

# Modellierung der Entstehung rotationssymmetrischer Filamente in der Zündphase großvolumiger Hochdruckglimmentladungen

Vom Fachbereich Physik  
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades

Doktor der Naturwissenschaften

– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Phys. Helmut Storr

geboren am 13. September 1961 in Hannover

2000

Physic ist wahrlich das eigentliche Studium des Menschen.

(Georg Christoph Lichtenberg, 1742–1799)

Referent: Prof. em. Dr. W. Bötticher

Korreferent: Prof. Dr. F. Demmig

Tag der Promotion: 12. November 1999

## Zusammenfassung

Helmut Storr

Modellierung der Entstehung rotationssymmetrischer Filamente  
in der Zündphase großvolumiger Hochdruckglimmentladungen

Es wird ein Modell zur zweidimensionalen Simulation von rotationssymmetrischen Hochdruckglimmentladungen entwickelt und auf eine XeCl\*-Entladung angewandt. Einbezogen werden Konvektion und Diffusion der Elektronen, Reaktionskinetik von Elektronen sowie positiven und negativen Ionen und die Berechnung der Raumladungsfeldverteilung. Die Verwendung von Transport- und Reaktionskoeffizienten, die lediglich von der reduzierten Feldstärke abhängen, beschränkt die Anwendbarkeit ebenso wie die Local-Field-Approximation auf die Zündphase der Entladung.

In diesem Institut durchgeführte Experimente belegen, daß die homogen vorionisierte Entladung zeitlich von Instabilitäten begrenzt wird, die ihren Ursprung in der Kathodenschicht haben. Diese Arbeit zeigt anhand von Modellrechnungen, daß lokale Erhöhungen des Sekundäremissionskoeffizienten durch Ionenaufprall auf die Kathode (Townsend  $\gamma$ ) Ionisationswellen unterschiedlicher Geschwindigkeit verursachen, an deren Rand es zum Vorschießen einer eng begrenzten, hohen Elektronendichte auf die Kathode kommt. Gleichzeitig dehnt sich eine Störung in das übrige Entladungsvolumen aus. Bereits eine um 10% erhöhte Sekundärelektronenemission führt zur Ausbildung eines Stiels zur Kathode.

Ferner wird der Einfluß inhomogener Vorionisation untersucht. Eine radial ausgedehnte Überhöhung der Vorionisationsdichte verursacht einen Kanal erhöhter Ladungsträgerdichte, während eine axial ausgedehnte Vorionisationsstörung vergleichsweise geringe Auswirkungen auf die weitere Entwicklung der Entladung hat.

Schlagworte: Entladung, Instabilität, Kathode

## Abstract

Helmut Storr

Modelling the development of rotationally symmetric filaments  
in the ignition phase of large volume high pressure glow discharges

A model to simulate two-dimensional high pressure glow discharges with rotationally symmetry is worked out and applied to a XeCl\* discharge. Included are electron convection and diffusion, reaction kinetics of electrons as well as positive and negative ions, and computation of the space charge field distribution. The use of transport and reaction coefficients depending solely on the reduced field and the local field approximation limits the applicability to the ignition phase of the discharge.

Experiments conducted in this institute prove, that the homogeneously preionized discharge is temporally restricted by instabilities originating in the cathode sheaths. It is shown in this thesis by model calculations, that local enhancements of the secondary emission coefficient due to flux of ions onto the cathode (Townsend  $\gamma$ ) will cause ionization waves with different velocities, of whose edges narrow, high electron densities shoot to the cathode. Simultaneously a disturbance expands into the bulk. Increasing the secondary emission coefficient by 10 % already results in the formation of a stem to the cathode.

In addition the influence of an inhomogeneously preionization is examined. A radially extended superelevation of preionization density leads to a channel of increased charge density, whereas an axially extended preionization disturbance in comparison has minor effects on the discharge.

Catchwords: discharge, instability, cathode

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modellierung</b>	<b>5</b>
2.1	Physikalisches Modell . . . . .	5
2.2	Grundgleichungen . . . . .	7
2.3	Numerisches Modell . . . . .	8
2.3.1	Konvektion . . . . .	11
2.3.1.1	Flüsse . . . . .	13
2.3.1.2	Lineare Verfahren . . . . .	15
2.3.1.3	Flux-Corrected-Transport nach Zalesak . . . . .	16
2.3.1.4	Flux-Corrected-Transport nach Kunhardt et al. . . . .	22
2.3.2	Diffusion . . . . .	29
2.3.3	Reaktionskinetik . . . . .	33
2.3.4	Elektrisches Feld . . . . .	36
2.3.5	Sekundärelektronenemission . . . . .	47
2.3.6	Kopplung der Verfahren . . . . .	48
2.4	Eingabedaten . . . . .	52
2.4.1	Äußere elektrische Feldstärke . . . . .	52
2.4.2	Reaktions- und Transportkoeffizienten . . . . .	54

2.4.3	Standardeingabeparameter . . . . .	64
2.5	Implementation . . . . .	64
<b>3</b>	<b>Vorionisationsstörungen</b>	<b>66</b>
3.1	Homogene Entladung . . . . .	67
3.2	Standardstörpuls . . . . .	69
3.3	Störung mit reduzierter Amplitude . . . . .	75
3.4	Einfluß der Form der Störung . . . . .	78
3.5	Störpuls bei niedriger Vorionisation . . . . .	83
3.6	Diskussion . . . . .	90
<b>4</b>	<b>Kathodenschicht</b>	<b>93</b>
4.1	Homogene Schichtzündung . . . . .	94
4.2	Lokal erhöhte Sekundärelektronenemission . . . . .	96
4.3	Diskussion . . . . .	105
<b>5</b>	<b>Schlußbetrachtung</b>	<b>110</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>113</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Skizze der Entladungsgeometrie . . . . .	9
2.2	Skizze des Rechengitters . . . . .	10
2.3	Angelegte Spannung und Feldstärke . . . . .	53
2.4	Effektiver Ionisierungskoeffizient für Standardbedingungen . .	56
2.5	Ionisierungskoeffizient für Standardbedingungen . . . . .	58
2.6	Attachmentkoeffizient für Standardbedingungen . . . . .	59
2.7	Elektronenbeweglichkeit für Standardbedingungen . . . . .	59
2.8	Diffusionskoeffizienten für Standardbedingungen . . . . .	60
2.9	Ionisierungskoeffizient bei verschiedenen Partialdrücken . . . .	61
2.10	Attachmentkoeffizient bei verschiedenen Partialdrücken . . . .	61
2.11	Elektronenbeweglichkeit bei verschiedenen Partialdrücken . . .	62
2.12	Transversaler Diffusionskoeff. bei verschiedenen Partialdrücken	62
2.13	Beweglichkeit der positiven Ionen für Standardbedingungen . .	63
3.1	Elektronendichte bei rein homogener Vorionisation . . . . .	68
3.2	Norm. Elektronendichte eines Standardstörpulses auf der Achse	70
3.3	Normierte Feldstärke eines Standardstörpulses auf der Achse .	70
3.4	Normierte Elektronendichte eines Standardstörpulses bei 12 ns	72
3.5	Normierte Elektronendichte eines Standardstörpulses bei 14 ns	72

3.6	Normierte Elektronendichte eines Standardstörpulses bei 16 ns	73
3.7	Normierte Elektronendichte eines Standardstörpulses bei 18 ns	73
3.8	Normierte Feldstärke eines Standardstörpulses bei 14 ns . . . .	74
3.9	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $\Gamma = 10$ . . . . .	76
3.10	Normierte Feldstärke auf der Achse für $\Gamma = 10$ . . . . .	76
3.11	Normierte Elektronendichte für $\Gamma = 10$ bei 14 ns . . . . .	77
3.12	Normierte Elektronendichte für $\Gamma = 10$ bei 16 ns . . . . .	77
3.13	Normierte Elektronendichte für $\Gamma = 10$ bei 18 ns . . . . .	78
3.14	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm	80
3.15	Normierte Feldstärke auf der Achse für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm . . .	80
3.16	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm bei 12 ns . .	81
3.17	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm bei 14 ns . .	81
3.18	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm bei 16 ns . .	82
3.19	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 0,2$ mm bei 18 ns . .	82
3.20	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm	84
3.21	Normierte Feldstärke auf der Achse für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm . . . .	84
3.22	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 12 ns . . .	85
3.23	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 14 ns . . .	85
3.24	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 15 ns . . .	86
3.25	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 16 ns . . .	86
3.26	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 17 ns . . .	87
3.27	Normierte Elektronendichte für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm bei 18 ns . . .	87
3.28	Normierte El.-Dichte auf der Achse für $\lambda_{r_{FWHM}} = 5$ mm, $\Gamma = 10$	88
3.29	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $n_{e0} = 10^6$ cm <sup>-3</sup> .	88
3.30	Normierte Feldstärke auf der Achse für $n_{e0} = 10^6$ cm <sup>-3</sup> . . . .	89

3.31	Normierte Elektronendichte für $n_{e0} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ bei 22 ns . . . . .	89
3.32	Anzahl der Elektronen im Störpuls . . . . .	92
4.1	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $\gamma = 0,1$ . . . . .	95
4.2	Normierte Feldstärke auf der Achse für $\gamma = 0,1$ . . . . .	95
4.3	Normierte Elektronendichte auf der Achse für $\gamma = 0,9$ . . . . .	96
4.4	Normierte Elektronendichte mit $\gamma = 0,1$ für 17,9 ns . . . . .	97
4.5	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,9$ im Fleck bei 17,0 ns . . . . .	98
4.6	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,9$ im Fleck bei 17,3 ns . . . . .	98
4.7	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,9$ im Fleck bei 17,6 ns . . . . .	99
4.8	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,9$ im Fleck bei 17,9 ns . . . . .	99
4.9	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,9$ im Fleck bei 18,2 ns . . . . .	100
4.10	Elektronendichte am Rand des $\gamma$ -Flecks . . . . .	101
4.11	Normierte Feldstärke für $\gamma = 0,9$ bei 17,3 ns . . . . .	102
4.12	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,2$ bei 17,9 ns . . . . .	103
4.13	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,11$ bei 17,9 ns . . . . .	104
4.14	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,11$ bei 18,2 ns . . . . .	104
4.15	Normierte Elektronendichte für $\gamma = 0,11$ bei 18,5 ns . . . . .	105
4.16	Norm. Elektronendichte eines unscharfen $\gamma$ -Flecks bei 17,6 ns . . . . .	106
4.17	Norm. Elektronendichte eines unscharfen $\gamma$ -Flecks bei 17,9 ns . . . . .	107
4.18	Norm. Elektronendichte eines unscharfen $\gamma$ -Flecks bei 18,2 ns . . . . .	107

# Tabellenverzeichnis

2.1	Schema der Verfahrenskopplung zum Gesamtprogramm . . . .	51
2.2	Standardentladungs- und -numerikbedingungen . . . . .	64
3.1	Standardparameter des Störpulses . . . . .	67

# Symbolverzeichnis

Hier werden nur die global verwendeten Bezeichnungen aufgeführt, nicht angegebene Symbole sind lokal im Text definiert.

$C$	Courantzahl
$\hat{D}_e$	Elektronendiffusionstensor
$D_L$	Longitudinaler Diffusionskoeffizient
$D_T$	Transversaler Diffusionskoeffizient
$d$	Elektrodenabstand
$\vec{E}$	Elektrische Gesamtfeldstärke
$\tilde{E}$	Normierte elektrische Feldstärke
$\vec{E}_{\text{ext}}$	Von außen angelegte elektrische Feldstärke
$\vec{E}_{\text{Rl}}$	Elektrische Raumladungsfeldstärke
$e_0$	Elementarladung
$F$	Transportive Flüsse
FCT	Flux-Corrected-Transport
$\vec{f}$	Teilchenstromdichte der Elektronen, hier als Fluß bezeichnet
$i$	Zähler für radiale Gitterpunkte
$j$	Zähler für axiale Gitterpunkte
LFA	Local-Field-Approximation
$N$	Gesamtteilchenzahldichte
$N_R$	Anzahl der rad. Gitterzellen zur Lösung der Poissongleichung
$N_r$	Anzahl der rad. Gitterzellen für die vollständige Numerik
$N_z$	Anzahl der axialen Gitterzellen
$n_e$	Elektronendichte
$\bar{n}_e$	Homogene Elektronendichte
$\tilde{n}_e$	Normierte Elektronendichte
$n_{e0}$	Homogene Vorionisationsdichte

$n_p$	Dichte der positiven Ionen
$n_n$	Dichte der negativen Ionen
$R$	Elektrischer Widerstand
$R_E$	Radius der Elektroden
$R_H$	Radius der Halogebietes
$R_P$	Radius des erweiterten Rechengebietes der Poissongleichung
$R_v$	Radius des vorionisierten Bereichs
$r$	Radiale Ortskoordinate
$t$	Zeit
$U$	Von außen angelegte Spannung
$\vec{v}_e$	Elektronengeschwindigkeit
$z$	Axiale Ortskoordinate
$\alpha$	Elektronenstoß-Ionisierungskoeffizient
$\Gamma$	Zentralamplitude der Störung
$\gamma$	Sekundäremissionskoeffizient für Ionenaufprall auf die Kathode
$\Delta r$	Radiale Schrittweite
$\Delta t$	Zeitschrittweite
$\Delta z$	Axiale Schrittweite
$\epsilon_0$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
$\eta$	Elektronen-Attachmentkoeffizient
$\lambda_{rFWHM}$	Volle radiale Halbwertsbreite der Störung
$\lambda_{zFWHM}$	Volle axiale Halbwertsbreite der Störung
$\mu_e$	Elektronenbeweglichkeit
$\mu_p$	Beweglichkeit der positiven Ionen
$\rho$	Raumladungsdichte
$\phi$	Raumladungspotential

# Kapitel 1

## Einführung

Stationäre Gasentladungen mit Gasdrücken von 1 bar und mehr erzeugen bei Strömen von einigen Ampere einen Plasmazustand nahe dem lokalen thermischen Gleichgewicht. Die elektrisch eingebrachte Leistung geht zu einem großen Anteil in die Aufrechterhaltung einer hohen Translationstemperatur der schweren Teilchen ein. Dies ist für eine Reihe von Anwendungen unerwünscht. Zur Erzeugung von Laserstrahlung und für plasmachemische Prozesse wird gefordert, die primär in das Elektronengas eingekoppelte Leistung überwiegend zur Erzeugung von Ionen und elektronisch angeregten Atomen und Molekülen und zur Vibrationsanregung zu benutzen. Solche Entladungen werden als *Hochdruckglimmentladungen* bezeichnet, sie sind prinzipiell nicht stationär zu betreiben.

Für Anwendungen in der Plasmachemie sind die sogenannten *dielektrisch behinderten Entladungen* (DBE) wegen ihrer relativ einfachen experimentellen Konfiguration gut geeignet. Einen Überblick zu diesem Entladungstyp gibt [KOGELSCHATZ97]. Die DBE bestehen aus dünnen stromführenden Filamenten mit einem Durchmesser von ca.  $100\ \mu\text{m}$ , die sich nach einer Strompulsdauer von etwa 100 ns infolge der Gegenspannung, die durch Aufladung einer dielektrischen Schicht auf einer der Elektroden entsteht, selbständig abschalten.

Homogen gepulste Hochdruckglimmentladungen mit Volumina bis zu einigen Litern bieten im Hinblick auf den Massendurchsatz in einem plasmachemischen Reaktor große Vorteile. Die hierzu notwendige Konfiguration ist sehr ausführlich bei der Entwicklung von Excimerlasern untersucht worden. Ein

Beispiel ist der  $\text{XeCl}^*$ -Laser, der in einem Gemisch aus Neon, Xenon und Chlorwasserstoff betrieben wird.

Bei der Entwicklung dieser Laser erwies es sich als sehr schwierig, Entladungen zu zünden, die bis zum Beginn des störenden Anstiegs der Schwermetalltemperatur räumlich homogen bleiben. Zur homogenen Zündung ist eine durch externe Ultraviolett- oder Röntgenstrahlung erzeugte Vorionisation von  $10^6$  oder besser mehr Elektronen pro Kubikzentimeter notwendig. Das Experiment zeigt, daß sich in der Entladung aus Störungen der Homogenität der Vorionisation oder durch Inhomogenitäten der Kathodenoberfläche Kanäle erhöhter Leuchtdichte, d. h. erhöhter elektrischer Stromdichte, ausbilden. Diese Beobachtungen werden unter der Bezeichnung *Filamentierung* zusammengefaßt [BÖTTICHER93].

Alle Modellrechnungen zur zeitlichen Entwicklung vorionisierter Hochdruckglimmentladungen gehen je nach Zielsetzung von starken Vereinfachungen aus. Die vollständige Ionisations- und Reaktionskinetik von mit Neon gepufferten  $\text{XeCl}$ -Entladungen ist z. B. in den Arbeiten des Instituts für Plasma-physik der Universität Hannover entwickelt und experimentell an einer kleinen Modellentladung verifiziert worden [BÖTTICHER92, LÜCK92, LÜCK94, SCHWABEDISSEN94, SCHWABEDISSEN95, BACKHAUS92, LOFFHAGEN94]. Dabei wurde ein räumlich homogenes Modell benutzt, das Filamentierungsprozesse nicht erfassen kann.

Makroskopisch inhomogene Entladungen können unter Verwendung der vollen Reaktionskinetik mit dem sogenannten Parallel- $R$ -Modell behandelt werden. In diesem Modelltyp werden eine Reihe in sich homogener Entladungssegmente (d. h. Widerstände  $R_i$ ) über die gemeinsamen Elektroden gekoppelt [GORTCHAKOV98]. Einflüsse durch in der Entladung aufgebaute elektrische Felder aus Raumladungen sind nicht berücksichtigt.

Raumladungseffekte werden durch räumlich inhomogene Vorionisationsdichten und von den Elektroden hervorgerufen. Sehr großen Einfluß haben Raumladungsfelder vor der Kathode. Wegen des Aufwands zur Lösung der Poisson-Gleichung wird in diesen Modellen nur die *Zündphase* behandelt. Sie ist durch die Forderung definiert, daß die Teilchenzahldichten der von der Entladung erzeugten Teilchensorten (sogenannte *Sekundärspezies*) noch so niedrig sind, daß Stöße von Elektronen mit diesen Teilchen die Elektronenverteilungsfunktion nicht beeinflussen. Diese ist dann als Funktion des Füllgas-

gemischs und der reduzierten elektrischen Feldstärke  $E/N$  ( $N$ : Gesamtteilchenzahldichte) berechenbar. Das erleichtert die numerische Modellierung außerordentlich. Ein zweidimensionales Modell dieser Art wurde von Simon entwickelt [SIMON93, SIMON94]. Er behandelt Entladungsgeometrien, die in einem Schnitt senkrecht zu den Elektrodenoberflächen zweidimensional und in der dazu senkrechten Richtung, d. h. beim Laser der Emissionsrichtung, homogen sind.

Ein wesentliches Resultat von Simon ist die Reproduktion der von Dreiskemper [DREISKEMPER95, DREISKEMPER95A] experimentell gefundenen sogenannten *Schichtzündung* vor der Kathode. Bei diesem Effekt handelt es sich um eine durch die Elektronenauslösung infolge Ionenaufpralls sehr schnell entstehende Schicht mit sehr hohen Raumladungsfeldern. Sowohl Simon als auch Dreiskemper haben gezeigt, daß der Zeitpunkt der Schichtzündung von dem Sekundäremissionskoeffizienten (Townsend  $\gamma$ ) der Elektrodenoberfläche abhängt. Die Experimente von Dreiskemper belegen, daß die starke Filamentierung in der voll entwickelten Entladung aus einer Struktur entsteht, die die Form eines auf der Kathode wachsenden Stiels hat, der sich zu einem Kelch erweitert und in der Zündphase von kleinen, eng lokalisierten Unregelmäßigkeiten der Kathodenoberfläche ausgelöst wird. Diese Beobachtung kann mit der Geometrie des Modells von Simon nicht behandelt werden.

Kernstück dieser Arbeit ist die Entwicklung eines zweidimensionalen Modells der Zündphase von vorionisierten Hochdruckglimmentladungen, mit dem die raumladungsbestimmte zeitliche Entwicklung rotationssymmetrischer Störungen behandelt werden kann. Im Gegensatz zu Akashi et al. [AKASHI97, AKASHI97A] postuliert diese Arbeit keine zu Feldemission führenden Mikrospitzen auf der Kathode als Auslöser einer Filamentierung.

Im Kapitel 2 wird das Modell vorgestellt. Die detaillierte Darstellung wurde gewählt, da die Erfahrung gezeigt hat, daß in der Literatur gefundene Modelle wegen unvollständiger und teilweise fehlerhafter Beschreibung sich nicht in lauffähige numerische Programme umsetzen ließen. Als entscheidendes Problem stellte sich heraus, daß ein geringer Fehler in der Berechnung eines Prozesses wie der Konvektion der Elektronen über andere Programmteile wie die Lösung der Reaktionskinetik oder Raumladungsfeldstärke rückkoppeln und sich unkontrollierbar verstärken kann. Daher werden hohe Anforderungen an die Genauigkeit einzelner Verfahren und ihre Verknüpfung gestellt.

Im Kapitel 3 und 4 werden Resultate der Anwendung dieses Modells vorgestellt. Dabei wird in Kapitel 3 die Entwicklung einer lokalisierten Störung der Vorionisation im Volumen behandelt. Um diese Prozesse isoliert betrachten zu können, wird dabei die Kathodenfallentwicklung numerisch unterdrückt.

Im Kapitel 4 wird die räumlich eng begrenzte Schichtzündung aufgrund einer lokalisierten Variation des Townsendschen Sekundäremissionskoeffizienten  $\gamma$  behandelt und mit Experimenten verglichen.

Im Kapitel 5 werden die Resultate bewertet und die für die Entwicklung eines mit weniger Näherungen behafteten Modells notwendigen Schritte beschrieben und begründet. Zum Schluß erfolgt eine Zusammenfassung.

# Kapitel 2

## Modellierung

In diesem Kapitel werden, ausgehend von einer Beschreibung der physikalischen Gegebenheiten in Unterkapitel 2.1, die Grundgleichungen in Unterkapitel 2.2 angegeben. Ihre numerische Lösung in Unterkapitel 2.3 gliedert sich in fünf Teile mit der Behandlung der Konvektion der Elektronen in Abschnitt 2.3.1, ihrer Diffusion in Abschnitt 2.3.2, der Teilchenkinetik in Abschnitt 2.3.3, der elektrischen Feldverteilung in Abschnitt 2.3.4 und der Sekundärelektronenemission in Abschnitt 2.3.5. Die Kopplung der Verfahrenselemente zum Gesamtprogramm wird in Abschnitt 2.3.6 beschrieben. Unterkapitel 2.4 zeigt die in der behandelten Modellentladung auftretenden und in den Rechnungen benutzten Feldstärken in Abschnitt 2.4.1, Reaktions- und Transportkoeffizienten in Abschnitt 2.4.2 und Standardeingabeparameter in Abschnitt 2.4.3. In Unterkapitel 2.5 schließlich wird die zur Umsetzung des Computerprogramms verwendete Hard- und Software aufgeführt.

### 2.1 Physikalisches Modell

Betrachtet werden zwei unendlich ausgedehnte planparallele Elektroden im Abstand  $d$ , die eine vorgegebene zeitlich variable Spannung  $U(t)$  tragen. Ziel der Untersuchungen ist die Beschreibung rotationssymmetrischer Effekte, daher erfolgt eine Beschränkung auf Zylindersymmetrie, d. h., auf den  $(r, z)$ -Raum. Der Vektor der angelegten elektrischen Feldstärke  $\vec{E}_{\text{ext}}$  weist in  $-z$ -Richtung.

Das Entladungsgefäß ist gefüllt mit einer Mischung der Gase Neon, Xenon und Chlorwasserstoff. Im Verlauf des Aufbaus einer Entladung bilden sich daraus eine Vielzahl verschiedener Atome und Moleküle im Grund-, angeregten und ionisierten Zustand, die als Sekundärspezies bezeichnet werden. Es existieren umfangreiche Arbeiten zur Behandlung der Kinetik, die Dutzende Schwerteilchen und Hunderte Reaktionen zwischen ihnen enthalten [HAMMER87, BACKHAUS92]. Die zugehörigen Ratengleichungen bilden ein System steifer Differentialgleichungen und erfordern als wesentliche Komplikation wegen der nichtthermischen Elektronenenergieverteilung mit jeder Änderung in den Konzentrationen der Sekundärspezies eine erneute Lösung der Boltzmann-Gleichung [BACKHAUS92]. Der erhebliche numerische Aufwand ist nur für räumlich homogene oder eingeschränkt eindimensionale Untersuchungen [GORTCHAKOV98] zu vertreten.

In dieser Arbeit wird ein vereinfachtes Modell der Kinetik verwendet. In dem mit konstanter Temperatur und konstantem Druck angenommenen Hintergrundgas werden die Dichten von Elektronen  $n_e$ , positiven Ionen  $n_p$ , d. h.  $\text{Xe}^+$ , und negativen Ionen  $n_n$ , d. h.  $\text{Cl}^-$ , betrachtet und im Rahmen eines Fluidmodells mit jeweils einer Teilchenzahlerhaltungsgleichung beschrieben. Die Beschränkung auf drei Spezies bedingt, daß das vorgestellte Modell nur für die Townsend- und Zündphase, nicht jedoch für die Brenn- und Rekombinationsphase der Entladung gültig ist [BACKHAUS92].

Diese Beschränkung erlaubt es, die Koeffizienten für Ionisation  $\alpha$  und Attachment  $\eta$  sowie Beweglichkeit  $\mu_e$  und Diffusion  $\hat{D}_e$  der Elektronen für ein spezifisches Gasgemisch im Rahmen der Local-Field-Approximation (LFA) als Funktion der lokalen reduzierten Feldstärke  $E/N$  zu berechnen. Zahlenwerte dieser Koeffizienten wurden von Loffhagen mit dem vollständigen räumlich homogenen Modell in quasistationärer Näherung [BACKHAUS92] berechnet und als Tabelle zur Verfügung gestellt (Abschnitt 2.4.2). Die LFA erlaubt zur Berechnung der Elektronengeschwindigkeit  $\vec{v}_e$  eine Beschränkung der Impulsgleichung auf den Drift- und Diffusionsterm. Sie vernachlässigt den Einfluß von Gradienten der reduzierten Feldstärke auf die Elektronenverteilungsfunktion. Die Verwendung der LFA wird bei den starken örtlichen Variationen der Feldstärke im Bereich des Kathodenfalls fragwürdig [SIMON93]. In dieser Arbeit wird aber kein Versuch unternommen, die nichtlokalen Effekte zu berechnen.

In der typischen Zeitskala der Zündung einer Entladung von einigen 10 ns läßt sich die Bewegung der Ionen vernachlässigen. Für die Ionendichten werden im Modell nur Erhöhungen aufgrund von Ionisation bzw. Attachment, aber keinerlei Verlustprozesse berücksichtigt.

Im Kathodenfall und gegebenenfalls auch im Volumen entstehen Raumladungen, deren Feldstärke die angelegte elektrische Feldstärke übertreffen kann. Dies ist ein die Entwicklung der Entladung entscheidend bestimmender Effekt. Über die Lösung der Poissongleichung gelangt man zum elektrischen Raumladungspotential  $\phi$  und zur Raumladungsfeldstärke  $E_{\text{RI}}$ . Als Dielektrizitätskonstante des Grundgases wird die des Vakuums angenommen.

Photoionisation im Volumen und an der Kathode ist aufgrund einer starken Vorionisierung nicht berücksichtigt. Elektronenauslösung an der Kathode durch Ionenbeschuß über den Sekundäremissionskoeffizienten  $\gamma$  wird dagegen berechnet.

Das vorgestellte Modell basiert auf Publikationen zur Simulation von Streamern [DHALI87, DHALI88, WU88, WANG90]. Einige zusätzliche Informationen zu den Verfahren von Kunhardt et al. konnten einer freundlicherweise überlassenen Diskette entnommen werden. Leider waren diese Programme teilweise fehlerhaft und nicht lauffähig.

## 2.2 Grundgleichungen

Aus den Annahmen und Definitionen des letzten Unterkapitels ergibt sich folgendes System gekoppelter partieller Differentialgleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_e + \vec{\nabla} \cdot (n_e \vec{v}_e) = (\alpha - \eta) n_e |\vec{v}_e| \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p = \alpha n_e |\vec{v}_e| \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_n = \eta n_e |\vec{v}_e| \quad (2.3)$$

$$n_e \vec{v}_e = -\hat{D}_e \cdot \vec{\nabla} n_e - \mu_e n_e \vec{E} \quad (2.4)$$

$$\vec{E} = \vec{E}_{\text{ext}} + \vec{E}_{\text{Rl}} \quad (2.5)$$

$$\vec{E}_{\text{ext}} = \frac{U}{d} \vec{e}_z \quad (2.6)$$

$$\vec{E}_{\text{Rl}} = -\vec{\nabla} \phi \quad (2.7)$$

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e_0}{\epsilon_0} (n_p - n_n - n_e). \quad (2.8)$$

## 2.3 Numerisches Modell

In diesem Unterkapitel wird eine Vorgehensweise zur Lösung des Gleichungssystems (2.1)–(2.8) beschrieben, die in dieser Arbeit entwickelt und benutzt wurde. Die physikalischen Phänomene werden dabei getrennt bearbeitet und jeweils mit einem geeigneten numerischen Algorithmus behandelt.

Für Gleichungen, die Zeitableitungen enthalten, werden explizite Differenzenverfahren eingesetzt. Die Konvektion der Elektronen wird mit einem flußkorrigierten Verfahren gelöst (Abschnitt 2.3.1), ihre Diffusion mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit und zentralen Differenzen in den räumlichen Koordinaten diskretisiert (Abschnitt 2.3.2) und die Reaktionskinetik mit einem modifizierten Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung in der Zeit integriert (Abschnitt 2.3.3).

Zur Berechnung der elektrischen Feldverteilung wird eine Fourier-Analyse der Raumladungsverteilung in axialer Richtung und eine Approximation durch kubische Splines in radialer Richtung durchgeführt (Abschnitt 2.3.4). Die Kopplung der Routinen zum Gesamtprogramm erfolgt mit der Methode der fraktionierten Schritte (Abschnitt 2.3.6).

Die zu untersuchende Entladungsgeometrie ist in Abbildung 2.1 mit Koordinatenachsen und Schaltkreis skizziert. Betrachtet wird eine rotationssymmetrische Konfiguration in Zylinderkoordinaten  $(r, z)$ . Die Kathode bei  $z = 0$  und die Anode bei  $z = d$  tragen eine zeitabhängige Spannung  $U(t)$ .

Gleichung (2.6) beschreibt ein homogenes, von außen angelegtes, elektrisches Feld, die Elektroden werden daher als planparallel und unendlich ausgedehnt angenommen ( $R_E = \infty$ ).

Im Entladungsvolumen erfolgt eine ortsabhängige Vorionisation in einem radial begrenzten Bereich ( $r \leq R_v$ ). Experimentell beobachtet man auch au-

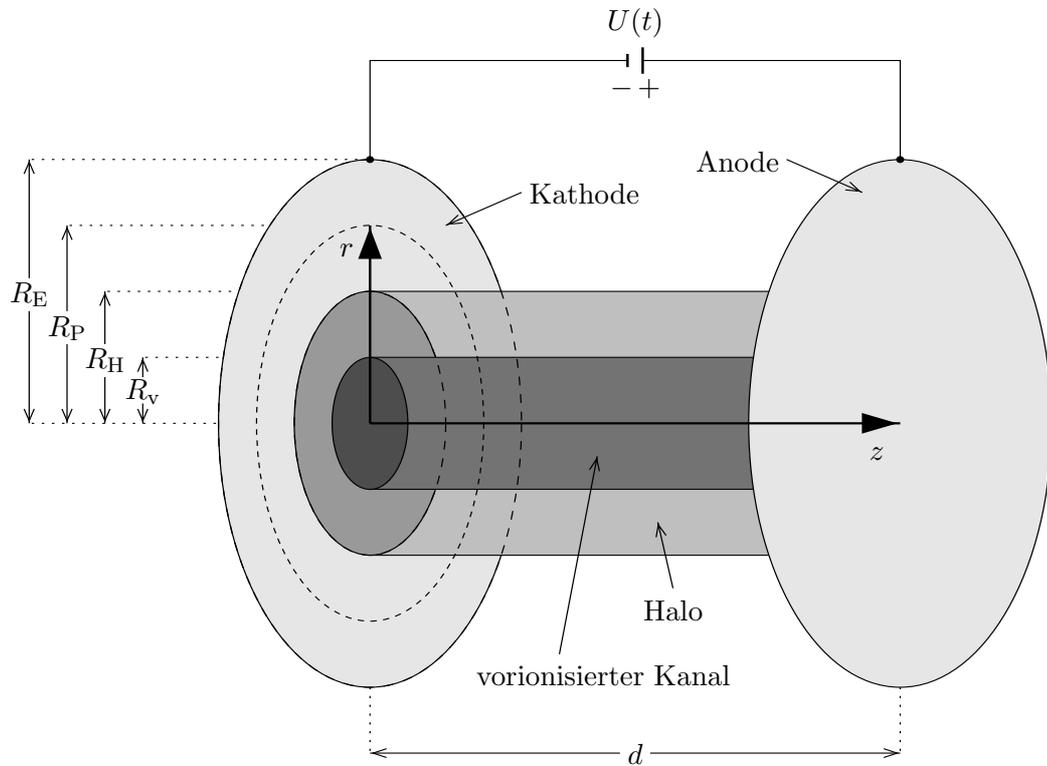


Abbildung 2.1: Skizze der Entladungsgeometrie, nicht maßstabstreu. Es gilt:  $R_v \leq R_H < d \ll R_P \ll R_E$ .

ßerhalb des vorionisierten Kanals Entladungsphänomene, den sogenannten Halo. Zur Berücksichtigung dieser Effekte ist es möglich, das Rechengebiet über den vorionisierten Bereich hinaus zu verlängern ( $r \leq R_H$ ). In den vorgelegten Rechnungen wurde diese Option nicht wahrgenommen.

Während einer Entladung entstehen Raumladungen, die Störungen des angelegten homogenen elektrischen Feldes bis weit außerhalb des zu untersuchenden Bereichs verursachen. Schwierigkeiten bei der Wahl der radialen Randbedingungen zur Feldverteilung werden umgangen durch die Einführung eines erweiterten Rechengebietes ( $R_H < r \leq R_P$ ), in dem lediglich die Poissongleichung gelöst wird (Abschnitt 2.3.4).  $R_P$  ist um den Faktor 390 höher als  $R_H$  gewählt.

In Abbildung 2.2 ist das verwendete Rechengitter skizziert. Die Lösungsmethode der Poissongleichung bedingt eine äquidistante Diskretisierung in  $z$ -Richtung und die zusätzliche Forderung, daß die Zahl der axialen Gitter-

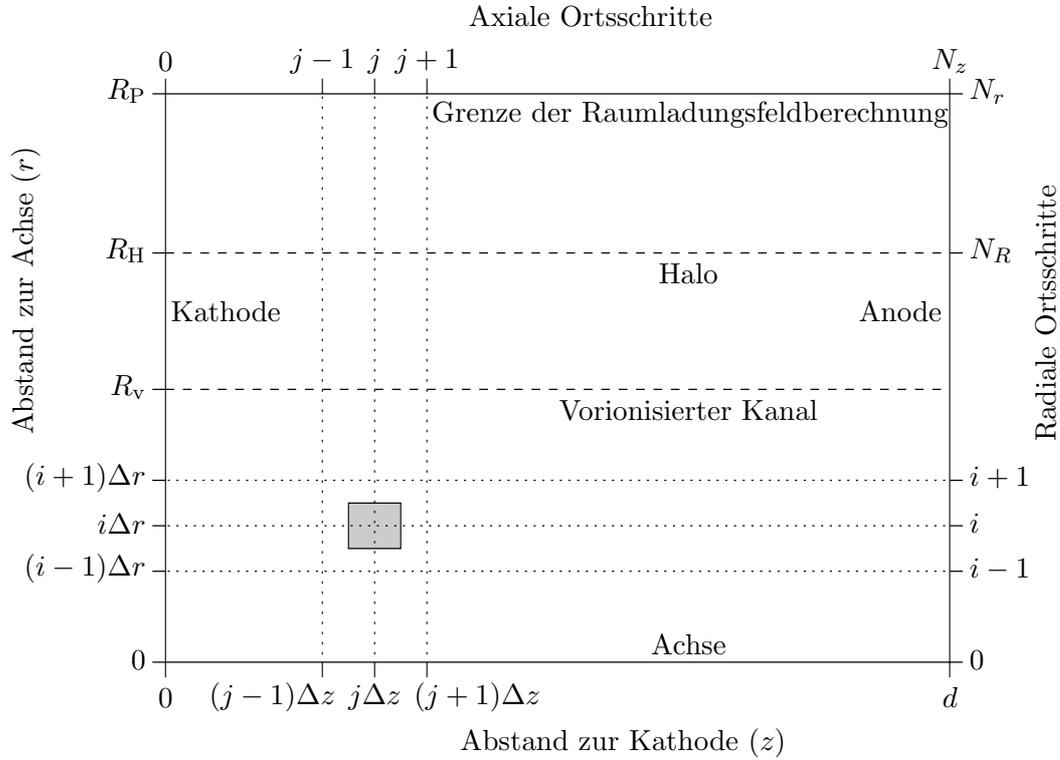


Abbildung 2.2: Skizze des Rechengitters. Die Schrittweiten sind äquidistant mit Ausnahme exponentiell wachsender radialer Punktabstände im Gebiet  $R_H < r \leq R_P$ . Eingezeichnet ist die zwei-dimensionale Gitterzelle um  $(i, j)$ .

zellen eine Potenz von 2 ist. Mit der Schrittweite  $\Delta z$  wird die Strecke von der Kathode bei  $z = 0$  zur Anode bei  $z = N_z \cdot \Delta z \equiv d$  in  $N_z + 1$  Gitterpunkte unterteilt.

In radialer Richtung gibt es keine prinzipiellen Einschränkungen. Zwischen der Achse bei  $r = 0$  und dem Entladungsrand bei  $r = N_r \cdot \Delta r \equiv R_H$  enthält die radiale Koordinate  $N_r + 1$  Gitterpunkte im äquidistanten Abstand  $\Delta r$ . Auf diesem Rechengitter wird das vollständige Grundgleichungssystem gelöst. Zusätzlich wird im Gebiet  $R_H < r \leq R_P$  in radialer Richtung mit  $N_r - N_R$  Punkten in exponentiell anwachsender Ortsschrittweite der an Bedeutung verlierenden Raumladungsfeldstärke Rechnung getragen.

Die Zeit ist in Schritten von  $\Delta t$  unterteilt, wobei sich die Zeitschrittweite im Verlauf einer Rechnung ändern kann (Abschnitt 2.3.6).

In den Verfahrensformeln wird bei den abhängigen Variablen der Zeitpunkt mit einem oberen Index und Ortskoordinaten mit unteren Indizes bezeichnet,  $i$  steht für die radiale vor  $j$  für die axiale Dimension. Damit gibt  $n_{e,i,j}^t$  die Elektronendichte am Ort ( $r = i \cdot \Delta r$ ,  $z = j \cdot \Delta z$ ) zur Zeit  $t$  an. Für die weiteren Betrachtungen ist es nützlich, ein temporäres Hilfsgitter auf den halbzahligen Zwischengitterpunkten einzuführen.  $n_{e,i,j}$  läßt sich dann interpretieren als die Dichte im Zentrum einer Zelle mit  $(i - 1/2) \cdot \Delta r < r < (i + 1/2) \cdot \Delta r$  und  $(j - 1/2) \cdot \Delta z < z < (j + 1/2) \cdot \Delta z$ .

### 2.3.1 Konvektion

Im angelegten elektrischen Feld driften Elektronen in axialer Richtung zur Anode. Spielen Raumladungsfelder eine Rolle, erfahren sie zusätzlich eine radiale Bewegung. Dieser Teilchentransport wird beschrieben von der Kontinuitätsgleichung (2.1) ohne Quellterm und der Teilchenstromdichte (2.4) ohne Diffusionsanteil

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (n\vec{v}), \quad \text{mit } n \equiv n_e, \quad \vec{v} = -\mu_e \vec{E}, \quad (2.9)$$

mit der Anfangsbedingung

$$n(r, z, t = 0) = n_0(r, z). \quad (2.10)$$

$\vec{v}$  bezeichnet die Elektronendriftgeschwindigkeit, und  $n$  wird in diesem Abschnitt als Kurzschreibweise für die Elektronendichte  $n_e$  eingeführt. Die Elektronenbeweglichkeit  $\mu_e$  hängt von der reduzierten Feldstärke ab (Abschnitt 2.4.2), daher ist die Driftgeschwindigkeit eine nichtlineare Funktion der lokalen Feldstärke.

In Zylinderkoordinaten ohne Winkelanteil lautet Gleichung (2.9) mit  $v_z$  als Axial- und  $v_r$  als Radialdriftgeschwindigkeit der Elektronen

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} (nv_z) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rnv_r). \quad (2.11)$$

Diese Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung vom hyperbolischen Typ.

Sind Raumladungen zu vernachlässigen und ist das angelegte elektrische Feld

zeitunabhängig, so ist  $v_z = \text{konst}$  und  $v_r = 0$ . Dann vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -v_z \frac{\partial n}{\partial z}, \quad (2.12)$$

und die allgemeine Lösung beschreibt eine Verschiebung der anfänglichen Dichteverteilung ohne Änderung der Form mit der Geschwindigkeit  $v_z$ :

$$n(r, z, t) = n_0(r, z - v_z t). \quad (2.13)$$

Diese geschlossene Lösung ist nützlich für Vergleiche mit numerischen Verfahren. In den nächsten Unterabschnitten werden dazu einige Beispiele genannt. Weitergehende analytische Lösungen sind möglich, auch für gewisse nichtkonstante Geschwindigkeitsfelder [KUNHARDT87, YANG92].

Die charakteristische Zeit  $\tau_{\text{Konv.}}$ , in der sich eine Struktur über die Länge  $\lambda$  bewegt, ergibt sich aus Gleichung (2.13) einfach zu

$$\tau_{\text{Konv.}} = \frac{\lambda}{|v_z|}. \quad (2.14)$$

Mit maximaler angelegter Feldstärke über die volle Entladungsdauer ohne Berücksichtigung von Raumladungen läßt sich die Driftlänge eines Elektrons nach oben abschätzen zu

$$\lambda_{\text{Konv.}} = \tau_{\text{Entl.}} \cdot |v_z| \lesssim 18 \text{ ns} \cdot 68300 \frac{\text{m}}{\text{s}} \approx 1,2 \text{ mm},$$

sie ist damit deutlich kürzer als die Entladungslänge mit 18 mm. Für Ionen ist die Driftlänge mit einem Faktor  $\mu_{\text{Ion}}/\mu_e \approx 1/250$  zu versehen (Abschnitt 2.4.2), beträgt also nur etwa  $5 \mu\text{m}$ . Dies rechtfertigt die Näherung vernachlässigbarer Ionenbewegung im Volumen.

Für zeit- und ortsabhängige elektrische Felder ist eine numerische Lösung der Gleichung (2.11) zu suchen. Zahlreiche Algorithmen wurden zur kompressiblen Gasdynamik entwickelt mit besonderem Augenmerk auf der Behandlung von Stoß- und Kontaktfronten. Übersichten und Vergleiche enthalten z. B. [WOODWARD84, ZALESK87, FLETCHER91, YANG92].

Die Übertragung von sogenannten *shock-capturing*-Verfahren, die Unstetigkeiten über mehrere Gitterpunkte verschmieren, auf die hier vorliegende Si-

tuation ist möglich und vorteilhaft. Zwar treten keine Stoßwellen auf, doch ist mit sehr steilen Gradienten der Elektronendichte über einen großen Dynamikbereich in Raumladungsschichten zu rechnen. Diese Arbeit verwendet eine flußkorrigierte Transporttechnik in der Variante nach Kunhardt und Wu [KUNHARDT87]. Vor der Beschreibung der Rechenvorschriften werden die Grundideen anhand einfacherer Verfahren eingeführt.

### 2.3.1.1 Flüsse

Gleichung (2.9) gibt die differentielle Form des Erhaltungssatzes für die Elektronen im Entladungsvolumen an.

$$\vec{f} = n \cdot \vec{v} \quad (2.15)$$

ist die *Teilchenstromdichte* der Elektronen, sie wird in diesem Unterkapitel der numerischen Literatur folgend als *Fluß* bezeichnet. Integration der umgeschriebenen Gleichung (2.9)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{f} \quad (2.16)$$

über ein Kontrollvolumen  $\Omega_{i,j}$  um den Punkt  $(i, j)$  mit der Ausdehnung  $i - 1/2$  bis  $i + 1/2$  und  $j - 1/2$  bis  $j + 1/2$  in den Zeiten von  $t$  bis  $t + \Delta t$  liefert die Differenzgleichung in Flußform [ORAN87, REALE90]

$$n_{i,j}^{t+\Delta t} = n_{i,j}^t - \frac{\Delta t}{\Omega_{i,j}} \left( F_{r_{i+\frac{1}{2},j}} - F_{r_{i-\frac{1}{2},j}} \right) - \frac{\Delta t}{\Omega_{i,j}} \left( F_{z_{i,j+\frac{1}{2}}} - F_{z_{i,j-\frac{1}{2}}} \right) \quad (2.17)$$

$$F_{r_{i+\frac{1}{2},j}} = \frac{\Lambda_{r_{i+\frac{1}{2},j}}}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f_{r_{i+\frac{1}{2},j}}(t') dt' \quad (2.18)$$

$$F_{z_{i,j+\frac{1}{2}}} = \frac{\Lambda_{z_{i,j+\frac{1}{2}}}}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f_{z_{i,j+\frac{1}{2}}}(t') dt'. \quad (2.19)$$

$n_{i,j}$  findet hier die Interpretation einer mittleren Dichte in der Zelle um den Punkt  $(i, j)$ .  $f_{r_{i+\frac{1}{2},j}}$  und  $f_{z_{i,j+\frac{1}{2}}}$  sind die Flüsse in radialer und axialer Richtung an den jeweiligen Zellgrenzen. Die sogenannten *transportiven Flüsse*  $F_{r_{i+\frac{1}{2},j}}$  und  $F_{z_{i,j+\frac{1}{2}}}$  sind die mit einem Geometriefaktor gewichteten Flüsse aus der Zelle um  $(i, j)$  über die Grenze zur Nachbarzelle. Es handelt sich um Funktionen der Flüsse  $f_{r_{i,j}}$  bzw.  $f_{z_{i,j}}$  auf den Gitterpunkten zu einem oder

mehreren Zeitpunkten, die genaue Abhängigkeit legt das Differenzenverfahren fest.

$\Omega_{i,j}$  ist das Volumenelement um den Punkt  $(i, j)$ .  $\Lambda_{r_{i+\frac{1}{2}},j}$  bezeichnet die Querschnittsfläche, die der Fluß an der Zellgrenze in radialer Richtung als Normale durchquert,  $\Lambda_{z_{i,j+\frac{1}{2}}}$  gilt entsprechend für den axialen Fluß. Als orthogonales Basissystem werden hier Zylinderkoordinaten benutzt, dann ist

$$\Omega_{i,j} = \pi \left( (r_{i+\frac{1}{2}})^2 - (r_{i-\frac{1}{2}})^2 \right) \Delta z = 2\pi r \Delta r \Delta z \quad \text{für } i > 0 \quad (2.20)$$

$$\Omega_{0,j} = \pi \left( \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \Delta z \quad (2.21)$$

$$\Lambda_{z_{i,j+\frac{1}{2}}} = \pi \left( (r_{i+\frac{1}{2}})^2 - (r_{i-\frac{1}{2}})^2 \right) = 2\pi r \Delta r \quad \text{für } i > 0 \quad (2.22)$$

$$\Lambda_{z_{0,j+\frac{1}{2}}} = \pi \left( \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \quad (2.23)$$

$$\Lambda_{r_{i+\frac{1}{2}},j} = 2\pi r_{i+\frac{1}{2}} \Delta z. \quad (2.24)$$

Gleichung (2.17) entnimmt man, daß ein transportiver Fluß von einer Zelle in eine benachbarte ausgeglichen wird durch einen bis auf das Vorzeichen identischen Fluß in Gegenrichtung. Gewinne und Verluste halten sich mit Ausnahme von Randflüssen exakt die Waage. Das Differenzenschema erfüllt den Erhaltungssatz der Differentialgleichung, man nennt es daher ein *kon-servatives* Verfahren. Dies gilt unabhängig von der Wahl der funktionalen Abhängigkeit  $F(f)$ .

Die Behandlung der Zweidimensionalität erfolgt mit einem Time-Splitting-Verfahren, in dem beide Ortskoordinaten getrennt berechnet werden (Abschnitt 2.3.6). Die weitere Diskussion der Algorithmen beschränkt sich in diesem Abschnitt auf den eindimensionalen Fall. Dargestellt werden Formeln für die axiale Komponente. Die in den nächsten Unterabschnitten behandelten Differenzenverfahren sind folglich von der Art

$$n_j^{t+\Delta t} = n_j^t - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right). \quad (2.25)$$

Der Geometriefaktor  $\Lambda$  ist zur Vereinfachung der Schreibweise aus den transportiven Flüssen vor die Klammer gezogen worden. Formeln für die radiale Koordinate sind mit den Gleichungen (2.17)–(2.24) zu gewinnen.

### 2.3.1.2 Lineare Verfahren

Ein einfaches Verfahren zur Berechnung der Flüsse entsteht durch Anwendung des vorderen Differenzenquotienten, auch *Donor-Cell*-Verfahren genannt, z. B. in [ORAN87, KUNHARDT87]:

$$F_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} v_{j+\frac{1}{2}}^t n_j^t & \text{für } v_{j+\frac{1}{2}}^t \geq 0 \\ v_{j+\frac{1}{2}}^t n_{j+1}^t & \text{für } v_{j+\frac{1}{2}}^t < 0 \end{cases} \quad \text{mit } v_{j+\frac{1}{2}}^t = \frac{v_j^t + v_{j+1}^t}{2}. \quad (2.26)$$

Die Richtung der Geschwindigkeit bestimmt, aus welcher Zelle Teilchen abfließen. Dieses Verfahren ist explizit und von erster Ordnung in Raum und Zeit, es ist stabil für Zeitschrittweiten

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{\max_j |v_{j+\frac{1}{2}}^t|} \quad (2.27)$$

oder mit der *Courantzahl*  $C$

$$C = \max_j |v_{j+\frac{1}{2}}^t| \frac{\Delta t}{\Delta z} \leq 1. \quad (2.28)$$

Dies ist die Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Bedingung, die sich aus Gleichung (2.14) erklärt: die Zeit für Materietransport über einen Gitterpunktabstand muß über der Zeitschrittweite liegen. Anders formuliert darf das Abhängigkeitsgebiet der Differenzgleichung für einen Punkt nicht kleiner als das der zugrundeliegenden Differentialgleichung sein.

Während die analytische Lösung eine einfache Translation vorgibt, kann Donor-Cell diese zwar nachvollziehen, doch wird das ehemals rechteckige Profil extrem breit verschmiert. Eine starke unphysikalische, durch den numerischen Algorithmus bedingte, Diffusion ist für stabile Verfahren erster Ordnung nicht zu vermeiden [POTTER73]

Donor-Cell ist das am wenigsten diffusive lineare Schema, das noch monoton ist. Es reproduziert eine weitere Eigenschaft der Differentialgleichung (2.16), die Positivität. Sie besagt, daß eine Lösung nirgends negativ werden kann, wenn sie im gesamten Bereich positiv war. Erkauft werden diese wichtigen Qualitäten mit einer erheblichen numerischen Diffusion.

Zur genaueren Behandlung steiler Dichtegradienten liegt es nahe, auf Sche-

mata höherer Ordnung umzusteigen, etwa auf das Lax-Wendroff-Verfahren.

Zwar werden die Flanken tatsächlich etwas besser beschrieben, doch geht auch hier eine Rechteckform verloren. Am Rand der Flanken zeigen sich Dispersionsfehler in Oszillationen, die zu einem Vorzeichenwechsel der Dichte führen [POTTER73]. *Geht man mit diesen negativen Elektronendichten in die Lösung anderer Programmteile wie der Reaktionskinetik oder des Raumladungsfeldes ein, sind katastrophale Folgen zu befürchten.*

### 2.3.1.3 Flux-Corrected-Transport nach Zalesak

Einer möglichst genauen Lösung der Konvektionsgleichung (2.11) kommt für das Gesamtprogramm entscheidende Bedeutung zu. Kleine Fehler in der Ermittlung der Elektronendichte verfälschen die Raumladung und damit das Raumladungsfeld. Da die Ionisationsrate exponentiell vom lokalen elektrischen Feld abhängt, können nachfolgende Berechnungen der Elektronendichte große Fehler aufweisen. Überschwinger in der Dichte sind unbedingt zu vermeiden.

Steile Gradienten werden bei Benutzung von Differenzen erster Ordnung durch numerische Diffusion abgeflacht, Verfahren höherer Ordnung entwickeln dort Oszillationen oder erfordern die Einführung einer zusätzlichen numerischen Diffusion. Die Forderungen nach Positivität und Genauigkeit scheinen sich gegenseitig auszuschließen. Das Dilemma läßt sich auflösen, wenn man auf die Linearität des Verfahrens verzichtet. Bei flachem Verlauf der zu bestimmenden Größe kann die gute Genauigkeit von Verfahren hoher Ordnung und niedriger numerischer Diffusion genutzt werden, an steilen Gradienten muß auf ein diffusiveres Verfahren zurückgegriffen werden, das ein Entstehen von Oszillationen verhindert und eine monotone Lösung garantiert.

Berechnet wird eine Linearkombination der Flüsse niedriger und hoher Ordnung an jeder Zellgrenze mit Wichtungsfaktoren, die nichtlineare Funktionen der lokalen Bedingungen sind. Entscheidendes Kriterium ist es, das Auftreten unphysikalischer neuer Extrema in der Lösung zu verhindern. Die Kombination der Verfahren geschieht anhand der Flüsse, um die Erhaltungseigenschaft der Differentialgleichung in der Differenzengleichung beibehalten zu können; so begründet sich der Name *flußkorrigierter Transport* (englisch:

*flux-corrected transport*, FCT).

Das Verfahren niedriger Ordnung kontrolliert gewissermaßen das Verfahren hoher Ordnung, indem es angibt, welchen Eigenschaften jener Lösung Glauben zu schenken ist. Das zusammengesetzte Verfahren reproduziert steile Gradienten, aber es ist in seinem Auflösungsvermögen durch das Verfahren niedriger Ordnung begrenzt, was sich bei der Wechselwirkung von Fronten steiler Gradienten unangenehm bemerkbar machen kann [WOODWARD84].

Das erste FCT-Verfahren wurde zwischen 1973 und 1976 von Boris, Book und Hain [BORIS73, BOOK75, BORIS76] veröffentlicht in Form einer Antidiffusionsoperation, die als Korrektor übermäßige Diffusion eines Prädiktors beseitigt. 1979 flexibilisierte Zalesak [ZALESAK79] den Ansatz mit der Beschreibung als gewichteter Kreuzung zweier Verfahren zu einer ganzen Klasse verwandter Algorithmen [YANG92]. Kunhardt und Wu erweiterten die Rechenvorschrift 1987 [KUNHARDT87] mit dem Ziel einer höheren Genauigkeit, ihrem Vorgehen soll hier gefolgt werden.

Das Verfahren gliedert sich in sechs von Zalesak definierte Schritte:

1. Berechne die transportiven Flüsse mit einem monotonen Verfahren niedriger Ordnung ( $L$ : low order)

$$F_{j+\frac{1}{2}}^L.$$

2. Berechne die Dichte zum neuen Zeitpunkt mit den Flüssen des monotonen Verfahrens

$$n_j^L = n_j^t - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( F_{j+\frac{1}{2}}^L - F_{j-\frac{1}{2}}^L \right). \quad (2.29)$$

3. Berechne die transportiven Flüsse mit einem dispersiven Verfahren hoher Ordnung ( $H$ : high order)

$$F_{j+\frac{1}{2}}^H.$$

4. Definiere die *antidiffusiven Flüsse*

$$F_{j+\frac{1}{2}}^A = F_{j+\frac{1}{2}}^H - F_{j+\frac{1}{2}}^L. \quad (2.30)$$

5. Begrenze die antidiffusiven Flüsse

$$F_{j+\frac{1}{2}}^C = C_{j+\frac{1}{2}} F_{j+\frac{1}{2}}^A, \quad 0 \leq C_{j+\frac{1}{2}} \leq 1. \quad (2.31)$$

6. Wende die begrenzten antidiffusiven Flüsse auf die Lösung niedriger Ordnung an

$$n_j^{t+\Delta t} = n_j^L - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( F_{j+\frac{1}{2}}^C - F_{j-\frac{1}{2}}^C \right). \quad (2.32)$$

Die Wahl der Verfahren niedriger und hoher Ordnung in Punkt 1 und 3 sowie die Spezifikation der Flußbegrenzung in Punkt 5 charakterisiert das jeweilige FCT-Verfahren. Der kritische Schritt ist der fünfte. In ihm wird gesichert, daß Schritt 6 nur soviel an übermäßig diffusivem Fluß rückgängig macht, daß kein Extremum in der Dichte entsteht, welches nicht bereits in der Lösung zum alten Zeitpunkt oder in der Dichte aus dem Verfahren niedriger Ordnung enthalten ist.

Die transportiven Flüsse des Gesamtverfahrens tauchen im Algorithmus nicht explizit auf, sie lassen sich angeben zu

$$F_{j+\frac{1}{2}} = C_{j+\frac{1}{2}} F_{j+\frac{1}{2}}^H + (1 - C_{j+\frac{1}{2}}) F_{j+\frac{1}{2}}^L. \quad (2.33)$$

An dieser Gleichung wird die Interpretation der  $C_{j+\frac{1}{2}}$  als Wichtungsfaktoren deutlich. In den Grenzfällen  $C_{j+\frac{1}{2}} = 0$  und  $C_{j+\frac{1}{2}} = 1$  enthält die Lösung nur den Anteil des Verfahrens niedriger bzw. hoher Ordnung.

Im weiteren wird das Rezept zur Bestimmung der  $C_{j+\frac{1}{2}}$  angegeben, zuvor jedoch erfolgt die Betrachtung eines Sonderfalls.

$$\text{Falls zugleich } F_{j+\frac{1}{2}}^A (n_{j+1}^L - n_j^L) < 0 \quad (2.34)$$

$$\text{und } F_{j+\frac{1}{2}}^A (n_{j+2}^L - n_{j+1}^L) < 0 \quad (2.35)$$

$$\text{oder } F_{j+\frac{1}{2}}^A (n_j^L - n_{j-1}^L) < 0 \quad (2.36)$$

$$\text{dann } F_{j+\frac{1}{2}}^A = 0. \quad (2.37)$$

$F_{j+\frac{1}{2}}^A$  gibt den antidiffusiven Fluß aus der Zelle  $j$  in die Zelle  $j+1$  an, also den Fluß, der die Dichte des Verfahrens niedriger gemäß dem hoher Ordnung von der übermäßigen Diffusion befreit. Das angegebene Kriterium verlangt, an-

antidiffusive Flüsse zu unterdrücken, falls sie die Steigung einer kontinuierlich ansteigenden oder fallenden Dichte mindern würden. Antidiffusive Flüsse werden also nur angewandt, wenn sie das Dichteprofil aufsteilen. Das Kriterium (2.34)–(2.37) ist vor Gleichung (2.31) auszuwerten.

Es werden nun je drei Größen für den Fluß in die Zelle  $j$  hinein (Index  $+$ ) und aus ihr heraus (Index  $-$ ) definiert. Die Summe aller antidiffusiven Flüsse in die Zelle  $j$  ist

$$P_j^+ = \max(0, F_{j-\frac{1}{2}}^A) - \min(0, F_{j+\frac{1}{2}}^A) \quad (2.38)$$

und aus  $j$  heraus

$$P_j^- = \max(0, F_{j+\frac{1}{2}}^A) - \min(0, F_{j-\frac{1}{2}}^A). \quad (2.39)$$

Seien  $n_j^{\max}$  und  $n_j^{\min}$  die noch zu bestimmende höchste und niedrigste tolerierbare Dichte in der Zelle  $j$  zum neuen Zeitpunkt, dann lassen sich die maximal hinnehmbaren antidiffusiven Flüsse in die Zelle und aus ihr heraus definieren zu

$$Q_j^+ = \frac{\Delta z}{\Delta t} (n_j^{\max} - n_j^L) \quad (2.40)$$

und

$$Q_j^- = \frac{\Delta z}{\Delta t} (n_j^L - n_j^{\min}). \quad (2.41)$$

Es ist  $n_j^{\min} \leq n_j^L \leq n_j^{\max}$  zu gewährleisten, so daß die Flüsse  $Q_j^+$  und  $Q_j^-$  nichtnegativ sind.

Der maximal zu erlaubende Bruchteil des antidiffusiven Flusses in die Zelle  $j$  beträgt somit

$$R_j^+ = \begin{cases} \min\left(1, \frac{Q_j^+}{P_j^+}\right) & \text{für } P_j^+ > 0 \\ 0 & \text{für } P_j^+ = 0 \end{cases} \quad (2.42)$$

und aus  $j$  heraus

$$R_j^- = \begin{cases} \min\left(1, \frac{Q_j^-}{P_j^-}\right) & \text{für } P_j^- > 0 \\ 0 & \text{für } P_j^- = 0. \end{cases} \quad (2.43)$$

Unbegrenzter antidiffusiver Fluß verläßt eine Zelle und könnte dort eine zu niedrige Dichte verursachen. Er tritt in eine Nachbarzelle ein und ist dort gegebenenfalls für eine zu hohe Dichte verantwortlich. Um sowohl Über- als auch Unterschwinger der Dichte zu vermeiden, ist nur der kleinste der beiden möglichen antidiffusiven Flüsse durch die Zellgrenze  $j+1/2$  zu berücksichtigen. Die  $C_{j+1/2}$  werden daher berechnet als

$$C_{j+1/2} = \begin{cases} \min(R_{j+1}^+, R_j^-) & \text{für } F_{j+1/2}^A \geq 0 \\ \min(R_j^+, R_{j+1}^-) & \text{für } F_{j+1/2}^A < 0. \end{cases} \quad (2.44)$$

Der entscheidende Schritt zur Flußbegrenzung, die Bestimmung der  $n_j^{\max}$  und  $n_j^{\min}$ , steht noch aus. [BORIS73] schlägt vor, die Dichte zur neuen Zeit am Punkt  $j$  durch die Dichte der diffusiven Lösung niedriger Ordnung zur neuen Zeit in  $j$  und den beiden Nachbarpunkten zu beschränken:

$$n_j^{\max} = \max(n_{j-1}^L, n_j^L, n_{j+1}^L) \quad (2.45)$$

$$n_j^{\min} = \min(n_{j-1}^L, n_j^L, n_{j+1}^L). \quad (2.46)$$

Diese Wahl ist einfach und wirksam, aber zu restriktiv, sie führt unter anderem zum Abschneiden spitzer Dichteprofile [ZALESAK79]. Letztgenannte Arbeit zieht zur Begrenzung der Dichte zum neuen Zeitpunkt zusätzlich die Dichte zum alten Zeitpunkt mit heran:

$$n_j^a = \max(n_j^t, n_j^L) \quad (2.47)$$

$$n_j^{\max} = \max(n_{j-1}^a, n_j^a, n_{j+1}^a) \quad (2.48)$$

$$n_j^b = \min(n_j^t, n_j^L) \quad (2.49)$$

$$n_j^{\min} = \min(n_{j-1}^b, n_j^b, n_{j+1}^b). \quad (2.50)$$

Damit sind die Rechenvorschriften zur Flußkorrektur komplett.

Um einen FCT-Algorithmus vollständig zu charakterisieren, sind noch die Verfahren niedriger und hoher Ordnung zu spezifizieren. [BORIS73] ver-

wendet Donor-Cell und ein auf Lax-Wendroff zweiter Ordnung basierendes Verfahren. [ZALESAK79] benutzt Donor-Cell mit einem zusätzlichen numerischen Diffusionsterm und als Verfahren hoher Ordnung einen Leapfrog-Trapezoidal-Algorithmus vierter oder sogar achter Ordnung in den räumlichen Ableitungen (siehe auch [ZALESAK84]) und zweiter Ordnung in der Zeit.

Die Nichtlinearität der Flußkorrektur macht es schwierig, Eigenschaften des Gesamtverfahrens anzugeben. Die explizite Zeitdiskretisierung impliziert eine obere Grenze der Zeitschrittweite, [BORIS73] schlägt vor, die Courantzahl kleiner  $1/2$  zu wählen, d. h.:

$$\Delta t \leq 0,5 \cdot \frac{\Delta z}{\max_j |v_{j+\frac{1}{2}}|}, \quad (2.51)$$

so daß der Fluß durch eine Zellgrenze nur von der Dichte und Geschwindigkeit in den beiden benachbarten Gitterpunkten abhängt. [YANG92] erwähnt ein geringfügig strengeres Kriterium, empfiehlt

$$\Delta t \lesssim 0,4 \cdot \frac{\Delta z}{\max_j |v_{j+\frac{1}{2}}|} \quad (2.52)$$

und gibt an, daß eine weitere Verringerung der Zeitschrittweite keine signifikante Verbesserung der Genauigkeit bewirkt.

Eine konvektierte Rechteckform bleibt im wesentlichen erhalten, Flanken werden nur über wenige Punkte verschmiert, und die Dichte ist an jedem Ort positiv. Jedoch tritt ein neues Problem auf, steile Flanken werden durch mehrere Stufen unterbrochen. Der Grund ist, daß die Flüsse hoher Ordnung dazu tendieren, Flanken aufzusteilen und die Flußbegrenzung in den Gleichungen (2.45)–(2.46) bzw. (2.47)–(2.50) dies erlaubt, bis die Dichte in einem Punkt die des Nachbarpunktes erreicht hat, so kann sich ein Plateau bilden.

Die Algorithmen von [BORIS93] und [ZALESAK79] wurden für die Berechnungen dieser Arbeit isoliert und im Zusammenspiel mit der Lösung des Gleichungssystems (2.1)–(2.8) getestet. Dabei erwies sich die Wechselwirkung mit der Lösung der Reaktionskinetik und der Poissongleichung als kritisch. Insbesondere in der Nähe steiler Gradienten kam es zu unüberwindlichen numerischen Schwierigkeiten. Offenbar stellt die Lösung des vollständigen

Gleichungssysteme höhere Anforderungen an die Genauigkeit der Konvektionsberechnung, als sie die bisher vorgestellten Verfahren befriedigen können.

#### 2.3.1.4 Flux-Corrected-Transport nach Kunhardt et al.

Im folgenden wird eine Weiterentwicklung des Algorithmus von Zalesak in Hinblick auf die Behandlung steiler Gradienten aus dem Jahre 1987 wiedergegeben [KUNHARDT87]. Die Autoren stellen fest, daß das entscheidende Problem in der numerischen Lösung von Gleichung (2.16) die korrekte Berechnung der Flüsse an den Zellgrenzen ist. Ihre Verbesserungsvorschläge lauten:

- Die Dichte und Geschwindigkeit an der Zellgrenze sollten unabhängig voneinander interpoliert und erst dann das Produkt genommen werden.
- Die Interpolation der Dichte und Geschwindigkeit an der Zellgrenze sollte nicht an den Größen selbst, sondern an Funktionen dieser Größen durchgeführt werden, die bei steilen Gradienten langsamer in Raum und Zeit variieren.
- Dichte und Geschwindigkeit sollten innerhalb einer Zelle als variabel angesehen werden. So ist zwischen der mittleren Dichte in der Zelle und der Dichte der Zellmitte zu unterscheiden.
- Die maximal und minimal zulässige Dichte in den Gleichungen (2.45), (2.46) bzw. (2.47)–(2.50) wird unter anderem aus den Dichten der Nachbarpunkte bestimmt. Angesichts der laut Gleichung (2.51) höchsten Geschwindigkeit von  $\Delta z / (2 \Delta t)$  sind diese aber doppelt so weit entfernt wie nötig, um möglichst enge Schranken vorzugeben. Die Flußbegrenzung im Punkt  $j$  sollte daher nur mit Dichten an den Stellen  $j - 1/2$ ,  $j$  und  $j + 1/2$  erfolgen.

Statt der Elektronendichte, die zwischen zwei Gitterpunkten stark variieren kann, wird ihr natürlicher Logarithmus interpoliert. Das ist gleichbedeutend mit der Annahme räumlich exponentiell steigender bzw. fallender Elektronendichte. Um Schwierigkeiten bei einer Dichte 0 zu vermeiden, wird  $\ln(1 + n')$  verwendet.  $n' = n/n_0$  ist die entdimensionierte Teilchendichte mit einem Skalenfaktor, der in dieser Arbeit zu  $n_0 = 1 \text{ cm}^{-3}$  gesetzt ist. Aus einer Entwicklung von  $\ln(1 + n')$  in eine Umgebung  $\delta z$  um  $z_j$  bis zum linearen

Glied

$$\ln\left(1 + n'(z_j + \delta z)\right) = \ln(1 + n'_j) + a_j \delta z + \dots \quad \text{mit } n'_j = n'(z_j) \quad (2.53)$$

folgt die Interpolationsformel:

$$n'(z_j + \delta z) = (1 + n'_j) e^{a_j \delta z} - 1. \quad (2.54)$$

Mit  $\delta z = \Delta z$  ergibt sich eine Berechnungsvorschrift für den Exponentialfaktor:

$$a_j = \frac{\ln(1 + n'_{j+1}) - \ln(1 + n'_j)}{\Delta z}. \quad (2.55)$$

Aus diesen Gleichungen läßt sich mit  $\delta z = \Delta z/2$  eine Dichte an der Grenze  $j + 1/2$  der Zellen  $j$  und  $j + 1$  bestimmen und damit, wie gefordert, die obere und untere Schranke der Dichte  $n_j^{t+\Delta t}$  eingrenzen. [KUNHARDT87] gibt an:

$$n_j^{\max} = \max\left(n_{j-\frac{1}{2}}^t, n_j^t, n_j^L, n_{j+\frac{1}{2}}^t\right) \quad (2.56)$$

$$n_j^{\min} = \min\left(n_{j-\frac{1}{2}}^t, n_j^t, n_j^L, n_{j+\frac{1}{2}}^t\right) \quad (2.57)$$

Auch die Geschwindigkeit kann sich zwischen zwei Gitterpunkten stark ändern und soll exponentiell interpoliert werden. Da sie positive und negative Werte annehmen kann, ist eine Fallunterscheidung vorzunehmen. Angestrebt wird eine Interpolation zwischen den Punkten  $j$  und  $j + 1$ . Haben beide Geschwindigkeiten das gleiche Vorzeichen, entwickelt man den Ausdruck  $\ln(1 + |v'|)$  um den Punkt  $j$ , ist  $v'_j$  positiv oder Null und  $v'_{j+1}$  negativ, nimmt man  $\ln(1 + v' - 2v'_{j+1})$  und im umgekehrten Fall  $\ln(1 + v' + 2v'_j)$ . Diese Wahl stellt sicher, daß im untersuchten Intervall stets der Logarithmus einer positiven Größe genommen wird.  $v' = v/v_0$  ist die entdimensionierte Geschwindigkeit mit einem Skalenfaktor, der zu  $v_0 = 1 \text{ cm/s}$  angenommen wird. Es resultiert die Interpolationsformel:

$$v'(z_j + \delta z) = S\left((1 + |v'_j| + 2S_2 |v'_{j+1}|) e^{b_j \delta z} - 1 - 2S_1 |v'_j| - 2S_2 |v'_{j+1}| \right) \quad (2.58)$$

mit

$$b_j = \frac{\ln(1 + |v'_{j+1}| + 2S_1 |v'_j|) - \ln(1 + |v'_j| + 2S_2 |v'_{j+1}|)}{\Delta z} \quad (2.59)$$

und den vier möglichen Fällen

$$\begin{aligned} S_1 = 0, \quad S_2 = 0, \quad S = 1 & \quad \text{für } v'_j \geq 0, \quad v'_{j+1} \geq 0 \\ S_1 = 0, \quad S_2 = 0, \quad S = -1 & \quad \text{für } v'_j < 0, \quad v'_{j+1} < 0 \\ S_1 = 0, \quad S_2 = 1, \quad S = 1 & \quad \text{für } v'_j \geq 0, \quad v'_{j+1} < 0 \\ S_1 = 1, \quad S_2 = 0, \quad S = 1 & \quad \text{für } v'_j < 0, \quad v'_{j+1} \geq 0. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Mit  $\delta z = \Delta z/2$  läßt sich die Geschwindigkeit an der Zellgrenze ermitteln und für das Donor-Cell-Verfahren in Gleichung (2.26) benutzen. Die resultierende Formel wird in dieser Arbeit zur Berechnung der Flüsse niedriger Ordnung eingesetzt:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^L = \begin{cases} v_{j+\frac{1}{2}}^t n_j^t & \text{für } v_{j+\frac{1}{2}}^t \geq 0 \\ v_{j+\frac{1}{2}}^t n_{j+1}^t & \text{für } v_{j+\frac{1}{2}}^t < 0 \end{cases} \quad \text{mit } v_{j+\frac{1}{2}}^t = v_0 v'(z_j + \frac{\Delta z}{2}, t). \quad (2.61)$$

Das Verfahren hoher Ordnung entstammt ebenfalls [KUNHARDT87], die Autoren geben allerdings Formeln nur für den Fall positiver Geschwindigkeiten an. Zwar sind negative Geschwindigkeiten in den Berechnungen eher selten, doch sind auch sie zu berücksichtigen. Den Hinweisen der Autoren folgend werden nun die Rechenvorschriften für alle in (2.60) definierten Fälle hergeleitet.

Grundlage des Verfahrens hoher Ordnung sind die gezeigten Interpolationsformeln.  $n_j$  und  $v_j$  werden interpretiert als Mittelwert der Größen in einer Zelle zwischen  $j - 1/2$  und  $j + 1/2$ . Bei steilen Gradienten sind sie von den Werten  $n_j^c$  und  $v_j^c$  im Zentrum der Zelle zu unterscheiden. In Gleichung (2.54) wird dann  $n'_j$  durch  $n_j^{c'}$  ersetzt. Unterläßt man diese Anpassung bei der Berechnung der  $a_j$  in Gleichung (2.55) und extrapoliert Gleichung (2.54) in den Bereich von  $j - 1/2$  bis  $j$ , folgt:

$$\begin{aligned} n'_j &= \frac{1}{\Delta z} \int_{-\frac{\Delta z}{2}}^{\frac{\Delta z}{2}} n'(z_j + \delta z) d(\delta z) \\ &\approx \frac{1}{\Delta z} \int_{-\frac{\Delta z}{2}}^{\frac{\Delta z}{2}} \left( (1 + n_j^{c'}) e^{a_j \delta z} - 1 \right) d(\delta z) \end{aligned}$$

$$= (1 + n_j^{c'}) \frac{\sinh\left(a_j \frac{\Delta z}{2}\right)}{a_j \frac{\Delta z}{2}} - 1,$$

und die Dichte in Zellmitte ergibt sich zu:

$$n_j^{c'} = \begin{cases} (1 + n_j') \frac{a_j \frac{\Delta z}{2}}{\sinh\left(a_j \frac{\Delta z}{2}\right)} - 1 & \text{für } a_j \neq 0 \\ n_j' & \text{für } a_j = 0. \end{cases} \quad (2.62)$$

Eine ähnliche Herleitung ist für  $v_j^{c'}$  möglich unter der Annahme, daß  $v_j^{c'}$  das Vorzeichen von  $v_j'$  besitzt und mit  $v_{j+1}^{c'} = v_{j+1}'$ :

$$v_j^{c'} = \begin{cases} (1 - 2S_1) \frac{v_j' - (S + 2S_2 |v_{j+1}'|) \left( \frac{\sinh\left(b_j \frac{\Delta z}{2}\right)}{b_j \frac{\Delta z}{2}} - 1 \right)}{\frac{\sinh\left(b_j \frac{\Delta z}{2}\right)}{b_j \frac{\Delta z}{2}} - 2S_1} & \text{für } b_j \neq 0 \\ v_j' & \text{für } b_j = 0. \end{cases} \quad (2.63)$$

Die Fälle  $a_j = 0$  und  $b_j = 0$  lassen sich mit einer Grenzwertbildung behandeln, sie bedeuten gleiche Dichte bzw. Geschwindigkeit in zwei benachbarten Punkten. Damit ist die mittlere Dichte gleich der Dichte in der Zellmitte. [KUNHARDT87] empfiehlt, offenbar aus Rechenzeitgründen, bei kleinen Gradienten grundsätzlich diese Annahme und gibt als Kriterium für die Näherung  $n_{j+1}'/n_j' < 5$  oder  $n_{j+1}'/n_j' > 0,2$  und zugleich  $n_j', n_{j+1}' < 1$  sowie eine entsprechende Bedingung für die Geschwindigkeit an. In dieser Arbeit wird jedoch auf die angegebene Näherung bis zu einer willkürlichen Grenze verzichtet, denn an der Schwelle beider Berechnungsmethoden kam es zu numerischen Störungen.

Es soll nun der Teilchenfluß durch die Zellgrenze bei  $j + 1/2$  in der Zeitspanne  $\tau$  betrachtet werden. Sei  $z_j + z_\tau$  der Ort zur Zeit  $t$ , der am Zeitpunkt  $t + \tau$  die Position  $z_j + \Delta z/2$  erreicht, dann fließt genau die Materie zwischen  $z_j + z_\tau$  und  $z_j + \Delta z/2$  in die Zelle um  $j + 1$ . Nimmt man für diesen Raumbereich konstante Geschwindigkeit an, linearisiert die Exponentialfunktion und setzt  $v_j^{c'}$  für  $v_j'$ , folgt mit Gleichung (2.58):

$$\begin{aligned}
\frac{\frac{\Delta z}{2} - z_\tau}{\tau} &\approx v(z_j + z_\tau) \\
&\approx v_0 S \left( (1 + |v_j^{c'}| + 2S_2 |v'_{j+1}|) e^{b_j z_\tau} - 1 - 2S_1 |v_j^{c'}| - 2S_2 |v'_{j+1}| \right) \\
&\approx v_0 S \left( (1 + |v_j^{c'}| + 2S_2 |v'_{j+1}|) b_j z_\tau + (1 - 2S_1) |v_j^{c'}| \right).
\end{aligned}$$

Damit erhält man einen Ausdruck für die unbekannte Länge:

$$z_\tau = \frac{\frac{\Delta z}{2} - S(1 - 2S_1)v_0|v_j^{c'}|\tau}{1 + Sv_0b_j(1 + |v_j^{c'}| + 2S_2|v'_{j+1}|)\tau}. \quad (2.64)$$

Mit dieser Beziehung und Gleichung (2.54) läßt sich nun die Teilchenzahl pro Einheitsfläche angeben, die in der Zeitspanne  $\tau$  durch eine Zellgrenze strömt:

$$\begin{aligned}
\Delta N &\approx n_0 \int_{z_\tau}^{\frac{\Delta z}{2}} \left( (1 + n_j^{c'}) e^{a_j \delta z} - 1 \right) d(\delta z) \\
&= \begin{cases} n_0 \left( (1 + n_j^{c'}) \frac{e^{a_j \frac{\Delta z}{2}} - e^{a_j z_\tau}}{a_j} - \frac{\Delta z}{2} + z_\tau \right) & \text{für } a_j \neq 0 \\ n_0 n_j^{c'} \left( \frac{\Delta z}{2} - z_\tau \right) & \text{für } a_j = 0. \end{cases}
\end{aligned}$$

Es folgt direkt die Formel zur Berechnung von Flüssen hoher Ordnung:

$$F_{j+\frac{1}{2}}(n_j^{c'}, v_j^{c'}) = \begin{cases} \frac{n_0}{\tau} \left( (1 + n_j^{c'}) \frac{e^{a_j \frac{\Delta z}{2}} - e^{a_j z_\tau}}{a_j} - \frac{\Delta z}{2} + z_\tau \right) & \text{für } a_j \neq 0 \\ \frac{n_0 n_j^{c'}}{\tau} \left( \frac{\Delta z}{2} - z_\tau \right) & \text{für } a_j = 0. \end{cases} \quad (2.65)$$

Der Begriff „hohe Ordnung“ ist irreführend, denn die gegenüber dem Verfahren niedriger Ordnung bezüglich der räumlichen Diskretisierung genauere Berechnung des Flusses an einer Zellgrenze wird hier nicht wie in [ZALESAK79] durch Einbeziehung der Flüsse einer größeren Zahl benachbarter Gitterpunkte erreicht, sondern mit einer aufwendigeren Interpolation zwischen lediglich zwei Punkten.

Genauigkeit von zweiter Ordnung in der Zeit wird nach einem Schema aus [KUNHARDT87] gewährleistet. Mit dem Fluß von Gleichung (2.65) läßt sich die Dichte zum halben Zeitschritt berechnen:

$$n_j^{t+\frac{\Delta t}{2}} = n_j^t - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( F_{j+\frac{1}{2}}(n_j^{c'}, v_j^{c'}) - F_{j-\frac{1}{2}}(n_j^{c'}, v_j^{c'}) \right). \quad (2.66)$$

Aus diesem Wert und der Dichte im Zentrum der Zelle zum Zeitpunkt  $t$  wird ein nichtnegativer Zwischenwert der Dichte bestimmt:

$$n_j^z = \max \left( \frac{n_j^{t+\frac{\Delta t}{2}} + n_j^c}{2}, 0 \right), \quad (2.67)$$

mit dessen Hilfe schließlich die transportiven Flüsse hoher Ordnung ermittelt werden, die in die Flußkorrektur eingehen:

$$F_{j+\frac{1}{2}}^H = F_{j+\frac{1}{2}}(n_j^z, v_j^{c'}). \quad (2.68)$$

Das verwendete Verfahren zur näherungsweise Berechnung der eindimensionalen Konvektionsgleichung (2.11) ist damit für innere Punkte vollständig beschrieben. Im Programm werden die aufgeführten Gleichungen in folgender Reihenfolge gelöst: (2.58)–(2.61), (2.29), (2.54)–(2.57), (2.62)–(2.68), (2.30), (2.34)–(2.44), (2.31) und (2.32).

Das von [ZALESAK79] entwickelte Verfahren zur Flußbegrenzung erlaubt eine direkte Erweiterung auf mehrere Dimensionen, die auch in der hier präsentierten modifizierten Fassung möglich ist. [KUNHARDT87] gibt jedoch an, daß die Anwendung auf zwei Dimensionen Überschwinger in der Dichte erzeugen kann, Erfahrungen im Rahmen dieser Arbeit bestätigen dies. Statt dessen wird ein Time-Splitting-Verfahren benutzt (Abschnitt 2.3.6).

Die Konvektionsgleichung stellt eine Anfangsrandwertaufgabe. Vorzugeben ist die Elektronendichte in Gleichung (2.10) an allen Gitterpunkten zu einem Zeitpunkt Null und für jeden Zeitpunkt an den Rändern des Rechengebietes. Ebenfalls vorausgesetzt wird zu jedem Zeitpunkt die Geschwindigkeit an allen Orten. Die Anfangsbedingung entspricht der Elektronenverteilung im Volumen zu Beginn der Entladung, sie wird durch die Vorionisation bestimmt. Es sind insgesamt vier Ränder zu betrachten, je zwei für die axiale und radiale Komponente.

Die Achse bei  $r = 0$  ist nur im mathematischen Sinne als Rand zu verstehen. Während dort in der Differentialgleichung (2.11) noch eine isolierte Singularität auftritt, weist sie die Diskretisierung (2.17)–(2.24) nicht mehr auf.

Die bei der Berechnung neuer Dichten auf der Achse in der konservativen Darstellung (2.17) auftretenden Flüsse aus einer Zelle mit negativer radialer Komponente werden zu Null gesetzt.

Am äußeren radialen Rand ist angenommen, daß die Dichte und Geschwindigkeit der Elektronen im ersten Ortsschritt außerhalb des Rechengebietes identisch mit denen am Rand sind. Damit ist gewährleistet, daß bei positiver Geschwindigkeit Elektronen das Entladungsvolumen verlassen können und bei negativer Geschwindigkeit durch eine konstante Elektronennachlieferung keine Störungen das Volumen beeinträchtigen.

An der Kathode werden Flüsse von der Elektrode ins Volumen betrachtet, aber nicht innerhalb der Kathode. Flüsse mit negativer axialer Komponente sind daher zu Null gesetzt. Sollte eine negative Geschwindigkeit auftreten, können Elektronen in die Kathode driften, für den üblichen Fall positiver Geschwindigkeiten ist an dieser Stelle kein Austrittsmechanismus von Elektronen vorgesehen (siehe Abschnitt 2.3.5).

Für den ersten Punkt außerhalb des Entladungsvolumens in der Anode wird eine Dichte von Null und eine Geschwindigkeit gleich der unmittelbar an der Anode angenommen. Damit können Elektronen ungestört in die Anode eindringen.

Zusammengefaßt lauten die Randbedingungen:

$$\begin{aligned}
 i = 0 & \quad (\text{innerer Rand}): & F_{r_{-\frac{1}{2},j}} &= 0 \\
 i = N_r & \quad (\text{äußerer Rand}): & n_{N_r+1,j} = n_{N_r,j}, & \quad v_{r_{N_r+1,j}} = v_{r_{N_r,j}} \\
 j = 0 & \quad (\text{Kathode}): & F_{z_{i,-\frac{1}{2}}} &= 0 \\
 j = N_z & \quad (\text{Anode}): & n_{i,N_z+1} = 0, & \quad v_{z_{i,N_z+1}} = v_{z_{i,N_z}}.
 \end{aligned} \tag{2.69}$$

Das Symbol  $F$  steht an dieser Stelle für alle Flüsse, die in der Rechenvorschrift auftreten, das betrifft die Gleichungen (2.29), (2.32), (2.38), (2.39) und (2.66).

Darüberhinaus ist eine Sonderbehandlung in den Gleichungen (2.34)–(2.37), (2.44), (2.56) und (2.57) erforderlich, es bleiben hier jeweils die Werte für außerhalb des Rechengebietes liegende Punkte unberücksichtigt.

### 2.3.2 Diffusion

Die Erhaltungsgleichung (2.1) enthält in Verbindung mit der Gleichung zur Teilchenstromdichte (2.4) einen Anteil, der für die Elektronenkomponente den diffusiven Transport infolge von Dichtegradienten beschreibt:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left( \hat{D}_e \cdot \vec{\nabla} n_e \right). \quad (2.70)$$

Ohne elektrisches Feld erfolgt die Diffusion isotrop, und der Diffusionskoeffizient  $\hat{D}_e$  ist eine skalare Konstante. In Gegenwart eines elektrischen Feldes jedoch wird die Diffusion anisotrop, und  $\hat{D}_e$  ist ein Tensor mit zwei Komponenten, einem longitudinalen Diffusionskoeffizienten  $D_L$  in Feldrichtung und einem transversalen Diffusionskoeffizienten  $D_T$  senkrecht dazu. Beide Komponenten sind abhängig von der reduzierten elektrischen Feldstärke  $E/N$ , wobei  $N$  die Gesamteilchendichte bezeichnet. In Zylindersymmetrie lautet Gleichung (2.70)

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( D_L \frac{\partial n_e}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_T \frac{\partial n_e}{\partial r} \right). \quad (2.71)$$

Die Diffusionsgleichung ist eine partielle Differentialgleichung vom parabolischen Typ, ihre numerische Lösung ist Gegenstand von Standardwerken, z. B. [POTTER73, PRESS95].

In dieser Arbeit erfolgt die Zeitintegration explizit mit der Eulerschen Methode, also Vorwärtsdifferenzen in der Zeit. Die räumlichen Ableitungen werden durch zentrale Differenzenquotienten genähert. [DHALI87] gibt im Rahmen eines ähnlichen numerischen Modells eine Formel für Zylinderkoordinaten an mit der Einschränkung, daß  $D_L$  und  $D_T$  als konstant angenommen werden. Eine Erweiterung auf variable Diffusionskoeffizienten ist z. B. in [ORAN87] beschrieben.

Die Rechenvorschrift läßt sich direkt aus der Diskretisierung der Diffusionsgleichung (2.71) gewinnen, für Gitterpunkte im Volumen erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{n_{e_{i,j}}^{t+\Delta t} - n_{e_{i,j}}^t}{\Delta t} = & \frac{1}{(\Delta z)^2} \left( D_{L_{i,j+\frac{1}{2}}}^t (n_{e_{i,j+1}}^t - n_{e_{i,j}}^t) \right. \\ & \left. - D_{L_{i,j-\frac{1}{2}}}^t (n_{e_{i,j}}^t - n_{e_{i,j-1}}^t) \right) \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{r_i} \frac{1}{(\Delta r)^2} \left( r_{i+\frac{1}{2}} D_{T_{i+\frac{1}{2},j}}^t (n_{e_{i+1,j}}^t - n_{e_{i,j}}^t) - r_{i-\frac{1}{2}} D_{T_{i-\frac{1}{2},j}}^t (n_{e_{i,j}}^t - n_{e_{i-1,j}}^t) \right), \quad (2.72)$$

mit dem arithmetischen Mittel für die Diffusionskoeffizienten an den Zellgrenzen

$$D_{L_{i,j+\frac{1}{2}}}^t = \frac{1}{2} (D_{L_{i,j}}^t + D_{L_{i,j+1}}^t) \quad (2.73)$$

$$D_{T_{i+\frac{1}{2},j}}^t = \frac{1}{2} (D_{T_{i,j}}^t + D_{T_{i+1,j}}^t). \quad (2.74)$$

Die Gleichung (2.72) läßt sich einfach nach der Elektronendichte zum neuen Zeitpunkt  $n_{e_{i,j}}^{t+\Delta t}$  auflösen. Auf der rechten Seite stehen nur bekannte Größen zum Zeitpunkt  $t$ , das Verfahren ist explizit.

An den Rändern sind spezielle Betrachtungen notwendig. Für die Kathode, Anode und den äußeren Rand bei  $r = R_H$  wird angenommen, daß die Diffusion der Elektronen einseitig in die Elektroden bzw. aus dem Entladungsvolumen heraus erfolgt. Gleichung (2.72) läßt sich formal auch an diesen drei Rändern verwenden, wenn man fiktive Punkte neben dem Rechengebiet einführt, die Elektronendichte dort zu Null setzt und das arithmetische Mittel des Diffusionskoeffizienten mit dem Wert am Rand belegt:

$$\begin{aligned} j = 0 \quad (\text{Kathode}): \quad & n_{e_{i,-1}}^t = 0, \quad D_{L_{i,-\frac{1}{2}}}^t = D_{L_{i,0}}^t \\ j = N_z - 1 \quad (\text{Anode}): \quad & n_{e_{i,N_z}}^t = 0, \quad D_{L_{i,N_z-\frac{1}{2}}}^t = D_{L_{i,N_z-1}}^t \\ i = N_r - 1 \quad (\text{äußerer Rand}): \quad & n_{e_{N_r,j}}^t = 0, \quad D_{T_{N_r-\frac{1}{2},j}}^t = D_{T_{N_r-1,j}}^t. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Für die radiale Diffusion an der Symmetrieachse ist wegen einer isolierten Singularität bei  $r = 0$  eine gesonderte Überlegung erforderlich. Anwendung der Produktregel auf Gleichung (2.71) liefert drei Terme:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = D_T \frac{1}{r} \frac{\partial n_e}{\partial r} + \underbrace{\frac{\partial D_T}{\partial r} \frac{\partial n_e}{\partial r}}_{=0 \text{ bei } r=0} + D_T \frac{\partial^2 n_e}{\partial r^2}. \quad (2.76)$$

Beide radialen Ableitungen im zweiten Term sind aus Symmetriegründen auf der Achse identisch Null, es bleiben der erste und dritte Term zur Diskretisierung. Die Elektronendichte wird durch eine Taylorentwicklung um  $r = 0$

bis zum zweiten Glied genähert:

$$n_e(r) = n_e \Big|_{r=0} + \underbrace{\frac{\partial n_e}{\partial r} \Big|_{r=0}}_{=0} r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n_e}{\partial r^2} \Big|_{r=0} r^2 + R_3(r). \quad (2.77)$$

Der lineare Term verschwindet aus Symmetriegründen. Wendet man diese Entwicklung auf den ersten Gitterpunkt neben der Achse an, erhält man eine Näherung für die zweite Ableitung

$$\frac{\partial^2 n_e}{\partial r^2} \Big|_{r=0} = 2 \frac{n_{e1,j} - n_{e0,j}}{(\Delta r)^2}. \quad (2.78)$$

Die Taylorentwicklung reduziert sich damit auf

$$n_e(r) = n_{e0,j} + \frac{n_{e1,j} - n_{e0,j}}{(\Delta r)^2} r^2. \quad (2.79)$$

Eingesetzt in Gleichung (2.76) wird die Singularität entfernt, und es ergibt sich als Ausdruck für die Diffusion von der bzw. zur Achse

$$\frac{n_{e0,j}^{t+\Delta t} - n_{e0,j}^t}{\Delta t} = 4D_{T\frac{1}{2},j} \frac{n_{e1,j}^t - n_{e0,j}^t}{(\Delta r)^2}. \quad (2.80)$$

Der Diffusionskoeffizient wird erneut an der Grenze der betrachteten Gitterzellen ausgewertet. Die axiale Diffusion auf der Achse läßt sich wie in Gleichung (2.72) diskretisieren, somit sind die Verfahrensformeln dieses Differenzschemas vollständig.

Das beschriebene Verfahren erfordert die Einhaltung eines Stabilitätskriteriums, das die Wahl der Zeitschrittweite begrenzt [PRESS95, NOYE82]

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta z)^2}{2 \max_{i,j} D_{L_{i,j+\frac{1}{2}}}}. \quad (2.81)$$

Ein analoges Kriterium besteht für die radiale Diffusion, ist in dieser Arbeit jedoch nicht relevant, da in allen Untersuchungen  $\Delta z \ll \Delta r$  gilt ( $D_L \approx D_T$ ).

Definiert man eine Diffusionszeit  $\tau_{\text{Diff}}$  einer Struktur mit Länge  $\lambda$  in einem Medium mit Diffusionskoeffizient  $D$  durch

$$\tau_{\text{Diff.}} \approx \frac{\lambda^2}{D}, \quad (2.82)$$

findet die Stabilitätsbedingung (2.81) eine physikalische Erklärung in der Forderung, daß die Zeitschrittweite kleiner als die Diffusionszeit über einen Gitterpunktabstand sein sollte.

Mit Gleichung (2.82) läßt sich die Bedeutung der Diffusion in den Berechnungen dieser Arbeit abschätzen. Unter der Annahme konstanter maximaler externer Feldstärke über die gesamte Entladungsdauer  $\tau_{\text{Entl.}}$  (Abschnitt 2.4.1) erhält man mit dem Diffusionskoeffizienten aus Abschnitt 2.4.2 für die größte Ausdehnung einer diffundierenden Struktur

$$\lambda = \sqrt{D \cdot \tau_{\text{Entl.}}} \lesssim \sqrt{0,24 \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \cdot 18 \text{ ns}} \approx 66 \mu\text{m}. \quad (2.83)$$

Diffusion spielt daher im Volumen der Entladung nur eine untergeordnete Rolle, auch ihre vollständige Abschaltung im Programm führt zu nahezu übereinstimmenden Ergebnissen. Im Kathodenfall (Kapitel 4) hingegen treten temporär kleinere Strukturen auf.

Das angegebene Verfahren ist von zweiter Ordnung in den räumlichen Ableitungen, aber nur erster Ordnung in der Zeitdiskretisierung. In fast allen Berechnungen liegt die Zeitschrittweite aufgrund strengerer Kriterien anderer Verfahren um Größenordnungen niedriger als in Bedingung (2.81) gefordert. Trotz der geringen zeitlichen Konvergenz ist somit eine ausreichende Genauigkeit der Berechnung gewährleistet.

Einen Sonderfall stellen die Rechenläufe zum Kathodenfall dar, in denen mit feiner räumlicher Auflösung gearbeitet werden muß. Hier kann die Stabilitätsbedingung (2.81) dominant werden, und es ist wünschenswert, nahe der Stabilitätsgrenze mit trotzdem guter Genauigkeit zu rechnen. An dieser Stelle kann man sich eine besondere Eigenschaft des beschriebenen Algorithmus zunutze machen. Für Zeitschrittweiten von einem Drittel des maximal erlaubten Wertes ist das Verfahren von zweiter Ordnung in der Zeit und vierter Ordnung bezüglich der räumlichen Koordinate [NOYE82], so daß als Kriterium

$$\Delta t \lesssim \frac{(\Delta z)^2}{6 \max_{i,j} D_{L_{i,j+\frac{1}{2}}}} \quad (2.84)$$

Verwendung findet.

Ein Nachteil des Verfahrens ist die quadratische Abhängigkeit der höchsten zeitlichen von der räumlichen Schrittweite. Wird die Zeitschrittweitensteuerung des Gesamtprogramms (Abschnitt 2.3.6) von der Stabilitätsbedingung zur Diffusion bestimmt, hat eine Halbierung der Ortsschrittweite eine Viertelung der Zeitschrittweite und damit eine Verachtfachung des Rechenaufwandes zur Folge.

Tests des implementierten Verfahrens sind auf verschiedene Weise möglich. Die Differenzengleichung reproduziert gewisse Eigenschaften der zugrundeliegenden Differentialgleichung, deren Einhaltung ein Kriterium für die korrekte Implementation ist: die diffundierende Teilchenzahl bleibt, bis auf Verluste an den Rändern, streng erhalten; Amplituden nehmen monoton ab; Phasenfehler entstehen nicht; Positivität der Dichten bleibt erhalten [ORAN87].

### 2.3.3 Reaktionskinetik

Veränderungen der Teilchenzahlen durch Stöße werden von den Quelltermen in den Kontinuitätsgleichungen (2.1)–(2.3) angegeben:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = (\alpha - \eta) |\vec{v}_e| n_e \quad (2.85)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \alpha |\vec{v}_e| n_e \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} = \eta |\vec{v}_e| n_e. \quad (2.87)$$

Ionisation durch Elektronenstoß an Neon und vorwiegend Xenon, beschrieben durch den Ionisierungskoeffizienten  $\alpha(E/N)$ , erhöht die Dichte der positiven Ionen, und Elektronenanlagerung an Chlorwasserstoff, beschrieben durch den Attachmentkoeffizienten  $\eta(E/N)$ , erhöht die Dichte der negativen Ionen. Die Elektronendichte verändert sich abhängig vom effektiven Ionisierungskoeffizienten  $\alpha(E/N) - \eta(E/N)$ , bei niedrigen Feldstärken überwiegt die Verminderung durch Attachment, bei hohen Feldstärken die Vermehrung durch Ionisation (Abschnitt 2.4.2).

Die betrachteten Prozesse sind lokal, d. h., in den Gleichungen (2.85)–(2.87) zur Beschreibung der Reaktionsraten treten nur Ableitungen nach der Zeit,

nicht nach den Ortskoordinaten auf. Sie können daher wie gewöhnliche Differentialgleichungen behandelt werden.

Unter der Annahme einer zeitlich unveränderlichen Gesamtfeldstärke und zu vernachlässigender Diffusion sind  $\alpha$ ,  $\eta$  und  $\vec{v}_e$  Konstante, und das Ratengleichungssystem ist analytisch lösbar:

$$n_e(t) = n_e(0)e^{(\alpha-\eta)|\vec{v}_e|t} \quad (2.88)$$

$$n_p(t) = n_p(0) + \frac{\alpha}{\alpha - \eta} n_e(0) (e^{(\alpha-\eta)|\vec{v}_e|t} - 1) \quad (2.89)$$

$$n_n(t) = n_n(0) + \frac{\eta}{\alpha - \eta} n_e(0) (e^{(\alpha-\eta)|\vec{v}_e|t} - 1). \quad (2.90)$$

Je nach Vorzeichen des effektiven Ionisierungskoeffizienten wächst oder fällt die Elektronendichte exponentiell. Mit ihr gehen die Ionendichten ebenfalls in ein exponentielles Wachstum über oder streben einem Gleichgewichtswert entgegen. Die charakteristische Zeit  $\tau_{\text{Kinetik}}$ , in der die Teilchendichten um einen Faktor e wachsen oder fallen, beträgt

$$\tau_{\text{Kinetik}} = \frac{1}{|\alpha - \eta| |\vec{v}_e|}. \quad (2.91)$$

Bei maximaler angelegter Feldstärke ohne Berücksichtigung von Raumladungen läßt sich diese Spanne nach unten abschätzen zu

$$\tau_{\text{Kinetik}} \gtrsim \frac{1}{|22600 \frac{1}{\text{m}} - 184 \frac{1}{\text{m}}| \cdot 68300 \frac{\text{m}}{\text{s}}} \approx 0,65 \text{ ns.}$$

Die Zeitskalen der drei Prozesse stimmen überein und liegen im Bereich der übrigen betrachteten physikalischen Vorgänge. Im Gegensatz zu Untersuchungen an räumlich homogenen Entladungen mit umfangreichem Reaktionskatalog und Gültigkeit für die Brennphase [WUTTKE90, BACKHAUS92] ist das Ratengleichungssystem in dieser Arbeit nicht steif.

Für zeitabhängige elektrische Felder ist eine numerische Lösung der gewöhnlichen linearen Differentialgleichungen erster Ordnung (2.85)–(2.87) erforderlich. Es wird ein explizites Einschrittverfahren verwendet ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung, das sogenannte verbesserte Polygonzugverfahren [COLLATZ55, POTTER73, DHALI87], welches in Hinblick auf die Einbettung in das Gesamtprogramm modifiziert wird. Die Diskretisierung für alle Raumgitterpunkte lautet:

$$\Delta n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}} = \frac{\Delta t}{2} (\alpha^t - \eta^t) |\vec{v}_e^t| n_e^t \quad (2.92)$$

$$n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}} = n_e^t + \Delta n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}} + \frac{1}{2} (\Delta_{\text{Konv.}} n_e^{t+\Delta t} + \Delta_{\text{Diff.}} n_e^{t+\Delta t}) \quad (2.93)$$

$$n_e^{t+\Delta t} = n_e^t + \Delta t \frac{1}{2} (\alpha^t + \alpha^{t+\Delta t} - \eta^t - \eta^{t+\Delta t}) \frac{1}{2} (|\vec{v}_e^t| + |\vec{v}_e^{t+\Delta t}|) n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}} \quad (2.94)$$

$$n_p^{t+\Delta t} = n_p^t + \Delta t \frac{1}{2} (\alpha^t + \alpha^{t+\Delta t}) \frac{1}{2} (|\vec{v}_e^t| + |\vec{v}_e^{t+\Delta t}|) n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}} \quad (2.95)$$

$$n_n^{t+\Delta t} = n_n^t - \Delta t \frac{1}{2} (\eta^t + \eta^{t+\Delta t}) \frac{1}{2} (|\vec{v}_e^t| + |\vec{v}_e^{t+\Delta t}|) n_e^{t+\frac{\Delta t}{2}}. \quad (2.96)$$

In den Gleichungen (2.92) und (2.93) wird die Elektronendichte mit einer expliziten Eulerintegration zur halben Zeitschrittweite bestimmt. Anschließend ist es möglich, die Teilchendichten in den Gleichungen (2.94)–(2.96) durch Anwendung der Mittelpunkregel über die volle Schrittweite zeitzentriert zu integrieren. Die Dichte beim halben Zeitschritt wird nach dieser Rechnung nicht weiter benutzt.

Vor der Lösung der Kinetik werden im Gesamtprogramm Drift, Diffusion und Feldverteilung zum neuen Zeitpunkt berechnet. Daher ist es in den Gleichungen (2.94)–(2.96) möglich, auch die Reaktionskoeffizienten und die Elektronengeschwindigkeit im zeitlichen Mittel zu berücksichtigen. Zur engeren Verzahnung der Verfahren werden in Gleichung (2.93) die Änderungen der Elektronendichte aufgrund von Drift- ( $\Delta_{\text{Konv.}} n_e^{t+\Delta t}$ ) und Diffusionsvorgängen ( $\Delta_{\text{Diff.}} n_e^{t+\Delta t}$ ) aus Nachbarpunkten zwischen den Zeiten  $t$  und  $t + \Delta t$  zur Hälfte eingespeist.

Bei bekannten  $\alpha$ ,  $\eta$  und  $\vec{v}_e$  handelt es sich um ein Anfangswertproblem. Vorgegeben sind die drei Teilchendichten an jeder Ortskoordinate zum Startzeitpunkt.

Zur weiteren Betrachtung ist es nützlich, die Schrittkennzahl  $\kappa$ , auch natürliche Schrittweite genannt, einzuführen:

$$\kappa = \Delta t \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \quad \text{bei} \quad \frac{dy}{dt} = f(y, t). \quad (2.97)$$

Mit Gleichung (2.85) folgt

$$\kappa = \Delta t |\alpha - \eta| |\vec{v}_e|. \quad (2.98)$$

Eine Stabilitätsanalyse (z. B. [Potter73], [Oran87]) ergibt für  $\frac{\partial f}{\partial y} < 0$  mit der Forderung nach einer betragsmäßig begrenzten Lösung die Bedingung  $\kappa \leq 2$ . Soll zusätzlich die Positivität der Dichte gewährleistet bleiben, ist verschärfend  $\kappa \leq 1$  anzunehmen. Dies entspricht der Forderung nach einer Zeitschrittweite, die kleiner als die charakteristische Zeit  $\tau_{\text{Kinetik}}$  in Gleichung (2.91) sein muß.

Die Differentialgleichungen sind mit möglichst hoher Genauigkeit durch die Differenzgleichungen zu approximieren, dies erfordert eine weitere Verringerung der Zeitschrittweite. In der Literatur finden sich empirische Kriterien zur Wahl der Schrittweite. [COLLATZ55] empfiehlt  $0,05 \leq \kappa \leq 0,1$ , [GRIGORIEFF72] gibt  $0,05 \leq \kappa \leq 0,15$  an und [ENGELN-MÜLLGES85] begnügt sich mit  $0,05 \leq \kappa \leq 0,2$ . In dieser Arbeit wird das schärfere Kriterium von Collatz gewählt. Unter Berücksichtigung der Zweidimensionalität des Modells und Vernachlässigung des Drift- und Diffusionsterms lautet damit die Zeitschrittweitenforderung dieses Abschnitts

$$\Delta t \leq \frac{0,1}{\max_{i,j} (|\alpha_{i,j} - \eta_{i,j}| |\vec{v}_{e_{i,j}}|)}. \quad (2.99)$$

In großen Teilen der durchgeführten Rechnungen ist aufgrund strengerer Kriterien anderer Programmteile sogar  $\kappa < 0,05$  erfüllt. Solange Rundungsfehler nicht dominant werden, steigt damit zwar die Genauigkeit der Kinetikberechnung weiter, doch macht es sich aufgrund der Verfahrensfehler in den anderen Algorithmen nicht positiv bemerkbar.

### 2.3.4 Elektrisches Feld

Die elektrische Feldstärke  $\vec{E}$  im Entladungsvolumen setzt sich, wie in Gleichung (2.5) beschrieben, aus zwei Anteilen zusammen. Zum einen wird durch eine zeitabhängige Spannung an den Elektroden eine äußere Feldstärke  $\vec{E}_{\text{ext}}$  vorgegeben, die sich unter der Annahme eines unendlich ausgedehnten Plattenkondensators in Gleichung (2.6) exakt angeben läßt. Zum anderen entstehen während der Entladung Raumladungsdichten  $\rho = e_0(n_p - n_n - n_e)$ , die zu einer beträchtlichen Raumladungsfeldstärke  $\vec{E}_{\text{RI}}$  führen können. In Abwesenheit magnetischer Felder erlauben die Maxwellgleichungen mit  $\vec{\nabla} \times \vec{E}_{\text{RI}} = 0$  die Einführung eines elektrischen Raumladungspotentials  $\phi$  in Gleichung

(2.7) und mit  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_{\text{RI}} = \rho/\epsilon_0$  die Herleitung der Poissongleichung (2.8). Die numerische Lösung der letzten beiden Gleichungen ist das Thema dieses Abschnitts. In Zylinderkoordinaten ausgeschrieben ohne Winkelanteil lautet die Poissongleichung

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.100)$$

und die Feldstärke berechnet sich aus dem Raumladungspotential zu

$$\vec{E}_{\text{RI}} = -\frac{\partial \phi}{\partial r} \vec{e}_r - \frac{\partial \phi}{\partial z} \vec{e}_z, \quad (2.101)$$

wobei  $\vec{e}_r$  und  $\vec{e}_z$  die Einheitsvektoren in radialer und axialer Richtung sind.

Die Poissongleichung ist eine partielle Differentialgleichung vom elliptischen Typ. Sie enthält keine Zeitableitung, beschrieben wird das durch die aktuelle Raumladungsverteilung und die Randbedingungen bestimmte statische elektrische Feld. Eine Störung an einem Ort beeinflusst instantan alle anderen Punkte. Es ist daher nötig, bei der Berechnung des Raumladungspotentials an einer Stelle das gesamte Rechengebiet zu berücksichtigen. Die Lösung der Poissongleichung stellt ein Randwertproblem. In dieser Arbeit wird dazu eine Dirichlet-Bedingung vorgegeben, das Raumladungspotential an den Elektroden und am äußeren radialen Rand ist zu Null gesetzt:

$$\begin{aligned} z = 0 & \quad (\text{Kathode}): & \quad \phi(r, 0) = 0 \\ z = d & \quad (\text{Anode}): & \quad \phi(r, d) = 0 \\ r = R_{\text{P}} & \quad (\text{äußerer Rand}): & \quad \phi(R_{\text{P}}, z) = 0. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Für den inneren Rand an der Achse erfolgt auf Seite 41 eine Sonderbetrachtung.

Zur Lösung der Poissongleichung existiert eine große Zahl von Verfahren, Übersichten enthalten z. B. [POTTER73, PRESS95]. Als grobe Unterteilung lassen sich direkte Matrixmethoden, Relaxationsmethoden und schnelle Methoden (englisch: rapid methods) unterscheiden. Die Anforderungen in dieser Arbeit an die Feldberechnung sind gute Genauigkeit auch bei steilen Raumladungsgredienten und hohe Ausführungsgeschwindigkeit für große Rechengitter. Sogenannte schnelle Methoden erfüllen diese Bedingungen, sind aber nur anzuwenden, wenn die Koordinaten separierbar sind und Grenzlinien

mit Koordinatenlinien übereinstimmen. Beide Voraussetzungen sind in den Gleichungen (2.100) und (2.102) erfüllt.

Eingesetzt wird mit der Fouriermethode ein Verfahren aus der Gruppe der schnellen Methoden [PICKERING86] für die axiale Richtung und eine Approximation durch kubische Splinefunktionen in radialer Richtung. Die Kombination dieser Verfahren und die Anwendung auf Zylindersymmetrie ist in [KUNHARDT85] beschrieben und in [WU89] verbessert.

Die Eigenfunktionen des Laplace-Operators sind die harmonischen Funktionen, ihre genaue Form ist durch die Randbedingungen festgelegt. Bei der speziellen Wahl in Gleichung (2.102) handelt es sich für die axiale Komponente um Sinusfunktionen. Eine Entwicklung des Raumladungspotentials nach Eigenfunktionen in  $z$ -Richtung entspricht daher einer diskreten Sinustransformation. Mit der Diskretisierung  $z = j \cdot \Delta z$  für  $0 \leq j \leq N_z$  gilt:

$$\phi_j(r) = \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z}. \quad (2.103)$$

Die Rücktransformation mit der inversen diskreten Sinustransformation liefert den Koeffizienten  $\phi^k(r)$ , der obere Index kennzeichnet Größen im Fourierraum:

$$\phi^k(r) = \frac{2}{N_z} \sum_{j=0}^{N_z-1} \phi_j(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z}, \quad (2.104)$$

Entsprechende Gleichungen gelten für die Raumladungsdichte

$$\rho_j(r) = \sum_{k=0}^{N_z-1} \rho^k(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z} \quad (2.105)$$

mit den Fourierkoeffizienten

$$\rho^k(r) = \frac{2}{N_z} \sum_{j=0}^{N_z-1} \rho_j(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z}. \quad (2.106)$$

Die Sinustransformation unterscheidet sich von ihrer Rücktransformation nur um einen Faktor  $2/N_z$ , zur Berechnung der letzten vier Beziehungen kann also das gleiche Verfahren herangezogen werden. Realisieren läßt sich die

Sinustransformation mit einer Abwandlung der schnellen Fouriertransformation, Beschreibungen enthalten z. B. [COOLEY70, PRESS95]. Falls sich die Zahl der axialen Zellen  $N_z$  durch eine Zweierpotenz ausdrücken läßt, ist der Algorithmus besonders effizient. Die Erfordernisse der Sinustransformation bedingen die Wahl einer äquidistanten Schrittweite  $\Delta z$  in axialer Richtung.

Die Diskretisierung der zweiten Ableitung des Raumladungspotentials nach der axialen Koordinate lautet mit zentralen Differenzen, der Entwicklung (2.103) und dem Additionstheorem  $\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi(r, z)}{\partial z^2} &= \frac{\phi_{j-1}(r) - 2\phi_j(r) + \phi_{j+1}(r)}{(\Delta z)^2} \\ &= \frac{1}{(\Delta z)^2} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r) \left( \sin \frac{(j-1)k\pi}{N_z} - 2 \sin \frac{jk\pi}{N_z} + \sin \frac{(j+1)k\pi}{N_z} \right) \\ &= \frac{2}{(\Delta z)^2} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z} \left( \cos \frac{k\pi}{N_z} - 1 \right). \end{aligned}$$

Mit dieser Beziehung und der Entwicklung für die Raumladungsdichte (2.105) läßt sich die zu lösende Gleichung (2.100) mit den transformierten Größen schreiben als

$$\frac{\partial^2 \phi^k(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi^k(r)}{\partial r} + \frac{2}{(\Delta z)^2} \left( \cos \frac{k\pi}{N_z} - 1 \right) \phi^k(r) = -\frac{\rho^k(r)}{\epsilon_0}, \quad (2.107)$$

das Problem hat sich damit auf eine gewöhnliche Differentialgleichung für die radiale Koordinate reduziert. Ihre Lösung wird, wie von [KUNHARDT85] eingeführt, durch einen Satz kubischer Splinefunktionen (z. B. [BJÖRCK72, PRESS95]) approximiert. Die radiale Achse sei von  $r = 0$  bis  $r = R_p$  in  $N_R + 1$  Punkte unterteilt, deren Abstände nicht-äquidistant sein können. Dann wird die  $k$ -te Fourierkomponente des Raumladungspotentials zwischen den Punkten  $r_i$  und  $r_{i+1}$  durch ein Polynom dritten Grades genähert:

$$\begin{aligned} \phi^k(r) &= T_{i,0}^k + T_{i,1}^k (r - r_i) + \frac{1}{2} T_{i,2}^k (r - r_i)^2 + \frac{1}{6} T_{i,3}^k (r - r_i)^3 \\ &\quad \text{für } r_i < r < r_{i+1}. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Die Polynome werden so zusammengesetzt, daß die Dichte und ihre ersten beiden Ableitungen überall stetig sind. Zusätzlich soll die Splinefunktion an

jedem Gitterpunkt die Differentialgleichung (2.107) erfüllen. Für  $1 \leq i \leq N_R - 1$  lauten diese Bedingungen:

$$T_{i,0}^k = T_{i-1,0}^k + h_{i-1}T_{i-1,1}^k + \frac{1}{2}h_{i-1}^2T_{i-1,2}^k + \frac{1}{6}h_{i-1}^3T_{i-1,3}^k \quad (2.109)$$

$$T_{i,1}^k = T_{i-1,1}^k + h_{i-1}T_{i-1,2}^k + \frac{1}{2}h_{i-1}^2T_{i-1,3}^k \quad (2.110)$$

$$T_{i,2}^k = T_{i-1,2}^k + h_{i-1}T_{i-1,3}^k \quad (2.111)$$

$$-\frac{\rho^k(r_i)}{\epsilon_0} = T_{i,2}^k + f_i T_{i,1}^k + g^k T_{i,0}^k \quad (2.112)$$

mit

$$f_i = \frac{1}{r_i} \quad (2.113)$$

$$h_i = r_{i+1} - r_i \quad (2.114)$$

$$g^k = \frac{2}{(\Delta z)^2} \left( \cos \frac{k\pi}{N_z} - 1 \right). \quad (2.115)$$

Von der noch ausstehenden Randbehandlung abgesehen, liegen für jeden Satz  $T_{i,0}^k$ ,  $T_{i,1}^k$ ,  $T_{i,2}^k$  und  $T_{i,3}^k$  vier Bestimmungsgleichungen vor. Es ist somit ein System von  $4(N_R + 1)$  linearen Gleichungen zu lösen. Zunächst werden die Gleichungen (2.111) und (2.112) nach den Koeffizienten  $T_{i,2}^k$  und  $T_{i,3}^k$  aufgelöst:

$$T_{i,3}^k = \frac{1}{h_i} (T_{i+1,2}^k - T_{i,2}^k) \quad (2.116)$$

$$T_{i,2}^k = -\frac{\rho^k(r_i)}{\epsilon_0} - g^k T_{i,0}^k - f_i T_{i,1}^k. \quad (2.117)$$

Mit diesen Beziehungen läßt sich durch Subtraktion der mit  $G_i$  multiplizierten Gleichung (2.110) von der mit  $I_i$  multiplizierten Gleichung (2.109) eine Formel für  $T_{i,1}^k$  gewinnen:

$$T_{i,1}^k = W_i^k + E_i^k T_{i-1,0}^k + F_i^k T_{i,0}^k \quad (2.118)$$

mit den Abkürzungen:

$$E_{i+1}^k = (I_i A_i^k - G_i C_i^k)/V_{i+1} \quad W_{i+1}^k = (G_i Y_i^k - I_i X_i^k)/V_{i+1} \quad (2.119)$$

$$F_{i+1}^k = (G_i D_i^k - I_i B_i^k)/V_{i+1} \quad V_{i+1} = I_i H_i - G_i J_i \quad (2.120)$$

$$A_i^k = 1 - \frac{1}{3} h_i^2 g^k \quad G_i = h_i \left(1 - \frac{1}{3} h_i f_i\right) \quad (2.121)$$

$$B_i^k = 1 + \frac{1}{6} h_i^2 g^k \quad H_i = \frac{1}{6} h_i^2 f_{i+1} \quad (2.122)$$

$$C_i^k = -\frac{1}{2} h_i g^k \quad I_i = 1 - \frac{1}{2} h_i f_i \quad (2.123)$$

$$D_i^k = \frac{1}{2} h_i g^k \quad J_i = 1 + \frac{1}{2} h_i f_{i+1} \quad (2.124)$$

$$X_i^k = \frac{1}{6} h_i^2 (2\rho_i^k + \rho_{i+1}^k)/\epsilon_0 \quad Y_i^k = \frac{1}{2} h_i (\rho_i^k + \rho_{i+1}^k)/\epsilon_0. \quad (2.125)$$

Einsetzen der Gleichungen (2.116)–(2.118) in Gleichung (2.109) ergibt einen Ausdruck, der nur noch Koeffizienten des nullten Gliedes der Splinefunktionen enthält:

$$Q_{i,i-1}^k T_{i-1,0}^k + Q_{i,i}^k T_{i,0}^k + Q_{i,i+1}^k T_{i+1,0}^k = S_i^k \quad (2.126)$$

mit den Bezeichnungen:

$$Q_{i,i-1}^k = G_i E_i^k \quad (2.127)$$

$$Q_{i,i}^k = A_i^k + G_i F_i^k - H_i E_{i+1}^k \quad (2.128)$$

$$Q_{i,i+1}^k = -B_i^k - H_i F_{i+1}^k \quad (2.129)$$

$$S_i^k = X_i^k - G_i W_i^k + H_i W_{i+1}^k. \quad (2.130)$$

Der  $1/r$ -Term in Gleichung (2.107) ist auf der Achse gesondert zu behandeln. Setzt man die Splinefunktion aus Gleichung (2.108) mit  $r_0 = 0$  ein und berücksichtigt, daß ihre ungeraden Terme aus Symmetriegründen verschwinden, dann ergibt sich

$$\left. \frac{1}{r} \frac{\partial \phi^k}{\partial r} \right|_{r=0} = \frac{1}{r} \left( \underbrace{T_{0,1}^k}_{=0} + T_{0,2}^k r + \frac{1}{2} \underbrace{T_{0,3}^k}_{=0} r^2 \right) \Big|_{r=0} = T_{0,2}^k$$

und statt Gleichung (2.112) gilt:

$$-\frac{\rho^k(r_0)}{\epsilon_0} = 2T_{0,2}^k + g^k T_{0,0}^k. \quad (2.131)$$

Die weitere Herleitung der Größen auf der Achse erfolgt analog zu der für  $r > 0$  mit dem Resultat:

$$Q_{0,0}^k = J_0 A_0^k - H_0 C_0^k \quad (2.132)$$

$$Q_{0,1}^k = H_0 D_0^k - J_0 B_0^k \quad (2.133)$$

$$S_0^k = J_0 X_0^k - H_0 Y_0^k \quad (2.134)$$

und den Abkürzungen:

$$A_0^k = 1 - \frac{1}{6} h_0^2 g^k \quad G_0 = h_0 \quad (2.135)$$

$$B_0^k = 1 + \frac{1}{6} h_0^2 g^k \quad H_0 = \frac{1}{6} h_0^2 f_1 \quad (2.136)$$

$$C_0^k = -\frac{1}{4} h_0 g^k \quad I_0 = 1 \quad (2.137)$$

$$D_0^k = \frac{1}{2} h_0 g^k \quad J_0 = 1 + \frac{1}{2} h_0 f_1 \quad (2.138)$$

$$X_0^k = \frac{1}{6} h_0^2 (\rho_0^k + \rho_1^k) / \epsilon_0 \quad Y_0^k = \frac{1}{4} h_0 (\rho_0^k + 2\rho_1^k) / \epsilon_0. \quad (2.139)$$

Am äußeren Rand  $r_{N_R} = R_P$  wird das Raumladungspotential laut Gleichung (2.102) als  $\phi(R_P, z) = 0$  vorgegeben, daher verschwinden nach Gleichung (2.104) alle Fourierkomponenten  $\phi^k(R_P)$ . Dies läßt sich formal berücksichtigen mit

$$Q_{N_R, N_R-1}^k = 0 \quad (2.140)$$

$$Q_{N_R, N_R}^k = 1 \quad (2.141)$$

$$S_{N_R}^k = 0. \quad (2.142)$$

Die Matrix  $Q_{i,l}^k$  mit von Null verschiedenen Elementen bei  $l = i-1, i, i+1$  und der Vektor  $S_i^k$  sind nun vollständig bestimmt, es bleibt das Gleichungssystem (2.126) nach den  $T_{i,0}^k$  aufzulösen. Das ist effizient mit einem Gaußschen Eliminationsverfahren möglich, weil die Matrix  $Q_{i,l}$  tridiagonale Gestalt besitzt. Der Thomas-Algorithmus (z. B. [ENGELN-MÜLLGES85, PICKERING86]) zerlegt die Tridiagonalmatrix in zwei Teilmatrizen, eine bidiagonal normierte

Superdiagonalmatrix, die von kleineren zu größeren Indizes gelöst wird und eine bidiagonale Subdiagonalmatrix, deren Rekursion von größeren zu kleineren Indizes die Lösung  $T_{i,0}^k$  liefert. Zur Verringerung von Rundungsfehlern legt [KUNHARDT85] jedoch Wert darauf, die beiden Rekursionen in umgekehrter Richtung durchzuführen [POTTER73, ORAN87]. Mit jedem  $k$  ist zu berechnen:

$$\begin{array}{rcl}
 e_{N_R} & \leftarrow & S_{N_R}^k \\
 d_{N_R} & \leftarrow & Q_{N_R, N_R}^k \\
 \hline
 \text{für } i = N_R - 1, \dots, 0 : & u_i & \leftarrow Q_{i, i+1}^k / d_{i+1} \\
 & d_i & \leftarrow Q_{i, i}^k - u_i Q_{i+1, i}^k \\
 & e_i & \leftarrow S_i^k - u_i e_{i+1} \\
 \hline
 & T_{0,0}^k & \leftarrow e_0 / d_0 \\
 \hline
 \text{für } i = 1, \dots, N_R : & T_{i,0}^k & \leftarrow (e_i - Q_{i, i-1}^k T_{i-1,0}^k) / d_i
 \end{array} \tag{2.143}$$

Numerische Stabilität ist auch ohne Pivotisierung für diagonal dominante Matrizen gegeben. Diese Eigenschaft ist im vorliegenden Fall nicht streng nachzuweisen. Die Matrix  $Q_{i,l}^k$  enthält ausschließlich die koordinatenabhängigen Größen  $h_i$ ,  $f_i$  und  $g^k$  in umfangreicher Kombination. Die Stabilität des Verfahrens hängt daher möglicherweise von der Wahl der axialen und radialen Ortsschrittweiten ab. Es wurde in dieser Arbeit empirisch gefunden, daß das Verfahren für  $\Delta z \leq \Delta r$  immer stabil funktionierte.

Der beschriebene Algorithmus ermöglicht die numerische Lösung der Gleichung (2.100) nach den  $T_{i,0}^k$ , die laut Gleichung (2.108) gerade die Fourierkoeffizienten des Raumladungspotentials an den Gitterpunkten sind. Eine schnelle Sinustransformation nach Gleichung (2.149) ermittelt daraus das Raumladungspotential im Ortsraum. Zur Bestimmung der Elektronengeschwindigkeit in Gleichung (2.4) und der Transport- und Reaktionskoeffizienten (Abschnitt 2.4.2) wird aber die elektrische Feldstärke benötigt. Laut Definition in Gleichung (2.101) ist die Feldstärke gleich dem negativen Gradienten des Raumladungspotentials. Zu ihrer Berechnung lassen sich bereits bestimmte Größen nutzen.

Bei der Approximation durch Splines in Gleichung (2.108) wurden die ersten bis dritten Ableitungen der Fourierkoeffizienten des Raumladungspotentials nach dem Radius an jedem Punkt angeglichen.  $T_{i,1}^k$ ,  $T_{i,2}^k$  und  $T_{i,3}^k$  mit den Bestimmungsgleichungen (2.116)–(2.118) geben diese Werte an. Mit der

Fourierentwicklung (2.103) ist die radiale Komponente der Raumladungsfeldstärke:

$$\begin{aligned}
E_{\text{Rl}r}(r_i, z_j) &= - \left. \frac{\partial \phi_j(r)}{\partial r} \right|_{r=r_i} \\
&= - \left. \frac{\partial}{\partial r} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z} \right|_{r=r_i} \\
&= - \sum_{k=0}^{N_z-1} \left. \frac{\partial \phi^k(r)}{\partial r} \right|_{r=r_i} \sin \frac{jk\pi}{N_z} \\
&= - \sum_{k=0}^{N_z-1} T_{i,1}^k \sin \frac{jk\pi}{N_z}. \tag{2.144}
\end{aligned}$$

Die Berechnung erfolgt im Programm somit durch eine schnelle Sinustransformation von  $-T_{i,1}^k$ .

Für die axiale Komponente der Raumladungsfeldstärke erhält man mit zentralem Differenzenquotienten, Fourierentwicklung und Anwendung des Additionstheorems  $\sin x - \sin y = 2 \sin \frac{x-y}{2} \cos \frac{x+y}{2}$ :

$$\begin{aligned}
E_{\text{Rl}z}(r_i, z_j) &= - \left. \frac{\partial \phi(r_i, z)}{\partial z} \right|_{z=z_j} \\
&= - \frac{1}{\Delta z} \left( \phi \left( r_i, z_j + \frac{\Delta z}{2} \right) - \phi \left( r_i, z_j - \frac{\Delta z}{2} \right) \right) \\
&= - \frac{1}{\Delta z} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r_i) \left( \sin \frac{(j + \frac{1}{2})k\pi}{N_z} - \sin \frac{(j - \frac{1}{2})k\pi}{N_z} \right) \\
&= - \frac{2}{\Delta z} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r_i) \sin \frac{k\pi}{2N_z} \cos \frac{jk\pi}{N_z}, \tag{2.145}
\end{aligned}$$

die Berechnung ist daher, wie von [KUNHARDT85] angegeben, mit einer Kosinustransformation von  $-\frac{2}{\Delta z} \sin \frac{k\pi}{2N_z} \phi^k(r_i)$  möglich.

Eine bessere Näherung und einen einfacheren Ausdruck erhält man unter Berücksichtigung der Beziehung  $z_j = j\Delta z = jd/N_z$  mit der direkten Anwendung des Differentialoperators auf die Fourierentwicklung (2.103):

$$\begin{aligned}
E_{\text{Rl}z}(r_i, z_j) &= -\frac{\partial}{\partial z} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r_i) \sin \frac{k\pi z}{d} \Big|_{z=z_j} \\
&= -\frac{k\pi}{d} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r_i) \cos \frac{k\pi z}{d} \Big|_{z=z_j} \\
&= -\frac{k\pi}{d} \sum_{k=0}^{N_z-1} \phi^k(r_i) \cos \frac{jk\pi}{N_z}, \tag{2.146}
\end{aligned}$$

es ist daher die Kosinustransformation auf  $-\frac{k\pi}{d}\phi^k(r_i)$  anzuwenden. Gleichung (2.145) geht in (2.146) über, wenn man das Diskretisierungsintervall  $\varepsilon \Delta z$  wählt und den Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  durchführt, also aus dem Differenzen- den Differentialquotienten bildet.

Weder Gleichung (2.145) noch (2.146) konnte in der Anwendung eine Lösung produzieren, die gemäß den hohen Anforderungen des Gesamtprogramms genau und „glatt“ genug war. Statt dessen wird die  $z$ -Komponente der Raumladungsfeldstärke mit einer Diskretisierung der Ableitung in Gleichung (2.101) durch Lagrangesche Interpolationspolynome [ABRAMOWITZ68, S. 914] berechnet. Mit Fünf- und Siebenpunktformeln wurden gute Ergebnisse erzielt, am besten bewährten sich aber die einfachen Dreipunktformeln:

$$E_{\text{Rl}z}(r_i, z_j) = \begin{cases} -\frac{1}{2\Delta z} (-3\phi_{i,0} + 4\phi_{i,1} - \phi_{i,2}) & \text{für } j = 0 \\ -\frac{1}{2\Delta z} (-\phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1}) & \text{für } 1 \leq j \leq N_z - 1 \\ -\frac{1}{2\Delta z} (\phi_{i,N_z-2} - 4\phi_{i,N_z-1} + 3\phi_{i,N_z}) & \text{für } j = N_z. \end{cases} \tag{2.147}$$

Die Partialsumme einer Fourierreihe nähert die entwickelte Funktion mit wachsender Zahl der Glieder immer besser. Bei unstetigen Funktionen treten jedoch an der Sprungstelle Über- und Unterschwinger auf, die zwar immer schmaler werden, aber bei ca. 9% der Sprunghöhe verbleiben [STRAUSS95]. Dieses sogenannte *Gibbssche Phänomen* läßt sich um etwa einen Faktor 9 reduzieren, wenn man in der Fouriersumme jeden Term mit dem *Lanczosschen* Faktor

$$\operatorname{sinc} \frac{k\pi}{2N_z} \equiv \frac{\sin \frac{k\pi}{2N_z}}{\frac{k\pi}{2N_z}} \quad (2.148)$$

multipliziert [ACTON70]. Raumladungsdichte und -potential können im vorliegenden Fall steile Gradienten aufweisen, die durch das Gibbsche Phänomen verfälscht werden. [WU89] schlägt vor, im beschriebenen Algorithmus zur Lösung der Poissongleichung den Korrekturfaktor in den Sinustransformationen zu berücksichtigen, die Gleichungen (2.103), (2.106) und (2.144) nehmen damit die Gestalt an:

$$\phi_j(r) = \sum_{k=0}^{N_z-1} \operatorname{sinc} \frac{k\pi}{2N_z} \phi^k(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z} \quad (2.149)$$

$$\rho^k(r) = \frac{2}{N_z} \sum_{j=0}^{N_z-1} \operatorname{sinc} \frac{j\pi}{2N_z} \rho_j(r) \sin \frac{jk\pi}{N_z} \quad (2.150)$$

$$E_{\text{Rl}r}(r_i, z_j) = - \sum_{k=0}^{N_z-1} \operatorname{sinc} \frac{k\pi}{2N_z} T_{i,1}^k \sin \frac{jk\pi}{N_z}. \quad (2.151)$$

Das implementierte Rechenschema zur Lösung der Poissongleichung (2.100) und des Potentialgradienten (2.101) besteht aus mehreren Stufen. Zu jedem  $r_i$  werden die Fourierkomponenten  $\phi^k(r_i)$  der Raumladungsdichte mit Gleichung (2.150) bestimmt. Anschließend ist das Gleichungssystem (2.126) mit dem Schema (2.143) für jedes  $k$  nach den  $T_{i,0}^k \equiv \phi^k(r_i)$  zu lösen. Daraus ergeben sich durch zwei weitere Fouriertransformationen das Raumladungspotential  $\phi_{i,j}$  im Ortsraum nach Gleichung (2.149) und die radiale Raumladungsfeldstärke  $E_{\text{Rl}r_{i,j}}$  nach den Gleichungen (2.118) und (2.151). Abschließend wird die axiale Feldstärke  $E_{\text{Rl}z_{i,j}}$  mit Gleichung (2.147) bestimmt.

Die Anzahl der Rechenschritte, die benötigt werden, ist für die schnellen Fouriertransformationen in  $z$ -Richtung proportional zur Anzahl der axialen Zellen multipliziert mit ihrem Zweierlogarithmus und für die Lösung des triagonalen Gleichungssystems in  $r$ -Richtung proportional zur Anzahl der radialen Ortsschritte. Insgesamt ist die Abhängigkeit der Zahl der Rechenschritte von der Gittergröße durch eine Proportionalität zu  $N_R N_z \log_2 N_z$  gegeben, diese Angaben verstehen sich für den Grenzfall großer Gitter.

Tests des implementierten Verfahrens sind auf verschiedene Weise durchgeführt worden. Einzelne Komponenten, wie die schnelle Sinustransformation und die Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems, wurden isoliert überprüft. Gleichung (2.107) erlaubt durch verschiedene Ansätze für  $\phi^k(r)$ , z. B. Potenz- und Exponentialfunktionen, exakte Lösungen, die mit der numerischen verglichen werden konnten. Der vollständige Algorithmus zur Behandlung der Poissongleichung wurde anhand einfacher analytischer Lösungen kontrolliert. Zusätzlich ist eine alternative Routine zur Lösung der Poissongleichung beschafft und installiert worden [SWARZTRAUBER79]. Diese Unterprogrammsammlung mit dem Namen *Fishpack* ist wohl getestet und weit verbreitet. Die Genauigkeit ihrer Ergebnisse ist mit der des hier beschriebenen Algorithmus vergleichbar, aber ihr Rechenzeitbedarf ist um ein Mehrfaches höher. Vergleichende Testrechnungen des alternativen Verfahrens zur Lösung der Poissongleichung mit dem beschriebenen unter für diese Arbeit typischen Bedingungen dienen der abschließenden Verifikation des benutzten Verfahrens.

### 2.3.5 Sekundärelektronenemission

Volumenionisation durch schnelle Ionen oder Photonen wird im Modell ebenso vernachlässigt wie Elektrodenemission durch Photoeffekt oder metastabile Atome. Berücksichtigt ist dagegen die Kathodenemission durch den Aufprall positiver Ionen. Die Teilchenstromdichte der Elektronen, die die Kathode unbeschadet von Rückstreuung in axialer Richtung verläßt, wird der der positiven Ionen proportional gesetzt [SIMON93]:

$$n_e(r, z=0) v_{ez}(r, z=0) = -\gamma(r) n_p(r, z=0) v_{pz}(r, z=0). \quad (2.152)$$

Der zweite Townsendsche Koeffizient  $\gamma$  ist als konstant in der Zeit und abhängig vom Radius gesetzt, dies macht die Betrachtung von Inhomogenitäten in der Beschaffenheit des Kathodenmaterials möglich. Gemäß der Local-Field-Approximation wird angenommen, daß die Elektronen die Kathode mit einer Geschwindigkeit verlassen, die der örtlichen Feldstärke entspricht.

Mit dieser Beziehung und einer Kontrollvolumenüberlegung gelangt man zur diskretisierten Form der Änderung der Elektronendichte durch Ionenbeschuß nach einem Zeitschritt im Gitterpunkt  $(r_i, z_0)$  an der Kathode:

$$\Delta n_{e_i,0}^\gamma = \frac{\Delta t}{\Delta z} \gamma_i n_{p_i,0} \mu_{p_i,0} E_{z_i,0}, \quad (2.153)$$

dabei wird die Geschwindigkeit der positiven Ionen mit

$$\vec{v}_p = \mu_p \vec{E} \quad (2.154)$$

ausgedrückt.  $\mu_p$  bezeichnet die von der reduzierten Feldstärke abhängige Beweglichkeit der positiven Ionen, wie in Abschnitt 2.4.2 dargestellt.

In dieser Arbeit wird die Beweglichkeit der positiven Ionen ausschließlich an der Kathode zur Berechnung der Sekundärelektronenemission berücksichtigt, ihre Bewegung ist grundsätzlich vernachlässigt. Die Näherung ist gültig, solange keine Verzerrung der Ionendichteverteilung vor der Kathode durch Konvektion auftritt. Ein Vergleich mit [SIMON93, Abbildung 29], dessen Modell die Kontinuitätsgleichung für positive Ionen enthält, bestätigt die Gültigkeit dieser Voraussetzung zumindest bis zur sogenannten Schichtzündung. Da dann auch die Local-Field-Approximation und damit die Grundvoraussetzung des Modells verletzt wird, entsteht durch die Näherung kein Problem.

Auf der Basis der implementierten Sekundärelektronenemission bildet sich ein Kathodenfall heraus, in dem hohe Feldstärken und folglich große Driftgeschwindigkeiten auftreten. Die CFL-Bedingung (2.51) erzwingt dann sehr kleine Zeitschrittweiten. Um Stabilitäts- und Rechenzeitprobleme für Untersuchungen zu reduzieren, die sich nur mit Phänomenen im übrigen Volumen beschäftigen, wurde ein alternatives Modell zur Kathodenemission entwickelt, das die Entstehung des Kathodenfalls künstlich unterdrückt. Dazu wird der Verlust an Elektronendichte vor der Kathode mit einem Quellterm von genau dieser Größe ausgeglichen. Zur Realisierung ist lediglich nach der Berechnung von Konvektion und Diffusion die alte Teilchendichte vor der Kathode zu restaurieren. Dauerhafte Änderungen der Elektronendichte an der Kathode sind dann nur durch reaktionskinetische Prozesse möglich.

### 2.3.6 Kopplung der Verfahren

In den letzten Abschnitten wurden die modellierten Prozesse und ihre numerische Behandlung beschrieben. Zu lösen sind zweidimensional eine hyperbo-

lische Differentialgleichung für die Konvektion der Elektronen, eine parabolische Differentialgleichung für ihre Diffusion, eine elliptische Differentialgleichung für das Raumladungsfeld und drei gewöhnliche Differentialgleichungen zur Reaktionskinetik. Die Verbindung der Dimensionen und der unterschiedlichen Algorithmen geschieht mit der *Methode der fraktionierten Schritte*, auch *Operator-Splitting* oder *Timestep-Splitting* genannt. Sie erlaubt, die individuellen Prozesse separat und nacheinander zu berechnen [PRESS95, S. 847].

Demzufolge wird die Konvektion der Elektronen über einen Zeitschritt zuerst eindimensional für eine Koordinate bestimmt und anschließend mit der neuen Elektronendichte die Konvektion über die andere Koordinate berechnet. Ob nun zuerst die axiale oder radiale Richtung betrachtet wird, die Wahl der Reihenfolge gibt eine gewisse Asymmetrie vor. Der daraus resultierende Fehler ist im allgemeinen klein und kann ignoriert werden [BORIS93, S. 24]. Er läßt sich aber auch mit einem rechentechnischen Trick beseitigen, indem man die Konvektion in alternierenden Richtungen doppelt bestimmt und den Mittelwert nimmt [ORAN87, S. 538]. Dies wurde für Standardbedingungen durchgeführt und mit den einfachen Berechnungen verglichen, die Ergebnisse stimmen sehr gut überein. In dieser Arbeit findet eine Modifikation des Vorgehens Anwendung, die Konvektion wird für jede Koordinate nur einmal berechnet und die Reihenfolge bei jedem Zeitschritt vertauscht.

Im nächsten fraktionierten Schritt wird der Kathodenquellterm ausgewertet und die Elektronendichte an der Kathode entsprechend erhöht. Mit dieser Dichte ist dann die Diffusion zu bestimmen. Auch hier sind wieder zwei Berechnungen notwendig, eine für jede Koordinate; es gelten die gleichen Bemerkungen wie bei der Konvektion.

Nun wird die Poissongleichung auf Grundlage der konvektierten und diffundierten Elektronendichte gelöst. Bei der Einbindung in das Gesamtprogramm entsteht dabei eine numerische Schwierigkeit auf der rechten Seite in Gleichung (2.8). Die Raumladungsdichte berechnet sich als Differenz der Dichte der positiven Ionen zu der von Elektronen und negativen Ionen. Während die Dichte der negativen Ionen gewöhnlich um Größenordnungen unter den anderen Dichten liegt, sind die Unterschiede zwischen Elektronendichte und Dichte der positiven Ionen oft im Promillebereich oder darunter. Da Computer Zahlen nur in endlicher Genauigkeit darstellen können, droht eine

Auslöschung mehrerer signifikanter Ziffern. Das Problem läßt sich mit einer alternativen Berechnung der Raumladungsdichte vermeiden. Sie variiert vom alten ( $\rho^t$ ) zum neuen Zeitschritt ( $\rho^{t+\Delta t}$ ) nur durch Elektronendichteänderung aus Konvektion ( $\Delta_{\text{Konv.}} n_e^{t+\Delta t}$ ), Diffusion ( $\Delta_{\text{Diff.}} n_e^{t+\Delta t}$ ) und Sekundärelektronenemission an der Kathode ( $\Delta_{\text{Kath.}} n_e^{t+\Delta t}$ ), denn die Ionen führen keine Bewegungen aus, und Ionisation und Attachment ändern die Raumlaugsverteilung nicht:

$$\begin{aligned}\rho^{t+\Delta t} &= e_0 (n_p - n_n - n_e) \\ &= \rho^t - \Delta_{\text{Konv.}} n_e^{t+\Delta t} - \Delta_{\text{Diff.}} n_e^{t+\Delta t} - \Delta_{\text{Kath.}} n_e^{t+\Delta t}.\end{aligned}\quad (2.155)$$

Die Differenz der annähernd gleichgroßen Zahlen  $n_p - n_e$  ist damit durch die Summation einer großen Zahl  $\rho^t$  mit kleinen Termen  $\Delta n_e$  ersetzt, zur optimierten Berechnung werden die kleineren Dichteänderungen zuerst untereinander addiert. Das Gesamtprogramm wird in doppelter Genauigkeit (15–16 signifikante Dezimalstellen) betrieben, die beschriebene Raumladungsdichteberechnung ermöglicht aber in der Entwicklungsphase auch Rechnungen mit einfacher Genauigkeit (6–7 signifikante Dezimalstellen).

Nach der Lösung der Poissongleichung wird als letzter Prozeß die Reaktionskinetik berechnet, dabei kann eine zeitzentrierte Integration durch Ermittlung der Transport- und Reaktionskoeffizienten aus den bereits bekannten Feldstärken zum neuen Zeitpunkt erreicht werden. Das vollständige Programmschema ist in Tabelle 2.1 angegeben.

Die dargestellte Methode der fraktionierten Schritte ist von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit [ORAN87]. Sie konvergiert, wenn sich die Werte der physikalischen Variablen für jeden der individuellen Prozesse nicht zu stark während eines Zeitschritts ändern, also bei genügend kleiner Zeitschrittweite. Während für alle Einzelprozesse Zeitschrittweitenkriterien angegeben wurden, gibt es keinen sicheren Weg, die angemessene Zeitschrittweite für das Gesamtsystem der gekoppelten Verfahren zu bestimmen. In dieser Arbeit wird die Zeitschrittweite des Verfahrens durch das Minimum der Einzelkriterien für Konvektion (2.52), Diffusion (2.84) und Reaktionskinetik (2.99) bestimmt:

Tabelle 2.1: Schema der Verfahrenskopplung zum Gesamtprogramm:

---

START
Einlesen der Feldstärke, Koeffizienten und Parameter (Unterkapitel 2.4)
Initialisierung der Variablen
Beginn der Zeitschleife
Falls Zeitschrittweitenkriterium (2.156) verletzt: Halbierung von $\Delta t$
Zwischenspeicherung von $n_e, v_{er}, v_{ez}, \alpha, \eta$ zur alten Zeit
Ber. der Konvektion: $r, z$ für gerade; $z, r$ für ung. Zeitschr. (Abschn. 2.3.1)
Berechnung des Kathodenquellterms (Abschnitt 2.3.5)
Ber. der Diffusion: $r, z$ für gerade; $z, r$ für ung. Zeitschritte (Abschn. 2.3.2)
Berechnung der Raumladungsfeldstärke (Abschnitt 2.3.4)
Berechnung von $\alpha, \eta, \mu_e, D_L, D_T$ abhängig von $E/N$ (Abschnitt 2.4.2)
Berechnung der Reaktionskinetik (Abschnitt 2.3.3)
Falls Plottzeitpunkt oder -schritt erreicht: Ausgabe von $n_e, n_p, n_n, E_z, E_r$
Falls Endzeitpunkt oder -schritt erreicht, $n_e$ zu hoch, $\Delta t$ zu klein: ENDE
Ende der Zeitschleife

---

$$\Delta t \leq \min \left( \frac{0,4 \Delta z}{\max_{i,j} |v_{e_{i,j+\frac{1}{2}}}|}, \frac{(\Delta z)^2}{6 \max_{i,j} D_{L_{i,j+\frac{1}{2}}}}, \frac{0,1}{\max_{i,j} (|\alpha_{i,j} - \eta_{i,j}| |\vec{v}_{e_{i,j}}|)} \right). \quad (2.156)$$

Entsprechende Begrenzungen gelten bezüglich der Konvektion und Diffusion auch für die radiale Koordinate und werden im Programm abgefragt. Sie sind jedoch hier nicht relevant, da die radiale Ortsschrittweite in allen Rechenläufen deutlich größer als die axiale gewählt ist. In den meisten Fällen begrenzt mit dem ersten Term die modifizierte CFL-Bedingung die Zeitschrittweite, gegen Ende der Rechnungen ist es oft die Reaktionskinetik mit dem dritten Term. Eine Beschränkung der Zeitschrittweite durch den zweiten Term, der Diffusionsvorgänge beschreibt, tritt für Rechnungen mit extrem kleiner Ortsschrittweite in Kapitel 4 auf.

Die Konvergenz der Methode der fraktionierten Schritte läßt sich testen, indem man zwei Rechenläufe mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten unternimmt und die Ergebnisse vergleicht. Konvergenz war in allen untersuchten Beispielen gegeben. Die Rechenläufe enden bei Elektronendichten von ca.  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , dann werden entweder die zulässigen Zeitschrittweiten unpraktikabel klein, oder es treten Oszillationen in allen physikalischen Größen

auf. Da bei Erreichen dieses  $n_e$ -Wertes die Grundannahmen des Modells wie Local-Field-Approximation oder Vernachlässigung von Zweistufenionisation verletzt werden, wurde eine Weiterentwicklung der numerischen Methoden nicht in Angriff genommen.

Dem Nachteil der Methode der fraktionierten Schritte, daß kein eindeutiges Schrittweitenkriterium gegeben ist, stehen bedeutende Vorteile gegenüber. So kann für jedes physikalische Phänomen ein eigenes optimiertes Verfahren gewählt werden, ganz wesentlich ist etwa die Möglichkeit, die Konvektion mit einem monotonen, die Positivität erhaltenden Algorithmus zu behandeln.

Die Programmstruktur kann modular gehalten werden. Alle beschriebenen Prozesse liegen für diese Arbeit in mindestens zwei austauschbaren Unterprogrammen vor, die auf jeweils unterschiedlichen Algorithmen basieren.

Die für einen Prozeß optimierten Verfahren sind im allgemeinen in der Ausführung relativ schnell, die Methode der fraktionierten Schritte erlaubt daher die Erstellung äußerst rechenzeiteffizienter Programme. Mit dem vorgestellten Modell wurden Berechnungen an Gittern bis zu einer Größe von 8192 axialen und 69 radialen Gitterzellen und mehreren Tausend Zeitschritten durchgeführt. Vergleichbare oder moderat komplexere Modelle sind auf räumlichen Gittern von  $512 \times 40$  [DHALI87],  $256 \times 20$  [WU88] oder  $80 \times 20$  [SIMON93] untersucht worden.

## 2.4 Eingabedaten

Die Wahl der physikalischen Parameter zu den Modellrechnungen bezieht sich auf experimentelle [LÜCK92, DREISKEMPER93] und numerische Untersuchungen [BACKHAUS92, SIMON93], die in diesem Institut durchgeführt wurden. Die Eingabe der Daten in das Programm ist über externe Dateien flexibel gesteuert.

### 2.4.1 Äußere elektrische Feldstärke

Experimentell wird mit einer aufwendigen elektrischen Beschaltung eine zeitabhängige Spannung  $U(t)$  an die Elektroden angelegt. Die präzise Ausmes-

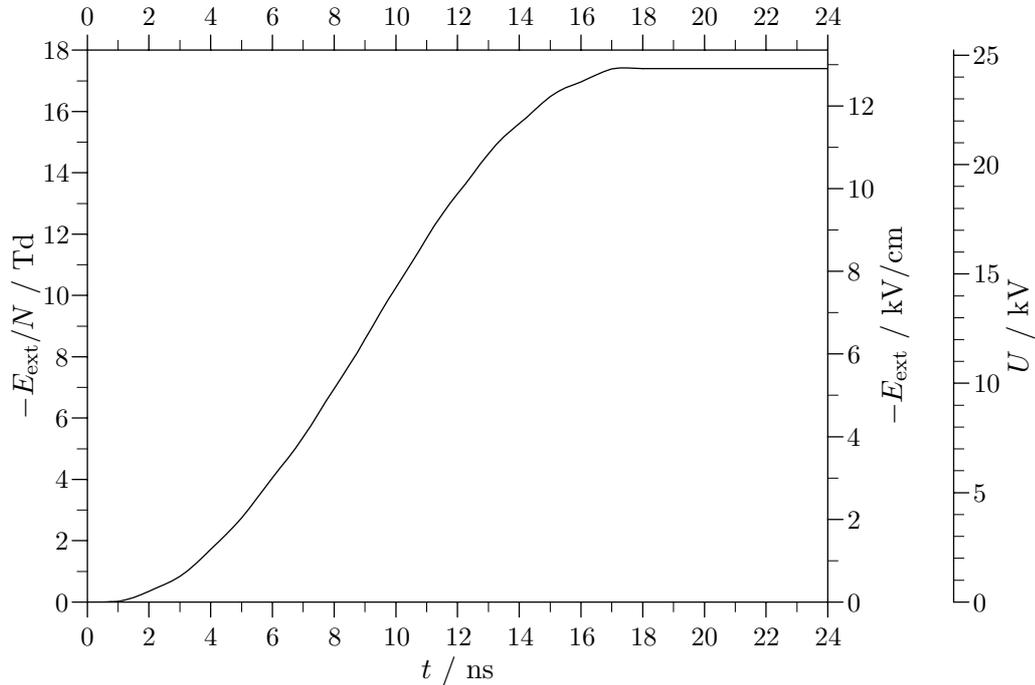


Abbildung 2.3: Angelegte Spannung, elektrische Feldstärke und reduzierte Feldstärke für Standardbedingungen in der Townsend- und Zündphase [LÜCK92, BACKHAUS92], ab 18 ns konstant.

sung einzelner Komponenten ermöglicht es, einen Ersatzschaltkreis in guter Übereinstimmung zum Experiment zu bestimmen [LÜCK92]. In dieser Arbeit werden Standardbedingungen mit einer Leerlaufspannung von 25,9 kV im Maximum zugrunde gelegt. Die zeitabhängige Spannung bis 18 ns ist einer Simulationsrechnung des Programms PINBED entnommen [BACKHAUS92] und in Abbildung 2.3 dargestellt. Im Experiment fällt die Spannung anschließend ab, hier wird sie zur gezielten Untersuchung der Zündphase für spätere Zeiten konstant gehalten. Der Spannungsverlauf hängt mit der Kapazität der Elektroden von ihrem Abstand ab. Die angegebenen Spannungen sind bis 18 ns für einen Elektrodenabstand von 1,89 cm berechnet. In dieser Arbeit wird ebenso wie in [SIMON93] der Spannungsverlauf von Abbildung 2.3 für einen Elektrodenabstand von 1,80 cm benutzt.

Zur Umrechnung auf die angelegte elektrische Feldstärke wird die Gleichung (2.6) eines Plattenkondensators angewendet. Die reduzierte Feldstärke ergibt sich daraus durch Division mit der Gesamteilchenzahldichte  $N$ , die bei 3 bar Gasdruck, 293 K Gastemperatur und Gültigkeit des idealen Gasgesetzes

$7,417 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  beträgt. Die Teilchendichten der Sekundärspezies werden gegenüber  $N$  vernachlässigt. Die reduzierte Feldstärke ist mit der Einheit *Townsend* (Td) bezeichnet, es ist  $1 \text{ Td} \equiv 10^{-17} \text{ V cm}^2$ . Bei dieser Gastemperatur entspricht 1 Td einem  $E/p$  von  $247 \text{ V}/(\text{cm bar})$ .

## 2.4.2 Reaktions- und Transportkoeffizienten

Die physikalischen Eigenschaften des Gases gehen über  $E/N$ -abhängige Koeffizienten der Ionisation, des Attachments, der Beweglichkeit und der Diffusion in das Modell ein. Während für reine Gase und ausgewählte Mischungen umfangreiche Tabellenwerke der kinetischen Koeffizienten existieren [DUTTON75], gibt es in der Literatur keine Angaben zu den speziellen hier verwendeten Excimer-Gasgemischen. Bekannt sind dagegen Querschnitte der verschiedenen Stoßprozesse.

Das Modell PINBED [BACKHAUS92] verwendet diese zur Berechnung der vollständigen, räumlich homogenen Reaktionskinetik einer XeCl-Entladung, indem es die Boltzmanngleichung in Zweiterm-näherung unter Einschluß der Elektron-Elektron-Wechselwirkung instationär für den Isotropanteil und quasistationär für den Anisotropanteil der Elektronenenergieverteilungsfunktion löst. Aus der mikroskopischen Beschreibung ergeben sich durch geeignete Integrationen über den Energieraum makroskopische Bilanzen, insbesondere die für das hier vorgestellte Modell benötigten Reaktions- und Transportkoeffizienten.

Bezeichne  $U$  das Voltäquivalent der kinetischen Elektronenenergie

$$e_0 U = \frac{m_e}{2} v_d^2, \quad (2.157)$$

mit der Momentangeschwindigkeit  $v_d$ . Dann wird der Isotropanteil  $f_0$  der Elektronenenergieverteilungsfunktion auf die Elektronendichte normiert gemäß

$$n_e(t) = \int_0^\infty U^{\frac{1}{2}} f_0(U, t) dU. \quad (2.158)$$

Das Programm PINBED berechnet Frequenzen  $\nu_{\text{ion}}(U, t)$  für ionisierende und  $\nu_{\text{att}}(U, t)$  für attachende (elektronenvernichtende) Stöße. Daraus lassen sich

energiegemittelte Stoßfrequenzen

$$\nu_{\text{ion}}(t) = \frac{1}{n_e(t)} \int_0^\infty \nu_{\text{ion}}(U, t) U^{\frac{1}{2}} f_0(U, t) dU \quad (2.159)$$

$$\nu_{\text{att}}(t) = \frac{1}{n_e(t)} \int_0^\infty \nu_{\text{att}}(U, t) U^{\frac{1}{2}} f_0(U, t) dU \quad (2.160)$$

bestimmen und gemäß

$$\alpha(t) = \frac{\nu_{\text{ion}}(t)}{|\vec{v}_e(t)|} \quad (2.161)$$

$$\eta(t) = \frac{\nu_{\text{att}}(t)}{|\vec{v}_e(t)|} \quad (2.162)$$

$$|\vec{v}_e(t)| = \mu_e(t) |\vec{E}(t)| \quad (2.163)$$

in Reaktionskoeffizienten umrechnen. Mit der zusammengefaßten Impulsdispersionsfrequenz  $\nu_{\text{im}}(U, t)$  ergeben sich die Transportkoeffizienten für Beweglichkeit und transversale Diffusion zu

$$\mu_e(t) = -\frac{1}{n_e(t)} \frac{2e_0}{3m_e} \int_0^\infty \frac{U^{\frac{3}{2}}}{\nu_{\text{im}}(U, t)} \frac{\partial f_0(U, t)}{\partial U} dU \quad (2.164)$$

$$D_T(t) = \frac{1}{n_e(t)} \frac{2e_0}{3m_e} \int_0^\infty \frac{U^{\frac{3}{2}}}{\nu_{\text{im}}(U, t)} f_0(U, t) dU. \quad (2.165)$$

Die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten wird über die  $E(t)$ -Beziehung in Abbildung 2.3 in eine Abhängigkeit von der reduzierten Feldstärke  $E/N$  umgeformt.

Mehrere Koeffizientensätze wurden von Loffhagen mit dem Modell PINBED berechnet [LOFFHAGEN93]. Die Implementation der Bestimmung des transversalen Diffusionskoeffizienten erfolgte eigens für die Verwendung in [SIMON93] und dieser Arbeit. Eine Berechnung des longitudinalen Diffusionskoeffizienten wurde nicht realisiert, so daß in dieser Arbeit als Behelf  $D_L = D_T$  gesetzt ist.

Die ermittelten Reaktions- und Transportkoeffizienten hängen von der reduzierten Feldstärke und den Partialdrücken der Gasbestandteile ab. Haben Stöße von Elektronen mit Sekundärspezies keinen signifikanten Einfluß auf die Elektronenverteilungsfunktion, wie in der Townsend- und Zündphase gegeben, werden die Koeffizienten für ein spezifisches Gasmisch als rein

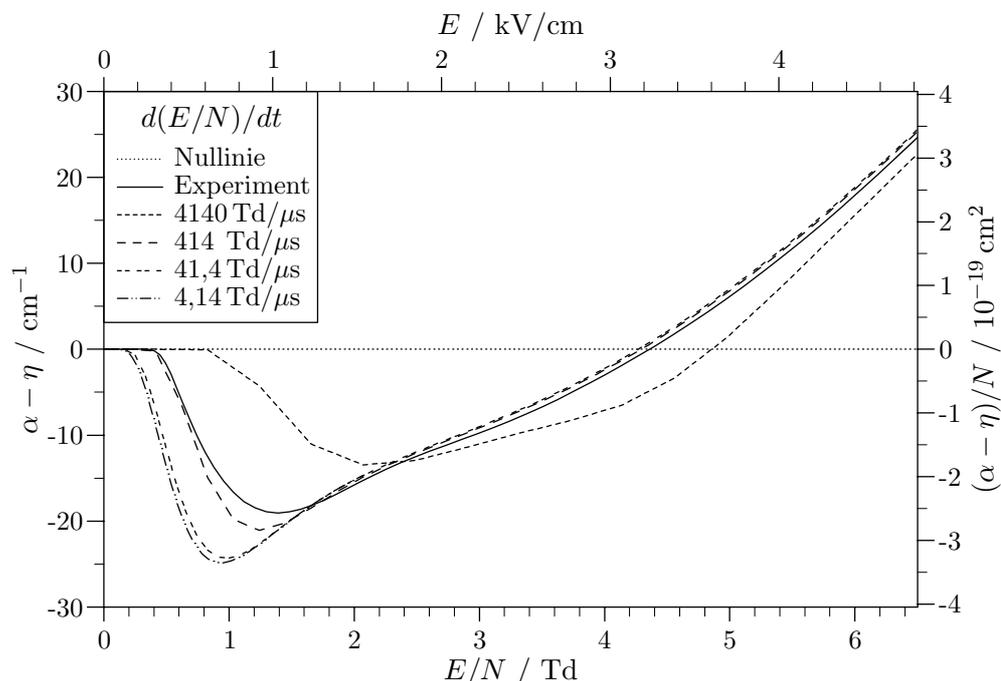


Abbildung 2.4: Effektiver Ionisierungskoeffizient bei Standardbedingungen für verschiedene Feldstärkeanstiege.

$E/N$ -abhängig betrachtet. Ihre Genauigkeit ist weniger durch Näherungen bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung als vielmehr von Unsicherheiten in den zugrundeliegenden Stoßquerschnitten bestimmt.

Falls die Elektronenenergie überwiegend durch Stöße in niedrigen Energiebereichen ausgetauscht wird, folgt der instationäre Isotropanteil der Elektronenverteilungsfunktion einer elektrischen Feldänderung nur mit Verzögerung [BACKHAUS92, Abschn. 2.4.4]. Dieser Zusammenhang ist unvereinbar mit der LFA und der gewählten Darstellung der Koeffizienten. Der resultierende Fehler wird besonders deutlich beim für die Elektronenkinetik maßgebenden effektiven Ionisierungskoeffizienten  $\alpha - \eta$ , der in Abbildung 2.4 für das Standardgasgemisch bei unterschiedlichen Spannungsanstiegen dargestellt ist. Es werden der experimentelle Spannungsverlauf aus Abbildung 2.3 und vier verschiedene zeitlich lineare Anstiege der elektrischen Feldstärke vorgegeben. Bei niedrigen Feldstärken zeigt sich für schnelle Spannungsanstiege ein deutlicher Einfluß, während die Abweichungen für hohe Felder klein sind. Rechnungen des vollständigen homogenen Modells mit verschiedenen Stufen der Instationarität führen für den gesamten Entladungsverlauf zu nur geringen

Fehlern der Elektronendichte [BACKHAUS92, Unterkap. 4.2], so daß die Näherung rein  $E/N$ -abhängiger Koeffizienten für diese Arbeit als ausreichend angesehen wird. Gemessene Koeffizienten stimmen im Rahmen der theoretischen und experimentellen Ungenauigkeiten überein [LÜCK92].

Die in den Kapiteln 3 und 4 verwendeten Reaktions- und Transportkoeffizienten setzen sich aus zwei Berechnungen des Modells PINBED zusammen. Für niedrige  $E/N$  bis 11,3 Td wird ein Datensatz benutzt, der mit einem flachen Anstieg der Feldstärke von 41,4 Td/ $\mu$ s (Abbildung 2.4) generiert wurde. Daran schließt sich ein Datensatz bis 53,8 Td bei einem Feldstärkeanstieg von 4,14 Td/ns an. Die Daten werden als Tabelle in das Computerprogramm eingelesen und Zwischenwerte mittels linearer Interpolation bestimmt. In Kapitel 4 treten vor der Kathode reduzierte Feldstärken bis 200 Td auf, Koeffizienten für diesen Bereich werden mittels linearer Extrapolation genähert. Der beschriebene Datensatz aus Ionisations-, Attachment- und Elektronendiffusionskoeffizient sowie Elektronenbeweglichkeit für das Standardgasgemisch ist in den Abbildungen 2.5–2.8 gezeigt, er wurde in gleicher Weise bereits von Simon benutzt [SIMON93].

In den Graphiken sind vier weitere Datensätze eingezeichnet, die von Bordage für das identische Gasgemisch mit einem anderen Programm zur Lösung der Boltzmann-Gleichung berechnet wurden [BORDAGE91, BORDAGE93]. Dabei kamen sowohl eine Zweiterm-Näherung als auch eine Multitermberechnung zum Einsatz. Für beide Programmversionen wurden je zwei Rechnungen mit unterschiedlichen Stoßquerschnitten ausgeführt, zum einen mit den von Bordage zusammengestellten, zum anderen mit denen von Loffhagen.

Insgesamt zeigen sich Abweichungen bis zu einem Faktor Zwei. Größere Unterschiede bei sehr niedrigen oder hohen Feldstärken sind durch ungenau bekannte Querschnitte bedingt und werden nicht weiter betrachtet, da sie im Rahmen dieser Arbeit nicht von Bedeutung sind. Während die Übereinstimmung für die Beweglichkeit in Abbildung 2.7 und die Diffusionskoeffizienten in Abbildung 2.8 sehr gut ist, zeigen sich bei den Reaktionskoeffizienten systematische Abweichungen. Der Ionisationskoeffizient in Abbildung 2.5 ist im Programm von Loffhagen durchweg höher als in allen Berechnungen von Bordage. Der Attachmentkoeffizient in Abbildung 2.6 ist dagegen kaum von dem Rechenverfahren abhängig, dafür deutlich von den verwendeten Stoßquerschnitten.

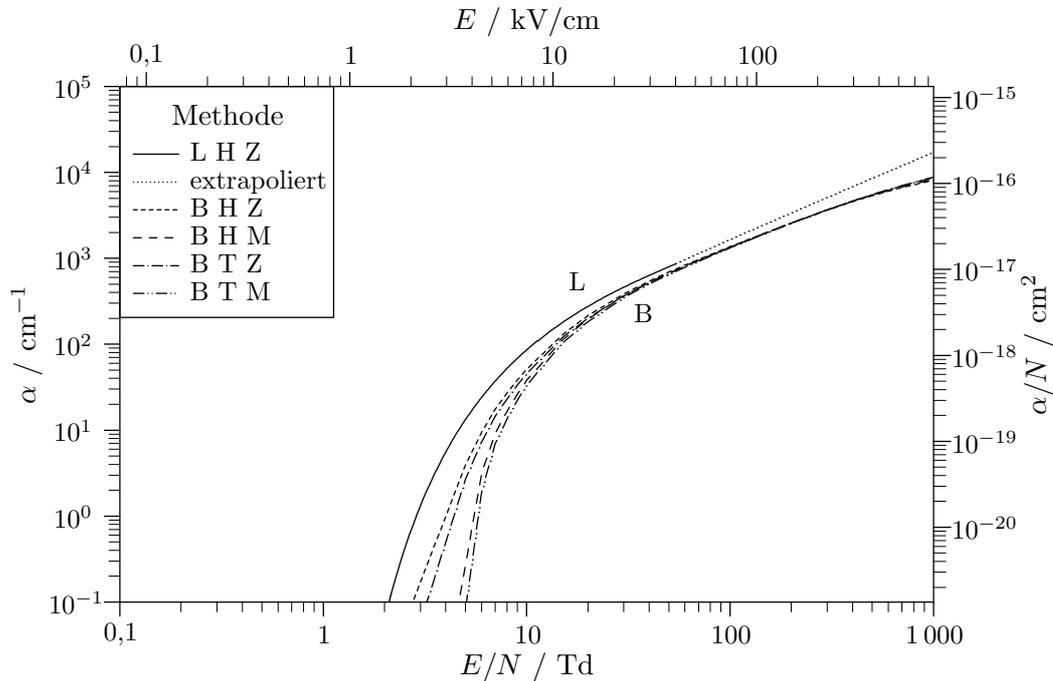


Abbildung 2.5: Ionisierungskoeffizient bei Standardbedingungen für unterschiedliche Berechnungsverfahren und Stoßquerschnitte:  
 L: Berechnet von **L**offhagen mit dem Programm PINBED  
 B: Berechnet von **B**ordage mit einem eigenen Programm  
 H: Stoßquerschnitte des Modells v. Loffhagen aus **H**annover  
 T: Stoßquerschnitte des Modells von Bordage aus **T**oulouse  
 Z: Elektronenverteilungsfunktion in **Z**weitermnaherung  
 M: Elektronenverteilungsfunktion in **M**ultitermnaherung.

Die vorliegenden Daten bestätigen die Gültigkeit der Zweitermnaherung zur Lösung der Boltzmann-gleichung. Die lineare Extrapolation der Koeffizienten bei hohen reduzierten Feldstärken läßt sich im Vergleich mit den Rechnungen von Bordage für den Ionisations- und Attachmentkoeffizienten und die Beweglichkeit rechtfertigen. Der Attachmentkoeffizient wird dagegen mit der Extrapolation für hohe  $E/N$  erheblich unterschätzt. Für die Ergebnisse dieser Arbeit hat das keine Folgen, denn die Elektronenkinetik wird bei hohen Feldstärken von der Ionisation dominiert, und negative Ionen spielen im Kathodenfall keine Rolle.

Bordage hat zusätzlich zum transversalen auch den longitudinalen Diffusionskoeffizienten berechnet. Aus Abbildung 2.8 wird ersichtlich, daß der longitu-

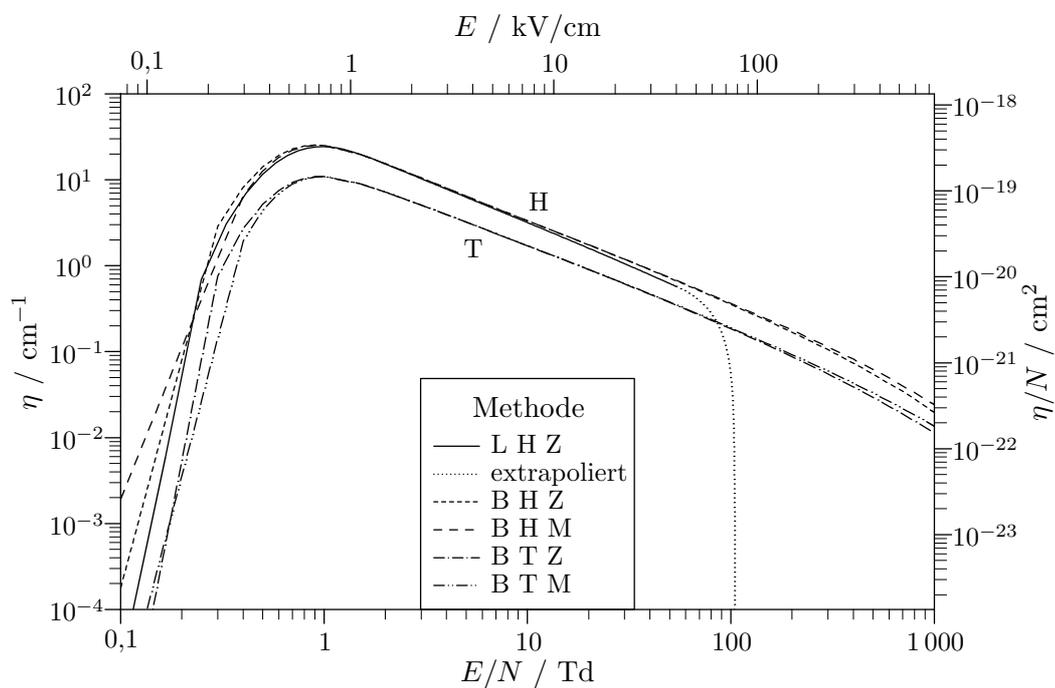


Abbildung 2.6: Attachmentkoeffizient für Bedingungen wie in Abbildung 2.5.

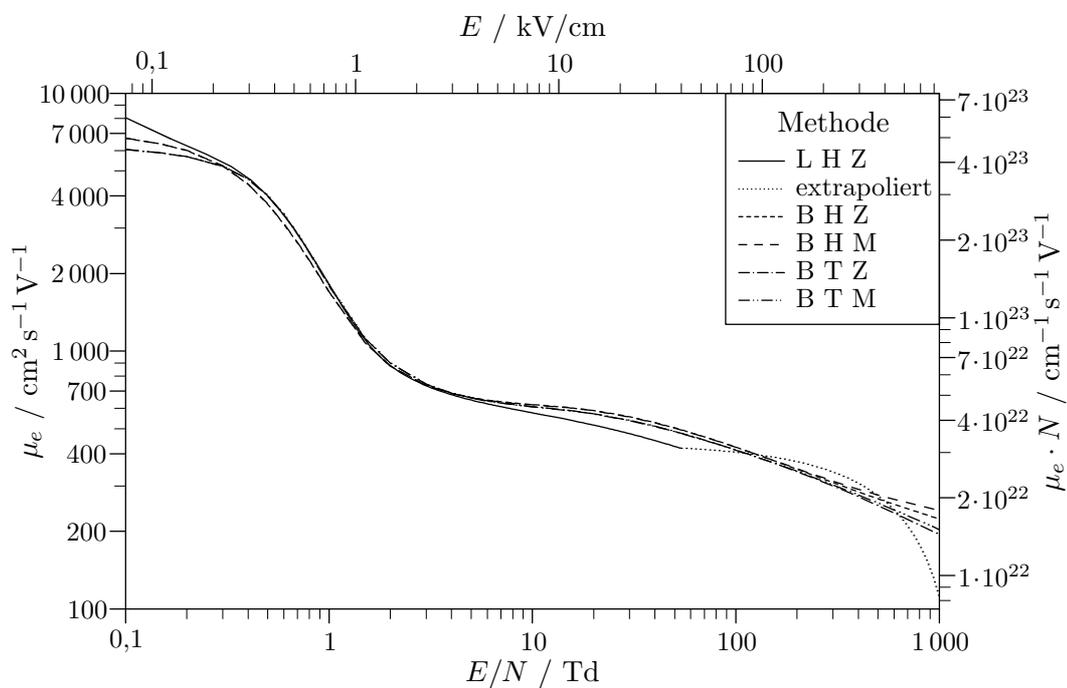


Abbildung 2.7: Elektronenbeweglichkeit für Bedingungen wie in Abbildung 2.5.

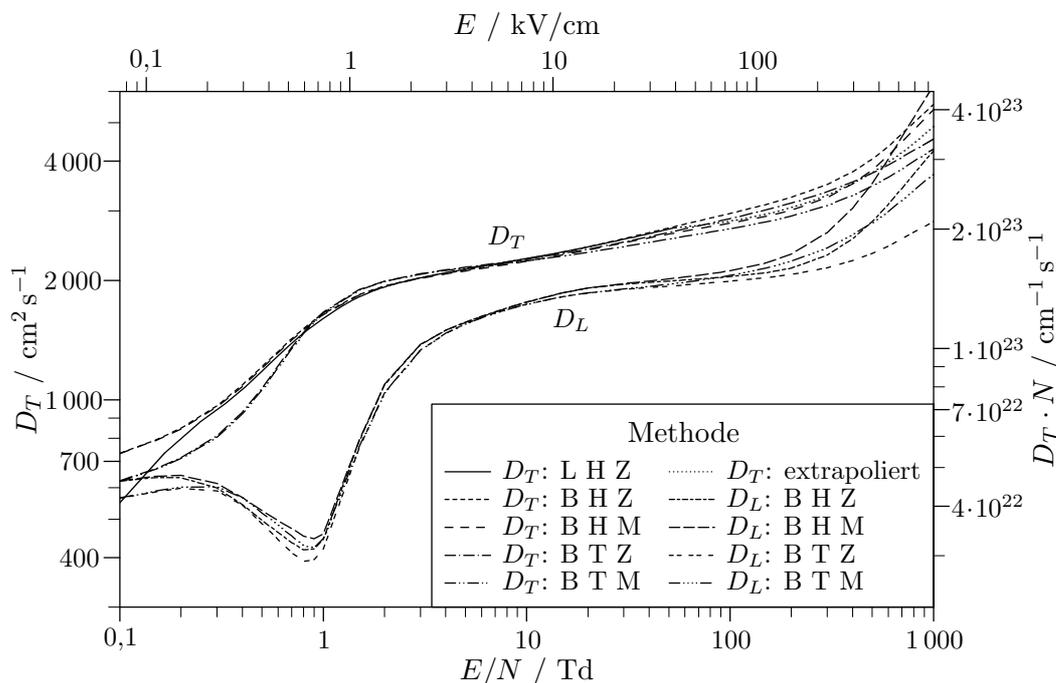


Abbildung 2.8: Transversaler und longitudinaler Diffusionskoeffizient für Bedingungen wie in Abbildung 2.5.

dinale durchweg kleiner als der transversale Diffusionskoeffizient ist; dies gilt genau dann, wenn die Elektronenstoßfrequenz mit wachsender Elektronenenergie zunimmt [PARKER69]. Für mittlere und hohe reduzierte Feldstärken beträgt die Abweichung etwa 50%, bei geringen Feldern bis zu einem Faktor vier. Durch die in dieser Arbeit gewählte Näherung  $D_L = D_T$  wird die longitudinale Diffusion somit überschätzt. Kontrollrechnungen zeigen aber, daß die vollständige Vernachlässigung der Diffusion keine qualitativen und nur geringe quantitative Auswirkungen hat, so daß die Gleichsetzung der Diffusionskoeffizienten nur einen geringen Fehler verursacht.

Im Bereich niedriger und mittlerer Felder wurden Reaktions- und Transportkoeffizienten bei einem linearen Anstieg der reduzierten Feldstärke von 414 Td/ $\mu\text{s}$  für verschiedene Partialdrücke der Grundgasbestandteile berechnet [BÖTTICHER91], sie sind in den Abbildungen 2.9–2.12 dargestellt.

Wenn Stöße mit Sekundärspezies keine Rolle spielen, wie in dieser Arbeit vorausgesetzt, gelten Ähnlichkeitsgesetze, die eine Druckskalierung zulassen [DREISKEMPER93A]. Insbesondere sind dann für ein festes Verhältnis der Konzentrationen der Grundgasbestandteile  $\alpha/N$ ,  $\eta/N$ ,  $\mu_e \cdot N$ ,  $D_T \cdot N$  und

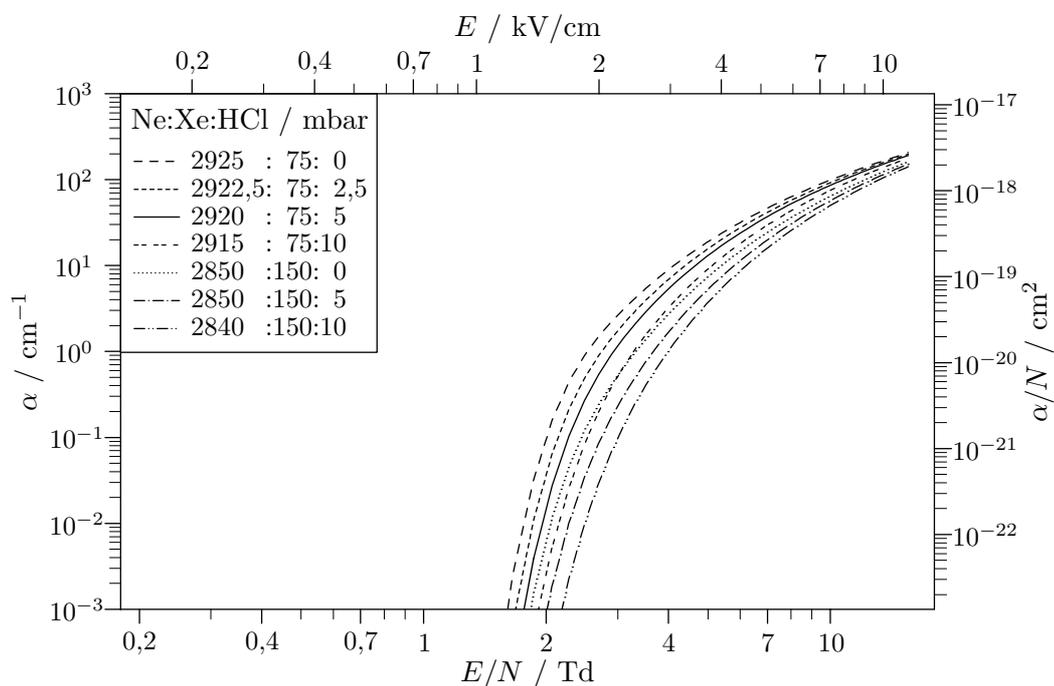


Abbildung 2.9: Ionisierungskoeffizient bei verschiedenen Partialdrücken der Grundgaskomponenten.

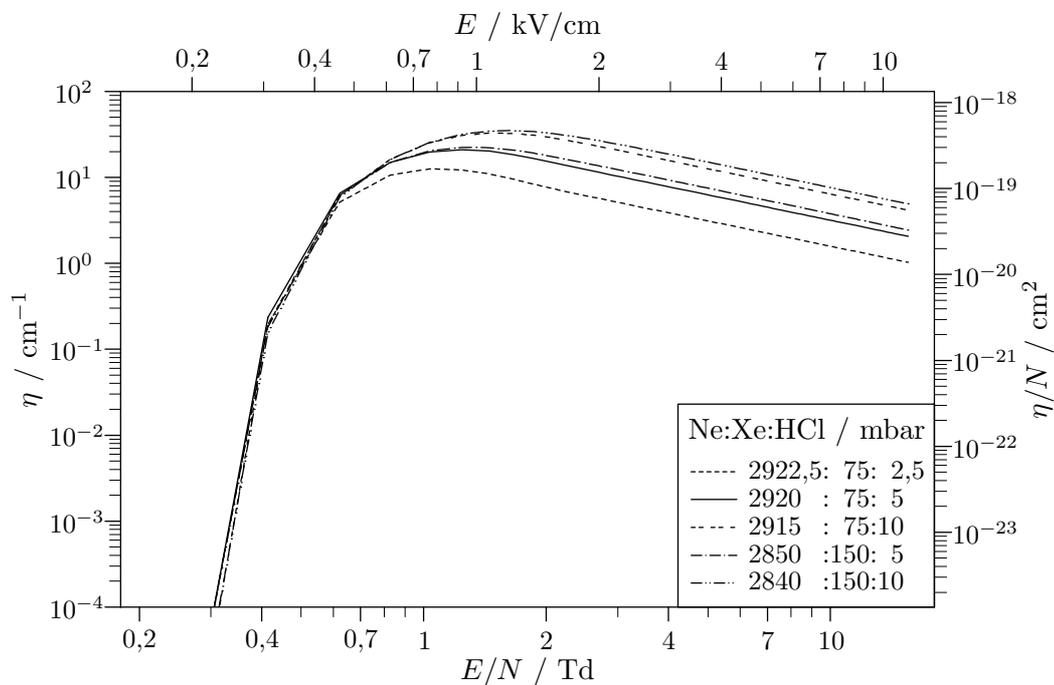


Abbildung 2.10: Attachmentkoeffizient bei verschiedenen Partialdrücken der Grundgaskomponenten.

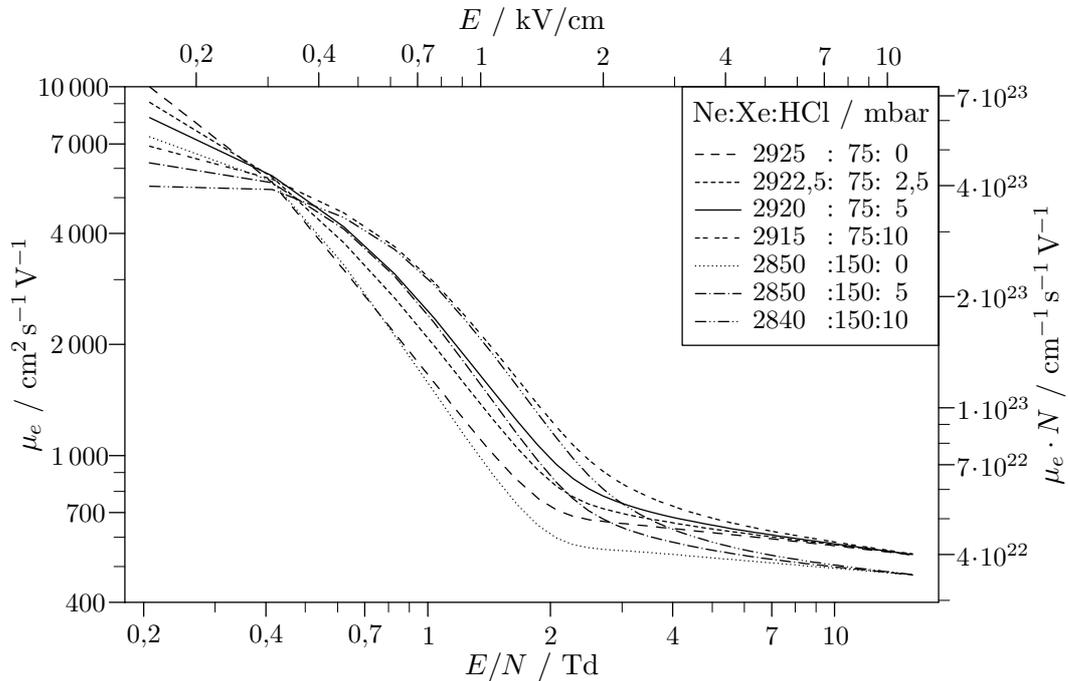


Abbildung 2.11: Elektronenbeweglichkeit bei verschiedenen Partialdrücken der Grundgaskomponenten.

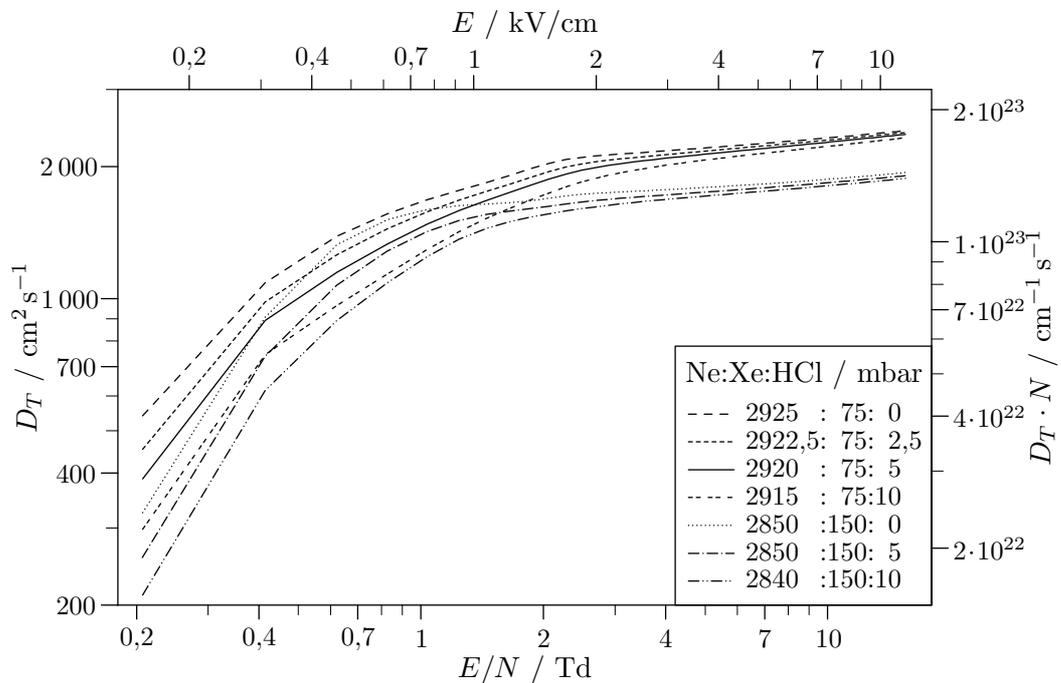


Abbildung 2.12: Transversaler Diffusionskoeffizient bei verschiedenen Partialdrücken der Grundgaskomponenten.

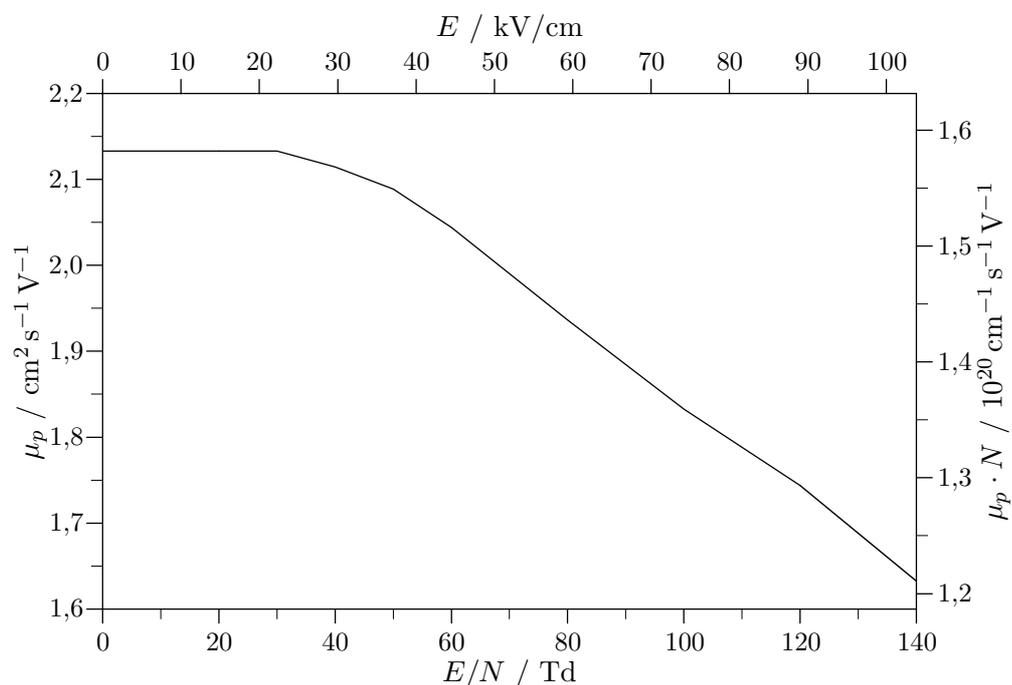


Abbildung 2.13: Beweglichkeit der positiven Ionen für Standardbedingungen.

$D_L \cdot N$  als Funktionen von  $E/N$  unabhängig vom Gesamtgasdruck, diese Größen sind jeweils auf der zweiten Ordinate angegeben.

Zur Berechnung der Sekundärelektronenemission in Abschnitt 2.3.5 wird die Beweglichkeit der positiven Ionen benötigt, unter den Bedingungen der betrachteten Entladung handelt es sich um die Bewegung von Xenonionen in Neon. Die von der reduzierten Feldstärke abhängige Ionenbeweglichkeit ist [ELLIS84] entnommen und in Abbildung 2.13 dargestellt.

### 2.4.3 Standardeingabeparameter

Tabelle 2.2: Standardentladungs- und -numerikbedingungen:

Grundgaskomponenten:	Ne:Xe:HCl
Partialdrücke:	2920:75:5 mbar
Gastemperatur:	293 K
Gesamtteilchenzahldichte:	$N = 7,417 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Elektrodenabstand:	$d = 1,80 \text{ cm}$
Sekundäremissionskoeffizient:	$\gamma = 0,1$
Vorionisation:	$n_{e0} = 10^9 \text{ cm}^{-3}$
Angelegte Spannung:	$U(t)$ in Abbildung 2.3
Transport- und Reaktionskoeffizienten:	Abbildungen 2.5–2.8 (L H Z), 2.13
Untersuchte Entladungsdauer:	24 ns
Startzeitschrittweite:	$\Delta t = 8 \text{ ps}$
Anzahl der axialen Zellen	$N_z = 1024$
Anzahl der radialen Zellen	$N_r = 99, N_R = 119$
Verhältnis der Ortsschrittweiten:	$\Delta r / \Delta z = 3$

## 2.5 Implementation

Die beschriebenen Algorithmen sind in FORTRAN 77 mit einigen Fortran 90-Erweiterungen verwirklicht. Das Programm ist modular aufgebaut, so daß alternative Verfahren oder Gaszusammensetzungen leicht zu realisieren sind. Der Code liegt vollständig im Quellformat vor, auf externe Programm-Bibliotheken wird nicht zurückgegriffen. Daher ist eine Portierung auf verschiedene Rechner prinzipiell einfach möglich und wurde im Laufe der Entwicklung des Programms mehrfach durchgeführt.

Vektorrechner wie Cray X-MP am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin oder Siemens S400 / VPP300 am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) in Hannover bieten für dieses Programm keinen Vorteil, da der Vektorisierungsgrad ungenügend ist.

Als gut geeignet erweisen sich dagegen schnelle Skalarrechner. Mit der Einführung einer Sun Ultra Enterprise 3000 am RRZN im Jahre 1997 reduzierte sich der Rechenzeitbedarf für eine typische Simulation auf einige CPU-

Stunden bei einem Rechengitter von  $1024 \times 99$  Zellen und einigen Tausend Zeitschritten. Darüber hinaus wurden Berechnungen mit einer Ortsauflösung möglich, die die Untersuchung des Kathodenfalls gestatten (Kapitel 4), bei einem Gitter von  $8192 \times 69$  Zellen beträgt die benötigte Rechenzeit etwa 80 CPU-Stunden. Der Hauptspeicherbedarf liegt für diese Rechnungen bei 50 bzw. 250 MByte.

Als Ergebnisse der Computersimulationen werden zweidimensionale Felder der Teilchendichten und Feldstärkekomponenten für ausgewählte Zeitpunkte oder -schritte ausgegeben. Die graphische Auswertung der großen Datenmenge erfolgt mit dem Programm Gsharp auf einer 1998 am RRZN installierten Sun Ultra 2.

# Kapitel 3

## Vorionisationsstörungen

In diesem Kapitel werden mit dem vorgestellten Modell Entladungen untersucht, deren homogene Vorionisation von einer rotationssymmetrischen Störung überlagert ist. Ausgehend von der homogenen Entladung in Unterkapitel 3.1 wird in Unterkapitel 3.2 gezeigt, wie aus der Störung Kanäle erhöhter Elektronendichte entstehen und sich zeitlich entwickeln. Unterkapitel 3.3 und 3.4 demonstrieren den Einfluß von Amplitude und Ausdehnung der Störung, verschiedene Stärken der Vorionisation werden in Unterkapitel 3.5 behandelt.

Ausgangspunkt ist eine Entladung der Grundgeometrie in Abbildung 2.1 bei Standardbedingungen (Abschnitt 2.4.3) mit dem Feldstärkeverlauf aus Abbildung 2.3. Zur Startzeit Null wird das Entladungsvolumen homogen vorionisiert und im Zentrum eine Störung in Form einer Gaußverteilung addiert:

$$n_e(r, z, t = 0) = n_{e0} \cdot \left( 1 + \Gamma e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda r_{\text{FWHM}}} r^2} e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda z_{\text{FWHM}}} \left(z - \frac{d}{2}\right)^2} \right) \quad (3.1)$$

$$n_p(r, z, t = 0) = n_e(r, z, t = 0) \quad (3.2)$$

$$n_n(r, z, t = 0) = 0. \quad (3.3)$$

In den hier dargestellten Berechnungen sind die Parameter dieser Anfangsbedingungen wie folgt gewählt:

Tabelle 3.1: Standardparameter des Störpulses {und gezeigte Variationen}:

Homogene Vorionisationsdichte:	$n_{e0} = 10^9 \text{ cm}^{-3}; \{10^6 \text{ cm}^{-3}\}$
Relative Zentralamplitude der Störung:	$\Gamma = 100; \{10\}$
Volle radiale Halbwertsbreite der Störung:	$\lambda_{r\text{FWHM}} = 1 \text{ mm}; \{0,2; 5 \text{ mm}\}$
Volle axiale Halbwertsbreite der Störung:	$\lambda_{z\text{FWHM}} = 1 \text{ mm}$

Der Aufbau eines Kathodenfalls wird in diesem Kapitel, wie in Abschnitt 2.3.5 beschrieben, numerisch unterdrückt, um eine Wechselwirkung mit den Phänomenen im übrigen Volumen zu vermeiden.

### 3.1 Homogene Entladung

Eine Entladung ohne Vorionisationsstörung ( $\Gamma = 0$ ) erfolgt, von Randeffekten abgesehen, gleichmäßig im gesamten Volumen und ist allein durch die Reaktionskinetik bestimmt. Die Elektronendichte für diesen Fall wird als *homogene Elektronendichte*  $\bar{n}_e$  definiert, sie läßt sich nach Integration der Gleichung (2.85) formal angeben zu

$$\bar{n}_e(t) \equiv n_{e0} \cdot e^{\int_0^t [\alpha(t') - \eta(t')] |\bar{v}_e(t')| dt'}. \quad (3.4)$$

Eine Berechnung mit den Methoden des Abschnitts 2.3.3 für zwei verschiedenen starke Vorionisationen ist in Abbildung 3.1 gezeigt. Bei niedrigen Feldstärken zu Beginn der Entladung bis 6 ns wird die Elektronendichte durch Attachment um 8 % reduziert, mit hohen Feldstärken im weiteren Verlauf überwiegt Ionisation, und die Elektronendichte geht in ein exponentielles Wachstum über. Im Vergleich zu der vom vollständigen homogenen Modell berechneten Elektronendichte bis 18 ns bei einer Vorionisation von  $10^9 \text{ cm}^{-3}$  [BACKHAUS92, Abb. 4.2] zeigt sich gute Übereinstimmung.

Verschiedene Stärken der Vorionisation führen in diesem Modell zu zeitversetzten, qualitativ gleichen Verläufen der Elektronendichte. Eine Verringerung der Vorionisationsdichte um drei Größenordnungen verzögert bei den gewählten Bedingungen den exponentiellen Anstieg der Elektronendichte um 4 ns.

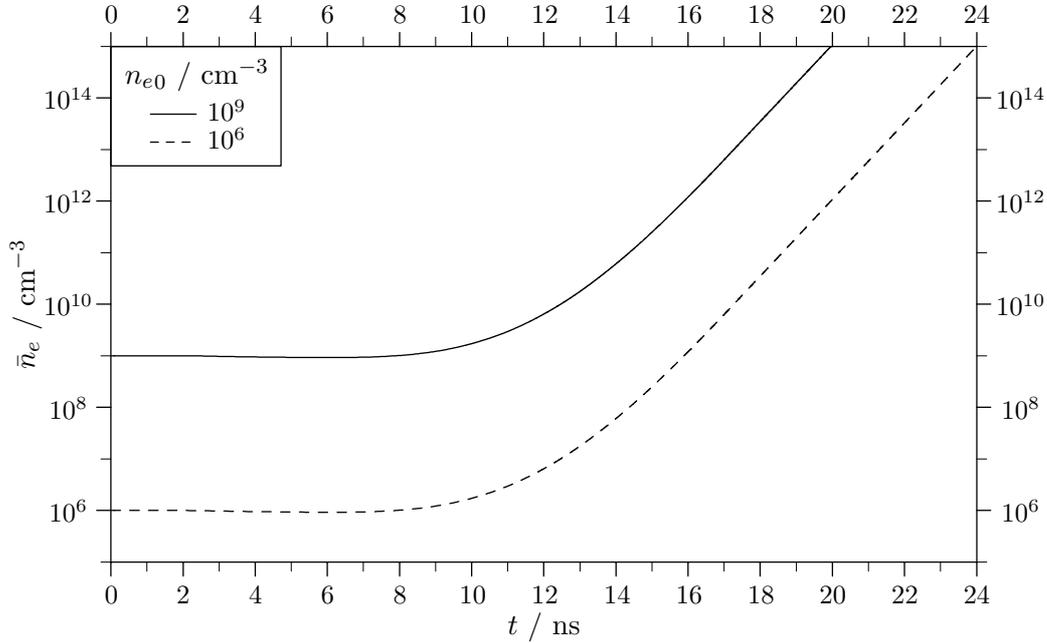


Abbildung 3.1: Elektronendichte bei rein homogener Vorionisation.

Zur anschaulichen Visualisierung der Entwicklung einer Inhomogenität werden im folgenden die berechneten Elektronendichten  $n_e$  auf die homogene Elektronendichte  $\bar{n}_e$  des jeweiligen Zeitpunkts bezogen. Die *normierte Elektronendichte*  $\tilde{n}_e$  wird definiert als

$$\tilde{n}_e(r, z, t) \equiv \frac{n_e(r, z, t)}{\bar{n}_e(t)}. \quad (3.5)$$

Als *normierte Feldstärke*  $\tilde{E}$  wird der Quotient der Beträge aus elektrischer Gesamtfeldstärke und von außen angelegter elektrischer Feldstärke bezeichnet:

$$\tilde{E}(r, z, t) \equiv \frac{|\vec{E}_{\text{ext}}(t) + \vec{E}_{\text{Rl}}(r, z, t)|}{|\vec{E}_{\text{ext}}(t)|}. \quad (3.6)$$

## 3.2 Standardstörpuls

In diesem Unterkapitel wird anhand einer Modellrechnung untersucht, wie eine Störung gemäß Standardparametern nach Tabelle 3.1 die Entwicklung einer ansonsten homogen vorionisierten Entladung beeinflusst. Zunächst werden die normierten Elektronendichten und Feldstärken auf der Achse in den Abbildungen 3.2 und 3.3 zu ausgewählten Zeitpunkten vorgestellt. Die axiale Koordinate ist auf der ersten Abszisse als Abstand von der Kathode in Millimetern und auf der zweiten Abszisse als Anzahl der Ortsschritte mit  $\Delta z = 18 \text{ mm}/1024 \approx 17,6 \mu\text{m}$  angegeben.

Bei 10 ns hat der gaußförmige Störpuls in der Darstellung der normierten Elektronendichte noch nahezu die ursprüngliche Struktur beibehalten, er ist in Richtung Anode gedriftet und um 20 % in der Amplitude geschrumpft. Bis zu diesem Zeitpunkt sind raumladungserzeugte elektrische Felder niedrig im Vergleich zum angelegten Feld, und die Multiplikation der Elektronendichte verläuft nahezu gleichmäßig im gesamten Volumen.

Die Lawine schneller Elektronen des Störpulses bildet nach Ionisation und Drift an ihrer Spitze eine negative Raumladung und hinterläßt eine positive Raumladung langsamer Ionen. Zwischen Kathode und positiver Raumladung sowie negativer Raumladung und Anode erhöht das resultierende Raumladungsfeld die Gesamtfeldstärke, während sie zwischen den Raumladungen verringert wird. Aus der Darstellung der normierten Feldstärke ist ersichtlich, daß die Felderhöhung bei 10 ns an den Flanken der Störung bis zu 5 % beträgt, während die Feldstärke im Zentrum um mehr als 10 % vermindert wird.

Da die Elektronendichte exponentiell vom Ionisierungskoeffizienten abhängt und dieser mit steigender Feldstärke monoton wächst, können schon geringe Feldänderungen einen bedeutenden Einfluß auf die Entladungsentwicklung ausüben. Im vorliegenden Fall wird die Amplitude der Störung verringert und ihre axiale Ausdehnung erhöht, wie den Darstellungen der nächsten Zeitschritte zu entnehmen ist.

Innerhalb von fünf Nanosekunden sinkt die Amplitude der normierten Elektronendichte des Störpulses auf ein Fünftel, und die Breite verdoppelt sich. Gleichzeitig erreicht die raumladungsbedingte Feldverzerrung Maximalwerte von fast 30 % der angelegten Feldstärke. Die Erniedrigung des Feldes im

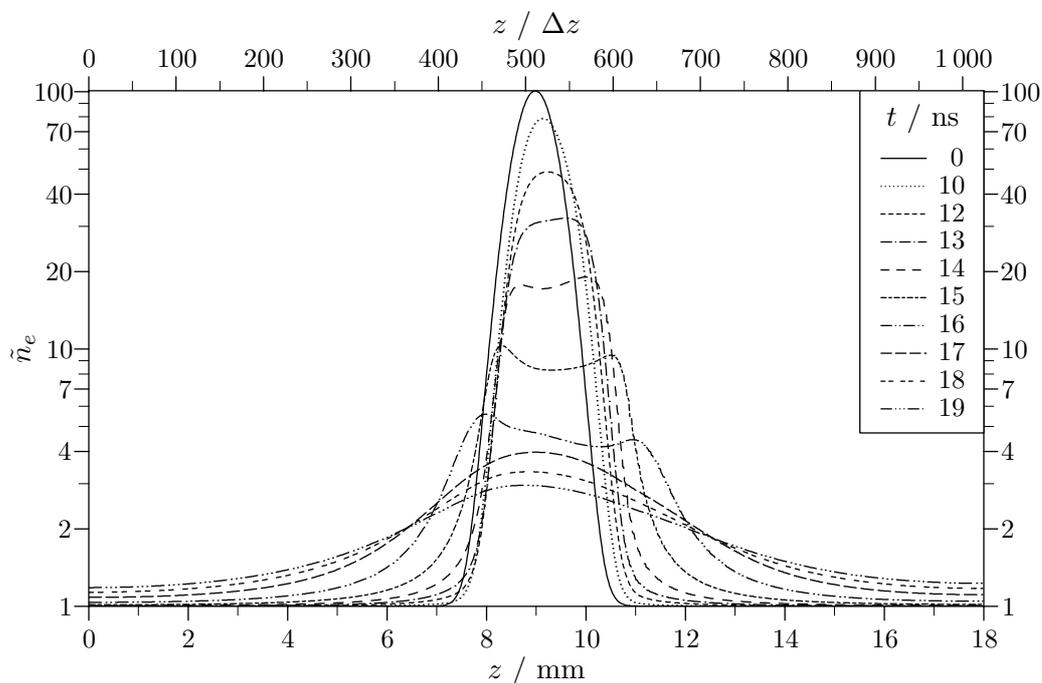


Abbildung 3.2: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Standardstörpuls.

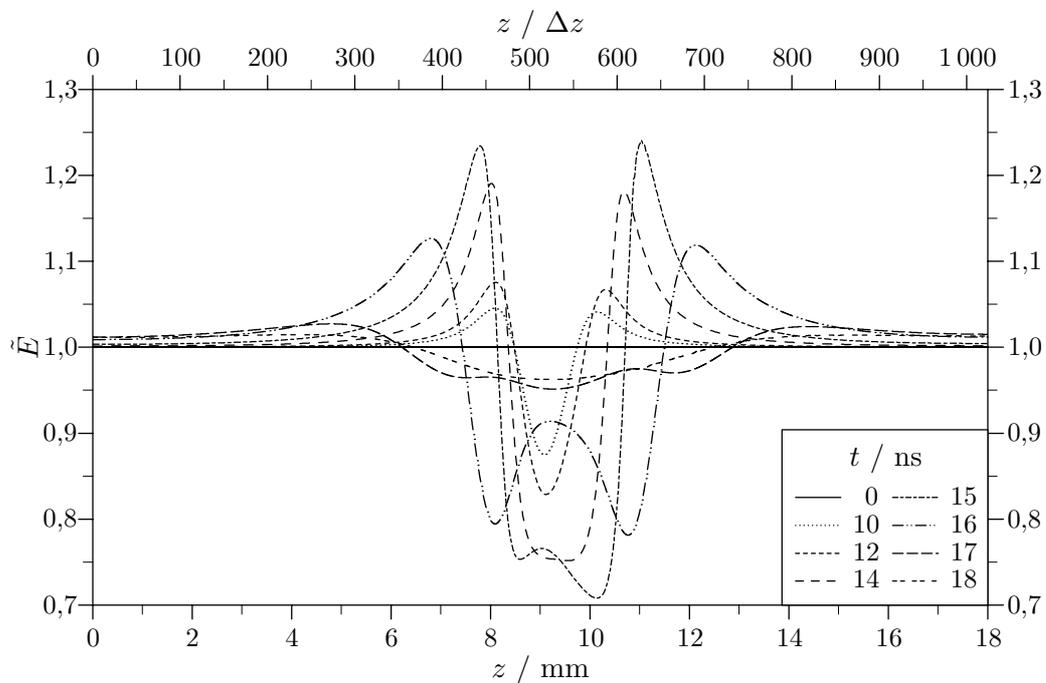


Abbildung 3.3: Normierte Feldstärke auf der Achse für einen Standardstörpuls.

Zentrum der Störung führt über eine Abflachung der Gaußstruktur zu einer Plateaubildung und schließlich ab 14 ns in der Mitte der Störung zu einer geringeren Elektronendichte als an den Flanken. In den betrachteten Zeiten steigt die Elektronendichte rapide an (Abbildung 3.1), so daß trotz der lokalisierten Abnahme der normierten Elektronendichte die realen Teilchendichten an allen Orten im Volumen steigen, wenn auch im Zentrum der Störung mit Verzögerung.

Ab 16 ns ist die normierte Elektronendichte im Störpuls so weit gefallen, daß auch die Feldverzerrungen zurückgehen. Die Störung nimmt nun wieder eine gaußförmige Struktur an mit einem Dreißigstel der Amplitude und dem Siebenfachen der Halbwertsbreite des Ausgangspulses. Die reduzierte Feldstärke ist im Zentrum der Störung noch einige Prozent erniedrigt und im restlichen Volumen erhöht, so daß eine weitere Angleichung der Elektronendichten im Volumen stattfindet.

Die Diskussion beschränkte sich bisher auf die physikalischen Größen an der Symmetrieachse und soll nun um die radiale Dimension erweitert werden. In den folgenden Abbildungen werden zweidimensionale Graphiken der normierten Elektronendichte und normierten Feldstärke präsentiert. Die Geometrie orientiert sich an Abbildung 2.2, wobei nur das vorionisierte Gebiet gezeigt wird. Wie bei der axialen sind auch die radialen Koordinaten als Länge und Ortsschritte angegeben mit  $\Delta r = 3 \cdot \Delta z \approx 52,7 \mu\text{m}$ . Der radiale Maßstab ist gegenüber dem axialen um einen Faktor Zwei gestreckt. Dargestellt sind Linien konstanter normierter Dichte bzw. Feldstärke in den Abstufungen 0,1, 0,2, . . . , 0,9, 0,95, 0,99, 1, 1,01, 1,05, 1,1, 1,2, 1,3, 1,4, 1,5, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 16, 32, . . . bei ausgewählten Zeitpunkten. Zur besseren Übersicht ist diese Information zusätzlich in Graustufen kodiert.

In den Abbildungen 3.4–3.7 werden die Isodensiten der normierten Elektronendichte für vier verschiedene Zeitpunkte vorgestellt. Während die ursprünglich gaußförmige Störung bei 12 ns noch weitgehend erhalten ist, weitet sie sich zu späteren Zeiten in axialer Richtung auf und erfährt eine drastische Reduktion der Amplitude.

In radialer Richtung hingegen dehnt sich der Störpuls nicht aus, sondern schnürt leicht ein. Um ihn herum entsteht ein Torus verringert normierter Elektronendichte, der bei 16 ns bis fast 0,5 herabreicht. Eine Erklärung für diese Entwicklung enthält die Darstellung der normierten Feldstärke exem-

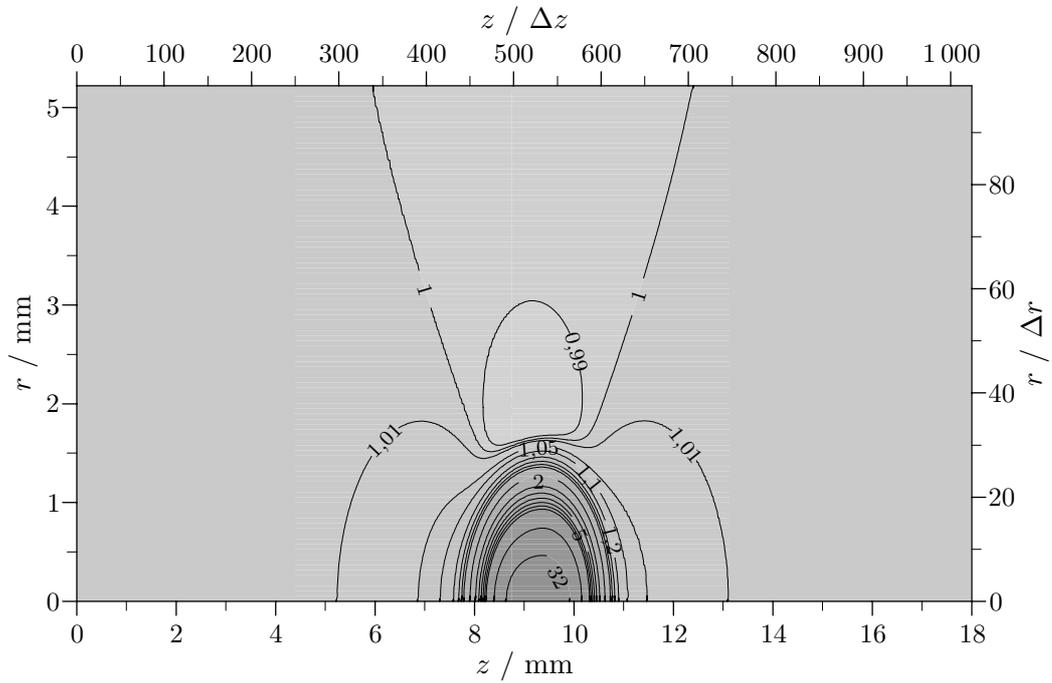


Abbildung 3.4: Normierte Elektronendichte für einen Standardstörpuls bei 12 ns ( $\bar{n}_e = 6,45 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ).

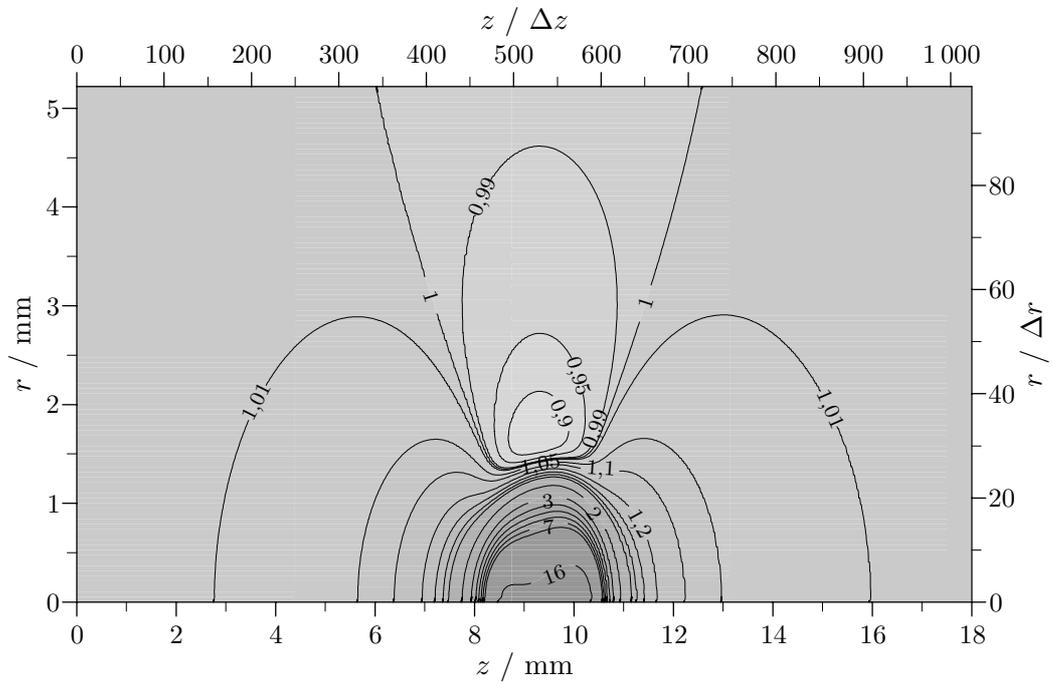


Abbildung 3.5: Normierte Elektronendichte für einen Standardstörpuls bei 14 ns ( $\bar{n}_e = 6,07 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ).

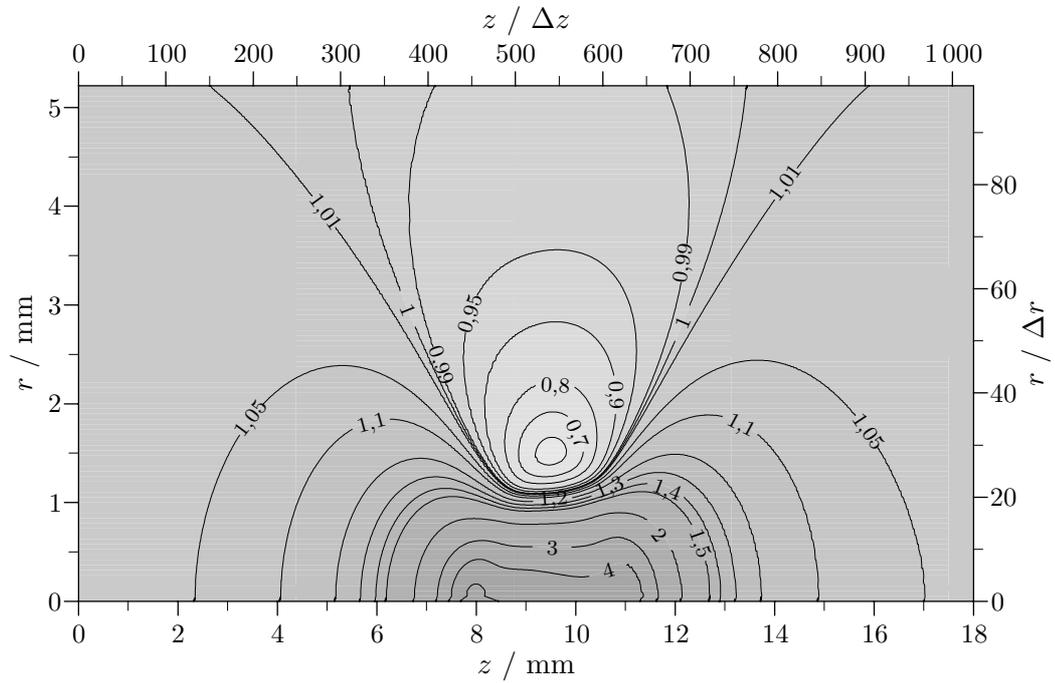


Abbildung 3.6: Normierte Elektronendichte für einen Standardstörpuls bei 16 ns ( $\bar{n}_e = 1,20 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

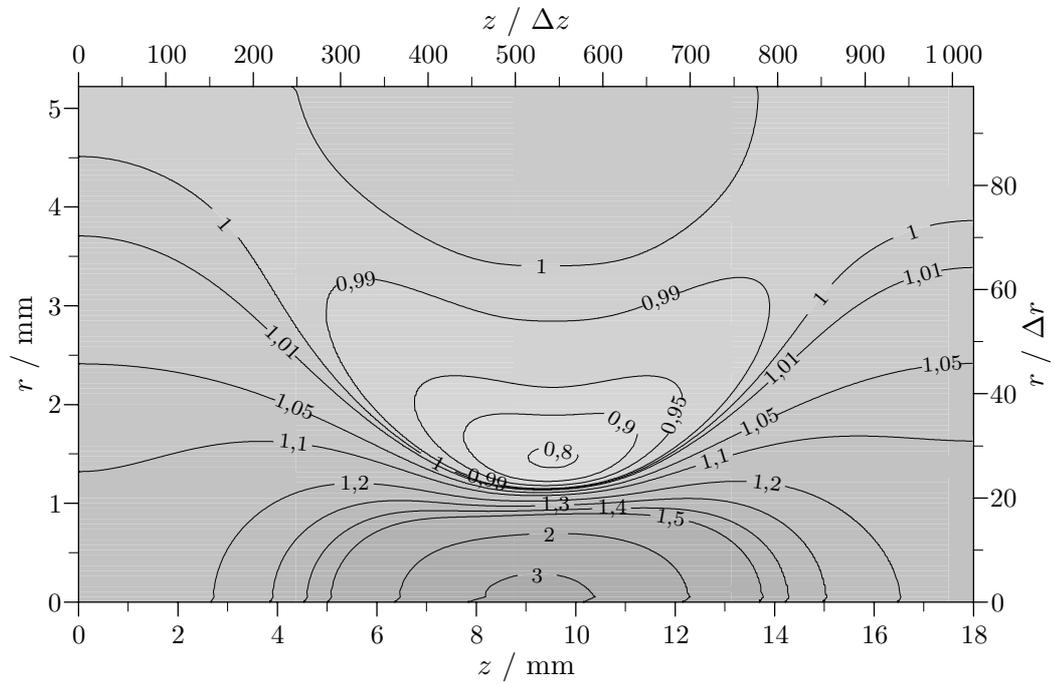


Abbildung 3.7: Normierte Elektronendichte für einen Standardstörpuls bei 18 ns ( $\bar{n}_e = 3,51 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

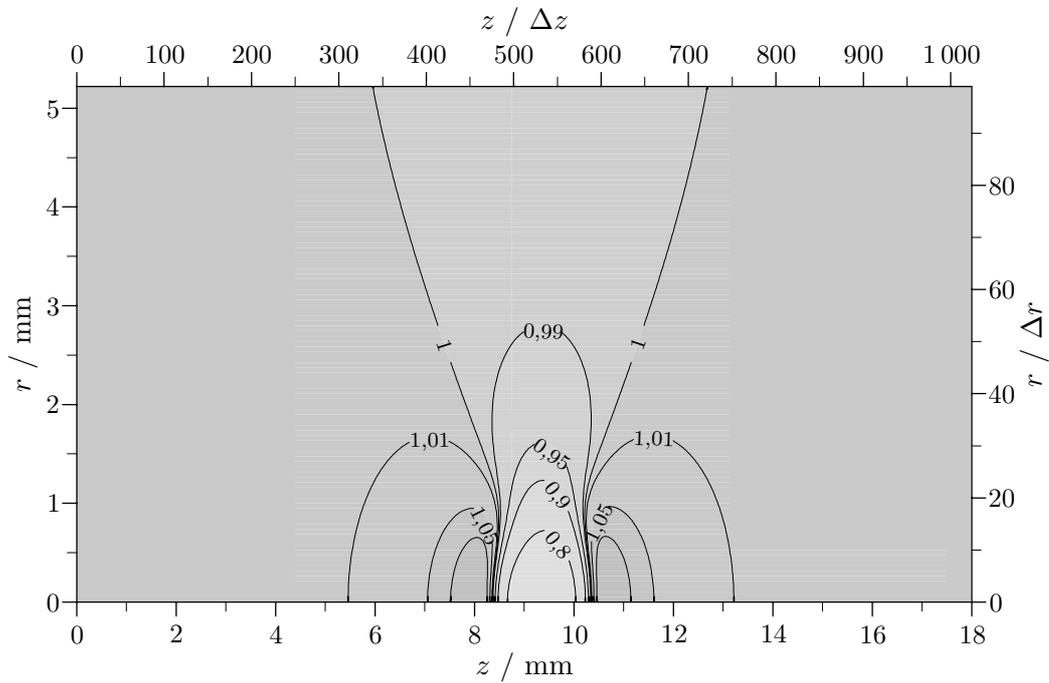


Abbildung 3.8: Normierte Feldstärke für einen Standardstörpuls bei 14 ns ( $|\vec{E}_{\text{ext}}| = 12,2 \text{ kV/cm}$ ).

plarisches bei 14 ns in Abbildung 3.8. An den Rändern der Störung ist die Feldstärke um über 10 % erhöht, in ihrem Zentrum um gut 20 % erniedrigt. Die Verringerung der Feldstärke in Entladungsmitte nimmt nach außen hin ab, gilt aber bis zum Rand der Entladung. Somit wird die Multiplikation der Elektronendichte in der Mitte der Störung stark behindert, aber auch am radialen Rand noch spürbar verzögert. Das elektrische Raumladungsfeld ist das eines ausgedehnten Dipols und nur in einer zweidimensionalen Berechnung zu erfassen.

Ergebnis der diskutierten Phänomene ist die Entstehung eines Kanals mit über 13 % überhöhter Elektronendichte bei 18 ns, der die Elektroden verbindet. Sein Radius entspricht etwa der vollen Halbwertsbreite der ursprünglichen Störung. Es sei angemerkt, daß Diffusionsvorgänge hier keine Bedeutung haben, wie eine Kontrollrechnung bei abgeschalteter Diffusion bestätigt.

### 3.3 Störung mit reduzierter Amplitude

Es wird nun der Einfluß einer Störung untersucht, deren Amplitude zu Beginn der Entladung mit  $\Gamma = 10$  statt 100 gewählt ist. Die Abbildungen 3.9 und 3.10 zeigen die normierte Elektronendichte und Feldstärke für diesen Fall, sie sind im Vergleich zu den Abbildungen 3.2 und 3.3 des Standardstörpulses zu betrachten.

Die Überhöhung der normierten Elektronendichte in der Störung wird erneut im Verlauf der Entladung abgebaut, allerdings mit Zeitverzug. Während im Standardstörpuls die normierte Elektronendichte bei 12 ns bereits auf die Hälfte gefallen ist, beträgt die Abnahme für die niedrigere Störung erst 13 %. Eine Plateaubildung in der Mitte der Störung tritt zwei Nanosekunden verzögert auf. Die anschließende kurzfristige Einschnürung im Zentrum ist nur schwach ausgeprägt.

Gegen Ende der Rechnung entwickelt sich die Struktur der Störung in beiden Fällen zu einer flachen gaußähnlichen Form. Im Vergleich zur normierten Elektronendichte des Standardstörpulses fällt eine schwächere normierte Elektronendichte in den axialen Bereichen fernab der Störung auf.

Auch beim niedrigeren Störpuls sinkt die normierte Feldstärke in der Mitte aufgrund von Raumladungseffekten, in den anderen Bereichen steigt sie. Während die Feldstärke im Zentrum noch um fast 20 % zurückgeht, beträgt ihre Erhöhung an den axialen Flanken der Störung nur noch weniger als 10 % und ist damit erheblich geringer als beim Standardstörpuls.

Mit der Darstellung der Isodensiten für drei Zeitpunkte in den Abbildungen 3.11 bis 3.13 werden die getroffenen Aussagen verdeutlicht. Noch bei 14 ns besitzt die normierte Elektronendichte weitgehend ihre ursprüngliche Gaußform. Zwar zeigt sich bei 16 und 18 ns eine axiale Aufweitung der Struktur, sie ist jedoch deutlich kürzer und etwas schmaler als beim Standardstörpuls. Im Bereich vor den Elektroden ist die Elektronendichte nur geringfügig überhöht, an der Achse um 2,7 % bei 18 ns. Im Gegensatz zum Standardstörpuls kommt es bei zehnfach reduzierter Amplitude nur zu einer stark verzögerten Entwicklung eines Kanals erhöhter Elektronendichte.

Weitere Variationen der Störpulsamplitude führen nicht zu neuen Effekten. Bei  $\Gamma = 1$ , also einer addierten Störung mit Maximalamplitude in Größe der

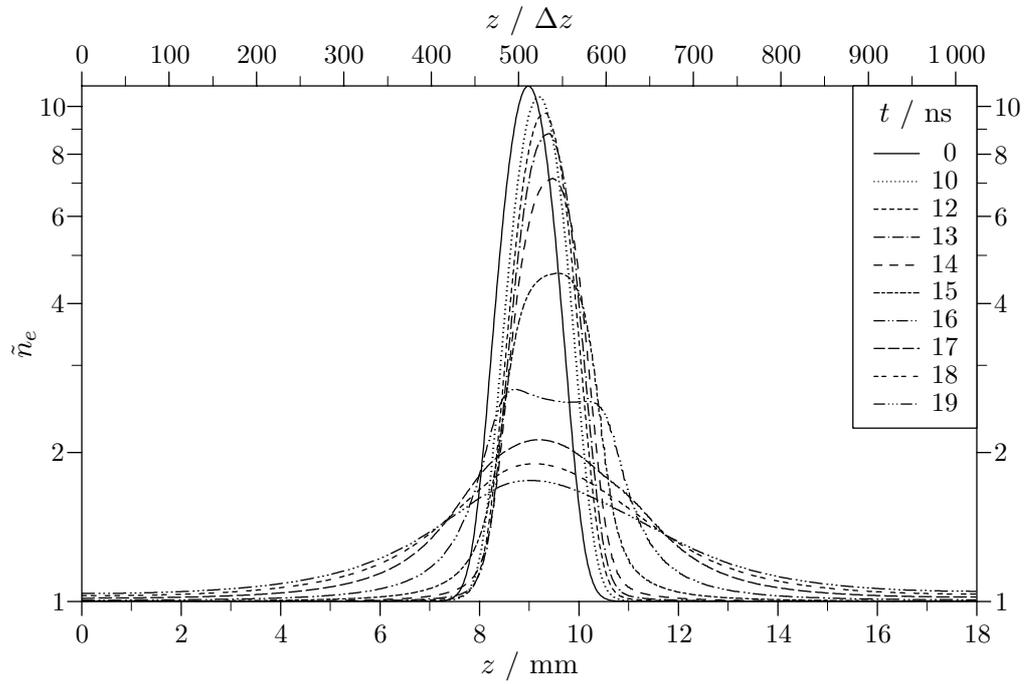


Abbildung 3.9: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Störpuls mit  $\Gamma = 10$ .

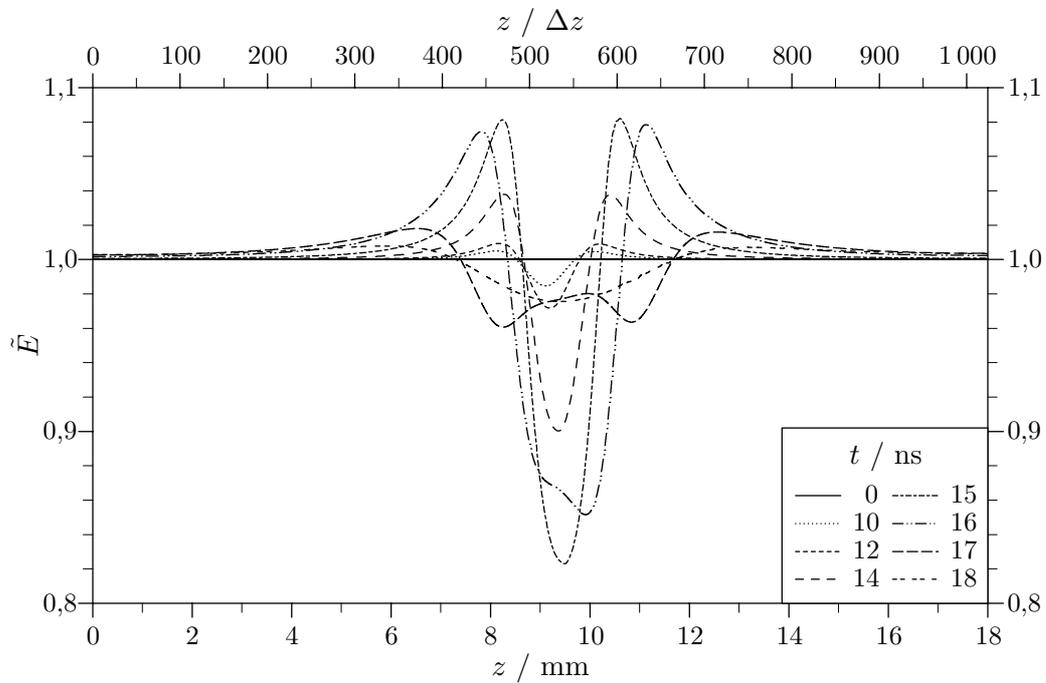


Abbildung 3.10: Normierte Feldstärke auf der Achse für einen Störpuls mit  $\Gamma = 10$ .

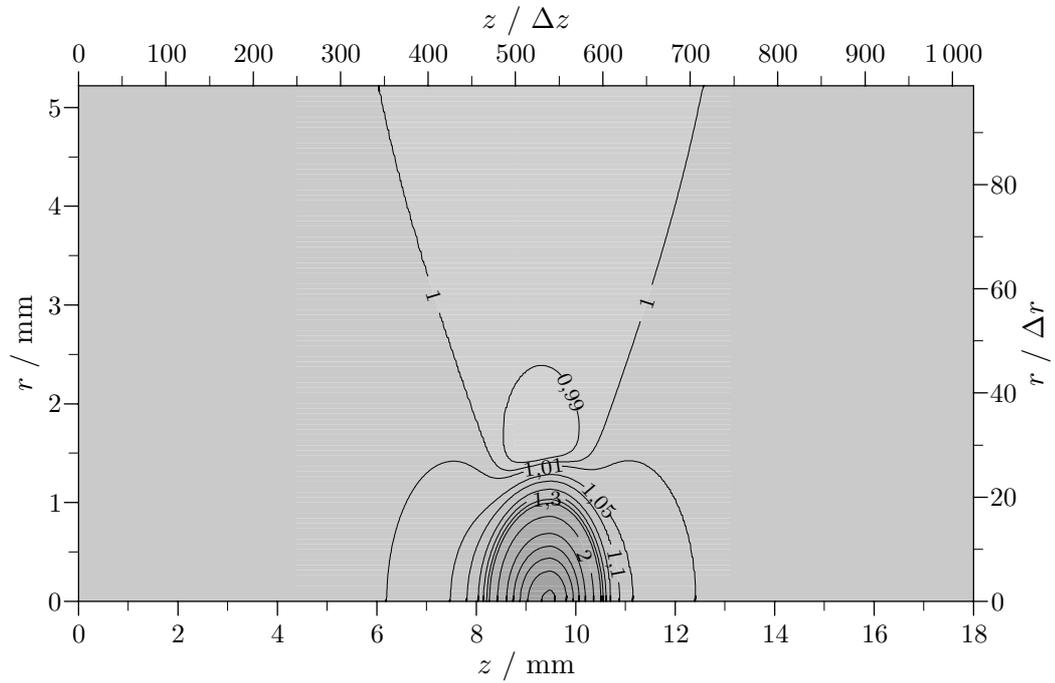


Abbildung 3.11: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\Gamma = 10$  bei 14 ns ( $\bar{n}_e = 6,07 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ).

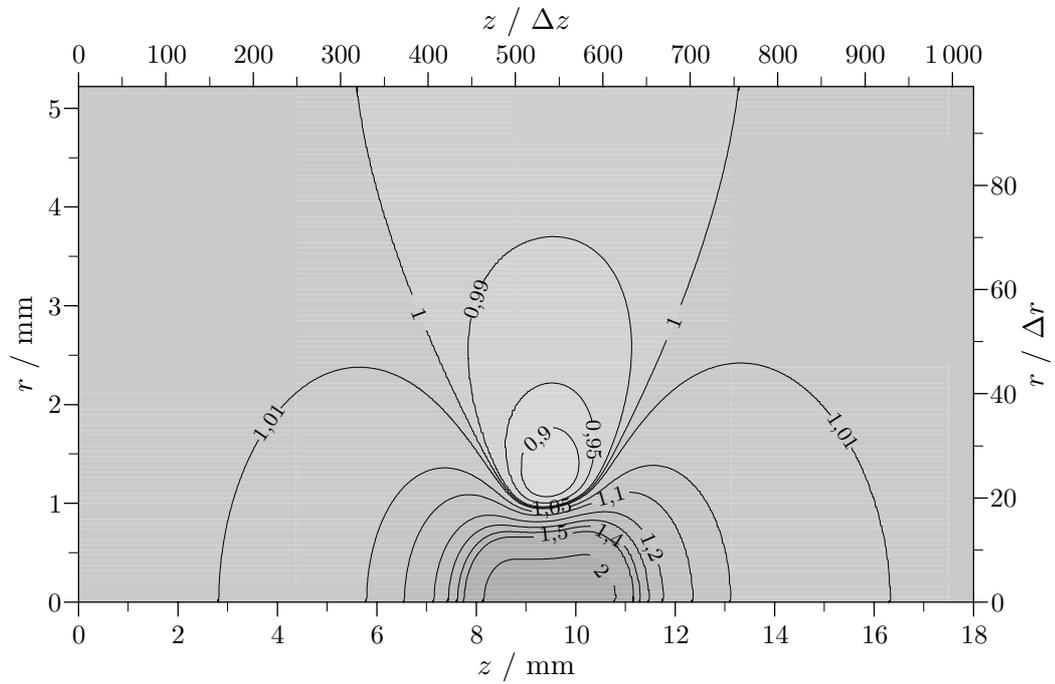


Abbildung 3.12: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\Gamma = 10$  bei 16 ns ( $\bar{n}_e = 1,20 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

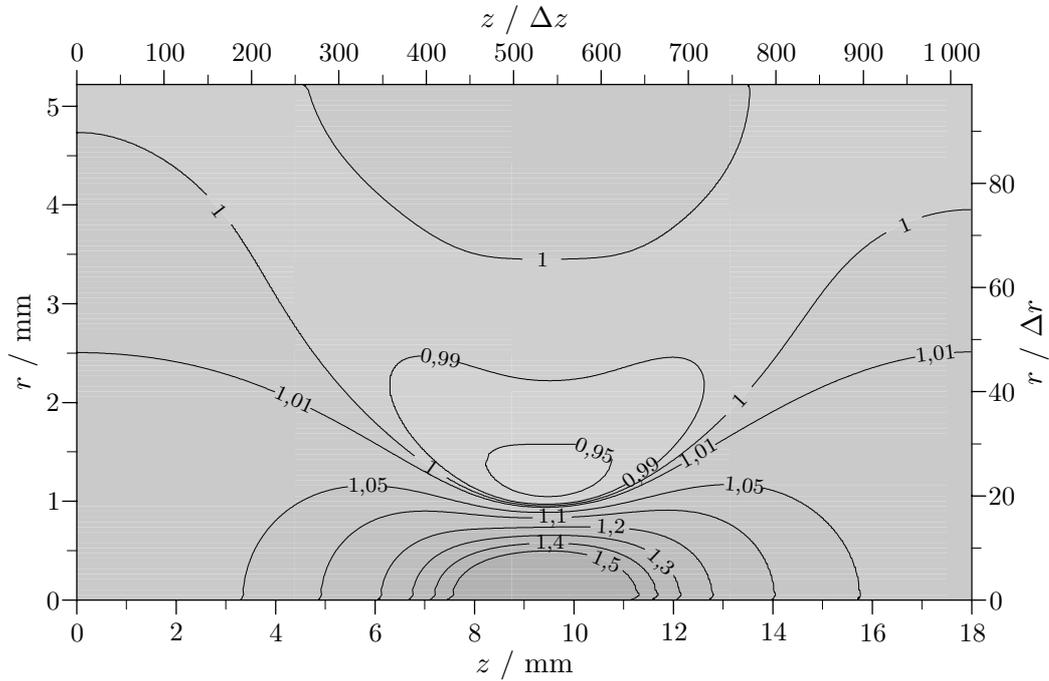


Abbildung 3.13: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\Gamma = 10$  bei 18 ns ( $\bar{n}_e = 3,51 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

Vorionisation, enthält der sich andeutende Kanal nur noch eine Erhöhung der normierten Elektronendichte von 0,4 % bei 18 ns. Auch für sehr starke Störungen nimmt die Entladung qualitativ den diskutierten Verlauf, es tritt aber eine Verstärkung der Raumladungseinflüsse auf. So entsteht mit  $\Gamma = 1000$  ein Kanal von 58 % überhöhter Elektronendichte.

### 3.4 Einfluß der Form der Störung

In diesem Unterkapitel werden Störungen untersucht, die von der bisher angenommenen Kugelsymmetrie abweichen. Zuerst wird eine Berechnung vorgestellt, in der die radiale Halbwertsbreite der Störung auf ein Fünftel reduziert ist, anschließend wird die Entwicklung einer um das Fünffache in radialer Richtung verbreiterten Störung verfolgt. Zur Gewährleistung einer angemessenen Gitterauflösung wurde die radiale Schrittweite gleichermaßen um den Faktor Fünf vergrößert bzw. verkleinert, ebenfalls ist der Maßstab in den folgenden Darstellungen der Isodensiten entsprechend angepaßt.

Mit der Wahl einer niedrigeren radialen Halbwertsbreite nimmt die Vorionisationsstörung die Form eines langgestreckten Ellipsoids an, dessen Dichte mit einer Gaußfunktion abfällt. Die normierte Elektronendichte auf der Achse in Abbildung 3.14 fällt in der Mitte dieser Entladung langsamer ab als beim Standardstörpuls. Es zeigt sich keine Plateaubildung oder Einschnürung im Zentrum, die Gaußform bleibt weitgehend erhalten. Die Störung verbreitert sich vergleichsweise langsam, und in entfernten Bereichen ist die Elektronendichte bei 18 ns nur um 1,5 % gegenüber der homogenen Elektronendichte erhöht.

Abbildung 3.15 zeigt, daß die normierte Feldstärke nur noch halb so stark zu- bzw. abnimmt wie beim Standardstörpuls. Sie fällt zudem an den axialen Flanken der Störung steiler ab und ist im restlichen Volumen kaum noch gegenüber der angelegten Feldstärke erhöht, dies ist eine Folge der spitzen Geometrie der Störung.

In den Abbildungen 3.16–3.19 sind die Isodensiten der normierten Elektronendichte für vier verschiedene Zeitpunkte dargestellt. Wie schon in der eindimensionalen Betrachtung zu erkennen, weitet sich die Störung in axialer Richtung zwar aus, bildet aber keinen Kanal erhöhter Elektronendichte. In radialer Richtung zeigt sich wie in den bisher betrachteten Rechenläufen eine Verminderung der normierten Elektronendichte, die hier durch „Ohren“ erhöhter Elektronendichte eng begrenzt ist.

Es wird nun eine Störung mit fünffach vergrößerter radialer Halbwertsbreite betrachtet, also ein zusammengedrücktes Ellipsoid. Die Abbildung 3.20 zeigt bedeutende Unterschiede im Verlauf der normierten Elektronendichte zu den bisher betrachteten Vorionisationsstörungen. Sie nimmt im Zentrum rapide ab, und zwischen 14 und 16 ns tritt eine erhebliche Einschnürung der Störung auf. Diese Phase endet abrupt bei 17 ns, ab dieser Zeit ist die Elektronendichte auf der gesamten Achse nahezu konstant 80 % über der homogenen Elektronendichte.

Die normierte Feldstärke auf der Achse in Abbildung 3.21 erfährt im Zentrum der Entladung einen stärkeren Rückgang als in den bisherigen Rechnungen, die Felderhöhungen an den Flanken der Störung sind jedoch nur vergleichsweise gering. Bei 16 ns wechselt aufgrund der starken Einschnürung der Elektronendichte in Entladungsmitte das Vorzeichen der Feldverzerrung. Im Zentrum besteht nun kurzfristig eine höhere Feldstärke als von den Elek-

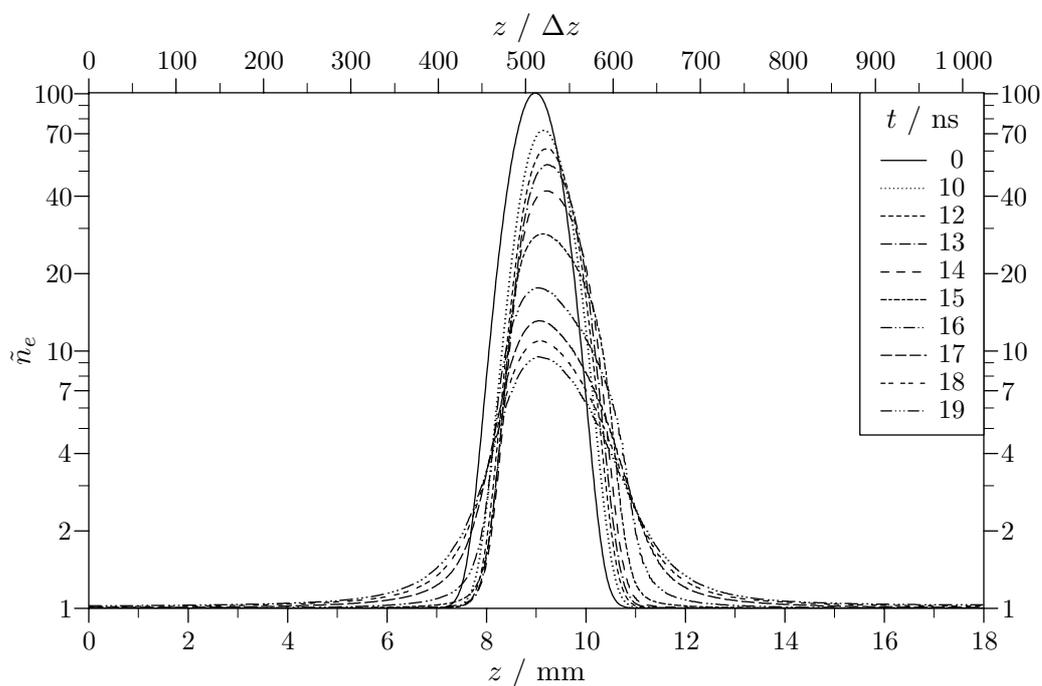


Abbildung 3.14: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Störpuls mit  $\lambda_{rFWHM} = 0,2 \text{ mm}$ .

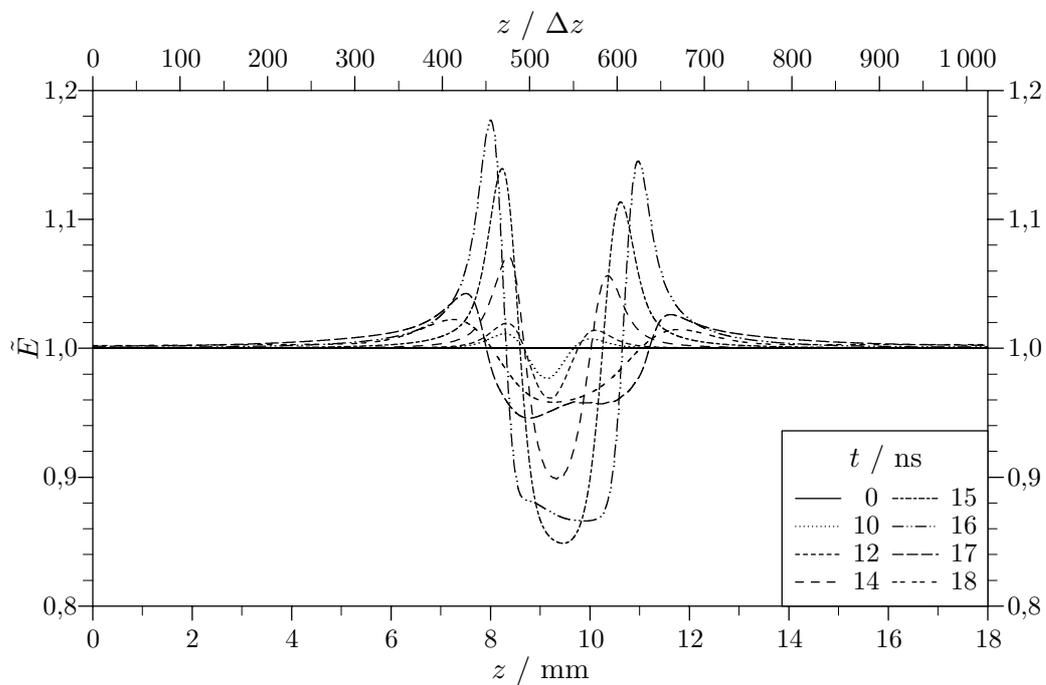


Abbildung 3.15: Normierte Feldstärke auf der Achse für einen Störpuls mit  $\lambda_{rFWHM} = 0,2 \text{ mm}$ .

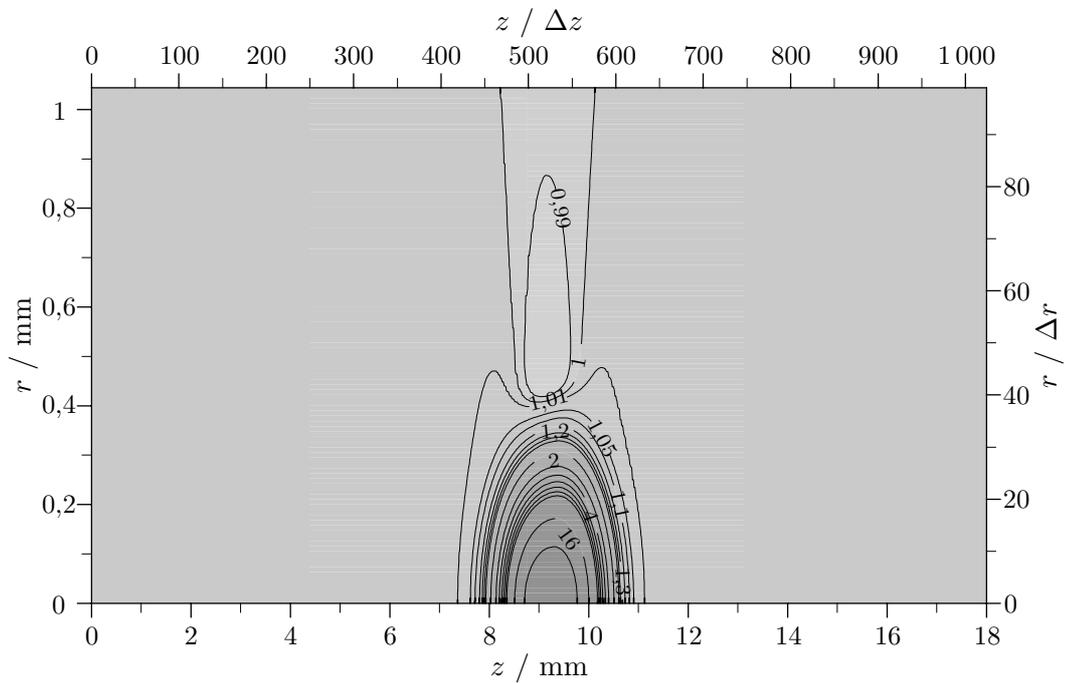


Abbildung 3.16: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 0,2$  mm bei 12 ns ( $\bar{n}_e = 6,45 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ).

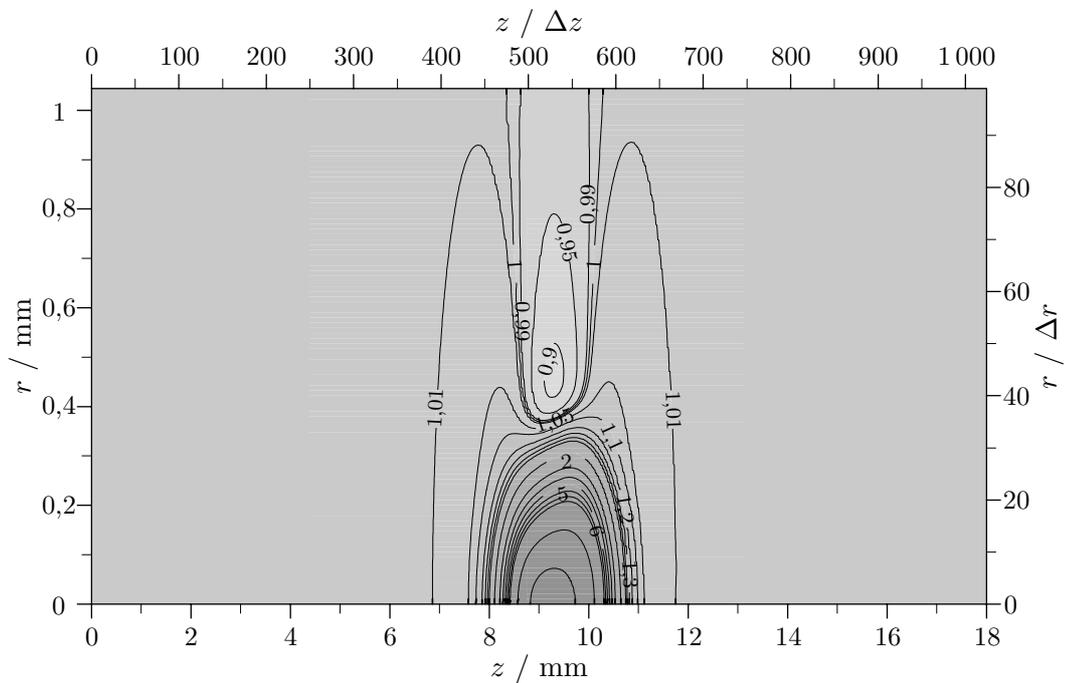


Abbildung 3.17: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 0,2$  mm bei 14 ns ( $\bar{n}_e = 6,07 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ).

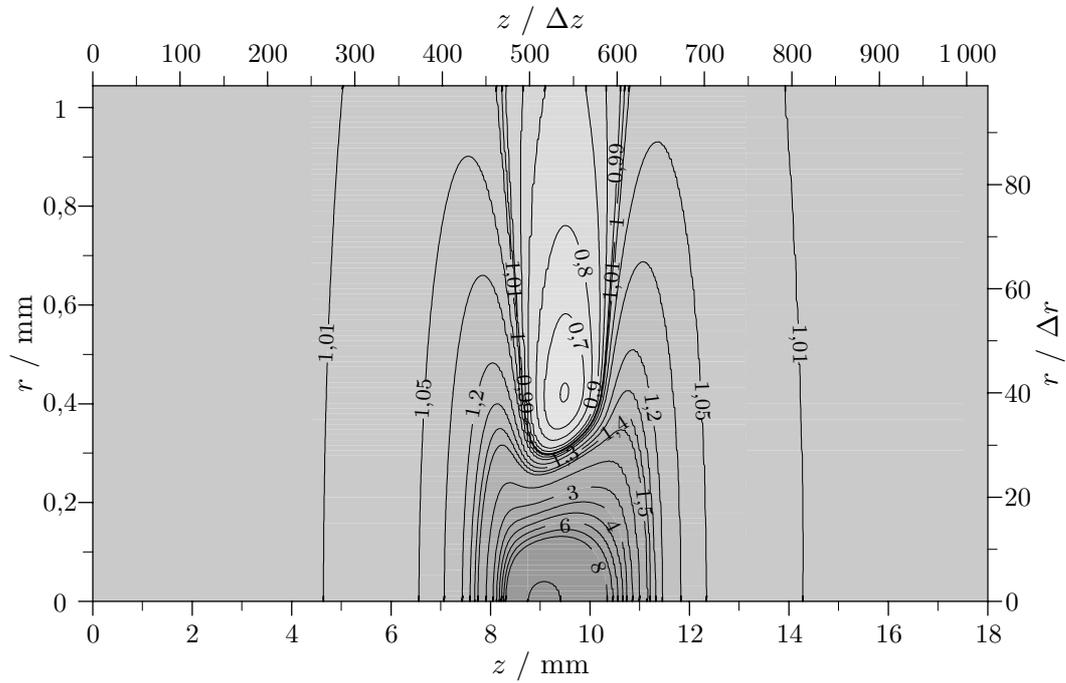


Abbildung 3.18: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 0,2 \text{ mm}$  bei 16 ns ( $\bar{n}_e = 1,20 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

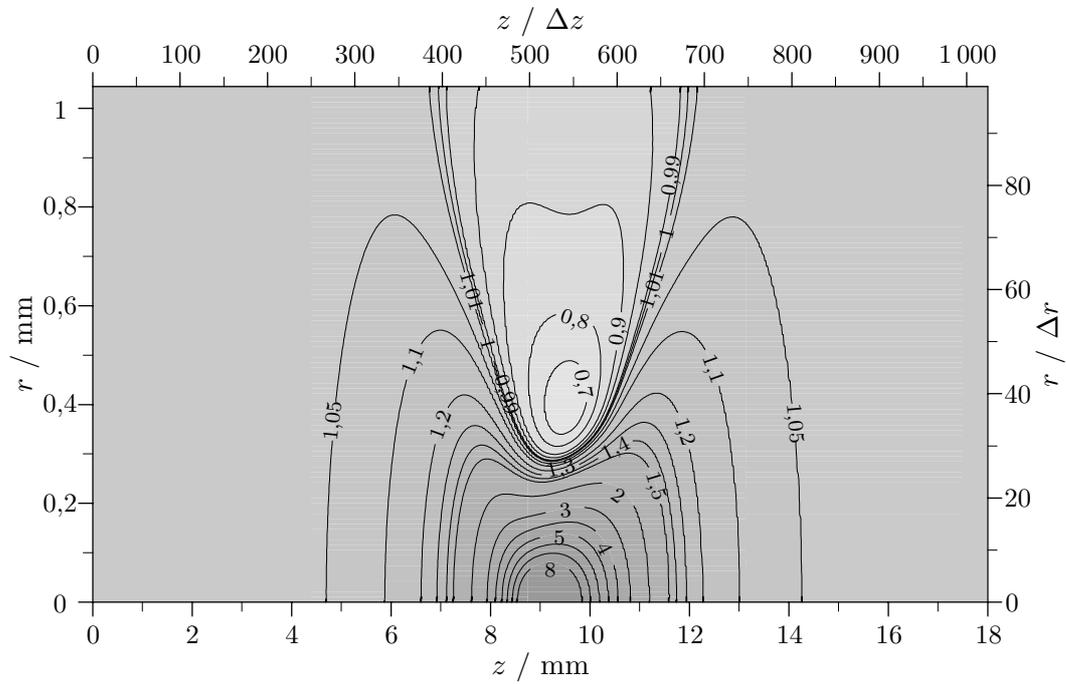


Abbildung 3.19: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 0,2 \text{ mm}$  bei 18 ns ( $\bar{n}_e = 3,51 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

troden angelegt, und unmittelbar an den axialen Rändern der Störung ist sie vermindert. Dies führt zu einer raschen Angleichung von bestehenden Raumladungsverteilungen und ab 18 ns zu vernachlässigbaren Feldverzerrungen.

Die Entwicklung der zweidimensionalen normierten Elektronendichte geht aus den Abbildungen 3.22–3.27 hervor. Schon bei 12 ns tritt eine Weitung der Störung in axialer Richtung auf, die sich mit den folgenden Zeitpunkten fortsetzt. Bei 14 und 15 ns entstehen auf der Achse neben der ursprünglichen Störung zwei Maxima der normierten Elektronendichte. Bei 16 ns kommt es dann zu einem Einbruch der normierten Elektronendichte im Zentrum, dem nur eine Nanosekunde später eine völlige Homogenisierung der Elektronendichte im gesamten achsnahen Bereich folgt. Bei 18 ns schließlich ist ein Kanal mit im Zentrum 80 % erhöhter Elektronendichte vollendet, der einen Durchmesser von etwa der Halbwertsbreite der Störung besitzt.

Ein Störpuls der Form des gestauchten Ellipsoids entwickelt auch bei niedrigerer Amplitude in gleicher Weise einen vollständigen Kanal, allerdings mit geringerer Elektronendichte. In Abbildung 3.28 ist dies für eine Störung mit  $\Gamma = 10$  anhand der normierten Elektronendichte auf der Achse gezeigt, es entsteht ein Kanal mit 22 % erhöhter Elektronendichte. Bei  $\Gamma = 1$  resultiert im Achsbereich noch eine um 4 % vermehrte Elektronendichte.

### 3.5 Störpuls bei niedriger Vorionisation

Es wird nun untersucht, wie sich eine Variation der homogenen Vorionisation auf die Entwicklung des Standardstörpulses auswirkt. Die folgende Modellrechnung geht von einer um drei Größenordnungen auf  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  reduzierten Vorionisationsdichte aus. Der Aufbau einer rein homogenen Entladung wird nach Abbildung 3.1 unter diesen Bedingungen um 4 ns verzögert.

In den Abbildungen 3.29 und 3.30 sind die normierte Elektronendichte und Feldstärke auf der Achse mit überlagertem Standardstörpuls dargestellt. Bis 14 ns driftet die Störung ohne Änderung der Form in Richtung Anode; entstehende Raumladungsdichten sind noch zu gering, um Einfluß auf die Gesamtfeldstärke ausüben zu können. Erst ab 16 ns werden Raumladungsfelder wirksam, und die Amplitude der normierten Elektronendichte verringert sich zunächst zögerlich, dann rapide. Gleichzeitig wächst die Breite der Störung.

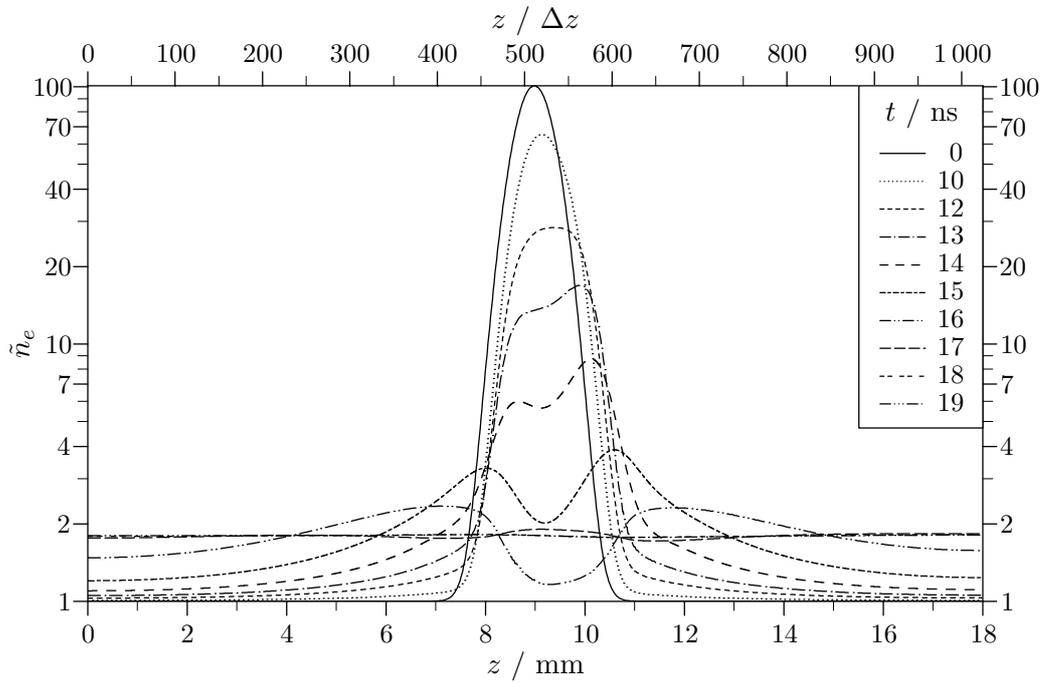


Abbildung 3.20: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Störpuls mit  $\lambda_{rFWHM} = 5$  mm.

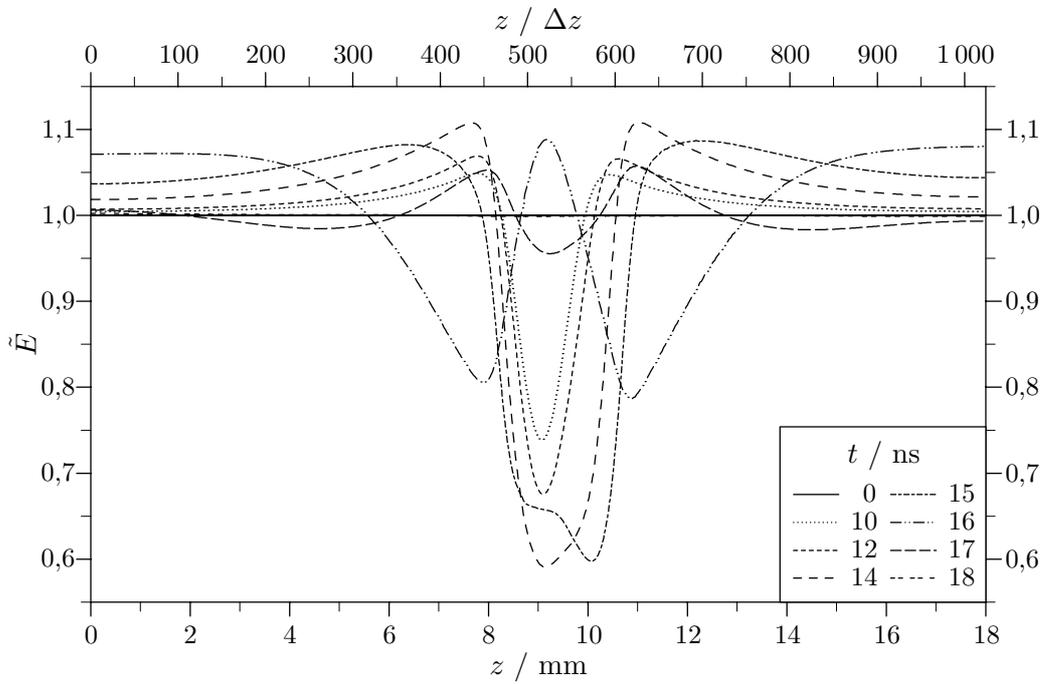


Abbildung 3.21: Normierte Feldstärke auf der Achse für einen Störpuls mit  $\lambda_{rFWHM} = 5$  mm.

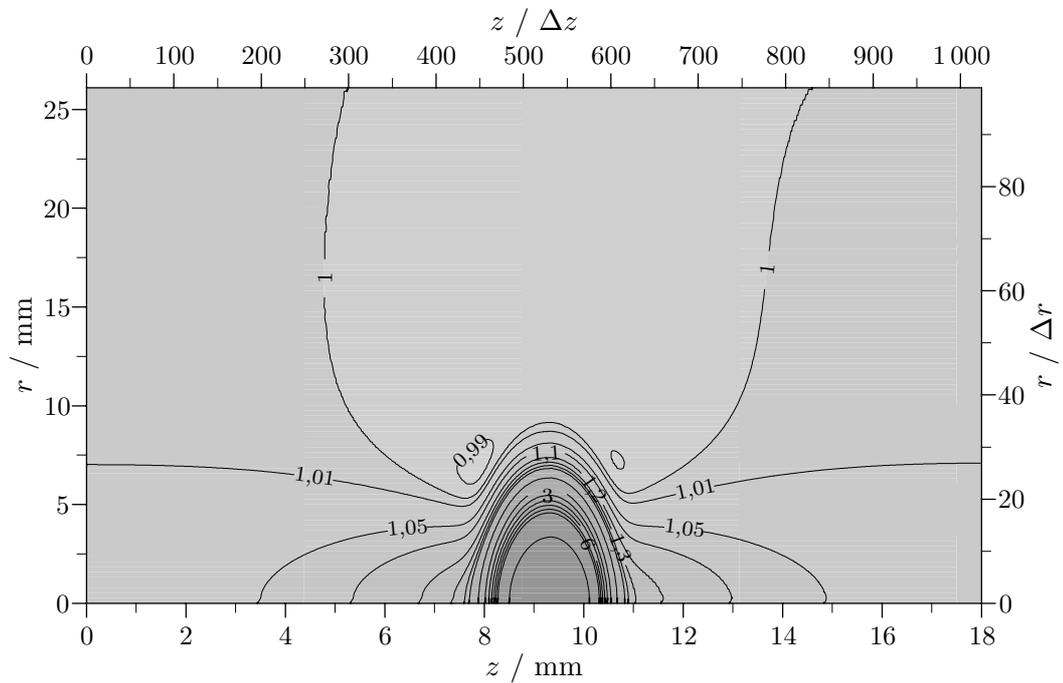


Abbildung 3.22: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5$  mm bei 12 ns ( $\bar{n}_e = 6,45 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ).

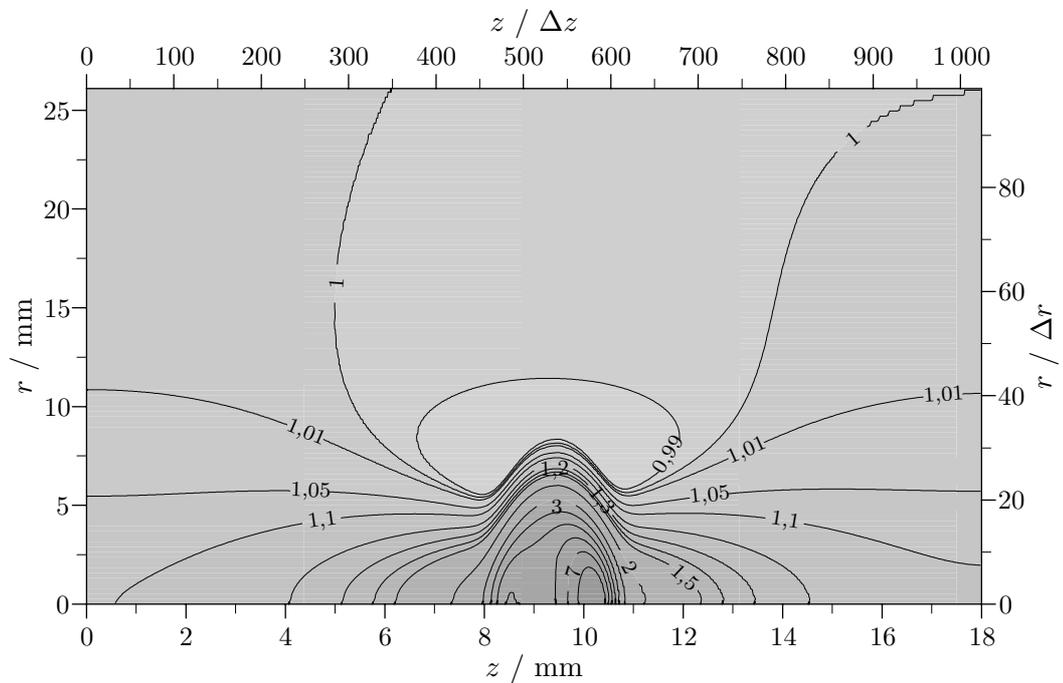


Abbildung 3.23: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5$  mm bei 14 ns ( $\bar{n}_e = 6,07 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ).

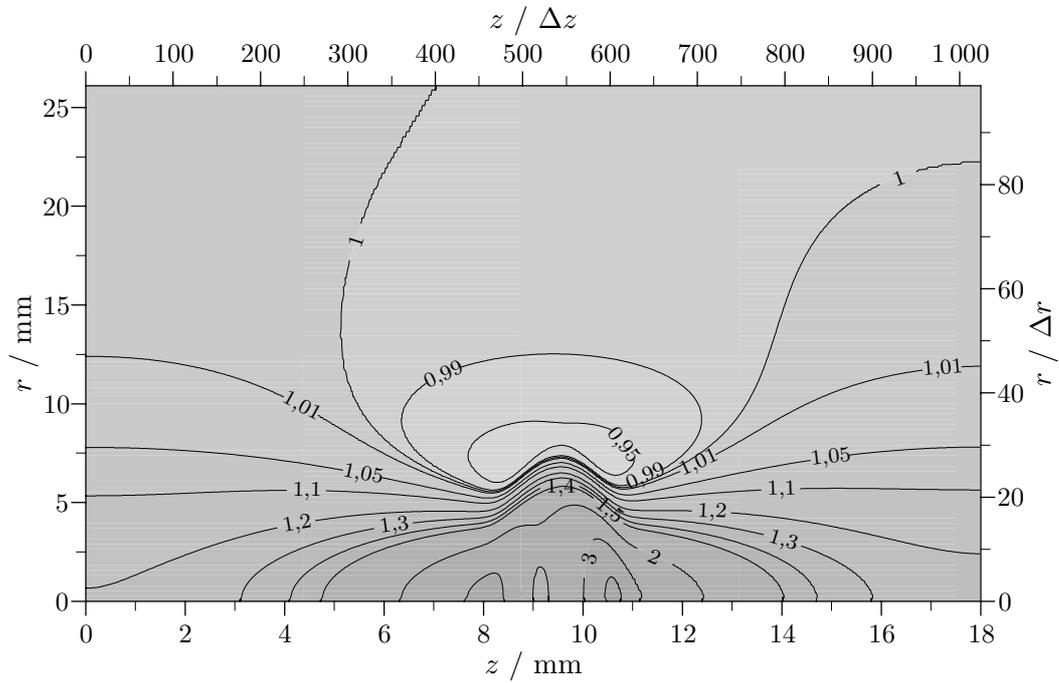


Abbildung 3.24: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5 \text{ mm}$  bei  $15 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 2,50 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ).

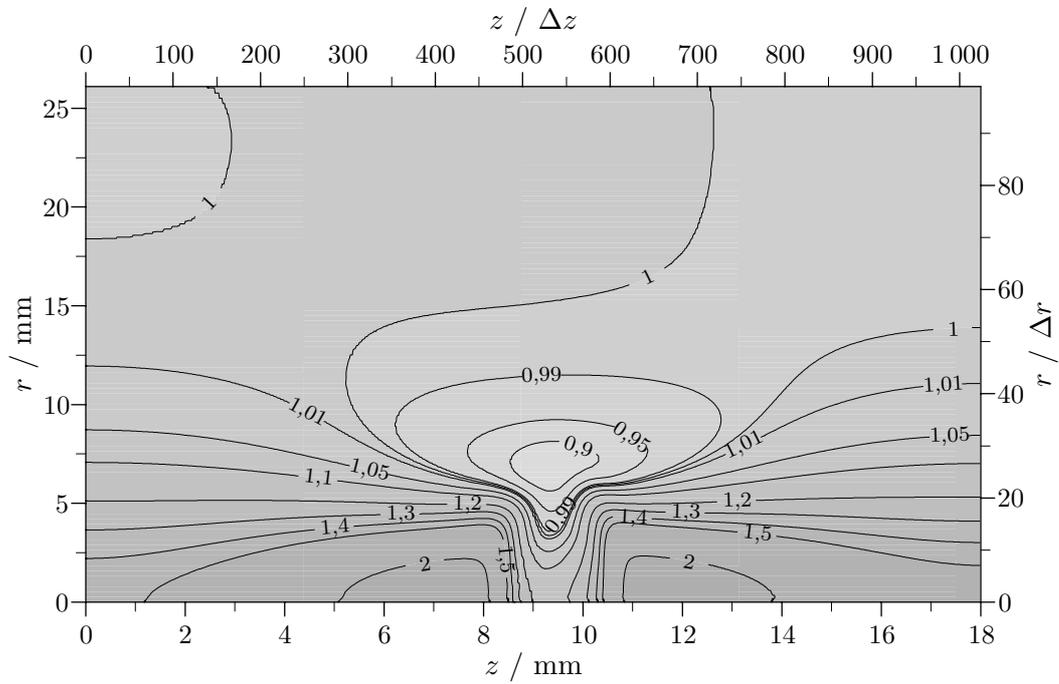


Abbildung 3.25: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5 \text{ mm}$  bei  $16 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 1,20 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

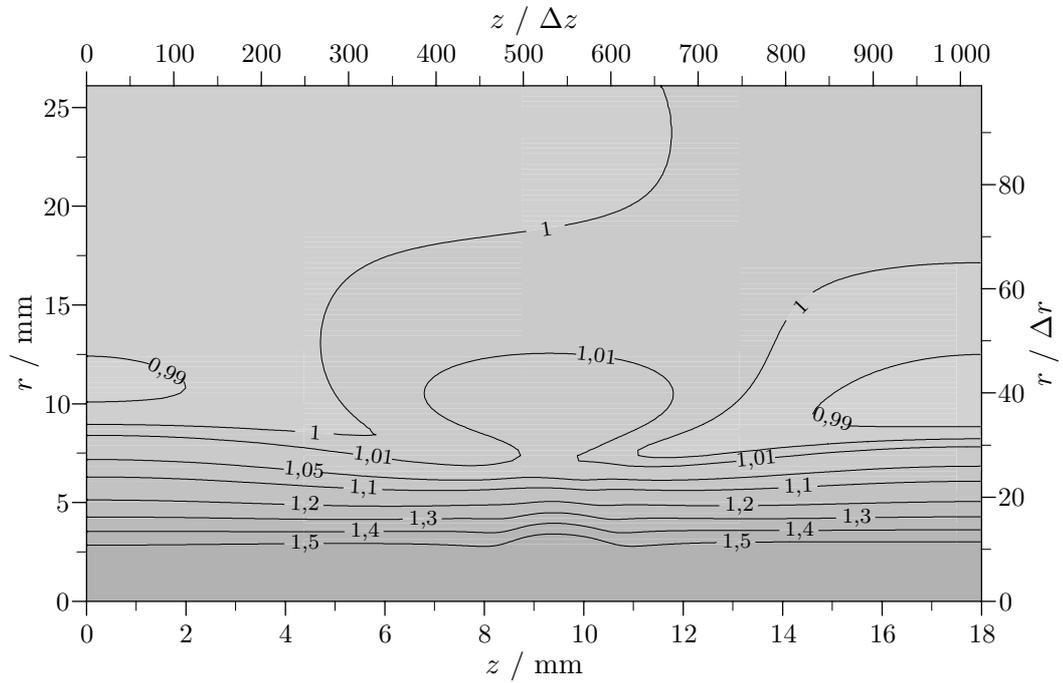


Abbildung 3.26: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5 \text{ mm}$  bei  $17 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 6,33 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

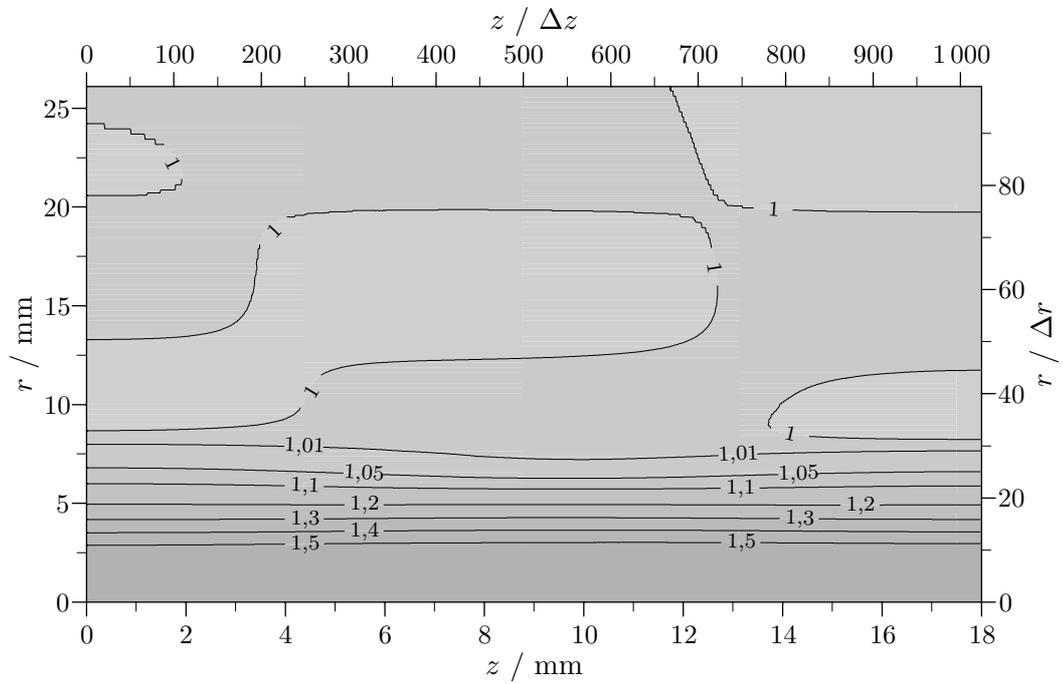


Abbildung 3.27: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5 \text{ mm}$  bei  $18 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 3,51 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

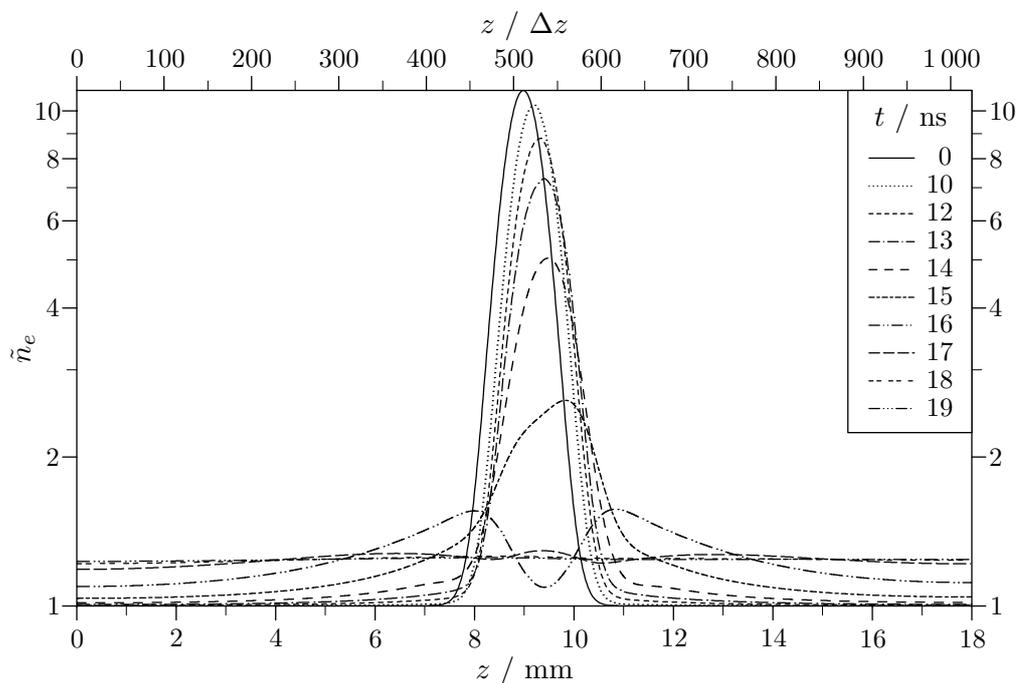


Abbildung 3.28: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Störpuls mit  $\lambda_{r\text{FWHM}} = 5$  mm und  $\Gamma = 10$ .

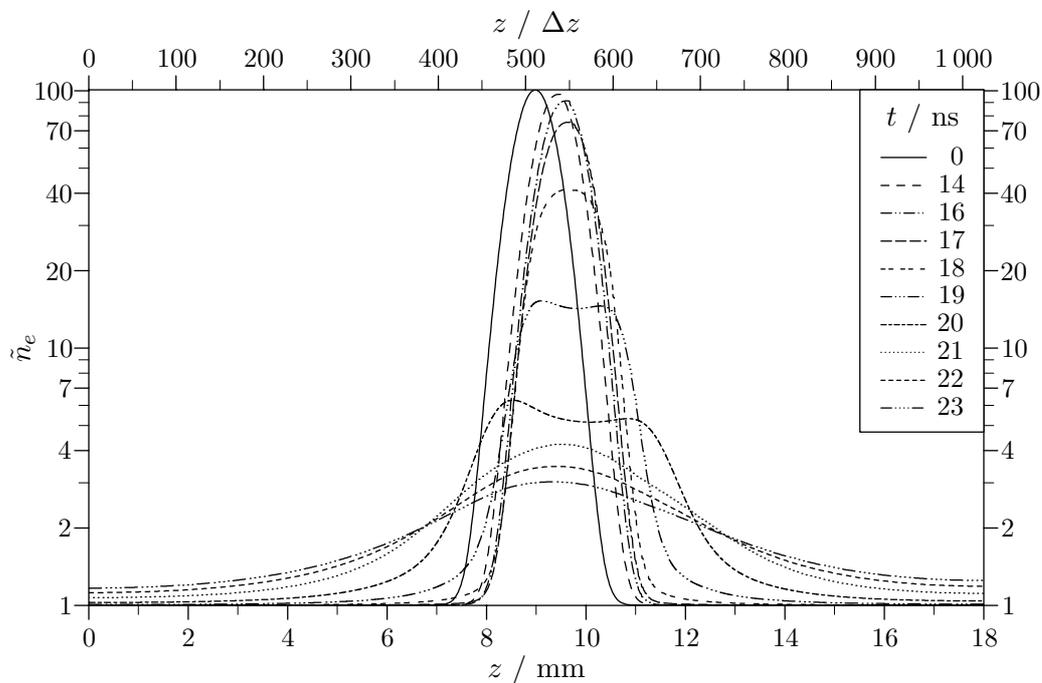


Abbildung 3.29: Normierte Elektronendichte auf der Achse für einen Störpuls mit  $n_{e0} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ .

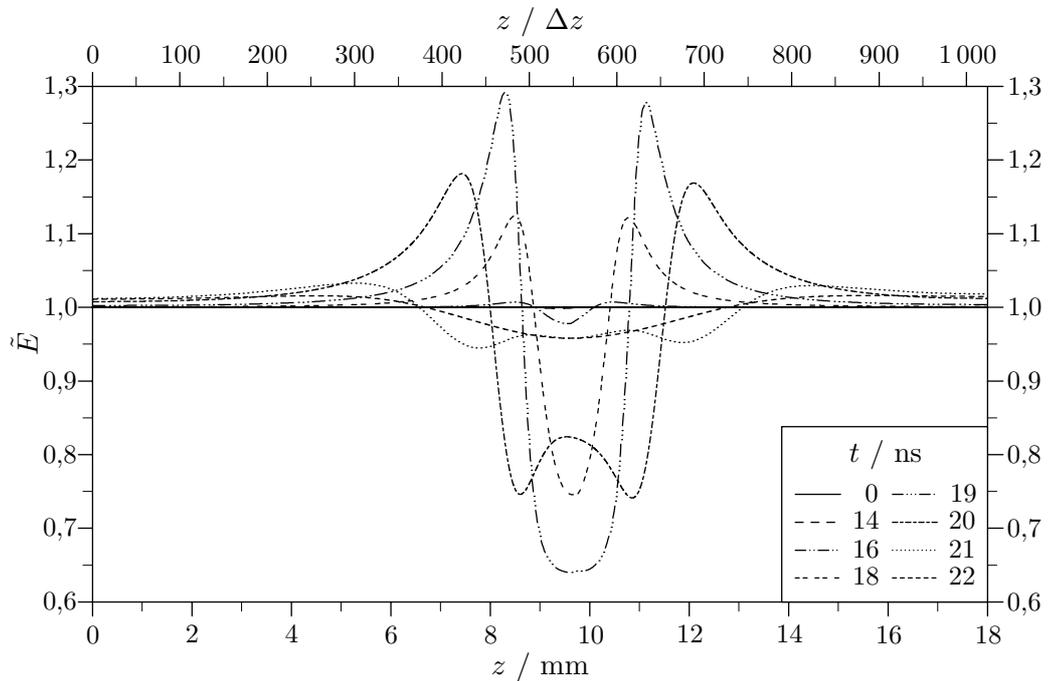


Abbildung 3.30: Normierte Feldstärke auf der Achse für einen Störpuls mit  $n_{e0} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ .

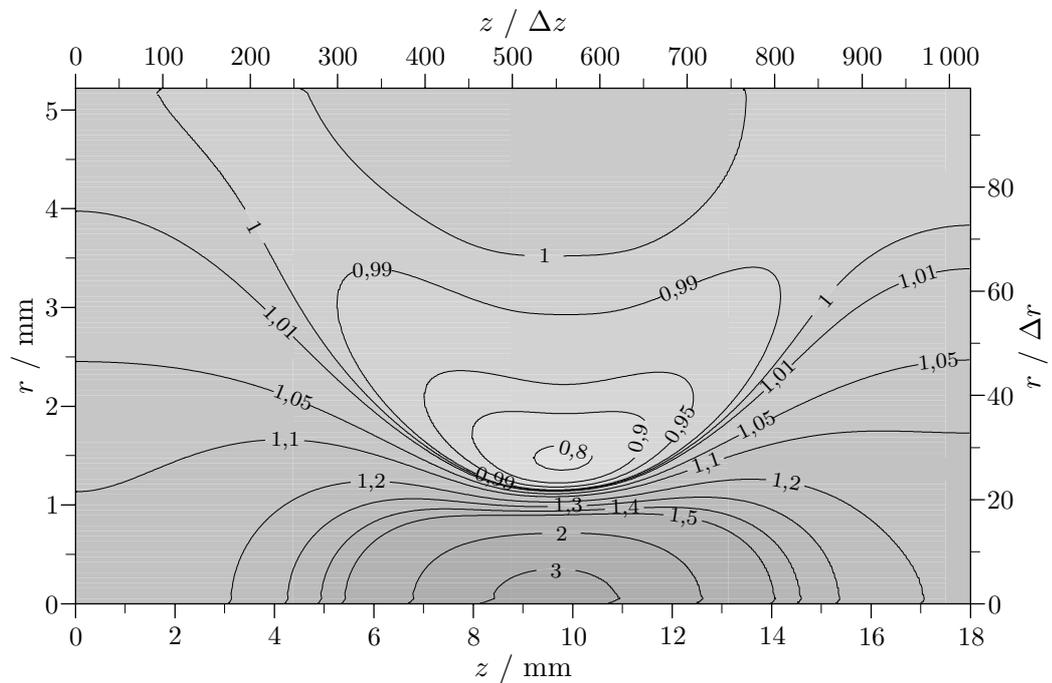


Abbildung 3.31: Normierte Elektronendichte für einen Störpuls mit  $n_{e0} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$  bei 22 ns ( $\bar{n}_e = 3,30 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

Ab 20 ns ist der Fortgang dann analog zur Entwicklung bei höherer homogener Vorionisation beginnend mit 16 ns in den Abbildungen 3.2 und 3.3. So entsprechen die Isodensiten der normierten Elektronendichte bei 22 ns in Abbildung 3.31, abgesehen von einer fortgeschritteneren Drift, weitgehend der Darstellung in Abbildung 3.7 mit höherer Vorionisation.

Berechnungen mit stärker verringerter oder erhöhter homogener Vorionisationsdichte führen zu einer verlangsamen bzw. beschleunigten Entladungsentwicklung, aber nicht zu grundlegend neuen Effekten.

## 3.6 Diskussion

In diesem Kapitel wurde die Entwicklung von verschiedenen Störungen der homogenen Vorionisation demonstriert. Den untersuchten Variationen ist der Verlauf des Beginns der Entladung gemein. Mit Einsetzen der angelegten Spannung führen Ionisation und Attachment im gesamten Volumen zu einer gleichmäßigen Multiplikation der Elektronendichte. Die Elektronen driften zur Anode, und zwischen Elektronenlawine der Vorionisationsüberhöhung und zurückbleibenden positiven Ionen entsteht ein elektrisches Raumladungsfeld. Es vermindert die Gesamtfeldstärke zwischen den Raumladungen und erhöht sie außerhalb.

Ist das Raumladungsfeld genügend stark gestiegen, um das angelegte Feld signifikant zu verzerren, ändert sich der Charakter der Entladung in Abhängigkeit von der Struktur der Störung. Wird eine gaußförmige Überhöhung der Vorionisationsdichte im Zentrum mit einer größeren radialen als axialen Ausdehnung vorgegeben, fällt das Raumladungsfeld nur langsam mit zunehmendem Abstand von der Störung, und das elektrische Feld ist zu den Elektroden hin erhöht. Dies führt zu einem verstärkten Wachstum der Elektronendichte beiderseits der Störung und innerhalb weniger Nanosekunden zur Bildung eines die Elektroden verbindenden Kanals erhöhter Leitfähigkeit.

Bei höherer axialer als radialer Ausdehnung des Störpulses werden nur eng benachbarte Bereiche von bedeutenden Feldverzerrungen erfaßt. Die Struktur der Störung ändert sich vergleichsweise langsam. Ein Kanal höherer Elektronendichte entsteht nicht. Um die Störung herum bildet sich aufgrund erniedrigter Feldstärke ein Torus verzögert wachsender Elektronendichte, der

bei dieser Form der Vorionisationsstörung besonders stark ausgeprägt ist.

Die Amplitude der Störung und die Höhe der homogenen Vorionisation haben quantitativen, aber keinen qualitativen Einfluß auf die Entwicklung der Entladung. Zwar gewinnt mit einer Vorionisationsdichte von  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  und darunter die diskrete Natur der Elektronen im Experiment an Bedeutung, diese wird jedoch von dem vorgelegten Fluidmodell nicht erfaßt.

Bei allen Berechnungen mit verschiedenen Vorionisationsstörungen tendieren die Inhomogenitäten gegen Ende des betrachteten Zeitraums dazu, sich auszugleichen.

Zu Beginn der Entladung beträgt die Anzahl der Elektronen  $\mathcal{N}_e$  im addierten gaußförmigen Störpuls

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_e(t=0) &= \int_0^{R_v} \int_0^d \int_0^{2\pi} \Gamma n_{e0} e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda_{r\text{FWHM}}^2} r^2} e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda_{z\text{FWHM}}^2} (z-\frac{d}{2})^2} r \, dr \, dz \, d\phi \\ &\approx 2\pi \Gamma n_{e0} \int_0^\infty e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda_{r\text{FWHM}}^2} r^2} r \, dr \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{4 \ln 2}{\lambda_{z\text{FWHM}}^2} (z-\frac{d}{2})^2} dz \\ &= \left(\frac{\pi}{4 \ln 2}\right)^{\frac{3}{2}} \Gamma n_{e0} \lambda_{r\text{FWHM}}^2 \lambda_{z\text{FWHM}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Zeitabhängigkeit dieser Größe läßt sich bestimmen, indem man am Ende jeden Zeitschritts die Elektronenzahl aller Gitterzellen summiert und die Elektronenzahl einer homogenen Entladung für den gleichen Zeitpunkt subtrahiert.

Abbildung 3.32 zeigt den zeitlichen Verlauf der Elektronenzahl in der Störung für die in diesem Kapitel vorgestellten und einige zusätzliche Variationen der Vorionisation. Er erfolgt nahezu proportional zur Elektronendichteentwicklung der homogenen Entladung in Abbildung 3.1.

Zu jeder Rechnung ist ein Zeitpunkt gekennzeichnet, an dem der Einfluß der Raumladung auf die Entladung besonders intensiv ist. Dieser wird definiert als der Moment, an dem die Abnahme der Störpulsamplitude bezüglich der normierten Elektronendichte pro Zeit maximal ist. Diese Zeitpunkte variieren stark mit der gewählten Vorionisation, wie in den Unterkapiteln bereits deutlich wurde. In der zugehörigen Elektronenzahl zeigt sich jedoch eine Systematik.

Für kugelsymmetrische Störpulse ist der Einfluß der Raumladungen dann

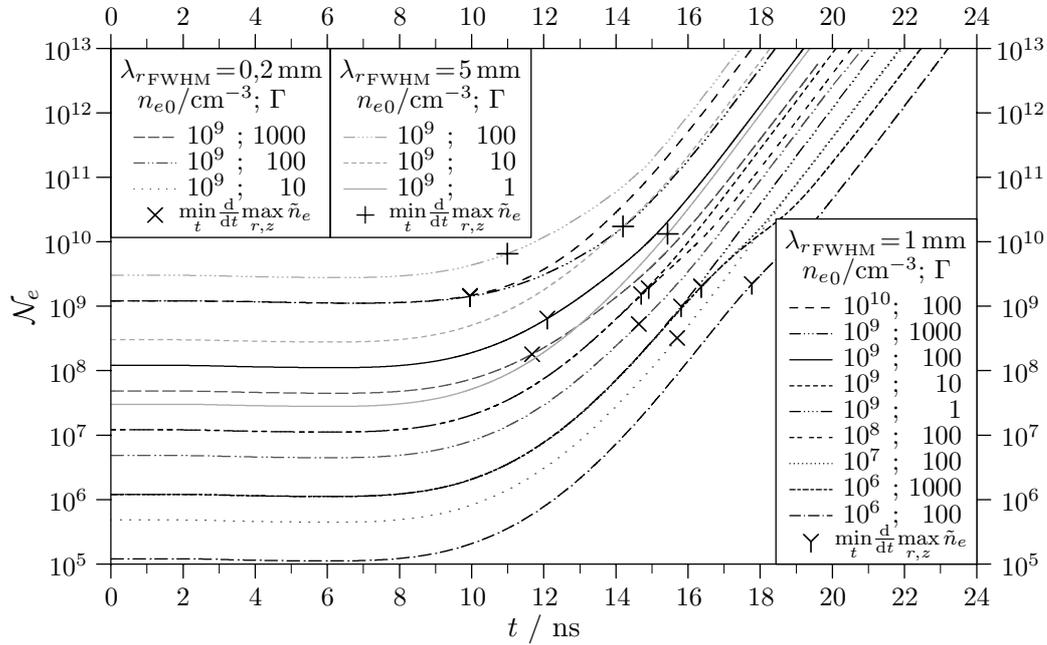


Abbildung 3.32: Anzahl der Elektronen im Störpuls für verschiedene Anfangsbedingungen, gekennzeichnet ist jeweils der Zeitpunkt der stärksten Reduktion der Amplitude.

besonders ausgeprägt, wenn die Anzahl der Elektronen in der Störung etwa  $1,4 \cdot 10^9$  erreicht, unabhängig von der Höhe der Vorionisationsdichte oder Amplitude der ursprünglichen Störung. Der Fehler dieser Aussage liegt unter einem Faktor 2. Für den auf ein Fünftel in radialer Richtung gestauchten Störpuls beträgt die mittlere Elektronenzahl bei hohem Raumladungseinfluß  $3,4 \cdot 10^8$  und für den auf das Fünffache gestreckten  $1,0 \cdot 10^{10}$ , mit gleicher Fehlerangabe.

Eine Störung muß daher erst eine kritische Anzahl von Ladungsträgern in der Elektronenlawine aufbauen, bevor die Entladung von Raumladungseffekten beeinflusst wird. Dies ist analog zur Streamertheorie [RAETHER64], die angibt, daß in einer nicht vorionisierten Entladung aus einem Elektron ein Streamer entsteht, falls die Ladungsträgerzahl etwa  $10^8$  erreicht. In dem hier untersuchten Fall mit hoher Vorionisation zeigen sich durch Raumladungen beschleunigte Ionisationsfronten, aber kein selbstlaufender Streamerkopf.

# Kapitel 4

## Kathodenschicht

In diesem Kapitel wird die Wirkung von Sekundärelektronenemission aus der Kathode durch Ionenfluß (Abschnitt 2.3.5) auf eine homogen vorionisierte Entladung untersucht. Unterkapitel 4.1 beschreibt die Entstehung und Entwicklung einer Zone verminderter Elektronendichte vor einer gleichförmigen Kathode. Unterkapitel 4.2 zeigt, wie lokale Unregelmäßigkeiten des Sekundäremissionskoeffizienten den Aufbau der Kathodenschicht beeinflussen. Die Ergebnisse der Modellrechnungen werden in Unterkapitel 4.3 bewertet und qualitativ mit Experimenten verglichen.

Grundlage der Berechnungen ist das in Kapitel 2 beschriebene Verfahren mit den in Tabelle 2.2 angegebenen Standardparametern. Abweichend dazu wird die axiale Auflösung mit  $\Delta z \approx 2,2 \mu\text{m}$  bei  $N_z = 8192$  Gitterzellen feiner gewählt, um einem schmalen Kathodenfall Rechnung zu tragen. Das Verhältnis von radialer und axialer Schrittweite ist zu  $\Delta r / \Delta z = 50$  bei  $N_r = 69$  radialen Gitterzellen vorgegeben.

Elektronendichten und Feldstärken aus Modellrechnungen sind im folgenden analog zum letzten Kapitel in normierter Form dargestellt. Die axiale Koordinate wird im logarithmierten Maßstab expandiert, um die Entwicklung der Kathodenschicht zu verdeutlichen. Bei zweidimensionalen Abbildungen von Linien gleicher Elektronendichte oder Feldstärke ist die Breite der ersten Ordinate proportional zum Sekundäremissionskoeffizienten auf der Kathode am jeweiligen Radius.

## 4.1 Homogene Schichtzündung

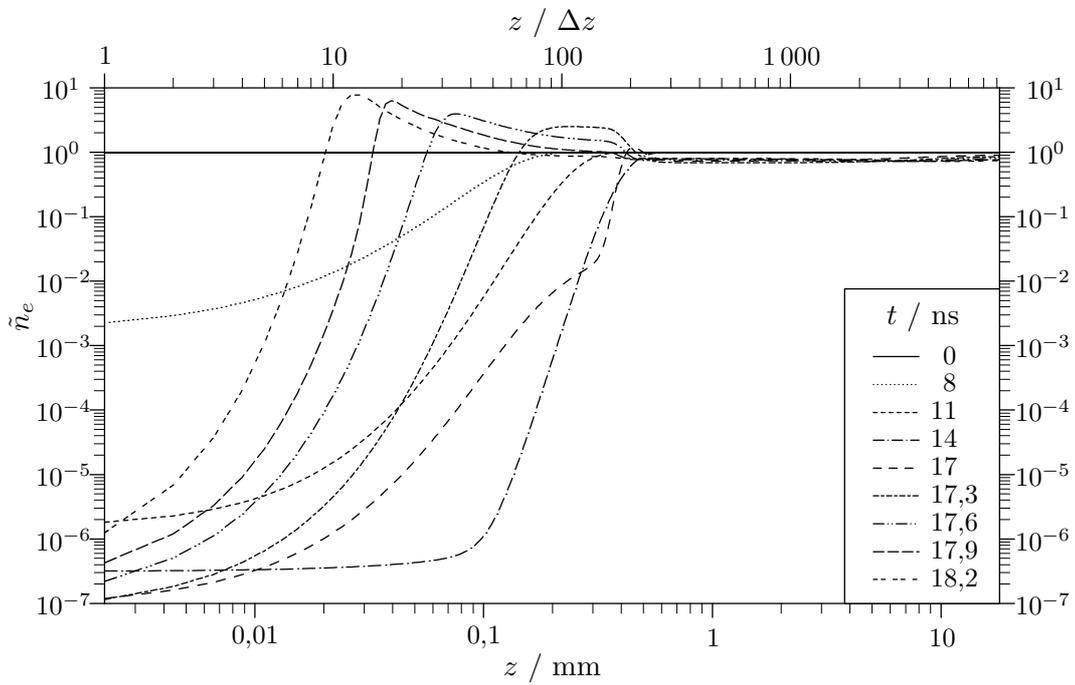
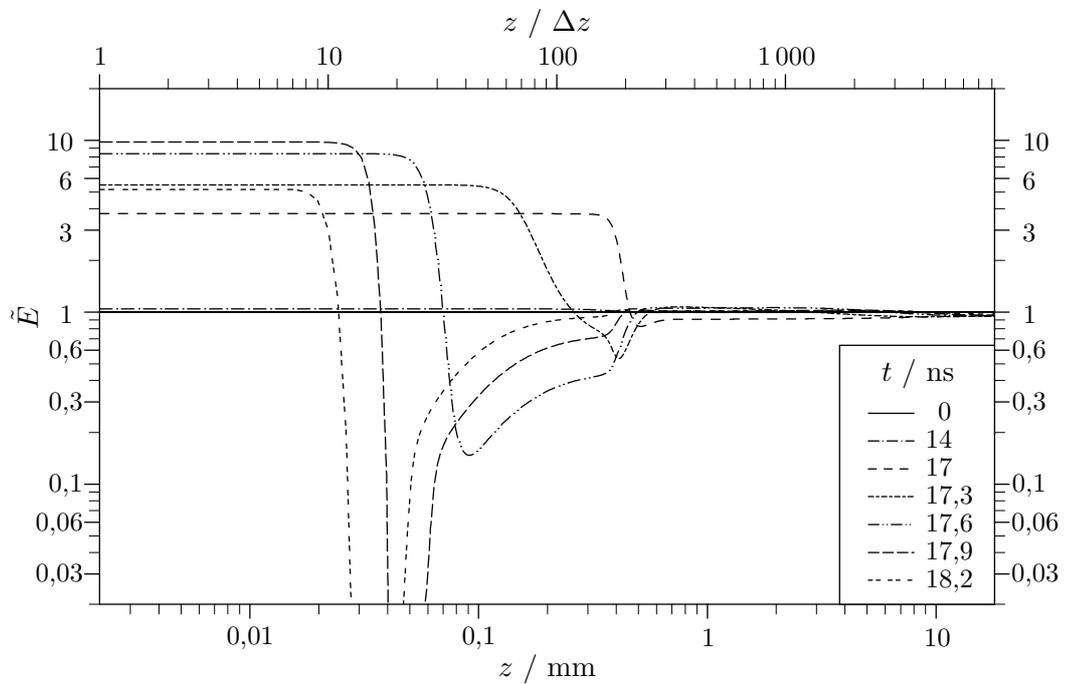
Es wird nun eine Entladung mit einem Sekundäremissionskoeffizienten von  $\gamma = 0,1$  betrachtet. Die Abbildungen 4.1 und 4.2 stellen für diesen Fall die normierte Elektronendichte und Feldstärke auf der Achse zu verschiedenen Zeitpunkten dar.

Die von der Vorionisation initialisierten Elektronen werden im angelegten elektrischen Feld multipliziert, gleichzeitig bewegen sie sich zur Anode. Positive Ionen prallen auf die Kathode und lösen Elektronen aus, ihre Zahl ist jedoch bei der niedrigen Ionenbeweglichkeit zu gering, um die wegdriftenden Elektronen der Vorionisation vollständig zu ersetzen. Vor der Kathode entsteht daher eine Raumladungszone geringerer Dichte der Elektronen als positiver Ionen, die sich mit Elektronendriftgeschwindigkeit bis 0,5 mm bei 14 ns verbreitert.

Die elektrische Feldstärke steigt in dieser Schicht, dem sogenannten *Kathodenfall*, erheblich. Sie erreicht bei 17,9 ns mit dem Zehnfachen des von außen angelegten Wertes ein Maximum. Im Gegenzug fällt für einen Großteil des Volumens die Feldstärke ab 17 ns um einige Prozent gegenüber der angelegten Feldstärke und die Elektronendichte um etwa 20 % unter die homogene Elektronendichte.

Das erhöhte Feld im Kathodenfall verstärkt die Ionisation. Restelektronen in diesem Gebiet werden dadurch rapide hochmultipliziert, und es entsteht in Abbildung 4.1 ab 17 ns das Bild einer auf die Kathode zulaufenden Ionisationswelle mit einer Front, die die homogene Elektronendichte um ein Vielfaches übersteigt. Ihr folgt in einer Schicht positiver Raumladung eine Zone sehr niedriger Feldstärke. Das hohe Feld vor der Kathode vergrößert gemäß Gleichung (2.153) die Sekundärelektronenemission. In Verbindung mit der kathodengerichteten Ionisationswelle führt dies zu einer Auffüllung des Kathodenraums mit Elektronen und zum Absinken der Feldstärke in diesem Bereich. Der geschilderte Prozeß wird als *Schichtzündung* bezeichnet. Er wurde für die betrachtete Entladung sowohl experimentell [DREISKEMPER93] als auch mit einem numerischem Modell [SIMON93] gefunden.

Der Zeitpunkt der Schichtzündung hängt schwach vom Sekundäremissionskoeffizienten ab. Im Vergleich der Elektronendichteverläufe für  $\gamma = 0,1$  in Abbildung 4.1 und  $\gamma = 0,9$  in Abbildung 4.3 zeigt sich eine um 0,2 ns be-

Abbildung 4.1: Normierte Elektronendichte auf der Achse mit  $\gamma = 0,1$ .Abbildung 4.2: Normierte Feldstärke auf der Achse mit  $\gamma = 0,1$ .

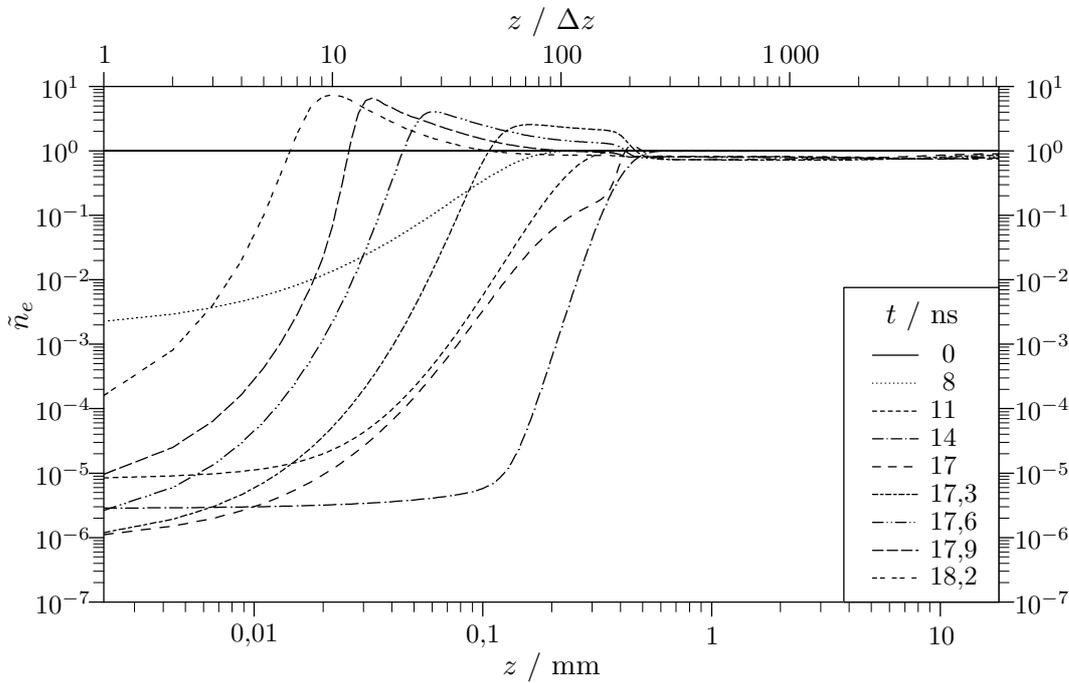


Abbildung 4.3: Normierte Elektronendichte auf der Achse mit  $\gamma = 0,9$ .

schleunigte Entwicklung bei der höheren Sekundäremission. Auch fällt die Elektronendichte vor der Kathode um einen Faktor 10 weniger ab.

Die Betrachtungen dieses Unterkapitels erfolgten eindimensional auf der Symmetrieachse. Die zugrundeliegenden Berechnungen wurden jedoch mit dem zweidimensionalen Modell durchgeführt. Abbildung 4.4 stellt exemplarisch zu 17,9 ns für  $\gamma = 0,1$  die Isodensiten dar. Am radialen Rand der vorionierten Entladung bei 7,6 mm bricht die Raumladungsschicht ab und führt zu Störungen der Feld- und Dichteverteilungen bis einige Millimeter in das Entladungsvolumen hinein. Diese Randeffekte werden hier nicht weiter betrachtet, im folgenden ist nur der Bereich innerhalb eines Radius von 3 mm dargestellt.

## 4.2 Lokal erhöhte Sekundärelektronenemission

In diesem Unterkapitel wird der Einfluß einer lokalisierten Inhomogenität des Sekundäremissionskoeffizienten auf die Entwicklung der Entladung untersucht. Dazu wird im Zentrum der Kathode und auf den sieben benachbar-

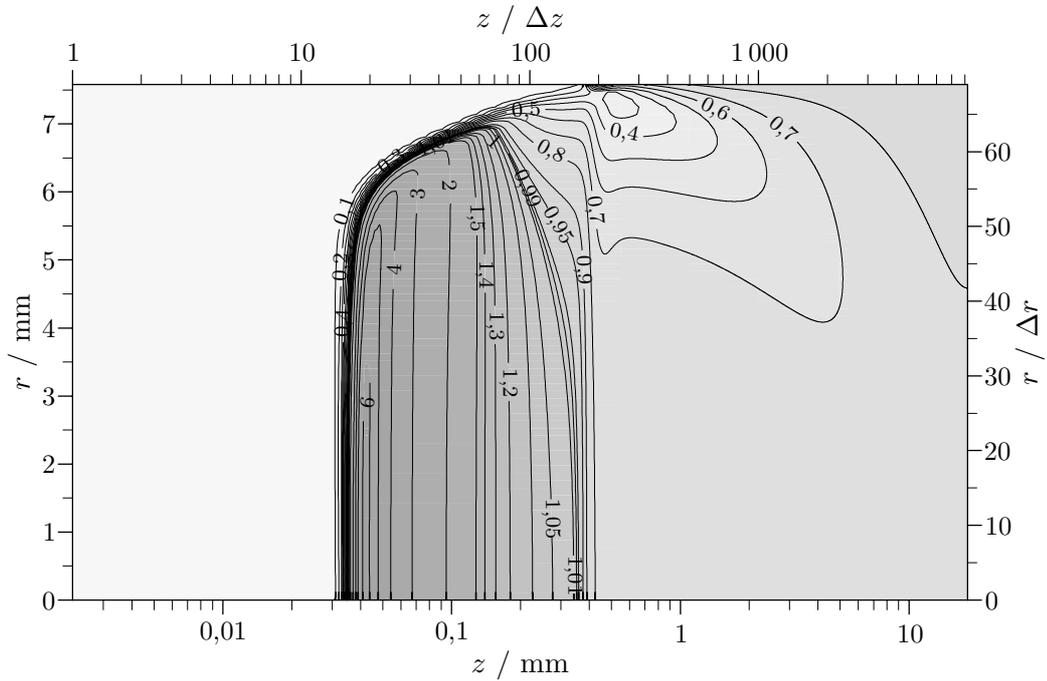


Abbildung 4.4: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,1$  bei  $17,9 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 2,96 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

ten radialen Gitterzellen  $\gamma = 0,9$  vorgegeben, während bei größeren Radien weiterhin  $\gamma = 0,1$  gilt. Dies simuliert einen runden Fleck neunfach erhöhter Elektronenemissivität mit einem Durchmesser von  $1,6 \text{ mm}$  auf der Kathode.

In den Abbildungen 4.5–4.9 sind für diese Konfiguration die Isodichten der normierten Elektronendichte zwischen  $17,0 \text{ ns}$  und  $18,2 \text{ ns}$  in Intervallen von  $0,3 \text{ ns}$  aufgetragen. Bei  $17,0 \text{ ns}$  ist eine  $0,5 \text{ mm}$  dicke Schicht vor der Kathode entstanden, die durch einen steilen Elektronendichtegradienten vom Hauptentladungsvolumen getrennt ist. Vor dem Fleck mit größerem  $\gamma$  beginnt ein Ausläufer, sich auf die Kathode zuzubewegen.

Bei  $17,3 \text{ ns}$  laufen zwei Fronten erhöhter Elektronendichte in Richtung Kathode. Die Ionisationswelle vor dem  $\gamma$ -Fleck ist deutlich weiter fortgeschritten als diejenige vor dem Gebiet mit niedrigem  $\gamma$ , wie es die Abbildungen 4.1 und 4.3 erwarten lassen. Beide Fronten grenzen sich scharf voneinander ab, am Übergang ist die schnelle Front leicht beschleunigt und die langsame verzögert. Bei  $r \approx 0,8 \text{ mm}$ ,  $z \approx 0,13 \text{ mm}$  steigt die Elektronendichte auf höhere Werte als im übrigen Volumen, und es treten steile axiale und radiale Elek-

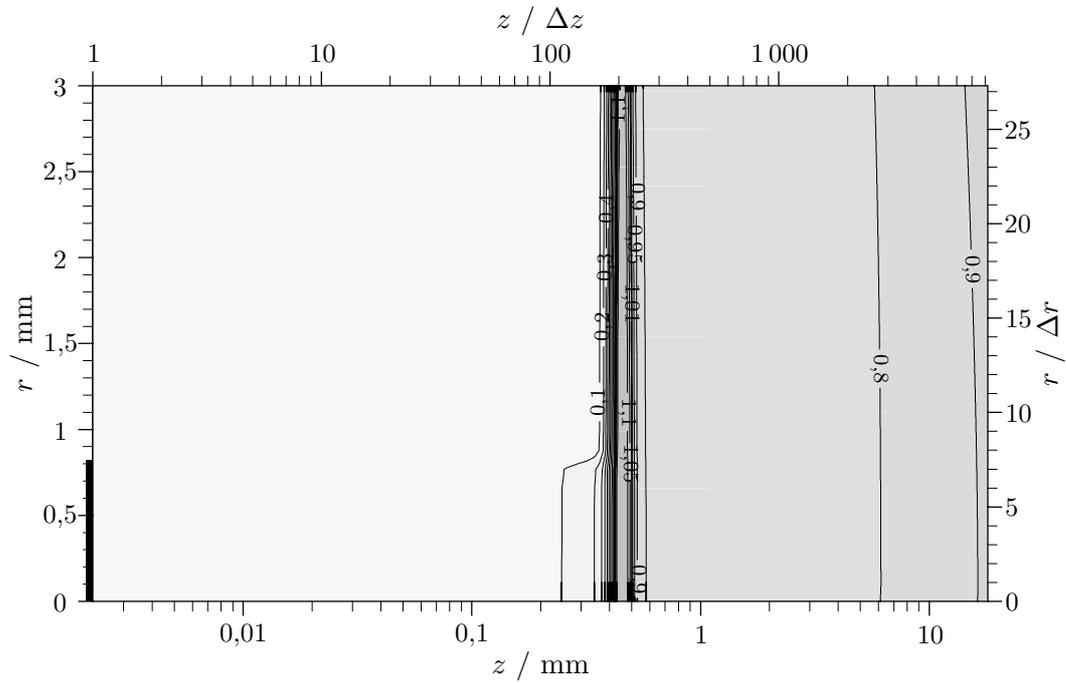


Abbildung 4.5: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,0 ns ( $\bar{n}_e = 6,33 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ).

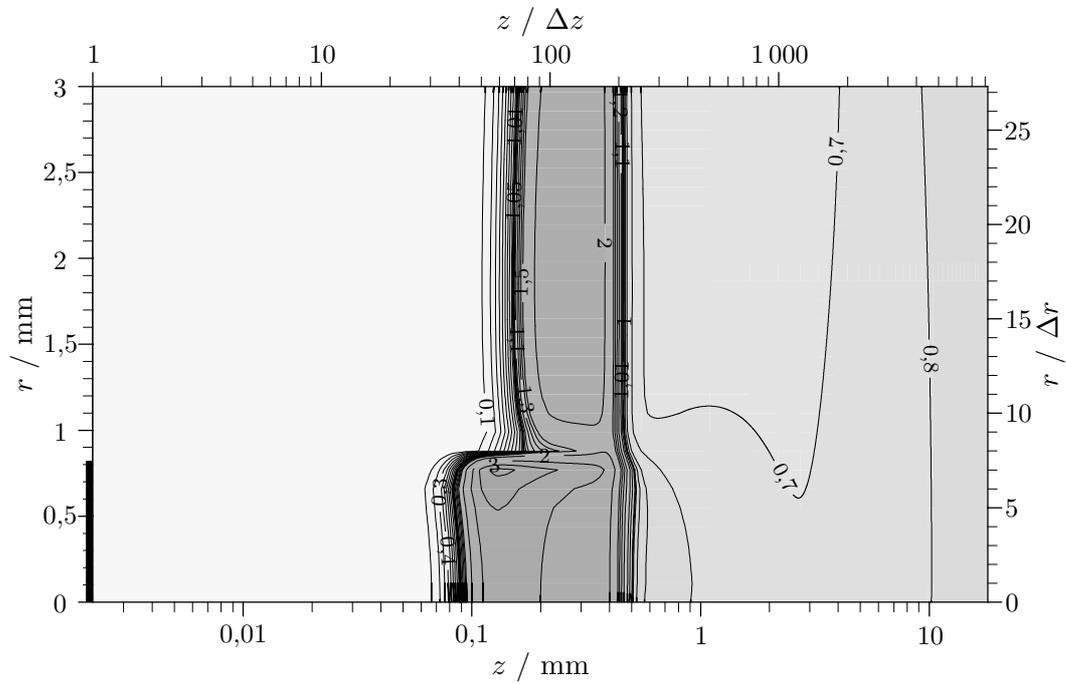


Abbildung 4.6: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,3 ns ( $\bar{n}_e = 1,06 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

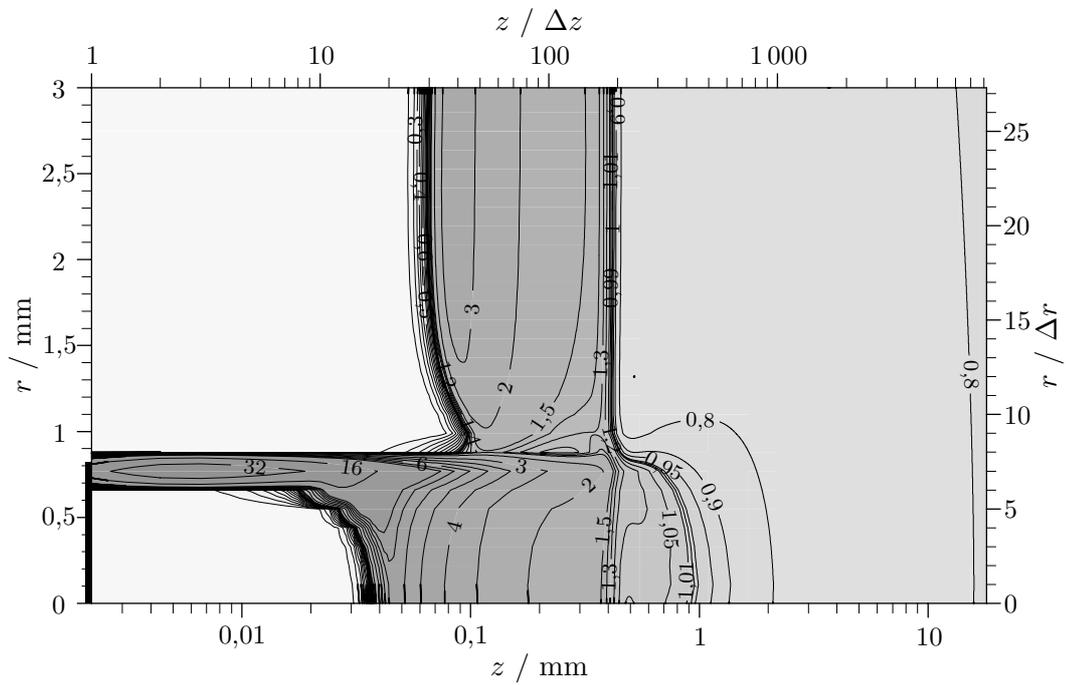


Abbildung 4.7: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,6 ns ( $\bar{n}_e = 1,77 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

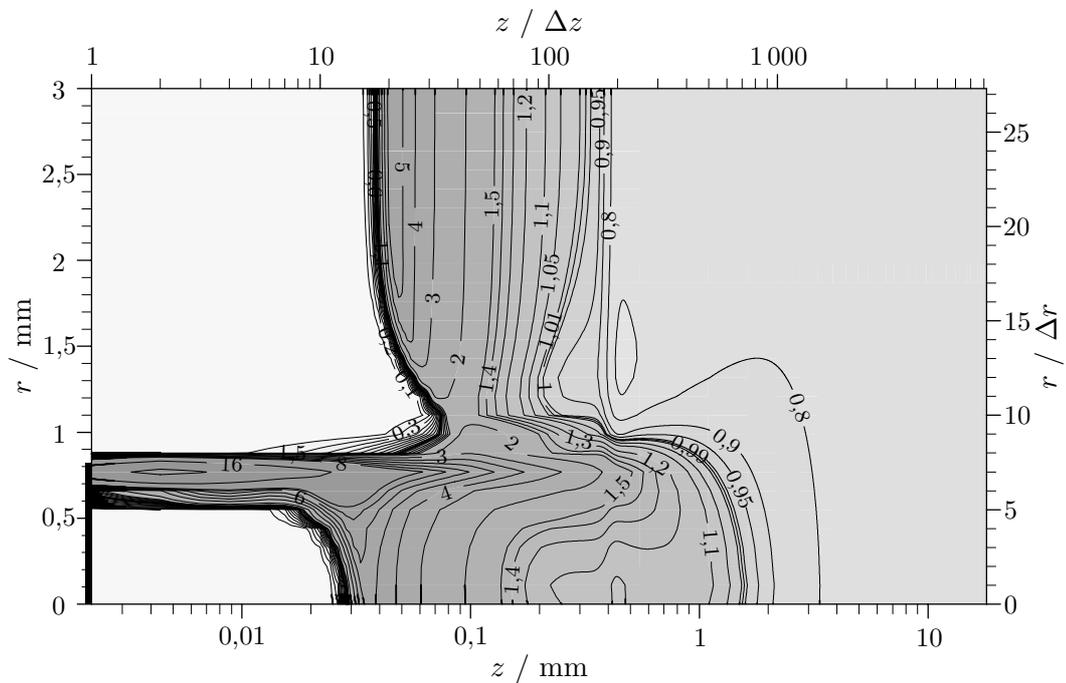


Abbildung 4.8: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,9 ns ( $\bar{n}_e = 2,96 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

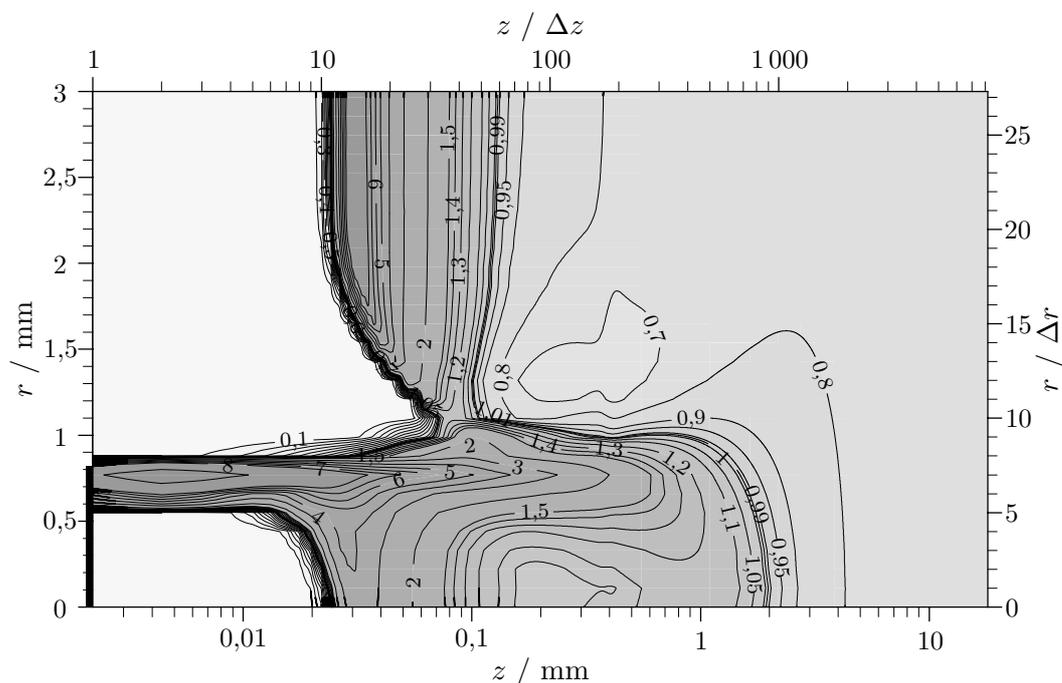


Abbildung 4.9: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8 \text{ mm}$  und  $\gamma = 0,1$  außen bei  $18,2 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 4,94 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

tronendichtegradienten auf.

Aus diesem Gebiet, genau an der Grenze der hohen zur niedrigen Sekundärelektronenemission, schießt innerhalb der  $0,3 \text{ ns}$  bis  $17,6 \text{ ns}$  eine Wolke großer Elektronendichte hervor, die die verbleibenden  $35 \mu\text{m}$  bis zur Kathode durchbricht und über ein Rohr hoher Leitfähigkeit das Entladungsvolumen mit der Kathode verbindet. Die Elektronendichte des Rohres steigt bis auf das Fünzigfache der homogenen Elektronendichte an. Der Mantel umfaßt lediglich drei radiale Punkte, so daß die Interpretation dieser Strukturbildung von der Gittergröße begrenzt wird.

Bei  $17,9$  und  $18,2 \text{ ns}$  verbreitert sich der Mantel des Rohres hoher Leitfähigkeit insbesondere nach innen, die normierte Elektronendichte geht dabei etwas zurück. Zur Kathode laufen weiterhin Fronten steiler Elektronendichtegradienten innerhalb und außerhalb des Rohres, ohne sie im betrachteten Zeitraum zu erreichen. Im Rohr verlangsamt sich die Front und wird bei  $18,2 \text{ ns}$  von der äußeren eingeholt.

Aus der zur Anode gerichteten Seite der Kathodenschicht erwächst eine ähnli-

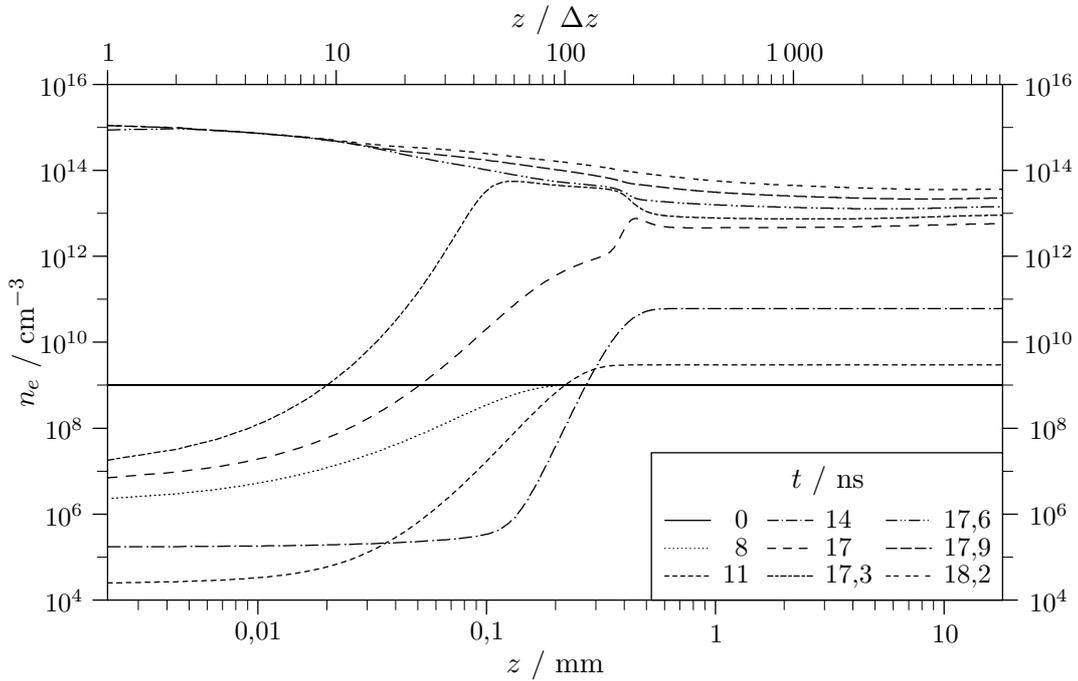


Abbildung 4.10: Elektronendichte im Abstand von  $r = 7 \Delta r \approx 0,8 \text{ mm}$  zur Achse mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r$  und  $\gamma = 0,1$  außen.

che rohrförmige Struktur, die ins Entladungsvolumen expandiert. Sie besitzt eine geringere Elektronendichteüberhöhung als das zur Kathode strebende Rohr, aber mit 1 mm bei 18,2 ns eine größere axiale Ausdehnung. Bei 2 mm Entfernung zur Kathode schließt ein bis zur Symmetrieachse reichendes abgerundetes Ende leicht erhöhter Elektronendichte die Störung ab, wobei Ausläufer noch weiter ins Volumen hineinreichen.

Wie schon in Kapitel 3 beschrieben, bilden sich radial neben Gebieten hoher Elektronendichte Zonen vergleichsweise niedriger normierter Elektronendichte. Es entsteht eine Trennlinie der Entladungsentwicklungen bei einem Radius von 1,1 mm.

Das Wachstum der absoluten Elektronendichte am siebten radialen Gitterpunkt bei  $r \approx 0,8 \text{ mm}$  ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Bis 17,3 ns entsteht die im letzten Unterkapitel beschriebene Kathodenschicht. In den folgenden 0,3 ns schließt sich der an dieser Stelle noch 0,1 mm breite Kathodenfall mit einer Elektronendichte von  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  und bildet das Rohr hoher Leitfähigkeit. Während die normierte Elektronendichte in den Abbildungen 4.7–4.9 im Mantel des Rohres bei steigender homogener Elektronendichte sinkt, bleibt

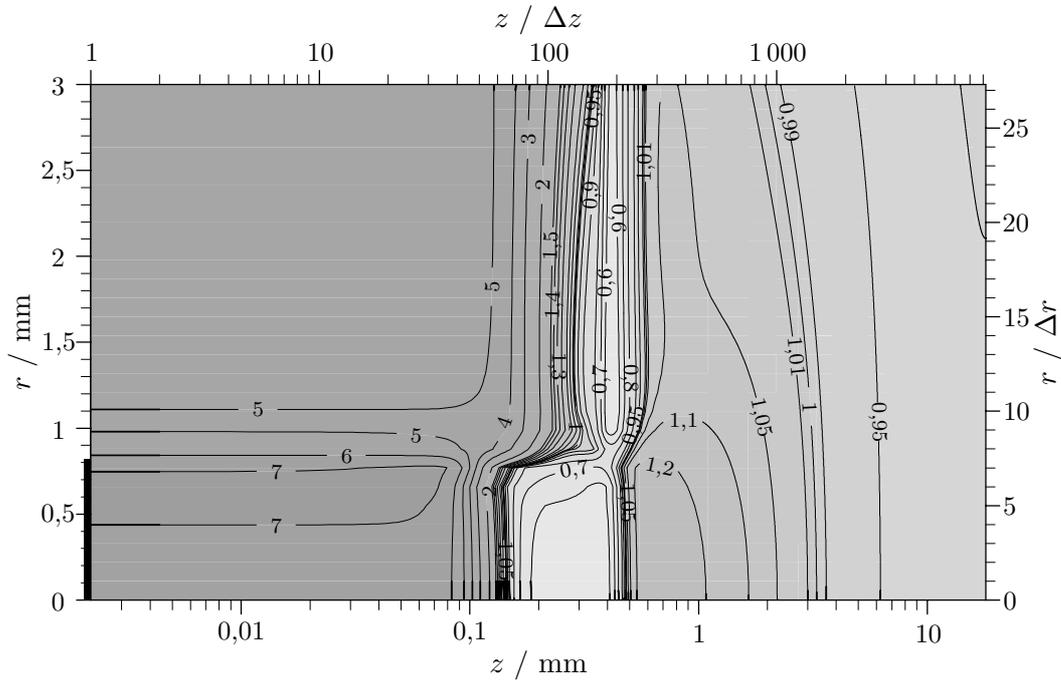


Abbildung 4.11: Normierte Feldstärke mit  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,3 ns ( $|\vec{E}_{\text{ext}}| = 13,6$  kV/cm).

die absolute Elektronendichte auf hohem Niveau nahezu konstant. Aufgrund der unzureichenden radialen Ortsauflösung sind Aussagen über die Breite des Rohrmantels und die erreichte Elektronendichte unsicher.

Weitere Hinweise zur Entstehungsursache der Rohrentwicklung gibt die Darstellung der normierten Feldstärke bei 17,3 ns in Abbildung 4.11. Im Kathodenfallgebiet ist die Feldstärkeverteilung der Schicht bei unterschiedlichem Sekundäremissionskoeffizienten verschieden. Vor dem Kathodenfleck und insbesondere seinem Rand auf der einen Seite und einer erhöhten Elektronendichte an der äußeren Grenze der inneren Ionisationsfront auf der anderen Seite ist das Feld weiter verstärkt als im übrigen Kathodenbereich. In diesem Gebiet zunehmender Ionisation erfolgt wenig später der Durchbruch.

Es wird nun untersucht, welche Auswirkungen ein Fleck weniger stark überhöhter Sekundärelektronenemission auf die Entladung hat. Abbildung 4.12 stellt für eine Konfiguration mit  $\gamma = 2$  im Zentrum und sonst gleichen Parametern die Isodensiten bei 17,9 ns dar. Die sich bildende Struktur vor der Kathode zeigt leichte quantitative, aber keine qualitativen Unterschiede zu Abbildung 4.8 bei  $\gamma = 0,9$ . Deutlich geringere Ausmaße nimmt dagegen der

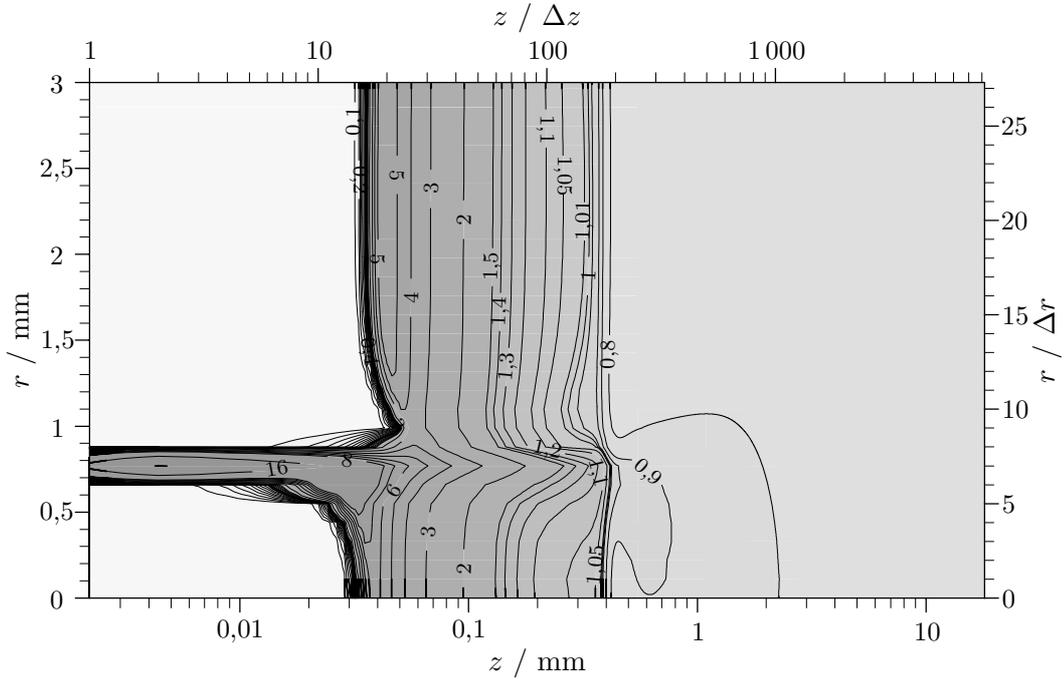


Abbildung 4.12: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,2$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8 \text{ mm}$  und  $\gamma = 0,1$  außen bei  $17,9 \text{ ns}$  ( $\bar{n}_e = 2,96 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

zur Anode strebende Bereich erhöhter Elektronendichte an.

Eine im Fleck auf  $\gamma = 1,1$  weiter reduzierte Sekundärelektronenemission führt zu der in den Abbildungen 4.13–4.15 gezeigten Entwicklung. Nur zögerlich beginnt die Front vor dem erhöhten  $\gamma$  bei  $17,9 \text{ ns}$ , beschleunigt im Vergleich zur äußeren Front auf die Kathode zuzulaufen. Zu  $18,2 \text{ ns}$ , wenn sich die Ionisationswelle bereits auf  $20 \mu\text{m}$  der Kathode genähert hat, entsteht eine deutliche Auswölbung der Front. Bei  $18,5 \text{ ns}$  entwickelt sich daraus der Durchbruch einer Wolke großer Elektronendichte, der die Kathode schon fast erreicht hat. Somit führt letztlich auch die lokale Erhöhung der Sekundärelektronenemission um nur  $10\%$  zur in diesem Unterkapitel beschriebenen Strukturbildung vor der Kathode. Die Elektronendichteerhöhung ins Entladungsvolumen hinein ist dagegen nur sehr schwach ausgeprägt.

Statt einer scharfen Begrenzung des Kreises erhöhter Sekundärelektronenemission wird nun ein verschmierter  $\gamma$ -Fleck untersucht. Dazu wird der in den bisherigen Modellrechnungen angenommene Sprung des Sekundäremissionskoeffizienten vom siebten zum achten Ortsschritt durch eine lineare Abstufung über fünf Gitterpunkte ersetzt, d. h.:  $\gamma(r = 5\Delta r) = 0,9$ ,  $\gamma(r =$

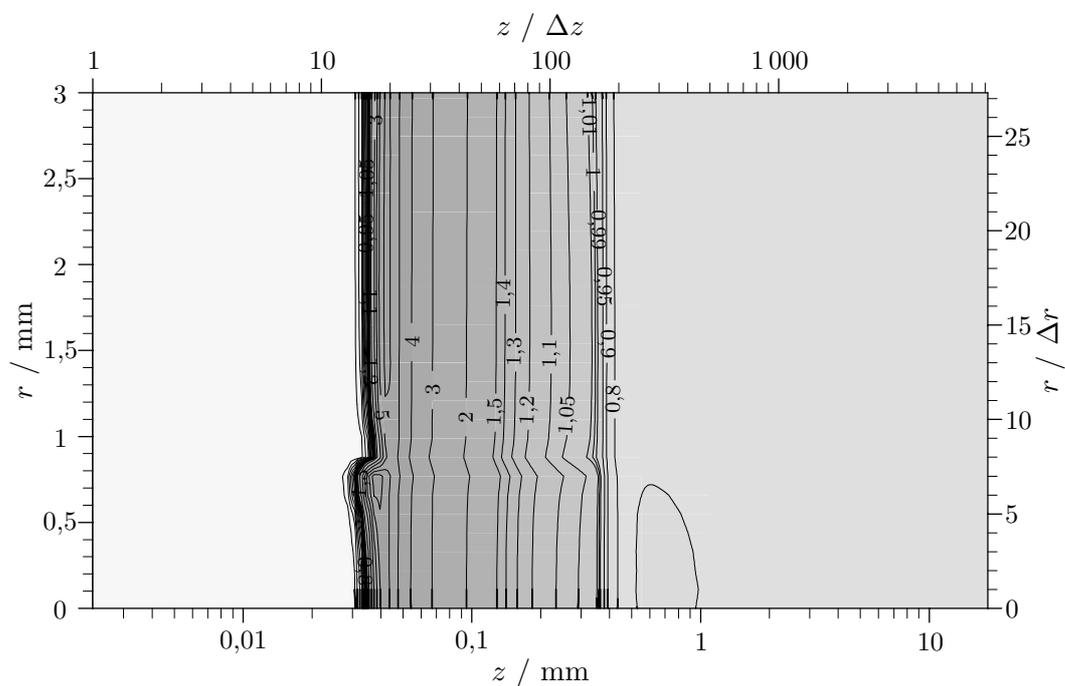


Abbildung 4.13: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,11$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 17,9 ns ( $\bar{n}_e = 2,96 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

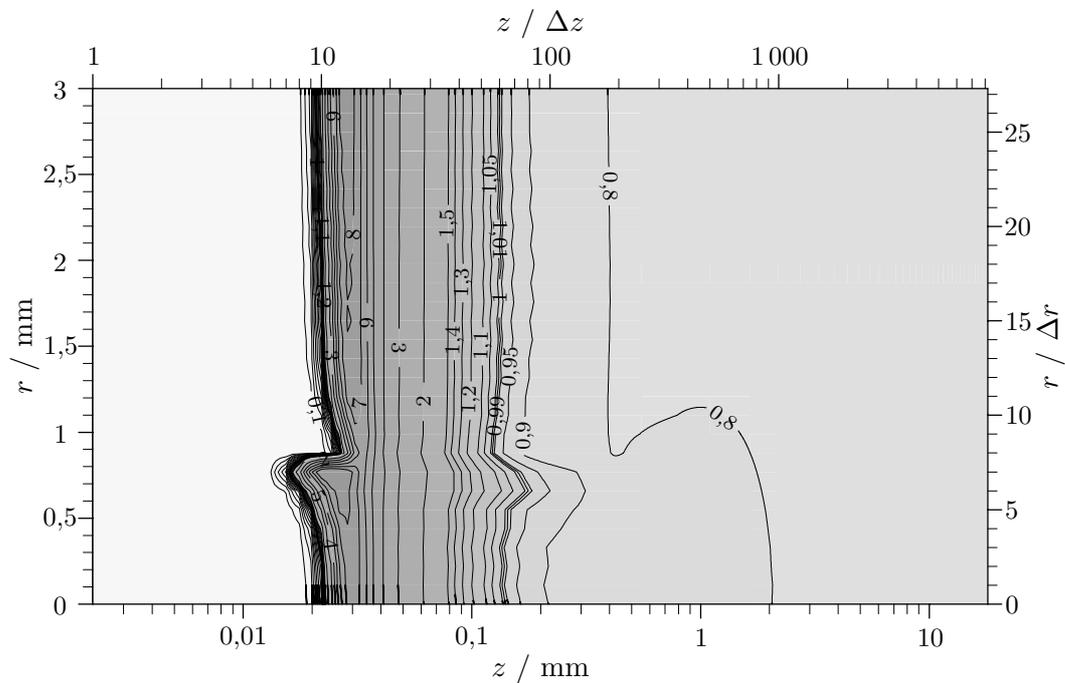


Abbildung 4.14: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,11$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 18,2 ns ( $\bar{n}_e = 4,94 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

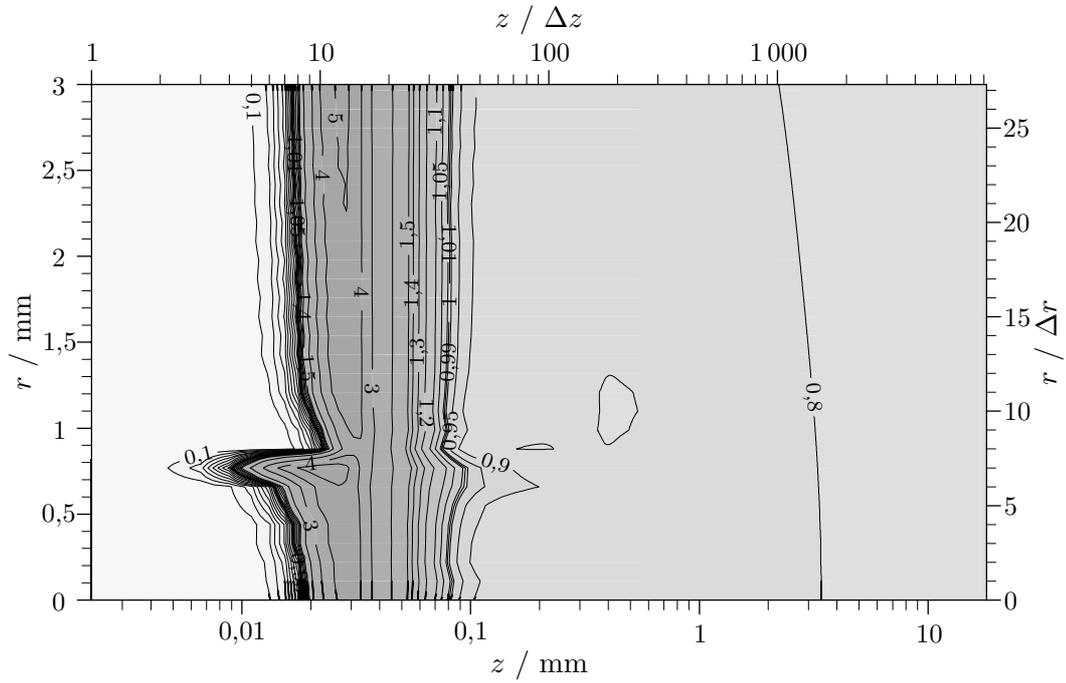


Abbildung 4.15: Normierte Elektronendichte mit  $\gamma = 0,11$  für  $r \leq 7,5 \Delta r \approx 0,8$  mm und  $\gamma = 0,1$  außen bei 18,5 ns ( $\bar{n}_e = 8,26 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

$6\Delta r) = 0,74$ ,  $\gamma(r = 7\Delta r) = 0,58$ ,  $\gamma(r = 8\Delta r) = 0,42$ ,  $\gamma(r = 9\Delta r) = 0,26$  und  $\gamma(r = 10\Delta r) = 0,1$ . Die resultierenden Isodensiten zwischen 17,6 ns und 18,2 ns sind in den Abbildungen 4.16–4.18 gezeigt. Der Durchbruch erfolgt unter diesen Bedingungen an der Kante zum höchsten auftretenden Sekundäremissionskoeffizienten. Im Vergleich zum scharfen  $\gamma$ -Fleck in den Abbildungen 4.7–4.9 verzögert sich der Durchbruch, er ist bei 17,6 ns noch nicht vollendet. Bei 17,9 ns ist der Mantel des entstehenden Rings erneut sehr schmal, er wird aber zu 18,2 ns breiter als beim scharfen  $\gamma$ -Fleck. Auf der zur Anode gerichteten Seite des Kathodenfalls ist die Entwicklung mit beiden Annahmen gleich.

### 4.3 Diskussion

In diesem Kapitel wurden Effekte einer inhomogenen Elektronenemissivität der Kathode untersucht. Grundlage der aufgezeigten Strukturbildung ist die Schichtzündung, in der der entstehende Kathodenfall innerhalb weniger

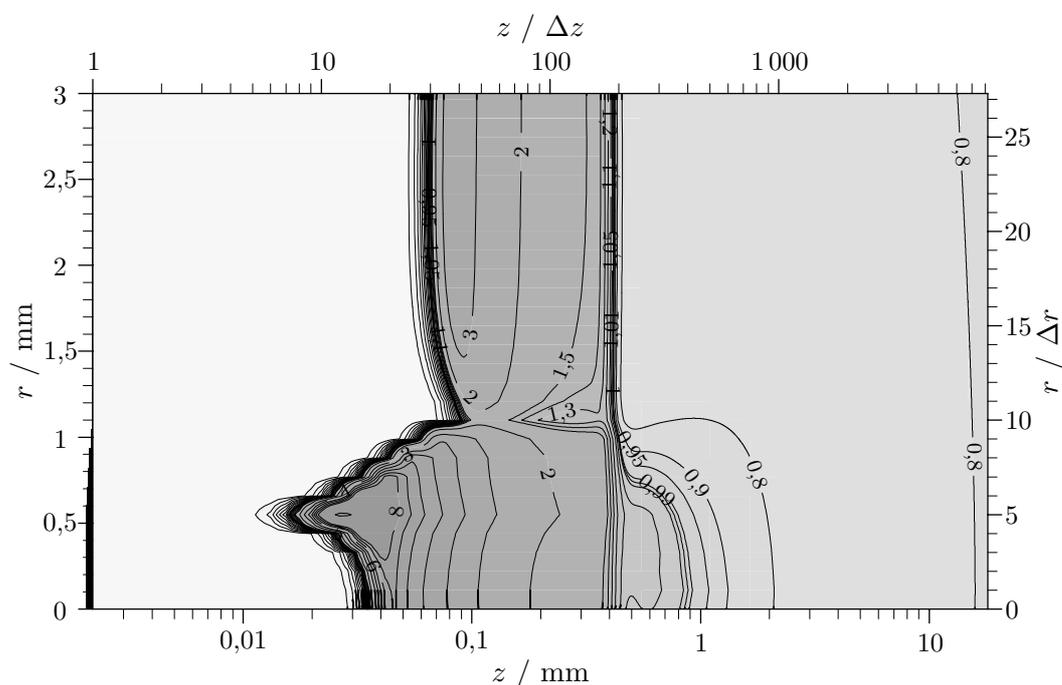


Abbildung 4.16: Normierte Elektronendichte mit einer linearen Übergangszone zwischen  $\gamma = 0,9$  für  $r \leq 5,5 \Delta r \approx 0,6$  mm und  $\gamma = 0,1$  für  $r \geq 9,5 \Delta r \approx 1,0$  mm bei 17,6 ns ( $\bar{n}_e = 1,77 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

Nanosekunden von einer auf die Kathode zulaufenden Ionisationswelle kurzgeschlossen wird.

Erstmals wurde die Schichtzündung in diesem Entladungstyp von Simon theoretisch untersucht. Vergleichbare Ergebnisse des Unterkapitels 4.1 stimmen bis 17,9 ns mit seinen Vorhersagen überein [SIMON93, Seiten 75ff]. Zu späteren Zeiten gibt Simons Modell in der Ionisationswelle bis zu einem Faktor Zehn größere Elektronendichten eine dreifach höhere Maximalfeldstärke im Kathodenfall und eine schnellere späte Phase der Schichtzündung als die vorliegende Arbeit an.

Die Diskrepanzen in den letzten betrachteten Nanosekundenbruchteilen mögen auf Unterschiede der physikalischen Modelle oder numerischen Verfahren zurückzuführen sein. Diese werden hier nicht weiter untersucht, da die Grundannahmen beider Modelle zu diesem Zeitpunkt fragwürdig sind. Simon hat gezeigt, daß dann hohe räumliche und zeitliche Gradienten der Feldstärke die auch von ihm benutzte Local-Field-Approximation verletzen. Zudem be-

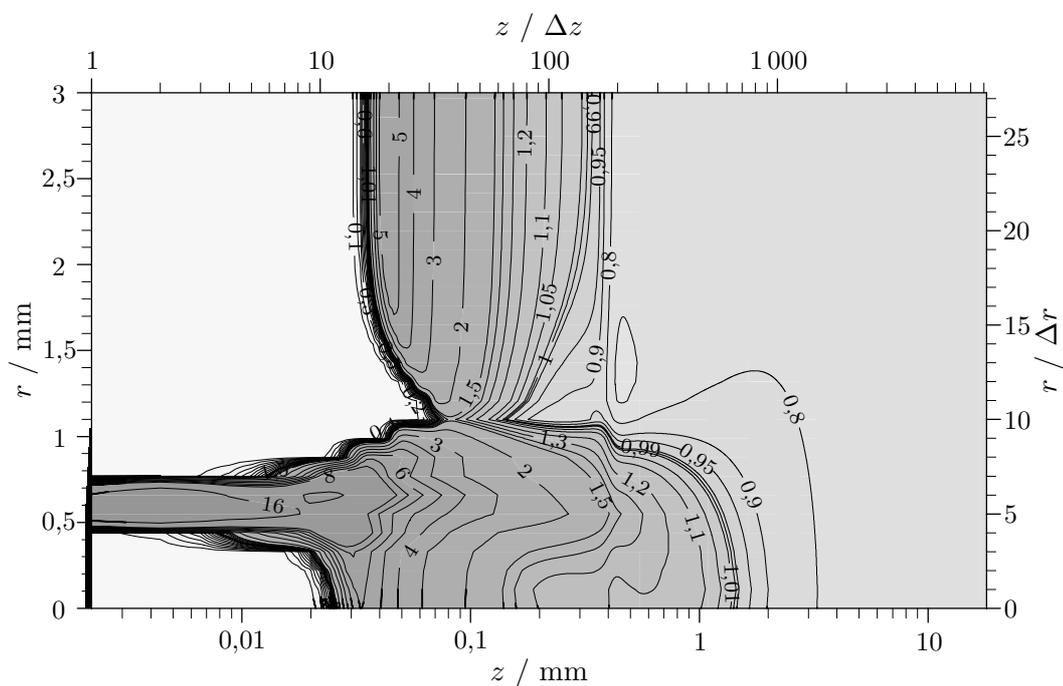


Abbildung 4.17: Normierte Elektronendichte für einen unscharfen  $\gamma$ -Fleck wie in Abbildung 4.16 bei 17,9 ns ( $\bar{n}_e = 2,96 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

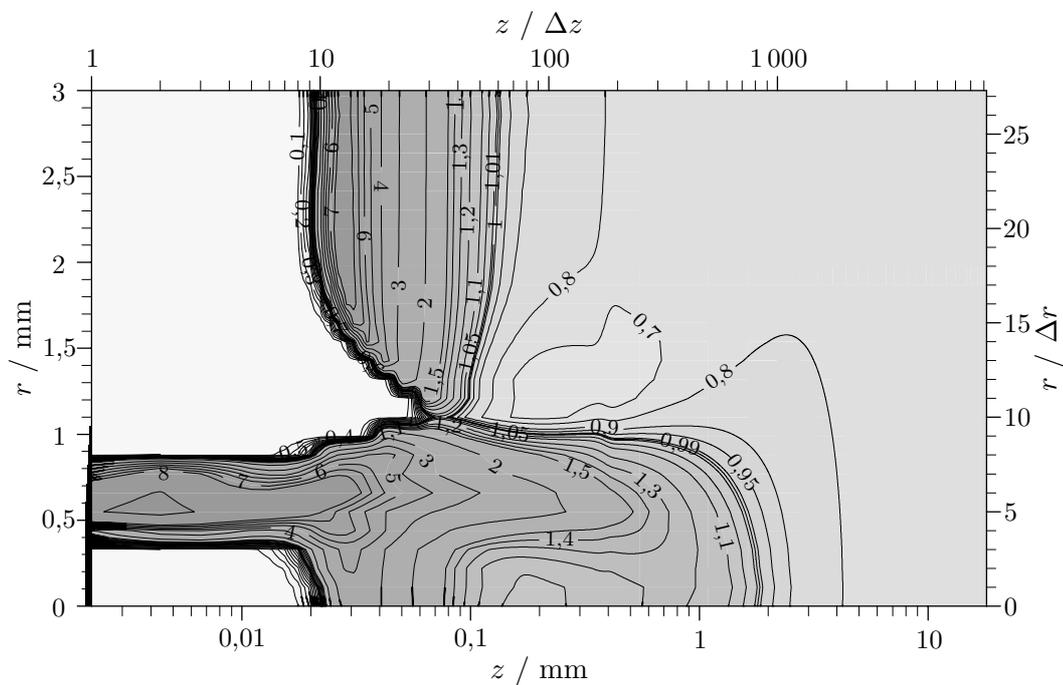


Abbildung 4.18: Normierte Elektronendichte für einen unscharfen  $\gamma$ -Fleck wie in Abbildung 4.16 bei 18,2 ns ( $\bar{n}_e = 4,94 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ).

ginnen Sekundärspezies, Einfluß auf die Elektronenverteilungsfunktion auszuüben. Im hier verwendeten Programm mit expliziter Zeitintegration setzen dann unrealistische Oszillationen der physikalischen Größen ein. Auch beim impliziten Verfahren von Simon treten zur gleichen Zeit numerische Schwierigkeiten auf. Mit dem vorliegenden Modell ist es daher nicht sinnvoll möglich, spätere Entladungsphasen zu untersuchen.

Die Elektronendichte im Kathodenfall ist nach Abbildung 4.10 vor dem Durchbruch äußerst gering. Die spätere rapide Hochmultiplikation kann mit einem Fluidmodell, wie in dieser Arbeit verwendet, nicht erschöpfend beschrieben werden, da in der Phase verschwindend niedriger Elektronendichte statistische Effekte zu erwarten sind, die nicht erfaßt werden.

Wie in Unterkapitel 4.1 demonstriert, ist der Einsatzzeitpunkt und die Geschwindigkeit der zur Kathode laufenden Ionisationswelle vom Sekundäremissionskoeffizienten auf der Kathode abhängig. Existieren Gebiete mit unterschiedlichem  $\gamma$ , so nähern sich getrennte Fronten der Kathode. Unterkapitel 4.2 zeigt für eine kreisrunde lokalisierte Erhöhung der Sekundärelektronenemission, daß am Übergangsbereich eine verstärkte Elektronendichte auftritt, die von einem erhöhten Feld im Kathodenfall begleitet wird. Innerhalb von weniger als 0,3 ns bricht dann eine Wolke sehr hoher Elektronendichte von der Ionisationswelle zur Kathode durch und bildet in dieser Geometrie eine Röhre mit einem schmalen Mantel großer Leitfähigkeit an der Kante zum hohen Sekundäremissionskoeffizienten. Auch ins übrige Entladungsvolumen hinein entwickelt sich über mehrere Millimeter hinweg eine Auswölbung erhöhter Elektronendichte. Die gesamte Strukturbildung ist stärker für größere Sekundäremissionskoeffizienten im Zentrum, tritt aber verzögert auch bei einem Fleck mit nur 10 % erhöhtem  $\gamma$  auf.

Experimente an diesem Entladungstyp zeigen [DREISKEMPER93], daß die Schichtzündung meist nicht homogen erfolgt. Es treten während des zeitlich eng begrenzten Zündvorgangs lokalisierte Verstärkungen der Leuchtdichte auf, die als Gebiete erhöhter Stromdichte gedeutet und *Hot Spots* genannt werden. Experimentelle Befunde legen eine hohe Temperatur und Elektronendichte im Hot Spot nahe. Dem Hot Spot ist ein Stiel vorgelagert, der sich kelchförmig zum Hauptentladungsvolumen öffnet. Im weiteren Verlauf entwickeln sich dünne, hell leuchtende Kanäle, sogenannte *Filamente*, die auf der Struktur aus Hot Spot, Stiel und Kelch fußen und zunehmend den

Strom im Plasmavolumen führen. Damit zerstören sie die für Anwendungen wie z. B. eine Laserentladung geforderte Homogenität der Entladung, und die starken Stromkonzentrationen schädigen die Kathode. Einzelne Entladungen ohne Filamente weisen keine Hot Spots auf.

Den Schlüssel zum Verständnis der Entstehung von Filamenten bergen die Hot Spots. Da sie sich genau während der Schichtzündung bilden, sind sie dem hier vorgestellten Modell zugänglich. In jener Phase kommen erstmals in der Entladungsentwicklung Kathodeneigenschaften zum Tragen. So ist es naheliegend, Inhomogenitäten der Kathode als Ausgangspunkt für Hot Spot anzunehmen.

Die Berechnungen dieses Kapitels können erstmals zeigen, daß und wie sich aus lokalisierten Erhöhungen des Sekundäremissionskoeffizienten schmale Volumina großer Elektronendichte an der Kathode bilden. Sie entstehen nicht primär vor der Zone mit erhöhten  $\gamma$ , sondern an ihrem Rand. In den dargestellten Berechnungen lassen sich Strukturen wie Stiel und Anfänge eines Kelches identifizieren. Die beobachtete Vergrößerung der Spot- bzw. Stieldimension mit der Entladungsdauer wird reproduziert. Auf einen expliziten Vergleich mit den Experimenten wird jedoch verzichtet, da wichtige experimentelle Bedingungen wie der Sekundäremissionskoeffizient auf der Kathode unbekannt sind.

Die Rechnungen sagen auch für geringe Erhöhungen von  $\gamma$  die Ausbildung eines Stiels mit später auftretendem Hot Spot voraus. Da sich die Geschwindigkeit der Ionisationsfronten bei so geringen Abweichungen der Sekundäremission kaum unterscheidet, entsteht nur ein kurzer Stiel im Vergleich zu einem doppelt oder neunfach erhöhtem  $\gamma$ .

Dreiskemper führte darüber hinaus Versuche mit einer speziell präparierten Kupferkathode durch, auf die galvanisch Nickelstreifen der Dicke  $12\ \mu\text{m}$  aufgebracht wurden. Im Verlauf einer Entladung entwickeln sich an den Kanten Hot Spots [DREISKEMPER93, Abbildung 4.2.2.7.2]. Die Berechnungen dieses Kapitels zeigen, daß dieses Phänomen allein durch unterschiedliche Sekundäremissionskoeffizienten hervorgerufen werden kann.

# Kapitel 5

## Schlußbetrachtung

Das dieser Arbeit zugrundeliegende physikalische Modell von Hochdruckglimmentladungen berücksichtigt nicht Stöße von Elektronen mit Sekundärspezies, d. h. Teilchen, die in der Entladung durch Elektronenstöße erzeugt werden. Daher ist es möglich, die Elektronenverteilungsfunktion nur in Abhängigkeit von der reduzierten Feldstärke  $E/N$  zu betrachten. Dasselbe gilt dann auch für die die Ionisationskinetik bestimmende Koeffizienten.

Elektronenerzeugung durch Photoionisation ist nicht im Modell enthalten. Sie ist bei der Bildung von Streamerentladungen in nicht vorionisierten Gasen ein für das schnelle Vorwachsen des Streamerkopfs wesentlicher Prozeß. Hier wird angenommen, daß die durch die Photoionisation erzeugten Elektronendichten gegenüber der Vorionisationselektronendichte vernachlässigt werden können.

Das Modell wird für die Untersuchung der Zündphase von Entladungen in Gemischen aus Neon, Xenon und Chlorwasserstoff benutzt. Die Zündphase wird gerade als die Zeitspanne definiert, in der die Sekundärspezies keinen Einfluß haben. Das entwickelte numerische Verfahren ist so gestaltet, daß es ohne weiteres auf Hochdruckglimmentladungen in anderen Gasgemischen angewendet werden kann, wenn dafür die Reaktions- und Transportkoeffizienten als Funktion von  $E/N$  bekannt sind.

Dabei muß beachtet werden, daß Entladungsphasen oder Gebiete, in denen der räumliche oder zeitliche Gradient der elektrischen Feldstärke so groß wird, daß dadurch die Elektronenverteilungsfunktion beeinflusst wird, nicht

behandelt werden können. Im Modell wird vorausgesetzt, daß die „Local-Field-Approximation“ gültig ist.

Für die behandelten Entladungen ist zu erwarten, daß in den sehr dünnen vor der Kathode gebildeten Filamenten die Local-Field-Approximation nicht mehr anwendbar ist. Dies darf bei einer detaillierten Analyse der berechneten Strukturen nicht vergessen werden.

Die wesentlichen Aussagen, die über die Ne/Xe/HCl-Entladung erhalten wurden, kann man wie folgt zusammenfassen:

- Aus räumlichen Inhomogenitäten der Vorionisation entwickeln sich keine einem Streamer ähnliche Elektronendichteverteilungen. Vielmehr bildet sich bei radial ausgedehnten Störungen während der Zündphase ein recht homogener Kanal erhöhter Elektronendichte, der von der Anode bis zur Kathode reicht. Das heißt, daß derartige Störungen am Ende der Zündphase zu einer räumlichen Verteilung der Elektronendichte führen, die gut durch das Parallel- $R$ -Modell behandelt werden können. Axial ausgedehnte Störungen hingegen sind in ihrer Form recht stabil. Sie nehmen nur langsam in der Amplitude ab und dehnen sich im betrachteten Zeitraum wenig aus.
- Starke radiale Inhomogenitäten der Elektronendichteverteilung entstehen durch lokale, kreisförmige Erhöhungen des Townsendkoeffizienten  $\gamma$  auf der Kathodenoberfläche. Sie bewirken an dieser Stelle einen früheren Einsatz der Schichtzündung. Dabei bildet sich ein Rohr mit stark erhöhter Elektronendichte, das als Stiel der Entladung bezeichnet werden kann. Dieser Effekt wurde von Dreiskemper experimentell nachgewiesen. Hier wurde gezeigt, daß schon kleine Erhöhungen von  $\gamma$  ( $\gamma = 0,1 \rightarrow 0,11$ ) ausreichen. Damit ist gezeigt, daß es nicht notwendig ist, zur Deutung diesen Effekts die Existenz von metallischen Mikrospitzen [AKASHI97, AKASHI97A] zu postulieren. Bei der Herstellung von Kathoden für Hochdruckglimmentladungen ist also nicht nur auf eine sehr ebene, spitzenfreie Oberfläche, sondern auch auf eine extrem hohe Materialhomogenität zu achten. Zum Beispiel können beim Polieren in die Fläche eingedrückte Flecken von Poliermaterial Auslöser von Stielen sein.

Ein Versuch, die berechneten Stieldimensionen quantitativ mit experimentellen Daten zu vergleichen, wurde nicht unternommen. Der Durchmesser des

Stiels und der Zeitpunkt des Beginns der Stielbildung und Herauswachsens einer Inhomogenität aus der Vorderseite der auf die Kathode zulaufenden Ionisationsfront werden in der Rechnung durch die Annahmen über den  $\gamma$ -Fleck (Durchmesser, Wert von  $\gamma$ ) auf der Kathode bestimmt. Solange keine gezielt durchgeführten Experimente vorliegen, ist außer der prinzipiellen Übereinstimmung keine Verifikation des Modells möglich.

## Mögliche Erweiterungen des Modells

Um die in Kapitel 4 behandelte Stielbildung genauer zu untersuchen und den Übergang in die Phase der Stielverlängerung und anschließenden Kelchbildung, wie sie experimentell beobachtet worden sind, zu behandeln, sind folgende Erweiterungen des physikalischen Modells notwendig:

1. Es muß der Einfluß der Sekundärspezies auf die Reaktions- und Transportkoeffizienten berücksichtigt werden. D. h., es sind die für räumlich homogene Modelle entwickelten Verfahren in das vorliegende Modell zu implementieren.
2. Im kathodennahen Bereich sind die Feldgradienten in der Lösung der Boltzmann-Gleichung zu berücksichtigen.
3. In späten Phasen der Entladung, in denen die Stromdichten weiter angestiegen sind, muß neben den von Raumladungen erzeugten inhomogenen Feldern auch die Verformung des von außen angelegten elektrischen Feldes durch zum Teil starke Unterschiede der elektrischen Leitfähigkeit berücksichtigt werden.

Die Implementation dieser Prozesse in das vorliegende Modell erfordert den Einsatz weiterentwickelter numerischer Verfahren. Neben dem Rechenaufwand für die Lösung der Poisson-Gleichung wäre die sehr häufige Neuberechnung der Elektronenverteilungsfunktion notwendig. Es ist anzunehmen, daß dadurch extrem große Rechenzeiten erforderlich werden. Es erscheint fraglich, ob dieser Aufwand der Problematik des exakten Verständnisses der Inhomogenitäten in gepulsten Hochdruckglimmentladungen angemessen ist.

# Literaturverzeichnis

- [ABRAMOWITZ68] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover Publications, New York (1968) 2.3.4
- [ACTON70] F. S. Acton, *Numerical methods that work*, Harper & Row, New York (1970) 2.3.4
- [AKASHI97] H. Akashi, Y. Sakai, H. Tagashira, *Modeling of a micro-streamer initiation and development of ArF excimer laser discharges*, Aust. J. Phys. **50**, 655–669 (1997) 1, 5
- [AKASHI97A] H. Akashi, Y. Sakai, N. Takahashi, T. Sasaki, *Modeling of a filamental discharge initiation and development of XeCl excimer laser discharges*, Proc. XII Int. Conf. on Gas Discharges and Their Applications **2**, Greifswald, 629–632 (1997) 1, 5
- [BACKHAUS92] D. Backhaus, *Untersuchungen zur instationären Boltzmann-Gleichung und zur Reaktionskinetik in der Modellierung von XeCl\*- und KrF\*-Hochdruckglimmentladungen*, Dissertation, Universität Hannover (1992) (D. Backhaus = D. Loffhagen) 1, 2.1, 2.1, 2.1, 2.1, 2.3.3, 2.4, 2.3, 2.4.1, 2.4.2, 2.4.2, 2.4.2, 3.1
- [BJÖRCK72] A. Björck, G. Dahlquist, *Numerische Methoden*, R. Oldenbourg, München (1972) 2.3.4
- [BÖTTICHER91] W. Bötticher, R. Dreiskemper, H. Storr, *Kathodenmechanismen in Hochdruckglimmentladungen*,

- Zwischenbericht zum F+E Vorhaben 13 N 5722, Bundesministerium für Forschung und Technologie (1991) 2.4.2
- [BÖTTICHER92] W. Bötticher, H. Lück, St. Niesner, A. Schwabedissen, *Small volume coaxial discharge as precision testbed for 0D-models of XeCl lasers*, Appl. Phys. B **54**, 295–302 (1992) 1
- [BÖTTICHER93] W. Bötticher, *Filamentation of high pressure glow discharges*, Proc. XXI ICPIG, Bochum, Contr. Papers **3**, 128–131 (1993) 1
- [BOOK75] D. L. Book, J. P. Boris, K. Hain, *Flux-corrected transport. II. Generalizations of the method*, J. Comp. Phys. **18**, 248–283 (1975) 2.3.1.3
- [BORDAGE91] M. C. Bordage, A. Chouki, P. Ségur, *Electron swarm parameter calculations in HCl and a typical Ne-Xe-HCl laser excimer mixture*, Proc. XX ICPIG, Il Ciocco, Contr. Papers **2**, 369–370 (1991) 2.4.2
- [BORDAGE93] M. C. Bordage, Université Paul Sabatier, Toulouse, private Mitteilung (1993) 2.4.2
- [BORIS73] J. P. Boris, D. L. Book, *Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works*, J. Comp. Phys. **11**, 38–69 (1973) 2.3.1.3, 2.3.1.3, 2.3.1.3, 2.3.1.3
- [BORIS76] J. P. Boris, D. L. Book, *Flux-corrected transport. III. Minimal-error FCT-algorithms*, J. Comp. Phys. **20**, 397–431 (1976) 2.3.1.3
- [BORIS93] J. P. Boris, A. M. Landsberg, E. S. Oran, J. H. Gardner, *LCPFCT — a flux-corrected transport algorithm for solving generalized continuity equations*, NRL Memorandum Report 6410, Naval Research Laboratory, Washington, DC (1993) 2.3.1.3, 2.3.6
- [COLLATZ55] L. Collatz, *Numerische Behandlung von Differentialgleichungen*, Springer, Berlin (1955) 2.3.3, 2.3.3

- [COOLEY70] J. W. Cooley, P. A. W. Lewis, P. D. Welch, *The Fast Fourier Transform algorithm: programming considerations in the calculation of sine, cosine and Laplace transforms*, *J. Sound Vib.* **12**, 315–337 (1970) 2.3.4
- [DHALI87] S. K. Dhali, P. F. Williams, *Two-dimensional studies of streamers in gases*, *J. Appl. Phys.* **62**, 4696–4707 (1987) 2.1, 2.3.2, 2.3.3, 2.3.6
- [DHALI88] S. K. Dhali, A. K. Pal, *Numerical simulation of streamers in SF<sub>6</sub>*, *J. Appl. Phys.* **63**, 1355–1362 (1988) 2.1
- [DREISKEMPER93] R. Dreiskemper, *Kathodenbedingte Instabilitäten transienter Hochdruckglimmentladungen, ein experimenteller Beitrag*, Dissertation, Universität Hannover (1993) 2.4, 4.1, 4.3, 4.3
- [DREISKEMPER93A] R. Dreiskemper, W. Böttcher, *Kathodenmechanismen in Hochdruckglimmentladungen*, Forschungsbericht 13 N 5722/3, Bundesministerium für Forschung und Technologie (1993) 2.4.2
- [DREISKEMPER95] R. Dreiskemper, W. Böttcher, *Light emission during cathode sheath formation in preionized high-pressure glow discharges*, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **23**, 180–187 (1995) 1
- [DREISKEMPER95A] R. Dreiskemper, G. Schröder, W. Böttcher, *Current filamentation of strongly preionized high pressure glow discharges in Ne/Xe/HCl mixtures*, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **23**, 987–995 (1995) 1
- [DUTTON75] J. Dutton, *A survey of electron swarm data*, *J. Phys. Chem. Rev. Data* **4**, 577–856 (1975) 2.4.2
- [ELLIS84] H. W. Ellis, M. G. Thackston, E. W. McDaniel, E. A. Mason, *Transport properties of gaseous ions over a wide energy range, part III*, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **31**, 113–151 (1984) 2.4.2

- [ENGELN-MÜLLGES85] G. Engeln-Müllges, F. Reutter, *Numerische Mathematik für Ingenieure*, Bibliographisches Institut, Zürich (1985) 2.3.3, 2.3.4
- [FLETCHER91] C. A. J. Fletcher, *Computational techniques for fluid dynamics*, 2. Auflage, 2 Bände, Springer, Berlin (1991) 2.3.1
- [GORTCHAKOV98] S. Gortchakov, D. Loffhagen, R. Winkler, *The homogeneity of a stabilized discharge-pumped XeCl\* laser*, Appl. Phys. B **66**, 313–321 (1998) 1, 2.1
- [GRIGORIEFF72] R. D. Grigorieff, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Band 1 *Einschrittverfahren*, Teubner, Stuttgart (1972) 2.3.3
- [HAMMER87] Th. Hammer, *Untersuchungen zur Reaktionskinetik gasentladungsgepumpter XeCl\*-Laser mittels hochzeitaufgelöster Absorptionsspektroskopier Messungen von Xe\*-Teilchenzahldichten*, Dissertation, Universität Hannover (1987) 2.1
- [KOGELSCHATZ97] U. Kogelschatz, B. Eliasson, W. Egli, *Dielectric-barrier discharges, principles and applications*, XXIII ICPIG, Toulouse, Invited Paper (1997); veröffentlicht in J. de Physique IV **7**, colloque C4, 47–66 (1997) 1
- [KUNHARDT85] E. E. Kunhardt, P. F. Williams, *Direct solution of Poisson's equation in cylindrically symmetric geometry: a fast algorithm*, J. Comp. Phys. **57**, 403–414 (1985) 2.3.4, 2.3.4, 2.3.4, 2.3.4
- [KUNHARDT87] E. E. Kunhardt, C. Wu, *Towards a more accurate flux corrected transport algorithm*, J. Comp. Phys. **68**, 127–150 (1987) 2.3.1, 2.3.1, 2.3.1.2, 2.3.1.3, 2.3.1.4, 2.3.1.4, 2.3.1.4, 2.3.1.4, 2.3.1.4, 2.3.1.4
- [LOFFHAGEN93] D. Loffhagen, Universität Hannover, persönliche Mitteilung (1993) 2.4.2

- [LOFFHAGEN94] D. Loffhagen, R. Winkler, *A new nonstationary Boltzmann solver in self-consistent modelling of discharge pumped plasmas for excimer lasers*, J. Comp. Phys. **112**, 91–101 (1994) 1
- [LÜCK92] H. Lück, *Präzisionsmessung von Entladungsstrom und -spannung von Hochdruckglimmentladungen in Ne:Xe:HCl Gemischen*, Dissertation, Universität Hannover (1992) 1, 2.4, 2.3, 2.4.1, 2.4.2
- [LÜCK94] H. Lück, D. Loffhagen, W. Böttcher, *Experimental verification of a zero-dimensional model of the ionization kinetics of XeCl discharges*, Appl. Phys. B **58**, 123–132 (1994) 1
- [NOYE82] J. Noye, *Finite difference methods for partial differential equations*, in: *Numerical solutions of partial differential equations*, Proceedings of the 1981 conference, Melbourne, Ed.: J. Noye, 3–137, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1982) 2.3.2, 2.3.2
- [ORAN87] E. S. Oran, J. P. Boris, *Numerical simulation of reactive flow*, Elsevier, New York (1987) 2.3.1.1, 2.3.1.2, 2.3.2, 2.3.2, 2.3.4, 2.3.6, 2.3.6
- [PARKER69] J. H. Parker Jr., J. J. Lowke, *Theory of electron diffusion parallel to electric fields. I. Theory*, Phys. Rev. **181**, 290–301 (1969) 2.4.2
- [PICKERING86] M. Pickering, *An introduction to Fast Fourier Transform methods for partial differential equations, with applications*, Research Studies Press, Letchworth (1986) 2.3.4, 2.3.4
- [POTTER73] D. Potter, *Computational physics*, John Wiley & Sons, London (1973) 2.3.1.2, 2.3.1.2, 2.3.2, 2.3.3, 2.3.4, 2.3.4
- [PRESS95] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical recipes in FORTRAN: The art*

- of scientific computing*, Zweite Auflage, Cambridge University Press, Cambridge (1995) 2.3.2, 2.3.2, 2.3.4, 2.3.4, 2.3.4, 2.3.6
- [RAETHER64] H. Raether, *Electron avalanches and breakdown in gases*, Butterworths, London (1964) 3.6
- [REALE90] F. Reale, G. Peres, S. Serio, *A two-dimensional hydrodynamic code for astrophysical flows*, Il Nuovo Cimento **105 B**, 1235–1254 (1990) 2.3.1.1
- [SCHWABEDISSEN94] A. Schwabedissen, D. Loffhagen, Th. Hammer, W. Bötticher, *Experimental verification of a zero-dimensional model of the kinetics of XeCl\* discharges by Xe\*- , Cl\*- , Ne\*- , and H\*-density measurements*, Appl. Phys. B **58**, 471–481 (1994) 1
- [SCHWABEDISSEN95] A. Schwabedissen, D. Loffhagen, Th. Hammer, W. Bötticher, *Experimental verification of a zero-dimensional model of the kinetics of XeCl\* discharges by XeCl\*(B)- , XeCl\*(C)- , and Xe<sub>2</sub>Cl\*-density measurements*, Appl. Phys. B **61**, 175–186 (1995) 1
- [SIMON93] G. Simon, *2D-Modell der Zündphase von Hochdruckglimmentladungen*, Dissertation, Universität Hannover (1993) 1, 2.1, 2.3.5, 2.3.5, 2.3.6, 2.4, 2.4.1, 2.4.2, 2.4.2, 4.1, 4.3
- [SIMON94] G. Simon, W. Bötticher, *Two-dimensional model of the ignition phase of high-pressure glow discharges*, J. Appl. Phys. **76**, 5036–5046 (1994) 1
- [STRAUSS95] W. A. Strauss, *Partielle Differentialgleichungen*, Vieweg, Braunschweig (1995) 2.3.4
- [SWARZTRAUBER79] P. Swarztrauber, R. Sweet, *Efficient FORTRAN subprograms for the solution of elliptic equations*, ACM Trans. Math. Softw. **5**, 352–364 (1979)  
Als Unterprogrammssammlung *Fishpack* realisiert von:

- J. Adams, P. Swarztrauber, R. Sweet, *A package of FORTRAN subprograms for the solution of separable elliptic partial differential equations*, Version 3.2, National Center for Atmospheric Research, Boulder, U.S.A. (1988), im Internet erhältlich unter <http://www.netlib.org/fishpack/> 2.3.4
- [WANG90] M. C. Wang, E. E. Kunhardt, *Streamer dynamics*, Phys. Rev. A **42**, 2366–2373 (1990) 2.1
- [WOODWARD84] P. Woodward, Ph. Colella, *The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks*, J. Comp. Phys. **54**, 115–173 (1984) 2.3.1, 2.3.1.3
- [WU88] C. Wu, E. E. Kunhardt, *Formation and propagation of streamers in  $N_2$  and  $N_2$ - $SF_6$  mixtures*, Phys. Rev. A **37**, 4396–4406 (1988) 2.1, 2.3.6
- [WU89] C. Wu, E. E. Kunhardt, *Numerical solution of Poisson's equation for rapidly varying driving functions*, J. Comp. Phys. **84**, 247–254 (1989) 2.3.4, 2.3.4
- [WUTTKE90] M. W. Wuttke, *Analyse der Elektronenkinetik in  $XeCl^*$ -Laser-Entladungen*, Dissertation, Universität Hannover (1990) 2.3.3
- [YANG92] H. Q. Yang, A. J. Przekwas, *A comparative study of advanced shock-capturing schemes applied to Burgers' equation*, J. Comp. Phys. **102**, 139–159 (1992) 2.3.1, 2.3.1, 2.3.1.3, 2.3.1.3
- [ZALESAK79] S. T. Zalesak, *Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids*, J. Comp. Phys. **31**, 335–362 (1979) 2.3.1.3, 2.3.1.3, 2.3.1.3, 2.3.1.3, 2.3.1.4, 2.3.1.4
- [ZALESAK84] S. T. Zalesak, *A physical interpretation of the Richtmyer two-step Lax-Wendroff scheme, and its generalization to higher order*, Advances in computer methods for partial differential equations — V, Ed.:

R. Vichnevetsky, R. S. Stepleman, IMACS, Rutgers University (1984) 2.3.1.3

[ZALESAK87]

S. T. Zalesak, *A preliminary comparison of modern shock-capturing schemes: linear advection*, Advances in computer methods for partial differential equations — VI, Ed.: R. Vichnevetsky, R. S. Stepleman, IMACS, Rutgers University (1987) 2.3.1

# Dank

Herrn Prof. Dr. W. Bötticher danke ich herzlich für die interessante Themenstellung und die Möglichkeit, diese Arbeit anfertigen zu können. Aus seinem großem Engagement entstanden äußerst hilfreiche Diskussionen, die diese Arbeit entscheidend prägen.

Der Siemens AG bin ich zu Dank verpflichtet für die Gewährung eines Promotionsstipendiums und Herrn Dr. Th. Hammer für wesentliche Anregungen.

Herrn Dr. D. Loffhagen sage ich Dank für die Berechnung der Transport- und Reaktionskoeffizienten und die kritische Durchsicht von Teilen des Manuskripts.

Den ehemaligen Kollegen Dr. M. Bähr, Dr. St. Choroba, Dr. R. Dreiskemper, Dr. H. Lück, Dr. J. C. Molino Garcia, Dr. A. Schwabedissen, Dr. G. Schröder und Dr. G. Simon gilt mein Dank für viele stimulierende Messungen, Rechnungen und Gespräche.

Den Mitarbeitern des Instituts verdanke ich eine gute Atmosphäre, geprägt von gegenseitigem Respekt und Wohlwollen, die ich als sehr förderlich erfahren habe.

Beim Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) bedanke ich mich für die großzügige Zuteilung von Rechenzeit auf modernen Computern und den Zugang zu hochwertigen Ausgabegeräten. Besonders erwähnt seien Herr Dr. H.-H. Hehmsoth und Herr Dipl.-Math. S. Ludwig.

Tiefen Dank schulde ich meiner Mutter für die umfassende Unterstützung meiner Vorhaben.

# Lebenslauf

- Name: Helmut Andreas Storr
- Geburt: 13. September 1961 in Hannover
- Eltern: Veronika Storr, geb. Hornig  
Rudolf Storr, † 1962
- Ausbildung: 1968–1972: Besuch der Grundschule in Hannover  
1972–1981: Besuch der Leibnizschule Hannover mit dem  
Abschluß Abitur  
1981–1988: Studium der Physik an der Universität Hanno-  
ver, Diplomarbeit am Institut für Plasmaphy-  
sik bei Prof. Dr. F. Demmig mit dem Thema  
„Eine Untersuchung der physikalischen Grund-  
lagen von Modellen der Zweiphasenströmung“,  
Diplomprüfung im März 1988
- Beschäftigung: 1988–1999: Wissenschaftliche Tätigkeit am Institut für  
Plasmaphysik / Institut für Atom- und Mo-  
lekülphysik unter der Anleitung von Prof. Dr.  
W. Böttcher