderes Bild. Durch die zusätzliche

z	Extrahierte Ströme I_z [$e\mu A$]								
	GasFlow_1= $1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$			GasFlow_1= $2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$			GasFlow_1= $5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$		
	$k_{\max_eii}=1$	$k_{\max_eii}=2$		$k_{\max_eii}=1$	$k_{\max_eii}=2$		$k_{\max_eii}=1$	$k_{\max_eii}=2$	
1	1.8E+00	2.1E+00	17%	2.7E+00	3.9E+00	46%	8.0E+00	1.1E+01	44%
2	1.1E+00	1.5E+00	37%	1.8E+00	2.8E+00	52%	4.8E+00	7.4E+00	52%
3	8.6E-01	1.3E+00	51%	1.6E+00	2.4E+00	44%	3.7E+00	5.2E+00	41%
4	6.3E-01	1.0E+00	70%	1.4E+00	2.0E+00	35%	2.7E+00	3.5E+00	30%
5	3.8E-01	7.7E-01	99%	1.1E+00	1.4E+00	28%	1.6E+00	2.0E+00	23%
6	2.0E-01	5.2E-01	153%	7.9E-01	9.8E-01	23%	8.8E-01	1.0E+00	19%
7	9.1E-02	3.0E-01	236%	5.0E-01	6.0E-01	20%	4.0E-01	4.7E-01	17%
8	3.3E-02	1.6E-01	376%	2.7E-01	3.2E-01	17%	1.5E-01	1.7E-01	16%
9	8.7E-03	5.4E-02	530%	1.0E-01	1.1E-01	7%	4.0E-02	4.3E-02	6%
10	1.8E-03	1.5E-02	736%	3.3E-02	3.2E-02	-4%	8.5E-03	8.2E-03	-4%
11	3.3E-04	4.0E-03	1099%	1.0E-02	8.8E-03	-14%	1.7E-03	1.5E-03	-11%
12	4.5E-05	7.7E-04	1595%	2.2E-03	1.7E-03	-21%	2.3E-04	1.9E-04	-16%
13	4.8E-06	1.2E-04	2440%	3.9E-04	2.8E-04	-26%	2.5E-05	2.1E-05	-17%
14	3.2E-07	1.3E-05	4020%	4.5E-05	3.3E-05	-26%	1.7E-06	1.6E-06	-9%
15	1.7E-08	1.2E-06	7300%	3.8E-06	3.1E-06	-19%	9.2E-08	1.0E-07	12%
16	4.2E-10	6.9E-08	15985%	1.6E-07	1.7E-07	8%	2.2E-09	4.0E-09	77%
17	1.6E-12	6.4E-10	38738%	1.1E-09	1.7E-09	54%	8.9E-12	2.6E-11	198%
18	6.3E-16	5.0E-12	786908%	3.4E-12	1.3E-11	290%	1.7E-14	1.6E-13	841%
$\bar{n}_{e,hot}$ [cm^{-3}]	9.3E+09	1.4E+10		2.0E+10	2.0E+10		2.0E+10	2.0E+10	

Tabelle 4.10: Werte der in Abbildung 4.53 dargestellten extrahierten Ionenströme bei drei verschiedenen Gaszufuhrdaten, je einmal nur unter Berücksichtigung der 1-EII und einmal unter zusätzlicher Berücksichtigung auch der 2-EII. Die Prozentzahlen geben die jeweilige Änderung bei zusätzlicher Berücksichtigung der 2-EII an. In der untersten Zeile ist jeweils die über die Plasmakammer gemittelte Dichte der heißen Elektronen angegeben.

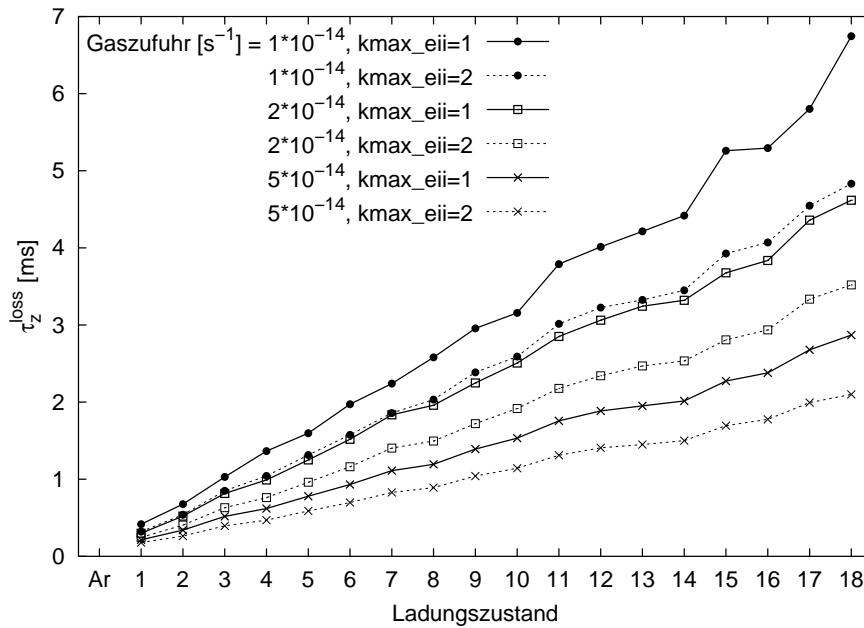


Abbildung 4.54: Einschlußzeiten mit/ohne Berücksichtigung der 2-EII und bei den verschiedenen Gaszufuhrzeiten. Durch die zusätzliche Ionisation durch die 2-EII werden die Einschlußzeiten der Ionen reduziert.

Ionisation von neutralem Ar wird mehr Ar^{2+} produziert. Dies setzt sich mit Ar^+ , Ar^{2+} bis (hier) Ar^{8+} fort, wobei die relative Zunahme jedoch immer geringer wird. Daß sich dieser Trend nicht durch alle Ladungszustände ziehen muß, sondern sich hier zwischen $z = 10$ und $z = 14$ bzw. 15 sogar umkehrt, ist Folge der Tatsache, daß sich bei fester Dichte der heißen Elektronen, aber zunehmender Dichte der niedrig geladenen Ionen der (elektrostatische) Einschluß der Ionen verschlechtert (siehe Abschnitt 4.5).

Somit ergibt sich die effektive Wirkung auf einen bestimmten Ladungszustand aus zwei entgegengesetzten Effekten: dem direkten stärkeren Aufbau durch 2-EII der $(z - 2)$ -fach geladenen Teilchen und der indirekt größeren Verlustrate durch Verschlechterung des Ioneneinschlusses.

Daß die Ladungszustände mit $z \geq 15$ wieder von 2-EII profitieren, paßt ebenfalls in diesen Zusammenhang. Denn wie man Tabelle 4.8 auf Seite 181 entnehmen kann, fällt die absolute Zufuhrzeit durch 2-EII mit größer werdendem z langsamer als die durch 1-EII, d.h. ihre relative Bedeutung im Vergleich zur 1-EII wächst mit z an.

Zusammenfassend kann man festhalten, daß die Unterschiede durch die zusätzliche Berücksichtigung der 2-EII so groß sind, daß sie nicht zugunsten kürzerer Simulationszeiten vernachlässigt werden sollten.

4.6.3 Ladungsaustausch, CX

Schon mehrfach wurde in dieser Arbeit auf die Bedeutung des Ladungsaustauschprozesses eingegangen, zuletzt bei den Erläuterungen zur Übersicht in Tabelle 4.8 auf Seite 181. Die darin zusammengestellten Prozeßraten ergeben sich jedoch aus der Mittelung der Produkte der beteiligten Dichten (siehe Tabelle 4.7 auf Seite 180) über die ganze Plasmakammer (und nicht aus dem Produkte der einzelnen Mittelwerte). Das bedeutet, daß die Beiträge zu den CX-Raten nur in den Raumbereichen groß sind, in denen auch das Produkt $n_0 \cdot n_z$ groß ist. Da n_0 und n_z jedoch entgegengesetzt verlaufende Ortsabhängigkeiten haben (siehe z.B. Abbildung 4.28 auf Seite 150), ist die über die Plasmakammer gemittelte Bedeutung des CX kleiner als die für ein einzelnes Ion, das aus dem PKB heraus in Richtung der Extraktion läuft.

Zur Beurteilung der effektiven Bedeutung wurden daher ähnlich wie im vorherigen Abschnitt Simulationen durchgeführt, in denen der Parameter `csd.kmax_cx`, der festlegt, bis zu wievielfacher Ladungsaustausch berücksichtigt werden soll, von 0 (d.h. CX bleibt völlig unberücksichtigt) bis 4 (d.h. 1- bis 4-facher CX wird mitsimuliert) variiert. Bis auf die in Tabelle 4.11 aufgeführten Parameter gleichen alle denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3.

In Tabelle 4.12 sind die extrahierten Ströme aus den Simulationen mit `csd.kmax_cx = 0, 1 und 4` aufgelistet. (Die Werte mit 2 und 3 sind aus Platz-

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd_init.ElectronDensityDistribFile</code>	<code>ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_012255.asc</code>
Prozeßparameter	
<code>csd.kmax_cx</code>	1, 2 bzw. 4
<code>csd.scale_cx</code>	1 bzw. 10
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	$2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.ions.temp.eV</code>	1 eV

Tabelle 4.11: Simulationsparameter der in diesem Abschnitt dokumentierten Simulationen, die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

z	Extrahierte Ströme I_z [μA]						
	<code>kmax_cx=0</code> (kein CX)	<code>kmax_cx=1</code> (nur 1-CX)		<code>kmax_cx=4</code> (1- bis 4-CX)		<code>kmax_cx=4, scale_cx=10</code> (zusätzl. Skal. d. σ_{cx})	
1	3.84e+00	3.94e+00	2.6%	3.98e+00	3.5%	5.55e+00	44.3%
2	2.75e+00	2.81e+00	2.3%	2.85e+00	3.5%	3.95e+00	43.6%
4	1.95e+00	1.98e+00	1.7%	2.00e+00	2.6%	2.50e+00	28.4%
6	9.83e-01	9.87e-01	0.5%	9.87e-01	0.4%	9.72e-01	-1.0%
8	3.36e-01	3.28e-01	-2.4%	3.21e-01	-4.3%	1.90e-01	-43.3%
10	3.62e-02	3.36e-02	-7.4%	3.23e-02	-10.9%	9.49e-03	-73.8%
12	2.21e-03	1.88e-03	-14.9%	1.76e-03	-20.4%	1.95e-04	-91.2%
14	4.82e-05	3.64e-05	-24.4%	3.31e-05	-31.3%	1.18e-06	-97.6%
16	3.10e-07	2.02e-07	-35.1%	1.77e-07	-43.0%	1.85e-09	-99.4%
18	2.96e-11	1.62e-11	-45.4%	1.36e-11	-53.9%	4.28e-14	-99.9%

Tabelle 4.12: Einige extrahierte Ionenströme bei unberücksichtigtem CX (`kmax_cx=0`), bei bis zu vierfachem CX (`kmax_cx=4`) und bei um Faktor 10 skalierten CX-Wirkungsquerschnitten (`kmax_cx=4, scale_cx=10`). Daneben die Differenzen der Ströme relativ zum Fall `kmax_cx=0`.

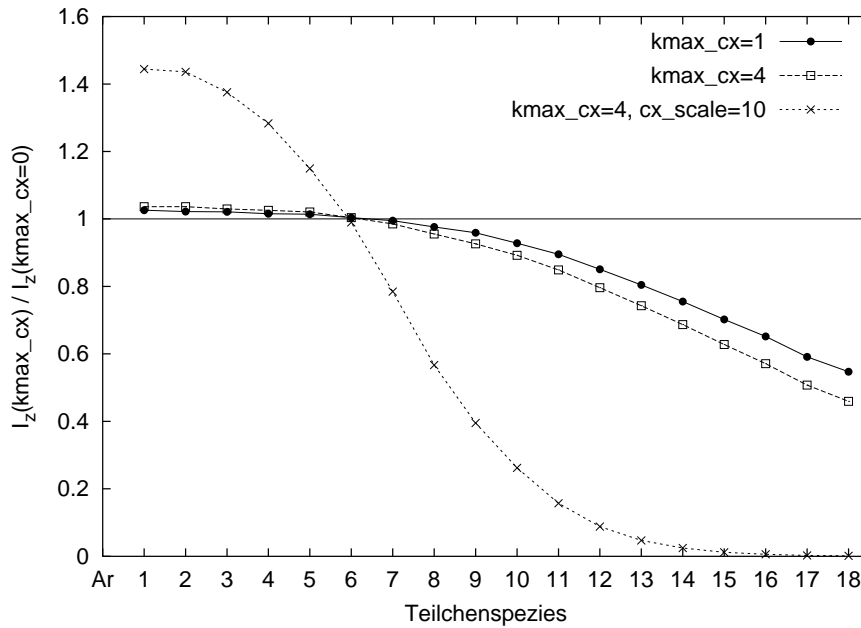


Abbildung 4.55: Extrahierte Ströme bei Berücksichtigung von 1-CX ($kmax_cx=1$) und bis zu 4-CX ($kmax_cx=4$) sowie bei um Faktor 10 skalierten CX-Wirkungsquerschnitten ($kmax_cx=4$, $cx_scale=10$) mit einer Ar-Gaszufuhr von $2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Aufgetragen ist das Verhältnis zu dem Ergebnis bei totaler Vernachlässigung des CX ($kmax_cx=0$).

gründen, und da sie sich nur marginal von denen mit `csd.kmax_cx = 1` und `4` unterscheiden, nicht mit aufgeführt.) In Abbildung 4.55 wurden die Ströme für die Fälle `csd.kmax_cx = 1` und `4` (jeweils im Verhältnis zu den Strömen bei totaler Vernachlässigung des CX, `csd.kmax_cx = 0`) dargestellt.

Durch den k -CX werden Ionen mit $z \geq k$ und Neutralteilchen zugunsten $(z - k)$ -fach sowie k -fach geladener Ionen abgebaut. Mit den in Abschnitt 3.5.3 diskutierten CX-Wirkungsquerschnitten zeigt sich für die 1- bis 8-fach geladenen Ar-Ionen ein letztlich positiver, aber mit weniger als 5% nur geringer Effekt. Für die höher geladenen Ar-Ionen ist der CX erwartungsgemäß von zunehmend negativer Bedeutung. Für Ar^{13+} , das in ECRIS 3 noch beobachtet werden konnte, ergibt sich hier ein etwa 20%iger Effekt, der somit nicht mehr vernachlässigbar ist.

Insgesamt sind die Einflüsse allerdings im Vergleich zur 2-EII relativ klein (vergleiche die *logarithmische* Darstellung der Effekte der 2-EII in Abbildung 4.53). Die Bedeutung des mehrfachen CX ist insbesondere für $z \leq 9$ im Vergleich zum 1-CX nur noch so gering, daß er bei Bedarf zugunsten kürzerer Rechenzeiten vernachlässigt werden könnte. (Alle in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen liefen jedoch mit `csd.kmax_cx=4`.)

Zehnfach größere CX-Querschnitte

Wie in Abschnitt 3.5.3 beschrieben, gibt es noch eine gewisse Unsicherheit bzgl. der tatsächlichen Größe der Wirkungsquerschnitte für den Ladungsaustausch bei den

im Vergleich zu den Vermessungsexperimenten sehr kleinen Stoßenergien.

Nimmt man großzügig an, alle CX-Querschnitte seien um den Faktor 10 größer, so macht sich dies sehr deutlich bemerkbar, wie die ebenfalls in Tabelle 4.12 und Abbildung 4.55 aufgeführte Simulation mit den Parametern `csd.kmax_cx = 4` und `csd.cx_scale = 10` zeigt.

Daß dies so drastisch ist, läßt sich wie im vorigen Abschnitt darauf zurückführen, daß sich mit ansteigender Dichte niedrig geladener Ionen aber konstanter Dichte heißer Elektronen der Ioneneinschluß verschlechtert (siehe Abschnitt 4.5), was besonders für die hochgeladenen Ionen extreme Auswirkungen hat.

Hieraus folgt, daß eine genauere Kenntnis der CX-Wirkungsquerschnitte bei den niedrigen Energien für die Simulationen von hohem Interesse sind.

4.6.4 Ionentemperatur und stoßbedingter Ioneneinschluß

Die Ionentemperatur T_i bestimmt maßgeblich den stoßbedingten Einschluß der Ionen im PKB. Denn da die ii-Stoßrate t_{ii}^{-1} nach (2.35) nur mit $T_i^{-3/2}$ fällt, die mittlere Teilchengeschwindigkeit \bar{v} jedoch mit T_i^2 steigt, verlängert sich die mittlere zwischen zwei Stößen zurückgelegte Strecke $\bar{l} = \bar{v} \cdot t_{ii}$ mit $T_i^{1/2}$. Der Diffusionskoeffizient $D \sim \bar{v} \cdot \bar{l}$ [Rei87, Gl. (12.5.6)] wächst somit mit $T_i^{5/2}$.

Das bedeutet, daß der stoßbedingte Ioneneinschluß im PKB mit steigender Temperatur sinkt.

Experimentelle Befunde

Die Apparatur, an der die ECRIS 3 für Experimente mit hochgeladenen Ionen an Festkörperoberflächen eingesetzt wurde [Duc99, Mro01], bot die Möglichkeit mit Hilfe eines elektrostatischen Halbkugelspektrometers die Energieverteilung der extrahierten und separierten Ionen zu vermessen. Dieses maß den Teilchenstrom der Ionen (Ladung $q = z \cdot e$), deren kinetische Energie $E_{kin,Detektor}$ an der Eingangsblende mit $E_{kin,Detektor} = U_{Detektor} \cdot q$ der variierbaren Detektorspannung $U_{Detektor}$ entsprach.

Die kinetische Ionenenergie am Detektor ergibt sich (wobei Ionenquelle und Spektrometer auf gleichem elektrischen Potential liegen) aus kinetischer Energie im Plasma $E_{kin,Plasma}$ und dem Plasmapotential U_{Plasma} (siehe Abbildung 3.3 auf Seite 43) gem. $E_{kin,Detektor} = E_{kin,Plasma} + U_{Plasma} \cdot q$, so daß für die vom Spektrometer detektierten Ionen gilt:

$$U_{Detektor} = U_{Plasma} + E_{kin,Plasma}/q. \quad (4.39)$$

In Abbildung 4.56 ist ein typisches Energiespektrum von extrahierten O^{7+} -Ionen gezeigt, wobei an der Abszisse $U_{Detektor}$ aufgetragen ist. Die Lage des Peaks bei etwa 6,2 V liefert nach (4.39) das Plasmapotential, wenn man vereinfachend annimmt, daß $E_{kin,Plasma}$ im Mittel verschwindet.

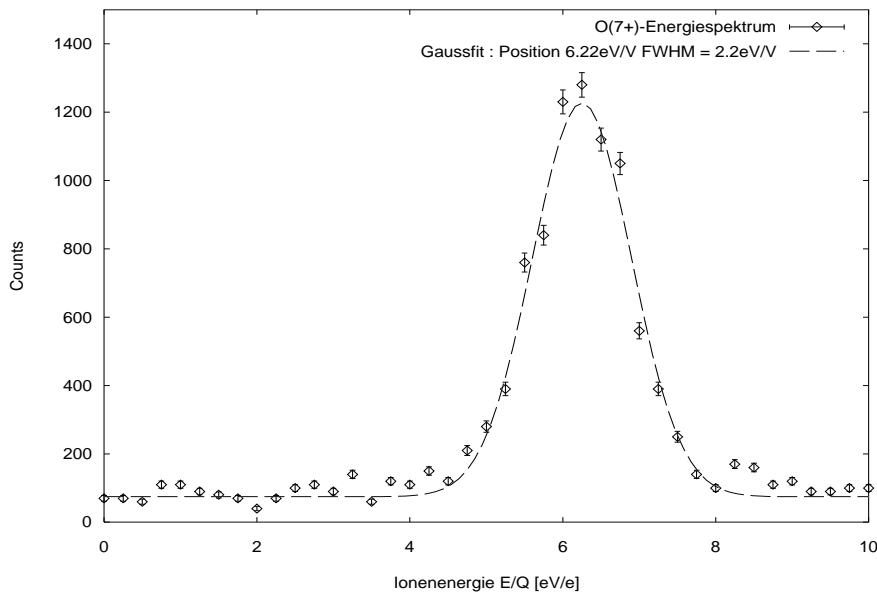


Abbildung 4.56: Energiespektrum von O^{7+} aus ECRIS 3. Auf der Abszisse ist die Spannung aufgetragen, mit der die Ionen durch das Spektrometer gelangen und detektiert werden konnten. Aufgrund der Spektrometereigenschaften entspricht dies der kinetischen Energie der Teilchen dividiert durch ihre Ladung. Die Lage des Peaks entspricht dem Plasmapotential (siehe Text). Freundlichst von J. MROGENDA zur Verfügung gestellt [Mro01, Abb. 2.12, S. 23]. (Die physikalische Einheit von Lage und Breite des Peaks in der Legende muß eigentlich wie in der Abszissenbeschriftung eV/e lauten.)

Die Halbwertsbreite von 2,2 V (dies entspricht einer Breite der Energieverteilung von $7e \cdot 2,2V = 15,4 eV$) ist gem. (4.39) sowohl Folge der thermischen Geschwindigkeitsverteilung der Ionen als auch der Schwankungen des Plasmapotentials²⁸.

Experimentell wurde immer wieder beobachtet, daß die Breiten der Energieverteilungen (etwa linear) mit der Ionenladung anstiegen (entsprechend konstanter Breiten der Meßkurven). Ginge man davon aus, daß U_{Plasma} keinen zeitlichen Schwankungen unterläge, bedeutete dies, daß die Iontemperatur mit der Ladung anstiege. (Dies scheint auf den ersten Blick plausibel, da die Ionenheizung durch heiße Elektronen nach (2.54) proportional zu z^2 ist.) Wie in Abschnitt 3.8 vorgerechnet wurde, sind die charakteristischen Zeiten, in denen Ionenpopulationen unterschiedlicher Temperatur hier ihre Temperaturen angleichen, jedoch so klein, daß man von einer für alle Ladungszustände gleichen Iontemperatur ausgehen kann!

Die *Zunahme* der Breite der Energieverteilungen mit z ist somit auf die Schwankungen des Plasmapotentials zurückzuführen.

Daher kann aus der Halbwertsbreite der Meßkurven nur eine obere Grenze für die Iontemperatur gezogen werden.

Lage und Breite der Ionenenergiespektren der ECRIS 3 variierten mit den Betriebsparametern. Die minimalen Halbwertsbreiten lagen bei etwa 1 eV pro Ladungszahl

²⁸Das Auflösungsvermögen des Spektrometers von 1,5% [Duc99] ist hier vernachlässigbar.

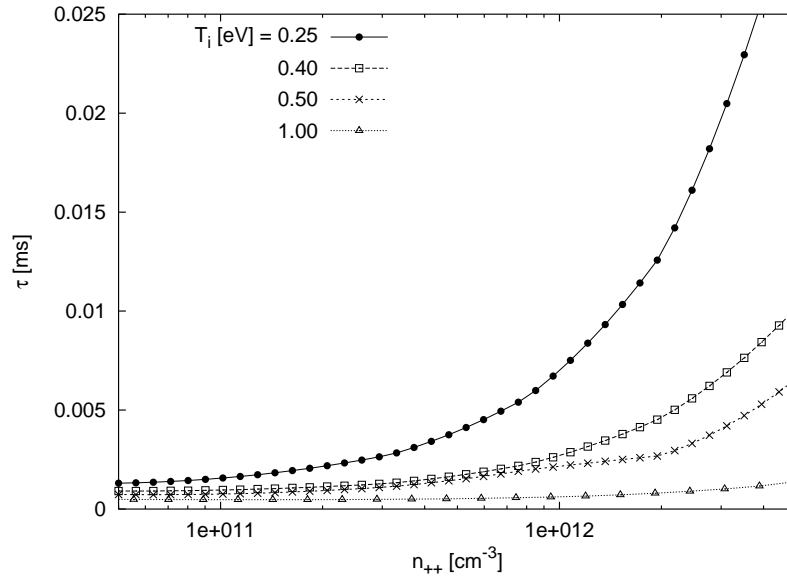


Abbildung 4.57: Stoßbedingte Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ der Ar^{8+} bei den angesetzten Iontemperaturen in einer PKB-Zelle in Abhängigkeit von der Dichte n_{++} , entsprechend Abbildung 3.28 auf Seite 94.

der analysierten Ionenstrahlen [Mro97, Abb. 3.24, S. 63], [Rü97, Kap. 8.8]. Daraus folgt für die T_i eine obere Grenze von 1 bis 2 eV.

Simulationen mit unterschiedlicher Iontemperatur

Im Rahmen des Modells geht die Iontemperatur an folgenden Stellen direkt ein:

- über l_1 aus (3.84) in $\frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$, $\frac{d}{dt} \langle \Delta v_{\parallel} \rangle$ und $\frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ aus (3.78) bis (3.80) bei der Monte-Carlo-Simulation der Ionen zur Bestimmung der mittleren, stoßbedingten Aufenthaltszeiten in den Zellen des PKBs sowie
- über (B.17), (B.15), (B.16), (3.123) und schließlich (3.122) in die Ionendichten außerhalb des PKBs.

Da T_i aufgrund der sehr rechenintensiven Monte-Carlo-Simulationen während einer Simulation der zeitlichen Entwicklung der CSD als fest gegeben betrachtet werden muß, müßte eigentlich schon vor der Simulation die Endtemperatur der Ionen bekannt sein, damit das Endergebnis mit dieser konsistent ist.

Zur Überprüfung, wie wichtig die vorausgehende Kenntnis von T_i ist, werden hier vier Simulationen mit unterschiedlichen Werten von T_i , ansonsten aber gleichen Parametern verglichen.

Transportparameter	
<code>transp.ions_temp.eV</code>	0.25, 0.40, 0.50 bzw. 1.00 eV

Tabelle 4.13: Simulationsparameter der in diesem Abschnitt dokumentierten Simulationen, die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

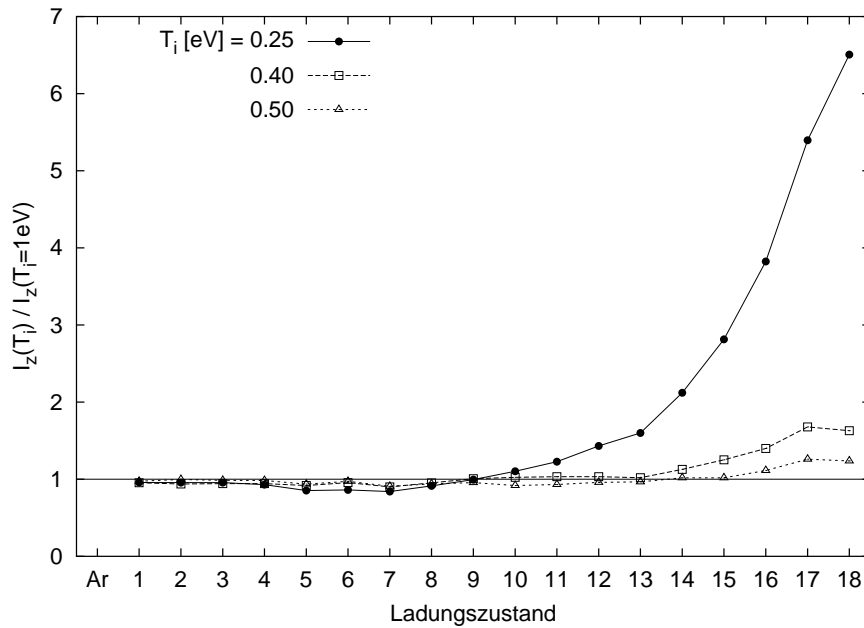


Abbildung 4.58: Extrahierte Ströme.

Abbildung 4.57 zeigt, wie stark der stoßbedingte Ionentransport (hier beispielsweise von Ar^{8+}) in einer einzelnen repräsentativen PKB-Zelle mit kleiner werdendem T_i ansteigt. Da diese Daten per Monte-Carlo-Simulation gewonnen werden, wächst auch die für eine ausreichende Statistik benötigte Zeit mit kleiner werdendem T_i drastisch an. Während für alle bei $T_i = 1$ eV durchgeführten Simulationen ca. 30 PCs mit einer Rechenleistung von ca. 800 MHz gleichzeitig in der Größenordnung von 24 Stunden ununterbrochen beschäftigt sind, mußte auf das Ergebnis für $T_i = 0,25$ eV etwa drei Wochen gerechnet werden!

z	Extrahierte Ströme [$e\mu\text{A}$]			
	transp.ions.temp.eV			
	0,25 eV	0,40 eV	0,50 eV	1,00 eV
1	2.06e+00	2.05e+00	2.09e+00	2.15e+00
2	1.63e+00	1.60e+00	1.70e+00	1.71e+00
3	1.38e+00	1.36e+00	1.43e+00	1.45e+00
4	1.10e+00	1.12e+00	1.16e+00	1.18e+00
5	8.40e-01	9.04e-01	9.21e-01	9.85e-01
6	5.73e-01	6.36e-01	6.47e-01	6.66e-01
7	3.90e-01	4.18e-01	4.22e-01	4.64e-01
8	2.37e-01	2.47e-01	2.44e-01	2.60e-01
9	9.95e-02	1.01e-01	9.57e-02	1.00e-01
10	3.73e-02	3.46e-02	3.10e-02	3.38e-02
11	1.20e-02	1.01e-02	9.10e-03	9.77e-03
12	3.22e-03	2.32e-03	2.16e-03	2.25e-03
13	6.79e-04	4.33e-04	4.10e-04	4.25e-04
14	1.21e-04	6.44e-05	5.81e-05	5.71e-05
15	1.68e-05	7.47e-06	6.08e-06	5.97e-06
16	1.49e-06	5.44e-07	4.32e-07	3.89e-07
17	2.12e-08	6.60e-09	4.96e-09	3.93e-09
18	2.37e-10	5.93e-11	4.50e-11	3.64e-11

Tabelle 4.14: Extrahierte Ströme aus den Simulationen zur Temperaturabhängigkeit.

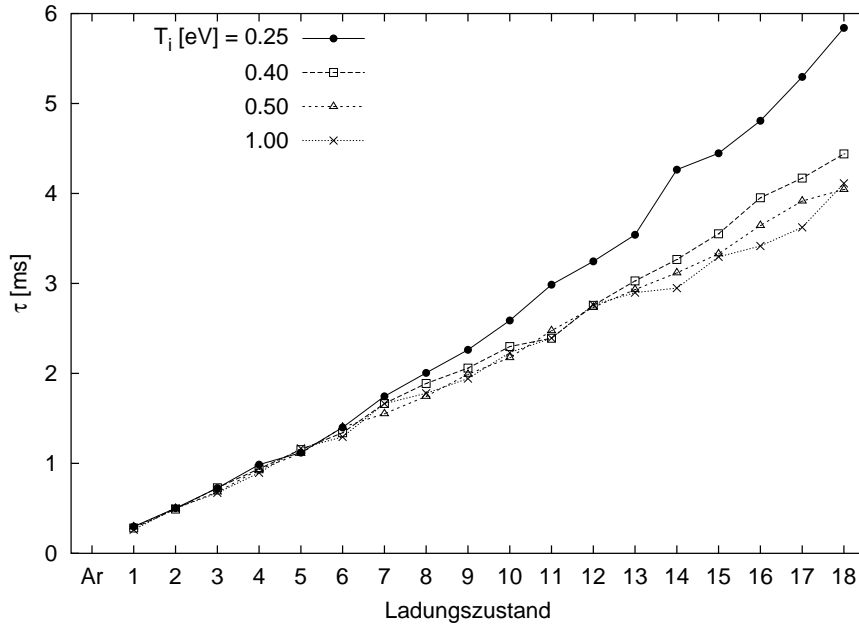


Abbildung 4.59: Resultierende, totale Ioneneinschlußzeiten τ_z^{loss} .

Der Einfluß von T_i (über die Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ der einzelnen PKB-Zellen) auf das gesamte System stellt sich jedoch als geringer heraus (siehe Tabelle 4.14 auf der vorherigen Seite mit einigen extrahierten Strömen). Abbildung 4.58 zeigt die so bestimmten extrahierten Ströme, jeweils normiert auf die entsprechenden Werte aus der Simulation mit $T_i = 1$ eV. In Abbildung 4.59 sind die totalen Einschlußzeiten τ_z^{loss} dargestellt. Im Bereich von $z = 1$ bis 10 sind die Unterschiede vernachlässigbar. Erst für noch höhere Ladungszustände macht sich T_i wirklich bemerkbar.

Da die Dichten dieser hochgeladenen Zustände im Vergleich zu den niedrigen zu vernachlässigen sind, ist ihr Beitrag zur Ionenheizung durch die heißen Elektronen gem. (2.54) sehr klein. Dadurch unterscheiden sich die vier a posteriori aus den PKB-Dichten berechneten Iontemperaturen nur marginal. Wie schon in der Beispielsimulation erwähnt, ergibt sich gem. (2.54) eine Temperatur von 0,29 eV, so daß die Ströme aus einer Simulation, in der T_i -Input und T_i -Output gleich wären, in Abbildung 4.58 etwas unterhalb der Kurve mit $T_i = 0,25$ eV liegen müßten.

Fazit

Bezüglich der extrahierten Ströme ist der stoßbedingte Einschluß für $z \leq 10$ vernachlässigbar, so daß sich in diesem Bereich der für die Simulationen angesetzte Wert auch von dem sich tatsächlich einstellenden unterscheiden kann.

Wird Wert auf Genauigkeit bei höher geladenen Zuständen gelegt, so sollten die Simulationen T_i solange wiederholt werden, bis Input- und Outputwert der Iontemperatur gut übereinstimmen.

4.6.5 Quasineutralität und elektrostatischer Ioneneinschluß

In Kapitel 3.6.2 wurde der Ansatz erläutert, mit dem die vom Plasma angestrebte Quasineutralität (QN) behandelt wird. Um eine aufwendige Berechnung von elektrostatischen Feldern zu vermeiden, werden die Einschlußzeiten $\tau_{z,c}$ der Ionen in den PKB-Zellen c gem. (3.105) so stark erhöht, daß die QN gerade nicht verletzt wird²⁹:

$$\tau_{z,c} = \tau_{z,c}^{E=0} + \underbrace{\xi_c \cdot z^\kappa}_{\geq 0}. \quad (3.105b)$$

Dabei sind die $\tau_{z,c}^{E=0}$ die Einschlußzeiten der Ladungszustände z im E-Feld freien Fall, die per Monte-Carlo-Simulation bestimmt werden (siehe Abschnitt 3.6.1). Während der eigentlichen Simulation der CSD wird κ als Konstante betrachtet, die bestimmt, wie stark die Abhängigkeit des elektrostatischen Anteils der Einschlußzeit von der Ladung $z \cdot e$ einer Spezies ist. Der Steigungsfaktor ξ_c wird während der Simulation dynamisch so angepaßt, daß die QN gerade nicht verletzt wird. So wird individuell mit jeder Zelle c des PKB verfahren.

In den bisher vorgestellten Simulationen wurde (in Anlehnung an die Meßergebnisse von DOUYSET *et al.* [DKGB00]) mit $\kappa = 1$ immer eine lineare Ladungsabhängigkeit der $\tau_{z,c}$ angesetzt, die sich auch in den daraus resultierenden, *totalen* Ioneneinschlußzeiten τ_z^{loss} immer wieder herausstellte (siehe Abbildungen 4.32 auf Seite 155, 4.45 auf Seite 171, 4.51 auf Seite 176 oder 4.54 auf Seite 184)

Der Ansatz (3.105) ist in seiner mathematischen Form jedoch nicht physikalisch-mathematisch hergeleitet, sondern nur qualitativ und anhand der zitierten, experimentellen Ergebnisse von DOUYSET *et al.* begründet worden. Er stellt damit den wahrscheinlich schwächsten Punkt in diesem Modell dar.

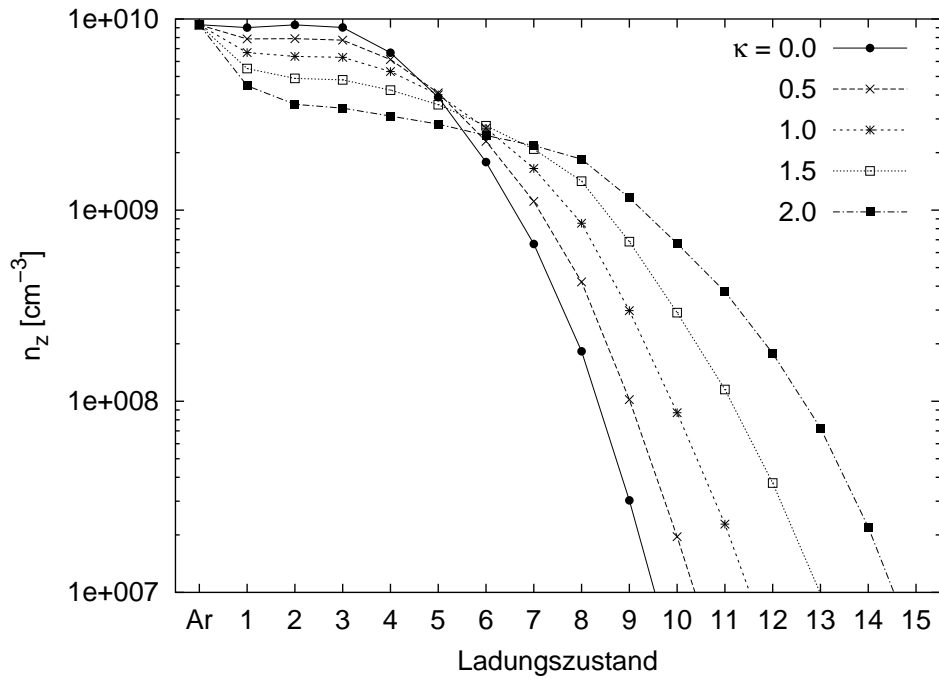
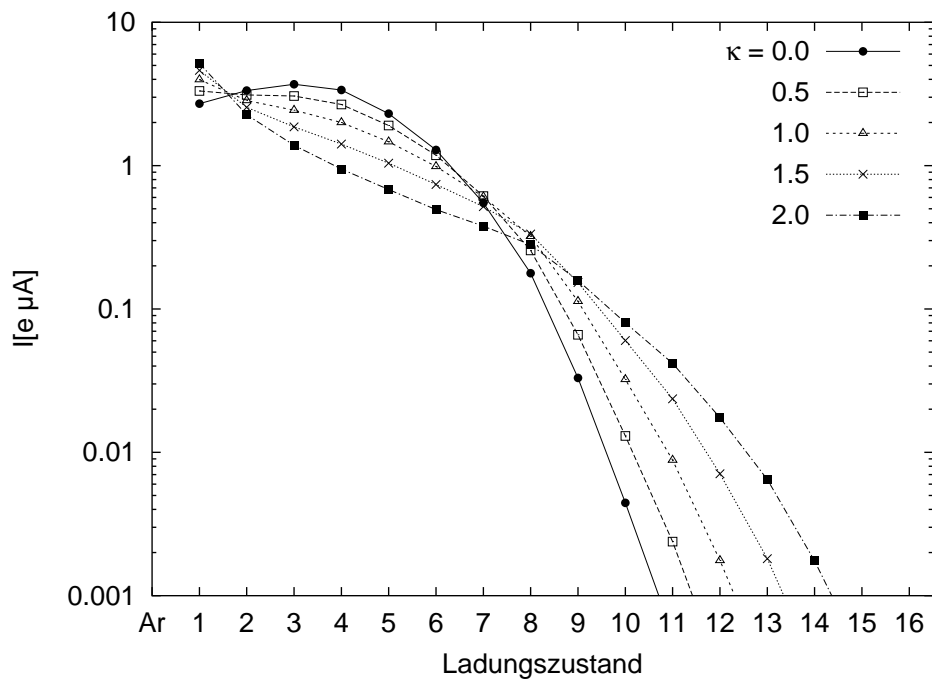
Um zu sehen, wie stark der Einfluß von κ ist, werden hier fünf Simulationen verglichen, in denen κ (Simulationsparameter `csd.kappa_tauQN`) im Bereich von 0 bis 2 variiert wurde. Alle anderen Parameter unterscheiden sich lediglich durch die in Tabelle 4.15 aufgeführten von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3.

In den Abbildungen 4.60, 4.61 und 4.62 sind die so erhaltenen mittleren Dichten im PKB, die extrahierten Ströme und die τ_z^{loss} der Ionen dargestellt.

²⁹Da in den vorgestellten Simulationen immer nur mit Ar als einzigem Gas gearbeitet wird, kann der allgemeinere Index für die Teilchenspezies s aus (3.105) im folgenden durch den konkreten Ladungszustand z ersetzt werden.

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd_init.ElectronDensityDistribFile</code>	<code>ecris3/2002/03mrz/00mm/edistrib/density_012255.asc</code>
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	$2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
<code>transp.ions.temp.eV</code>	1 eV
<code>transport.kappa_tauQN</code>	von 0 bis 2 in Schritten von 0,5

Tabelle 4.15: Simulationsparameter der in diesem Abschnitt dokumentierten Simulationen, die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

Abbildung 4.60: PKB-Dichten bei verschiedenen κ aus (3.105b).Abbildung 4.61: Extrahierte Ströme bei verschiedenen κ aus (3.105b).

Mit $\kappa = 0$ werden im Falle der QN-Erhaltung (je Zelle c) alle Einschlußzeiten $\tau_{z,c}$ um den gleichen Betrag $\xi_c \cdot z^0 = \xi_c$ erhöht. Da dabei im Vergleich zum Fall $\kappa = 1$ die hochgeladenen Ionen weniger gut eingeschlossen sind, müssen die niedrig gela-

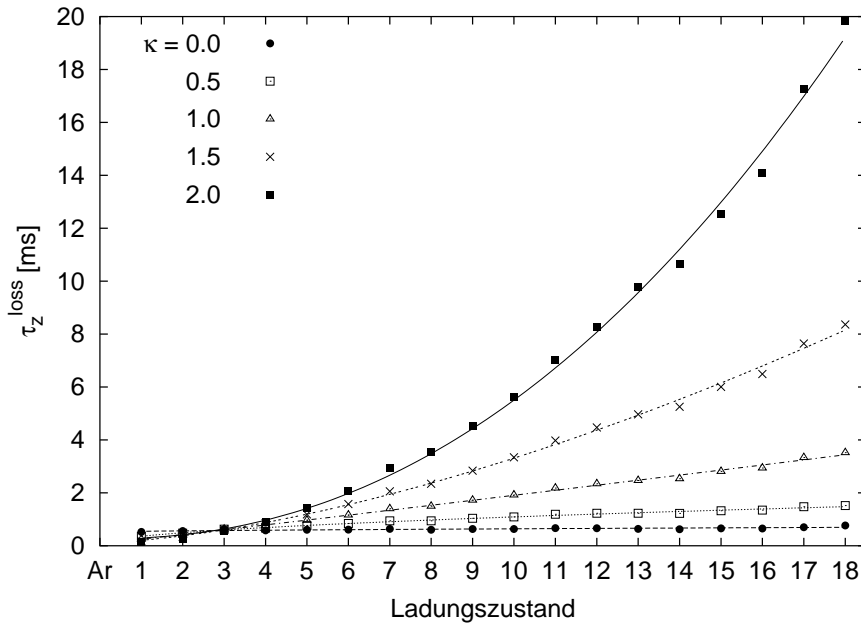


Abbildung 4.62: Totale Ioneneinschlußzeiten τ_z^{loss} in Abhängigkeit von verschiedenen κ aus (3.105b). Die Parameter zu den Fits sind in Tabelle 4.16 auf der nächsten Seite aufgelistet.

denen besser eingeschlossen werden, um bei gleicher Elektronendichte die negativen Ladungen kompensieren zu können. Aus diesem Grund sinken vor allem die Ströme der Ar^+ , die (gemittelt über die ganze Plasmakammer) die größte Dichte haben. Von ihrem erhöhten Einschluß profitieren die nächst höheren Ladungszustände, da sie dadurch eine höhere Teilchenzufuhr durch EII bekommen. Für $z \geq 7$ wird dieser positive Effekt durch den schlechteren Einschluß kompensiert.

Letztlich bildet sich durch den Übergang von $\kappa = 0 \rightarrow 1$ in der für $\kappa = 1$ mit z fallenden "Kurve" der extrahierten Ströme ein Maximum (hier bei $z = 3$) heraus, was *qualitativ* besser zu den experimentellen Ergebnissen paßt, die bei ECRIS 3 im Spektrum der extrahierten Ströme auch das Maximum bei dem Ladungszustand z_{opt} haben, auf den optimiert wurde, sofern z_{opt} kleiner 8 blieb. (Das ist bei ECRIS 3 der höchste Ladungszustand, auf den das Maximum im Spektrum der extrahierten Ströme optimiert werden kann [Mü]. Optimiert man die Quelle auf Ar^{9+} oder höher, wird das Maximum im Spektrum bei einem kleineren Ladungszustand liegen.)

Setzt man $\kappa = 2$ und betont somit die höher geladenen Zustände bei der Gewährleistung der QN, so führt dies im Vergleich zu $\kappa < 2$ zu einem stärkeren Verlust von Ar^+ (und somit höheren Strömen von Ar^+), der sich negativ auf die EII-Zufuhrraten und somit auch auf die Ströme der nächst höher geladenen Zustände auswirkt. Dies wird jedoch mit z zunehmend durch den besseren Einschluß kompensiert, so daß (hier ab $z = 8$) die Ströme im Vergleich zu $\kappa < 2$ wieder größer sind.

Überprüfung der z -Abhängigkeit der totalen Einschlußzeiten

Wie oben erläutert, paßt eine lineare z -Abhängigkeit der τ_z^{loss} zu den Messungen von DOUYSET *et al.* und wäre damit eine (wenn auch schwache) Legitimation für den Ansatz (3.105). Des weiteren könnte die Linearität sogar als Hilfskriterium für die Wahl des "richtigen" Wertes für κ dienen.

Daher wurde durch die τ_z^{loss} jeweils eine Kurve der Form

$$\tau'_z = b + m \cdot z^{\kappa'} \quad (4.40)$$

gefittet. Die sich ergebenden Fitparameter b , m , κ' und ihre Standardabweichungen σ_b , σ_m , $\sigma_{\kappa'}$ sind in Tabelle 4.16 zusammengestellt.

$\kappa = \text{csd.kappa_tauQN}$	b	$\pm\sigma_b$	m	$\pm\sigma_m$	κ'	$\pm\sigma_{\kappa'}$
0.00	0.521	± 0.064	0.026	± 0.044	0.65	± 0.46
0.50	0.072	± 0.098	0.287	± 0.074	0.55	± 0.07
1.00	0.080	± 0.073	0.168	± 0.029	1.04	± 0.05
1.50	0.123	± 0.102	0.086	± 0.015	1.57	± 0.06
2.00	0.260	± 0.192	0.034	± 0.008	2.19	± 0.08

Tabelle 4.16: Fitparameter b , m , κ' der Fitfunktion (4.40) und die zugehörigen Standardabweichungen der Kurven in Abbildung 4.62 durch die totalen Ioneneinschlußzeiten τ_z^{loss} .

Im Fall `csd.kappa_tauQN=0` ist der numerische Fit aufgrund der wenn überhaupt nur sehr schwachen Abhängigkeit der resultierende τ_z^{loss} von z sehr ungenau, weswegen die Standardabweichungen σ_m und $\sigma_{\kappa'}$ relativ groß sind. Optisch ist jedoch sehr gut zu erkennen, daß die τ_z^{loss} praktisch unabhängig von z sind, κ' also nahezu null ist. Für die drei anderen Kurven stimmen `csd.kappa_tauQN` und κ' gut überein.

Betrachtet man jedoch die Verläufe der τ_z^{loss} zu den Simulationen mit `csd.kappa_tauQN` ≤ 1.5 , so könnte man diese guten Gewissens auch als linear ansehen, insbesondere, wenn man die Meßdaten von DOUYSET *et al.* als Linearitätsmaßstab heranzieht (siehe [DKGB00, Abb. 8]).

Hinzukommend zeigen DOUYSET *et al.* nur Meßdaten im Bereich $9 \leq z \leq 16$, worin sogar die τ_z^{loss} mit `csd.kappa_tauQN=2` als linear betrachtet werden können.

Fazit

In allen fünf Simulationen können die τ_z^{loss} in dem von DOUYSET *et al.* veröffentlichten Bereich $9 \leq z \leq 16$ als näherungsweise linear von z abhängig gelten, so daß ihr Verlauf leider keine Hilfe für die Bestimmung eines "richtigen" Wertes für κ im Ansatz (3.105) ist.

Die starke Abhängigkeit der extrahierten Ströme vom angesetzten κ macht deutlich, wie wichtig eine gute Beschreibung des elektrostatischen Einschusses ist. Der in Abschnitt 3.6.2 beschriebene Ansatz (3.105) ist (unter anderem aufgrund der

Unkenntnis von κ) noch mit großen Unsicherheiten verbunden. Er darf nur als allererster Versuch verstanden werden.

4.7 Bedeutung der Elektronendichte

Wie schon mehrfach dargelegt wurde, sind die heißen Elektronen die wichtigste Teilchenspezies im Plasma der EZR-Ionenquellen. In Kapitel 3.3 wurde erläutert, welche Prozesse ihre Dichte $n_{e,hot}$ bestimmen. Bei der Berechnung der Gewinn- und Verlustraten mußten bzgl. der Teilchenzufuhr und der Begrenzung von $n_{e,hot}$ durch den Mikrowellen-Cut-off so starke Vereinfachungen vorgenommen werden, daß mit dieser Modellierung des Elektronenhaushaltes nur sehr qualitative Ergebnisse zu erzielen sind. Letztlich muß der sich im Gleichgewicht einstellende Wert von $\bar{n}_{e,hot}$ vom Simulator festgelegt werden.

Da es in der ECRIS 3 keine Messungen der Elektronendichte gibt, bestehen zu den dort tatsächlich herrschenden Werten lediglich Anhaltspunkte wie die kritische Dichte n_c nach (2.69), die bei der verwendeten Mikrowellenfrequenz von 6,7 GHz bei $n_c = 5,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ liegt.

Mit der Simulation ist es möglich zu untersuchen, wie stark der Einfluß von $n_{e,hot}$ auf die extrahierten Ströme ist. Dazu wurde $\bar{n}_{e,hot}$ (Mittelwert über die gesamte Plasmakammer) im Bereich von $2 \cdot 10^9$ bis 10^{11} cm^{-3} auf bestimmte Werte (siehe Tabelle 4.19 auf der nächsten Seite) gesetzt, indem der Ioneneinschluß $\tau_{e,hot}$ aus (3.15) (Simulationsparameter `csd.tau_eHot`) mit 10^3 s praktisch auf unendlich und die obere Grenze (Simulationsparameter `csd.n_eHot_mean_max`) auf den gewünschten Wert von $\bar{n}_{e,hot}$ gesetzt wurde (siehe Abbildung 4.63).

Bis zu $\bar{n}_{e,hot} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ wird die kritische Dichte n_c der Elektronen auch am

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd.tau_eHot</code>	10^3 s
<code>csd.n_eHot_mean_max</code>	$2 \cdot 10^{15}, 5 \cdot 10^{15}, 1 \cdot 10^{16}, 2 \cdot 10^{16}, 5 \cdot 10^{16}, 1 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	10^{14} s^{-1}
Transportparameter	
<code>transp.ions_temp_eV</code>	0,25 eV

Tabelle 4.17: Simulationsparameter der Simulationsreihe bei relativ niedriger Ar-Zufuhr von nur 10^{14} s^{-1} , die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

Parameter der heißen Elektronen	
<code>csd.tau_eHot</code>	10^3 s
<code>csd.n_eHot_mean_max</code>	$2 \cdot 10^{15}, 5 \cdot 10^{15}, 1 \cdot 10^{16}, 2 \cdot 10^{16}, 5 \cdot 10^{16}, 1 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$
Gasparameter	
<code>csd.GasFlow_1</code>	10^{15} s^{-1}
Transportparameter	
<code>transp.ions_temp_eV</code>	1 eV

Tabelle 4.18: Simulationsparameter der Simulationsreihe bei relativ hoher Ar-Zufuhr von 10^{15} s^{-1} , die sich von denen der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 unterscheiden.

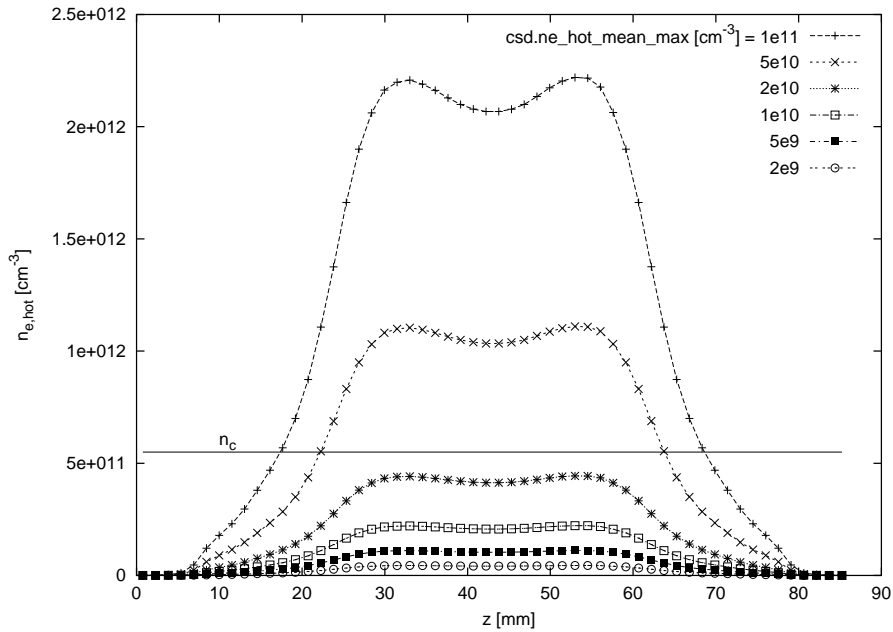


Abbildung 4.63: Verläufe der angesetzten Elektronendichten $n_{e,hot}(z)$ entlang der Symmetrieachse. Eingetragen ist auch die kritische Dichte n_c nach (2.69) für die Mikrowellenfrequenz von 6,7 GHz.

Ort des absoluten Maximums noch nicht erreicht, so daß in der Plasmakammer nirgendwo ein Mikrowellen-Cut-off auftritt.

Mit $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ wird jedoch im Bereich maximaler Elektronendichte der Cut-off der O-Welle überschritten. Dieser Bereich erstreckt sich axial etwa von $z = 22$ bis 65 mm und hat eine radiale Ausdehnung³⁰ von etwa 4 mm . Somit wird

³⁰Den Wert kann man in Abbildung 4.22a auf Seite 144 etwa anhand der eingezeichneten Konturlinien ablesen. Dort ist das Dichteprofil der Simulation mit $\bar{n}_{e,hot} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ gezeigt. Da es sich von der mit $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ nur durch die Skalierung unterscheidet, sind beide

$\bar{n}_{e,hot} = \text{csd.n.eHot.mean.max}$ [cm ⁻³]	PKB [cm ⁻³]	Maximum [cm ⁻³]
$2 \cdot 10^9$	$1,17 \cdot 10^{10}$	$4,44 \cdot 10^{10}$
$5 \cdot 10^9$	$2,93 \cdot 10^{10}$	$1,11 \cdot 10^{11}$
$1 \cdot 10^{10}$	$5,87 \cdot 10^{10}$	$2,22 \cdot 10^{11}$
$2 \cdot 10^{10}$	$1,17 \cdot 10^{11}$	$4,44 \cdot 10^{11}$
$5 \cdot 10^{10}$	$2,93 \cdot 10^{11}$	$1,11 \cdot 10^{12}$
$1 \cdot 10^{11}$	$5,87 \cdot 10^{11}$	$2,22 \cdot 10^{12}$

Tabelle 4.19: Dichten der heißen Elektronen in den hier dokumentierten Simulationen. Von links: der als Simulationsparameter vorgegebene Mittelwert über die ganze Plasmakammer, der über den PKB gemittelte Wert, das absolute Maximum in der Plasmakammer. (In den Simulationen der anderen Abschnitte wurde allgemein mit $\text{csd.n.eHot.mean.max} = 2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ gerechnet, wodurch die kritische Dichte von etwa $5,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ auch im absoluten Maximum nicht überschritten wird.)

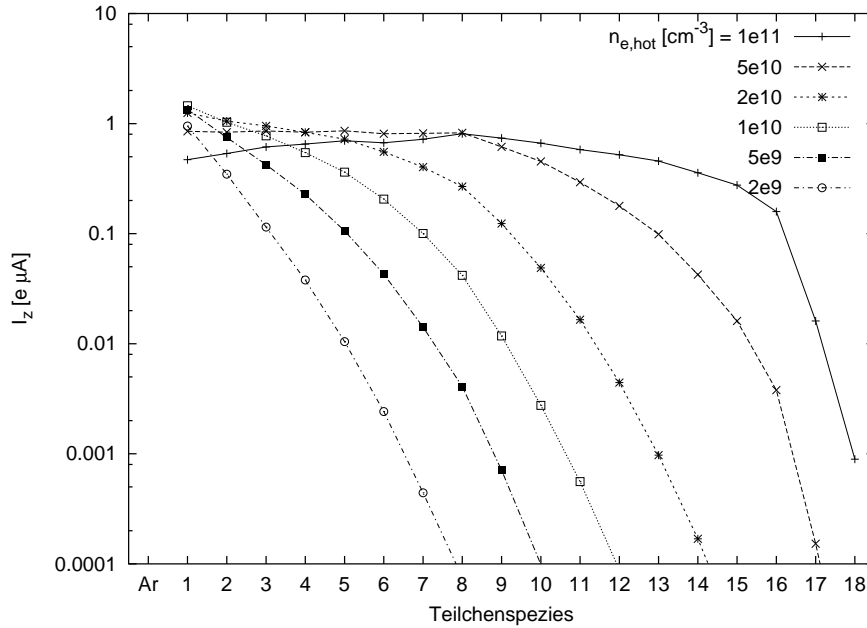


Abbildung 4.64: Extrahierte Ströme bei $I_{inlet} = 10^{14} \text{ s}^{-1}$.

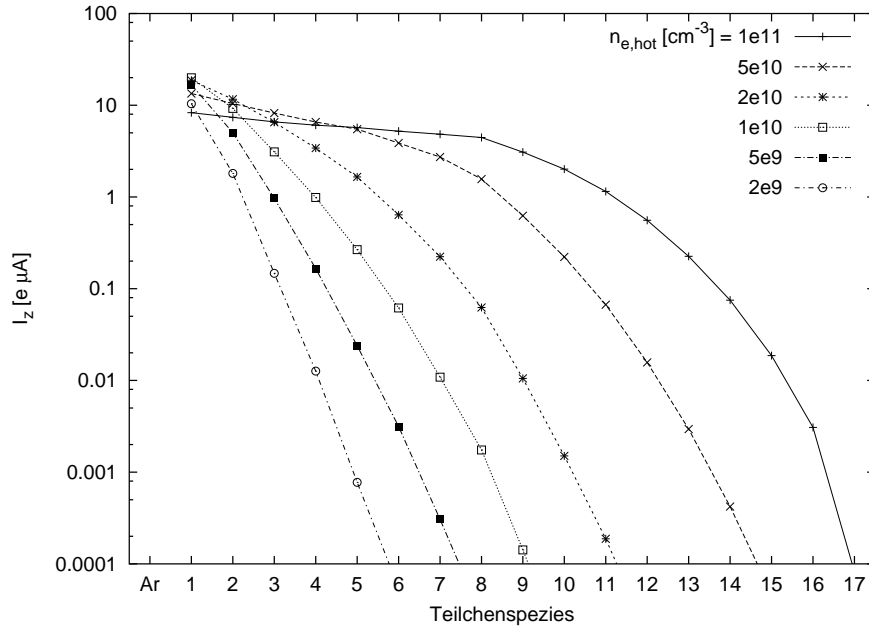
die L-Welle lediglich in einem als Zylinder genäherten Volumen von ca. $2,1 \text{ cm}^3$ der $102,7 \text{ cm}^3$ großen Plasmakammer gedämpft, wobei die Eindringtiefe noch größer als 7 mm (siehe Abbildung 3.6 auf Seite 50) ist. Alle anderen Wellentypen sind ungedämpft. Aufgrund der bzgl. des Volumens nur 2%-igen Störung ist eine so hohe Elektronendichte nicht undenkbar.

Bei der maximal angesetzten mittleren Dichte $\bar{n}_{e,hot} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ überschreitet schon die über den Plasmakernbereich gemittelte Elektronendichte den Wert von n_c (siehe Tabelle 4.19 auf der vorherigen Seite). Dennoch ist das Volumen, in dem $n_{e,hot}(\vec{r})$ die kritische Dichte n_c überschreitet, mit $(67 - 17) \cdot \pi \cdot 7^2 \text{ mm}^3 \approx 7,7 \text{ cm}^3$ immer noch nicht sehr groß. Allerdings werden an den Orten um die Dichtemaxima der heißen Elektronen dann auch die Cut-off-Dichten der L- und der X-Wellen überschritten, die etwa bei der zweifachen kritischen Dichte liegen (siehe Abbildung 2.13 auf Seite 31). Daß sich derart hohe Elektronendichten im dynamischen Gleichgewicht des Plasmas mit den Überlegungen aus Kapitel 2.5 einstellen, ist also zunehmend unwahrscheinlich. Dazu müßte eine Mikrowelle mit höherer Frequenz eingestrahlt werden (siehe Abbildung 3.5 auf Seite 49).

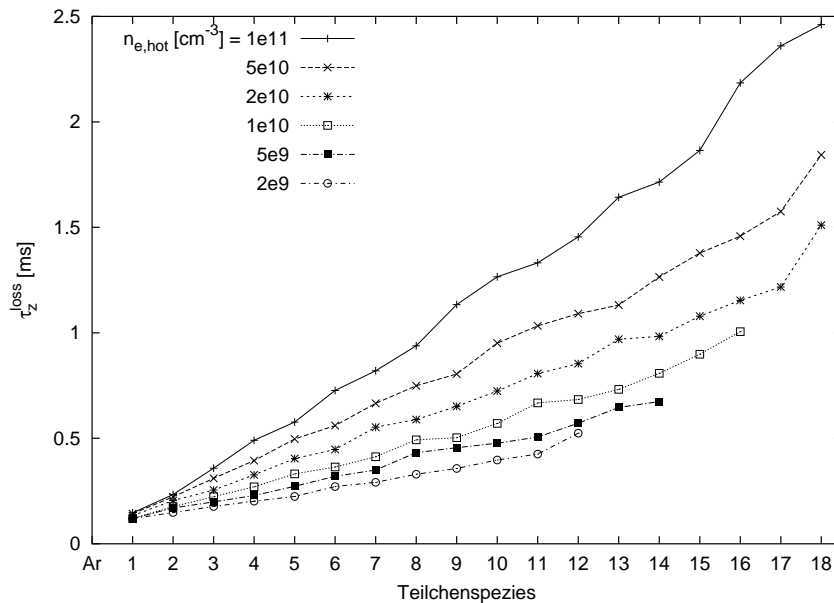
Wirkung auf die extrahierten Ströme

Da die Ergebnisse stark von der Neutralgaszufuhr I_{inlet} abhängen, wurden Simulationsreihen, in denen $\bar{n}_{e,hot}$ variiert wurde, für unterschiedliche Werte von I_{inlet} durchgeführt. Hier dargestellt sind die Ergebnisse von $I_{inlet} = 10^{14}$ und 10^{15} s^{-1} (siehe Abbildung 4.64 und 4.65).

Dichten radial bei etwa 4 mm auf die Hälfte des Maximums abgefallen.

Abbildung 4.65: Extrahierte Ströme bei $I_{inlet} = 10^{15} \text{ s}^{-1}$.

Man erkennt die starke Bedeutung der heißen Elektronen sehr deutlich. Durch die mit $n_{e,hot}$ ansteigende Elektronenstoßionisation und den immer stärkeren elektrostatischen Ioneneinschluß (siehe Abbildung 4.66) wachsen auch die extrahierten Ionenströme drastisch. Lediglich bei den niedrig geladenen Ionen kommt es ab einer bestimmten Elektronendichte wieder zu einer Senkung der Ströme, da die Teilchen verstärkt durch die Elektronenstoßionisation abgebaut werden.

Abbildung 4.66: Ioneneinschlußzeiten τ_z^{loss} für die Simulationsreihe mit $I_{inlet} = 10^{15} \text{ s}^{-1}$.

Für $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10}$ und 10^{11} cm^{-3} ergeben sich Ströme bei den hochgeladenen Zuständen, die experimentell nicht beobachtet werden können.

Die gezeigten Daten demonstrieren noch einmal, daß die Elektronendichte für eine ECRIS mit möglichst hochgeladenen Ionen so groß wie möglich sein sollte.

4.8 Mikrowellenleistung und mittlere Elektronenenergie

Die dem EZR-Plasma zugeführte Mikrowellenleistung P hat ebenfalls großen Einfluß auf die extrahierten Ionenströme. Üblicherweise wachsen diese mit P an, fallen dann aber (sofern nicht andere Parameter nachgeregelt werden) wieder ab. Bei der ECRIS 3 standen beispielsweise fast 200 W Leistung zur Verfügung, ausreichend für den Optimalbetrieb waren allgemein jedoch schon etwa 30 W [Mü00, Kap. 4.12.].

Wurde die Leistung noch deutlich erhöht, so begann ein in der Nähe der Quelle platzierter GEIGER-MÜLLER-Zähler zu reagieren. Dies wird auf Bremsstrahlung von sehr hoch geheizten Elektronen zurückgeführt, die dem magnetischen Einschluß entkommen und in die Plasmakammerwand sowie das darum befindliche Material eindringen. Es wird als Indiz dafür gewertet, daß die EZRH in der ECRIS 3 sehr effizient gewesen ist.

Da die Mikrowelle effektiv nur mit den Elektronen wechselwirkt, sollte sich eine zunehmende Leistung direkt in einer zu höheren Werten verschobenen Energieverteilung (*electron energy distribution function*, EEDF) bemerkbar machen. Dies zeigen erwartungsgemäß auch HEINENS Simulationen [Hei02, Kap. 6.6.6]. (Des weiteren verbessert sich der Einschluß der heißen Elektronen, da diesen vornehmlich Rotationsenergie zugeführt wird und sich ihre Geschwindigkeiten somit weiter von dem Verlustkegel des magnetischen Spiegelfeldes entfernen, siehe Abbildung 2.10 auf Seite 18.)

Aufgrund von HEINENS Simulationsergebnissen wird die EEDF im Rahmen dieser Simulationen als exponentiell fallend genähert (siehe Abschnitt 3.3.4).

Parameter der heißen Elektronen	
ElectronEnergyDistribFile	eedf/exp_1e2.asc, eedf/exp_1e3.asc, eedf/exp_1e4.asc, eedf/exp_1e2.asc, eedf/exp_2e4.asc, eedf/exp_1e5.asc bzw. eedf/exp_1e6.asc
Gasparameter	
csd.GasFlow_1	$1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Transportparameter	
transp.ions_temp_eV	0.4 eV

Tabelle 4.20: Simulationsparameter, in denen sich die in diesem Abschnitt dokumentierte Simulationsreihe von der Beispielsimulation in Kapitel 4.3 (siehe Tabelle 4.2 auf Seite 132) unterscheidet.

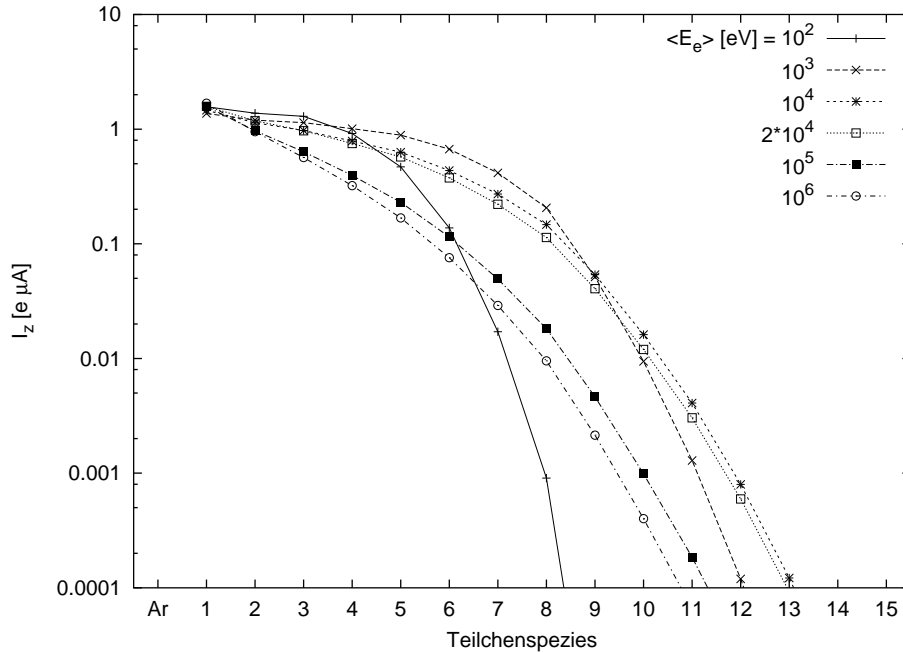


Abbildung 4.67: Extrahierte Ströme bei exponentiell fallenden EEDFs mit verschiedenen mittleren Elektronenenergien $\bar{E}_e = \langle E_e \rangle$.

In Abbildung 4.67 wird gezeigt, wie sich die mittlere Energie \bar{E}_e der Elektronen auf die CSD der extrahierten Ströme auswirkt: Bei $\bar{E}_e = 100$ eV können praktisch keine hochgeladenen Ionen extrahiert werden, da nur ein geringer Anteil der heißen Elektronen überhaupt die benötigten Ionisationsenergien überschreitet (siehe die EII-Wirkungsquerschnitte in Abbildung 3.11, 3.14 und 3.15 ab Seite 61 sowie die EII-Ratenkoeffizienten in Abbildung 3.13). Bei 10-fach höherer mittlerer Elektronenenergie ($\bar{E}_e = 1000$ eV) wird dann (unter den hier dokumentierten Simulationen) für die Ladungszustände mit $z \leq 9$ das Optimum erreicht. Die weitere Verzehnfachung von \bar{E}_e führt dann zu einer Absenkung der Ströme der Ladungszustände mit $z \leq 9$, während die höher geladenen aber noch ansteigen. Steigert man \bar{E}_e weiter, so sinken alle Ströme, da die EII-Ratenkoeffizienten aller Ladungszustände fallen.

Dies entspricht qualitativ den experimentellen Beobachtungen und erklärt sich durch die Abhängigkeiten der EII-Wirkungsquerschnitten bzw. der EII-Ratenkoeffizienten (siehe Abbildung 3.13 auf Seite 63). Es macht deutlich, daß jeder Ladungszustand seine eigene optimale EEDF hat.

Ferner zeigt diese Simulationsreihe, daß die Elektronensimulationen alleine nicht ausreichend sind, um die optimalen Betriebsparameter zu verstehen, denn diese lieferten typischerweise eine mittlere Energie von wenigen 10 keV [Hei02, Kap. 6.5 bis 6.7], die hier aber viel zu hoch ist. (Die mittlere Elektronenenergie ist natürlich von Parametern abhängig, die der Simulator bestimmt. Diese wurde allgemein jedoch so gewählt, daß mittlere Energie und Einschluß der Elektronen (im Rahmen plausibler Werte) möglichst groß wurden, da insbesondere ein hoher Elektroneneinschluß als

optimal für den Quellenbetrieb angenommen wurde.). Mit $\bar{E}_e = 20$ keV wurde im Rahmen der CSD-Simulationen aber lange (wie in allen vorigen Abschnitten) gerechnet.

4.9 Vergleich mit experimentellen Daten und abschließende Diskussion

In diesem abschließenden Kapitel des Ergebnisteils erfolgt eine Gegenüberstellung experimenteller Werte mit Simulationsdaten. Ferner werden die Grenzen des Modells diskutiert.

4.9.1 Beispiel experimenteller Daten

Aus der Fülle vermessener Extraktionsspektren der ECRIS 3 wird in Abbildung 4.68 eine Meßreihe dargestellt, in der die Abhängigkeit von der Verschiebung der Plasmakammer gegen die Magnetstruktur (siehe Abbildung 4.70) untersucht wurde. Die Quelle wurde dabei ohne Sauerstoffzufuhr betrieben, um möglichst gut simuliert werden zu können.

Bei einer Verschiebung von 0 mm verläuft das Magnetfeld auf der Symmetrieachse

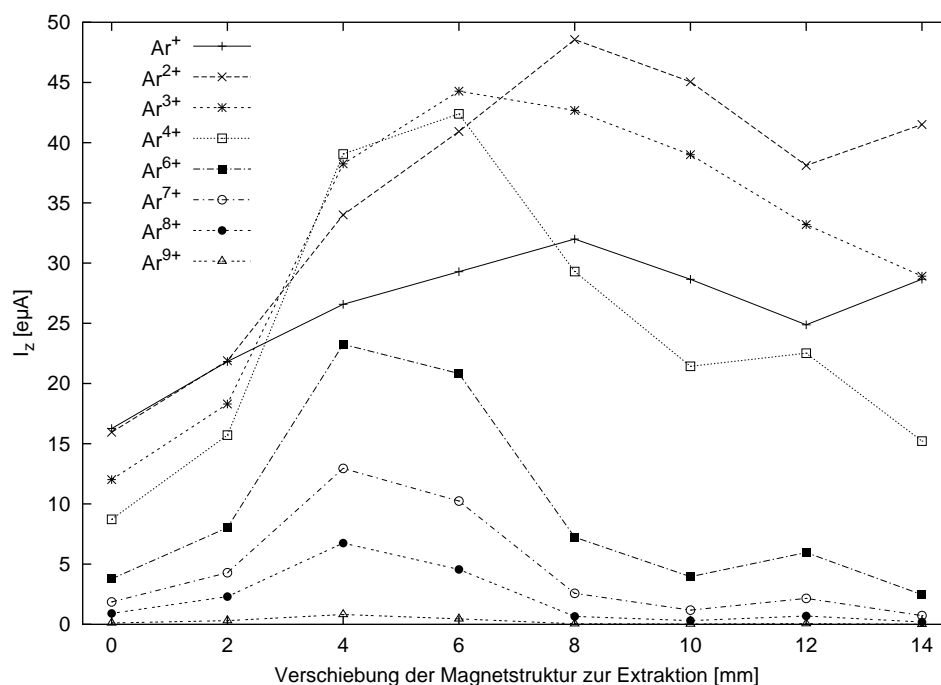


Abbildung 4.68: Beispiel für das experimentell zu beobachtende Verhalten der extrahierten Ströme der ECRIS 3 bei Verschiebung der Magnetstruktur in Richtung der Extraktion. Bei dieser Meßreihe wurde die ECRIS 3 bei der Verschiebung von 4 mm auf Ar⁸⁺ optimiert, danach blieben bis auf die Position der Magnetstruktur alle anderen Parameter fix [Mü].

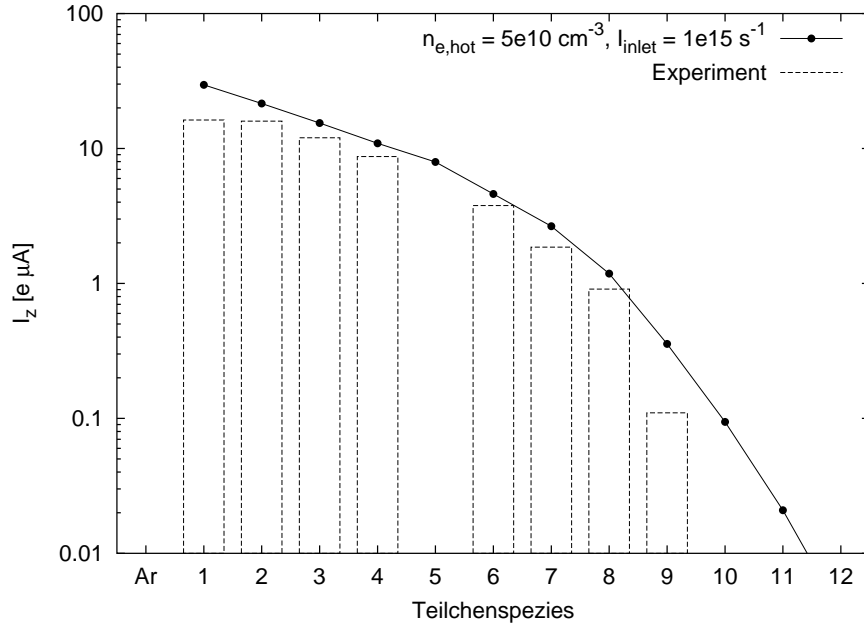


Abbildung 4.69: Vergleich der experimentellen Daten aus Abbildung 4.68 für die unverschobene Magnetstruktur mit dem Simulationsergebnis für $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ aus Abbildung 4.65 auf Seite 199. Von Ar^{5+} können keine Ströme gemessen werden, da Ar^{5+} -Ionen und O^{2+} -Ionen dasselbe m/q -Verhältnis haben, und daher nicht separiert werden können (siehe Abbildung 2.8 auf Seite 15).

symmetrisch, so wie es in Abbildung 2.5 auf Seite 9 dargestellt ist und wie es in den hier dokumentierten Rechnungen simuliert wurde. Verschiebt man nun die Magnetstrukturen gegen die Plasmakammer in Richtung der Extraktionsöffnung, so senkt sich das Magnetfeld an der Extraktionsöffnung ab und der magnetische Einschluß wird reduziert (siehe Abbildung 4.70). Bis zu einer Verschiebung von etwa 4 bis 8 mm führt dies allgemein zu einer Zunahme der extrahierten Ströme, danach sinken die Ströme wieder. (Die Erklärung dieser Beobachtung erfolgt weiter unten.)

Die Werte bei 0 mm Verschiebung sind noch einmal in Abbildung 4.69 als Balken dargestellt und mit den Daten aus der Simulation mit $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ aus Abbildung 4.66 auf Seite 199 verglichen worden³¹.

Die Übereinstimmung der beiden Verläufe ist angesichts der in Abschnitt 4.1 erläuterten Probleme relativ gut.

Interpretation der Ergebnisse zur Verschiebung der Magnetstruktur

Durch die Verschiebung der Magnetstruktur in Richtung der Extraktion kommen zwei gegenläufige Effekte zum Tragen. Einerseits wird der magnetische Plasmaein- schluß auf der Seite der Extraktion kontinuierlich verschlechtert (siehe Abbildung 4.70) und auf der gegenüberliegenden Seite erhöht, wodurch sich der axiale Ionen-

³¹Die wichtigsten Simulationsparameter dieser Simulation sind also $\bar{E}_e = 1 \text{ keV}$, $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, $I_{inlet} = 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $\kappa = 1$.

verlust des Plasmas in Richtung der Extraktion verlagert und die extrahierten Ströme ansteigen. Gleichzeitig treffen aber auch mehr Elektronen und Ionen auf die Plasmaelektrode, wodurch *dort* mehr Sekundärelektronen generiert werden. (Ihr positiver Einfluß wird im folgenden Abschnitt erläutert.)

Andererseits konnte HEINEN zeigen, daß ebenfalls aufgrund des schlechteren Einschlusses auf der Extraktionsseite die mittlere Aufenthaltsdauer der heißen Elektronen reduziert werden (siehe Tabelle 4.21). Dieser negative Effekt wird letztlich so stark, daß die Ströme nach Überschreiten der optimalen Verschiebung wieder sinken.

4.9.2 Optimalbetrieb der ECRIS 3

Mit den hier vorgestellten Simulationen ist jedoch noch nicht die Leistung der ECRIS 3 erreicht, wenn diese auf höhere Ladungszustände wie Ar^{8+} optimiert wurde. (Typische Ströme sind in Abbildung 2.8 auf Seite 15 zu sehen.) Dazu mußten von den Operatoren insbesondere zwei "Tricks" genutzt werden.

Zum einen wurde das Magnetfeld, wie Abbildung 4.68 nahelegt, in Richtung der Extraktionsöffnung verschoben. Noch wichtiger jedoch ist die richtige Beimischung von Sauerstoff. Wie schon an mehreren Stellen erwähnt, kann die Produktion hochgeladener Ar-Ionen bis zu etwa einer Größenordnung verbessert werden, wenn das

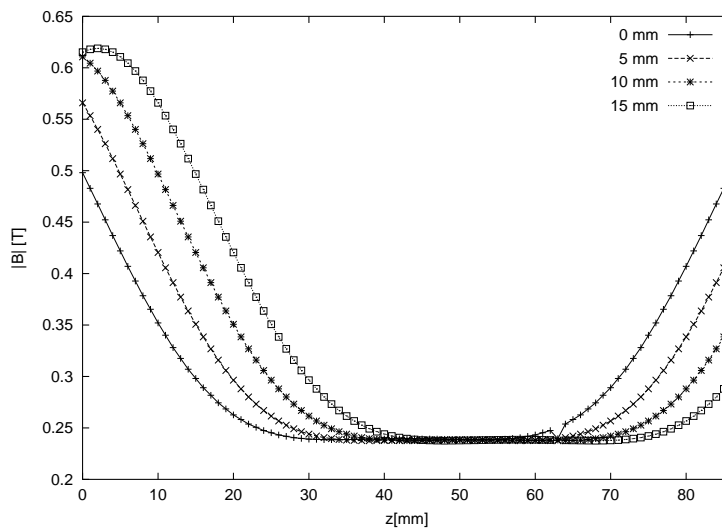


Abbildung 4.70: Magnetfeldstärke auf der z -Achse in der Plasmakammer bei verschobener Magnetstruktur in Richtung der Extraktion bei $z = 86$ cm.

Verschiebung [mm]	0	5	10	15
Einschlußzeit $\tau_{e,hot}$ [μs]	460	335	277	133

Tabelle 4.21: Einschlußzeiten der heißen Elektronen aus HEINENS Simulationen zur Verschiebung der Magnetstruktur [Hei].

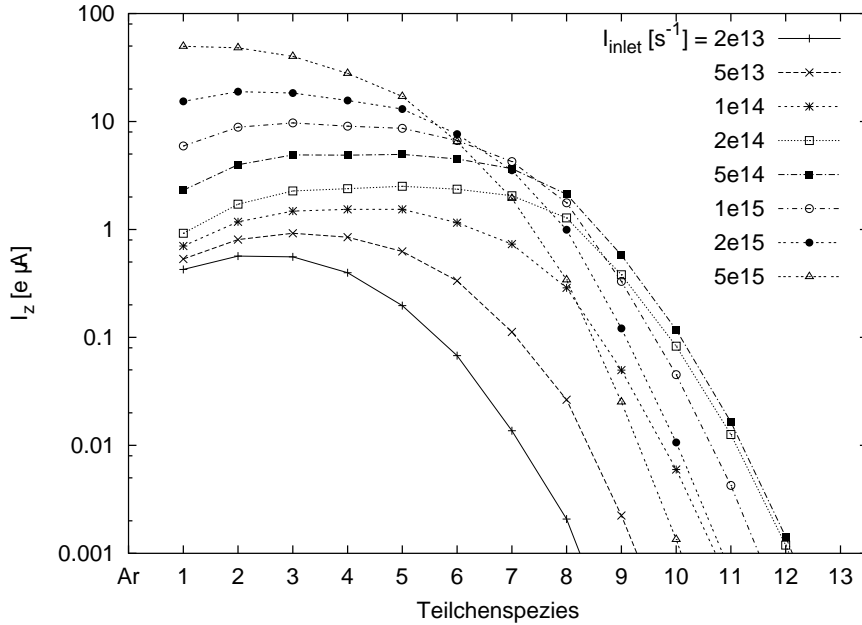


Abbildung 4.71: Extrahierte Ströme bei Variation der Gaszufuhr I_{inlet} bei $\bar{E}_e = 1$ keV, $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ und $\kappa = 0$.

Plasma gleichzeitig mit bestimmten leichteren Gasen, insbesondere mit Sauerstoff betrieben wird. Oftmals brennt eigentlich ein O_2 -Plasma, dem etwas Ar zugefügt wird (siehe z.B. das Extraktionsspektrum in Abbildung 2.8 auf Seite 15). Mit dieser Erhöhung der extrahierten Ströme war gleichzeitig auch eine Verschiebung des Maximums im Extraktionsspektrum von $z = 1$ (wie in den meisten hier gezeigten Spektren) hin bis zu $z = 8$ wie in Abbildung 2.8 auf Seite 15 verbunden.

Simulationsversuche. Die Versuche, dieses Maximum bei Ar^{8+} auch in den Simulationen (ohne verschobene Magnetstruktur und ohne Sauerstoff) zu reproduzieren, sind jedoch nur wenig erfolgreich gewesen. In Abbildung 4.61 auf Seite 193 konnte das Maximum von Ar^+ nach Ar^{3+} verschoben werden, wenn man von $\kappa = 1$ zu 0 übergeht. Allerdings war hier noch mit $\bar{E}_e = 20$ keV gerechnet worden, und Abschnitt 4.8 zeigte, daß diese Elektronenenergie zu hoch ist.

Abbildung 4.71 zeigt daher zusätzlich eine Serie von Simulationen mit $\bar{E}_e = 1$ keV, $\bar{n}_{e,hot} = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ und $\kappa = 0$, in der die Gaszufuhr variiert wurde. Hier kommt man mit $I_{inlet} = 2 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ der experimentellen Beobachtung schon näher, allerdings auf zu niedrigem Niveau, was die Stärke der Ströme betrifft.

Gasmixing mit O_2

Dafür, daß dieses Maximum in der CSD der simulierten extrahierten Ströme nicht so ausgeprägt wie im Experiment auftritt, wird vor allem der Gasmixing-Effekt verantwortlich gemacht, der in der Arbeitsgruppe wie folgt verstanden wird.

Insgesamt wirkt sich das zusätzliche O_2 vermutlich positiv auf den Elektronen-

haushalt und die EEDF aus. Zum einen ist die Ionisationsenergie von O_2 und atomarem O niedriger als die von Ar (siehe Tabelle 4.22), wodurch bei gleicher Neutralgasdichte³² allgemein eine stärkere Ionisation der Neutralteilchen und damit eine stärkere Elektronenfreisetzung innerhalb des Plasmas erfolgt.

Wichtiger scheint jedoch ein mit dem O_2 verbundener Wandeffekt zu sein. Wie in Abschnitt 2.1.1 erläutert, sind die Innenwände der in dieser Arbeitsgruppe entwickelten Quellen mit einem Quarzglaszylinder abgedeckt. Bei deren obersten Schichten handelt es sich normalerweise um SiO_2 , das einen größeren Sekundärelektronenkoeffizienten als reines Si hat (siehe Fußnote 5 auf Seite 13), wodurch die Wand stärker als Quelle neuer Elektronen wirkt. Diese SiO_2 -Schichten werden jedoch durch die permanent auf die Wand treffenden Ionen auch abgetragen, so daß die genannte Wirkung abgeschwächt wird. Durch den Betrieb der Quelle mit O_2 wird dem jedoch eine stetige Oxidation der obersten Si-Schichten entgegengesetzt. Dies würde auch erklären, warum z.B. Stickstoff, das keine derartige Verbindung mit Si eingeht, als Mischgas weniger geeignet ist als O_2 .

Durch diese beiden Effekte kann die Neutralgaszufuhr reduziert werden, ohne kleinere Elektronendichten in Kauf nehmen zu müssen. Dadurch wird der Ladungsaustausch weiter reduziert. Da dieser jedoch nur wenig wirksam ist (siehe Abschnitt 4.6.3), muß es (bei gleicher Elektronendichte) weitere Zusammenhänge geben, wie im folgenden gezeigt wird.

Damit die extrahierten Ströme der niedrig geladenen Ionen sinken und die der höher geladenen ($z = 6 \dots 10$) bei gleicher Elektronendichte steigen, muß (siehe Abbildung 2.7 auf Seite 14) somit

- a) der Einschluß der niedrig geladenen und/oder
- b) deren Weiterionisation

verbessert werden.

Verstärkter Ioneneinschluß

Falls das Mischgas zu keiner effektiven Erhöhung der Elektronendichte n_e führt, weil z.B. schon die durch den Mikrowellen-Cut-off gegebene obere Grenze für n_e erreicht

³²Die für die nächsten Ionisationsschritte benötigten Energien sind bei Sauerstoff allerdings größer als bei Argon [Wea84, Tab. E-63].

	Ionisationsenergie [eV]	Referenz
O_2 molekular	12,1	[Wea84, Tab. E-72]
O atomar	13,6	[Wea84, Tab. E-63], [Stö98, Tab. 30.1/1]
N atomar	14,5	[Wea84, Tab. E-63]
N_2 molekular	15,6	[Wea84, Tab. E-71]
Ar	15,8	[Wea84, Tab. E-63], [Stö98, Tab. 30.1/1]

Tabelle 4.22: Energien zur ersten Ionisation vom neutralen zum einfach geladenen Zustand einiger ausgewählter Stoffe.

ist, kommt bzgl. eines erhöhten Ioneneinschlusses nur der stoßbedingte Einschluß in Betracht. Denn der elektrostatische verliert mit zunehmendem Ionisationsgrad und ansteigender Ionendichte aber konstanter Elektronendichte an Bedeutung (siehe Abschnitt 4.5).

Tauscht man (gedanklich) immer mehr Ar- durch O-Ionen aus, so verschlechtert sich effektiv aber auch der stoßbedingte Einschluß der verbleibenden Ar-Ionen, da der Einfluß der Stöße auf sie mit geringerer Masse der Stoßpartner abnimmt³³.

Häufig wird im Zusammenhang mit dem Gasmixing auch ein Kühlungseffekt durch die leichteren Stoßpartner diskutiert (siehe z.B. [Gel96]), durch den sich der Einschluß erhöht. Wie in Abschnitt 4.6.4 gezeigt, hat dies jedoch gerade bei den Ladungszuständen $1 \leq z \leq 10$ praktisch keine Wirkung auf die extrahierten Ströme gehabt.

Somit kommt der veränderte Ioneneinschluß nicht als Ursache des Gasmixing-Effektes in Betracht, es sei denn, die Elektronendichte kann durch das Gasmixing erhöht werden, was den elektrostatischen Ioneneinschluß verbessern würde.

Stärkere Weiterionisation der niedrig geladenen Zustände

Damit bleibt als Erklärung für das Maximum im Extraktionsspektrum bei Ar^{8+} nur eine effektivere Weiterionisation der niedrig geladenen ($z < 8$) Ar-Ionen, als es in den dokumentierten Simulationen der Fall gewesen ist. Diesbezüglich müssen folgende Möglichkeiten diskutiert werden:

1. Beschleunigte Elektronen aus dem Wandbereich. Die Sekundärelektronen von der Wand (siehe Abschnitt 3.3.1.1) werden generell vom Plasmapotential U_p ins Plasmaintere beschleunigt (siehe Abbildung 3.3 auf Seite 43). Entspricht U_p der Ionisationsenergie des Gases oder ist sogar größer, so können diese (im Sinne der Definition aus Abschnitt 3.3.2.2) kalten Elektronen für eine zusätzliche EII insbesondere von Neutralteilchen sorgen. Denn typische Werte für U_p liegen im Bereich von 5 bis 20 V (siehe Abbildung 4.56 auf Seite 188), wodurch zusammen mit der bei der Elektronengeneration freigegebenen Energie die Ionisationsenergie von Ar (siehe Tabelle 4.22 auf der vorherigen Seite) erreicht werden könnte. Von den

³³Dies ist nicht trivialerweise so! Denn einerseits ist zwar die Geschwindigkeitsänderung bei einem einzelnen Stoß mit einem leichteren Teilchen geringer, andererseits nimmt die Stoßhäufigkeit zu, da die O-Ionen bei gleicher Temperatur höhere mittlere Geschwindigkeiten als die Ar-Ionen haben. Mathematisch wird die effektiv geringere kumulierte Stoßwirkung auf die Ar-Ionen letztlich anhand von $\frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$, $\frac{d}{dt} \langle \Delta v_{\parallel} \rangle$ und $\frac{d}{dt} \langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ aus (3.78) bis (3.80) deutlich, die jeweils ein Maß für die statistischen Geschwindigkeitsänderungen sind: Nach (3.84) nimmt l_1 mit m_1 (das ist hier die Masse der O-Ionen) für den Durchschnitt der Ar-Ionen (d.h. ausgehend von $x = 1$ beim reinen Ar-Plasma) ab. Dadurch werden die von der Projektilgeschwindigkeit abhängigen Terme in (3.78) und (3.80) größer (siehe Abbildung 3.25 auf Seite 89). Diese Zunahmen werden jedoch durch den direkten Einfluß von l_1 in (3.78) bis (3.80) für durchschnittliche ($x = 1$) Ar-Ionen mehr als kompensiert, so daß die kleinere Masse der Stoßpartner letztlich zu einer Verringerung der effektiven Stoßrate führt.

so erzeugten Ar^+ wird der Teil, der sich nicht in der Plasma-Wand-Schicht befindet (und somit nicht durch das zur Wand abfallende Potential zu dieser beschleunigt wird), durch den magnetischen Plasmaeinschluß in Richtung des PKBs beschleunigt werden, was eine zusätzliche Ar^+ -Zufuhr im PKB zur Folge hat.

Betrachtet man jedoch die zentrale Abbildung 2.7 auf Seite 14, so wird klar, daß durch die vermehrte Ar^+ -Zufuhr zwar alle Dichten und extrahierte Ströme erhöht werden. Es können sich jedoch nicht direkt auch die Verhältnisse zwischen verschiedenen Ladungszuständen (mit $z \geq 1$) so ändern, daß Ströme höher geladener Ionen stärker ansteigen würden als die der niedriger geladenen.

2. Auger-Elektronen. Damit auch Zustände $1 \leq z < 8$ stärker ionisiert werden, müssen auch mehr Elektronen mit Energien zwischen 25 und 200 eV (siehe die EII-Wirkungsquerschnitte in Abbildung 3.11 auf Seite 61) vorhanden sein. Ungeheizte Elektronen in diesem Energiebereich werden z.B. während der Neutralisation von Ionen an Oberflächen frei (siehe z.B. die AUGER-Spektren in [Duc99, Mro01]).

3. Überschätzung der simulierten Elektronenenergien. Bezüglich der Elektronensimulationen muß man im Auge behalten, daß, solange nur die Elektronendaten zur Bewertung ihrer selbst vorlagen, gerade hohe Einschlußzeiten und damit verbunden hohe Energien als Kriterium für die Wahl der Simulationsparameter (hier speziell der variierten E-Feldstärke der stehenden Mikrowelle) angesehen wurden.

Dies führte zu mittleren Energien im Bereich einiger 10 keV. Die S-EII-Wirkungsquerschnitte der Ar^{z+} mit $z \leq 16$ sind bei diesen Energien jedoch schon auf etwa 10% ihres Maximalwertes gefallen (siehe Abbildung 3.11 auf Seite 61). Die Ar^{z+} mit $z \leq 8$ haben ihre Maxima sogar schon bei 200 eV überschritten.

Es ist daher anzunehmen, daß die Elektronensimulationen mit den hohen mittleren Energien um einige 10 keV und hohen Einschlußzeiten mehr der in Abschnitt 4.8 beschriebenen experimentellen Situation, in der der GEIGER-MÜLLER-Zähler ansprach, als dem Optimalbetrieb entspricht, bei dem die Mikrowellenleistung etwa fünf mal kleiner war.

Des Weiteren konnten die unter 1. und 2. genannten Elektronen in den Simulationen von HEINEN nicht erfaßt werden.

Schlußfolgerung

Fazit dieser Überlegungen ist somit, daß in der tatsächlichen EEDF der Quelle im Optimalbetrieb wahrscheinlich (vor allem in den räumlichen Bereichen außerhalb des Resonanzvolumens) die Energien kleiner 1 keV stärkere Beiträge haben als bisher in dieser Arbeit angenommen wurde. Dadurch sind die Ionisationsraten der niedrig geladenen Ionen ($z \leq 8$) in den hier gezeigten Simulationen zu klein.

Der Ansatz der exponentiell fallenden EEDF ist somit nicht ausreichend. Es bedarf der genaueren Kenntnis des Verlaufs der EEDF im Bereich $E_e < 1$ keV.

Im Zusammenhang mit dem Gasmixing-Effekt stellt sich stark verkürzt somit folgendes Bild dar: Für maximale Ionisationsraten der Ar^{z+} mit $z \leq 8$ sollten die mittleren Elektronenenergien unter 1 keV liegen (siehe Abbildung 3.13 auf Seite 63). Bei diesen im Vergleich zu den Ergebnissen der Elektronensimulationen relativ kleinen Energien ist der Elektroneneinschluß relativ schlecht. Dies könnte beim Gasmixing mit Sauerstoff durch eine erhöhte Sekundärelektronenproduktion kompensiert werden.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung

Ionenquellen, die nach dem Prinzip der Elektron-Zyklotron-Resonanz funktionieren, werden seit etwa drei Jahrzehnten zunehmend für wissenschaftliche und industrielle Zwecke eingesetzt. Die Leistungsfähigkeit der Quellen sowie das Verständnis der komplexen Plasmaprozesse wurden in dieser Zeit immer weiter entwickelt, sind jedoch noch nicht an ihrem Ende angelangt.

Obwohl schon früh begonnen wurde, die Zusammenhänge der Funktionsweise der ECRIS mittels theoretischer Modelle genauer zu verstehen, sind viele der technischen Fortschritte in der ECRIS-Entwicklung Trial- and Error-Versuchen zu verdanken. Mit steigender Leistungsfähigkeit von Computern können aber auch die theoretischen Modelle mit komplexeren Berechnungen immer genauere Aussagen machen, um die Planung von Weiterentwicklungen dieser Quellen zu unterstützen.

Modell. In dieser Arbeit wurde erstmalig ein Ratengleichungsmodell zur Berechnung der in drei Dimensionen orts aufgelösten Dichteverteilung der beteiligten Teilchen im Plasma einer EZR-Ionenquelle entwickelt. In dieses Modell geht insbesondere der vollständige Verlauf des äußeren Magnetfeldes ein, das für die räumliche Plasmapverteilung maßgeblich ist.

Ausgangspunkt dieser Arbeit sind Simulationsergebnisse von HEINEN, die unter anderem das Dichteprofil der von der Mikrowelle geheizten Elektronen liefern. Dieses Profil ist in erster Näherung unabhängig von den Dichten der Atome und Ionen. Da diese Elektronen die zwei wichtigsten Prozesse (die Elektronenstoßionisation und den elektrostatischen Ioneneinschluß) bestimmen, ist ihr Dichteprofil der wichtigste Input der Simulation.

Weil die Ionisation der Atome und Ionen hauptsächlich schrittweise durch Elektronenstoß erfolgt, hängen alle Ionendichten zumindest indirekt auch von der räumlichen Verteilung der Neutralgasteilchen ab. Diese wird per Monte-Carlo-Simulation in Abhängigkeit von der gegebenen Elektronendichteverteilung und unter

Berücksichtigung der Ionenneutralisation an den Plasmakammerwänden bestimmt. Mit der Kenntnis der räumlichen Verteilungen der geheizten Elektronen und der Neutralgasteilchen sowie der Reaktionsraten der ladungsändernden Prozesse und den durch Teilchentransport bedingten Änderungsraten kann die zeitliche Entwicklung der lokalen Dichten näherungsweise verfolgt werden, bis das System konvergiert. Zu den dabei berücksichtigten ladungsändernden Prozessen gehören bis zu zweifache Elektronenstoßionisation und bis zu vierfacher Ladungsaustausch. Der IONENTRANSPORT berücksichtigt den stoßdominierten und den elektrostatischen Einschluß im Plasmakernbereich sowie den Einschluß durch das Magnetfeld außerhalb des Plasmakernbereiches.

Beim derzeitigen Entwicklungsstand des Simulationsprogrammes ist es nur möglich, genau eine Gassorte zu simulieren, und es werden keine Wandeffekte erfaßt.

Ergebnisse. Unter diesen Einschränkungen wurde eine Reihe von Simulationen zur ECRIS 3 durchgeführt, um in die Nähe der optimalen Betriebsparameter zu gelangen. Die Meßwerte bei unverschobener Magnetstruktur und reinem Ar-Betrieb konnten dabei gut reproduziert werden.

Des Weiteren wurden die Abhängigkeiten der Ladungszustandsverteilung der extrahierten Ströme sowohl von bestimmten Plasmagrößen (Iontemperatur, Elektronenenergieverteilung, Elektronendichte) und Plasmaprozessen (Elektronenstoßionisation, Ladungsaustausch, elektrostatischer Einschluß) als auch von Betriebsparametern (Gaszufuhr, Magnetfeld) untersucht.

Dabei konnte als Erklärung für die experimentell zu beobachtende starke Abhängigkeit der extrahierten Ströme von der Gaszufuhr der Zusammenhang zwischen Gaszufuhr und elektrostatischem Einschluß der Ionen gezeigt werden.

Die Simulationen zeigen eindeutig, daß es einen elektrostatischen Ioneneinschluß geben muß, um die experimentell gemessenen Ströme erreichen zu können.

Weiter konnte gezeigt werden, daß der Ladungsaustausch im Vergleich zur Elektronenstoßionisation, vor allem aber zum Teilchenverlust durch Transport an die Plasmakammerwände nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Die räumlichen Dichteverteilungen der verschiedenen Ionenspezies erweisen sich durch die Elektronenstoßionisation und den elektrostatischen Einschluß als stark an die Dichten der heißen Elektronen gebunden.

Die energetischen Betrachtungen bestätigen, daß es nur eine Iontemperatur gibt. Ferner lassen sie den Schluß zu, daß die beobachteten Breiten in den gemessenen Energieverteilungen der extrahierten Ionen vornehmlich auf Schwankungen des Plasmapotentials zurückzuführen sind.

Die Simulationen stoßen bei der Beschreibung des Optimalbetriebs, der durch das Gasmixing mit Sauerstoff geprägt ist, an ihre Grenzen. Die diesbezüglichen Überlegungen lassen schließen, daß die aus den Elektronensimulationen gewonnenen mittleren Elektronenenergien höher als im realen Optimalbetrieb der ECRIS 3

sind. Die bei niedrigeren Elektronenenergien stärkeren Elektronenverluste können beim Gasmixing mit Sauerstoff vermutlich durch die verstärkte Produktion von Sekundärelektronen kompensiert werden. Damit wäre der Effekt des Gasmixings primär auf Wandeffekte zurückgeführt.

Ausblick

Beim jetzigen Stand von Modell und Simulationsprogramm scheinen insbesondere die folgenden Verbesserungen wichtig zu sein:

- Um vollständig selbstkonsistente Berechnungen durchzuführen, müßten die von der Iontemperatur abhängigen Größen (das sind insbesondere die stoßbedingten Einschlußzeiten in den Zellen des Plasmakernbereiches) nach der Iontemperatur parametrisiert werden, damit sie während der Simulation dynamisch angepaßt werden können.
- Die Diskussion in Abschnitt 4.6.5 hat die Unsicherheiten des Ansatzes (3.105) für den elektrostatischen Ioneneinschluß, der die Quasineutralität gewährleistet, deutlich gemacht. Wahrscheinlich wird bei einer detaillierteren Beschreibung die Berechnung der bei Verletzung der Quasineutralität auftretenden elektrostatischen Felder benötigt.
- Das Programm sollte so erweitert werden, daß mehrere Gassorten gleichzeitig simuliert werden können, damit die Zusammenhänge des Gasmixings genauer untersucht werden können.
- Ferner ist die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Dichte der heißen Elektronen (vor allem die Gewinnrate) noch nicht ausreichend, so daß die Simulation deren Werte nur ansatzweise liefern kann. Insbesondere fehlt die Berücksichtigung der durch die Ionen-Wand-Neutralisation bedingten Produktion von Sekundärelektronen und deren Beschleunigung.
- Ganz entscheidend für eine bessere Realitätsnähe scheint eine bessere Kenntnis der Energieverteilung der Elektronen speziell im Bereich von weniger als 1 keV zu sein.
Hierzu gehört auch der Übergang von einer globalen zu einer ortsabhängigen Energieverteilung.

Insbesondere der letzte Punkt lag bisher außerhalb des hier vorgestellten Modells. Um bzgl. der Elektronen nicht nur die auf viele keV geheizten, sondern auch diejenigen mit Energien kleiner 1 keV genauer zu erfassen, ist es bei weiter steigenden Rechenleistungen der kommenden Computergenerationen denkbar, die Elektronensimulationen an die CSD-Simulationen zu koppeln. Mit der aus den CSD-Simulationen resultierenden Kenntnis der ortsabhängigen Neutralisationsströme auf

der Plasmakammerwand wäre man in der Lage, vor allem die Sekundärelektronenproduktion an den Wänden und deren Einfluß auf die Energieverteilung der Elektronen dynamisch, d.h. abhängig vom Plasmazustand, zu erfassen. (Hierzu bedürfte es allerdings auch eines Modells über die Neutralisationsprozesse.) Die genauere Elektronenenergieverteilung sollte dann wiederum in die CSD-Simulation eingehen.

Trotz der aufgezeigten Verbesserungsmöglichkeiten von Modell und Simulationsprogramm wurde in dieser Arbeit eine Basis geschaffen, mit der aufgrund der Berücksichtigung des vollständigen äußeren Magnetfeldes Zusammenhänge zwischen diesem (sowie den experimentellen Parametern) und den extrahierbaren Strömen untersucht werden können.

Anhang A

Stöße zwischen Gasteilchen, Formalismus und Notation

Stoßrate und Ratenkoeffizient

Ein Teilchen der Sorte A mit der Geschwindigkeit u bewege sich durch eine Menge ruhender Teilchen der Sorte B mit der Dichte n_B . Dann ist die **Stoßrate** bzw. die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, daß dem A -Teilchen ein Stoß mit einem B -Teilchen widerfährt, für den $\sigma(u)$ der totale Wirkungsquerschnitt ist, gleich [Rei87, Gl. (12.2.7)]

$$\tau_A^{-1} = n_B \sigma(u) u . \quad (\text{A.1})$$

Betrachtet werde nun ein *Ensemble* von A -Teilchen, das die Geschwindigkeitsverteilung $f(\vec{v}_A)$ mit $\int f(\vec{v}_A) d^3v_A = 1$ hat. Diese mögen sich ebenfalls durch ein Ensemble von B -Teilchen mit der Geschwindigkeitsverteilung $f(\vec{v}_B)$ mit $\int f(\vec{v}_B) d^3v_B = 1$ bewegen. Die *mittlere* Stoßrate der A -Teilchen (für Stöße mit B -Teilchen) ergibt sich dann aus (A.1) wie folgt, wobei u zur Relativgeschwindigkeit wird:

$$\langle \tau_A \rangle^{-1} = n_B \iint \sigma(\underbrace{|\vec{v}_A - \vec{v}_B|}_u) \cdot \underbrace{|\vec{v}_A - \vec{v}_B|}_u \cdot f(\vec{v}_A) f(\vec{v}_B) d^3v_A d^3v_B . \quad (\text{A.2})$$

Bei Kenntnis der eindimensionalen Verteilung $f(u)$ der Relativgeschwindigkeiten mit $\int_0^\infty f(u) du = 1$ vereinfacht sich das Integral über die sechs Geschwindigkeitskomponenten aus (A.2) zu

$$\langle \sigma \cdot u \rangle = \int_0^\infty \sigma(u) u f(u) du . \quad (\text{A.3})$$

Mit diesem sogenannten **Ratenkoeffizienten** nimmt (A.2) die besser merkbare Form

$$\langle \tau_A \rangle^{-1} = n_B \cdot \langle \sigma \cdot u \rangle \quad (\text{A.4})$$

an. Das Symbol $\langle \sigma \cdot u \rangle$ wird in dieser Arbeit allgemein für den Ratenkoeffizienten verwendet, d.h. auch bei seiner Berechnung wie in (A.2).

Für die Elektronenstoßionisation z.B. wird der Wirkungsquerschnitt nicht abhängig von u , sondern als Funktion der Elektronenenergie angegeben. Kennt man die Energieverteilung $f_E(E)$ der Elektronen, so ist es einfacher, den Ratenkoeffizienten anstatt gem. (A.3) nach

$$\langle \sigma \cdot u \rangle = \int_0^\infty \sigma_E(E) \cdot v(E) \cdot f_E(E) dE \quad (\text{A.5})$$

zu berechnen, wobei $v(E)$ die (relativistische) Geschwindigkeit des Elektrons ist. (A.5) erhält man aus (A.3) mit der Identität $f(u) du = f_E(E) dE$ und der Substitutionsregel.

Mittlere freie Weglänge

Während der Zeit $\langle \tau_A \rangle$ kann sich ein typisches A-Teilchen im Mittel stoßfrei bewegen und legt bei einer mittleren Geschwindigkeit \bar{v}_A in dieser Zeit die Strecke

$$l_A = \langle \tau_A \rangle \bar{v}_A \quad (\text{A.6})$$

zurück. Diese Strecke wird als mittlere freie Weglänge bezeichnet und mit den obigen Größen gilt für sie:

$$l_A = \frac{\bar{v}_A}{n_B \langle \sigma \cdot u \rangle} . \quad (\text{A.7})$$

Reaktionsrate

Betrachtet man zwei Teilchen-Ensembles (Dichten n_A und n_B), die bei einem Stoß nach dem Muster



miteinander reagieren, so treffen in einem Volumen V pro Zeiteinheit dt

$$\begin{aligned} N &= \frac{n_A V}{\langle \tau \rangle} dt \\ &= n_A n_B \langle \sigma \cdot u \rangle V dt \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

A- auf B-Teilchen. Die Anzahl der Stöße pro Zeit- und Volumeneinheit wird als Reaktionsrate bezeichnet:

$$R = n_A n_B \langle \sigma \cdot u \rangle . \quad (\text{A.10})$$

Durch den Prozeß (A.8) ändern sich die Dichten der Teilchensorten A bis D somit gem.

$$\frac{\partial n_A}{\partial t} = \frac{\partial n_B}{\partial t} = -R$$

und

$$\frac{\partial n_C}{\partial t} = \frac{\partial n_D}{\partial t} = +R .$$

Anhang B

Parallelgeschwindigkeitsverteilung bei stoßfreiem Ionentransport

In diesem Anhang wird gezeigt, wie für einen Punkt \vec{r}_1 außerhalb des PKB (siehe Abbildung B.1) für eine gegebene Ionenspezies die Geschwindigkeitsverteilung $f_{s_1}(v_{||})$ der Geschwindigkeiten parallel zum lokalen Magnetfeld bestimmt wird.

Dazu wird ohne erneute Erläuterung die Notation aus Abschnitt 3.6.3 übernommen!

Dort wurden auch die drei Szenarien erläutert, die ein Ion erleben kann, das von \vec{r}_0 entlang der Feldlinie in Richtung \vec{r}_1 läuft (siehe Abbildung B.1):

- Spiegelung vor Erreichen von s_1 . Damit liefert es keinerlei Beitrag zur Geschwindigkeitsverteilung $f_{s_1}(v_{||})$ bei s_1 .
- Spiegelung nach Erreichen von s_1 . Dann trägt es mit $v_{||}(s_1) \geq 0$ beim 1. Durchlauf und mit demselben Geschwindigkeitsbetrag, aber negativer Geschwindigkeit beim Rücklauf zu $f_{s_1}(v_{||})$ bei.
- Keine Spiegelung und Auftreffen auf die Wand, so daß es nur mit $v_{||}(s_1) \geq 0$ in $f_{s_1}(v_{||})$ eingeht.

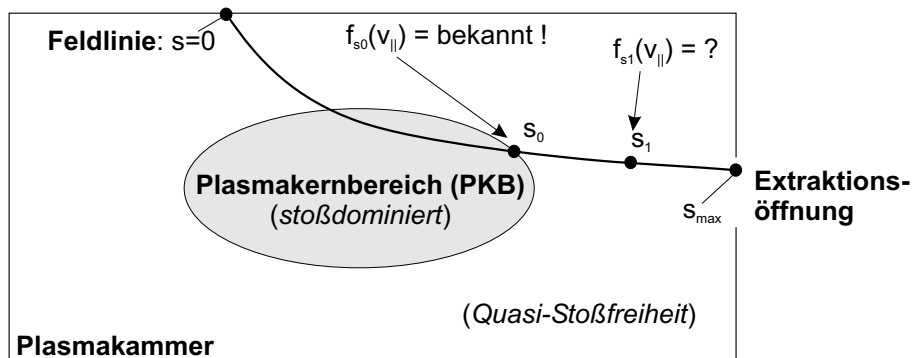


Abbildung B.1: Skizze zur Berechnung der Geschwindigkeitsverteilung $f_{s_1}(v_{||})$ einer Ionenspezies am Punkt $\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_B(s_1)$ außerhalb des PKB. Ein typischer Feldstärkeverlauf entlang der Feldlinie est in Abbildung 3.31 auf Seite 102 dargestellt.

Welchen dieser drei Wege ein Ion geht, hängt (abgesehen vom Magnetfeldverlauf) nur von der Anfangsgeschwindigkeit $(v_{\parallel 0}, v_{\perp 0})$ bei s_0 ab.

Ansatz

Der zentrale Gedanke dieses Anhangs ist nun, daß wenn die Geschwindigkeit eines einzelnen Ions bei \vec{r}_1 in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit bei \vec{r}_0 determiniert ist, und wenn die Verteilung der Startgeschwindigkeiten bei \vec{r}_0 bekannt ist, sich dann auch die Geschwindigkeitsverteilung $f_{s_1}(v_{\parallel})$ bei \vec{r}_1 ermitteln läßt.

Die Startgeschwindigkeiten sind dadurch bekannt, daß im PKB aufgrund der hohen Stoßraten ein thermisches Gleichgewicht angenommen werden kann. Dann sind die mikroskopischen Geschwindigkeiten MAXWELL-verteilt.

B.1 Trajektorien im Phasenraum

Zur Bestimmung von $f_{s_1}(v_{\parallel})$ bietet sich eine Analyse der Teilchenbewegung in dem 3-dimensionalen Phasenraum an, der von der Ortskoordinate s und den Geschwindigkeiten v_{\parallel} und v_{\perp} aufgespannt wird.

Die Punkte, die ein Teilchen in diesem Phasenraum durchläuft, bilden eine Trajektorie

$$\vec{x}(t) = (s(t), v_{\parallel}(t), v_{\perp}(t)) \quad (\text{B.1})$$

mit dem Startpunkt

$$\vec{x}_0 \equiv (s_0, v_{\parallel 0}, v_{\perp 0}) \quad (\text{B.2})$$

(siehe Abbildungen B.2 und B.3). Von dort bewegt sich ein *typisches* Teilchen, d.h. eines mit $v_{\perp} > 0$, aufgrund der anfänglich positiven Geschwindigkeit v_{\parallel} in positive s -Richtung. Da die Parallelgeschwindigkeit durch den Gradienten der Magnetfeldstärke abgebaut wird, ändert sich die Ortskoordinate s im zeitlichen Verlauf immer langsamer, und die Trajektorie führt auf die $(v_{\parallel} = 0)$ -Ebene zu. Dort angekommen ändert v_{\parallel} aufgrund der anhaltenden Kraft F_{\parallel} das Vorzeichen, worauf die s -Koordinate wieder abnimmt.

Hat ein Ion keine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu \vec{B} (untypisches Teilchen), so erfährt es nach (2.18) auch keine Parallelbeschleunigung, und die Trajektorie verläuft strikt parallel zur s -Achse (Trajektorie B in Abbildung B.2).

Wenn Teilchen jedoch auf ihrem Weg entlang der Feldlinie nicht stark genug abgebremst werden, treffen sie bei s_{max} auf die Wand und ihre Trajektorie im Phasenraum wird abgeschnitten. Daher gibt es im Phasenraum Punkte mit $v_{\parallel} < 0$, durch die keine Teilchen laufen. Diese lassen sich mathematisch identifizieren, indem man die Magnetfeldstärke berechnet, die ein Teilchen (mit den Startwerten $v_{\perp 0}, v_{\parallel 0}$) im Umkehrpunkt s_{mirr} erfahren muß. Ist diese größer als die Feldstärke $B_s(s_{max})$ am Schnittpunkt $\vec{r}_B(s_{max})$ der Feldlinie mit der Kammerwand, so liegt der (dann imaginäre) Umkehrpunkt aufgrund der als monoton ansteigend angenommenen

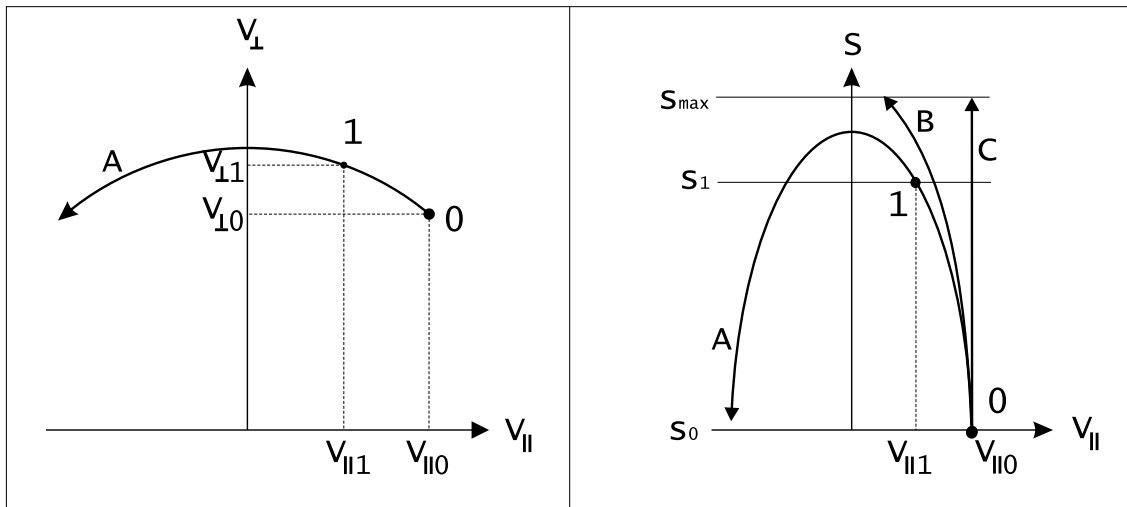


Abbildung B.2: Projektionen der Trajektorie eines Ions im Phasenraum, der von der Ortskoordinate s und den Geschwindigkeiten $v_{||}$ und v_{\perp} parallel und senkrecht zum Magnetfeld aufgespannt wird (siehe Text). Im Fall A kann das Ion vom Magnetfeld gespiegelt werden. Je kleiner jedoch die anfängliche Senkrechtgeschwindigkeit $v_{\perp 0}$ ist, desto schwächer wird ein Ion abgebremst, so daß es ggf. bei s_{max} auf die Wand trifft (Fall B). Im Grenzfall $v_{\perp 0} = 0$ läuft es ungebremst auf die Wand (Fall C).

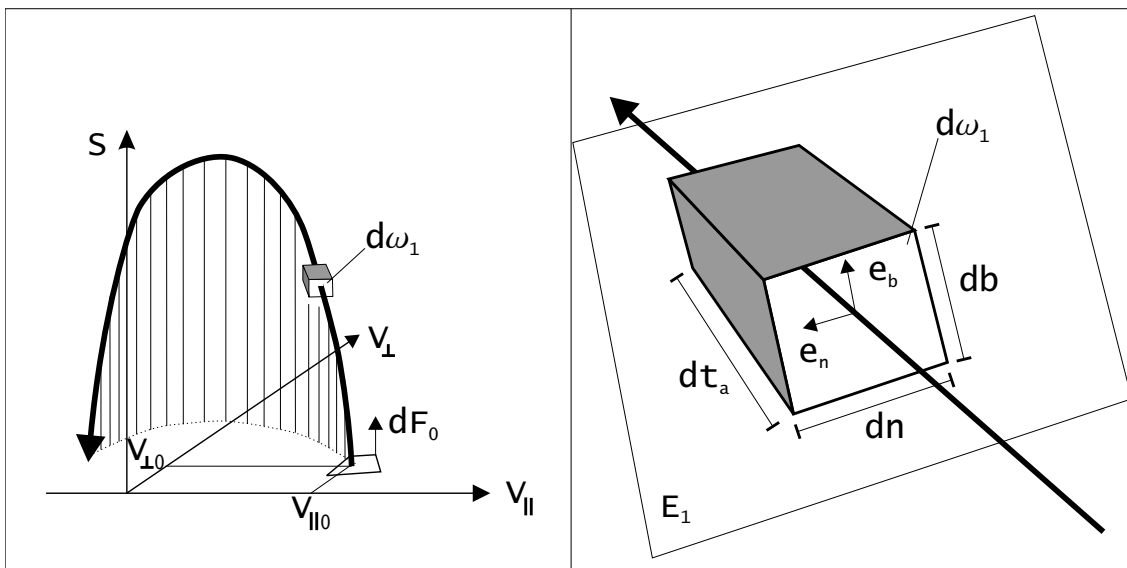


Abbildung B.3: Links: Skizze der Trajektorie eines Ions im Phasenraum, der von der Ortskoordinate s und den Geschwindigkeiten $v_{||}$ und v_{\perp} parallel und senkrecht zum Magnetfeld aufgespannt wird (siehe Text). Das Flächenelement dF_0 ist die Projektion von $d\omega_1$ entlang der Phasenraumtrajektorien auf die $(s = s_0)$ -Ebene.

Rechts: Vergrößerte Skizze eines Volumenelementes $d\Omega_1$ des Phasenraums an einem Punkt der Trajektorie. Die zur Trajektorie senkrechte Stirnfläche $d\omega_1$ liegt in der Ebene E_1 . Eingezeichnet sind auch die Einheitsvektoren \vec{e}_n und \vec{e}_b des begleitenden Dreibeins (siehe Text auf Seite 222); \vec{e}_t (nicht eingezeichnet) zeigt in Richtung der Trajektorie.

Feldstärke $B_s(s)$ außerhalb der Plasmakammer. Ein solches Teilchen wäre nicht durch das Magnetfeld reflektiert worden und kann somit keine Trajektorienpunkte mit $v_{||} < 0$ haben.

Die durch einen gegebenen Punkt $\vec{x}_1 \equiv (s_1, v_{||1}, v_{\perp 1})$ des Phasenraumes verlaufende Trajektorie $\vec{x}(t)$ läßt sich gut durch s parametrisieren, da die Geschwindigkeiten $v_{||}$ und v_{\perp} entlang $\vec{x}(t)$ nur vom lokalen Magnetfeld und somit von s abhängen:

$$\vec{x}(s) = (s, v_{||}(s), v_{\perp}(s)). \quad (\text{B.3})$$

Die beiden Geschwindigkeitskomponenten folgen aus der Invarianz des magnetischen Momentes (2.16):

$$v_{||}(s_1, v_{||1}, v_{\perp 1}; s) = \pm \sqrt{v_{||1}^2 + v_{\perp 1}^2 [1 - \alpha(s_1; s)]} \quad (\text{B.4})$$

$$v_{\perp}(s_1, v_{||1}, v_{\perp 1}; s) = v_{\perp 1} \sqrt{\alpha(s_1; s)} \quad (\text{B.5})$$

mit

$$\alpha(s_1; s) := B_s(s) / B_s(s_1) \quad (\text{B.6})$$

$$B_s(s) := |\vec{B}(\vec{r}_B(s))|. \quad (\text{B.7})$$

Damit ist auch der Startpunkt $\vec{x}_0 \equiv (s_0, v_{||0}, v_{\perp 0})$ bestimmt:

$$v_{||0}(s_1, v_{||1}, v_{\perp 1}) = \sqrt{v_{||1}^2 + v_{\perp 1}^2 [1 - B_s(s_0)/B_s(s_1)]} \geq v_{||1}, \quad (\text{B.8})$$

$$v_{\perp 0}(s_1, v_{||1}, v_{\perp 1}) = v_{\perp 1} \sqrt{B_s(s_0)/B_s(s_1)} \leq v_{\perp 1}. \quad (\text{B.9})$$

B.2 Geschwindigkeit entlang der Trajektorie $\vec{x}(s)$ im Phasenraum

Die Ionen halten sich auf ihrer Trajektorie an verschiedenen Orten dieses Phasenraumes nicht immer gleich lang auf. Vielmehr ändern sie die *Phasenraumgeschwindigkeit* $u := |\vec{u}| \equiv |\dot{\vec{x}}|$. Mit $\vec{u} \equiv (u_s, u_{||}, u_{\perp})$ und

$$u_s := \dot{s} = v_{||} \quad (\text{B.10})$$

$$u_{||} := \dot{v}_{||} = F_{||}/m \stackrel{(2.18)}{=} -\frac{v_{\perp}^2}{2 B_s(s)} \frac{\partial B_s}{\partial s}(s) \quad (\text{B.11})$$

$$u_{\perp} := \dot{v}_{\perp} = \frac{d}{dt} \sqrt{v^2 - v_{||}^2} = -\frac{v_{||}}{v_{\perp}} \dot{v}_{||} = \frac{v_{\perp} v_{||}}{2 B_s(s)} \frac{\partial B_s}{\partial s}(s) \quad (\text{B.12})$$

gilt¹

$$|\vec{u}| = \sqrt{v_{||}^2 + \left(1 - \frac{v_{||}^2}{v_{\perp}^2}\right) \frac{F_{||}^2}{m^2}}. \quad (\text{B.13})$$

¹Im Nenner von (B.13) werden Quadrate einer Geschwindigkeit und einer Beschleunigung addiert. Physikalisch-mathematisch strenger lassen sich die Größen, die den betrachteten Phasenraum aufspannen, auch so normieren, daß man mit dimensionslosen Zahlen arbeitet. Da sich zeigen läßt, daß diese Normierungskonstanten bei den folgenden Ergebnissen wegfallen, werden sie der einfacheren Darstellung halber schon hier nicht notiert.

B.3 Dichteverteilung im Phasenraum.

Starten im Ortsraum bei $\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_B(s_0)$ kontinuierlich Teilchen mit einer konstanten Rate und mit der gegebenen Geschwindigkeitsverteilung $f_0(v_{\parallel}, v_{\perp})$, so entspricht dies *im Phasenraum* einem Strom von Teilchen, die aus dem Teilbereich der $(s = s_0)$ -Ebene mit $v_{\parallel} > 0$ in positive s -Richtung starten und sich, wie oben beschrieben, durch den Phasenraum bewegen. Abhängig von der Verteilung $f_0(v_{\parallel}, v_{\perp})$ der Anfangsgeschwindigkeiten, den Trajektorienverläufen sowie den lokalen *Phasenraumgeschwindigkeiten* $\vec{u}(\vec{x})$ führt dies zu einer Dichteverteilung

$$\rho(\vec{x}) \equiv \rho(s, v_{\parallel}, v_{\perp}) \quad (\text{B.14})$$

im Phasenraum. Kennt man diese, so stellt

$$g_s(v_{\parallel}) := \int_0^{\infty} \rho(s, v_{\parallel}, v_{\perp}) dv_{\perp} \quad (\text{B.15})$$

ein geeignetes Maß für die Häufigkeit des Auftretens der Parallelgeschwindigkeit v_{\parallel} bei gegebener Entfernung $s - s_0$ vom Startpunkt \vec{r}_0 dar. Die gesuchte Geschwindigkeitsverteilung $f_s(v_{\parallel})$ ergibt sich dann durch die Normierung

$$f_s(v_{\parallel}) := \frac{g_s(v_{\parallel})}{\int_{-\infty}^{\infty} g_s(v_{\parallel}) dv_{\parallel}} \cdot \quad (\text{B.16})$$

Die folgenden Unterabschnitte widmen sich der Bestimmung von ρ .

Phasenraumdichte für $v_{\parallel} \geq 0$ und $s = s_0$.

Bei den Punkten $\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_B(s_0)$ im Ortsraum, die im allgemeinen an der Außenfläche des Plasmakernbereiches liegen², ist definitionsgemäß (siehe Problemstellung, Seite 100) die Geschwindigkeitsverteilung $f_0(v_{\parallel}, v_{\perp})$ der betrachteten Ionenspezies bekannt. Da die Phasenraumdichte $\rho(s, v_{\parallel}, v_{\perp})$ in einer Phasenraumebene mit festen s selbst eine (allerdings nicht notwendigerweise normierte) Verteilung der Paare $(v_{\parallel}, v_{\perp})$ darstellt, muß ρ für $s = s_0$ und $v_{\parallel} \geq 0$ proportional zu $f_0(v_{\parallel}, v_{\perp})$ sein:

$$\rho(s_0, v_{\parallel}, v_{\perp}) = k \cdot f_0(v_{\parallel}, v_{\perp}). \quad (\text{B.17})$$

Dabei ist k eine Konstante, die sich letztlich in (B.16) immer wieder herauskürzt.

Phasenraumdichte für $v_{\parallel} \geq 0$ und $s > s_0$.

Die Phasenraumdichten an allen anderen Punkten mit $s > s_0$ kann man mittels Analyse der durch sie verlaufenden Trajektorien bestimmen.

Zur klareren Unterscheidung des Phasenraumpunktes, für welchen ρ bestimmt werden soll, von den anderen Phasenraumpunkten werden dieser sowie die mit ihm in unmittelbarem Zusammenhang

²Ausnahmefälle hierfür sind weiter unten auf Seite 232 beschrieben.

stehenden Größen im folgenden mit dem Index 1 versehen. Die Koordinate s_1 kann dabei als durch den Raumpunkt \vec{r}_1 und die dadurch verlaufende Magnetfeldlinie $\vec{r}_B(s)$ mittels der Beziehung $\vec{r}_B(s_1) \equiv \vec{r}_1$ als fest gegeben betrachtet werden, da letztlich nur in der ($s = s_1$)-Ebene Werte für ρ berechnet werden. Die Phasenraumkoordinaten $v_{\parallel 1}$ und $v_{\perp 1}$ stehen jedoch in keinerlei Beziehung zu \vec{r}_1 , sondern sind völlig variabel!

Um ρ also für $\vec{x}_1 \equiv (s_1, v_{\parallel 1}, v_{\perp 1})$ mit $s_0 < s_1 \leq s_{max}$ und $v_{\parallel 1} \geq 0$ zu bestimmen, betrachte man die Phasenraumtrajektorie $\vec{x}(s)$ durch \vec{x}_1 . An jedem Punkt der Trajektorie kann ein lokales, rechtshändiges und kartesisches Koordinatensystem mit Hilfe des sogenannten *begleitenden Dreibeins* (siehe Abbildung B.3, rechts) definiert werden [BSGM00, Kap. 3.6.2]. Dieses wird gebildet durch

- den zu $d\vec{x}/ds$ parallelen *Tangenteneinheitsvektor*

$$\vec{e}_t \equiv (e_{ts}, e_{t\parallel}, e_{t\perp}), \quad (\text{B.18})$$

- den zu $d^2\vec{x}/ds^2$ parallelen *Hauptnormaleneinheitsvektor*

$$\vec{e}_n \equiv (e_{ns}, e_{n\parallel}, e_{n\perp}) \quad \text{sowie} \quad (\text{B.19})$$

- den *Binormaleneinheitsvektor*

$$\vec{e}_b \equiv (e_{bs}, e_{b\parallel}, e_{b\perp}) := \vec{e}_t \times \vec{e}_n. \quad (\text{B.20})$$

Diese sind mit (B.3) bis (B.7) eindeutig bestimmt³.

Nun sei $d\Omega_1 \equiv d\Omega_1(\vec{x}_1)$ ein infinitesimal kleines Volumenelement des Phasenraums bei \vec{x}_1 , dessen Teilchendichte $\rho(\vec{x}_1)$ zu bestimmen ist. Geeigneterweise wird $d\Omega_1$ entlang der Achsen des begleitenden Dreibeins mit den Kantenlängen dt_a , dn und db aufgespannt (siehe Abbildung B.3 auf Seite 219). Dann gilt

$$d\Omega_1 = |d\vec{e}_t \cdot \underbrace{(d\vec{e}_n \times d\vec{e}_b)}_{=: d\vec{\omega}_1}| = dt_a dn db \quad (\text{B.21})$$

mit

$$d\vec{e}_t = dt_a \cdot \vec{e}_t, \quad d\vec{e}_n = dn \cdot \vec{e}_n, \quad d\vec{e}_b = db \cdot \vec{e}_b. \quad (\text{B.22})$$

Die Zahl N der Teilchen, die sich im zeitlichen Mittel gleichzeitig in $d\Omega_1$ aufhalten, ergibt sich wie folgt: Alle relevanten Teilchen treten mit einer konstanten Rate R_1 senkrecht durch die von $d\vec{e}_n$ und $d\vec{e}_b$ bei \vec{x}_1 aufgespannte Stirnfläche

$$d\vec{\omega}_1 \equiv dn \cdot db \quad (\text{B.23})$$

in das Volumenelement $d\Omega_1$ ein und bewegen sich dort mit der *Phasenraum-Geschwindigkeit* $\vec{u}(\vec{x}_1)$ parallel zu \vec{e}_t . Gelangt zur Zeit $\tau = 0$ das erste Teilchen hinein, so vergeht die Zeit

$$d\tau := dt_a / |\vec{u}(\vec{x}_1)|, \quad (\text{B.24})$$

³Einzige Ausnahme ist der Fall $v_{\parallel 1} = 0$. Da die Trajektorie dann senkrecht durch die Ebene mit $v_{\parallel} = 0$ verläuft, gilt dann $\vec{e}_t = (0, -1, 0)$ und für \vec{e}_n kann ein beliebiger dazu senkrechter Einheitsvektor genommen werden.

bis dieses $d\Omega_1$ wieder verläßt. Während dieser Zeit kommen insgesamt $R_1 \cdot d\tau$ weitere Teilchen nach. Für jedes spätere verläßt auch wieder genau eines das Volumenelement, so daß sich im zeitlichen Mittel

$$dN = R_1 \cdot d\tau = R_1 \cdot dt_a / |\vec{u}(\vec{r}_1)| \quad (\text{B.25})$$

Teilchen im Phasenraumvolumen $d\Omega_1$ befinden.

Für die Teilchendichte bei \vec{x}_1 bedeutet dies

$$\rho(\vec{x}_1) \equiv \frac{dN}{d\Omega_1} = \frac{R_1 dt_a}{dt_a dn db |\vec{u}(\vec{x}_1)|} = \frac{R_1}{|d\vec{\omega}_1 \cdot \vec{u}(\vec{x}_1)|}. \quad (\text{B.26})$$

Es bleibt R_1 zu bestimmen: Alle Teilchen, die $d\omega_1$ durchlaufen, sind ursprünglich von dem Flächenelement

$$d\vec{F}_0 = d\vec{F}_0(\vec{x}_0) = dF_0 \cdot \vec{e}_s \quad (\text{B.27})$$

auf der ($s = s_0$)-Ebene gestartet. Bei dF_0 handelt es sich um die Projektion von $d\omega_1$ entlang der durch $d\omega_1$ verlaufenden Trajektorien in Richtung kleiner werdender s auf die ($s = s_0$)-Ebene (siehe Abbildung B.3, links). Der Vektor \vec{e}_s ist der Einheitsvektor in s -Richtung.

Die Rate R_1 , mit der Teilchen durch die Stirnfläche $d\omega_1$ in $d\Omega_1$ hinein gelangen, ist nun gleich der Rate R_0 , mit der Teilchen von dF_0 starten:

$$R_1 = R_0 = \rho(\vec{x}_0) \cdot |d\vec{F}_0 \cdot \vec{u}(\vec{x}_0)|. \quad (\text{B.28})$$

Kennt man also $d\vec{F}_0(d\vec{\omega}_1(\vec{x}_1))$, so ergibt sich für die Teilchendichte

$$\rho(\vec{x}_1) = \rho(\vec{x}_0) \cdot \frac{|d\vec{F}_0 \cdot \vec{u}(\vec{x}_0)|}{|d\vec{\omega}_1 \cdot \vec{u}(\vec{x}_1)|} = \rho(\vec{x}_0) \cdot \frac{dF_0 |\vec{e}_s \cdot \vec{u}(\vec{x}_0)|}{d\omega_1 |\vec{u}(\vec{x}_1)|}. \quad (\text{B.29})$$

Bestimmung des Flächenelementes dF_0 .

Es bleibt damit lediglich noch das zu $d\omega_1$ gehörige Flächenelement dF_0 zu bestimmen. Die Punkte $(s_0, w_{||}, w_{\perp})$ in dF_0 erhält man, indem man alle Trajektorien, die durch $d\omega_1$ verlaufen, bis zur ($s = s_0$)-Ebene zurückverfolgt, also durch Abbildung aller Punkte von $d\omega_1$ gem. (B.8) und (B.9) mit $s = s_0$. Das bedeutet

$$\begin{aligned} w_{||}(s, v_{||}, v_{\perp}) &:= v_{||0}(s, v_{||}, v_{\perp}) \\ w_{\perp}(s, v_{||}, v_{\perp}) &:= v_{\perp 0}(s, v_{||}, v_{\perp}). \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Das Flächenelement $d\omega_1$ liegt nun in einer mit E_1 bezeichneten Ebene, die sich mit g und h aus \mathbb{R} wie folgt parametrisieren läßt:

$$\begin{aligned} E_1 : \quad \vec{x}(g, h) &= \vec{x}_1 + g \cdot \vec{e}_n + h \cdot \vec{e}_b \\ &=: (s(g, h), v_{||}(g, h), v_{\perp}(g, h)). \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Das bedeutet mit den Komponenten (B.18) bis (B.20) der Vektoren des begleitenden Dreibeins:

$$\begin{aligned} s(g, h) &= s_1 + g \cdot e_{ns} + h \cdot e_{bs} \\ v_{\parallel}(g, h) &= v_{\parallel 1} + g \cdot e_{n\parallel} + h \cdot e_{b\parallel} \\ v_{\perp}(g, h) &= v_{\perp 1} + g \cdot e_{n\perp} + h \cdot e_{b\perp} . \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

Mit der Parametrisierung (B.31) gilt für das Stirnflächenelement

$$d\omega_1 \equiv dn db = dg dh. \quad (\text{B.33})$$

Des weiteren läßt sich eine (bijektive) Abbildung $(g, h) \mapsto (w_{\parallel}, w_{\perp})$ der Parameterpaare (g, h) (und somit der Punkte der Ebene E_1) auf die $(s = 0)$ -Ebene mit

$$\begin{aligned} w_{\parallel}(g, h) &:= w_{\parallel}(s(g, h), v_{\parallel}(g, h), v_{\perp}(g, h)) \\ w_{\perp}(g, h) &:= w_{\perp}(s(g, h), v_{\parallel}(g, h), v_{\perp}(g, h)) \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

definieren.

Da es sich bei $d\omega_1 = dg dh$ um eine Differentialform (zweiten Grades) handelt, gilt für die Transformation (B.34) [BS96, Kap. 1.5.10, insb. Gl. (1.100)]

$$\underbrace{dw_{\parallel} dw_{\perp}}_{dF_0} = |J_1| \cdot \underbrace{dg dh}_{d\omega_1}. \quad (\text{B.35})$$

Dabei ist $|J_1|$ die JACOBI-Funktionaldeterminante mit den partiellen Ableitungen der Abbildung an der Stelle $(g, h) = (0, 0)$, d.h.

$$J_1 \equiv J(s_1, v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial w_{\parallel}}{\partial g}(0, 0) & \frac{\partial w_{\parallel}}{\partial h}(0, 0) \\ \frac{\partial w_{\perp}}{\partial g}(0, 0) & \frac{\partial w_{\perp}}{\partial h}(0, 0) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.36})$$

Mit $w_{\parallel, \perp}(g, h)$ nach (B.34) und $(s, v_{\parallel}, v_{\perp})(g, h)$ nach (B.32) ist $|J_1|$ voll bestimmt.

Somit wird aus (B.29) und (B.35)

$$\rho(\vec{x}_1) = \rho(\vec{x}_0) \cdot |J_1| \cdot \frac{|\vec{e}_s \cdot \vec{u}(\vec{x}_0)|}{|\vec{u}(\vec{x}_1)|}, \quad (\text{B.37})$$

wobei nach (B.17) $\rho(\vec{x}_0) = k \cdot f_0(v_{\parallel 0}, v_{\perp 0})$ ist.

Phasenraumdichte für $v_{\parallel} < 0$ und $s \geq s_0$.

Da Phasenraumtrajektorien teilweise bei s_{max} abgeschnitten werden, gibt es im Phasenraum für $v_{\parallel} < 0$ Punkte, durch welche keine Trajektorien laufen. Dort ist die Phasenraumdichte gleich Null.

Diese Punkte lassen sich identifizieren, indem man überprüft, welche Magnetfeldstärke $B_s(s_{mirr})$ ein Teilchen, das durch diesen Punkt laufen soll, im Umkehrpunkt $\vec{r}_B(s_{mirr})$ haben muß. Für die gesuchten Punkte ist diese größer als die Feldstärke $B_s(s_{max})$ am Schnittpunkt der Feldlinie mit der Kammerwand.

Aufgrund der Konstanz des magnetischen Momentes μ mit (2.16), der Tatsache, daß im Umkehrpunkt die kinetische Energie vollständig in der Rotationsbewegung steckt, und der Energieerhaltung im Magnetfeld gilt

$$\frac{m v_{\perp 1}^2}{2 B_s(s_1)} = \frac{m (v_{\parallel 1}^2 + v_{\perp 1}^2)}{2 B_s(s_{mirr})}, \quad (\text{B.38})$$

woraus folgt:

$$B_s(s_{mirr}) = \frac{v_{\parallel 1}^2 + v_{\perp 1}^2}{v_{\perp 1}^2} B_s(s_1). \quad (\text{B.39})$$

Also für $v_{\parallel 1} < 0$ und $B_s(s_{max}) \leq B_s(s_{mirr})$:

$$\rho = 0. \quad (\text{B.40})$$

Weil die Trajektorien im Phasenraum, sofern sie nicht bei s_{max} abgeschnitten werden, nach (B.4) spiegelsymmetrisch zur $(v_{\parallel} = 0)$ -Ebene sind, gilt dies auch für die Phasenraumdichte. Also gilt für $v_{\parallel 1} < 0$ und $B_s(s_{max}) > B_s(s_{mirr})$:

$$\rho(s_1, v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}) = \rho(s_1, -v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}). \quad (\text{B.41})$$

Somit kann zusammenfassend für die Gleichungen (B.17), (B.29), (B.37), (B.40) und (B.41) geschrieben werden:

$$\rho(\underbrace{s_1, v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}}_{\vec{x}_1}) = \begin{cases} k \cdot f_0(v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}) & \text{für } v_{\parallel 1} \geq 0 \wedge s_1 = s_0 \\ \rho(\vec{x}_0) \cdot |J_1| \cdot \frac{|\vec{e}_s \cdot \vec{u}(\vec{x}_0)|}{|\vec{u}(\vec{x}_1)|} & \text{für } v_{\parallel 1} \geq 0 \wedge s_0 < s_1 < s_{max} \\ 0 & \text{für } v_{\parallel 1} < 0 \wedge B_s(s_{max}) \leq B_s(s_{mirr}) \\ \rho(s_1, -v_{\parallel 1}, v_{\perp 1}) & \text{für } v_{\parallel 1} < 0 \wedge B_s(s_{max}) > B_s(s_{mirr}) \end{cases}, \quad (\text{B.42})$$

wobei \vec{x}_0 und $B_s(s)$ ebenfalls von \vec{x}_1 abhängen!

Anhang C

Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung

Verteilungen der Geschwindigkeitsbeträge

Die MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung $f(\vec{v})$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Geschwindigkeit \vec{v} eines Teilchens eines Gases aus Teilchen der Masse m mit der Temperatur T .

Für die Verteilung der Beträge $v \equiv |\vec{v}|$ gilt mit der BOLTZMANN-Konstante k

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k T}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad (\text{C.1})$$

mit den Eigenschaften

$$\int_0^{\infty} f(v) dv = 1, \quad (\text{C.2})$$

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (\text{C.3})$$

Mittlere Relativgeschwindigkeit

Der Mittelwert der Beträge der Relativgeschwindigkeiten $u \equiv |\vec{v}_i - \vec{v}_j|$ zwischen beliebigen Teilchen i und j , die derselben MAXWELL-Verteilung unterliegen, ist [Fro79, Kap. 3.6]

$$\bar{u} = \sqrt{2} \bar{v} = \sqrt{\frac{16kT}{\pi m}}. \quad (\text{C.4})$$

Energieverteilung

Für die zu (C.1) gehörende Energieverteilung $f_E(E)$ ergibt sich aus

$$f(v) dv = f_E(E) dE \Leftrightarrow f_E(E) = f(v) \frac{dv}{dE} \quad (\text{C.5})$$

und

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (\text{C.6})$$

die Darstellung

$$f_E(E) = 2 \sqrt{\frac{E}{\pi(kT)^3}} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right). \quad (\text{C.7})$$

Anhang D

Das Simulationsprogramm

In diesem Anhang werden einige Aspekte des Computerprogramms **CSD.EXE** beleuchtet, in dem das in Kapitel 3 vorgestellte Modell umgesetzt wurde. Dazu gehören die Beschreibung des Programmablaufes sowie der Ein- und Ausgabedateien.

D.1 Programmablauf

Jede Simulationsrechnung muß in einem eigenen Dateiverzeichnis (im folgenden als *Arbeitsverzeichnis* bezeichnet) laufen, da vom Programm verschiedene Unterverzeichnisse angelegt werden (siehe Abbildung D.4 auf Seite 239). Alle folgenden Dateinamen verstehen sich relativ zu diesem Arbeitsverzeichnis, sofern nichts weiteres angegeben ist.

Der grobe Verlauf einer Simulation erfolgt wie folgt:

1. Einlesen der Simulationsparameter aus der Datei `parameter.txt` (Beschreibung der Parameter siehe Abschnitt D.2.4).
2. Initialisierung der folgenden Daten:
 - Einlesen des Magnetfeldes $\vec{B}(\vec{r})$ aus der durch die Simulationsparameter `FieldsDir` und `BfieldFile` definierten Datei.
 - Berechnung der EII-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{z \rightarrow z+k}^{eii} \cdot u \rangle$ aus (3.35) und (3.40). Die dazu benötigte EEDF wird aus der durch die Simulationsparameter `FieldsDir` und `ElectronEnergyDistribFile` definierten Datei eingelesen.
 - Berechnung der CX-Ratenkoeffizienten $\langle \sigma_{A^{z+}, B}^{A^{z+}, B} \cdot u \rangle$ und $\langle \sigma_{A^{(z-k)+}, B^{i+}}^{A^{z+}, B} \cdot u \rangle$ aus (3.66) und (3.68). Falls im Arbeitsverzeichnis die Datei `sigma_cx.txt` existiert, werden dazu aus dieser die Konstanten $\gamma_{A^{(z-k)+}, B^{i+}}^{A^{z+}, B}$ eingelesen (siehe (3.64) auf Seite 82), ansonsten werden diese gem. (3.65) gesetzt.

- Einlesen des Dichteprofiles der heißen Elektronen aus der durch die Simulationsparameter `FieldsDir` und `csd_init.ElectronDensityDistribFile` definierten Datei.
 - Initialisierung der CSD (siehe Abschnitt D.1.1). Falls über den Simulationsparameter `csd.startDistribFile` eine existierende Datei angegeben wird, die das Ergebnis einer vorherigen Simulation ist, wird die CSD mit deren Werten initialisiert.
3. Berechnung der NT-Profile (siehe Kapitel 3.4). Die Ergebnisse werden in der Datei `np_prof1.asc` gesichert, um bei einer wiederholten Simulation auf die erneute Berechnung verzichten zu können.
 4. Berechnung der stoßbedingten Einschlußzeiten τ und der Verteilungen Ω_k der Transportverluste auf die Nachbarzellen k für die PKB-Zellen (siehe Abschnitt D.1.2). Dieser Teil des Programms ist so geschrieben worden, daß mehrere PCs gleichzeitig an diesem äußerst zeitaufwendigen Problem beteiligt werden können. Das Ergebnis wird in der Datei `dpcrmc_result.dat` gesichert.
 5. Berechnung der für den Transport benötigten Daten, die sich insbesondere aus dem Magnetfeldverlauf außerhalb des PKBs ergeben. Diese werden in der Datei `transp_opcr.dat` gesichert.
 6. Simulation der zeitlichen Entwicklung der CSD bis a) die durch den Simulationsparameter `csd.t_max` vorgegebene maximale Simulationszeit erreicht wird, b) das Konvergenzkriterium (Parameter `csd.maxRelChange_per_ms`) erreicht wird oder das Programm einen Steuerbefehl zum Abbrechen bekommen hat. Nach jedem Zeitschritt werden dabei die Transportkoeffizienten einer PKB-Zelle neu berechnet, falls sich deren Dichte $n_{++} \equiv \sum_s z_s^2 \cdot n_s$ im Vergleich zum genauso berechneten Wert n'_{++} zum Zeitpunkt der letzten Transportkoeffizientenberechnung so stark geändert hat, daß $|n_{++} - n'_{++}|/n'_{++}$ größer als der Parameter `transp.adopt_data` ist.
 7. Sicherung der CSD in der Datei `csd.asc`.
 8. Erzeugung verschiedener Graphikdateien zur Analyse der CSD zum Zeitpunkt des Simulationsendes (siehe Kapitel 4).

Die wichtigsten Schritte sind in den folgenden Abschnitten detaillierter beschrieben.

D.1.1 Initialisierung der CSD

Die Dichteverteilung der heißen Elektronen setzt sich nach (3.9) aus dem Dichteprofil $\rho(\vec{r}_c)$ und der mittleren Dichte $\bar{n}_{e,hot}$ zusammen. Die Werte der $\rho(\vec{r}_c)$ werden aus der durch die Simulationsparameter `FieldsDir` sowie `csd_init.ElectronDensityDistribFile` definierten Datei (siehe Abschnitt

D.2.1) eingelesen und $\bar{n}_{e,hot}$ erhält seinen Anfangswert durch den Parameter `csd_init.n_eHot.mean`.

Darauf werden die Neutralteilchendichten aller Zellen auf die gem. (3.25) berechneten Werte gesetzt. Die Gaszufuhrraten I_{inlet} sind dabei durch den Simulationsparameter `csd_init.GasFlow_n` gegeben, während τ_{inlet} und ρ_{inlet} von der durch `csd_init.n_eHot.mean` festgelegten mittleren Elektronendichte abhängen.

Um von Beginn an Quasineutralität zu gewährleisten, wird in jeder Zelle die Dichte der einfach geladenen Ionenspezies gleich der Dichte der heißen Elektronen gesetzt. Alle Dichten der höher geladenen Ionen starten mit Null.

D.1.2 Berechnung der mittleren Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ und der Verteilung $\Omega_{s,c,k}$ der Transportverluste auf die Nachbarzellen k für die PKB-Zellen mittels Monte-Carlo-Simulation

In Abschnitt 3.6.1 wurde beschrieben, wie für die Zellen des PKB die mit dem *Abtransport* von Teilchen aus einer Zelle verbundenen Verlustraten mit Hilfe von zell- und teilchenspezifischen Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ bestimmt werden. Die *Teilchenzufuhr* durch Transport folgt aus den Verlustraten der Nachbarzellen c' und *deren* Verteilungen $\Omega_{s,c',k}$ der Verluste auf die Nachbarzellen. Diese für jede Zelle und jede Ionenspezies zu bestimmenden Größen hängen von der Iontemperatur, der Stoßrate, der Zellgeometrie und vom lokalen Magnetfeld ab¹.

Ebenfalls wurde dargelegt, wie ein einzelnes Ion in einem gegebenen Magnetfeld und unter Berücksichtigung der elastischen ii-Stöße bei gegebenen Stoßpartnerdichten simuliert werden kann. Zur Bestimmung von $\tau_{s,c}$ und den $\Omega_{s,c,k}$ bei einer bestimmten Stoßpartnerdichte n_{++} müssen so viele Einzelteilchensimulationen durchgeführt werden, daß $\tau_{s,c}$ und die $\Omega_{s,c,k}$ durch Mittelwertbildung mit ausreichender Genauigkeit berechnet werden können. Aufgrund der Unzahl möglicher Startpositionen in der Zelle und der MAXWELL-verteilten Startgeschwindigkeiten handelt es sich dabei um mehrere tausend Einzelsimulationen, für die heutige PCs mit Leistungen im GHz-Bereich noch einige 10 Minuten (pro s, c und n_{++}) benötigen². Eine immer neue Berechnung von $\tau_{s,c}$ und den $\Omega_{s,c,k}$ für alle betroffenen Zellen und Ionenspezies immer in Abhängigkeit von der sich verändernden Stoßrate ist somit technisch (derzeit) nicht akzeptabel.

¹Im Grenzfall sehr hoher Stoßraten verschwindet jedoch der Einfluß des Magnetfeldes, wenn die LORENTZ-Kraft im Vergleich zu den durch die Stöße verursachten Kräfte verschwindet (siehe (3.74) und Abbildung 3.29 auf Seite 95).

²Die pro Einzelsimulation benötigte Rechenzeit hängt sehr stark vom Ladungszustand z des simulierten Teilchens ab. Mit größerem z wächst erstens die mittlere Einschlußzeit (siehe Abbildung 3.28) und zweitens muß die Integrationsschrittweite Δt reduziert werden, damit der Mittelwert $\langle \Delta v_{\parallel} \rangle$ und die Varianzen $\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$, $\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ für die Wahrscheinlichkeitsdichten w_{\parallel} und w_{\perp} nach (3.91), (3.92) und (3.88), aus denen die zufälligen Geschwindigkeitsänderungen gewürfelt werden, nicht zu groß werden.

Zur Lösung dieses Problems wird daher wie folgt vereinfachend vorgegangen. Anstatt individuelle Monte-Carlo-Simulationen für alle PKB-Zellen durchzuführen, werden $\tau_{s,c}$ und die $\Omega_{s,c,k}$ nur für hier sogenannte *repräsentative* Zellen berechnet. Dabei wird für alle PKB-Zellen mit gleichem Abstand zur Zylinderachse (siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38) genau eine repräsentative Zelle definiert, da erstere – abgesehen von ihrer azimutalen Lage – geometrisch identisch sind. Die repräsentative Zelle hat selbstverständlich ebenfalls dieselbe Geometrie.

Das Magnetfeld in ihr wird parallel zur Zylinderachse angesetzt. Dies ist für die PKB-Zellen in guter Näherung der Fall. Als Magnetfeldstärke wird der Mittelwert aller repräsentierten Zellen angesetzt.

Des Weiteren werden die $\tau_{s,c}$ und die $\Omega_{s,c,k}$ für jede repräsentative Zelle und jede Ionspezies nur für eine vorgegebene Zahl verschiedener Stoßpartnerdichten n_{++} per Monte-Carlo-Simulation ermittelt. Werte für neben diesen Stützpunkten liegende n_{++} werden dann inter- bzw. extrapoliert (siehe Abbildung 3.28 auf Seite 94). Der dabei abzudeckende Bereich von n_{++} und die Anzahl der Stützstellen werden mit Hilfe der Simulationsparameter `transp.collmc_npp_min`, `transp.collmc_npp_max` und `transp.collmc_samplesCnt` festgelegt (siehe Abschnitt D.2.4).

Selbst mit diesen starken Vereinfachungen sind ca. 40 PCs mit Taktfrequenzen zwischen 800 und 1500 MHz zusammen zur vollständigen Ermittlung aller Datensätze mit ausreichender Genauigkeit noch mehrere Wochen permanent beschäftigt.

D.1.3 Berechnung der lokalen Parallelgeschwindigkeitsverteilung im quasi-stoßfreien Fall

Zur Berechnung der Ionendichten außerhalb des PKBs wird gem. (3.122) mit (3.123) die Verteilung $f_s(v_{||})$ der Teilchengeschwindigkeiten parallel zum lokalen Magnetfeld benötigt. Die analytische Herleitung zur Bestimmung von $f_s(v_{||})$ ist in Anhang B dokumentiert. In diesem Abschnitt wird erläutert, wie diese Berechnungen numerisch durchgeführt werden.

Um für einen bestimmten Ort \vec{r}_1 (siehe Abbildung B.1 auf Seite 217), an dem quasi-stoßfreier Ionttransport angesetzt werden kann, konkret die Verteilung der Parallelgeschwindigkeiten zu berechnen, wird in der folgenden Weise vorgegangen:

1. **Berechnung der Feldlinie $\vec{r}_B(s)$ durch \vec{r}_1 .** In beiden Richtungen wird die Feldlinie durch \vec{r}_1 soweit verfolgt bis sie auf die Kammerwand trifft [Keg98, Anhang A.2: Berechnung von Feldlinien].
2. **Analyse des Feldlinien- und Feldstärkeverlaufes.** Im Normalfall (Feldlinie N in Abbildungen D.1 auf der nächsten Seite mit Feldstärkeverlauf in Abbildung 3.31 auf Seite 102) schneidet die Feldlinie den PKB an dem dadurch definierten Punkt $\vec{r}_0 \equiv \vec{r}_B(s_0)$ auf der einen Seite von $\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_B(s_1)$ und die Plasmakammerwand oder Extraktion auf der anderen Seite bei $\vec{r}_B(s_{max})$.

Gleichzeitig wächst die Feldstärke monoton von s_0 bis s_{max} an. Nach der Bestimmung von \vec{r}_0 geht es dann mit Schritt 3 weiter.

Neben diesem Normalfall existieren jedoch einige Spezialfälle, die besonders behandelt werden müssen.

Spezialfall 1 (Feldlinie SP 1 in Abbildung D.1 mit Feldstärkeverlauf wie in Abbildung D.2 mit $s_1 \equiv s_{1,1}$): Die Feldlinie verläuft wie im Normalfall auch durch den PKB, der Verlauf der Feldstärke nimmt jedoch zwischen s_1 und

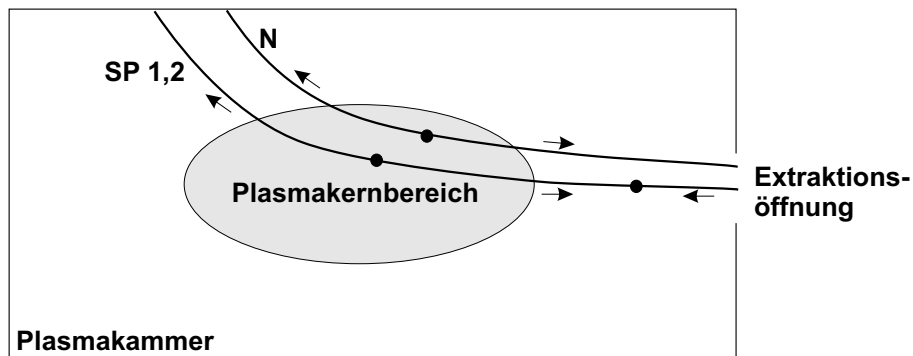


Abbildung D.1: Typische Verläufe von Feldlinien (vergleiche Vektorfelddarstellung 2.3 auf Seite 8). Sofern vorhanden, markieren die Punkte auf den Feldlinien die Orte extremer Feldstärke $B_s(s)$ entlang der Feldlinien. Die Pfeile zeigen jeweils in Richtung zunehmender Feldstärke. **N**, **SP 1** und **2** kennzeichnen die Feldlinien des hier sogenannten Normalfalls sowie der Spezialfälle 1 und 2 (siehe Text). Die Verläufe **N** einerseits und **SP 1,2** andererseits treten in keiner Magnetfeldkonfiguration so, wie hier gezeichnet, gleichzeitig auf.

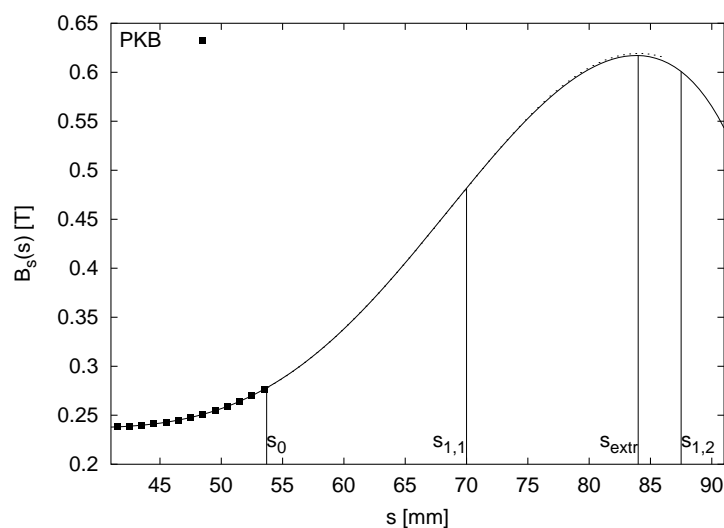


Abbildung D.2: Typischer Feldstärkeverlauf mit lokalem Maximum zwischen PKB und Wand, der für die Spezialfälle 1 (mit $s_{1,1}$) und 2 (mit $s_{1,2}$) verantwortlich ist. Diese unterscheiden sich nur durch die Lage von s_1 relativ zum lokalen Maximum (siehe Text).

s_{max} bei s_{extr} ein lokales Maximum ein, d.h.

$$B_s(s_1) < B_s(s_{extr}) \quad \text{und} \quad B_s(s_{extr}) > B_s(s_{max}) \quad (\text{D.1})$$

$$\text{bei} \quad s_1 < s_{extr} < s_{max} . \quad (\text{D.2})$$

Dies tritt z.B. dann auf, wenn die Magnetstruktur (siehe Abbildung D.2 auf der vorherigen Seite) soweit verschoben wird, daß eines der Maxima des Spiegelfeldes innerhalb der Plasmakammer liegt.

Da die Ionen, die von s_0 kommend s_{extr} überschreiten, bei Stoßfreiheit immer auch die Wand bei s_{max} erreichen, kann diese Situation wie der Normalfall behandelt werden, wobei jedoch $s_{max} := s_{extr}$ gesetzt wird.

Spezialfall 2 (Feldlinie SP 2 in Abbildung D.1 mit Feldstärkeverlauf wie in Abbildung D.2 mit $s_1 \equiv s_{1,2}$): Bei einem Feldlinien- und Feldstärkeverlauf wie im Spezialfall 1, wobei s_1 jedoch zwischen s_{extr} und s_{max} liegt, d.h. $s_0 < s_{extr} < s_1 < s_{max}$ gilt, müßte eigentlich so, wie im Normalfall die bei s_0 bekannte Geschwindigkeitsverteilung $f_{s_0}(v_{||})$ auf diejenige bei s_1 abgebildet werden, zuerst $f_{s_0}(v_{||})$ auf $f_{s_{extr}}(v_{||})$ und diese dann wiederum auf $f_{s_1}(v_{||})$ abgebildet werden. Da dies aber softwaretechnisch sehr aufwendig ist und dieser Spezialfall nur selten eintritt, wird in diesem Fall vereinfachend für $f_{s_1}(v_{||})$ die "halbe" Ausgangsverteilung angesetzt:

$$f_{s_1} := \begin{cases} f_{s_0}(v_{||}), & \text{falls } v_{||} \geq 0 \\ 0 & \text{falls } v_{||} < 0, \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

wobei mit $v_{||} \geq 0$ die Bewegung in Richtung s_{max} verbunden sei³.

Nur im Normalfall geht es dann mit Schritt 3 weiter. In allen anderen Fällen ist eine Lösung für die gesuchte Verteilung gefunden.

3. **Bestimmung benötigter magnetischer Größen.** Dazu gehören die Feldstärken $B_s(s_0)$, $B_s(s_1)$ und $B_s(s_{max})$ sowie der Gradient $(\partial B_s / \partial s)(s_1)$ der Magnetfeldstärke in Richtung der Feldlinie bei \vec{r}_1 und $(\partial^2 B_s / \partial s^2)(s_1)$.
4. **Berechnung der Stützpunkte von $g_{s_1}(v_{||})$.** Nach (B.15) muß hierzu bei festem s_1 und $v_{||1}$ die Phasenraumdichte $\rho(s_1, v_{||1}, v_{\perp})$ über v_{\perp} integriert werden. Dies erfolgt numerisch, wobei zur Berechnung von ρ für jeden Stützpunkt $\vec{x}_1 \equiv (s_1, v_{||1}, v_{\perp1})$ im allgemeinen Fall, d.h. $v_{||1} \geq 0$ und $s_0 < s_1 \leq s_{max}$, wie folgt vorgegangen wird:

4.1 Berechnung der Vektoren des begleitenden Dreibeins der Phasenraumtrajektorie durch \vec{x}_1 an der Stelle \vec{x}_1 .

4.2 Berechnung der Funktionaldeterminante J_1 aus (B.36).

³Andernfalls wird auch die Fallunterscheidung in (D.3) vertauscht.

4.3 Anwendung von (B.37).

Die Spezialfälle für v_{11} und s_1 werden gem. (B.42) auf einen allgemeinen Fall zurückgeführt oder direkt mit (B.42) berechnet.

5. **Normierung** der durch die Stützpunkte gegebenen Funktion $g_{s_1}(v_{11})$ gem. (B.16). Damit ist $f_s(v_{11})$ bestimmt.

D.1.4 Berechnung der zeitlichen Entwicklung

Ausgehend von einer gegebenen Anfangsdichteverteilung $n_{z,c}(t_0)$ zum Zeitpunkt t_0 soll die Verteilung $n_{z,c}(t \rightarrow \infty)$ berechnet werden, die sich im dynamischen Gleichgewicht einstellt. Wie in Abschnitt 3.2.3 erläutert, wird dazu das EULER-Verfahren verwendet, bei dem die Dichten nach einer kurzen Zeitspanne Δt gemäß

$$n_{z,c}(t_0 + \Delta t) \approx n_{z,c}(t_0) + \dot{n}_{z,c}(t_0) \cdot \Delta t \quad (3.8)$$

als Näherung berechnet werden. Dabei ist $\dot{n}_{z,c}(t_0)$ die aus allen Prozeßraten $R_{z,c}^{(p)}$ aufaddierte zeitliche Änderung

$$\dot{n}_{z,c}(t_0) = \sum_p R_{z,c}^{(p)}(t_0) \equiv R_{z,c}^{tot}(t_0). \quad (D.4)$$

Im Simulationsprogramm ließe sich dieses Verfahren mit drei Schleifen direkt implementieren:

```

do {
  // Zeitschleife
  for c=1 to N_cell {
    // Schleife ueber alle Zellen
    n[0,c] = ... // NT-Dichte folgt aus den Daten
                // der Monte-Carlo-Simulation
    for z=1 to Z {
      // Schleife ueber alle Ladungszustaende
      R_tot = ... // Berechnung der totalen Prozessrate

      // Aenderung der Dichte:
      n[z,c] = n[z,c] + R_tot * delta_t
    }
  }
  t = t + delta_t
} until ... // bis Konvergenzkriterium erfuellt

```

Da fast alle zu berücksichtigenden Prozesse p entweder mindestens zwei Ladungszustände z oder zwei Zellen c betreffen, kommt fast jede Prozeßrate $R_{z,c}^{(p)}$ als Summand in mindestens zwei Totalraten vor. Als Beispiel sei die 1-EII von A^{5+} betrachtet:



Die zugehörige Prozeßrate $R_{A^{5+} \rightarrow A^{6+}}^{eii} > 0$ (hier ist der Index c weggelassen) geht sowohl in

$$R_{A^{5+}}^{tot} = \dots - R_{A^{5+} \rightarrow A^{6+}}^{eii} \pm \dots \quad (D.6)$$

als auch

$$R_{A^{6+}}^{tot} = \dots + R_{A^{5+} \rightarrow A^{6+}}^{eii} \pm \dots \quad (D.7)$$

ein. Beim CX sind sogar vier Ladungszustände betroffen. Entsprechendes gilt auch für die mit dem Teilchentransport verbundenen Raten, die fast immer zwei "benachbarte Dichten" einer Sorte betreffen⁴.

Um die unnötige mehrfache Berechnung der einzelnen Prozeßraten zu umgehen, werden diese in der innersten Schleife prozeßweise berechnet und die damit verbundenen Dichteänderungen direkt bei allen betroffenen Spezies berücksichtigt:

```
do {
    // Zeitschleife .....
    for c=1 to N_cell { // Schleife ueber alle Zellen
        n[0,c] = ...
        for z=0 to Z { // Schleife ueber alle Ladungszustaende
            // Aenderungen durch 1-EII von A(z+) gem.
            // A(z+) + e- --> A((z+1)+) + 2 e-
            dn_eii = ...
            n[z,c] = n[z,c] -dn_eii // aber nicht fuer z=0
            n[z+1,c] = n[z+1,c] +dn_eii // aber nicht fuer z=Z

            // Aenderungen durch 1-CX von A(z+) gem.
            // A(z+) + A(0) --> A((z-1)+) + A(1+)
            dn_cx = ...
            n[z,c] = n[z,c] -dn_cx // aber nicht fuer z=0
            n[z-1,c] = n[z-1,c] +dn_cx // aber nicht fuer z<=1
            // n[0,c] = n[0,c] -dn_cx // dies wird vernachlaessigt
            n[1,c] = n[1,c] +dn_cx

            // Aenderungen durch Abtransport von A(z+) in die
            // Nachbarzelle c2 (aber nur fuer z>0):
            dn_tr = ...
            n[z,c] = n[z,c] -dn_tr
            n[z,c2] = n[z,c2] +dn_tr
        }
    }
    t = t + delta_t

    // Erstellen einer Kopie der Dichten n[z,c] auf deren Basis
    // im naechsten Zeitschritt die Prozessraten berechnet werden:
    ...
} until ... // ... bis Konvergenzkriterium erfuellt
```

⁴Eine Ausnahme ist beispielsweise der Transport aus den Randzellen des PKBs.

Die Berechnung der einzelnen Raten erfolgt dabei immer auf der Basis einer *Kopie* der Dichten aus dem letzten Zeitschritt, die in den zwei inneren Schleifen unverändert bleibt.

Tatsächlich ist die Implementation noch deutlich komplexer, da CX sowie EII mit mehrfacher Ladungsänderung k (und auch verschiedene Gassorten⁵) berücksichtigt werden.

Modifizierung der Berechnung der Dichteänderungen durch Transport-Verluste. Damit es während einer Simulation auf keinen Fall zu negativen Dichten kommt, dürfen die Dichteänderungen $\Delta n_{z,c}^{(p)}(\Delta t) < 0$ durch Verlustprozesse p während eines Zeitschrittes Δt betragsmäßig nicht größer als die Dichte selbst sein⁶:

$$|\Delta n_{z,c}^{(p)}(\Delta t)| \stackrel{!}{<} n_{z,c}. \quad (\text{D.8})$$

Das hat bei der Berechnung der Dichteänderungen gemäß

$$\Delta n_{z,c}^{(p)}(\Delta t) = \left(\frac{\partial n_{z,c}}{\partial t} \right)^{(p)} \cdot \Delta t \equiv -\frac{n_{z,c}}{\tau_{z,c}^{(p)}} \Delta t \quad (\text{D.9})$$

zur Folge, daß Δt kleiner als die kleinste aller charakteristischen Prozeßzeiten $\tau_{z,c}^{(p)}$ bleiben muß!

Die kleinsten $\tau_{z,c}^{(p)}$ sind für die einzelnen Zellen im allgemeinen die den Teilchenverlust durch Abtransport beschreibenden Zelleinschlußzeiten $\tau_{z,c}^{loss}$. (Während die charakteristischen $\tau_{z,c}^{(p)}$ der ladungsändernden Prozesse unabhängig von der Zellgröße sind, werden die $\tau_{z,c}^{loss}$ mit kleinerer Zellgröße kleiner.)

Um die Simulationen aber vor allem zu Beginn mit größeren Δt laufen lassen zu können, ohne daß es zu negativen Dichten kommt, werden die Dichteänderungen durch Abtransport pro Zeitschritt gemäß

$$\Delta n_{z,c}^{loss}(\Delta t) = -n_{z,c} \left[1 - \exp \left(-\frac{\Delta t}{\tau_{z,c}^{loss}} \right) \right] \quad (\text{D.10})$$

berechnet. Durch diesen "Trick" wird die Änderung pro Zeiteinheit betragsmäßig mit größerem Δt kleiner, so daß (D.8) für $\Delta n_{z,c}^{(p)} = \Delta n_{z,c}^{loss}$ stets gewährleistet ist (siehe Abbildung D.3).

Für Simulationen mit großem Δt im Vergleich zu den $\tau_{z,c}^{loss}$ bedeutet dies eine Unterschätzung der Verluste durch Neutralisation an den Wänden und durch Extraktion, so daß das Plasma numerisch schneller zündet und die Ionendichten im Gleichgewicht größer werden.

⁵Wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, ist die Behandlung mehrerer Gassorten jedoch noch nicht durchgehend im ganzen Programm implementiert.

⁶Eigentlich genügt es, (D.8) für die totale Änderung (summiert über alle Gewinn- und Verlustprozesse) zu fordern. Der Einfachheit halber wird dies aber zur (somit strengeren) Bedingung für die Änderungen durch alle einzelnen Verlustprozesse gemacht.

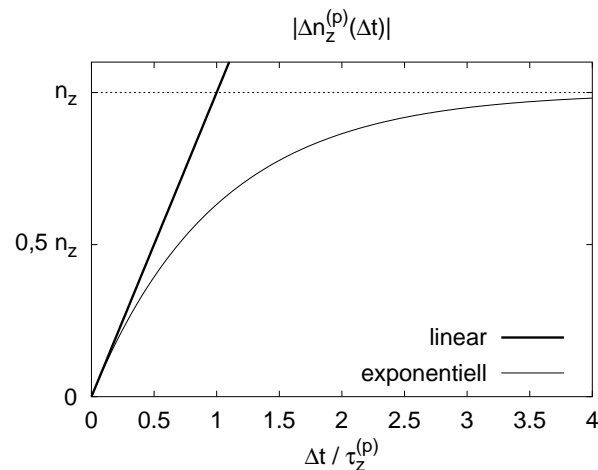


Abbildung D.3: Betrag der Dichteänderung $\Delta n_{z,c}^{(p)}$ während eines Integrationszeitschrittes Δt durch einen Verlustprozeß p mit der charakteristischen Prozeßzeit $\tau_{z,c}^{(p)}$ in Abhängigkeit von Δt . Der lineare Fall entspricht (D.9), der exponentielle (D.10).

Da (D.10) für $\Delta t \rightarrow 0$ jedoch gegen (D.9) konvergiert, kann nach der mit großen Δt erreichten Konvergenz der CSD mit kleinerem Δt weitergerechnet werden, bis die CSD erneut konvergiert. Dies wird solange wiederholt, bis die damit verbundenen Änderungen in der CSD vernachlässigbar werden (siehe Abschnitt 4.4.1). Dieses Vorgehen liefert zwar eine ungenauere zeitliche Entwicklung der CSD⁷, führt aber wesentlich schneller zur CSD im Gleichgewicht.

D.2 Programmein- und -ausgabe

D.2.1 Verzeichnis- und Dateiübersicht

Das Simulationsprogramm liest einige Daten aus Dateien ein und generiert eine Reihe von Ergebnisdateien, die in diesem Abschnitt kurz dokumentiert werden. Tabelle D.1 auf der nächsten Seite listet die Input-Dateien auf. Abbildung D.4 zeigt die vom Programm erzeugte Verzeichnisstruktur und in Tabelle D.2 auf Seite 241 sind die Output-Dateien zusammengestellt.

Einige Dateinamen ergeben sich aus der Kombination zweier Simulationsparameter. Dies wird durch die Funktion `fname(param1, param2)` realisiert, die abhängig von den Werten der Parameter z.B. folgende Dateinamen liefert

- `fname("d:\sim", "datei.dat")` → `"d:\sim\datei.dat"`
(Typische Benutzung.)
- `fname(egal, "c:\dir\datei.dat")` → `"c:\dir\datei.dat"`
(Enthält der zweite Parameter einen absoluten Pfad, so wird der erste ignoriert.)

⁷Es sei erneut darauf hingewiesen, daß der zeitlichen Entwicklung in dieser Arbeit auch kein besonderes Interesse gewidmet ist.

```

---<Arbeitsverzeichnis>
  +---doc
    +---axis_ts
    +---flow
    +---npmcsim
    +---transp
      | +---opcr
      | +---pcr
      | +---slice00
      | +---slice01
      | +      .
      | +      .
      |
    +---wall_impct
    +---xy
    +---zrplot

```

Abbildung D.4: Struktur der von der Simulation angelegten Unterverzeichnisse des Arbeitsverzeichnisses.

- `fname("d:\dir1\dir2", "..\datei.dat")` → `"d:\dir1\datei.dat"`
(Der zweite Parameter kann auch auf übergeordnete Verzeichnisse verweisen.)

Eingabedateien	
Dateiname	Beschreibung
<code>parameter.txt</code>	Simulationsparameter (obligatorisch, siehe Abschnitt D.2.4)
<code>csd.asc</code>	CSD-Ergebnis einer älteren Simulation. Falls nicht vorhanden, wird die CSD, wie in Abschnitt D.1.1 beschrieben, initialisiert.
<code>sigma_cx.txt</code>	Koeffizienten $\gamma_{A(z-k)_+, B^{i+}}^{A^{z+}, B}$ (optional)
<code>fname(FieldsDir, BfieldFile)</code>	Magnetfeld (obligatorisch)
<code>fname(FieldsDir, csd_init.ElectronDensityDistribFile)</code>	Dichteprofil der heißen Elektronen (obligatorisch, wenn <code>csd.asc</code> nicht eingelesen wird)
<code>fname(FieldsDir, ElectronEnergyDistribFile)</code>	EEDF (obligatorisch)
<code>runctrl.txt</code>	Steuerdatei (optional)

Tabelle D.1: Eingabedateien für die Simulation.

Ausgabedateien	
(Kursiv gedruckte Buchstaben in den Dateinamen stehen für variable, ganzzahlige Werte.)	
Dateiname	Beschreibung
Arbeitsverzeichnis	
<code>csd.asc</code>	Ergebnisdatei mit der CSD am Ende der Simulation.
<code>csd.asc.bak</code>	Backup der Ergebnisdatei <code>csd.asc</code> vom letzten Durchlauf.

Fortsetzung Ausgabedateien	
(Kursiv gedruckte Buchstaben in den Dateinamen stehen für variable, ganzzahlige Werte.)	
Dateiname	Beschreibung
<code>dpcrmc_result.dat</code>	Ergebnisdatei der Monte-Carlo-Simulationen zur Bestimmung der Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ und der Verteilungen $\Omega_{s,c,k}$ (siehe Abschnitt 3.6.1). Siehe auch Verzeichnis <code>doc\backslashtransp\backslashpcr\backslash</code> .
<code>dpcrmcsim.log</code>	Lesbare Form der Datei <code>dpcrmc_result.dat</code> .
<code>error.log</code>	Protokolldatei der Warnungen und Fehlermeldungen.
<code>fvpaxis.wrl</code>	VRML-Graphik zur z -Abhängigkeit der Verteilung Parallelgeschwindigkeiten von Teilchen auf der z -Achse.
<code>journal.log</code>	Protokolldatei der Simulation(en).
<code>np_profl.asc</code>	Dichteprofile der Neutralteilchen, die mittels Monte-Carlo-Simulation ermittelt wurden (siehe Abschnitt 3.4).
<code>parameter_log.html</code>	HTML-Datei mit den Simulationsparametern des letzten Programmlaufes.
<code>pcrcells.wrl</code>	VRML-Graphik, in der alle Zellen des PKBs zusammen mit der durch ihr jeweiliges Zentrum verlaufenden Feldlinie dargestellt werden.
<code>pcrcells...</code> <code>...wo_flines.wrl</code>	Wie <code>pcr_cells.wrl</code> , jedoch ohne die Feldlinien.
<code>transp_opcr.dat</code>	Daten für die Berechnung der Dichten außerhalb des PKBs.
<code>transp_pcr.dat</code>	Daten zum Ionentransport innerhalb des PKBs.
Unterverzeichnis <code>doc\</code>	
<code>axis.plt</code> (mit <code>axis.asc</code>)	GNU PLOT-Datei für Graphiken mit Daten der CSD entlang der Zylinderachse (siehe z.B. Abbildung 4.28 auf Seite 150).
<code>axis_ts.plt</code>	GNU PLOT-Datei zur zeitlichen Entwicklung der Dichten $n_{e,hot}$ und n_+ entlang der Zylinderachse.
<code>flows.html</code>	HTML-Übersichtsdatei, über welche auf die einzelnen VRML-Graphiken im Ordner <code>doc\flow\</code> (s.u.) zugegriffen werden kann.
<code>max_np_cell.txt</code>	ASCII-Textdatei mit Daten der CSD in der Zelle mit der höchsten Dichte n_+ .
<code>mean.plt</code> (mit <code>mean.asc</code>)	GNU PLOT-Datei für Graphiken der über die ganzen Plasmakammer gemittelten Daten der CSD (siehe z.B. Abbildung 4.30 auf Seite 153).
<code>mean.txt</code>	ASCII-Textdatei mit über die ganzen Plasmakammer gemittelten Daten der CSD.
<code>pcr_profile.plt</code> (mit <code>pcr_profile.asc</code>)	GNU PLOT-Datei zur Darstellungen der Konturen des PKBs in der zr -Ebene.
<code>t.plt</code> (mit <code>t.asc</code>)	GNU PLOT-Datei für Graphiken zur zeitlichen Entwicklung der CSD (siehe z.B. Abbildungen in Abschnitt 4.3.1 ab Seite 133).
<code>zr.plt</code>	GNU PLOT-Datei für die zr -Plots der räumlichen Dichteverteilungen (siehe z.B. Abbildung 4.22 auf Seite 144).
Unterverzeichnis <code>doc\axis_ts\</code>	
<code>nnnn.asc</code>	Daten für <code>doc\axis_ts.plt</code> .
Unterverzeichnis <code>doc\flow\</code>	
<code>gnnzmm.wrl</code>	VRML-Graphik mit den Nettoteilchenströmen der Ionenspezies der Gassorte $nn + 1$ und Ladung mm .
Unterverzeichnis <code>doc\npmcsim\</code>	

Fortsetzung Ausgabedateien	
(Kursiv gedruckte Buchstaben in den Dateinamen stehen für variable, ganzzahlige Werte.)	
Dateiname	Beschreibung
<code>plot.plt</code>	GNUPLOT-Datei zur Darstellung der Ergebnisse der NT-Simulationen (siehe Abschnitt 4.2).
<code>*.asc</code>	Die Daten, die von <code>plot.plt</code> dargestellt werden.
<code>*.ps</code>	POSTSCRIPT-Dateien mit xy-Plots der verschiedenen NT-Dichteprofile (siehe Abschnitt 4.2).
Unterverzeichnis <code>doc\transp\</code> ⁸	
<code>trlog.html</code>	HTML-Übersichtsdatei mit einer Tabelle über welche die folgenden Dateien schnell erreicht werden können.
Unterverzeichnis <code>doc\transp\opcr\</code>	
<code>*.*</code>	Verschiedene Dateien zur Kontrolle der Berechnungen zu den Dichten außerhalb des PKBs.
Unterverzeichnis <code>doc\transp\pcr\</code>	
<code>tau_omega_ir.plt</code>	GNUPLOT-Datei zur Darstellung der Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ und der Verteilungen $\Omega_{s,c,k}$ (siehe Abschnitt 3.6.1).
<code>*.asc</code>	Verschiedene Dateien mit den von <code>tau_omega_ir.plt</code> darzustellenden Daten.
Unterverzeichnisse <code>doc\transp\splicenn\</code>	
<code>fline_cellcc.wrl</code>	VRML-Datei mit der Feldlinie durch das Zentrum der Zelle cc
<code>Bs_cellcc.plt</code>	GNUPLOT-Datei für den Verlauf der Magnetfeldstärke entlang der Feldlinie durch das Zentrum der Zelle cc
<code>fp_cellcc.plt</code>	GNUPLOT-Datei für die berechnete Geschwindigkeitsverteilung $f_{ii}(v_{ii})$ der einfach geladenen Ionen der ersten Gassorte parallel zum Magnetfeld in der Zelle cc .
Unterverzeichnis <code>doc\wall_impct\</code>	
<code>gnnzmm.ps</code>	POSTSCRIPT-Graphik mit der Wandauftreffverteilung der Ionenspezies der Gassorte nn und Ladung mm .
Unterverzeichnis <code>doc\xy\</code>	
<code>n_gnnzmm_col.eps</code>	POSTSCRIPT-Graphik mit xy-Plot (siehe Abschnitt D.2.3) der Ionenspezies der Gassorte nn und Ladung mm .
<code>ne_hot_col.ps</code> , <code>ne_cold_col.ps</code> und <code>np_col.ps</code>	POSTSCRIPT-Graphik mit xy-Plot (siehe Abschnitt D.2.3) der heißen bzw. kalten Elektronen und der positiven Ladungen n_+ .

Tabelle D.2: Ausgabedateien der Simulation.

⁸Die Dateien und Verzeichnisse im Unterverzeichnis `doc\transp\` werden nur erzeugt, wenn der Simulationsparameter `transp.log.calculations` auf 1 gesetzt wurde.

D.2.2 Graphikausgabeformate

Ein großer Teil der produzierten Daten wird von CSD.EXE automatisch graphisch dargestellt. Abhängig von der Darstellungsform wurde auf verschiedene Graphikformate und Programme zurückgegriffen.

GNUPLOT

Die Mehrheit der in dieser Arbeit gezeigten Plots (siehe Tabelle D.2 auf der vorherigen Seite) stammt aus GNUPLOT-Kommandodateien, die von CSD.EXE standardmäßig erzeugt und dann manuell angepaßt wurden. GNUPLOT ist ein für viele Betriebssysteme frei erhältliches Programm, mit dem sich wissenschaftliche Daten relativ einfach in üblicher Weise (2D- und 3D-Plots, Balkendiagramme und vieles mehr) darstellen lassen. Es arbeitet kommandozeilenorientiert und kann seine Befehle auch aus ASCII-Dateien einlesen. Das Programm findet man im Internet unter www.gnuplot.org.

POSTSCRIPT

POSTSCRIPT ist eine von der Firma ADOBE entwickelte, sogenannte Seitenbeschreibungssprache, mit der sich praktisch beliebig komplexe Graphiken erzeugen lassen [Kol89]. CSD.EXE generiert die hier sogenannten xy-Plots (siehe Anhang D.2.3) mit den Dichteprofilen und die Wandauftreffverteilungen in Form von POSTSCRIPT-Dateien. Zu deren Anzeige benötigt man ein Interpreterprogramm wie zum Beispiel das ebenfalls frei verfügbare GHOSTVIEW, das man unter www.gnu.org/software/ghostview/ghostview.html findet.

Virtual Reality Modelling Language, VRML

Mit Hilfe der VRML lassen sich 3-dimensionale Welten beschreiben, durch die man sich dann mit sogenannten VRML-Browsern ähnlich wie bei Flugsimulatoren interaktiv bewegen kann [Has97]. Ausgiebige Informationen zu VRML findet man im Internet unter www.web3d.org/vrml/vrml.htm. Die von CSD.EXE erzeugten VRML-Dateien sind mit dem im Internet unter www.cai.com/cosmo/home.htm frei erhältlichen COSMO-PLAYER getestet worden⁹.

In dieser Arbeit wird VRML vor allem zur Darstellung der Feldlinien in der Plasmakammer, aber auch von Nettoionenströmen genutzt.

⁹Leider sind die Weiterentwicklung und der Support des COSMO-PLAYERS eingestellt worden.

D.2.3 Darstellung der räumlichen Verteilungen: zr- und xy-Plots

Zur Darstellung der 3-dimensionalen räumlichen Dichteverteilungen $n(i_z, i_r, i_\phi)$ mit den Zellindizes (i_z, i_r, i_ϕ) (siehe Abschnitt 3.2.2) werden vom Simulationsprogramm zwei unterschiedliche Graphiken erzeugt.

zr-Plots

In den hier sogenannten **zr-Plots** wie z.B. Abbildung 4.22 auf Seite 144 werden die Werte mit gleichen i_z - und i_r -Indizes durch Mittelung über den Azimutalwinkel ϕ gemäß

$$n_{zr}(i_z, i_r) := N_\phi(i_r)^{-1} \cdot \sum_{i_\phi=0}^{N_\phi(i_r)-1} n(i_z, i_r, i_\phi) \quad (\text{D.11})$$

zusammengefaßt, und dann quasi 3-dimensional in Abhängigkeit von z und r geplottet, wobei $N_\phi(i_r)$ die Zahl der Unterteilungen der Ringe mit radialem Koordinatenindex $i_r \in \{0, 1, \dots, N_r - 1\}$ in azimuthaler Richtung ist.

xy-Plots

Zur Visualisierung der durch diese Mittelwertbildung verlorengegangenen Abhängigkeit vom Azimutalwinkel dienen die hier sogenannten **xy-Plots** (siehe z.B. Abbildung 4.23 auf Seite 145). Zu ihrer Erzeugung wird die Plasmakammer entlang der z -Achse in acht gleich dicke Zylinder(-scheiben) der Länge $L/8$ unterteilt, deren Schnittflächen parallel zur xy -Ebene (siehe Abbildung 3.1 auf Seite 38) liegen. Von jeder Scheibe $j = 1 \dots 8$ werden die Daten gemäß

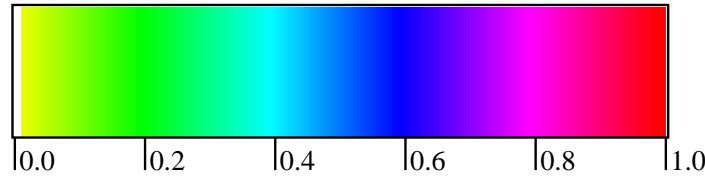
$$n_{xy}^{(j)}(i_r, i_\phi) := \frac{L}{8} \sum_{i_z} n(i_z, i_r, i_\phi) \cdot l(j, i_z) \quad (\text{D.12})$$

entlang der z -Achse gemittelt. Dabei ist $l(j, i_z)$ die Länge der Zellen mit axialem Koordinatenindex i_z , mit der diese die Scheibe j schneiden¹⁰. Für alle j gilt $\sum_{i_z} l(j, i_z) = L/8$.

Diese $n_{xy}^{(j)}(i_r, i_\phi)$ werden dann für jede Scheibe j in einem Konturplot dargestellt, indem den einzelnen Dichtewerten eine Farbe (bzw. ein Farbwert g) zugeordnet wird, mit der die zu den Koordinatenindizes (i_r, i_ϕ) gehörige Querschnittsfläche gefüllt wird. Um die 8 Plots untereinander vergleichen zu können, werden diese mit derselben Farbwertfunktion

$$g(x) = \begin{cases} 0, & \text{falls } 0 \leq x < \epsilon \\ g_{min} + \frac{1-g_{min}}{1-\epsilon} \cdot x, & \text{falls } \epsilon \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (\text{D.13})$$

¹⁰Im allgemeinen ist $l(j, i_z)$ gleich der vollen axialen Länge $\Delta z = L/N_z$ der Zellen (siehe Abschnitt 3.2.2) oder Null, falls die Zellen mit axialem Koordinatenindex i_z nicht zur Scheibe j gehören. Lediglich in dem Fall, daß die Zellen mit i_z genau über der Trennfläche zwischen zwei Scheiben j und $j+1$ liegen, kann $0 < l(j, i_z) < \Delta z$ gelten.

Abbildung D.5: Kodierung der Farbwertskala g .

mit

$$x(n) \equiv n / \max(n_{xy}^{(j)}(i_r, i_\phi)) \quad (\text{D.14})$$

$$\epsilon = 0,01 \quad (\text{D.15})$$

$$g_{min} = 0,17 \quad (\text{D.16})$$

erzeugt¹¹. Abbildung D.5 zeigt die mit g verbundene Farbskala¹².

Das xy-Koordinatensystem liegt wie üblich so in der Papierebene, daß die positive x-Richtung nach rechts und die positive y-Richtung nach oben verlaufen. Dies entspricht der Perspektive von der Extraktionsöffnung in Richtung Gaszufuhr.

Die xy-Plots der acht Scheiben sind dann wie folgt zusammengestellt: Links oben befindet sich die an der Gaseinlaßseite liegende Scheibe ($j = 1$). Dann folgen nach rechts die jeweiligen Nachbarscheiben bis $j = 4$. Die zweite Hälfte der Scheiben von der Plasmakammermitte bis zur Extraktion ($j = 5 \dots 8$) ist darunter allerdings von rechts nach links aufgereiht. Damit haben zwei übereinander angeordnete Scheiben denselben Abstand von der Plasmakammermitte, so daß Symmetrien bzgl. Spiegelung an der Kammermitte deutlicher werden.

D.2.4 Simulationsparameter

Alle Parameter, mit denen die Simulation gesteuert wird, werden aus der Datei `parameter.txt` des Arbeitsverzeichnisses eingelesen, für die folgende Regeln gelten:

- Parameternamen und zugehörige Werte werden, durch beliebig viele Leerzeichen oder Tabulatoren getrennt, zeilenweise in der folgenden Form angegeben:
Parametername Wert1 [Wert2 Wert3 ...]
- Kommentare werden mittels Rautezeichen (#) eingeleitet und enden mit der Zeile.

¹¹Die Farbwertfunktion $g(x(n))$ ist innerhalb der vom Simulationsprogramm generierten POSTSCRIPT-Datei definiert (Prozedur `val2hue`) und kann dort bei Bedarf angepaßt werden. Hierbei handelt es sich praktisch um eine lineare Skalierung der Dichtewerte von 0 bis n_{max} auf das Intervall $[0, 1]$, wobei aber allen Dichten unter der Schwelle $\epsilon \cdot n_{max}$ der Wert 0 zugewiesen wird, um "Rauschwerte" auszublenden.

¹²In den POSTSCRIPT-Graphiken wird zur Farbfestlegung das HSB-Modell (H=hue/Farbton, S=saturation/Sättigung, B=brightness/Helligkeit) verwendet [Ado99]. Der Farbwert g bestimmt dabei H, während S für $g=0$ auf 0 ansonsten auf 1 und B konstant auf 1 gesetzt werden.

```

# parameter.txt - Parameterdatei fuer CSD.EXE

csd.t_step          1e-6  # Max. Zeitschrittweite [s]
csd.t_max           0.035 # Max. Simulationsdauer [s]

FieldsDir           e:\sim\felder # absoluter Pfad
BfieldFile          ecris3\b.tab  # relative
#
# Somit wird versucht, die Datei 'e:\sim\felder\ecris3\b.tab'
# fuer das B-Feld zu lesen.

# Und hier kommen natuerlich eigentlich noch mehr Parameter:
# ....

```

Abbildung D.6: Beispiel für die Datei `parameter.txt`.

- Werte für physikalische Größen müssen, sofern nicht anders dokumentiert, in SI-Einheiten angegeben werden.
- Dateinamen und -pfade dürfen keine Leerzeichen enthalten.
- Mögliche Werte für BOOLEsche Parameter sind 0 (= nein, false) und 1 (= ja, true).

Abbildung D.6 zeigt ein Beispiel für einige gültige Zeilen. Im folgenden werden die Simulationsparameter mit kurzen Beschreibungen aufgelistet. Werden dabei Voreinstellungen für einen Parameter angegeben, so kann dieser in der Datei entfallen. Alle anderen Parameter sind obligatorisch.

Simulationstechnische Parameter:

`csd.startDistribFile` : Name der Datei (relativ zum Arbeitsverzeichnis), aus der die CSD gelesen werden soll, mit der die Berechnung *fortgesetzt* wird. Ist dieser Parameter nicht definiert oder die angegebene Datei nicht vorhanden, so wird eine neue CSD initialisiert und mit dieser begonnen. Voreinstellung ist die Datei `csd.asc`.

`csd.use_stored_TranspData` : BOOLEscher Parameter, der festlegt, ob die Transportkoeffizienten aus der Datei `transp.asc` im Arbeitsverzeichnis gelesen werden soll. Ist dieser Parameter auf 0 gesetzt, werden diese neu berechnet und in `transp.asc` im Arbeitsverzeichnis abgespeichert. Voreinstellung ist 1.

`csd.regard_quasiNeutrality` : Ist dieser BOOLEsche Parameter auf 1 gesetzt, so dürfen (wie in Abschnitt 3.6.2 beschrieben) nur dann Ionen aus den Zellen abfließen, wenn in diesen die Gesamtelektronendichte größer als die Dichte n_+ der positiven Ladungen ist. Ist er auf 0 gesetzt, so wird die Quasineutralität nicht beachtet und ggf. verletzt. Voreinstellung ist 1.

`csd.t_step` : Integrationszeitschrittweite [s]. Wird hierfür kein Wert angegeben, so wird dieser Parameter auf ein Zehntel der für alle Zellen und Ionenspezies minimalen Einschlußzeit gesetzt.

`csd.t_record` : Maximale Zeit [s] zwischen zwei Punkten in den Plots der Zeitverläufe. Voreinstellung ist 0,5 ms.

`csd.log_axis_ts` : BOOLEscher Parameter, der festlegt, ob die zeitliche Entwicklung von $n_{e,hot}$ und n_+ entlang der z-Achse für den Plot in der Datei `axis_ts.plt`

protokolliert werden sollen. Voreinstellung ist 0, wodurch die Zahl der erzeugten Dateien stark reduziert wird.

`csd.t_max` : Maximal zu simulierende Zeit [s]. Wird diese Zeit erreicht, bricht die Simulation regulär ab. Wird dieser Parameter nicht bzw. auf 0 gesetzt, läuft die Simulation, bis das Konvergenzkriterium (siehe nächster Parameter) erreicht ist.

`csd.maxRelChange_per_ms` : Konvergenzkriterium, das angibt, wie klein die unter allen Teilchendichten maximale Änderung relativ zum entsprechenden Wert aus dem vorhergehenden Zeitschritt pro simulierter Millisekunde sein muß, damit die Simulation regulär abgebrochen wird. Voreinstellung ist 0.01 (= 1 %/ms).

`csd.PCR_threshold` : In der aktuellen Version von CSD.EXE wird der Plasmakernbereich (*plasma core region*, PCR) anhand des Dichteprofiles der heißen Elektronen bestimmt: Zum Plasmakernbereich gehören alle Zellen, in denen die heiße Elektronendichte größer als das s -fache des über die gesamte Plasmakammer gemittelten Wertes $\bar{n}_{e,hot}$ ist. Dazu wird der Parameter s mit `csd.PCR_threshold` festgelegt. Voreinstellung ist 1.

Experimentelle Parameter:

`cavity.radius` und `cavity.length` : Radius und Länge der Plasmakammer [m].

`gasInletAperture_radius` : Radius der Gaseinlaßöffnung gegenüber der Extraktionsöffnung [m].

`extraction_radius` : Radius der Extraktionsöffnung [m].

`f_rf` : Frequenz der eingestrahlten Mikrowelle [Hz].

Parameter der heißen Elektronen:

`csd_init.ElectronDensityDistribFile` : Name der Datei (relativ zum Verzeichnis `FieldsDir`), aus der bei Initialisierung einer neuen CSD das Dichteprofil der heißen Elektronen eingelesen wird.

`csd_init.n_eHot_mean` : Über die ganze Plasmakammer gemittelte Dichte der heißen Elektronen bei Initialisierung einer neuen CSD [m^{-3}].

`ElectronEnergyDistribFile` : Name der Datei, aus der die EEDF der heißen Elektronen eingelesen wird. Wird kein absoluter Pfad angegeben, so wird der endgültige Dateiname zusammen mit `FieldsDir` gebildet.

`csd.n_eHot_mean_max` : Maximalwert $\bar{n}_{e,hot}^{max}$ für die über die ganze Plasmakammer gemittelte Dichte der heißen Elektronen. Wird dieser Wert gesetzt, so wird zusätzlich zu der durch `csd.n_eHot_evolution_method` bestimmten Kontrolle vom Programm dafür gesorgt, daß die mittlere Dichte der heißen Elektronen den angegebenen Wert nicht übersteigt (siehe (3.17) auf Seite 51).

`csd.tau_eHot` : Siehe `csd.n_eHot_evolution_method` mit `tau_particle`.

Gasparameter:

`csd_init.GasesCnt` : Anzahl der verschiedenen zu simulierenden Gassorten. In der aktuellen Version muß hierfür 1 angegeben werden, da CSD.EXE noch nicht

durchgehend für mehrere Gase ausgelegt ist. Aus diesem Grund können von den folgenden zwei Parametergruppen auch nur diejenigen mit $n = 1$ verwendet werden.

`csd_init.GasType_n` : Atomzahl Z des Gases der n -ten Sorte. Die Zählung beginnt bei 1.

`csd.GasFlow_n` : Einlaßrate I_{inlet} der Gassorte n [Teilchen/s].

Transportparameter:

`BfieldFile` : Name der Datei, aus der das B-Feld eingelesen wird. Wird kein absoluter Pfad angegeben, so wird der endgültige Dateiname zusammen mit `FieldsDir` gebildet.

`transp.neutrals_temp_K` : Temperatur der Neutralteilchen [°K].

`transp.ions_temp_eV` : Temperatur der Ionen [eV].

`transp.kappa_tauQN` : Der Parameter κ aus (3.105). Voreinstellung ist 1.

`transp.log_calculations` : Wenn dieser BOOLEsche Parameter auf 1 gesetzt ist, werden bei der Berechnung der Transportkoeffizienten die Protokolldateien in den Unterverzeichnissen `doc\transp\` und `doc\transp\splice_nn` (siehe Tabelle D.2 auf Seite 241) erzeugt. Voreinstellung ist 0. Vorsicht: Die Protokollierung führt zu sehr vielen Einzeldateien (drei pro Zelle mit quasi-stoßfreiem Transport), die die Berechnungen, aber auch das Dateisystem sehr stark ausbremsen können!

`transp.adopt_data` : Mit diesem Parameter wird die Aktualisierung der Transportkoeffizienten während der Simulation gesteuert. Der angegebene Wert definiert, wie stark sich für jede Zelle $n_{++} := \sum_s n_s \cdot z_s$ relativ zum genauso berechneten Wert n'_{++} bei der letzten Aktualisierung ändern muß, damit die Transportkoeffizienten der Zelle neu berechnet werden¹³. Bei einem Wert von `transp.adopt_data` von z.B. 0,5 werden Neuberechnungen vorgenommen, wenn $|n_{++} - n'_{++}|/n'_{++} > 0,5$. Voreinstellung ist 0, womit (entgegengesetzt zum obigen Kriterium) *keine* Aktualisierungen durchgeführt werden.

Parameter zur Steuerung der Monte-Carlo-Simulationen für die Einschlußzeiten $\tau_{s,c}$ und Verteilungen $\Omega_{s,c,k}$:

`transp.collmc_npp_min` und `transp.collmc_npp_max` : definieren den Wertebereich, in dem $n_{++} \equiv \sum_s n_s \cdot z_s$ variiert werden soll.

`transp.collmc_npp_samplesCnt` : Anzahl der Stützstellen für n_{++} , für welche (je Ladungszustand) Transportdaten berechnet werden.

`transp.collmc_Nmax` : Maximale Anzahl der pro Ladungszustand und Elektronendichte zu simulierenden Teilchen.

`transp.collmc_log` : BOOLEscher Parameter, mit dem festgelegt wird, ob die Ergebnisdaten protokolliert werden sollen. Voreinstellung ist 0 (false).

¹³Die Größe n_{++} ist das empfindlichste Maß für die Stoßrate der Ionen (vergleiche (2.35)), die den stoßdominierten Transport bestimmt.

Parameter zur Steuerung der Neutralteilchensimulation:

- `np_mc_sim.Nsim` : Anzahl der NT, die je Profil und angesetzter Elektronendichte $\bar{n}_{e,hot}$ simuliert werden sollen.
- `np_mc_sim.n_eHot_max` : Obere Grenze des Bereichs für $\bar{n}_{e,hot}$, in dem je Profil NT-Simulationen durchgeführt werden sollen. Die untere Grenze ist immer 0.
- `np_mc_sim.n_eHot_samplesCnt` : Anzahl der äquidistanten Werte von $\bar{n}_{e,hot}$, für die je Profil NT-Simulationen durchgeführt werden sollen.
- `np_mc_sim.log_results` : BOOLEscher Parameter, mit dem festgelegt wird, ob die Ergebnisdaten protokolliert werden sollen. Voreinstellung ist 0 (false).

Sonstige Parameter:

- `FieldsDir` : Basisverzeichnis für verschiedene Input-Dateien (siehe unten). Es muß ein absoluter Pfad angegeben werden.
- `csd.CX_scale` : Skalierungsfaktor für die Ratenkoeffizienten des Ladungsaustausches. Voreinstellung ist 1.
- `csd.kmax_cx` : Maximale Projektilladungsänderung für den Ladungsaustausch (siehe Anmerkung nach (3.70) auf Seite 83). Voreinstellung ist 4.
- `csd.kmax_eii` : Maximale Projektilladungsänderung für die Elektronenstoßionisation. Voreinstellung ist 2.

Anhang E

Abkürzungsverzeichnis

CSD	Ladungszustandsverteilung (<i>charge state distribution</i>)
CX	Ladungsaustausch (<i>charge exchange</i>)
<i>k</i> -CX	<i>k</i> -facher Ladungsaustausch
DR	D ielektrische R ekombination
ECR, EZR	E lektron- Z yklotron- R esonanz (<i>electron cyclotron resonance</i>)
ECRH, EZRH	EZR-Heizung (<i>ecr heating</i>)
ECRIS	EZR-Ionenquelle (<i>ecr ion source</i>)
ee-, ei-, ii-Stöße	E lektron- E lektron-, E lektron- I on-, I on- I on-Stöße,
EEDF	Elektronenenergieverteilung (<i>electron energy distribution function</i>)
EII	Elektronenstoßionisation (<i>electron impact ionization</i>)
<i>k</i> -EII	<i>k</i> -fache Elektronenstoßionisation
M-EII, S-EII	Mehr- (bzw. Ein-)fache Elektronenstoßionisation (<i>multiple/single electron impact ionization</i>)
MFWL	M ittlere freie W eglänge
NT	N eutralteilchen
PI	P hotoionisation
PKB	P lasmakernbereich
PUMA, PUMAEX	G epulste M agnetische E xtraktion
QN	Q uasineutralität
RR	Strahlende Rekombination (<i>radiative recombination</i>)
SEE	S ekundärelektronenemission
TBR	Drei-Körper-Stoß-Rekombination (<i>three body recombination</i>)
VRML	<i>Virtual Reality Modeling Language</i>

Viele der Abkürzungen wurden wegen ihrer gängigen Verwendung in der Literatur in der englischen Form übernommen.

Literaturverzeichnis

- [ACRS94] R. ALI, C.L. COCKE, M.L.A. RAPHAELIAN, and M. STOCKLI: *Multielectron processes in 10-keV/u Ar^{q+} (5 ≤ q ≤ 17) on Ar collisions*. Phys. Rev. A, 49(5):3586–3596, 1994.
- [Ado99] ADOBE SYSTEMS INC.: *PostScript Language Reference*. Addison-Wesley, 3 edition, 1999. Frei erhältlich unter <http://www.adobe.com/products/postscript/resources.html>.
- [Alb02] BORIS ALBERS: *Konstruktion der Plateau-ECRIS V und erste Untersuchungen ihrer Röntgenstrahlung*. Diplomarbeit in Vorbereitung, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 2002.
- [AS94] G.D. ALTON and D.N. SMITHE: *Design studies for an advanced ECR ion source*. Rev. Sci. Instr., 65(4):775–787, 4 1994.
- [BAC⁺85] A. BÁRÁNY, G. ASTNER, H. CEDERQUIST, H. DANARED, S. HULDT, P. HVELPLUND, A. JOHNSON, H. KNUDSEN, L. LILJEBY, and K.-G. RENSFELT: *Absolute cross sections for multi-electron processes in low energy Ar^{q+}-Ar collisions: comparison with theory*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 9:397–399, 1985.
- [Bat97] YURI K. BATYGIN: *Spatial distribution of collisionless ions confined in an electron cyclotron resonance ion source*. J. Appl. Phys., 83(2):684–690, 1 1997.
- [BBB⁺99] C. BRANDAU, T. BARTSCH, C. BÖHME, F. BOSCH, G. DUNN, B. FRANZKE, A. HOFFKNECHT, C. KNOCKE, H. KNOPP, C. KOZHUHAROV, A. KRÄMER, P.H. MOKLER, A. MÜLLER, F. NOLDEN, S. SCHIPPERS, Z. STACHURA, M. STECK, T. STÖHLKER, T. WINKLER, and A. WOLF: *Recombination Measurements of the Heaviest Ions*. Physica Scripta, T80:318–320, 1999.
- [BBG⁺92] C. BARUÉ, P. BRIAND, A. GIRARD, G. MELIN, and G. BRIFFOD: *Hot electron studies in the MinimaFios ECR ion source*. Rev. Sci. Instr., 63(4):2844–2846, 4 1992.
- [BCT81] S. BLIMAN and N. CHAN-TUNG: *Ionization equilibrium model for the multiply charged ion formation*. J. Physique, 42:1247–1252, 9 1981.
- [BDS⁺97] C. BÉLENGER, P. DEFRANCE, E. SALZBORN, V.P. SHEVELKO, H. TAWARA, and D.B. USKOV: *Double ionization of neutral atoms, positive*

- and negative ions by electron impact.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 30:2667–2679, 1997.
- [BL91] C.K. BIRDSALL and A.B. LANGDON: *Plasma Physics via Computer Simulations.* Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1991.
- [BR92] M. BARAT and P. RONCIN: *Multiple electron capture by highly charged ions at keV energies.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 25:2205–2243, 1992.
- [BRY00] V. A. BERNSHAM, YU. V. RALCHENKO, and MARON Y.: *Empirical formula for cross section of direct electron-impact ionization of ions.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 33:5025–5032, 2000.
- [BS92] *Bergmann Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 5, Vielteilchen-Systeme.* Walter de Gruyter, 1992.
- [BS96] I.N. BRONSTEIN und K.A. SEMENDJAJEW: *Teubner-Taschenbuch der Mathematik.* Teubner, 1996.
- [BSGM00] I.N. BRONSTEIN, K.A. SEMENDJAJEW, MUSIOL G. und H. MÜHLIG: *Taschenbuch der Mathematik.* Harri Deutsch, 5 Auflage, 2000.
- [BVSSB95] S. BIRI, J. VÁMOSI, K.E. STIEBING, and H. SCHMIDT-BÖCKING: *Simulation of HCI movement in magnetic traps of ECR ion sources.* Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 98:553–557, 1995.
- [CC97] F.B.M. COPELAND and D.S.F. CROTHERS: *Cross sections for resonant charge transfer between atoms and their positive ions.* Atom. Data and Nucl. Data Tables, 65(2):273–288, 3 1997.
- [Che74] FRANCIS F. CHEN: *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion.* Plenum Press, New York and London, 1974.
- [Cra81] D.H. CRANDALL: *Electron Impact Ionization of Multicharged Ions.* Physica Scripta, 23(2):153–162, 2 1981.
- [DBM00] H. DEUTSCH, K. BECKER, and T.D. MÄRK: *Calculated cross sections for the multiple ionization of nitrogen and argon atoms by electron impact.* Plasma Phys. Control. Fusion, 42:489–499, 2000.
- [Dem94] WOLFGANG DEMTRÖDER: *Experimentalphysik 1, Mechanik und Wärme.* Springer, 1994.
- [DJUK96] V. D. DOUGAR-JABON, A. M. UMNOV, and V. B. KUTNER: *Calculating method for confinement time and charge distribution of ions in electron cyclotron resonance sources.* Rev. Sci. Instr., 67(3):1152–1154, 3 1996.
- [DJUSD02] V. D. DOUGAR-JABON, A. M. UMNOV, and D. SUESCUN DIAZ: *Three-dimensional simulation of an ECR plasma in a minimum-B trap.* Rev. Sci. Instr., 73(2):629–631, 2 2002.
- [DKGB00] G. DOUYSSET, H. KHODJA, A. GIRARD, and J. P. BRIAND: *Highly charged ion densities and ion confinement properties in an electron-cyclotron-resonance ion source.* Phys. Rev. E, 61(3):3015–3022, 3 2000.

- [DKP89] QI DONG, Y. KUANG, and R. H. PRATT: *Photoionization of Atoms and Ions*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A, A280:189–194, 8 1989.
- [Duc99] JENS J. DUCRÉE: *Dynamik hyperthermischer hochgeladener Ionen an Oberflächen*. Dissertation, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1999.
- [Ede98] CHRISTIAN EDELMANN: *Vakuumphysik*. Spektrum, Akad. Verlag, 1998.
- [Fro79] ARNOLD FROHN: *Einführung in die kinetische Gastheorie*. Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 1979.
- [Fü81] L. FÜSTÖSS: *Monte Carlo calculations for free molecular and near-free molecular flow through axially symmetric tubes*. Vacuum, 3(6):243–246, 1981.
- [Gel96] R. GELLER: *Electron Cyclotron Resonance Ion Sources and ECR Plasmas*. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1996.
- [GG95] V. P. GOPINATH and T. A. GROTJOHN: *Three-Dimensional Electromagnetic PIC Model of a Compact ECR Plasma Source*. IEEE Trans. Plasma Sci., 23(4):602–608, 1995.
- [GR98] ROBERT J. GOLDSTON und PAUL H. RUTHERFORD: *Plasmaphysik - Eine Einführung*. Vieweg, 1998.
- [Gro92] T.A. GROTJOHN: *Numerical modeling of a compact ECR ion source*. Rev. Sci. Instr., 63(4):2535–2537, 4 1992.
- [Gro96] T.A. GROTJOHN: *Modeling the electron heating in a compact electron cyclotron resonance ion source*. Rev. Sci. Instr., 67(3):921–923, 3 1996.
- [GSZ+97] H. GAO, R. SCHUCH, W. ZONG, E. JUSTINIANO, D.R. DEWITT, LEBIUS H., and W. SPIES: *Energy and charge dependence of the rate of electron-ion recombination in cold magnetized plasmas*. J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys., 30:L499–L506, 1997.
- [HAB+85] P. HVELPLUND, L.H. ANDERSEN, A. BÁRÁNY, H. CEDERQUIST, J. HEINEMEIER, H. KNUDSEN, K.B. MACADAM, E.H. NIELSEN, and J. SØRENSEN: *Energy-gain spectroscopy studies of state-selective electron capture for multiply charged Ar recoil ions: comparison with the extended classical barrier model*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, B9:421–425, 1985.
- [Hah93] YUKAP HAHN: *Improved rate formulas for dielectronic recombination*. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 49(1):81–93, 1993.
- [Hah97] YUKAP HAHN: *Electron-ion recombination processes - an overview*. Rep. Prog. Phys., 60:691–759, 1997.
- [Hah00] YUKAP HAHN: *Improved rates for three-body recombination at low temperature*. Phys. Lett. S, 264:465–471, 2000.
- [Has97] HANS-LOTHAR HASE: *Dynamische virtuelle Welten mit VRML 2.0*. dpunkt-Verlag, Heidelberg, 1997.

- [Hei] ANSELM HEINEN. Private Kommunikation.
- [Hei97] ANSELM HEINEN: *Effiziente Simulation von Nichtgleichgewichts-Plasmen und deren Anwendung auf EZR-Ionenquellen*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 11 1997.
- [Hei02] ANSELM HEINEN: *Untersuchung des Verhaltens von resonant beschleunigten Elektronen in stationären Elektron-Zyklotron-Resonanz-Plasmen*. Dissertation, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 2002.
- [HG94] M. HENZLER und W. GÖPEL: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. Teubner, Stuttgart, 2 Auflage, 1994.
- [HRD⁺98] A. HEINEN, M. RÜTHER, J. DUCRÉE, J. LEUKER, M. MROGENDA, H.W. ORTJOHANN, E. RECKELS, CH. VITT, and H.J. ANDRÄ: *Successful modeling, design and test of ECR ion sources*. Rev. Sci. Instr., 69(2), 2 1998.
- [HRO⁺99] A. HEINEN, M. RÜTHER, H.W. ORTJOHANN, CH. VITT, S. RHODE, and H.J. ANDRÄ: *Heating and trapping of electrons in ecris, from scratch to afterglow*. In *Proceedings of the 14th international Workshop on ECR Sources, ECRIS99 CERN, Geneva, Switzerland, 3-6 May 1999*, 1999. <http://cern.web.cern.ch/CERN/Divisions/PS/ECRIS99/Proceedings/pdfecris/Heinen.pdf>.
- [Hub80] B.A. HUBER: *Charge transfer of Ar²⁺ in He, Ne and Ar*. J. Phys. B, 13:809–818, 1980.
- [HUS⁺99] A. HOFFKNECHT, O. UWIRA, S. SCHENNACH, A. FRANK, J. HASELBAUER, W. SPIES, N. ANGERT, P.H. MOKLER, R. BECKER, M. KLEINOD, S. SCHIPPERS, and A. MÜLLER: *Influence of Magnetic Fields on Recombination Rates of Au²⁵⁺*. Physica Scripta, T80:316–317, 1999.
- [HVA99] A. HEINEN, CH. VITT, and H.J. ANDRÄ: *Density and energy density distributions of electrons in compact ECRIS*. Physica Scripta, T80, 1999.
- [Jan92] GERD JANZEN: *Plasmatechnik*. Hüthig Buchverlag GmbH, Heidelberg, 1992.
- [Kam88] E.Y. KAMBER: *State-selective single- and double-electron capture by Ar⁴⁺ and Ar⁵⁺ ions from rare-gas atoms*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 21:4185–4203, 1988.
- [Keg98] WILHELM H. KEGEL: *Plasmaphysik: Eine Einführung*. Springer, 1998.
- [KMI93] YUSHI KATO, KAZUNORI MATSUMOTO, and SHIGEYUKI ISHII: *Modelling for Production of Multicharged Ions in ECR Source*. J. Phys. Soc. Japan, 62(4):1221–1232, 4 1993.
- [KMS75] H. KLINGER, A. MÜLLER, and E. SALZBORN: *Electron capture processes of multiply charged argon ions in argon at energies from 10 to 90 keV*. J. Phys. B, 8(2):230–238, 1975.
- [Kne90] F.K. KNEUBÜHL: *Repetitorium der Physik*. Teubner, Stuttgart, 1990.

- [KNH⁺02] M. KIDERA, T. NAKAGAWA, Y. HIGURASHI, M. KASE, and Y. YANO: *Effect of plasma chamber surface for production of highly charged ions from ECRIS*. Rev. Sci. Instr., 73(2):611–613, 2 2002.
- [Kol89] NICOLAI G. KOLLOCK: *PostScript richtig eingesetzt*. IWT-Verlag GmbH, Vaterstetten bei München, 1989.
- [KSO⁺95] SCOTT KRAVIS, HIROKI SAITOH, KAZUHIKO OKUNO, KOUICHI SOEJIMA, MINEO KIMURA, ISAO SHIMAMURA, YOHKO AWAYA, YOZABURO KANEKO, MASAKI OURA, and NORIYUKI SHIMAKURA: *Single- and double-charge-exchange cross sections for $Ar^{q+} + H_2$ ($q = 6, 7, 8, 9,$ and 11) collisions from 6 eV to 11 keV*. Phys. Rev. A, 52(2):1206–1212, 8 1995.
- [Leo95] GÖTZ LEONHARDT: *Effektive elektronische Simulationen von Plasmen in EZR-Ionenquellen*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1995.
- [LJMS99] M. LAMPE, G. JOYCE, W. M. MANNHEIMER, and S. P. SLINKER: *Quasi-Neutral Particle Simulation of Magnetized Plasma Discharges: General Formalism and Application to ECR Discharges*. IEEE Trans. Plasma Sci., 26(6):1592–1609, 12 1999.
- [Lot67] WOLFGANG LOTZ: *An Empirical Formula for the Electron-Impact Ionization Cross-Section*. Z. Physik, 206:205–211, 1967.
- [Lot68a] WOLFGANG LOTZ: *Electron-Impact Ionization Cross-Sections and Ionization Rate Coefficients for Atoms and Ions from Hydrogen to Calcium*. Z. Physik, 216:241–247, 1968.
- [Lot68b] WOLFGANG LOTZ: *Subshell Binding Energies of Atoms and Ions from Hydrogen to Zinc*. J. Opt. Soc. Am., 58(7):915–921, 1968.
- [Lot69] WOLFGANG LOTZ: *Electron-Impact Ionization Cross-Sections and Ionization Rate Coefficients for Atoms and Ions from Scandium to Zinc*. Z. Physik, 220:466–472, 1969.
- [Lot70] WOLFGANG LOTZ: *Electron-Impact Ionization Cross-Sections for Atoms up to $Z=108$* . Z. Physik, 232:101–107, 1970.
- [MBB⁺90] G. MELIN, F. BOURG, J. BRIAND, J. DEBERNARDI, M. DELAUNY, R. GELLER, B. JACQUOT, P. LUDWIG, T.K. N’GUYEN, L. PIN, M. PONTONNIER, J.C. ROCCO, and F. ZADWORNÝ: *Some particular aspects of the physic of the ECR sources for multicharged ions*. Rev. Sci. Instr., 61(1):236–238, 1 1990.
- [MDGH99] G. MELIN, A.G. DRENTJE, A. GIRARD, and D. HITZ: *Ion behavior and gas mixing in electron cyclotron resonance plasmas as sources of highly charged ions*. J. Appl. Phys., 86(9):4772–4779, 11 1999.
- [Mel99] G. MELIN: *Electron cyclotron resonance ion sources of highly charged ions: from classical to superconducting sources*. Int. J. Mass Spectr., 192:87–97, 9 1999.

- [MFB81] R. MANN, F. FOLKMANN, and H.F. BEYER: *Selective electron capture into highly stripped Ne and N target atoms after heavy-ion impact*. Phys. B: At. Mol. Phys, 14:1161–1181, 1981.
- [MG92] H. MEINKE und F.W. GUNDLACH: *Taschenbuch der Hochfrequenztechnik*. Springer, 5 Auflage, 1992.
- [MH90] DANIEL J. MCLAUGHLIN and YUKAP HAHN: *Scaling behavior of radiative recombination cross sections and rate coefficients*. Phys. Rev. A, 43(3):1313–1323, 2 1990.
- [MK92] THEO MAYER-KUCKUK: *Kernphysik - Eine Einführung*. Teubner, 1992.
- [Mro97] JENS MROGENDA: *Auger-Elektronenspektren hochgeladener Ionen an Oberflächen*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1997.
- [Mro01] JENS MROGENDA: *Bestimmung des Emissionsortes von Auger-Elektronen aus hyperthermalen hochgeladenen Ionen an Festkörperoberflächen*. Dissertationsschrift, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 2001.
- [MS77] A. MÜLLER and E. SALZBORN: *Scaling of cross sections for multiple electron transfer to highly charged ions colliding with atoms and molecules*. Physics Letters, 62A(6):391–394, 9 1977.
- [MSH⁺02] V. MIRONOV, K. E. STIEBING, O. HOHN, L. SCHMIDT, H. SCHMIDT-BÖCKING, S. RUNKEL, A. SCHEMPP, G. SHIRKOV, S. BIRI, and L. KENÉZ: *Influence of the biased electrode on the plasma potential in ECRIS*. Rev. Sci. Instr., 73(2):623–625, 2 2002.
- [Mü] L. MÜLLER. Private Kommunikation.
- [Mü00] L. MÜLLER: *Gepulste Extraktion von hochgeladenen Ionen aus einer Plateau-Elektron-Zyklotron-Resonanz-Ionenquelle*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 2000.
http://www.uni-muenster.de/Physik/KP/archive/andrae/diplomarbeit_mueller_2000.pdf.
- [Nie86] A. NIEHAUS: *A classical model for multiple-electron capture in slow collisions of highly charged ions with atoms*. Phys. B: At. Mol. Phys, 19:2925–2937, 1986.
- [NIF01] *Bibliographic and Numerical Atomic and Molecular Databases of the National Institute of Fusion Science, Japan*. <http://dbshino.nifs.ac.jp>, 2001.
- [NMW97] A. NADZEYKA, D. MEYER, and K. WIESEMANN: *Gasmixing and selective ion heating in an ECR ion source*. In *Proc. of the 13th Workshop on ECRIS 1997, Texas*, 1997.
- [OSS⁺97] K. OKUNO, H. SAITOH, K. SOEJIMA, S.D. KRAVIS, and N. KOBAYASHI: *Mini-EBIS Report on Electron Capture in Slow Collisions of Multiply Charged Ions with Neutral Targets*. Physica Scripta, T71:140–146, 1997.

- [OUZ99] V.P. OVSYANNIKOV, F. ULLMANN, and G. ZSCHORNAK: *Electron injection into an ECR ion source magnetic field configuration*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 155:498–505, 1999.
- [Pas74] V.P. PASTUKHOV: *Collisional losses of electrons from an adiabatic trap in a plasma with a positive potential*. Nucl. Fusion, 14:3–6, 1974.
- [PGKM99] C. PERRET, A. GIRARD, H. KHODJA, and G. MELIN: *Limitations to the plasma energy and density in electron cyclotron resonance ion sources*. Physics of Plasmas, 6(8):3408–3415, 8 1999.
- [PR99] T. PATTARD and J.M. ROST: *Cross Sections for (Multiple) Ionization of Ions in Collisions with Electrons*. Physica Scripta, T80:295–297, 1999.
- [PS95] V.G. PALCHIKOV and V.P. SHEVELKO: *Reference Data on Multicharged Ions*. Springer Series on Atoms and Plasmas. Springer, 1995.
- [PS99] M. PAJEK and R. SCHUCH: *Plasma effects in three-body recombination of high- z bare ions with electrons*. Physica Scripta, T80:307–309, 1999.
- [PTVF92] WILLIAM H. PRESS, SAUL A. TEUKOLSKY, WILLIAM T. VETTERLING, and BRIAN P. FLANNERY: *Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [PV90] S. PEŠIĆ and M. VUKOVIĆ: *Plasma modeling in an electron-cyclotron-resonance ion source*. Phys. Rev. A, 42(6):3571–3578, 9 1990.
- [RC80] T.D. ROGNLIEN and T.A. CUTLER: *Transition from Pastukhov to collisional confinement in a magnetic and electrostatic well*. Nucl. Fusion, 20(8):1003–1011, 1980.
- [Rei87] FREDERICK REIF: *Statistische Physik und Theorie der Wärme*. Walter de Gruyter, 3 Auflage, 1987.
- [RSW80] H. RYUFUKU, K. SASAKI, and T. WATANABE: *Oscillatory behavior of charge transfer cross sections as a function of the charge of projectiles in low energy collisions*. Phys. Rev. A, 21(3):745–750, 3 1980.
- [Rü97] M. RÜTHER: *Einfluß von Mikrowellenresonanzen und Magnetfeldern auf die Ionenausbeute einer EZR-Ionenquelle*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1997.
- [SAP⁺02] G. SHIRKOV, V. ALEXANDROV, V. PREISENDORF, V. SHEVTSOV, A. FILIPPOV, R. KOMISSAROV, V. MIRONOV, E. SHIRKOVA, O. STREKALOVSKY, N. TOKAREVA, A. TUZIKOV, V. VATULIN, E. VASINA, V. FOMIN, A. ANISIMOV, R. VESELOV, A. GOLUBEV, S. GRUSHIN, V. POVYSHEV, A. SADOVOI, E. DONSKOI, V. SHEVELKO, T. NAKAGAWA, and Y. YANO: *Particle-in-cell code library for numerical simulation of the ECR source plasma*. Rev. Sci. Instr., 73(2):644–646, 2 2002.
- [Sch00] FRANZ SCHWABL: *Statistische Mechanik*. Springer, 2000.

- [Ses73] SENGADU RANGASWAMY SESHADRI: *Fundamentals of plasma physics*. Elsevier, New York, 1973.
- [Shi92a] G. SHIRKOV: *Fundamental processes determining the highly charged ion production in ECR ion sources*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A, A322:161–165, 1992.
- [Shi92b] G. SHIRKOV: *The multiply charged ion production in ECR ion sources*. Rev. Sci. Instr., 63(4):2894–2896, 4 1992.
- [Shi93] G.D. SHIRKOV: *A classical model of ion confinement and losses in ECR ion sources*. Plasma Sources Sci. Technol., 2:527–532, 1993.
- [Shi94] GRIGORI SHIRKOV: *Highly charged ion production in ECR source of heavy ions*. CERN report, CERN/PS 94-33 (HI), 1994.
- [Shi96] G.D. SHIRKOV: *Improvement of highly charged ion production in the ECR source of heavy ions*. Rev. Sci. Instr., 67(3):1158–1160, 3 1996.
- [Shi00] G. SHIRKOV: *Multicomponent consideration of electron fraction of electron-cyclotron-resonance source plasmas*. Rev. Sci. Instr., 71(2):850–852, 2 2000.
- [SKY⁺93] R. SAID, E.Y. KAMBER, S. YALTKAYA, M. GOPINATHAN, and S.M. FERGUSON: *Translational energy spectra and differential cross sections for low energy Ar⁵⁺-Ar and Ne⁵⁺-Ne collisions*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 79:40–43, 1993.
- [SLO⁺92] K. SOEJIMA, C.J. LATIMER, K. OKUNO, N. KOBAYASHI, and Y. KANEKO: *Cross sections for single and multiple electron capture in low energy collisions of C⁴⁺ with H₂, O₂ and N₂*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 25:3009–3014, 1992.
- [SMMZ91] G. SHIRKOV, C. MÜHLE, G. MUSIOL, and G. ZSCHORNAK: *Ionization and charge dispersion in electron cyclotron resonance ion sources*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A, A302:1–5, 1991.
- [SN98] G. SHIRKOV and T. NAKAGAWA: *Numerical simulation of highly charged ion production in RIKEN 18 GHz electron-cyclotron resonance ion source*. Rev. Sci. Instr., 69(2):1141–1143, 2 1998.
- [SON97] K. SUZUKI, K. OKUNO, and KOBAYASHI N.: *Single- and Multiple-charge Changing Cross Sections in Slow Collisions of Ar^{q+} (q = 4 – 9) with Ne*. Physica Scripta, T73:172–174, 1997.
- [Spi56] LYMAN SPITZER, JR: *Physics of fully ionized gases*. Interscience Publishers Inc., New York, 1956.
- [ST95] V.P. SHEVELKO and H. TAWARA: *Semiempirical Formula for Multiple Ionization Cross Sections of Atoms by Electron Impact*. Physica Scripta, 52:649–653, 1995. Die Erweiterung des Anwendungsbereiches der vorgeschlagenen Formel auf Ionen findet sich u.a. in [BDS⁺97].

- [Stö94] H. STÖCKER: *Taschenbuch der Physik: Formeln, Tabellen, Übersichten*. Harri Deutsch, 1994.
- [Stö98] H. STÖCKER: *Taschenbuch der Physik: Formeln, Tabellen, Übersichten*. Harri Deutsch, 3. Auflage, 1998.
- [Stü95] MATTHIAS STÜBBE: *Entwicklung einer rotationssymmetrischen 2.45 GHz EZR-Ionenquelle unter besonderer Berücksichtigung einer resonanten Mikrowelleneinkopplung*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1995.
- [SZ95] G. SHIRKOV and G. ZSCHORNACK: *Simulation of ion confinement in an ECR ion source under electron injection*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 95:527–532, 1995.
- [SZ96] GRIGORI SHIRKOV and GÜNTER ZSCHORNAK: *Electron Impact Ion Sources for Charged Heavy Ions*. Vieweg, 1996.
- [TA77] TOMONORI TAKIZUKA and HIROTADA ABE: *A Binary Collision Model for Plasma Simulation with a Particle Code*. J. Comp. Phys., 25:209–219, 1977.
- [Täs02] ALEXANDER TÄSCHNER: *Konstruktion einer Teilchenoptik zur Elektroneninjektion in eine Plateau-EZR-Ionenquelle*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 2002.
- [TK87] H. TAWARA and T. KATO: *Total and partial ionization cross sections of atoms and ions by electron impact*. Atom. Data and Nucl. Data Tables, 36(2):167–353, 3 1987. Die hier veröffentlichte Meßwertsammlung ist auch im Internet frei zugänglich, s. [NIF01].
- [TS99] HIRO TAWARA and V.P. SHEVELKO: *Multiple ionization of negative and positive ions, neutral atoms, and molecules under electron impact: data and databases*. Int. J. Mass. Spectrom, 192:75–85, 1999.
- [Vac96] VACUUMSCHMELZE GMBH, HANAU: *Selten-Erd-Dauermagnete und Systeme VACODYM, VACOMAX*, 1996. Firmenprospekt BD-01.
- [VB94] J. VÁMOSI and S. BIRI: *TrapCAD - a tool to design and study magnetic traps of ECR ion sources*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 94:297–305, 1994.
- [VFKY96] D. A. VERNER, G. J. FERLAND, K. T. KORISTA, and D. G. YAKOVLEV: *Atomic Data for Astrophysics. II. New Analytic Fits for Photoionization Cross Sections of Atoms and Ions*. Astrophys. J., 465:487–498, 7 1996.
- [Vit96] CHRISTIAN F. VITT: *Realisation einer kompakten 6.8 GHz-EZR-Quelle zur Erzeugung hochgeladener Ionen*. Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1996.
- [VPFK93] J. VANCURA, J.J. PEROTTI, J. FLIDR, and V.O. KOSTROUN: *Absolute total, one-, two-, and three-electron-transfer cross sections for Ar^{q+} ($8 \leq q \leq 16$) on Ar at 2.3q keV*. Atom. Data and Nucl. Data Tables, 55(2):233–280, 1993.

- [VY93] D. A. VERNER and D. G. YAKOVLEV: *Subshell Photoionization Cross Sections and Ionization Energies of Atoms and Ions from He to Zn*. Phys. Rev. A, 49(4):2515–2523, 1993.
- [WAW88] M. WUTZ, H. ADAM und W. WALCHER: *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik*. Vieweg, 4 Auflage, 1988.
- [Wea84] ROBERT C. WEAST (editor): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida, 64 edition, 1984.
- [Wes82] H.I. WEST, JR.: *Calculation of Ion Charge-State Distribution in ECR Ion Sources*. Technical Report UCRL-53391, Lawrence Livermore National Laboratory, 1982.
- [WG90] D.R. WHALEY and W.D. GETTY: *Ion temperature effects on ion charge-state distributions of an electron cyclotron resonant ion source*. Phys. Fluids B, 2(6):1195–1203, 6 1990.
- [XL94] Z.Q. XIE and C.M. LYNEIS: *Plasma potentials and performance of the advanced electron cyclotron resonance ion source*. Rev. Sci. Instr., 65(9):2947–2952, 9 1994.
- [YKF93] S. YALTKAYA, E.Y. KAMBER, and S.M. FERGUSON: *Differential cross sections for state-selective electron capture by low-energy Ar^{q+} ions from He and Ar*. Phys. Rev. A, 48(1):382–391, 1993.
- [YM85] S.M. YOUNGER and T.D. MÄRK: *Semi Empirical and Semi-Classical Approximations for Electron Ionization*. In T.D. MÄRK and G.H. DUNN (editors): *Electron Impact Ionization*. Springer-Verlag, 1985.
- [ZEK94] H.W. ZHAO, A.A. EFREMOV, and V.B. KUTNER: *Calculation of the gas mixing effect in ECR ion source*. JINR Report E9-94-398, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 1994.
- [ZEK95] H.W. ZHAO, A.A. EFREMOV, and V.B. KUTNER: *Numerical study on the gas mixing effect in ECR ion sources*. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 98:545–548, 1995.

Korrektur

Gegenüber der Originalfassung dieser Arbeit vom 24. September 2002 (siehe letzte Seite des Inhaltsverzeichnisses, unten) wurde in dieser Version der Arbeit die folgende inhaltliche Korrektur vorgenommen:

In Gleichung (3.10) auf Seite 47 wurde die Normierungskonstante V^{-1} hinzugefügt.

Danksagung

Allen, die zu dieser Arbeit beigetragen und mich bei ihrer Fertigstellung unterstützt haben, möchte ich herzlich danken.

Dieser Dank gilt zuallererst meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. H.J. ANDRÄ, für die Ermöglichung dieser Arbeit und die gute Betreuung. Im Laufe dieser Arbeit habe ich besonders die ständige Diskussionsbereitschaft und die Gewährung des großen Freiraums vor allem bei der Beschreitung der Lösungswege zu schätzen gelernt.

Bei Herrn Priv.-Doz. Dr. ALFONS KHOUKAZ bedanke ich mich sehr für die freundliche Übernahme des Korreferates.

Des weiteren sei den Mitgliedern der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. ANDRÄ für die kollegiale Zusammenarbeit (speziell die Zurverfügungstellung ihrer PCs für meine Rechnungen im Hintergrund) und das gute Arbeitsklima gedankt. Dazu gehören derzeit BORIS ALBERS, Dipl. Phys. ANSELM HEINEN, MICHAEL KAHNT, Dipl. Phys. LARS MÜLLER, LUTZ NOWACK, Dipl. Ing. HANS-WERNER ORTJOHANN, Dipl. Phys. ALEXANDER TÄSCHNER und STEFAN WOLOSIN.

Genannt seien aber auch die ehemaligen Mitglieder, die Dipl. Phys. Dr. JENS DUCRÉE, Dr. JOACHIM LEUKER, Dr. JENS MROGENDA, ECKBERT RECKELS, SEBASTIAN RHODE, MARKUS RÜTHER, Dr. J. SCHMAND sowie MAURO VENIER.

Unter diesen gilt ANSELM HEINEN für seine Elektronendaten und die Zurverfügungstellung der Rechen-„Knechte“ sowie ALEXANDER TÄSCHNER, LARS MÜLLER und MICHAEL KAHNT für ihre Beiträge bei der Durchsicht dieser Arbeit ganz besonderer Dank!

Ferner bedanke ich mich bei den Mitgliedern des Instituts für Kernphysik, insbesondere Dipl. Phys. NICOLA BRUSKI für die abwechslungsreichen Gespräche. Vielen Dank auch an HELMUT BAUMEISTER und WERNER HASSENMEIER für die Überlassung ihrer PCs für die Rechnungen im Hintergrund, Dipl. Phys. Dr. RICHARD GLASOW für den technischen Support in der EDV sowie Frau MAYER für den Support im Geschäftszimmer.

Meinen Eltern sei für die Ermöglichung des Physikstudiums gedankt.

Besonderer und herzlicher Dank gebührt jedoch KATJA HOFMANN! Sie hat mir während dieser scheinbar nicht enden wollenden Zeit unglaublich den Rücken freigehalten und auf manches zugunsten dieser Arbeit verzichtet. Ich hoffe, davon in der Zukunft viel zurückgeben zu können!

Lebenslauf

Christian Friedrich Vitt

10.09.1969 Geburt in Hilstrup (jetzt Münster)
ledig

Eltern: Dipl. Volksw. Helmuth Vitt
Dr. med. Marie-Luise Vitt, geb. Stahl

Schulbildung:

1976 - 1980 Gustav-Peters-Grundschule in Eutin-Fissau, Schleswig-Holstein
1980 - 1989 Carl-Maria-von-Weber-Gymnasium, Eutin,
mit Abschluß der Hochschulreife (Abitur) am 27.5.1989

Grundwehrdienst:

06/1989 - 08/1990 bei der Luftwaffe in Goslar und Großenbrode

Studium:

10/1990 - 05/1996 Diplom-Studiengang Physik an der Westfälischen Wilhelms-
Universität (WWU), Münster
seit 04/1993 Diplom-Studiengang Volkswirtschaftslehre an der WWU
seit 04/1997 Promotionsstudiengang Physik an der WWU

Prüfungen:

22.04.1993 Vordiplom Physik, WWU
17.05.1996 Diplom Physik, WWU

Tätigkeiten:

09/1990 - 03/1992 Student. Hilfskraft (z.T. Werkverträge) am Institut f. Siedlungs-
und Wohnungswesen, WWU
08 - 09/1993 Werkstudent bei der Siemens AG im ehem. Halbleiterbereich
(heute Infineon Technologies AG), München
04 - 07/1995 Student. Hilfskraft am Institut f. Didaktik der Physik, WWU
06 - 07/1996 Wiss. Mitarbeiter am Institut f. Kernphysik, WWU
08 - 12/1996 Forschungspraktikum am Center for Telecommunications
Research (CTR) der Columbia University, New York, USA
02/1997 - 08/2002 Wiss. Mitarbeiter/Hilfskraft am Institut f. Kernphysik, WWU

Beginn der Dissertation:

02/1997 am Institut f. Kernphysik, WWU.
Betreuer: Prof. Dr. H.J. Andrä