

Modellierung von Teilchenkollisionen zur Berechnung hochverdünnter Plasmaströmungen

Von der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie der
Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Dejan Petkow
aus Burgas, Bulgarien

Hauptberichterin: Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz
Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. Claus-Dieter Munz
Mitberichter: Prof. Stefanos Fasoulas

Tag der mündlichen Prüfung: 31.01.2011

Institut für Raumfahrtsysteme
der Universität Stuttgart
2011

Kurzfassung

Diese Arbeit ist im Rahmen einer Kooperation mit dem Institut für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart, dem Institut für Hochleistungsimpuls- und Mikrowellentechnik des Karlsruher Instituts für Technologie sowie dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart entstanden. Im Rahmen der Kooperation soll ein vollkinetisches 3D Verfahren zur Simulation hochverdünnter Plasmaströmungen entwickelt werden. Hierbei hat das Institut für Aerodynamik und Gasdynamik die Aufgabe, einen Löser zur zeitgenauen Berechnung elektrischer und magnetischer Felder zu entwickeln. Das Institut für Hochleistungsimpuls- und Mikrowellentechnik ist mit der Entwicklung eines Fokker-Planck-Lösers zur Simulation von Coulomb-Kollisionen betraut. Am Institut für Raumfahrtssysteme werden die kurzreichweitigen Teilcheninteraktionen modelliert.

Die hier vorgestellte Arbeit gibt zunächst eine Einführung in die Theorie der gaskinetischen Beschreibung einer hochverdünnten Strömung. Dabei wird u. A. ein neu entwickeltes Modell zur Initialisierung Boltzmann'sch verteilter Anregungszustände vorgestellt und erfolgreich getestet.

Die Modellierungen der Teilcheninteraktionen umfassen reaktive und nichtreaktive Kollisionen, wobei mindestens ein Teilnehmer elektrisch neutral ist, sowie Coulomb-Kollisionen. Der Modellansatz des Instituts für Hochleistungsimpuls- und Mikrowellentechnik für die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung, welche die Grundgleichung zur Beschreibung von Coulomb-Kollisionen ist, beruht auf der Lösung einer äquivalenten stochastischen Differentialgleichung. Das Verfahren ist sehr genau und selbstkonsistent, erweist sich aber in der gekoppelten Anwendung derzeit als nicht praktikabel. Da mit dem gekoppelten Partikelverfahren technisch relevante und wissenschaftlich interessante Fragestellungen auf größeren räumlichen und zeitlichen Skalen untersucht werden sollen, wird in dieser Arbeit ein statistischer Modellierungsansatz gewählt.

Ein- und Ausgangsgrößen für die Kollisionsberechnung sind grundsätzlich Teilchenenergien sowie die entsprechenden Spezieszugehörigkeiten. Elektrische und magnetische Feldeffekte spielen während der Kollisionssimulation keine Rolle, machen sich aber in den Teilchengeschwindigkeiten vor dem Stoss bemerkbar. Die Translationsenergien geladener Teilchen enthalten elektrisch und magnetisch bedingte Anteile als Ergebnis des instationär arbeitenden Feldlösers hoher Ordnung, welcher vom Institut für Aerodynamik und Gasdynamik entwickelt wird.

Die Neutralteilcheninteraktion wird durch Implementierung eines Modells zur Berücksichtigung von Lennard-Jones-Potentialen verbessert. Das Kollisionsmodell wird modifiziert, um die Simulation von Elektron-Schwerteilcheninteraktionen auf Basis eines neu entwickelten Reaktionsmodells zu gewährleisten. Dieses basiert auf energieabhängigen Wechselwirkungsquerschnitten. Es wird eine einfache Querschnittsdatenbank für Argon sowie eine umfangreiche Datenbank für atomare Kohlenstoffspezies aufgebaut und implementiert, was durch plasmatechnologische Anwendungen sowie durch mit TeflonTM betriebene Parallelschienenbeschleuniger in der Raumfahrt motiviert ist. Die Datenbank enthält Querschnitte für die elastische Streuung von Elektronen an Neutralteilchen unter Berücksichtigung von Polarisierungseffekten, elektronenstoßinduzierte An- und Abregungs- sowie elektronenstoßinduzierte Ionisations- und Rekombinationsquerschnitte. Die Qualität des Modells hängt maßgeblich von der Berücksichtigung *aller* konkurrierenden Prozesse in Form von Querschnittsinformationen ab. Somit wird für die reaktive Interaktion eines Ion-Elektron-Paares ein vereinfachtes

Querschnittsmodell für die Coulomb-Streuung sowie ein Querschnitt für die Strahlungsrekombination implementiert. Eine eigens erzeugte Datenbasis für Fluor kann aufgrund der sehr schlechten Qualität derzeit verfügbarer Datenpunkte nicht verifiziert werden.

Coulomb-Kollisionen erfordern aufgrund des zugrundeliegenden langreichweitigen Coulomb-Potentials in der Regel eine alternative Herangehensweise, da die Kollisionen nicht als Zweikörperkollisionen behandelt werden können. Um dennoch Konsistenz in der Modellierung der Teilcheninteraktionen zu wahren, wird ein auf statistischen Prinzipien basierendes Verfahren implementiert und verifiziert. Dabei werden Coulomb-Kollisionen vereinfacht als Abfolge vieler Zweikörperkollisionen betrachtet.

Die numerischen Eigenschaften der implementierten Modelle werden hinsichtlich der Kopplung des Gesamtverfahrens sowie der räumlichen, zeitlichen und teilchenbezogenen Diskretisierung diskutiert. Erstmals wird auch der Einfluss des statistischen Fokker-Planck-Lösers auf die Gesamtenergieerhaltung im Falle einer mit einem einfachen Feldlöser gekoppelten Simulation untersucht.

Umfangreiche Verifizierungssimulationen auf Basis von Reservoirsimulationen werden durchgeführt. Der statistische Fokker-Planck-Löser wird verifiziert, in dem ein Elektronenstrahl in eine Ionen- und eine Elektronenwolke geschossen wird. Es werden analytische Lösungen für die Lang- und Kurzzeitentwicklung der Drift sowie der Varianz als Referenz verwendet. Im Fall der kurzreichweitigen Teilcheninteraktionen werden systemunabhängige Ratenkoeffizienten als Vergleichsgrößen herangezogen. Nicht vorhandene Referenzwerte werden numerisch durch Mittelung des betreffenden Querschnitts über eine gleichgewichtsverteilte Energie erzeugt.

Die Kopplung der Kollisionsroutinen an ein zur Verfügung gestelltes Verfahren zur Berechnung elektrischer Felder wird anhand einer vereinfachten Simulation eines Elektronenstrahls, welcher einen Kohlenstoff-Fluor-Strahl kreuzt, demonstriert. Hierbei steht der Nachweis sowohl der Kopplung unterschiedlicher Datenstrukturen, als auch die Ausführung der Kollisionsprozesse im Vordergrund.

Abstract

This work is embedded in a cooperation with the Institute of Aerodynamics and Gasdynamics of the Universität Stuttgart, the Institute of Pulsed Power and Microwave Technology of the Karlsruhe Institute of Technology, and the High Performance Computing Center Stuttgart. Within this cooperation a fully kinetic 3D particle code for the simulation of highly rarefied plasma flows is being developed. The Institute of Aerodynamics and Gasdynamics is responsible for the development of a solver for the time accurate computation of electric and magnetic fields. The development of a Fokker-Planck solver for the simulation of Coulomb collisions is assigned to the Institute of Pulsed Power and Microwave Technology. At the Institute of Space Systems the short range particle interactions are being developed.

The presented work gives initially an introduction in the theory of gas dynamic description of highly rarefied flows. As a part of this, a newly developed model for the initialization of Boltzmann distributed electron excitation states is presented.

The modelling of particle interactions concerns reactive and non-reactive collisions where at least one of the colliding particles is a neutral, and Coulomb collisions. The model approach used at the Institute of Pulsed Power and Microwave Technology for solving the Fokker-Planck equation - which is the governing equation for Coulomb collision processes - is based on solving an equivalent stochastic differential equation. The solver is very accurate and self consistent but a coupled simulation is currently unfeasible. As the overall particle code is intended to be applied to technically relevant and scientifically interesting problems on larger spatial and temporal scales a statistical approach is used within this work.

Input and output quantities for the collision computation are in general particle energies and the corresponding species identity. Electric and magnetic field effects are neglected during collision computation but affect the pre-collisional particle velocities. The translational energies of charged particles contain velocity components which are influenced by the electric and magnetic fields computed by the time accurate field solver which is being developed at the Institute of Aerodynamics and Gasdynamics.

The neutral particle interaction is improved by an implemented model taking Lennard-Jones potentials into account. The collision model is modified in order to allow for electron - heavy particle interactions which are treated on basis of a newly developed reaction model. It works with energy dependent cross sections. Therefore, a simple cross section data base for Argon and an extensive cross section data base for atomic Carbon species is being build and implemented which is motivated by typical plasma based industrial processes as well as TeflonTM propelled parallel plate accelerators for space propulsion purposes. The data base contains cross sections for the elastic electron scattering by atoms taking into account polarization effects, electron induced excitation and de-excitation cross sections, as well as electron induced ionization and recombination cross sections. The quality of the model strongly depends on the consideration of *all* concurrent processes in terms of cross section data. In order to treat a reactive ion-electron interaction a simplified formulation of the Coulomb cross section as well as a cross section for the radiative recombination is being implemented. The verification of a self developed Fluorine based cross section data base fails due to the low fidelity of

the available data.

Coulomb collisions demand another way of treatment caused by the long range interaction potential as this prohibits a treatment as binary collisions. For the sake of consistency in collision modelling an alternative approach based on statistical methods is implemented and verified. Therein, Coulomb collisions are modelled as a consecution of many binary collisions which simplifies the problem.

Numerical properties of the implemented models are discussed regarding code coupling methodology as well as spatial, temporal and particle discretization. For the first time the influence of the statistical Coulomb collision solver on the total energy conservation with respect to a coupled field and Coulomb collision solver is being discussed.

Extensive reservoir based verification simulations are being performed. The statistical Fokker-Planck solver is being verified by the interaction of an electron beam with an ion and with an electron cloud. The drift and variance of the beam electrons are compared to reference values obtained from analytical long and short term solutions. In case of short range particle interactions simulation results are compared with system independent rate coefficients. Unknown reference values are numerically computed by averaging the corresponding cross section over an energy making use of an equilibrium distribution function.

The coupling of the collision routines to a provided electric field solver is demonstrated on basis of a simplified simulation of an electron beam scattered by a heavy particle (Carbon and Fluorine) beam. Here, the coupling of different data structures as well as the correct execution of collision processes is of main importance.

Danksagung

Beginnen möchte ich mit einer Protokollverletzung: Mein größter Dank gilt meiner Frau Inna. Ihre geduldige und facettenreiche Unterstützung hat maßgeblich zum Erfolg dieser Doktorarbeit beigetragen.

Großer Dank gilt auch meiner Doktormutter Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz. Ihr reicher Erfahrungsschatz war mir oftmals eine unschätzbare Hilfe.

Ich danke auch Prof. Dr. rer. nat. Claus-Dieter Munz und Prof. Stefanos Fasoulas für die Übernahme des Mitberichts.

Dr.-Ing. Georg Herdrich möchte ich ganz besonders danken für den hochfrequenten Ansporn, auch wissenschaftliche Themen abseits der Doktorarbeit nicht aus den Augen zu verlieren. Zahllose Gespräche mit ihm haben mir eine erweiterte Perspektive gegeben, die ich nicht missen möchte.

Bedanken möchte ich mich auch bei Dr.-Ing. Markus Fertig für die wertvollen Erweiterungen meiner Sicht auf die Welt der Numerik. Und ich beharre darauf: DSMC gehört streng genommen nicht zur Numerik.

Auch möchte ich mich bei allen Doktoranden, Studenten und Mitarbeitern des Institutes bedanken für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Nicht zuletzt gilt mein ganz persönlicher Dank meinen Eltern, die viele Opfer gebracht haben, um mir Möglichkeiten zu geben.

"Wer immer tut, was er schon kann, bleibt immer das, was er schon ist."

Henry Ford

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	xv
Tabellenverzeichnis	xix
Symbolverzeichnis	xxi
1. Einleitung	1
2. Anwendungsbeispiele für Partikelverfahren	7
2.1. Parallelschienenbeschleuniger	7
2.2. Atmosphärischer Eintritt in großen Höhen	9
2.2.1. Berechnung des elektrischen Feldes in DSMC	10
2.2.2. Bewegung der Elektronen in DSMC	10
2.3. Industrielle Niederdruck- und Vakuumprozesse	11
2.3.1. Kathodenzerstäubung	12
2.3.2. Plasma- und Reaktives Ionenätzen	12
2.3.3. Physikalische Gasphasenabscheidung	13
3. Gaskinetische Grundlagen	15
3.1. Zustandssummen und Freiheitsgrade	15
3.2. Temperaturberechnung	18
3.3. Verteilungsfunktionen	19
3.3.1. Translation	19
3.3.2. Rotation	20
3.3.3. Vibration	20
3.3.4. Anregung	21
3.4. Kollisionsmechanik	23
3.4.1. Beschreibung der Kollisionsebene	23
3.4.2. Herleitung des Starrkugelquerschnitts	23
3.5. Kollisionsfrequenz und mittlere freie Weglänge	26
3.6. Energie- und Impulserhaltung	26
4. Physikalische Modellierung	29
4.1. Kollisionsmodelle	30
4.1.1. Simulierte Kollisionszahl	30
4.1.2. Methode der begrenzten Wahrscheinlichkeit	30

4.1.3.	Methode der natürlichen Stichprobengröße	32
4.2.	Neutralteilchenkollisionen	33
4.2.1.	Einfaches Starrkugelmodell	34
4.2.2.	Variables Starrkugelmodell	35
4.2.3.	Verallgemeinertes Starrkugelmodell	38
4.2.4.	Isotropes Streumodell	41
4.3.	Molekulare Relaxations- und Reaktionsprozesse	41
4.3.1.	Relaxationswahrscheinlichkeiten	41
4.3.2.	Reaktionswahrscheinlichkeiten	42
4.4.	Elektron-Schwerteilchen-Interaktionen	44
4.4.1.	Modifikation des Kollisionsmodells	45
4.4.2.	Reaktionsmodell	46
4.4.3.	Implementierte Wirkungsquerschnitte	48
4.5.	Coulomb-Kollisionen	56
4.5.1.	Theorie des kumulativen Streuwinkels	56
4.5.2.	Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion	61
5.	Numerische Eigenschaften	63
5.1.	Kopplungskonzept und Operatorsplitting	64
5.2.	Zweikörperkollisionen	65
5.2.1.	Statistische Fehler	65
5.2.2.	Deterministische Fehler	66
5.3.	Coulomb-Kollisionen	70
5.3.1.	Numerisches Heizen	71
5.3.2.	Gekoppelte PIC-FP-Simulation	73
6.	Simulationsergebnisse	79
6.1.	Verallgemeinertes Starrkugelmodell	80
6.2.	Modifiziertes Kollisionsmodell	81
6.2.1.	Argon	81
6.2.2.	Kohlenstoff und Fluor	82
6.3.	Reaktionsmodell	83
6.3.1.	Elektronenstoßionisation von Kohlenstoff	84
6.3.2.	Dreikörperrekombination von Kohlenstoff	85
6.3.3.	Elektronenanregung von Kohlenstoff	85
6.3.4.	Elektronenabregung von Kohlenstoff	86
6.3.5.	Reaktionsevaluierung von Fluor	87
6.4.	Coulomb-Streuung eines Elektronenstrahls	87
6.4.1.	Elektronenstrahl in Ionenwolke	87
6.4.2.	Elektronenstrahl in Elektronenwolke	89
6.5.	Gekreuzte Teilchenstrahlen	91
7.	Zusammenfassung und Ausblick	95

Literaturverzeichnis	99
Anhang	110
A. Nützliche Integrale	110
B. Tabellierte $A(\tau)$ -Funktion	111
C. Verwendete Simulationsparameter	112
D. Verallgemeinerte Darstellung der Ratenkoeffizienten	113

Abbildungsverzeichnis

2.1. Entladung des iMPD-Triebwerkes ADD SIMPLEX [35].	8
3.1. Vergleich der SHO-/TSHO-Vibrationszustandssumme am Beispiel Stickstoff unter Berücksichtigung der Nullpunktsenergie.	18
3.2. Vergleich der SHO-/TSHO-Vibrationsfreiheitsgrade am Beispiel Stickstoff mit $E_D = 945.33 \text{ kJ/mol}$	18
3.3. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C-Atome bei $T_e = 40.000 \text{ K}$	21
3.4. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C-Atome bei $T_e = 60.000 \text{ K}$	21
3.5. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 40.000 \text{ K}$	22
3.6. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 60.000 \text{ K}$	22
3.7. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 80.000 \text{ K}$	22
3.8. Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 100.000 \text{ K}$	22
3.9. Trajektorie eines kollidierenden Teilchens (2) im Fall eines repulsiven Potentials aus der Perspektive des Teilchens (1), b - minimaler Abstand der ungestörten Trajektorien, ε - Azimuthwinkel, χ - polarer Ablenkwinkel.	23
4.1. Qualitativer Vergleich unterschiedlicher Interaktionspotentiale für Neutralteilchen.	34
4.2. d^{VHS}/d^{HS} -Verhältnis für $T_{ref} = 300 \text{ K}$ sowie unterschiedliche ω -Exponenten über der Energie.	36
4.3. $\lambda^{HS}/\lambda^{VHS}$ -Verhältnis für $T_{ref} = 300 \text{ K}$ sowie unterschiedliche ω -Exponenten über der Temperatur.	36
4.4. Vergleich der Argon-Viskosität für unterschiedliche VHS-Parameter.	38
4.5. Vergleich der α -Werte am Kollisionsintegral für die Diffusion am Beispiel Argon.	39
4.6. Vergleich der α -Werte am Kollisionsintegral für die Viskosität am Beispiel Argon.	39
4.7. Definition der Interaktionsarten auf Basis der Austauschmechanismen bei molekularen Neutralteilchen.	42
4.8. Vergleich des elastischen Streuquerschnittes nach (4.68) mit Referenzwerten.	50
4.9. Die Größe A als Funktion des Isotropieparameters τ	60
4.10. Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichten für unterschiedliche Isotropieparameter und Streuwinkel.	60

5.1. Kopplungsschema	63
5.2. Relativer Fehler in Abhängigkeit von der Teilchenzahl.	67
5.3. Produkt aus Plasmafrequenz und Heizzeit als Funktion der räumlichen Auflösung [135].	72
5.4. Kinetische Energie aller Teilchen beim Fokker-Planck-Löser für drei verschiedene Auflösungen.	73
5.5. Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 1$ und zwei unterschiedlichen Teilchenzahlen N	75
5.6. Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 2$ und zwei unterschiedlichen Teilchenzahlen N	76
5.7. Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit 200.000 Teilchen und einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} = \{1, 2\}$	76
6.1. Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für Argon mit der Referenz, siehe Gl. (4.32).	80
6.2. Relative Abweichung des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für Argon von der Referenz, siehe Gl. (4.32).	80
6.3. Interaktionsquerschnitte für die Teilchenpaarung Elektron-Atom am Beispiel Argon .	82
6.4. Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten mit der Referenz, siehe Gl. (6.5)	82
6.5. Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)	83
6.6. Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für die (e, F) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)	83
6.7. Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der Referenz	84
6.8. Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten für die (e, C^+) -Paarung mit der Referenz	84
6.9. Vergleich des simulierten Rekombinationsratenkoeffizienten für die (e, C^+) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)	85
6.10. Vergleich des simulierten Rekombinationsratenkoeffizienten für die (e, C^{2+}) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)	85
6.11. Vergleich des simulierten Anregungsratenkoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3).	86
6.12. Vergleich des simulierten Geschwindigkeitsmittels des Elektronenstrahls mit der Theorie, siehe Gl. (6.6).	88
6.13. Relative Abweichung des simulierten Geschwindigkeitsmittels des Elektronenstrahls von der Theorie, siehe Gl. (6.6).	88
6.14. Vergleich der simulierten longitudinalen (Viereck) und transversalen (Kreis) Varianzen des Elektronenstrahls mit der Theorie, siehe Gln. (6.7) und (6.8).	89
6.15. Relative Abweichung der simulierten Varianzen des Elektronenstrahls von der Theorie, siehe Gln. (6.7) und (6.8).	89
6.16. Vergleich des simulierten (Symbol) Geschwindigkeitsmittels mit der Kurzzeitlösung (Linie) des Elektronenstrahls als Funktion der Zeit.	90

6.17. Vergleich der simulierten (Symbol) Gesamtvarianz mit der Kurzzeitlösung (Linie) des Elektronenstrahls als Funktion der Zeit.	90
6.18. Anfangskonfiguration: Gekreuzter Teilchenstrahl mit Elektronen (blau) und C - und F -Atomen (grün).	92
6.19. Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 1000 Iterationen, die C -Ionen sind rot markiert. . .	92
6.20. Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 5000 Iterationen.	92
6.21. Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 10000 Iterationen.	92
6.22. Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 15000 Iterationen.	93
6.23. Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 16000 Iterationen.	93

Tabellenverzeichnis

3.1. Charakteristische Rotations- und Vibrationstemperaturen für Luft.	17
4.1. Typische VHS-Parameter für Argon.	37
4.2. Ausgewählte Speziesparameter für das Lennard-Jones-Potential.	39
4.3. Die α_j -Parameter für das verallgemeinerte Starrkugelmodell [87].	40
4.4. Zuordnung Teilchentyp und Identifikationsnummer	47
5.1. Räumliche Auflösungswerte $\lambda_D/\Delta x$ für den Energieerhaltungstest.	75
6.1. Atomare Daten für die Elektronenanregung eines Argonatoms im Grundzustand. . .	81
A.1. Tabellierte Gammafunktionenwerte.	110
B.1. Tabellierte Werte für $A(\tau)$ mit $0.01 \leq \tau \leq 3$	111
C.1. Parameter für die Verifizierung des verallgemeinerten Starrkugelmodells.	112
C.2. Parameter für die Verifizierung des Kollisions- und Reaktionsmodells.	112
C.3. Parameter für die Verifizierung des Fokker-Planck-Lösers am Beispiel Elektronenstrahl in Ionenwolke.	112
C.4. Parameter für die Verifizierung des Fokker-Planck-Lösers am Beispiel Elektronenstrahl in Elektronenwolke.	112
C.5. Parameter für den Fokker-Planck-Energieerhaltungstest.	112
C.6. Parameter für die Simulation der gekreuzten Teilchenstrahlen.	112
D.1. Zuordnung m -Wert und Arrhenius-Modell.	113

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

a	$[-]$	Prä-exponentieller Arrhenius-Koeffizient
A	$[-]$	Funktion des Isotropieparameters
A_k	$[m^3/s^4]$	Koeffizienten im Ionisationsquerschnitt
$\tilde{A} \dots \tilde{F}$	$[-]$	Funktionskoeffizienten
$A_{ij}^{(0)}$	$[-]$	Drehmatrix
$B_{ij}^{(0)}$	$[-]$	Drehmatrix
\mathcal{B}	$[-]$	Betafunktion
\vec{B}	$[Vs/m^2]$	Magnetische Flussdichte
B	$[-]$	Speziesbezeichnung
B	$[-]$	Streukern
b	$[-]$	Prä-exponentieller Arrhenius-Koeffizient
b	$[m]$	Kollisionsparameter
c	$[m/s]$	Thermische Geschwindigkeit
C	$[\]$	Skalierungsfaktor für Wirkungsquerschnitt (Einheit variiert)
$C^{(0)}$	$[-]$	Matrix
d	$[m]$	Teilchendurchmesser
$D^{(0)}$	$[-]$	Matrix
D	$[-]$	Operator
D_{FP}	$[-]$	Fokker-Planck-Streukern
D_{FP}^*	$[-]$	Approximierter Fokker-Planck-Streukern
D	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient
E	$[J, eV]$	Energie
\vec{e}	$[-]$	Einheitsvektor
\vec{F}_L	$[N]$	Lorentzkraft
F	$[-]$	Wahrscheinlichkeitsdichte
F_{sim}	$[-]$	Makropartikelfaktor
f_{0-i}	$[-]$	Transitionsstärke
f	$[\]$	Verteilungsfunktion (Einheit variiert)
f^0	$[-]$	Normierte Verteilungsfunktion

G^*	$[1/m^4 kg^{1/2}]$	Konstante
$G_i^{()}$	$[-]$	Untermenge der Drehmatrix
\vec{g}	$[m/s]$	Relativgeschwindigkeit
g	$[m/s]$	Betrag der Geschwindigkeit
g_i	$[-]$	Entartung
\hat{g}	$[m/s]$	Normierte Relativgeschwindigkeit
H	$[-]$	Koeffizient
I	$[kgm^2]$	Massenträgheitsmoment
J	$[-]$	Operator
K_{eq}	$[-]$	Gleichgewichtskonstante
K	$[-]$	Knotenzahl
Kn	$[-]$	Knudsenzahl
L	$[m]$	Charakteristische Länge
l	$[-]$	Rotationsquantenzahl
m	$[kg]$	Teilchenmasse
m_{red}	$[kg]$	Reduzierte Teilchenmasse
N	$[-]$	Teilchenzahl
N_i	$[-]$	Teilchenzahl im Zustand i
n	$[1/m^3]$	Teilchendichte
n	$[-]$	Obere Vibrationsquantenzahl
O	$[-]$	Ordnung
P	$[-]$	Wahrscheinlichkeit
\tilde{P}	$[-]$	Funktionskoeffizient
P_l	$[-]$	Legendre-Polynom
Q	$[-]$	Paaranzahl
Q	$[-]$	Zustandssumme
\tilde{Q}	$[-]$	Funktionskoeffizient
R	$[-]$	Zufallszahl
R_s	$[J/kgK]$	Spezifische Gaskonstante
r	$[m]$	Teilchenabstand
r_0	$[m]$	Nulldurchgang des Lennard-Jones-Potentials
S	$[-]$	zu untersuchende Teilchenpaarzahl
t	$[s]$	Zeit
T	$[K]$	Temperatur
u	$[-]$	Dimensionslose Energie
U	$[-]$	Anzahl Iterationen
V	$[m^3]$	Volumen
\vec{v}, \vec{w}	$[m/s]$	Teilchengeschwindigkeit
X	$[-]$	Dimensionslose Energie

X_1	[–]	Dimensionslose Obergrenze des Resonanzbereiches
\vec{x}	[m]	Teilchenposition
Y	[J/eV]	Dimensionslose Energie
Z	[–]	Ladungszahl
Z	[–]	Kollisionsszahl

Griechische Symbole

α	[–]	GHS-Parameter
α_R	[–]	Steuergröße für die Relaxationseffizienz
α_r	[–]	Relative Polarisierbarkeit
β_c	[\sim]	Koeffizient für Kollisionsmodell
γ_0	[–]	Nullpunktparameter
γ	[–]	Hilfsgröße
Γ	[–]	Gammafunktion
δ	[–]	Kroneckersymbol
χ	[–]	polarer Streuwinkel
ϵ	[–]	dimensionslose Energie
ε	[–]	azimuthaler Streuwinkel
ϕ	[–]	azimuthaler Streuwinkel
Φ	[J]	Potential
Φ_0	[J]	Minimum des Lennard-Jones-Potentials
ϕ_c	[–]	Koeffizient für Kollisionsmodell
ϕ_{1-3}	[–]	VFD-Exponent
κ	[–]	Wärmeleitfähigkeit
Λ	[–]	Verhältnis Klein- zu Großwinkelkollisionen
λ	[m]	Mittlere freie Weglänge
λ_D	[m]	Debye-Länge
λ_L	[m]	Landau-Länge
μ	[$Pa\ s$]	Viskositätskoeffizient
η	[–]	Winkel
ν	[$1/s$]	Frequenz
Ω	[–]	Raumwinkel
$\Omega^{(l,s)}$	[–]	Kollisionsintegral
$\Omega^{I,II}$	[–]	Kollisionsstärke Typ I und II
Ω_R	[–]	Kollisionsstärke im Resonanzbereich
ω	[–]	VHS-/GHS-Parameter
$\vec{\omega}$	[–]	Drehwinkelinformation
Ψ	[–]	Faktor

σ	$[m^2]$	Wirkungsquerschnitt
τ	$[-]$	Isotropieparameter
θ_R	$[K]$	Charakteristische Rotationstemperatur
θ_V	$[K]$	Charakteristische Vibrationstemperatur
θ	$[-]$	polarer Einzelstreuwinkel
Θ	$[-]$	Winkel
Ξ	$[-]$	Störgröße
ξ	$[-]$	Freiheitsgrad
ξ	$[rad]$	Winkel
ζ	$[-]$	Anzahl äquivalenter Elektronen in der Außenschale

Indizes

A, B	atomare Spezies
a, b	Teilchen
b	Rückreaktion
CE	Chapman-Enskog
c	Kollision
c	Gitterzelle
cm	Massenschwerpunkt
cou	Coulomb-Kollision
D	differentiell
D	Dissoziation
d	Dissoziationsreaktion
Del	Delaunay
dex	Abregung
e	Austauschreaktion
e	Elektronen
ee	Elektronenanregung
ela	elastisch
exc	Anregung
f	Hinreaktion
ges	gesamt
i	Quantisiertes Energieniveau
i	Raumkoordinate
i	Interaktionstyp
i	Koordinatentransformationsschritt
ion	Ionisation
i, j	Drehmatrixkomponenten

j	Zähler
j	Ionisationsstufe
k	Zähler
k	k-te Koordinatentransformation
kin	kinetisch
l	Parameter für Kollisionsintegral
M	Maxwellverteilung
M	Diffusion
m, n	Energiezustand
n	oberes quantisiertes Energieniveau
n	Zustand nach der n-ten Koordinatentransformation
N	Anzahl der Binärkollisionen einer Mehrfachkollision
p	Plasma
$phion$	Photoionisation
R	Rotation
R	Rekombinationsreaktion
rad	radiativ
rec	Rekombination
ref	Referenz
rel	relativ
s	Spezies
s	Parameter für Kollisionsintegral
T	Translation
T	total
th	thermisch
V	Vibration
Vor	Voronoi
X	beliebige atomare Spezies
x, y, z	Raumkoordinaten
α	Spezies der Testteilchen
α	Parameter für Streumodell
β	Spezies der Feldteilchen
μ	Viskosität
ν	Parameter für Potentialmodell
0	Initialwert
1, 2	Teilchen
1, 2	Modelltyp
1, 2, 3	Drehung
'	nach der Kollision

	Parallelrichtung
⊥	Perpendikulärrichtung

Naturkonstanten

a_0	$5.291772 \cdot 10^{-11} \text{ m}$	Bohr-Radius
k_B	$1.380650 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$	Boltzmann-Konstante
e	$1.602189 \cdot 10^{-19} \text{ As}$	Elementarladung
h	$6.626176 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Planck'sches Wirkungsquantum
ε_0	$8.854188 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/Am}$	Permeabilitätskonstante des Vakuums
R_y	$6.626176 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Rydberg-Energie

Abkürzungsverzeichnis

DSMC	D irect S imulation M onte C arlo
FP	F okker- P lanck
GHS	G eneralised H ard S phere
HS	H ard S phere
iMPD	i nstationär m agnetoplasma d ynamisch
LasVegas	L ösungs a daptiertes S imulationssystem für v erdünnte G ase
MC	M onte C arlo
MCC	M onte C arlo C oulomb
MHD	M agneto h ydro d ynamik
PIC	P article I n C ell
PTFE	P olytetrafluorethylen
VHS	V ariable H ard S phere

1. Einleitung

Im Gegensatz zu einem Gas enthält ein Plasma Ladungsträger. Dadurch treten bestimmte Phänomene auf, welche durch eine Neutralgasmodellierung i. A. nicht ausreichend erklärt werden können. Ein Plasma besteht keinesfalls *nur* aus Ladungsträgern: So entsteht z. B. bei einem hochenthalpen atmosphärischen Eintrittsmanöver vor dem Bug des Eintrittskörpers ein Stoß, der die Teilionisation des in der Regel neutralen Atmosphäremisches zur Folge hat. Andererseits kann bei thermonuklearen Fusionsreaktoren von einer vollständigen Ionisation des Fusionsplasmas ausgegangen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden teilionisierte Plasmen betrachtet, wobei sich die genaue Zusammensetzung aus der Simulation der Plasmaströmung ergibt. Der Terminus *hochverdünnt* impliziert die Modellierung der Plasmaströmung unter Vermeidung der Kontinuumsannahme aufgrund zu niedriger Teilchendichten. Ein präzises Maß für den Grad der Verdünnung kann i. A. nicht angegeben werden, da die Kontinuumsannahme nicht gilt, wenn die Störung eines Plasmazustandes *aus der Sicht des Plasmas* so groß ist, dass es zu größeren und unbekannteren Abweichungen von der Gleichgewichtsverteilung der Teilchenenergien kommt. Eine niedrige Teilchendichte ist dazu nicht zwingend erforderlich, begünstigt aber das Versagen der Kontinuumsmodellierung erheblich, da aufgrund der verringerten Kollisionsprozesse die Relaxation in den Gleichgewichtszustand verzögert ist. Gilt die Kontinuumsannahme noch, so kann mit einer Temperatur- und Chemie-Nichtgleichgewichtsmodellierung gearbeitet werden. Andernfalls muss die Gültigkeit des Temperaturbegriffs grundsätzlich in Frage gestellt werden.

Die gaskinetische Grundgleichung zur Beschreibung einer Strömung ist die so genannte Boltzmann-Gleichung¹. Die gesuchte Größe ist die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion f , welche für jede Spezies definiert ist. Bei vernachlässigbaren Abweichungen von der algebraisch bekannten Gleichgewichtsverteilungsfunktion f_{GGW} können aus der Boltzmann-Gleichung die Euler-Gleichungen für Masse-, Impuls- und Energieerhaltung hergeleitet werden [1]. Sollen kleine Abweichungen von der Gleichgewichtsverteilungsfunktion grundsätzlich erlaubt werden, so können unter Verwendung eines linearen Störansatzes aus der Boltzmann-Gleichung die Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet werden [2]. Die Navier-Stokes-Gleichungen sind die hydrodynamischen Grundgleichungen und unterscheiden sich von den Euler-Gleichungen durch die Transportterme für die Viskosität, die Diffusion und die Wärmeleitung, welche makroskopische Manifestationen eines mikroskopischen Relaxationsprozesses darstellen. Da sich die meisten technisch interessanten Strömungen durch diese viskosen Transportprozesse auszeichnen, haben sich die Navier-Stokes-Gleichungen in der Hydrodynamik etabliert. Bei Plasmen müssen i. A. noch elektrische und magnetische Felder sowie deren Einfluss auf die Transportprozesse berücksichtigt werden. Dies macht die Lösung der Maxwell-Gleichungen erforderlich und führt in Kombination mit den Navier-Stokes-Gleichungen zu den Grundgleichungen

¹Diese Gleichung wird in Kap. 3 etwas näher erläutert.

der Magnetohydrodynamik [3].

Als Maß für die Gültigkeitsgrenze der Kontinuumsannahme wird die Knudsenzahl $Kn = \lambda/L$ verwendet, wobei λ und L die mittlere freie Weglänge und eine charakteristische Systemlänge darstellen. Für $\lambda \ll L$ bzw. $Kn \ll 1$ wird der gaskinetische Zustand durch die Kollisionen dominiert und man kann von einer gleichgewichtsnahen Geschwindigkeitsverteilungsfunktion ausgehen. Derartige Strömungszustände werden dann in aller Regel mit Navier-Stokes-Verfahren simuliert [4]. Die Grenze der Anwendbarkeit von Kontinuumsverfahren ist fließend. Als Richtwert gilt bekanntlich $Kn = 0.1$, darüber beginnt der so genannte Übergangsbereich, welcher ab $Kn > 10$ in den Bereich der freien Molekularbewegung übergeht. Bemühungen, die Grundgleichungen der Hydrodynamik in der Art zu erweitern, dass auch Strömungen mit Knudsenzahlen im Übergangsbereich durch Differentialgleichungssysteme beschrieben werden können (siehe z. B. [5, 6]), haben bisher nicht zum erhofften Erfolg geführt [7]. Aufgrund ihrer mathematischen Struktur existiert bisher kein allgemein gültiges analytisches Lösungsverfahren. Ausführliche Beschreibungen der numerischen Methoden zur direkten numerischen Lösung der Boltzmann-Gleichung sind z. B. in [8, 9, 10] zu finden. Derartige Methoden sind allerdings stark problemabhängig und somit in ihrer Anwendbarkeit eingeschränkt.

Wie jede Differential- sowie Integralgleichung beschreibt auch die Boltzmann-Gleichung das Verhalten des zugrunde gelegten Systems. Somit besteht ein alternativer Ansatz darin, das durch diese Gleichung repräsentierte System direkt zu modellieren. Dabei besteht die Strömung aus einer Vielzahl einzelner Teilchen. Diese Teilchen werden bewegt und deren Interaktionen untereinander sowie mit eventuell existierenden Wänden abgebildet.

Ein Verfahren, welches sich bei der Simulation hochverdünnter Strömungen etabliert hat ist die Direkte Simulation Monte Carlo (DSMC). Dieses statistische Verfahren macht sich zwei wesentliche Eigenschaften zunutze, welche den Rechenaufwand deutlich reduzieren: Zum Einen kann ein Teilchen eine Vielzahl realer Teilchen repräsentieren. Zum Anderen wird bei der DSMC die korrekte Reproduktion der Kollisionsfrequenz im zeitlichen Mittel gefordert, wodurch jedes simulierte Teilchen nur maximal eine Kollision je Zeitschritt erfährt. Durch den statistischen Ansatz wird der Rechenaufwand auf eine lineare Abhängigkeit von der Teilchenzahl reduziert. Dies erlaubt prinzipiell die Simulation von Problemstellungen auf größeren Raum- und Zeitskalen.

Die Modellierung von Teilchenkollisionen in hochverdünnten Plasmaströmungen wurde in dieser Arbeit bewusst allgemein gehalten, so dass die diskutierten Modellvorstellungen auf viele technische und wissenschaftliche Probleme angewandt werden können. Dennoch ist es hilfreich, exemplarisch eine Anwendung heraus zu greifen, um anhand ihrer diese Arbeit zu motivieren. Dies wird im folgenden Abschnitt am Beispiel eines Parallelschienenbeschleunigers durchgeführt.

Parallelschienenbeschleuniger

Parallelschienenbeschleuniger gehören zur Gruppe der instationären magnetoplasmadynamischen (iMPD) Triebwerke. Das sind gepulst arbeitende elektrische Triebwerke, die seit vielen Jahren in der Raumfahrt zur Lageregelung eingesetzt werden [11]. Für eine Reihe von Missionen ist dieser Triebwerkstyp auch als Primärtrieb geeignet, was die Anforderungen an eine missionsabhängi-

ge Optimierung und Qualifizierung enorm erhöht. Dies erfordert u. A. eine entsprechende numerische Modellierung und Simulation unter Berücksichtigung unterschiedlicher Konfigurationen. Die Schienen sind im einfachsten Fall zwei parallel angeordnete Elektroden, zwischen denen ein Treibstoffblock eingespannt ist. An den Elektroden liegt eine hohe Spannung an, die durch eine kapazitiv gespeicherte Energie aufrecht erhalten wird. Ein Zündmechanismus sorgt für die Erzeugung initialer Ladungsträger, mit deren Hilfe dann ein Oberflächenablationsprozess am Treibstoffblock in Gang gesetzt wird. Damit werden weitere Ladungsträger generiert, was schließlich die Entladung der Kondensatorenergie zur Folge hat. Kondensatorenergie und Pulsdauer führen dazu, dass eine Leistung von bis zu einem Megawatt bei einer ablatierten Masse der Größenordnung Mikrogramm umgesetzt wird. Dies lässt sehr starke Störungen der Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen erwarten, was eine vollkinetische Modellierung dieser Prozesse erforderlich macht. Die approximative Lösung der vollständigen Boltzmann-Gleichung erfordert auch die Berechnung elektrischer und magnetischer Felder, die durch die bewegten Ladungsträger erzeugt werden. Derartige Partikelverfahren zur Lösung der Maxwellgleichungen werden Particle-In-Cell (PIC) genannt und ignorieren direkte Kollisionen von Ladungsträgern (Coulomb-Kollisionen). Diese werden durch sogenannte Fokker-Planck-Löser (FP) behandelt, welche die Grundgleichung (Fokker-Planck-Gleichung) für die Beschreibung von Coulomb-Kollisionen lösen. Die vollkinetische Simulation einer Entladung eines gepulsten Parallelschienenbeschleunigers erfordert die Kopplung aller drei Verfahren (d.h. PIC-DSMC-FP) bzw. die Berücksichtigung der assoziierten plasmaphysikalischen Phänomene in einem Gesamtverfahren.

Stand der Forschung

Die Kopplung von Partikelverfahren stellt eine bekannte Methode zur numerischen Untersuchung verdünnter Strömungen auf dem Gebiet der elektrischen Raumfahrtantriebe dar. Allerdings basiert der größte Teil der gekoppelten Partikelverfahren auf sogenannten PIC-MCC-Verfahren. Der Terminus MCC steht für Monte-Carlo-Collision und impliziert die Annahme einer bekannten, konstanten und homogenen Hintergrundverteilung von Neutralteilchen. Sämtliche Kollisionsprozesse basieren auf diesem Hintergrund, wodurch Energie und Impuls mit theoretisch unendlicher Geschwindigkeit abtransportiert werden [12, 13, 14, 15, 16, 17]. Die stetige Entwicklung verfügbarer Rechenleistung erlaubte es, Fluid/PIC-DSMC-Verfahren für die Simulation von elektrischen Antrieben und der erzeugten Plasmastrahlen anzuwenden [18, 19, 20]. Die Weiterentwicklung von MCC zu DSMC basiert in der direkten Simulation der Neutralteilchen mit veränderlichen Positionen und Geschwindigkeiten. In 2000 untersuchten Boyd et al. [21] die Freistrahlerentwicklung eines koaxialen iMPD-Triebwerkes hinsichtlich Rückströmung und Kontaminationseffekten. Entladung, Ablation und gasdynamische Beschleunigung in der Düse wurden mit Hilfe eines 1D-Modells berechnet und als Anfangsbedingung für das Partikelverfahren vorgegeben. Unter der Annahme von Quasineutralität wurde die Strömungsentwicklung mit Hilfe eines 2D Fluid/PIC-DSMC-Verfahrens simuliert. Weiterhin wurde ein volldissoziierter Zustand angenommen, d.h. molekulare Spezies wurden nicht berücksichtigt. Durch die Modellierung von Ladungsaustauschreaktionen konnte gezeigt werden, dass es beim iMPD-Triebwerk zu einer signifikant höheren Kontaminationsgefahr durch Rückströmung von langsamen Ionen kommen kann im Vergleich zu Hall-Ionen-Triebwerken. In 2001 untersuchten Gatsonis und Yin [22] ebenfalls mit einem 2D Fluid/PIC-DSMC-Verfahren einen Parallelschienenbeschleuni-

ger und dessen Freistrahler. Obwohl die plasmaphysikalische Modellierung genauer war als bei [21], konnten nicht alle Ergebnisse experimentell validiert werden. Das wurde nicht nur auf die Problematik der Messungen hochstationärer Größen zurückgeführt, sondern auch auf die fehlende Rotationssymmetrie sowie auf die Annahme einer Isothermie. In 2004 verwendeten Keidar et al. [23] ein ähnliches Verfahren zur Simulation eines koaxialen Mikro-iMPD-Triebwerkes. Aufgrund des Triebwerksaufbaus (Treibstoffblock und Elektroden liegen in einer Ebene) vollziehen sich alle plasmaphysikalischen Prozesse außerhalb des sonst üblichen Entladungsvolumens. Eine höhere physikalische Genauigkeit konnte durch die Entwicklung eines zeitgenauen B-Feldlösers erreicht werden. Die Ergebnisse der Simulation lieferten teilweise eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Allerdings weisen die Autoren darauf hin, dass ein Vergleich mit experimentellen Daten fraglich sein kann, zumal reale Entladungen keineswegs rotationssymmetrisch sein müssen.

Die in den referenzierten Arbeiten verwendeten Verfahren lieferten keine Information über die Abweichung der Elektronenverteilungsfunktion vom Gleichgewichtszustand. Eine solche Information kann nur eine vollkinetische 3D PIC-DSMC-FP-Simulation mit Lösung der instationären Maxwellgleichungen liefern. Hierfür ist aber die Simulation von Coulomb-Kollisionen erforderlich, die aufgrund des langreichweitigen Coulomb-Potentials prinzipiell Mehrkörperkollisionen darstellen. Allerdings lässt sich eine Mehrkörperkollision vereinfacht als eine Abfolge mehrerer Zweikörperkollisionen mit kleinen Streuwinkeln betrachten. Basierend auf dieser Überlegung haben Rosenbluth et al. [24] ausgehend von der Boltzmann-Gleichung die Fokker-Planck-Gleichung für beliebige Verteilungsfunktionen hergeleitet. Takizuka und Abé [25] haben ein Monte-Carlo-Verfahren zur Simulation von Binärkollisionen in Plasmen entwickelt. Jones et al. [26] publizierten eine Methode zur Berechnung der Krafteinwirkung auf ein Teilchen von den Gittergrößen in einem Particle-In-Cell-Code, wobei die Anwendbarkeit auf bestimmte Verteilungsfunktionen begrenzt war. Daraufhin verbesserten Manheimer et al. [27] das Verfahren von Jones et al. [26] hinsichtlich der Beliebbarkeit der Verteilungsfunktion bis auf ihre Isotropie. In all diesen Arbeiten wurden die Coulomb-Kollisionen einzeln behandelt.

D'Andrea [28] entwickelte einen Fokker-Planck-Löser, bei dem eine äquivalente stochastische Differentialgleichung gelöst wird. Allerdings verlangt das Verfahren zur Erhaltung der Selbstkonsistenz eine extrem hohe Teilchenzahl auf sehr kleinen räumlichen Skalen. Cranfill et al. [29] schlugen einen zeitimpliziten Particle-In-Cell-Löser vor, der auf der Gruppierung mehrerer Kollisionen mit kleinen Streuwinkeln zu einer Kollision mit großem Streuwinkel beruhte. In [30, 31] schlug Nanbu eine alternative Methode zur Behandlung der Gruppierungseigenschaft von Coulomb-Kollisionen vor, bei der es im Wesentlichen um die Bestimmung der Verteilungsfunktion $f(\chi_N)$ eines kumulativen Streuwinkels χ_N als Resultat vieler Kollisionen N mit kleinem Streuwinkel χ geht. Damit konnte er eine Wahrscheinlichkeitsdichte für die Winkelverteilung angeben, die verwendet werden kann, um den kumulativen Streuwinkel zu bestimmen. Schließlich haben Bobylev und Nanbu [32] nachgewiesen, dass durch diese Methode die Fokker-Planck-Gleichung für den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ approximativ gelöst wird.

Zielstellung und Gliederung

In dieser Arbeit sollen bestehende Modelle zur Simulation von Zwei- und Mehrkörperkollisionen in hochverdünnten Plasmaströmungen untersucht sowie bei Bedarf neue Modelle entwickelt werden. Ausgangspunkt ist das am Institut für Raumfahrtssysteme entwickelte 2D DSMC-Verfahren *LasVegas* [33]. Die darin implementierten Teilchenalgorithmen sind auf neutrale Spezies beschränkt und nicht auf Plasmen anwendbar. Die wesentlichen Datenstrukturen und Neutralteilchenalgorithmen sollen in ein neues 3D PIC-DSMC-FP-Verfahren transferiert und in geeigneter Weise für die neuen Modellierungsarbeiten modifiziert werden. Dieses neue Verfahren trägt den Namen *PicLas* und entsteht im Rahmen einer Kooperation mit drei weiteren Instituten: Das Institut für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart entwickelt einen instationären Feldlöser hoher Ordnung [34, 35]. Am Institut für Hochleistungsimpuls- und Mikrowellentechnik am Karlsruher Institut für Technologie wird ein Fokker-Planck-Löser entwickelt [28, 35]. Um in akzeptablen Zeiten ein Simulationsergebnis zu erhalten, arbeitet das Höchstleistungsrechenzentrum der Universität Stuttgart an der Parallelisierung und Optimierung des Verfahrens [36, 35].

In die Kategorie der Zweikörperkollisionen fallen Wechselwirkungen zwischen Neutralteilchen sowie zwischen einem Ladungsträger und einem Neutralteilchen. Trotz der allgemein gehaltenen Modellierungsansätze soll auch ein Bezug zu sehr typischen Anwendungen hergestellt werden. Drei typische Anwendungsbeispiele sind in Kap. 2 erläutert.

Die Modellierung der Teilchenkollisionen macht eine Diskussion der gaskinetischen Grundlagen erforderlich, siehe Kap. 3. Diese wird hauptsächlich anhand atomarer und molekularer Luftkomponenten durchgeführt. Die Kollisionsmodelle für Neutralteilchen werden in Kap. 4 primär am Beispiel Argon besprochen, welches in plasmatechnologischen Niederdruckanwendungen oft als Trägergas eingesetzt wird. Die molekularen Relaxations- und Reaktionsmodelle werden im Zusammenhang mit den Luftkomponenten dargestellt. Die neu entwickelte Modellierung für die Elektron-Schwerteilcheninteraktion auf Basis eines vollständig dissoziierten und teilionisierten Ablationsmaterials, welches häufig in Parallelschienenbeschleunigern zum Einsatz kommt, ist in Kap. 4.4 zu finden. Es wurden Interaktionsmodelle für elektronenstoßinduzierte Prozesse entwickelt, dazu gehören die Ionisation und Rekombination sowie die An- und Abregung. Bei dem Ablationsmaterial handelt es sich um Polytetrafluorethylen (TeflonTM), welches aus Kohlenstoff-Fluor-Polymeren besteht. Entsprechend soll eine Datenbasis aufgebaut werden, welche für diese zwei Elemente und deren Speziesgattungen Wirkungsquerschnitte enthält. Zu den Speziesgattungen gehören angeregte und nicht angeregte Atome und Ionen. Die Ionen können mehrfach ionisiert sein, wobei die Entstehung von negativen F^- -Ionen vernachlässigt werden soll. Verzögerungen bei der Entwicklung des Fokker-Planck-Lösers haben die Implementierung und Verifizierung eines alternativen, auf Monte-Carlo-Methoden basierenden Fokker-Planck-Lösers motiviert. Eine detaillierte Beschreibung ist Kap. 4.5 zu entnehmen.

Die numerischen Eigenschaften der Löser für die Zwei- und Mehrkörperkollisionen werden in Kap. 5 beleuchtet. Unter anderem wird mit einem zur Verfügung gestellten einfachen PIC-Löser [37] die Energieerhaltung eines Gleichgewichtsplasmas auf Basis einer gekoppelten PIC-FP-Simulation untersucht. In Kap. 6 werden Simulationsergebnisse präsentiert. Die Kernaspekte der Modellierungsarbeiten sowie die essenziellen Erkenntnisgewinne sind in Kap. 7 zusammengefasst.

2. Anwendungsbeispiele für Partikelverfahren

Der wesentliche Unterschied zwischen der makroskopischen und der mikroskopischen Modellierung basiert auf der Annahme der Energieverteilung einzelner oder aller Spezies. Im mikroskopischen Fall werden Verteilungen lediglich zu Beginn einer Simulation angenommen. Im makroskopischen Fall werden grundsätzlich bestimmte Verteilungsfunktionen zugrundegelegt, welche zu jedem Zeitpunkt und in jedem Punkt des Simulationsgebietes ihre Gültigkeit haben. Die Annahme definierter Verteilungen impliziert eine Limitierung des physikalisch bzw. numerisch sinnvollen Anwendungsbereiches makroskopischer Modellierungsansätze. Umgekehrt steigt bei mikroskopischen Modellierungen der Rechenaufwand mit der zu simulierenden Teilchenzahl. Bei deterministischen Verfahren wie im Fall der klassischen Molekulardynamik [38] herrscht eine quadratische Abhängigkeit von der Teilchenzahl vor. Dies begrenzt die Anwendbarkeit auf entsprechend kleinen räumlichen Skalen, da mit der heutigen Rechenleistung nur Systeme der Größenordnung 10^6 Teilchen realisiert werden können. Durch Verwendung statistischer Methoden (wie z. B. DSMC) lässt sich die Abhängigkeit weiter auf einen linearen Zusammenhang reduzieren. Dies erlaubt eine Abbildung technisch relevanter Systeme, d.h. eine Abbildung auf deutlich grösseren räumlichen und zeitlichen Skalen.

Im Folgenden werden einige typische Anwendungsbeispiele für derartige statistische Partikelverfahren dargestellt. Die gewählten Beispiele haben einen direkten Bezug zu den Modellierungstätigkeiten, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Ein Großteil der modellierten Elektron-Schwerteilchen-Interaktion basiert auf den Spezies Kohlenstoff und Fluor, welche bei einer elektrischen Entladung in einem gepulsten Plasmatriebwerk mit Polytetrafluorethylen als Treibstoff eine zentrale Rolle spielen. Ein weiterer Teil der Arbeit basiert auf der Spezies Argon, welche bei industriellen Vakuumprozessen sehr häufig als Prozessgas verwendet wird. Die Modellierung der molekularen Neutralteilcheninteraktionen ist besonders bei der Simulation von atmosphärischen Wiedereintrittsmanövern in großen Höhen von Bedeutung.

2.1. Parallelschienenbeschleuniger

Das Institut für Raumfahrtssysteme der Universität Stuttgart betreibt ein Kleinsatellitenprojekt namens *BW1 (Baden-Württemberg 1)*. Dabei handelt es sich um eine lunare Erkundungsmission mit Oberflächenkontakt. Bei *BW1* wird ein etwa $1m \times 1m \times 1m$ -Satellit mit Hilfe des Lichtbogentriebwerkes TALOS [39] durch den van-Allen-Gürtel beschleunigt. Für die lange Flugphase zum Mond sollen mehrere instationäre magnetoplasmadynamische (iMPD) Triebwerke eingesetzt wer-



Abbildung 2.1.: Entladung des iMPD-Triebwerkes ADD SIMPLEX [35].

den. Abbildung 2.1 zeigt eine Entladung eines solchen Triebwerkes. Bei diesem Triebwerk handelt es sich um einen sogenannten Parallelschienenbeschleuniger, dessen Entladungsvolumen sich zwischen zwei Elektroden befindet. Die Elektroden müssen keinesfalls planparallel ausgerichtet oder geometrisch identisch sein, zumal die Variation des Elektrodenöffnungswinkels (Divergenzwinkel) sowie eine Zuspitzung der Elektroden deutliche Unterschiede im Entladungsverhalten sowie den erreichten Austrittsgeschwindigkeiten gezeigt haben [40]. In den Kondensatoren ist eine Energie von etwa 70 J bei etwa 1300 V gespeichert. Zwischen den Elektroden befindet sich der Festtreibstoff, welcher durch einen Federmechanismus [11] in das Entladungsvolumen geschoben wird. Der Treibstoff der Wahl ist Polytetrafluorethylen (PTFE). Die anliegende Spannung reicht nicht aus, um eine Zündung zu initiieren, so dass zusätzlich in der Kathode ein Zündmechanismus eingebaut ist, welcher in definierten Zeitabständen einen Puls gibt. Die dabei entstehende Primärentladung zwischen den Elektroden der Zündvorrichtung sowie die Mikroentladungen zwischen der Zündvorrichtung und der Kathode setzen Ladungsträger frei, die zu einer Oberflächenablation und -ionisation des Treibstoffes führen. Die freigesetzten Elektronen werden entlang der Oberfläche zur Anode hin beschleunigt, die Ionen entsprechend zur Kathode. Der entstehende Kriechstrom an der PTFE-Oberfläche führt zu weiteren Ablations- und Ionisationsvorgängen. Die sich der Kathode nähernden Ionen erhöhen das Potentialgefälle in Kathodennähe, so dass es zu statistisch verteilten Brennfleckenansätzen auf der kalten Kathode kommt. Dadurch wird das Oberflächenmaterial punktuell aufgeschmolzen, wodurch wiederum ausreichend Ladungsträger für die Aufrechterhaltung der Entladung erzeugt werden [41]. Die von der Kathode emittierten Elektronen kriechen entlang der PTFE-Oberfläche in Richtung Anode und lösen die chemischen Bindungen des Treibstoffes in erhöhtem Maße auf. Der entstehende Stromfluss induziert ein Magnetfeld, welches mit dem verursachenden Strom wechselwirkt. Die induzierten Lorentzkräfte wirken auf die Elektronen wesentlich stärker als auf die Ionen. Die Elektronen werden entlang der Längsachse des Triebwerkes hinausbeschleunigt. Dies hat starke elektrostatische Kräfte zur Folge - die Ionen werden daraufhin ebenfalls beschleunigt.

Der Entladungs- und Beschleunigungsprozess ist alleine aus der Perspektive der Elektrodynamik nicht zu verstehen, es müssen auch gaskinetische Effekte betrachtet werden. Kollisionen der Ionen mit den im Entladungsvolumen verbliebenen Neutralteilchen reduzieren die Effizienz der oben beschriebenen Beschleunigungsmechanismen, so dass für die Abschätzung der Verluste und die Nut-

zung dieser Ergebnisse für die Triebwerksoptimierung eine möglichst realistische Simulation der Neutralteilchenspezies entscheidend ist. Diese können nicht als homogen und zeitlich konstant verteilt im Sinne einer Hintergrundspezies angenommen werden.

Obwohl in der Entwicklung und Anwendung solcher Triebwerke, besonders auf russischer Seite, Erfahrungen von über 40 Jahren existieren, sind die detaillierten plasmaphysikalischen Vorgänge, die während eines Entladungspulses stattfinden, nur unzureichend bekannt. Das liegt u. A. an der hochgradigen Instationarität des Betriebes und der damit einhergehenden Probleme beim experimentellen Vermessen [11] sowie beim Modellieren. Beim iMPD-Triebwerk entlädt sich innerhalb von etwa $15 \mu s$ eine Kondensatorenergie in Höhe von ca. $70 J$, wobei ein Massenbit in der Größenordnung von ca. $50 \mu g$ ablatiert wird. Diese typischen Parameter lassen sich aus Geometrie- und Messdaten ableiten. Eine Abschätzung der Größenordnung zeigt, daß eine Einkopplung von nur 20% der Kondensatorenergie in das Plasma einer mittleren Leistung je Puls von ca. $1 MW$ entspricht. Solche Leistungsumsätze in Verbindung mit derartig niedrigen Massenbits lassen starke Abweichungen vom thermochemischen Gleichgewicht erwarten, wodurch die makroskopische bzw. kontinuumsbasierte Modellierung solcher Triebwerke grundsätzlich infrage gestellt wird, zumal die Simulationsergebnisse zu Optimierungszwecken herangezogen werden sollen.

2.2. Atmosphärischer Eintritt in großen Höhen

Beim Eintritt eines Körpers in eine planetare Atmosphäre wird dessen kinetische Energie durch Reibungseffekte mit der Atmosphäre abgebaut und in thermische Energie umgewandelt. Dabei bildet sich vor dem Körper ein Stoß aus, dessen Ausdehnung von der Größenordnung der mittleren freien Weglänge ist. Auf diesen Skalen wird zu Beginn die Translationstemperatur der Atmosphärenspezies auf ein Vielfaches der lokalen Umgebungstemperatur erhöht. Durch Relaxationsprozesse wird die Energie zunächst in Rotation, später in Vibration, Anregung und chemische Reaktionen wie Dissoziation und Ionisation umgewandelt. Ein Teil der Energie kann durch Strahlung abgegeben werden, wobei dieser Effekt erst bei Eintrittsgeschwindigkeiten ab $10 km/s$ an Bedeutung gewinnt.

Die wesentlichen Energieumwandlungsprozesse im Nachstoßgebiet eines Eintrittskörpers wie z.B. bei dem US-amerikanischen Space Shuttle [42] können durch die Modellierung der molekularen Relaxationsprozesse sowie der Neutralteilchenreaktionen verstanden werden. Die zunehmende Entwicklung der Raumfahrttechnologie hat eine steigende Anzahl an hochenthalpen atmosphärischen Eintrittsmanövern zur Folge, bei denen es vermehrt zu Ionisationsprozessen im Nachstoßgebiet kommt. Als Beispiel sei hier die Stardustmission genannt [43].

Es muss nach der Höhe des zu untersuchenden Trajektorienpunktes unterschieden werden. In großen Höhen wird weniger kinetische Energie in thermische Energie umgewandelt, allerdings wird diese Energie auf weniger Teilchen verteilt. Diese sind im Mittel deutlich schneller, was endotherme Prozesse wie Dissoziation und Ionisation begünstigt. In niedrigeren Höhen wird deutlich mehr kinetische Energie abgebaut, so dass der Eintrittskörper thermisch maximal beansprucht wird. Die Energie wird nun auf mehr Teilchen verteilt: Die gestiegene Kollisionsfrequenz führt zu einem intensivierten Energieaustausch zwischen dem translatorischen und den rotatorischen sowie vibratorischen Frei-

heitsgraden. In dieser Höhe ist mit einem deutlich niedrigeren Ionisationsgrad zu rechnen.

Hinsichtlich der verwendeten Partikelverfahren haben sich zwei Varianten durchgesetzt: Reine DSMC-Löser werden verwendet, wenn Ionisationsprozesse vernachlässigt werden können. Bei nicht zu großen Ionisationsgraden wird der DSMC-Löser um einen einfachen Feldlöser erweitert. Dieser berechnet auf Basis der ambipolaren Diffusion elektrische Feldeffekte und soll im folgenden Abschnitt kurz beschrieben werden.

2.2.1. Berechnung des elektrischen Feldes in DSMC

Experimentelle Untersuchungen [44] zeigen, dass bei großen Höhen ($> 70km$) der Effekt der ambipolaren Diffusion nicht vernachlässigt werden sollte. Ambipolare Diffusion liegt vor, wenn Elektronen aufgrund ihrer höheren Beweglichkeit bei Strömungen mit einem Massendichtegradienten schneller diffundieren im Vergleich zu Ionen. Das resultierende E-Feld bremst die Elektronendiffusion und verstärkt die Ionendiffusion. Tonks und Langmuir [45] haben 1929 einen sehr einfachen Ausdruck für die Berechnung des elektrischen Feldes auf Basis der ambipolaren Diffusion angegeben, welcher im Wesentlichen die Elektronentemperatur und -dichte enthält. Prinzipiell ist die allgemeine Gültigkeit dieses als Langmuir-Tonks-Gleichung bezeichneten Zusammenhangs bei stark verdünnten Plasmaströmungen anzuzweifeln, denn er basiert auf der Gültigkeit der Kontinuumsannahme. Die Gleichung wird hergeleitet aus der Impulserhaltungsgleichung für Elektronen und Ionen. Dabei werden Vereinfachungen getroffen wie z. B. niedriger Ionisationsgrad und ein verschwindender Nettostromfluss. Trotz dieser Vereinfachungen bietet die Langmuir-Tonks-Gleichung einen komfortablen Einstieg in die Berechnung elektrischer Felder in der DSMC-basierten Simulation atmosphärischer Eintrittsmanöver.

2.2.2. Bewegung der Elektronen in DSMC

Die Berücksichtigung von Elektronen in DSMC-Verfahren führt aufgrund der massenbedingt sehr unterschiedlichen Teilchengeschwindigkeiten zu sehr unterschiedlichen Zeitskalen. Diese sind mit den räumlichen Skalen über die Kollisionsfrequenz gekoppelt, so dass bei großen Teilchengeschwindigkeiten die lokale Kollisionsfrequenz in aller Regel steigt und die lokale mittlere freie Weglänge sinkt. Hieraus folgt nicht nur, dass die Zeitschrittweite zum Zweck der Kollisionsauflösung verringert werden muss, sondern auch bei der (kollisionsfreien) Konvektion, da die Zellen nun ebenfalls feiner auflösen sind und ein Teilchen in einem Zeitschritt maximal eine Zelle durchqueren sollte.

Eine grundsätzliche Lösung basiert in der Einführung eines zweiten Gitters parallel zum ersten Gitter, wodurch Speicher- und Rechenzeitbedarf sowie der Programmieraufwand deutlich steigen. Eine weitere Lösung besteht in der Einführung mehrerer Zeitschrittweiten, wobei zwei Varianten unterschieden werden: Die Zeitschrittweiten können einerseits speziesbezogen sein. Die Elektronen kollidieren und bewegen sich in jedem Zeitschritt, die Schwerteilchen nur bei einem Vielfachen dieses Zeitschrittes. Die andere Variante unterscheidet zwischen lokalen und globalen Zeitschritten. Dabei wird versucht, dass nicht alle Zellen mit dem gleichen (globalen) Zeitschritt behandelt werden.

Soll im DSMC-Verfahren unter Berücksichtigung von Elektronen nur *ein* Gitter sowie *eine* Zeitschrittweite verwendet werden, so lassen sich drei Lösungsansätze identifizieren:

- Bird [46] hat in einer frühen Arbeit die Bewegung der Elektronen an die des jeweiligen Mutterions gekoppelt, die Elektronen sind somit fest mit den Mutterionen verbunden. Diese Methode hat den Vorteil, dass die Zeitschrittweite durch die Bewegung der Schwerteilchen bestimmt wird. Nachteilig ist jedoch, dass stets perfekte Ladungsneutralität unabhängig vom lokalen Plasmazustand erzwungen wird.
- Einige Autoren nutzen den Massenunterschied zwischen Elektronen und Schwerteilchen aus und erhöhen künstlich die Elektronenmasse, siehe z.B. [19]. Hierbei macht man sich den bei Elektron-Schwerteilchen-Kollisionen naturgemäss sehr niedrigen Energie- und Impulstransfer zunutze. Dieser ist besser, je ähnlicher die Teilchenmassen sind. Im Fall von Argon liegen fünf Grössenordnungen zwischen den jeweiligen Teilchenmassen, wobei dann dieser Wert auf zwei Grössenordnungen verringert werden kann. Diese Modifikation wirkt sich im Verfahren lediglich auf die Elektronenbewegung aus, nicht auf die Kollisionen. Dennoch wird dadurch ein Fehler beim Ladungstransport induziert, welcher abhängig vom Problem auch unterschiedlich stark ausfallen kann. Eine systematische Untersuchung des induzierten Fehlers sollte im Fokus zukünftiger Forschungsaktivitäten liegen.
- Boyd [47] hat die Bewegung der Elektronen an die mittlere lokale Ionengeschwindigkeit $\langle \vec{v}_i \rangle$ gekoppelt. Jedes Elektron wird nun mit $\langle \vec{v}_i \rangle$ bewegt und daraufhin neu lokalisiert, kollidiert aber mit seiner individuellen Geschwindigkeit \vec{v}_e . Mit diesem Ansatz lassen sich Ionisationsgrade von bis zu 25% simulieren.

2.3. Industrielle Niederdruck- und Vakuumprozesse

Die Plasmazustände der hier diskutierten Plasmaprozesse sind sehr heterogen. So basiert z. B. die Methode der physikalischen Gasphasenabscheidung auf dem ballistischen Transport des auf einem Substrat abzuschneidenden Materials und kann mit Neutralteilchenmodellen numerisch abgebildet werden. Sobald aber Ladungsträger in einer Konzentration am Prozess beteiligt sind, aufgrund derer einfache Neutralteilchenmodelle nicht mehr ausreichend sind, müssen die elektrostatischen Wechselwirkungen Berücksichtigung finden.

Nach [47] erlaubt der Ansatz über die ambipolare Diffusion zur Berechnung des elektrischen Feldes in DSMC einen Ionisationsgrad von bis zu 25%. Einige plasmatechnologische Niederdruckprozesse wie die Kathodenzerstäubung haben lokal wesentlich höhere Ionisationsgrade, so dass in solchen Fällen meist auf einen Poisson-Löser zurückgegriffen wird. Dabei wird die elektrostatische Maxwellgleichung (Gauss-Gesetz) gelöst. Derartige (stationäre) Löser sind verhältnismässig leicht zu entwickeln und werden verstärkt auch im Bereich der elektrischen Raumfahrtantriebe eingesetzt, wie beispielsweise zur Simulation von Ionenantrieben [48], Hall-Ionenantrieben [19] und Helicon-Triebwerken [49].

Industrielle Beschichtungsprozesse und Oberflächenbehandlungsverfahren bei sehr niedrigen Drücken

haben ein sehr weites Anwendungsspektrum, dazu gehören z. B. biomedizinische Implantate, Gläser, optoelektronische und mechanische Bauteile [50, 51]. Weit verbreitete Schutzschichten wie solche aus TiN, TiCN und TiAlN erhöhen die Oberflächenhärte und verringern gleichzeitig den Reibungsbeiwert. Diese Eigenschaften sind besonders vorteilhaft für die Trockenbearbeitung harter und spröder Materialien. Als Beispiel sei hier die Oberflächenstrukturierung kristalliner Si-basierter Solarzellen genannt, wodurch eine Erhöhung des Wirkungsgrades dieser Zellen erreicht wird [52]. Schutzschichten aus Diamant werden ebenfalls intensiv untersucht [53]. Darüber hinaus ist z. B. die Abscheidung funktionaler Dünnschichten in der Halbleiterindustrie und in der Mikroelektronik von großer Bedeutung. Hier wird die Nachfrage der Computerindustrie durch die Nachfrage der schnell wachsenden Photovoltaikindustrie ergänzt. In der Photovoltaikindustrie führt die Dünnschichttechnologie zu massiven Kostensenkungen bei der Solarzellenherstellung. Weitere Information zu Be- und Entschichtungstechnologien können in [54] nachgeschlagen werden. In den folgenden Abschnitten werden einige Vakuumprozesse im Zusammenhang mit DSMC-Simulationen diskutiert.

2.3.1. Kathodenzerstäubung

Bei der Kathodenzerstäubung (Sputtern) wird ein Zielmaterial mit Ionen beschossen, wobei aus dem Zielmaterial durch mechanisches Herausschlagen Atome extrahiert werden. Das extrahierte gasförmige Material kann zum Beschichten verwendet werden, wenn ein geeignetes Substrat dieser Umgebung ausgesetzt wird. Abhängig von der Energie der einschlagenden Ionen können auch Ionen in das Material implantiert werden, oder sie können an der Oberfläche des Zielmaterials kondensieren. Weitere mögliche Reaktionen sind z. B. die Sekundärelektronenemission und das Herausschlagen von weiteren Ionen und auch ganzen Klumpen. Von zentraler Bedeutung sind die beschleunigten Ionen und die extrahierten Atome. Sofern bekannte Zerstäubungsraten zur Verfügung stehen, können solche Modelle relativ unproblematisch in existierende DSMC-Verfahren implementiert werden, zumal DSMC-Verfahren meist über diverse Oberflächenmodelle verfügen und die dafür notwendige Datenstruktur vorhanden ist. Darüberhinaus sind im Fall von Abscheidungsprozessen die Tankdrücke sehr niedrig, da die extrahierten Atome möglichst ungestört das Substrat erreichen müssen. Dies prädestiniert DSMC-Verfahren für die numerische Untersuchung solcher Prozesse. Frühere Arbeiten auf dem Gebiet der Kathodenzerstäubung haben gezeigt, dass die üblicherweise verwendeten Interaktionspotentiale verbessert werden müssen [55]. Das variable Starrkugelmodell z. B. berücksichtigt keine Anisotropien in der Teilchenstreuung, obwohl das Streuverhalten bei der Kathodenzerstäubung anisotrop und sehr bedeutsam für den Abscheidungsprozess ist. Andere Untersuchungen haben gezeigt, dass das Sputtern nicht mit einfachen Monte-Carlo-Methoden sinnvoll zu behandeln ist, da derartige Ansätze auf einer homogenen Teilchenverteilung im Raum beruhen [56].

2.3.2. Plasma- und Reaktives Ionenätzen

Ätzprozesse werden z. B. beim Entfernen von Oberflächenverunreinigungen in Reaktionskammern [52] und bei der Strukturierung von Wafern [57] eingesetzt, wobei flüchtige Produkte entstehen. Nassätzprozesse sind aus ökonomischer, ökologischer und betrieblicher Sicht problematisch. Aus Kosten-

gründen wurden deshalb Trockenätzprozesse entwickelt. In dem Segment sind Plasmaätzen und Reaktives Ionenätzen am weitesten verbreitet. Bei beiden Prozessen wird in der Reaktionskammer ein Plasma erzeugt. Der eigentliche Unterschied wird durch das Potential des Substrates erzeugt: Beim Reaktiven Ionenätzen ist das Substrat negativ und die Ionen werden dahin beschleunigt. Aufgrund des elektrischen Feldes verläuft der Ätzprozess anisotrop, was an den Trajektorien der einschlagenden Ionen liegt. Auf molekularer Ebene wirkt das Ätzen unabhängig von der Kristallorientierung, weshalb der Prozess zur Oberflächenstrukturierung polykristalliner Wafer eingesetzt wird. Eine geerdete Anode führt zu einem schwachen Plasmapotential, wodurch die Oberflächeninteraktion rein chemisch wird. Im Gegensatz zum Reaktiven Ionenätzen gibt es dabei keine Vorzugsrichtung.

Ätzprozesse wurden numerisch mit Hilfe von DSMC-Methoden von Economou et al. [58, 59] untersucht. Aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen wurden Ätzprozessen vorher berechnet, meist auf Basis von Kontinuumsverfahren. Nanbu et al. [60] berechneten die Ätzraten mittels gekoppelten PIC/MC-Methoden. In [61] konnten Ikegawa et al. konkrete Aussagen hinsichtlich der Konfiguration der Reaktionskammer treffen. Dadurch konnte gezeigt werden, welche Bedeutung DSMC-Simulationen für ingenieurtechnische Fragestellungen haben können.

2.3.3. Physikalische Gasphasenabscheidung

Die physikalische Gasphasenabscheidung beruht auf der Bildung eines gasförmigen Beschichtungsmaterials, welches in den meisten Fällen ballistisch zum Substrat transportiert wird, auf dem es anschließend kondensiert [62]. Die Art des Transportes verlangt eine Hochvakuumumgebung, limitiert allerdings die Anwendbarkeit auf einfache Substratgeometrien. Die Erzeugung der Gasphase basiert entweder auf Verdampfung (thermisch, Lichtbogen, Laser, Elektronen- oder Molekularstrahl) oder auf Kathodenzerstäubung. Der Prozess der Dampferzeugung sollte als eigenständiger Prozess unabhängig vom Transport- und Kondensationsprozess betrachtet werden, da besonders im Fall von Kathodenzerstäubung entsprechende Raten, Energien und Winkelverteilungen als Einströmbedingungen verwendet werden können [55, 50].

DSMC-Simulationen eines Elektronenstrahl-Prozesses wurden von Balakrishnan et al. [63] durchgeführt. Dabei wurde erfolgreich die Abhängigkeit der Elektronenanregung der gesputterten Partikel als Funktion der als Einströmbedingung definierten Energie- und Winkelverteilungen untersucht.

Verbesserte Varianten der physikalischen Gasphasenabscheidung basieren auf einem plasmaunterstützten Transport durch eine Vorionisation der Partikel in Kombination mit einem extern angelegten elektrischen Feld, wodurch das Material zum Substrat beschleunigt wird [62]. Dadurch wird die Substrattemperatur verringert und die Ionendichte an der Substratoberfläche erhöht, was zu weitaus höheren Abscheidungsraten führt [64]. Allerdings können niedrige Substrattemperaturen bei der physikalischen Gasphasenabscheidung zur Abscheidung amorpher Phasen führen, was nachteilig ist für die Abnutzung der Beschichtung. Durch die Anwendung gepulster Laser kann dies umgangen und kristallines Al_2O_3 erzeugt werden.

3. Gaskinetische Grundlagen

Die gaskinetische Boltzmann-Gleichung ist die Grundgleichung, welche die Änderung eines Strömungszustands fundamental beschreibt. Der Zustand der Spezies α kann dargestellt werden mit Hilfe der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion $f_\alpha(\vec{x}, \vec{v}_\alpha, t)$, die im von Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten $[\vec{x}, \vec{v}]$ aufgespannten Phasenraum definiert und eine Funktion der Zeit t ist. Die allgemeine Formulierung der Boltzmann-Gleichung für verdünnte Gase lautet [2]

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v}_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}_\alpha}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}_\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} [f(\vec{v}'_\alpha) f(\vec{v}'_\beta) - f(\vec{v}_\alpha) f(\vec{v}_\beta)] g \sigma_D d\Omega d\vec{v}. \quad (3.1)$$

Hierbei sind f_β die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion einer Hintergrundspezies β , $g = |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|$ die Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner, $\sigma_D(E, \chi, \varepsilon)$ der differentielle Kollisionsquerschnitt als Funktion von der Stoßenergie E , dem polaren Ablenkwinkel χ sowie den azimuthalen Ablenkwinkel ε und $d\Omega$ das differentielle Raumwinkelement, über welches integriert werden muss. Die mit (') markierten Geschwindigkeiten beschreiben den Zustand nach dem Stoß. Der zweite Term der linken Seite von Gl. (3.1) beschreibt die Änderung von f_α basierend auf räumlichen Inhomogenitäten. Der dritte Term beschreibt die Wirkung äußerer Kräfte \vec{F}_α auf die Teilchen mit der Teilchenmasse m_α . Dazu gehören bei Ladungsträgern elektromagnetische Kräfte $\vec{F}_\alpha = q_\alpha(\vec{E} + \vec{v}_\alpha \times \vec{B})$, wobei q_α , \vec{E} und \vec{B} die elektrische Ladung des Teilchens, das elektrische Feld und magnetische Feld an der Teilchenposition darstellen. Der Integralausdruck auf der rechten Seite von Gl. (3.1) beschreibt die Teilchenkollisionen.

Die Simulation von Teilcheninteraktionen, für die DSMC ursprünglich nicht konzipiert und entwickelt wurde, erfordert eine dezidierte Untersuchung der verfügbaren Kollisions- und Reaktionsmodelle. Dabei ist es unvermeidlich, den Temperaturbegriff als fundamentale Gleichgewichtsgröße zu verwenden, auch wenn dieser in den Modellierungen der Querschnitte in späteren Kapiteln weitestgehend vermieden wird. Insbesondere der Gleichgewichtscharakter der Temperatur soll die Diskussion der gaskinetischen Grundlagen sowie die Identifizierung geeigneter Erweiterungen und Modifikationen motivieren und begründen.

3.1. Zustandssummen und Freiheitsgrade

Um die mit einer Energie assoziierten Freiheitsgrade zu bestimmen, müssen die Zustandssummen dieser Freiheitsgrade diskutiert werden. Als Zustandssumme bezeichnet man die Summe aller mög-

lichen quantisierten Zustände

$$Q = \sum_{i=0}^{\infty} g_i \exp(-\beta E_i) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (3.2)$$

wobei g_i und E_i die Entartung und das Energieniveau des i -ten Zustandes repräsentieren. Demnach beschreibt die Maxwell-Boltzmann-Statistik

$$\frac{N_i}{N} = \frac{g_i \exp(-\beta E_i)}{Q} \quad (3.3)$$

die Wahrscheinlichkeit, dass sich N_i von N Teilchen auf dem i -ten Energieniveau befinden. Definiert man die mittlere Energie $\langle E \rangle$ gemäß

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} E_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_{i=0}^{\infty} \exp(-\beta E_i)}, \quad (3.4)$$

so erhält man unter Verwendung von Gl. (3.2) den Zusammenhang

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial \beta} = -\frac{\partial(\ln Q)}{\partial \beta}. \quad (3.5)$$

Die energetischen Freiheitsgrade sind unterschiedlich stark quantisiert. Nach [65] werden die translationalen Energieniveaus eines Teilchens unter Verwendung der Quantenzahlen $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$ beschrieben:

$$E_{T_{n_x, n_y, n_z}} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right). \quad (3.6)$$

Die Systemabmessungen sind gegeben durch a, b und c , h ist das Planck'sche Wirkungsquantum. Außer bei Temperaturen in der Nähe des absoluten Nullpunkts liegen die Abstände der Energieniveaus extrem eng beieinander, so dass die Summation in Gl. (3.2) durch ein Integral ersetzt werden kann. Unter Verwendung des Systemvolumens $V = abc$ erhält man als Translationszustandssumme

$$Q_T = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2}. \quad (3.7)$$

Die rotatorischen Energieniveaus eines diatomaren Teilchens AB sind gegeben durch

$$E_{R_l} = l(l+1)k_B\theta_R \quad \text{mit} \quad l = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.8)$$

wobei l und θ_R die Rotationsquantenzahl sowie die charakteristische Rotationstemperatur

$$\theta_R = \frac{h^2}{8\pi^2 I k_B} \quad (3.9)$$

darstellen. Die Größe I beschreibt das Massenträgheitsmoment des Moleküls. Die Entartung der rotatorischen Energieniveaus beträgt $g_l = 2l + 1$. Die für die molekularen Luftkomponenten relevanten charakteristischen Rotationstemperaturen sind in Tab. 3.1 zusammengefasst [33].

Die typischen Temperaturbereiche bei atmosphärischen Eintrittssimulationen mit DSMC in großen Höhen liegen deutlich oberhalb der θ_R , so dass die rotatorischen Energieniveaus nahe beieinander

liegen. Entsprechend kann die Summation in Gl. (3.2) auch für diesen Fall durch ein Integral ersetzt werden, wodurch sich folgende Rotationszustandssumme ergibt:

$$Q_R = \frac{1}{1 + \delta_{A-B}} \frac{T_R}{\theta_R}. \quad (3.10)$$

Das Kronecker-Symbol δ_{A-B} berücksichtigt die Symmetrie homogener Moleküle, d.h. es wird geprüft, ob die Bedingung $A = B$ erfüllt ist.

Die vibratorischen Energieniveaus diatomarer Teilchen sind gegeben durch die allgemeine Formulierung

$$E_{V_i} = h\nu \sum_{k=1}^{k_{max}} \alpha_k (i + \gamma_0)^k \quad \text{mit} \quad i = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (3.11)$$

Die Wahl der Modellparameter k_{max} und α_k hängt vom verwendeten intramolekularen Potentialmodell ab. Darüber hinaus sind ν , i , und γ_0 die Vibrationsfrequenz, die Vibrationsquantenzahl sowie der Nullpunktparameter mit $\gamma_0 = 1/2$.

Die allgemeine Schreibweise von Gl. (3.11) erlaubt einen Vergleich unterschiedlicher Vibrationsmodelle, zumal in DSMC-Simulationen häufig die Nullpunktenergie der Vibration vernachlässigt wird. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Modell des einfachen harmonischen Oszillators (Simple Harmonic Oscillator - SHO) zugrunde gelegt. Mit $k_{max} = 1$ und $\alpha_1 = 1$ vereinfacht sich Gl. (3.11) unter Verwendung von $\theta_V = h\nu/k_B$, siehe Tab. 3.1, zu

$$E_{V_i} = (i + \gamma_0)k_B\theta_V \quad \text{mit} \quad i = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (3.12)$$

Das SHO-Modell führt zu konstanten Abständen zwischen den einzelnen Energieniveaus. Obwohl dieser Umstand nur bei den schwach besetzten höheren Niveaus zu deutlichen Abweichungen vom realen Verhalten führt, wird in dieser Arbeit auch das TSHO-Modell (Truncated SHO) verwendet, welches die Vibrationsquantenzahlen beschränkt. Die obere Grenze

$$n = \left\lfloor \frac{\theta_D}{\theta_V} \right\rfloor + 1 \quad (3.13)$$

wird mit Hilfe der charakteristischen Dissoziationsenergie $\theta_D = E_D/k_B$ definiert. Da die einzelnen Vibrationsniveaus nicht sehr dicht verteilt sind, kann in Gl. (3.2) kein Übergang zur kontinuierlichen Betrachtung durchgeführt werden. Die Vibrationszustandssumme beträgt damit

$$Q_V = \exp(-\gamma_0\theta_V/T_V) \frac{1 - \exp(-\bar{\theta}_D/T_V)}{1 - \exp(-\theta_V/T_V)}. \quad (3.14)$$

Spezies	θ_R / K	θ_V / K
N_2	2.879	3395
O_2	2.069	2239
NO	2.440	2817

Tabelle 3.1.: Charakteristische Rotations- und Vibrationstemperaturen für Luft.

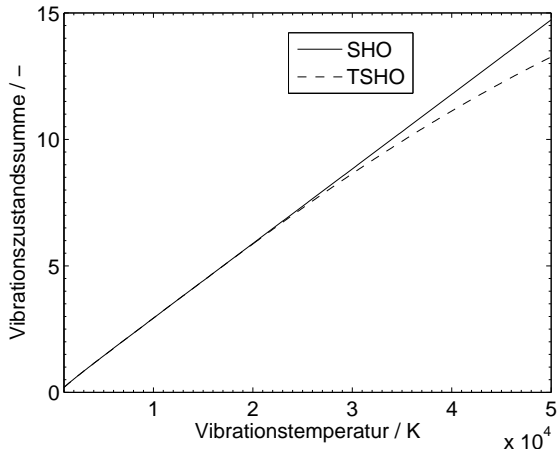


Abbildung 3.1.: Vergleich der SHO-/TSHO-Vibrationszustandssumme am Beispiel Stickstoff unter Berücksichtigung der Nullpunktenergie.

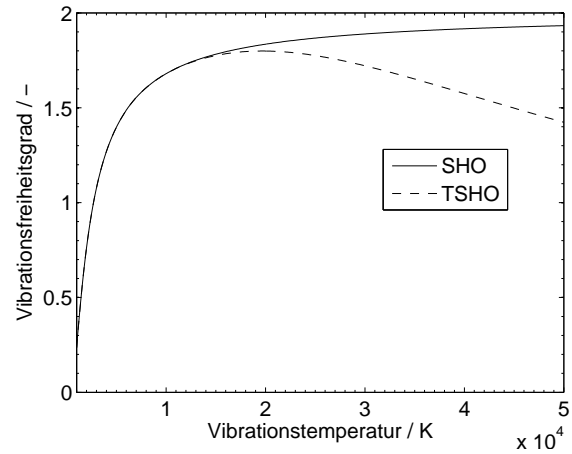


Abbildung 3.2.: Vergleich der SHO-/TSHO-Vibrationsfreiheitsgrade am Beispiel Stickstoff mit $E_D = 945.33 \text{ kJ/mol}$.

Hierbei ist $\bar{\theta}_D = n\theta_V \geq \theta_D$ die modifizierte Dissoziationsenergie. Die Vibrationszustandssumme für das SHO- sowie für das TSHO-Modell ist beispielhaft für N_2 in Abb. 3.1 dargestellt.

Der Gleichverteilungssatz der Quantenmechanik liefert einen Zusammenhang zwischen einer Energie E und den damit assoziierten Freiheitsgraden ξ :

$$\langle E \rangle = \frac{\xi}{2} k_B T. \quad (3.15)$$

Unter Verwendung der Zustandssummen für Translation (3.7), Rotation (3.10) und Vibration (3.14) sowie Gl. (3.5) erhält man für die einzelnen Freiheitsgrade $\xi_T = 3$ und $\xi_R = 2$. Aufgrund der niedrigen charakteristischen Rotationstemperatur θ_R ist die Rotation in aller Regel voll angeregt. Für die Vibration erhält man

$$\xi_V = \frac{2\theta_V/T_V}{\exp(\theta_V/T_V) - 1} - \frac{2\bar{\theta}_D/T_V}{\exp(\bar{\theta}_D/T_V) - 1}. \quad (3.16)$$

Ein Vergleich der Vibrationsfreiheitsgrade beim SHO- sowie TSHO-Modell am Beispiel Stickstoff ist in Abb. 3.2 dargestellt. Gerade die Unterschiede in der Vibrationsanregung bei hohen Temperaturen motiviert die Verwendung des TSHO-Modells.

3.2. Temperaturberechnung

Bei DSMC-Verfahren sind jedem Simulationsteilchen drei translatorische Geschwindigkeitskomponenten sowie die inneren Energien zugeordnet, was eine Mehrtemperaturmodellierung impliziert. Die makroskopischen Temperaturen werden in jeder Zelle durch zeitliche Mittelung über die Teilcheneigenschaften ermittelt.

Die Translationstemperatur T_T und ihre Komponenten berechnen sich für jede Spezies aus dem Mittelwert der Teilchengeschwindigkeit $\langle \vec{v} \rangle = (\langle v_x \rangle, \langle v_y \rangle, \langle v_z \rangle)$ und dem Mittelwert des Geschwindig-

keitsquadrates $\langle \bar{v}^2 \rangle$, gebildet über die Beziehungen

$$T_{T_x} = \frac{m}{k_B} (\langle v_x^2 \rangle - \langle v_x \rangle^2), \quad (3.17)$$

$$T_{T_y} = \frac{m}{k_B} (\langle v_y^2 \rangle - \langle v_y \rangle^2), \quad (3.18)$$

$$T_{T_z} = \frac{m}{k_B} (\langle v_z^2 \rangle - \langle v_z \rangle^2), \quad (3.19)$$

$$T_T = \frac{m}{3k_B} (\langle \bar{v}^2 \rangle - \langle \bar{v} \rangle^2). \quad (3.20)$$

Die speziesbezogene Rotationstemperatur T_R ergibt sich aus Gl. (3.15) und $\xi_R = 2$ durch arithmetische Mittelwertbildung aller rotatorischen Energien der Teilchen:

$$T_R = \frac{\langle E_R \rangle}{k_B}. \quad (3.21)$$

Die Vibrationstemperatur T_V ergibt sich ebenfalls jeweils für jede Spezies durch arithmetische Mittelwertbildung aller vibratorischen Energien der Teilchen dieser Spezies sowie unter Verwendung von Gln. (3.15) und (3.16). Für das SHO-Modell erhält man die Vibrationstemperatur aus der Beziehung

$$T_V = \frac{\theta_V}{\ln [1 + 1/(\langle E_V \rangle / k_B \theta_V - \gamma_0)]}. \quad (3.22)$$

Für das TSHO-Modell kann kein analytischer Ausdruck formuliert werden, so dass die Berechnung numerisch erfolgen muss.

3.3. Verteilungsfunktionen

In diesem Abschnitt werden die Verteilungsfunktionen diskutiert, die im Rahmen dieser Arbeit sehr häufig verwendet werden.

3.3.1. Translation

Die Lösung der Boltzmann-Gleichung im Fall des thermodynamischen Gleichgewichts ist gegeben durch die Maxwellverteilung

$$f_M(\vec{c}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m\vec{c}^2}{2k_B T} \right), \quad (3.23)$$

wobei \vec{c} die molekulare bzw. thermische Geschwindigkeit darstellt. Gleichung (3.23) erhält man direkt aus der Boltzmann-Gleichung für $Kn \rightarrow 0$ und ohne Definition der intermolekularen Kräfte. Für die Verteilung der einzelnen Geschwindigkeitskoordinaten c_i gilt

$$f_M(c_i) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{mc_i^2}{2k_B T} \right). \quad (3.24)$$

Ebenfalls von Bedeutung ist die Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages $c = |\vec{c}|$

$$f_M(c) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} c^2 \exp \left(-\frac{mc^2}{2k_B T} \right), \quad (3.25)$$

die aus Gl. (3.23) unter Berücksichtigung der Isotropie folgt.

3.3.2. Rotation

Nach Hinshelwood [66] kann ganz allgemein eine Verteilungsfunktion für eine kontinuierlich verteilte Energie $\epsilon = E/k_B T$ mit ξ Freiheitsgraden formuliert werden als

$$f_H(\epsilon) = \frac{1}{\Gamma(\xi/2)} \epsilon^{\xi/2-1} \exp(-\epsilon). \quad (3.26)$$

Diese Darstellung der Energieverteilung lässt sich unmittelbar aus der Maxwell-Boltzmann-Statistik (3.3) herleiten, wobei ein Übergang zur klassischen Näherung durchgeführt wird, siehe [66], Kap. 2. Somit ist Gl. (3.26) für *alle* kontinuierlich verteilten Energien gültig, sofern die klassische Näherung keine allzu grobe Vereinfachung darstellt. Bei der Rotation vereinfacht sich wegen $\xi_R = 2$ Gl. (3.26) zu

$$f_R(\epsilon_R) = \exp(-\epsilon_R). \quad (3.27)$$

Ist die Rotationstemperatur T_R bekannt, kann unter Verwendung von Zufallszahlen R durch Inversion von Gl. (3.27) den Teilchen statistisch verteilte Rotationsenergien zugewiesen werden nach der Beziehung

$$E_R = -k_B T_R \ln(R). \quad (3.28)$$

3.3.3. Vibration

Die Hinshelwoodverteilung ist für die Beschreibung der vibratorischen Energieniveaus nicht geeignet, da diese aufgrund der hohen Abstände besonders für kleine i diskret behandelt werden müssen. Aus den Gleichungen für die Vibrationsenergie (3.11) sowie den Zustandssummen (3.14) und (3.2) lässt sich mit der Boltzmann-Verteilung (3.3) ein Ausdruck für die diskrete Verteilungsfunktion für die Teilchenzahlen N_i auf den Energieniveaus i herleiten:

$$\frac{N_i}{N} = \exp\left(-\frac{i\theta_V}{T_V}\right) \frac{1 - \exp(-\theta_V/T_V)}{1 - \exp(-\theta_D/T_V)}. \quad (3.29)$$

Mit Hilfe der Dirac'schen δ -Funktion kann die Verteilungsfunktion für das diskret verteilte Energieniveau i als Funktion der kontinuierlichen Energie $\epsilon_V = E_V/(k_B T_V)$ formuliert werden:

$$f_{V,i}(\epsilon_V, i) = \exp\left(\frac{\gamma_0 \theta_V}{T_V} - \epsilon_V\right) \frac{1 - \exp(-\theta_V/T_V)}{1 - \exp(-\theta_D/T_V)} \delta\left[\epsilon_V - \frac{(i + \gamma_0)\theta_V}{T}\right]. \quad (3.30)$$

Nach Bird [67] können bei einer gegebenen Vibrationstemperatur mit Hilfe von Zufallszahlen gemäß

$$i = \left\lfloor -\ln(R) \frac{T_V}{\theta_V} \right\rfloor \quad (3.31)$$

die statistisch verteilten Quantenzustände i von Teilchen berechnet werden. Die Vibrationsenergie kann nun mit Gl. (3.11) ausgewertet werden. Beim TSHO-Modell muss zusätzlich die Bedingung $i < n$ erfüllt sein.

3.3.4. Anregung

Die Verteilung der angeregten Elektronen nach Gl. (3.3) wird wie bei der Translation, Rotation und Vibration mit Hilfe der Verwerfungsmethode (*Acceptance Rejection Method*) umgesetzt, siehe [68]. Dazu werden zunächst alle Werte i der diskreten Verteilung auf den maximalen Wert f_{max} normiert:

$$P_i = \frac{f_i}{f_{max}}. \quad (3.32)$$

Zur Evaluierung der Belegung eines Energieniveaus wird ein Wert j gebildet gemäß

$$j = 1 + \lfloor R_1 n \rfloor, \quad (3.33)$$

wobei n und R_1 die Anzahl der möglichen Zustände sowie eine gleichverteilte Zufallszahl darstellen. Die resultierende Zustandswahrscheinlichkeit (3.32) wird mit einer weiteren Zufallszahl R_2 geprüft. Falls $P_j > R_2$ ist, wird der Zustand j des Teilchens besetzt. Falls $P_j < R_2$, wird die gesamte Prozedur solange wiederholt, bis ein Wert angenommen wird. Allerdings liegt die Besetzungsdichte, welche nach Gl. (3.3) berechnet wird, aufgrund des Boltzmann-Terms sehr nahe an der Rechengenauigkeit heutiger Computer. Deshalb wird f_{max} unter Verwendung des Logarithmus des Zählers ausgewertet und man erhält nach kurzer Rechnung folgende Zustandswahrscheinlichkeit:

$$P_i = \frac{g_i}{g_{max}} \exp\left(\frac{E_{max} - E_i}{k_B T_e}\right). \quad (3.34)$$

Bei der Initialisierung wird diese Prozedur lediglich für die angeregten Spezies durchgeführt.

Exemplarisch sind in Abb. 3.3 und 3.4 die Zustandsbesetzungen von Kohlenstoffatomen bei Elektronentemperaturen von 40.000 K sowie 60.000 K dargestellt. Dies ist angelehnt an die Messungen von Gatsonis et al. [69] und Byrne et al. [70]. Sie konnten zeigen, dass im untersuchten Parallelschienenbeschleuniger zu Beginn der Entladung bei einer gespeicherten Energie von 40 J eine Elektronentemperatur von 10 eV auftreten kann, was in etwa 100.000 K entspricht.

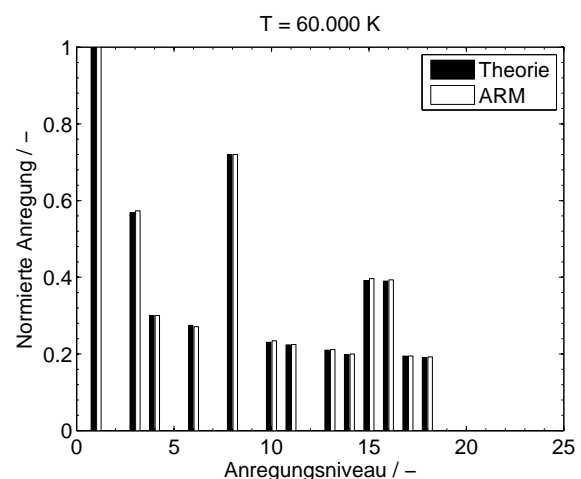
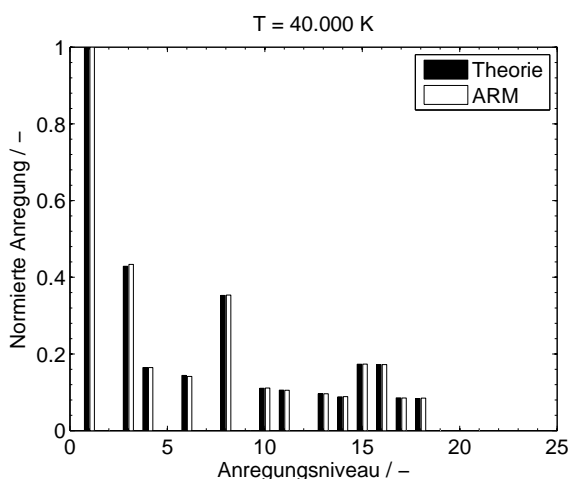


Abbildung 3.3.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C-Atome bei $T_e = 40.000 K$.

Abbildung 3.4.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C-Atome bei $T_e = 60.000 K$.

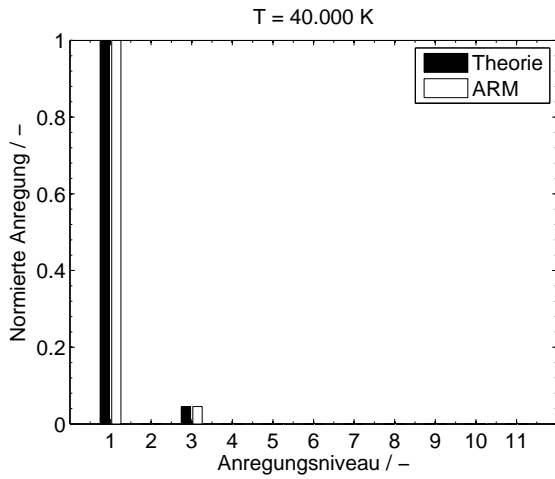


Abbildung 3.5.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 40.000 K$.

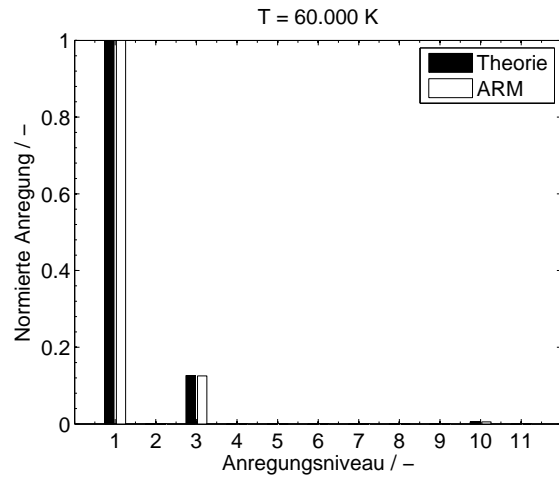


Abbildung 3.6.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 60.000 K$.

Die Besetzungszahlen sind hier auf die maximal auftretende Besetzungsdichte normiert. Diese ist in der Regel beim Grundzustand vorzufinden. Die kleinen Abweichungen bei der Reproduktion der Besetzungsdichten sind auf die numerischen Eigenheiten des Verfahrens zurückzuführen und liegen bei maximal 2.28%. In den meisten Fällen liegt die relative Abweichung vom Sollwert bei $< 1\%$.

Beispielhaft sind in den Abb. 3.5 und 3.6 sowie 3.7 und 3.8 auch die initialen Besetzungsdichten für zweifach ionisierte Kohlenstoffionen bei vier Temperaturen dargestellt. Erwartungsgemäß steigt auch hier die Elektronenanregung mit der Temperatur. Allerdings wirkt das elektrostatische Potential des positiven Ions dem entgegen, so dass es erst bei deutlich höheren Temperaturen zu nennenswerten Besetzungsdichten höherer Energieniveaus kommt.

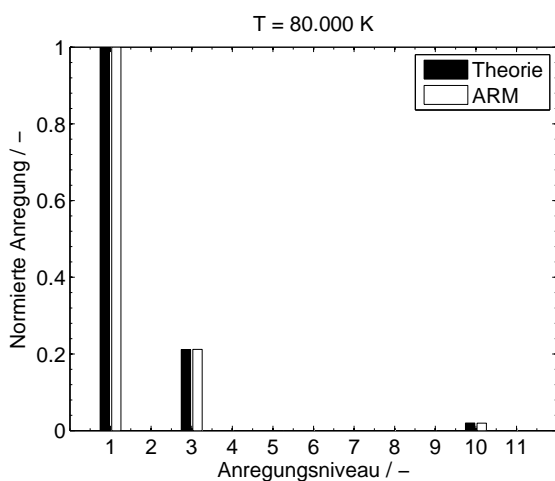


Abbildung 3.7.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 80.000 K$.

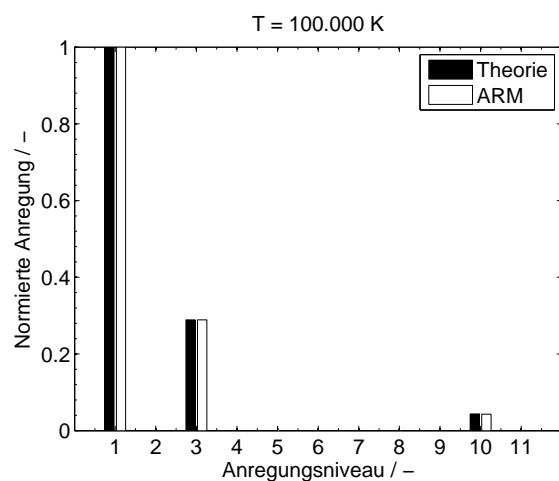


Abbildung 3.8.: Vergleich der theoretischen und nach der Verwerfungsmethode generierten Besetzungsdichte für C^{2+} -Ionen bei $T_e = 100.000 K$.

3.4. Kollisionsmechanik

In diesem Abschnitt werden die physikalischen Grundlagen einer Teilchenkollision unter der Annahme einer azimuthalen Streuisotropie diskutiert. Die Streuisotropie impliziert gleichzeitig die Kugelsymmetrie der Interaktionspotentiale, der Umkehrschluss gilt jedoch nicht. Abbildung 3.9 zeigt schematisch die Flugbahn eines gestreuten Teilchens, welches als Punktmasse m_2 dargestellt ist.

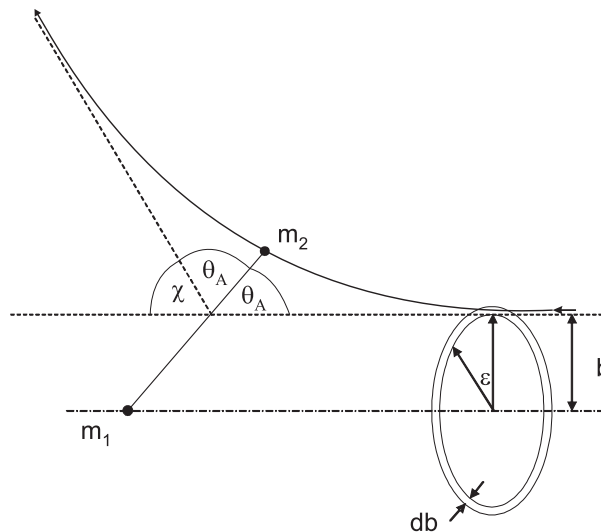


Abbildung 3.9.: Trajektorie eines kollidierenden Teilchens (2) im Fall eines repulsiven Potentials aus der Perspektive des Teilchens (1), b - minimaler Abstand der ungestörten Trajektorien, ε - Azimutwinkel, χ - polarer Ablenkwinkel.

3.4.1. Beschreibung der Kollisionsebene

Durch die chaotische Verteilung der Teilchen im Orts- sowie im Geschwindigkeitsraum stellen die Teilchenkollisionen bezüglich eines raumfesten Koordinatensystems ein dreidimensionales Phänomen dar. Durch Isotropiebetrachtungen und geeignete Transformationen lässt sich die Kollisionsbeschreibung vereinfachen: Betrachtet man die Vektoren der Teilchenrelativgeschwindigkeiten vor und nach dem Stoß, so kann damit eine Ebene gebildet werden, in welcher der komplette Stoß abläuft. Die Orientierung dieser Ebene zu einer beliebigen Referenzebene ist ebenfalls zufallsbedingt und wird mit Hilfe des azimuthalen Streuwinkels ε beschrieben. Durch eine weitere Transformation in der Art, daß der Beobachter sich mit dem streuenden Teilchen bewegt, kann schließlich das Problem auf ein Einteilchenproblem reduziert werden, welches in Abb. 3.9 dargestellt ist. Die gesuchte Größe ist der polare Streuwinkel χ .

3.4.2. Herleitung des Starrkugelquerschnitts

Für die Kollisionsbetrachtung muss der Wirkungsquerschnitt bekannt sein, wobei *Wirkung* eine allgemeine Bezeichnung darstellt, da im Detail noch die Art der Wirkung spezifiziert werden muss, z.B.

Streuung, Reaktion, Anregung oder Ionisation. Jede Interaktionsart kann durch einen energie- und winkelabhängigen differentiellen Wirkungsquerschnitt $\sigma_D(E, \chi)$ beschrieben werden, wobei E und χ die zur Verfügung stehende (Kollisions-)Energie sowie den polaren Ablenkwinkel darstellen.

Die Herleitung der grundlegenden Zusammenhänge beginnt mit einer diskreten Formulierung: Man stelle sich einen Teilchenfluss N [$1/m^2$] vor. Eine bestimmte Teilchenanzahl $\Delta N (= N\sigma_D)$ fliegt durch das kleine Flächenelement σ_D , wonach eine Untermenge ΔN^* dieses Teils (bzw. das aktuelle Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit) in das Raumwinkelement $\omega = \Delta\Omega/\Omega$ gestreut wird. Dabei ist $\Omega = \int_0^{4\pi} d\Omega$. Man kann also schreiben:

$$\Delta N^* = N\sigma_D\omega. \quad (3.35)$$

Diese Formulierung ist gleichbedeutend mit einer Filterung der Teilchen, die diese Bedingungen erfüllen. Nach σ_D umgestellt, ergibt dies den allgemeinen Zusammenhang

$$\sigma_D = \frac{1}{N} \frac{\Delta N^*}{\Delta\Omega} \Omega. \quad (3.36)$$

Der Term $\Delta N^* \cdot \Omega = \Delta N$ beschreibt damit alle Teilchen, die durch das Flächenelement σ_D fliegen. Geht man nun von der diskreten in die differentielle Schreibweise über und berücksichtigt Zylinderkoordinaten für die Beschreibung von dN , so führt dies auf $dN = Nb db d\varepsilon$. Für das differentielle Raumwinkelement erhält man bei Verwendung von Kugelkoordinaten $d\Omega = \sin\chi d\chi d\varepsilon$. Eingesetzt in Gl. (3.36) führt auf

$$\sigma_D = \frac{1}{N} \frac{Nb db}{\sin\chi d\chi} = \frac{b}{\sin\chi} \left| \frac{db}{d\chi} \right|. \quad (3.37)$$

Der Term $|db/d\chi|$ wird als Ablenkfunktion bezeichnet und muss für die Berechnung von σ_D bekannt sein. Die in Abb. 3.9 als Punktmassen dargestellten Teilchen mit den Indizes 1 und 2 werden elastisch gestreut, wobei sich der Beobachter mit dem streuenden Teilchen m_1 bewegt. Im Moment der größten Annäherung beider Teilchen beträgt der minimale Teilchenabstand dem effektiven Teilchendurchmesser $d_{1,2} = (d_1 + d_2)/2$, was man sich durch die Betrachtung einer Kollision zweier starrer Kugeln verdeutlichen kann. Gleichzeitig gilt

$$\sin\Theta_A = \frac{b}{d_{1,2}} \quad (3.38)$$

sowie $\chi = \pi - 2\Theta_A$, was zu

$$\chi = 2 \arccos\left(\frac{b}{d_{1,2}}\right) \quad (3.39)$$

führt. Die Ablenkfunktion beträgt damit

$$\left| \frac{db}{d\chi} \right| = \frac{d_{1,2}}{2} \sin\frac{\chi}{2}. \quad (3.40)$$

Der differentielle Streuquerschnitt vereinfacht sich zu $\sigma_D = d_{1,2}^2/4$. Die Winkelabhängigkeit ist vollständig entfallen. Hierzu zwei Anmerkungen:

- Die Einführung einer geometrisch verteilten Streuwahrscheinlichkeit gemäß $\Delta\Omega/\Omega$ impliziert bereits die Streusymmetrie in azimuthaler Richtung. Unter Annahme eines kugelsymmetrischen Potentials *muss* daher jede Abhängigkeit von ε in Gl. (3.37) verschwinden.

- Die Ablenkfunktion beim Starrkugelmodell basiert auf rein geometrischen Überlegungen und beinhaltet keinerlei Energieabhängigkeit des Ablenkwinkels, woraus auch die Streuisotropie in polarer Richtung resultiert. Formal wird im weiteren Verlauf jedoch die Winkelabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes berücksichtigt.

Den integralen Wirkungsquerschnitt $\sigma_I(E)$ erhält man im Allgemeinen durch Integration des differentiellen Stoßquerschnitts über den Raumwinkel:

$$\sigma_I(E) = \int_0^{4\pi} \sigma_D(E, \chi) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma_D(E, \chi) \sin \chi d\chi. \quad (3.41)$$

Sofern sich σ_D aus der Summe der einzelnen differentiellen Wirkungsquerschnitte für eine betrachtete Teilchenpaarung zusammensetzt, entspricht σ_I dem totalen integralen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_T = \pi d_{1,2}^2, \quad (3.42)$$

der auch als *Kollisions-* oder *Stoßquerschnitt* bezeichnet wird. Diese zwei Termini beschreiben die Interaktion im Allgemeinen, wobei noch völlig unspezifiziert ist, welche Art der Interaktion im Detail stattfindet. Allgemein lässt sich die Interaktion in einen elastischen¹ und einen inelastischen² Teil aufspalten:

$$\sigma_D = \sigma_{D,ela} + \sigma_{D,inel}. \quad (3.43)$$

Betrachtet man elastische Kollisionen, so verändert sich der Impuls eines gestreuten Teilchens entsprechend dem Streuwinkel. Daraus ergibt sich ein Ansatz für einen Impulsübertragungsquerschnitt, der verallgemeinert dargestellt werden kann gemäß

$$\sigma^{(l)} = \int_0^{4\pi} (1 - \cos^l \chi) \sigma_{D,ela}(E, \chi) d\Omega. \quad (3.44)$$

Diese Formulierung liegt auch der Chapman-Enskog-Theorie zugrunde (siehe z.B. [71]). Für $l = 1$ und $l = 2$ erhält man jeweils die Ausdrücke für den Diffusions- sowie den Viskositätsquerschnitt:

$$\sigma^{(1)} = \sigma_M = \int_0^{4\pi} (1 - \cos \chi) \sigma_{D,ela}(E, \chi) d\Omega = \sigma_T \quad (3.45)$$

und

$$\sigma^{(2)} = \sigma_\mu = \int_0^{4\pi} (1 - \cos^2 \chi) \sigma_{D,ela}(E, \chi) d\Omega = \frac{2}{3} \sigma_T. \quad (3.46)$$

Aufgrund dieser Beziehungen können Informationen über Kollisionsquerschnitte aus Viskositäts- und Diffusionsdaten gewonnen werden, die mit Hilfe von Kollisionsintegralen dargestellt werden:

$$\Omega^{(l,s)} = \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} \sigma^{(l)}(E) d\gamma \quad \text{mit} \quad \gamma = \sqrt{E/(k_B T)}. \quad (3.47)$$

¹Teilchenwechselwirkung unter Erhaltung der gesamten kinetischen Energie sowie des Impulses.

²Energietransfer zwischen translatorischen, vibratorischen, rotatorischen und elektronischen Anregungszuständen.

Die Parameter l sowie s sind Wichtungsfaktoren und beschreiben die physikalische Bedeutung der Kollisionsintegrale: $\Omega^{(1,1)}$ repräsentiert das Kollisionsintegral für die Diffusion und $\Omega^{(2,2)}$ das für die Viskosität. Entsprechend lassen sich der Viskositätskoeffizient μ und der Diffusionskoeffizient D nach Chapman-Enskog wie folgt formulieren:

$$D = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B T / m_r}}{n\pi r_0^2 \Omega^{(1,1)}} \quad (3.48)$$

und

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\pi r_0^2 \Omega^{(2,2)}}. \quad (3.49)$$

3.5. Kollisionsfrequenz und mittlere freie Weglänge

Die Kollisionsfrequenz ν beschreibt die Anzahl der Kollisionen Z je Zeiteinheit Δt und ist für ein Teilchen in einem Gas allgemein definiert als

$$\nu = \frac{Z}{\Delta t} = n \langle \sigma_T g \rangle. \quad (3.50)$$

Hierbei stellen σ_T und n den integralen Kollisionsquerschnitt und die Teilchendichte dar, wobei $\langle \rangle$ eine Mittelung über eine Gleichgewichtsverteilung der Kollisionsenergie bedeutet. Demnach repräsentiert $\langle \sigma_T g \rangle$ den Kollisionsratenkoeffizienten und ν stellt eine Gleichgewichtsgröße dar. Für die zeitliche Auflösung in DSMC gilt allgemein $\Delta t < 1/\nu$.

Die mittlere freie Weglänge λ beschreibt den Weg, den ein Teilchen im Mittel zwischen zwei Kollisionen zurücklegt. Die allgemeine Definition lautet

$$\lambda = \frac{\langle v_{th} \rangle}{n \langle \sigma_T g \rangle}, \quad (3.51)$$

wobei $\langle v_{th} \rangle$ die mittlere thermische Geschwindigkeit repräsentiert, die bekanntermaßen aus

$$\langle v_{th} \rangle = \sqrt{8R_s T / \pi} = \sqrt{8k_B T / \pi m} \quad (3.52)$$

mit R_s als spezifische Gaskonstante ermittelt werden kann. Für die räumliche Auflösung in DSMC gilt allgemein $\Delta x < \lambda$.

Sowohl ν als auch λ hängen maßgeblich vom Kollisionsquerschnitt σ_T und somit vom zugrundeliegenden Potentialmodell ab. In Kap. 4.2 werden drei typische Potentialmodelle für Neutralteilcheninteraktionen u. A. anhand dieser beiden Größen verglichen.

3.6. Energie- und Impulserhaltung

Die Kollisionsenergie E_c , welche in die Berechnung der Wirkungsquerschnitte eingeht, entspricht der Relativenergie der kollidierenden Teilchen, die sich gemäß

$$E_c = \frac{1}{2} m_r g^2 \quad (3.53)$$

berechnet, wobei $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ die reduzierte Masse der zwei Teilchen darstellt. Im Falle eines elastischen Stoßes erhält man aus der nicht-relativistischen Impulserhaltung

$$m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 = m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2 = (m_1 + m_2) \vec{v}_{cm} \quad (3.54)$$

die Schwerpunktschwindigkeit

$$\vec{v}_{cm} = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{(m_1 + m_2)}. \quad (3.55)$$

Wie man Gl. (3.54) entnehmen kann, wird bei elastischen Kollisionen die Schwerpunktschwindigkeit über den Stoß hinweg nicht beeinflusst. Mit der Teilchenrelativgeschwindigkeit $\vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$ folgt aus Gl. (3.54)

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_{cm} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{g} \quad (3.56)$$

bzw.

$$\vec{v}_2 = \vec{v}_{cm} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{g}. \quad (3.57)$$

Eine analoge Rechnung führt auf die gesuchten Nachstoßgeschwindigkeiten

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_{cm} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{g}' \quad (3.58)$$

bzw.

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_{cm} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{g}'. \quad (3.59)$$

Die Gleichungen (3.58) und (3.59) zeigen, daß für die Berechnung der Teilchengeschwindigkeiten nach dem Stoß die Relativgeschwindigkeiten der Teilchen zueinander nach dem Stoß bekannt sein müssen. Die Energieerhaltung für elastische Kollisionen liefert lediglich $g' = g$. Die Betrachtung dieser einfachen Grundgleichungen erlaubt keine Aussage über die Orientierung der Relativgeschwindigkeitsvektoren nach dem Stoß. Diese sind vom verwendeten Potentialmodell abhängig. Sind die Winkel allerdings bekannt, so erhält man die Nachstoßrelativgeschwindigkeit aus der bekannten Beziehung

$$\vec{g}' = g \begin{pmatrix} \cos \chi \\ \sin \chi \cos \varepsilon \\ \sin \chi \sin \varepsilon \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Im Fall eines inelastischen Stoßes, bei dem eine Energie ΔE mit der zur Verfügung stehenden Kollisionsenergie verrechnet werden muss, folgt g aus $g = \sqrt{2(E_c - \Delta E)/m_r}$.

4. Physikalische Modellierung

In Kap. 2 wurde die Boltzmann-Gleichung (3.1) eingeführt als gaskinetische Grundgleichung. Die Modellierung von Teilchenkollisionen erlaubt die Lösung des Kollisionsterms auf der rechten Seite der Boltzmann-Gleichung, welcher kurzreichweitige Interaktionen beschreibt.

Der dritte Term der linken Seite der Boltzmann-Gleichung (3.1), welcher die Änderung der gesuchten Geschwindigkeitsverteilungsfunktion beschreibt, wird meist vernachlässigt. Zum Einen ist die gravitative Wirkung auf mikroskopischen Skalen vernachlässigbar, zum Anderen entfällt die makroskopisch relevante Wirkung elektrischer und magnetischer Kräfte auf Neutralteilchen. Zusätzlich muss berücksichtigt werden, dass der Kollisionsquerschnitt alle Teilcheninteraktionsarten kurzer Reichweite enthält. Auch chemische Reaktionen unter Beteiligung von Ladungsträgern, besonders in Kombination mit Neutralteilchen, sind Interaktionen kurzer Reichweite, da eventuelle Polarisierungseffekte nur auf kurzen Entfernungen für die Kollisionsentscheidung von Bedeutung sind. Im Gegensatz dazu ist die Coulomb-Interaktion eine grundsätzlich langreichweitige Interaktion, die sich jedoch aufgrund von elektrostatischen Dämpfungseffekten sowohl auf sehr großen Skalen (Particle-In-Cell-Löser), als auch auf sehr kleinen Skalen (Fokker-Planck-Löser) bemerkbar macht.

Obwohl beim DSMC-Verfahren der Rechenaufwand nur linear mit der Teilchenzahl ansteigt, stellen die Teilchenkollisionen den limitierenden Faktor hinsichtlich der Anwendbarkeit von Partikelverfahren bei niedrigeren Knudsenzahlen dar. Entsprechend gab es in den letzten Jahren Bestrebungen, die Grenze der Anwendbarkeit modellbasiert weiter in den Kontinuumsbereich zu verschieben [72, 73]. Zentrales Merkmal der DSMC-Methode ist die Trennung von Bewegung und Kollision. Die Bewegung wird generell deterministisch gemäß des Newton'schen Bewegungsgesetzes berechnet, die Kollisionen werden rein statistisch behandelt und liefern Geschwindigkeitsinkremente sowie Populations- und Depopulationsinformationen im Fall von reaktiven Kollisionen. Die kollisionsbasierten Geschwindigkeitsänderungen gehen additiv mit den Geschwindigkeitsänderungen der anderen Module in die Lösung der relativistischen Bewegungsgleichungen ein, siehe auch [34].

Die getrennte Betrachtung von Bewegung und Kollision erfordert eine ausreichend kleine Zeitschrittweite Δt . Ist Δt zu groß, fliegen die Teilchen zu weit, ohne mit anderen Teilchen zu interagieren, was zu unphysikalischen Ergebnissen führen würde. Die Diskretisierung des Raumes dient primär der Kollisionsberechnung, zumal nur diejenigen Teilchen kollidieren können, die sich zu einem Zeitschritt in der gleichen Zelle befinden. Entsprechend muss die räumliche Auflösung in der Größenordnung der lokalen mittleren freien Weglänge λ liegen, typisch ist $\lambda/3$. Zu große Zellen führen zu Kollisionen, die im aktuellen Zeitschritt aufgrund der derzeit noch positionsunabhängigen Teilchenpaarbildung noch nicht stattfinden würden, was wiederum einen unphysikalisch hohen Massen-, Impuls- und Energietransport zur Folge hätte. Zusätzlich führt die Diskretisierung von Raum und Zeit in beiden Fällen zu numerischen Fehlern, die in Kap. 5 genauer betrachtet werden.

4.1. Kollisionsmodelle

Die kontinuumsferne Strömungssituation während der Entladung in einem instationären magnetoplasmadynamischen Triebwerk (siehe z.B. [11]) und die damit einhergehende Schwierigkeit, Größen wie Temperatur und Druck für die Beschreibung zu verwenden, erfordert eine intensive Diskussion der bekannten Kollisionsmodelle.

Der Begriff *Kollisionsmodell* wird in der angloamerikanischen Literatur i. A. als Synonym für das zugrunde liegende Starrkugelpotential verwendet, häufig in Verbindung mit dem sogenannten No-Time-Counter-Schema [67]. Doch dieser Begriff ist irreführend und wird hier als Synonym für ein Modell zur Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit verwendet.

4.1.1. Simulierte Kollisionszahl

Die in Gl. (3.50) gegebene Kollisionszahl Z gilt streng genommen nur für Binärkollisionen, welche wiederum eine in der Gaskinetik sehr häufig verwendete Approximation darstellen. Tatsächlich gibt es in einem Gas, welches aus vielen Teilchen besteht, keine Binärkollisionen, da die (klassischen) Teilchenpotentiale eine unendliche Reichweite haben. Da die Potentiale aber sehr schnell asymptotisch gegen Null gehen, stellt diese Approximation im Rahmen der statistischen Methoden der Gaskinetik eine sinnvolle und brauchbare Näherung dar. Deterministisch lässt sich die Kollisionszahl direkt aus der Teilchenzahl ableiten: Sind N simulierte Teilchen vorhanden, erfährt ein Teilchen $(N - 1)$ Kollisionen. Da in der Regel die Menge der Kollisionen aller N Teilchen von Interesse ist, folgt aus der deterministischen Betrachtung eine Kollisionszahl von $N(N - 1)/2$. Ist N groß, kann dies schnell die zur Verfügung stehende Rechenleistung sprengen, da die Zahl der Kollisionen proportional zu N^2 ist. Da jedes simulierte Teilchen sehr viele reale Teilchen repräsentiert, wird angenommen, dass $N^2/2 - N/2 \approx N^2/2$ gilt. Damit kann Gl. (3.50) für ein Gasgemisch erweitert werden, wobei Z_{ab} allgemein die Anzahl der Kollisionen zwischen den Spezies a und b beschreibt:

$$Z_{ab} = \frac{N_a N_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{F_{sim} \Delta t}{V_c} \langle \sigma_{T,ab} g_{ab} \rangle. \quad (4.1)$$

Da jedes simulierte Teilchen eine Vielzahl (F_{sim}) realer Teilchen repräsentiert, wurde folgender Zusammenhang bei der Bestimmung von Gl. (4.1) verwendet: $n = N \cdot F_{sim}/V_c$. Somit beschreibt Gl. (4.1) die Kollisionszahl, die mit den beiden in den folgenden Unterabschnitten diskutierten Kollisionsmodelle in einer Gleichgewichtssituation reproduziert wird. Es werden die Indizes a und b aus Gründen der Übersichtlichkeit überall da weggelassen, wo sie nicht zwingend erforderlich sind.

4.1.2. Methode der begrenzten Wahrscheinlichkeit

Die Methode der begrenzten Wahrscheinlichkeit (*Constraint Probability Method*) wurde von Bird vorgeschlagen [74] und ist derzeit sehr stark verbreitet. Sie basiert auf einer a priori berechneten Anzahl an Kollisionen, die in der aktuell betrachteten Volumen- und Zeiteinheit stattfinden. Dieser Methode liegen folgende Überlegungen zugrunde: In einer Zelle mit dem Volumen V_c befinden sich

mehrere simulierte Teilchen. Bewegt sich ein Teilchen durch dieses Volumen, so ist die Wahrscheinlichkeit einer Kollision P_c dieses Teilchens gleich dem Verhältnis des Volumens, welches durch den in der Zeit Δt mit Relativgeschwindigkeit g bewegten Kollisionsquerschnitt σ_T erzeugt wird, zum Zellvolumen V_c :

$$P_c = \frac{F_{sim} \Delta t}{V_c} \sigma_T g. \quad (4.2)$$

Dabei ist P_c meist sehr klein, so dass Gl. (4.2) sehr ineffizient ist. Dies führt dazu, dass unnötig viele P_c -Berechnungen durchgeführt werden müssen, um die korrekte Rate zu reproduzieren. Gleichzeitig führt die Approximation $N^2/2 - N/2 \approx N^2/2$, welche bei der Herleitung der Gl. (4.1) gemacht wurde, zu großen Fehlern bei niedrigen Teilchenzahlen.

Beide Probleme können umgangen werden, wenn nur ein bestimmter Anteil der Teilchenpaarungen berücksichtigt wird. Die Kollisionswahrscheinlichkeit (4.2) wird erhöht, wenn die Gleichung durch diesen Anteil dividiert wird. Sollen nur 10% aller potentiellen Paare untersucht werden, muss die Kollisionswahrscheinlichkeit um den Faktor 10 erhöht werden, damit die gleiche Kollisionsrate reproduziert wird. Dieses Prinzip kann optimiert werden, wenn die maximale Kollisionswahrscheinlichkeit den Wert Eins erreicht, aber nicht überschreitet. Man erhält

$$P_{c,max} = \frac{F_{sim} \Delta t}{V_c} \langle \sigma_T g \rangle_{max} = 1. \quad (4.3)$$

Der Wert in der Klammer stellt wieder die Mittelung über eine Maxwell'sch verteilte Energie dar.

Die Anzahl der Paare wird berechnet, indem die rechte Seite von Gl. (4.3) mit der Anzahl aller potentiellen Paare $N^2/2$ in der Zelle multipliziert wird. Da N aber häufig fluktuiert und $\langle \rangle^2$ sich von $\langle \rangle^2$ unterscheidet, sollte N^2 durch das Produkt aus der Anzahl der sich aktuell in der Zelle aufhaltenden Teilchen und ihrem zeitlichen Mittel \bar{N} ersetzt werden. Gleichzeitig wird das Kronecker-Symbol eingeführt, um Mehrfachzählungen bei identischen Teilchenarten zu vermeiden. Damit ergibt sich folgender Ausdruck für die Anzahl der zu untersuchenden Teilchenpaare:

$$S_{ab} = \frac{N_a \bar{N}_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{F_{sim} \Delta t}{V_c} \langle \sigma_{T,ab} g_{ab} \rangle_{max}. \quad (4.4)$$

Für jedes Paar wird nun die Interaktionswahrscheinlichkeit berechnet nach

$$P_i = \frac{\sigma_i g}{\langle \sigma_T g \rangle_{max}}, \quad (4.5)$$

wobei i die Art der Interaktion und σ_i den entsprechenden (integralen) Interaktionsquerschnitt beschreiben. Das Verfahren bietet folgende Vor- und Nachteile:

Vorteile:

- In aller Regel ist $S_{ab} < N/2$, was zu einer verringerten Rechenzeit führt.
- Durch Verwendung von $\langle \sigma_T g \rangle_{max}$ wird sichergestellt, dass $P_i \leq 1$ immer erfüllt ist.

Nachteile:

- Der maximale Wert des Kollisionsratenkoeffizienten $\langle \sigma_T g \rangle_{max}$ impliziert die Annahme einer Gleichgewichtsverteilungsfunktion der kinetischen Energie. Diese Annahme ist bei Nichtkontinuumsverfahren, besonders bei stark instationären Problemen, kritisch zu bewerten. In der Praxis wird deswegen häufig nicht der Ratenkoeffizient verwendet, sondern das Produkt $(\sigma_T g)_{max}$.

- Bei der Berechnung der Paaranzahl S muss garantiert werden, dass die Anzahl der Teilchenpaare in der Zelle im aktuellen Zeitschritt nicht überschritten wird. Falls $S > N/2$ ist, müssen neue Paare gebildet und Kollisionen berechnet werden.

Die Vorteile des Verfahrens dominieren, wenn die Lösung auskonvergiert¹ ist, so dass die zeitlichen Mittelungen keinen großen Schwankungen unterworfen sind. Eine Aussage bezüglich der Eigenschaften im Fall eines instationären Problems kann ohne weiterführende Untersuchungen nicht getroffen werden.

4.1.3. Methode der natürlichen Stichprobengröße

Diese Methode wurde ursprünglich von Baganoff und McDonald [75] vorgeschlagen und ist in der einschlägigen Literatur unter der Bezeichnung *Natural Sample Size* bekannt. Ausgangspunkt ist die Definition eines allgemeinen Ansatzes für die Darstellung der Kollisionswahrscheinlichkeit,

$$P_c = \beta_c g^{\phi_c}. \quad (4.6)$$

Die Größen β_c und ϕ_c sind zwei noch zu bestimmende Koeffizienten. Die mittlere Kollisionswahrscheinlichkeit

$$\langle P_c \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P_c(g) f(g) dg \quad (4.7)$$

kann i. A. durch Mittelung über eine Gleichgewichtsverteilungsfunktion der Relativgeschwindigkeit

$$f(g) = \frac{4\pi g^2}{(2\pi k_B T / m_r)^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{m_r g^2}{2k_B T}\right) \quad (4.8)$$

berechnet werden. Das Ergebnis der Integration ist aus Gleichgewichtsbetrachtungen bekannt und entspricht dem Verhältnis aus der Kollisionszahl Z_{ab} zur möglichen Paarzahl Q_{ab} ,

$$\langle P_c \rangle = \frac{Z_{ab}}{Q_{ab}}. \quad (4.9)$$

Hierbei gilt $Q_{ab} = F_{sim} S_{ab}$. Nach Durchführung der Integration (4.7) erhält man für die gesuchten Koeffizienten durch einen Koeffizientenvergleich [33],

$$\beta_c = \frac{n_a n_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{C_{ab}}{Q_{ab}} V_c \Delta t = \frac{N_a N_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{C_{ab}}{S_{ab}} \frac{F_{sim} \Delta t}{V_c} \quad (4.10)$$

und

$$\phi_c = 1 - 2\omega. \quad (4.11)$$

Die Größe C_{ab} enthält potentialabhängige Informationen über den Kollisionsquerschnitt und wird in Kap. 4.2 näher diskutiert. Dieses Verfahren bietet folgende Vor- und Nachteile:

¹Eine geeignete Analogie, zumal bei einem stationären Problem durch viele Mittelwertbildungen das Rauschen minimiert wird.

Vorteile:

- Diese Methode zur Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit ist aus algorithmischer Sicht für die Berücksichtigung von Rekombinationsreaktionen besonders gut geeignet [33], da noch vor Beginn der Kollisionsberechnung geeignete Teilchen reserviert werden können, denen die frei werdende Rekombinationsenergie übertragen wird.
- Es können nur maximal die Paare kollidieren, die auch in der Zelle existieren.

Nachteile:

- Ein Nachteil dieser Methode liegt darin, dass sichergestellt werden muss, dass P_c niemals den Wert 1 überschreitet. Dies wird über eine Anpassung des Zeitschrittes erreicht.
- Die Mittelung über eine Gleichgewichtsverteilungsfunktion ist besonders bei kontinuumsfernen Strömungssituationen fraglich, zumal der Kollisionsratenkoeffizient ebenfalls eine Gleichgewichtsinformation ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Zeitschrittweite im verwendeten *PicLas*-Verfahren vom instationären Feldlöser vorgegeben, wobei dieser die Ausbreitung elektromagnetischer Informationen zeitgenau auflöst. Somit ist das Problem der Verletzung der Bedingung $P_c < 1$ und einer daraus resultierenden Zeitschrittadaption nicht gegeben. Außerdem wurde die elektronenstoßinduzierte Dreikörperrekombination zusätzlich zur molekularen Neutralteilchenrekombination implementiert, weswegen im Rahmen dieser Arbeit die Methode der natürlichen Stichprobengröße bevorzugt wird.

4.2. Neutralteilchenkollisionen

Die zentralen Kollisionsroutinen des *LasVegas*-Codes wurden in den *PicLas*-Code implementiert. Dabei wurden nicht nur kopplungsbedingt Modifikationen durchgeführt, sondern auch Erweiterungen hinsichtlich der physikalischen Modellierung. Dies betrifft nicht nur die im darauf folgenden Kapitel diskutierten Ladungsträgerinteraktionen, sondern auch die Neutralteilcheninteraktionen. Diese basieren auf dem zwischen den Teilchen wirkenden Potential $\Phi(r)$. Für die mathematische Beschreibung des Potentials existieren verschiedene Modelle mit unterschiedlicher Genauigkeit. Bei Neutralteilchen ist dies im einfachsten Fall ein Starrkugelpotential, welches erst beim Unterschreiten eines Mindestabstandes wirkt.

Sehr viele Potentiale lassen sich hinreichend genau durch ein invers abklingendes Potential (Inverses Potenzgesetz) beschreiben. Eine noch genauere Beschreibung lässt sich mit dem Lennard-Jones-Potential erreichen. Es berücksichtigt zusätzlich zum repulsiven Anteil den bei niedrigen Temperaturen an Bedeutung gewinnenden attraktiven Anteil. In Abb. 4.1 ist $\Phi(r)$ für verschiedene Potentialmodelle qualitativ dargestellt. Darin ist angedeutet, dass der Nulldurchgang des Lennard-Jones-Potentials [71] häufig als der Abstand definiert wird, bei dem Starrkugelteilchen bei dessen Unterschreitung kollidieren, aber sonst keinerlei Wechselwirkung unterliegen.

Bei DSMC-Neutralteilchenmodellen werden die Kollisionsquerschnitte aus den zugrunde gelegten Potentialmodellen abgeleitet. Im folgenden Abschnitt werden die Unterschiede anhand gaskinetischer

Größen wie Kollisionsfrequenz und mittlerer freier Weglänge dargestellt. Dabei basieren alle Modelle auf isotropem Streuverhalten.

4.2.1. Einfaches Starrkugelmodell

Das einfache Starrkugelmodell (*Hard Sphere* - *HS*) ist das primitivste Modell zur Beschreibung molekularer Kollisionsprozesse. Allgemein ist die Kraft, die ein Teilchen bei einer Kollision erfährt,

$$F(r) = -\frac{d\Phi(r)}{dr}. \quad (4.12)$$

Im Fall des einfachen Starrkugelmodells findet eine Interaktion erst bei Unterschreiten eines Mindestabstands statt. Außerdem besteht keine Energieabhängigkeit des Kollisionsquerschnittes, d.h. $\sigma_T = \text{const.}$ Somit ist $\langle \sigma_T g \rangle = \sigma_T \langle g \rangle$, was auf

$$\lambda^{HS} = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma_T} \quad (4.13)$$

führt. Der in der Literatur häufig verwendete Standardausdruck für die mittlere freie Weglänge λ basiert also auf dem einfachen Starrkugelmodell, siehe z.B. [76]. Die Kollisionsfrequenz lautet

$$\nu^{HS} = \sqrt{2}n\sigma_T \langle v_{th} \rangle. \quad (4.14)$$

Eine Information über den Kollisionsquerschnitt erhält man aus Viskositätsdaten. Aus Gl. (3.47) folgt nach kurzer Rechnung mit $l = s = 2$ für ein reines Gas, d.h. mit $m_r = m/2$, das Kollisionsintegral

$$\Omega^{(2,2)} = \left(\frac{m}{4k_B T} \right)^4 \int_0^\infty g^7 \sigma_\mu \exp\left(-\frac{mg^2}{4k_B T}\right) dg. \quad (4.15)$$

Mit Gl. (3.46) und Gl. (3.49) kann nun ein Ausdruck für das einfache Starrkugelmodell als Funktion der Viskosität hergeleitet werden:

$$\sigma_T^{HS} = \frac{15}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\mu}. \quad (4.16)$$

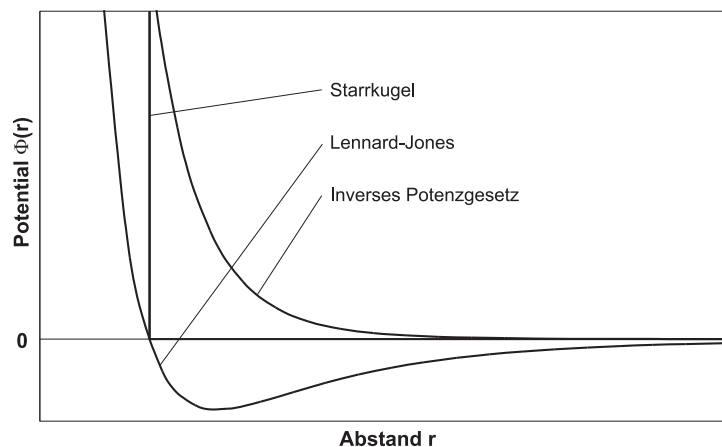


Abbildung 4.1.: Qualitativer Vergleich unterschiedlicher Interaktionspotentiale für Neutralteilchen.

Aufgrund dieser einfachen Zusammenhänge hat sich das einfache Starrkugelmodell für analytische Untersuchungen gaskinetischer Fragestellungen etabliert. Trotz der fehlenden Energieabhängigkeit des Kollisionsquerschnittes können grundlegende Eigenschaften einer Strömung abgeleitet werden.

4.2.2. Variables Starrkugelmodell

Die Temperatur in Gl. (4.16) hat einen konstanten Exponenten (1/2), obwohl bekannt ist, dass sich die Viskosität gemäß $\mu \sim T^{1/2+\omega}$ mit $0.1 < \omega < 0.4$ verhält. Nach [77] verhält sich der Stoßquerschnitt proportional zur relativen Kollisionsenergie zweier Teilchen,

$$\sigma = \pi d^2 \sim (E_{rel})^{-\omega} = \left(\frac{1}{2} m_r g^2 \right)^{-\omega}. \quad (4.17)$$

Wegen der fehlenden Energieabhängigkeit bei σ_T^{HS} führt das einfache Starrkugelmodell bei hohen Energien auf zu hohe Kollisionsfrequenzen bzw. -zahlen und ist deswegen für weitergehende Untersuchungen nicht geeignet. Dies hat die Einführung eines variablen Starrkugelmodells (*Variable Hard Sphere - VHS*) motiviert, dessen Grundidee im Folgenden kurz skizziert wird.

Die Proportionalität in Gl.(4.17) führt auf den Zusammenhang

$$\sigma = \sigma_{ref} \left(\frac{g^2}{g_{ref}^2} \right)^{-\omega}, \quad (4.18)$$

wobei σ_{ref} und g_{ref} noch zu bestimmende konstante Referenzgrößen darstellen. Eine Referenzrelativgeschwindigkeit kann aus allgemeinen Gleichgewichtsbetrachtungen gewonnen werden:

$$\left\langle \frac{1}{2} m_r g^2 \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T \approx (2 - \omega) k_B T. \quad (4.19)$$

Diese Approximation ist exakt für $\omega = 1/2$. Man erhält damit den Kollisionsquerschnitt

$$\sigma_T^{VHS} = \pi d_{ref}^2 \left(\frac{2(2 - \omega) k_B T_{ref}}{m_r g^2} \right)^\omega \quad (4.20)$$

als Funktion von d_{ref} , T_{ref} und ω . Damit lässt sich auch der für die Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit relevante Term C_{ab} bestimmen, siehe Gl. (4.10). Es ist bekannt, dass dieser den Kollisionsquerschnitt sowie die Relativgeschwindigkeit als Produkt enthalten muss:

$$C_{ab} = \sigma_T^{VHS} g^{2\omega} = \pi d_{ref}^2 \left(\frac{2(2 - \omega) k_B T_{ref}}{m_r} \right)^\omega. \quad (4.21)$$

Für $\omega = 0$ erhält man sofort das einfache Starrkugelmodell mit energieunabhängigem Kollisionsquerschnitt.

Mit Gl. (3.42) und (4.20) sowie $d_{ref} = d^{HS}$ kann die qualitative Änderung des Teilchendurchmessers beim variablen Starrkugelmodell in Abhängigkeit von der Kollisionsenergie (4.17) dargestellt werden:

$$\frac{d^{VHS}}{d^{HS}} = \left(\frac{(2 - \omega) k_B T_{ref}}{E_c} \right)^{\omega/2}. \quad (4.22)$$

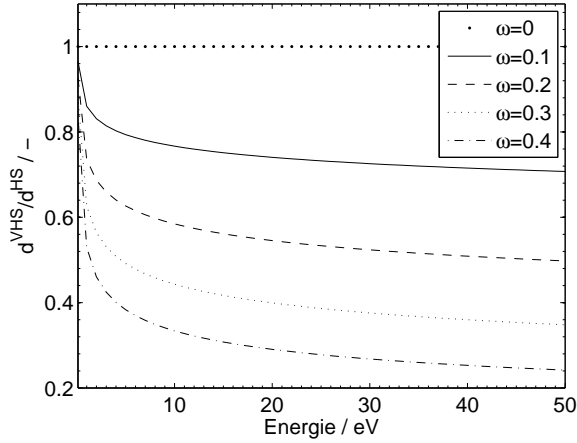


Abbildung 4.2.: d^{VHS}/d^{HS} -Verhältnis für $T_{ref} = 300 K$ sowie unterschiedliche ω -Exponenten über der Energie.

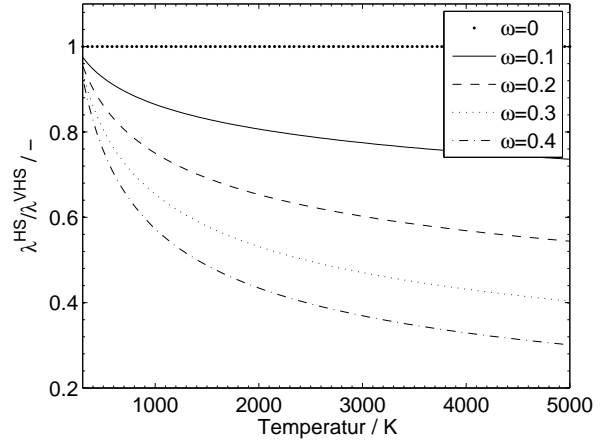


Abbildung 4.3.: $\lambda^{HS}/\lambda^{VHS}$ -Verhältnis für $T_{ref} = 300 K$ sowie unterschiedliche ω -Exponenten über der Temperatur.

Gleichung (4.22) ist beispielhaft für unterschiedliche ω und $T_{ref} = 300 K$ in Abb. 4.2 dargestellt.

Der Ratenkoeffizient beim variablen Starrkugelmodell zur Berechnung von λ^{VHS} ergibt sich ebenfalls durch Mittelung über die Gleichgewichtsenergie. Nach kurzer Rechnung erhält man

$$\langle \sigma_T^{VHS} g \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sigma_{ref} \left(\frac{2k_B T_{ref}}{m_r} \right)^\omega \left(\frac{2k_B T}{m_r} \right)^{1/2-\omega} \Gamma(2-\omega)(2-\omega)^\omega. \quad (4.23)$$

Daraus ergibt sich eine mittlere freie Weglänge von

$$\lambda^{VHS} = \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\omega \left((2-\omega)^\omega \Gamma(2-\omega) \sqrt{2} n \sigma_{ref} \right)^{-1}. \quad (4.24)$$

Folgender Zusammenhang wird hier nochmals bestätigt: Da $\lambda \sim T^\omega$ und $\sigma \sim T^{-\omega}$, gilt $\lambda \sim \sigma^{-1}$. Der Unterschied zum einfachen Starrkugelmodell kann durch Verhältnis-Bildung dargestellt werden, wobei wieder angenommen wird, dass $d^{HS} = d_{ref}$ ist:

$$\frac{\lambda^{HS}}{\lambda^{VHS}} = \Gamma(2-\omega)(2-\omega)^\omega \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^\omega = \frac{\nu^{VHS}}{\nu^{HS}}. \quad (4.25)$$

Gleichung (4.25) ist beispielhaft mit $T_{ref} = 300 K$ in Abb. 4.3 qualitativ für einige ω -Werte dargestellt. Die drei VHS-Parameter ω , T_{ref} und d_{ref} werden aus experimentell ermittelten Viskositätsdaten gewonnen. Die Lösung des Integrals Gl. (3.47) in Verbindung mit Gl. (3.49) liefert

$$\mu^{VHS} = \frac{15}{8} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\Gamma(4-\omega)(2-\omega)^\omega \sigma_{ref}} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\omega \sim T^{\omega+1/2}. \quad (4.26)$$

Durch Anwenden der Methode der kleinsten Fehlerquadrate [78] auf Gl. (4.26) unter Berücksichtigung von Gl. (3.42) erhält man die gesuchten Parameter für einen vorgegebenen Temperaturbereich.

Eine alternative Vorgehensweise ist die Berechnung der Parameter basierend auf einer Referenzviskosität bei einer Referenztemperatur [67]. Dann ergibt sich der Referenzdurchmesser einfach aus

$$d_{ref} = \left[\frac{15(m k_B T_{ref} / \pi)^{1/2}}{2(5-2\omega)(7-2\omega)\mu_{ref}} \right]^{1/2}. \quad (4.27)$$

Hierbei ist die Reproduktion des viskosen Verhaltens in der Nähe der Referenztemperatur sehr gut. Das hier diskutierte variable Starrkugelmodell ist aufgrund seiner Einfachheit und seiner guten Reproduktion des Strömungsverhaltens in neutralen Fluiden zum Standardmodell in DSMC-Verfahren geworden. Dennoch enthält es modellinhärente Schwächen:

- Da d_{ref} durch eine Temperaturkorrelation aus Gleichgewichtsdaten gewonnen wurde, skaliert σ^{VHS} gemäß diesen Gleichgewichtsdaten.
- Da σ^{VHS} von der Relativenergie abhängt, wird das rein repulsiv wirkende variable Starrkugelmodell häufig als Umsetzung des inversen Potenzgesetzes interpretiert. Allerdings konnten Koura et al. [83] zeigen, dass bei verdünnten Gasgemischen, bei denen die diffusiven Effekte gegenüber den viskosen dominieren, die Diskrepanz zwischen beiden Modellen zunimmt.
- Die gute Approximation des viskosen Verhaltens gilt nur über einen kleinen Temperaturbereich, wodurch der Fehler bei Strömungsproblemen mit größeren Temperaturunterschieden zunimmt.
- Die Viskosität ist eine Funktion der Zusammensetzung, so dass sich bei Strömungssituationen, in denen sich die Molanteile stark ändern, von einem ausreichend gut approximierten Viskositätsverhalten nicht mehr ausgegangen werden kann.

Anhand von Tab. 4.1 ist zu erkennen, dass in der Literatur viele unterschiedliche VHS-Parameter angegeben werden. Alle aufgeführten Parametersätze reproduzieren die Viskosität nur in der Nähe der Referenztemperatur, die Abweichung nimmt zu ab etwa 800 K und wird maximal bei hohen Temperaturen. Dies wird weiter veranschaulicht in Abb. 4.4. Die beste Übereinstimmung wird durch die VHS-Parameter nach [82] erhalten. Insgesamt ist zu beobachten, dass das variable Starrkugelmodell die experimentell bestimmte Viskosität [84] überschätzt und nicht sehr geeignet ist, den Viskositätsverlauf über größere Temperaturbereiche gut wiederzugeben, was durch die mathematische Einfachheit des Modells erklärt werden kann. Es können für jede Spezies separat Referenzdurchmesser und -temperaturen, aber derzeit nur ein ω -Parameter vorgegeben werden. Dies ist problematisch, da die Viskosität einer jeden Spezies nicht mit identischem ω -Parameter approximiert werden sollte. Deshalb haben Chung et al. [85] das variable Starrkugelmodell in der Art erweitert, dass für jede Spezies ein eigener ω -Parameter vorgegeben werden kann. Das Problem der Interaktion zwischen Teilchen unterschiedlicher Spezies bleibt dadurch jedoch ungeklärt. So hat Nanbu [86] vorgeschlagen, für die Simulation von Gasgemischen Diffusionskoeffizienten heranzuziehen, um daraus die notwendigen

$\omega / -$	$d_{ref} / 10^{-10} m$	T_{ref} / K	Ref.
0.250	3.262	293	[79]
0.186	3.000	300	[80]
0.310	4.040	273	[77]
0.220	3.244	300	[81]
0.310	4.061	273	[82]

Tabelle 4.1.: Typische VHS-Parameter für Argon.

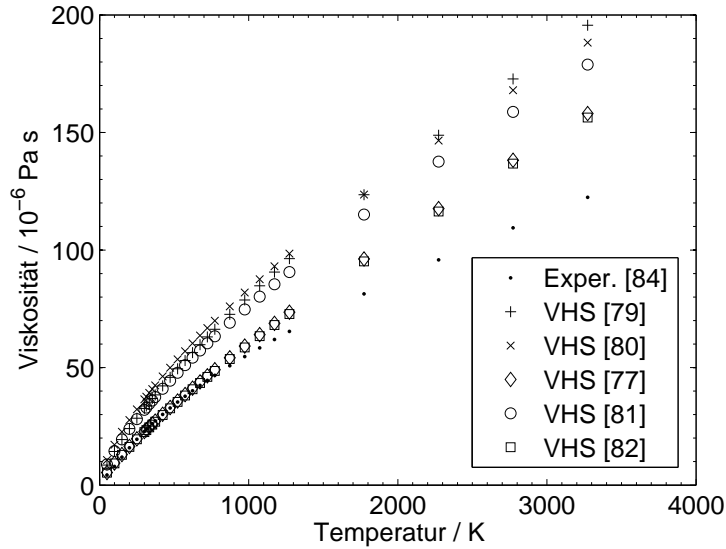


Abbildung 4.4.: Vergleich der Argon-Viskosität für unterschiedliche VHS-Parameter.

VHS-Parameter zu ermitteln. Im Rahmen dieser Arbeit wird als Lösungsansatz die Erweiterung der Potentialmodellierung hin zu repulsiv-attraktiven Potentialen verfolgt. Dadurch wird ein zusätzlicher Parametersatz zur Verfügung gestellt, welcher verwendet werden kann, um den Kollisionsquerschnitt an Viskositäts- und Diffusionsdaten anzupassen.

4.2.3. Verallgemeinertes Starrkugelmodell

Die wesentliche Modellerweiterung im Bereich der Neutralteilcheninteraktionen stellt die Implementierung des verallgemeinerten Starrkugelmodells (*Generalised Hard Sphere - GHS*) dar. Dieses reproduziert ebenfalls isotropes Streuverhalten, allerdings werden jetzt auch die anziehenden Effekte des Interaktionspotentials berücksichtigt. Das zugrunde liegende Lennard-Jones-Potential

$$\Phi(r) = 4\Phi_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (4.28)$$

ist qualitativ in Abb. 4.1 dargestellt. Die Größen Φ_0 und r_0 sind das Potentialminimum sowie der Teilchenabstand, bei dem das Potential zu Null wird. Beispielhaft sind in Tab. 4.2 einige Speziesdaten nach [87, 1] angegeben. Nach Hassan und Hash [88] kann der Kollisionsquerschnitt beim verallgemeinerten Starrkugelmodell dargestellt werden gemäß

$$\sigma_T^{GHS} = r_0^2 \sum_{j=1}^2 \alpha_j \left(\frac{E_c}{\Phi_0} \right)^{-\omega_j} . \quad (4.29)$$

Die ω_j -Koeffizienten resultieren aus dem Potential. Nach [88] gilt für das Lennard-Jones-Potential $\omega_1 = 1/6$ sowie $\omega_2 = 2/3$, hingegen werden die α_j -Koeffizienten aus Viskositäts- und Diffusionsdaten bestimmt. Unter Verwendung der Gln. (3.45), (3.46) und (3.47) erhält man nach etwas länglicher Rechnung die hier dargestellten Kollisionsintegrale des verallgemeinerten Starrkugelmodells:

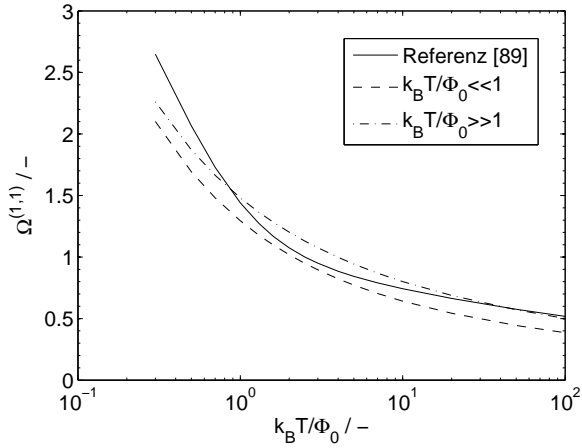


Abbildung 4.5.: Vergleich der α -Werte am Kollisionsintegral für die Diffusion am Beispiel Argon.

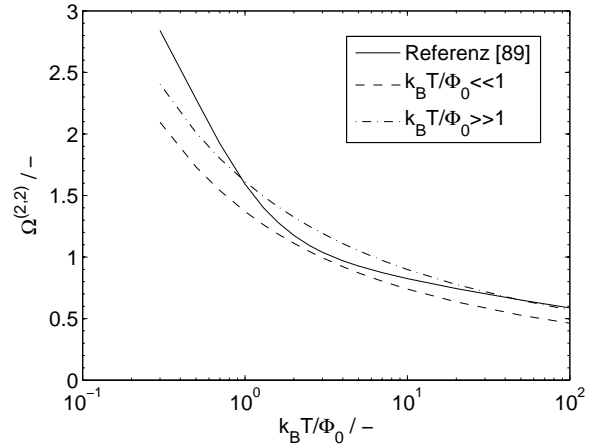


Abbildung 4.6.: Vergleich der α -Werte am Kollisionsintegral für die Viskosität am Beispiel Argon.

$$\Omega^{(1,1)} = \frac{1}{2\pi} \left[\alpha_1 \Gamma(3 - \omega_1) \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_1} + \alpha_2 \Gamma(3 - \omega_2) \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_2} \right], \quad (4.30)$$

$$\Omega^{(2,2)} = \frac{1}{6\pi} \left[\alpha_1 \Gamma(4 - \omega_1) \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_1} + \alpha_2 \Gamma(4 - \omega_2) \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_2} \right]. \quad (4.31)$$

Kunc et al. [89] verwendeten die Kollisionsintegrale (4.30) und (4.31), um mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate auf Basis von tabellierten Kollisionsintegralen unterschiedliche α_j -Parameter zu ermitteln. Dabei haben die Autoren nicht nur die (relative) Stärke des anziehenden Potentials berücksichtigt, sondern auch zwischen einem Gas und einem Gasgemisch unterschieden. Bei niedrigen Temperaturen $k_B T / \Phi_0 \ll 1$ ist der anziehende Teil stark, bei hohen Temperaturen $k_B T / \Phi_0 \gg 1$ ist der anziehende Teil schwach, siehe Tab. 4.3.

Die Kollisionsintegrale (4.30) und (4.31) werden in den Abb. 4.5 und 4.6 mit tabellierten Kollisionsintegralen nach [1, 2] verglichen. Es ist zu erkennen, dass die Approximation auf Basis der schwachen Anziehung nicht nur bei hohen Temperaturen deutlich besser ist, sondern auch im gesamten Temperaturbereich $k_B T / \Phi_0 \leq 400$. Deswegen wird die Formulierung mit der schwachen Anziehung bevorzugt.

Die Berechnung der gaskinetischen Größen verläuft wie beim einfachen und variablen Starrkugel-

Spezies	$\Phi_0 / k_B / K$	$r_0 / 10^{-10} m$
Ar	124	3.418
N ₂	91.5	3.681
O ₂	113	3.433
NO	119	3.47

Tabelle 4.2.: Ausgewählte Speziesparameter für das Lennard-Jones-Potential.

	$k_B T / \Phi_0 \gg 1$	$k_B T / \Phi_0 \ll 1$
Reines Gas	$\alpha_1 = 4.56409$ $\alpha_2 = 2.91719$	$\alpha_1 = 3.67779$ $\alpha_2 = 2.82673$
Gasgemisch	$\alpha_1 = 3.76410$ $\alpha_2 = 2.36174$	$\alpha_1 = 2.83874$ $\alpha_2 = 2.71844$

 Tabelle 4.3.: Die α_j -Parameter für das verallgemeinerte Starrkugelmodell [87].

modell. Der Kollisionsratenkoeffizient ist dann

$$\langle \sigma_T^{GHS} g \rangle = 2r_0^2 \sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m_r}} \left[\sum_{j=1}^2 \alpha_j \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_j} \Gamma(2 - \omega_j) \right] \quad (4.32)$$

und für die mittlere freie Weglänge erhält man

$$\lambda^{GHS} = \frac{1}{\sqrt{2} n r_0^2 \left[\sum_{j=1}^2 \alpha_j \left(\frac{k_B T}{\Phi_0} \right)^{-\omega_j} \Gamma(2 - \omega_j) \right]}. \quad (4.33)$$

Ein analytischer Vergleich mit dem einfachen und variablen Starrkugelmodell auf Basis von Kollisionsquerschnitten und mittleren freien Weglängen ist nicht sinnvoll, da keine vergleichbaren Parametersätze zur Verfügung stehen. Während beim einfachen sowie beim variablen Starrkugelmodell die Kollisionsquerschnitte aus ermittelten Teilchendurchmessern resultieren, basieren die Parameter des verallgemeinerten Starrkugelmodells unmittelbar auf den Kollisionsintegralen für die Diffusion und die Viskosität. Für die Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit nach der Methode der natürlichen Stichprobengröße kann die Ähnlichkeit mit dem Querschnittsmodell genutzt werden:

$$P_c = \sum_{j=1}^2 \beta_{c,j} g^{\phi_{c,j}}. \quad (4.34)$$

Die Vorgehensweise bei der Herleitung der fehlenden Parameter erfolgt aufgrund der Summendarstellung wie in Kap. 4.1.3 beschrieben, man erhält

$$\phi_{c,j} = 1 - 2\omega_j \quad (4.35)$$

und

$$\beta_{c,j} = \frac{N_a N_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{F_{sim} \Delta t}{S_{ab} V_c} C_{ab,j}, \quad (4.36)$$

wobei

$$C_{ab,j} = r_0^2 \alpha_j \left(\frac{m_r}{2\Phi_0} \right)^{-\omega_j}. \quad (4.37)$$

Dies führt auf die Kollisionswahrscheinlichkeit

$$P_c = \frac{N_a N_b}{1 + \delta_{ab}} \frac{F_{sim} \Delta t}{S_{ab} V_c} r_0^2 \sum_{j=1}^2 \alpha_j \left(\frac{m_r}{2\Phi_0} \right)^{-\omega_j} g^{\phi_{c,j}}. \quad (4.38)$$

4.2.4. Isotropes Streumodell

Alle Starrkugelmodelle basieren auf einem isotropen Streumodell. Nach Fasoulas [68] kann unter Verwendung des Zusammenhangs

$$\left(\frac{b}{d_{1,2}}\right)^2 = R, \quad (4.39)$$

wobei $R \in [0, 1]$ eine gleichverteilte Zufallszahl darstellt, eine korrekte Verteilung des Ablenkwinkels berechnet werden. Mit Gl. (3.39) erhält man aus Gl. (4.39) die Relation

$$\cos \chi = 2R - 1. \quad (4.40)$$

Aufgrund der chaotischen Orientierung der Kollisionsebene zu einer raumfesten Referenzebene wird der azimuthale Streuquerschnitt ε bestimmt gemäß $\varepsilon = 2\pi R$.

Die polare Streuisotropie stellt eine Vereinfachung dar, da vor allem bei nicht-kugelsymmetrischen Potentialen eine Energieabhängigkeit der Winkelverteilung auftritt [90]. Die Annahme der (polaren) Isotropie hat allerdings einen geringfügigen Einfluss auf makroskopische Strömungsgrößen [77], so dass sie sowohl bei den Neutralteilchen, als auch bei den inelastischen Ladungsträgerinteraktionen beibehalten wird. Zukünftige Arbeiten sollten das anisotrope Streuverhalten bei bestimmten Prozessen wie die Elektron-Molekül-Streuung berücksichtigen.

4.3. Molekulare Relaxations- und Reaktionsprozesse

Die Überführung der zentralen Kollisions- und Reaktionsroutinen von *LasVegas* nach *PicLas* motiviert eine kurze Einführung in das Gebiet der molekularen Interaktionen. Bei Molekülen kann zusätzlich zum Austausch translatorischer Energie (T) auch der Austausch rotatorischer (R) und vibratorischer (V) Energie erfolgen, siehe Abb. 4.7. Ein derartiger Prozess wird als Relaxation bezeichnet. Ist die Kollisionsenergie ausreichend hoch, so kann es auch zum reaktiven Energieaustausch kommen. Sowohl bei einer Relaxation, als auch bei einer Reaktion wird die Nachstoßenergie auf die verfügbaren Freiheitsgrade verteilt. Das zugrundeliegende Modell wurde ursprünglich von Borgnakke und Larsen [91] eingeführt und hat sich als Standardmodell etabliert. Zentrales Merkmal dieses Modells ist die Verteilung der nach einem Stoß zur Verfügung stehenden Energie beruhend auf Gleichgewichtsverteilungsfunktionen. Die mathematische Herangehensweise soll in diesem Abschnitt nur kurz dargestellt werden. Eine ausführliche Diskussion kann den Arbeiten von Fasoulas [68] und Laux [33] entnommen werden.

4.3.1. Relaxationswahrscheinlichkeiten

Über einen relativ großen Temperaturbereich hinweg können die Relaxationswahrscheinlichkeiten als konstant angenommen werden. In Anlehnung an die Literatur [92, 93] werden folgende Wertebe-

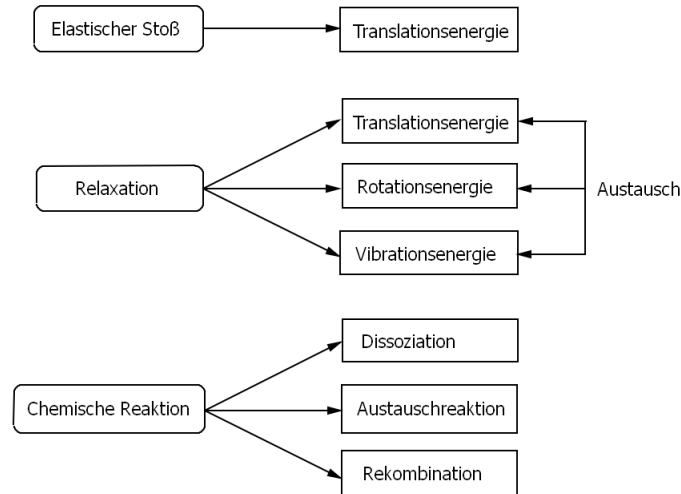


Abbildung 4.7.: Definition der Interaktionsarten auf Basis der Austauschmechanismen bei molekularen Neutralteilchen.

reie zugrunde gelegt:

$$P_R \approx 0.1 \dots 0.2, \quad (4.41)$$

$$P_V \approx 0.002 \dots 0.02. \quad (4.42)$$

Das in *PicLas* implementierte Ablaufschema sieht eine Betrachtung der Vibrationsrelaxation vor der Rotationsrelaxation vor, da für die Relaxationswahrscheinlichkeiten $P_R \gg P_V$ gilt.

4.3.2. Reaktionswahrscheinlichkeiten

Das Chemiemodell umfasst Algorithmen zur Behandlung von Dissoziations-, Austausch- und Rekombinationsreaktionen unter Beteiligung von Atomen und diatomaren Molekülen. An dieser Stelle soll nur kurz auf die Vorgehensweise bei der Bestimmung der Reaktionswahrscheinlichkeiten eingegangen werden. Eine ausführliche Diskussion kann den Arbeiten von Fasoulas [68] und Laux [33] entnommen werden.

Dissoziationsreaktion

Das Schema



beschreibt die Dissoziation eines Moleküls AB in die atomaren Bestandteile A und B durch Kollision mit einem beliebigen Teilchen X . Die entsprechende Ratengleichung lautet

$$\frac{dn_{AB}}{dt} = -n_{AB}n_Xk_f(T), \quad (4.44)$$

wobei $k_f(T)$ den Ratenkoeffizienten in der erweiterten Arrhenius-Darstellung

$$k_f(T) = a_f T^{b_f} \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad (4.45)$$

für die Hinreaktion repräsentiert. Die Größe E_a stellt die Aktivierungsenergie für die Reaktion dar, a_f und b_f sind bekannte Koeffizienten. Zur Bestimmung der instantanen Dissoziationswahrscheinlichkeit P_d wird, wie in Kap. 4.1.3 dargestellt, ein Ansatz für P_d aufgestellt. Dieser wird über eine gleichgewichtsverteilte Energie gemittelt und das Ergebnis mit der analytisch bekannten Gleichgewichtslösung verglichen. Ein Koeffizientenvergleich liefert die gesuchten Koeffizienten. Der von Laux [33] verwendete Ansatz lautet

$$P_d(E_c, E_V) = \beta_d (E_c - E_a)^{\phi_1} E_c^{\phi_2} E_V^{\phi_3}, \quad (4.46)$$

wobei der Term $E_V^{\phi_3}$ den Einfluss der Vibration auf die Dissoziation berücksichtigen soll. Nach Durchführung von Integration und Koeffizientenvergleich erhält man die gesuchten Koeffizienten:

$$\beta_d = \frac{a_f k_B^{1/2-b_f-\omega}}{H_{AB,X}} \frac{\Gamma(\xi_v/2)\Gamma(\phi_3 + \xi_c/2)}{\Gamma(\phi_1 + 1)\Gamma(\phi_3 + \xi_v/2)}, \quad (4.47)$$

$$\phi_1 = b_f - \frac{3}{2} + \omega + \frac{\xi_c}{2}, \quad (4.48)$$

$$\phi_2 = 1 - \frac{\xi_c}{2} - \phi_3. \quad (4.49)$$

Die Größe $H_{AB,X}$ enthält potentialabhängige Informationen. Der Parameter ϕ_3 wird aus einem Vergleich zwischen Simulation und Experiment gewonnen. Haas und Boyd geben in [94] ϕ_3 -Werte für Luftkomponenten an.

Austauschreaktion

Die Berechnung der Reaktionswahrscheinlichkeit P_e für die Austauschreaktion nach dem Ablaufschema



erfolgt wie bei der Dissoziationsreaktion, da bei der Austauschreaktion ebenfalls eine Dissoziation stattfindet. Dies führt zu der bereits bekannten Darstellung

$$P_e(E_c, E_V) = \beta_d (E_c - E_a)^{\phi_1} E_c^{\phi_2} E_V^{\phi_3}. \quad (4.51)$$

Die Parameter sind auch hier durch die Gl. (4.47), (4.48) und (4.49) gegeben.

Rekombinationsreaktion

Bei der Modellierung von Rekombinationsreaktionen nach dem Schema



lautet die Ratengleichung

$$\frac{dn_{AB}}{dt} = n_A n_B n_X k_b(T), \quad (4.53)$$

wobei $k_b(T)$ den Ratenkoeffizienten

$$k_b(T) = a_b T^b \quad (4.54)$$

beschreibt. Verwendet man den Ansatz

$$P_r(E_c) = \beta_r E_c^{\phi_r} \quad (4.55)$$

für die Darstellung der instantanen Rekombinationswahrscheinlichkeit, so kann unter Anwendung der gleichen Methodik wie im Fall der Dissoziation und der Austauschreaktion eine Information über die gesuchten Koeffizienten gefunden werden:

$$\beta_r = \frac{a_b n_X k_B^{1/2-b_b-\omega}}{H_{A,B}} \frac{\Gamma(\xi_X/2 - \omega + 2)}{\Gamma(\phi_r + \xi_X/2 - \omega + 2)}, \quad (4.56)$$

$$\phi_r = b_b - 1/2 + \omega. \quad (4.57)$$

Die vollständigen Herleitungen für die Bestimmung der instantanen Reaktionswahrscheinlichkeiten P_d , P_e und P_r können der Arbeit von Laux [33] und darin aufgeführten Referenzen entnommen werden.

4.4. Elektron-Schwerteilchen-Interaktionen

Der Einfachheit halber wird zunächst angenommen, dass das ablatierte Treibstoffmaterial in voll-dissoziiertem Zustand vorliegt, d.h. alle Partikel im Simulationsgebiet werden als atomare Spezies behandelt. Dies reduziert die auftretenden Speziesarten und erlaubt, die wichtigsten Elementarprozesse in einem solch gearteten Plasma in vier Kategorien einzuteilen:



Gleichung (4.58) repräsentiert den Ionisations- und Rekombinationsprozess, der im Gleichgewicht durch die Saha-Verteilung beschrieben werden kann. Die Reaktionsgleichung für An- und Abregungsprozesse ist durch Gl. (4.59) dargestellt, wobei A^* ein elektronisch angeregtes Atom repräsentiert. Im Gleichgewicht können diese Prozesse durch die Boltzmann-Verteilung beschrieben werden. Die Entwicklung, Implementierung und Verifizierung dieser vier Einzelreaktionsprozesse (elektronenstoßinduzierte Ionisation, Rekombination, An- und Abregung) bilden einen zentralen Bestandteil dieser Arbeit. Der theoretische Hintergrund wird in diesem Abschnitt diskutiert, die Verifizierung erfolgt in Kap. 6.

Bei der dritten Kategorie (4.60) geht es um die (elastische) Elektronenrelaxation auf Basis von Coulomb-Kollisionen. Da dieser Kollisionsprozess üblicherweise auf den kleinsten Zeitskalen abläuft, wird zumeist eine Maxwell-Verteilung der Elektronen angenommen, was eine Fluidannahme

der Elektronen motiviert. Diese Annahme wird in dieser Arbeit (und im Rahmen des in der Einleitung beschriebenen Kooperationsprojektes) nicht getroffen. Da Coulomb-Kollisionen nicht auf die gleiche Weise behandelt werden können wie kurzreichweitige Kollisionsprozesse, wurde eigens ein Fokker-Planck-Löser implementiert, welcher in Kap. 4.5 diskutiert wird.

Diese Arbeit ist u. A. durch die numerische Untersuchung der hochgradig instationären Entladung eines iMPD-Triebwerkes motiviert. Die Energieeinkopplung erfolgt primär über die Elektronen, die durch Elektronenstoßprozesse weitere Teilchen anregen und ionisieren. Somit liegt der Fokus auf kollisionsbasierte Prozesse, so dass im Rahmen dieser Arbeit Strahlungseffekte wie die Spontanemission oder die Strahlungsabsorption aus Konsistenzgründen vernachlässigt werden müssen. Entsprechend werden Strahlungsprozesse nicht im Detail modelliert. Wie später gezeigt werden wird, werden aber stoßinduzierte Emissionsprozesse in so weit berücksichtigt, als dass die instantane Rekombinationswahrscheinlichkeit der Dreikörperrekombination korrekt reproduziert wird. Die Berücksichtigung ist nötig, da die Zwei- und Dreikörperrekombination konkurrierende Prozesse sind.

In zukünftigen Arbeiten sollte zusätzlich die Spontanemission modelliert werden, um z.B. beim hochenthalpen atmosphärischen Wiedereintritt die radiativen Wärmeflüsse, welche einen nicht zu vernachlässigenden Anteil an der integralen Wärmelast ausmachen können, besser voraussagen zu können [4].

4.4.1. Modifikation des Kollisionsmodells

Das variable Starrkugelmodell hat nur einen einzigen ω -Parameter für alle Teilchenpaarungen, was bei manchen Paarungen zu unphysikalischen Kollisionsraten führt. So untersuchten Chung und DeWitt [85] ein modifiziertes Verfahren mit unterschiedlichen ω -Parametern für Gasgemische mit stark unterschiedlichen Teilchenmassen. Dennoch konnte das zugrundeliegende Problem, wie es für das hier entwickelte Partikelverfahren nötig wäre, nicht zufriedenstellend gelöst werden: Die Berechnung des Kollisionsquerschnittes für kontinuumsferne Strömungszustände basiert nach wie vor auf Viskositäts- und eventuell auch auf Diffusionsdaten.

Zur Umgehung der Probleme wurde im Rahmen dieser Arbeit das Kollisionsmodell modifiziert. Zur rein energiebasierten Berechnung der Kollisions- und Reaktionswahrscheinlichkeiten wird für ein untersuchtes Teilchenpaar ein Gesamtquerschnitt

$$\sigma_T(E) = \sum_i \sigma_i(E) \quad (4.62)$$

gebildet, welcher alle modellierten Interaktionsarten i bei der zur Verfügung stehenden Kollisionsenergie beinhaltet. Durch Setzen des VHS-Parameters ω in Gl. (4.6) zu Null entfällt die Energieabhängigkeit des Kollisionsquerschnittes bei der Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit und man kann den (einfachen) Starrkugelquerschnitt durch Gl. (4.62) ersetzen. Dies führt auf den einfachen Zusammenhang

$$P_c = \frac{\beta_c}{C_{ab}} \sigma_T(E) g. \quad (4.63)$$

Die Notwendigkeit einer viskositätsbasierten Korrelation zur Temperatur des Mediums, worauf das variable Starrkugelmodell im Wesentlichen beruht, entfällt vollständig. Der auf diese Weise definierte

Kollisionsquerschnitt ist keine Gleichgewichtsgröße, sofern die verwendeten Einzelquerschnitte mit den üblichen Verfahren² bestimmt werden.

Die Verwendung eines echt energieabhängigen Querschnittes erlaubt prinzipiell, das Anwendungsspektrum des Starrkugelmodells auf Bereiche niedrigerer Temperaturen zu erweitern. Mit dieser elementaren Modifikation und in Kombination mit dem im Folgenden beschriebenen Reaktionsmodell können Reaktionsratenkoeffizienten sehr gut reproduziert werden.

4.4.2. Reaktionsmodell

Zur Berücksichtigung von elektronenstoßinduzierten Prozessen können verschiedene Methoden angewendet werden. Weit verbreitet ist z.B. bei hybriden PIC-DSMC-Verfahren die Verwendung von Ratengleichungen, wobei der Terminus *hybrid* auf die Fluidapproximation des Elektronengases hindeutet.

Die einzelnen Prozesse, ob stoßfrei oder stoßbasiert, werden mit Hilfe von Ratenkoeffizienten berücksichtigt. Die Betrachtung der Elektronen als Fluid erlaubt die Verwendung des Temperaturbegriffes und somit eine zumindest gleichgewichtsnahere Berechnung auf Basis der Elektronentemperatur. So berechnet Celik in [95] die (De-)Population der einzelnen Spezies in jedem Zeitschritt durch Bilanzierung der Quell- und Verlustterme am Beispiel eines Hallionentriebwerkes mit Xenon als Treibstoff. In [96] untersuchten Bogaerts et al. Glimmentladungen auf Basis von Argon mit einem ähnlichen Modell. Diese Art der Modellierung ist allerdings kontinuumstheoretisch. Alternativ können Ratenkoeffizienten gemäß der in Kap. 4.2 beschriebenen Modellierung zur Berechnung instantaner Reaktionswahrscheinlichkeiten zweier Teilchen verwendet werden [43, 97, 98]. Beide Modelle basieren letztlich auf der Annahme einer Gleichgewichtsverteilung.

Eine weitere Methode zur partikelbasierten Berechnung von elektronenstoßinduzierten Prozessen stellt die Maximum-Entropie-Methode dar [99]. Nachteil dieser Methode ist die notwendige Verfügbarkeit experimenteller Daten, die in das Modell einfließen. Die Vermessung geeigneter gleichgewichtsferner Plasmaströmungen ist aufwendig, die erreichbare Messgenauigkeit zum Teil gering.

Das hier vorgeschlagene Reaktionsmodell basiert zunächst auf der Annahme, dass eine Teilchenkollision stattfindet. Dann ist die aktuelle Reaktionswahrscheinlichkeit für die aktuell betrachtete Reaktionsart i

$$P_i = \frac{\sigma_i}{\sigma_T}. \quad (4.64)$$

Allgemein gilt, dass P_i unabhängig von der räumlichen Partikelverteilung in der Zelle ist, sofern die Kollisionsrate korrekt reproduziert wird, da die Paarung randomisiert ist. Eine Reaktion findet statt, falls $P_i > R$ ist. Folgende Überlegung motiviert die Verwendung der an sich abstrakten Größe *Wechselwirkungsquerschnitt*: Ausgehend von einer noch nicht näher spezifizierten Interaktion muss z.B. im Fall einer Elektron-Atom-Paarung eine elastische Streuung, eine Elektronenanregung oder eine Elektronenstoßionisation stattfinden, sofern sich das Atom im Grundzustand befindet. Durch Verhältnisbildung nach Gl. (4.64) erhält die Wirkungsquerschnittsfläche einen Wahrscheinlichkeitscharakter. Wenn also bekannt ist, dass eine Interaktion stattfindet, muss die Wahrscheinlichkeit der

²Vgl. Kap. 4.4.3

Interaktion i dem Verhältnis nach Gl. (4.64) entsprechen, wobei die Summe im Nenner *zwingend* alle relevanten möglichen Interaktionen im betrachteten Energiespektrum enthalten sollte.

Implementierung

Ein effizienter Algorithmus zur Bestimmung des gewünschten Kollisionsevaluierungsverfahrens wurde in das Partikelverfahren *PicLas* implementiert. In klassischen DSMC-Verfahren werden die Totalquerschnitte basierend auf der Speziespaarung berechnet. Entsprechend geht in die P_c -Berechnung primär die Speziesinformation ein. Für das neu entwickelte Reaktionsmodell werden die Querschnitte in Abhängigkeit von den möglichen Interaktionen berechnet, die wiederum von der Paarung der Teilchenarten abhängen. Jede Spezies erhält eine teilchenarttypische Identifikationsnummer *InterID*, siehe Tab. 4.4. Unterschieden wird in dieser Tabelle zwischen Atom (A), Molekül (M), Elektron (e),

Typ	A	M	e	I	M^+	A^*	I^*	M^*	M^{*+}	...
InterID	1	2	4	10	20	40	100	200	400	...

Tabelle 4.4.: Zuordnung Teilchentyp und Identifikationsnummer

atomarem Ion (I), molekularem Ion (M^+), elektronisch angeregtem Atom (A^*), elektronisch angeregtem, atomarem Ion (I^*), elektronisch angeregtem Molekül (M^*) sowie elektronisch angeregtem, molekularem Ion (M^{*+}). Durch Summation der Teilchentypnummern entsteht eine unverwechselbare Paarungstypnummer *p_{type}*, die in eine *select case*-Anweisung eingeht. Eine weitere Fallabfrage ordnet die chemische Spezies basierend auf der Protonenzahl zu. Die Funktionsweise dieses Schemas wurde in [36] verifiziert und bietet zwei wesentliche Vorteile:

- Für jede auftretende Teilchenpaarung kann ein individueller Algorithmus zur Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit verwendet werden. So werden im Fall der Interaktion zwischen Elektronen und Schwerteilchen die Reaktionswahrscheinlichkeiten nach Gl. (4.64) ermittelt, die Neutralteilcheninteraktionen werden nach den in Kap. 4.2 beschriebenen Modellen bestimmt.
- Es ist problemlos möglich, dieses Reaktionsschema zu erweitern sowohl hinsichtlich der auftretenden Teilchen-, als auch bezüglich der Reaktionsarten. So bietet es sich an, die Abfrage der Protonenzahl hinsichtlich der Neutronenzahl zu erweitern, was eine für Kernreaktionen relevante Isotopenunterscheidung erlauben würde.

Teilchenpaarungen und Interaktionsarten

In dieser Arbeit werden die drei folgenden, wesentlichen Teilchenpaarungen und die damit in Zusammenhang stehenden Interaktionsarten berücksichtigt:

$e - A$: Das Atom befindet sich Grundzustand. Es sind drei Interaktionsarten möglich: elastische Streuung, Elektronenanregung sowie Elektronenstoßionisation. Demnach gilt

$$\sigma_T = \sigma_{ela} + \sigma_{exc} + \sigma_{ion}. \quad (4.65)$$

$e - A^*$: Diese Paarung erlaubt folgende Interaktionen: Anregung, Abregung, Ionisation sowie elastische Streuung, d.h.

$$\sigma_T = \sigma_{exc} + \sigma_{dex} + \sigma_{ion} + \sigma_{ela}. \quad (4.66)$$

$e - I$: Bei der (e,I)-Paarung können prinzipiell folgende Interaktionen stattfinden: Elektronenstoßinduzierte Ionisation, Anregung, Coulomb-Streuung sowie Rekombination. Da die Zweikörperrekombination mit der Dreikörperrekombination konkurriert, geht der entsprechende Querschnitt σ_{rad} in die Wahrscheinlichkeitsberechnung ein, auch wenn der radiative Prozess nicht explizit berechnet wird. Der totale Kollisionsquerschnitt lautet damit

$$\sigma_T = \sigma_{cou} + \sigma_{exc} + \sigma_{ion} + \sigma_{rec} + \sigma_{rad}. \quad (4.67)$$

Die benötigten spezies- und modellierungsspezifischen Querschnitte werden im nächsten Abschnitt diskutiert.

4.4.3. Implementierte Wirkungsquerschnitte

Das neu entwickelte Reaktionsmodell für DSMC basiert auf der Verwendung von Querschnittsinformationen. Entsprechend müssen für jede betrachtete Teilchenpaarung und für die daraus resultierenden möglichen Interaktionen die Wirkungsquerschnitte bekannt sein. Verschiedene Verfahren zur Bestimmung dieser Größen haben sich etabliert:

- Teilchenstrahlexperimente [90]: Es werden Ladungsträger beschleunigt und auf ein Ziel geschossen, welches bei dem hier interessierenden Energiebereich in der Regel neutral ist. Dabei wird darauf geachtet, dass im Kollisionsbereich jedes ankommende Teilchen mit maximal einem Zielteilchen kollidiert, da sonst die Winkelinformation verloren geht. Diese ist entscheidend für die Bestimmung des integralen Querschnittes. Die Ein-Kollisionsbedingung ist experimentell nicht immer umsetzbar. Um auch bei Mehrfachkollisionen die Daten interpretieren zu können, untersuchten Braunstein et al. [100] mit quantenmechanisch hergeleiteten Querschnitten, welche Streueffekte bei ihrem Teilchenstrahlexperiment auftreten würden, wenn man den Teilchenfluss ins Mehr-Kollisionsregime erhöhen würde.
- Teilchenschwarmexperimente [101, 102]: Diese Verfahren dienen der Messung von Elektronenstreuquerschnitten an Neutralteilchen. An ein Gemisch aus Elektronen und Neutralteilchen werden externe Felder angelegt, woraufhin sich makroskopische Strömungsgeschwindigkeiten der Ladungsträger ausbilden. Es werden die entsprechenden Drift- und Diffusionsgeschwindigkeiten gemessen und auf Basis des Boltzmann'schen Transportterms ausgewertet. Dabei wird nach einer selbstkonsistenten Lösung der vorgegebenen Querschnittsformen gesucht, für die sich eine eindeutige Lösung für die gemessenen Werte ergibt. Aufgrund der Ausnutzung makroskopischer Effekte basieren Teilchenschwarmexperimente zwangsläufig auf Mehrfachkollisionen.
- ab initio-Methode: Auf Basis numerischer Simulationen quantenmechanischer Systeme, wie sie bei Binärkollisionen modellhaft vorliegen, werden die Wirkungsquerschnitte bestimmt. Die

Lösung der entsprechenden quantenmechanischen Grundgleichungen ist allerdings sehr aufwendig.

- Messung von Transporteigenschaften: Aus gemessenen Viskositäts- und Diffusionsdaten werden nach der in Kap. 4.2.2 und 4.2.3 beschriebenen Methode Kollisionsquerschnitte bestimmt. Wegen der Temperaturabhängigkeit der Transportgrößen skalieren auch die Querschnitte mit der Temperatur. Dieses Verfahren wird primär für neutrale Gase und Binärgemische verwendet.
- Eine weitere Methode ist das Prinzip der Mikroskopischen Reversibilität, welches besagt, dass zwischen paarweise zusammengehörenden Prozessen wie die Ionisation und die Rekombination eine Symmetrie der Reaktions- und Besetzungswahrscheinlichkeiten existiert. Diese äußert sich darin, dass die Wahrscheinlichkeit der Besetzung eines bestimmten Zustandes nach der Reaktion gleich der Wahrscheinlichkeit sein muss, mit der dieser Zustand eine Reaktion verursacht. Im Gleichgewicht hat dies zur Konsequenz, dass die Rate der Besetzung eines Teilchenzustands n , welches aus einem Zustand m kommt, $m \rightarrow n$ gleich der inversen Rate sein muss, $n \rightarrow m$. Dieses Prinzip sowie die Annahme der Gleichgewichtssituation wird häufig zur Bestimmung von Querschnitten für Rückreaktionen verwendet, deren experimentelle Bestimmung sehr aufwendig oder derzeit noch nicht möglich ist [96]. Der entsprechende Zusammenhang lautet allgemein $\sigma_m g_m \sim \sigma_n g_n$ wobei g hier die Entartung der Zustände m und n beschreibt.

Argon

Ein Teil der Entwicklungs- und Verifizierungsarbeiten in dieser Arbeit wurden anhand von Argon durchgeführt, da zum Einen die Kohlenstoff-Fluor-Datenbasis zum Zeitpunkt der Verifizierung noch nicht aufgebaut war und zum Anderen für Argon Daten in ausreichender Menge zur Verfügung standen, die es erlaubten, eine Bewertung des neuen Kollisions- und Reaktionsmodells durchzuführen. Zu diesem Zweck war es ausreichend, Grundzustandsatome und deren Interaktion mit Elektronen zu betrachten.

Streuung: Aufgrund seiner Einfachheit wurde im Fall der elastischen Streuung folgende Formulierung für den Streuquerschnitt σ_{ela} für Argon implementiert [103]:

$$\sigma_{ela}(E_c) = \sqrt{\frac{\pi \alpha_r a_0^3 e^2}{2 \varepsilon_0 E_c}}. \quad (4.68)$$

Darin bedeuten $\alpha_r = \alpha/a_0^3$ und a_0 die relative Polarisierbarkeit des Schwerteilchens und der Bohr-Radius. Der Querschnitt wurde auf Basis der klassischen Physik hergeleitet und ist geeignet, um eine Information über die Größenordnung zu erhalten. Die Gültigkeit ist unter Anderem auf niedrige Elektronendichten beschränkt. Nach [103] gilt (in cgs-Einheiten)

$$n_e < \frac{3}{4\pi} \left(\frac{k_B T_e}{e^2} \right)^3. \quad (4.69)$$

Dies führt bei z.B. $T_e = 10.000 \text{ K}$ zu der Forderung $n_e < 5 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$. Die Teilchendichten typischer DSMC-Anwendungen liegen mehrere Größenordnungen darunter, so auch die in Kap. 2 vorgestellten

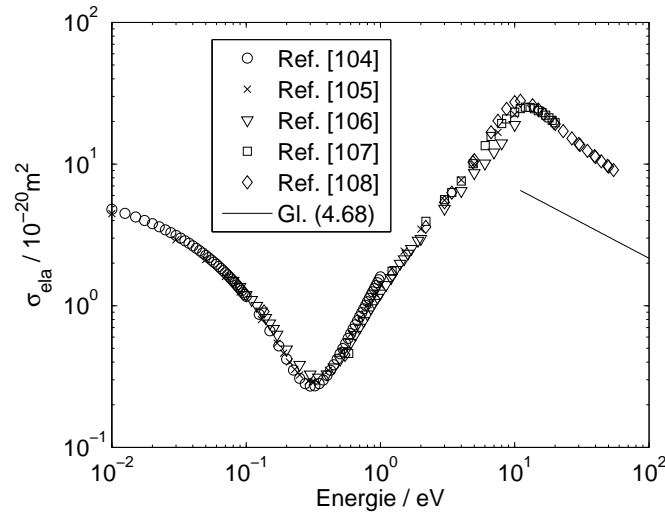


Abbildung 4.8.: Vergleich des elastischen Streuquerschnittes nach (4.68) mit Referenzwerten.

Anwendungen. Eine weitere Bedingung für die Gültigkeit von (4.68) ist $E_c \gg R_y/\alpha_r$, wobei R_y die Rydberg-Energie darstellt. Mit einer relativen Polarisierbarkeit von $\alpha_r = 11.1$ für Argon [54] führt dies aus $E_c \gg 1.225 \text{ eV}$. Somit ist dieser Querschnitt zur Beschreibung der elastischen Elektronenstreuung für die meisten plasmatechnologischen Niederdruckanwendungen aufgrund der Energiebedingung nicht geeignet. Der relative Fehler, welcher aufgrund des eingeschränkten Gültigkeitsbereiches von Gl. (4.68) in die Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit induziert wird, wächst für kleiner werdende Kollisionsenergien. Der Impulsaustausch zwischen Elektronen und Schwerteilchen ist aufgrund des Massenunterschieds jedoch sehr gering, was den absolut auftretenden Fehler aufgrund einer zu hohen Kollisionszahl reduziert.

Details zur Abweichung des elastischen Streuquerschnittes von experimentell gewonnenen Daten von Argon im niederenergetischen Bereich [104, 105, 106, 107, 108] können Abb. 4.8 entnommen werden. Im Bereich zwischen 10 – 100 eV liegen die Referenzgrößen für Argon um einen Faktor 3 – 4 darüber. Im niederenergetischen Bereich sind noch größere Abweichungen zu erwarten, zumal das Minimum, welches bei ca. 0.3 eV vorliegt, nicht abgebildet wird und σ_{ela} bei $E_c = 0$ einen Pol hat.

Dennoch bedeutet das nicht zwangsläufig, dass der verwendete Querschnitt für die elastische Streuung ungeeignet ist. Für die Simulation von Reaktionen im hochenergetischen Bereich können durchaus belastbare Ergebnisse erzeugt werden, wie in Kap. 6.3 gezeigt werden wird. Für Energien außerhalb des Gültigkeitsbereiches von Gl. (4.68) ist die Approximation experimentell gewonnener Daten zu empfehlen und sollte in zukünftigen Arbeiten aufgegriffen werden.

Anregung: Für Edelgasatome wie Argon wird die semi-empirische Dravin-Formel nach [103] verwendet. Für $E_c < E_{e,i}$ ist $\sigma_{exc,i} = 0$, für alle anderen Kollisionsenergien E_c gilt

$$\sigma_{exc,i} = 4\pi a_0^2 \left(\frac{R_y}{E_{e,i}} \right)^2 f_{0-i} \left[\frac{u}{(u+1)^2} \ln(1.25(u+1)) + \frac{0.3}{u+1} \right], \quad (4.70)$$

wobei $E_c \geq E_{e,i}$ und $u = (E_c - E_{e,i})/E_{e,i}$ ist. Die Größe f_{0-i} wird Transitionsstärke genannt und

ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit des Überganges³ von Zustand $0 \rightarrow i$. Die quantenmechanische Herleitung von Gl. (4.70) basiert auf der Bethe-Born-Approximation. Dabei werden nur optisch erlaubte Übergänge (Dipolübergänge) berücksichtigt, es gibt keine Beschränkungen hinsichtlich der Energie des kollidierenden Elektrons. Der eigentliche Anregungsquerschnitt entspricht der Summe der einzelnen Querschnitte, d.h.

$$\sigma_{exc} = \sum_{i=1}^k \sigma_{exc,i} \sim \sum_{i=1}^k \frac{f_{0-i}}{E_{e,i}^2}. \quad (4.71)$$

Dies ist gerechtfertigt, zumal jeder Übergang möglich ist und dementsprechend als separater Prozess im Rahmen der Modellierung (Gl. (4.64)) behandelt wird.

Ionisation: Im Fall von Argon wurde der Ionisationsquerschnitt nach Lotz verwendet [103]. Für $E_c < E_{ion}$ ist er Null und

$$\sigma_{ion}(E_c) = 2.78\pi a_0^2 \frac{R_y^2}{E_c E_{ion}} \zeta \ln \left(\frac{E_c}{E_{ion}} \right), \quad (4.72)$$

falls $E_c > E_{ion}$. Die Größe ζ repräsentiert die Anzahl der äquivalenten⁴ Elektronen in der äußeren Schale des Atoms im Grundzustand. Der Querschnitt (4.72) wurde im Coulomb-Born-Modell hergeleitet und ist gültig bei Plasmen niedriger Elektronendichte gemäß Gl. (4.69).

Kohlenstoff

Streuung: Für die elastische Streuung von Elektronen an neutralen Kohlenstoffatomen unter Berücksichtigung von Polarisierungseffekten wird die Gl. (4.68) verwendet. Nach [109] gilt für die relative Polarisierbarkeit von Kohlenstoffatomen $\alpha_r = 11.46$. Daraus resultiert die Gültigkeitsbedingung $E_c \gg 1.187 \text{ eV}$. Für angeregte Kohlenstoffatome wird vereinfacht angenommen, dass sich die relative Polarisierbarkeit nicht ändert.

Anregung: Die Querschnittsinformationen für die elektronenstoßbasierte Anregung von Kohlenstoffatomen und -ionen wurden der Publikation von Suno und Kato [110] entnommen. Diese Autoren haben Querschnittsdaten, die nach 1985 generiert wurden, zusammengetragen und ausgewertet. Bei elektronischen Übergängen, für die nur Daten aus der Zeit vor 1985 verfügbar waren, wurden die entsprechenden Quellen verwendet, siehe [110] und Verweise darin. Grundsätzlich wurden experimentelle Ergebnisse gegenüber theoretischen Daten bevorzugt und geeignete Approximationsfunktionen hergeleitet. Sofern nur theoretische Daten vorlagen, wurden im niederenergetischen Bereich Daten auf Basis von Close-Coupling- und R-Matrix-Berechnungen [111] verwendet, im hochenergetischen Bereich wurden Ergebnisse der Distorted-Wave- sowie der Coulomb-Born-Methode [112] bevorzugt. Das liegt darin begründet, dass bei Berücksichtigung auch optisch verbotener Übergänge die theoretischen Modelle zu deutlich voneinander abweichenden Ergebnissen führen können.

³In dieser Arbeit werden keine Übergänge zwischen angeregten Argon-Zuständen berücksichtigt.

⁴Äquivalent bedeutet, dass ζ Elektronen die gleichen Haupt- und Nebenquantenzahlen, aber unterschiedliche Magnet- und Spinquantenzahlen besitzen.

Nachfolgend werden die Methoden zur Berechnung der Anregungsquerschnitte kurz dargestellt. Die dabei approximierten Größen sind nicht die Querschnitte, sondern die dimensionslose Kollisionsstärke Ω_{mn} . Aufgrund ihrer Energieabhängigkeit eignet sich die Kollisionsstärke zum Approximieren vorhandener Daten. Der gesuchte Anregungsquerschnitt berechnet sich dann nach [110] aus

$$\sigma_{exc,mn} = 1.1969 \cdot 10^{-19} \frac{\Omega_{mn}^{I,II}}{g_m E_c}, \quad (4.73)$$

wobei g_m die Entartung des initialen Zustandes m angibt. Durch den konstanten Vorfaktor wird der Anregungsquerschnitt in $[m^2]$ berechnet, wenn die Energie in $[eV]$ eingesetzt wird. Führt man noch die dimensionslose Energie

$$X = \frac{E_c}{E_{mn}} \quad \text{mit } X > 1 \quad (4.74)$$

ein, wobei E_{mn} die Energiedifferenz der zwei Zustände m und n beschreibt, so lassen sich zwei Funktionen für die Übergänge angeben. Typ I hat die Struktur

$$\Omega_{mn}^I(X) = \tilde{A} + \frac{\tilde{B}}{X} + \frac{\tilde{C}}{X^2} + \frac{\tilde{D}}{X^3} + \tilde{E} \ln X, \quad (4.75)$$

wobei $\tilde{A} \dots \tilde{E}$ bekannte Koeffizienten sind. Bei den Daten, die nicht mit dieser Gleichung ausreichend gut approximiert werden konnten, wurde Typ II verwendet:

$$\Omega_{mn}^{II}(X) = \frac{\tilde{A}}{X^2} + \tilde{B}e^{-\tilde{F}X} + \tilde{C}e^{-2\tilde{F}X} + \tilde{D}e^{-3\tilde{F}X} + \tilde{E}e^{-4\tilde{F}X}. \quad (4.76)$$

Typ II enthält einen zusätzlichen Koeffizienten \tilde{F} .

Manche Datensätze lagen nicht als Querschnitt, sondern als Ratenkoeffizient vor. Deshalb wurde die Kollisionsstärke basierend auf dem Ansatz

$$\langle \sigma v \rangle = \frac{8.010}{g_m \sqrt{T_e}} e^{-Y} \gamma \quad (4.77)$$

integriert und anschließend angenähert, wobei die Temperatur hier ebenfalls in $[eV]$ eingesetzt wird. Die Größe γ lässt sich darstellen in der Form

$$\gamma = Y e^Y \int_1^{\infty} \Omega_{mn} e^{-XY} dX \quad \text{mit } Y = \frac{E_{mn}}{T_e}. \quad (4.78)$$

Daraus ergibt sich für Typ I folgende Darstellung:

$$\gamma = Y \left[\left(\frac{\tilde{A}}{Y} + \tilde{C} \right) + \frac{\tilde{D}}{2} (1 - Y) + e^Y E_1(Y) \left(\tilde{B} - \tilde{C}Y + \frac{\tilde{D}Y^2}{2} + \frac{\tilde{E}}{Y} \right) \right]. \quad (4.79)$$

Hierbei ist $E_1(Y)$ definiert als

$$E_1(Y) = \int_Y^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt. \quad (4.80)$$

Für Typ II erhält man

$$\begin{aligned} \gamma &= \tilde{A}Y (1 - e^Y E_1(Y)Y) \\ &+ \left[\frac{\tilde{B}e^{-\tilde{F}}}{\tilde{F} + Y} + \frac{\tilde{C}e^{-2\tilde{F}}}{2\tilde{F} + Y} + \frac{\tilde{D}e^{-3\tilde{F}}}{3\tilde{F} + Y} + \frac{\tilde{E}e^{-4\tilde{F}}}{4\tilde{F} + Y} \right] Y. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Die meisten Datensätze wurden mit Hilfe von Gl. (4.75) approximiert [110]. Wo auch Gl. (4.76) ungeeignet war, wurde mit den Formulierungen (4.79) und (4.81) gearbeitet. In manchen Fällen liegen in der Nähe des Anregungslimits Resonanzen vor. Da diese sehr schwer zu approximieren sind, werden die Bereiche mit Hilfe von Geraden angenähert:

$$\Omega_R = \tilde{P}X + \tilde{Q} \quad \text{für } 1 \leq X \leq X_1. \quad (4.82)$$

Hier stellen X_1 , \tilde{P} und \tilde{Q} die obere Grenze des Resonanzbereiches sowie die entsprechenden Funktionskoeffizienten zur Berechnung der Kollisionsstärke im Resonanzbereich dar. Sämtliche Koeffizienten können [110] entnommen werden.

Ionisation: Die Ionisationsquerschnitte für Kohlenstoffatome und -ionen basieren auf Anpassungsfunktionen, die wiederum auf sehr vielen gesammelten experimentellen und theoretischen Daten beruhen [110]. Die auftretenden Fehler bezüglich der verwendeten Originaldaten liegen dabei zwischen 0.1 % und 1.46 %. Der Ionisationsquerschnitt berechnet sich aus

$$\sigma_{ion}(E_c) = \frac{10^{-17}}{E_{ion}E_c} \left[A_1 \ln \left(\frac{E_c}{E_{ion}} \right) + \sum_{k=2}^N A_k \left(1 - \frac{E_{ion}}{E_c} \right)^{k-1} \right]. \quad (4.83)$$

Die Energiegrößen werden auch hier in [eV] eingesetzt, die A_k -Koeffizienten sind [110] zu entnehmen.

Abregung: Für die Abregung aus einem höher gelegenen Zustand m in einen niedriger gelegenen Zustand n folgt nach Bogaerts et al. [96]

$$\sigma_{dex}(m, n, E_c) = \frac{g_n}{g_m} \frac{E_c}{E_c - E_{mn}} \sigma_{exc}(n, m, E_c). \quad (4.84)$$

Zwar arbeiteten die Autoren mit Argon, allerdings beruht die Herleitung von Gl. (4.84) auf dem Prinzip der mikroskopischen Reversibilität. Dieses ist vollkommen unabhängig von der betrachteten Spezies, so dass hier der gleiche Ausdruck für die Abregung von Kohlenstoffteilchen verwendet wird.

Dreikörperrekombination: Auch bei der Dreikörperrekombination wird ein Querschnitt verwendet, welcher nach dem Prinzip der mikroskopischen Reversibilität ermittelt wurde, siehe [96]:

$$\sigma_{rec}(0, E_c) = \frac{g^{(j-1)+}}{2g_0^{(j)+}} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k_B T_e} \right)^{3/2} n_e \frac{E_c}{E_c - E_{ion,0}} \sigma_{ion}(0, E_c). \quad (4.85)$$

Darin beschreibt $()^+$ die $()$ -te Ionisationsstufe. Wie zu erkennen ist, erfolgt die Rekombination immer auf den Grundzustand, da der Ionisationsquerschnitt, der in die Berechnung eingeht, sich ebenfalls in dieser Darstellung auf die Grundzustandsionisation bezieht. Dennoch erlaubt dieser Ansatz prinzipiell die Rekombination in einen angeregten Zustand. Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit allerdings

nicht angestrebt, da die Abregung in einen angeregten Zustand einen erheblich höheren Verifizierungsaufwand erforderlich macht, siehe Kap. 6. Gleichung (4.85) erfordert zusätzlich die Berechnung der Elektronentemperatur. Dies ist eine Konsequenz des Modellierungsansatzes nach [96], wonach für das freie Elektron eine Energie von $E_e = 0$ angenommen wird.

Zweikörperrekombination⁵: Auch hier erfolgt die Berechnung des Photorekombinationsquerschnittes σ_{rad} auf Basis des Prinzips der mikroskopischen Reversibilität. Da Photonen bisher im DSMC-Verfahren nicht berücksichtigt werden, wird ein Fortran-Programm zur Berechnung der Photoionisationsquerschnitte verwendet, welches im Rahmen von [113] entstanden ist und entsprechen portiert und implementiert wurde. Es enthält geeignete Approximationen für die Elemente des *Opacity Projects* [114], dazu zählen auch Kohlenstoff und Fluor sowie deren Ionen. In Anlehnung an die Literatur [96] lautet die Querschnittsgleichung

$$\sigma_{rad}(0, E_c) = \frac{g^{(j-1)+}}{2g_0^{j+}} \frac{E_c^2}{m_e c^2} \frac{1}{E_c - E_{ion,0}} \sigma_{phion}(0, \nu). \quad (4.86)$$

Aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus kann das Elektron als ankommende elektromagnetische Welle mit $E_c = h\nu$ mit ν als Frequenz betrachtet werden.

Coulomb-Streuung: Bei einer (e, I) -Paarung stellt die Berechnung des Coulomb-Querschnittes die größte Unsicherheit dar, da durch diesen Ansatz eine prinzipiell auf Mehrfachkollisionen basierende Interaktion in eine Formulierung gebracht wird, die eigentlich nur für Binärkollisionen geeignet ist. Es ist bekannt, dass σ_{cou} aufgrund der endlosen Reichweite des elektrostatischen Potentials divergiert. Durch Verwendung vereinfachender Annahmen wird die analytische Berechnung eines totalen Stoßquerschnittes ermöglicht. Etabliert haben sich zwei Ansätze: Die Definition eines minimalen Streuwinkels χ_{min} bei der Integration des differentiellen Coulomb-Querschnittes

$$\frac{d\sigma(E, \chi)}{d\Omega} = \frac{Z_i^2 e^4}{(16\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\chi}{2} E^2} \quad (4.87)$$

sowie die Definition einer maximalen Interaktionsreichweite b_{max} , die häufig mit der Debye-Länge λ_D identifiziert wird. Diese beschreibt i. A. die Größe der Umgebung eines Ladungsträgers, in der die angenommene Quasineutralität des Plasmas aufgrund der thermischen Bewegung umgebender Ladungsträger aufgehoben sein kann. Die allgemeine Definition lautet

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 \left(n_e + T_e \sum_i \frac{n_i Z_i^2}{T_i} \right)}}. \quad (4.88)$$

Eine weitere plasmaphysikalisch wichtige Größe ist die Landau-Länge λ_L . Diese beschreibt, ab welchem Teilchenabstand die thermische Energie zweier Ladungsträger gleich der elektrostatischen potentiellen Energie dieser Ladungsträger ist. Im Vakuum gilt

$$\lambda_L = \frac{|Z_1 Z_2| e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}. \quad (4.89)$$

⁵Auch Strahlungs- oder Photorekombination genannt.

Setzt man Debye- und Landau-Länge zueinander ins Verhältnis, führt dies auf den Coulomb-Logarithmus $\ln \Lambda = \ln(\lambda_D/\lambda_L)$. In [115] diskutiert Jahn unterschiedliche elektrische Antriebssysteme, darunter auch iMPD-Triebwerke. Ein typischer Wert für den Coulomb-Logarithmus bei Plasmen elektrischer Antriebssysteme ist $\ln \Lambda \approx 10$. Damit und mit

$$\sigma_{cou} = \pi \lambda_D^2 \quad (4.90)$$

ergibt sich folgende implementierte Vereinfachung:

$$\sigma_{cou} \approx 6.5 \cdot 10^{-17} \frac{Z_i^2}{E_c^2}. \quad (4.91)$$

Hierbei ist die Kollisionsenergie in $[eV]$ einzusetzen.

Fluor

Streuung: Der elastische Streuquerschnitt für Elektronen, die mit Fluoratomen kollidieren, berechnet sich gemäß Gl. (4.68). Nach [109] gilt für die relative Polarisierbarkeit von Fluoratomen $\alpha_r = 3.266$. Daraus resultiert die Gültigkeitsbedingung $E_c \gg 4.164 eV$. Für angeregte Fluoratome wird vereinfacht angenommen, dass sich die relative Polarisierbarkeit nicht ändert.

Anregung: In [116] sind Kollisionsstärken als Ergebnis von R-Matrix-Kalkulationen für alle Übergänge der 11 bekannten Zustände in Fluoratomen angegeben. Allerdings sind die Energiebereiche begrenzt auf $16.2 - 40.8 eV$, wobei sich die untere Energiegrenze mit der oberen Grenze des betrachteten Energiebereiches beim iMPD-Triebwerk überschneidet. Zu Testzwecken wurden die Kollisionsstärken implementiert und nach Gl. (4.73) in eine Querschnittsinformation umgewandelt. Dieser Ansatz ist hochgradig experimentell und sollte lediglich für Verifizierungszwecke hinsichtlich der Datenbank verwendet werden. Ohne weiterführende Untersuchungen sollten keine Anwendungen damit gerechnet werden.

Ionisation: Für Fluor wurden lediglich Querschnittsinformationen für die einfache Ionisation von neutralen Fluoratomen im Grundzustand identifiziert [117]. Die Querschnitte sind für $10 - 200 eV$ angegeben, allerdings wurden Daten nur bis $100 eV$ implementiert, da dies den betrachteten Energiebereich beim iMPD-Triebwerk bereits übersteigt. Die angegebenen Datenpunkte wurden mit Hilfe von Polynomfunktionen angenähert und implementiert. In einigen Fällen wurde linear zwischen den Datenpunkten interpoliert. Auch in diesem Fall kann eine Verwendung der generierten Querschnittsdaten für die Fluorionisation für Anwendungen nicht empfohlen werden.

Schlussbemerkung: Aufgrund des Mangels an Wirkungsquerschnitten werden die eigens generierten Querschnittsdaten für die elektronenstoßinduzierte Anregung sowie Ionisation von Fluoratomen als unzuverlässig bewertet und hier nicht weiter diskutiert. Die Implementierung der Wechselwirkungsquerschnitte erfolgt zu Testzwecken. Die Ergebnisse in Kap. 6 bestätigen die unzureichende Qualität der Querschnitte für die reaktiven Interaktionen.

4.5. Coulomb-Kollisionen

Coulomb-Kollisionen sind Mehrkörperkollisionen und basieren auf der Rutherfordstreuung. Sie sind von den Binärkollisionen zu unterscheiden, da das zugrunde liegende elektrostatische Coulomb-Potential wegen der $1/r$ -Abhängigkeit langreichweitig ist und ein geladenes Teilchen mit allen anderen Ladungsträgern in der näheren Umgebung interagiert. Für eine einzelne positive Ladung im Vakuum gilt

$$\Phi(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}. \quad (4.92)$$

Die Reichweite der Interaktion wird in einem Plasma durch den Effekt der Debye-Abschirmung begrenzt. Zur Modellierung der effektiven Reichweite des Coulomb-Potentials kann ein *Cut-off*-Wert definiert werden, wobei dieser üblicherweise der Debye-Länge λ_D entspricht. Mit größerem Abstand zur Testladung erfährt dessen Potential eine exponentielle Dämpfung gemäß

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) & \text{für } r < \lambda_D, \\ 0 & \text{für } r > \lambda_D. \end{cases} \quad (4.93)$$

Da die Reichweite des Potentials mathematisch nach wie vor unendlich ist, wird für praktische Zwecke das Potential bei $r = \lambda_D$ abgeschnitten.

4.5.1. Theorie des kumulativen Streuwinkels

Eine Mehrkörperkollision lässt sich vereinfacht betrachten als eine sehr schnelle Abfolge vieler Zweikörperkollisionen mit kleinen Streuwinkeln χ . Nach N Zweikörperkollisionen liegt ein kumulativer Streuwinkel χ_N vor. Ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für dessen Winkelverteilung

$$F(\chi_N) = 2\pi \sin \chi_N f(\chi_N) \quad (4.94)$$

bekannt, so kann daraus ein Streuwinkel für eine Mehrkörperkollision bestimmt werden. Hierzu hat Nanbu [30, 31] eine Methode zur Behandlung der Gruppierungseigenschaft von Coulomb-Kollisionen vorgeschlagen, bei der es um die Bestimmung der gesuchten Verteilungsfunktion $f(\chi_N)$ geht. Ausgangspunkt ist die Simulation einer Vielzahl binärer Coulomb-Kollisionen, wobei der polare Streuwinkel χ einer jeden Kollision berechnet und der kumulative Streuwinkel χ_N als Funktion der Kollisionszahl bestimmt wird.

Dafür wird zunächst eine Koordinatentransformation in einem kartesischen Koordinatensystem xyz durchgeführt [30]. Die Drehung ist eine Kombination aus drei hintereinander folgenden Einzeldrehungen, wobei die ursprünglichen Einheitsvektoren $\vec{e}_1^{(0)}$, $\vec{e}_2^{(0)}$ und $\vec{e}_3^{(0)}$ lauten. Bei der ersten Drehung dreht die z -Achse des xyz -Systems um den Winkel ϕ_1 . Danach dreht das neue $x'y'z'$ -System mit $z' = z$ um die y' -Achse um den Winkel θ_1 in das $x''y''z''$ -System, wobei $y'' = y'$ ist. Bei der letzten Drehung dreht das Koordinatensystem um den Winkel $-\phi_1$ um die $z'' = z'''$ -Achse. Damit zeigt z''' in Richtung $\vec{e}_3^{(1)}$. Die (erste) Dreifachdrehung gemäß

$$\vec{e}_j^{(1)} = A^{(1)} \vec{e}_i^{(0)} = A(\theta_1, \phi_1) \vec{e}_i^{(0)} \quad (4.95)$$

kann durch folgende Drehmatrix beschrieben werden:

$$A(\theta_n, \phi_n) = \begin{pmatrix} \cos \theta_n \cos^2 \phi_n + \sin^2 \phi_n & (\cos \theta_n - 1) \sin \phi_n \cos \phi_n & -\sin \theta_n \cos \phi_n \\ (\cos \theta_n - 1) \sin \phi_n \cos \phi_n & \cos \theta_n \sin^2 \phi_n + \cos^2 \phi_n & -\sin \theta_n \sin \phi_n \\ \sin \theta_n \cos \phi_n & \sin \theta_n \sin \phi_n & \cos \theta_n \end{pmatrix}. \quad (4.96)$$

Die Indizes i, j und n beschreiben Koordinatenrichtungen sowie die n -te Koordinatentransformation. Wird nun angenommen, dass $\vec{e}_3^{(0)} = \vec{g}_0/g$ und $\vec{e}_3^{(1)} = \vec{g}_1/g$ sind, dann ist $\chi_1 = \theta_1$ der polare Streuwinkel dieser ersten Binärkollision.

Diese Dreifachdrehung kann sukzessive durchgeführt werden, wobei für die zweite Kollision Gleiches gilt:

$$\vec{e}_j^{(2)} = A^{(2)} \vec{e}_i^{(1)} = B^{(2)} \vec{e}_i^{(0)}. \quad (4.97)$$

Hierbei sind $B^{(2)} = A^{(2)} A^{(1)}$ und $A^{(2)} = A(\theta_2, \phi_2)$. Sind also (θ_1, ϕ_1) sowie (θ_2, ϕ_2) bekannt, so ist auch $B^{(2)}$ bekannt. Die Größen $B_{31}^{(2)}$, $B_{32}^{(2)}$ und $B_{33}^{(2)}$ entsprechen den Komponenten von $\vec{e}_3^{(2)}$ im ursprünglichen $(\vec{e}_1^{(0)} \vec{e}_2^{(0)} \vec{e}_3^{(0)})$ -System:

$$B_{31}^{(2)} = \sin \chi_2 \cos \varepsilon_2, \quad (4.98)$$

$$B_{32}^{(2)} = \sin \chi_2 \sin \varepsilon_2, \quad (4.99)$$

$$B_{33}^{(2)} = \cos \chi_2. \quad (4.100)$$

Bei Fortsetzung dieser Prozedur ergeben sich die polaren Winkel χ_3, χ_4, \dots , so dass nach N Kollisionen ein polarer Gesamtstreuwinkel χ_N resultiert. Unter der Annahme kleiner polarer Einzelstreuwinkel θ_n kann ein analytischer Ausdruck für χ_N hergeleitet werden. Gleichung (4.97) wird in verallgemeinerter Form geschrieben als

$$\vec{e}_i^{(n)} = A^{(n)} \vec{e}_i^{(n-1)} = B^{(n)} \vec{e}_i^{(0)}. \quad (4.101)$$

Dabei ist n mit $0 < n \leq N$ der Index für die aktuelle Binärkollision. Führt man noch die Abkürzung

$$G_i^{(n)} = A_{3i}^{(n)} = (\sin \theta_n \cos \phi_n, \sin \theta_n \sin \phi_n, \cos \theta_n) \quad (4.102)$$

ein, so führt dies mit $\hat{g}_n = \vec{g}_n/g = \vec{e}_3^{(n)}$ zu

$$\begin{aligned} \hat{g}_n &= G_i^{(n)} \vec{e}_3^{(n-1)} \\ &= G_i^{(n)} [A^{(n-1)} A^{(n-2)} \dots A^{(1)}]_{ij} \vec{e}_3^{(0)}. \end{aligned} \quad (4.103)$$

Dementsprechend ergibt sich der jeweilige kumulative Streuwinkel aus

$$\begin{aligned} \cos \chi_n &= \hat{g}_n \vec{e}_3^{(0)} \\ &= G_i^{(n)} [A^{(n-1)} A^{(n-2)} \dots A^{(1)}]_{i3}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

Führt man nun eine Taylorreihenentwicklung von $A^{(n)}$ um θ_n durch und vernachlässigt Terme der Ordnung $O(\theta_n^3)$ und höher, so erhält man nach kurzer Rechnung folgende Darstellung:

$$A^{(n)} = I + \theta_n C^{(n)} - \frac{1}{2} \theta_n^2 D^{(n)}. \quad (4.105)$$

Darin sind I die Einheitsmatrix und $C^{(n)}$ und $D^{(n)}$ Matrixfunktionen, die von $\xi_n = \cos \phi_n$ sowie $\eta_n = \sin \phi_n$ abhängen:

$$C^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\xi_n \\ 0 & 0 & -\eta_n \\ \xi_n & \eta_n & 0 \end{pmatrix},$$

$$D^{(n)} = \begin{pmatrix} \xi_n^2 & \xi_n \eta_n & 0 \\ \xi_n \eta_n & \eta_n^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Damit lässt sich unter wiederholter Vernachlässigung der Terme von der Ordnung $O(\theta_n^3)$ und höher folgender Zusammenhang berechnen:

$$A^{(n-1)} A^{(n-2)} \dots A^{(1)} = I + \sum_{k=1}^{n-1} \theta_k C^{(k)} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \theta_k^2 D^{(k)} + \sum_{k=2}^{n-1} \sum_{l=1}^{k-1} \theta_k \theta_l C^{(k)} C^{(l)}. \quad (4.106)$$

Für kleine θ_n erhält man

$$G_i^{(n)} = [\theta_n \xi_n, \theta_n \eta_n, 1 - \theta_n^2/2]. \quad (4.107)$$

Gleichung (4.106) und (4.107) führen nach Einsetzen in Gl. (4.104) auf den kumulierten polaren Streuwinkel χ_N nach N Kollisionen:

$$\sin^2 \frac{\chi_N}{2} = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \theta_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=2}^N \sum_{l=1}^{k-1} \theta_k \theta_l \cos(\phi_k - \phi_l). \quad (4.108)$$

Im Rahmen dieser Herleitung wird angenommen, dass $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k, \dots, \theta_N \ll 1$ gilt. Dies ist im Rahmen der Kleinwinkelstreuung bei Coulomb-Interaktionen gültig. Die $\{\theta, \phi\}$ -Winkelpaare sind zufallsbasiert, wobei für ein statistisches Modell (bzw. bei Annahme von chaotischen, unkorrelierten Systemen) nicht nur die θ_k -Winkel voneinander unabhängig sind und einem bestimmten Wahrscheinlichkeitsgesetz gehorchen, sondern es wird auch angenommen, dass die Wertemenge $\{\theta_k\}$ von der Wertemenge $\{\phi_k\}$ unabhängig ist.

Die Berechnung des Erwartungswertes von Gl. (4.108) führt auf die vereinfachte Darstellung

$$\left\langle \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \right\rangle = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \langle \theta_k^2 \rangle, \quad (4.109)$$

da der azimuthale Streuwinkel ϕ gleichförmig zwischen $[0, 2\pi]$ verteilt ist und somit der zweite Term auf der rechten Seite von Gl. (4.108) verschwindet. Werden außerdem die Paarmengen $\{\theta_k, \phi_k\}$ nicht als Zufallsgrößen sondern als deren Realisierungen interpretiert, so kann $\langle \theta_k^2 \rangle$ als Mittelwert über viele Kollisionen aufgefasst werden. Alle Einzelstreuwinkel θ folgen dem gleichen Verteilungsgesetz, was wegen $\langle \theta_1 \rangle = \langle \theta_2 \rangle = \dots$ auf

$$\left\langle \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \right\rangle = \frac{1}{4} \langle \theta_1^2 \rangle N \quad (4.110)$$

führt. Für $N \rightarrow \infty$ divergiert die rechte Seite, obwohl die linke Seite kleiner Eins ist. Somit ist Gl. (4.110) nur bedingt anwendbar. Allerdings ist bekannt, dass bei großen N die Streuung isotrop

wird, d.h. für den Erwartungswert gilt dann $\langle \sin^2 \chi_N / 2 \rangle = 1/2$ bzw. $\chi_N = \pi/4$. Nach [30] kann die Entwicklung des Erwartungswertes in Abhängigkeit von N sehr gut durch

$$\left\langle \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} [1 - \exp(-\tau)] \quad (4.111)$$

wiedergegeben werden. Die Größe τ wird als Isotropieparameter bezeichnet, da sie als Maß für die Streuisotropie bezeichnet werden kann. Dieses gehorcht der Gleichung

$$\tau = \frac{1}{2} \langle \theta_1^2 \rangle N. \quad (4.112)$$

Aus der Literatur, siehe z.B. [54], ist der analytische Ausdruck für $\langle \theta_1^2 \rangle$ bekannt,

$$\langle \theta_1^2 \rangle = 2 \left(\frac{b_0}{b_{max}} \right)^2 \ln \Lambda. \quad (4.113)$$

Hierbei ist der minimale Stoßparameter $b_0 = |q_\alpha q_\beta| / 2\pi \varepsilon_0 m_r g^2$. Aus Gl. (4.112) und Gl. (3.50) folgt mit Gl. (4.91)

$$\tau = \frac{\ln \Lambda}{4\pi} \left(\frac{q_\alpha q_\beta}{\varepsilon_0 m_r} \right)^2 n_\beta g^{-3} \Delta t, \quad (4.114)$$

wobei q_α und q_β die der Spezies α und β zugeordneten Ladungen darstellen. Prinzipiell gibt es also keine Beschränkungen bei der Wahl des Zeitschrittes. Besonders wenn man die Dynamik eines Relaxationsprozesses im Detail studieren möchte, empfiehlt sich die Wahl eines nicht zu großen Zeitschrittes.

Die Wahrscheinlichkeit, dass \vec{g}_N in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreut wird, entspricht $f(\chi_N) d\Omega$, die Normierung führt erwartungsgemäß auf

$$2\pi \int_0^\pi f(\chi_N) \sin \chi_N d\chi_N = 1. \quad (4.115)$$

Nach [30] kann die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\chi_N)$ als Funktion von $\cos \chi_N$ in ausreichender Genauigkeit durch einen exponentiellen Ansatz approximiert werden, der mit Gl. (4.115) schließlich auf

$$f(\chi_N) = \frac{A}{4\pi \sinh A} \exp(A \cos \chi_N) \quad (4.116)$$

führt. Zusätzlich folgt aus Gl. (4.111)

$$2\pi \int_0^\pi f(\chi_N) \sin^2 \frac{\chi_N}{2} \sin \chi_N d\chi_N = \frac{1}{2} [1 - \exp(-\tau)]. \quad (4.117)$$

Damit und mit Gl. (4.116) erhält man für A die Relation

$$\coth A - A^{-1} = \exp(-\tau). \quad (4.118)$$

Somit ist Gl. (4.94) definiert, wenn die Anzahl der Binärkollisionen N , die zu einer kumulativen Kollision zusammengefasst werden, bekannt ist. Damit Gl. (4.118) nicht während der Laufzeit des

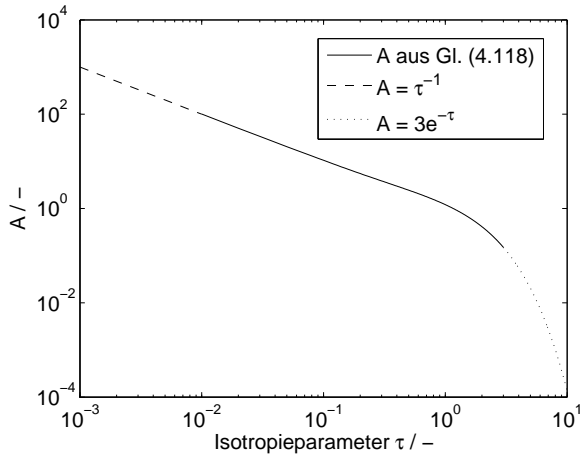


Abbildung 4.9.: Die Größe A als Funktion des Isotropieparameters τ .

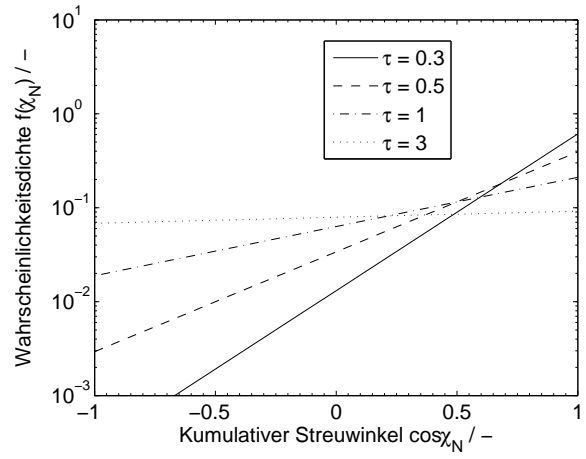


Abbildung 4.10.: Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichten für unterschiedliche Isotropieparameter und Streuwinkel.

Programms gelöst werden muss, wurden Wertepaare tabelliert, zwischen denen linear interpoliert wird, siehe Tab. B.1 im Anhang. Für alle anderen τ gilt

$$A = \begin{cases} \tau^{-1} & \text{für } \tau < 0.01, \\ 3e^{-\tau} & \text{für } \tau > 3. \end{cases} \quad (4.119)$$

Im ersten Fall beträgt der Fehler maximal 0.5%, im zweiten Fall 0.15%. Eine Darstellung von $A(\tau)$ ist in Abb. 4.9 zu sehen. Wie man [30] entnehmen kann, ist die Genauigkeit der in Abb. 4.10 dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion nach Gl. (4.116) für viele Einzelkollisionen hoch. Die durch Simulation der Einzelkollisionen ermittelte Winkelverteilungsfunktion weist bei niedrigen Kollisionszahlen ($N = 100$) allerdings kein lineares Verhalten auf. Daher sollte in zukünftigen Arbeiten die Qualität der verwendeten Verteilungsfunktion gerade in Bereich niedriger Kollisionszahlen N erhöht werden.

Für die Berechnung der Nachstoßgeschwindigkeiten wird nun ein geeigneter Streuwinkel nach dem Algorithmus

$$\cos \chi_N = A^{-1} \ln (e^{-A} + 2R \sinh A) \quad (4.120)$$

bestimmt. Auch hier ist R eine gleichverteilte Zufallszahl gemäß $0 < R < 1$. Mit dieser Information kann dem auszuwertenden Teilchenpaar eine neue Relativgeschwindigkeit bzw. den einzelnen Teilchen jeweils eine neue Absolutgeschwindigkeit zugeordnet werden:

$$\vec{v}'_{\alpha} = \vec{v}_{\alpha} - \frac{m_{\beta}}{m_{\alpha} + m_{\beta}} [\vec{g}(1 - \cos \chi_N) + \vec{h} \sin \chi_N] \quad (4.121)$$

$$\vec{v}'_{\beta} = \vec{v}_{\beta} + \frac{m_{\alpha}}{m_{\alpha} + m_{\beta}} [\vec{g}(1 - \cos \chi_N) + \vec{h} \sin \chi_N]. \quad (4.122)$$

Die kartesischen Komponenten von \vec{h} ergeben sich gemäß

$$h_x = g_\perp \cos \varepsilon \quad (4.123)$$

$$h_y = -(g_x g_y \cos \varepsilon + g g_z \sin \varepsilon) / g_\perp \quad (4.124)$$

$$h_z = -(g_x g_z \cos \varepsilon - g g_y \sin \varepsilon) / g_\perp, \quad (4.125)$$

wobei $g_\perp = (g_y^2 + g_z^2)^{1/2}$ ist sowie ε den azimuthalen, isotrop verteilten Streuwinkel darstellt.

4.5.2. Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion

Man kann eine explizite Formulierung für die zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der Spezies α auf einer Hintergrundverteilung der Spezies β herleiten. Dabei wird der Kollisionsoperator der Boltzmann-Gleichung durch einen exponentiellen Operator ersetzt und das Anfangswertproblem mit Hilfe von sphärischen harmonischen Funktionen (Legendre-Polynomen) gelöst. Ausgangspunkt ist die homogene⁶ Boltzmann-Gleichung zur Beschreibung eines Plasmas mit s Komponenten:

$$\frac{\delta f(\vec{v}, t)}{\delta t} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} [f(\vec{v}') f(\vec{w}') - f(\vec{v}) f(\vec{w})] g \sigma_D d\Omega d\vec{w}. \quad (4.126)$$

Unter der Annahme eines symmetrischen Streugesetzes lässt sich eine Kollisionstransformation durchführen (vgl. z.B. [118]), woraus eine zu Gl. (4.126) äquivalente Darstellung resultiert:

$$\frac{\delta f(\vec{v}, t)}{\delta t} = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathcal{S}^2} [f(\vec{v}') f(\vec{w}') - f(\vec{v}) f(\vec{w})] B d\vec{w} d\vec{\omega}. \quad (4.127)$$

Darin beschreiben \mathbb{R}^3 und \mathcal{S}^2 den Euklidischen 3-D Raum sowie eine Einheitskugel im \mathbb{R}^3 mit $\vec{\omega} \in \mathcal{S}^2$. Die Größe $B = B(g, \cos \chi)$ wird als Kollisions- bzw. Streukern bezeichnet. Ausgehend davon haben Bobylev und Nanbu [32] eine explizite Darstellung für die zeitliche Entwicklung einer Verteilungsfunktion der Spezies α in einem Plasma mit Feldspezies β hergeleitet:

$$f_\alpha(\vec{v}, t + \Delta t) = \frac{1}{n} \sum_{\beta=1}^s \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathcal{S}^2} f_\alpha(\vec{v}'_{\alpha\beta}, t) f_\beta(\vec{w}'_{\alpha\beta}, t) D(\mu, \tau) d\vec{w} d\vec{\omega}. \quad (4.128)$$

Die Nachstoßgeschwindigkeiten sind definiert als

$$\vec{v}'_{\alpha\beta} = \vec{v}_{cm} + \frac{m_r}{m_\alpha} g \vec{\omega}, \quad \text{und} \quad \vec{w}'_{\alpha\beta} = \vec{v}_{cm} - \frac{m_r}{m_\beta} g \vec{\omega}. \quad (4.129)$$

Da $g \vec{\omega} = \vec{g}'$ gilt, enthält $\vec{\omega}$ die Drehwinkelinformation für die Nachstoßrelativgeschwindigkeit. Dabei gilt $\vec{\omega}^2 = 1$.

In Gl. (4.128) repräsentieren $n = \sum_s n_s$ und $D(\mu, \tau)$ die totale Teilchendichte sowie den Kollisionskern, der analog zu B eine Funktion des Streuwinkels und der Relativgeschwindigkeit ist:

$$\mu = \cos \chi = \vec{g} \vec{\omega} / g \quad (4.130)$$

⁶Räumliche Homogenität kann angenommen werden, wenn die Zellgröße ausreichend klein ist.

und

$$\tau = A_{\alpha\beta} \frac{\Delta t}{g^3}. \quad (4.131)$$

Es ist

$$A_{\alpha\beta} = \frac{n}{4\pi} \left(\frac{q_\alpha q_\beta}{\varepsilon_0 m_r} \right)^2 \ln \Lambda_{\alpha\beta}. \quad (4.132)$$

Nach [3] gilt

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \frac{4\pi\varepsilon_0 m_r \lambda_D \langle g_{\alpha\beta}^2 \rangle}{|q_\alpha q_\beta|}. \quad (4.133)$$

Gleichung (4.133) enthält die Debye-Länge λ_D sowie das mittlere Quadrat der Relativgeschwindigkeit zwischen zwei Teilchen $\langle g_{\alpha\beta}^2 \rangle$. Da der Coulomb-Logarithmus $\ln \Lambda_{ab}$ nur schwach von Λ_{ab} abhängt, wird $\langle g_{\alpha\beta}^2 \rangle$ mit Hilfe von Maxwellverteilungen approximiert:

$$\langle g_{\alpha\beta}^2 \rangle = \frac{3k_B T_\alpha}{m_\alpha} + \frac{3k_B T_\beta}{m_\beta} + (\langle \vec{v}_\alpha \rangle - \langle \vec{v}_\beta \rangle)^2. \quad (4.134)$$

Für thermodynamisches Gleichgewicht erhält man $\langle g_{\alpha\beta}^2 \rangle = 3k_B T / m_r$ und damit wieder die Standardformulierung für den Coulomb-Logarithmus.

Der Kollisionskern in (4.128) kann analytisch unter Verwendung von Legendre-Polynomen $P_l(\mu)$ dargestellt werden als

$$D(\mu, \tau) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) \exp \left[-\frac{1}{2} l(l+1) \tau \right] \quad (4.135)$$

und repräsentiert die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für $\vec{\omega}$. Dabei stellt $D(\mu, \tau) \sin \chi d\chi d\varepsilon$ die Wahrscheinlichkeit dar, mit der $g\vec{\omega}$ in $\sin \chi d\chi d\varepsilon$ gestreut wird.

Da es sehr aufwendig ist, einen zufälligen Wert aus Gl. (4.135) zu bestimmen, hat Nanbu [119] die Approximation

$$D^*(\mu, \tau) = \frac{A}{4\pi \sinh A} \exp(\mu A) \quad (4.136)$$

vorgeschlagen, welche Gl. (4.135) für $l = 0$ erfüllt und $f(\chi_N)$ entspricht, vgl. Gl. (4.116).

Aufgrund der Approximationsmethode wurde formal ein zeitlicher Fehler von der Ordnung $O(\Delta t)$ eingeführt. Jedoch konnten Wang et al. [120] auf Basis von umfangreichen Simulationen nachweisen, dass der Fehler im Fall von (e, e) -Kollisionen von der Ordnung $O(\sqrt{\Delta t})$ ist. Zusätzlich konnten die Autoren zeigen, dass im Vergleich zu der Methode von Takizuka und Abe [25] der deterministische Fehler etwa nur halb so groß ist, was eine vergleichsweise vierfach größere Zeitschrittweite erlaubt. Analytische und numerische Untersuchungen von Dimits et al. [121] bestätigen die Abhängigkeit der physikalischen Genauigkeit dieses Kollisionsmodells von der Wahl der Zeitschrittweite und geben eine Modellverbesserung an, die in zukünftigen Arbeiten aufgegriffen und implementiert werden sollte.

5. Numerische Eigenschaften

Das DSMC-Verfahren ist ein statistisches Verfahren, entsprechend gibt es nicht nur deterministische, sondern auch statistische Fehler. Bevor im Detail darauf eingegangen wird, soll die Trennung von Teilchenkollision und -bewegung untersucht werden, die dem Partikelverfahren zugrunde liegt. Das Kopplungsschema für den *PicLas*-Code ist in Abb. 5.1 dargestellt. Aus den bekannten Informationen bezüglich der Teilchenpositionen und -geschwindigkeiten lassen sich am Gitter Ladungs- und Stromdichten berechnen. Der Maxwell-Löser berechnet die entsprechenden elektrischen und magnetischen Felder auf dem Rechengitter. Diese Felder werden zusammen mit eventuell existierenden externen Feldern zurück auf die Teilchenpositionen interpoliert. Dies führt zu einer selbstkonsistenten Modellierung: die Teilchen bestimmen die Felder und die Felder wirken auf die Teilchen. Ein relativistischer Lorentz-Löser berechnet eine Geschwindigkeitsänderung $\Delta \vec{v}$ für jedes Teilchen [34]. Das Fokker-Planck-Modul bestimmt entsprechende Geschwindigkeitsänderungen, welche durch die Coulomb-Interaktionen verursacht werden. Das DSMC-Modul berechnet die Geschwindigkeitsänderungen, welche durch alle verbleibenden Teilcheninteraktionen hervorgerufen werden, wie z.B. chemische Reaktionen. Alle Beiträge zu den Geschwindigkeitsänderungen werden entsprechend aufsummiert. Anschließend werden die Partikel bewegt, neu lokalisiert und es wird an den Rändern geprüft, ob eventuell Partikel das Simulationsgebiet verlassen haben. Dies ist der prinzipielle Ablauf in jedem Zeitschritt.

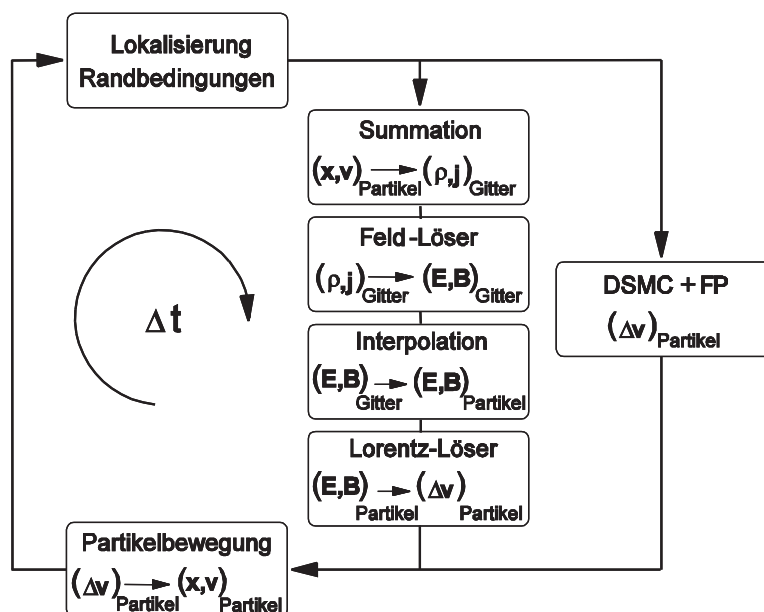


Abbildung 5.1.: Kopplungsschema

5.1. Kopplungskonzept und Operatorsplitting

Gesucht ist die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion f_i , deren zeitliche Entwicklung nach Gl. (3.1) beschrieben wird. Bei bekanntem Verfahren zur Berechnung von f_i zur Zeit $t + \Delta t$ kann $f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t)$ bei ausreichend kleinem Δt schrittweise aus $f_i(\vec{v}, \vec{x}, t)$ berechnet werden. Eine Taylorreihenentwicklung von f_i um t führt auf

$$f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) + \Delta t \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (5.1)$$

Die Größe $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ beschreibt die Ordnung des numerischen Fehlers. Durch die Trennung von Bewegung und Stoss nach Abb. 5.1 erhält das Verfahren einen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, denn nach Einsetzen von Gl. (3.1) in Gl. (5.1) erhält man unter Vernachlässigung des Restglieds

$$\begin{aligned} f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t) &= f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) + \Delta t(J + D)f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) \\ &= f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) + \Delta t J f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) + \Delta t D f_i(\vec{v}, \vec{x}, t), \end{aligned} \quad (5.2)$$

wobei J und D die kollisionsbehafteten und -freien Operatoren mit

$$J f_i = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} [f(\vec{v}'_i) f(\vec{v}') - f(\vec{v}_i) f(\vec{v})] g \sigma_D d\Omega d\vec{v} \quad (5.3)$$

sowie

$$D f_i = -\vec{v}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{x}} - \frac{1}{m_i} \frac{\partial(\vec{F}_i f_i)}{\partial \vec{v}_i} \quad (5.4)$$

darstellen. Gleichung (5.2) entspricht damit genau dem derzeit implementierten Kopplungskonzept und stellt eine Approximation erster Ordnung für die Berechnung von f_i im Sinne der Trennung von Bewegung und Kollision dar.

Diese Entkopplung sowie die Kollisionsberechnung in einer Zelle unabhängig von den umgebenden Zellen ist eine Konsequenz des Operatorsplittings. Dieses ist nur erlaubt, wenn $\Delta t |J f_i| \ll f_i$ und $\Delta t |D f_i| \ll f_i$. Die erste Forderung ist gleichbedeutend mit einem kleinen Einfluss der Kollisionen, d.h. $P_c \simeq \Delta t / \tau$ mit $\Delta t \ll \tau$. Die zweite Forderung entspricht $|\Delta \vec{x}| \ll |\vec{x}|$ und $|\Delta \vec{v}| \ll |\vec{v}|$.

Eine höhere Genauigkeit erfordert die gekoppelte Betrachtung von Bewegung und Kollision. Nach [119] kann $f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t)$ dargestellt werden gemäß

$$f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t) = (1 + \Delta t J)(1 + \Delta t D) f_i(\vec{v}, \vec{x}, t). \quad (5.5)$$

Gleichung (5.5) geht bei Vernachlässigung des Terms $\Delta t^2 D J$ in Gleichung (5.2) über. Durch Modifikation des Kopplungskonzeptes in Form einer seriellen Abarbeitung der konvektiven (5.4) sowie kollisionsbasierten (5.3) Effekte wird Gleichung (5.5) zu

$$f_i(\vec{v}, \vec{x}, t + \Delta t) = (1 + \Delta t J) f_i^D(\vec{v}, \vec{x}, t), \quad (5.6)$$

wobei

$$f_i^D(\vec{v}, \vec{x}, t) = f_i(\vec{v} + \Delta \vec{v}, \vec{x} + \Delta \vec{x}, t) = (1 + \Delta t D) f_i(\vec{v}, \vec{x}, t) \quad (5.7)$$

auf aktualisierten Orts- und Geschwindigkeitswerten beruht.

5.2. Zweikörperkollisionen

Abgesehen vom Fehler, der durch das Operatorsplitting verursacht wird, existieren vier grundsätzliche Fehlerquellen bei DSMC, welche die Qualität der Lösung und der Lösungskonvergenz¹ beeinflussen können. Dies sind die statistischen Fehler sowie die deterministischen Fehler aufgrund von unvermeidbaren Diskretisierungen des Raumes, der Zeit sowie der Teilchenzahl. Die Fehlerquellen sind natürlich nicht unabhängig voneinander, allerdings ist es hilfreich, diese unabhängig von einander zu untersuchen, um allgemeine Aussagen über die zu erwartenden Fehlerordnungen treffen zu können. Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass die zeitliche Diskretisierung sich sowohl auf die Kollisionen als auch auf die Bewegung der Teilchen auswirkt. Auch dies ist ein Resultat des Operatorsplittings, welches durch Δt charakterisiert wird.

Unabhängig vom Simulationsverfahren wirken sich plattformabhängige aber intrinsische Rundungsfehler negativ auf die Rechnung aus. Bei DSMC-Verfahren spielt außerdem die Qualität der Zufallszahlen eine Rolle. Je höher die Qualität, desto besser können z.B. Verteilungsfunktionen bei der Initialisierung der Rechnung oder auch bei Einströmungsrändern während der Rechnung abgebildet werden. Hierbei gibt es einen direkten Zusammenhang zwischen Zufallszahlqualität und Partikeldiskretisierung. Je höher die Qualität der Zufallszahlen, desto besser kann eine Verteilungsfunktion durch weniger Teilchen reproduziert werden.

5.2.1. Statistische Fehler

Die Ursache statistischer Fehler (Rauschen²) liegt zum Einen darin, dass Mittelwerte in einem begrenzten Volumen gebildet werden, zum Anderen darin, dass die simulierten Teilchen jeweils eine Vielzahl physikalischer Teilchen abbilden. Diese Fehler weisen ein asymptotisches Verhalten auf und verschwinden, wenn die Mittelwertbildung gegen Unendlich strebt, d.h. wenn bei einer zeitlichen Mittelung die Iterationszahl gegen Unendlich geht, oder wenn die Anzahl der Simulationsteilchen, über die gemittelt wird, gegen Unendlich geht. Da die meisten Mittelungsalgorithmen über *alle* Teilchen in einer Zelle mitteln, kann sofort geschlussfolgert werden, dass der Makropartikelfaktor die maßgebliche Größe zur Bewertung des statistischen Rauschens darstellt, da dessen Wert bei typischen Anwendungen die Stichprobengröße von einem *praktisch* unendlichen Wert (z.B. 10^{14}) auf einen nahezu verschwindenden Wert (z.B. 10) reduziert.

Durch Mittelwertbildung werden makroskopische Strömungsgrößen wie Druck und Temperatur aus den mikroskopischen Eigenschaften eines Teilchenensembles berechnet. Eine kleine Teilchenzahl reduziert zwar den Rechenaufwand, erhöht aber die statistischen Fluktuationen und Ungenauigkeiten. Nach Fallavollita et al. [123] verhält sich der statistische Fehler für Teilchenzahlen $N \geq 100$ proportional zu $1/\sqrt{S}$, wobei S den Stichprobenumfang beschreibt. Chen und Boyd [124] konnten zudem

¹Hierbei ist das Erreichen eines stationären Zustands gemeint.

²Eine weitere Rauschquelle wäre eine sehr niedrige Strömungsgeschwindigkeit, wie sie z.B. bei Mikroströmungen auftritt, wenn das gesuchte Signal (Strömungsgeschwindigkeit) viel kleiner ist als die mittlere thermische Geschwindigkeit. In solchen Fällen muss der DSMC-Löser erweitert werden, siehe z.B. [122]. Dieses Problem tritt im Zusammenhang mit den in Kap. 2 diskutierten Anwendungen aber nicht auf.

zeigen, dass sich der Fehler aus zwei Komponenten zusammensetzt: eine statistische Komponente mit der gleichen Proportionalität $1/\sqrt{S}$ und eine deterministische Komponente proportional zu $1/N$. Der deterministische Fehler wird im anschließenden Abschnitt diskutiert. Die Autoren verwendeten einen rms-Fehlerindikator (*root mean square*) zur Fehlerabschätzung und konnten dadurch für einen gegebenen Rechenaufwand die für die Rauschminimierung notwendige Teilchenzahl angeben. Der Fehler hängt vom Interaktionsmodell ab und ist minimal für das Starrkugelmodell, welches die höchsten Kollisionsraten liefert. Dieser Zusammenhang legt nahe, dass der statistische Fehler durch Maximierung der Kollisionsraten unter Erhaltung der physikalischen Gültigkeit der Simulation minimiert werden kann.

Klassische DSMC-Verfahren wie *LasVegas* verfügen über eine instationäre und eine stationäre Programmphase. In der instationären Phase werden Gitter- und Zeitschrittadaption nach vorher festgelegten Iterationszahlen durchgeführt. Makroskopische Werte werden durch Mittelung über die in der Zelle vorhandenen Teilchen berechnet. Dies kann je nach Strömungssituation zu Fehlern führen, da der Mittelungsalgorithmus häufig Gleichgewichtsbetrachtungen impliziert. Da die auf diese Weise berechneten Größen nur in die Gitter- und Zeitschrittadaption gehen, kann davon ausgegangen werden, dass lediglich das Konvergenzverhalten beeinflusst wird, sofern die instationäre Programmphase ausreichend lange läuft. Nach Erreichen der stationären Phase werden die makroskopischen Werte durch zeitliche Mittelung in jeder Zelle über eine vorher zu bestimmende Anzahl an Iterationen berechnet.

Bei instationären Strömungsproblemen ist die stationäre Programmphase obsolet und eine Mittelung der Ergebnisse kann über Zufallszahlen erfolgen, die sich aus unterschiedlichen Initiierungswerten ergeben. Handelt es sich zudem um ein hochenergetisches Strömungsproblem ist darauf zu achten, dass ausreichend viele Simulationsteilchen den hochenergetischen Bereich der Verteilungsfunktion bevölkern, da sonst in chemisch reaktiven und radiativen Strömungen die relevanten Effekte nicht akkurat wiedergegeben werden können.

5.2.2. Deterministische Fehler

Wie bei Kontinuumsverfahren beruht das DSMC-Verfahren auf einer räumlichen und zeitlichen Diskretisierung. Hinzu kommt die Diskretisierung der Teilchenzahl. Damit einhergehende numerische Ungenauigkeiten wirken sich negativ sowohl auf die Lösungskonvergenz, als auch auf die Qualität der Lösung aus, welche nach Wagner [125] im Grenzübergang für verschwindende Zeitschrittweiten und Zellgrößen und für Teilchenzahlen $N \rightarrow \infty$ zur Lösung der Boltzmann-Gleichung konvergiert. Bird [67] gibt als einfache Orientierung folgende empirische Richtwerte an: $N \geq 20$, $\Delta x \leq \lambda/3$ und $\Delta t \leq \nu/4$. Jedoch ist es sinnvoll, den Einfluss der Diskretisierung genauer zu studieren. Da die deterministischen Fehler nicht statistischer Natur sind, können sie durch Erhöhung des Stichprobenumfanges nicht reduziert werden. Um ihn zu studieren bietet es sich an, den statistischen Fehler durch ausreichend große Mittelung bis zu einem für die deterministischen Fehler unerheblichen Niveau zu reduzieren. Um das Konvergenzverhalten zu studieren, werden häufig unterschiedliche Funktionale verwendet, dies können die Verhältnisse der Wärmeleitfähigkeiten, Temperaturen und Wärmeflüsse sein. Es sollte betont werden, dass das Konvergenzverhalten nur bei stationären Problemen eine

Rolle spielt. Daher erfolgt in den folgenden Unterabschnitten nur eine kurze Übersicht über dieses Themengebiet.

Partikeldiskretisierung

Die Diskretisierung der Partikelzahl macht sich auch bei der Bildung der Kollisionspaare bemerkbar. Wie in Kap. 4.1 dargestellt ist, wird die Anzahl der auszuwertenden Teilcheninteraktionen bei N Teilchen gemäß $N(N-1)/2 \approx N^2/2$ approximiert, wobei der Fehler für all zu kleine Werte N signifikant wird. Abbildung 5.2 zeigt den relativen Fehler in Abhängigkeit von der Teilchenzahl. Nach [126] enthalten die Zellen typischer DSMC-Simulationen etwa 30 Teilchen. Dies entspricht einem Fehler von etwa 3.5 %. Bei 10 Teilchen werden rechnerisch bereits 11 % der Teilcheninteraktionen nicht berücksichtigt. Chen und Boyd [124] haben gezeigt, dass im Grenzbereich verschwindender Zellausdehnungen, Zeitschrittweiten und unendlich vieler Stichproben der verbleibende Fehler eines jeden Funktionales $\sim 1/\sqrt{N}$ beträgt. Für den Fehler, der durch die Darstellung der Verteilungsfunktion als Resultat der Partikeldiskretisierung entsteht, gibt Rader [127] folgenden allgemeinen Zusammenhang am Beispiel des Verhältnisses der Wärmeleitfähigkeiten κ an:

$$\lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} \frac{\kappa^{DSMC}}{\kappa^{CE}} = 1 + \frac{A}{N}. \quad (5.8)$$

Hierbei ist A eine für den jeweiligen Testfall zu bestimmende Konstante.

Durch die Partikeldiskretisierung wird zusätzlich die Annahme des chaotischen Zustands, welcher der Boltzmann-Gleichung zugrunde liegt, gestört. Je niedriger die Teilchenzahl N in der Zelle, desto wahrscheinlicher wird die Kollision zweier Teilchen, die im vorhergehenden Zeitschritt ebenfalls kollidierten. Solche Folgekollisionen sind unphysikalisch und erhöhen die statistische Abhängigkeit der eigentlich unkorrelierten Teilchen. Die Größenordnung dieser statistischen Abhängigkeit kann durch Zählen dieser Folgekollisionen abgeschätzt werden. Vorhergehende Untersuchungen [128] zeigen eine Abhängigkeit zur Zeitschrittweite und zum Makropartikelfaktor. Eine Erhöhung der Zeitschrittweite erhöht die statistische Abhängigkeit und den damit in Verbindung stehenden Fehler. Die Ab-

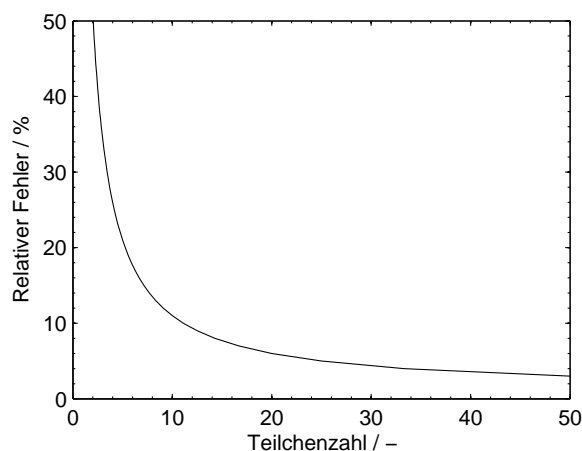


Abbildung 5.2.: Relativer Fehler in Abhängigkeit von der Teilchenzahl.

hängigkeit steigt bei steigendem Δt mit steigendem Makropartikelfaktor. Der Anteil der Folgekollisionen an den gesamten Kollisionen ist ein brauchbarer Indikator für die Qualität der DSMC-Lösung in Bezug auf die Lösung der Boltzmann-Gleichung. Dabei sollten für eine akzeptable Lösungsqualität die Folgekollisionen keinesfalls mehr als 20 % ausmachen.

In zukünftigen Arbeiten sollte geprüft werden, ob es einen Zusammenhang gibt zwischen der Wahl des Interaktionsmodells und der Teilchenzahl. Die derzeitigen Ergebnisse lassen vermuten, dass die vernachlässigten Teilcheninteraktionen durch erhöhte Kollisionsraten in Abhängigkeit vom Interaktionsmodell mindestens teilweise kompensiert werden können.

Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung bei DSMC basiert auf der Notwendigkeit, potentielle Kollisionspaare in einer Zelle zu bilden. Um den numerischen Einfluss der räumlichen Diskretisierung qualitativ und quantitativ zu untersuchen, haben einige Autoren detaillierte Studien durchgeführt. So haben Alexander et al. [129, 130] die Green-Kubo-Theorie [131] auf einfache Starrkugeln angewandt und damit analytische Formulierungen hergeleitet für die Viskosität μ sowie für die Wärmeleitfähigkeit κ für endliche, aber nicht all zu große Zellgrößen. Die Viskosität setzt sich aus drei Komponenten zusammen,

$$\mu = \mu^K + \mu^C + \mu^P, \quad (5.9)$$

wobei μ^K den kinetischen Viskositätsanteil beschreibt, der aus der Chapman-Enskog-Theorie bekannt und unabhängig von der Zellausdehnung ist. Der dritte Term μ^P beschreibt den Einfluss von Kollisionen und ist abhängig von der Zellausdehnung. Im Fall des einfachen Starrkugelmodells ergibt sich dafür

$$\mu^P = \frac{1}{9}mG^*(\Delta x)^2, \quad (5.10)$$

wobei Δx die Kantenlänge einer würfelförmigen Zelle und $G^* = 2d_{ref}^2 n^2 \sqrt{\pi k_B T / m}$ eine Konstante darstellen. Der mittlere Term beschreibt den Einfluss des mittleren Teilchenabstandes auf die Viskosität. Da aber in DSMC-Verfahren der Teilchenabstand keinen Einfluss auf die Kollisionsfrequenz hat, gilt hier $\mu^C = 0$. Zusammenfassend ergibt sich für die Viskosität

$$\mu = \frac{15}{16d_{ref}^2} \sqrt{\frac{mk_B T}{\pi}} \left(1 + \frac{16}{45\pi} \frac{(\Delta x)^2}{\lambda^2} \right). \quad (5.11)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit erhält man nach analoger Rechnung mit

$$\kappa^P = \frac{1}{6}k_B G^*(\Delta x)^2 \quad (5.12)$$

folgenden Zusammenhang:

$$\kappa = \frac{75}{64d_{ref}^2} \sqrt{\frac{k_B^3 T}{m\pi}} \left(1 + \frac{32}{225\pi} \frac{(\Delta x)^2}{\lambda^2} \right). \quad (5.13)$$

Unter Verwendung dieser Größen kann gezeigt werden, dass bei unzureichender Auflösung, z.B. bei $\Delta x = \lambda$, die Viskosität und Wärmeleitfähigkeit von diesen Referenzwerten um 11.3% sowie um

4.5% abweichen. Für die Selbstdiffusion existiert keine Abhängigkeit von der räumlichen Diskretisierung.

Weitere Untersuchungen wurden von Rader et al. [127] durchgeführt. Auf Basis eines eindimensionalen Fourier-Problems konnte gezeigt werden, dass für $N \rightarrow \infty$ das Konvergenzverhalten von der Ordnung $O(\Delta x^2)$ ist. Die Autoren geben im Grenzfall für sehr große Teilchenzahlen und sehr kleine Zeitschrittweiten folgenden analytischen Zusammenhang für das Konvergenzverhalten am Beispiel des Verhältnisses der Wärmeleitfähigkeiten κ an:

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta t \rightarrow 0}} \frac{\kappa^{DSMC}}{\kappa^{CE}} = 1 + \frac{32}{225\pi} (\Delta \tilde{x}^2) = 1 + 0.04527 (\Delta \tilde{x}^2). \quad (5.14)$$

Darin ist $\Delta \tilde{x} = \Delta x / \lambda$.

Zeitliche Diskretisierung

Der durch die zeitliche Diskretisierung verursachte Fehler resultiert aus der Berechnung aller Kollisionen zu einem gemeinsamen Zeitpunkt, obwohl die Kollisionen zeitlich über einen Zeitraum Δt verteilt erfolgen. Ähnliche Untersuchungen wie im Fall der Δx -Abhängigkeit wurden für den Fehler aufgrund der zeitlichen Diskretisierung durchgeführt. So haben Garcia und Wagner [132] umfangreiche Untersuchungen basierend auf stationären und instationären Couette-Strömungen, Wärme-strömungen, Diffusionsströmungen und der Auswertung einer dementsprechend hohen Anzahl an Funktionalen durchgeführt. Sie konnten zeigen, dass der Fehler für eine Mehrzahl an Strömungsproblemen proportional zum Quadrat der Zeitschrittweite ist. Dies gilt sowohl für stationäre als auch für instationäre Strömungsprobleme.

Dies deckt sich mit den Arbeiten von Hadjiconstantinou [133], der in Analogie zu [129] den Green-Kubo-Formalismus auf die zeitliche Diskretisierung angewendet hat. Hierbei ist der Fehler von der Ordnung $O(\Delta t^2)$ und steigt mit abnehmender Teilchenzahl. Auch hier ergeben sich Formulierungen für die Viskosität und Wärmeleitfähigkeit bei endlichen, aber nicht all zu großen Zeitschrittweiten. Die Berechnung der einzelnen Komponenten (K), (C) und (P) wird hier nicht explizit dargestellt. Für die Viskosität erhält man den Ausdruck

$$\mu = \frac{15}{16d_{ref}^2} \sqrt{\frac{mk_B T}{\pi}} \left(1 + \frac{32}{150\pi} \frac{(v_0 \Delta t)^2}{\lambda^2} \right). \quad (5.15)$$

Die Größe $v_0 = \sqrt{2k_B T / m}$ ist die wahrscheinlichste Geschwindigkeit. Die Wärmeleitfähigkeit entspricht

$$\kappa = \frac{75k_B}{64d_{ref}^2} \sqrt{\frac{k_B T}{m\pi}} \left(1 + \frac{64}{675\pi} \frac{(v_0 \Delta t)^2}{\lambda^2} \right). \quad (5.16)$$

Zusätzlich ist auch die Selbstdiffusion eine Funktion von Δt :

$$D = \frac{3}{8nd_{ref}^2} \sqrt{\frac{k_B T}{m\pi}} \left(1 + \frac{4}{27\pi} \frac{(v_0 \Delta t)^2}{\lambda^2} \right). \quad (5.17)$$

Der Fehler in den Transportkoeffizienten lässt sich im Fall von $\Delta t \sim \lambda / v_0$ auf etwa 5% abschätzen.

Basierend auf [133] gibt Rader [127] folgenden analytischen Zusammenhang für das Konvergenzverhalten am Beispiel des Verhältnisses der Wärmeleitfähigkeiten an:

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta x \rightarrow 0}} \frac{\kappa^{DSMC}}{\kappa^{CE}} = 1 + \frac{64}{675\pi} (\Delta \tilde{t}^2) = 1 + 0.03018 (\Delta \tilde{t}^2). \quad (5.18)$$

Darin ist $\Delta \tilde{t} = \Delta t / t_0$ mit $t_0 = \lambda / v_0$.

Schlussfolgerungen

Die identifizierten Abhängigkeiten der Transportgrößen Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Diffusion von der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung können verwendet werden, um eine gewünschte Genauigkeit auf Basis der Definition von Referenztransportgrößen bei DSMC-Simulationen zu erreichen. Dies kann durch ein entsprechendes Auflösungskriterium umgesetzt werden, wobei bedacht werden muss, dass die Herleitungen zu den räumlichen Ableitungen auf einem eindimensionalen Ansatz beruhen. Das Zellvolumen V_c wurde in den referenzierten Veröffentlichungen [129, 130] mittels kartesischen Koordinaten gemäß $V_c = L_x L_y L_z$ beschrieben. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zunächst vereinfacht angenommen, dass $L_x = L_y = L_z = \Delta x$ gilt. Dies ist im Allgemeinen nicht erfüllt, so dass eine Abhängigkeit der Transportgrößen von der Zellgröße *und* von der Zellform existiert. Besonders bei unstrukturierten Gittern ist eine Anisotropie³ der Transportgrößen zu erwarten. Es liegt nahe, in zukünftigen Arbeiten das Auflösungskriterium entsprechend zu erweitern. Dies erweist sich bei unstrukturierten Gittern wie in *LasVegas* und *PicLas* als schwierig, da grundsätzlich unterschiedliche Referenzlängen definiert werden können. Der 3D-Partikelcode *PicLas* verfügt zum Zeitpunkt der Einreichung dieser Arbeit noch nicht über eine automatisierte Gitteradaption, so dass die in Kap. 6.5 präsentierten Simulationsergebnisse *ohne* Gitteradaption durchgeführt wurden.

In zukünftigen Arbeiten sollte zusätzlich der Einfluss des Potentialmodells genauer beleuchtet werden, da die hier diskutierten Ergebnisse auf dem einfachen Starrkugelmodell beruhen, welches aber keine Abhängigkeit der Kollisionsquerschnitte von der Kollisionsenergie enthält.

5.3. Coulomb-Kollisionen

Der Fokker-Planck-Löser wird in modularisierter Form der Kollisionsroutine im DSMC-Modul zur Verfügung gestellt. Somit laufen DSMC-, als auch die Fokker-Planck-Routinen auf dem gleichen Gitter. Sofern das räumliche Auflösungskriterium die niedrigste charakteristische Länge $\min(\lambda_D, \lambda)$ betrachtet, wobei λ die totale (lokale) mittlere freie Weglänge im Plasma darstellt, kann die Berechnung der Kollisionswahrscheinlichkeit für den Fokker-Planck-Löser entfallen, da bei Auflösung der Debye-Länge λ_D jeder Ladungsträger mit jedem Ladungsträger interagiert und somit für alle Ladungsträgerpaare $P_c = 1$ gilt. Zur Zeit ist jedoch kein Gitteradaptionsverfahren implementiert, so dass in zukünftigen Arbeiten entsprechendes Augenmerk darauf zu richten ist.

³Isotropie ist nur bei sphärischen Gittern zu erwarten.

In den folgenden Abschnitten soll nicht nur die Qualität der Energieerhaltung des Fokker-Planck-Lösers untersucht werden, sondern auch der Einfluss des Fokker-Planck-Lösers auf den Feldlöser, da nicht bekannt ist, wie sich die Relaxation der Elektronen auf kleinen Skalen ($< \lambda_D$) auf die Entwicklung der Elektronenenergie auf großen Skalen ($> \lambda_D$) auswirkt.

5.3.1. Numerisches Heizen

Es ist bekannt, dass bei Particle-In-Cell-basierten Feldlösern aufgrund der inhärenten Diskretisierung des Raumes, der Zeit und der Teilchen verschiedene numerische Effekte beobachtet werden können, wie z.B. numerische Instabilitäten. Durch die Wahl geeigneter Formfunktionen, ausreichend kleiner Zeitschrittweiten sowie bei Verwendung ausreichend großer Teilchenzahlen können diese umgangen bzw. minimiert werden, siehe z.B. Referenz [134].

Ein weiterer Parameter stellt die räumliche Auflösung dar. So berichtet Okuda [135], dass ab einem $\lambda_D/\Delta x$ -Verhältnis von 0.5 und weniger der Feldlöser instabil wird. Eine Verringerung der Auflösung kann zu einer sehr starken, numerisch bedingten Energiezunahme sowie zu unphysikalischen Fluktuationen der Lösung führen. Eine Erhöhung der Auflösung hin zu $\lambda_D/\Delta x > 1$ wiederum führt die Annahme der Kollisionsfreiheit des Plasmas (Vlasov-Theorie) ad absurdum, da nun nicht nur kollektive Phänomene, sondern auch individuelle Teilchenkollisionen einfließen. Dies deutet darauf hin, dass die räumliche Auflösung der Debye-Länge nicht der Vlasov-Theorie genügt, die aufgrund der implizit angenommenen Kollisionsfreiheit des Plasmas nur auf Skalen oberhalb der Debye-Länge Gültigkeit besitzt. Nach Spirkin und Gatsonis [136, 137] nimmt das numerische Heizen bei $\lambda_D/\Delta x > 1$ zu, was als Maß für die Verletzung der Kollisionsfreiheit im Rahmen der Vlasov-Theorie interpretiert werden kann.

Definition der Heizzeit

Zur Bewertung des numerischen Heizens ist es sinnvoll, als charakteristische Größe die sogenannte Heizzeit τ_H einzuführen. Diese ergibt sich aus der Betrachtung der mittleren Energiezunahme eines Teilchens der Spezies s nach einer Zeit t ,

$$\langle \Delta E_{kin,s}(t) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \Delta E_{kin,i}(t) = \frac{m_s}{2N_s} \sum_{i=1}^{N_s} (v_i^2(t) - v_i^2(0)). \quad (5.19)$$

Gleichzeitig ist die mittlere Änderung der kinetischen Teilchenenergie gleich der Änderung der Temperatur der entsprechenden Spezies. Nach [134] ist die Heizzeit gleich der Zeit, in der die durchschnittliche kinetische Energie je Teilchen der Spezies s um die mittlere Anfangsenergie eines Freiheitsgrades steigt, d.h.

$$\langle \Delta E_{kin,s}(\tau_H) \rangle = \frac{3}{2} k_B (T_s(\tau_H) - T_s(0)) = \frac{1}{2} k_B T_s(0). \quad (5.20)$$

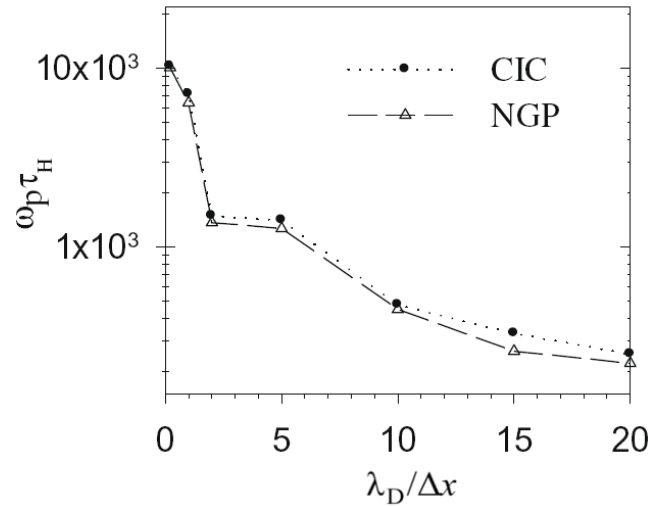


Abbildung 5.3.: Produkt aus Plasmafrequenz und Heizzeit als Funktion der räumlichen Auflösung [135].

Somit stellt eine kleine Heizzeit ein starkes numerisches Heizen dar, entsprechend gilt für reale Plasmen $\tau_H \rightarrow \infty$. Es ist üblich, die Heizzeit mit Hilfe der Plasmafrequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}} \quad (5.21)$$

zu normieren. Dadurch erhält man eine von der Temperatur unabhängige und dimensionslose Referenzgröße, auf deren Basis Parameterstudien hinsichtlich numerischer Stellgrößen wie z.B. der räumlichen Auflösung durchgeführt werden können. So zeigt Abb. 5.3 das Produkt $\omega_p \tau_H$ als Funktion der räumlichen Auflösung [137]. Man erkennt eine deutliche Verschlechterung der Energieerhaltung mit steigender Auflösung. Es wurde unter anderem der Einfluss von Formfunktionen auf die Energieerhaltung untersucht. NGP steht für *Nearest Grid Point* und beschreibt die niedrigste Ordnung der Ladungszuweisung. Dabei wird entweder die gesamte Ladung dem Zellpunktschwerpunkt zugeordnet, oder jede einzelne Ladung dem Zellknoten, welcher die kürzeste Entfernung zur Ladung hat. CIC hingegen steht für *Cloud-In-Cell* und beinhaltet die Ladungsvermischung mittels einer linearen Formfunktion, was sich günstig auf die Energieerhaltung auswirkt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf die erste Methode zurückgegriffen.

Test des Fokker-Planck-Lösers

Es stellt sich die Frage, in wie weit der Fokker-Planck-Löser zu einer Verbesserung oder Verschlechterung der Energieerhaltung im Fall einer gekoppelten Simulation beiträgt. Um dies zu bewerten, wird zunächst die Qualität der Energieerhaltung des reinen Fokker-Planck-Lösers untersucht.

Als Referenzproblem wurde eine Box mit einer Kantenlänge von $6 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ gewählt, die mit einem homogenen Plasma gefüllt ist. Alle Teilchen werden an den Wänden spiegelnd reflektiert. Die Simulation läuft mit ausgeschaltetem Feldlöser, d.h. es ist keine Reservoirsimulation, sondern eine gekoppelte PIC-FP-Simulation, bei welcher der Feldlöser keinen Beschleunigungsbeitrag leistet. Das

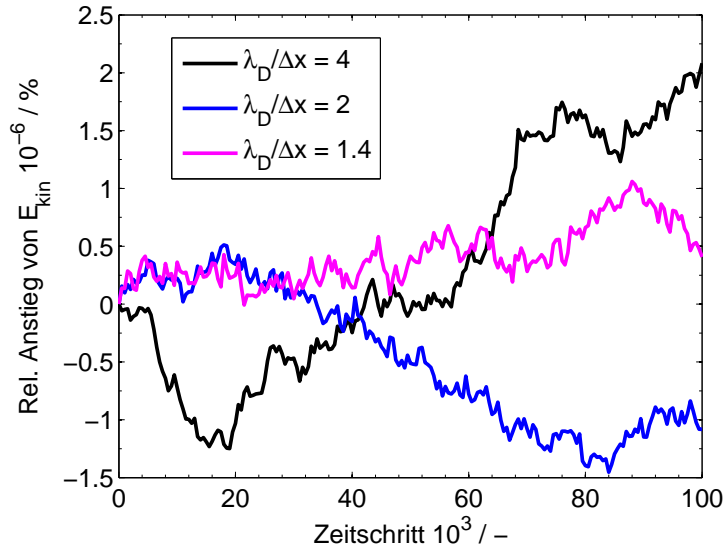


Abbildung 5.4.: Kinetische Energie aller Teilchen beim Fokker-Planck-Löser für drei verschiedene Auflösungen.

Volumen wurde je nach Auflösung mit einer jeweils anderen Anzahl an Zellen diskretisiert. Allerdings ist der Rechenaufwand maßgeblich von der Zellanzahl abhängig, so dass nicht das Gitter an das Problem, sondern das Problem an das Gitter angepasst wurde. Die sich ergebenden Simulationsparameter sind in Tab. C.5 zusammengefasst. Daraus ergeben sich weitere Parameter: $\lambda_D = 1.09 \cdot 10^{-4} m$ und $\omega_p \Delta t = 0.01$.

Es wurden drei Auflösungen getestet: $\lambda_D/\Delta x = \{1.4, 2, 4\}$. Wie in Abb. 5.4 zu erkennen ist, befindet sich der kumulierte Fehler in allen drei Fällen in der Größenordnung $10^{-6} \%$. Es existiert kein erkennbarer Zusammenhang zwischen der räumlichen Auflösung und dem Anstieg der Teilchenenergien. Insgesamt ist davon auszugehen, dass der Fokker-Planck-Löser die Energieerhaltung des Particle-In-Cell-Lösers nicht beeinflusst.

5.3.2. Gekoppelte PIC-FP-Simulation

Nach Hockney [134] kann der Fehler, der zu einem numerischen Heizeffekt führt, durch ein stochastisches Fehlerfeld δE beschrieben werden, wobei s wieder einen Speziesindex darstellt:

$$\langle \Delta E_{kin,s}(t) \rangle = \frac{q_s^2}{2m_s} (\Delta t)^2 |\delta E|^2 U. \quad (5.22)$$

Es lässt sich feststellen, dass der kumulierte Fehler linear mit der Iterationszahl U wächst. Allerdings dominiert hierbei die Wahl der Zeitschrittweite, da diese quadratisch eingeht. Außerdem ist die invers proportionale Abhängigkeit von der Teilchenmasse zu erkennen, d.h. die Energieerhaltung ist bei den Elektronen bedeutend schlechter als bei den Schwerteilchen. Man erkennt auch, dass es keine Abhängigkeit von der Teilchenenergie gibt.

Kurzbeschreibung des verwendeten Feldlösers

Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Feldlöser ist ein analytischer Particle-In-Cell-Löser [37]. Alle zeitlich veränderlichen Anteile der Maxwellgleichungen werden vernachlässigt. Stattdessen wird das Gauss-Gesetz der Elektrostatik

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r^2} \hat{r} \quad (5.23)$$

verwendet, wobei r und \hat{r} den Abstand zwischen zwei Knoten sowie den Einheitsvektor beschreiben. Ausgehend von den auf die Knoten verteilten Ladungen wird für jeden Knoten unter Berücksichtigung der Ladungsverteilung auf allen anderen Knoten diese Berechnung durchgeführt. Dies wird für jeden Knoten K durchgeführt, die Felder werden anschließend an jedem Knoten aufaddiert. Insgesamt ergibt sich ein quadratischer Rechenaufwand gemäß $K(K-1)/2$.

Die Berechnung des Magnetfeldes basiert auf der Biot-Savart-Beziehung,

$$d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Id\vec{l} \times \hat{r}}{|\vec{r}|^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{qd\vec{v} \times \hat{r}}{|\vec{r}|^3}. \quad (5.24)$$

Diese Gleichung beschreibt den Beitrag des Stromelementes $Id\vec{l}$ zur magnetischen Induktion an einem Punkt im Abstand \vec{r} . Dabei wurde das Stromelement durch die mikroskopische Formulierung $qd\vec{v}$ ersetzt. Ähnlich zur Vorgehensweise bei der Berechnung des elektrischen Feldes wird auch hier von jedem Knoten ausgehend der wirksame Anteil des B-Feldes berechnet und jeweils aufaddiert.

Als *Deposition* wird die Verteilung der Quellen

$$\rho = \sum_s q_s \int f_s(\vec{x}, \vec{v}, t) d^3v \quad \text{und} \quad \vec{j} = \sum_s q_s \int \vec{v}_s f_s(\vec{x}, \vec{v}, t) d^3v \quad (5.25)$$

auf die Gitterknoten bezeichnet. Da im Allgemeinen die Verteilungsfunktion f_s der Spezies s nicht bekannt ist, müssen approximative Methoden verwendet werden. Im einfachsten Fall werden alle Quellen (Ladungen und Stromdichten) dem Zellschwerpunkt zugeordnet, was der hier verwendeten Methode entspricht. Depositionsmethoden höherer Ordnung berücksichtigen den Abstand zwischen den Quellen und Knoten und, im Fall von Ladungen, den Potentialabfall. Hier finden dann Formfunktionen oder auch alternative Gewichtungsmethoden Anwendung.

Der verwendete Feldlöser arbeitet mit einem dualen Gitter. Das primäre Gitter ist ein Delaunay-Gitter, welches aus tetraedrischen Zellen besteht. Auf diesem Gitter werden alle Kollisionsprozesse berechnet. Um das Delaunay-Gitter herum wird ein kubisches Voronoi-Gitter erstellt, auf welchem der Particle-In-Cell-Löser die elektrischen und magnetischen Felder berechnet. Die Tetraederzellen des Delaunay-Gitters haben etwa $1/6$ des Volumens der Voronoi-Kuben, d.h. bei gleicher Debye-Länge existieren unterschiedliche $\lambda_D/\Delta x$ -Verhältnisse für den Particle-In-Cell und den Fokker-Planck-Löser. Da bei Tetraederzellen ein genauer Knotenabstand nicht festzulegen ist, wird somit zum Zweck einer besseren Vergleichbarkeit ein Radius eingeführt, welcher sich aus der Geometrie einer Kugel mit gleichem Zellvolumen ergibt:

$$\frac{V_{Vor}}{V_{Del}} = \frac{r_{Vor}^3}{r_{Del}^3} \approx 6. \quad (5.26)$$

Daraus ergibt sich mit $r_{Vor}/r_{Del} = 1.82 \approx 2$, dass die Voronoi-Zelle etwa doppelt so groß ist wie die Delaunay-Zelle. Dies hat zur Folge, dass bei einem $\lambda_D/\Delta x$ -Verhältniss beim Particle-In-Cell-Löser

$\Delta x [10^{-5} m]$	=	15	10	5
$\lambda_D/\Delta x_{PIC} [-]$	\approx	0.7	1	2
$\lambda_D/\Delta x_{FP} [-]$	\approx	1.4	2	4

Tabelle 5.1.: Räumliche Auflösungswerte $\lambda_D/\Delta x$ für den Energieerhaltungstest.

von 0.7 die Debye-Länge beim Fokker-Planck-Löser um den Faktor 1.4 aufgelöst ist, vgl. Tab. 5.1. Es gibt also prinzipiell einen engen Rahmen, in dem sowohl die Vlasov-Theorie formal ihre Gültigkeit behält, als auch eine Auflösung der Debye-Länge für den Fokker-Planck-Löser möglich ist.

Ergebnisse

Für den Test der Energieerhaltung wurden die gleichen Simulationsbedingungen verwendet wie im Fall des Energieerhaltungstests beim Fokker-Planck-Löser, siehe Tab. C.5. Der analytische Löser hatte offene Wände hinsichtlich der Felder, die Teilchen wurden spiegelnd reflektiert.

Für den Energieerhaltungstest des reinen Fokker-Planck-Lösers wurde eine Gesamtteilchenzahl von 20.000 verwendet. Daher wurde für $N_{ges} = 200.000$ der Makropartikelfaktor auf 22 verringert, damit die Teilchendichten und damit das physikalische System unverändert bleiben. Alle weiteren Parameter sind konstant geblieben. Abbildung 5.5 zeigt den relativen Anstieg der kinetischen Elektronenenergie im Fall einer gekoppelten PIC-FP-Simulation für unterschiedliche Teilchenzahlen.

Die sehr starke Sensitivität gegenüber der Teilchenzahl ist deutlich zu erkennen, die Auflösung spielt dabei eine eher untergeordnete Rolle. Bei einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 1$ kann der Fokker-Planck-Löser zu einer leichten Verbesserung der Energieerhaltung führen.

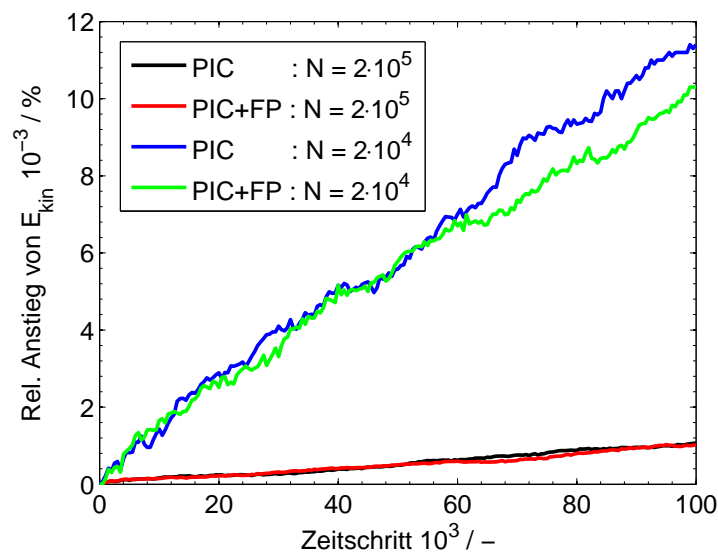


Abbildung 5.5.: Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 1$ und zwei unterschiedlichen Teilchenzahlen N .

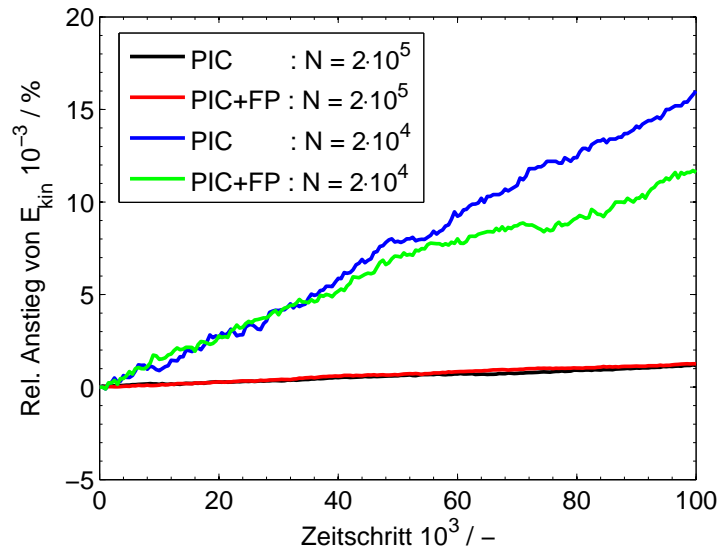


Abbildung 5.6.: Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 2$ und zwei unterschiedlichen Teilchenzahlen N .

Es wurde auch eine weitere Erhöhung der Auflösung untersucht, siehe Abb. 5.6. Das Ergebnis ist allerdings widersprüchlich. Eine Berücksichtigung von Coulomb-Kollisionen kann bei $\lambda_D/\Delta x_{FP} \approx 2$ und einer zu niedrigen Teilchenzahl auch zu einer Verschlechterung der Energieerhaltung führen. Dies kann dadurch erklärt werden, dass eine höhere Auflösung zwangsläufig zu niedrigeren Teilchenzahlen je Zelle und damit zu einer Erhöhung des numerischen Heizens beim Particle-In-Cell-Löser führt. Im Fall des Fokker-Planck-Lösers bedeutet eine kleinere Teilchenzahl je Zelle, dass bei der Paarbildung insgesamt mehr Teilchen im Relaxationsprozess nicht berücksichtigt werden können. Im Extremfall relaxieren bei drei Ladungsträgern in der Zelle nur zwei davon, bei einem Ladungs-

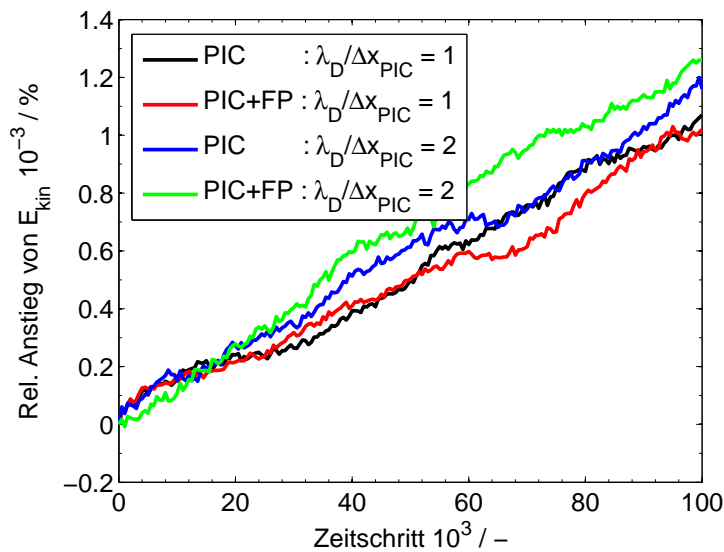


Abbildung 5.7.: Kinetische Elektronenenergie bei einer gekoppelten PIC-FP-Simulation mit 200.000 Teilchen und einer Auflösung von $\lambda_D/\Delta x_{PIC} = \{1, 2\}$

träger findet überhaupt keine Relaxation statt. Dies entspricht einer thermischen Isolation und würde den numerischen Heizanteil des Fokker-Planck-Lösers verringern, allerdings fällt dieser im Vergleich zum numerischen Heizanteil des Particle-In-Cell-Lösers sowieso nicht ins Gewicht. Insgesamt ist also bei einer Verringerung der Teilchenzahl je Zelle von einer Verschlechterung der Energieerhaltung aufgrund des Particle-In-Cell-Lösers auszugehen, was aber bereits zu erwarten war.

Die Ergebnisse der Simulationen mit hoher Teilchenzahl ($N_{ges} = 200.000$) sind nochmals etwas deutlicher in Abb. 5.7 zusammengefasst. Auch wenn das Ergebnis starken Schwankungen unterworfen ist, so kann folgendes vorläufig geschlussfolgert werden: Je höher die räumliche Auflösung beim Fokker-Planck-Löser, desto besser die Energieerhaltung. Zwar ist bei $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 2$ die Energieerhaltung absolut gesehen etwas schlechter im Vergleich zu $\lambda_D/\Delta x_{PIC} \approx 1$, allerdings ist die relative Verbesserung der Energieerhaltung aufgrund der Berücksichtigung von Coulomb-Kollisionen etwas besser. Weitere Untersuchungen unter Variation zusätzlicher Parameter wie die Formfunktion und die Laufzeit werden als sinnvoll erachtet.

6. Simulationsergebnisse

In Anlehnung an die AIAA-Richtlinien [138] wird wie folgt zwischen Verifizierung und Validierung unterschieden. Eine Modellverifizierung bestätigt die korrekte Implementierung dieses Modells und erfolgt durch Vergleich mit analytischen Lösungen oder mit anderen Simulationen (Code-zu-Code-Vergleich). Die Frage, ob das richtige Modell implementiert wurde, wird mit Hilfe von Validierungsrechnungen beantwortet. Dabei erfolgt der Vergleich mit experimentellen Daten. Dementsprechend kann eine Verifizierung oder auch Validierung nie vollständig sein, sondern gilt immer nur im Rahmen der getroffenen Annahmen, Messgenauigkeiten sowie Modellierungstiefen.

Da der Fokus in dieser Arbeit auf der Modellentwicklung liegt, wird entsprechend Wert gelegt auf die Verifizierung. Dazu zählt der grundsätzliche Nachweis der Kopplung des DSMC-Moduls an das PIC-Verfahren, die Verifizierung des neuen Reaktions- sowie des modifizierten Kollisionsmodells, die Verifizierung des MC-basierten Fokker-Planck-Lösers sowie des verallgemeinerten Potentialmodells. Des Weiteren wird ein Teil der Kohlenstoff-Fluor-Datenbasis anhand der Grundzustandsatome sowie der dazugehörigen Elektronenübergänge und der Ionisation und Dreikörperrekombination einfach ionisierter Teilchen untersucht.

Zur Verifizierung von Kollisions- und Reaktionsmodellen in DSMC-Verfahren hat sich die Reproduktion von Ratenkoeffizienten etabliert, da diese unabhängig von den Reservoirereigenschaften sind. Bei Reservoirsimulationen werden in einer geometriellosen adiabaten Zelle eine vorgegebene Anzahl an Teilchen initialisiert. Deren energetische Verteilung entspricht einer vorgegebenen Verteilung, in aller Regel einer Gleichgewichtsverteilung. Da die Zelle keine Geometrie hat, haben die Teilchen keine Ortskoordinaten. Die Generierung potentieller Kollisionspaare verläuft zufallsgesteuert. Damit sind Ortskoordinaten irrelevant. Auf Basis vorgegebener Spezies- und Chemiedaten sowie allgemeiner Simulationsparameter wie Zellvolumen, Zeitschrittweite und Makropartikelfaktor werden die Kollisions- und Reaktionsprozesse in jedem Zeitschritt berechnet. Unterbindet man die Durchführung in der Art, dass lediglich die Ereignisse gezählt und ausgegeben werden, so lässt sich daraus ein Ratenkoeffizient bestimmen. Im nächsten Zeitschritt wird die Prozedur nur mit dem Unterschied wiederholt, dass jetzt neue Paare gebildet und evaluiert werden. Nach Ablauf einer vorgegebenen Iterationszahl werden die Raten gemittelt und somit die inhärenten statistischen Fluktuationen minimiert. Durch elementares Umformen lassen sich die Ratenkoeffizienten berechnen und mit Referenzen vergleichen. Als Referenzen dienen sowohl angenäherte experimentelle, analytisch berechnete als auch numerisch integrierte Ratenkoeffizienten. Erstere liegen in der Regel in der allgemeinen Arrhenius-Form

$$k_f = a_f T^{b_f} \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right) \quad (6.1)$$

vor und sind für endotherme Hinreaktionen wie die Ionisation oder die Dissoziation leichter zu be-

stimmen. Ratenkoeffizienten für die Rückreaktionen werden häufig aus bekannten Gleichgewichtskonstanten

$$K_{eq}(T) = \frac{k_f}{k_b} \quad (6.2)$$

bestimmt. Falls die Referenzratenkoeffizienten nicht bekannt sind, können diese für eine gewünschte Interaktion i durch eine Mittelung des Terms $\sigma_i g$ gemäß

$$k_i(T) = \langle \sigma_i(E_c)g \rangle = \frac{4}{\sqrt{2\pi m_r} (k_B T_e)^3} \int_0^\infty \sigma_i(E_c) E_c \exp\left(-\frac{E_c}{k_B T_e}\right) \quad (6.3)$$

bestimmt werden. Sofern die Querschnitte nicht in analytisch leicht zu handhabender Form vorliegen, kann die Integration (6.3) numerisch durchgeführt werden. Zu diesem Zweck wurde ein auf Matlab™ basierendes Verfahren entwickelt und zur Berechnung von Ratenkoeffizienten auf Basis von Kohlenstoff und Fluor sowie für Fusionsreaktionen [139] eingesetzt.

6.1. Verallgemeinertes Starrkugelmodell

Das verallgemeinerte Starrkugelmodell wurde anhand des Kollisionsratenkoeffizienten auf Basis der in Tab. C.1 aufgelisteten Parameter für Argon verifiziert. Es wurden Teilchenkollisionen im Temperaturbereich $300 \leq T \leq 5000 \text{ K}$ simuliert und daraus der Kollisionsratenkoeffizient berechnet. Das Ergebnis ist in Abb. 6.1 dargestellt. Die Übereinstimmung mit der Referenz (4.32) ist sehr gut. Das zeigt auch Abb. 6.2.

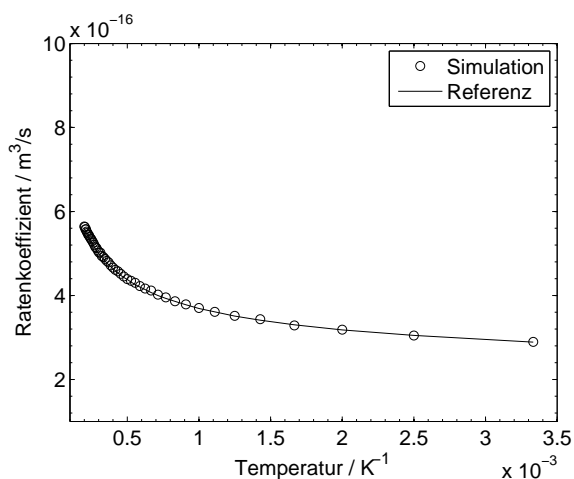


Abbildung 6.1.: Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für Argon mit der Referenz, siehe Gl. (4.32).

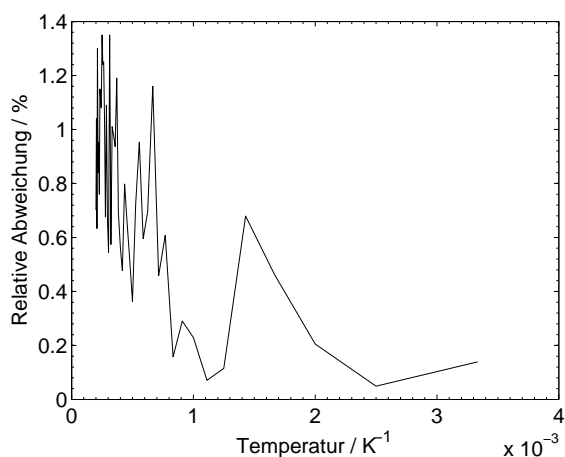


Abbildung 6.2.: Relative Abweichung des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für Argon von der Referenz, siehe Gl. (4.32).

6.2. Modifiziertes Kollisionsmodell

Die Modifikation des in Kap. 4.1.3 eingeführten Kollisionsmodells wurde ebenfalls anhand von Kollisionsratenkoeffizienten verifiziert. Hierzu werden zunächst Reservoirsimulationen auf Basis von Argon durchgeführt, da diesbezüglich Spezies- und Chemiedaten in ausreichender Menge zur Verfügung standen, um eine Bewertung des vorgeschlagenen Modells durchzuführen.

6.2.1. Argon

Die berücksichtigten Wechselwirkungen basieren auf den Elektron-Atom-Interaktionen, d.h.

$$\sigma_T = \sigma_{ela} + \sigma_{exc} + \sigma_{ion}. \quad (6.4)$$

Der elastische Streuquerschnitt wird nach Gl. (4.68) berechnet. Der verwendete Anregungsquerschnitt basiert auf der Dravin-Formel, siehe Gl. (4.70) und Gl. (4.71). Tabelle 6.1 listet die verwendeten NIST-Daten [140] für unterschiedliche Elektronenanregungszustände von Argonatomen im Grundzustand auf. Demnach ist $\sigma_{exc} = \sum_{i=1}^6 \sigma_{exc,i}$. Die Berechnung des Ionisationsquerschnittes basiert auf der Lotz-Formel (4.72). Im Fall von Argon ist $\zeta = 6$, die Ionisationsenergie beträgt 15.7596 eV. Die sich ergebenden Querschnitte sind in Abb. 6.3 zusammenfassend ab der Ionisationsenergie dargestellt. Die Elektronenanregung trägt bei Energien oberhalb der Ionisationsenergie nur geringfügig zur Interaktion bei. Bei niedrigen Energien dominiert der elastische Streuquerschnitt, da dieser auf einer Hochenergienäherung basiert, allerdings liegt die Ionisationsenergie deutlich im Gültigkeitsbereich des verwendeten elastischen Streuquerschnittes.

Wird σ_{ion} über eine gleichgewichtsverteilte Energie gemittelt, erhält man den temperaturabhängigen Ionisationsratenkoeffizienten

$$k_{ion}(T_e) = 5.56\sqrt{\pi}\zeta \left(\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^3}{m_e^2e^2} \right) \left(\frac{R_y}{E_i} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{E_i}{kT_e}} \Gamma \left(0, \frac{E_i}{k_B T_e} \right). \quad (6.5)$$

Darin ist $\hbar = h/(2\pi)$ die reduzierte Planck-Konstante.

Die Bedingungen der Reservoirsimulation sind im Anhang C in Tab. C.2 aufgelistet. Zwar wurde Ladungsneutralität initialisiert, aber da eventuell existierende Felder nicht in die Berechnung der

i	Konfiguration $3s^23p^5$	$E_{e,i} / eV$	$f_{0-i} / -$
1	$(^2P_{3/2}^0)4s^2[3/2]_1^0$	11.6236	0.0609
2	$(^2P_{1/2}^0)4s^2[1/2]_1^0$	11.8281	0.2500
3	$(^2P_{3/2}^0)5s^2[3/2]_1^0$	14.0900	0.0270
4	$3d^2[3/2]_1^0$	14.1525	0.0932
5	$(^2P_{1/2}^0)5s^2[1/2]_1^0$	14.2551	0.0119
6	$3d^2[3/2]_1^0$	14.3037	0.1060

Tabelle 6.1.: Atomare Daten für die Elektronenanregung eines Argonatoms im Grundzustand.

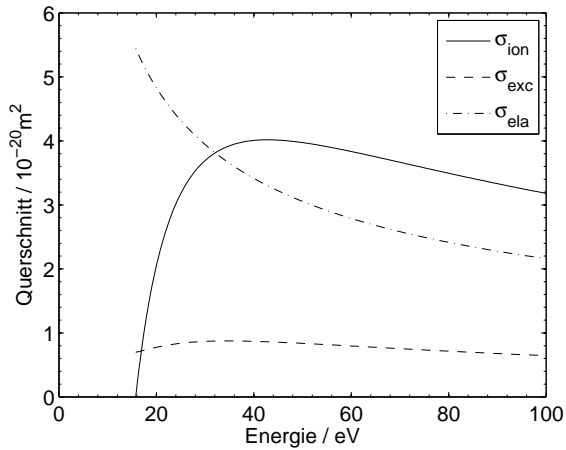


Abbildung 6.3.: Interaktionsquerschnitte für die Teilchenpaarung Elektron-Atom am Beispiel Argon

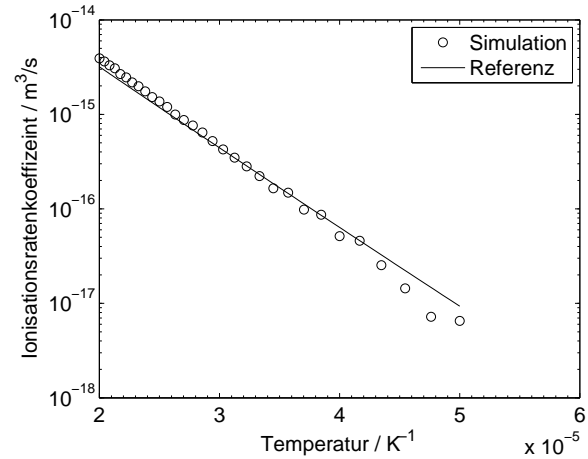


Abbildung 6.4.: Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten mit der Referenz, siehe Gl. (6.5)

Kollisions- und Rekombinationswahrscheinlichkeit sowie in die Berechnung der Referenz eingehen, spielen Abweichungen von der Quasineutralität hier keine Rolle. Man erkennt in Abb. 6.4 eine sehr gute Übereinstimmung bei hohen Temperaturen und Fluktuationen bei niedrigen Temperaturen. Schwankungen sind durch die selteneren Ionisationsereignisse bei niedrigen Temperaturen zu erklären. Der Mittelwert der Schwankungen tendiert zu einem zu niedrigen Ratenkoeffizienten. Dies kann durch die Hochenergienäherung des elastischen Streuquerschnittes erklärt werden, der in die Berechnung der analytischen Referenz nicht eingeht. Insgesamt bestätigt Abb. 6.4 den gewählten Ansatz zu Berechnung von Kollisions- und Reaktionswahrscheinlichkeiten in DSMC. Die Reaktionsraten sind wegen $\langle \sigma_{Rg} \rangle < \langle \sigma_{Tg} \rangle$ eine Untermenge der Kollisionsraten und bei einer korrekten Reproduktion der entsprechenden Ratenkoeffizienten kann von einer korrekten Reproduktion der Kollisionsraten ausgegangen werden. Allerdings ist dies nicht zwingend erforderlich, da sich Fehler in der programmtechnischen Umsetzung gegenseitig auch aufheben können.

6.2.2. Kohlenstoff und Fluor

Es wurden Reservoirsimulationen mit ähnlichen Bedingungen wie im Testfall mit Argon durchgeführt. Der Temperaturbereich wurde basierend auf den hochenergetischen Entladungsprozessen im IMPD entsprechend gewählt und beträgt $20.000 K < T_e < 200.000 K$. Dies entspricht einem Energiebereich von $1.724 eV - 17.24 eV$. Die obere Temperaturgrenze wurde bisher experimentell nicht bestätigt und ist motiviert durch die Untersuchung von Gültigkeitsgrenzen der Querschnittsmodelle sowie des Kollisions- und Reaktionsmodells an sich. Die Schwerteilchentemperatur wurde mit $T = 2.000 K$ initialisiert. Alle 12 Spezies haben den gleichen Molanteil. Insgesamt wurden folgende Spezies berücksichtigt: $C, C^+, C^{2+}, C^{3+}, C^*, C^{*+}, C^{*2+}, C^{*3+}, F, F^+, F^*$ sowie e . Details über die verwendeten Wirkungsquerschnitte sind Kap. 4.4.3 und den darin aufgeführten Referenzen zu entnehmen.

Die Resultate sind in Abb. 6.5 für Kohlenstoff und in Abb. 6.6 für Fluor dargestellt. Die Referenz wur-

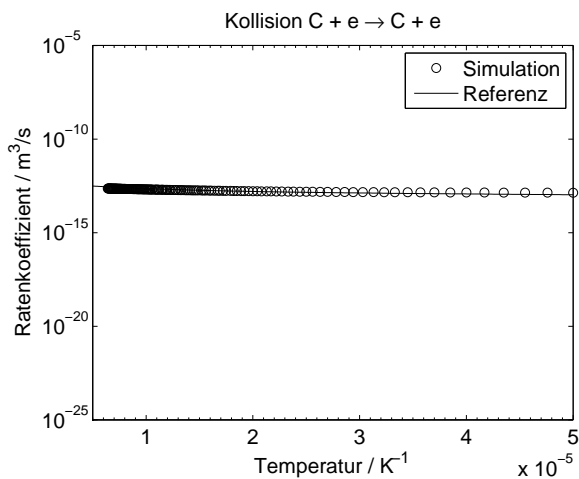


Abbildung 6.5.: Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)

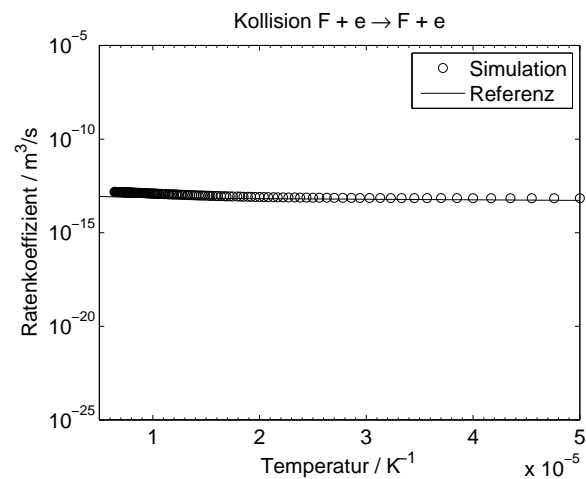


Abbildung 6.6.: Vergleich des simulierten Kollisionsratenkoeffizienten für die (e, F) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)

de durch numerische Integration gemäß Gl. (6.3) berechnet. Für beide Fälle ist die Übereinstimmung als sehr gut zu bezeichnen. Im Fall von Kohlenstoff bezieht sich das auf den kompletten Temperaturbereich. Bei Fluor ist der simulierte Ratenkoeffizient bei höheren Temperaturen in Bezug auf die Referenz etwas zu hoch und steigt mit der Temperatur. Dieses Verhalten wird bei (e, C) -Kollisionen nicht beobachtet. Allerdings ist dies aufgrund der Größenordnung der Ratenkoeffizienten nur ein optischer Effekt. Im Fall von Kohlenstoff tritt die maximale Abweichung bei minimaler Elektronentemperatur auf und beträgt 22.6%, bei maximaler Elektronentemperatur beträgt die Abweichung 22.2%. Im Gegensatz dazu tritt bei Fluor die maximale Abweichung von der Referenz bei maximaler Elektronentemperatur auf und beträgt 45.8%, bei minimaler Elektronentemperatur sind es dagegen 23.7%. Auch wenn dies zunächst viel erscheint, muss man sich dennoch vor Augen halten, dass der Modellansatz mit den energieabhängigen Querschnitten grundsätzlich *keinen* direkten Bezug zu den entsprechenden Ratenkoeffizienten enthält und das Simulationsergebnis somit keinesfalls in der gleichen Größenordnung liegen muss. Hinzu kommt, dass sich Querschnitte (und damit auch die daraus berechneten Ratenkoeffizienten) je nach Literatur und Messmethode [102] mit gleich niedrigen Messungenauigkeiten deutlich voneinander unterscheiden können.

6.3. Reaktionsmodell

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Verifizierungsrechnungen der vier neu entwickelten und implementierten elektronenstoßinduzierten Reaktionstypen Ionisation, Dreikörperrekombination, An- und Abregung diskutiert. Die Reservoirbedingungen sind identisch zu den im vorhergehenden Kapitel verwendeten Bedingungen.

6.3.1. Elektronenstoßionisation von Kohlenstoff

Abbildungen 6.7 und 6.8 zeigen einen Vergleich der simulierten Ionisationsratenkoeffizienten mit verfügbaren Referenzen aus der Literatur. Die Übereinstimmung erscheint über den gesamten Temperaturbereich gut. Im Fall der (e, C) -Paarung liegt der simulierte Ratenkoeffizient im gesamten Temperaturbereich unterhalb der Referenz. Bei maximaler Elektronentemperatur beträgt die relative Abweichung 45.7%, bei minimaler Elektronentemperatur lediglich 29.4%.

Bei der Ionisation von einfach geladenen C-Ionen beginnt die Ionisation erst bei höheren Temperaturen. Auch hier liegt der simulierte Ratenkoeffizient ein wenig unterhalb der Referenz, der Abstand verringert sich allerdings mit steigender Temperatur. Die relative Abweichung von der Referenz beträgt bei maximaler Elektronentemperatur 29.7%. Bei fallender Temperatur nimmt die Streuung zu, weswegen hier die Abweichung bei einer Elektronentemperatur von 40.000 K angegeben wird mit 46.8%. Die Streuung kann auf eine niedrige Ereigniszahl zurückgeführt werden. Die ebenfalls verifizierte Ionisation von C^{2+} -Ionen folgt auch diesem Trend, ist hier aber nicht explizit dargestellt. Insgesamt ist das Ergebnis nicht überraschend, da Ionisationsquerschnitte [110] und Ratenkoeffizienten [141] aus unterschiedlichen Quellen stammen.

Die Ergebnisse werden zusätzlich durch die Verwendung des Coulomb-Querschnittes (4.91) im Nenner von Gl. (4.64) beeinflusst. Der Coulomb-Querschnitt ist bekanntermaßen zur Modellierung reiner Binärkollisionen nicht besonders geeignet. Eine entsprechende Simulation von Coulomb-Stößen auf Basis der DSMC-Modellierung bestätigte dies. Die simulierten Ratenkoeffizienten zeigten sehr deutliche Abweichungen von der Referenz, da der Coulomb-Querschnitt nun nicht nur im Nenner, sondern auch im Zähler von Gl. (4.64) auftaucht. Gleichzeitig basiert Gl. (4.91) auf einer sehr groben Näherung. Somit ist eine Abweichung bei Elektron-Ion-Paarungen grundsätzlich zu erwarten, auch wenn die Ungenauigkeit des Coulomb-Querschnittes im totalen Querschnitt verschmiert wird.

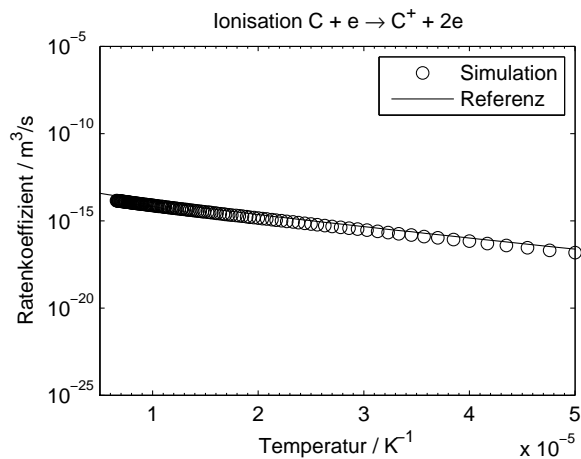


Abbildung 6.7.: Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der Referenz

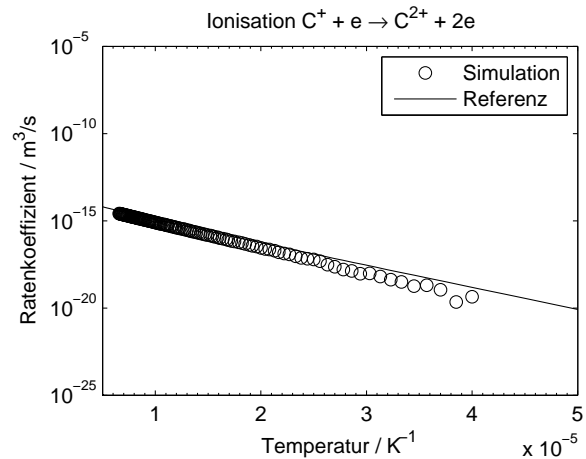


Abbildung 6.8.: Vergleich des simulierten Ionisationsratenkoeffizienten für die (e, C^+) -Paarung mit der Referenz

6.3.2. Dreikörperrekombination von Kohlenstoff

Die Ratenkoeffizienten der Dreikörperrekombination von (e, C^+) - und (e, C^{2+}) -Paarungen sind in Abb. 6.9 und 6.10 abgebildet. Der Vergleich mit den numerischen Referenzratenkoeffizienten nach Gl. (6.3) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Aufgrund der niedrigen Wahrscheinlichkeit solcher Reaktionsprozesse sind nur wenige Datenpunkte vorhanden und das auch nur bei hohen Temperaturen.

Entgegen den Erwartungen impliziert das Prinzip der mikroskopischen Reversibilität steigende Rekombinationsreaktionen bei steigenden Ionisationsreaktionen. Da der Ionisationsquerschnitt des C^+ -Ions kleiner als der des C -Atoms ist, finden im Fall der (e, C^{2+}) -Paarung deutlich weniger Rekombinationsprozesse im Vergleich zu (e, C^+) -Paarungen statt. Das Ergebnis entspricht den Erwartungen und bestätigt eine erfolgreiche Verifizierung der elektronenstoßinduzierten Dreikörperrekombination. Aufgrund der sehr niedrigen Ereigniszahl wird hier auf die Angabe einer relativen Abweichung verzichtet.

In Verbindung mit der Elektronenstoßionisation von Ionen ist dieses Verifizierungsergebnis besonders hervorzuheben, da sich bei Elektron-Ion-Paarungen der Totalquerschnitt aus der höchsten Zahl an Einzelquerschnitten zusammensetzt und somit die Berechnung der Interaktionswahrscheinlichkeiten bei derartigen Teilchenpaarungen potentiell am fehleranfälligsten ist.

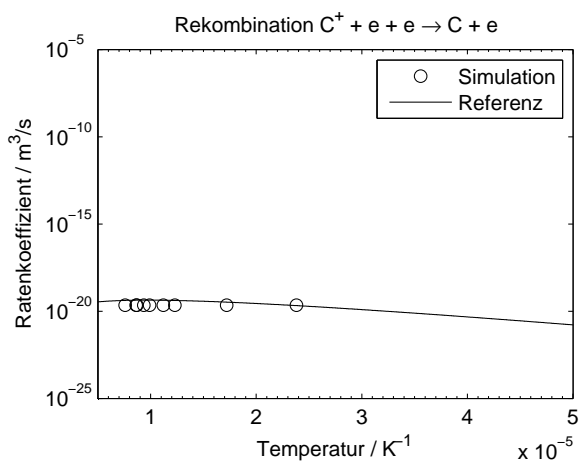


Abbildung 6.9.: Vergleich des simulierten Rekombinationsratenkoeffizienten für die (e, C^+) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)

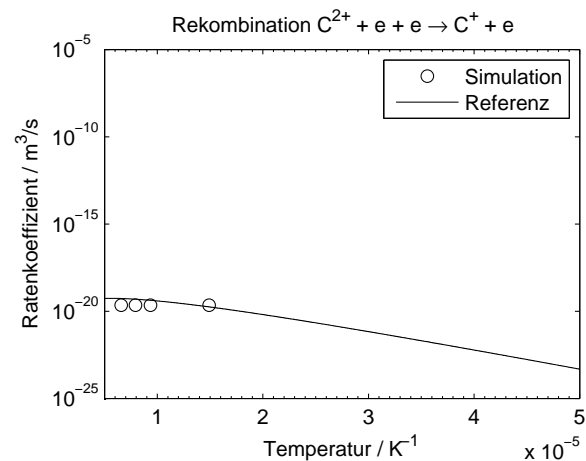


Abbildung 6.10.: Vergleich des simulierten Rekombinationsratenkoeffizienten für die (e, C^{2+}) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3)

6.3.3. Elektronenanregung von Kohlenstoff

Die Elektronenanregung von Kohlenstoff wurde ebenfalls untersucht und Verifizierungsrechnungen unterzogen. Dabei lag der Fokus auf Anregungsprozesse bei Atomen im Grundzustand, siehe Abb. 6.11. Auch hier ist eine sehr gute Übereinstimmung des simulierten Ratenkoeffizienten mit der Referenz

renz nach Gl. (6.3) zu erkennen. Der maximale relative Fehler liegt bei 25.7% bei maximaler Elektronentemperatur. Bei minimaler Elektronentemperatur beträgt der relative Fehler 2.8%. Somit kann auch von einer erfolgreichen Verifizierung des Anregungsprozesses von Atomen im Grundzustand ausgegangen werden. Dagegen können sämtliche Anregungsprozesse von C^{m+} -Ionen als nicht verifiziert betrachtet werden. Dies wird auf die Schwierigkeit der Modellierung eines geeigneten Coulomb-Querschnittes zurückgeführt und sollte Bestandteil zukünftiger Arbeiten sein.

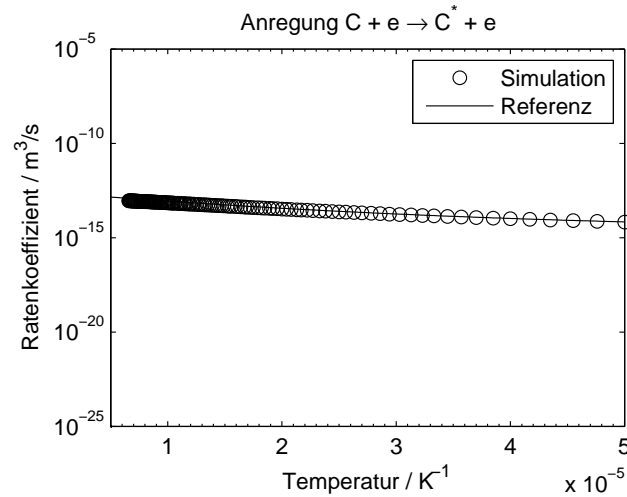


Abbildung 6.11.: Vergleich des simulierten Anregungsratekoeffizienten für die (e, C) -Paarung mit der numerischen Referenz, siehe Gl. (6.3).

6.3.4. Elektronenabregung von Kohlenstoff

Der Vergleich der Ratenkoeffizienten bei den bisherigen Rechnungen zeigt eine Diskrepanz von mehreren Größenordnungen, obwohl bei allen drei vorhergehenden Reaktionsarten Ionisation, Rekombination und Anregung von einem funktionierenden und fehlerfreien Reaktionsschema ausgegangen werden kann. Ursächlich für die Diskrepanz beim Vergleich der Ratenkoeffizienten kann die Art der Schwerteilcheninitialisierung sein. Es wurden Vergleichssimulationen durchgeführt unter Variation der Art der Anregung, d.h. keine Anregung (Grundzustand), Boltzmann-Verteilung und auch alle Schwerteilchen im ersten angeregten Niveau. Die unterschiedlichen Initialisierungen führten zu unterschiedlichen Ratenkoeffizienten. In die Berechnung der numerischen Referenz nach Gl. (6.3) gehen allerdings *alle* Zustände und Übergänge ein, die definiert sind. Es sind in der Initialisierung der Schwerteilchen jedoch keinesfalls alle Zustände belegt, so dass es zwangsläufig zu einer Diskrepanz kommen muss. Ein Indiz dafür ist die Tatsache, dass der numerisch integrierte Ratenkoeffizient größer ist als der simulierte Ratenkoeffizient. Ein Ansatz für die Lösung dieses Problems liegt in der Anpassung der Integrationsroutinen für die Integration des Ratenkoeffizienten in der Art, dass nur noch die Zustände und somit Übergänge berücksichtigt werden, die auch bei der Initialisierung der Schwerteilchen prinzipiell möglich sind.

6.3.5. Reaktionsevaluierung von Fluor

Die Untersuchungen zu den reaktiven Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Teilchen der Fluorspezies haben nochmals bestätigt, dass die Qualität von Querschnittsdaten essenziell ist für das Interaktionsmodell, welches in Rahmen dieser Arbeit entwickelt und implementiert wurde. Keiner der reaktiven Wechselwirkungen konnte erfolgreich verifiziert werden. Die Probleme lassen sich auf zwei Kernaspekte reduzieren:

- Zwischen den Publikationen zu den Querschnitten [117] und Ratenkoeffizienten [141] liegen 10 Jahre Forschung. Gerade aufgrund der chemischen Besonderheiten von Fluor kann davon ausgegangen werden, dass die hier untersuchten Wechselwirkungen nur eine sehr untergeordnete Rolle spielen. Referenzdaten zur ionisierenden Dreikörperrekombination ($F + 2e \rightarrow F^- + e$) dürften von wesentlich besserer Qualität sein. Diese Reaktion wurde jedoch aus Konsistenzgründen vernachlässigt.
- Die verfügbaren Querschnittsdaten, bestehend aus meist einigen wenigen Datenpunkten je Querschnitt, wurden auf eine Weise approximiert, die bewusst einfach gehalten wurde. Die Gültigkeit der Approximationen unterliegt zusätzlich einer Einschränkung hinsichtlich des Energiebereiches. Die Bewertung der Qualität der numerisch gewonnenen Ratenkoeffizienten wird dadurch deutlich erschwert.

6.4. Coulomb-Streuung eines Elektronenstrahls

Die Verifizierung der Interaktionsmodelle für Potentiale mit kurzen Reichweiten basiert auf der Reproduktion der Ratenkoeffizienten, da diese unabhängig sind von den gewählten Plasmabedingungen. Nanbus Modellansatz basiert u. A. auf der Auflösung der Debye-Länge, so dass alle Ladungsträger in der aktuell betrachteten Zelle miteinander interagieren. Damit lässt sich eine Verifizierung basierend auf der Reproduktion von Ratenkoeffizienten nicht durchführen, da diese mit den gewählten Plasmabedingungen skalieren. Die in Anhang D beschriebene verallgemeinerte Theorie der Ratenkoeffizienten ist hier ebenfalls nicht anwendbar, da der Wert der minimalen Kollisionsstärke H_{min} nicht bekannt ist und ebenfalls von der Wahl der Plasmamparameter abhängt [142].

Somit erfolgt die Verifizierung des Fokker-Planck-Lösers auf Basis von zwei Problemen: ein Elektronenstrahl wird einmal in eine Ionen-, sowie das andere mal in eine Elektronenwolke geschossen. Die Rechnungen wurden mit Hilfe von Reservoirsimulationen durchgeführt, da lediglich die Energieentwicklungen von Interesse sind und nicht die Teilchenpositionen. Es erfolgt ein Vergleich mit analytischen Lösungen.

6.4.1. Elektronenstrahl in Ionenwolke

Ein Elektronenstrahl wird in x-Richtung in eine Ionenwolke geschossen und die Änderung der zwei charakteristischen Geschwindigkeitsgrößen *Drift* und *Varianz* der Elektronen gemessen. Ersteres ist

ein Maß für den Impulsverlust der Elektronen, letzteres beschreibt diffusive Effekte. Für den hier diskutierten Spezialfall hat Trubnikov [143] unter Annahme eines Massenverhältnisses von $m_e/m_i \rightarrow 0$ folgende Darstellung für die zeitliche Entwicklung des normierten Mittelwerts der Elektronendriftgeschwindigkeit bestimmt, wobei $\hat{v}_{\parallel}(t) = \hat{v}_x(t)$ ist:

$$\langle \hat{v}_{\parallel}(t) \rangle = \exp\left\{-\nu_s^{(e,i)}(t-t_0)\right\} \hat{v}_{x0}. \quad (6.6)$$

Aufgrund der Normierung auf die Anfangsgeschwindigkeit ist $\hat{v}_{x0} = 1$. Für die Varianz der normierten Einzelkomponenten erhält man

$$\begin{aligned} \langle \hat{v}_{\parallel}^2(t) \rangle &= \frac{1}{3} \left[1 - \exp\left\{-3\nu_s^{(e,i)}(t-t_0)\right\} \right] \\ &+ \left[\exp\left\{-3\nu_s^{(e,i)}(t-t_0)\right\} - \exp\left\{-2\nu_s^{(e,i)}(t-t_0)\right\} \right] \hat{v}_{x0}^2 \end{aligned} \quad (6.7)$$

sowie

$$\langle \hat{v}_y^2(t) \rangle = \langle \hat{v}_z^2(t) \rangle = \frac{1}{3} \left[1 - \exp\left\{-3\nu_s^{(e,i)}(t-t_0)\right\} \right]. \quad (6.8)$$

Daraus ergibt sich eine Gleichgewichtslösung bei jeweils 1/3. Die charakteristische Relaxationsfrequenz $\nu_s^{(\alpha,\beta)}$ erhält man aus

$$\nu_s^{(\alpha,\beta)} = \frac{8\pi\sqrt{2m_\alpha\varepsilon_0}(E_{x,0})^{3/2}}{n_\beta(q_\alpha q_\beta)^2} \ln \Lambda_{\alpha\beta}, \quad (6.9)$$

wobei $E_{x,0} = 30\text{eV}$ die initiale Elektronenenergie darstellt. Entsprechend wird die Zeit normiert, $\hat{t} = t \cdot \nu_s^{(e,i)}$.

Da sich aufgrund von Kollisionsprozessen die Ionentemperatur erhöht, wurde nur den Elektronen erlaubt, ihre Energie zu ändern, da wegen $m_e/m_i \rightarrow 0$ die Ionen keine Änderung der Energie erfahren dürfen. In beiden Testfällen soll der Elektronenstrahl möglichst monoenergetisch sein, d.h. die

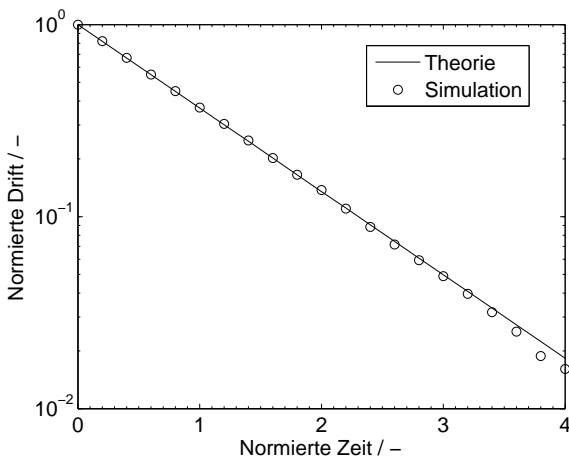


Abbildung 6.12.: Vergleich des simulierten Geschwindigkeitsmittels des Elektronenstrahls mit der Theorie, siehe Gl. (6.6).

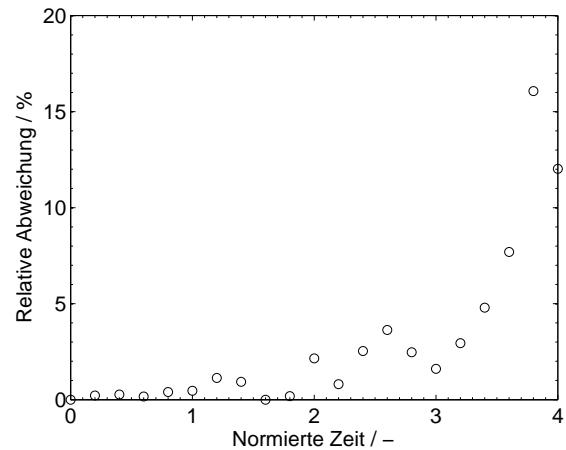


Abbildung 6.13.: Relative Abweichung des simulierten Geschwindigkeitsmittels des Elektronenstrahls von der Theorie, siehe Gl. (6.6).

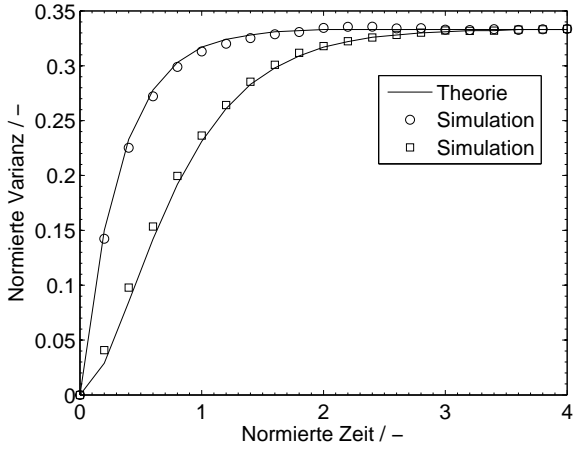


Abbildung 6.14.: Vergleich der simulierten longitudinalen (Viereck) und transversalen (Kreis) Varianzen des Elektronenstrahls mit der Theorie, siehe Gln. (6.7) und (6.8).

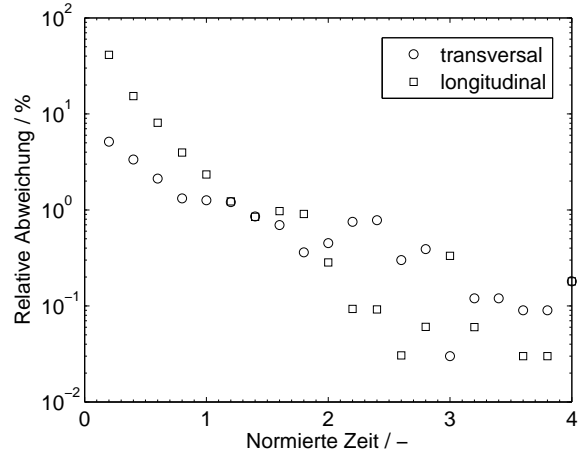


Abbildung 6.15.: Relative Abweichung der simulierten Varianzen des Elektronenstrahls von der Theorie, siehe Gln. (6.7) und (6.8).

Initialisierung erfolgt mit einer möglichst niedrigen Temperatur. Alle relevanten Parameter können Tab. C.3 entnommen werden. Damit erhält man die in Abb. 6.12 und 6.14 dargestellten Resultate. Die Driftkomponente der Elektronen verliert sukzessive an (gerichteter) Energie, die dann zusehends in die thermischen Komponenten übergeht. Statistische Effekte liefern bei niedrigen Driftgeschwindigkeiten bzw. bei großen Zeiten Streuungen um die Referenzlösung, wobei diese exponentiell zu steigen scheinen. Dies ist nicht überraschend, wenn berücksichtigt wird, dass die y-Achse in Abb. 6.12 logarithmisch ist. Der Anstieg kann grundsätzlich durch ein schlechter werdendes Signal/Rausch-Verhältnis erklärt werden. Mit fortschreitender Zeit nimmt die thermische Geschwindigkeitskomponente betragsmäßig zu, was durch Abb. 6.14 bestätigt wird. Die resultierende Temperaturerhöhung zeigt einen deutlichen Unterschied in der Dynamik des longitudinalen und des transversalen Freiheitsgrades. Wie erwartet erreicht die transversale Komponente schneller den (richtigen) Gleichgewichtszustand.

Im Gegensatz zur Originalpublikation von Nanbu [30], in der die Verifizierung anhand der Kurzzeitleösungen

$$\langle \hat{v}_{\parallel}(t) \rangle \approx \left(1 - \nu_s^{(e,i)} t \right) \hat{v}_{x0} \quad (6.10)$$

$$\langle \hat{v}_{\perp}^2(t) \rangle = \langle \hat{v}_y^2(t) \rangle + \langle \hat{v}_z^2(t) \rangle \approx 2 \nu_s^{(e,i)} t, \quad (6.11)$$

durchgeführt wurde, erfolgt die Verifizierung hier auf Basis der Langzeitleösungen (6.7) und (6.8). Dies erhöht maßgeblich die Qualität der Verifizierung.

6.4.2. Elektronenstrahl in Elektronenwolke

Eine ähnliche Simulationskonfiguration mit einer Elektronenwolke anstatt einer Ionenwolke wird verwendet zur Verifizierung der (e, e) -Streuung. Hierbei verläuft die Thermalisierung des Elektro-

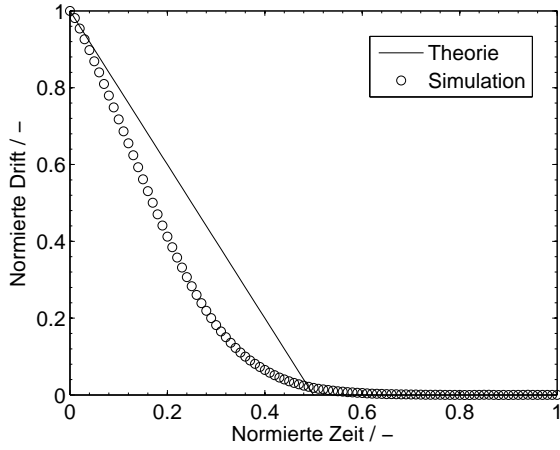


Abbildung 6.16.: Vergleich des simulierten (Symbol) Geschwindigkeitsmittels mit der Kurzzeitlösung (Linie) des Elektronenstrahls als Funktion der Zeit.

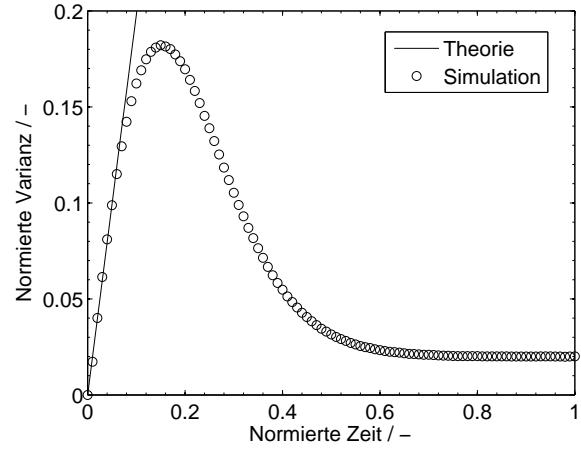


Abbildung 6.17.: Vergleich der simulierten (Symbol) Gesamtvarianz mit der Kurzzeitlösung (Linie) des Elektronenstrahls als Funktion der Zeit.

nenstrahls viel schneller. Die mit Index E bezeichneten Elektronen bilden die Hintergrundspezies. Die veränderten Parameter sind in Tab. C.4 aufgelistet.

Für dieses Problem stehen nur die Kurzzeitlösungen zur Verfügung:

$$\langle \hat{v}_{\parallel} \rangle = 1 - 2\hat{t}, \quad (6.12)$$

$$\langle \hat{v}_{\perp}^2 \rangle = (2 - \eta_{\alpha\beta}^{-1})\hat{t}. \quad (6.13)$$

wobei $\eta_{\alpha\beta} = E_{x,0}/k_B T_{\beta} = 50$. Ein Gültigkeitsbereich der Kurzzeitlösungen kann nicht angegeben werden, jedoch erhält man nach [30] im Gleichgewicht die in Abb. 6.17 angestrebte Lösung $\langle \hat{v}_{\perp}^2 \rangle = \eta_{\alpha\beta}^{-1} = 0.02$.

Die Kurzzeitlösungen stimmen sehr gut mit den simulierten Verläufen überein. Kleinere Abweichungen im Vergleich mit Nanbus Verläufen bei großen Energien sind durch die in Tab. B.1 verwendeten Werte zu erklären, da Nanbu eine um den Faktor 10 höhere Auflösung der Wertepaare verwendet. Gerade bei hohen Energien (bzw. kleinen τ) führt eine kleine Änderung von τ zu einer starken Änderung des Streuwinkels und somit der Energie- und Impulsübertragung.

Da ein Verfahren per Definition immer nur im Rahmen der getroffenen Annahmen und Vereinfachungen verifiziert werden kann, sollten in zukünftigen Arbeiten weitere Testsimulationen durchgeführt werden. Beispiele hierfür sind:

- Elektronenstrahl in ein Plasmagemisch und Untersuchung der Mittelwerte und Varianzen.
- Relaxation einer initialen Nichtgleichgewichtsverteilungsfunktion in einem Elektronengas auf Basis von (e, e) -Kollisionen.
- Relaxation einer initialen Verteilungsfunktion einer Elektronenströmung in einem Ionengas.
- Relaxation initialer Verteilungsfunktionen in einem Elektron-Ion-Gemisch bei thermischem Nichtgleichgewicht.

- Driftgeschwindigkeit der Elektronen in einem oszillierenden E-Feld.

Für diese Problemstellungen sind Referenzlösungen bekannt [30].

6.5. Gekreuzte Teilchenstrahlen

Die Entwicklung eines vollkinetischen Löser für die komplette Boltzmann-Gleichung unter Berücksichtigung des kollektiven Plasmaverhaltens, chemischer Prozesse sowie der vor allem dafür relevanten Relaxation der Elektronenverteilungsfunktion ist von sehr hoher Komplexität. Dies spiegelt sich unter anderem in den verfügbaren Publikationen wieder, in denen vielfach stark vereinfachende Annahmen getroffen werden, wie z.B. Axialsymmetrie, niedrige Teilchendichten und entsprechend niedrige Dichtegradienten sowie ein stationäres Verhalten. Solche Annahmen werden im Rahmen der institutsübergreifenden Kooperation, in der die hier dargestellte Arbeit eingebettet ist, nicht getroffen. Aufgrund der damit einhergehenden neuen Problemstellungen konnte bis zur Anfertigung dieses Berichts kein geeigneter (instationär und hoher Ordnung) Feldlöser entwickelt werden, der eine selbstkonsistente Lösung der hochgradig instationären Entladungsprozesse liefert. Die in diesem Abschnitt präsentierten Simulationsergebnisse dienen der Verifizierung der Kopplung des DSMC-Moduls an das Hauptprogramm sowie der Vorbereitung einer Ionenstrahlsimulation für Ionentriebwerke.

Für die Demonstration der zentralen DSMC-Routinen wurde der Testfall zweier gekreuzter Teilchenstrahlen aufgesetzt, siehe Abb. 6.18. In grün dargestellt sind die C- und F-Atome, die sich im energetischen Grundzustand befinden. Deren makroskopische Geschwindigkeit beträgt 1000 m/s . In Blau dargestellt sind die Elektronen, die wiederum mit einer Geschwindigkeit in Höhe von $5 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ initialisiert wurden. Dies entspricht einer Elektronenenergie von ca. 70 eV , was weit über den ersten Ionisationsenergien liegt ($E_{ion,C} = 11.3 \text{ eV}$, $E_{ion,F} = 17.4 \text{ eV}$). Entsprechend ist mit einer starken stoßbedingten Ionisation im Kreuzungsbereich der Strahlen zu rechnen. Die initialen Molanteile im Schwerteilchenstrahl ergeben sich aus der Annahme eines vollständig auf atomarer Ebene zerlegten PTFE-Polymers $C_x F_{2x}$. Die wesentlichen Modellierungsparameter sind in Tab. C.6 zusammengefasst. Zu Gunsten der optischen Darstellung der auftretenden Phänomene wurden einige Effekte ausgeschaltet:

- Weder der Particle-In-Cell-Löser noch der Fokker-Planck-Löser tragen zu den Interaktionen bei, d.h. es gibt weder externe noch selbst erzeugte Felder, die auf die Ladungsträger wirken.
- An-, Abregungs- sowie Rekombinationsprozesse sind ausgeschaltet.
- Es werden nur die Kohlenstoffatome ionisiert.

Insgesamt werden damit in diesem Beispiel lediglich die Interaktionen zwischen C-Atomen und den Elektronen berücksichtigt. Die Teilchenverteilung nach 1000 Iterationen ist in Abb. 6.19 dargestellt. Die Bewegung der Elektronen ist in z -Richtung.

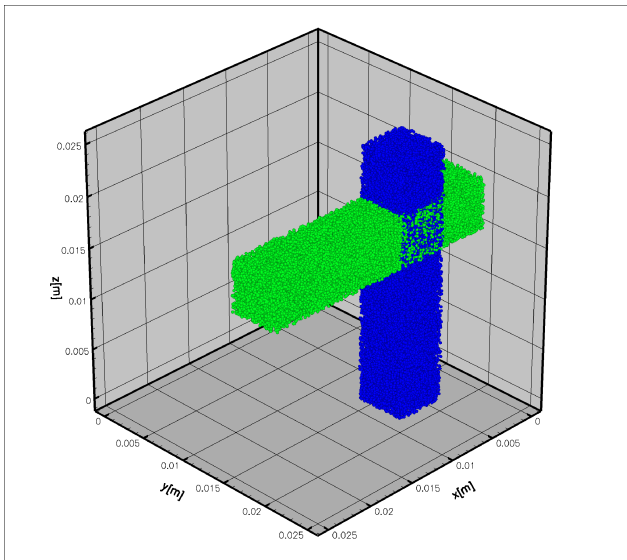


Abbildung 6.18.: Anfangskonfiguration: Gekreuzter Teilchenstrahl mit Elektronen (blau) und *C*- und *F*-Atomen (grün).

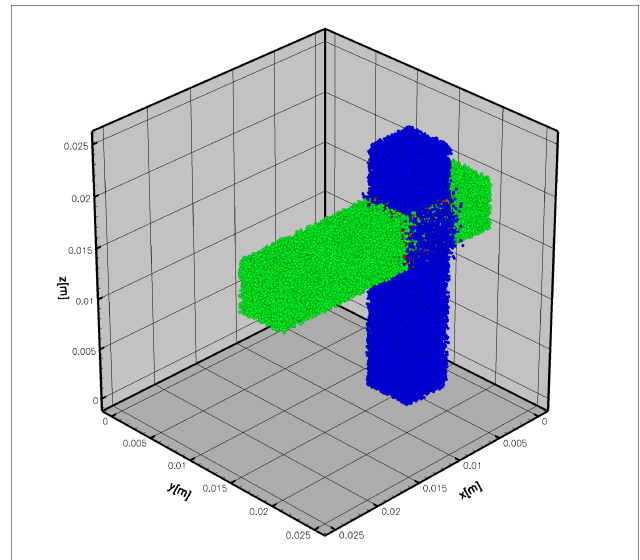


Abbildung 6.19.: Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 1000 Iterationen, die *C*-Ionen sind rot markiert.

Man erkennt, rot dargestellt, die *C*-Ionen sowie die ersten gestreuten Elektronen. Abbildung 6.20 zeigt die Entwicklung nach 5000 Iterationen. Aufgrund der Vernachlässigung von Feldeffekten sowie aufgrund der Implementierung eines isotropen Streugesetzes ist keinerlei Vorzugsrichtung bei der Streuung zu erkennen. Die gestreuten Elektronen verhalten sich ballistisch, wie auch die folgenden Abbildungen demonstrieren, siehe z.B. Abb. 6.21. Zusätzlich ist zu erkennen, dass sich die Ionisationsfront in den grünen Schwerteilchenstrahl hinein bewegt hat. Dies kann auf die hohe Restenergie der gestreuten Elektronen zurückgeführt werden.

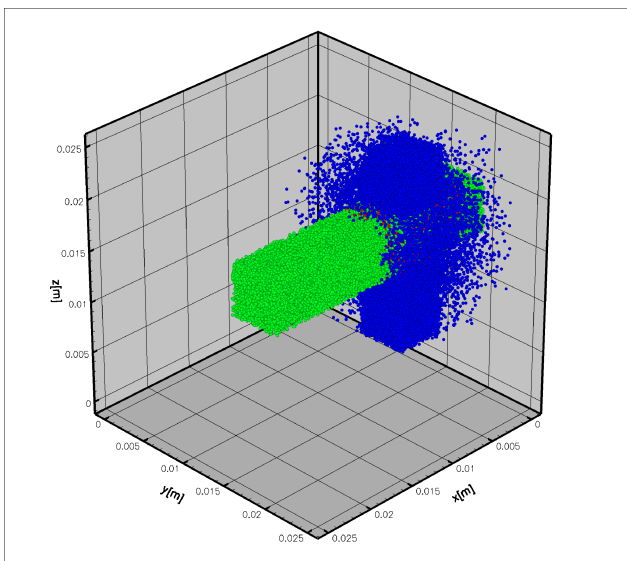


Abbildung 6.20.: Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 5000 Iterationen.

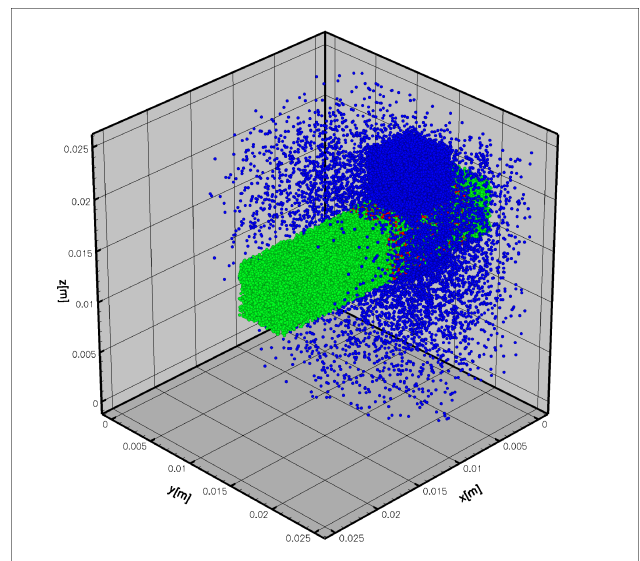


Abbildung 6.21.: Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 10000 Iterationen.

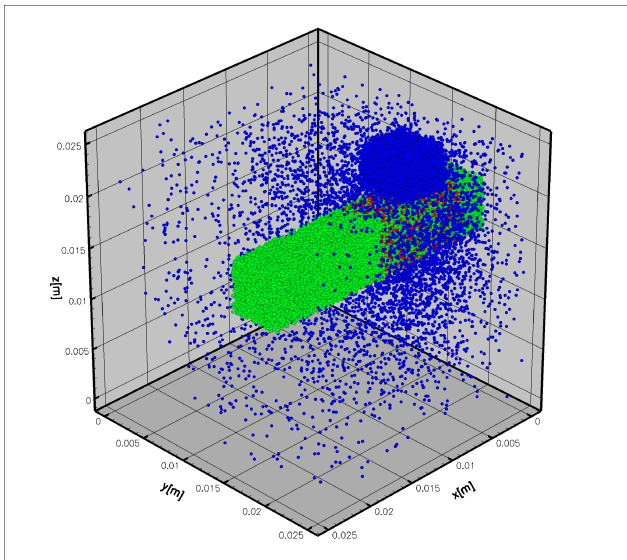


Abbildung 6.22.: Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 15000 Iterationen.

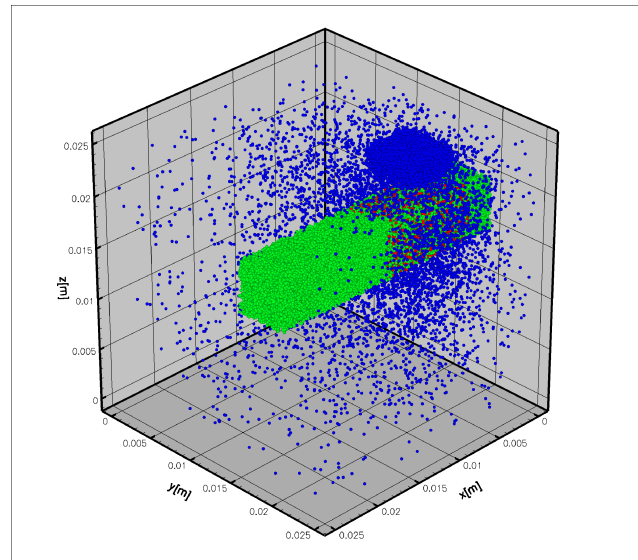


Abbildung 6.23.: Gekreuzte Teilchenstrahlen nach 16000 Iterationen.

Wie bereits Abb. 6.21 ansatzweise zeigt, interagieren die Elektronen im Elektronenstrahl nach einigen tausend Iterationen nicht mehr mit den Schwerteilchen im Kreuzungsbereich. Dies kann durch die festgelegten Parameter und Vereinfachungen speziell für dieses Simulationsbeispiel erklärt werden. Wegen $C_x F_{2x}$ existieren doppelt so viele F -Atome wie C -Atome. Da aber die F -Ionisation ausgeschaltet ist, können maximal $1/3$ aller Schwerteilchen im Kreuzungsbereich der Teilchenstrahlen ionisieren, was durch den Simulationsverlauf bestätigt wird. Da auch die Feldeffekte vernachlässigt wurden, wird mit fortschreitender Iterationszahl der Anteil an (C, e) -Paarungen immer niedriger. Dies hat zur Folge, dass der sich zu Simulationsbeginn unterhalb des Schwerteilchenstrahls befindende Teil der Elektronen den im Rahmen der Annahmen vollständig ionisierten Kreuzungsbereich nahezu ungestört durchquert, siehe Abb. 6.22 und 6.23. An dieser Stelle kann die Motivation für die Vernachlässigung der Feldeffekte besonders deutlich gemacht werden: Aufgrund der hohen Elektronendichte im Elektronenstrahl sowie der quasi diskreten Dichteübergang an den Grenzen des Elektronenstrahls hätten die auftretenden Feldeffekte zu einer explosionsartig auseinanderfliegenden Elektronenwolke geführt.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Für die vollkinetische Simulation eines instationären magnetoplasmadynamischen Triebwerkes wird im Rahmen einer Kooperation mit drei weiteren Instituten ein 3D-Partikelverfahren zur Simulation hochverdünnter Plasmen entwickelt. Dabei werden auf mikroskopischer Ebene die kurz- und langreichweitigen Interaktionen modelliert und untersucht. Als langreichweitige Interaktionen werden die auf Feldeffekten beruhenden kollektiven Phänomene bezeichnet, direkte Teilchenkollisionen zählen hierzu nicht. Diese Phänomene spielen sich auf Skalen oberhalb der lokalen Debye-Länge ab. Im Gegensatz dazu spielen sich die Coulomb-Kollisionen aufgrund von Dämpfungseffekten auf Skalen unterhalb der lokalen Debye-Länge ab. Als kurzreichweitige Teilcheninteraktionen sind im Besonderen die reaktiven sowie nichtreaktiven Stöße zwischen Elektronen und Neutralteilchen von Bedeutung.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung von Zwei- und Mehrkörperkollisionen. Um diese numerisch abzubilden, wurde ein Direkt-Simulation-Monte-Carlo-Löser (DSMC) weiterentwickelt und ein Fokker-Planck-Löser (FP) implementiert.

Die klassischen Neutralteilchenmodelle des DSMC-Lösers wurden um das verallgemeinerte Starrkugelmodell erweitert, durch das Wechselwirkungen basierend auf dem Lennard-Jones-Potential berücksichtigt werden können. Dies hat zum Einen zur Folge, dass bei entsprechenden Strömungsproblemen das gaskinetische Verhalten über einen größeren Temperaturbereich hinweg realistischer wiedergegeben werden kann. Zum Anderen können damit auch Gasgemische genauer modelliert werden, da das bisher am Institut für Raumfahrtsysteme verwendete variable Starrkugelmodell einzig auf Viskositätsdaten beruht. Das verallgemeinerte Starrkugelmodell reproduziert ebenfalls isotropes Streuverhalten, was aber nur geringfügigen Einfluss auf makroskopische Strömungsgrößen hat.

Umfangreiche Entwicklungsarbeiten fanden im Bereich der Elektron-Schwerteilcheninteraktionen statt, die ebenfalls in den DSMC-Löser implementiert wurden. Zur Berechnung der instantanen Kollisionswahrscheinlichkeit wurde das bestehende Kollisionsmodell derart erweitert, dass durch Bilden eines hypothetischen, auf dem totalen Wirkungsquerschnitt basierenden Teilchendurchmessers die Elektron-Schwerteilchen-Interaktionen mit dem bestehenden Kollisionsmodell behandelt werden können. Dieser Ansatz erfordert nur geringfügige Modifikationen an den Kollisionsroutinen bestehender DSMC-Löser, führt aber zu einer maßgeblichen Verbesserung der Modellierungstiefe.

Zur Vermeidung des Temperaturbegriffes als Konsequenz des vollkinetischen Modellierungsansatzes wurde zusätzlich ein rein energieabhängiges Reaktionsmodell entwickelt und implementiert. Dieses basiert ebenfalls auf Wechselwirkungsquerschnitten und erlaubt prinzipiell auch die Simulation gleichgewichts- sowie kontinuumsferner Problemstellungen. Voraussetzung dafür ist die Verfügbarkeit geeigneter Querschnittsdaten. Dies kann sich als limitierender Faktor herausstellen, wenn für ein interessierendes Problem keine oder nicht ausreichend Querschnittsinformationen zur Verfügung

stehen. Dies konnte am Beispiel der atomaren Spezies Fluor und Kohlenstoff beobachtet werden. Während es für Kohlenstoff sowie dessen Ionen ausreichend und qualitativ hochwertige Daten gibt, konnten für Fluor nur sehr wenige Quellen identifiziert werden. Dies machte sich in den Verifizierungsbestrebungen bemerkbar: Die wesentlichen Interaktionen im Zusammenhang mit Kohlenstoff konnten erfolgreich verifiziert werden. Bei Fluor war dies nicht möglich. Es ist zu erwarten, dass bei Berücksichtigung von Molekülen dieses Problem noch deutlicher wird, weswegen in dieser Arbeit auf die Implementierung von C - und F -haltigen diatomaren Molekülen verzichtet wurde.

Zu diesem Zeitpunkt stellt die aufgebaute und verifizierte C -Datenbasis die einzige ihrer Art im Rahmen der bekannten DSMC-basierten Publikationen dar. Die Datenbasis enthält Wirkungsquerschnitte für die elektronenstoßinduzierten Interaktionen Ionisation, Dreikörperrekombination, An- sowie Abregung. Diese wurden ebenfalls neu entwickelt.

Alle neuen Modelle und Modellerweiterungen konnten auf Basis von Reservoirsimulationen bzw. auf Basis der Reproduktion von Referenz-Ratenkoeffizienten erfolgreich verifiziert werden. Eine Ausnahme bildet der kollisionsbasierte Abregungsprozess, der nicht ohne weitere Modifikationen verifiziert werden kann, da das Simulationsergebnis stark von der Initialisierung der angeregten Spezies abhängt. Diesbezüglich wurde auch ein Modell zur Initialisierung Boltzmann'sch verteilter angeregter Spezies entwickelt und erfolgreich getestet.

Die Vermeidung des Temperaturbegriffes in der Modellierung konnte beinahe vollständig umgesetzt werden. Bei der Elektron-Schwerteilchen-Interaktion existiert der Temperaturbegriff lediglich bei der Berechnung des Dreikörperrekombinationsquerschnittes. Dies fällt allerdings aufgrund der Unwahrscheinlichkeit dieses Prozesses bei hochverdünnten Plasmaströmungen nicht ins Gewicht.

Umfangreiche Untersuchungen hinsichtlich der numerischen Eigenschaften von DSMC-Verfahren wurden durchgeführt. Die inhärente Trennung von Bewegung und Stoß führt zu zeitlichen Fehlerordnungen, die je nach verwendeten Testfällen und zugrunde gelegten Funktionalen $O(\Delta t)$ oder $O(\Delta t^2)$ betragen. Eine Untersuchung der deterministischen Fehler aufgrund der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der Kollisionsprozesse zeigt eine quadratische Abhängigkeit von der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung.

Als weitere kollisionsbasierte Interaktionsart wurde ein Fokker-Planck-Löser implementiert, welcher im DSMC-Löser eingebettet ist. Der FP-Löser simuliert die Coulomb-Kollisionen auf Basis eines kumulativen Streuwinkels. Hier wurde die Verifizierung anhand von analytisch bekannten Lang- und Kurzzeitlösungen durchgeführt. Im ersten Fall wurde ein Elektronenstrahl in eine Ionenwolke geschossen, im zweiten Fall in eine Elektronenwolke.

Die Kopplungsbestrebungen im Zusammenhang mit einem PIC-Löser motivierten die Untersuchung des numerischen Heizens des FP-Lösers. Es hat sich gezeigt, dass der numerisch bedingte Beitrag zur Verletzung der Energieerhaltung sehr gering ist. Vielmehr wird die Qualität der Energieerhaltung beim Gesamtverfahren durch die räumliche Auflösung sowie durch die Teilchendiskretisierung dominiert. Der Zusammenhang zwischen diesen Eigenschaften ist von nichtlinearer und instationärer Natur und aktuelles Forschungsthema.

Abschließend wurde anhand zweier gekreuzter Teilchenstrahlen die elektronenstoßinduzierte Ionisation von Atomen im Grundzustand demonstriert. Zu Gunsten der Darstellbarkeit der physikali-

schen Phänomene hat nur der DSMC-Löser einen Beitrag geleistet. Besonders bei komplexen Problemstellungen sind die visuellen Darstellungsmöglichkeiten eingeschränkt. Hier sind weitergehende Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Visualisierung notwendig, da das Wechselspiel zwischen Feldeffekten, Teilcheneigenschaften und chemischen Prozessen besonders im Fall eines hochgradig instationären Prozesses nicht durch die Mittelung makroskopischer Größen vereinfacht werden kann.

In zukünftigen Arbeiten sollte die Modellierung des Coulomb-Querschnittes, welcher in die Berechnung der Elektron-Schwerteilcheninteraktionen eingeht, verbessert werden.

Weitere Arbeiten auf dem Gebiet des DSMC-FP-Lösers können im Bereich der Strahlungsmodellierung liegen. Zumindest die Rekombinationsstrahlung ist mit einem geringen Aufwand ebenfalls zu berechnen, da die zentrale Datenstruktur bereits existiert. Dazu zählen auch die Algorithmen zur Berechnung der instantanen Photorekombinationswahrscheinlichkeit.

Zur Simulation typischer plasmatechnologischer Anwendungen ist die Datenbasis hinsichtlich der Argonquerschnitte zu erweitern. Hierzu existieren in der Literatur eine Vielzahl an Informationen hinsichtlich der Modelle sowie Genauigkeiten. Denkbar ist auch die Entwicklung und Implementierung eines Algorithmus zur Bestimmung spontaner Emissionswahrscheinlichkeiten. Dies würde Strahlungsuntersuchungen als Funktion variabler Elektronenverteilungen ermöglichen.

Ebenfalls zu empfehlen ist eine Verbesserung des Kollisionsmodells. Die Berücksichtigung der räumlichen Verteilung der Teilchen in der Zelle würde nicht nur den statistischen Charakter des DSMC-Verfahrens reduzieren, sondern auch den räumlichen Auflösungsbedarf verringern.

Der Vergleich mit dem Experiment ist unverzichtbar für die weitere Entwicklung des PIC-DSMC-FP-Gesamtverfahrens. Ein möglicher Ansatz sind Teilchenstrahlexperimente, was allerdings aufgrund der Vorwärtsstreuung von hochenergetischen Elektronen die Implementierung eines geeigneten anisotropen Streugesetzes im DSMC-Löser verlangt. Ein weiterer Ansatz beruht auf der Simulation von Ionentriebwerken, was allerdings noch die Modellierung der Ladungsaustauschreaktion sowie der Atom-Gitter-Erosion erfordert. In weiteren Schritten kann unter Verwendung eines instationären PIC-Lösers die erste vollkinetische Simulation der Entladung in einem gepulsten Plasmatriebwerk durchgeführt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] HIRSCHFELDER, J. O. ; CURTISS, C. F. ; BIRD, R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York : Wiley, 1954
- [2] CHAPMAN, S. ; COWLING, T. G.: *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. New York : Cambridge University Press, 2nd ed., 1952
- [3] CAP, F.: *Lehrbuch der Plasmaphysik und Magnetohydrodynamik*. Wien, New York : Springer Verlag, 1994
- [4] FERTIG, M.: *Modellierung reaktiver Prozesse auf Siliziumkarbid-Oberflächen in verdünnten Nichtgleichgewichts-Luftströmungen*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtsysteme, Dissertation, 2005
- [5] BURNETT, D.: The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas. In: *Proc. Lond. Math. Soc.* 40 (1935), S. 382–435
- [6] GRAD, H.: On the kinetic theory of rarefied gases. In: *Commun. Pure Appl. Math.* 2 (1949), S. 331–407
- [7] REESE, J. M. ; GALLIS, M. A. ; LOCKERBY, D. A.: New directions in fluid dynamics: non-equilibrium aerodynamic and microsystem flows. In: *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* (2003), Nr. 361, S. 2967–2988
- [8] CERCIGNANI, C.: *Mathematical Methods in Kinetic Theory, Sec. Ed.* Plenum Press, New York and London, 1990
- [9] CERCIGNANI, C. ; ILLNER, R. ; PULVIRENTI, M.: *The Mathematical Theory of Dilute Gases*. Springer Verlag, 1994 (Applied Mathematical Sciences 106)
- [10] CERCIGNANI, C.: *Rarefied gas dynamics: from basic concepts to actual calculations*. Cambridge University Press, 2000
- [11] NAWAZ, A.: *Entwicklung und Charakterisierung eines gepulsten instationären MPD Triebwerks als Primärtrieb für Weltraumsonden*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtsysteme, Dissertation, 2009
- [12] GARRIGUES, L. ; HERON, A. ; ADAM, J. C. ; BOEUF, J. P.: Hybrid and Particle-In-Cell Models of a Stationary Plasma Thruster. In: *Plasma Sources Sci. Technol.* 9 (2000), S. 219–226
- [13] GARRIGUES, L. ; BAREILLES, J. ; BOEUF, J. P. ; BOYD, I. D.: Modeling of the plasma jet of a stationary plasma thruster. In: *Journal of Applied Physics* 91 (2002), Nr. 12, S. 9521–9528

- [14] TACCOGNA, F. ; LONGO, S. ; CAPITELLI, M. ; SCHNEIDER, R.: Start-Up Transient in a Hall Thruster. In: *Contrib. Plasma Phys.* 46 (2006), Nr. 10, S. 781–786
- [15] TACCOGNA, F. ; LONGO, S. ; CAPITELLI, M. ; SCHNEIDER, R.: Particle-in-Cell Simulation of Stationary Plasma Thruster. In: *Contrib. Plasma Phys.* 47 (2007), Nr. 8-9, S. 635–656
- [16] KOO, J. W. ; BOYD, I. D.: Computational model of a Hall thruster. In: *Computer Physics Communications* 164 (2007), S. 442–447
- [17] TACCOGNA, F. ; SCHNEIDER, R. ; LONGO, S. ; CAPITELLI, M.: Kinetic simulations of a plasma thruster. In: *Plasma Sources Sci. Technol.* 17 (2008), S. 1–16
- [18] VANGILDER, D. B. ; BOYD, I. D. ; KEIDAR, M.: Particle Simulations of a Hall Thruster Plume. In: *Journal of Spacecraft and Rockets* 37 (2000), Nr. 1, S. 129–136
- [19] KOMURASAKI, K. ; YOKOTA, S. ; YASUI, S. ; ARAKAWA, Y.: *Particle Simulation of Plasma Dynamics Inside an Anode-Layer Hall Thruster*. 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 11-14 July, Fort Lauderdale, Florida, USA, 2004
- [20] CHENG, S. ; SANTI, M. ; CELIK, M. ; MARTINEZ-SANCHEZ, M. ; PERAIRE, J.: Hybrid PIC-DSMC simulation of a Hall thruster plume on unstructured grids. In: *Computer Physics Communications* 164 (2004), S. 73–79
- [21] BOYD, I. D. ; KEIDAR, M. ; MCKEON, W.: Modeling of a Pulsed Plasma Thruster from Plasma Generation to Plume Far Field. In: *Journal of Propulsion and Power* 37 (2000), Nr. 3, S. 399–407
- [22] GATSONIS, N. A. ; YIN, X.: Hybrid (Particle-Fluid) Modeling of Pulsed Plasma Thruster Plumes. In: *Journal of Propulsion and Power* 17 (2001), Nr. 5, S. 945–958
- [23] KEIDAR, M. ; BOYD, I. D. ; ANTONSEN, E. ; SPANJERS, G. G.: Electromagnetic Effects in the Near-Field Plume Exhaust of a Micro-Pulsed-Plasma Thruster. In: *Journal of Propulsion and Power* 20 (2004), November, Nr. 6, S. 961–969
- [24] ROSENBLUTH, M. ; MACDONALD, W. ; JUDD, D.: Fokker-Planck Equation for an inverse-square Force. In: *Phys. Rev.* 107 (1957), S. 1–6
- [25] TAKIZUKA, T. ; ABÉ, H.: A binary collision model for plasma simulation with a particle code. In: *J. Comput. Phys.* 25 (1997), S. 205–219
- [26] JONES, M.E. ; LEMONS, D.S. ; MASON, R.J. ; THOMAS, V.A. ; WINSKE, D.: A Grid-Based Coulomb Collision Model for PIC Codes. In: *J. Comput. Phys.* 123 (1996), S. 169 – 181
- [27] MANHEIMER, W. ; LAMPE, M. ; JOYCE, G.: Langevin Representation of Coulomb Collisions in PIC Simulations. In: *J. Comput. Phys.* 138 (1997), S. 563–584
- [28] D'ANDREA, D.: *Modelling of Intra- and Inter Species Charged Particle Collisions for Flow Simulation in Pulsed Plasma Thrusters*. Universität Stuttgart, Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Dissertation, 2008
- [29] CRANFILL, C. W. ; BRACKBILL, J. U. ; GOLDMANN, S. R.: A time-implicit Monte Carlo

- collision algorithm for particle-in-cell electron transport models. In: *J. Comp. Phys.* 66 (1986), S. 239–249
- [30] NANBU, K.: Theory of cumulative small-angle collisions in plasmas. In: *Phys. Rev. E* 55 (1997), S. 4642–4652
- [31] NANBU, K.: Momentum relaxation of a charged particle by small-angle Coulomb collisions. In: *Phys. Rev. E* 56 (1997), S. 7314
- [32] BOBYLEV, A. V. ; NANBU, K.: Theory of collision algorithms for gases and plasmas based on the Boltzmann equation and Landau-Fokker-Planck equation. In: *Phys. Rev. E* 61 (2000), S. 4576–4586
- [33] LAUX, M.: *Direkte Simulation verdünnter, reagierender Strömungen*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtssysteme, Dissertation, 1996
- [34] QUANDT, M. ; MUNZ, C.-D. ; SCHNEIDER, R.: Relativistic High Order Particle Treatment for Electromagnetic Particle-In-Cell Simulations. In: *Proceedings of the 7th International Conference on Scientific Computing in Electrical Engineering*. Helsinki, Finland, 2008 (SCEE-2008)
- [35] STINDL, T. ; NEUDORFER, J. ; STOCK, A. ; AUWETER-KURTZ, M. ; MUNZ, C.-D. ; ROLLER, S. ; SCHNEIDER, R.: Comparison of Coupling Techniques in a High-Order Discontinuous Galerkin-based Particle-in-Cell Solver. In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* 44 (2011), S. 194004
- [36] In: FERTIG, M. ; PETKOW, D. ; STINDL, T. ; AUWETER-KURTZ, M. ; QUANDT, M. ; MUNZ, C.-D. ; NEUDORFER, J. ; ROLLER, S. ; D'ANDREA, D. ; SCHNEIDER, R.: *Hybrid Code Development for the Numerical Simulation of Instationary Magnetoplasmadynamic Thrusters*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009 (High Performance Computing in Science and Engineering '08), S. 585–597
- [37] STINDL, T.: *Partikelverfahren zur Simulation von elektrischen Raumfahrtantrieben unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen elektromagnetischen Feldern und geladenen Teilchen (Arbeitstitel)*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtssysteme, Dissertation, Vorgesehene Einreichung 2012
- [38] VALENTINI, P. ; SCHWARTZENTRUBER, T. E.: A combined Event-Driven/Time-Driven molecular dynamics algorithm for the simulation of shock waves in rarefied gases. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 23, S. 8766 – 8778. – ISSN 0021–9991
- [39] BOCK, D.: *Untersuchung eines thermischen Lichtbogentriebwerksystems für die Lunar Mission BW1*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtssysteme, Dissertation, 2009
- [40] SCHÖNHERR, T. ; NAWAZ, A. ; HERDRICH, G. ; RÖSER, H.-P. ; AUWETER-KURTZ, M.: Influence of Electrode Shape on Performance of Pulsed Magnetoplasmadynamic Thruster SIMPLEX. In: *Journal of Propulsion and Power* 25 (2009), Nr. 2, S. 380–386
- [41] SCHRADE, H. O. ; AUWETER-KURTZ, M. ; KURTZ, H. L.: *Cathode Erosion Studies on MPD Thrusters*. Alexandria, Virginia : AIAA/DGLR/JSASS 18th International Electric Propulsion

Conference, Sep 30th – Oct 2nd 1985

- [42] GALLIS, M. A. ; BOYLES, K. A. ; LEBEAU, G. J.: DSMC Simulations in Support of the STS-107 Accident Investigation. In: CAPITELLI, M. (Hrsg.): *Rarefied Gas Dynamics: 24th International Symposium*, American Institute of Physics, 2005
- [43] OZAWA, T. ; ZHONG, J. ; LEVIN, D. A.: Development of kinetic-based energy exchange models for noncontinuum ionized hypersonic flows. In: *Phys. Fluids* 20 (2008), Nr. 046102
- [44] SCHEXNAYDER, C. J. J. ; HUBER, P. W. ; EVANS, J. S.: Calculation of Electron Concentration for a Blunt Body at Orbital Speeds and Comparison with Experimental Data / NASA. 1971 (TN D-6294). – Forschungsbericht
- [45] TONKS, L. ; LANGMUIR, I.: A General Theory of the Plasma of an Arc. In: *Phys. Rev.* 34 (1929), Nr. 6, S. 876–922
- [46] BIRD, G. A.: *Low Density Aerothermodynamics*. 20th AIAA Thermophysics Conference (Williamsburg, VA), AIAA Paper No. 85-0994, p. 10, 1985
- [47] BOYD, I. D.: Monte Carlo Simulation of nonequilibrium flow in a low power hydrogen arcjet. In: *Phys. Fluids* 9 (1997), S. 3086
- [48] LINGWEI, Z. ; YU, L. ; JUAN, L. ; ZUO, G. ; HAOCHENG, J. ; HAIXING, W. ; HAIBIN, T.: Numerical Simulation of Characteristics of CEX Ions in Ion Thruster Optical System. In: *Chinese Journal of Aeronautics* 23 (2010), Nr. 1, S. 15–21
- [49] MANENTE, M. ; CARLSSON, J. ; BRAMANTI, C. ; PAVARIN, D. ; ANGRILLI, F.: Numerical Simulation Of The Helicon Double Layer Thruster Concept. In: *Proceedings of the 43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*. Cincinnati, Ohio, USA, 2007
- [50] WADLEY, H.N.G. ; THOU, X. ; JOHNSON, R.A. ; NEUROCK, M.: Mechanisms, models and methods of vapour deposition. In: *Prog. Mat. Sci.* 46 (2001), S. 329–377
- [51] GOTTWALD, B.: *Grundlegende Ansätze zur Modellierung und Simulation von Beschichtungsprozessen am Beispiel PVD-Kupfer*. Universität Stuttgart, Dissertation, 2006
- [52] LEIFHELM, B.: *Großflächiges Strukturieren von Siliziumwafern in der Solarzellenproduktion*. Aachen, RWTH Aachen, Dissertation, 2004
- [53] BRENNER, D. W.: Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapour deposition of diamond films. In: *Physical Review B* 42(15) (1990), S. 9458–9471
- [54] LIEBERMAN, M.A. ; LICHTENBERG, A.J.: *Principles of Plasma Discharges and Material Processing*. New York : Wiley, 1994
- [55] KERSCH, A. ; MOROKOFF, W. ; WERNER, C.: Selfconsistent simulation of sputter deposition with the Monte Carlo method. In: *J. Appl. Phys.* 75 (1994), Nr. 4, S. 2278–2285
- [56] KADLEC, S. ; QUAEYHAEGENS, C. ; KNUYT, G. ; STALS, L. M.: Energy-resolved mass spectrometry and Monte Carlo simulation of atomic transport in magnetron sputtering. In: *Surf. Coat. Techn.* 97 (1997), S. 633–641

- [57] NOSITSCHKA, W. A.: *Plasmaätzverfahren für multikristalline Silizium Solarzellen*. Aachen, RWTH Aachen, Diss., 2003
- [58] ECONOMOU, D. J. ; BARTEL, T. J. ; WISE, R. S. ; LYMBEROPOULOS, D. P.: Two-Dimensional Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) of Reactive Neutral and Ion Flow in a High Density Plasma Reactor. In: *IEEE Trans. Pl. Sci.* 23 (1995), Nr. 4, S. 581–590
- [59] ECONOMOU, D.J. ; BARTEL, T.J.: Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) of Rarefied Gas Flow During Etching of Large Diameter (300-mm) Wafers. In: *IEEE Trans. Pl. Sci.* 24 (Feb 1996), Nr. 1, S. 131–132
- [60] NANBU, K. ; MORIMOTO, T. ; SUETANI, M.: Direct Simulation Monte Carlo Analysis of Flows and Etch Rate in an Inductively Coupled Plasma Reactor. In: *IEEE Trans. Pl. Sc.* 27(5) (1999), S. 1379–1388
- [61] IKEGAWA, M. ; KOBAYASHI, J. ; FUKUYAMA, R.: Effects of gas-flow structures on radical and etch-product density distributions on wafers in magnetomrowave plasma etching reactors. In: *J. Vac. Sci. Technol. A* 19(2) (2001), S. 460–466
- [62] KLAUS, C.: *Messung von Prozessparametern an PVD-Produktionsanlagen*. Technische Universität Dresden, Institut für Halbleiter- und Mikrosystemtechnik, Dissertation, 2004
- [63] BALAKRISHNAN, J. ; BOYD, I.D. ; BRAUN, D.G.: Monte Carlo simulation of vapor transport in physical vapor deposition of titanium. In: *J. Vac. Sci. Technol. A* 18(3) (May/Jun 2000), S. 907–916
- [64] CREMER, R.: *Verkürzung der Entwicklungszeiten multikomponentiger funktionaler Werkstoffe mittels kombinatorischer Ansätze*. RWTH Aachen, Aachen, 2002
- [65] LEE, J. F. ; SEARS, W. F. ; TURCOTTE, D. L.: *Statistical Thermodynamics*. London : Addison-Wesley Publishing Company, 1973
- [66] HINSHELWOOD, C. N.: *The Kinetics of Chemical Change*. Oxford : Clarendon Press, 1940
- [67] BIRD, G.A.: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford : Clarendon Press, 1994
- [68] FASOULAS, S.: *Experimentelle und theoretische Charakterisierung einer hochenthalpen Stickstoffströmung zur Wiedereintrittssimulation*. Universität Stuttgart, Institut für Raumfahrtssysteme, Dissertation, 1995
- [69] GATSONIS, N. A. ; ZWAHLEN, J. ; WHEELLOCK, A. ; SPIRKIN, A. ; PENCIL, E. J. ; KAMHAWI, H.: *Characterization of a Pulsed Plasma Thruster Plume using a Quadruple Langmuir Probe Method*. AIAA 2002-4123, Proceedings of the 38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Indianapolis, USA, 2002
- [70] BYRNE, L. T. ; ZWAHLEN, J. ; GATSONIS, N. A. ; PENCIL, E. J.: *Pulsed Plasma Thruster Plume Measurements using a Triple Langmuir Probe Method*. AIAA 2002-4126, Proceedings of the 38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Indianapolis, USA, 2002

- [71] VINCENTI, W. G. ; KRUGER, C. H.: *Introduction to Physical Gas Dynamics*. New York, London, Sydney : John Wiley and Sons, Inc., 1965
- [72] RONGHAI, Z. ; WEI, Y. ; JINDONG, L.: A selection limiter of DSMC for near continuum flows. In: *Comm. Nonlinear Sci. Num. Sim.* 13 (2008), S. 2203–2212
- [73] TITOV, E. ; GALLAGHER-ROGERS, A. ; LEVIN, D.: Examination of a Collision-Limiter Direct Simulation Monte Carlo Method for Micropropulsion Applications. In: *J. Prop. Power* 24 (2008), Nr. 2, S. 311–321
- [74] BIRD, G. A.: Perception of numerical methods in rarefied gasdynamics. In: *Rarefied gas dynamics: Theoretical and computational techniques; International Symposium, 16th, Pasadena, CA, July 10-16, 1988, Technical Papers (A90-37169 16-77)*. Washington, DC, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1989, S. 211–226
- [75] BAGANOFF, D. ; MCDONALD, J. D.: A Collision-Selection Rule for a Particle Simulation Method suited to Vector Computers. In: *Phys. Fluids A* 2(7) (1990), S. 1248–1259
- [76] FROHN, A.: *Einführung in die Technische Thermodynamik*. 2. Wiesbaden : Aula Verlag, 1989
- [77] BIRD, G. A.: Monte-Carlo Simulation in an Engineering Context. In: *Rarefied Gas Dynamics* Bd. 74. edited by Sam S. Fisher, 1981, S. 239–255
- [78] OPFER, G.: *Numerische Mathematik für Anfänger. Eine Einführung für Mathematiker, Ingenieure und Informatiker*. Braunschweig : Vieweg, 2002. – ISBN 3–528–37265–6
- [79] SERIKOV, V.V. ; KAWAMOTO, S. ; NANBU, K.: Particle-in-Cell plus Direct Simulation Monte Carlo (PIC-DSMC) Approach for Self-Consistent Plasma-Gas Simulations. In: *IEEE Transactions on Plasma Science* 27 (1999), Nr. 5, S. 1389–1398
- [80] BERGEMANN, F.: *Gaskinetische Simulation von kontinuumsnahen Hyperschallströmungen unter Berücksichtigung von Wandkatalyse*. Universität München, Institut für Strömungsmechanik des DLR Göttingen, Dissertation, 1994
- [81] MACROSSAN, M. N. ; LILLEY, C. R.: Viscosity of argon at temperatures $> 2000\text{ K}$ from measured shock thickness. In: *Phys. Fluids* 15 (2003), Nr. 11, S. 3452–3457
- [82] ERWIN, D. A. ; PHAM-VAN-DIEP, G. C. ; MUNTZ, E. P.: Nonequilibrium gas flows. I: A detailed validation of Monte Carlo direct simulation for monatomic gases. In: *Phys. Fluids A* 3 (1991), Nr. 4, S. 697–705
- [83] KOURA, K. ; MATSUMOTO, H. ; SHIMADA, T.: A test of equivalence of the variable-hard-sphere and inverse-power-law models in the direct-simulation Monte Carlo method. In: *Phys. Fluids A* 3 (1991), Nr. 7, S. 1835–1837
- [84] KESTIN, J. ; KNIERIM, K. ; MASON, E. A. ; NAJAFI, B. ; RO, S. T. ; WALDMAN, M.: Equilibrium and Transport Properties of the Noble Gases and Their Mixtures at Low Density. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 13(1) (1984), Jan, S. 229–303
- [85] CHUNG, C. N. ; DEWITT, K. J.: *New Approach in Direct-Simulation of Gas Mixtures*. AIAA

Paper 91-1343, 1991

- [86] NANBU, K.: Variable Hard-Sphere Model for Gas Mixture. In: *J. Phys. Soc. Jap.* 59 (1990), Nr. 12, S. 4331–4333
- [87] FAN, J.: A generalized soft-sphere model for Monte Carlo simulations. In: *Phys. Fluids* 14 (2002), Nr. 12, S. 4399–4405
- [88] HASSAN, H. A. ; HASH, D. B.: A generalized hard-sphere model for Monte Carlo simulation. In: *Phys. Fluids A* 5 (1993), Nr. 3, S. 738–744
- [89] KUNC, J. A. ; HASH, D. B. ; HASSAN, H. A.: The GHS interaction model for strong attractive potentials. In: *Phys. Fluids* 7 (1995), Nr. 5, S. 1173–1175
- [90] LEVINE, R. B. R. D. und Bernstein B. R. D. und Bernstein: *Molekulare Reaktionsdynamik*. B. G. Teubner Stuttgart, 1991
- [91] BORGNACKE, C. ; LARSEN, P.S.: Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture. In: *J. Comput. Phys.* 18 (1975), S. 405–420
- [92] DIETRICH, S.: *Direktes Monte-Carlo-Simulationsverfahren für kontinuumsnahe Hyperschallströmungen mit chemischen Reaktionen*. Universität Stuttgart, Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt, Dissertation, 1993
- [93] NANBU, K. ; HONDA, T. ; IGARASHI, S.: Probability of Inelastic Collisions for the Larsen-Borgnakke Model to the Monte Carlo Simulation Method. In: *J. Thermophys. Heat Trans.* 5 (1991), Nr. 2, S. 251–252
- [94] HAAS, B. L. ; BOYD, I. D.: Models for Direct Monte Carlo Simulation of Coupled Vibration-Dissociation. In: *Physics of Fluids A* 5 (1993), Nr. 2, S. 478–489
- [95] CELIK, M.: *Experimental and Computational Studies of Electric Thruster Plasma Radiation Emission*, Massachusetts Institute of Technology, Phd thesis, 2007
- [96] BOGAERTS, A. ; GIJBELS, R. ; VLCEK, J.: Collisional-radiative model for an argon glow discharge. In: *J. Appl. Phys.* 84 (1998), Nr. 1, S. 121–136
- [97] BOYD, I. D.: Modeling backward chemical rate processes in the direct simulation Monte Carlo method. In: *Phys. Fluids* 19 (2008), Nr. 126103
- [98] O'CONNOR, P. D. ; LONG, L. N. ; ANDERSON, J. B.: Accurate rate expressions for simulations of gas-phase chemical reactions. In: *J. Comp. Phys.* 227 (2008), S. 7664–7673
- [99] GALLIS, M. A. ; HARVEY, J. K.: The modeling of chemical reactions and thermochemical nonequilibrium in particle simulations computations. In: *Phys. Fluids* 20 (1998), Nr. 6
- [100] BRAUNSTEIN, M. ; BRUNSVOLD, A. L. ; GARTON, D. J. ; MINTON, T. K.: Measurements and simulation of high energy $O(^3P) + Ar(^1S)$ angular scattering: Single and multi-collision regimes. In: *Journal of Applied Physics* 120 (2004), Nr. 5, S. 2238–2246. – DOI: 10.1063/1.1637343

- [101] BRUNGER, M. J. ; BUCKMAN, S. J.: Electron–molecule scattering cross sections. I. Experimental techniques and data for diatomic molecules. In: *Physics Reports* 357 (2002), S. 215–458
- [102] BUCKMAN, J. S. ; BRUNGER, M. J.: A Critical Comparison of Electron Scattering Cross Sections measured by Single Collision and Swarm Techniques. In: *Aust. J. Phys.* 50 (1997), S. 483–509
- [103] CHERNYI, G. G. ; LOSEV, S. A. ; MACHERET, S. O. ; POTAPKIN, B. V.: *Physical and Chemical Processes in Gas Dynamics: Cross Sections and Rate Constants, Volume 1*. 181 Alexander Bell Drive, Suite 500, Reston, VA 20191-4344, USA : AIAA - Progress in Astronautics and Aeronautics, 2002
- [104] HADDAD, G. N. ; O’MALLEY, T. F.: Scattering cross sections in argon from electron transport parameters. In: *Australian Journal of Physics* 35 (1982), S. 35–39
- [105] MCEACHRAN, R. P. ; STAUFFER, A. D.: Relativistic effects in low-energy electron-argon scattering. In: *Australian Journal of Physics* 50 (1997), S. 511–524
- [106] FERCH, J. ; GRANITZA, B. ; MASCHKE, C. ; RAITH, W.: Electron-argon total cross section measurements at low energies by time-of-flight spectroscopy. In: *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 18 (1985), Mar, S. 967–983
- [107] WILLIAMS, J. F.: A phaseshift analysis of experimental angular distributions of electrons elastically scattered from He, Ne and Ar over the range 0.5 to 20 eV. In: *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 12 (1979), Nr. 2, S. 265–282
- [108] MCEACHRAN, R. P. ; STAUFFER, A. D.: Elastic scattering of electrons from neon and argon. In: *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 16 (1983), S. 4023–4038
- [109] GUPTA, A. ; BHATTACHARYA, A. K. ; MUKHERJEE, P. K.: Coupled Hartree Fock Calculation of Static Dipole Polarizabilities and Shielding Factors of Open Shell Systems. In: *Int. J. Quant. Chem.* VIII (1974), S. 97–105
- [110] SUNO, H. ; KATO, T.: Cross section database for carbon atoms and ions: Electron impact ionization, excitation, and charge exchange in collisions with hydrogen atoms. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 92 (2006), Nr. 4, S. 407–455
- [111] BURKE, P. G.: The Convergence of the Close Coupling Expansion. In: *Proceedings of the Physical Society* Bd. 82, 1963, S. 443–445
- [112] BURKE, P. G. ; JOACHAIN, C. J.: *Theory of Electron-Atom Collisions: Part 1: Potential Scattering*. Plenum Press, 1995
- [113] VERNER, D. A. ; FERLAND, G. J. ; KORISTA, K. T. ; YAKOVLEV, D. G.: Atomic Data for Astrophysics. II. New Analytic Fits for Photoionization Cross Sections of Atoms and Ions. In: *Astrophysics Journal* 465 (1996), S. 487–498
- [114] SEATON, M. J. ; ZEIPPEN, C. J. ; TULLY, J. A. ; PRADHAN, A. K. ; MENDOZA, C. ; HIBBERT, A. ; BERRINGTON, K. A.: The Opacity Project - Computation of Atomic Data. In: *Rev.*

Mexicana Astron. Astrof. 23 (1992), S. 19–43

- [115] JAHN, R.G.: *Physics of Electric Propulsion*. New York : McGraw-Hill, 1968
- [116] BALIYAN, K. S. ; BHATIA, A. K.: Electron-impact collision strengths for neutral fluorine. In: *Phys. Rev. A* 50 (1994), Oct, Nr. 4, S. 2981–2988
- [117] HAYES, T. R. ; WETZEL, R. C. ; FREUND, R. S.: Absolute electron-impact-ionization cross-section measurements of the halogen atoms. In: *Phys. Rev. A* 35 (1987), Nr. 2, S. 578–584
- [118] RJASANOW, S. ; WAGNER, W.: *Stochastic Numerics for the Boltzmann Equation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005
- [119] NANBU, K.: Probability Theory of Electron-Molecule, Ion-Molecule, Molecule-Molecule, and Coulomb Collisions for Particle Modeling of Materials Processing Plasmas and Gases. In: *IEEE Transactions on Plasma Science* 28 (2000), Nr. 3, S. 971–990
- [120] WANG, C. ; LIN, T. ; CALFISH, R. ; COHEN, B. I. ; DIMITS, A. M.: Particle simulation of Coulomb collisions: Comparing the methods of Takizuka and Abe and Nanbu. In: *J. Comp. Phys.* 227 (2008), S. 4308–4329
- [121] DIMITS, A. M. ; WANG, C. ; CALFISH, R. ; COHEN, B. I. ; HUANG, Y.: Understanding the accuracy on Nanbu's numerical Coulomb collision operator. In: *J. Comp. Phys.* 228 (2009), S. 4881–4892
- [122] MASTERS, N. D. ; YE, Wenjing: Octant flux splitting information preservation DSMC method for thermally driven flows. In: *J. Comput. Phys.* 226 (2007), Nr. 2, S. 2044–2062. – ISSN 0021–9991
- [123] FALLAVOLLITA, M. A. ; BAGANOFF, D. ; McDONALD, J. D.: Reduction of simulation cost and error for particle simulations of rarefied flows. In: *J. Comp. Phys.* 109 (1993), S. 30
- [124] CHEN, G. ; BOYD, I. D.: Statistical error analysis for the direct simulation Monte Carlo technique. In: *J. Comp. Phys.* 126 (1996), S. 434–448
- [125] WAGNER, W.: A convergence Proof for Bird's Direct Simulation Monte Carlo Method for the Boltzmann Equation. In: *Journal of Statistical Physics* 66 (1991), Nr. 3/4, S. 1011–1043
- [126] PRASANTH, P. S. ; KAKKASSERY, J. K.: Direct Simulation Monte Carlo (DSMC): A numerical method for transition-regime flows - A review. In: *J. Indian Inst. Sci.* 86 (2006), S. 169–192
- [127] RADER, D. J. ; GALLIS, M. A. ; TORCZYNSKI, J. R. ; WAGNER, W.: Direct simulation Monte Carlo convergence behavior of the hard-sphere-gas thermal conductivity for Fourier heat flow. In: *Physics of Fluids* 18 (2006), Nr. 7
- [128] SHEVYRIN, A. A. ; BONDAR, Ye. A. ; IVANOV, M. S.: Analysis of Repeated Collisions in the DSMC Method, AIP, 2005, 565-570
- [129] ALEXANDER, F. J. ; GARCIA, A. L. ; ALDER, B. J.: Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms. In: *Physics of Fluids* 10 (1998), Nr. 6, S. 1540–1542

- [130] ALEXANDER, F. J. ; GARCIA, A. L. ; ALDER, B. J.: Erratum: “Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms” [Phys. Fluids [bold 10], 1540 (1998)]. In: *Physics of Fluids* 12 (2000), Nr. 3, S. 731–731
- [131] DORFMAN, J. R.: *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics (Cambridge Lecture Notes in Physics)*. UK : Cambridge University Press, 1999. – ISBN 0521655897
- [132] GARCIA, A. L. ; WAGNER, W.: Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo. In: *Phys. Fluids* 12 (2000), Nr. 10, S. 2621–2633
- [133] HADJICONSTATINOU, N. G.: Analysis of discretization in the direct simulation Monte Carlo. In: *Phys. Fluids* 12 (2000), Nr. 10, S. 2634–2638
- [134] HOCKNEY, R. ; EASTWOOD, J.: *Computer Simulation using Particles*. New York : McGraw-Hill, 1981
- [135] OKUDA, H.: Nonphysical Noises and Instabilities in Plasma Simulation due to a Spatial Grid. In: *J. Comp. Phys.* 10 (1972), S. 475–486
- [136] SPIRKIN, A. ; GATSONIS, N. A.: Unstructured 3D PIC simulations of the flow in a retarding potential analyzer. In: *Comp. Phys. Commun.* 164 (2004), Nr. 1–3, S. 383–389. – Proceedings of the 18th International Conference on the Numerical Simulation of Plasmas
- [137] GATSONIS, N. A. ; SPIRKIN, A.: A three-dimensional electrostatic particle-in-cell methodology on unstructured Delaunay-Voronoi grids. In: *J. Comp. Phys.* 228 (2009), Nr. 10, S. 3742–3761
- [138] *AIAA Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations*. AIAA, 1998 (AIAA Standards Series). – ISBN 1–56347–354–2
- [139] PETKOW, D. ; HERDRICH, G. ; LAUFER, R. ; GABRIELLI, R. A. ; ZEILE, O.: Comparative Investigation of Fusion Reactions for Space Propulsion Applications. In: *ISTIS Special Issue: Selected papers from the 26th International Symposium on Space Technology and Science* Bd. 7. Japan, 2009 (Transactions of Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Space Technology)
- [140] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY (Hrsg.): *Atomic Spectra Database*. National Institute of Standards and Technology, <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/>
- [141] VORONOV, G. S.: A Practical Fit Formula for Ionization Rate Coefficients of Atoms and Ions by Electron Impact: $Z = 1 - 28$. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 65 (1997), Nr. 1, S. 1–35
- [142] CHANG, Y.: The concept of collision strength and a unified kinetic calculation for hard-sphere interactions and inverse square force law interactions. In: *Phys. Plasmas* 10 (2003), Nr. 12, S. 4645–4660
- [143] TRUBNIKOV, B. A.: *Particle interactions in a fully ionized plasma*. New York : Consultants

Bureau, 1965 (Reviews of Plasma Physics)

[144] CHANG, Y.: *The Concept of Collisions Strength and its Applications*, University of North Texas, Dissertation, 2004

A. Nützliche Integrale

Folgende Beziehungen sind für Rechnungen in der theoretischen Gaskinetik nützlich:

$$I_x = \int_{a=0}^{\infty} v^x \exp(-yv^2) dv, \quad (\text{A.1})$$

hat die Ordnung x mit $y = m/(2k_B T)$. Die allgemeine Lösung lautet

$$I_x = \frac{1}{2} y^{-\left(\frac{1+x}{2}\right)} \Gamma\left(\frac{1+x}{2}\right), \quad (\text{A.2})$$

wobei Γ die Gammafunktion darstellt. Mit den in Tab. A.1 zusammengefassten Wertzuweisungen lassen sich Lösungen für $x = 0, 1, \dots, 7$ schnell ermitteln. Für $a = -\infty$ muss Gl. (A.2) um den Faktor $(1 + (-1)^x)$ erweitert werden.

z	1/2	1	3/2	2	5/2	3	7/2	4
$\Gamma(z)$	$\sqrt{\pi}$	1	$\sqrt{\pi}/2$	1	$3\sqrt{\pi}/4$	2	$15\sqrt{\pi}/8$	6

Tabelle A.1.: Tabellierte Gammafunktionswerte.

B. Tabellierte $A(\tau)$ -Funktion

Die tabellierten Wertepaare sind Ref. [30] entnommen und implementiert worden.

τ	A	τ	A	τ	A
0.01	100.5	0.1	10.51	1	1.207
0.02	50.50	0.2	5.516	2	0.4105
0.03	33.84	0.3	3.845	3	0.1496
0.04	25.50	0.4	2.987		
0.05	20.50	0.5	2.448		
0.06	17.17	0.6	2.067		
0.07	14.79	0.7	1.779		
0.08	13.01	0.8	1.551		
0.09	11.62	0.9	1.363		

Tabelle B.1.: Tabellierte Werte für $A(\tau)$ mit $0.01 \leq \tau \leq 3$.

C. Verwendete Simulationsparameter

Aus Gründen der Reproduzierbarkeit sind in diesem Abschnitt alle relevanten Simulationsparameter für die unterschiedlichen Rechnungen aufgelistet.

r_0 / m	m_{Ar} / kg	ϵ / J	$\alpha_1 / -$	$\alpha_2 / -$
$3.42 \cdot 10^{-10}$	$6.64 \cdot 10^{-26}$	$1.71 \cdot 10^{-21}$	3.677779	2.82673

Tabelle C.1.: Parameter für die Verifizierung des verallgemeinerten Starrkugelmodells.

n / m^{-3}	$\Psi_{e,Ar^+} / -$	$\Psi_{Ar} / -$	$\Delta t / s$	$N / -$	$F_{sim} / -$	T / kK
$3.6 \cdot 10^{21}$	0.05	0.90	10^{-10}	$3.6 \cdot 10^5$	10^{14}	20 – 50

Tabelle C.2.: Parameter für die Verifizierung des Kollisions- und Reaktionsmodells.

n / m^{-3}	$\Psi_{e,Ar^+} / -$	$\Delta t / s$	$N / -$	T_e / K	$E_{x,0} / eV$
$2 \cdot 10^{18}$	0.5	$2.79 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^5$	1	30

Tabelle C.3.: Parameter für die Verifizierung des Fokker-Planck-Lösers am Beispiel Elektronenstrahl in Ionenwolke.

$\Delta t / s$	T_E / eV	$E_{x,0} / eV$
$3.04 \cdot 10^{-7}$	2	100

Tabelle C.4.: Parameter für die Verifizierung des Fokker-Planck-Lösers am Beispiel Elektronenstrahl in Elektronenwolke.

n / m^{-3}	$\Psi_{e,C^+} / -$	$\Delta t / s$	$N / -$	$F_{sim} / -$	T / kK	Iter.
$2 \cdot 10^{16}$	0.5	$1.43 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^4$	216	50	10^5

Tabelle C.5.: Parameter für den Fokker-Planck-Energieerhaltungstest.

v_e / ms^{-1}	$v_{C,F} / ms^{-1}$	T / K	$F_{sim} / -$	$\Delta t / s$
$5 \cdot 10^6$	10^3	300	10^{14}	10^{-13}

Tabelle C.6.: Parameter für die Simulation der gekreuzten Teilchenstrahlen.

D. Verallgemeinerte Darstellung der Ratenkoeffizienten

Die nach Arrhenius benannte Darstellung der Ratenkoeffizienten beschreibt die Temperaturabhängigkeit der Rate. Nur diejenigen Teilchen haben das Potential chemisch zu reagieren, die auch über eine Mindestenergie verfügen. Nach der Stoßtheorie und der Transitionstheorie kann der Ratenkoeffizient dargestellt werden in der Form

$$k(T) = D(k_B T)^m \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right). \quad (\text{D.1})$$

Darin beschreiben D , E_a und m eine Konstante bezüglich des Sterik- bzw. Wahrscheinlichkeitsfaktors [66, 144], die für die Reaktion benötigte Aktivierungsenergie sowie einen theorie- und reaktionsabhängigen Wert gemäß Tab. D.1.

Arrhenius-Modell	m
Klassisch	0
Stoßtheorie	1/2
Transitionstheorie	1
Exp. Fit	$-1.5 \leq 4$

Tabelle D.1.: Zuordnung m -Wert und Arrhenius-Modell.

Beim klassischen Arrhenius-Modell verschwindet der temperaturabhängige prä-exponentielle Faktor. Da die Variation von m relativ klein und der exponentielle Term deutlich sensitiver ist geht man davon aus, dass die Theorien konsistent sind. Da jedoch Stoß- und Transitionstheorie unterschiedliche Aspekte einer chemischen Reaktion beschreiben, ergänzen sich die Theorien, ohne den m -Parameter theoretisch ermitteln zu können.

Nach [142] beruht jede der Darstellungen des Ratenkoeffizienten (D.1) in Verbindung mit Tab. D.1 auf der Verwendung eines Starrkugelmodells bzw. auf Interaktionspotentialen kurzer Reichweite. Durch Anwendung des Konzeptes der *Kollisionsstärke* als Maß für die Stärke eines Stoßes kann die Darstellung des Ratenkoeffizienten auf langreichweitige Interaktionspotentiale erweitert werden:

$$k(T) = D(k_B T)^{-3/2} \Gamma\left(\alpha, \frac{H_{min}}{k_B T}\right). \quad (\text{D.2})$$

Hierin beschreiben Γ und H_{min} eine unvollständige Gammafunktion sowie eine Energie, die im Fall der Stoßtheorie der Aktivierungsenergie E_A und im Fall der Thomson'schen Ionisationstheorie der Ionisationsenergie E_i entspricht. Für langreichweitige Interaktionspotentiale wie dem Coulomb-Potential ist $\alpha = -1$. Für das Starrkugelmodell ($\alpha = 1$) reduziert sich die unvollständige Gammafunktion zur Exponentialfunktion, d.h. $\Gamma(1, H_{min}/(k_B T)) = \exp(-H_{min}/(k_B T))$.

Lebenslauf

Dejan Petkow, geb. am 02.09.1977 in Burgas, Bulgarien

- 1984-1986 Diesterweg-Grundschule in Stendal
- 1986-1994 Comenius-Gymnasium in Stendal
- 1994-1996 Otto-von-Guericke-Gymnasium in Magdeburg
- 1996 Abitur
- 1996-1997 Zivildienst
- 1997-2004 Studium der Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart
- 1999-2000 Praktikumssemester MTU Maintenance, Hannover
- 2004 Studienarbeit
Portierung, Dokumentation und Erweiterung des FZKA-PIC-Codes zur Vorbereitung von Strömungs- und Halbleitersimulationen
am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart
- 2004 Diplomarbeit
Experimentelle und theoretische Untersuchung des magnetischen Drucks in induktiv beheizten Plasmageneratoren
am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart
- 2004 Diplom
- 01/2005 - 01/2011 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart
- 2005 Ausgezeichnet mit dem Preis der Freunde der Universität Stuttgart e.V. für die beste Diplomarbeit der Fakultät
- 2005 Ausgezeichnet mit dem Reisestipendium der Griepentrog Innovationsstiftung für die Präsentation der Diplomarbeit auf der 29th International Electric Propulsion Conference in Princeton, NJ, USA
- 2007 Ausgezeichnet mit dem Forschungsstipendium der Japan Society for the Promotion of Science
- 2008 Dreimonatiger Forschungsaufenthalt an der University of Tokyo, Japan
- 01/2010 - 1/2011 Gruppenleiter der Gruppe *Plasmamodellierung und -simulation* der Abteilung Raumtransporttechnologie am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart
- seit 02/2011 Research Fellow (Plasma Physics and Advanced Space Propulsion) im Advanced Concepts Team der ESA, ESTEC