

EMISSIONSPEKTROSKOPISCHE UNTERSUCHUNG DER UMSTRÖMUNG VON PROBENKÖRPERN IN HOCHENTHALPEN PLASMASTRÖMUNGEN

Von der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde des Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Michael W. G. Winter

aus Köln

Hauptberichterin:	Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz
Mitberichter:	Prof. Dr.-Eng. Dr.-Ing.E.h. Chul Park
Tag der mündlichen Prüfung:	8. Dezember 2006

Institut für Raumfahrtssysteme

Universität Stuttgart

2006

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Institut für Raumfahrtssysteme. Für die Gelegenheit zur Dissertation und die damit einhergehende Betreuung aber auch für die Möglichkeit, im Rahmen von verschiedenen Projekten über den Tellerrand hinauszublicken möchte ich meiner Hauptberichterin Frau Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz sehr herzlich danken. Besonderer Dank geht an Prof. Dr.-Eng. Dr.-Ing.E.h. Chul Park, der sich nicht nur als Zweitberichter zur Verfügung gestellt hat, sondern von Beginn der Arbeit an mit besonderem Interesse und reger Anteilnahme über internationale Grenzen hinweg meine Arbeit mitbetreut hat. Besonders die tiefeschürfenden fachlichen Diskussionen haben mir sehr geholfen.

Diese Dissertation ist erst möglich geworden durch die Unterstützung meiner Familie, die nie den Glauben an mich verloren hat. Weiterhin möchte ich mich bei meinen Freunden bedanken, die wie meine Familie viel zu oft hinter der Arbeit zurückstehen mussten.

Die Versuchsdurchführung wäre ohne die Hilfe meiner Kollegen am Institut für Raumfahrtssysteme nicht möglich gewesen. Vom eigentlichen Betrieb der Bodentestanlagen bis hin zur Unterstützung bei administrativen Problemen waren immer Kollegen zur Hilfe bereit, wenn es nötig war. Dafür und für die anregenden Diskussionen möchte ich mich bei allen sehr herzlich bedanken. Besonderer Dank gilt Dr.-Ing. Markus Fertig für die Überlassung der numerischen Ergebnisse und für die zahlreichen Interpretationsversuche. Für die intensive Betreuung durch die Werkstätten des Instituts möchte ich mich stellvertretend für alle Mitarbeiter bei Karl-Heinz Schneider und Dipl.-Ing Manfred Hartling bedanken. Dank geht ebenfalls an die Mitarbeiter der Hausverwaltung für ihre Unterstützung bei der Versuchsdurchführung. Besondere Erwähnung müssen hier auch die Studenten finden, die in Form von Studien- und Diplomarbeiten aber auch durch ihre Tätigkeit als studentische Hilfskräfte wertvolle Unterstützung geleistet haben. Stellvertretend für alle möchte ich mich hier besonders bei Dipl.-Phys. Thomas Pfrommer, Dipl.-Ing. Jürgen Schlutz, Dipl.-Ing. Markus Fromm und Dr.-Ing. Georg Herdrich bedanken.

Allen nicht genannten Kollegen und Freunden sei speziell gedankt für die herzliche und angenehme Arbeitsatmosphäre, die sicherlich wesentlich zu den am Institut möglichen Leistungen beiträgt.

Stuttgart, 20.12.2006

Michael Winter

Kurzfassung

EMISSIONSSPEKTROSKOPISCHE UNTERSUCHUNG DER UMSTRÖMUNG VON PROBENKÖRPERN IN HOCHENTHALPEN PLASMASTRÖMUNGEN

In dieser Arbeit werden emissionsspektroskopische Messungen im Freistrahlsystem als auch in der körpernahen Probenumströmung eines magnetoplasmadynamischen Generators analysiert. Rotations- und Vibrationstemperaturen der Moleküle NO, O₂, N₂ und N₂⁺ sowie elektronische Anregungstemperaturen von atomarem Sauerstoff und Stickstoff und von NO wurden aus den Messungen berechnet. Zu diesem Zweck wurde ein Programmpaket zur theoretischen Simulation der Molekülstrahlung zweiatomiger Moleküle entwickelt und zur Untersuchung der Moleküle eingesetzt. Zur Überprüfung dieses Programms wurden am Plasmawindkanal und an einem Mikrowellengenerator die Strahlung von NO, N₂ und N₂⁺ spektral hoch aufgelöst gemessen. Zusätzlich zu den emissionsspektroskopischen Untersuchungen wurden unterstützende Messungen mit elektrostatischen Sonden zur Ermittlung von Elektronentemperatur und -dichte und mit einem Fabry-Perot Interferometer zur Bestimmung von Translationstemperatur durchgeführt. Zur Interpretation der Ergebnisse wurde eine numerische Simulation der Probenumströmung herangezogen. Für diese Simulation wurde aus schon vorliegenden Messwerten für die Plasmaenthalpie unter Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht ein Anströmzustand berechnet, der angepasst wurde, bis die Numerik die gemessenen Oberflächenlasten reproduzierte. Die Ergebnisse der numerischen Simulation der Probenumströmung wurden auf der Staustromlinie mit den Messergebnissen verglichen.

Die emissionsspektroskopischen Experimente fanden sowohl vor einer wassergekühlten Sonde mit Kupferoberfläche als auch vor einer bei 1700°C glühenden Siliziumkarbid (SiC) Materialprobe statt. Die Berechnung von Molekültemperaturen war jedoch bedingt durch die in der Simulation nicht berücksichtigten Einflüsse der Strahlung der Erosionsprodukte nur vor der gekühlten Oberfläche möglich. Die Messergebnisse wurden zudem durch hochfrequente Plasmaoszillationen beeinträchtigt, deren Einfluss durch zeitlich aufgelöste emissionsspektroskopische Messungen und durch Messungen mit elektrostatischen Sonden abgeschätzt wurde.

Abschließend wurde ein Wiedereintrittsspektrometersystem (RESPECT) vorgeschlagen und für den Einsatz auf der Wiedereintrittskapsel EXPERT der ESA ausgelegt. In enger Kopplung an die Numerik sind die Ergebnisse des für 2008 vorgesehenen Fluges zur Überprüfung der verwendeten Chemiemodelle unter besonderer Berücksichtigung von Nichtgleichgewicht vorgesehen.

Abstract

EMISSION SPECTROSCOPIC INVESTIGATION OF THE FLOW FIELD AROUND A BLUNT BODY IN A HIGH ENTHALPY FLOW

Emission spectroscopic measurements of the free stream and the boundary layer around a blunt body in a subsonic plasma flow produced by a magneto plasma dynamic generator (MPG) are analysed. Rotational and vibrational temperatures of NO, O₂, N₂ and N₂⁺ as well as electronic excitation temperatures of atomic oxygen and nitrogen were calculated from the measured data. For this purpose, a code for the spectral simulation of the radiation of homonuclear molecules was developed and applied to the measured data. The simulation was controlled by emission spectroscopic measurements in high spectral resolution of plasmas generated by the MPG and by a microwave generator. The emission spectroscopic experiments were supplemented by measurements with electrostatic probe to determine electron temperature and density distributions and by measurements with a Fabry-Perot interferometer for the determination of translational temperature. To support the interpretation of the measured data, a numerical simulation of the flow field around the blunt body was used. The upstream inflow condition for this simulation was determined from an evaluation of already measured specific enthalpies under the assumption of equilibrium and iteratively adapted until the numerically determined surface loads were in agreement with the measured ones. The results of the numerical simulation were compared to the measurement along the stagnation line.

Although the emission spectroscopic measurements took place in front of a water-cooled copper probe and of a silicon carbide (SiC) material probe at 1700°C, the determination of molecular temperatures could only be performed in front of the water-cooled copper surface since the erosion product were not included in the spectral simulation. In addition, the measurements were disturbed by high frequency oscillations. The effect of these oscillations was investigated by timely resolved emission spectroscopy and by measurements with electrostatic probes.

Finally, a re-entry spectrometer system (RESPECT) was proposed and a design for the European re-entry capsule EXPERT was developed. With strong coupling to numerical simulation, the results of the flight, expected for 2008, will be used for a validation of the chemical models implemented in the numerical simulation with particular respect to non-equilibrium effects.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	5
Abstract	6
Inhaltsverzeichnis	7
Bezeichnungen	10
Kapitel 1 Einleitung	17
1.1 Grundlagen zum Test von Hitzeschutzmaterialien	18
1.2 Die Bedeutung der körpernahen Grenzschicht	20
1.3 Emissionsspektroskopie – Stand der Forschung	22
Kapitel 2 Theoretische Grundlagen	23
2.1 Atom- und Molekülstrahlung	23
2.1.1 Grundlagen zur Strahlung von Atomen.....	23
2.1.2 Bestimmung der Anregungstemperatur aus der Strahlung von Atomen.....	26
2.1.3 Vorgehensweise bei der Auswertung der Atomspektren	29
2.1.4 Grundlagen zur theoretischen Berechnung der Molekülstrahlung.....	32
2.1.5 Temperaturbestimmung aus Molekülspektren	41
2.2 Simulationsprogramme	42
2.2.1 PARADE	43
2.2.2 EMCAL	44
Verwendete Spektrale Simulation der Molekülstrahlung	45
Bestimmung von Abbruchkriterien für Rotations- und	
Vibrationsquantenzahlen	50
2.2.3 ASPEN	53
2.3 Auswertung von Dopplerverbreiterungen	56
2.4 Rekonstruktion von lokalen Intensitäten	61
2.4.1 Verfahren der Abel-Inversion für rotationssymmetrische Profile.....	62
2.4.2 Korrekturen für Abweichungen von der Rotationssymmetrie	63

2.5	Berechnung der Enthalpie	65
Kapitel 3	Beschreibung der experimentellen Aufbauten	69
3.1	Magnetoplasmadynamisch (MPD) erzeugte Plasmaströmungen	69
3.1.1	Die Plasmaquelle RD5	69
3.2	Versuchsaufbauten für emissionsspektroskopische Messungen	71
3.2.1	Versuchsaufbau mit niedriger Ortsauflösung	71
3.2.2	Messungen mit hoher Ortsauflösung zur Untersuchung der Grenzschicht	73
3.2.3	Intensitätskalibrierung	75
3.3	Versuchsaufbau zur Fabry-Perot-Interferometrie	77
3.4	Pendelaufbau für Messungen mit elektrostatischen Sonden.....	78
Kapitel 4	Experimentelle Ergebnisse	79
4.1	Bisher erfolgte Charakterisierung des Testpunktes.....	79
4.2	Numerische Berechnung der Probenumströmung.....	81
4.3	Überblick über die spektrale Plasmaemission	87
4.4	Spektral hoch aufgelöste Molekülspektroskopie	88
4.4.1	Messungen der Emission von N ₂ und NO am Mikrowellengenerator	88
4.4.2	Messungen der Emission von N ₂ ⁺	93
4.5	Untersuchung hochfrequenter Schwankungen	95
4.5.1	Zeitaufgelöste Emissionsspektroskopie	96
4.5.2	Frequenzuntersuchungen der Messungen mit elektrostatischen Sonden	101
4.6	Freistrahlscharakterisierung	102
4.6.1	Elektronendichten und -temperaturen aus Tripelsondenmessungen	102
4.6.2	Ergebnisse der Fabry-Perot-Interferometrie	104
4.6.3	Emissionsspektroskopische Ergebnisse	105
4.7	Grenzschichtuntersuchungen.....	111
4.7.1	Grenzschichtcharakterisierung auf Basis der integrierten Emission verschiedener Spezies vor Kupfer- und SiC-Oberflächen.....	111

4.7.2	Temperaturverteilungen aus Messungen der Atomstrahlung.....	116
4.7.3	Temperaturverteilungen aus emissionsspektroskopischen Messungen der Molekülstrahlung.....	119
Kapitel 5	Vorschlag eines Flugexperimentes.....	121
Kapitel 6	Zusammenfassung und Ausblick	129
Kapitel 7	English Summary	131
	Literaturverzeichnis.....	133
ANHANG	144
Anhang A:	Berücksichtigte Anregungszustände der Atome	144
Anhang B:	Fehlerrechnung beim Boltzmann-Plot	149
Anhang C:	Unscharfe Abbildung und Strahlverfolgung	151
	C.1: Betrachtungen zur unscharfen Abbildung	151
	C.2: Programm zur Strahlverfolgung	156
Anhang D:	Verwendete Spektroskopische Konstanten der Moleküle.....	162
	D.1: Konstanten zur Ermittlung der Übergangsenergie	162
	D.2: Hönl-London-Faktoren.....	165
	D.3: Kopplungskonstanten für Hund'sche Fälle	167
Anhang E:	Grenzwerte für Rotationsquantenzahlen.....	168
Lebenslauf	175

Bezeichnungen

Formelzeichen

A, B	Konstanten zur Berechnung des Übergangs zwischen den Hund'schen Fällen
A_{ki}	Einstein'sche Übergangswahrscheinlichkeit von Niveau k auf das Niveau i
b	Abstand zur Linse auf der Bildseite (Spektrometerseite)
B	Bildgröße
b	Steigung der Regressionsgerade, auch Abstand zur Linse auf der Bildseite
B_e, D_e	Rotationskonstanten
B_v	Rotationskonstante im Schwingungszustand v
$c_{p,i}$	spezifische Wärme der Komponente i
D	Plattenabstand im Fabry-Perot-Interferometer, auch Durchmesser
D_v	Zentrifigalaufweitungskonstante
E, E_λ	Energie, spektrale
E'	Energie des oberen Niveaus
e'	elektronische Quantenzahl des oberen Zustands
E''	Energie des unteren Niveaus
E_{el}	elektronische Anregungsenergie
F	Rotationsenergie, normiert durch $(h c)$
f	Brennweite
$F_{N_2}, F_{N_2^*}$	Skalierungsfaktoren
$F(e', v', J')$	rotatorischer Anregungszustand
F_1, F_2	Rotationsenergie des oberen und unteren Niveaus
f_{λ_0}	Fokuslänge bei der Wellenlänge λ_0
g	Abstand zur Linse auf der Gegenstandsseite (Plasmaseite)
G	Gegenstandsgröße
G	Vibrationsenergie, normiert durch $(h c)$
$G(e', v')$	vibratorischer Anregungszustand
g_i	elektronische Entartung des Energieniveaus i

g_k	elektronische Entartung des Energieniveaus k
\hat{h}	Hamilton Operator
h_{chemisch}	chemische Enthalpie
h_{el}	Anteil an der spezifischen Gesamtenthalpie durch elektronische Anregung
h_{ges}	spezifische Gesamtenthalpie
$h_{i,\text{chem}}$	chemische Bildungsenthalpie
h_{kin}	kinetische Enthalpie
$h_{\text{rot,vib}}$	Rotatorisch-vibratorische Enthalpie
h_{statisch}	statische Enthalpie
$h_{\text{thermisch}}$	thermische Enthalpie
$I_{\text{mess},\Delta\lambda_{1/2}}$	gemessene Intensität, integriert über die Wellenlänge im Intervall von λ_1 bis λ_2
$I_{N_2,\Delta\lambda_{1/2}}$	simulierte Intensität von N_2 , integriert über die Wellenlänge im Intervall von λ_1 bis λ_2
$I_{N_2^+,\Delta\lambda_{1/2}}$	simulierte Intensität von N_2^+ , integriert über die Wellenlänge im Intervall von λ_1 bis λ_2
$I_{\text{Eichlampe,gemessen}}$	spektrale Intensität der Eichlampe aus Kalibriermessung
$I_{\text{Eichlampe,theor}}$	spektrale Intensität der Eichlampe aus Eichkurve
I_{ki}	Intensität beim Übergang von angeregten Niveau k auf das Niveau i
I_{mess}	gemessene Intensität
I_{Messung}	Rohdaten der zu kalibrierenden Messung
$I_{\text{Messung, korrigiert}}$	Intensitätskorrigierte Messdaten
j	Trägheitsmoment
\mathbf{J}	Gesamtdrehimpuls des Moleküls in vektorieller Form
J	rotatorische Quantenzahl des oberen Zustands
\mathbf{K}, K	Gesamtdrehimpuls ohne Berücksichtigung vom Spin in vektorieller Form und als Quantenzahl
l	Länge der Sichtlinie
\mathbf{L}, L	elektronischer Bahndrehimpuls in vektorieller Form und als Quantenzahl
m	Masse
n	Linienanzahl
\mathbf{N}	Drehimpuls des Moleküls aufgrund der Atomkerne in vektorieller Form

n	Brechungsindex
N', N''	Teilchendichten des oberen und unteren Niveaus
n_0	Gesamteilchendichte
n_k	Besetzungsdichte des angeregten Zustands k
n_{λ_0}	Brechungsindex bei der Wellenlänge λ_0
p^0	Druck im Standardzustand (101300 Pa)
p_{stat}	statischer Druck
$Q_{\omega}^{D_0}$	Rotatorisch-vibratorische Zustandssumme, bis zur Dissoziationsenergie berechnet
Q_0	Querschnitt an der Sondenposition
Q_A	Anströmquerschnitt für die URANUS Rechnung
$q_{v',v''}$	Frank-Condon Faktor
R	Atomabstand, Korrelationsfaktor
$R_e(\bar{r}_{v',v''})$	elektronisches Übergangsmoment
R, r	Radius, auch internuklearer Abstand
r_e	Gleichgewichtsabstand der Atome ohne Vibrations- und Rotationseinfluss
$S_{J'A'}^{J''A''}$	Hönl London Faktor
\underline{S}, S	Elektronenspin in vektorieller Form und als Quantenzahl
T^0	Temperatur im Standardzustand (298,15 K)
$T(e')$	elektronischer Anregungszustand
T_{anr}	Anregungstemperatur
T_G	Pseudotemperatur
T_{tr}	Translationstemperatur
U	Zustandssumme
U	Molekülpotential
u_{Gerade}	Standardabweichung der logarithmischen Terme von der Regressionsgeraden
u_T	Temperaturunsicherheit
$U_{v,J}$	Molekülpotential, modifiziert durch Rotations-Vibrations-Kopplung
u_{x_i}	Messunsicherheiten der direkt gemessenen Größen x_i
u_y	Messunsicherheit der kombinierten Messgröße y
v'	vibratorische Quantenzahl des oberen Zustands

v_{PL}	gerichtete Geschwindigkeit der Plasmaströmung
v_{th}	thermische Geschwindigkeit
$W(r)$	Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von v' nach v'' beim internuklearen Abstand r
x	Differenz des internuklearen Abstands zum Gleichgewichtsabstand
x_i	Einzelmessgrößen
y	aus den Einzelmessgrößen kombinierte Größe
Y	Kopplungsfaktor zwischen den Hund'schen Fällen
Z_1, Z_2	Konstanten zur Berechnung des Übergangs zwischen den Hund'schen Fällen

Griechische Symbole

$\bar{\nu}$	Wellenzahl
$\Delta\lambda_F$	freier Spektralbereich
$\Delta\lambda_r, \Delta\lambda_{rad}$	Verbreiterung durch radiale Geschwindigkeitskomponente des Plasmastahls
$\Delta\lambda_{90}$	Unter 90° zur Plasmawindkanalhochachse gemessene spektrale Verbreiterung
$\Delta\lambda_A$	Apparateverbreiterung
$\Delta\lambda_{HWB,V}$	Halbwertsbreite des Voigt-Profiles
$\Delta\lambda_{HWB,G}$	Halbwertsbreite des Gauss-Profiles
$\Delta\lambda_{HWB,L}$	Halbwertsbreite des Lorentz-Profiles
$\Delta\lambda_T$	spektrale Verbreiterung infolge der thermischen Geschwindigkeit
$\underline{\Lambda}, \Lambda$	Projektion des elektronischen Bahndrehimpulses auf die intermolekulare Achse in vektorieller Form und als Betrag
Θ	Raumwinkel
$\underline{\Sigma}, \Sigma$	Projektion des Elektronenspins auf die intermolekulare Achse in vektorieller Form und als Betrag
$\underline{\Omega}, \Omega$	elektronischer Gesamtbahndrehimpuls der Elektronen um die intermolekulare Achse in vektorieller Form und als Betrag
α	Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und der Plasmalängsachse
α_e	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Rotationsenergie
β	Exponentialfaktor im Morsepotential, auch Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und der Plasmahochachse, auch Energieakkomodationskoeffizient
β_e	Konstante in der Dunham-Entwicklung

δ	Kronecker-Zahl
δ_e	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Rotationsenergie
$\delta\nu_{ki}$	Natürliche Linienbreite des Übergangs zwischen den elektronischen Niveaus i und k
$\delta\nu_{ki}$	natürliche Linienbreite
ϵ	Emissionskoeffizient
ϵ_L	spektraler Emissionsgrad
$\epsilon_{rot,k}$	Rotationsenergie der Spezies k
$\epsilon_{vib,k}$	Vibrationsenergie der Spezies k
$\epsilon(r)$	lokaler Emissionskoeffizient
γ_e	Konstante in der Dunham-Entwicklung
γ_v'	Konstante in der Dunham-Entwicklung
φ, θ	Öffnungswinkel
λ	Wellenlänge
μ_A	reduzierte Molekülmasse
ν	Frequenz
ν_{ki}	Frequenz der ausgesandten Strahlung
ν_{osz}	Oszillationsfrequenz des harmonischen Oszillators
$\theta_\gamma, \theta_\nu$	charakteristische Temperaturen
ρ_{ges}	Gesamtdichte
ρ_i	Dichte der Spezies i
τ_i	Lebensdauer Niveau i
τ_i, τ_k	Lebenszeiten der elektronischen Niveaus i und k
τ_k	Lebensdauer Niveau k
ν	Vibrationsquantenzahl
ω_e	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Vibrationsenergie (Schwingungsfrequenz des harmonischen Oszillators)
$\omega_e x_e$	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Vibrationsenergie (Abweichung von ω_e im Morse Potential)
$\omega_e y_e$	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Vibrationsenergie
$\omega_e z_e$	Konstante in der Dunham-Entwicklung der Vibrationsenergie

$\Psi'_{\text{vib}}, \Psi''_{\text{vib}}$	Vibrationswellenfunktion des oberen und unteren Niveaus
ζ_i	Massenanteil Spezies i

Konstanten

$h = 6,62620 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$	Plancksches Wirkungsquantum
$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
$k = 1,38062 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$	Boltzmannkonstante

Weitere Indizes

Achse	im Fokus auf der Plasmaseite
ax	axial
el	elektronisch; Elektronen-
ges	gesamt
hinter	hinter dem Fokus auf der Plasmaseite
i	angeregtes Niveau, auch Komponente oder Spezies
k	angeregtes Niveau
kin	kinetisch
pl	Plasma
proj	projiziert
rad	radial
rot, r	rotatorisch
vib	vibratorisch
Schlitz	im Fokus auf der Spektrometerseite
th	thermisch
trans , tr	translatorisch
vor	vor dem Fokus auf der Plasmaseite

Abkürzungen

ASPEN	Programmname: <i>Automatische Spektrenauswertung von N_2^+</i>
EMCAL	Programmname: <i>Emission of Molecules: Computational Algorithm</i>
ESA	European Space Agency, Europäische Raumfahrtagentur
FIRE	Flugexperiment USA: F light I nvestigation of the R eentry E nvironment
FPI	F abry P erot I nteferometrie/Interferometer
IRS	I nstitut für R aumfahrtsysteme der U niversität S tuttgart
MPD	M agnetoplasmadynamisch
MWG	M ikrowellengenerator
NASDA	N ational S pace D evelopment A gency of J apan
NEQAIR	Programmname: <i>Non-Equilibrium Air Radiation</i>
NIR	N ahes I nfrarot: Spektralbereich ab etwa 770 nm, hier verwendet zwischen 740 nm und 1000 nm.
PARADE	Programmname: <i>Plasma Radiation Database</i>
PMT	P hoto M ultiplier T ube
PWK	P lasmawindkanal
QSS	Q uasi S tady S tate: Methode zur Berechnung elektronischer Nichtgleichgewichtsanregung
SINA	Programmname: S equential I terative N on- E quilibrium A lgorithm
SPRADIAN	Programmname: <i>Structured Package for Radiation Analysis</i>
RESPECT	R e- E ntry S pectrometer, Wiedereintrittsspektrometersystem
SFB	S onderforschungsbereich
URANUS	Programmname: <i>Upwind Relaxation Algorithm for Nonequilibrium Flows of the University of Stuttgart</i>
USA	U nited S tates of A merica, V ereinigte S tstaaten von A merika
UV	U ltravioletter Spektralbereich zwischen 200 nm und 400 nm
VUV	V akuum- U V: Spektralbereich unter 200 nm

Kapitel 1

Einleitung

Der Mensch ist auf dem Weg in den Weltraum. Wie in allen neu erschlossenen Grenzgebieten müssen hierbei verschiedene Phasen der Erforschung und Erschließung durchlaufen werden. Nach den ersten gewaltigen Schritten in der 60er Jahren des vergangenen Jahrhunderts erlebten die 80er und 90er Jahre eine intensive industrielle und kommerzielle Nutzung des erdnahen Weltraums. Der nächste Schritt ist es, den Weg in den Weltraum weiter zu erleichtern und zu verbilligen. In diesem Zusammenhang wächst in Hinblick auf Gewicht und Kosteneffizienz das Bedürfnis nach vollständig wieder verwendbaren Raumtransportsystemen, wie sie im Konzept schon Mitte des 20. Jahrhunderts, z.B. durch Eugen Sänger beschrieben wurden [105]. Bezüglich Gewicht und Betriebskosten ist eine kritische Komponente das Hitzeschutzsystem. Bedingt durch die hohen Fluggeschwindigkeiten beim atmosphärischen Eintritt entsteht ein Verdichtungsstoß vor dem Raumfahrzeug. Durch diesen Stoß heizt sich das Gas stark auf. Auf Grund der hohen Gastemperaturen werden hohe Wärmelasten auf die Fahrzeugoberfläche aufgebracht. Diese Wärmelasten sind typischerweise im Staupunkt und im Bereich von Flügelvorderkanten oder Steuerklappen am höchsten. Zumindest teilweise ist diese Forderung nach Wiederverwendbarkeit und Wirtschaftlichkeit durch das im Prinzip wieder verwendbare Hitzeschutzsystem des amerikanischen Shuttle Orbiters verwirklicht, der jedoch umfangreiche Wartungsarbeiten und einen häufigen Austausch einzelner Kacheln zwischen den Flügeln erfordert. Einen Schwerpunkt bei der Konzeption von potentiellen Nachfolgesystemen [25] stellt die Entwicklung und der Test geeigneter Hitzeschutzmaterialien dar. Die experimentelle Qualifikation geschieht in Plasmawindkanälen, in denen die Wiedereintrittsbedingungen und somit die auftretenden thermo-chemischen Lasten auf den Hitzeschutzschild für kritische Flugphasen nachgestellt werden [10]. Ein wesentliches Problem hierbei ist durch die Notwendigkeit einer möglichst genauen Charakterisierung der erzeugten Plasmen gegeben, die jedoch benötigt wird, um eine Zuordnung zu realen Flugzuständen vornehmen zu können. Diese Charakterisierung wird erschwert durch die sowohl in der experimentellen Simulation wie auch beim realen Wiedereintritt auftretenden Nichtgleichgewichtseffekte im Plasma. Simulationsziel ist die thermo-chemische Ähnlichkeit der körpernahen Grenzschicht in Simulation und Flug. Optische Verfahren bieten sich hierbei zur Charakterisierung an, da sie berührungslos arbeiten und die Strömung nicht beeinflussen [5]. Für die vorliegende Arbeit wurden wegen der Vielfalt der zugänglichen Größen emissionsspektroskopische Methoden gewählt. Schon aus dem Auftreten einzelner Emissionslinien können qualitative Informationen über die Chemie gewonnen werden und über die räumliche Verteilung sind Aussagen über das Strömungsfeld möglich. Informationen über Temperaturen und Teilchendichten sind in den Spektren enthalten, erfordern allerdings Annahmen über die Verteilungen der verschiedenen, beteiligten Energieformen [5], die nur im Gleichgewichtsfall hinreichend

gut bekannt sind. Im Fall der Emissionsspektroskopie erschweren Nichtgleichgewichtseffekte besonders stark die Interpretation der gewonnenen Ergebnisse, sodass eine Überprüfung der für die Auswertung getroffenen Voraussetzungen einen wichtigen Bestandteil der Vorgehensweise darstellt. Aus diesem Grund ist es sinnvoll weitere Messverfahren heranzuziehen, um die erzielten Ergebnisse zu stützen und die Interpretation zu erleichtern. In Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden dazu die Fabry-Perot Interferometrie zur Bestimmung der Translationstemperatur, die zur Auswertung der idealen Gasgleichung benötigt wird, und Untersuchungen mit elektrostatischen Sonden zur Ermittlung von Elektronentemperatur und -dichte herangezogen, da die Anregung der strahlenden Energieniveaus im Wesentlichen durch Stöße mit den Elektronen geschieht. Über die Untersuchungen in Bodentestanlagen hinaus sind jedoch Flugexperimente ein wichtiges Instrument zur Bestätigung der Qualität von experimentellen und numerischen Simulationsverfahren.

Im Folgenden werden die Grundlagen zum Test von Hitzeschutzmaterialien und die Bedeutung der körpernahen Grenzschicht erläutert und ein kurzer Überblick über den Stand der Forschung bezüglich Emissionsspektroskopie an Hochenthalpieströmungen gegeben. In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen der Atom- und Molekülstrahlung kurz zusammengefasst und die verwendete Simulation der Molekülstrahlung erklärt. Weiterhin werden das Verfahren zur Rekonstruktion lokaler Intensitäten aus den integriert gemessenen Spektren auf Basis einer Abel-Inversion, ein Strahlverfolgungsprogramm zur Überprüfung der Voraussetzungen für die Abel-Inversion und zur Auslegung eines Flugspektrometers, sowie die Verfahren zur Auswertung von Dopplerverschiebungen und Verbreiterungen und die Grundlagen zur Berechnung der Enthalpie erklärt. Nach der Beschreibung der verwendeten Versuchsaufbauten in Kapitel 3 werden in Kapitel 4 die Messergebnisse dargestellt und interpretiert. Dazu werden zuerst Ergebnisse aus früheren Arbeiten zur Charakterisierung des Messpunktes zusammengefasst, aus denen eine Anströmzustand für die numerische Simulation abgeleitet wurde. Nach einer Beschreibung der Ergebnisse der numerischen Simulation werden die Auswirkungen von hochfrequenten Schwankungen des Plasmastrahls untersucht, um deren Auswirkungen auf die Messmethoden zur Charakterisierung des Plasmas abzuschätzen. In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der Messungen durch Emissionsspektroskopie, Fabry Perot Interferometrie und elektrostatische Sonden im Freistrahl dargestellt. Die emissionsspektroskopischen Messergebnisse werden im Vergleich mit den Ergebnissen der numerischen Simulation der Probenumströmung einer wassergekühlten Kupferprobe und einer Siliziumkarbid-Materialprobe diskutiert. Abschließend werden die Messergebnisse diskutiert. In Kapitel 5 wird der Entwurf und die Auslegung eines Flugspektrometersystems zum Einsatz auf der Rückkehrkapsel EXPERT der ESA vorgestellt, bevor die Ergebnisse zusammengefasst werden.

1.1 Grundlagen zum Test von Hitzeschutzmaterialien

Zum Schutz des Fahrzeuges finden, abhängig von der zu erwartenden Maximalbelastung, verschiedene Hitzeschutzsysteme Verwendung. Für hochenthalpe Wiedereintritte, z.B. bei Rückkehrmissionen aus dem erdfernen Weltraum, müssen Ablatorwerkstoffe benutzt werden, die sich während des Eintritts thermisch zersetzen und für wieder verwendbare Raumfahrzeuge also ungeeignet sind. Wird Wiederverwendbarkeit ohne aktive Kühlung angestrebt, so bleibt das Prinzip der Strahlungs-

kühlung. Für weite Teile des Raumfahrzeugs können metallische Werkstoffe verwendet werden, für die kritischsten Bereiche bieten sich jedoch aufgrund ihrer guten thermischen Beständigkeit und ihres hohen Emissionsgrades keramische Werkstoffe an. Hier sind vor allem Kohlenstoff basierte Keramiken zu nennen. In dieser Arbeit wurden Materialproben aus Siliziumkarbid (SiC) benutzt, da SiC meist als Beschichtung auf kohlefaserverstärkten Werkstoffen den direkten Kontakt zum Plasma darstellt. Über die thermische Beständigkeit hinaus bildet sich auf SiC für einen weiten Bereich von Plasmazuständen durch Kontakt mit dem umgebenden Sauerstoff eine SiO_2 -Schicht an der Oberfläche. Aufgrund der geringen Sauerstoff-Durchlässigkeit bildet diese Schicht im Folgenden einen Schutz gegen Oxidation durch das Plasma und die Erosion des Oberflächenmaterials wird deutlich vermindert (passive Oxidation).

Für die emissionsspektroskopischen Untersuchungen reicht jedoch die Untersuchung von solchen Materialproben nicht aus, da zur Ermittlung von makroskopischen Größen der Plasmaströmung wie Staudruck und Wärmefluss gekühlte Sonden eingesetzt werden, deren Messwerte wiederum durch Einflüsse wie z.B. der Oberflächenkatalyzität beeinflusst werden [10, 105]. Es kann nicht vorausgesetzt werden, dass die Grenzschicht vor diesen verschiedenen Oberflächen gleich ist, was durch vergleichende Messungen vor beiden Oberflächen nachgewiesen wurde.

Die Frage nach der Wahl einer geeigneten Bodentestanlage zum Test von Hitzeschutzmaterialien wird durch vielfältige, sich teilweise widersprechende Forderungen beeinflusst. Am Wichtigsten sind die geforderten Lasten, die durch den nachzustellenden Flugzustand definiert werden. Auf der Materialseite ist dies die Oberflächentemperatur des Hitzeschutzmaterials, die eng an die durch das Plasma eingetragene Wärmelast und den herrschenden Staudruck gekoppelt ist. Im Staupunkt können diese Forderungen über Grenzschichtbeziehungen [88] in einen Anströmzustand überführt werden, für den eine der wichtigsten Bestimmungsgrößen durch die Enthalpie gegeben ist, also durch die Summe aller im Plasma enthaltenen Energieformen unter besonderer Berücksichtigung der inneren Energie.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Frage nach der Natur der geplanten Untersuchungen, die sich grundsätzlich in Materialuntersuchungen und Bauteiltests unterteilen lässt. Für Materialuntersuchungen reichen meist verhältnismäßig kleine Probendurchmesser aus, die häufig in einer Staupunktkonfiguration getestet werden, während für den Test von Bauteilgruppen oder ganzen Flugkörpern (hier sind im Wesentlichen Wiedereintrittskapseln bzw. deren Hitzeschutz gemeint) größere Strahldurchmesser zur Verfügung gestellt werden müssen. Nicht zuletzt aus Gründen der Kosteneffizienz finden jeweils unterschiedliche Anlagentypen Verwendung.

Generell ist der thermodynamische Zustand des Plasmas in den für die Wiedereintrittssimulation verwendeten Plasmawindkanälen noch nicht hinreichend genau geklärt. Unter den bestehenden Typen ist bisher die von thermischen Lichtbogen-Generatoren erzeugte Strömung am besten verstanden, vor allem da in der Brennkammer dieser Geräte bedingt durch den hohen Druck oftmals ein Gleichgewichtszustand angenommen werden kann. Speziell bei den Geräten in Konstriktorbauweise stellt der Lichtbogen nur die Leistung zur Aufheizung des Gases zur Verfügung, die Interaktion des elektrischen Stromes und des zwangsweise gleichzeitig auftretenden Magnetfeldes spielen für die in der Testsektion erzeugte Plasmaströmung keine wesentliche Rolle. Das Strömungsfeld in solchen Windkanälen ähnelt in seinen wesentlichen Charakteristika dem von konven-

tionell geheizten, supersonischen Windkanälen und ist nicht so kompliziert wie das der in dieser Arbeit behandelten Geräte. Die Hauptnachteile von thermischen Lichtbogengeneratoren sind jedoch, dass diese Geräte, resultierend aus den im Bereich der Grenzenthalpie sehr stark ansteigenden Strahlungsverlusten, in der maximal erreichbaren Enthalpie auf etwa 30 MJ/kg begrenzt sind, und dass zumindest die Großanlagen in Konstriktorbauweise, wie sie z.B. in Amerika [111] oder in Italien [107] verwendet werden, sowohl in der Anschaffung wie auch im Unterhalt sehr aufwendig sind.

Mit magnetoplasmadynamischen (im folgenden mit MPD bezeichnet) Plasmageneratoren, wie sie durch die am Institut für Raumfahrtsysteme entwickelt und verwendet werden, kann durch die hohen Austrittsgeschwindigkeiten eine weit höhere Enthalpie von bis zu 150 MJ/kg erreicht werden. MPD-Generatoren gehen aus der Verwendung als Raketen-Triebwerk hervor [2, 115] werden wegen der erwarteten hohen erzielbaren Austrittsgeschwindigkeiten bei für elektrische Triebwerke hohen Schubdichten als sehr viel versprechend angesehen. In den Plasmawindkanälen wird die Strömung neben der thermischen Entspannung in der Düse direkt durch die Interaktion der geladenen Teilchen mit den durch den Lichtbogenstrom induzierten magnetischen Feldern beschleunigt. Aufgrund der subsonischen Natur der Strömung in der Testsektion und der verhältnismäßig kleinen Dichte liegt der dynamische Druckanteil typischerweise deutlich niedriger als bei durch reine Lichtbogengeneratoren erzeugten Strömungen. Die an sich hohe Enthalpie im Kernstrahl wird allerdings durch zwei Phänomene verringert: Um hohe Staudrücke zu erreichen, muss der Umgebungsdruck im Tank angehoben werden, und um die glühende Kathode vor Erosion zu schützen, wird der Sauerstoff erst im Bereich der Düse zugeführt und vermischt sich in der Folge mit dem Stickstoff-Kernstrahl. Die Kernenthalpie wird in diesem Falle durch Kaltgaseinmischung von außerhalb des Hauptstrahls gemindert. Die elektromagnetischen Interaktionen und die Mischungseffekte erschweren das Verständnis der physikalischen Prozesse im Vergleich zu thermischen Lichtbogen-Generatoren. Da die Maximalwerte der spezifischen Enthalpie weit höher sind als in einem Wiedereintritt aus typischen Erdumlaufbahnen gefordert wird, gewinnen MPD-Generatoren vor allem in Hinblick auf Missionen mit höheren Eintrittsgeschwindigkeiten immer mehr an Bedeutung. Rückkehrmissionen vom Mars, den äußeren Planeten, aber auch von Asteroiden oder Kometen-Missionen erfordern Maximalenthalpien von etwa 80 MJ/kg und mehr.

1.2 Die Bedeutung der körpernahen Grenzschicht

Im realen Wiedereintritt wird das ruhende Gas im Verdichtungsstoß vor dem Raumfahrzeug stark komprimiert und gleichzeitig aufgeheizt. Dabei wird vor allem die Translationstemperatur innerhalb weniger freier Weglängen auf sehr hohe Werte angehoben. Nach dem Stoß strömt das Gas entlang der Staustromlinie mit Unterschallgeschwindigkeit auf das Raumfahrzeug zu. Auf dem Weg zur Fahrzeugoberfläche verteilt sich die in der Translationstemperatur gespeicherte Energie auf die anderen Energiezustände. Moleküle werden elektronisch, rotatorisch und vibratorisch angeregt und können ionisiert oder dissoziiert werden. Die entstandenen Atome können wiederum elektronisch angeregt und ionisiert werden. Die aus der Ionisation frei werdenden Elektronen wer-

den durch Stöße mit den Schwerteilchen geheizt. Nahe der Körperwand bilden sich verschiedenen dicke Grenzschichten aus. Zuerst einmal steigen Druck und Temperatur im Aufstaugebiet. In einer Unterschallströmung dehnt sich dieser Bereich theoretisch bis ins Unendliche aus. Wenn im Folgenden von der Grenzschicht gesprochen wird, ist allerdings nicht dieser Aufstaugebiet gemeint, sondern die Grenze, an der die Auswirkungen von Oberflächenprozessen in der Strömung sichtbar werden. Diese Definition wird bei der Darstellung der numerischen Simulation der Probenumströmung in Kapitel 4 noch näher erläutert werden. Im gesamten Nachstoßgebiet befindet sich das Plasma typischerweise im Nichtgleichgewicht. In diesem Falle finden an der Körperoberfläche katalytisch beeinflusste Prozesse der Molekülbildung durch die verschiedenen Atome statt. Hierbei begünstigt eine hohe Oberflächenkatalyzität Reaktionen, die das Plasma in Richtung der Gleichgewichtszusammensetzung treiben. Die entstehenden Moleküle wie auch Erosionsprodukte des Hitzeschutzmaterials werden dabei durch Diffusionsprozesse gegen die Anströmung stromauf transportiert.

Im Plasmawindkanal laufen nahe einer Probe die gleichen Prozesse ab, allerdings unterscheidet sich der Entstehungsprozess des Plasmas grundsätzlich vom Freiflug. Im Plasmawindkanal wird das zuströmende Gas in einem Plasmagenerator geheizt und somit teilweise dissoziiert, angeregt und ionisiert, in einem MPD Generator wird das Plasma zusätzlich magnetisch beschleunigt. Der größte Teil des Energieeintrags erfolgt hierbei durch Ohm'sche Heizung der Elektronen, die wiederum durch Stöße ihre Energie an die Schwerteilchen übertragen. Zusätzlich sollte in Lichtbogen beheizten Plasmageneratoren die Kathode vor Sauerstoff geschützt werden, um Elektrodenerosion und die daraus resultierende Plasmaverunreinigung zu verhindern. Der Sauerstoff wird also dem Stickstoff verhältnismäßig spät beigemischt, was im magnetoplasmadynamischen Generator erst in der Düse geschieht. Bei den betrachteten Plasmazuständen entsteht auf diese Weise im für die Materialuntersuchungen relevanten Teil des Plasmastrahls eine Unterschallstrahlströmung. Damit unterscheidet sich der Anfangszustand des erzeugten Plasmas deutlich vom realen Wiedereintritt.

Wesentlich für die Belastungen eines Hitzeschutzmaterials ist allerdings die Kontaktzone des Plasmas mit der Oberfläche des Hitzeschutzschildes, also die körpernahe Grenzschicht, die den Plasmazustand an der Oberfläche definiert. Bei der experimentellen Simulation der Staupunktströmung in Plasmawindkanälen wird daher darauf verzichtet, aerodynamische Ähnlichkeiten zu erlangen, wie sie in konventionellen Windkanälen angestrebt werden. Stattdessen soll eine thermochemische Ähnlichkeit erreicht werden, bei der die thermischen und chemischen Lasten auf eine Materialprobe denen gleichen, die auf einen Hitzeschutzschild beim Wiedereintritt wirken. Dazu muss nur die körpernahe Grenzschicht korrekt nachgebildet werden, nicht aber das Anströmgebiet. Bedingt durch die oben beschriebenen Unterschiede in der Plasmaerzeugung ist es notwendig nachzuweisen, dass die resultierende Grenzschicht tatsächlich dem Flugzustand entspricht. Gekühlte Sonden, die die gleiche Geometrie wie die Materialproben aufweisen (z.B. Wärmeflusssonden oder Druckmesssonden), erzeugen dabei ein sehr ähnliches Strömungsfeld. Sie weisen jedoch gravierende Unterschiede bezüglich der Oberflächenkatalyzität und damit auch in Hinsicht auf die chemischen Prozesse in der körpernahen Grenzschicht auf. Im Gegensatz zu Sondenexperimenten stören passive optische Verfahren das Strömungsfeld nicht und eignen sich daher besonders gut zur Untersuchung dieser sehr sensitiven Region.

1.3 Emissionsspektroskopie – Stand der Forschung

An dieser Stelle kann kein kompletter Überblick über Einsatzmöglichkeiten der Emissionsspektroskopie gegeben werden, sondern es soll ein Abriss der Einsatzmöglichkeiten in den untersuchten Plasmen gegeben werden. Das Verfahren der Emissionsspektroskopie ist bereits erfolgreich auf Strömungen in verschiedenen Plasmawindkanaltypen angewendet worden [41, 66, 70, 84, 99]. Die Ermittlung von Anregungs-, Rotations- und Vibrationstemperaturen steht dabei im Vordergrund, allerdings wurden auch Versuche zur Teilchendichtebestimmung unternommen [11]. Diese Studien zeigten sowohl das Potenzial für wertvolle Informationen über das Plasma aber auch signifikante Limitierungen. Sowohl die supersonischen Strömungen thermischer Plasmageneratoren in Konstriktorbauweise wie auch die Strömungen hinter dem Stoß in Stoßrohrwindkanälen sind in starkem Nichtgleichgewicht. Aus den emissionsspektroskopischen und numerischen Untersuchungen geht neben einer Bestätigung der Nichtgleichgewichtseffekte hervor, dass die N_2^+ -Strahlung, die in Luftplasmen in Plasmawindkanälen die wohl stärkste molekulare Strahlungsquelle darstellt, diesen Nichtgleichgewichtseffekten stark unterworfen ist und wahrscheinlich nur unzureichend Informationen über die Vibrationsanregung des molekularen Stickstoffs in neutraler Form zulässt, der wiederum den größten Anteil an Molekülen stellt. Die Rotationstemperatur jedoch sollte eine Kopplung an die Translationstemperatur aufweisen, weswegen Diagnostik an diesem starken Strahler trotzdem sinnvoll ist.

Am IRS wurden im Laufe der letzten Jahre neben der numerischen und theoretischen Analyse wesentliche Arbeitsschwerpunkte dadurch definiert, die von MPD-Generatoren erzeugten Strömungen plasmadiagnostisch zu charakterisieren. Dazu gehörten auch emissionsspektroskopische Messungen von Argon [1] und simuliertem Hydrazin (H_2+N_2) [125] an elektrischen Triebwerken und von molekularem Stickstoff und CN an den Plasmawindkanälen zur Charakterisierung des atmosphärischen Eintritts der Huygens Sonde [93]. Speziell bei der Untersuchung von Molekülstrahlung ist eine Auswertung oft nur noch unter Verwendung einer theoretischen Simulation der Strahlung möglich, da die spektrale Auflösung einzelner Rotationslinien hohen apparativen und zeitlichen Aufwand bedeutet. Für homonukleare Moleküle beruhen solche Simulationen meist auf einer Berechnung der Einzellinien unter Verwendung der Dunham-Entwicklung der Energiezustände der Moleküle [108, 28]. Die Modellierung in dieser Arbeit stützt sich im Wesentlichen auf Konstanten und Vorgehensweisen aus [28, 52, 70, 79, 102, 19].

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel wird ein Überblick über die theoretischen Grundlagen sowohl der verwendeten Messverfahren und deren Auswertung sowie der theoretischen Simulation von Emissionsspektren gegeben. Es wird auf die zur Analyse notwendigen physikalischen Grundlagen eingegangen. In den folgenden Unterkapiteln werden zuerst die Grundlagen der Atom- und Molekülstrahlung diskutiert und die theoretische Behandlung im Rahmen der Auswertung der Messergebnisse erläutert. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Simulation der Strahlung von zweiatomigen Molekülen, wobei auch die zur Auswertung verwendeten Programmpakete vorgestellt werden.

Im Rahmen der Fabry-Perot-Untersuchungen sind die Auswertungsmethoden für die Ermittlung der Dopplertemperatur modifiziert worden. Diese Modifikationen werden in einem Abschnitt kurz erläutert.

Anschließend wird das verwendete Verfahren zur Rekonstruktion lokaler Intensitäten diskutiert, in dem eine Abel-Inversion mit Korrekturen für leichte Abweichungen von der Rotationssymmetrie verwendet wird. Die Gültigkeit der für diese Rekonstruktion benötigten Voraussetzungen wird mit einem Strahlverfolgungsprogramm untersucht, das auch bei der Auslegung des Wiedereintrittsspektrometers, das in Kapitel 5 beschrieben wird, zur Untersuchung des Strahlengangs Verwendung fand.

2.1 Atom- und Molekülstrahlung

Bei der Auswertung der emissionsspektroskopischen Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wurde vor allem die Strahlung durch Übergänge aus elektronisch angeregten Zuständen von Atomen und Molekülen erfasst. Die Effekte von Kontinuumsstrahlung jedweder Art waren zu schwach, um berücksichtigt werden zu müssen. Aus diesem Grund behandelt auch der theoretische Teil vorwiegend Strahlung aus elektronisch angeregten Zuständen.

2.1.1 Grundlagen zur Strahlung von Atomen

Trotz seiner begrenzten Gültigkeit beschreibt das Bohr'sche Atommodell doch recht anschaulich die Grundprinzipien der Strahlung aus elektronisch angeregten Zuständen. Wird z.B. durch Stöße mit anderen Atomen oder mit Elektronen Energie auf ein Atom oder Molekül übertragen, so kann eines der äußeren, gebundenen Elektronen in einen energetisch höheren, also angeregten Zustand übergehen, der im Bohr'schen Atommodell einer höheren Umlaufbahn um den Kern entspricht. Die Verweildauer in diesem angeregten Zustand ist jedoch begrenzt und das Elektron fällt unter Aussendung eines Photons auf eine energetisch niedrigere Bahn zurück, wenn es seine Energie

nicht strahlungslos durch einen weiteren Stoß mit einem anderen Teilchen wieder abgibt. Bei niedrigen Drücken von einigen hPa, wie sie in den untersuchten Plasmen vorherrschen, dominieren die strahlenden Übergänge, da während der verhältnismäßig kurzen Lebensdauer der angeregten Zustände die Kollisionswahrscheinlichkeit eher gering ist. Der untere Zustand des Übergangs muss nicht zwingend dem Ausgangszustand entsprechen, da von einem angeregten Niveau aus verschiedene strahlende Übergänge möglich sind. Die verschiedenen Energieniveaus sind nicht beliebig, sondern für die beteiligten Atome und Moleküle charakteristisch. Im einfachsten Falle des Wasserstoffatoms mit nur einem Elektron können diese Energieniveaus mit der Rydberg-Formel berechnet werden. Je nach unterem Niveau des Übergangs ergeben sich die verschiedenen Serienformeln [46]. Für komplexere Atome gelten diese einfachen Formeln nicht mehr, da Interaktionen zwischen den verschiedenen Elektronen die Berechnung deutlich erschweren. In den in dieser Arbeit behandelten Untersuchungen steht vor allem die Strahlung von atomarem Sauerstoff und Stickstoff im Vordergrund. Als Erosionsprodukte der Siliziumkarbid-Proben wurde auch die Emission von atomarem Kohlenstoff (C) und Silizium (Si) beobachtet, jedoch wurden diese Größen nicht zur Temperatur- oder Teilchendichtebestimmung herangezogen. Die Energieniveaus von Sauerstoff- und Stickstoffatomen sind verhältnismäßig gut bekannt und wurden im Wesentlichen aus [109] entnommen. Abbildung 2.1 zeigt Termschemata für die angeregten Zustände von atomarem Sauerstoff in Form von Grotrian Diagrammen für das Triplet und das Quintett System [12]. Die zur Temperaturbestimmung benutzten Übergänge sind schwarz dargestellt, mögliche, aber nicht beobachtete Übergänge sind grau eingefärbt. Die Wellenlänge für den jeweiligen Übergang ist längs der kennzeichnenden Linie in Angström aufgetragen. Entsprechende Diagramme für atomaren Stickstoff finden sich im Anhang A.

Die Energiedifferenz des Übergangs $\Delta E = h \nu$ bestimmt die Frequenz und damit über $\nu = c/\lambda$ auch die Wellenlänge der ausgesandten Strahlung. Diese in der Theorie scharfe Linie wird in der Praxis durch verschiedene Effekte verbreitert, sodass sich ein Linienprofil ergibt. Die natürliche Linienbreite kann basierend auf der Annahme eines gedämpften harmonischen Oszillators nach [106] in der Größenordnung von etwa 10^{-5} nm abgeschätzt werden und liegt damit um etwa drei Größenordnungen unterhalb der im Plasmawindkanal gemessenen Verbreiterungen (vgl. [45, 118, 65]). Für einen spezifischen Übergang kann die natürliche Linienbreite nach [24] aus den Lebensdauern der beteiligten Niveaus durch

$$\delta\nu_{ki} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_k} \right) \quad (1)$$

bestimmt werden, die sich wiederum aus dem Kehrwert der Summe der Einsteinschen Übergangswahrscheinlichkeiten aller möglichen Übergänge aus dem jeweiligen Niveau ergeben. Diese ergeben sich im aus Wechselwirkungen mit anderen Teilchen (Stark-Verbreiterung durch Interaktion mit Elektronen oder van der Waals Verbreiterung durch Wechselwirkung mit Schwerteilchen) sowie aus Dopplerverschiebungen und daraus resultierenden Verbreiterungen. Letztere werden bei Messungen mit dem Verfahren der Fabry-Perot-Interferometrie zur Bestimmung von Plasmageschwindigkeit und Translationstemperatur ausgenutzt und in Kapitel 2.3 näher erläutert.

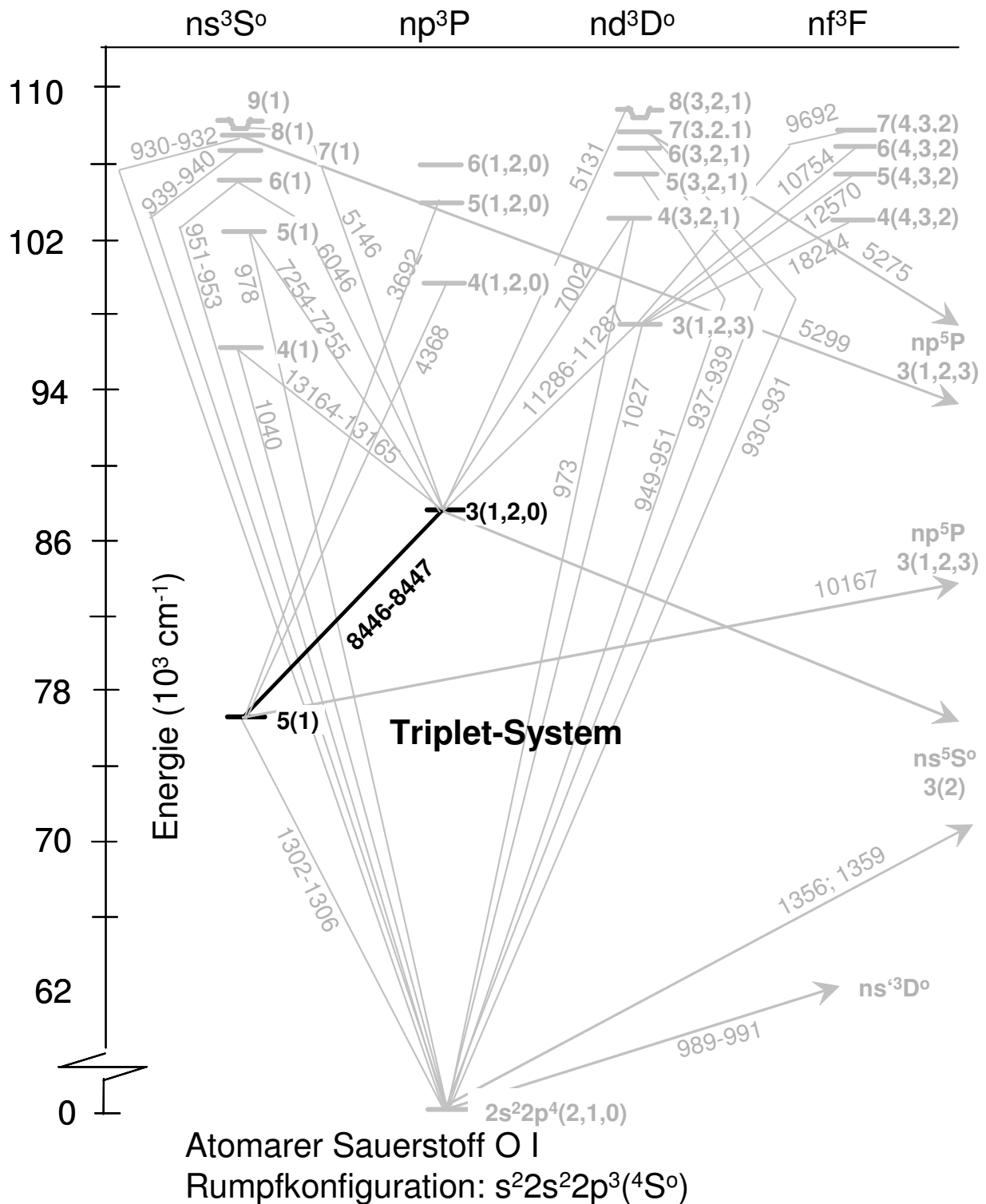


Abbildung 2.1: Termschemata für die angeregten Energieniveaus von atomarem Sauerstoff im Triplet System (beobachtete Übergänge in schwarz).

Bei den emissionsspektroskopischen Messungen der auftretenden Atome in den Plasmawindkanälen dominiert jedoch bei weitem die Verbreiterung, die durch den optischen Versuchsaufbau verursacht wird, die so genannte Apparateverbreiterung. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die oben beschriebenen Verbreiterungseffekte außer dem Dopplereffekt nicht für diagnostische Zwecke ausgenutzt, wurden jedoch bei der Auswertung der Messungen durch eine Integration der Atomlinien

über die Linienbreite berücksichtigt. Auch bei der Simulation von Spektren zum Vergleich mit Messwerten müssen diese Verbreiterungen Berücksichtigung finden.

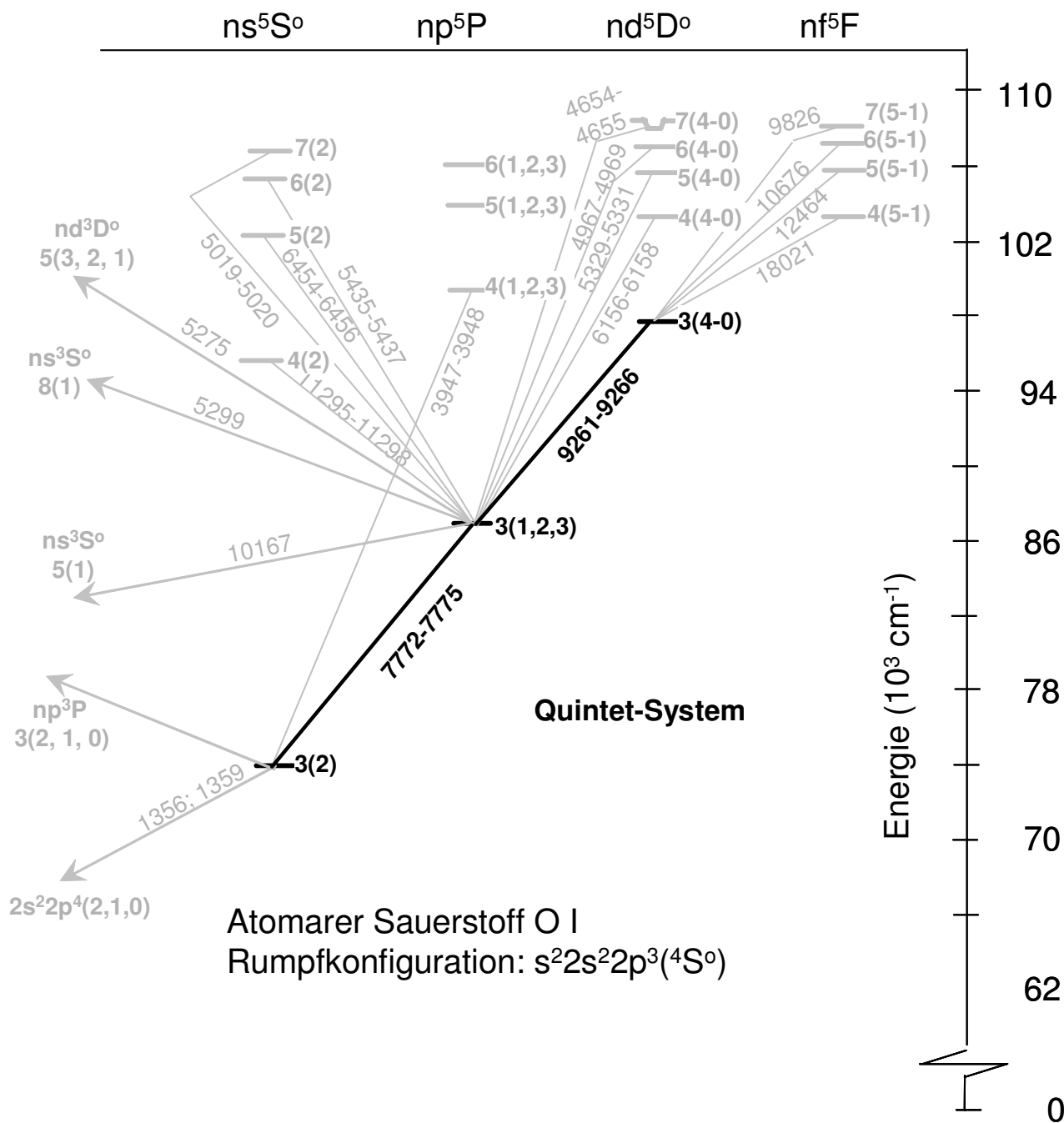


Abbildung 2.2: Termschemata für die angeregten Energieniveaus von atomarem Sauerstoff im Quintett System (beobachtete Übergänge in schwarz).

2.1.2 Bestimmung der Anregungstemperatur aus der Strahlung von Atomen

Die grundsätzliche Bedeutung des Temperaturbegriffs in der Thermodynamik ist die eines Steuerparameters für Verteilungsfunktionen der Energie und es lassen sich unterschiedliche Temperaturen für die verschiedenen Energieformen definieren. Um eine solche Steuergröße einführen zu können, muss allerdings überhaupt erst eine mathematisch formulierbare Verteilungsfunktion vorliegen. So wird z.B. die Verteilung der thermischen Geschwindigkeit durch die Translationstempe-

ratur als Steuerparameter in der Maxwell-Verteilung beschrieben. Im Idealfall des thermodynamischen Gleichgewichts stimmen die verschiedenen Temperaturen miteinander überein, und alle Energieverteilungen lassen sich durch eine gemeinsame Temperatur beschreiben. Reale Plasmen weisen jedoch im Regelfalle Abweichungen von diesem Gleichgewichtszustand auf. Daraus ergibt sich bei einem a priori unbekanntem Plasmazustand die Notwendigkeit der Überprüfung der vorausgesetzten Verteilungsfunktion. Für die durch magnetoplasmodynamische Generatoren erzeugten Plasmen gilt dies in ganz besonderem Maße, da die Energieeinkopplung über einen Lichtbogen und damit durch die Heizung der Elektronen erfolgt und an keinem Punkt des Plasmastrahls von vorne herein ein Gleichgewichtszustand vorausgesetzt werden kann.

Die Boltzmannverteilung

$$n_k = \frac{g_k}{U(T_{anr})} n_0 \exp\left(-\frac{E_k}{kT_{anr}}\right) \quad (2)$$

beschreibt die Besetzungsdichte n_k eines elektronisch angeregten Zustands k im Verhältnis zur Gesamteilchendichte n_0 der betrachteten Spezies in Abhängigkeit von der Anregungstemperatur T_{anr} , der elektronischen Entartung g_k und der elektronischen Anregungsenergie E_k . Die Zustandssumme $U(T_{anr})$ ist für alle elektronischen Zustände konstant und wird sich bei der Verhältnisbildung herauskürzen. Gehorchen die Besetzungsdichten der angeregten Niveaus durchgehend einer Boltzmann-Verteilung, reicht zur Bestimmung der Anregungstemperatur das Verhältnis zweier Emissionslinien aus, deren Besetzungsdichten der jeweils oberen Energieniveaus i und k demzufolge über

$$\frac{n_i}{n_k} = \frac{g_i}{g_k} \exp\left(-\frac{(E_i - E_k)}{kT_{anr}}\right) \quad (3)$$

zusammenhängen. In der Praxis ist jedoch, wie oben schon erwähnt, die Überprüfung der Gültigkeit einer Boltzmann-Verteilung notwendig, um die Aussagekraft der ermittelten Temperaturen beurteilen zu können. Dies kann geschehen, indem so viele verschiedene Emissionslinien wie möglich gemessen und miteinander verglichen werden. Je höher der Energieabstand der einzelnen Linien voneinander ist, desto genauer lässt sich die Temperatur bestimmen. Der spektrale Emissionsgrad

$$\varepsilon_L = \frac{h\nu_{ki}}{4\pi} A_{ki} n_k \quad , \quad (4)$$

abhängig von der Frequenz der ausgesandten Strahlung ν_{ki} , dem Einstein'schen Übergangswahrscheinlichkeit vom oberen Niveau k auf das untere Niveau i A_{ki} , dem Planck'schen Wirkungsquantum h und der Besetzungsdichte des angeregten Zustands n_k , wird über die Sichtlinie l integriert

$$I_{ki} = \int_0^l \varepsilon(x) dx = \frac{h\nu}{4\pi} A_{ki} n_k l \quad (5)$$

und in die Boltzmann-Verteilung (Gleichung 2) eingesetzt. Die durch Logarithmieren entstehende Formulierung hat die Form einer Geradengleichung

$$\ln\left(\frac{I_{ki}}{vA_{ki}g_k}\right) + \text{const} = -\frac{E_k}{kT_{\text{anr}}} \quad (6)$$

mit dem Logarithmus der gemessenen Emission als Ordinate und der Anregungsenergie als Abszisse. Die gesuchte Temperatur findet man in der Steigung der Gerade $-1/k T_{\text{anr}}$ wieder. Diese Vorgehensweise wird im Allgemeinen Boltzmann-Plot genannt. Zugleich kann über die Abweichung der Messwerte von der Ausgleichsgerade eine Abschätzung der Gültigkeit der Boltzmann-Verteilung getroffen werden. Die Abweichung von der Geraden und somit von der Boltzmann Verteilung im Bereich der behandelten Energieniveaus kann über einen Korrelationsfaktor bestimmt werden, der in dieser Arbeit nach [16] durch

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (7)$$

definiert wurde. Korrelationsfaktoren zwischen 0,8 und 1 kennzeichnen Wertegruppen, die hinreichend gut durch Geradengleichungen beschrieben werden können, Korrelationsfaktoren unter 0,5 geben an, dass eine Interpretation mit Hilfe einer Boltzmann-Verteilung nicht möglich ist. Eine Fehlerabschätzung ist z.B. möglich, indem zwei Geraden mit der maximalen und der minimalen Steigung durch die Messwerte gelegt werden. Für eine konventionelle Fehlerabschätzung wurde eine Fehlerfortpflanzung zufälliger Messwertabweichungen nach DIN 1319 verwendet. Die kombinierte Standardunsicherheit u_y einer Funktion $y(x_1, x_2, \dots, x_i)$ ergibt sich dabei aus der quadratischen Fortpflanzung der einzelnen Messunsicherheiten u_{x_i} unter Berücksichtigung der partiellen Ableitungen zu

$$u_y = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} u_{x_i}\right)^2} \quad (8)$$

Für die Temperatúrauswertung können hierbei die einzelnen Fehlerquellen als die Messunsicherheit der gemessenen Intensität, die Unsicherheit der verwendeten Einstein-Koeffizienten sowie die Abweichung der logarithmischen Terme von der ermittelten Regressionsgeraden definiert werden. Die Gleichung für die Bestimmung der Temperaturunsicherheit u_T ergibt sich schließlich zu

$$u_T = \frac{1}{kb^2} \frac{1}{n \sum_n E_i^2 - \left(\sum_n E_i\right)^2} \sqrt{\sum_n \left(nE_i - \sum_n E_i\right)^2} \sqrt{\left(\frac{\Delta I_{\text{mess}}}{I_{\text{mess}}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta A_{ki}}{A_{ki}}\right)^2} + u_{\text{Gerade}}^2 \quad (9)$$

mit der Steigung der Regressionsgeraden b , der Anzahl der berücksichtigten Linien n und der Standardabweichung u_{Gerade} der logarithmischen Terme von der Regressionsgerade. Eine Herleitung dieser Formel ist im Anhang B beschrieben.

Bei der Auswertung der Messdaten muss jedoch in jedem Fall berücksichtigt werden, dass die Gültigkeit der Boltzmann-Verteilung auf beschränkte Bereiche der Anregungsenergie begrenzt sein kann. Eine Ankopplung an den Grundzustand ist im Allgemeinen aufgrund der hohen Energiediffe-

renz nur im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht gegeben. Eine qualitative Abschätzung des Einflusses einer Nichtgleichgewichtssituation auf die beobachtete Anregungstemperatur in Plasmen, die durch Ionisierungs- oder Rekombinationseffekte bestimmt sind, ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Je nachdem, ob es sich um ein ionisierendes oder rekombinierendes Plasma handelt, gibt es demnach Bereiche der Anregungsenergie (im Diagramm Bereich II), in denen die Besetzungsdichten zwar einer Boltzmannverteilung folgen, die jedoch durch eine andere Temperatur als die Gleichgewichtstemperatur beschrieben wird. Aus Übergängen mit verschiedener Anregungsenergie können also durchaus unterschiedliche Temperaturen resultieren, die von der Gleichgewichts-Anregungstemperatur abweichen, obwohl die gemessenen Werte auf einer Ausgleichsgeraden liegen. Allerdings deuten laut [91] niedrigere Anregungstemperaturen auf ein ionisierendes Plasma hin, während es sich bei den betrachteten Plasmazuständen um ein rekombinierendes Plasma handeln sollte. Trotzdem wurden niedrigere elektronische Anregungstemperaturen als die Translationstemperatur ermittelt, wie später noch gezeigt werden wird.

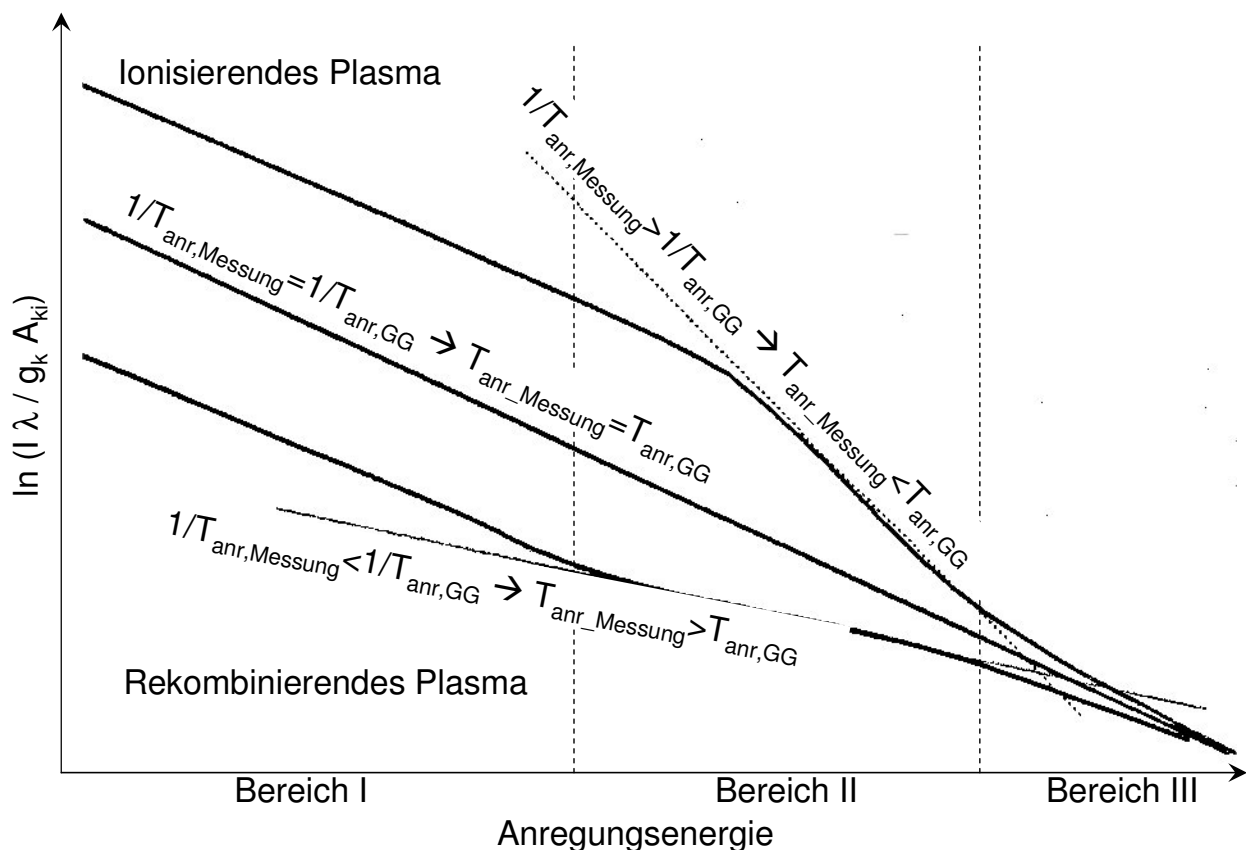


Abbildung 2.3: Auswirkungen des Nichtgleichgewichts auf die Anregungstemperatur nach [91].

2.1.3 Vorgehensweise bei der Auswertung der Atomspektren

Die Auswertung der gemessenen Spektren von atomarem Sauerstoff und Stickstoff erforderte Anpassungen der im vorigen Kapitel beschriebenen Vorgehensweise. Das Triplett von atomarem Stickstoff um 745 nm herum wurde als untere Grenze des zu untersuchenden Wellenlängenbereichs gewählt. Aus den zur Verfügung stehenden Beugungsgittern des Spektrometers ergab sich

damit eine obere Grenzwellenlänge von etwa 944 nm. Abbildung 2.4 zeigt ein Atomspektrum, gemessen auf der Mittelachse des Plasmafreistrahls.

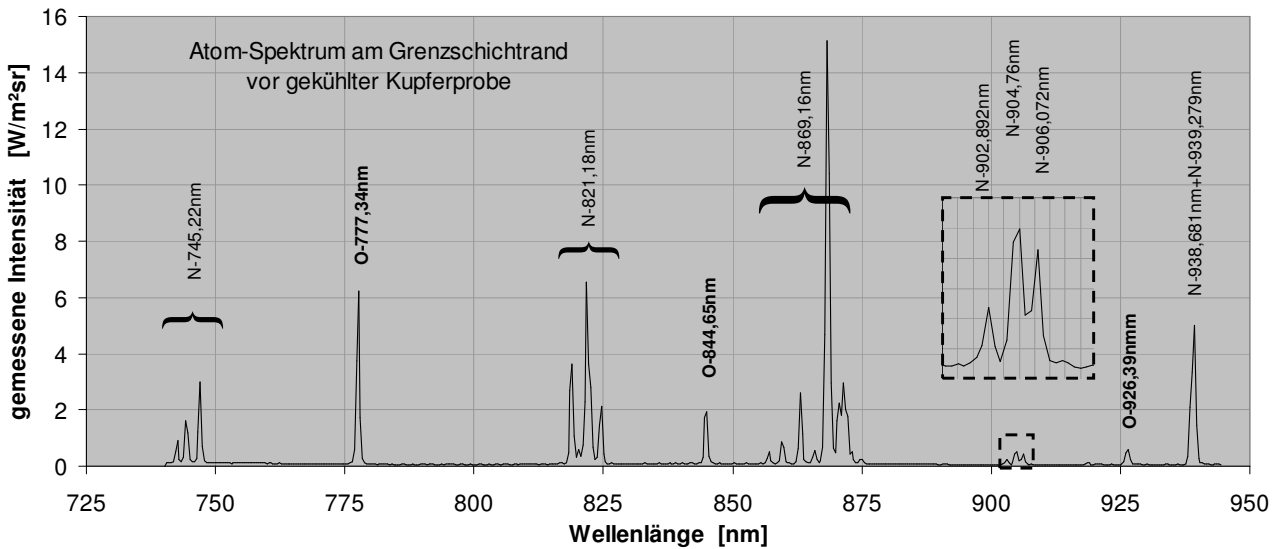


Abbildung 2.4: Atomspektrum gemessen auf der Mittelachse des Plasmafreistrahls.

Die Strahlung resultiert aus den Übergängen zwischen den Orbitalen $2s^2 2p^3 (^4S^0)3p \rightarrow 2s^2 2p^3 (^4S^0)3s$ und $2s^2 2p^3 (^4S^0)3d \rightarrow 2s^2 2p^3 (^4S^0)3p$ von atomarem Sauerstoff und $2s^2 2p^2 (^3P)3p \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P)3s$, $2s^2 2p^2 (^3P)3d \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P)3p$ und $2s^2 2p^2 (^1D)3p' \rightarrow 2s^2 2p^2 (^1D)3s'$ von atomarem Stickstoff. Zur formalen Vervollständigung müssen die oben genannten Orbitale für die verschiedenen Anregungszustände noch durch einen (oben nicht dargestellten) Term zur Charakterisierung der Multiplizität und des Gesamtdrehimpulses ergänzt werden, der hier aus Übersichtlichkeitsgründen weggelassen wurde. Die vollständigen Angaben der betrachteten Niveaus sind mit einer Erklärung der verwendeten Nomenklatur im Anhang A dargestellt.

Aufgrund der endlichen Ausdehnung der einzelnen Pixel der verwendeten CCD-Kamera ergibt sich eine minimale Auflösung der einzelnen Pixelelemente von etwa 0,4 nm, die in einer Überlagerung einzelner Spektrallinien resultiert. Die verschiedenen Multipletts können jedoch zu Liniengruppen mit gemeinsamen spektroskopischen Konstanten zusammengefasst werden, sodass trotzdem eine Auswertung der Integrale über die verschiedenen Multipletts erfolgen kann. Eine Auflistung der verwendeten spektroskopischen Konstanten für die einzelnen Emissionslinien und der benutzten Liniengruppen nach [109] ist ebenfalls im Anhang A dargestellt.

Leider liegen die Emissionslinien der oberen Niveaus $2s^2 2p^2 (^3P)3d ^2P$ und $2s^2 2p^2 (^1D)3p' ^2F^0$ von atomarem Stickstoff bei 905 nm zu dicht beieinander, um bei der resultierenden Wellenlängenauflösung eine saubere Trennung der Einzellinien zu ermöglichen. Andererseits weisen gerade diese Emissionslinien einen großen Energieabstand zu den übrigen Linien auf, der sie für die Temperatureauswertung interessant macht. Ein ähnliches Problem tritt bei den Einzellinien des $2s^2 2p^2 (^3P)3p ^2D^0 \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P)3s ^2P$ Multipletts bei 939 nm auf. Die letzte Einzellinie liegt außerhalb des detektierten Wellenlängenfensters, sodass die kombinierten Konstanten für das gesamte Multiplett nicht verwendet werden können. Deshalb wurden für die entsprechenden Linienintegrale theoretische Intensitätsverhältnisse laut Gleichungen (2) und (5) gebildet. Diese Verhältnisse weisen über den Exponentialterm eine Temperaturabhängigkeit auf. Für das Multiplett bei 939 nm

wird das Verhältnis aufgrund der kleinen Energieabstände sehr schnell konstant, was für die Linienkombination bei 905 nm leider nicht gilt. Abbildung 2.5 zeigt die berechneten Linienverhältnisse.

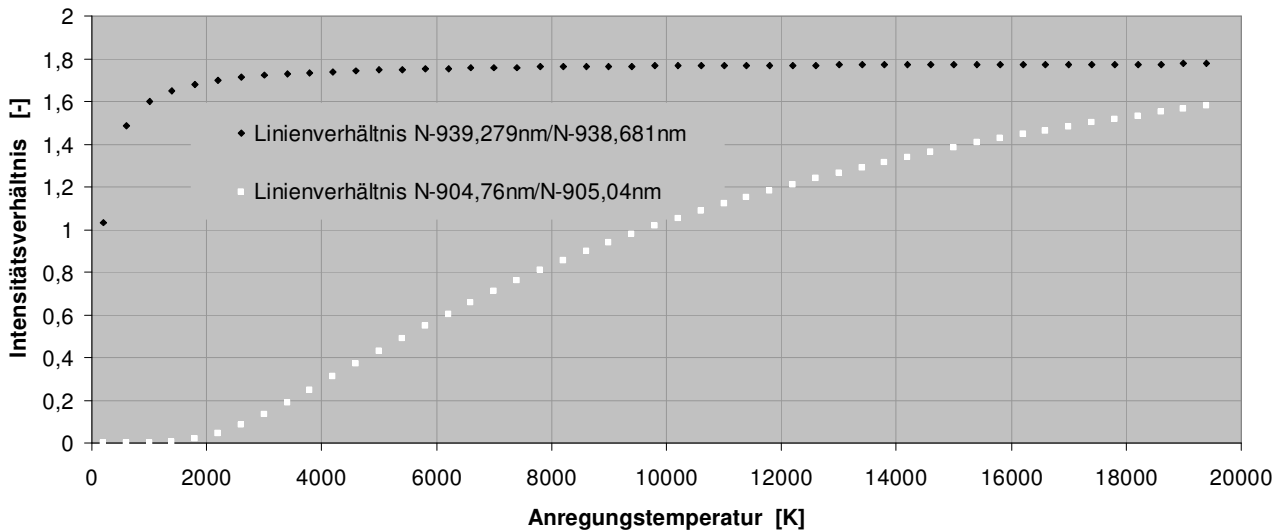


Abbildung 2.5: Theoretische Linienverhältnisse der Einzellinien des $N_I 2s^2 2p^2 (^3P)3p^2 D^o \rightarrow 2s^2 2p^2 (^3P)3s^2 P$ Multipletts bei 939 nm und der N_I Strahlung aus den oberen Niveaus $2s^2 2p^2 (^3P)3d^2 P$ und $2s^2 2p^2 (^1D)3p^2 F^o$ um 905 nm.

In der weiteren Auswertung der Strahlung von atomarem Stickstoff wurde zuerst eine Anregungstemperatur aus den ungestört detektierbaren Übergängen berechnet und als Startwert für die Berechnung der Linienverhältnisse der sich überlagernden Übergänge benutzt. Dann wurde die endgültige Anregungstemperatur unter Berücksichtigung aller beobachteten Linien berechnet, die iterativ so lange zur erneuten Berechnung der Linienverhältnisse der überlagerten Übergänge verwendet wurde, bis die Änderung der resultierenden Anregungstemperatur kleiner als 1 K war.

Auch ohne die Auswertung durch einen Boltzmann-Plot können allerdings schon Abschätzungen der zugrunde liegende Anregungstemperatur aus der Präsenz einzelner Anregungslinien im Spektrum gewonnen werden. Aufgrund der hohen erforderlichen Anregungsenergie des oberen Niveaus sind höher energetische Zustände erst ab bestimmten Temperaturen ausreichend besetzt, um überhaupt eine nennenswerte Menge von Strahlung auszusenden. In Abbildung 2.6 sind die Intensitätsverhältnisse von Emissionslinien unterschiedlicher Anregungsenergie im untersuchten Wellenlängenbereich über der Anregungstemperatur dargestellt. Als Bezugslinie für jedes Element wurde dabei die energetisch niedrigste Linie gewählt, die im betrachteten Temperaturbereich gleichzeitig auch die stärkste Emission ausstrahlt. Die Diagramme zeigen, dass je nach Empfindlichkeit des Detektors aus dem Vorkommen einzelner Atomlinien von atomarem Stickstoff nur eine Unterscheidung möglich ist, ob die Temperatur ober- oder unterhalb von 5000 K bzw. 6000 K liegt, da in dem untersuchten Wellenlängenbereich keine höher energetischen Emissionslinien existieren. Die Emissionslinien von atomarem Sauerstoff jedoch erlauben in Abhängigkeit von der minimal detektierbaren Intensität der Atomlinien eine Abschätzung der Anregungstemperatur in einem

Temperaturbereich bis zu 12000 K oder mehr¹. Für genauere Angaben oder für höhere Temperaturbereiche ist jedoch eine Auswertung der Strahlung über einen Boltzmann-Plot notwendig. Für deutlich höhere Temperaturen schließlich bieten sich die Ionenlinien zur Untersuchung des Plasmas an [57, 56].

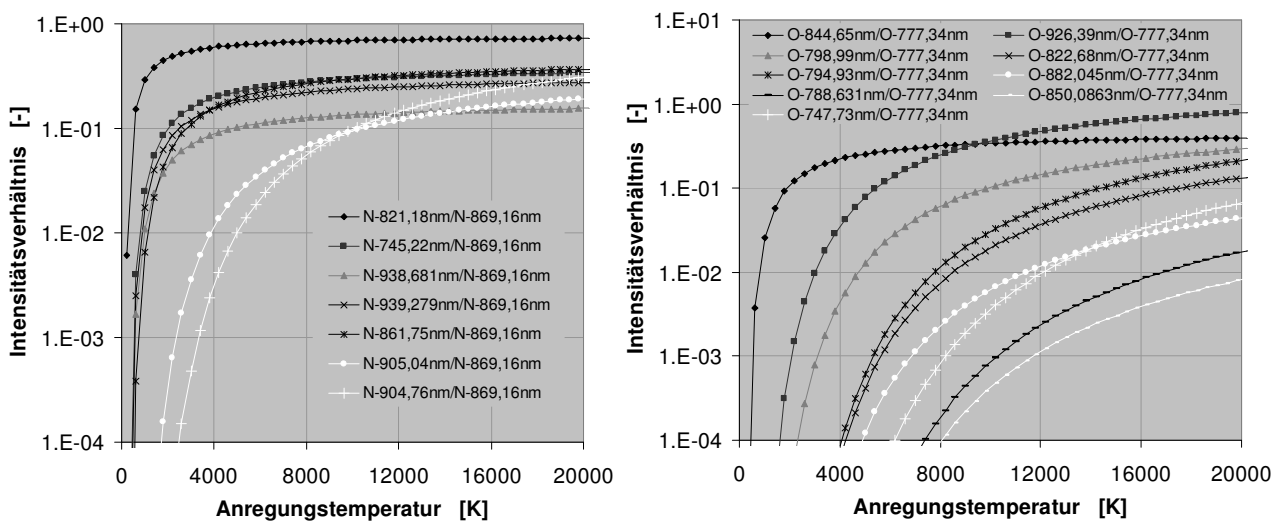


Abbildung 2.6: Theoretische Intensitätsverhältnisse der wesentlichen Atomlinien von Stickstoff und Sauerstoff im untersuchten Wellenlängenbereich zur Abschätzung der Temperatur aus dem Auftreten einzelner Emissionslinien.

2.1.4 Grundlagen zur theoretischen Berechnung der Molekülstrahlung

Die Berechnung der Molekülstrahlung gliedert sich in zwei grundlegende Teile. Zuerst wird die spektrale Position der durch einen Übergang zwischen zwei verschiedenen Energieniveaus emittierten Strahlung betrachtet, die sich direkt aus der Energieänderung ergibt. Diese Energieniveaus sind nicht vom Plasmazustand oder der Gültigkeit von Gleichgewichtsbeziehungen abhängig. In einem zweiten Schritt wird schließlich die Intensität der emittierten Strahlung ermittelt, wozu Besetzungsdichten der verschiedenen Energieniveaus und Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den einzelnen Zuständen berücksichtigt werden müssen. In diese Berechnungen müssen Verteilungsfunktionen für die elektronische, vibratorische und rotatorische Anregungszustände eingehen, die wiederum stark von den verwendeten Gleichgewichtsbeziehungen beeinflusst werden.

Eine Simulation der Molekülstrahlung kann unter Verwendung der unten beschriebenen Formeln erfolgen. In der englischsprachigen Literatur wird diese Vorgehensweise als *Line by Line* Methode bezeichnet, da jeder Übergang einzeln betrachtet wird im Gegensatz zu Verfahren, die ganze Liniengruppen zusammenfassen und die hauptsächlich für eine grobe Betrachtung des Strahlungs- transports in numerischen Rechnungen Verwendung finden [18].

¹ Die Grenze des Intensitätsverhältnisses hängt natürlich von der Empfindlichkeit des verwendeten Detektionssystems ab. Ausgehend von einem Detektor mit einer Dynamik von 16 Bit ergibt sich ein Maximalsignal von etwa 65000 Zählern. Selbst bei voller Ausnutzung des Dynamikbereichs durch die stärkste Linie ist die Detektionsgrenze bei einem Intensitätsverhältnis von 10^{-4} erreicht. Dieser Wert reduziert sich bei nicht vollständiger Ausnutzung des Messbereichs.

Ermittlung der spektralen Position von Emissionslinien

Im Gegensatz zu den Atomen kann bei den Molekülen Energie nicht nur in der Translation und der elektronischen Anregung gespeichert werden sondern auch noch in Form von Rotations- und Vibrationsenergie. Dadurch ergibt sich eine Vielzahl von zusätzlichen Energiezuständen, die sich auch auf die Emission von Strahlung auswirken. Im vorliegenden Fall genügt eine Beschränkung auf zweiatomige Moleküle, da komplexere Formen bei den zu erwartenden Temperatur- und Druckbereichen aller Wahrscheinlichkeit nach nicht entstehen bzw. nicht stabil bleiben. Im Folgenden sollen die grundlegenden Prinzipien der Simulation von Molekülspektren erläutert werden. Die spezielle Simulation der einzelnen Übergänge wird in der Beschreibung der verwendeten Programmpakete in höherer Detailtiefe dargestellt.

Analog zur Atomstrahlung ergibt sich die Wellenlänge einer einzelnen Emissionslinie auch für ein Molekül aus der Energieänderung $\Delta E = E' - E''$ zwischen einem oberem (') und einem unterem Niveau (''). Diese kann sich jetzt aber aus jeweils einem Anteil durch die gleichzeitige Änderung des elektronischen (E_{el}), des rotatorischen (E_{rot}) und des vibratorischen (E_{vib}) Anregungszustandes zusammensetzen.

$$\Delta E = \Delta E_{el} + \Delta E_{vib} + \Delta E_{rot} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (10)$$

Für die weitere Rechnung ist es vorteilhaft, die durch das Produkt (hc) normierten Energien (traditionell in der Einheit cm^{-1}) zu benutzen, da somit eine direkte Umrechnung in Wellenzahlen $\bar{\nu}$ bzw. Wellenlängen λ erfolgen kann. Das obere Niveau wird durch die Quantenzahlen e' , v' und J' für den elektronischen ($T(e')$), vibratorischen ($G(e',v')$) und rotatorischen ($F(e',v',J')$) Anregungszustand gekennzeichnet, das untere Niveau durch e'' , v'' und J'' .

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = T(e') - T(e'') + G(e',v') - G(e'',v'') + F(e',v',J') - F(e'',v'',J'') \quad (11)$$

Abbildung 2.7 illustriert diese Schachtelung der unterschiedlichen Energiezustände. Jeder Übergang eines einzelnen Moleküls findet nur zwischen zwei diskreten Quantenzuständen statt; die Strahlung einer Menge von Molekülen gehorcht jedoch statistischen Gesetzen, die durch Verteilungsfunktionen der verschiedenen Energieformen beschrieben werden können. Erwähnenswert ist an dieser Stelle noch, dass homonukleare Moleküle, die in einem Luftplasma einen wesentlichen Anteil darstellen, bedingt durch ihr fehlendes Dipolmoment keine reinen Rotations-Schwingungsspektren aufweisen. Die beobachtbaren Spektren werden also immer durch einen Übergang von einem angeregten elektronischen Zustand in einen anderen elektronischen Zustand erzeugt [24].

Eine anschauliche Herleitung der Rotations- und Vibrationsenergien kann durch die „klassische“ Mechanik erfolgen, wobei das zweiatomige Molekül zunächst als starre Hantel mit dem Trägheitsmoment j berücksichtigt wird und die beiden Atome als Punktmassen betrachtet werden, die durch einen masselosen Verbindungsstab verbunden sind [47]. Analog dazu wird die Vibrationsenergie zuerst aus den Gleichungen für einen harmonischen Oszillator hergeleitet. Aus der Lösung

der Schrödinger-Gleichung ergeben sich schließlich die diskreten Energieniveaus. Man erhält die Rotationsenergie E_{rot} unter der Annahme des starren Hantelmodells zu

$$E_{\text{rot}} = \frac{h^2}{8\pi^2 j} J(J+1) \quad \text{bzw.} \quad F(J) = \frac{E_{\text{rot}}}{hc} = BJ(J+1) \quad J = 0,1,2,\dots \quad (12)$$

Die Vibrationsenergie aus dem Ansatz des harmonischen Oszillators ergibt sich zu

$$E_{\text{vib}}(\nu) = h\nu_{\text{osz}} \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad \text{bzw.} \quad G(\nu) = \frac{E_{\text{vib}}(\nu)}{hc} = \omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad \nu = 0,1,2,\dots \quad (13)$$

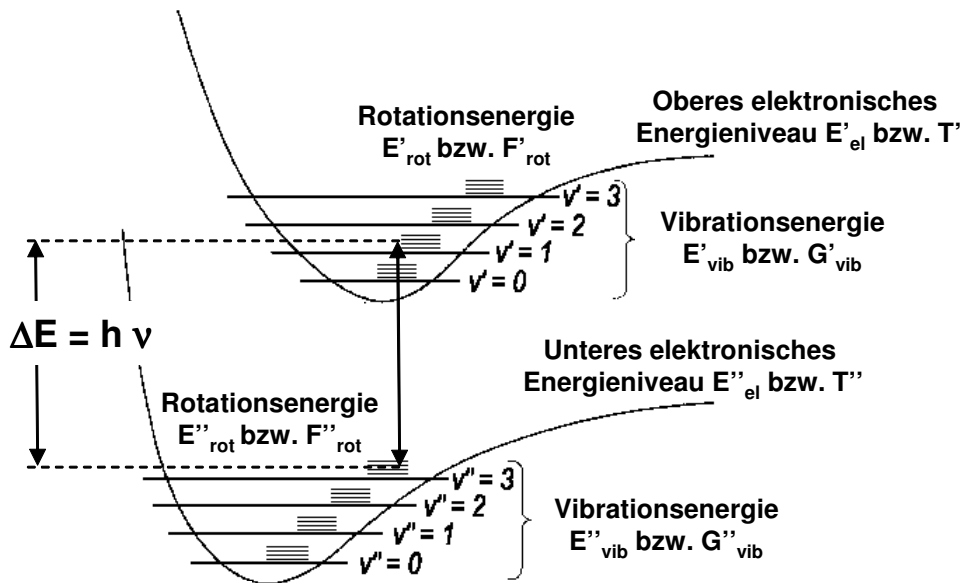


Abbildung 2.7: Veranschaulichung der verschiedenen Energiezustände eines Moleküls.

Der Ansatz eines harmonischen Oszillators wird in der numerischen Strömungsmechanik aufgrund der einfacheren mathematischen Behandlung häufig benutzt [60], führt jedoch bei Anwendungen in der Spektroskopie nicht zu befriedigenden Ergebnissen. Unter anderem ergibt sich auf diese Weise eine symmetrische Potentialkurve, die nicht dem realen Molekülpotential entspricht. Dieses weist zu kleinen Atomabständen hin einen steil ansteigenden Verlauf auf, der aufgrund der Abstoßungskräfte der beiden Atomkerne bis ins Unendliche ansteigen muss. Zu steigenden Atomabständen hin werden die Anziehungskräfte hingegen mit dem Quadrat des Atomabstands kleiner und nähern sich asymptotisch der Dissoziationsenergie an. Reale Moleküle gehorchen daher eher dem Ansatz eines anharmonischen Oszillators, der sowohl die sinkenden Energiedifferenzen für steigende Vibrationsquantenzahlen wie auch die Annäherung an die Dissoziationsenergie besser wiedergibt.

Im Folgenden wird zur Berechnung der Vibrations- und Rotationsenergie eine Reihenentwicklung nach Dunham verwendet [28], wie sie auch in [70, 79, 108] beschrieben wird. Die zugehörigen Molekülkonstanten für die betrachteten Luftmoleküle wurden [70] entnommen und sind im Anhang D noch einmal zusammengestellt. Die Energien G und F eines elektronischen Niveaus ergeben sich zu:

$$G(v) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 + \omega_e z_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^4 + \dots \quad (14)$$

$$F_v(v, J) = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots \quad (15)$$

mit den vibratorischen Kopplungskonstanten

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \gamma_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \quad (16)$$

und
$$D_v = D_e + \beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + \delta_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \quad (17)$$

Die spektroskopischen Konstanten ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$, $\omega_e z_e$ sowie B_e , D_e , α_e , β_e , δ_e und γ_e resultieren aus der schon erwähnten Reihenentwicklung nach Dunham und sind für die in dieser Arbeit betrachteten Moleküle im Anhang D tabelliert. Rotations- und Vibrationsenergie sind demnach nicht unabhängig voneinander, deshalb soll an dieser Stelle der Ausdruck eines rovibratorischen Übergangs (oder einer entsprechenden Emissionslinie) eingeführt werden, auch wenn eine Änderung der elektronischen Anregungsenergie beinhaltet ist. Typischerweise müssen Vibrationsquantenzahlen bis $v \sim 25$ und Rotationsquantenzahlen bis etwa $J \sim 200$ berücksichtigt werden. Eine genauere Abschätzung der Abbruchbedingungen für diese Quantenzahlen wird in Kapitel 2.2.2 gegeben.

Die Vorgehensweise zur Berechnung eines Übergangs für ein spezifisches Molekül hängt im Wesentlichen von der Natur des angeregten elektronischen Niveaus ab. Dieses elektronische Niveau ist durch seinen Spin und seinen Bahndrehimpuls charakterisiert. Detaillierte Beschreibungen dieser Phänomene finden sich in [52, 47, 69], trotzdem sollen an dieser Stelle die Grundprinzipien und die verwendete Nomenklatur kurz erläutert werden.

Die Notation zur Bezeichnung der verschiedenen elektronisch angeregten Niveaus eines zweiatomigen Moleküls setzt sich zusammen aus: einem Buchstaben für das entsprechende Niveau (i.A. X für den Grundzustand, dann A, B, C, ... und a, b, c, ... für die folgenden Niveaus), einem hochgestellten Index $2S+1$, der durch den Spin S festgelegt wird, und einem griechischen Großbuchstaben, der die Projektion Λ des Bahndrehimpulses auf die internukleare Achse charakterisiert. Λ kann die Werte 0, 1, 2, 3, ... annehmen, denen dann die Buchstaben Σ , Π , Δ , Φ , ... zugeordnet werden. Der Wert von Λ wird später noch eine wesentliche Rolle bei der Behandlung von Spin-Aufspaltungseffekten spielen. Weitere Suffixe kennzeichnen Eigenschaften der elektronischen Wellenfunktion (z.B. $_g$ und $_u$ für gerade oder ungerade, $^+$ und $^-$ bei Σ -Zuständen für symmetrisch oder unsymmetrisch), für deren Erklärung hier aber auf die oben genannte weiterführende Literatur verwiesen werden soll.

Beim Übergang von einem angeregten Niveau auf ein anderes sind dabei die Auswahlregeln der Quantenmechanik zu beachten. So darf sich bei zweiatomigen Molekülen der Gesamtspin S nicht verändern, während für den projizierten Bahndrehimpuls Λ Änderungen um ± 1 oder 0 zulässig sind. Weiterhin sind nur Übergänge ungerader Wellenfunktionen auf gerade ($_g \leftrightarrow _u$) erlaubt und das Vorzeichen der Wellenfunktion muss erhalten bleiben, also $^+ \leftrightarrow ^+$ oder $^- \leftrightarrow ^-$.

Die Auswahlregeln der Quantenmechanik für rotatorische Übergänge erlauben in einem einzelnen Übergang nur Änderungen der Rotationsquantenzahl um ± 1 oder 0. Die daraus resultierenden Linienserien werden als Zweige bezeichnet. Im P-Zweig beträgt die Differenz der Rotationsquantenzahlen vom oberen zum unteren Niveau 1 (z.B. $J_{\text{oben}}=10, J_{\text{unten}}=9$). Der R-Zweig fasst alle Übergänge mit einer Rotationsquantenzahldifferenz von -1 zusammen. Im Q-Zweig ändert sich die Rotationsquantenzahl während des Übergangs nicht ($\Delta J=0$). Dieser Übergang ist für Σ - Σ Übergänge (z.B. N_2^+) verboten. Wenn die weiter unten genauer beschriebenen Aufspaltungseffekte auftreten, teilen sich obere oder/und untere Niveaus auf und es treten so genannte Satellitenzweige auf, deren Intensität im Allgemeinen schwächer ist als die der Hauptzweige, die aber in speziellen Fällen (z.B. $^2\Sigma^2\Pi$ -Übergänge des NO Moleküls) so stark werden können, dass auch für eine eher grobe Betrachtung eine Berücksichtigung zwingend nötig wird.

Zur Beurteilung der Modellierung eignen sich die so genannten Fortrat-Parabeln, in denen die Rotationsquantenzahl über der Wellenlänge oder der Wellenzahl aufgetragen wird. Sie erlauben eine Beurteilung der entstehenden Molekülbande mit ihren verschiedenen Zweigen hinsichtlich der Energieabstände der einzelnen Linien und damit ihrer Wellenlängen. Abhängig von den oben genannten Konstanten und dort vor allem der Konstante B_v im oberen und unteren Niveau bilden sich Molekülbanden aus, die entweder zum Roten oder zum Violetten hin degradieren. Abbildung 2.8 gibt qualitative Verläufe der einzelnen Zweige für die drei möglichen Extremfälle für Molekülbanden an [39].

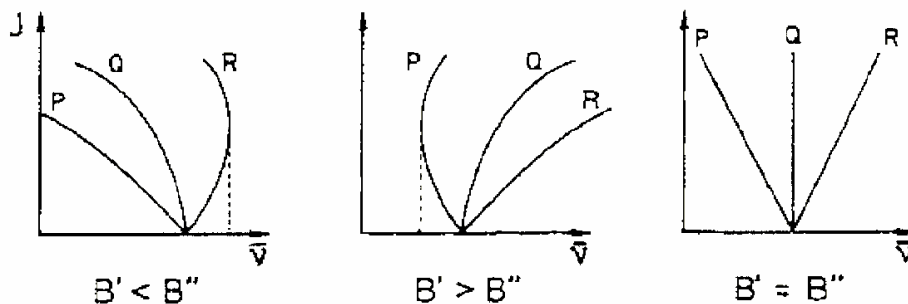


Abbildung 2.8: Extremfälle für Fortrat-Parabeln, aufgetragen über der Wellenzahl $\bar{\nu}$, entnommen aus [39].

Damit ergeben sich aus Kombinationen verschiedener angeregter Niveaus unter Anwendung der oben genannten Auswahlregeln mögliche strahlende Systeme. Für die Nomenklatur dieser Systeme können griechische Buchstaben benutzt werden (so z.B. für die verschiedenen Systeme von NO) oder es werden die Namen der Forscher benutzt, die diese Systeme als erstes beobachtet haben (z.B. O_2 Schumann-Runge). Schließlich ist es noch gebräuchlich, die spektrale Position des entsprechenden Systems im Spektrum einer Glühentladung anzugeben (so z.B. das 2. Positive System von N_2). Aus Gründen der angestrebten Vermeidung von Anglizismen wird im Folgenden die englische Nomenklatur für die strahlenden Molekülsysteme durch die beteiligten elektronischen Niveaus ersetzt. In Tabelle 1 sind die Luftmoleküle mit den in dieser Arbeit berücksichtigten elektronischen Niveaus und deren charakteristischen Werten für die oben genannten Größen aufgeführt.

Molekül	Strahlendes System	Übergang	Spin	Proj. Bahndrehimpuls	
				Λ'	Λ''
N_2^+	First Negative	$B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$	$\frac{1}{2}$	0	0
N_2	First Positive	$B^3\Pi \rightarrow A^3\Sigma$	1	1	0
	Second Positive	$C^3\Pi \rightarrow B^3\Pi$	1	1	1
NO	β	$B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	$\frac{1}{2}$	1	1
	γ	$A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$	$\frac{1}{2}$	0	1
	δ	$C^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	$\frac{1}{2}$	1	1
	ϵ	$D^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$	$\frac{1}{2}$	0	1
O_2	Schumann-Runge	$B^3\Sigma \rightarrow X^3\Sigma$	1	0	0
CN	Violet	$B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$	$\frac{1}{2}$	0	0

Tabelle 1: Berücksichtigte strahlende Systeme verschiedener Luftspezies.

Die bisher betrachtete, verhältnismäßig einfache Charakterisierung der Rotationsniveaus durch die Quantenzahl J beschreibt zwar die Energie der verschiedenen Übergänge korrekt, muss jedoch bei der genaueren spektralen Charakterisierung der Einzellinien durch eine Betrachtung des Bahndrehimpulses in dem entsprechenden Energieniveau ergänzt werden, wenn die Feinstruktur der Rotationsbanden aufgelöst werden soll. Im klassischen, mechanischen Modell überlagern sich verschiedene Bewegungen. Im Folgenden werden diese Bewegungen durch die Bahndrehimpulse in der Einheit $\hbar = h/(2\pi)$ erfasst, die als Vektoren betrachtet werden. Die Beziehung zwischen dem Betrag des entsprechenden Vektors und der resultierenden Quantenzahl ergibt sich aus der Quantenbedingung nach [47], z.B. für den Spin S zu:

$$|\underline{S}| = \sqrt{S(S+1)} \quad (18)$$

Alle Größen beziehen sich auf die Gesamtheit der vorhandenen Elektronen und nicht nur auf das für die Strahlung verantwortliche optische Elektron. S z.B. gibt somit die Summe aller Elektronenspins im Molekül an. Der elektronische Bahndrehimpuls \underline{L} beschreibt die Bewegung des Elektrons auf seiner Bahn um den Kern und der Elektronenspin \underline{S} den Eigendrehimpuls der Elektronen. Die vektorielle Summe aus beiden ergibt den elektronischen Gesamtbahndrehimpuls der Elektronen. In einem Atom wäre \underline{L} eine reine Funktion der Elektronengeschwindigkeit, in einem zweiatomigen Molekül ergibt sich jedoch eine nicht rotationssymmetrische Überlagerung der elektrischen Felder der beiden Atomkerne und somit eine Vorzugsachse im Raum, gegeben durch die intermolekulare Achse. Hierbei beschreibt die Projektion von \underline{L} auf die intermolekulare Achse $\underline{\Lambda}$ einen Drehimpuls als Funktion der Bewegung des Elektrons, während \underline{L} im Regelfalle um die intermolekulare Achse präzediert. In der quantenmechanischen Betrachtung homonuklearer Moleküle kann Λ ganzzahlige, positive Werte von 0 bis L annehmen [52]. Für alle Fälle außer $\Lambda=0$ resultiert aus diesem Bahndrehimpuls ein magnetisches Feld in Richtung der internuklearen Achse, das eine Präzession des Spins \underline{S} um diese Achse bewirkt [15, 19]. Auch hier ergibt die Projektion auf

die Achse eine konstante Komponente Σ , die in der quantenmechanischen Formulierung die Werte $\Sigma=-S$ bis $\Sigma=S$ annehmen kann, also insgesamt $(2S+1)$ unterschiedliche Zustände, bezeichnet als Spin-Multiplizität. Aus der Addition von $\underline{\Lambda}$ und $\underline{\Sigma}$ folgt der elektronische Gesamtbahndrehimpuls der Elektronen um die internukleare Achse $\underline{\Omega}$. Ω ist ganzzahlig für eine gerade Anzahl von Elektronen und halbzahlig für eine ungerade Elektronenzahl.

Bisher wurde die Elektronenbewegung um zwei statische Kerne betrachtet, für die Molekülrotation ist jedoch die Überlagerung mit der eigentlichen Rotation des Gesamtmoleküls \underline{N} erforderlich. Eine Kopplung dieser Effekte wurde durch Hund eingeführt, der unter Vernachlässigung von Kernspineffekten fünf verschiedene Kopplungsfälle definiert hat. Die vektorielle Addition der verschiedenen Drehimpulse ergibt den Gesamtdrehimpuls des Moleküls \underline{J} . Für zweiatomige Moleküle, wie sie hier betrachtet werden, sind nur die ersten beiden Hund'schen Kopplungsfälle (a) und (b) interessant [52].

Im Hund'schen Fall (a) ist die Interaktion zwischen der langsamen Moleküldrehung der Kerne und der schnellen Elektronenbewegung schwach, aber die Kopplung der Elektronenbewegung an die internukleare Achse über das elektrische und das induzierte magnetische Feld sehr stark. Daraus resultiert ein definierter elektronischer Gesamtbahndrehimpuls $\underline{\Omega}$ und der Gesamtdrehimpuls \underline{J} ergibt sich aus einer vektoriellen Addition von $\underline{\Omega}$ und \underline{N} . Je nach Größe von N kann J die Werte $J=\Omega, \Omega+1, \Omega+2, \dots$ annehmen [52].

Im Hund'schen Fall (b) bewegen sich die Kerne verhältnismäßig schnell. Es findet immer noch eine Kopplung des Bahndrehimpulses der Elektronen \underline{L} an die intermolekulare Achse statt und $\underline{\Lambda}$ ist definiert. Die Kopplung des Spins an diese Achse über das induzierte Magnetfeld ist jetzt jedoch nur noch sehr schwach [52] und seine Projektion $\underline{\Sigma}$ ist nicht mehr definiert. Deshalb wird der Gesamtdrehimpuls ohne Berücksichtigung vom Spin \underline{K} als Addition von $\underline{\Lambda}$ und \underline{N} definiert. Die neue Quantenzahl K kann je nach Größe von N die integralen Werte $\Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \dots$ annehmen. Der Gesamtdrehimpuls \underline{J} ergibt sich schließlich aus der Addition von \underline{S} und \underline{K} . Mögliche Werte von J sind für $K>S$ durch $(K+S), (K+S-1), \dots, (K-S)$ gegeben, sodass J für jeden Wert von K wieder $(2S+1)$ Zustände annehmen kann. Abbildung 2.9 beschreibt die beiden Kopplungsfälle.

Welcher Kopplungsfall für ein gegebenes Energieniveau zur Anwendung kommen muss, hängt wesentlich von S und Λ ab. So gehören z.B. Σ Zustände unabhängig von der Rotation prinzipiell dem Fall (b) an, da die Projektion des Bahndrehimpulses der Elektronen Λ Null ist und somit kein Magnetfeld in Richtung der internuklearen Achse induziert wird. ${}^2\Pi$ Zustände dagegen gehen mit steigender Rotationsquantenzahl typischerweise vom Fall (a) in den Fall (b) über. Die Formulierungen zur Charakterisierung dieses Übergangs weisen dabei meist auch noch eine Abhängigkeit von der Vibrationsquantenzahl auf. Zu beachten ist weiterhin, dass (a) und (b) Extremfälle darstellen, die für $\Lambda \neq 0$ nur näherungsweise erreicht werden.

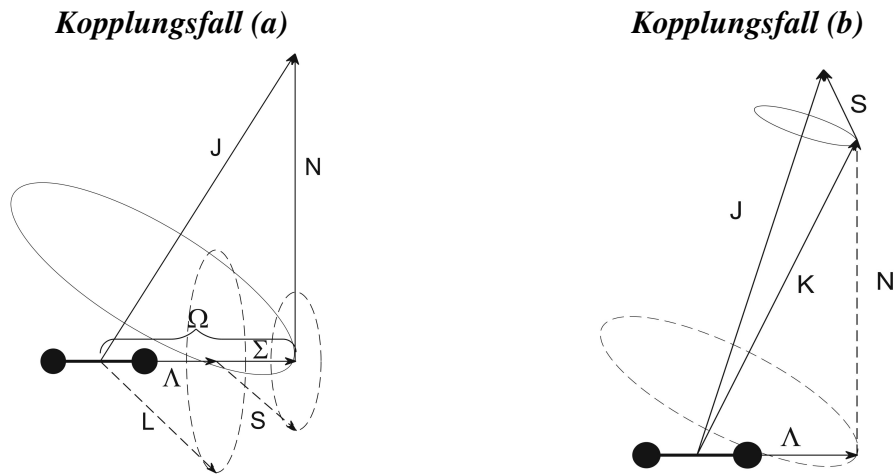


Abbildung 2.9: Vektordiagramm für die Hund'schen Kopplungsfälle (a) und (b) nach [52].

Die besondere Bedeutung der Hund'schen Kopplungsfälle liegt darin, dass abhängig von der Kopplungsart eine unterschiedliche Aufspaltung der Energieniveaus erreicht wird und sich somit die Feinstruktur der emittierten Strahlung ändert. Die wesentlichen Aufspaltungsprozesse sind dabei die Spin-Aufspaltung, die durchaus merkbare qualitative Veränderungen der spektralen Charakteristik zur Folge haben kann, und die Λ -Verdopplung, die typischerweise um Größenordnungen niedriger liegt und in den meisten Fällen nur bei sehr hoher spektraler Auflösung von Bedeutung ist. Auf die genaue Behandlung der Aufspaltungseffekte wird bei der Beschreibung der verwendeten Simulation eingegangen werden. Zu betonen ist jedoch, dass die Aufspaltung nicht zu einer Änderung der Gesamtenergie der Übergänge führt, sondern nur eine Umverteilung der zuvor berechneten Energien auf zusätzliche Emissionslinien bewirkt.

Bestimmung der spektralen Intensitätsverteilung

Bisher wurden nur die spektralen Positionen einzelner Emissionslinien als Funktion der Energie des Übergangs behandelt. Um ein Emissionsspektrum zu erhalten, müssen zusätzlich noch die Intensitäten der einzelnen Linien ermittelt werden. Grundsätzlich ergibt sich die Intensität einer einzelnen Emissionslinie eines Moleküls wie bei den Atomen aus einer Übergangswahrscheinlichkeit aufgrund quantenmechanischer Überlegungen und der Besetzungsdichte des betrachteten oberen Niveaus. Werden Verbreiterungseffekte, die wie schon weiter oben beschrieben wesentlich von der gegenseitigen Beeinflussungen der einzelnen Teilchen durcheinander sowie durch externe Effekte wie elektrische und magnetische Felder abhängen, vorerst nicht berücksichtigt werden, so kann die Intensität einer Emissionslinie mit dem Emissionskoeffizienten gleichgesetzt werden. Der Emissionskoeffizient ergibt sich zu:

$$\varepsilon = \frac{N' A_{\rightarrow''} \Delta E_{\rightarrow''}}{4\pi} = \frac{16\pi^3 c \bar{V}^4}{3} N' (R_e(\bar{r}_{v''}))^2 q_{v''} \frac{S_{J''\Lambda''}^{J'\Lambda'}}{2J'+1} \quad (19)$$

Die Besetzungsdichte des diskreten oberen Niveaus wird im Allgemeinen aus Verteilungsfunktionen bestimmt, die für die Rotations- und Vibrationsenergie in Form einer Boltzmann-Verteilung angenommen werden. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird wesentlich durch das Frank-Condon Prinzip beschrieben. Ein grundlegendes Postulat ist hierbei, dass der eigentliche Übergang (Zeitdauer $\approx 10^{-16}$ s [40]) gegenüber der Bewegung der beiden Atomkerne sehr schnell passiert. In ei-

dem Potentialdiagramm des Moleküls sind mögliche Übergänge also durch senkrechte Linien gekennzeichnet. Je größer der gemeinsame Bereich der betrachteten Vibrationsenergieniveaus des oberen und unteren Zustands auf der Achse der Kernabstände, desto größer auch die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang. Nach dem Übergang befinden sich die Kerne in einem anderen Potential als vorher. Die wahrscheinlichsten Übergänge sind deshalb weiterhin die, die eine möglichst schnelle Anpassung der Kerne an das neue Potential ermöglichen, also die Vibrationswellenfunktion² ψ am wenigsten ändern [40]. Abbildung 2.10 verdeutlicht das Frank-Condon Prinzip.

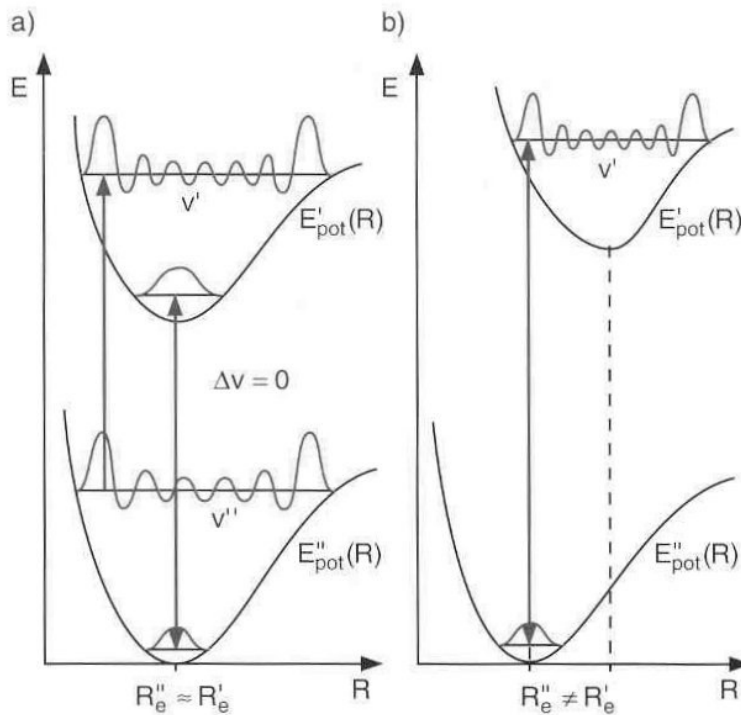


Abbildung 2.10: Bevorzugte Schwingungsübergänge (a) mit $\Delta v=0$ bei ähnlichen Potentialen im unteren und oberen Zustand, (b) mit $\Delta v \neq 0$ bei gegeneinander verschobenen Potentialkurven, entnommen aus [23].

Ein weiterer quantenmechanischer Faktor ist durch den von der Rotationsquantenzahl abhängigen Hönl-London Faktor $S_{J''\Lambda''}^{J'\Lambda'}$ gegeben. Er gewichtet die Verteilung der Übergänge auf die verschiedenen Zweige. Dabei muss die Summe der Hönl-London-Faktoren für eine Rotationsquantenzahl jeweils die Rotationsentartung $(2J+1)$ ergeben. Werden durch den Elektronenspin aufgesplante Niveaus berechnet, ergibt die

entsprechende Summe das Produkt aus Rotationsentartung und Spinmultiplizität. Werden in einem Programm unterschiedliche Modellierungsansätze für verschiedene strahlende Systeme verwendet, ist es vorteilhaft, die Hönl-London Faktoren durch die Rotationsentartung und die Spinmultiplizität zu normieren. Die in dieser Arbeit verwendeten Hönl-London Faktoren wurden aus Herzberg [52]

² Die Vibrationswellenfunktion ist die quantenmechanische Lösung des Bewegungsproblems der Atomkerne bei der Vibration des Moleküls. Die Wahrscheinlichkeit $W(R)$ für einen Übergang von v' nach v'' in einem Intervall dr um r berechnet sich zu $W(r) = \frac{\psi'_{vib}(r) \cdot \psi''_{vib}(r) dr}{\int \psi'_{vib}(r) \cdot \psi''_{vib}(r)}$ [23]. Die getrennte Berechnung der elektronischen und der vibratorischen Bewegung ist wegen der stark unterschiedlichen Massen von Elektronen und Kern zulässig (Born-Oppenheimer Näherung [14]).

entnommen. Eine Ausnahme stellen die Werte für NO γ , und NO ϵ dar, für die die Formulierungen von Arnold und Whiting [108] verwendet wurden.

Ein weiterer Faktor ist das vibratorisch-elektronische Übergangsmoment $R_e(\bar{r}_{v,v''})$, das von Laux in der Form $\sum R_e^{v''v'''} = (2 - \delta)(2S + 1)(R_e(\bar{r}_{v,v''}))^2$ in [70] für die wichtigsten Übergänge von O₂, N₂, NO und CN tabelliert wurde. Hierbei ist $(2S + 1)$ die Spin-Multiplizität des betrachteten Moleküls und δ das Kronecker Delta, das in der von Laux benutzten Form 0 wird, wenn auch die Summe der projizierten Bahndrehimpulse des oberen und unteren Zustands 0 ist (also nur für $\Sigma \rightarrow \Sigma$ Übergänge) und sonst den Wert 1 annimmt.

2.1.5 Temperaturbestimmung aus Molekülspektren

Wie im vorigen Kapitel gezeigt, sind auch einzelne Emissionslinien immer durch alle drei Energieformen bzw. deren Änderung bestimmt. Zur isolierten Bestimmung der Rotationstemperatur müssen die Einflüsse der anderen Komponenten des Übergangs, gegeben durch den elektronischen und vibratorischen Übergang, von der Charakteristik des rotatorischen Übergangs entkoppelt werden. Dazu werden verschiedene Rotationslinien eines Moleküls aus nur einem definierten elektronischen und vibratorischen Übergang betrachtet. Da die Temperaturbestimmung aus den Verhältnissen der einzelnen Linien erfolgt, entfallen dann die Einflüsse von elektronischer und vibratorischer Anregung. Diese isolierte Betrachtung ist nur möglich, wenn die einzelnen rovibratorischen Linien spektral aufgelöst zur Verfügung stehen.

Die Intensität der einzelnen Linien ist unter anderem proportional zur Rotationsenergiedifferenz zwischen der Energie des oberen und unteren Zustands, für die im Allgemeinen eine Boltzmannverteilung angenommen wird. Analog zur Ermittlung der elektronischen Anregungstemperatur von Atomen kann auch hier wieder ein Boltzmann-Plot erstellt werden, allerdings dürfen nur Linien des gleichen Vibrationsübergangs im gleichen elektronischen Übergang verwendet werden. Ebenfalls analog zu den Betrachtungen bei der Atomstrahlung ermöglicht eine solche Vorgehensweise gleichzeitig eine Überprüfung der Annahme einer Boltzmann-Verteilung für die Rotationsenergie. Je größer die Energieabstände der Linien sind, desto genauer wird die Temperaturbestimmung. Eine besondere Schwierigkeit bei der Bestimmung der Molekültemperaturen aus Boltzmann-Plots besteht darin, dass sich die Emissionslinien nicht überlappen dürfen. Dabei können sowohl Überlagerungen von Emissionslinien unterschiedlicher Moleküle, als auch unterschiedlicher Vibrationsübergänge des gleichen Moleküls, aber auch Überlagerungen der verschiedenen Äste (P, Q, R) des gleichen Vibrationsübergangs auftreten, die sich alle störend auswirken.

Prinzipiell ist auf diese Art und Weise auch eine Bestimmung der Vibrationstemperatur möglich. Dazu müssen Linien verschiedener Vibrationsniveaus miteinander verglichen werden. Im Wesentlichen gelten die gleichen Bedingungen wie für einen Boltzmann Plot über verschiedene Rotationslinien, allerdings sind die spektralen Positionen der einzelnen Linien sehr viel weiter voneinander entfernt, was diese Art der Auswertung in den meisten Fällen unpraktikabel macht. Sowohl der Zeitaufwand für die Messung als auch die resultierenden Datenmengen wachsen damit sehr stark an. Analoge Aussagen gelten auch für eine Ermittlung der elektronischen Temperatur. Deshalb

wurde nach einem Verfahren gesucht, das es ermöglicht, eine Temperaturbestimmung aus spektral niedrig aufgelösten Spektren durchzuführen, wie sie im folgenden Kapitel beschrieben wird.

Eine Temperaturbestimmung aus spektral niedrig aufgelösten Spektren ist möglich, wenn eine Simulation der Molekülstrahlung im entsprechenden Wellenlängenbereich durchgeführt wird, die dann mit dem gemessenen Spektrum verglichen wird. Variiert man bei der theoretischen Simulation die zugrunde liegenden Temperaturen, so werden sich unterschiedlich gute Übereinstimmungen zwischen den simulierten und gemessenen Spektren ergeben. Das Ergebnis dieser Auswertung ist durch die, den am besten übereinstimmenden Spektren zugehörigen Temperaturen gegeben. In einem ersten Schritt für die Untersuchung von N_2^+ [116] wurden die aus den spektral hoch aufgelösten Messungen gewonnenen Rotationstemperaturen als Eingangsparameter für die spektrale Simulation gewählt. Nur die Vibrationstemperatur wurde durch einen Vergleich in niedriger spektraler Auflösung bestimmt. In späteren Untersuchungen [113-123] wurde die zugrunde liegende Datenbank erweitert und das Verfahren auf eine gleichzeitige Bestimmung von Rotations- und Vibrationstemperatur ohne zusätzliche Messungen in hoher spektraler Auflösung erweitert. Dadurch konnte eine Reduzierung der Messzeit um einen Faktor 1000 erreicht werden, die eine örtlich aufgelöste Untersuchung der Probenumströmung erst möglich machte.

Neben diesen positiven Effekten bewirkt der Verlust an spektralen Informationen aber auch zusätzliche Unsicherheiten, die sich im Wesentlichen aus der Überlagerung der Emission verschiedener Moleküle ergeben. Ist in einer spektral hoch aufgelösten Messung zumindest theoretisch noch eine Zuordnung einzelner Linien zu verschiedenen Molekülarten vorstellbar, so ist dies in der niedrigen spektralen Auflösung nur noch bedingt möglich. Dies wirkt sich vor allem bei Molekülen mit im Vergleich zur sonstigen Strahlung niedrigen Intensitäten (z.B. N_2 in der spektralen Umgebung von N_2^+) oder/und schwach ausgeprägter spektraler Charakteristik (z.B. O_2 oder $NO\beta$) aus.

2.2 Simulationsprogramme

Die theoretische Simulation von Emissionsspektren hochenthalper Plasmaströmungen wird weltweit aus verschiedenen Gründen untersucht. Zum einen stellt die spektrale Charakteristik des Plasmas einen wichtigen, teilweise sogar den einzigen Zugang zu Informationen über den thermodynamischen und chemischen Zustand des Plasmas dar und es ergibt sich über die Emissionsspektren eine Kopplungsmöglichkeit zwischen experimentellen Untersuchungen in Bodentestanlagen oder bei Freifluguntersuchungen mit numerischen Untersuchungen [60, 6]. Zum anderen gewinnt die spektrale Simulation aber auch bei der Betrachtung von Strahlungstransportvorgängen im Rahmen numerischer Untersuchungen immer mehr an Bedeutung [104, 55]. Aus diesem Grunde wurden weltweit verschiedene Programmpakete entwickelt, die in unterschiedlicher Detailtiefe derartige Simulationen durchführen können. An erster Stelle ist wahrscheinlich der US-amerikanische Code NEQAIR in den verschiedenen Versionen zu nennen. Leider unterliegen die nach 1985 erstellten Erweiterungen starken Restriktionen durch die amerikanische Regierung und sind außerhalb der USA nicht verfügbar, deshalb beziehen sich alle Aussagen über NEQAIR auf die Version von 1985 [79]. Ende der 90er Jahre wurde in Europa im Auftrag der ESA mit der Erstellung der *Plasma Radiation Database* PARADE begonnen, die gerade erweitert wird [104, 122].

PARADE wurde in dieser Arbeit zur Berechnung der Vergleichsspektren zur Enthalpiebestimmung verwendet und wird in einem ersten Unterkapitel näher erläutert. In der vorliegenden Arbeit wurden jedoch auch spektral hoch aufgelöste Simulationen durchgeführt, die eine detailliertere Modellierung erfordern, als sie in PARADE implementiert ist. Aus diesem Grunde wurde ein eigenes Programmpaket (EMCAL) entwickelt, das zur Auswertung der emissionsspektroskopischen Messungen angewandt wurde. Auch dieses Programm wird in einem Unterkapitel beschrieben. Neben den schon erwähnten Simulationsprogrammen gibt es noch verschiedene russische Entwicklungen, von denen jedoch nur ein Programmpaket zugänglich war, das allerdings nicht in der Lage ist, spektral hoch aufgelöste Rechnungen zu erstellen [18], sowie verschiedene französische Projekte [69, 92, 21], mit denen gegen Ende der Arbeit im Rahmen der Erweiterung von PARADE [103] und der *Plasma Radiation Database Working Group* [90] der ESA intensiver Datenaustausch stattgefunden hat. Darüber hinaus besteht Kontakt zu einer japanischen Gruppe, deren Programm SPRADIAN [38] zwar inzwischen zu Verfügung steht, aber für einen Einsatz in dieser Arbeit zu spät kam.

Neben diesen Programmen zur spektralen Simulation wurde ein Programmpaket notwendig, das zur Ermittlung der Molekültemperaturen einen systematischen Vergleich von theoretisch simulierten mit gemessenen Spektren zu ermöglicht. Auch dieses Programmpaket (ASPEN) wird in einem Unterkapitel kurz vorgestellt.

2.2.1 PARADE

PARADE ist ein Programmpaket, dessen Entwicklung 1994 von der ESA initiiert wurde [102]. Nach Eingabe von Temperaturen, Gesamtteilchendichte und Molanteilen der beteiligten Spezies wird die von diesem Plasma emittierte Strahlung, bestehend aus Kontinuumstrahlung, Atomlinien und Molekülstrahlung, sowie die entsprechende Absorption berechnet. Eine Nichtgleichgewichts-anregung der elektronischen Niveaus kann sowohl für Atome als auch für Moleküle berücksichtigt werden, unterschiedliche Vibrationstemperaturen für die verschiedenen Moleküle werden zugelassen. In der in dieser Arbeit verwendeten Version 2.0 sind 15 verschiedene Atome, darunter atomarer Stickstoff und Sauerstoff, sowie deren erste Ionisationsstufen und die Moleküle N_2 , O_2 , N_2^+ und CN mit verschiedenen strahlenden Systemen implementiert. Detaillierte Beschreibungen finden sich in [122, 112], die Berechnung der Molekülstrahlung soll jedoch an dieser Stelle etwas eingehender diskutiert werden. Bei Fertigstellung der ersten Version von PARADE wurden eigene Prozeduren für die Behandlung der Atomstrahlung entwickelt. Die Routinen, wie auch die nötigen Eingabedatenfiles zur Berechnung der Moleküle wurden jedoch direkt aus NEQAIR entnommen. Der Strahlungscode NEQAIR wurde 1985 in den USA zusammengestellt [79] und basiert in weiten Teilen auf früheren Projekten [z.B. 108], die mit einem Nichtgleichgewichtsmodell für die elektronische Anregung [82] kombiniert wurden. Bedingt durch die Hardware Beschränkungen der Computer zu dieser Zeit, wurde in NEQAIR versucht, möglichst effektive Zusammenfassungen in die Modellierung zu implementieren, um sowohl Speicherbedarf als auch Laufzeit zu optimieren. Die daraus resultierenden Vereinfachungen bedingen jedoch Ungenauigkeiten in der spektralen Simulation, die einen Vergleich mit spektral hoch aufgelösten Messungen behindern. Die Eingabedateien für die spektroskopischen Konstanten werden formatiert eingelesen und sind weitestgehend unkommentiert, sodass eine Modifikation der Eingabedaten zur Aktualisierung auf neuere Datensätze

so gut wie unmöglich ist, ohne weitgehend in das eigentliche Programm einzugreifen. Erst in letzter Zeit wurde eine aufwendige Aktualisierung und Weiterentwicklung des Programms auf die aktuelle Version 2.0 möglich, in die jetzt auch neue Konstanten eingebunden werden können [103].

Die Nichtgleichgewichtsanregung³ wird über eine Theorie quasistationärer Zustände (*Quasi Steady State Methode* - QSS) realisiert [82]. Hierbei werden Ratengleichungen für die möglichen Übergänge zwischen den verschiedenen Anregungszuständen durch Stöße und Strahlung aufgestellt und in einem linearen Gleichungssystem zusammengefasst, dessen Lösung die gewünschte Verteilung der verschiedenen Energiezustände ergibt. Darüber hinaus muss die Summe aller angeregten Zustände die Gesamteilchendichte ergeben. Es ergeben sich dabei $n+1$ Gleichungen für n angeregte Niveaus. Da aufgrund des hohen Energieabstands zu den angeregten Zuständen die Ankopplung des Grundzustandes an eine vorerst unbekannte Verteilung die geringste Wahrscheinlichkeit aufweist, wird dieser Zustand nicht berücksichtigt. Eine genauere Darstellung bezüglich der Einbindung in PARADE findet sich auch in [60].

Die Berechnung der Molekülstrahlung erfolgt durch Unterprogramme, in denen die verschiedenen, möglichen Übergänge zusammengefasst werden. In Abhängigkeit davon, ob eine Änderung des Bahndrehimpulses Λ stattfindet, oder nicht, wird dabei nur zwischen drei Arten von Übergängen unterschieden. Übergänge mit $\Delta\Lambda=0$ werden wie $^1\Sigma\text{-}^1\Sigma$ Übergänge mit einem P und einem R Zweig modelliert, alle Übergänge mit $\Delta\Lambda=1$ als $^1\Sigma\text{-}^1\Pi$ Übergänge mit je einem P, Q und R Zweig. Zusätzlich zu diesen zwei Routinen wurde eine eigene Unteroutine für $^2\Sigma\text{-}^2\Pi$ Übergänge implementiert, da diese eine weit komplexere Struktur mit insgesamt 12 Zweigen aufweisen.

2.2.2 EMCAL

Die ursprüngliche Intention dieses Programmpakets lag in der Temperaturbestimmung, die einen qualitativen Vergleich der simulierten und gemessenen Spektren erfordert. Im Rahmen der Auswertung erster Messungen der N_2^+ Strahlung zur Ermittlung von Rotations- und Vibrationstemperatur wurde eine theoretische Berechnung der Strahlung des $\text{B}\rightarrow\text{X}$ Systems von N_2^+ erstellt [116]. Im Rahmen weiterer Untersuchungen wurde die zusätzliche Betrachtung der N_2 -Strahlung des $\text{C}\rightarrow\text{B}$ Systems nötig, um Diskrepanzen zwischen den gemessenen und simulierten Spektren erklären zu können [113]. Im Laufe der Zeit wurde das Programm immer weiter verfeinert und durch zusätzliche strahlende Systeme von N_2 , NO und O_2 ergänzt [123]. In der aktuellen Version verfügt EMCAL über eine deutlich detailliertere und genauere Modellierung als PARADE. Ein wesentlicher Unterschied der Programmpakete NEQAIR/PARADE und EMCAL besteht jedoch darin, dass in den ersten beiden Programmen, ausgehend von einem durch Temperaturen, Gesamteilchendichte und Molanteile definierten Plasmazustand, Anregung und Strahlung für alle Spezies berechnet wird, während EMCAL nach Vorgabe von Rotations- und Vibrationstemperatur einzelne strahlende Systeme berechnet. Diese müssen nach der Rechnung überlagert und entweder durch eine getrennte Berechnung der Besetzungsdichten der angeregten Niveaus, oder durch einen Vergleich mit experimentellen Daten skaliert werden.

³ Die Gültigkeit des Verfahrens ist allerdings auf geringe Abweichungen vom Gleichgewicht beschränkt..

Verwendete Spektrale Simulation der Molekülstrahlung

Grundsätzlich folgt die Berechnung der Molekülstrahlung den Gleichungen (14) bis(17). Die nötigen spektroskopischen Konstanten wurden für die hier gezeigten Berechnungen Laux [70] entnommen und durch Vergleiche mit spektral hoch aufgelösten Messungen angepasst [112]. Die spezifischen Behandlungsweisen für die unterschiedlichen Übergänge sind in Anlehnung an [108] und [52] formuliert worden. Speziell zur Interpretation von spektral hoch aufgelösten Messungen, z.B. zur Erstellung eines Boltzmann Plots unter Verwendung einzelner Rotationslinien, erschienen die in PARADE implementierten Vereinfachungen zu weit gehend. Deshalb wurde in EMCAL eine komplexere Modellierung implementiert, um die Feinstruktur der Rotationsspektren möglichst genau wiederzugeben. In EMCAL sind deshalb fünf verschiedene Übergänge implementiert. Alle $\Sigma \rightarrow \Sigma$ Übergänge werden ohne Spin-Aufspaltung als $^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$ Übergänge behandelt. Für alle NO Übergänge sowie für das N_2 C-B System werden die Übergänge physikalisch korrekt berechnet. Das N_2 B-A $^3\Pi \rightarrow ^3\Sigma$ System wurde in der für diese Arbeit verwendeten Version noch nicht abschließend implementiert, sondern wurde als $^2\Pi \rightarrow ^2\Sigma$ Übergang behandelt, wobei die Berechnung analog zu den NO Systemen verläuft und nur das untere und obere Niveau vertauscht werden.

Die in den verschiedenen Programmen berechneten strahlenden Systeme der verschiedenen Moleküle mit der verwendeten Modellierung und den genutzten spektroskopischen Konstanten sind in Tabelle 2 zusammengefasst. Generell berechnet PARADE die größte Anzahl von strahlenden Systemen während EMCAL die größte Detailtiefe in der Modellierung aufweist.

Molekül	Strahlendes System	Übergang	NEQAIR85		PARADE V2.0		EMCAL	
			Modell	Konst.	Modell	Konst.	Modell	Konst.
N_2^+	First Negative	$B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux/Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux
N_2	First Positive	$B^3\Pi \rightarrow A^3\Sigma$	$^1\Pi \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Pi \rightarrow ^1\Sigma$	Laux/Park	$^2\Pi \rightarrow ^2\Sigma$	Laux
	Second Positive	$C^3\Pi \rightarrow B^3\Pi$	$^1\Pi \rightarrow ^1\Pi$	Park	$^1\Pi \rightarrow ^1\Pi$	Laux/Park	$^3\Pi \rightarrow ^3\Pi$	Laux
	Birge-Hopfield	$B^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma$	$^1\Pi \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Pi \rightarrow ^1\Sigma$	Park	nein	-
NO	β	$B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	$^1\Pi \rightarrow ^1\Pi$	Park	$^1\Pi \rightarrow ^1\Pi$	Laux/Park	$^2\Pi \rightarrow ^2\Pi$	Laux
	γ	$A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$	$^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$	Park	$^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$	Laux/Park	$^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$	Laux
	δ	$C^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$	nein	Park	$^1\Pi \rightarrow ^1\Pi$	Laux	$^2\Pi \rightarrow ^2\Pi$	Laux
	ϵ	$D^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$	nein	Park	$^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$	Laux	$^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$	Laux
O_2	Schumann-Runge	$B^3\Sigma \rightarrow X^3\Sigma$	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux/Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux
CN	Red	$A^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Park	Nein	-
	Violet	$B^2\Sigma \rightarrow X^2\Sigma$	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux/Park	$^1\Sigma \rightarrow ^1\Sigma$	Laux

Tabelle 2: Vergleich der Modellierung in NEQAIR85, PARADE und EMCAL.

Ein direkter Vergleich der Spektren, die mit den unterschiedlichen Programmen erzeugt werden, ist im Rahmen des *Gas Radiation Modelling Workshops* der ESA 2003 in Lissabon angestellt worden [90]. Dazu wurde mit allen drei Programmpaketen der gleiche Testfall durchgerechnet, der auf

Messungen eines Gleichgewichtsplasmas aus [70] beruhte. Außer im Bereich der Emission von CN, das zu dem Zeitpunkt noch nicht implementiert war, wies dabei EMCAL die beste qualitative Übereinstimmung mit den Messergebnissen auf. Da es sich bei den experimentellen Daten um Spektren eines Gleichgewichtsplasmas handelt, konnten die Besetzungsdichten der elektronisch angeregten Niveaus direkt aus der Boltzmann-Verteilung entnommen werden. Der Vergleich mit den durch EMCAL simulierten Spektren ermöglichte eine quantitative Beurteilung der spektralen Simulation durch EMCAL. Abbildung 2.11 zeigt einen Vergleich der simulierten und experimentellen Ergebnisse durch PARADE und EMCAL nach Einbindung der Simulation von CN. Um die gezeigte Übereinstimmung zu erreichen, musste die Emission von $\text{NO}\delta$ und $\text{NO}\epsilon$ jeweils mit einem Faktor von 1,3 und die von O_2 mit 4 multipliziert werden. EMCAL unterschätzt also die Strahlung dieser Spezies um die genannten Faktoren.

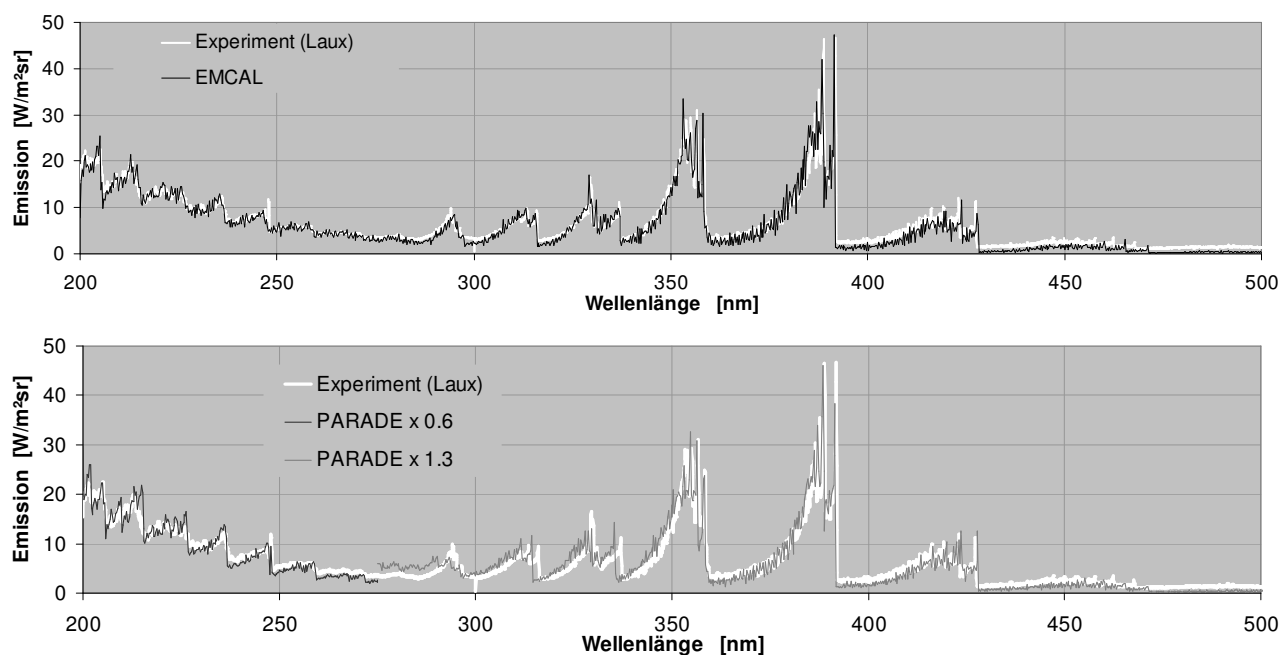


Abbildung 2.11: Vergleich der Simulation der Molekülstrahlung berechnet mit PARADE und EMCAL mit experimentellen Daten eines Gleichgewichtsplasmas [122, 70].

Auch wenn einzelne Systeme prinzipiell dem gleichen Übergang zuzuordnen sind, sind doch üblicherweise Unterschiede in den verschiedenen Konstanten vorhanden, die merkliche Unterschiede in den resultierenden Spektren bewirken können. Eines der drastischsten Beispiele sind die Spektren von $\text{NO}\beta$ und $\text{NO}\delta$, die beide durch einen ${}^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$ Übergang definiert werden, deren Rotationslinien sich jedoch für steigende Rotationsquantenzahlen in entgegengesetzte Richtungen verschieben. Im Folgenden wird die Modellierung für die verschiedenen Ansätze dargestellt und anhand von Fortratparabeln und Linienintensitäten für ausgewählte Übergänge illustriert. Die verwendeten Hönl-London-Faktoren und Molekülkonstanten sowie die zur Berücksichtigung des Übergangs zwischen den Hund'schen Fällen nötigen Größen sind im Anhang D tabelliert.

Zur Charakterisierung der Modellierung können Fortrat-Parabeln verwendet werden, in denen die Rotationsquantenzahl des oberen Zustands über der Wellenlänge der Einzellinie aufgetragen wird, oder die Intensitäten der Einzellinien über der Wellenlänge aufgetragen werden. Zur Berechnung

eines realen Spektrums (z.B. zum Vergleich mit gemessenen Spektren) müssen diese Intensitäten unter Berücksichtigung der relevanten Verbreiterungsmechanismen über die gemessenen Wellenlängenintervalle integriert werden, wie im Ergebniskapitel gezeigt werden wird. Im Folgenden werden die verwendeten Übergänge getrennt beschrieben.

Modellierung des ${}^1\Sigma \rightarrow {}^1\Sigma$ Übergangs: (N_2^+ , CN, O_2)

Nach [52] wirkt sich die Spin-Aufspaltung bei $\Sigma \rightarrow \Sigma$ nur schwach aus. Deshalb wurde die vereinfachende Betrachtung mit der Spin-Multiplizität von 1 gewählt. Die Modellierung dieses Übergangs reduziert sich dann durch den verbotenen Q-Zweig mit $\Delta J=0$ auf die zwei Zweige P und R mit $\Delta J=\pm 1$. Auch für eine Rechnung mit Spin-Aufspaltung müsste kein Übergang zwischen verschiedenen Hund'schen Fällen berücksichtigt werden, da ${}^2\Sigma$ Zustände wegen $\Lambda=0$ grundsätzlich dem Hund'schen Fall (b) gehorchen. Im Gegensatz zu anderen Übergänge tritt jedoch eine Intensitätsalternierung auf, die im Falle von N_2^+ einen Faktor von 2 zwischen benachbarten Linien jedes Zweiges und für O_2 zum völligen Wegfall jeder zweiten Rotationslinie führt. Für das obere und untere Niveau gelten strikt die in Kapitel 2.1.4 dargestellten Formeln. Abbildung 2.12 zeigt als Beispiel die Fortratparabeln und die Linienintensitäten für verschiedene Übergänge von N_2^+ mit $\Delta v=0$.

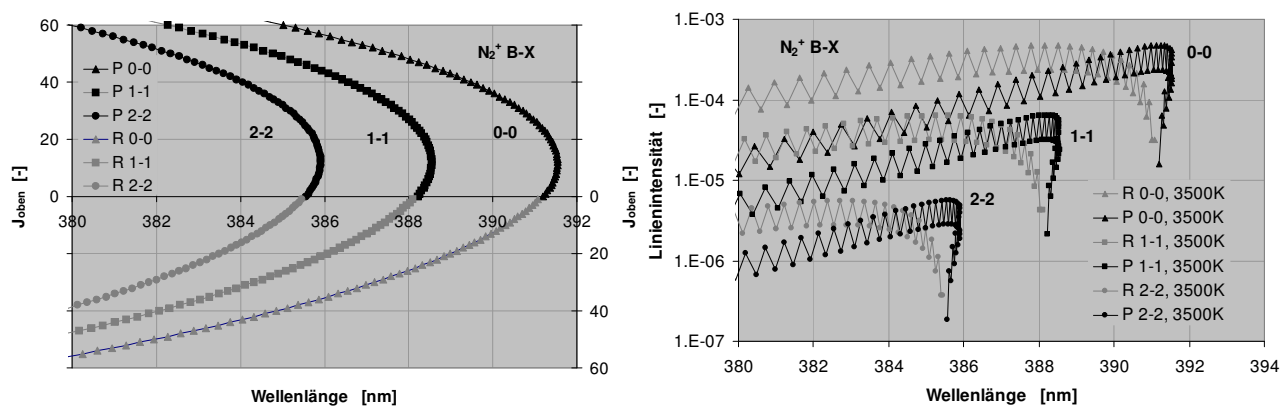


Abbildung 2.12: Fortrat Parabeln und Linienintensitäten des N_2^+ -Moleküls für $\Delta v=0$.

Die realen Spektren weisen in diesem Wellenlängenbereich allerdings eine Abweichung von dieser Simulation auf, die sich aus einer Überschneidung der Potentialkurven mit dem elektronischen $\text{A}^2\Pi$ ergibt (Meinel-Störung) und in der EMCAL Modellierung nicht enthalten ist. Die real auftretenden Emissionslinien im Bereich zwischen 389,7 nm und 390,3 nm weichen dabei sowohl in ihrer Position als auch in ihrer Intensität vom simulierten Spektrum ab.

Modellierung des ${}^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$ Übergangs : ($\text{NO}\beta$, $\text{NO}\delta$)

Sowohl oberes wie auch unteres Niveau spalten sich für jede Rotationsquantenzahl J prinzipiell in je zwei unterschiedliche Energieniveaus mit $K=J\pm 0,5$ auf. Dabei erfolgt ein Übergang vom Hund'schen Fall a) für kleine Rotationsquantenzahlen zum Fall b) für große J. Die Aufspaltung wird erfasst durch eine unterschiedliche Berechnung der beiden aufgespaltenen Energieniveaus unter Verwendung der gemeinsamen Quantenzahl J über:

$$F_1 = B_v(J + 0,5)^2 - 1 - \frac{1}{2} \sqrt{4(J + 0,5)^2 + Y(Y - 4) - D_v J^4} \quad (20)$$

$$F_2 = B_v(J + 0,5)^2 - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{4(J + 0,5)^2 + Y(Y - 4) - D_v(J + 1)^4} \quad (21)$$

Hierbei berücksichtigt die Größe $Y=A/B_v$ über die Kopplungskonstante A den Übergang zwischen den beiden Hund'schen Fällen. Mögliche Übergänge ergeben sich jetzt aus der Kombination der unterschiedlichen Energiezustände im oberen und unteren Niveau $1 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$ und $2 \rightarrow 2$. Die Hauptzweige resultieren dabei aus Übergängen zwischen gleichartigen Unterniveaus ($1 \rightarrow 1$ und $2 \rightarrow 2$), die anderen Kombinationen ergeben nur schwache Satellitenzweige [52] und werden deshalb in EMCAL nicht berücksichtigt. Damit reduziert sich die Berechnung auf die sechs Zweige Q_1 , Q_2 , P_1 , P_2 , R_1 und R_2 . Die Abbildungen 2.13 und 2.14 zeigen die Fortratparabeln und die Linienintensitäten für die 0-0 Übergänge von $NO\beta$ und $NO\delta$.

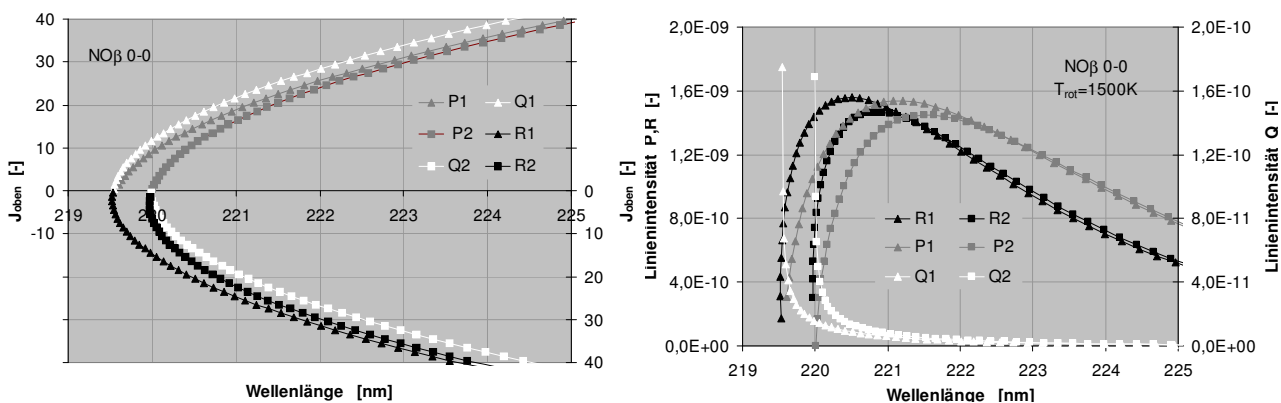


Abbildung 2.13: Fortrat Parabeln und Linienintensitäten des $NO\beta$ Systems für den Vibrationsübergang 0-0.

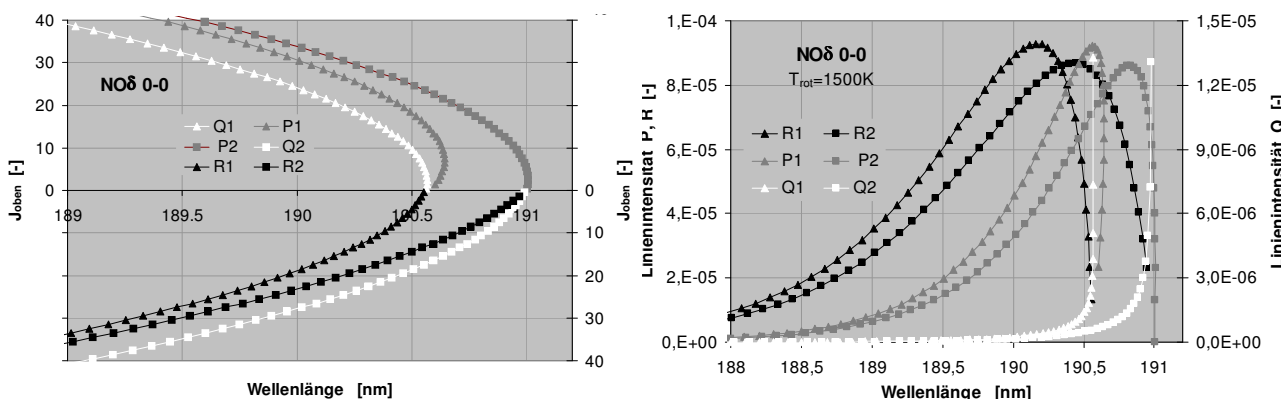


Abbildung 2.14: Fortrat Parabeln und Linienintensitäten des $NO\delta$ Systems für den Vibrationsübergang 0-0.

Modellierung des $^3\Pi \rightarrow ^3\Pi$ Übergangs: (N_2 C-B)

Sowohl oberes wie auch unteres Niveau spalten sich für jede Rotationsquantenzahl J in je drei unterschiedliche Energieniveaus mit $K=J\pm 1$ auf. Dabei erfolgt ein Übergang vom Hund'schen Fall (a) für kleine Rotationsquantenzahlen zum Fall (b) für große J für jedes Niveau. Auch hier erfolgt keine separate Variation der Rotationsquantenzahl, sondern eine getrennte Berechnung der drei aufgespaltenen Niveaus nach [52] durch:

$$F_1 = B_v \left(J(J+1) - \sqrt{Z_1} - 2Z_2 \right) - D_v (J-0,5)^4 \quad (22)$$

$$F_2 = B_v \left(J(J+1) + 4Z_2 \right) - D_v (J+0,5)^4 \quad (23)$$

$$F_1 = B_v \left(J(J+1) - \sqrt{Z_1} - 2Z_2 \right) - D_v (J+1,5)^4 \quad (24)$$

Der Übergang zwischen den verschiedenen Hund'schen Fällen wird wieder durch die Konstante A im Kopplungsfaktor $Y=A/B_v$ berücksichtigt und ist in den Formeln für Z_1 und Z_2 enthalten:

$$Z_1 = \Lambda^2 Y(Y-4) + \frac{4}{3} + J(J+1) \quad \text{und} \quad Z_2 = \Lambda^2 Y(Y-1) + \frac{4}{9} - \frac{2J(J+1)}{3Z_1} \quad (25)$$

Auch hier dominieren die Hauptzweige deutlich über die schwachen Satellitenzweige. Laut [52] entfällt der dritte Q-Zweig, sodass die Modellierung schließlich die 8 Zweige Q_1 , Q_2 , P_1 , P_2 , P_3 , R_1 , R_2 und R_3 umfasst. Abbildung 2.15 zeigt als Beispiel die Fortratparabeln und die Linienintensitäten für den 0-0 Übergang von N_2 C-B.

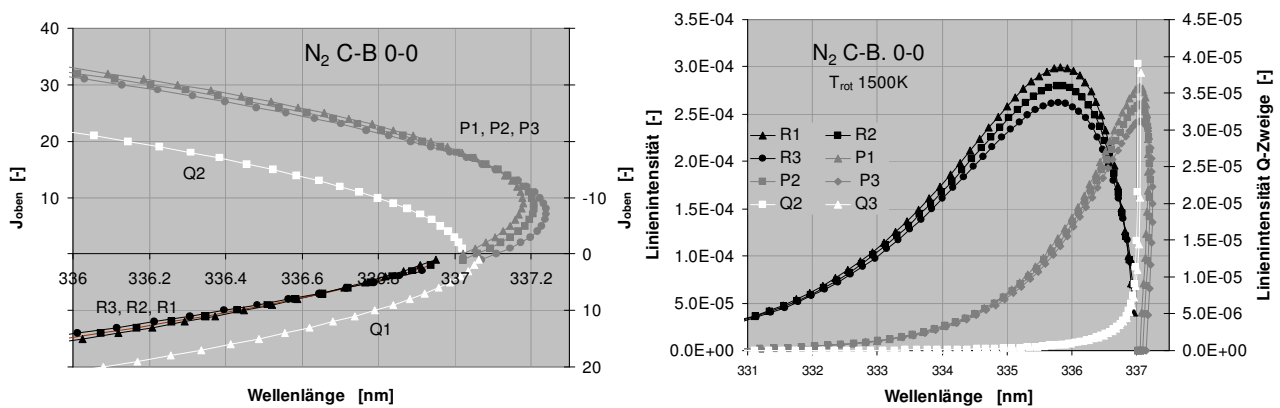


Abbildung 2.15: Fortrat Parabeln und Linienintensitäten des N_2 C-B Systems für den Vibrationsübergang 0-0.

Modellierung des ${}^2\Sigma \rightarrow {}^2\Pi$ Übergangs: ($NO\gamma$, $NO\epsilon$)

Dieser Übergang erfordert eine aufwendigere Modellierung als die bisher behandelten, da hier der Beitrag der Satellitenzweige nicht mehr schwach und auf niedrige Rotationsquantenzahlen begrenzt ist. Daher müssen alle 12 resultierenden Zweige auch wirklich berechnet werden. Je nach Modellierung fallen zwar schließlich einige Zweige zusammen, werden aber trotzdem getrennt berechnet. Für die Energie des unteren Niveaus F'' wird die schon dargestellte Beschreibung für einen ${}^2\Pi$ Zustand verwendet:

$$F_1'' = B_v'' (J''+0,5)^2 - 1 - \frac{1}{2} \sqrt{4(J''+0,5)^2 + Y''(Y''-4)} - D_v'' J''^4 \quad (26)$$

$$F_2'' = B_v'' (J''+0,5)^2 - 1 + \frac{1}{2} \sqrt{4(J''+0,5)^2 + Y''(Y''-4)} - D_v'' (J''+1)^4 \quad (27)$$

Für das obere Niveau wird eine Aufspaltungskonstante γ [19] berücksichtigt. Wie ein Vergleich mit hoch aufgelösten Messungen gezeigt hat, kann eine Übereinstimmung mit den Messungen jedoch

nur durch eine explizite Verwendung der Quantenzahl $K=J\pm 0,5$ für die beiden Niveaus erreicht werden. Daher ergeben sich die Energieniveaus für den oberen Zustand zu:

$$F_1' = B_v'(J'-0,5)((J'-0,5)+1) - D_v'(J'-0,5)^2((J'-0,5)+1)^2 + 0,5\gamma_v'(J'-0,5) \quad (28)$$

$$F_2' = B_v'(J'+0,5)((J'+0,5)+1) - D_v'(J'+0,5)^2((J'+0,5)+1)^2 - 0,5\gamma_v'(J'+0,5) \quad (29)$$

Für das betrachtete System ist der Effekt der Konstanten γ jedoch sehr schwach.

Neben den schon bekannten Hauptzweigen tragen jetzt auch die sonst sehr schwachen Satellitenzweige merklich zur Bandenform mit bei. Hierbei ergibt sich das Phänomen, dass z.B. der Q_{12} Zweig formell eigentlich der Bedingung $\Delta J=0$ gehorcht, sich durch die Aufspaltung des oberen und unteren Niveaus effektiv allerdings wie ein P Zweig verhält. Zu den Hauptzweigen kommen also noch die Zweige $^P Q_{12}$, $^R Q_{21}$, $^Q R_{12}$, $^S R_{21}$, $^Q P_{21}$ und $^O P_{12}$ hinzu. Abbildung 2.16 zeigt die Fortratparabeln und die Linienintensitäten für den 0-0 Übergang von $\text{NO}\gamma$.

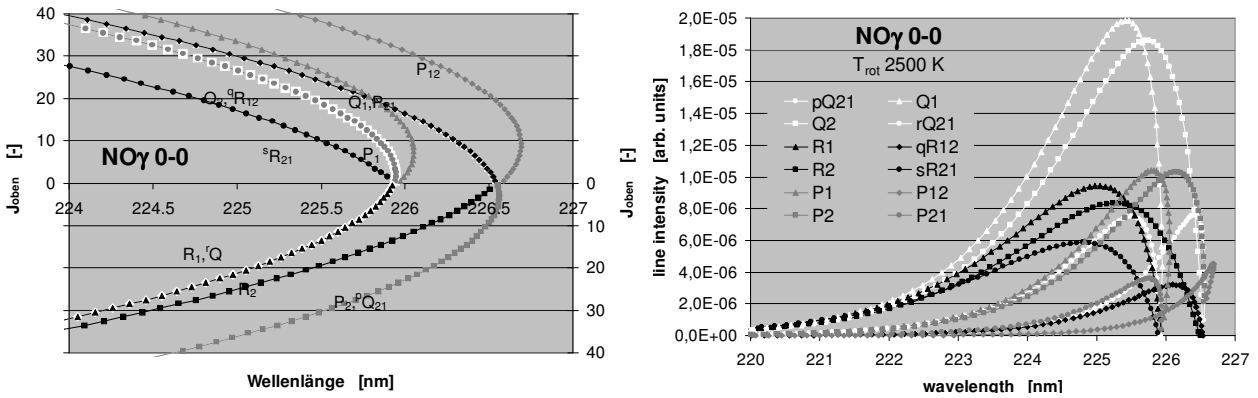


Abbildung 2.16: Fortrat Parabeln und Linienintensitäten des $\text{NO}\gamma$ Systems für den Vibrationsübergang 0-0.

Bestimmung von Abbruchkriterien für Rotations- und Vibrationsquantenzahlen

Die Bestimmung von Abbruchkriterien für die zu behandelnden Rotations- und Vibrationsübergänge kann nur gekoppelt erfolgen und ergibt sich nicht direkt aus den Gleichungen (14) bis (17) für die Rotations- und Vibrationsenergie. Zwar kann bei der Auswertung eine Begrenzung für die Vibrationsquantenzahlen definiert werden, wenn für weiter steigende Quantenzahlen die Änderung der Vibrationsenergie negativ wird, tatsächlich aber werden die letzten möglichen Zustände schon früher erreicht werden. Zur Formulierung von zutreffenderen Abbruchbedingungen ist die spezifischere Betrachtung der Molekülpotentiale notwendig.

Die genaue Berechnung der Potentialkurven ist möglich, jedoch verhältnismäßig aufwändig [19]. Stattdessen wurden verschiedene Näherungsformeln untersucht. Eine gebräuchliche Näherung für eine erste Betrachtung ist hierbei das Morse-Potential, das eine geschlossene Lösung darstellt, wenn die in Kapitel 2.1.4 vorgestellte Reihenentwicklung zur Berechnung der Rotations- und Vibrationsenergie in Gleichung (14) nach dem ersten Glied abgebrochen wird. Damit ergibt sich das Molekülpotential zu:

$$U(x) = D_e \left(1 - e^{-\beta x}\right)^2 \quad (30)$$

mit
$$\beta = 1,2177 \cdot 10^{-7} \omega_e \sqrt{\frac{\mu_A}{D_e}} .$$

Die Koordinate $x = r - r_e$ ist hierbei durch die Differenz des Abstands der Atome r und dem Gleichgewichtsabstand ohne Vibrations- und Rotationseinfluss r_e gegeben. Die Konstanten ω_e und D_e wurden schon bei der Berechnung der Vibrations- und Rotationsenergie eingeführt, μ_A ist die reduzierte Masse des Moleküls in Atommassen.

Dieses Potential gibt den Bereich um das Potentialminimum sowie die Asymptote zur Dissoziationsenergie verhältnismäßig gut wieder, weist jedoch im Übergangsbereich relativ hohe Unsicherheiten auf. Bedauerlicherweise bildet sich jedoch in diesem Bereich das lokale Maximum des Potentials aus, das zur oben beschriebenen Berechnung der Abbruchbedingungen benötigt wird. Eine etwas aufwändigere Beschreibung ist durch das Hulbert-Hirschfelder Potential durch eine Modifikation des Morse Potentials gegeben [52, 82]:

$$U(x) = D_e \left[\left(1 - e^{-\beta x}\right)^2 + c \beta^3 x^3 e^{-2\beta x} (1 + b \beta x) \right] \quad (31)$$

mit
$$c = 1 - \frac{1}{\beta r_e} \left(1 + \frac{\alpha_e r_e}{6 B_e^2} \right)$$

und
$$b = 2 + \frac{1}{c} \left[\frac{7}{12} - \frac{1}{\beta^2 r_e^2} \left(\frac{5}{4} + \frac{5 \alpha_e \omega_e}{12 B_e^2} + \frac{5 \alpha_e^2 \omega_e^2}{144 B_e^4} - \frac{2 \omega_e x_e}{3 B_e} \right) \right] .$$

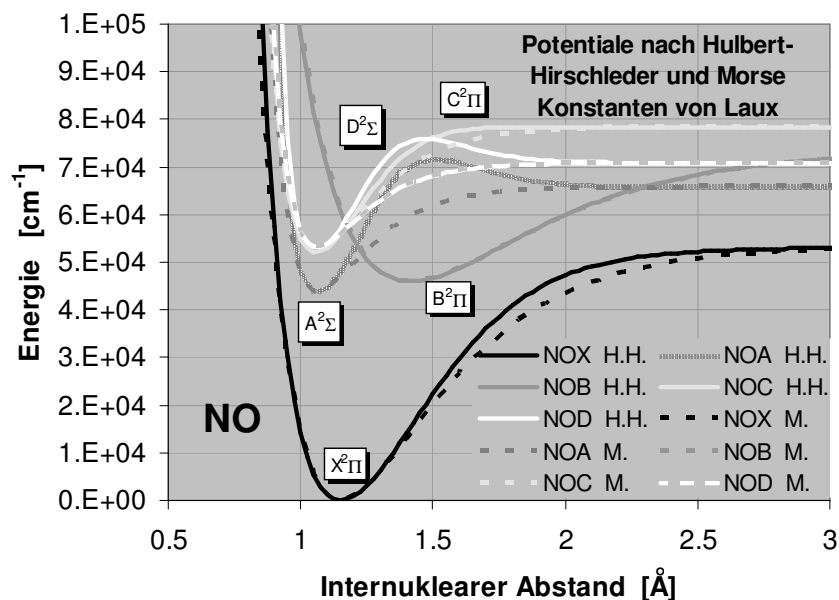


Abbildung 2.17: Molekülpotentiale der verschiedenen elektronisch angeregten Niveaus von NO, berechnet mit den Potentialnäherungen nach Morse und Hulbert-Hirschfelder.

Zusätzlich zu den im Morse Potential verwendeten Konstanten gehen in diese Form auch noch α_e , $w_e x_e$ und B_e ein. In den Voruntersuchungen wurden zu Vergleichszwecken Rechnungen mit beiden Näherungen durchgeführt. Abbildung 2.17 zeigt einen Vergleich der berechneten Potentiale für die elektronischen Anregungszustände von NO. Beide Näherungen zeigen im NO-B Zustand so gut

wie keine und im Grundzustand (NO-X) nur leichte Abweichungen voneinander. Für die anderen Anregungszustände sind jedoch deutliche Abweichungen erkennbar.

Wird zusätzlich noch der Rotationseinfluss berücksichtigt, zeigt sich eine Änderung der qualitativen Form des Molekülpotentials, da die Rotation eine Änderung des Atomabstandes bedingt [52, 82]. Dabei bildet sich mit steigender Rotationsquantenzahl zu höheren Atomabständen hin ein lokales Maximum des ohne Rotation monoton steigenden Potentialastes aus, das über der Dissoziationsenergie liegt. Hierdurch wird ein Potentialtopf geformt, der für rotatorisch angeregte Zustände deutlich höhere Energien als die Dissoziationsenergie erlaubt. Mit weiter steigender Rotationsquantenzahl verschwindet dieses lokale Maximum schließlich und verwandelt sich in einen Sattelpunkt. Jetzt weist das gesamte Molekülpotential mit steigendem Atomabstand einen monoton fallenden Verlauf auf und stabile Molekülzustände sind nicht mehr möglich.

Zur Berücksichtigung dieser Effekte wurden die modifizierten Potentialkurven der betrachteten elektronischen Niveaus für die verschiedenen Rotationsquantenzahlen nach [82] berechnet. Die Modifikation des Potentials ergibt sich aus:

$$U(x)_{v,J} = \frac{J(J+1)h^2}{8\pi^2\mu_A r^2} + U(x) \quad (32)$$

Wenn die Summe der zur jeweiligen Vibrationsquantenzahl gehörigen Energie und der von der Rotationsquantenzahl abhängigen Minimalenergie des Potentials größer wird als das lokale Maximum ist die gesuchte Kombination aus Vibrations- und Rotationsquantenzahl für den Grenzzustand für ein stabiles Molekül erreicht. Abbildung 2.18 zeigt die Modifikation der Potentialkurve mit steigender Rotationsquantenzahl exemplarisch für den Grundzustand von NO für die Rechnung nach Hulbert-Hirschfelder.

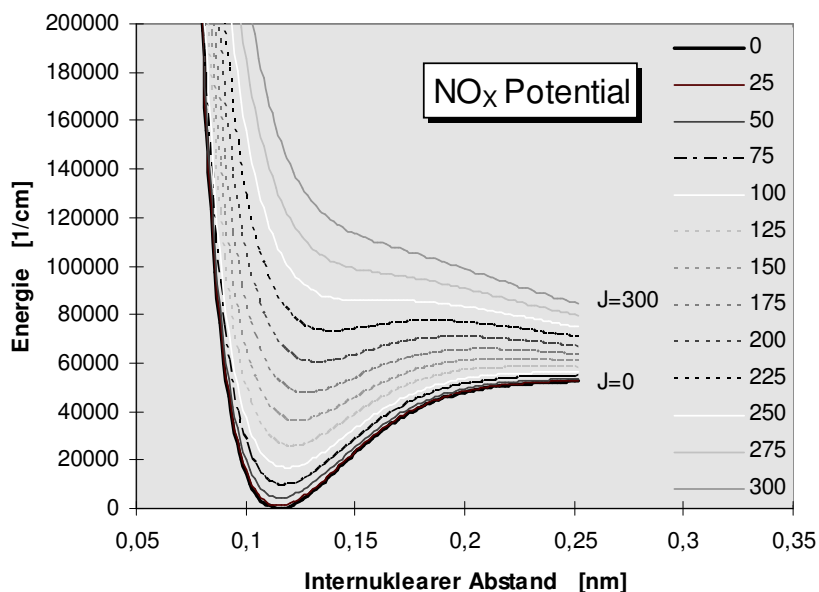


Abbildung 2.18: Evolution der Potentialkurve mit steigender Rotationsquantenzahl J für den elektronischen Grundzustand von NO.

Das Morse Potential weist im Allgemeinen das oben diskutierte lokale Maximum nur schwach auf und hat niedrigere Grenzquantenzahlen zur Folge. Auf der anderen Seite zeigt das Hulbert-

Hirschfelder Potential für NO A und D schon ohne Rotationseinfluss ein lokales Maximum, das nicht vorhanden sein sollte, überschätzt also wahrscheinlich die maximale Rotationsquantenzahl. Eine Rechnung mit Konstanten von Park [82] zeigt ähnliche Resultate wie die mit den Konstanten von Laux [70]. Die resultierenden Abbruchquantenzahlen für die verschiedenen elektronischen Zustände von NO sind in Abbildung 2.19 dargestellt.

Schlussendlich wurden Abbruchbedingungen verwendet, die mit dem Potential nach Hulbert-Hirschfelder und den Konstanten von Laux [70] generiert wurden. Die vollständigen Ergebnisse für alle betrachteten Moleküle sind im Anhang D aufgelistet.

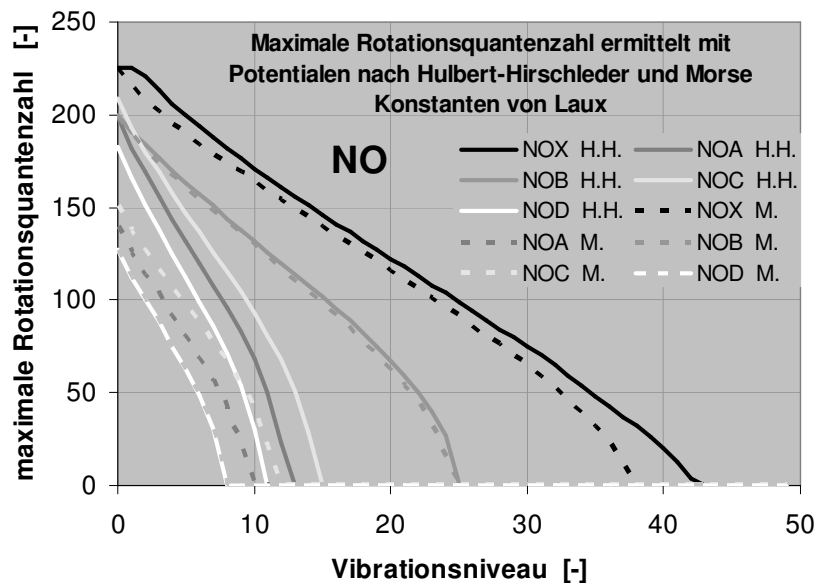


Abbildung 2.19: Maximal mögliche Rotation- und Vibrationsquantenzahlen für die verschiedenen elektronisch angeregten Niveaus von NO, berechnet mit den Potentialnäherungen nach Morse und Hulbert-Hirschfelder.

2.2.3 ASPEN

Das Programmpaket ASPEN (*Automatische Spektrenauswertung*) wird dazu verwendet, gemessene Emissionsspektren mit simulierten Datenbankspektren zu vergleichen und das am besten übereinstimmende Spektrum auszuwählen. Aus diesem Vergleich resultieren dann bei hinreichend guter Übereinstimmung Rotations- und Vibrationstemperaturen sowie die Besetzungsdichten der beteiligten elektronischen Anregungszustände. Zur Vorbereitung des Vergleichs müssen die von EMCAL separat erzeugten Spektren der unterschiedlichen elektronischen Übergänge und Moleküle über die Wellenlängenintervalle des gemessenen Spektrums integriert werden, um einen optimalen Vergleich zu gewährleisten. Danach werden die simulierten Spektren durch einen Vergleich mit dem gemessenen Spektrum getrennt skaliert, um die simulierten Spektren an die tatsächlich vorhandene Besetzungsdichte des gemessenen Plasmas anzupassen, und dann überlagert. Die entkoppelte Vorgehensweise unter Verwendung getrennter Einzelspektren für die verschiedenen Moleküle und elektronischen Übergänge wurde gewählt, um einerseits keine Teilchendichten der einzelnen Spezies aus Eingangsgrößen zu benötigen, sondern diese als Ergebnis der Rechnungen zu erhalten und andererseits der Nichtgleichgewichtssituation Rechnung zu tragen und beliebige Temperaturkombinationen zuzulassen.

In ersten Untersuchungen wurde nur die Emission von N_2^+ ($B \rightarrow X$) und N_2 ($C \rightarrow B$) berücksichtigt [116, 113]. Die Skalierung konnte daher durch einen Vergleich in zwei Wellenlängenintervallen erfolgen, in denen für die über das gewählte Wellenlängenintervall integrierten Intensitäten gilt:

$$I_{mess,\Delta\lambda_1} = F_{N_2} I_{N_2,\Delta\lambda_1} + F_{N_2^+} I_{N_2^+,\Delta\lambda_1} \quad (33)$$

$$I_{mess,\Delta\lambda_2} = F_{N_2} I_{N_2,\Delta\lambda_2} + F_{N_2^+} I_{N_2^+,\Delta\lambda_2} \quad (34)$$

$I_{mess,\Delta\lambda_{1/2}}$ gemessene Intensität, integriert über die Wellenlänge in den Intervallen $\Delta\lambda_{1,2}$
 $I_{N_2,\Delta\lambda_{1/2}}, I_{N_2^+,\Delta\lambda_{1/2}}$ simulierte Intensitäten, integriert über die Wellenlänge in den Intervallen $\Delta\lambda_{1,2}$
 $F_{N_2}, F_{N_2^+}$ Skalierungsfaktoren,

Die Skalierungsfaktoren ergaben sich dann zu:

$$F_{N_2^+} = \frac{(I_{mess,\Delta\lambda_1} - F_{N_2} I_{N_2,\Delta\lambda_1})}{I_{N_2^+,\Delta\lambda_1}} \quad F_{N_2} = \frac{(I_{mess,\Delta\lambda_2} - I_{mess,\Delta\lambda_1} I_{N_2^+,\Delta\lambda_2} / I_{N_2^+,\Delta\lambda_1})}{(I_{N_2,\Delta\lambda_2} - I_{N_2,\Delta\lambda_1} I_{N_2^+,\Delta\lambda_2} / I_{N_2^+,\Delta\lambda_1})} \quad (35)$$

Mit der Implementierung von den zusätzlichen strahlenden Systemen von NO und O₂ ergibt sich ein komplizierteres Gleichungssystem mit bis zu 8 Unbekannten [123]. Um die Anzahl der variablen Größen zu reduzieren, wurden im Bereich der NO-Strahlung die Skalierungsfaktoren für N_2^+ und N_2 aus der Messung des höheren Wellenlängenbereichs übernommen. Für das verbleibende lineare Gleichungssystem mit 5 Variablen führte die Verwendung der analytischen Lösung jedoch zu Inkonsistenzen in Form von negativen Skalierungsfaktoren für einzelne Temperatur-Kombinationen. Deshalb wurde für die Skalierung eine numerische Iteration der integrierten Intensitäten in zwei Wellenlängenintervallen gewählt, in der sich eventuell ergebende negative Werte ignoriert werden konnten. Die Iteration konnte beschleunigt und gleichzeitig stabilisiert werden, indem in jedem Intervall zuerst nur drei Spezies variiert und die verbleibenden konstant gehalten wurden, während die beiden anderen in einer zweiten Iterationsschleife variiert wurden. Hierbei wurde die Sauerstoffintensität in beiden Intervallen mit iteriert, während jeweils zwei NO-Systeme variiert wurden, während die anderen beiden konstant gehalten wurden [123].

Im Laufe der Untersuchungen der NO-Emission wurden gemeinsame Rotationstemperaturen für die Emissionen von O₂ und NO δ sowie gleiche Vibrationstemperaturen für O₂, NO δ und NO ϵ eingeführt, um die Anzahl der möglichen Kombinationen und damit auch die Rechenzeit in überschaubaren Grenzen zu halten und eine Eindeutigkeit der Ergebnisse bei der Überlagerung der Einzelspektren zu gewährleisten. In den Grenzschichtuntersuchungen wurden wegen der großen Anzahl von auszuwertenden Spektren auch für N_2 und N_2^+ gemeinsame Temperaturen verwendet. In den Freistrahluuntersuchungen wurden jedoch eigene Vibrationstemperaturen für N_2 und N_2^+ zugelassen.

Es wurden verschiedene Verfahren zum Vergleich der simulierten und gemessenen Spektren untersucht. Obwohl zuerst der Vergleich über eine Fourier-Transformation favorisiert wurde [37, 62], konnten in den letzten Versionen die besten Ergebnisse durch eine gewichtete Analyse der Differenzen zwischen Simulation und Experiment erzielt werden. Hierbei kann durch spektral unter-

schiedliche Gewichtungsfaktoren ein größerer Einfluss der Übereinstimmung in vordefinierten spektralen Regionen (z.B. im Bereich der Bandenköpfe) erzielt werden. In Testrechnungen hat sich gezeigt, dass eine Verwendung der absoluten Differenzen eine bessere Rekonstruktion des Gesamtspektrums ermöglicht, da normierte Differenzen zu viel Gewicht auf Bereiche niedriger spektraler Intensität legen, die wiederum typischerweise die höchsten Messfehler aufweisen. Eine Minimierung der Quadrate der Abweichungen zeigte bei den Rechnungen mit zwei strahlenden Systemen gute Ergebnisse, führte aber bei den Rechnungen im Bereich der NO-Strahlung zu einer Verschlechterung der Gesamtsensitivität und teilweise auch zu mehrdeutigen Ergebnissen. Zu Vergleichszwecken wurden in den abschließenden Rechnungen sowohl die Ergebnisse der Minimierung der Summe der Differenzen als auch die Ergebnisse der Fourier-Transformationen parallel berechnet und zeigten eine gute Übereinstimmung. Die Vorgehensweise innerhalb ASPEN ist in Abbildung 2.20 durch Blockdiagramme für die verschiedenen Spektralbereiche näher erläutert.

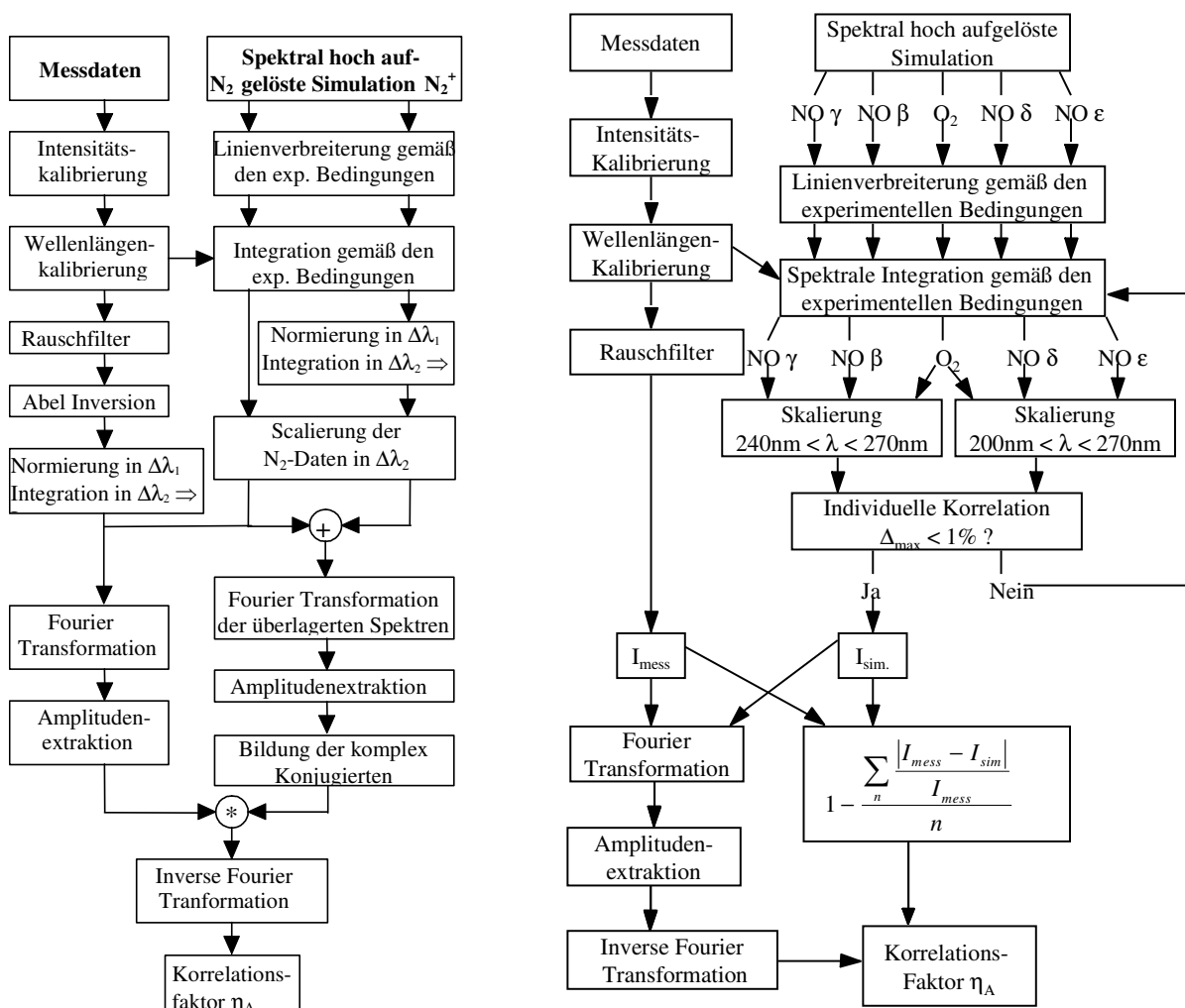


Abbildung 2.20: Blockstruktur des Programmpaketes ASPEN zum Vergleich von gemessenen und simulierten Emissionsspektren und gleichzeitiger Rotations- und Vibrationstemperaturbestimmung für N₂⁺/N₂ Spektren mit Korrelation durch Fourier-Transformation (links) und für NO/O₂ Spektren mit zusätzlicher Minimierung gewichteter Differenzen (rechts)

Bei der Berechnung der Datenbanken wurden Temperaturbereiche von 1 000 K bis 15 000 K für die Rotationstemperatur und von 1 000 K bis 20 000 K für die Vibrationstemperatur gewählt, die in

Temperaturintervalle von 200 K aufgeteilt wurden. Dadurch ergeben sich 6650 Einzelspektren pro berücksichtigtem strahlenden System. Weiterhin wurden für die Grenzschichtberechnungen gemeinsame Temperaturen für N_2 und N_2^+ verwendet. Diese Restriktion wurde für die Freistrahlunduntersuchungen aufgegeben. Im Wellenlängenbereich unterhalb von 300 nm wurden für die Auswertung der gemessenen Spektren gemeinsame Rotationstemperaturen für die Emissionen von O_2 und $NO\delta$ sowie gleiche Vibrationstemperaturen für O_2 , $NO\delta$ und $NO\epsilon$ eingeführt, um die Anzahl der nötigen Rechnungen zu reduzieren. Zur Auswertung jedes gemessenen Spektrums mussten trotzdem bis zu 100 Millionen Spektrenvergleiche durchgeführt werden. Für die Abel-invertierten Spektren wurden schließlich die aus der N_2^+/N_2 Strahlung bestimmte Rotationstemperatur und 5 verschiedenen Vibrationstemperaturen verwendet. Trotzdem konnten die Berechnungen aus Zeitgründen nur mit einer Temperaturschrittweite von 1000 K für die Vibrationstemperaturen durchgeführt werden.

2.3 Auswertung von Dopplerverbreiterungen

Aufgrund der hohen Strömungsgeschwindigkeiten in den Plasmawindkanälen von einigen Kilometern pro Sekunde kann die Plasmageschwindigkeit aus der Doppler-Verschiebung einer Spektrallinie ermittelt werden. Die hohen Temperaturen von 5000 K und mehr lassen eine Bestimmung der Translationstemperatur aus der Doppler-Verbreiterung einer Spektrallinie zu. In den vorliegenden Untersuchungen wurde ein Fabry-Perot Interferometer als hochauflösendes Spektrometer betrieben, um die Effekte der Doppler-Verschiebung auf die detektierten Emissionslinien zu untersuchen. Wenn eine Lichtwelle von einem Objekt ausgestrahlt wird, das eine Relativgeschwindigkeit $v \cos(\alpha)$ zum Betrachter aufweist, so wird die detektierte Wellenlänge eine Verschiebung zur ausgestrahlten Wellenlänge aufweisen. Die Doppler-verschobene Wellenlänge λ berechnet sich zu:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v}{c} \cos \alpha} \quad (36)$$

Für nichtrelativistische Geschwindigkeitsbereiche kann der Term v^2/c^2 vernachlässigt werden. Wird weiterhin die Funktion $\left(1 + \frac{v}{c} \cos \alpha\right)^{-1}$ in eine binomische Reihe mit negativen Exponenten entwickelt [16], ist eine Vernachlässigung der Terme zweiter Ordnung möglich und Gleichung (36) reduziert sich zu:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{v}{c} \cos \alpha \quad (37)$$

Die Wellenlängenverschiebung der von einem einzelnen Teilchen ausgesandten Strahlung ergibt sich als Summe der auf die Betrachtungsachse projizierten Geschwindigkeitsanteile seiner ungerichteten, thermischen Geschwindigkeit v_{th} und der gerichteten Geschwindigkeit der Plasmaströmung v_{pl} . Für die folgenden Betrachtungen werden die axialen und radialen Komponenten der Plasmageschwindigkeit $v_{pl,ax}$ und $v_{pl,rad}$ mit den Winkeln α und β zwischen Beobachtungsrichtung und der Plasmalängsachse bzw. der Plasmahochachse eingeführt.

$$\Delta\lambda_D = \lambda - \lambda_0 = \lambda_0 \frac{(v_{th,proj} + v_{pl,ax} \cos \alpha + v_{pl,rad} \cos \beta)}{c} \quad (38)$$

Die detektierte Strahlung setzt sich immer aus der Summe aller strahlenden Teilchen auf der optischen Achse zusammen, deren thermische Geschwindigkeiten im Allgemeinen durch eine Maxwell-Verteilung beschrieben werden:

$$\frac{dn}{n} = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT_{tr}}} \exp\left(-\frac{mv_{th}^2}{2kT_{tr}}\right) dv \quad (39)$$

In der Folge hat die Summe der Wellenlängenverschiebungen aller strahlenden Teilchen eine Verbreiterung der Emissionslinie, die gerichtete Plasmageschwindigkeit eine Verschiebung der verbreiterten Linie zur Folge. Aus der Verbreiterung lässt sich direkt die Translationstemperatur T_{tr} ableiten, aus der Verschiebung die Plasmageschwindigkeit. Zur Ermittlung der Wellenlängenverschiebung des verbreiterten Profils muss eine unverschobene Referenzlinie gemessen werden, die z.B. durch eine Laserlinie oder die Linie einer Kalibrierlampe gegeben sein kann. Einfacher ist es jedoch, eine unverschobene Emissionslinie des Plasmas als Referenz zu benutzen. Dies ist möglich, da die Verschiebung aufgrund der gerichteten Geschwindigkeit von der Betrachtungsrichtung abhängt. Eine Betrachtungsrichtung senkrecht zur Strahlachse wird keine solche Verschiebung aufweisen und kann somit als Referenzlinie gegenüber der Messung unter einem Winkel α zur Strahlachse verwendet werden. Die Verbreiterung infolge der thermischen Geschwindigkeit $\Delta\lambda_T$ ist gegeben durch:

$$\Delta\lambda_T = 2\lambda_0 \sqrt{\frac{2kT_{tr} \ln 2}{mc^2}} \quad (40)$$

Die gemessene Verbreiterung enthält jedoch zusätzlich die immer vorhandene Apparateverbreiterung $\Delta\lambda_A$ durch die verwendeten optischen Elemente und eine Verbreiterung $\Delta\lambda_{rad}$ durch eine radiale Geschwindigkeitskomponente des Plasmastrahls. Diese Radialgeschwindigkeit bedingt entgegengesetzt gerichtete Wellenlängenverschiebungen der Strahlhälften vor und hinter der optischen Achse, geht dabei mit ihrem auf die Betrachtungsachse projizierten Anteil in die Verschiebung mit ein und verursacht in der Folge keine dezidierte Verschiebung sondern eine zusätzliche Verbreiterung. Abbildung 2.21 verdeutlicht die geometrischen Verhältnisse in einem Plasmaquerschnitt anhand von zwei Beobachtungsachsen.

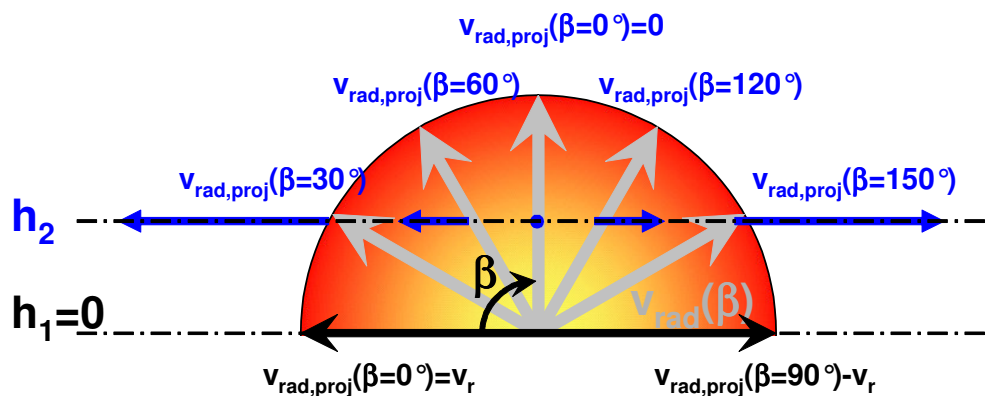


Abbildung 2.21: Verdeutlichung der Verbreiterung durch eine Radialgeschwindigkeit in einem Plasma-Halbquerschnitt.

Bedingt durch die Rotationssymmetrie des Plasmastrahls reicht die Betrachtung eines Halbprofils aus. Wird eine über den Plasmaquerschnitt im Betrag konstante Radialgeschwindigkeit angenommen, so lässt sich für jeden Punkt im Querschnitt eine charakteristische Radialgeschwindigkeit angeben, deren Richtung vom Winkel β abhängt. In Abbildung 2.21 sind exemplarisch zwei Beobachtungsachsen eingezeichnet, eine auf der Plasmastrahlachse und eine in einem Abstand h_2 zu dieser Achse. Die Dopplerverschiebung auf der Mittelachse ergibt sich für radiale Positionen zwischen dem Beobachter und der Strahlmitte aufgrund der Geschwindigkeit v_{rad} auf den Betrachter zu und verschiebt die Emissionslinien zu niedrigeren Wellenlängen. An Positionen hinter der Plasmamitte wirkt $-v_{rad}$ und bewirkt eine Verschiebung zu höheren Wellenlängen. Die gleiche Betrachtung auf der Beobachtungsachse im Abstand h_2 führt zu Beiträgen durch projizierte Geschwindigkeitskomponenten unter Winkeln β zwischen 30° und 150° . Für eine Berechnung der Verschiebungen müssen die Einflüsse der wirksamen Geschwindigkeiten entlang der Sichtlinie ermittelt und integriert werden. Hierbei bietet sich an, ein durch Temperatur- und Apparateinflüsse schon verbreitertes Profil gemäß den jeweiligen projizierten Radialgeschwindigkeiten zu verschieben und über die Sichtlinie aufzuintegrieren. In der Realität wird diese Vorgehensweise jedoch dadurch kompliziert, dass optische Versuchsaufbauten immer Strahlung aus einem endlichen Raumwinkel aufnehmen. An jedem Punkt der Sichtlinie ergibt sich also kein strahlender Punkt, sondern eine endliche strahlende Fläche, über die hinweg dann auch verschiedene projizierte Radialgeschwindigkeiten berücksichtigt werden müssen. Für kleine Raumwinkel und Sichtlinien in der Nähe der Plasmastrahlachse ergeben sich aus dieser Betrachtung allerdings nur dann Auswirkungen, die in Form einer Verbreiterung berücksichtigt werden können, wenn die Verschiebung durch die Radialgeschwindigkeit klein gegenüber den anderen Verbreiterungsmechanismen ist. Andernfalls erfolgt eine Aufspaltung der Emissionslinie mit zwei lokalen Maxima. Eine analytische Formulierung wurde in [65] begonnen, zeigte jedoch, dass ein sehr hoher numerischer Aufwand nötig wäre, um diese Berechnungen für den gesamten Querschnitt durchzuführen. Es wurde daher auf eine analytische Berücksichtigung dieser Prozesse verzichtet, zumal die Implementierung eines vorerst unbekanntes radialen Profils der Radialgeschwindigkeit aller Voraussicht nach zu mehrdeutigen Ergebnissen führt. Auch wenn die oben aufgeführte Betrachtung keinen Eingang in die Auswertung der Fabry-Perot-Untersuchungen fand, wird sie in der Interpretation der emissionsspektroskopischen Untersuchung der hochfrequenten Oszillationen noch einmal aufgegriffen werden.

Da die bei den betreffenden Plasmazuständen beobachteten Radialgeschwindigkeiten nur relativ gering sind [65], wurde trotzdem die in [45] verwendete Methode zur Berücksichtigung der Radialgeschwindigkeit über eine zusätzliche Halbwertsbreite verwendet. Wenn alle Verbreiterungen als Gauß Profile⁴ angenommen werden, ergibt sich die gemessene Verbreiterung zu:

⁴ Streng genommen ergibt sich bei Verwendung eines Gauss-Profiles für die Verbreiterung durch eine Radialgeschwindigkeit eine Unterschätzung der Halbwertsbreite, also eine Überschätzung der zugrunde liegenden Radialgeschwindigkeit. Eine Berücksichtigung durch ein Voigt-Profil würde jedoch eine ungleich kompliziertere mathematische Berücksichtigung erfordern. Durch die kleinen Beträge der beobachteten Radialgeschwindigkeiten [65] scheint diese Vereinfachung gerechtfertigt.

$$\Delta\lambda_{90} = \sqrt{\Delta\lambda_r^2 + \Delta\lambda_A^2 + \Delta\lambda_r^2} \quad (41)$$

Werden Messungen unter verschiedenen Winkeln aufgenommen (im Falle der beschriebenen Untersuchungen unter 90° und 45°, vgl. Kapitel 3.3), so können Radial- und Temperaturverbreiterung nach [45] unabhängig von der Verteilung der Radialgeschwindigkeit aus der Differenz der Messungen extrahiert werden.

$$\Delta\lambda_r = \sqrt{\frac{\Delta\lambda_{90}^2 - \Delta\lambda_\alpha^2}{1 - \sin\alpha}} \quad \Delta\lambda_r = \sqrt{\Delta\lambda_{90}^2 - \Delta\lambda_A^2 - \Delta\lambda_r^2} \quad (42)$$

Eine möglichst genaue Bestimmung der Apparateverbreiterung $\Delta\lambda_A$ ist von besonderer Bedeutung für die Auswertung der Messungen, da die Apparateverbreiterung in der gleichen Größenordnung wie die Temperaturverbreiterung ist. Obwohl eine theoretische Bestimmung der Apparateverbreiterung aus den verwendeten optischen Bauteilen möglich ist [45], führen doch schon leichte Ungenauigkeiten in der Bestimmung der benutzten Größen (vor allem der Reflektivität der Spiegelplatten) zu verhältnismäßig großen Unsicherheiten. Deshalb schien es sinnvoll, diesen Einfluss experimentell aus der Verbreiterung der Emission eines Justierlasers zu bestimmen, dessen eigene Linienbreite als vernachlässigbar betrachtet wird. Aufgrund der quadratischen Kombination von Gaußverbreiterungen ergibt sich ein Fehler von 1%, wenn die Laserbreite 10% der Apparateverbreiterung beträgt. Nach Angaben des Herstellers kann die Laserbreite mit etwa 1 GHz oder 1,3 pm bei einer Laserwellenlänge von 633 nm angenommen werden. Neuere Untersuchungen mit gesteigerter Auflösung [86] zeigen, dass bei dem verwendeten Laser ein verhältnismäßig langsamer Modensprung von etwa 1 GHz auftritt, die eigentliche Breite des Lasers jedoch deutlich darunter liegt und mit 0,5 pm nach oben abgeschätzt werden kann. Bei gemessenen Verbreiterungen von etwa 10 pm und mehr [65] ist diese Voraussetzung erfüllt und der Einfluss der Laserbreite auf die Messung kann vernachlässigt werden. Bemerkenswert ist, dass bis zum Ende der Auswertung keine weiteren Annahmen als die sehr grundlegende Gültigkeit einer Maxwell-Verteilung getroffen werden müssen, sodass die Ergebnisse kaum durch die Nichtgleichgewichtssituation im Plasma beeinflusst werden.

Es werden zwei verschiedenen Interferenzordnungen gemessen, da die Zuordnung der Messwerte zu Wellenlängen aus dem freien Spektralbereich $\Delta\lambda_F$ erfolgen muss, der in Abhängigkeit vom Plattenabstand d und dem Brechungsindex n des Mediums zwischen den Spiegelplatten des FPI den Abstand dieser beiden Ordnungen in nm angibt:

$$\Delta\lambda_F = \frac{\lambda_0^2}{2nd} \quad (43)$$

Abbildung 2.22 verdeutlicht eine typische FPI Messung anhand von Messdaten unter 45° und 90° zur Plasmastrahlachse. Bei der Auswertung der Messungen wurde in vorherigen Arbeiten [45, 32, 33] ein Gauß Profil den Messkurven angeglichen, aus dem die Verbreiterung bestimmt wurde. In den vorliegenden Untersuchungen wurden verschiedene Möglichkeiten zur Auswertung untersucht, wobei sich schlussendlich ein einfaches Abzählverfahren der Messwerte zwischen den halben Maximalwerten der gemessenen Intensität als die komfortabelste Methode herausgestellt hat [65].

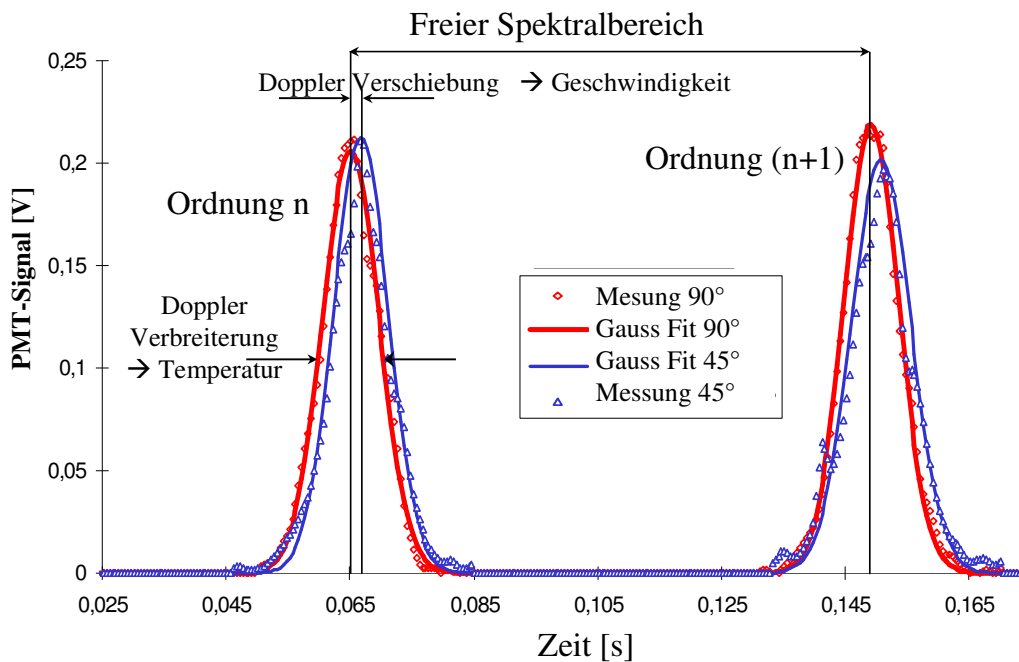


Abbildung 2.22: Typische FPI-Messdaten einer Stickstoff-Atomlinie im Plasmawindkanal unter 45° und 90° .

Bisher wurden nur die Einflüsse von reinen Gauss Profilen durch den Doppler Effekt betrachtet. Werden allerdings Messungen in Plasmen mit ausreichend hoher Elektronendichte ausgewertet, so kann die Stark-Verbreiterung aus Interaktionen mit den Elektronen die Messung beeinträchtigen. Hierbei müssen Spezies-spezifische Verbreiterungskonstanten für die verschiedenen Spektrallinien berücksichtigt werden. In [43] sind berechnete Starkverbreiterungen tabelliert, die sich auf eine Elektronendichte von 10^{22} m^{-3} beziehen und für atomaren Stickstoff und atomaren Sauerstoff über Multiplikation mit dem Verhältnis der tatsächlich auftretenden Elektronendichte zu dieser Referenzdichte skaliert werden müssen. Für die Anwendung auf die gemessenen Verbreiterungen wurden die Tabellenwerte interpoliert, wie in Abb. 2.23 dargestellt.

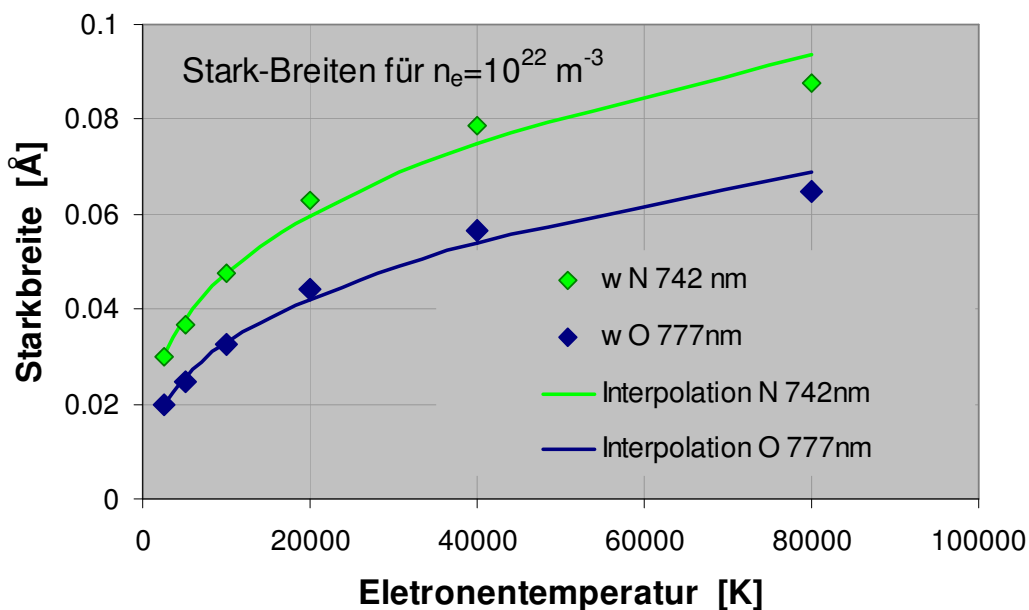


Abbildung 2.23: Starkverbreiterungen nach [43] und verwendete Interpolation.

Die Stark-Verbreiterung gehorcht einem Voigt Profil, das in der Form

$$E_\lambda = E_{\lambda,0} \left(\left(1 - \frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right) e^{-2.772 \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right)^2} + \frac{\frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{\Delta\lambda_{HWB,V}}}{1 + 4 \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right)^2} \right. \\ \left. + 0.016 \left(1 - \frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right) \frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \left[e^{-0.4 \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right)^{2.25}} - \frac{10}{10 + \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_{HWB,V}} \right)^{2.25}} \right] \right) \quad (44)$$

mit der spektralen Intensität E_λ bei einer gegebenen Wellenlänge λ , der Zentrumswellenlänge λ_0 , der Lorentz-Halbwertsbreite $\Delta\lambda_{HWB,L}$ und der Voigtbreite $\Delta\lambda_{HWB,V}$ dargestellt werden kann [108]. Die gemessene Halbwertsbreite muss also als Voigt-Breite aufgefasst werden, die sich aus einer Kombination von Lorentz Breite $\Delta\lambda_{HWB,L}$ und Gauss Breite $\Delta\lambda_{HWB,G}$ ergibt:

$$\Delta\lambda_{HWB,V} = \frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{2} + \sqrt{\Delta\lambda_{HWB,L}^2 + \Delta\lambda_{HWB,G}^2} \quad (45)$$

Aus der Voigt Breite, die der gemessenen Linienbreite entspricht, kann also über

$$\Delta\lambda_{HWB,G} = \sqrt{\left(\Delta\lambda_{HWB,V} - \frac{\Delta\lambda_{HWB,L}}{2} \right)^2 - \Delta\lambda_{HWB,L}^2} \quad (46)$$

die Überlagerung aller auftretenden Gauss-Verbreiterungen bestimmt werden.

2.4 Rekonstruktion von lokalen Intensitäten

Sowohl die Emissionsspektroskopie, wie auch die Fabry-Perot Interferometrie stellen von ihrer Natur her integrierende Messverfahren dar, da die jeweils verwendeten Optiken nicht in der Lage sind, Licht aus Regionen vor oder hinter dem zu untersuchenden Querschnitt hinreichend gut zu unterdrücken. Um lokale Größen ableiten zu können, ist also eine Rekonstruktion der Profile notwendig, die die integrierten Messgrößen erzeugt haben. Unter Annahme von Rotationssymmetrie stellt die Abel-Inversion eine eindeutige Lösung für das Problem der Rekonstruktion zur Verfügung. Leider hat sich im Laufe der Messungen herausgestellt, dass die grundlegende Voraussetzung der Rotationssymmetrie nicht vollständig erfüllt war. Aus diesem Grunde wurde ein Verfahren zur Korrektur der streng genommen nur für rotationssymmetrische Profile gültigen Abel-Inversion entwickelt. Weiterhin ergibt sich aus der Verwendung abbildender Optiken ein sich aufweitender Strahlquerschnitt, der in Querschnitten außerhalb des Fokuspunktes axiale Überlagerungen verursacht, die jedoch durch Einsatz des Thomas Algorithmus [89, 124] ebenfalls einer Korrektur unterzogen werden können. Auf grundlegende Betrachtungen zur Tiefenschärfe wird im

Anhang C eingegangen, um den Einsatz von den im Folgenden beschriebenen Verfahren zu rechtfertigen.

2.4.1 Verfahren der Abel-Inversion für rotationssymmetrische Profile

Wird mit einem Verfahren wie der Emissionsspektroskopie oder der Fabry-Perot-Interferometrie, die beide nicht orts aufgelöst arbeiten, ein strahlendes Volumen detektiert, so erhält man als Messergebnis die Integration der lokalen Intensitäten über die gesamte Sichtlinie hinweg. Im Folgenden soll davon ausgegangen werden, dass wie im vorigen Kapitel untersucht, jeder axiale Querschnitt gleich stark in das Ergebnis eingeht. Somit kann der Strahlengang durch einen räumlich nicht ausgedehnten Einzelstrahl ersetzt werden

Sei $\varepsilon(r)$ der lokale Emissionskoeffizient im Radius r und $I(z)$ die gemessene Intensität im Abstand z zum Mittelpunkt des rotationssymmetrischen Strahlungsfeldes, so können beide durch die Abel-sche Integralgleichung verknüpft werden:

$$\varepsilon(z) = 2 \int_{r=z}^R \frac{r}{\sqrt{r^2 - z^2}} \varepsilon(r) dr \quad \text{oder} \quad \varepsilon(r) = -\frac{1}{\pi} \int_{z=r}^{\infty} \frac{dI/dz}{\sqrt{z^2 - r^2}} dz \quad (47)$$

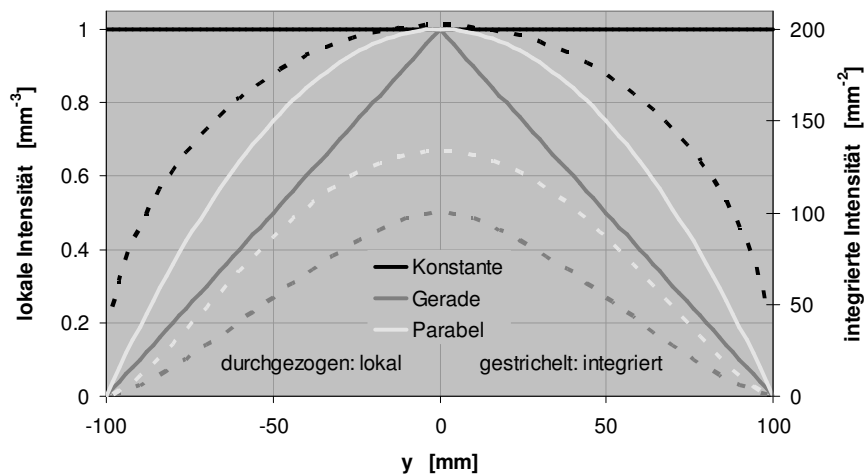


Abbildung 2.24: Beispiele für Abel-Inversionen anhand von Testfunktionen.

Eine analytische Lösung dieser Gleichung ist nur für spezielle Funktionen möglich. Diese Funktionen werden oft auch als Testfunktionen für Entabelungsprogramme verwendet. Die Abel-Inversion einer Ellipse ergibt z.B. einen konstanten Wert, alle reinen Exponential-Funktionen ergeben nach der Entabelung wieder sich selbst. Abbildung 2.24 zeigt einige Beispiele für solche Testfunktionen vor einer Abel-Inversion (also der integrierten Intensität) und danach (entsprechend der lokalen Intensität).

Für beliebige Funktionen gestaltet sich die Abel-Inversion deutlich schwieriger. In einer vereinfachenden Betrachtung kann eine integrierte Einzelmessung jedoch als eine Linearkombination von Einzelwerten dargestellt werden, die wiederum auf Ringen um die Symmetrieachse konstant sind. Führt man jetzt eine Serie von n Einzelmessungen in verschiedenen Abständen zur Strahlmitte durch und nähert die reale Verteilung im Plasma durch eine gleich große Anzahl von Ringen konstanter Intensität an, so erhält man für jede Integration eine Linearkombination aus diesen Ringen konstanter Intensität. Die Kombination aus allen Einzelmessungen liefert ein lineares Gleichungs-

system, dessen Koeffizientenmatrix durch die Geometrie und dessen rechte Seiten durch die integrierte Messungen gegeben sind.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \cdots & a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathcal{E}(r_1) \\ \mathcal{E}(r_2) \\ \vdots \\ \mathcal{E}(r_{n-1}) \\ \mathcal{E}(r_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I(z_1) \\ I(z_2) \\ \vdots \\ I(z_{n-1}) \\ I(z_n) \end{bmatrix} \quad (48)$$

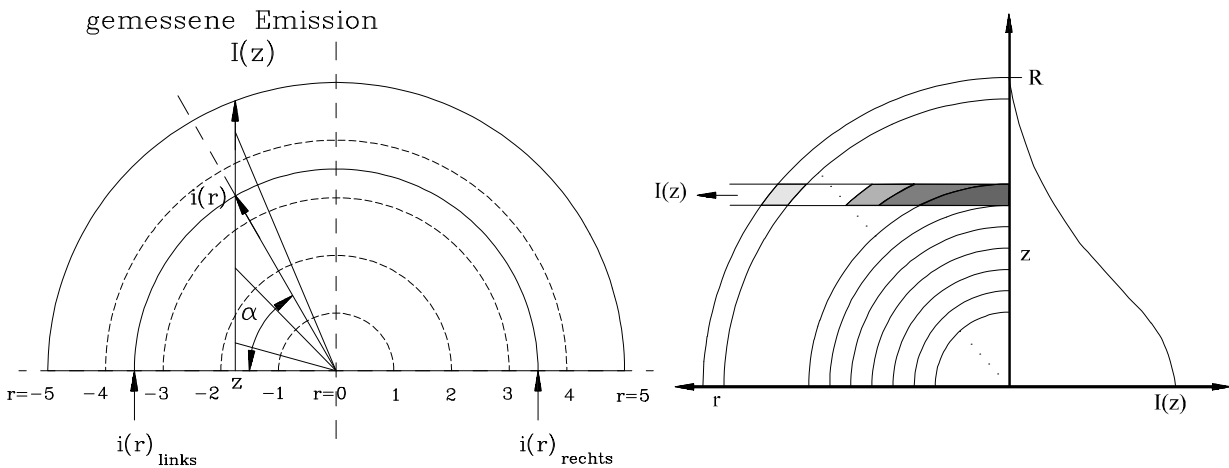


Abbildung 2.25: Prinzipielle Vorgehensweise zur Abel-Inversion.

Die Koeffizienten a_{ij} ergeben sich hierbei als Länge auf der der betrachtete Strahl den jeweiligen Ring konstanter Intensität schneidet. Die in Abbildung 2.24 dargestellten Testfunktionen konnten durch das entwickelte Programmpaket mit mittleren Abweichungen unter 10^{-2} Prozent wiedergegeben werden. Eine weitere Verfeinerung dieses Systems kann durch eine lineare Interpolation zwischen zwei als konstant betrachteten Stützstellen erreicht werden. Zur Bestimmung der Koeffizientenmatrix a wird zuerst eine virtuelle Integration durchgeführt, in der die jeweiligen Lauflängen bestimmt werden. In einem zweiten Programmteil werden schließlich die gemessenen Profile unter Verwendung dieser Matrix durch eine LU-Zerlegung gelöst, wie sie in [89] zu finden ist.

2.4.2 Korrekturen für Abweichungen von der Rotationssymmetrie

Da in den gemessenen Profilen Abweichungen von der Rotationssymmetrie gefunden wurden, erscheint zunächst die weitere Anwendung des Prinzips der Abel-Inversion nicht mehr möglich. Ein möglicher Grund für unsymmetrische Strahlprofile ist eine Schiefstellung der Kathode gegenüber der Anode, die eine unsymmetrische Lichtbogenentladung und somit ein nicht rotationssymmetrisches Strahlprofil bewirkt. Eine solche Schiefstellung ist prinzipiell in jeder Raumrichtung möglich und lässt demzufolge keine Ableitung einer geometrischen Vorschrift zur Korrektur der gemessenen Profile zu. Bei der Versuchsvorbereitung wird allerdings größtmögliche Sorge zur Vermeidung einer Kathodenschiefstellung getragen.

Doch auch unter Annahme eines rotationssymmetrischen Strahlprofils beim Austritt aus dem Plasmagenerator ändert sich zumindest die Geometrie des umgebenden Vakuumtanks im weiteren Verlauf in eine nicht rotationssymmetrische Form. Nach oben und zu den Seiten hin bleibt der kom-

plette Raum bis zur Tankwand hin in einem Abstand von einem Meter zur Plasmastrahlachse frei. Nach unten jedoch wird der freie Raum durch die Kühlbleche zum Schutz der Schrittmotoren und Versorgungsleitungen auf einen Abstand von etwa 30 cm beschränkt. Im Strömungsfeld vor einer Sonde oder Materialprobe wird dieser Unterschied noch durch den Sondenfuß und den Sockel der Probenhalterung verstärkt. Durch den Restdruck im Tank ergibt sich eine Rezirkulationsströmung am Plasmastrahlrand, die durch die geometrischen Unterschiede am unteren und oberen Rand des Plasmastrahls andere Auswirkungen haben kann. Da es sich bei den betrachteten Plasmazuständen um Unterschallströmungen handelt, sind prinzipiell auch Rückwirkungen auf Querschnitte stromaufwärts möglich.

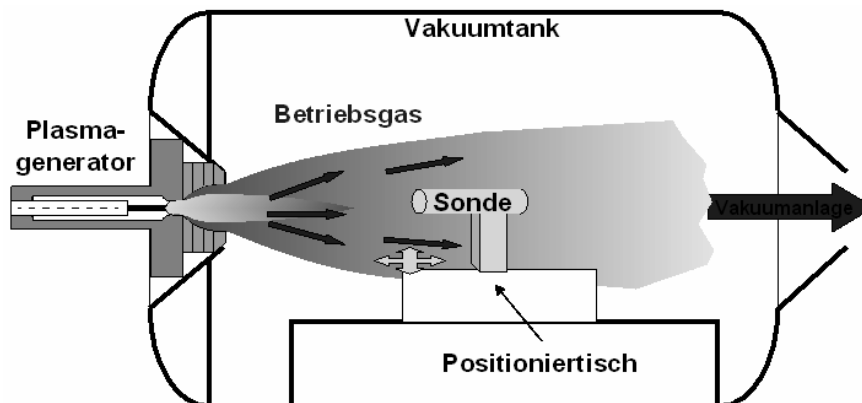


Abbildung 2.26: Geometrieverhältnisse im Plasmawindkanal.

Die oben beschriebenen Einflüsse stehen allerdings im Gegensatz zu einer möglichen Kathodenschiefstellung in definierter Relation zur Detektion der Strahlung durch den optischen Aufbau. Die obere Hälfte des gemessenen Profils sollte unter den oben getroffenen Einflüssen ein rotations-symmetrisches Strahlprofil zur Folge haben. Definiert man einen azimuthalen Winkel für die Einzelprofile, der in Blickrichtung auf die Probenfläche mit 0° das senkrecht nach oben zeigende Halbprofil kennzeichnet, so sollten also alle Halbprofile von -90° bis 90° identisch sein. Das Profil, das durch die oben beschriebenen Gegebenheiten am stärksten von diesen Profilen abweicht, wird dann das Halbprofil unter 180° sein. Alle Halbprofile zwischen 90° bzw. -90° und 180° stellen eine Transformation zwischen diesen beiden Profilen dar. Um die Abweichungen von der Rotations-symmetrie fassen zu können, wurde als Näherung für diese azimuthale Verteilung ein linearer Übergang zwischen den beiden Profilen angenommen. Diese Vorgehensweise ermöglicht zumindest eine Berücksichtigung der beobachteten Effekte und erzeugt kontinuierliche Verläufe, auch wenn nicht davon ausgegangen werden kann, dass die realen Verläufe exakt wiedergegeben werden. Abbildung 2.27 verdeutlicht die Vorgehensweise.

Eine Kontrolle des verwendeten Verfahrens wurde einerseits durch die Entabelung von Testfunktionen mit bekannten Lösungen durchgeführt, die gemäß den oben beschriebenen geometrischen Voraussetzungen zusammengesetzt wurden. Außerdem wurde ein Programm zur Rekonstruktion der ursprünglichen Profile vor der Abelinversion aus den Abel-invertierten Profilen geschrieben, um die Konsistenz des Verfahrens nachzuweisen. Alle Testrechnungen lieferten befriedigende Ergebnisse [121].

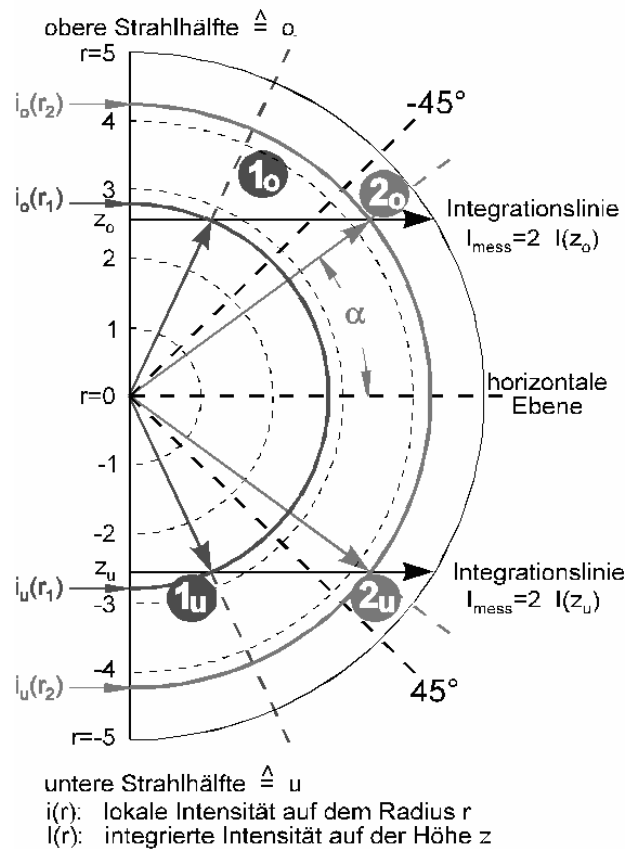


Abbildung 2.27: Vorgehensweise zur Korrektur von Abweichungen von der Rotationssymmetrie bei der Rekonstruktion lokaler Intensitäten.

2.5 Berechnung der Enthalpie

Die Enthalpie gibt die gesamte, im Gas enthaltene Energie an und berücksichtigt auch die in den inneren Freiheitsgraden wie Rotation, Vibration und elektronischer Anregung enthaltenen Energieformen und vor allem auch die in chemischen Reaktionen oder in der Ionisation gespeicherte Energie:

Zur Berechnung der Gesamtenthalpie müssen alle im Gas enthaltenen Spezies berücksichtigt werden. Für thermodynamisches Gleichgewicht lässt sich jeder Temperatur eine Enthalpie zuordnen, zu der für den Zustand im Plasmawindkanal jedoch noch ein Beitrag der Plasmageschwindigkeit addiert werden muss. Für die vorliegende Berechnung wurden die Energiebeiträge der rotatorischen und vibratorischen Anregung, des Drucks, der Plasmageschwindigkeit und der thermischen Energie sowie die in der chemischen Zusammensetzung gefangenen Anteile berücksichtigt, während die Beiträge der elektronischen Anregung vernachlässigt wurden. Die spezifische Gesamtenthalpie berechnet sich also zu

$$\begin{aligned}
 h_{ges} &= h_{statisch} + h_{chemisch} + h_{thermisch} + h_{rot,vib} + h_{kin} + h_{el} \\
 &\quad \downarrow \quad \quad \downarrow \quad \quad \downarrow \quad \quad \downarrow \quad \quad \downarrow \\
 &= \frac{p_{stat}}{\rho_{ges}} + \sum_i^{Spezies} \xi_i h_{i,chem} + T_{trans} \sum_i^{Spezies} \xi_i C_{p,i} + \sum_k^{Moleküle} \xi_i h_{rot,vib,k} + \frac{v_{Pl}^2}{2}
 \end{aligned} \tag{49}$$

mit dem statischen Druck p_{stat} , der Gesamtdichte ρ_{ges} , den Massenanteilen der einzelnen Spezies $\zeta_i = \rho_i / \rho_{ges}$, den chemischen Bildungsenthalpien $h_{i,chem}$, der Translationstemperatur T_{trans} , den spezifischen Wärmen $c_{p,i}$, der Summe der Rotations- und Vibrationsenergien $\varepsilon_{rot,k}$ und $\varepsilon_{vib,k}$ über alle Vibrations- und Rotationszustände v und J der einzelnen Moleküle $h_{rot,vib}$ und der Plasmageschwindigkeit v_{pl} . Die nachfolgende Darstellung folgt den Formulierungen in [36] und [60], da sie für die Handhabung der Enthalpie im Strömungslöser URANUS verwendet werden mit dem Berechnungen der Probenumströmung durchgeführt wurden.

Die Rotations- und Vibrationsenergien für jeden Zustand J bzw. v

$$\varepsilon_r(J) = J(J+1)k\theta_r \text{ und } \varepsilon_v(v) = v k \theta_v \quad (50)$$

mit den charakteristischen Temperaturen θ_r und θ_v , die in Form einer Temperatur die Rotations- und Vibrationskonstanten für den starren Rotator und den harmonischen Oszillator enthalten, müssen über alle relevanten Zustände integriert werden. Zur Berechnung der Zustandssumme

$$Q_{vJ}^{D_0} = \frac{1}{\theta_r} \frac{1}{1 - e^{-\frac{\theta_v}{T_v}}} \left\{ T_r \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_r}} \right) - T_Q e^{-\frac{D_0}{kT_v}} \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_Q}} \right) \right\} \quad (51)$$

wird zur Vereinfachung der Rechnung über

$$\frac{1}{T_Q} = \frac{1}{T_r} - \frac{\delta_D}{T_v} \quad (52)$$

eine Pseudotemperatur T_Q eingeführt. Sie berücksichtigt über die Konstante $\delta_D = 0.8$ näherungsweise die schon in Abbildung 2.18 für den Grundzustand von NO gezeigte Verformung des Molekülpotenzials, die stabile Energiezustände oberhalb der Dissoziationsenergie erlaubt. Die Rotations- und Vibrationsenergie bis zur Dissoziationsenergie D_0 ergibt sich schließlich aus

$$\varepsilon_r^{D_0} = \frac{1}{Q_{vJ}^{D_0}} \frac{R}{\theta_r \left(1 - e^{-\frac{\theta_v}{T_v}} \right)} \left\{ T_r^2 \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_r} + 1 \right) e^{-\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_r}} \right] - T_Q^2 e^{-\frac{D_0}{kT_v}} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_Q} \right) e^{-\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_Q}} \right] \right\} \quad (53)$$

und

$$\varepsilon_v^{D_0} = \frac{1}{Q_{vJ}^{D_0}} \frac{R}{\theta_r \left(1 - e^{-\frac{\theta_v}{T_v}} \right)} \left\{ \frac{T_r \theta_v}{e^{\frac{\theta_v}{T_v}} - 1} \left(1 - \frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_r} \right) - T_Q e^{-\frac{D_0}{kT_v}} \left[\left(1 - \frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_Q} \right) \left(\frac{\theta_v}{e^{\frac{\theta_v}{T_v}} - 1} + \frac{D_0}{k} - \delta_D T_Q \right) + \delta_D \frac{\varepsilon_{r,max}}{k} e^{-\frac{\varepsilon_{r,max}}{kT_r}} \right] \right\} \quad (54)$$

unter Verwendung der spezifischen Gaskonstante R und der maximal möglichen Summe aus Rotations- und Vibrationsenergie $\varepsilon_{r,max}$.

Die in der elektronischen Anregung enthaltene Energie kann für jedes angeregte Niveau k durch das Produkt der Teilchendichte n_k und der Energie E_k abgeschätzt werden. Im thermodynamischen Gleichgewicht sind die elektronisch angeregten Niveaus gemäß einer Boltzmann Verteilung bevöl-

kert, wie sie durch Gleichung 2 gegeben ist. Für jede Temperatur muss dazu zuerst die Zustandssumme

$$U(T_{anr}) = \sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k}{kT_{anr}}\right) \quad (55)$$

berechnet werden. Dafür wurden die elektronischen Entartungen g_k und die Anregungsenergien E_k für die Atome der elektronisch verfügbaren NIST Datenbank [54] entnommen, die entsprechenden Werte für die Moleküle sind in [82] aufgelistet. Der gesuchte Beitrag zur Gesamtenthalpie der Spezies i ergibt sich aus der Summe über alle angeregten Niveaus k :

$$E_{el,i} = \sum_k n_{k,i} E_{k,i} = \frac{n_{0,i}}{U(T_{anr})} \sum_k g_{k,i} \exp\left(-\frac{E_{k,i}}{kT_{anr}}\right) E_{k,i} \quad (56)$$

Für die Berechnung der Beiträge zur Gesamtenthalpie ist es zweckmäßig, eine über alle Zustände summierte elektronische Anregungsenergie zu berechnen, die multipliziert mit der Teilchendichte der Spezies den in der Anregung enthaltenen Energiebetrag angibt:

$$\bar{E}_{el} = \frac{1}{U(T_{anr})} \sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k}{kT_{anr}}\right) E_k \quad (57)$$

Abbildung 2.28 zeigt die mittlere elektronische Anregungsenergie für die Luftspezies O, N, N₂, NO und O₂ sowie für die jeweiligen einfach ionisierten Zustände.

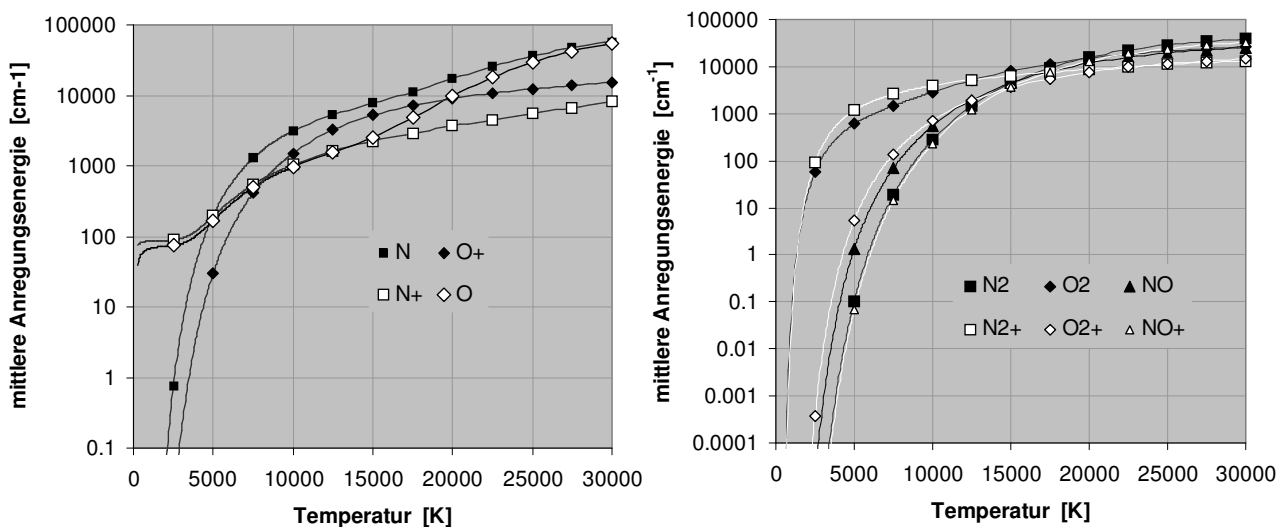


Abbildung 2.28: Gleichgewichtsabschätzung der mittleren Anregungsenergie der Luftatome und -moleküle sowie ihrer einfachen Ionen bis 30 000 K.

Unter Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht lässt sich jeder Temperatur über die chemische Zusammensetzung und die Gleichgewichtsverteilungen der verschiedenen Energieformen eine Enthalpie zuordnen, die bis auf die Plasmageschwindigkeit alle oben beschriebenen Energieanteile enthält. Abbildung 2.29 zeigt die verwendete Gleichgewichtszusammensetzung für den zugrunde liegenden statischen Druck von 490 Pa [35].

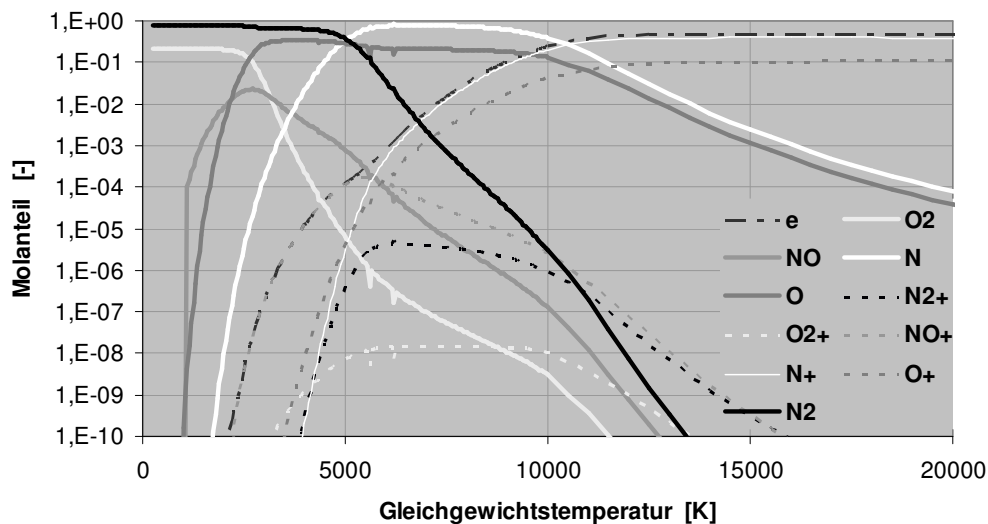


Abbildung 2.29: Gleichgewichtszusammensetzung von Luft für Temperaturen zwischen 250 und 20.000 K [35].

Aus dieser Verteilung wurde in Abhängigkeit von der Temperatur die resultierende Gesamtenthalpie berechnet. Abbildung 2.30 zeigt die spezifische Gesamtenthalpie und die prozentualen Beiträge der einzelnen Energieanteile im Temperaturbereich bis 15 000 K.

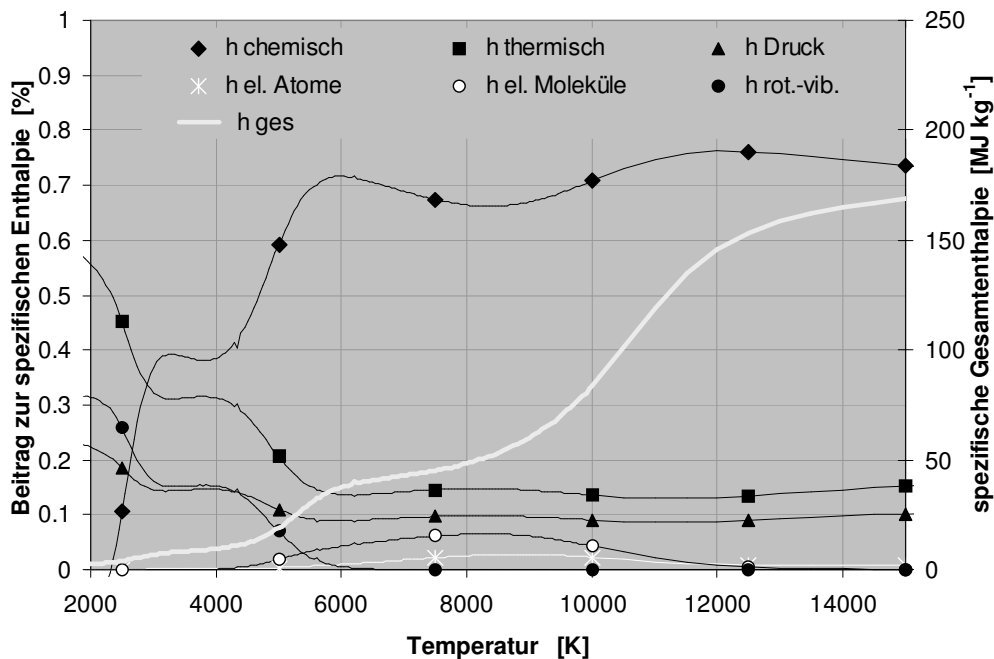


Abbildung 2.30: Berechnete spezifische Gesamtenthalpie⁵ und prozentuale Aufschlüsselung der Beiträge der in den verschiedenen Freiheitsgraden enthaltenen Energie für Luft im thermodynamischen Gleichgewicht zwischen 2 000 K und 15 000 K.

⁵ In der verwendeten Definition der Gesamtenthalpie, die bei $T^0=298,15$ K und $p^0=101300$ Pa ihren Nullpunkt hat [36], wird der chemische Anteil bis zu Werten von etwa 2300 K negativ. Deshalb muss die Summe der positiven Einzelbeiträge zur spezifischen Enthalpie unterhalb dieser Temperatur größer als 1 werden.

Kapitel 3

Beschreibung der experimentellen Aufbauten

Neben einer Beschreibung der Versuchsaufbauten zur Plasmadiagnostik, gegeben durch die verschiedenen emissionsspektroskopischen Messaufbauten, einen Aufbau zur Fabry-Perot Interferometrie sowie des Messstandes mit elektrostatischen Sonden, zählen auch die Anlagen zur Plasmaerzeugung zu den benutzten experimentellen Aufbauten. Am Institut für Raumfahrtssysteme wurden unterschiedliche Plasmawindkanäle entwickelt, die zur Simulation des Wiedereintritts in verschiedenen Stadien des Rückkehrfluges eingesetzt werden [50]. Obwohl im Laufe der Zeit Untersuchungen an allen diesen Anlagen durchgeführt wurden, beziehen sich die in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse im Wesentlichen auf Messungen an magnetoplasmadynamisch (MPD) erzeugten Plasmaströmungen im Plasmawindkanal PWK2. Die spektral hoch aufgelösten Messungen zur Unterstützung der Modellierung der Molekülstrahlung wurden an von einem Mikrowellengenerator erzeugten Plasmen gemessen [86, 110], der im Ergebniskapitel dieser Messungen kurz beschrieben wird.

3.1 Magnetoplasmadynamisch (MPD) erzeugte Plasmaströmungen

MPD-Generatoren heizen das Arbeitsgas mit Hilfe eines Lichtbogens auf. Im Vergleich zu thermischen Lichtbogeneneratoren wird jedoch eine zusätzliche Beschleunigung der geladenen Teilchen über das durch die hohen Ströme selbst-induzierte Magnetfeld bewirkt. Dadurch lässt sich mit MPD-Generatoren eine sehr hohe spezifische Enthalpie von bis zu 150 MJ/kg erreichen [68]. Diese Eigenschaft ist besonders interessant, da solche Werte beim Wiedereintritt im Rahmen von Rückkehrmissionen auf hyperbolischen Rückkehrbahnen durchaus erreicht werden und zur Zeit mit keiner anderen Technologie erzeugt werden können. Die theoretische Berechnung der Plasmen wird jedoch durch diese magnetohydrodynamischen Effekte wesentlich erschwert, zumal in keinem Teil der Plasmaströmung ohne weiteres von thermodynamischem Gleichgewicht ausgegangen werden kann.

3.1.1 Die Plasmaquelle RD5

Im Falle der am IRS verwendeten Geräte wird eine koaxiale Konfiguration verwendet, in der die Kathode auf der Generatorachse sitzt und der Lichtbogen zwischen dieser Kathode und der gleichzeitig als letztes Düsensegment fungierenden, wassergekühlten Anode entsteht. Die Anode und die Kathode sind analog zu den ebenfalls am Institut untersuchten, düsenförmigen MPD-Triebwerken [1, 115] durch Neutralsegmente voneinander getrennt, durch die die Potentialdifferenz schrittweise

abgebaut wird und sich dem Plasmapotential anpassen kann [114]. Bei der Erzeugung von Luftplasma muss die glühende Kathode vor dem Sauerstoff geschützt werden. Aus diesem Grund wird nur der Stickstoff an der Kathode entlang geführt, während der Sauerstoff erst kurz nach dem Düsenhals in einem Neutralsegment zugemischt wird. Abbildung 3.1 zeigt den Aufbau des in den beschriebenen Versuchen verwendeten Plasmagenerators RD5-IRS [68] in Form einer Schnittzeichnung.

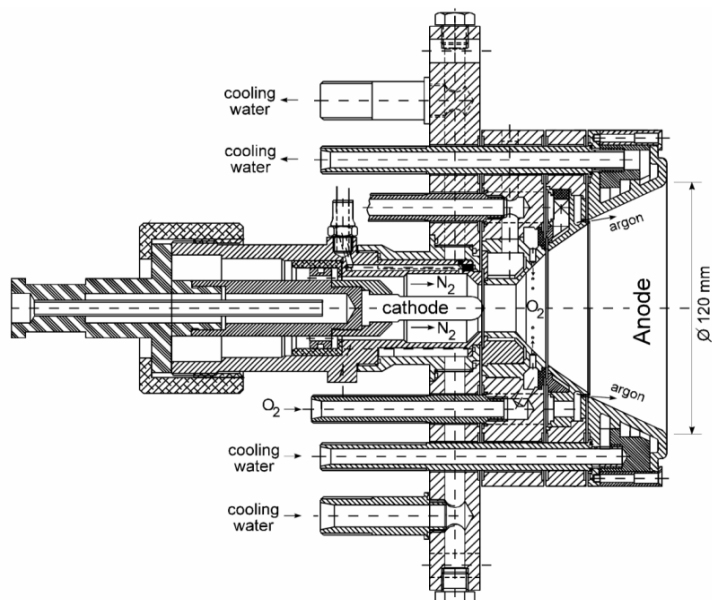


Abbildung 3.1: Schnittzeichnung der magnetoplasmadynamischen Plasmaquelle RD5-IRS.

3.2 Versuchsaufbauten für emissionsspektroskopische Messungen

Im Laufe der Untersuchungen wurden verschiedene Versuchsaufbauten verwendet, die an die unterschiedlichen Zielsetzungen adaptiert werden mussten. Für die Messungen in der körpernahen Grenzschicht stand z.B. eine gute Ortsauflösung im Vordergrund, während zur Untersuchung der Oszillationen ein komplettes Radialprofil zugleich gemessen werden musste. Weiterhin wurden verschiedene Detektoren für die unterschiedlichen Messaufgaben verwendet. Für alle in dieser Arbeit präsentierten Messungen am Plasmawindkanal wurde ein abbildendes Spektrometer ACTON 300i mit einer Brennweite von 300 mm eingesetzt. Messungen in hoher spektraler Auflösung an einem Mikrowellengenerator zur Unterstützung der Modellierung der Molekülstrahlung wurden mit dem Spektrometer ACTON 2750 mit einer Brennweite von 750 mm durchgeführt. Für alle diese Versuchsaufbauten wurden Spiegel an Stelle von Linsen als fokussierende Elemente verwendet, um Fehler auf Grund von chromatischer Aberration zu vermeiden. Dies ist notwendig, wenn gleichzeitig große Wellenlängenbereiche gemessen werden sollen. Besonders stark wirkt sich dieser Effekt beim Übergang vom UV-Bereich zum Bereich sichtbaren Lichts aus. Im Falle des Versuchsaufbaus mit niedriger Ortsauflösung hätte eine Linse gleicher Brennweite bei einer Fokussierung auf die Plasmawindkanalachse für Licht mit einer Wellenlänge von 400 nm bei 200 nm überhaupt keine Abbildung mehr ermöglicht.

Um die Justierung der Versuchsaufbauten zu erleichtern, aber auch um eine Kontrollmöglichkeit der Messposition zu geben, wurde in allen Versuchsaufbauten, in denen kein Photomultiplier verwendet wurde, ein Helium-Neon-Laser durch den seitlichen Schlitz in das Spektrometer geleitet. Der Laserstrahl musste dabei den Versuchsaufbau rückwärts durchlaufen, wenn das Spektrometer auf die entsprechende Wellenlänge eingestellt wurde, und markierte somit den kompletten Strahlengang. Schließlich wurden Vorversuche zur Auslegung des vorgeschlagenen Flugexperiments mit einem miniaturisierten Spektrometer Ocean Optics S2000 durchgeführt, die jedoch im Kapitel 6 beschrieben werden.

Im Folgenden sollen die verschiedenen Versuchsaufbauten skizziert werden. Weiterhin wird die verwendete Intensitätskalibrierung beschrieben.

3.2.1 Versuchsaufbau mit niedriger Ortsauflösung

Der emissionsspektroskopische Versuchsaufbau für Messungen in niedriger Ortsauflösung wurde zur gleichzeitigen Messung kompletter radialer Profile im Plasmawindkanal entwickelt, wobei eine zentrale Anwendung die Untersuchung hochfrequenter Oszillationen war. Die optische Einkopplung wurde jedoch auch zur Messung spektral hoch aufgelöster Emissionsspektren am Mikrowellengenerator eingesetzt.

Zur Untersuchung der hochfrequenten Oszillationen musste ein komplettes radiales Profil zur gleichen Zeit aufgenommen werden. Dabei sollte die Strahlung der verschiedenen Spezies gleichzeitig gemessen werden, um die einzelnen Strahlprofile miteinander vergleichen zu können. Daher wurde ein Hohlspiegel mit einer Brennweite von 125 mm verwendet, der über einen Planspiegel eine Abbildung der Plasmawindkanalachse auf die Schlitzebene des Spektrometers ermöglichte. Aufgrund des kleinen Spiegeldurchmessers von 20 mm wurde auf eine weitere Blende im Strahlengang ver-

zichtet. Filter zur Unterdrückung höherer Ordnung wurden direkt vor dem Eingangsschlitz des Spektrometers angebracht. Abbildung 3.2 zeigt eine Skizze dieses Versuchsaufbaus. Die Eckdaten des Versuchsaufbaus sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Aus vorangegangenen Untersuchungen im Rahmen des SFB-259 [98] an anderen Simulationspunkten sowie Filmaufnahmen mit einer Hochgeschwindigkeitskamera ergaben sich Frequenzen der beobachteten Schwingungen im Bereich von mehreren Kilohertz. Für die Untersuchung dieser Schwingungen waren also Belichtungszeiten von deutlich weniger als $200 \mu\text{s}$ notwendig, die durch Verwendung einer Intensitäts-verstärkten Kamera, die minimale Belichtungszeiten von einigen ns erlaubt, erreicht wurden. Leider ließ dieser Versuchsaufbau keine vergleichbar hohe Bildwiederholfrequenz zu, sodass die Aussagen über Oszillationsfrequenzen aus dem Vergleich von zeitlich hoch aufgelösten Einzelaufnahmen erfolgen müssen.

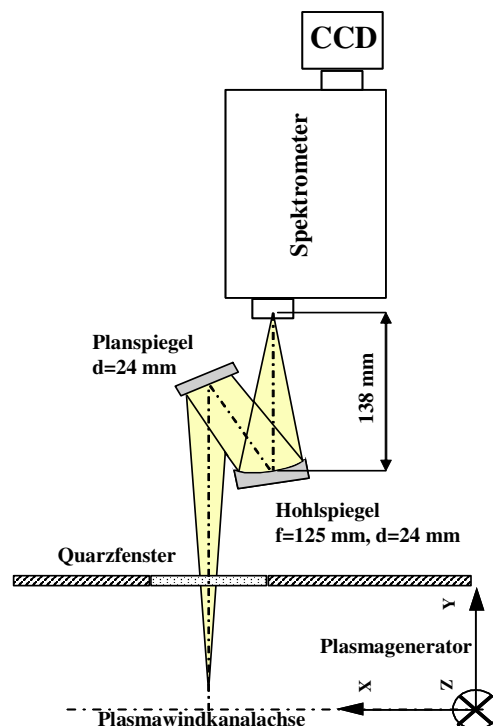


Abbildung 3.2: Versuchsaufbau zur gleichzeitigen Messung kompletter Radialprofile (nicht maßstäblich).

Spiegelbrennweite	125 mm
axiale Ortsauflösung	0,4 mm
radiale Ortsauflösung = radiale Schrittweite	0,4 mm
Strahlöffnungswinkel	$0,5^\circ$

Schlitzweite	$25 \mu\text{m}$
Verkleinerungsfaktor	15
Blendendurchmesser/ Spiegeldurchmesser	24 mm
f/d_{effektiv}	5,5
Raumwinkel	$2,5 \cdot 10^{-4} \text{ sr}$

Tabelle 1: Eckdaten zum Versuchsaufbau zur gleichzeitigen Messung kompletter Radialprofile

Die gleiche Abbildungsoptik wurde für die Messungen hoch aufgelöster Spektren an einem Mikrowellengenerator mit dem Spektrometer Acton SP2750 mit einer Fokuslänge von 750 mm verwendet. Dazu wurde aber das f/d_{effektiv} Verhältnis geändert, um dem durch das Spektrometer vorgegebenen Wert von $f/d=9,6$ zu entsprechen. Übersichtsspektren wurden unter Verwendung einer CCD-Kamera mit einem Beugungsgitter mit 50 Strichen/mm erstellt, um einen stabilen Plasmazustand mit möglichst hoher Emission zu ermitteln. Die spektral hoch aufgelösten Messungen wurden mit einem Gitter mit 3600 Strichen/mm durchgeführt, das jedoch aufgrund seiner Bauform nur Messungen bis zu einer Wellenlänge von 470 nm erlaubt. Zur Detektion wurde ein Photomultiplier

(PMT) der Firma Hamamatsu des Typs R955 verwendet. Abbildung 3.3 verdeutlicht den Versuchsaufbau.

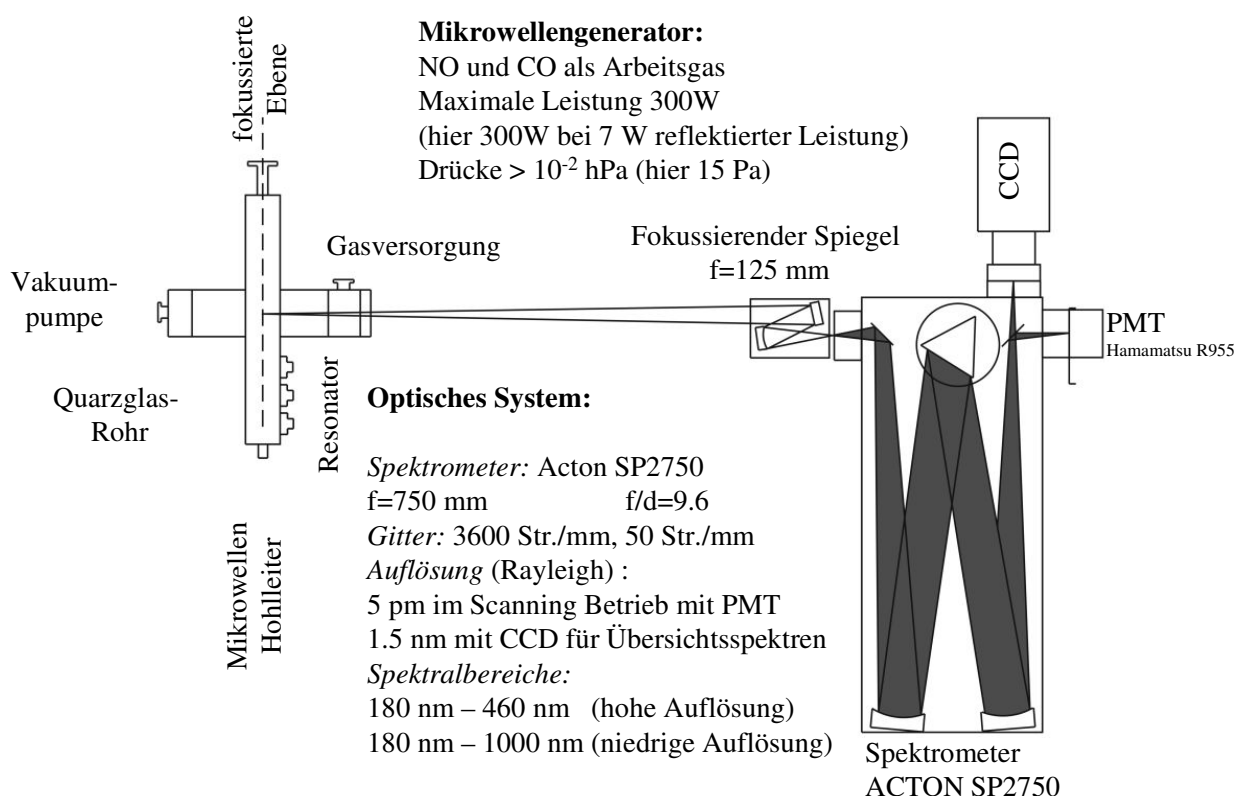


Abbildung 3.3: Versuchsaufbau zur spektral hoch aufgelösten Emissionsspektroskopie am Mikrowellengenerator.

3.2.2 Messungen mit hoher Ortsauflösung zur Untersuchung der Grenzschicht

Obwohl sich erste Auswirkungen des Aufstaugebietes vor einer Probe in den betrachteten Unterschall-Plasmaströmungen schon in etwa 50 mm Abstand zur Probenoberfläche beobachten lassen, finden die durch Oberflächeneinflüsse bewirkten Effekte direkt vor der Oberfläche statt. Um eine möglichst hohe Ortsauflösung zu erreichen, wurde über einen parabolischen Hohlspiegel mit einer Brennweite von 660 mm der Bereich auf der Plasmawindkanalachse scharf auf den Eingangsschlitz des Spektrometers abgebildet. Durch eine Drehung des Spektrometers um 90° wurde erreicht, dass ein Bereich von etwa 20 mm auf die Schlitzhöhe abgebildet wurde, sodass für jeweils eine vertikale Position ein kompletter Schnitt durch die Grenzschicht gleichzeitig vermessen werden konnte. Die theoretisch erreichbare Ortsauflösung ist hierbei durch die Größe eines Kamerapixels gegeben, das mit dem Abbildungsmaßstab multipliziert werden muss. Es ergab sich ein Wert von 0,04 mm für eine Pixelgröße von 19 μ m und einen Abbildungsmaßstab von etwa 1:10. Im realen Versuchsaufbau ist das Auflösungsvermögen eines optischen Systems jedoch durch die Größe des minimalen Beugungsscheibchens begrenzt:

Diese Rechnung muss sowohl für den optischen Aufbau zur Fokussierung auf den Spektrometereingangsschlitz, wie auch für die Abbildung innerhalb des Spektrometers durchgeführt werden. Für den äußeren optischen Weg ergaben sich mit einem wirksamen Spiegeldurchmesser von 20 mm minimale Beugungsscheibchenradien von $8 \cdot 10^{-3}$ mm bzw. $3,22 \cdot 10^{-2}$ mm bei 200 nm bzw. 800 nm.

Die Werte für den optischen Weg im Spektrometer lagen mit $7,32 \cdot 10^{-4}$ mm und $2,93 \cdot 10^{-3}$ mm bei 200 nm bzw. 800 nm unter denen des äußeren optischen Wegs und müssen deshalb nicht gesondert berücksichtigt werden. Diese Angaben stellen eine absolute Grenze für die örtliche Auflösung dieses Versuchsaufbaus dar, liegen aber sowohl unterhalb der genutzten Schlitzweite als auch unter den geforderten und den durch die endliche Pixelgröße erreichbaren Ortsauflösungen. Um die Lichtausbeute zu optimieren und gleichzeitig eine örtliche Trennung der einzelnen Messwerte zu gewährleisten wurden in den eigentlichen Messungen jeweils zwei Zeilen zusammengefasst und die darauf folgende verworfen, wodurch sich eine Ortsauflösung von 0,12 mm auf der Plasmawindkanalachse ergab. Aus Datenreduktionsgründen wurde diese Auflösung nur nahe der Probenoberfläche benutzt, während in größeren Anständen zur Oberfläche durch die kleineren örtlichen Gradienten der Plasmaparameter ohne Datenverluste größere Abstände zwischen den einzelnen Messpositionen möglich wurden.

Zur Messung verschiedener vertikaler Messpositionen, die für eine Abel-Inversion benötigt werden, wurde der Strahlengang über einen direkt vor dem Tankfenster angebrachten, drehbaren Planspiegel umgelenkt, sodass unterschiedliche Positionen außerhalb der Plasmawindkanalachse erreicht werden konnten. In den durchgeführten Versuchen wurden jeweils 100 radiale Positionen mit einer Schrittweite von 2 mm vermessen. In Verbindung mit der gleichzeitigen Messung von 30 axialen Positionen ergaben sich somit etwa 3000 Spektren pro Messfeld. Abbildung 3.4 zeigt den Versuchsaufbau und das verwendete Messgitter, Tabelle 2 fasst die Eckdaten des optischen Versuchsaufbaus zusammen.

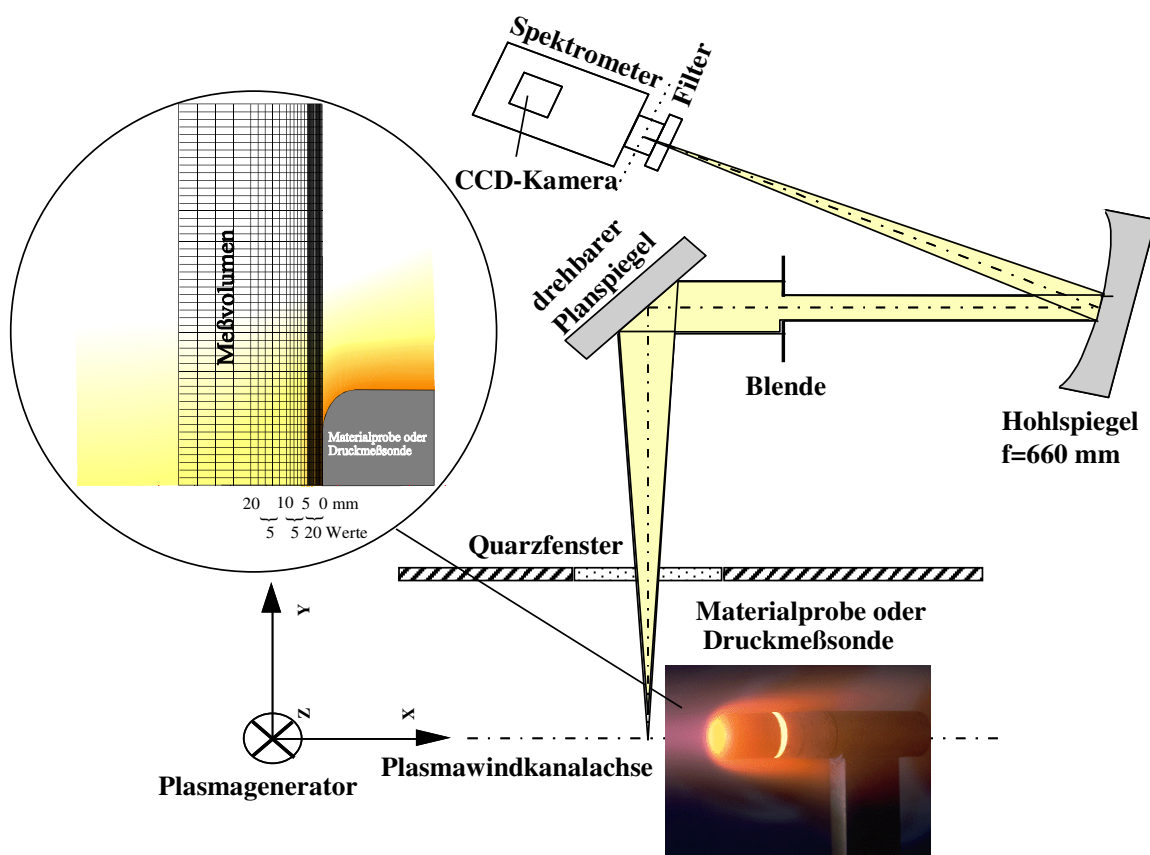


Abbildung 3.4: Versuchsaufbau zur örtlich hoch aufgelösten, emissionspektroskopischen Untersuchung der Grenzschicht vor einer Probe im Plasmastrahl.

Spiegelbrennweite	660 mm	Schlitzweite	50 μm
minimale axiale Ortsauflösung	0,1 mm	Verkleinerungsfaktor	2
Radiale Schrittweite	2 mm	Blendendurchmesser	13 mm
radiale Ortsauflösung	0.1 mm	f/d _{effektiv}	11
Strahlöffnungswinkel	0,276 °	Raumwinkel	2,3 10^{-5} sr

Tabelle .2: Eckdaten für den örtlich hoch auflösenden, emissionsspektroskopischen Versuchsaufbau.

3.2.3 Intensitätskalibrierung

Alle Elemente eines optischen Versuchsaufbaus weisen unabhängig voneinander verschieden spektrale Charakteristiken auf. Selbst wenn nur relative Intensitäten miteinander verglichen werden sollen und keine Messung absoluter Intensitäten geplant ist, ist eine Intensitätskalibrierung unabdingbar. Eine Möglichkeit besteht darin, jedes Element des Versuchsaufbaus getrennt zu kalibrieren und die einzelnen Kalibrierfunktionen zur Korrektur der Messung heranzuziehen. Obwohl dies auf den ersten Blick vorteilhaft zu sein scheint, da die einmal erstellten Kalibrierfunktionen in unterschiedlicher Kombination immer wieder verwendet werden können, stellt eine solche Vorgehensweise doch einen Unsicherheitsfaktor da, wenn die Kalibrierfunktionen nicht regelmäßig überprüft werden, speziell wenn der Versuchsaufbau häufig geändert wird.

In dieser Arbeit wurde der Ansatz gewählt, den gesamten Aufbau gemeinsam zu kalibrieren. Dafür wurden Eichlampen am Ort der scharfen Abbildung aufgestellt und mit den gleichen Parametern vermessen wie im Versuch, dessen Messdaten kalibriert werden sollen. Durch einen Vergleich mit den zu den Eichlampen gehörigen Eichkurven ergibt sich ein Korrekturfaktor K, der sämtliche Einflussfaktoren berücksichtigt.

$$K = \frac{I_{\text{Eichlampe,theor}}}{I_{\text{Eichlampe,gemessen}}} \quad ; \quad K = \frac{I_{\text{Eichlampe,theor}}}{I_{\text{Eichlampe,gemessen}}} \quad I_{\text{Messung,korrigiert}} = K I_{\text{Messung}} = \frac{I_{\text{Eichlampe,theor}}}{I_{\text{Eichlampe,gemessen}}} I_{\text{Messung}} \quad (58)$$

mit: $I_{\text{Eichlampe,theor}}$ spektrale Intensität der Eichlampe aus Eichkurve
 $I_{\text{Eichlampe,gemessen}}$ spektrale Intensität der Eichlampe aus Kalibriermessung
 I_{Messung} Rohdaten der zu kalibrierenden Messung
 $I_{\text{Messung, korrigiert}}$ Intensitätskorrigierte Messdaten

Zur absoluten Intensitätskalibrierung muss die Eichlampe in Bezug auf ihre spektrale Strahldichte in $W/m^2 \text{ nm sr}$ geeicht sein. Zur Kalibrierung der in dieser Arbeit gewonnenen Messwerte wurden eine Wolframbandlampe der Firma OSRAM für Wellenlängen zwischen 300 nm und 1000 nm sowie eine Deuteriumlampe der Firma Gigahertz für Wellenlängen von 200 nm bis 400 nm herangezogen. Allerdings stand nur für die Wolframbandlampe eine Kalibrierung bezüglich spektraler Strahldichte zur Verfügung, während die Deuteriumlampe bezüglich ihrer Bestrahlungsstärke kalibriert war. Deshalb musste für die Kalibrierung der Messwerte im UV-Bereich eine Kreuzkalib-

rierung herangezogen werden. Dabei wurden die Korrekturfaktoren aus der Messung der Deuteriumlampe im Überlappungsbereich mit der Wolframbandlampe in ihrem Absolutwert skaliert. Abbildung 3.5 zeigt die Eichkurven der beiden Lampen und typische Korrekturfaktoren für die zur Temperaturbestimmung im Freistrahlfeld verwendeten Spektren. Da die kalibrierten Werte für die Wolframbandlampe nur bis 850 nm zur Verfügung standen, wurde die Kurve bis 1000 nm mit einem Polynom sechster Ordnung extrapoliert. Da sich die Transmission des Glaszylinders in diesem Bereich nicht wesentlich ändert, basiert diese Vorgehensweise nur auf der Annahme eines grauen Strahlers mit konstantem Emissionsgrad, die aufgrund des vergleichsweise schmalen, fehlenden Spektralbereichs durchaus gerechtfertigt erscheint.

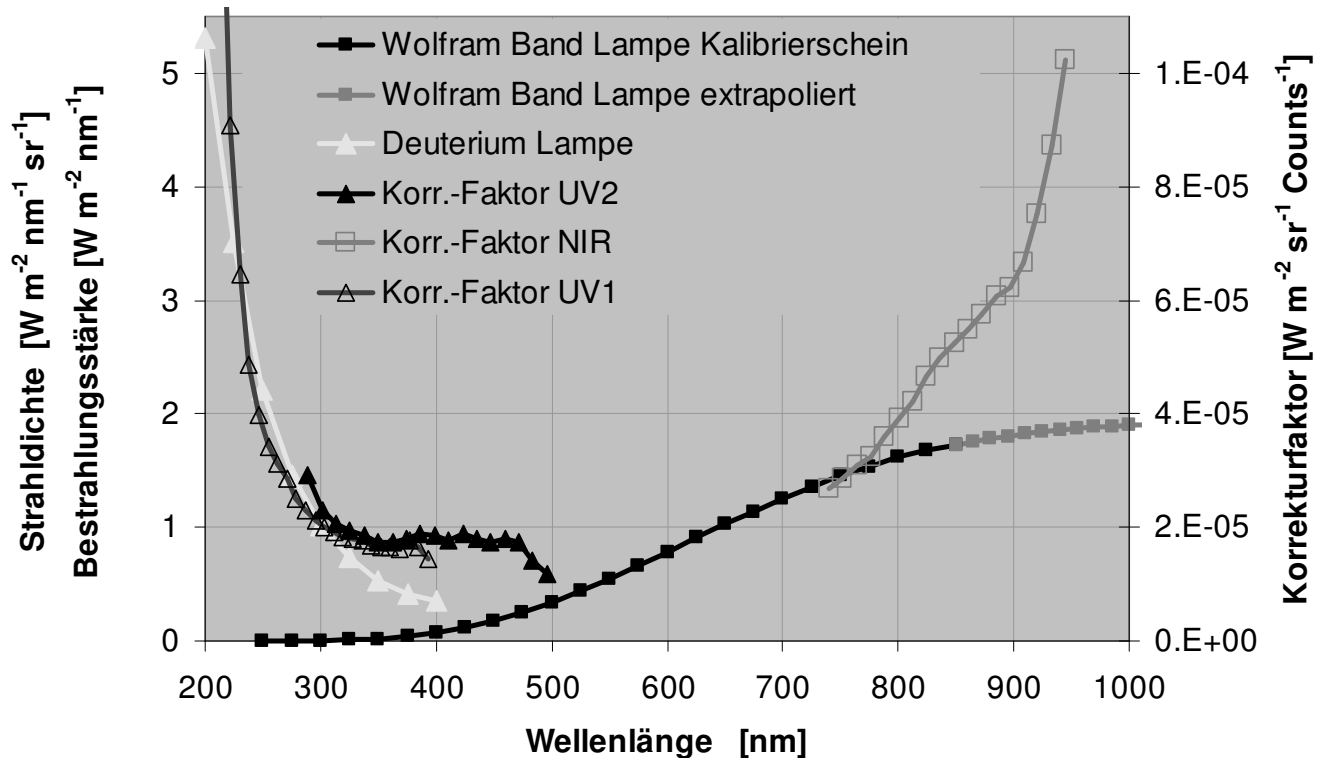


Abbildung 3.5: Eichkurven der verwendeten Kalibrierkurven laut [59] und [58] und typische Korrekturfaktoren für die zur Temperaturbestimmung verwendeten Spektralbereiche.

3.3 Versuchsaufbau zur Fabry-Perot-Interferometrie

Für die Versuche mit dem Fabry-Perot-Interferometer wurde ein in einer früheren Dissertation entwickelter [45] und in einer darauf folgenden Studienarbeit [32] erweiterter Versuchsaufbau benutzt. Hierbei wird ein Fabry-Perot-Interferometer (FPI) als hochauflösender Spektralapparat verwendet, um einzelne Spektrallinien des Plasmas hinsichtlich ihrer Dopplerverbreiterung und -verschiebung zu untersuchen. Aus der Dopplerverbreiterung ergibt sich die Translationstemperatur der betrachteten Spezies und aus der Dopplerverschiebung die Geschwindigkeit des Plasmas. Dazu sind Messungen der Plasmastrahlung unter verschiedenen Winkeln zur Strahlachse notwendig. Die verwendete Sonde enthält zwei Linsen, deren optische Wege einen Winkel von 45° gegeneinander aufweisen und sich auf der Strahlachse schneiden. Die gemessene Strahlung wird über Lichtwellenleiter aus dem Tank herausgeleitet und über eine Aufweitungsoptik in das FPI eingekoppelt. Dort erfolgt durch eine Bewegung der Spiegelplatten gegeneinander über Piezoelemente eine Wellenlängenselektion nach dem Prinzip der Mehrstrahlinterferenz. Nach dem FPI wird die Strahlung durch ein Spektrometer, das als wellenlängenselektiver Filter verwendet wird, von einem Photomultiplier (PMT) detektiert. Dieser Versuchsaufbau wurde durch eine zeitliche Integration der PMT-Signale ergänzt. Dadurch konnte eine wesentliche Verbesserung der Sensitivität des Aufbaus erreicht werden, die für die Messung radialer Profile notwendig war. Zudem resultieren die Änderungen in einer größeren Robustheit gegenüber hochfrequenten Oszillationen. Abbildung 3.6 zeigt den Versuchsaufbau und die Sonde im Plasmastrahl.

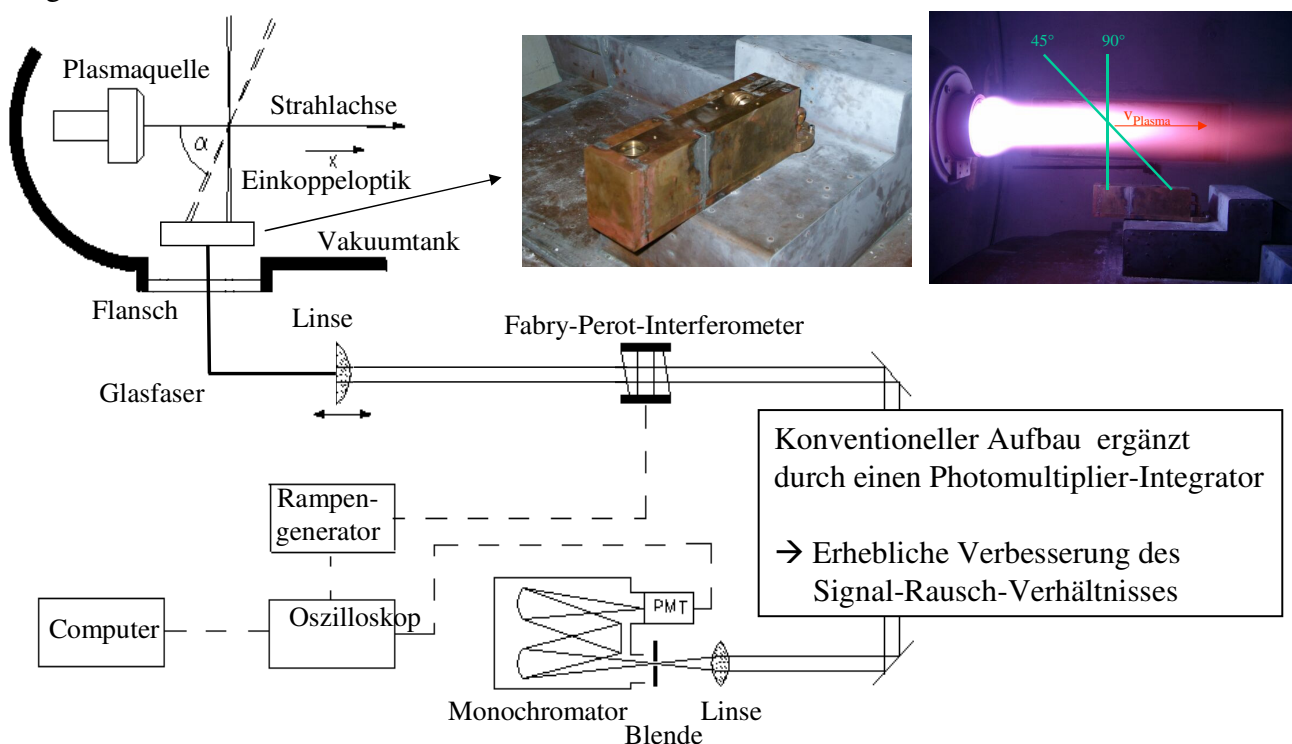


Abbildung 3.6: Versuchsaufbau zur Fabry-Perot-Interferometrie mit Lichtwellenleitertechnik und Illustration der optischen Wege im Plasmastrahl. PLD2003

3.4 Pendelaufbau für Messungen mit elektrostatischen Sonden

Schon in der Vergangenheit wurden am NASDA-Punkt Messungen mit elektrostatischen Sonden durchgeführt, deren Ergebnisse jedoch nur schwer mit den Resultaten anderer Messmethoden in Einklang zu bringen sind [123], wie auch noch in Kapitel 4.6.1 erläutert wird. Eine Erklärung dafür sind die hohen thermischen Lasten auf die Sonden, die eine erhöhte und messtechnisch nur schwer fassbare Elektrodenerosion mit sich führen, die wiederum direkt die Auswertung der Messdaten beeinflusst. Deshalb wurde ein Versuchsaufbau konzipiert, der die Sonden möglichst schnell durch das Plasma bewegen soll, um die Dauer der thermischen Belastung so gering wie möglich zu halten. Zu diesem Zweck wurde ein Pendel gebaut, das über Magnethalterungen an der Tankwand fixiert und erst für die eigentliche Messung losgelassen wird. Nach einem Durchlauf durch den Plasmastrahl wird das Pendel an der gegenüberliegenden Seite wieder gefangen und dort gehalten, bis die nächste Messung durchgeführt werden soll. Abbildung 3.7 zeigt ein Photo des resultierenden Versuchsaufbaus.

Leider zeigte sich während der Versuche, dass auch außerhalb des eigentlichen Plasmastrahls merkliche thermische Belastungen auftreten. Diese Belastungen hatten eine Überhitzung einzelner Magnete und ein vorzeitiges Versagen des Versuchsaufbaus zur Folge. Bedingt durch die kurze Verweildauer im Plasmastrahl von 0,1 Sekunden für ein radiales Profil wurden elektrostatische Tripelsonden eingesetzt, die keine Variation der Speisespannung erfordern. Mit solchen Sonden können gleichzeitig Elektronentemperatur und -dichte ermittelt werden [45].



Abbildung 3.7: Pendelaufbau zur Diagnostik mit elektrostatischen Sonden. PLD2003

Kapitel 4

Experimentelle Ergebnisse

Bevor die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen präsentiert werden, wird die in früheren Arbeiten erfolgte Charakterisierung des Testpunktes dargestellt. Im Rahmen dieser Darstellung wird auch eine Interpretation der Messungen unter Voraussetzung von thermodynamischem Gleichgewicht vorgenommen. Obwohl die numerische Berechnung der Probenumströmung mit dem Strömungslöser URANUS [36, 55], die zur Unterstützung der Interpretation der Ergebnisse der Grenzschichtuntersuchungen verwendet wurde, nicht zu den experimentellen Ergebnissen zählt, wird sie an dieser Stelle dargestellt, da aus den gemessenen Werten für Druck und Enthalpie Startwerte für die numerische Simulation gewonnen wurden. Im Anschluss an diesen Überblick wird eine Übersicht über die spektrale Emission der untersuchten Plasmen gegeben, um die Basis für die darauf folgenden Untersuchungen zu legen. Weiterhin werden die spektral hoch aufgelösten Messungen zur Unterstützung der Modellierung der Molekülstrahlung dargestellt, um die Leistungsfähigkeit der verwendeten Simulationsprogramme zu demonstrieren. Bei den Untersuchungen wurden hochfrequente Schwankungen des Plasmastrahls festgestellt, die untersucht werden, um ihre Auswirkungen auf die anderen Messergebnisse abzuschätzen. Anschließend wurden die Messergebnisse zur Charakterisierung des Freistrahls durch Emissionsspektroskopie, Fabry-Perot-Interferometrie und Messungen mit elektrostatischen Sonden dargestellt. Die Untersuchungen der Probenumströmung durch emissionsspektroskopische Messungen werden mit der numerischen Simulation der Probenumströmung verglichen, und abschließend werden die Messergebnisse diskutiert und bewertet.

4.1 Bisher erfolgte Charakterisierung des Testpunktes

MPD-Plasmen wurden am IRS unter anderem im Zusammenhang mit Untersuchungen für das geplante europäische Rückkehrfahrzeug HERMES [96] sowie in einer Kooperation mit der damaligen japanischen Raumfahrtagentur NASDA [7] und im Sonderforschungsbereich SFB 259 [4] intensiv untersucht. Für die hier vorliegende Arbeit wurden hauptsächlich Untersuchungen an einem intensiv untersuchten Testpunkt aus der NASDA Kooperation (im Folgenden als NASDA-Punkt bezeichnet⁶) durchgeführt, für den jedoch keine numerischen Ergebnisse zur Verfügung standen. Deshalb wurden parallel zu diesen Untersuchungen auch Daten am SFB II Testpunkt [4] aufgenommen, für den umfangreiche numerische Ergebnisse vorliegen [42]. Die an diesem Testpunkt

⁶ Dieser Versuchspunkt wurde unter der Bezeichnung SFB-VII auch in die SFB-Untersuchungen aufgenommen.

gemessenen Spektren weisen jedoch im Bereich der Molekülstrahlung Störungen auf, die unter anderem auf die Emission von NH zurückgeführt werden konnten [117] und eine Temperaturbestimmung verhinderten. Tabelle 3 zeigt die wesentlichen Betriebsparameter der Plasmaquelle für diese beiden Testpunkte. Prinzipiell liegen alle Messdaten für beide Versuchspunkte vor, die Auswertung wird jedoch hier nur für den NASDA Punkt dargelegt.

Der Versuchspunkt ist vor allem deshalb von besonderem Interesse, weil sich bei der resultierenden Oberflächentemperatur einer SiC Probe von 1700°C eine sprunghafte Änderung des Materialverhaltens zu deutlich höheren Oberflächentemperaturen bei nur geringer Steigerung der elektrischen Leistung zeigt. Dieses Verhalten wurde im Laufe weiterer Untersuchungen [22, 53, 71] dem Übergang von passiver zu aktiver Oxidation des SiC Materials zugeordnet, der bei der Auslegung des Hitzeschutzschilds und der Auswahl der Flugbahn eines geflügelten Rückkehrfahrzeugs eine wesentliche Rolle spielt.

		NASDA/SFB VII	SFB II
Gesamtmassendurchsatz	[g/s]	8	2
Strom	[A]	1235	1200
El.Leistung	[kW]	119	83
Umgebungsdruck	[kPa]	0.49	0.29
Sondendurchmesser	[mm]	50	
Sondenposition	[mm]	368	467
Staudruck	[kPa]	0.8	0.4
SiC Oberflächentemperatur	[°C]	1700	1280
SiC Ersosionsrate in Luft	[kg m ⁻² h ⁻¹]	3,5	<0,2

Tabelle 3: Betriebsparameter der magnetoplasmadynamischen Plasmaquelle RD5-IRS und resultierende Belastung einer SiC Materialporbe an der Testposition..

Die Untersuchungen im Rahmen der NASDA Kooperation umfassen intensive Untersuchungen mit mechanischen Sonden zur Ermittlung von Druck- und Wärmeflussprofilen sowie Materialtests und erste Messungen mit elektrostatischen Sonden [7]. Eine wesentliche Größe zur Charakterisierung von Wiedereintrittsplasmen ist die spezifische Enthalpie, die die gesamte, in den Plasmastrahl eingetragene Energie beschreibt. Wie schon in Kapitel 2.5 ausgeführt, wird dabei nicht nur die kinetische Energie des Plasmastrahls, beschrieben durch den Staudruck oder durch die Plasmageschwindigkeit und den Massenfluss, und der statischen Druck, sondern auch die innere Energie des Plasmas berücksichtigt, die in der elektronischen, vibratorischen und rotatorischen Anregung sowie in chemischen Reaktionen gespeichert werden kann. Demzufolge sind zu einer Berechnung der spezifischen Enthalpie nicht nur die thermischen und strömungsmechanischen Zustandsgrößen des Plasmas nötig, sondern auch seine chemische Zusammensetzung. Wenn diese Informationen in ihrer Gesamtheit nicht zur Verfügung stehen, wird häufig auf die gemittelte, effektive spezifische Enthalpie zurückgegriffen, die sich in Bodentestanlagen aus der Differenz zwischen in der Plasmaquelle eingetragener elektrischer und abgeführter thermischer Leistung ergibt [80]. Im Realfalle weist die spezifische Enthalpie jedoch ein Profil über den Plasmastrahl auf [51]. Charakteristisch für die Materialuntersuchungen ist daher die lokale spezifische Enthalpie. Die Leistungsbilanz stellt hierbei eine Kontrollmöglichkeit für die lokalen Werte dar, da sie sich als Integral aus dieser

ergeben muss. Deshalb wurden in der Vergangenheit am IRS Anstrengungen unternommen, um die spezifische Enthalpie über Sondenmessungen zu bestimmen [31]. Dieses Verfahren wurde aktuell mit besonderem Augenmerk auf Steigerung der Messgenauigkeit und Anwendbarkeit auf Überschallbedingungen noch weiterentwickelt [29]. Am NASDA-Punkt wurden im Rahmen der Entwicklung dieses Messverfahrens bereits Messungen mit der Enthalpiesonde durchgeführt [31]. In Abb. 4.1 sind mit mechanischen Sonden gemessene Pitotdruck-, Wärmeflussdichte- und Enthalpieprofile dargestellt. Die gemessenen Werte wurden als Stützstellen für eine Interpolation mit Hilfe eines Voigt-Profiles benutzt, das in den Grafiken jeweils durch die durchgezogene Linie dargestellt ist.

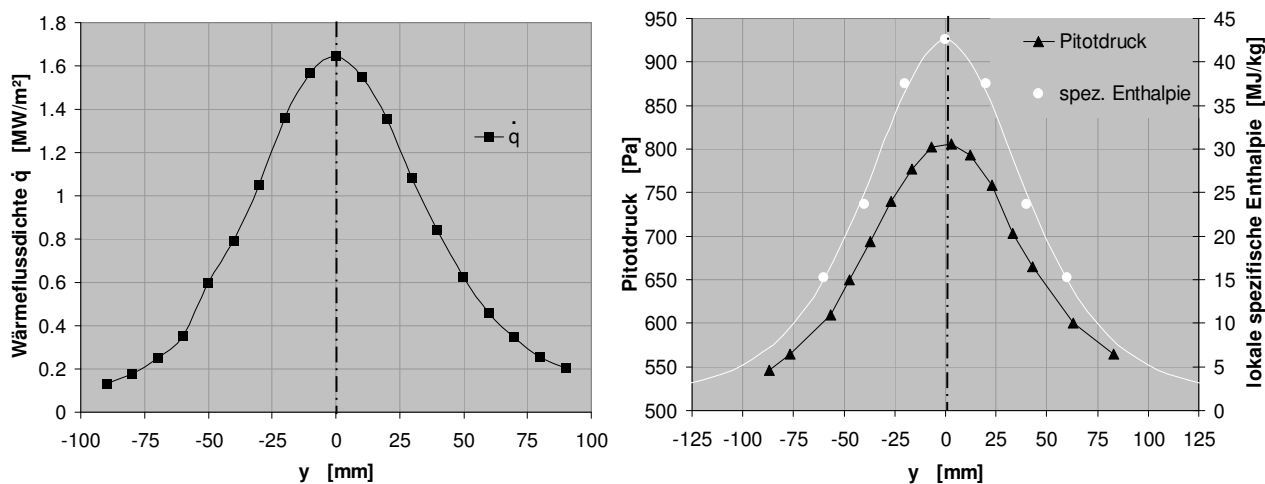


Abbildung 4.1: Radiale Profile für Wärmeflussdichte gemessen mit Gardon Gage Sensoren sowie für Pitotdruck und spezifische Enthalpie gemessen mit mechanischen Sonden am NASDA-Testpunkt [7, 31].

4.2 Numerische Berechnung der Probenumströmung

Aus den Messergebnissen der Grenzschichtuntersuchungen ließen sich deutliche Einflüsse der Oberflächeneffekte erkennen. Für die numerische Berechnung von mit MPD-Generatoren erzeugten Plasmen wurde am Institut für Raumfahrtssysteme das Programmpaket SINA entwickelt [42]. Da für den NASDA-Testpunkt jedoch noch keine numerischen Rechnungen mit SINA zur Verfügung standen, und der Strömungslöser URANUS mit deutlich weiter entwickelten Verfahren zur Berücksichtigung der Oberflächenchemie ausgestattet ist, wurden zur Unterstützung der Grenzschichtuntersuchungen für diese Arbeit daher von Fertig numerische Simulationen der Probenumströmung mit URANUS durchgeführt [34]. Mit URANUS kann aber keine Quellenrechnung für den Plasmagenerator durchgeführt werden, sondern es muss ein Anströmzustand zur Verfügung gestellt werden.

Zur Ermittlung eines solchen Anströmzustandes wurden die im vorigen Kapitel beschriebenen Messungen von Druck und Enthalpie herangezogen, um unter Annahme von thermodynamischem Gleichgewicht die Plasmazusammensetzung zu berechnen [34]. Zusätzlich zur Plasmazusammensetzung aus der gemessenen Enthalpie muss noch die Plasmageschwindigkeit berechnet werden, die sich unter Verwendung der temperaturabhängigen Gesamteilchendichte aus der Differenz zwi-

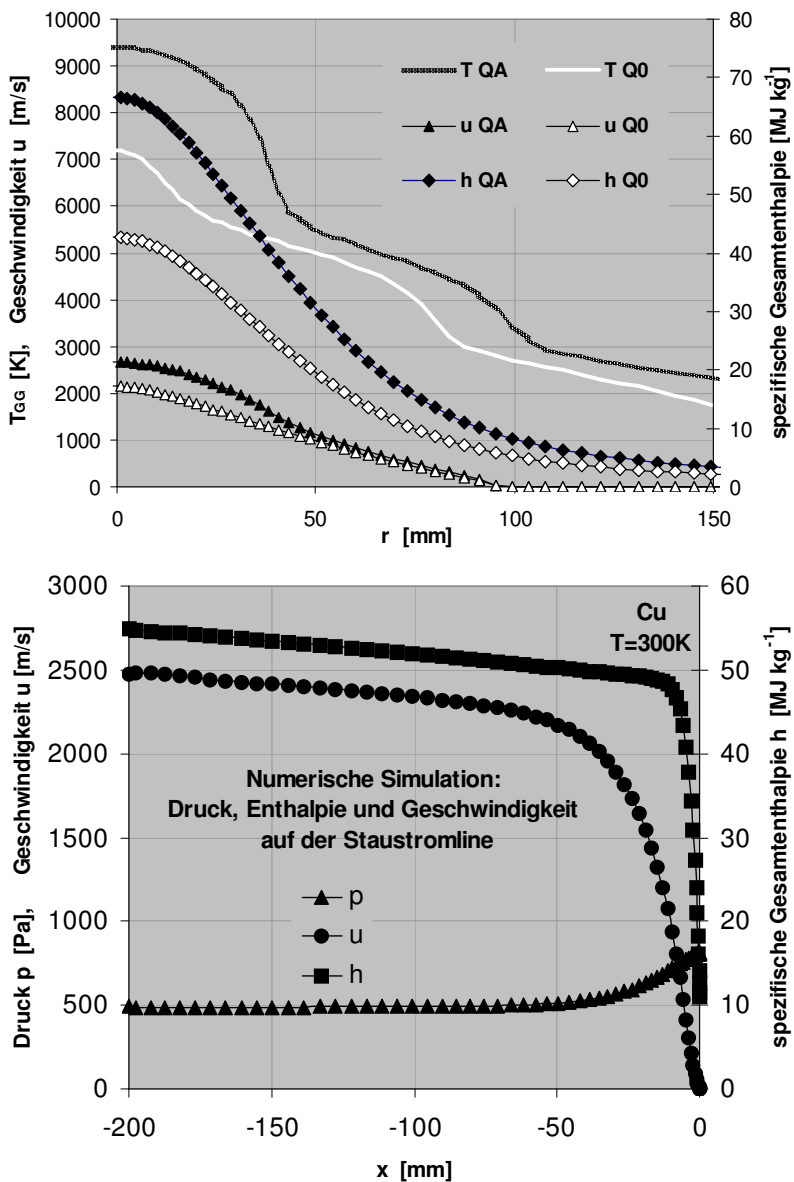


Abbildung 4.2: Gleichgewichtstemperatur, spezifische Gesamtenthalpie und Plasmageschwindigkeit bestimmt aus gemessenen Enthalpiewerten und Staudrücken unter Voraussetzung von thermodynamischem Gleichgewicht an der Messposition der Enthalpiesonde Q_0 am NASDA-Testpunkt und Extrapolation zum Anströmquerschnitt Q_A .

reproduziert. Dies konnte durch eine lineare Skalierung der zugrunde liegenden Enthalpie erfolgen, da sich der Plasmazustand in der URANUS-Simulation bis zum Anfang der Grenzschicht im Wesentlichen nur linear ändert. Verläufe entlang der Plasmaquerachse von Temperatur, Plasmageschwindigkeit und spezifischer Gesamtenthalpie den direkt aus der Enthalpie an der Messposition (Q_0) bestimmten Querschnitt und für den Anströmzustand ($Q_A = Q_0 - 200$ mm), sowie von Uranus berechnete Verläufe von spezifischer Gesamtenthalpie, Druck und Plasmageschwindigkeit auf der Staustromlinie vor einer Kupferoberfläche sind in Abb. 4.2 gezeigt.

schen dem Staudruck und dem statischen Druck ergibt und den fehlenden Beitrag zur Gesamtenthalpie liefert. Aus dem mit der gemessenen Enthalpie übereinstimmenden theoretisch berechneten Wert erhält man die gesuchte Gleichgewichtstemperatur und daraus den gesuchten Anströmzustand. Dieser muss speziell in Unterschallströmungen in einer ausreichende Distanz zur Probenoberfläche liegen, da der Aufstauvorgang im Unterschall auch stromaufwärts Auswirkungen zeigt. Für den betrachteten Plasmazustand hat sich gezeigt, dass auf einem Rechengitter mit 60×84 Volumenzellen, wie es in Abb. 4.3 dargestellt ist, eine Distanz von etwa 200 mm zur Probe ausreicht.

Da die gemessenen Enthalpie- und Druckwerte nur an der Probenposition zur Verfügung standen, wurden die Anströmbedingungen für die numerischen Rechnungen so extrapoliert, dass der Plasmazustand am Rand der Temperaturgrenzschicht die gemessenen Enthalpiewerte aufweist und dann so modifiziert, dass die Lösung den Oberflächenwärmestrom auf Kupfer re-

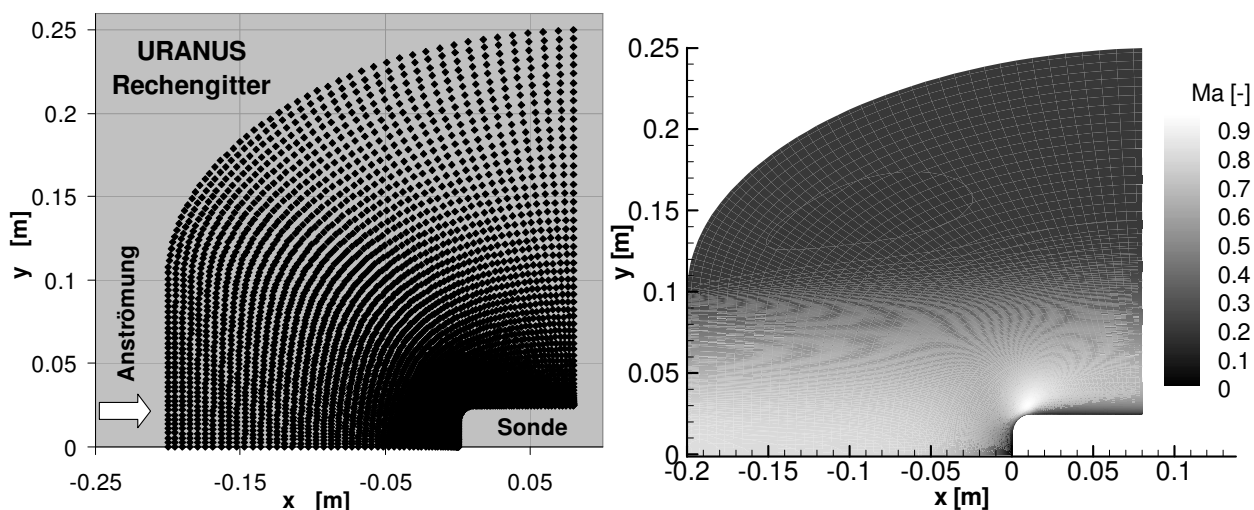


Abbildung 4.3: URANUS Rechengitter zur numerischen Simulation der Probenumströmung und resultierender Machzahlverlauf vor einer Kupferoberfläche am NASDA-Testpunkt.

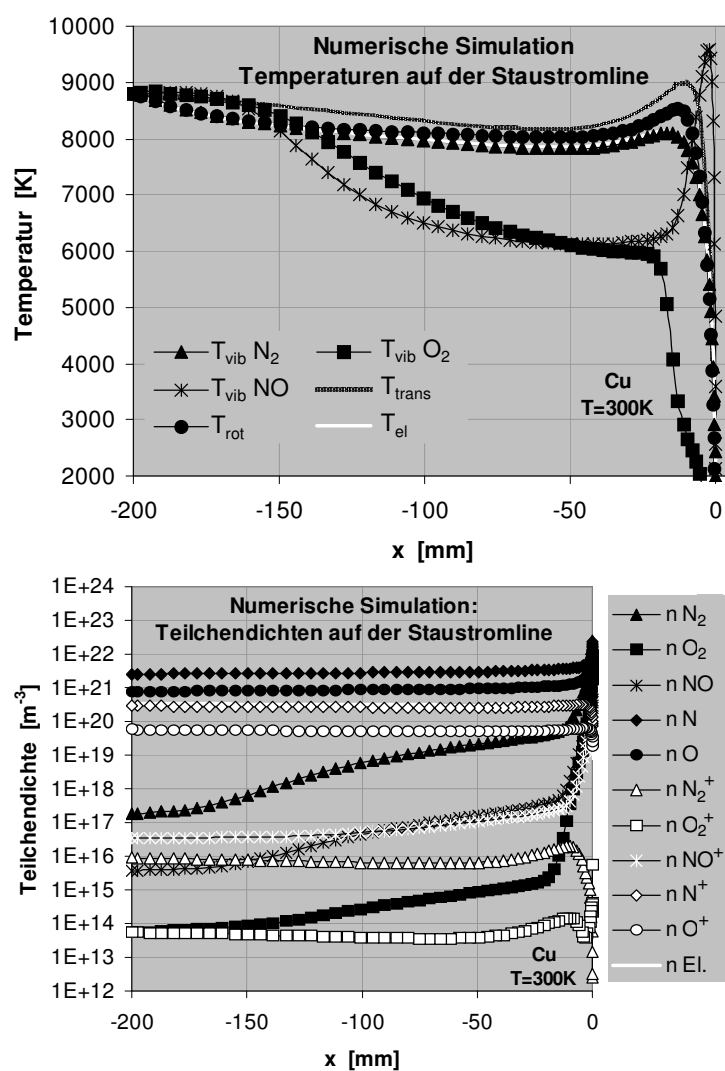


Abbildung 4.4: Numerisch berechnete Temperaturen und Teilchendichten auf der Staustromlinie vor einer Kupfer Oberfläche am NASDA-Testpunkt.

Das Maximum der Gleichgewichts-Temperatur im Messquerschnitt liegt bei 7200 K auf der Plasmastrahlachse und fällt bei einem Radius von 100 mm auf etwa 2700 K ab. Auch die maximale Plasma-geschwindigkeit tritt in der Strahlmitte auf und liegt bei etwa 2150 m/s. Das Abknicken der Temperaturkurve bei etwa 20 mm und 80 mm erklärt sich aus der Dissoziation bzw. Rekombination von Stickstoff und Sauerstoff, wobei Rekombinationsenergie in thermische Energie umgesetzt wird bzw. die Dissoziationsenergie aus der thermischen Energie entnommen wird. In der numerischen Berechnung sind alle Beiträge zur Enthalpie mit Ausnahme der elektronischen Anregung berücksichtigt. Gemäß der in Kapitel 2.5 durchgeführten Abschätzung kann dieser Anteil bis zu 10% der

Gesamtenthalpie betragen, wurde jedoch zur Berechnung des Anströmzustandes analog zur Berechnungsweise in der numerischen Simulation nicht berücksichtigt, um die gemessene Gesamtenthalpie komplett in die numerische Rechnung einzukoppeln.

Obwohl der Anströmzustand auf der Basis von thermodynamischem Gleichgewicht berechnet wurde, stellt URANUS eine Nichtgleichgewichtsrechnung zur Verfügung. Die auskonvergierte Lösung weist deshalb Abweichungen vom Gleichgewicht auf, die sich unter anderem in Unterschieden zwischen den einzelnen Temperaturen niederschlagen. Abb. 4.3 zeigt den Verlauf der Machzahl im Simulationsgebiet, die Teilchendichten und Temperaturen auf der Staustromlinie für den Fall einer gekühlten Kupferoberfläche sind in Abb. 4.4 dargestellt, der Verlauf der spezifischen Gesamtenthalpie, des Drucks und der Axialgeschwindigkeit in Abb. 4.5.

Zusätzlich zu den Rechnungen vor einer gekühlten Kupferoberfläche wurden von Fertig mit diesem Anströmzustand Rechnungen für eine SiC Materialprobe durchgeführt. Dabei wurden SiC- und SiO₂-Katalysemodelle eingesetzt, wobei die SiO₂ Lösung den Fall der passiven Oxidation beschreibt, in dem die SiC Probe eine SiO₂ Schutzschicht ausbildet. Alle Lösungen stimmen bis hin zu einem Abstand von etwa 20 mm miteinander überein, weisen dann aber Unterschiede auf. Diese Unterschiede sind zum Einen auf die unterschiedliche Oberflächentemperatur, zum Anderen aber auch auf die Reaktionen an der Oberfläche zurückzuführen, die durch die verschiedene

Oberflächenkatalyzität der Materialien beeinflusst werden. Abb. 4.5 zeigt die numerisch berechneten Wärmeflüsse und Oberflächentemperaturen im Vergleich mit den gemessenen Werten.

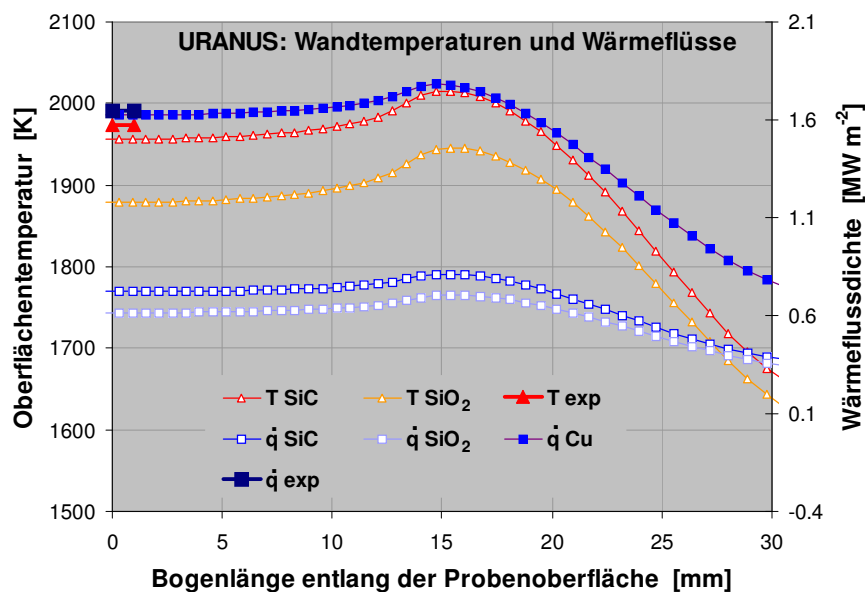


Abbildung 4.5: Berechnete Wärmeflüsse und Oberflächentemperaturen am NASDA Punkt für Kupfer-, SiC- und SiO₂-Oberflächen [34] und gemessene Werte [7].

Die gemessene Wärmeflussdichte von 1,8 MW/m² auf der Staustromlinie wird gut reproduziert, die berechneten SiO₂ und SiC Oberflächentemperaturen liegen mit 1879 K und 1956 K um etwa 100 K bzw. 20 K unter der gemessenen Probenoberflächentemperatur von 1973 K. Die numerische Berechnung weist jedoch höhere Temperaturen im Bereich des gekrümmten Teils der Probenkappe auf, die eigentlich über (in URANUS nicht berücksichtigte) Wärmeleitungsprozesse die Probenoberflächentemperatur leicht er-

höhen sollten, sodass die Übereinstimmung als hinreichend gut betrachtet werden kann. Laut [7, 53] befindet sich die Materialprobe bei den nominalen Bedingungen im Bereich passiver Oxidation, wechselt aber bei leicht gesteigerter Enthalpie schnell in den aktiven Bereich. Trotz der besseren Übereinstimmung der Oberflächentemperatur im Falle der SiC Rechnung, wird daher die SiO₂ Lösung favorisiert.

Zur Verdeutlichung der Unterschiede vor den drei Oberflächenmaterialien sind in den Abbildungen 4.6 und 4.7 die Verläufe der Teilchendichten und Temperaturen auf der Staustromlinie in den letzten 20 mm vor der Oberfläche dargestellt. Die höchste Temperatur in der Anströmung ist die Translationstemperatur, gefolgt von der Rotationstemperatur. Die Elektronentemperatur koppelt eng an die Vibrationstemperatur von N₂. Vor allen Oberflächenmaterialien sinken Translations-, Rotations- und Elektronentemperatur drastisch ab. Wesentliche Unterschiede sind dabei erst im letzten Millimeter vor der Oberfläche zu erkennen, also bei Temperaturen unter 5000K. Da der gleiche Oberflächendruck erreicht wird, ergibt sich direkt vor der Kupferprobe etwa die dreifache Teilchendichte wie vor der SiO₂ Oberfläche, was ungefähr dem reziproken Verhältnis der Translationstemperaturen entspricht. Die Moleküle werden durch Rekombination an der Oberfläche gebildet und von dort aus durch Diffusionsprozesse stromaufwärts transportiert. Bedingt durch die höhere Oberflächenkatalyzität von Kupfer ist dabei allerdings ein deutlicher Anstieg der Molanteile von molekularem Stickstoff und Sauerstoff zu erkennen. So ist die Teilchendichte von O₂ vor der Kupferoberfläche um einen Faktor 250 höher als vor SiO₂ und mehr als drei Größenordnungen höher als die vor SiC. Für N₂ und NO sind die Faktoren deutlich niedriger, was in der Temperaturabhängigkeit der Rekombinationskoeffizienten für SiC und SiO₂ begründet liegt, die für die verschiedenen Spezies bei jeweils anderen Oberflächentemperaturen Maxima aufweisen [36]. Die Modellierung für Kupfer erlaubt nur die Rekombination von O und N zu N₂ und O₂, nicht aber zu NO, das erst in der Gasphase durch Austauschreaktionen der Moleküle mit den Atomen aus der Anströmung gebildet wird. Für SiO₂ und SiC wird jedoch auch die Rekombination zu NO an der Oberfläche berücksichtigt, wodurch hier trotz der allgemein niedrigeren Oberflächenkatalyzität direkt vor der Oberfläche höhere Molanteile von NO erreicht werden können.

Neben den Teilchendichten sind insbesondere die Verläufe der verschiedenen Vibrationstemperaturen interessant. Vor der Kupferoberfläche steigt die Vibrationstemperatur von NO deutlich steiler an als die anderen Temperaturen und erreicht bei etwa 2 mm Abstand zur Oberfläche ein Maximum von 9600K. Dieser Anstieg deutet auf eine NO-Produktion durch Austauschreaktionen hin, bei denen NO in energetisch angeregten Zuständen produziert wird. Vor der SiO₂ und der SiC Oberfläche hingegen fällt die NO-Vibrationstemperatur an der Oberfläche erst gar nicht auf die Wandtemperatur ab sondern startet an der Oberfläche mit Werten über 700 K. Das liegt daran, dass bei diesen Oberflächen mit unvollständiger Energie-Akkomodation gerechnet wird, was bedeutet, dass ein Teil der bei der Rekombination an der Oberfläche freigesetzten Energie beim Molekül verbleibt und in den inneren Freiheitsgraden der Rotation und der Vibration gespeichert wird. Bei Kupfer hingegen werden Akkomodationsskoeffizienten von $\beta=1$ verwendet, die gesamte Rekombinationsenergie wird also an die Wand abgegeben und die Teilchen entstehen mit vollständig an den Oberflächenzustand angepasster Energie. Bei Messungen von Energieakkomodationskoeffizienten vor metallischen Oberflächen wurden jedoch für Kupfer bei 400K Werte von $\beta=0,3$ für O₂

ermittelt [73]. Dies lässt erwarten, dass auch vor der Kuperoberfläche mit höheren Vibrationstemperaturen gerechnet werden muss als die Simulation bisher vorhersagt.

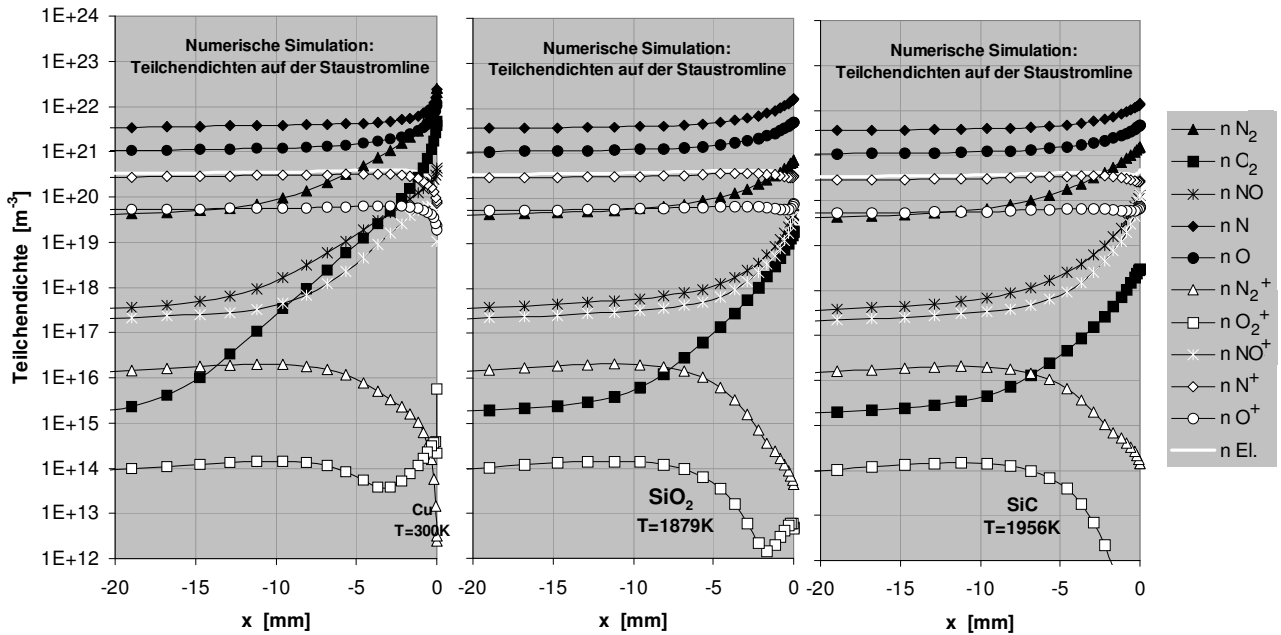


Abbildung 4.6: Numerisch berechnete Teilchendichten in der körpernahen Grenzschicht auf der Staustromlinie vor den verschiedene Oberflächen am NASDA-Testpunkt.

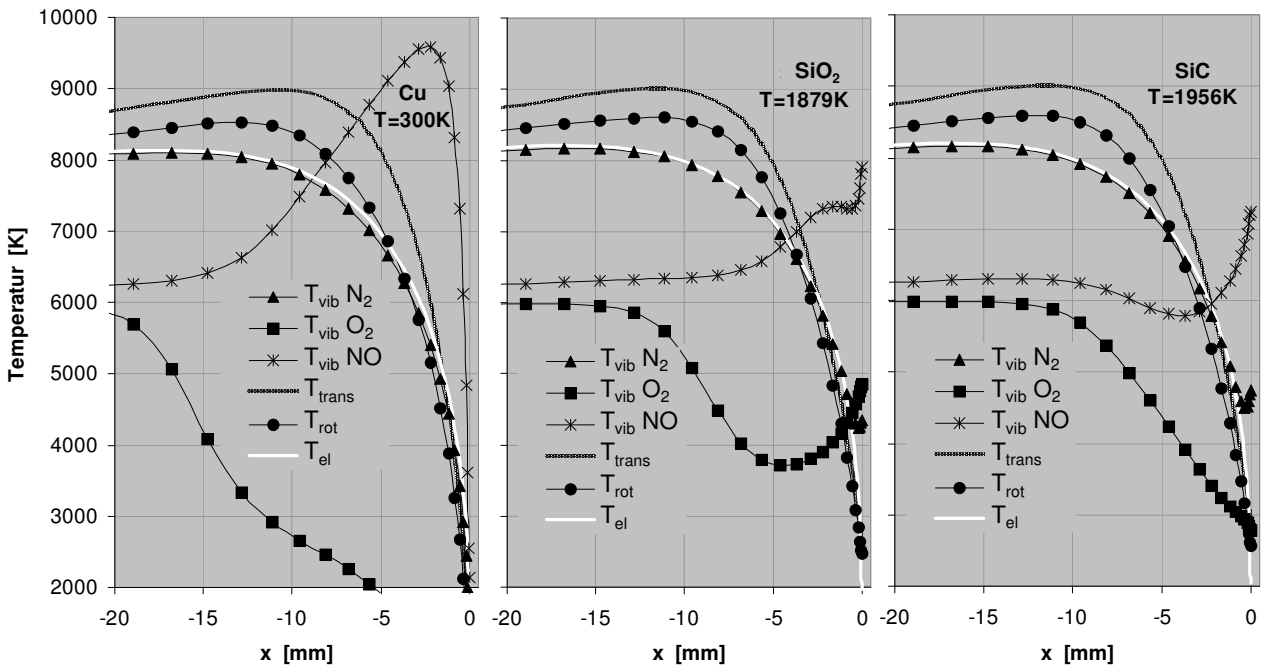


Abbildung 4.7: Numerisch berechnete Temperaturen in der körpernahen Grenzschicht auf der Staustromlinie vor den verschiedene Oberflächen am NASDA-Testpunkt.

4.3 Überblick über die spektrale Plasmaemission

Im den untersuchten Luft-Plasmen wird die spektrale Charakteristik im Bereich zwischen 200 nm und 1000 nm dominiert durch die Emission elektronisch angeregter Übergänge. Hierbei überlagert sich die Strahlung von O_2 und verschiedener Systeme von NO im Wellenlängenbereich zwischen 200 und 270 nm. Zwischen 270 nm und 450 nm kann verhältnismäßig schwache Strahlung von N_2 und starke Emission von N_2^+ beobachtet werden. Für größere Wellenlängen tritt hauptsächlich Molekülstrahlung von N_2 auf, die ab 745 nm von Atomlinien von atomarem Stickstoff und atomarem Sauerstoff überlagert wird. An den untersuchten Querschnitten spielt die Strahlung von Ionenlinien nur eine untergeordnete Rolle. Bei der Messung in der Grenzschicht vor einer Siliziumkarbid-Probe wird diese spektrale Charakteristik überlagert von der Strahlung von den Erosionsprodukten. Diese sind im Wesentlichen atomares Silizium, atomarer Kohlenstoff, CN, SiO, C_2 und CO. Abbildung 4.8 zeigt charakteristische Emissionsspektren im Bereich zwischen 200 nm und 800 nm vor einer gekühlten Kupferoberfläche und vor einer heißen SiC-Materialprobe bei 1700°C.

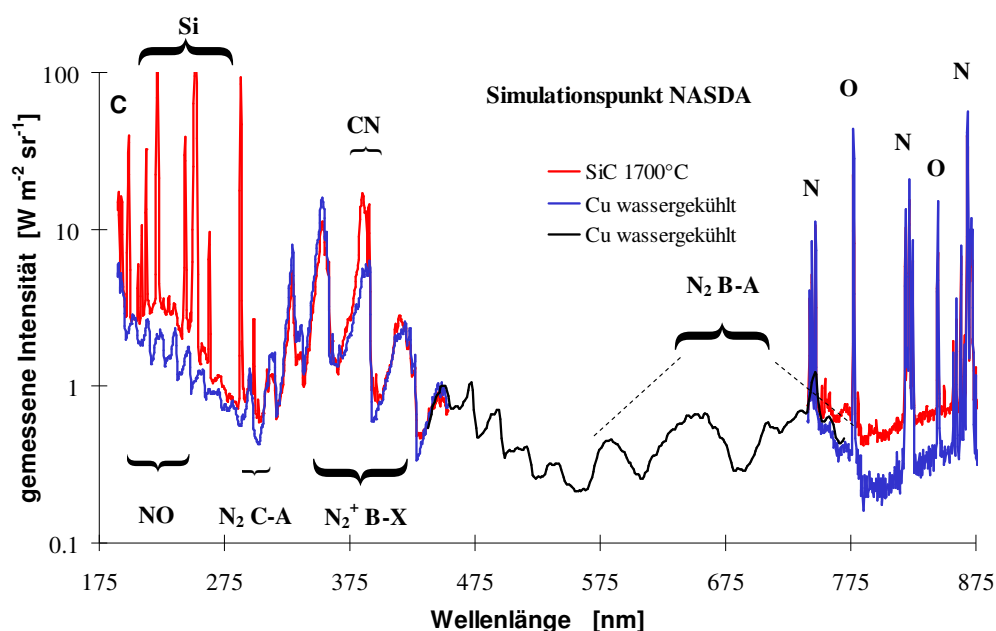


Abbildung 4.8: Typische Übersichtsspektren der untersuchten MPG-Plasmen vor einer wassergekühlten Kupferoberfläche und einer SiC-Materialprobe bei 1700 °C.

Zur Temperaturbestimmung wurden zwei verschiedene Wellenlängenbereiche im Ultraviolett (189 nm bis 397 nm und 289 nm 496 nm) und ein Bereich im nahen Infrarot zwischen 740 nm und 945 nm ausgewählt und in höherer spektraler Auflösung gemessen. Die Messungen im Ultraviolett dienen zur Bestimmung von Molekültemperaturen und -dichten durch einen Vergleich mit entsprechenden Simulationen der Molekülstrahlung. Im infraroten Wellenlängenintervall wird die Strahlung von atomarem Sauerstoff und Stickstoff zur Bestimmung der Anregungstemperaturen über einen Boltzmann-Plot detektiert.

4.4 Spektral hoch aufgelöste Molekülspektroskopie

Zur Unterstützung der Modellierung der einzelnen Luftmoleküle wurden spektral hoch aufgelöste Messungen an den Plasmawindkanälen durchgeführt. Dazu wurden sowohl Messungen mit einer CCD-Kamera wie auch mit einem Photomultiplier durchgeführt [123]. Für letztere Messungen wurde das Spektrometer als Monochromator im Scanning-Modus betrieben.

Zusätzlich zu den Plasmawindkanalmessungen wurden Messungen mit reinem Stickstoffmonoxid (NO) an einem Mikrowellengenerator durchgeführt, die zur Verifikation der spektralen Simulation der Molekülstrahlung herangezogen werden konnten [112, 110].

4.4.1 Messungen der Emission von N_2 und NO am Mikrowellengenerator

Ziel der Untersuchungen war nicht die möglichst genaue thermodynamische Charakterisierung des Mikrowellenplasmas (obwohl dies im Zusammenhang mit Untersuchungen mit Xenon in anderen Forschungsvorhaben [87, 100] durchgeführt wurde) sondern die Aufnahme von spektral möglichst hoch aufgelösten Einzelspektren zur Unterstützung der Modellierung. In erster Linie interessieren also die spektralen Positionen der Einzellinien und erst danach die Intensitätsverteilungen, weshalb auch auf eine detaillierte Temperaturbestimmung verzichtet und stattdessen nur eine grobe Abschätzung durchgeführt wurde. Trotzdem wurde eine Intensitätskalibrierung durchgeführt, auch wenn das schlechte Signal-Rausch-Verhältnis von ungefähr 2 deutlich auf die Unsicherheit dieser Kalibrierung hinweist. Weiterhin wurde ein für Xenon-Untersuchungen zur Vorbereitung der Plasmadiagnostik an Ionentriebwerken [9] aufgebauter Versuchsaufbau für Messungen mit elektrostatischen Sonden [86, 87] dazu verwendet, Elektronentemperaturen und -dichten zu ermitteln. Die daraus resultierenden Abschätzungen ergaben Elektronendichten im Bereich von 10^{13} m^{-3} und Elektronentemperaturen von etwa 20 000 K. Wie später gezeigt werden wird, liegen die Rotationstemperaturen, mit denen simulierte und gemessene Spektren zur Übereinstimmung gebracht werden können, deutlich niedriger, während plausible Vibrationstemperaturen zwischen diesen beiden Werten liegen. Zusätzlich wurden FPI-Messungen der 777 nm Linien von atomarem Sauerstoff zur Messung der Translationstemperatur an dem hier untersuchten NO Plasma durchgeführt, die einen Wert von etwa 2500 K ergaben. Der Plasmazustand weist also eine für Mikrowellenplasmen typische Nichtgleichgewichtssituation auf.

Bei den Untersuchungen zeigte sich, dass das Plasma durch die Emission von NO (hier hauptsächlich das γ -System) und N_2 dominiert wurde; nur schwache Beiträge von N_2^+ konnten gesehen werden. Die schon vorher erwähnte Wellenlängenbegrenzung bedingte hinsichtlich der Untersuchung von N_2 eine Beschränkung auf das $N_2 \text{ C} \rightarrow \text{B}$ System. Abbildung 4.9 zeigt ein Übersichtsspektrum in niedriger spektraler Auflösung und die dazugehörigen Daten in hoher spektraler Auflösung.

Bei Messungen in niedriger Auflösung mit einer CCD-Kamera lässt sich die Wellenlängenkalibrierung verhältnismäßig einfach durch ein Polynom 2. Ordnung unter Verwendung von drei Stützstellen durch die Messung einer Kalibrierlampe (typischerweise bekannte Linien einer Quecksilberdampfampe) bewerkstelligen. Bei der spektral hoch aufgelösten Messung gewinnt die Wellenlängenkalibrierung sowohl an Bedeutung wie auch an Schwierigkeit. Mit dem hier verwendeten Aufbau wurde in Vorversuchen die Stabilität der Verfahrensgeschwindigkeit des Monochromators kon-

trolliert, indem Mehrfachmessungen der Quecksilberdampfampe durchgeführt wurden. Es zeigte sich, dass die Verfahrensgeschwindigkeit eine befriedigende Genauigkeit aufweist, dass aber der Startpunkt trotz Triggerung durch die Kontrollsignale des Spektrometers merkliche Schwankungen zwischen verschiedenen Versuchen aufweist. Daher wurden die Wellenlängeninkremente pro Zeiteinheit aus diesen Vorversuchen bestimmt, während der spektrale Fixpunkt im gemessenen Spektrum durch eine bekannte Quecksilberlinie bei jeder Messung neu festgelegt wurde. Eine gleichzeitige Messung von Quecksilberlampe und Mikrowellenplasma erwies sich als nicht praktikabel. Deshalb wurde ebenfalls in Vorversuchen eine charakteristische Emissionslinie der Molekülstrahlung von N_2 durch eine Kreuzkalibrierung mit den Quecksilberlinien festgelegt, deren Wellenlänge durch diese Messung bekannt war. In den folgenden Plasma-Messungen wurde diese Linie als Wellenlängenfixpunkt verwendet.

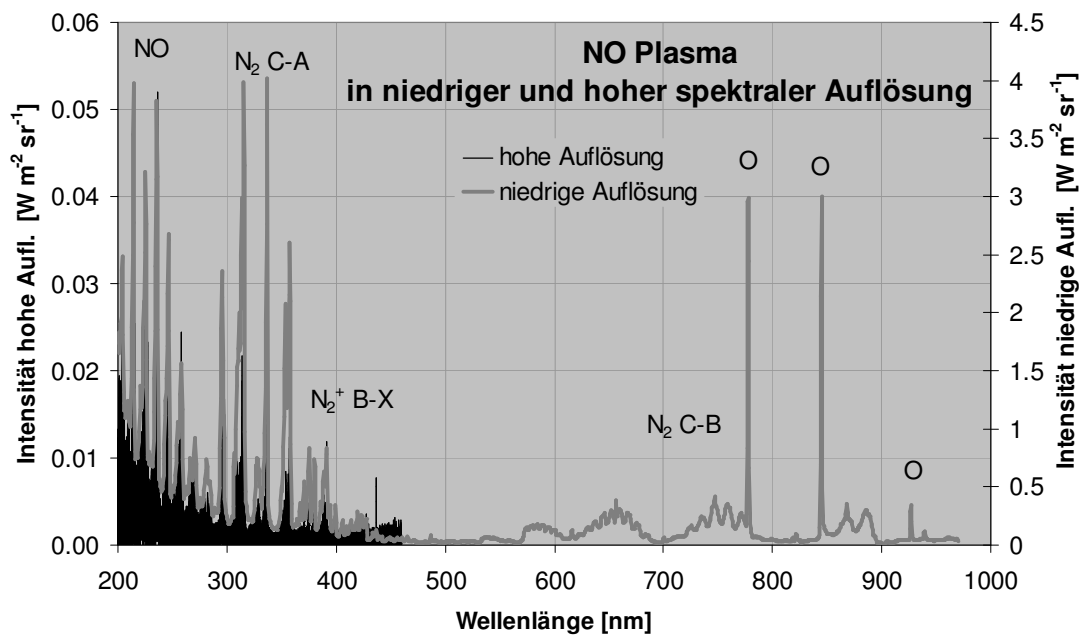


Abbildung 4.9: Gemessene Emissionsspektren in einem Mikrowellen generierten NO-Plasma in verschiedener spektraler Auflösung.

Auf diese Weise konnte eine Wellenlängenkalibrierung der gemessenen Spektren auf Luftwellenlängen erreicht werden. Diese Wellenlängenkalibrierung ist allerdings noch durch den Brechungsindex von Luft über

$$\lambda_{\text{Vakuum}} = \lambda_{\text{Luft}} n_{\text{Luft}} \quad (59)$$

beeinflusst. Aus der vorher beschriebenen Simulation der Molekülstrahlung ergeben sich jedoch Vakuumwellenlängen. Prinzipiell können diese Wellenlängen natürlich in Luftwellenlängen umgerechnet werden, aber für die beabsichtigten Vergleiche zwischen Simulation und Experiment schien es zur Erleichterung des Vergleichs zweckmäßig, stattdessen die gemessenen Wellenlängen in Vakuumwellenlängen umzurechnen. Grundsätzlich ist der spektrale Brechungsindex von Luft stark abhängig von verschiedenen Einflussfaktoren wie Luftdruck, Wasserdampfgehalt, CO_2 Gehalt und Temperatur, die in den durchgeführten Versuchen nicht mit hinreichender Genauigkeit bestimmt werden konnten. Durch die verwendeten Kalibrierwellenlängen wurde den Versuchsda-

ten jedoch statt des unter realen Messbedingungen herrschenden Brechungsindex ein den tabellierten Werte zugrunde liegender Wert aufgeprägt. Für die Umrechnung genügt es also, diesen Standardbrechungsindex zu verwenden. Der spektrale Brechungsindex ergibt sich nach [67] zu:

$$n(\lambda) = 1 + \frac{0,05791817}{238,0185 - \left(\frac{1000}{\lambda}\right)^2} + \frac{0,00167909}{57,362 - \left(\frac{1000}{\lambda}\right)^2} \quad (60)$$

mit λ in [nm].

Eine Bewertung der Modellierung kann jetzt durch einen Vergleich der gemessenen Spektren mit der spektralen Simulation erfolgen. Generell sind in den gemessenen Spektren vorwiegend niedrige Vibrationszustände angeregt, was durch die auf 300 W begrenzte Leistung des Mikrowellengenerators und die daraus resultierenden, ebenfalls niedrigen Elektronendichten begründet wird, die aus Messungen mit elektrostatischen Sonden zu nur etwa 10^{13} m^{-3} abgeschätzt wurden. Die stärksten Banden gehen daher von Vibrationsquantenzahlen 0 aus. Im Wesentlichen konnten das N_2 C-B System und das NO_γ System in hinreichender Stärke detektiert werden, um einen sinnvollen Vergleich mit der Simulation durchzuführen. Im Folgenden werden Vergleiche zwischen Simulation und Experiment für ausgewählte Übergänge präsentiert.

N_2 C \rightarrow B: Vergleich zwischen Simulation und Messung:

Die Modellierung dieses Systems in EMCAL wurde schon in Kapitel 2.2 beschrieben. Generell besteht zwischen Messung und Simulation exzellente qualitative Übereinstimmung der Rotations- und Vibrationsstruktur, wie die Vergleiche des 0-0 Übergangs und der verschiedenen Banden der $\Delta v=1$ Übergänge in Abbildung 4.10 demonstrieren. Die Triplet-Struktur der drei Hauptzweige ist in der Messung deutlich zu erkennen und wird in der Simulation korrekt wiedergegeben. Für höhere Rotationsquantenzahlen ergibt sich eine leichte Verschiebung der Simulation zu niedrigeren Wellenlängen hin, also eine leichte Überschätzung der Übergangsenergie.

Um die Spektren in Übereinstimmung zu bringen, mussten die simulierten Spektren in der Wellenlänge verschoben werden. Ein ähnliches Verhalten kann auch für die NO Emission erkannt werden, wie später noch gezeigt wird. Dass die ermittelten Verschiebungen für N_2 und NO unterschiedliche Vorzeichen aufweisen, deutet darauf hin, dass der Fehler tatsächlich in der Simulation und nicht in der Messung zu suchen ist. Für alle N_2 -Banden ist eine Verschiebung zu kleineren Wellenlängen nötig, was als Indiz für eine zu niedrige Energiedifferenz der betrachteten Übergänge gewertet werden muss. Eine Umrechnung der Wellenlängenverschiebungen in Energieeinheiten zeigt, dass eine Übereinstimmung im gesamten Wellenlängenbereich durch ein konstantes Energieinkrement von etwa 18 cm^{-1} erreicht werden kann, was auf leicht falsche Termwerte für die elektronischen Anregungsenergie hindeutet. Ob das obere oder das untere Niveau (oder eventuell beide) betroffen ist, kann nur durch Vergleich mit anderen strahlenden Systemen, wie z.B. dem noch nicht gemessenen N_2 B \rightarrow A System bestimmt werden.

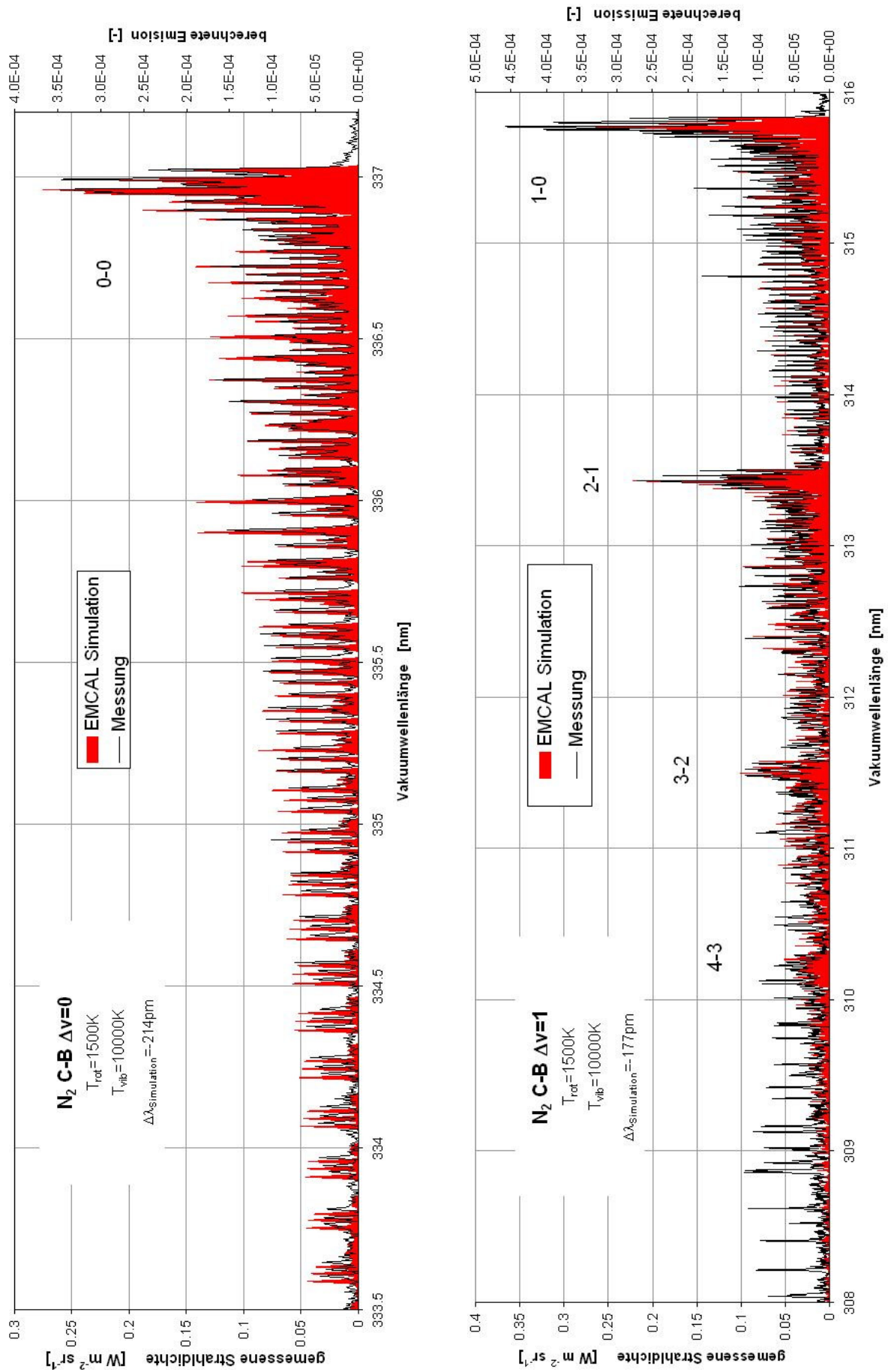


Abbildung 4.10: Theoretisch simulierte und gemessene Strahlung des N_2 C-B Systems für die Vibrationsübergänge 0-0 und $\Delta v=1$ in hoher spektraler Auflösung.

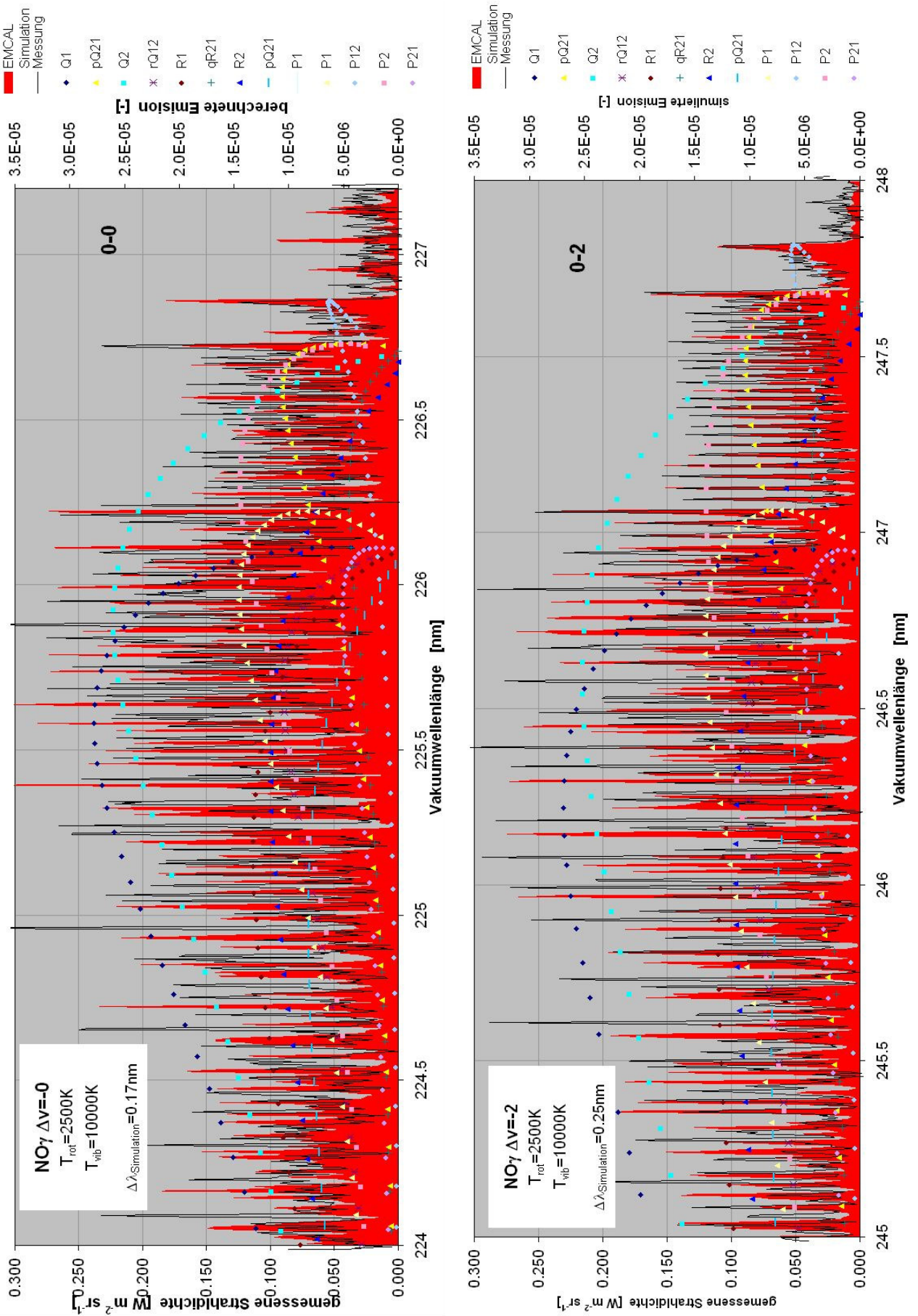


Abbildung 4.11: Theoretisch simulierte und gemessene Strahlung des NO γ -Systems für die Vibrationsübergänge 0-0 und 0-2 in hoher spektraler Auflösung.

NO γ : Vergleich zwischen Simulation und Messung:

Auch für NO ergibt sich eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation, jedoch stimmt die Rotationsstruktur nicht komplett überein. Auch für NO muss eine Wellenlängenverschiebung aufgeprägt werden, um die Spektren in Übereinstimmung zu bringen, die jedoch generell positiv ist. Die angegebenen Wellenlängeninkremente wurden über die Bandenköpfe bestimmt und entsprechen Energieinkrementen in der Größenordnung von etwa 38 cm^{-1} , die jedoch für die verschiedenen Banden nicht konstant sind. Dieses Verhalten deutet darauf hin, dass wahrscheinlich Korrekturen für die elektronischen Termenergien nötig sind, aber auch Unstimmigkeiten in der Modellierung auftreten. Die Rotationslinien können jeweils durch eine weitere Wellenlängenverschiebung zu niedrigeren Wellenlängen hin in Übereinstimmung gebracht werden, was einer Erhöhung der Energiedifferenz mit steigender Rotationsquantenzahl entspricht. Obwohl diese Informationen Hinweise für die nötigen Änderungen in der Modellierung geben, können aufgrund der Komplexität noch keine schlüssigen Modifikationen vorgeschlagen werden. Die unterschiedlich gute Übereinstimmung für gleiche obere aber unterschiedliche untere Niveaus, die in Abbildung 4.11 zu erkennen ist, deutet jedoch auf Probleme im unteren Niveau $X^2\Pi$ hin. Über Unstimmigkeiten in der generellen Modellierung hinaus werden z.B. in [19] aber auch Störungen durch Überschneidungen mit anderen Energieniveaus berichtet, deren Berücksichtigung eine getrennte Modellierung der einzelnen Vibrationsniveaus erfordern würde.

4.4.2 Messungen der Emission von N_2^+

In Plasmawindkanalmessungen wurden spektral hoch aufgelöste Messungen der Strahlung von N_2^+ durchgeführt [116, 48]. Für diesen Aufbau wurde ein SPEX 1000 Spektrometer mit einer Brennweite von 1m, einem 1200 Striche/mm Beugungsgitter und der schon beschriebenen CCD-Kamera verwendet. Dabei wurde das Gitter in zweiter Ordnung betrieben, wodurch eine Pixelauflösung von etwa 7 pm erreicht werden konnte. Da die Wellenlängenjustage des Spektrometers über einen Analogmotor erreicht wird und in dem betrachteten Wellenlängenbereich nicht ausreichend viele bekannte Atomlinien zur Verfügung standen, konnte keine hinreichend genaue Wellenlängenkalibrierung durchgeführt werden. Deshalb wurden die simulierten Wellenlängen der N_2^+ Rotationslinien zur Wellenlängenkalibrierung verwendet. Die spektrale Übereinstimmung auf der Wellenlängenchse im in Abbildung 4.12 dargestellten Vergleich zwischen Simulation und Messung ist demzufolge durch die Wellenlängenkalibrierung bedingt und kann nicht zur Überprüfung der Modellierung herangezogen werden. Hauptziel dieser Messungen war allerdings eine Bestimmung der Rotationstemperatur aus Boltzmann-Plots über die einzelnen Rotationslinien. Die ausgewählten Linien sind in Abbildung 4.12 durch Pfeile gekennzeichnet. Neben der Rotationstemperatur selbst war das wesentliche Ergebnis dieser Untersuchung eine Überprüfung der Gültigkeit der Boltzmann Verteilung für die Rotationsenergie, die durch die gute Übereinstimmung der Ausgleichsgerade mit den gemessenen Linienintensitäten in Abbildung 4.13 nachgewiesen werden konnte. Für die beabsichtigten Untersuchungen der Grenzschicht war jedoch der experimentelle und zeitliche Aufwand zu hoch. Stattdessen wurde das oben schon beschriebene Verfahren zur gleichzeitigen Ermittlung von Rotations- und Vibrationstemperatur entwickelt. Die Übereinstimmung der aus den beiden verschiedenen Verfahren resultierenden Temperaturen wurde als Validierung des neuen Verfahrens angesehen.

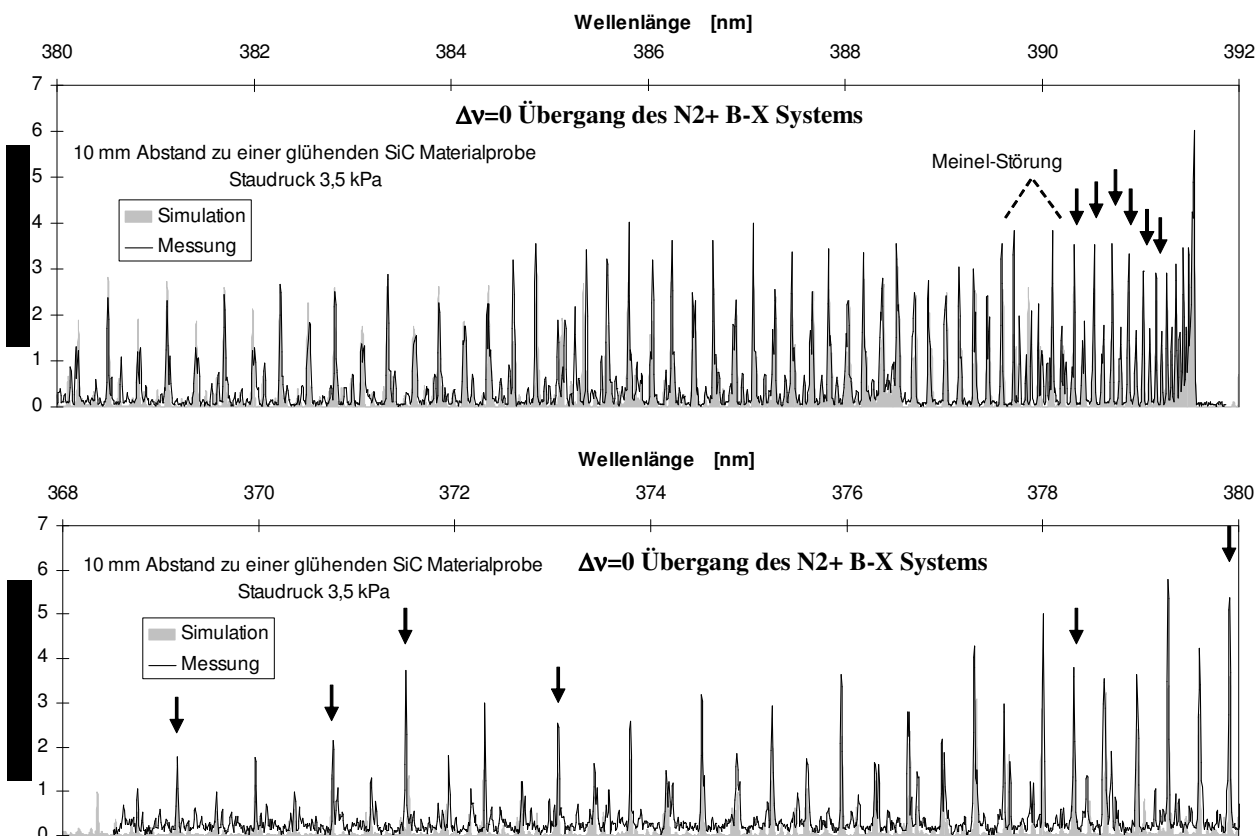


Abbildung 4.12: Theoretisch simulierte und gemessene Strahlung des N_2^+ B-X-Systems für die Vibrationsübergänge mit $\Delta v=0$ in hoher spektraler Auflösung.

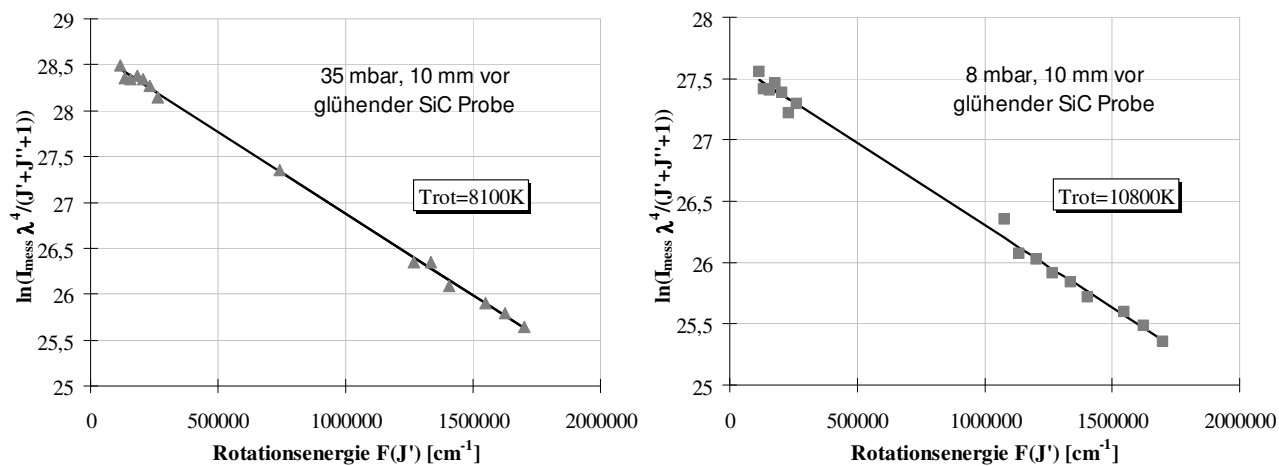


Abbildung 4.13: Boltzmann Plots über verschiedene Rotationslinien des 0-0 Übergangs des N_2^+ B-X-Systems für Staudrücke von 8 hPa und 35 hPa gemessen 10 mm vor einer glühenden SiC Materialprobe.

4.5 Untersuchung hochfrequenter Schwankungen

Bei den untersuchten Plasmen wurden Schwankungen des gesamten Plasmastrahls im Kilohertzbereich beobachtet [98]. Eine erste Untersuchung dieser Fluktuationen erfolgte durch Filmaufnahmen des Plasmastrahls an der untersuchten Probenposition mit einer Hochgeschwindigkeitskamera mit einer Bildwiederholungsfrequenz von 5 000 Bildern/s. Abbildung 4.14 verdeutlicht den Prozess an Hand von zwei Einzelbildern dieser Filmaufnahmen, in denen der Plasmastrahl eine extreme Verformung zeigt.

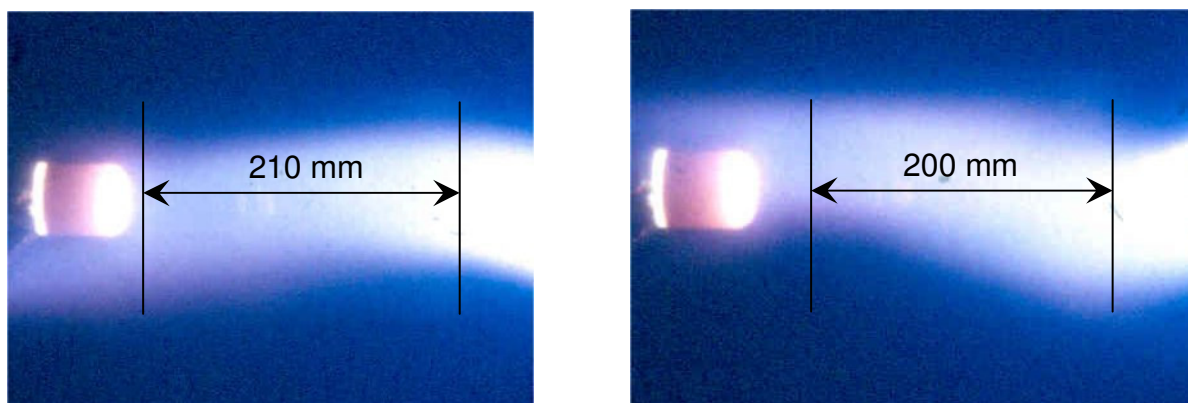


Abbildung 4.14: Einzelbilder einer mit einer Hochgeschwindigkeitskamera aufgenommenen Filmsequenz des Plasmastrahls.

Die Schwankungen des Plasmakernstrahls sind deutlich an der Veränderung der Strahlform zu erkennen und liegen in ihrer Amplitude in der Größenordnung des Strahldurchmessers. Zwischen den Einzelbildern des gesamten Films ist allerdings keine kontinuierliche Änderung der Strahlform erkennbar. Schwingungen mit deutlich höherer Frequenz als durch die Belichtungszeit einer Einzelaufnahme festgelegt, würden jedoch nicht als erkennbare Struktur sondern als integriertes Strahlprofil erscheinen. Daraus folgt, dass die Schwankungen entweder stochastisch verteilt sind, oder dass eine Schwingung vorliegt, deren Frequenz in der Größenordnung der Bildwiederholungsfrequenz von 5 kHz liegt. Unter der Annahme einer Schwingung des Plasmastrahls mit konstanter Frequenz lässt sich eine Abschätzung auch anhand der oben gezeigten Einzelbilder vornehmen. Wenn sich die in den Bildern erkennbare Struktur mit der Strömung zur Probe hin bewegt, die in den beiden gezeigten Bildern jeweils eine Extremposition der Plasmastrahlauslenkung erfährt, kann die Schwingungsdauer über die Distanz der Maxima in Kombination mit der Strömungsgeschwindigkeit abgeschätzt werden. Unter Annahme einer mittleren Strömungsgeschwindigkeit von 2 km/s ergibt sich aus der deformierten Strahlform eine Oszillationsfrequenz von etwa 5 kHz.

Grundsätzlich lässt sich eine Schwankung der gemessenen Strahlung durch verschiedene Effekte erklären, da die Emission der betrachteten Plasmen von der Teilchendichte der strahlenden Spezies, der Plasmatemperatur und, unter Annahme von Anregung durch Elektronenstößen als dominierende Ursache der elektronischen Anregung, von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur abhängt. Die Lebenszeiten der angeregten Niveaus liegen in den betrachteten Plasmen in der Größenordnung von 10^{-8} Sekunden, die Plasmageschwindigkeit etwa bei 2 km/s. Während der Lebensdauer der angeregten Zustände bewegt sich das Plasma also um etwa $2 \cdot 10^{-2}$ mm fort, die Anregung

der strahlenden Niveaus muss also an der Stelle der Beobachtung der Strahlung erfolgen. Selbst bei Abweichungen von diesen Annahmen um zwei Größenordnungen müssen die Anregungsprozesse, die schlussendlich zur detektierten Strahlung führen, also in einem Bereich von weniger als einem Millimeter vor der gemessenen Position erfolgen. Die detektierte Strahlung charakterisiert den örtlichen Plasmazustand also in einer transienten Art und Weise und Verschleppungsprozesse, wie z.B. im Falle der chemischen Reaktionen durch eine eingefrorene Strömung, können die Messung nicht beeinflussen.

Um genauere Informationen zu erhalten, wurden zeitlich aufgelöste Emissionsspektren herangezogen, die sehr niedrige Belichtungszeiten der Einzelbilder erlauben, jedoch eine stark begrenzte Wiederholfrequenz aufweisen. Für die Klärung der Frage, ob es sich um eine definierte Schwingung oder nur um stochastische Schwankungen handelt, wurden Messungen mit elektrostatischen Sonden herangezogen. Da im Allgemeinen von einer Anregung der strahlenden elektronischen Niveaus von Atomen und Molekülen durch Elektronenstöße ausgegangen werden kann, müssen sich die Oszillationen ebenfalls in der Elektronendichte niederschlagen.

4.5.1 Zeitaufgelöste Emissionsspektroskopie

Zur Zeitaufgelösten Messung von Emissionsspektren wurde eine Intensitätsverstärkte CCD-Kamera eingesetzt, die mit etwa 1 Hz zwar keine hohe Bildwiederholrate hat, aber Momentaufnahmen mit einer Belichtungszeit bis in den Nanosekunden-Bereich erlaubt. Deshalb können die Frequenzuntersuchungen nur durch eine Betrachtung vieler Einzelmessungen erfolgen, von denen Serien mit unterschiedlichen Belichtungszeiten durchgeführt wurden. Ob die zeitliche Charakteristik der Schwankungen einer definierten Schwingung folgt oder nur statistisch verteilt ist, kann mit dieser Art der Messung nicht geklärt werden. Für die Untersuchungen wurde der Versuchsaufbau zur Messung in grober örtlicher Auflösung verwendet, der die Aufnahme eines ganzen radialen Profils zur gleichen Zeit ermöglicht. Die Frequenzinformationen ergeben sich aus der Veränderung der Profilform bei verschiedenen Momentaufnahmen mit der gleichen Belichtungszeit. Hierbei wurde die Belichtungszeit zwischen 1 μ s und 100 ms variiert. Wenn eine Sinusschwingung vorliegt, so ist die minimal nötige Abtastfrequenz nach dem Nyquist-Shannon'schen Abtasttheorem gerade doppelt so hoch wie die Schwingungsfrequenz der höchsten beteiligten Sinusschwingung [77, 101]. Aus den vorliegenden Messungen lassen sich also im günstigsten Fall Aussagen bis hin zu Maximalfrequenzen von 500 kHz treffen. Gerade bei den niedrigsten Belichtungszeiten ergaben sich hierbei sehr geringe Intensitäten. Um trotzdem verlässliche Aussagen über die Profilform zu ermöglichen, wurde die Emission der einzelnen Spezies spektral integriert, wodurch jedoch die Temperaturinformation verloren geht. Hierbei bietet sich als dominante Emission die Strahlung von N_2^+ an, die gleichen Informationen liegen jedoch auch für die NO-Strahlung vor. Mit Einschränkungen bezüglich der verschiedenen Detektionszeiten aufgrund der verminderten Empfindlichkeit der Kamera im infraroten Spektralbereich wurden auch Daten für die Atomstrahlung aufgenommen. Zudem weist die integrierte NO-Emission sehr viel breitere Profile auf, was darauf hinweist, dass die NO-Strahlung eher aus den Randbereichen des Plasmastrahls stammt.

Die integrierte Emission von N_2^+ im Freistrahler wurde bei Belichtungszeiten zwischen 1 μ s und 10 ms aufgenommen. Um eine statistische Aussage zu ermöglichen, wurden für Belichtungszeiten

unterhalb 1 ms jeweils 100 Profile aufgenommen. Ab 1 ms zeigen sich nur noch reduzierte Oszillationen und die Anzahl der aufgenommenen Profile konnte auf 20 begrenzt werden. Ab 10 ms ergeben sich einheitliche Strahlprofile. Die gemittelten Profile bei den niedrigen Belichtungszeiten stimmen sehr gut mit den längeren Belichtungszeiten überein, wodurch die Annahme einer ausreichenden Anzahl von Einzelmessungen gerechtfertigt scheint. In Abbildung 4.15 sind die Strahlprofile der integrierten Molekülemission von N_2^+ für Belichtungszeiten bis zu 1 ms sowie als grau unterlegte Fläche das gemittelte Profil dargestellt.

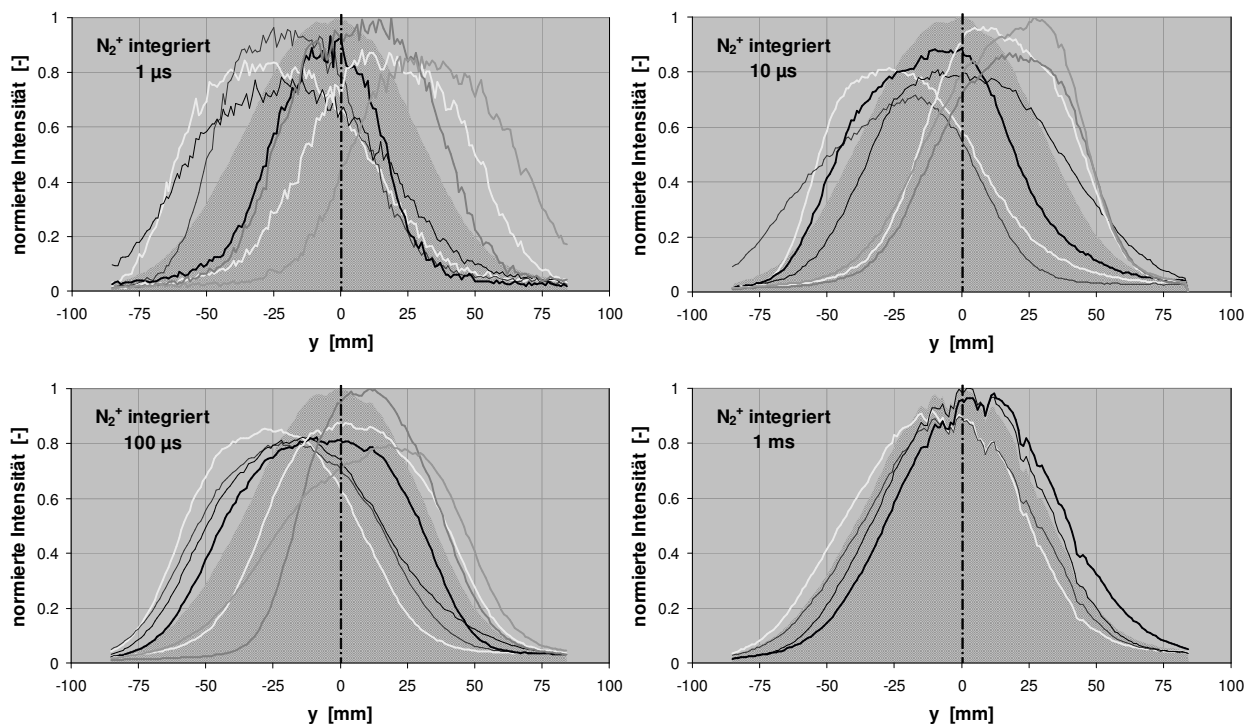


Abbildung 4.15: Profilform der integrierten N_2^+ Emission bei verschiedenen Belichtungszeiten.

Mit der Belichtungszeit steigt auch die mittlere Halbwertsbreite der Profile von 69 mm auf 74 mm an. Die Variation der Einzelprofile sowohl bezüglich der Position des Maximums als auch der Halbwertsbreite ist jedoch deutlich größer für Belichtungszeiten zwischen 1 μ s und 100 μ s.

Zur weiteren Interpretation der Oszillationen wird vorerst eine regelmäßige Fluktuation durch ein Umlaufen eines schmalen Profils um die Plasmastrahlachse mit einer definierten Kreisfrequenz postuliert. Die gemessenen Profile bei einer Belichtungszeit von 1 μ s sind im Wesentlichen symmetrisch, was darauf hindeutet, dass eine mögliche Rotation eines Kernstrahlprofils bei deutlich niedrigeren Frequenzen als 500 kHz stattfindet. Auch die Strahlprofile bei 1 ms und mehr weisen keine Unsymmetrien auf, weil hinreichend oft über eine solche Schwingung aufsummiert wird. Bei einer Belichtungszeit von 10 μ s lassen sich unsymmetrische Strahlprofile erkennen, die in abgeschwächter Form auch bei 100 μ s auftreten. Diese Profile finden sich auch in einer theoretischen Simulation des rotierenden Profils wieder, wenn das Verhältnis von Messzeit zu Umlaufzeit kleiner 2 ist. Darüber hinaus ergibt sich aus diesen Simulationen, dass bei einer regelmäßigen Umlauffrequenz eines schmalen Kernprofils die breitesten Profile in der Mitte erwartet werden müssen (hier überstreicht das Kernprofil vom Beobachter aus gesehen in kurzer Zeit einen großen Bereich), während die schmalsten Profile in den Randbereichen auftreten (hier findet die Bewegung haupt-

sächlich in Richtung der Beobachtungsachse statt). Diese Erwartung wird durch die gemessenen Profile nicht bestätigt. Tatsächlich variiert die mittlere Halbwertsbreite der Profile nur unwesentlich mit der radialen Position des Maximums. Darüber hinaus treten die schmalsten Profile in der Strahlmitte auf, die Trendlinie weist sogar ein leichtes Ansteigen der Halbwertsbreite zum Rand hin auf. Abbildung 4.16 illustriert dieses Verhalten für die Messungen mit einer Belichtungszeit von $1\mu\text{s}$. Zusätzlich gibt die Balkendarstellung die Anzahl der Profile mit dem Maximum auf dem korrespondierenden Radius an. Die Simulation eines um die Achse rotierenden Profils ergibt hier Häufungen in den Randbereichen und einen Minimalwert auf der Strahlachse, während die Messungen eine Häufung in der Strahlmitte zeigen. Diese Tendenzen zeigen sich auch in den Messwerten bei $10\mu\text{s}$ und $100\mu\text{s}$ Belichtungszeit.

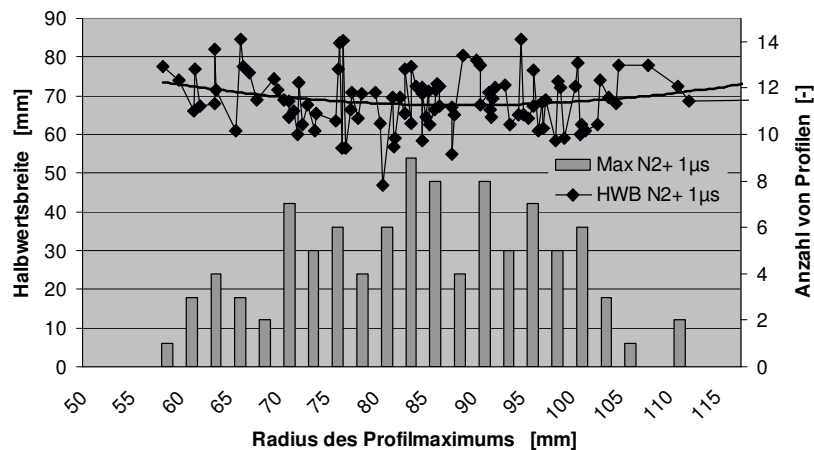


Abbildung 4.16: Halbwertsbreiten und Anzahl von Profilen aufgetragen über dem Radius des Profilmaximums für die integrierte Emission von N_2^+ bei einer Belichtungszeit von $1\mu\text{s}$.

Analoge Messungen der Atomstrahlung zeigen mit der N_2^+ Emission übereinstimmende Ergebnisse. In Abb. 4.17 sind Strahlprofile für atomaren Stickstoff und Sauerstoff bei einer Belichtungszeit von $500\mu\text{s}$ (durchgezogene Linien) sowie das Langzeitprofil bei 100ms (graue Fläche) dargestellt.

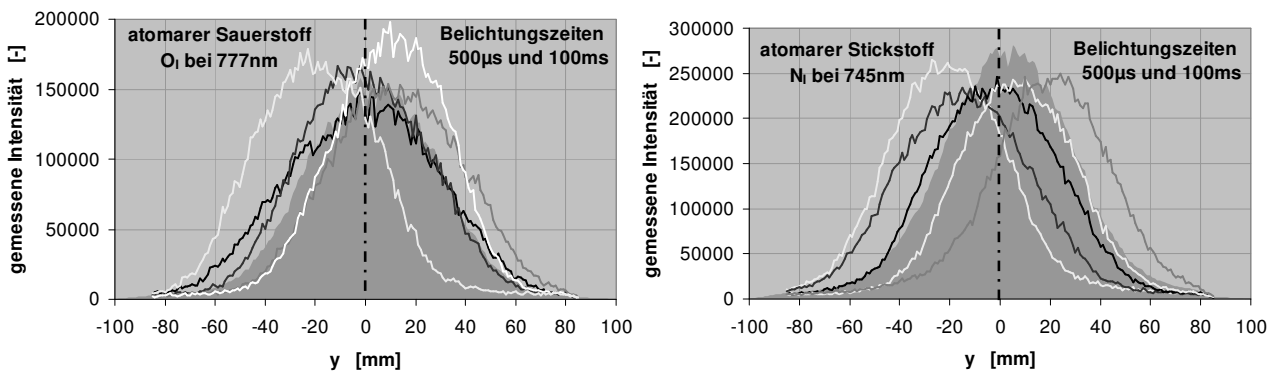


Abbildung 4.17: Profilform der Emission von atomarem Sauerstoff und Stickstoff bei Belichtungszeiten von $500\mu\text{s}$ und 100ms .

Es kann also anscheinend nicht davon ausgegangen werden, dass es sich bei den beobachteten Oszillationen um eine stabile Kreisbewegung eines schmalen Kernprofils um die Plasmastrahlachse handelt. Die symmetrischen Profile bei $1\mu\text{s}$ im Gegensatz zu den teilweise unsymmetrischen Formen bei $10\mu\text{s}$ weisen jedoch darauf hin, dass zumindest für begrenzte Zeiträume solche Bewegungen des Plasmastrahls stattfinden. Die unterschiedlich breiten Profile bei $1\mu\text{s}$ können zwar durch

ein zeitlich nicht konstantes Strahlprofil erklärt werden, aber auch ein zeitlich konstantes, schmales Strahlprofil, dessen Bewegungsrichtung nicht aus einer Rotation sondern hauptsächlich aus radial verlaufenden „Sprüngen“ besteht, würde die beobachteten Effekte bewirken. Diese Interpretation würde auch die schmalen Profile in der Strahlmitte erklären, die durch ein Profil erzeugt würden, das sich in Beobachtungsrichtung bewegt und deshalb während der Beobachtungszeit nicht verbreitert wird. Die maximale Bewegungsgeschwindigkeit ergäbe sich dann aus den breitesten Profilen mit den höchsten Halbwertsbreiten. Wenn das schmalste Profil aus Abbildung 4.15 für $1 \mu\text{s}$ als „wahres“ Profil interpretiert wird, ergibt sich aus den breitesten Profilen eine Bewegung von etwa 25 mm bis 35 mm innerhalb der Messzeit von $1 \mu\text{s}$ und somit eine Bewegungsgeschwindigkeiten von 25 km/s bis 35 km/s bei einer Bewegung des Strahlprofils senkrecht zur Beobachtungsachse. Alle Profildauern zwischen diesen Extremwerten entstünden dann aus Bewegungen unter unterschiedlichen Winkeln zur Beobachtungsachse.

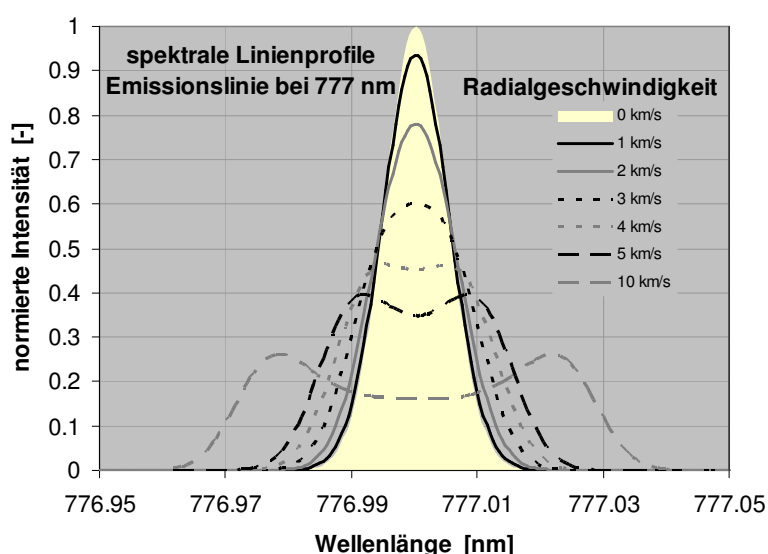


Abbildung 4.18: Doppler-verbreiterte spektrale Linienprofile einer Emissionslinie bei 777 nm für verschiedene Radialgeschwindigkeiten, ausgehend von einem Gaußprofil mit einer Halbwertsbreite von 0,011 nm.

Eine Überprüfung dieser Interpretation bietet sich über die Untersuchungen der spektralen Verbreiterung der Emissionslinien an. Die Betrachtung kann analog zum Einfluss der radialen Geschwindigkeit des Plasmastrahls erfolgen, wie schon in Kapitel 2.3 ausgeführt. Die Bewegung der zeitlich aufgelösten Profile muss eine Doppler-Verschiebung bewirken, geht also anstelle der in Kapitel 2.3 berücksichtigten Radialgeschwindigkeit in die Berechnung ein. Zur Vereinfachung wird der Begriff „Radialgeschwindigkeit“ in dieser Betrachtung beibehalten. Der wesentliche Unterschied ist jedoch, dass sich jetzt das gesamte Profil mit einer als konstant angenommenen Geschwindigkeit bewegt und die in Abbildung 2.21 beschriebene örtliche Diskretisierung entfallen kann. Die resultierende Profilform wurde abgeschätzt, indem für jeden Winkel β zwischen 0° und 180° in Schritten von 1° ein Doppler-verschobenes Profil berechnet wurde. Die Summe über den gesamten Winkelbereich ergibt resultierende Profile die für unterschiedliche Radialgeschwindigkeiten in Abbildung 4.18 für eine Emissionslinie bei 777 nm dargestellt sind. Als spektrale Breite des unverschobenen Profils ($\beta=90^\circ$) wurde hierbei eine Halbwertsbreite von 0,011 nm verwendet, die einer Temperatur von etwa 6000 K entspricht. Für kleine Radialgeschwindigkeiten ergeben sich verbreiterte

Linienprofile, aber ab einer Geschwindigkeit von etwa 4 km/s weisen diese Profile die auch schon in Kapitel 2.3 beschriebene Trennung der Emissionslinie in zwei lokale Maxima auf. Für die oben bestimmten Geschwindigkeiten müsste eine sehr deutliche Trennung der Emissionslinien in Doppellinien erfolgen, die in den Fabry-Perot-Untersuchungen aber nicht beobachtet werden konnte. Diese Betrachtung zeigt daher, dass die oben abgeleiteten Geschwindigkeiten um etwa eine Größenordnung zu hoch sein müssen oder dass sich die beobachteten Schwankungen nicht in einer Bewegung der Schwerteilchen (und somit auch nicht in einer Doppler-Verschiebung) sondern nur der Elektronen ausdrücken.

Aus den Freistrahlundorschungen konnte also keine geschlossene Modellierung abgeleitet werden, die unter Voraussetzung eines zeitlich aufgelösten Basisprofils und einer konstanten Umlauffrequenz die Nachbildung des zeitlich integrierten Profils erlaubt. Leider können also auch keine Angaben zur Abschätzung des Einflusses dieser Instabilitäten auf die aus den FPI-Messungen bestimmten Translationstemperaturen bestimmt werden.

Zusätzlich zu den Messungen im Freistrahle wurde untersucht, inwiefern sich die beobachteten Schwankungen in der Grenzschicht auswirken. Dazu wurden die gleichen Untersuchungen wie im Freistrahle an unterschiedlichen Abständen zu einer wassergekühlten Kupfersonde durchgeführt. Auch hier ergibt sich für Integrationszeiten im Millisekundenbereich eine konstante Profilform. Die Kurzzeitmessungen zeigen jedoch, dass sich die Schwankungen über die Grenzschicht hinweg bis zur Probenoberfläche hin fortpflanzen. Über die Grenzschicht hinweg kann im Vergleich zu den Freistrahlundorschungen keine Glättung der Profile erkannt werden, nahe der Oberfläche treten deutlich gestiegene Schwankungen in der Profilamplitude auf. Abb. 4.19 zeigt ausgewählte Profilformen für atomaren Sauerstoff in Abständen von 1, 2, 3 und 4 mm Abstand zur Kupferoberfläche bei einer Belichtungszeit von 50 μ s.

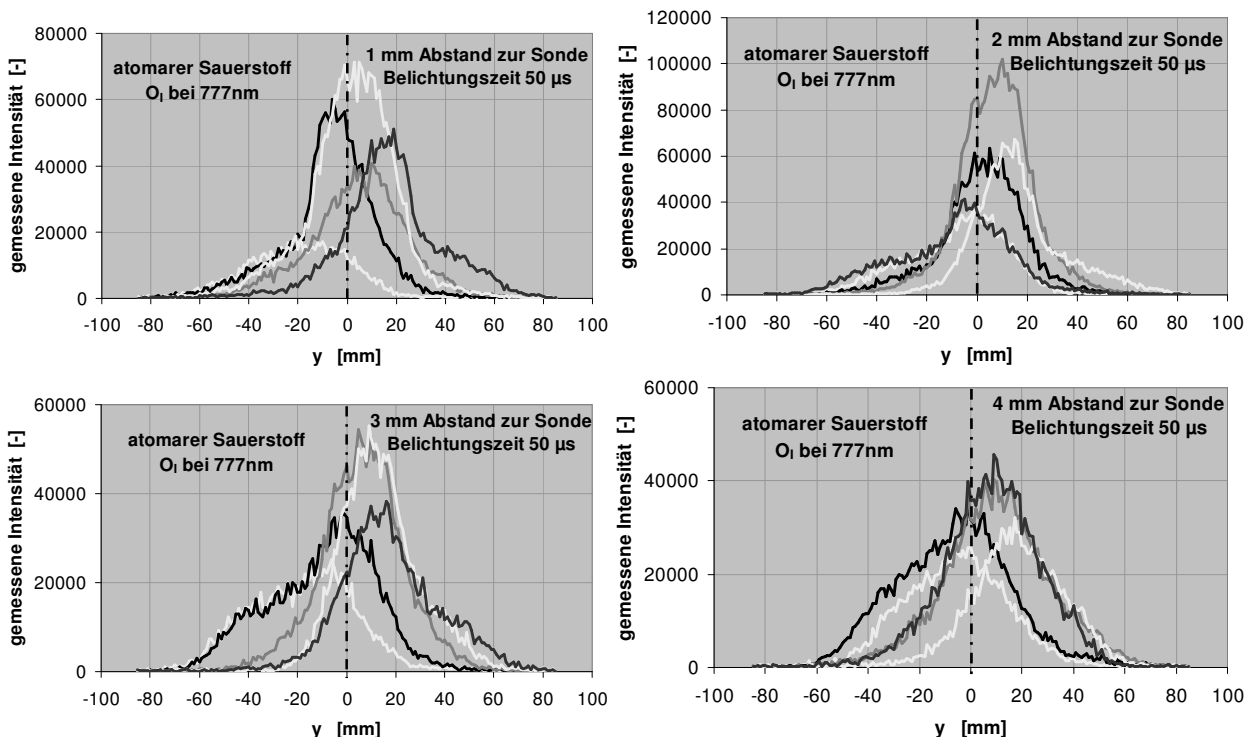


Abbildung 4.19: Profilform der Emission von atomarem Sauerstoff bei einer Belichtungszeit von 50 μ s in verschiedenen Abständen zu einer gekühlten Kupferoberfläche.

4.5.2 Frequenzuntersuchungen der Messungen mit elektrostatischen Sonden

Unter den eingangs beschriebenen Annahmen muss sich eine Oszillation in der emittierten Strahlung auch zeitnah in der Elektronendichte niederschlagen, da diese die Anregung der strahlenden Niveaus wesentlich mitbestimmt. Die Bewegung der Sonde durch das Plasma ist langsam gegenüber den oben abgeschätzten Frequenzen. Wenn der Plasmastrahl also eine geregelte Schwingung durchführt, so muss diese auch auf der Elektronendichte und somit auf dem von den Doppelsonden gemessenen Strom aufgeprägt sein und dort als regelmäßige Schwingung erkennbar sein. Deshalb wurden die Messungen des Sondenstroms einer Fourier-Analyse unterzogen, um die Plasmaoszillationen näher zu charakterisieren.

Um Effekte auf die Messung zu berücksichtigen, die nicht durch das Plasma an der Messstelle bedingt sind (z.B. Auswirkungen der Lichtbogenentladung), wurden einzelne Messreihen aufgenommen, in denen das Pendel nicht ausgelöst wurde, also in seiner Position an der Tankwand verblieb. Diese Messungen weisen deutliches Frequenzspektrum auf, in dem ausgeprägte, einzelne Frequenzen auftauchen, die auch beim Durchgang durch das Plasma vorhanden sind. Tatsächlich liegen diese Frequenzen in einer Größenordnung, die mit den beobachteten Effekten übereinstimmen würde. Ein Einfluss des elektrischen Feldes durch das oszillierende Plasma selbst auf die verhältnismäßig große Entfernung von etwa 1 m zum ruhenden Pendel ist zwar nicht auszuschließen, es ist aber durchaus auch möglich, dass diese Schwingungen aus Einflüssen der Auswerteelektronik und der umgebender Einflussgrößen, wie z.B. störenden elektrischen Feldern durch das Triebwerk selbst resultieren und somit als Störfrequenzen und nicht als die gesuchte Plasmaoszillation gewertet werden müssen. Bei den Durchgängen durch das Plasma sind allerdings keine so klar dominierenden, einheitlichen Frequenz zu erkennen. Die stärksten Schwingungen treten bei $\sim 12,6$ kHz, 24,2 kHz und 30 kHz auf. Abbildung 4.20 zeigt Frequenzspektren der mit elektrostatischen Sonden gemessenen Sondenströme vor und während des Pendeldurchgangs durch den Plasmastrahl. Die grau dargestellten Frequenzen können Oberschwingungen einer Frequenz bei etwa 3,2 kHz sein.

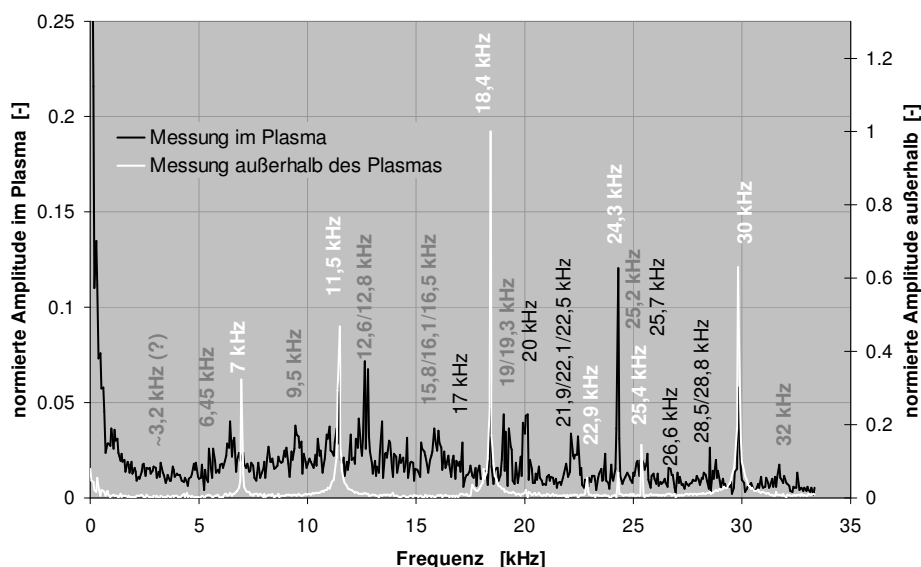


Abbildung 4.20: Frequenzspektren der mit elektrostatischen Sonden gemessenen Sondenströme vor und während des Pendeldurchgangs durch den Plasmastrahl.

Die Überlagerung von verschiedenen Frequenzen ist für mehrere Messreihen in einem Test im Wesentlichen reproduzierbar, fällt jedoch in verschiedenen Versuchen für den gleichen Plasmazustand unterschiedlich aus. Es gibt also charakteristische Frequenzen, mit denen die Elektronendichte im Plasmastrahl oszilliert, die jedoch in verschiedenen Tests beim gleichen Plasmazustand unterschiedliche Werte annehmen können. Die Ursache dieser Schwingungen wird in einer Instabilität des Lichtbogens vermutet, wie sie unter anderen schon von Schrade et al. für magnetoplasmadynamische Triebwerke postuliert wurde [97], obwohl die vorhergesagten Frequenzen bei deutlich höheren Werten liegen. Eine quantitative Berücksichtigung bei der Auswertung optischer Plasma-diagnostik scheint jedoch nach derzeitigem Kenntnisstand nur schwer möglich, wenn überhaupt.

4.6 Freistahlcharakterisierung

Die Freistahlcharakterisierung erfolgt mit Hilfe emissionsspektroskopischer Messungen, aus denen Molekültemperaturen und Dichten von N_2^+ , N_2 und NO , sowie Anregungstemperaturen von atomarem Stickstoff und Sauerstoff bestimmt wurden [123]. Diese Untersuchungen wurden ergänzt durch Messungen der Translationstemperatur von Stickstoff und Sauerstoff mit Hilfe der Fabry-Perot-Interferometrie [118]. Zusätzlich wurde ein Pendelaufbau zur Bestimmung von Elektronendichte und -temperatur mit Hilfe von elektrostatischen Doppelsonden eingesetzt [118]. Alle Messungen zur Freistahlcharakterisierung wurden am NASDA-Punkt in einem Abstand zur Anode von $x=368$ mm durchgeführt.

4.6.1 Elektronendichten und -temperaturen aus Tripelsondenmessungen

Für den untersuchten Plasmazustand wurden schon im Rahmen einer Kooperation mit der ehemaligen japanischen Raumfahrtagentur NASDA Messungen mit elektrostatischen Sonden durchgeführt [7]. Die damaligen Ergebnisse weisen eine maximale Elektronentemperatur von 30 000 K und eine maximale Elektronendichte von etwa $3 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$ auf. Bei diesen Werten der Elektronendichte müsste die Stark-Verbreiterung in die Auswertung der Fabry-Perot-Untersuchungen einfließen. Die aus der gemessenen Enthalpie gewonnene Gleichgewichtsverteilung, die in Kapitel 4.2 zur Ermittlung des Anströmzustandes für die numerische Strömungssimulation berechnet wurde, ergibt Elektronendichten auf der Plasmawindkanalachse von $4,4 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Diese Werte hätten keine merklichen Verbreiterungseffekte zur Folge. Aus diesem Grunde wurden eigene Messungen mit einem Pendelaufbau durchgeführt, der die thermischen Belastungen auf die Sonden minimieren sollte. Da für den NASDA-Punkt nur eine Vergleichsmessung zur Verfügung stand, wurden zur Qualifikation des neuen Aufbaus zuerst Messungen am SFB-II Punkt durchgeführt, der durch frühere Untersuchungen deutlich besser charakterisiert ist. Die ermittelten Elektronentemperatur- und -dichteverteilungen sind in den Abbildungen 4.21 und 4.22 für verschiedene SONDENSpannungen dargestellt. Laut [45] folgt die Abhängigkeit zwischen der Elektronentemperatur und der Floating-Spannung im erwarteten Temperaturbereich von bis zu 40 000 K für angelegte SONDENSpannungen zwischen 10 V und 15 V einer linearen Charakteristik. Die gute Übereinstimmung der verschiedenen Messkurven bestätigt diese Annahme. Elektronentemperatur und -dichte wurden iterativ bestimmt, wie in [45, 118] beschrieben. Jede Messkurve resultiert aus der Mittelung von vier Einzel-

messungen, die in weiß dargestellten Fehlerbalken sind die Höchst- und Mindestwerte aus allen Einzelmessungen für alle Sondenspannungen.

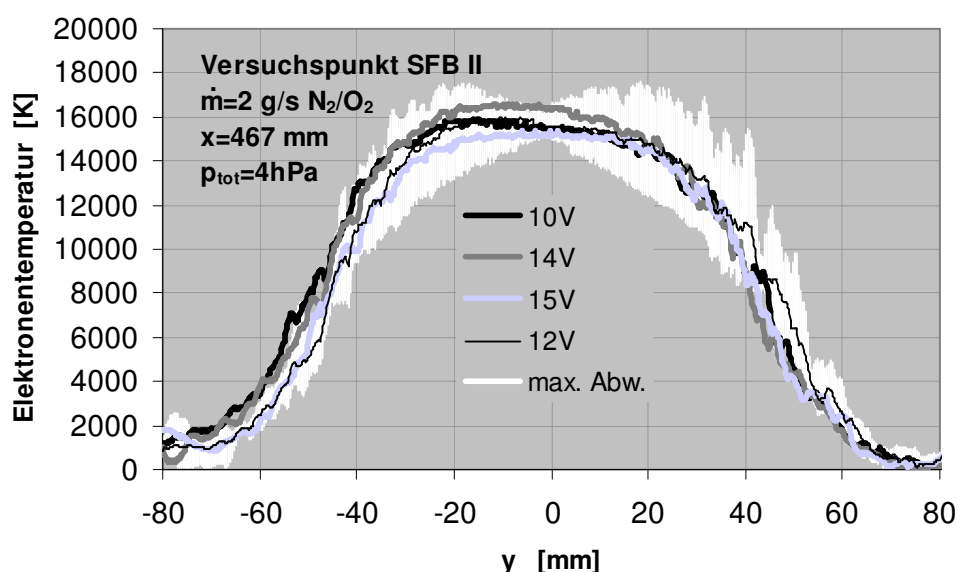


Abbildung 4.21: Elektronentemperaturverteilungen für verschiedene Sondenspannungen am SFB-II Punkt.

Die ermittelten Maximaltemperaturen sind mit 15000 K um etwa 5000 K höher als die der im Rahmen des SFB 259 durchgeführten Messungen am SFB II Punkt. Die Elektronendichten stimmen gut mit den alten Ergebnissen überein. Die Schlussfolgerung muss also sein, dass die mit dem verwendeten Versuchsaufbau ermittelten Elektronendichten vertrauenswürdig sind, während die Elektronentemperatur eher überschätzt wird.

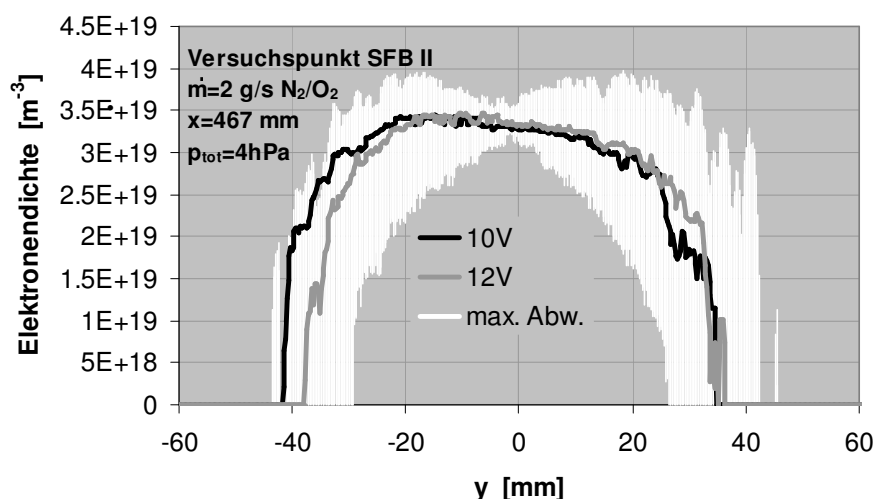


Abbildung 4.22: Elektronendichteverteilungen für verschiedene Sondenspannungen am SFB-II Punkt.

Leider erhitzte sich der Versuchsaufbau bei den Versuchen am NASDA-Punkt zu stark, woraufhin mehrere Kabel und einer der verwendete Magnete zerstört wurden. Für diesen Punkt stehen daher nur vorläufige Messungen zur Verfügung, die allenfalls Abschätzungen erlauben. Aus diesen Abschätzungen geht jedoch hervor, dass die Maximalwerte am NASDA-Punkt bei Elektronentemperaturen zwischen 15000 K und 20000 K und maximalen Elektronendichten bis zu $5 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ lie-

gen. Diese Elektronendichten stimmen zudem gut mit der Gleichgewichtszusammensetzung aus den gemessenen Enthalpien überein. Mit den hier abgeschätzten Werten ist eine Berücksichtigung der Stark-Verbreiterung durch Ladungsträger im Plasma bei der Bestimmung der Translationstemperatur aus Dopplerverbreiterungen nicht notwendig.

4.6.2 Ergebnisse der Fabry-Perot-Interferometrie

Aus den Messungen mit dem Fabry-Perot Interferometer wurden radiale Verläufe der Translationstemperatur aus der Verbreiterung von Emissionslinien von atomarem Sauerstoff und Stickstoff bestimmt. Die Temperaturen aus der Stickstoffstrahlung weisen Maximalwerte von ca. 10 500 K auf der Plasmawindkanalachse und Werte von etwa 8 000 K am Strahlrand auf, die aus der Sauerstoffstrahlung ermittelten Werte liegen in der Strahlmitte um etwa 1 500 K über den Werten für Stickstoff. Die stark ansteigenden Werte bei weiter außen liegenden Radien resultieren aus sehr niedrigen Intensitäten aus dem Plasma, die durch an den Tankwänden reflektierte Strahlung aus der Plasmastrahlmitte verfälscht werden. Wie schon in Kapitel 2.3 ausgeführt, wird ein Teil der gemessenen Linienbreite durch die Stark Verbreiterung verursacht. Abb. 4.23 zeigt die Verläufe der gemessenen Temperaturen und eine Abschätzung des Einflusses der Stark-Verbreiterung auf die Temperaturbestimmung am Beispiel der Translationstemperatur auf der PWK-Achse. Für Elektronendichten unter 10^{19} m^{-3} ist die Stark-Verbreiterung vernachlässigbar, ab 10^{20} m^{-3} ändert sich die Translationstemperatur gegenüber der Berechnung ohne Stark-Verbreiterung um etwa 10%. Mit den in [7] angegebenen Elektronendichten von $5 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$ bei 30 000 K würde sich aus der Dopplerverbreiterung der Stickstofflinie eine Temperatur von unter 2 000 K ergeben. Für die in Abb. 4.23 gezeigten Temperaturprofile wurde mit $n_e=5 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ und $T_e=10\,000 \text{ K}$ gerechnet.

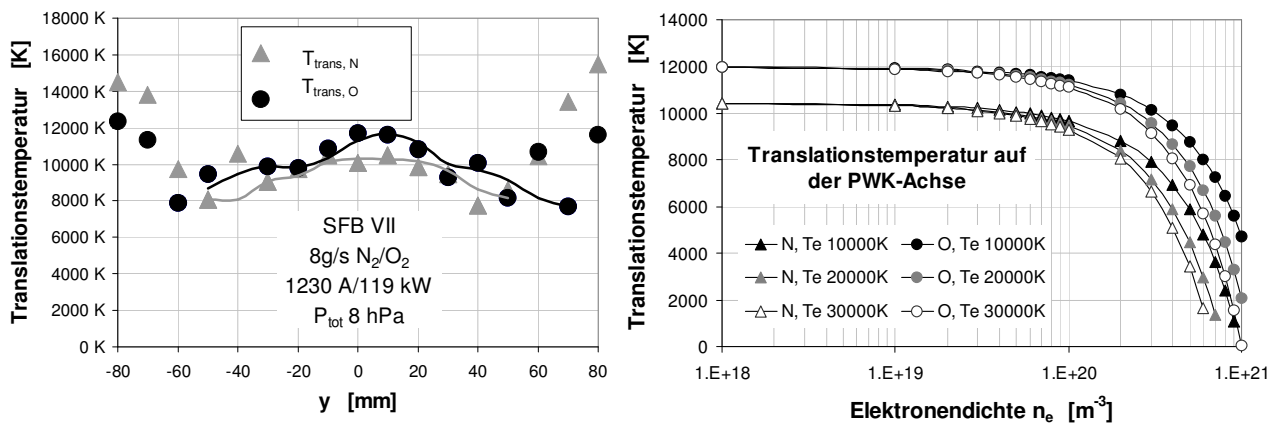


Abbildung 4.23: Verteilung der Translationstemperaturen quer zum Plasmastrahl, ermittelt durch Fabry-Perot-Messungen an O und N unter Annahme von $T_e=10\,000\text{K}$ und $n_e=5 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ und Einfluß von n_e und T_e am Beispiel der Temperatur auf der Plasmawindkanalachse.

Wie später gezeigt wird, liegen die aus den emissionspektroskopischen Messungen gewonnenen Rotationstemperaturen von N_2^+ auf der Plasmawindkanalachse um etwa 2000 K unter den hier bestimmten Translationstemperaturen. Wird diese Temperaturdifferenz komplett dem Einfluss der Stark-Verbreiterung zugeordnet, entspricht dies einer Elektronendichte von etwa $2 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$. Dieser Wert liegt in der gleichen Größenordnung wie der aus der numerischen Rechnung erhaltene Ergeb-

nis am Grenzschichttrand. Obgleich es sich hierbei um die obere Grenze für die Elektronendichte handelt, ist diese um einen Faktor 2 geringer als der numerische Wert.

Die Integrationszeit für jeden Messwert bei den Fabry-Perot Untersuchungen lag mit 5 ms bei Belichtungszeiten, bei denen die Strahlprofile des Kernstrahls schon keine zeitlichen Schwankungen mehr aufwiesen. Es ist also davon auszugehen, dass jedem Einzelwert ein zeitlich integriertes Radialprofil zugrunde liegt, das sich allerdings während der Messwertaufnahme aus einer Überlagerung von vielen unterschiedlichen Einzelprofilen zusammensetzt. Eine Schwankung des Plasmastrahls sowohl in Form einer Rotationsbewegung als auch in Form von statistisch verteilten Sprüngen des Plasmastrahls, wie sie in Kapitel 4.5.1 untersucht wurde, hätte eine zusätzliche Verbreiterung der Emissionslinien zur Folge und würde zu einer scheinbaren Erhöhung der Translationstemperatur führen. Allerdings wurden kontinuierliche spektrale Profile der untersuchten Emissionslinien gemessen, die keine Anzeichen einer in Kapitel 4.5.1 vorhergesagten Linienaufspaltung aufweisen. Es kann also keine direkte Berechnung der Auswirkungen auf die Messung der Dopplerbreite durchgeführt werden, die gemessenen Translationstemperaturen müssen daher als obere Grenzwerte der tatsächlichen Translationstemperatur betrachtet werden. Grundsätzlich würden derartige Effekte aber immer eine zusätzliche Verbreiterung der Linien zur Folge haben. Deshalb wird die aus den Stickstofflinien bestimmte Translationstemperatur gegenüber dem aus den Sauerstofflinien bestimmten Wert favorisiert.

4.6.3 Emissionsspektroskopische Ergebnisse

Aus den zwei Wellenlängenbereichen im Ultraviolett erfolgte eine Bestimmung der Molekültemperaturen der berücksichtigten Luftmoleküle. Abbildungen 4.24 und 4.25 zeigen die gemessenen Emissionsspektren auf der Plasmawindkanalachse. Zusätzlich sind die aus dem Vergleich mit der spektralen Simulation für die beste Übereinstimmung ermittelten Theoriespektren sowie die zu Grunde liegenden Temperaturen in die Diagramme eingetragen.

Um lokale Profile der Molekültemperaturen zu erhalten, wurden die gemessenen Spektren einer Abel-Inversion unterzogen, und an 4 radialen Positionen (0 mm, 20 mm, 40 mm und 80 mm) wurden analog zur Untersuchung der integrierten Spektren Temperaturen bestimmt. Hierbei wurden für N_2^+ und N_2 Temperaturschrittweiten von 200 K benutzt und Temperaturbereiche zwischen 1 000 K und 15 000 K für die Rotationstemperatur und zwischen 1 000 K und 20 000 K für die Vibrationstemperatur untersucht. Die Rotationstemperatur wird im Wesentlichen durch die Emission von N_2^+ definiert, die Einflüsse von N_2 sind nur gering. Aus diesem Grund wurde eine gemeinsame Rotationstemperatur für die beiden Moleküle verwendet. Da die Spektren in der Strahlmitte durch die N_2^+ -Strahlung dominiert werden, muss die Bestimmung der N_2 Vibrationstemperatur in diesem Bereich als unsicher betrachtet werden. Erst in den Randbereichen ist der Anteil der N_2 -Strahlung höher. Die Rotationstemperatur erreicht auf der Strahlachse Werte von 9 200 K und fällt mit nur schwachen Gradienten zum Strahlrand hin auf 8 000 K ab. Die Vibrationstemperatur von N_2^+ erreicht in der Strahlmitte 15 000 K und fällt zum Rand hin auf 13 200 K ab. Abbildung 4.26 zeigt die Abel-invertierten und die theoretisch berechneten Spektren für verschiedene radiale Positionen. Die simulierten Spektren sind in sehr guter Übereinstimmung mit den Abel-invertierten Messwerten.

Bei der Auswertung der NO Spektren wurden 5 verschiedene Vibrationstemperaturen für die strahlenden Systeme von NO und O_2 verwendet. Daraus resultierten allerdings extrem hohe Rechenzei-

ten. Außerdem schien eine Rotationstemperaturbestimmung aufgrund der - zumindest in der Plasmastrahlmitte - eher schwach ausgeprägten spektralen Charakteristik nicht sinnvoll. Da die aus den N_2^+ Spektren bestimmte Rotationstemperatur verhältnismäßig nah an der aus der Emission von atomarem Stickstoff ermittelten Doppler-Temperatur liegt, wurde diese Temperatur auch für die Simulation der NO- und O_2 -Emission verwendet. Zur Reduzierung der Rechenzeit wurde die Vibrationstemperatur in Schrittwerten von 1000 K variiert. Ein Vergleich der Abel-invertierten und theoretisch berechneten Spektren in diesem Wellenlängenbereich ist in Abbildung 4.27 für verschiedene radiale Positionen dargestellt.

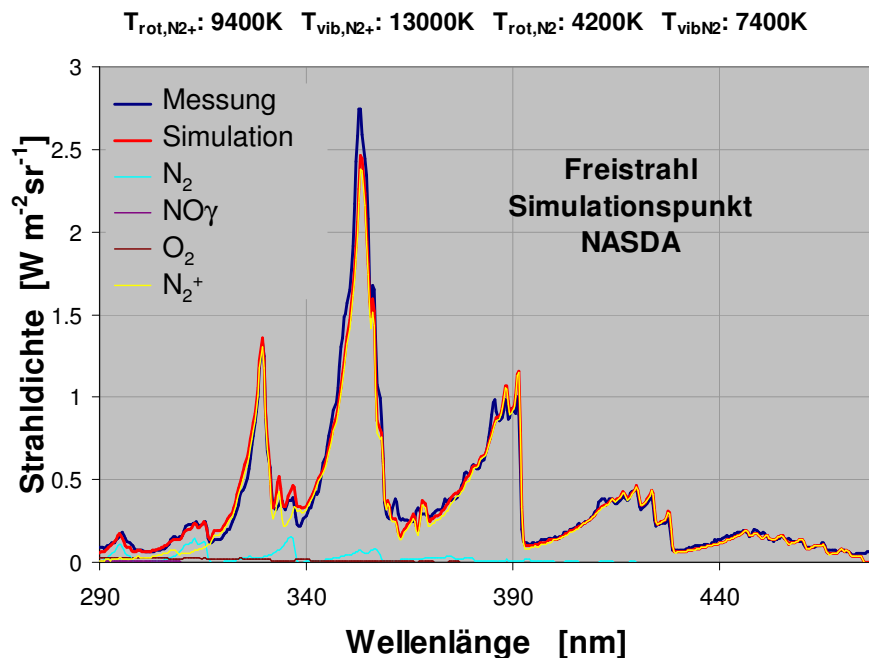


Abbildung 4.24: Gemessenes Freistrahlspektrum im Bereich zwischen 290 nm und 480 nm und simulierte Spektren mit der besten Übereinstimmung.

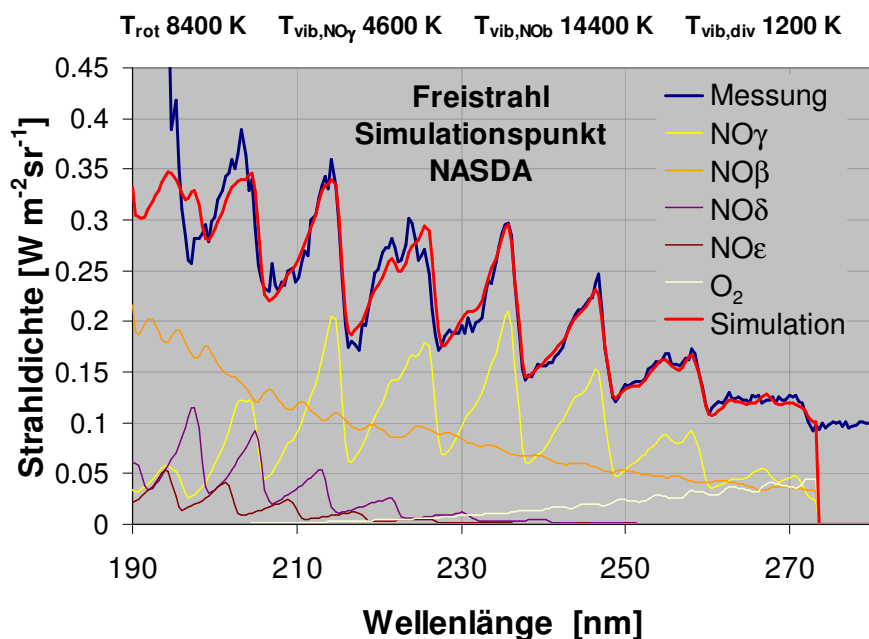


Abbildung 4.25: Gemessenes Freistrahlspektrum im Bereich zwischen 190 nm und 290 nm und simulierte Spektren mit der besten Übereinstimmung.

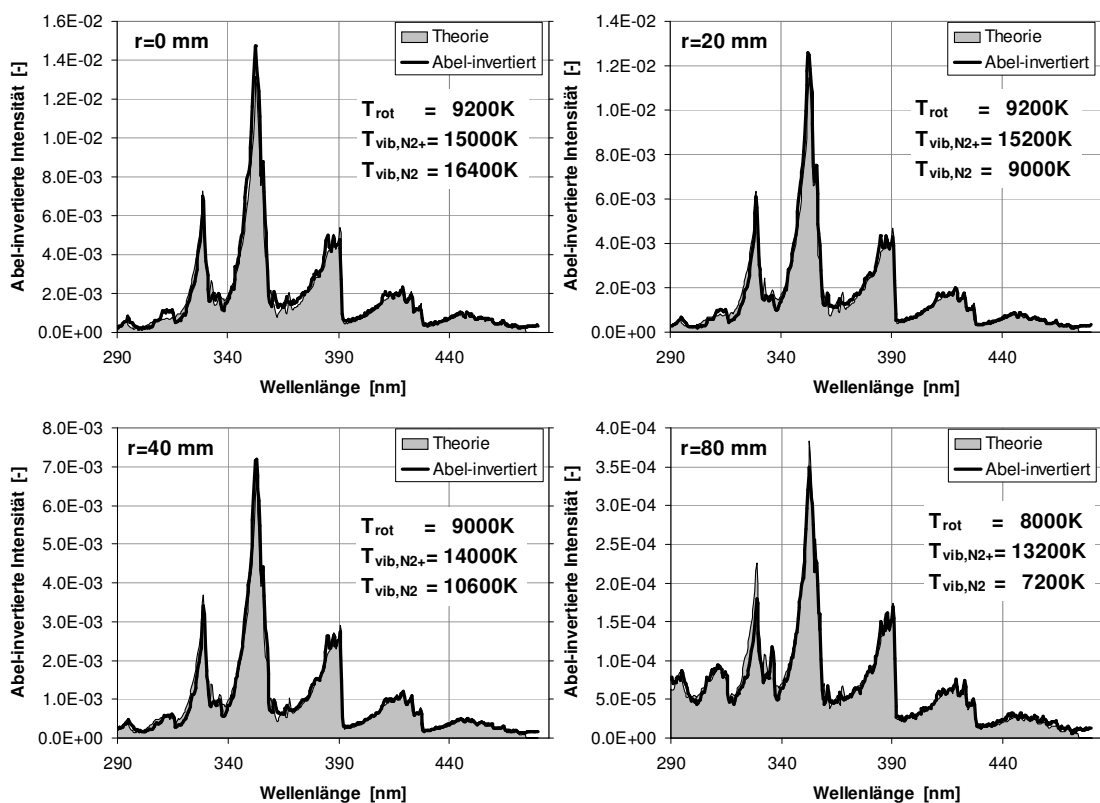


Abbildung 4.26: Abel-invertierte Freistrahlspektren im Bereich zwischen 190 nm und 280 nm an den radialen Positionen 0 mm, 20 mm, 40 mm und 80 mm und simulierte Spektren mit der besten Übereinstimmung.

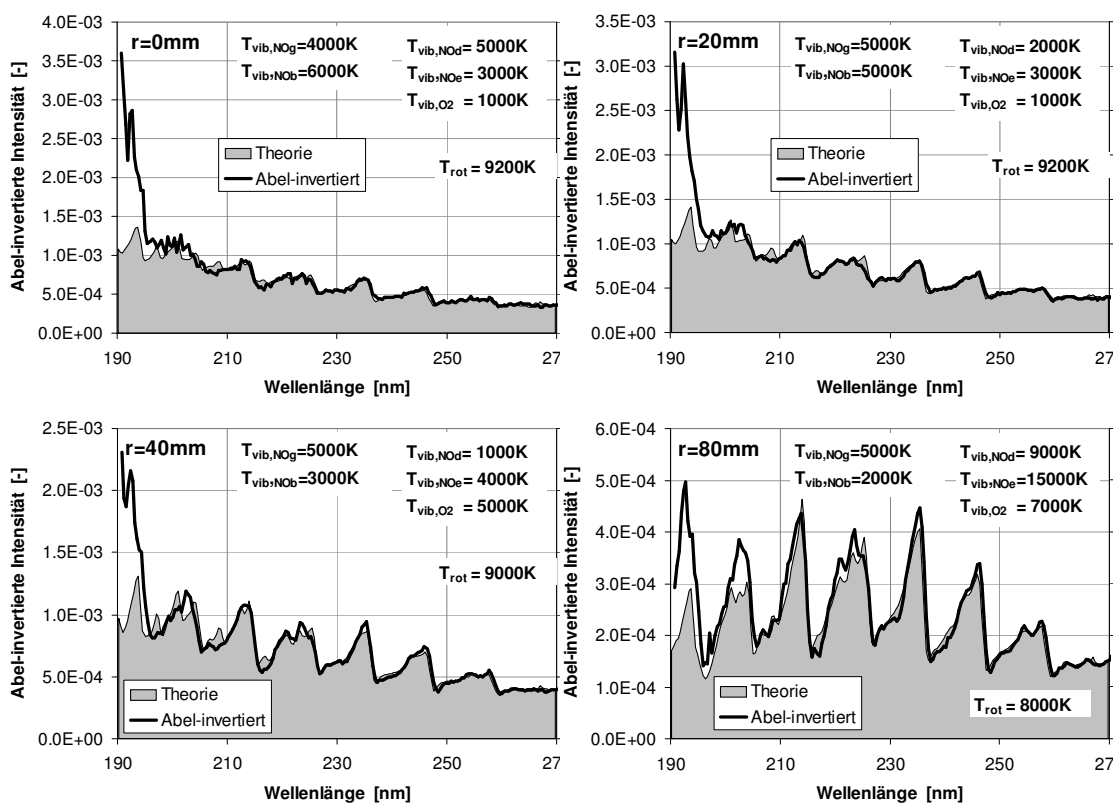


Abbildung 4.27: Abel-invertierte Freistrahlspektren im Bereich zwischen 290 nm und 480 nm an den radialen Positionen 0 mm, 20 mm, 40 mm und 80 mm und simulierte Spektren mit der besten Übereinstimmung.

Zwischen 210 nm und 280 nm stimmen die berechneten Spektren recht gut mit den entabelten Messwerten überein, unterhalb von 210 nm und im Bereich um 225 nm sind deutliche Abweichungen zu erkennen. Diese Abweichungen werden durch die Emission von $\text{NO}\delta$ und $\text{NO}\epsilon$ verursacht. Im Rahmen dieser Arbeit konnten für diese Spezies keine hochaufgelösten Messungen durchgeführt werden, sodass eine experimentelle Überprüfung der Modellierung, wie sie für $\text{NO}\gamma$ und N_2 C-B in Kapitel 4.4 durchgeführt wurde, noch nicht erfolgen konnte. Abbildung 4.28 zeigt die aus allen Spektren über den Plasmaquerschnitt hinweg ermittelten Temperaturverteilungen.

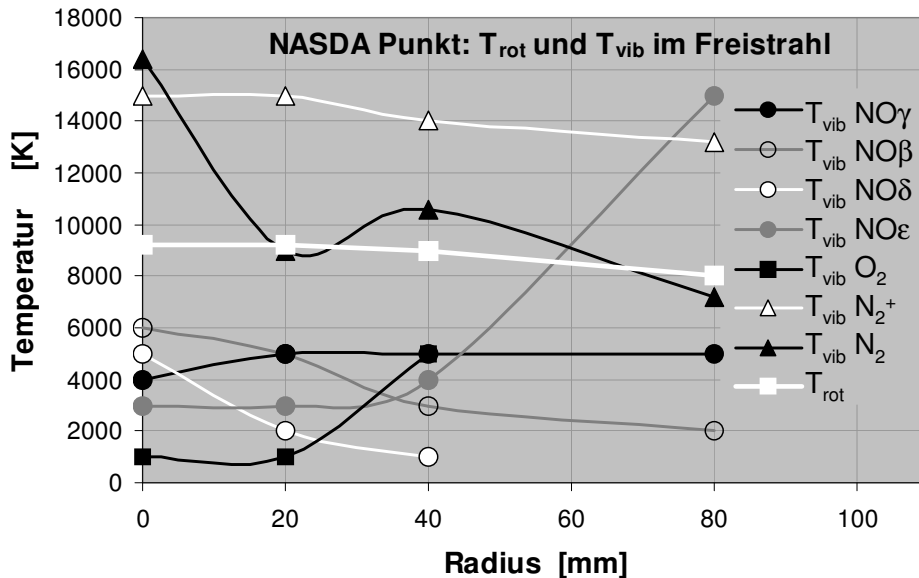


Abbildung 4.28: Verlauf für Rotations- und Vibrationstemperaturen der strahlenden Moleküle am NASDA Punkt über den Strahlradius hinweg.

Die Rotationstemperatur weist nur ein schwaches radiales Profil auf, was qualitativ mit dem Verlauf der Translationstemperatur übereinstimmt. In der Strahlmitte ist die Translationstemperatur um etwa 1000 K höher, am Strahlrand weisen beide Temperaturen einen Wert von etwa 8000 K auf. Die Vibrationstemperatur von N_2^+ liegt mit einem Maximalwert von 15000 K auf der PWK-Achse deutlich über der Rotationstemperatur sinkt bis zum Strahlrand auf 13000 K ab. Auch die Vibrationstemperatur von N_2 weist ein Maximum in Strahlmitte auf, das bei über 16000 K liegt, sinkt aber rasch mit steigendem Radius. Die Vibrationstemperatur von N_2 koppelt normalerweise sehr schnell mit der Elektronentemperatur [64]. Dieses Ergebnis stimmt also zumindest qualitativ mit den in der Strahlmitte sehr hoch gemessenen Elektronentemperaturen überein. Alle anderen Vibrationstemperaturen liegen deutlich unter der Rotationstemperatur. Die Vibrationstemperaturen von O_2 und $\text{NO}\epsilon$ zeigen eine stark steigende Tendenz zum Plasmarand hin wo $T_{\text{vib},\text{NO}\epsilon}$ auf einen Wert von 15000 K ansteigt. Das deutet darauf hin, dass $\text{NO}\epsilon$ wahrscheinlich nicht durch Elektronenstöße angeregt wird, sondern in Austauschreaktionen mit in den Strahl diffundierendes Kaltgas in vibratorisch angeregten Zuständen gebildet wird. Andererseits weist das $\text{NO}\epsilon$ System die stärkste Strahlung an der unteren Grenze des Detektionsbereichs auf. In diesem Bereich hat es sich als schwierig herausgestellt, das experimentell ermittelte Spektrum durch die Simulation nachzustellen. Tatsächlich erscheinen die für $\text{NO}\epsilon$ charakteristischen Bandenköpfe in der Messung nur deutlich schwächer als

in der Simulation. Der Anstieg von $T_{\text{vib,NO}\epsilon}$ zum Rand hin kann also durchaus auch auf einer Fehlinterpretation durch den Skalierungsalgorithmus des Auswertungsprogramms beruhen.

Zusätzlich zu den Temperaturen ergeben sich aus dem Vergleich mit der spektralen Simulation auch Teilchendichten der elektronisch angeregten Zustände, die in Abbildung 4.29 dargestellt sind. Dazu wird die der theoretischen Simulation zurunde liegende Teilchendichte des betrachteten Niveaus mit dem Skalierungsfaktor, der sich aus dem Vergleich mit dem Experiment ergibt, multipliziert. Die höchsten Teilchendichten in den angeregten Niveaus werden von N_2^+ , $\text{NO}\gamma$ und $\text{NO}\beta$ gestellt, deren Strahlung folgerichtig auch das Spektrum dominiert. Die $\text{NO}\epsilon$ Teilchendichte steigt zum Rand hin nicht deutlich an.

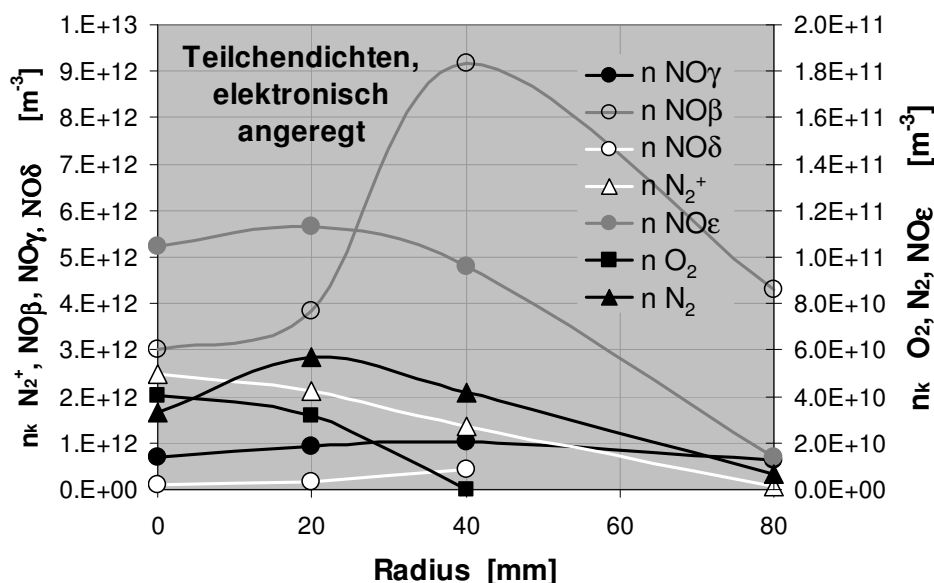


Abbildung 4.29: Verlauf der Teilchendichten in den elektronisch angeregten Niveaus der strahlenden Moleküle im Freistrah am NASDA Punkt über den Strahlradius hinweg.

Grundsätzlich sind Rückschlüsse auf die Grundzustandsdichte nur unter Annahme einer Verteilungsfunktion für die Besetzungsdichten der angeregten elektronischen Niveaus wie z.B. einer Boltzmann-Verteilung möglich. Es fehlt eine Möglichkeit zur Bestimmung der entsprechenden Anregungstemperatur, die im Nichtgleichgewichtsfall nicht ohne Überprüfung der Gültigkeit der verwendeten Verteilung durch eine andere Temperatur ersetzt werden kann. Im Fall der Strahlung von NO sind jedoch im Gegensatz zu den anderen betrachteten Spezies verschiedene elektronisch angeregte Niveaus zugänglich, sodass eine Überprüfung der Besetzungsdichteverteilung und im bei Gültigkeit einer Boltzmann-Verteilung eine Bestimmung der Anregungstemperatur durch einen Boltzmann-Plot möglich wird. Die Teilchendichten der angeregten Niveaus zeigen jedoch deutliche Abweichungen von der Boltzmann-Geraden, wie in Abbildung 4.30 zu sehen ist. Werden aus diesen Daten Grundzustandsdichten von NO berechnet, so ergeben sich aus den Boltzmann-Beziehungen zwischen den einzelnen angeregten Niveaus und der Grundzustandsdichte Werte zwischen 10^{18} m^{-3} und 10^{18} m^{-3} mit Schwankungen um \pm eine Größenordnung. Ohne eine verlässliche elektronische Nichtgleichgewichtsanregung lassen sich also aus der Molekülstrahlung keine Gesamtteilchendichten bestimmen.

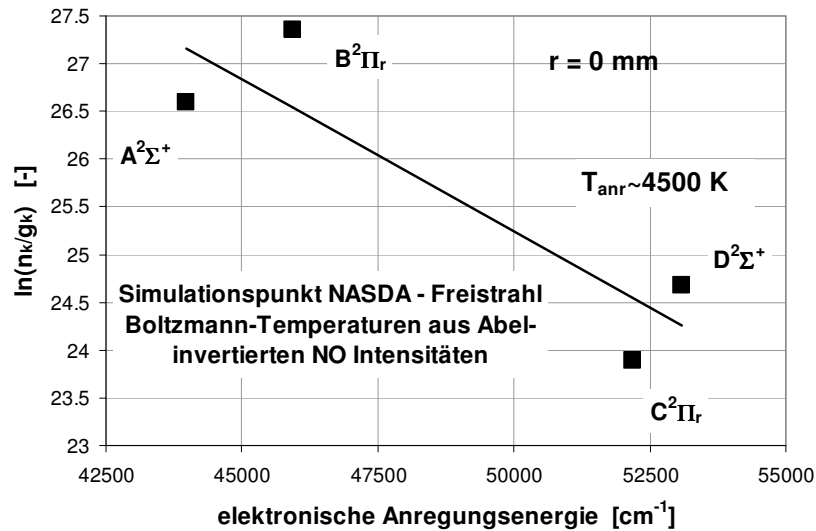


Abbildung 4.30: Boltzmann-Plot für die aus Abel-invertierten Messwerten bestimmten Besetzungsdichten der elektronischen Niveaus $A^2\Sigma^+$, $B^2\Pi_r$, $C^2\Pi_r$ und $D^2\Sigma^+$ von NO im Freistrah am NASDA Simulationspunkt.

Neben der Molekülemission wurde auch die Emission der Atome O und N untersucht. Eine Auswertung der Atomstrahlung unter Annahme einer Boltzmann-Verteilung der elektronisch angeregten Niveaus für atomaren Sauerstoff und Stickstoff ergab für beide Spezies ein sehr flaches Temperaturprofil ohne eindeutiges Maximum in der Strahlmitte. Zusätzlich lag das Temperaturniveau mit 5500 K auf der Strahlachse deutlich unter den oben gezeigten Rotationstemperaturen, korreliert allerdings gut mit der Vibrationstemperatur von $\text{NO}\gamma$, die ebenfalls keine ausgeprägten Änderungen über den Querschnitt hinweg aufweist. Abbildung 4.31 zeigt die ermittelten Temperaturprofile. Tatsächlich zeigt sich bei der Auswertung der Stickstofflinien eine noch niedrigere Anregungstemperatur, wenn nur die Linien des $2s^2 2p^3 (^4S^o)3p \rightarrow 2s^2 2p^3 (^4S^o)3s$ Triplets bei 745 nm berücksichtigt werden.

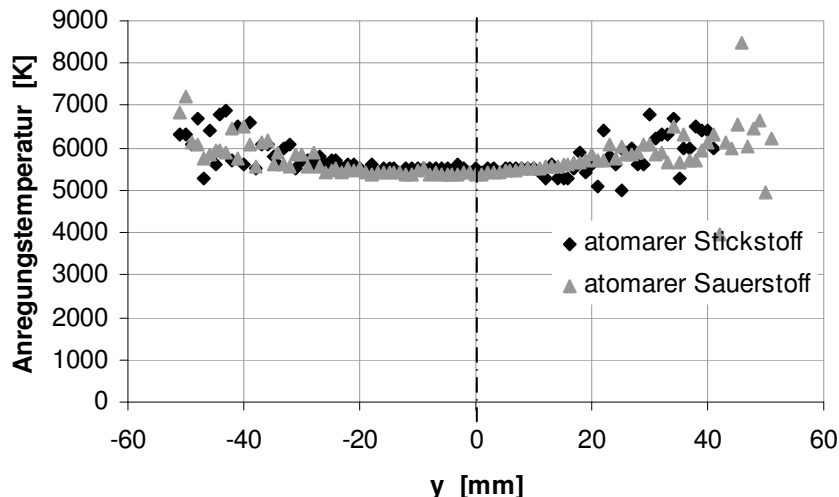


Abbildung 4.31: Anregungstemperaturprofile für atomaren Sauerstoff und Stickstoff.

Ausgehend von den in Abbildung 2.3 gezeigten Auswirkungen von Nichtgleichgewicht auf die gemessene Anregungstemperatur stimmt die niedrige elektronische Anregungstemperatur nicht mit der Annahme eines rekombinierenden Plasmas überein, wie es von einer expandierenden Unter-

schallströmung erwartet wird. Bedingt durch den verhältnismäßig hohen Umgebungsdruck kann der Plasmastrahl unter Umständen aber auch als eine verdichtete Stömung betrachte werden, die die Forderung nach einem ionisierenden Plasma auch erfüllen würde.

Die Möglichkeit für elektronische Anregungstemperaturen unterhalb der Elektronentemperatur wird auch in [82] beschrieben, wenn die Elektronendichte unterhalb des Gleichgewichtswertes liegt. Unter diesen Umständen könnte sich das Plasma wie ein ionisierendes Plasma verhalten, da die Plasmatemperatur eigentlich eine höhere Elektronendichte verlangen würde.

Schließlich wurde von Park mit NEQAIR Rechnungen nachgewiesen, dass starke Strahlung im Vakuum-UV über resonante Absorptionsprozesse, vornehmlich von atomarem Sauerstoff, die Anregungstemperatur in den oberen elektronisch angeregten Niveaus deutlich abgesenken kann [123]. Durch Stoßabregung der metastabilen Niveaus erfolgt dabei eine Energieeinkopplung in die Elektronen. Im Rahmen von der Qualifikation des Hitzeschutzmaterials für die Huygens-Sonde [93] wurden radiometrische Messungen im Plasmawindkanal durchgeführt, die zeigten, dass aus der Plasmaquelle heraus hohe Strahlungsflüsse im Vakuum-UV in Richtung der Plasmawindkanalachse emittiert werden. Dieser Prozess würde gleichzeitig die niedrigen elektronischen Anregungstemperaturen und die hohen Elektronentemperaturen in der Plasmawindkanalströmung erklären.

4.7 Grenzschichtuntersuchungen

Die Untersuchung der Grenzschicht erfolgte durch emissionsspektroskopischen Messungen. Eine erste Betrachtung der relativen, räumlichen Verteilung der Strahlung der einzelnen Spezies in der Grenzschicht ergab Informationen über Grenzschichtabmessungen und -form. Diese werden mit einer theoretischen Grenzschichtbetrachtung verglichen. Darüber hinaus wurden radiale und axiale Profile der Molekültemperaturen von N_2^+ und N_2 , sowie der atomaren Anregungstemperaturen über die Grenzschicht hinweg ermittelt.

4.7.1 Grenzschichtcharakterisierung auf Basis der integrierten Emission verschiedener Spezies vor Kupfer- und SiC-Oberflächen

Als erste Annäherung an das Problem der Grenzschichtcharakterisierung wurde die relative Verteilung der Emission der Strahlung verschiedener Spezies herangezogen. Wie schon in Kapitel 3.2.2 bei der Beschreibung des Versuchsaufbaus dargestellt, wurde der Bereich vor den Proben bis zu einem Abstand von 20 mm zur Oberfläche gemessen. Aus Gründen der Datenreduktion wurde jedoch nur der Bereich bis zu einem Abstand von 5 mm zur Körperoberfläche in feiner örtlicher Auflösung aufgenommen. Für die Atome wurden dabei alle starken Emissionslinien im Detektionsbereich aufsummiert, für die Moleküle wurden die Molekülbanden über charakteristische Wellenlängenbereiche integriert. Tabelle 4 gibt die Integrationsbereiche bzw. die berücksichtigten Linien oder Liniengruppen für die verschiedenen untersuchten Spezies an. Wie später noch deutlicher ausgeführt wird, setzt sich die NO-Emission aus verschiedenen strahlenden Systemen zusammen, die sich in der gegebenen Wellenlängenauslösung nicht ohne weiteres voneinander separieren lassen und wird zusätzlich durch Strahlung von molekularem Sauerstoff überlagert. Trotzdem wird dieser Bereich im Folgenden weiterhin mit NO bezeichnet, da dieses Molekül den wesentlichen

Anteil der Strahlung stellt. Es können keine direkten thermodynamischen Informationen über Temperaturen oder Teilchendichten extrahiert werden, aber Grenzschichtform und -dimensionen werden wiedergegeben.

Spezie	Integrationsbereich
Stickstoffmonoxid NO	Integration zwischen 209 nm und 288 nm
Silizium Atomlinien Si	205,48 nm, 206,12nm, 206,55 nm, 211,46 nm, 212,41 nm, 222,8 bis 221,9, 243,52 nm, 243,88 nm, 244,34 nm, 245,52 nm, 250,69 bis 253,24nm, 263,13 nm, 288,16 nm, 298,76 nm
Stickstoff Atomlinien N	Summe über Emissionslinien bei 745,22 nm, 821,18 nm, 861,75 nm, 869,16 nm, 904,76 nm, 905,04 nm, 938,68 nm
Sauerstoff Atomlinien O	Summe über Emissionslinien bei 777,34 nm, 844,65 nm, 926,39 nm

Tabelle .4: Integrationsbereiche für die verschiedenen Spezies mit berücksichtigten Linien und Liniengruppen der Atome nach [109, 54].

Besonders aussagekräftig ist hierbei die Strahlung von Spezies, die auf Prozesse zurückgehen, die spezifisch in der Grenzschicht vor einer Probe stattfinden, wie z.B. Rekombinations- oder Erosionsprodukte. In der Grenzschicht werden Teilchen, die durch Rekombination oder Erosionsprozesse an der Körperoberfläche erzeugt werden durch Diffusionsprozesse stromaufwärts transportiert. Abbildung 4.32 zeigt die integrierte Emission von NO vor einer gekühlten Kupferoberfläche und Abbildung 4.33 die Emission von atomarem Silizium vor einer glühenden Siliziumkarbidprobe. Die Charakterisierung von NO durch die integrierte Strahlung vor einer heißen Probe ist nicht möglich, da die Emission der Erosionsprodukte in dieser spektralen Auflösung nicht von der NO-Strahlung separiert werden kann.

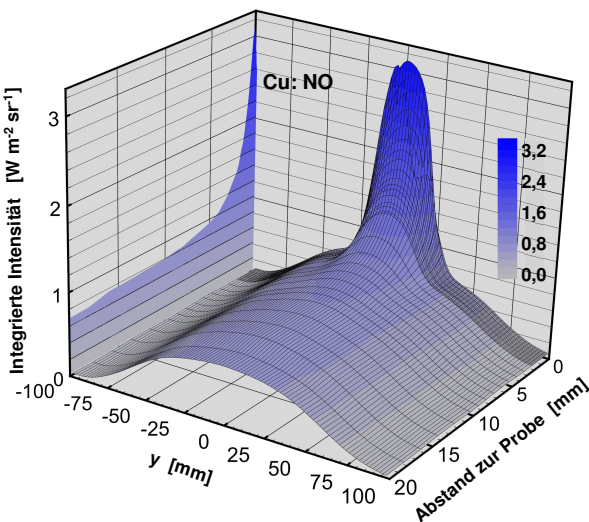


Abbildung 4.32: Relative Intensitätsverteilung der Emission von NO vor einer wassergekühlten Kupferoberfläche.

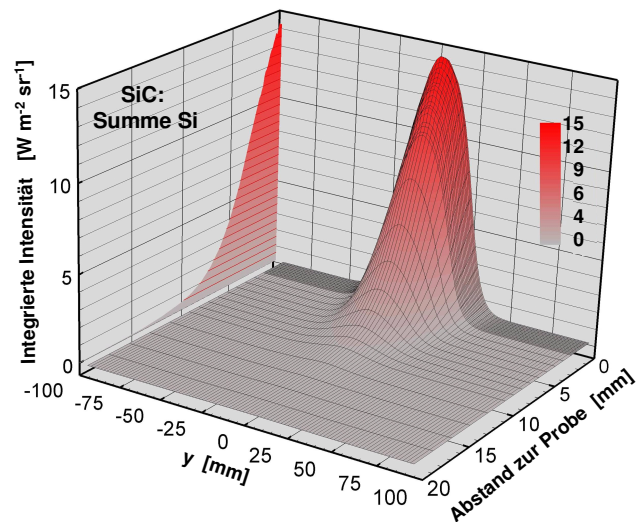


Abbildung 4.33: Relative Intensitätsverteilung der Emission von Si vor einer glühenden Siliziumkarbid Materialprobe bei 1700°C.

Die Auswirkungen der Erosions- und Molekülbildungsprozesse auf der Staustromlinie bilden sich bis zu einem Abstand von etwa 10 mm stromaufwärts aus. Die gleiche Grenzschichtgeometrie geht auch aus der Emission von atomarem Sauerstoff und Stickstoff hervor. Zur Auswertung wurden die einzelnen Linien jeweils über ihre spektrale Breite integriert. In den Abbildungen 4.34 und 4.35 sind die summierten Linienintensitäten für O und N in der Grenzschicht vor einer gekühlten Kupferprobe und einer glühenden SiC-Materialprobe dargestellt. Vor der Kupferoberfläche ergibt sich ein Anstieg der Atomemission um einen Faktor von etwa 3,5 für atomaren Sauerstoff und von etwa 2 für atomaren Stickstoff. Die Strahlung vor der SiC-Materialprobe sinkt zur Oberfläche hin für Sauerstoff auf etwa 50% und für Stickstoff auf etwa 40% ab.

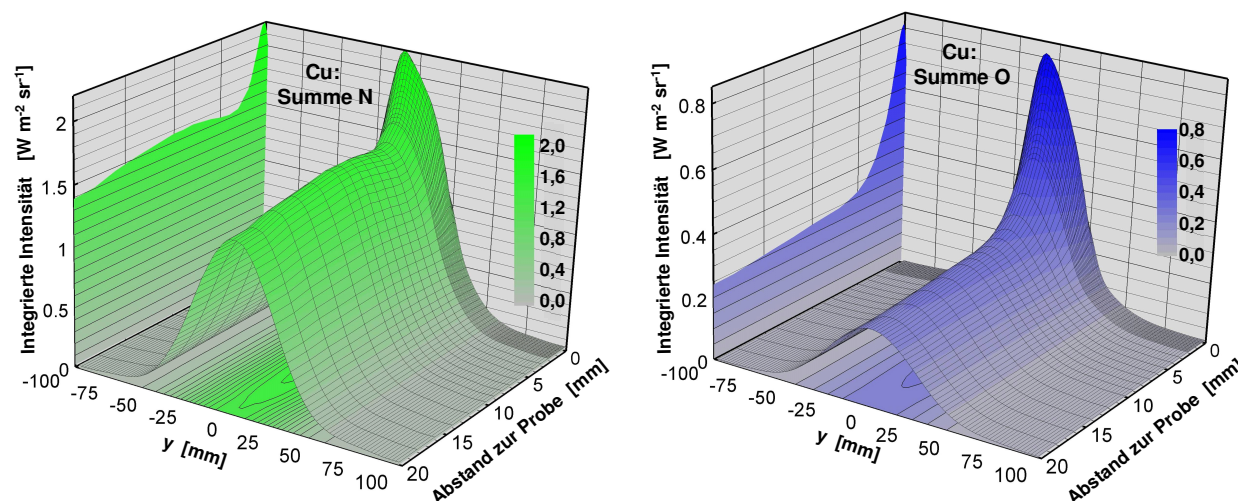


Abbildung 4.34: Räumliche Verteilung der spektral integrierten Emission von N und O vor einer gekühlten Kupferprobe.

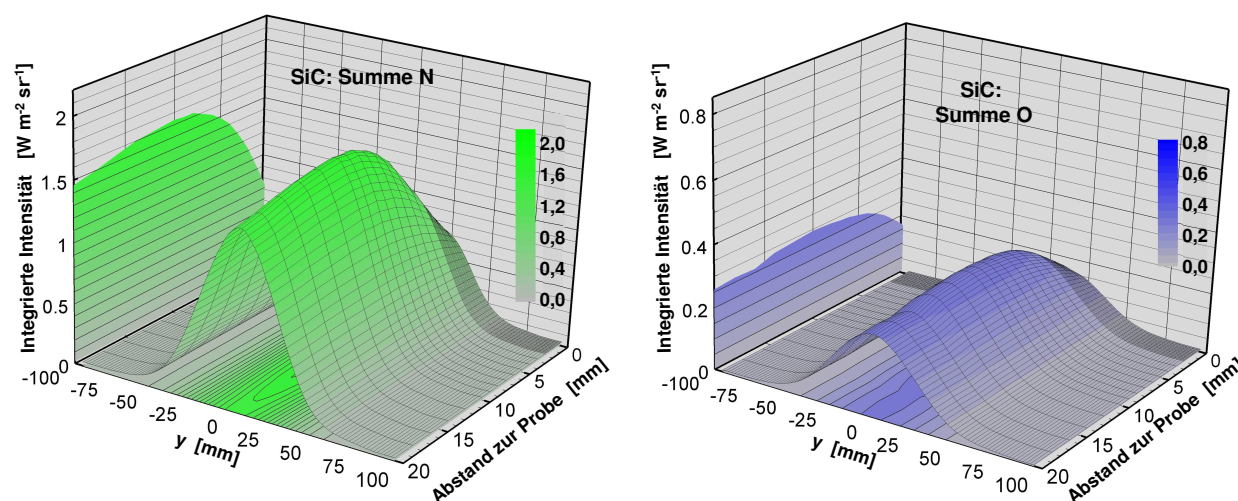


Abbildung 4.35: Räumliche Verteilung der spektral integrierten Emission von N und O vor einer glühenden SiC-Materialprobe bei 1700°C.

Zum Vergleich mit den Ergebnissen aus der Numerik wird im Folgenden die Staustromlinie näher betrachtet. Mit Hilfe der schon in Kapitel 4.2 gezeigten, numerisch ermittelten Teilchendichten und Temperaturen wurde zum Vergleich mit den gemessenen Verläufen die Strahlung von atomarem Stickstoff und Sauerstoff berechnet. Hierbei wurden PARADE Rechnungen unter Vor-

aussetzung einer Boltzmann Verteilung und unter Verwendung der in PARADE verfügbaren QSS-Routine [82] zur Berechnung von Teilchendichten in elektronisch angeregten Niveaus im Nichtgleichgewicht erstellt, aus deren Ergebnisspektren analog zur Auswertung der gemessenen Spektren die Summen der berücksichtigten Emissionslinien von O und N gebildet wurden. Die Rechnungen für SiC und SiO₂ Oberflächen ergaben gleiche Ergebnisse, deshalb wird im Folgenden nur noch die SiC Probe angesprochen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 4.36 und 4.37 zusammen mit der Abel-invertierten Emission von atomarem Stickstoff und Sauerstoff dargestellt.

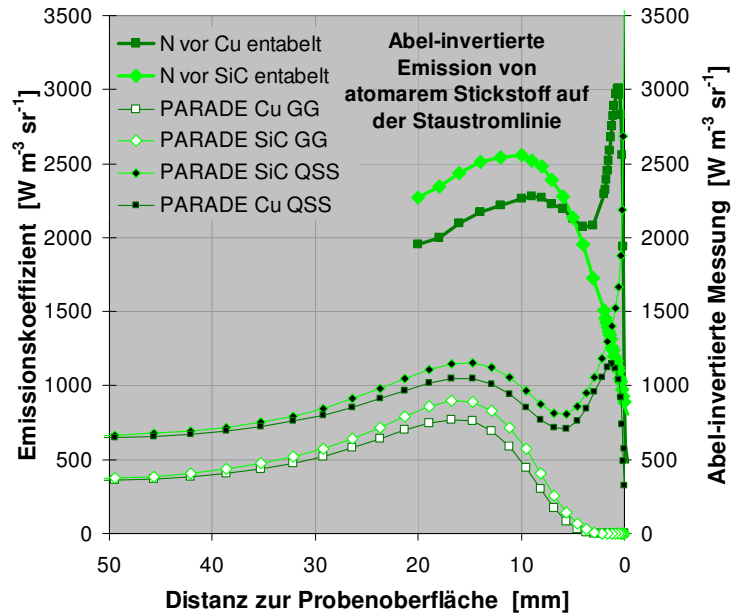


Abbildung 4.36: Abel-invertierte Emission von N vor einer wassergekühlten Kupferoberfläche und einer glühenden SiC Materialprobe auf der Staustromlinie und mit PARADE berechnete Emissionskoeffizienten mit Gleichgewichts- und QSS Anregung.

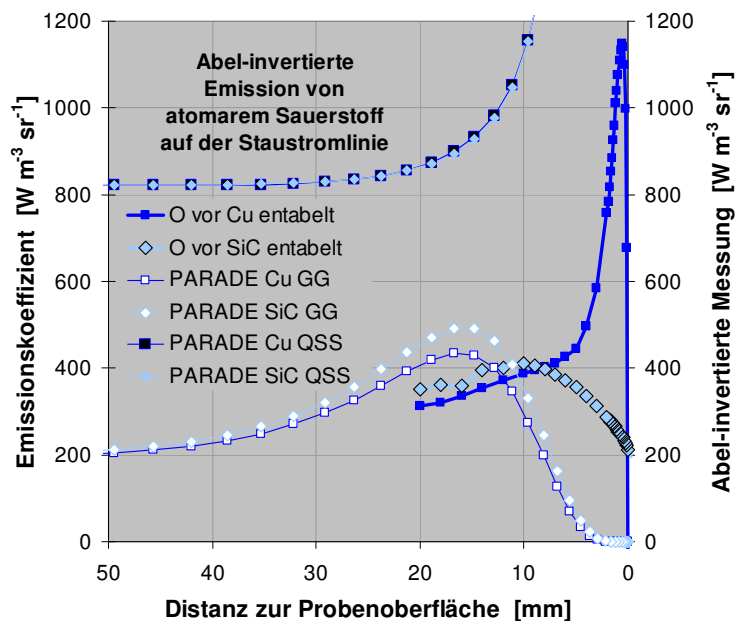


Abbildung 4.37: Abel-invertierte Emission von O vor einer wassergekühlten Kupferoberfläche und einer glühenden SiC Materialprobe auf der Staustromlinie, mit PARADE berechnete Emissionskoeffizienten mit Gleichgewichts- und QSS Anregung.

Für atomaren Sauerstoff stimmt die mit Gleichgewichtsannahmen berechnete Strahlung am Rand des Messgebiets quantitativ überraschend gut mit den Messwerten überein, für atomaren Stickstoff ergibt sich jedoch ein Faktor von etwa 2,5 zwischen experimentellen und berechneten Werten. Grundsätzlich weist die Gleichgewichtsrechnung im Verlauf vor der Probe eine qualitative Übereinstimmung mit den Messwerten vor der SiC Probe auf, ergibt aber mit etwa 15 mm einen deutlich höheren Abstand des Strahlungsmaximums von der Oberfläche als die Messungen, in denen die maximale Strahlung etwa 10 mm vor der Oberfläche detektiert wird. Die Messwerte reichen leider nur bis zu einem Abstand von 20 mm vor der Probe, deshalb kann der in den Rechnungen erkennbare Rand der Grenze des Aufstaugebiets bei etwa 50 mm Abstand zur Oberfläche nicht überprüft werden.

Vor Kupfer weisen die Messungen ein Maximum direkt vor der Oberfläche auf, das in der Gleichgewichtssimulation nicht zu erkennen ist. In der PARADE Rechnung mit QSS-Nichtgleichgewichtsanregung tritt für Stickstoff dagegen ein sehr ähnliches Maximum auf. Qualitativ stimmt der Verlauf mit dem gemessenen Strahlungsverlauf überein, allerdings liegt das in der QSS-Rechnung erkennbare Maximum näher an der Probenoberfläche. Für atomaren Sauerstoff weist die QSS Rechnung einen unphysikalischen Verlauf auf, da die Emission vor allen Materialien bis zur Oberfläche hin unverhältnismäßig stark ansteigt und auch im Anströmgebiet immer über der von Stickstoff liegt. Bei näherer Betrachtung der in PARADE ermittelten Teilchendichten der elektronisch angeregten Niveaus zeigen sich für die QSS Rechnung nahe der Oberfläche betragsmäßig hohe, aber negative Teilchendichten im Grundniveau und in den unteren angeregten Niveaus, was auf ein Versagen des Modells hindeutet. Aus der QSS Rechnung für Sauerstoff lassen sich also keine weiteren Informationen extrahieren.

Vor SiC liegt die Emission in der Numerik in der gesamten Grenzschicht grundsätzlich leicht über der vor einer Kupferprobe. Stromaufwärts des oben erwähnten Maximums in Abständen von 10 mm bis 20 mm zur Oberfläche ist dieser Effekt in den Messungen ebenfalls zu erkennen. Aus den experimentellen Daten an dieser Stelle geht ein Verhältnis N/O von etwa 6 hervor. Die PARADE Rechnungen mit Gleichgewichtsanregung ergeben hingegen einen Faktor von etwa 2. Die QSS Rechnungen weisen auch das bereits erwähnte Maximum an der Oberfläche auf, was im Widerspruch zu den Messwerten steht. Tatsächlich ist das Maximum vor SiC sogar höher als vor Kupfer.

Zumindest für Stickstoff könnte die QSS-Nichtgleichgewichtsanregung also das gemessene Strahlungsmaximum vor der Kupferprobe erklären, nicht aber den Abfall der Strahlung vor der SiC Materialprobe. Dieser gemessene Abfall ist also nicht über Nichtgleichgewichtseffekte erklärbar, die durch eine QSS-Rechnung erfasst werden können.

Weitere Erklärungsmöglichkeiten bieten jedoch die Vibrationstemperaturverläufe aus Abbildung 4.7. Wie schon in Kapitel 4.2 beschrieben wurde, kann die Berücksichtigung von unvollständiger Akkomodation bei der Rekombination an einer Oberfläche die Vibrationstemperatur der gebildeten Spezies anheben, wie vor SiC und SiO₂ für NO zu erkennen ist. In URANUS werden für Kupferoberflächen Akkomodationskoeffizienten von 1 verwendet, die in der Realität wahrscheinlich nicht haltbar sind, wie in Experimenten für O₂-Rekombination festgestellt wurde [73]. Vor Kupfer sollte also ein Ansteigen der Vibrationstemperaturen von N₂ und O₂ erwartet werden. Zur Zeit werden die Auswirkungen der Energieakkommodationskoeffizienten unter Variation des Rekombinati-

onskoeffizienten am IRS numerisch untersucht. Im Rahmen einer Studienarbeit konnte gezeigt werden, dass bei einer Anströmung durch ein Luftplasma mit einer spezifischen Gesamtenthalpie von 20 MJ/kg die Vibrationstemperatur von O_2 um einen Faktor von 2 und mehr angehoben werden kann [94]. Weiterhin zeigen bestehende Modelle [64] im betrachteten Druckregime eine starke Kopplung der Elektronentemperatur an die Vibrationstemperatur von N_2 . Eine Erhöhung der Vibrationstemperatur von N_2 würde also auch die Elektronentemperatur erhöhen, die wiederum ausschlaggebend für die elektronische Anregung der Atome und damit für die emittierte Strahlung ist. Vor einer SiO_2 oder SiC Oberfläche wird die unvollständige Energieakkomodation schon berücksichtigt und zeigt keinen hohen Einfluss auf T_{vib,N_2} , aber die Rekombinationskoeffizienten an diesen Oberflächen sind deutlich niedriger als die auf Kupfer. Sollte T_{vib,N_2} durch einen Einfluss der Energieakkomodation nahe der Oberfläche deutlich steigen, müsste auch die Strahlung in diesem Gebiet anwachsen. Zum jetzigen Zeitpunkt können diese Prozesse nicht quantifiziert werden, generell bieten sie jedoch eine Erklärungsmöglichkeit für die beobachteten Effekte. Eine detailliertere Betrachtung ist im Rahmen dieser Arbeit allerdings nicht möglich.

4.7.2 Temperaturverteilungen aus Messungen der Atomstrahlung

Über die Grenzschicht hinweg wurden auch Verläufe der elektronischen Anregungstemperatur von atomarem Sauerstoff und Stickstoff bestimmt. Grundsätzlich weisen die Anregungstemperaturverteilungen in der Grenzschicht die gleiche Charakteristik auf, die sich schon in den Freistrahluuntersuchungen gezeigt hat. Abbildung 4.38 zeigt beispielhaft die Boltzmann-Plots zwischen den angeregten Niveaus von O und N für einen Abstand von 1 mm zur gekühlten Kupferoberfläche auf der Staustromlinie. Zumindest für Sauerstoff ist zwischen diesen elektronisch angeregten Niveaus eine Boltzmann-Verteilung gegeben.

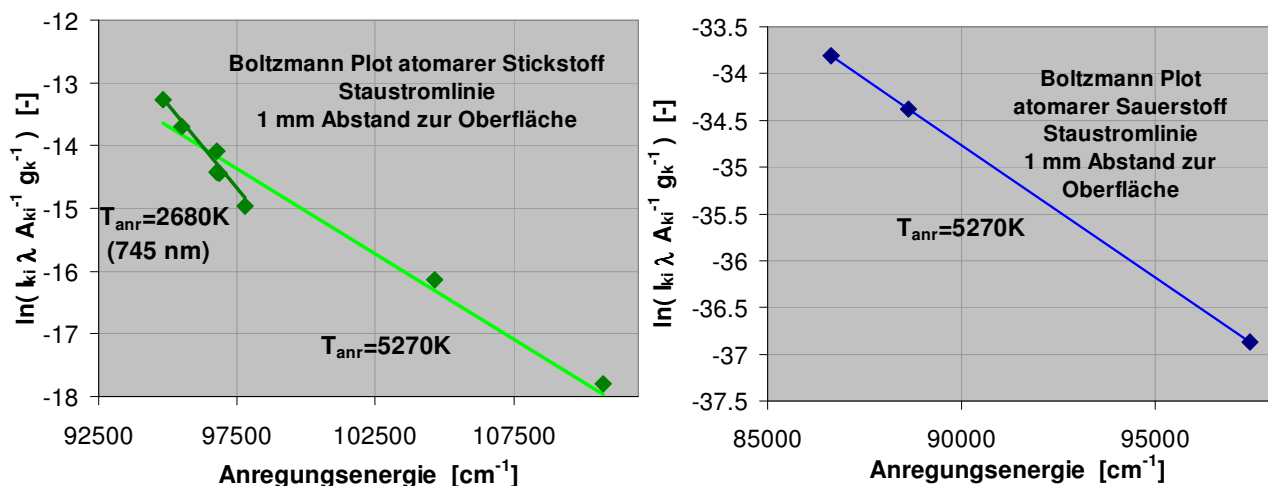


Abbildung 4.38: Boltzmann Plots für die Emission von atomarem Stickstoff und Sauerstoff aus Abel-invertierten Messwerten auf der Staustromlinie in 1 mm Abstand zur gekühlten Kupferoberfläche..

Die resultierenden Temperaturverläufe sind in den Abbildungen 4.38 bis 4.41 gezeigt. Im Gegensatz zu den bisher gezeigten Diagrammen wurde für die Temperaturverläufe in der Grenzschicht eine nicht äquidistante Darstellung der gemessenen Positionen gewählt, in der die körpernahe Grenzschicht vergrößert dargestellt ist.

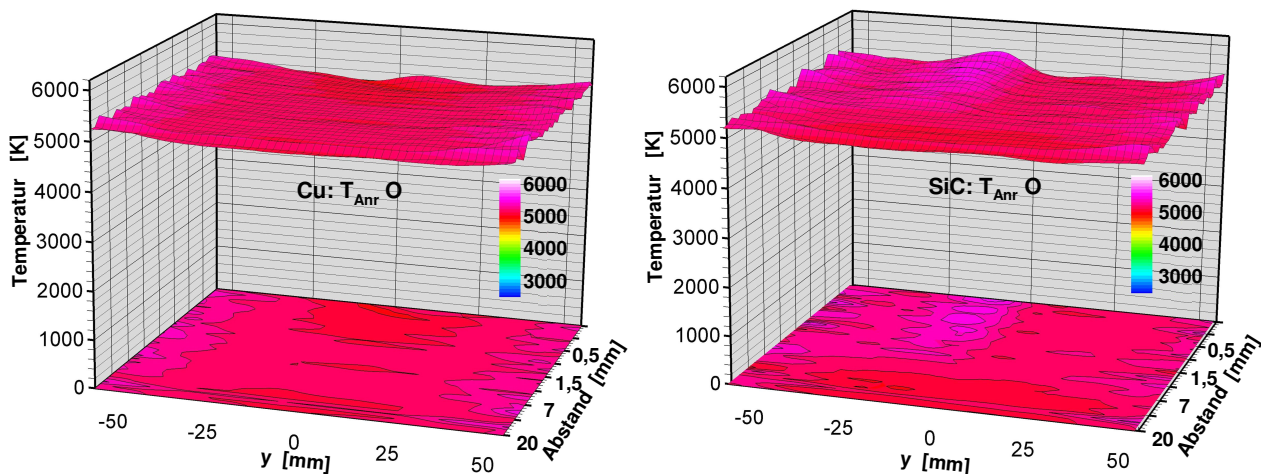


Abbildung 4.39: Anregungstemperaturverteilung aus Boltzmann-Plots der Emission von O vor einer gekühlten Kupferprobe und einer glühenden SiC-Materialprobe bei 1700°C .

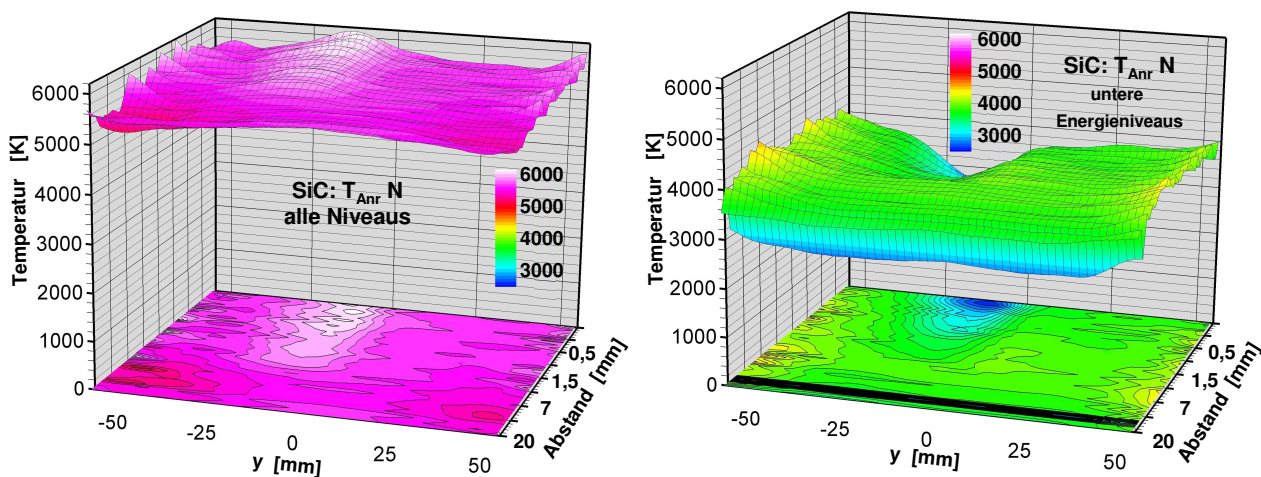


Abbildung 4.40: Anregungstemperaturverteilung aus Boltzmann-Plots der Emission von N vor einer glühenden SiC-Materialprobe bei 1700°C .

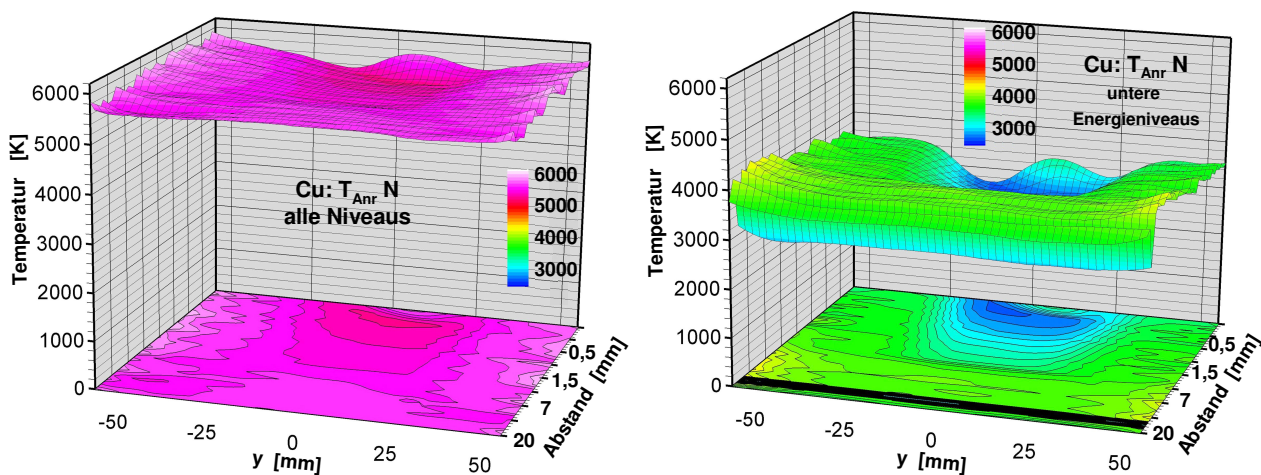


Abbildung 4.41: Anregungstemperaturverteilung aus Boltzmann-Plots der Emission von N vor einer gekühlten Kupferprobe.

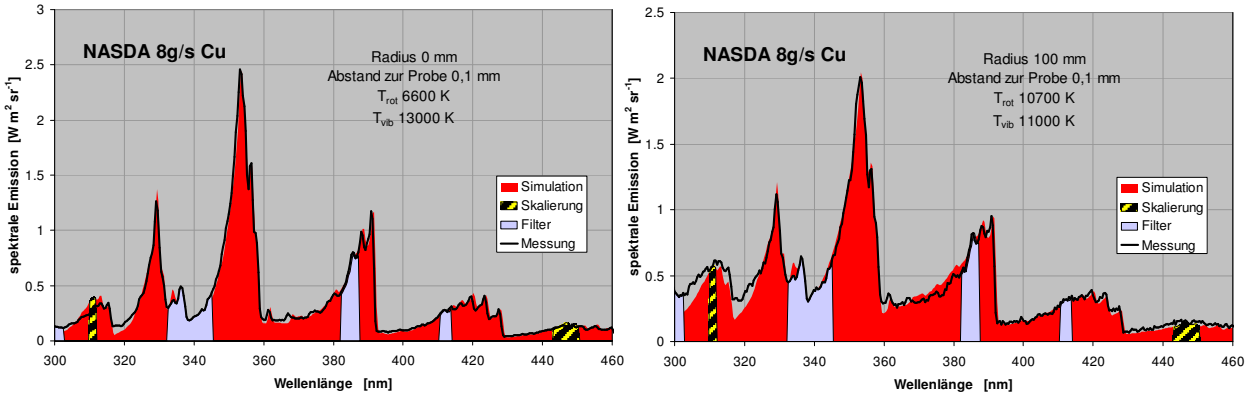


Abbildung 4.42: Gemessene und simulierte Einzelspektren der N_2^+ und N_2 Emission an verschiedenen Positionen in der Grenzschicht vor einer gekühlten Kupferoberfläche.

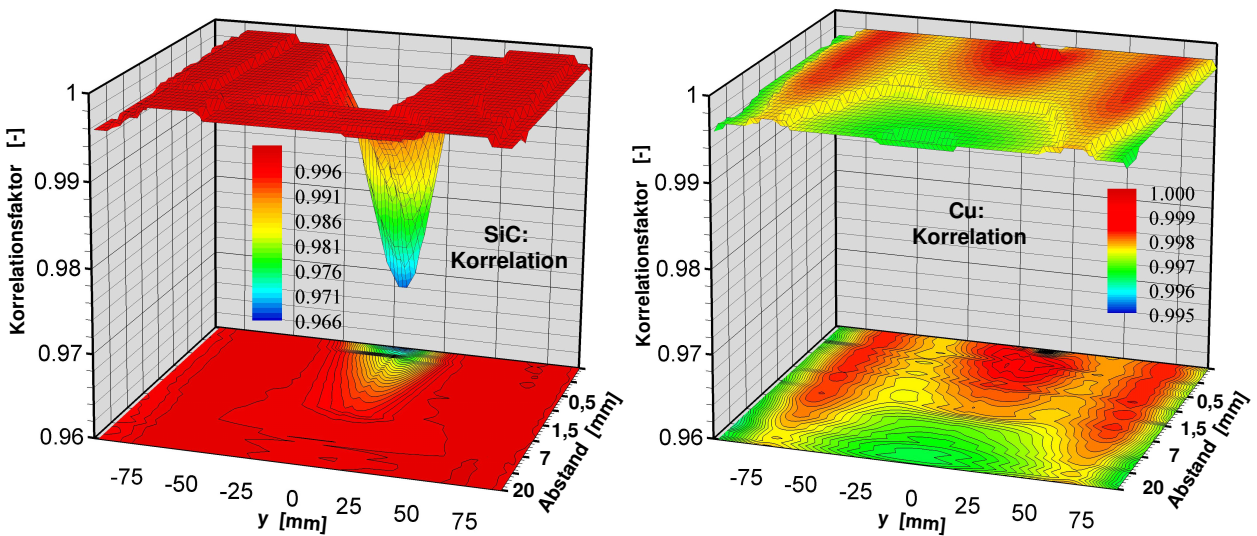


Abbildung 4.43: Verteilung des Korrelationsfaktors bei der Temperaturbestimmung in der Grenzschicht vor einer SiC Materialprobe bei $1700^\circ C$ und vor einer gekühlten Kupferoberfläche.

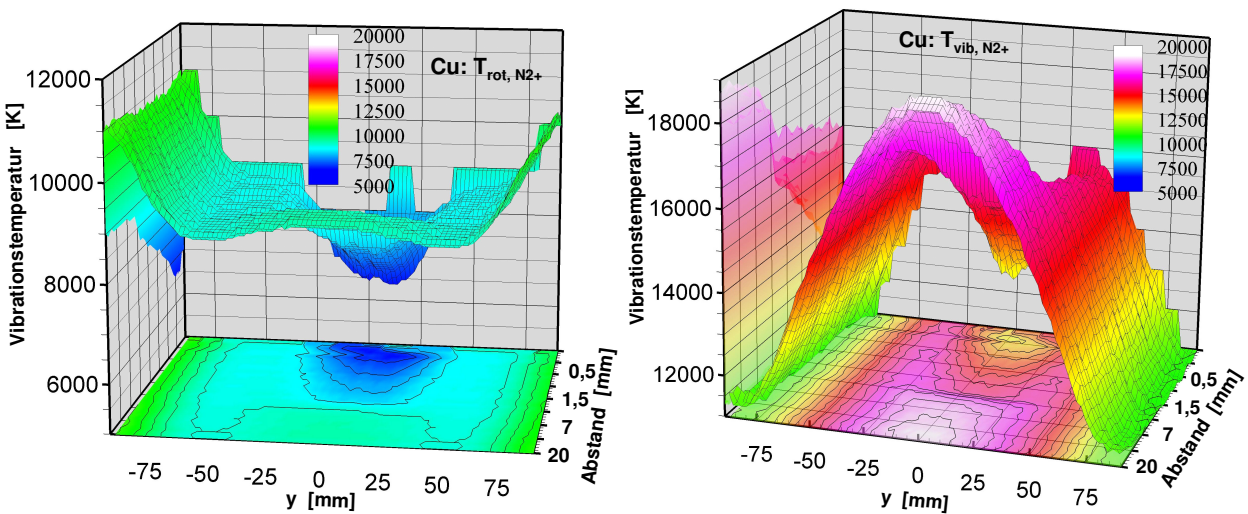


Abbildung 4.44: Rotations- und Vibrationstemperaturverteilung von N_2^+ in der Grenzschicht vor einer gekühlten Kupferoberfläche.

Die Anregungstemperatur von atomarem Sauerstoff zeigt über die Grenzschicht hinweg keine signifikante Änderung, auch wenn vor der SiC-Oberfläche ein leichter Anstieg erkannt werden kann, der vor der Kupferoberfläche nicht zu sehen ist. Es wurde eine im Wesentlichen konstante Anregungstemperatur von etwa 5200 K bestimmt. Werden alle detektierten Stickstofflinien zur Temperaturbestimmung genutzt, ergibt sich für die Anregungstemperatur von atomarem Stickstoff ein sehr ähnlicher Verlauf. Auch hier kann eine weitgehend konstante Temperatur von etwa 5300 K extrahiert werden, jedoch ist vor der SiC Oberfläche ein deutlicherer Anstieg auf etwa 6000 K zu erkennen, während vor der Kupferprobe ein leichtes Absinken der Anregungstemperatur erkannt werden kann.

Werden zur Auswertung jedoch nur die Linien des $2s^2 2p^3 (^4S^o)3p \rightarrow 2s^2 2p^3 (^4S^o)3s$ Triplets bei 745 nm herangezogen, ergeben sich wie bei den Freistrahlmessungen deutlich niedrigere Temperaturen von etwa 4000 K am Grenzschichttrand. Die Verteilung vor der Sondenoberfläche zeigt jedoch eine ausgeprägte Temperaturgrenzschicht in Oberflächennähe mit einem Temperaturabfall auf etwa 2500 K vor der Oberfläche. Die Temperaturen vor der Kupferoberfläche entsprechen zwar denen vor der SiC Materialprobe, die Grenzschicht selbst ist jedoch sowohl in axialer wie auch in radialer Richtung sehr viel deutlicher ausgeprägt. Die lokal leicht ansteigenden Temperaturen nahe der Oberfläche resultieren aus einer leichten Dejustage des Versuchsaufbaus, wodurch der Messfleck die Sondenoberfläche gestreift hat. Damit geben die aus den unteren Energieniveaus ermittelten Temperaturen den erwarteten Grenzschichtverlauf qualitativ besser wieder als die energetisch höheren Niveaus.

4.7.3 Temperaturverteilungen aus emissionsspektroskopischen Messungen der Molekülstrahlung

Analog zu den schon beschriebenen Freistrahlundorschungen wurden durch Vergleiche der simulierten und gemessenen Spektren Rotations- und Vibrationstemperaturen der strahlenden Systeme von N_2^+ und N_2 durchgeführt. In diesem Wellenlängenbereich tritt vor einer SiC Materialprobe jedoch auch die Strahlung von Erosionsprodukten wie z.B. Si, SiO, CN und CO auf. Eine Temperaturbestimmung, in der Wellenlängenbereiche mit signifikanten Beiträgen von Erosionsprodukten ausgefiltert wurden, zeigte, dass nur eine unbefriedigende Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung [124] erreicht werden konnte und aussagekräftige Temperaturen konnten nur vor einer gekühlten Kupferoberfläche bestimmt werden. Die wesentliche Größe zur Beurteilung der Aussagekraft der Temperaturbestimmung ist in dem Falle der Korrelationsfaktor, der die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment angibt. Werte über 0,99 indizieren eine gute Übereinstimmung während Werte unter 0,95 auf eine unzureichende Übereinstimmung für eine Temperaturbestimmung hinweisen. Abbildung 4.42 zeigt simulierte und gemessene Spektren auf der Plasmastrahlachse und direkt vor der Probenoberfläche mit sehr guten Korrelationsfaktoren. Bemerkenswert ist, dass der Korrelationsfaktor zur Sondenoberfläche hin deutlich ansteigt und direkt vor der Kupfer-Oberfläche ein Maximum annimmt, wie in Abbildung 4.43 dargestellt ist, während der Korrelationsfaktor vor einer SiC-Oberfläche über die Grenzschicht hinweg abnimmt und vor der SiC-Oberfläche ein Minimum annimmt, das allerdings hauptsächlich auf die störende Strahlung der Erosionsprodukte zurückzuführen ist. Die Gültigkeit der Boltzmannverteilung und damit die Annäherung an einen Gleichgewichtszustand nimmt also zur Kupferoberfläche hin zu, was auf den

Einfluss der Oberflächenkatalyzität zurückgeführt wird, die Prozesse begünstigt, die in Richtung des Gleichgewichtszustandes laufen. Trotzdem ergeben sich deutlich unterschiedliche Werte für die Vibrations- und die Rotationstemperatur, die auf der Plasmastrahlachse von etwa 9500 K am Grenzschichtrand auf Werte von etwa 6500 K direkt vor der Oberfläche abfällt. Die entsprechenden Werte der Vibrationstemperatur liegen hier bei 19000 K und 12500 K. Die ermittelten Temperaturverläufe sind in Abbildung 4.44 gezeigt. Während eine Kopplung der Rotationstemperatur an die Translationstemperatur wahrscheinlich ist, wird die Vibrationstemperatur stärker von Elektronenstößen beeinflusst. Trotz der steigenden Annäherung an einen Gleichgewichtszustand bezüglich der rotatorischen und vibratorischen Anregung kann also nicht davon ausgegangen werden, dass sich diese Annäherung auch auf die Zustandgrößen von Elektronen und Schwerteilchen erstreckt.

Über die beschriebenen Ergebnisse hinaus wurden auch NO-Spektren aufgenommen. Bedingt durch die hohen Rechenzeiten war eine Berechnung der NO-Molekültemperaturen über die Grenzschicht hinweg bisher jedoch nicht möglich.

Kapitel 5

Vorschlag eines Flugexperimentes

Das eigentliche Ziel aller Untersuchungen zum Wiedereintritt von Raumflugkörpern in die Erdatmosphäre ist der wirkliche Rückkehrflug. Bei aller Sorgfalt zur Simulation dieser Vorgänge in Bodentestanlagen kann eine endgültige Überprüfung der angewandten Methoden deshalb nur in einem wirklichen Flug stattfinden. Eine sehr wichtige Rolle spielen hierbei die numerischen Methoden zur Vorhersage der während des Fluges auftretenden Lasten. Zur Verifikation dieser Methoden und hierbei vor allem der verwendeten Chemiemodelle muss ein Zugang zur chemischen Zusammensetzung im Nachstoßbereich gefunden werden. Wie in den vorausgegangenen Kapiteln gezeigt, kann dies mit Hilfe der Emissionsspektroskopie erfolgen. In der Vergangenheit wurden deshalb vor allem in Amerika einige Flugexperimente durchgeführt [17, 30, 81], deren Ergebnisse – soweit sie international zugänglich gemacht wurden – in Kombination mit den Programmpaketen zur numerischen Simulation des Wiedereintritts nicht nur für die Forschung in den USA wertvolle Erkenntnisse zur Folge hatten [60]. Leider beschränkten sich die bisher durchgeführten bzw. veröffentlichten Experimente auf einzelne Spezies oder, bedingt durch verhältnismäßig niedrige Fluggeschwindigkeiten, wie z.B. bei Bow-Shock-UV [30], auf niedrige Temperaturbereiche. Aus Experimenten mit höheren Geschwindigkeiten, wie z.B. mit mehr als 10 km/s bei FIRE II [17, 81], stehen bisher nur radiometrische Messungen ohne detaillierte spektrale Auflösung zur Verfügung. Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs SFB 259 wurden auch Flugexperimente entwickelt und qualifiziert. Unter anderem wurde am Institut für Raumfahrtssysteme das Spektrometersystem RESPECT (**Re-Entry SPECTrometer**) für den Wiedereintrittsflug ausgelegt und der ESA vorgeschlagen [120]. Mit dem EXPERT-Programm der ESA [75] wird jetzt eine Plattform zur Durchführung eines solchen Experiments zur Verfügung stehen. Im Folgenden wird eine Beschreibung des vorgeschlagenen Systems und der zur Auslegung durchgeführten Analysen gegeben. Abbildung 5.1 zeigt eine Darstellung des Messprinzips für das RESPECT System auf EXPERT.

Das RESPECT System besteht im Wesentlichen aus zwei Sensorköpfen, die die Durchführung durch das Hitzeschutzsystem und die Einkoppeloptik in die Lichtwellenleiter beeinhaltet. Über die optischen Fasern wird das Licht zum Spektrometer geleitet, das zusammen mit der Auswerteelektronik und dem Kontrollcomputer geschützt im Inneren der Kapsel sitzt. Sowohl die Auslegung des Spektrometersystems als auch die geplante Auswertung der Messdaten stützen sich in besonderem Maße auf theoretisch-numerische Berechnungen mit dem Strömungslöser URANUS und dem Strahlungsberechnungsprogramm PARADE. Bei einem Flugspektrometer kann die integrierende Natur emissionsspektroskopischer Messungen nicht kompensiert werden, und es steht keine direkte Methode zur örtlichen Auflösung der Messergebnisse zur Verfügung. Die Messergebnisse werden also immer die integrierte Strahlungsleistung des gesamten Gebietes zwischen dem Verdichtungsstoß

und der Körperoberfläche repräsentieren, wodurch eine direkte Extraktion von Temperaturen oder Teilchendichten aus den Messergebnissen nicht möglich ist. Um trotz der ausgeprägten Gradienten in dem betrachteten Strömungsfeld Aussagen über den thermodynamischen Zustand zu ermöglichen, ist eine enge Kopplung der Datenauswertung an die numerische Strömungssimulation notwendig. Die aus der numerischen Simulation gewonnenen, örtlich aufgelösten Informationen über den Plasmazustand im Nachstoßbereich werden als Ausgangsgrößen für ein Programm zur Strahlungssimulation verwendet. Die so erhaltenen, örtlich aufgelösten Einzelspektren werden entlang des optischen Pfades des Detektionssystems aufintegriert und ergeben das theoretisch simulierte Spektrometersignal.

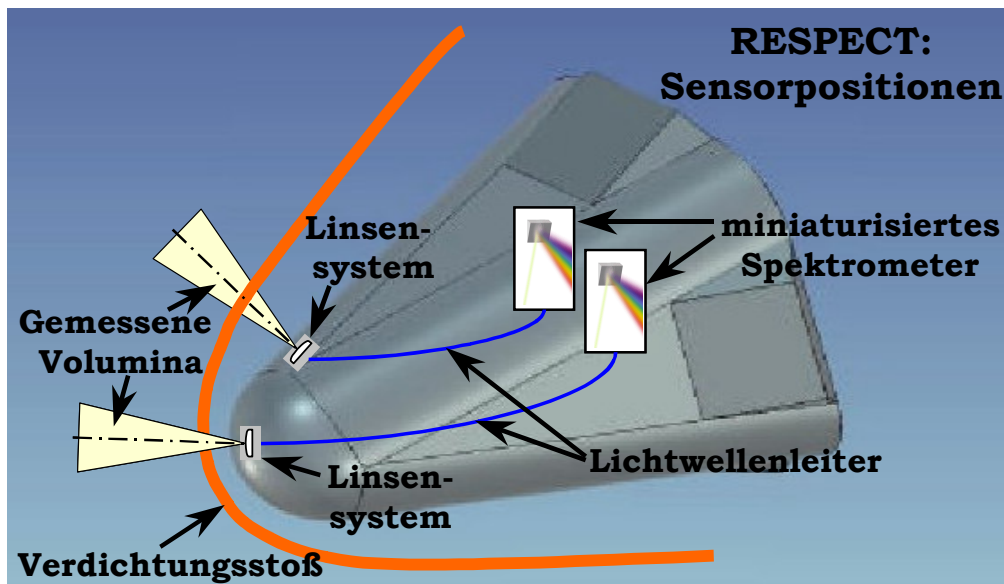


Abbildung 5.1: Messprinzip und vorgeschlagene Sensorpositionen von RESPECT auf EXPERT.

Zur Auslegung des Spektrometersystems wurden einzelne Trajektorienpunkte von EXPERT ausgewählt, für die mit dem Programmpaket URANUS das jeweilige Strömungsfeld um das Raumfahrzeug berechnet wurde [6]. Da die genauen Sensorpositionen zum Auslegungszeitpunkt noch nicht festgelegt waren, wurden zur Simulation des Spektrometersignals Integrationslinien im Stauunkt und an einer seitlichen Position an der Grenze der Nasenkappe ausgewählt. Da EXPERT ein ballistisches Kapselexperiment ist, liegt der Punkt des maximalen Wärmeflusses mit 35 km in verhältnismäßig niedriger Höhe bei einem relativ hohen Staudruck von etwa 1,7 bar. In diesem Druckbereich wird ein gleichgewichtsnaher Plasmazustand erwartet. Von besonderem Interesse in Hinblick auf die Beurteilung der Rechenverfahren ist jedoch vor allem der Bereich der Trajektorie, der durch Nichtgleichgewichtszustände charakterisiert ist, sodass ein Hauptaugenmerk auf die Datenerfassung in Höhen um ca. 70 km Höhe gelegt wurde. Trotzdem ist eine Datenerfassung entlang der gesamten Trajektorie geplant. Abbildung 5.2 zeigt den Verlauf der Translationstemperatur im Strömungsfeld der EXPERT Kapsel in einer Höhe von 70 km und das zugrunde liegende Gitternetz für die numerische Simulation mit den angenommenen Sichtlinien für die beiden Spektrometerpositionen. In Abbildung 5.3 sind exemplarisch mit PARADE simulierte Einzelspektren entlang der Staustromlinie für diesen Flugzustand dargestellt. Es ist klar zu erkennen, dass der Hauptteil der

Strahlung im Nachstoßgebiet erzeugt wird, während die körpernahe Grenzschicht nur unwesentlich zum gemessenen Signal beiträgt.

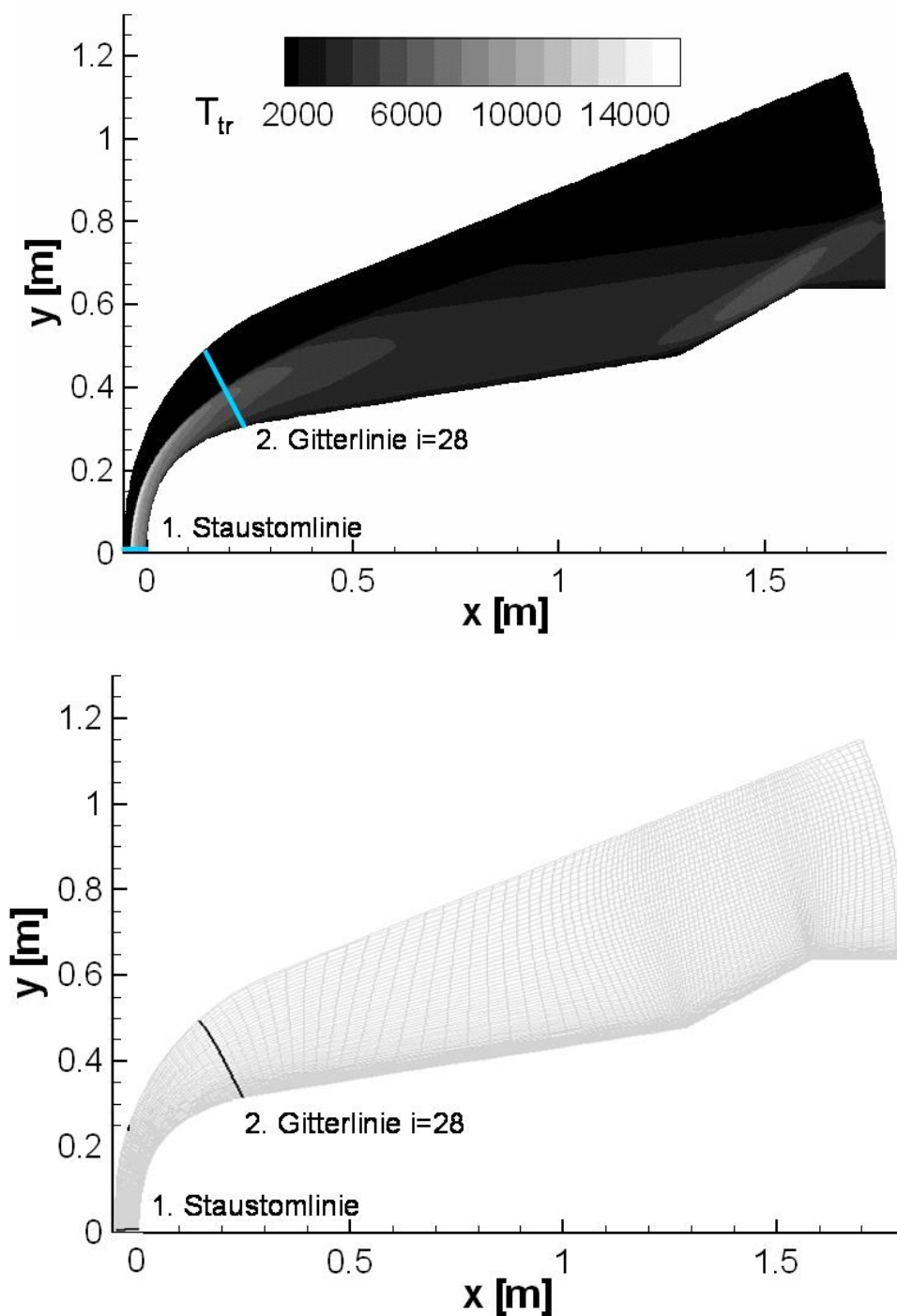


Abbildung 5.2: Verlauf der Translationstemperatur im Strömungsfeld der EXPERT Kapsel bei einer Höhe von 70 km für eine Eintrittsgeschwindigkeit von 6 km/s gemäß URANUS Simulation mit dem verwendeten Rechengitter mit den Integrationslinien für die Simulation des Spektrometersignals.

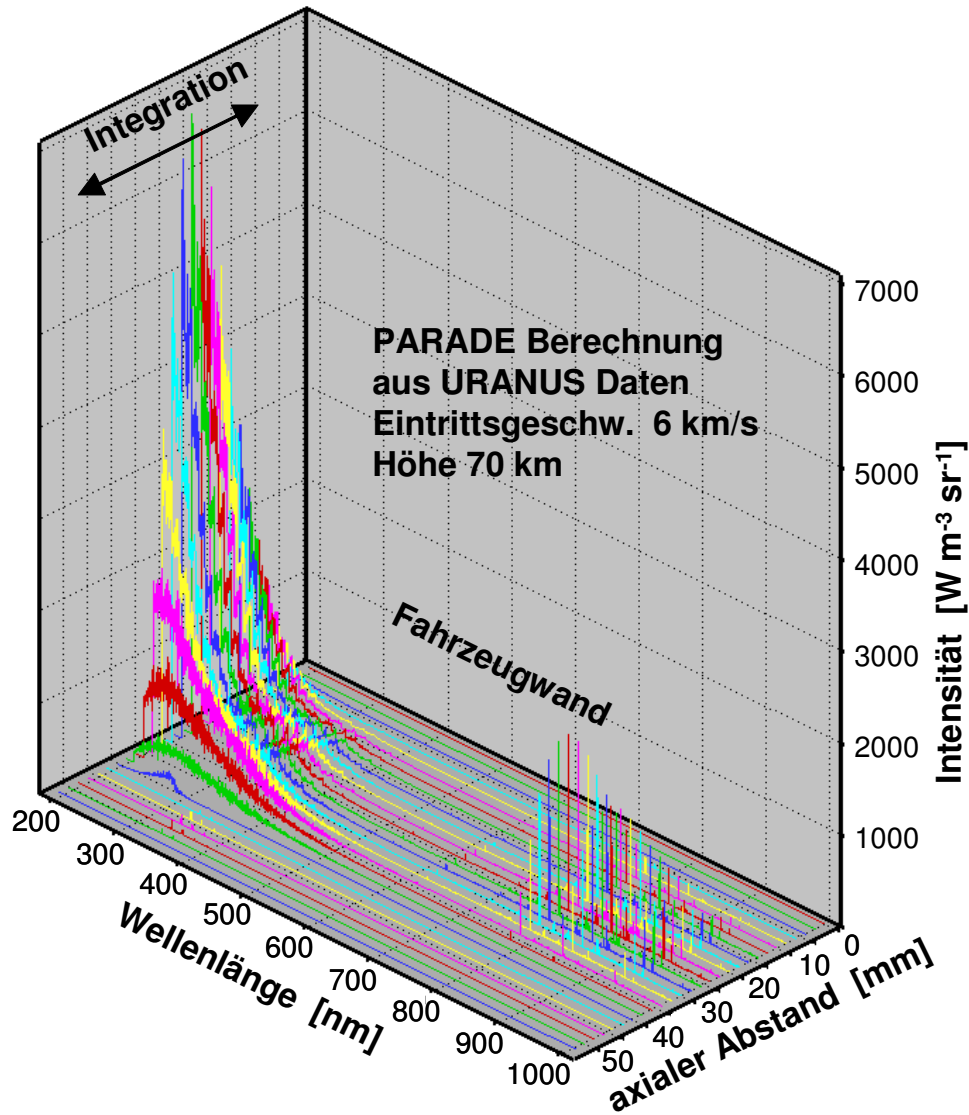


Abbildung 5.3: Örtlich aufgelöste Einzelspektren auf der Staustromlinie generiert durch PARADE Rechnungen basierend auf den Informationen über das Strömungsfeld aus der URANUS Simulation bei einer Höhe von 70 km für eine Eintrittsgeschwindigkeit von 6 km/s.

Schon zur Auslegung des Systems [6, 95] war es wichtig, die erwartete Strahlung mit verhältnismäßig hoher Genauigkeit vorhersagen zu können, da zahlreiche Hardwarebeschränkungen bezüglich Gewicht, Robustheit, Raumfahrttauglichkeit und leider auch finanzielle Beschränkungen ein eher limitiertes System bedingen, das zwar die erforderliche Genauigkeit aufweisen kann, aber dazu verhältnismäßig stark an die Messbedingungen angepasst werden muss. Über die Trajektorie hinweg steht nur noch die Belichtungszeit als Regelgröße für die Detektion der Strahlungsintensität zur Verfügung. Eine obere Grenze für die detektierbare Strahlung ist hierbei durch die vorgegebene minimal mögliche Belichtungszeit gegeben, die Untergrenze wird durch die maximal zulässige Belichtungszeit festgelegt, die wiederum von der geforderten Messrate bestimmt wird. Diese verhältnismäßig starren Grenzen in Kombination mit der limitierten Intensitätsauflösung des Detektors erfordern eine möglichst gute Anpassung der Systemeffizienz an die Extrembedingungen.

Im Laufe der Voruntersuchungen wurde als Spektrometer das Ocean Optics S2000 ausgewählt [95, 78]. Damit war eine Untergrenze für die minimale Belichtungszeit von etwa 3 ms sowie eine maximale Intensitätsauflösung von 12 Bit festgelegt. Eine weitere Beeinflussung der gemessenen Intensität, zuerst ohne die Verwendung von Filtern, konnte also nur durch die Geometrie des optischen Weges erfolgen. In Zusammenarbeit mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrttechnik in Stuttgart wurde das Konzept einer optischen Durchführung durch den Hitzeschutzschild entwickelt [26], die weitestgehend an das Design des pyrometrischen Temperatursensors PYREX [49] angelehnt wurde, um von dessen bereits vorhandener Raumfahrtqualifikation aus vorhergehenden Missionen [44, 3, 49] profitieren zu können. Aus diesem Design und den Randbedingungen für die grundsätzliche Geometrie der EXPERT Kapsel ergaben sich weitere geometrische Randbedingungen für die Geometrie des optischen Sensors. Innerhalb dieser Randbedingungen fand schließlich eine Optimierung des optischen Systems statt [95].

Als Beispiel für den Auslegungsprozess soll die Auslegung der Einkopplung der Strahlung in den Lichtwellenleiter beschrieben werden. Hier bieten sich drei verschiedene Basiskonfigurationen zur Einkopplung der Strahlung in den Lichtwellenleiter an, die in Abbildung 5.4 dargestellt sind. Eine Brennpunktconfiguration erfasst parallele Lichtstrahlen und fokussiert sie auf den Lichtwellenleiter, der im Fokuspunkt der verwendeten Linse steht. Eine abbildende Konfiguration erzeugt ein scharfes Bild eines Punktes in der Grenzschicht auf dem Lichtwellenleiter, während Positionen vor und hinter diesem Punkt nur über eine unscharfe Abbildung zum Gesamtsignal beitragen. Bei einer absichtlich defokussierten Konfiguration schließlich liegt dieser Punkt der scharfen Abbildung innerhalb der Durchführung durch den Hitzeschutzschild des Raumfahrzeugs und alle Punkte in der zu messenden Grenzschicht werden nur über eine unscharfe Abbildung erfasst.

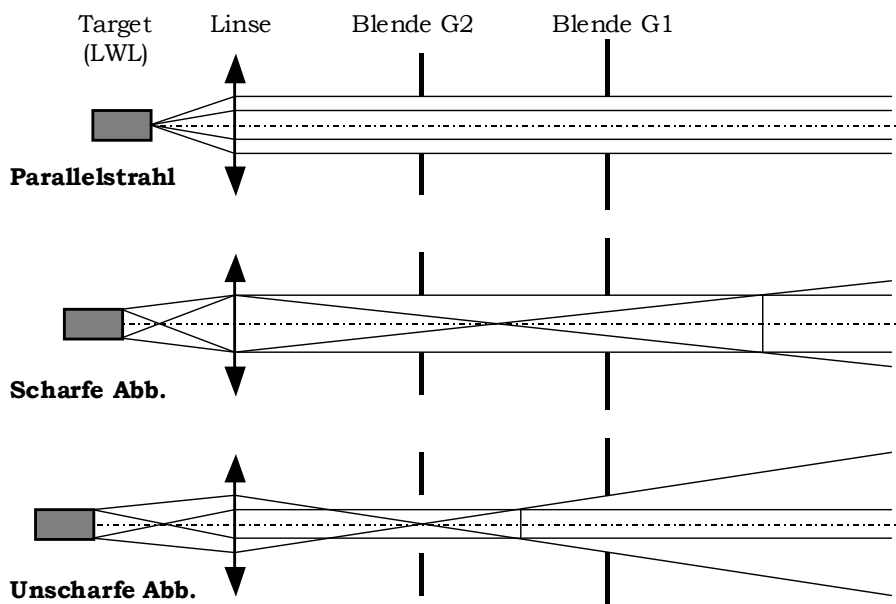


Abbildung 5.4: Basiskonfigurationen zur Einkopplung der optischen Signale in die optische Faser.

Diese drei Konfigurationen haben unterschiedliche Gewichtungen der Signale aus verschiedenen Positionen in der Grenzschicht zur Folge. Zur Charakterisierung dieser Konfigurationen wurden nähere Untersuchungen unter Verwendung des schon früher beschriebenen Strahlverfolgungspro-

gramms RAYS durchgeführt. Speziell in Hinblick auf die Nachflugauswertung scheint die Brennpunkt-Konfiguration I aufgrund der einfachsten Geometrie eine günstige Wahl. Leider können die verschiedenen Konfigurationen jedoch nicht unabhängig voneinander betrachtet werden. Bedingt durch den weiten Spektralbereich und die zwangsläufige Nutzung von Linsen anstelle von Spiegeln aus konstruktiven Gründen muss die chromatische Aberration der verwendeten Linsen berücksichtigt werden. Durch diesen Effekt verschiebt sich die Brennweite der verwendeten Linse mit der Wellenlänge des detektierten Lichts gemäß:

$$f = f_{\lambda_0} \cdot \frac{(n_{\lambda_0} - 1)}{(n - 1)} \quad (61)$$

Erfolgt also eine Auslegung des optischen Systems laut Konfiguration I für eine Wellenlänge von 200 nm, so entspricht dies für höhere Wellenlängen einem fließenden Übergang auf Konfiguration II, da jetzt der Lichtwellenleiter nicht mehr im Brennpunkt der Linse steht, sondern effektiv eine scharfe Abbildung eines Punktes erzeugt, der nicht mehr im Unendlichen liegt. Dadurch ändern sich die optischen Verhältnisse mit der Wellenlänge. Optimal wäre die Nutzung von apochromatischen Objektiven, deren Brennweite über einen weiten Wellenlängenbereich nahezu konstant ist, und die Effekte durch chromatische Aberration eliminieren würden. Diese Objektive bestehen aus drei Einzellinsen aus Quarzglas und Kalziumfluorid. Leider konnte kein Hersteller die mechanische und thermische Stabilität dieser Objektive garantieren, sodass zugunsten der Systemsicherheit auf einen Einsatz verzichtet werden musste. Es ergeben sich also für verschiedene Wellenlängen unterschiedlich optische Konfigurationen. Dem wurde Rechnung getragen, indem die Untersuchungen mit Hilfe der Strahlverfolgung für drei verschiedene Wellenlängen bei 200 nm, 400 nm und 800 nm durchgeführt wurden. Die resultierenden Einflussfaktoren der unterschiedlichen Querschnitte wurden interpoliert und bei der Integration der mit PARADE berechneten Einzelspektren berücksichtigt.

Weitere Schritte der Auslegung zielten im Wesentlichen auf die Ermittlung der absoluten System-sensitivität ab, um die theoretisch simulierten Strahlungsleistungen in ein Spektrometersignal in Counts umwandeln zu können. Die oben beschriebenen theoretischen Untersuchungen des Systems wurden dabei mit Messungen von kalibrierten Eichlampen ergänzt, die ebenfalls mit theoretischen Untersuchungen des Strahlengangs durch Strahlverfolgung ergänzt wurden. Die Wirkungsweise des Strahlverfolgungsprogramms wurde durch diese Messungen bestätigt [95]. Abbildung 5.5 fasst die generelle Vorgehensweise der Ermittlung der absoluten Sensitivität und zeigt die einzelnen Schritte der theoretischen und experimentellen Linien noch einmal auf. Zusätzlich wurden die simulierten Molekülspektren unterhalb von 275 nm mit einem Faktor von 0,7 und oberhalb dieses Wertes mit einem Faktor von 1,3 multipliziert. Diese Faktoren ergaben sich bei Vergleichsrechnungen mit Gleichgewichtsmessungen eines Luftspektrums, die im Laufe eines von der ESA initiierten Vergleichs europäischer Strahlungssimulationsprogramme ermittelt wurden [122].

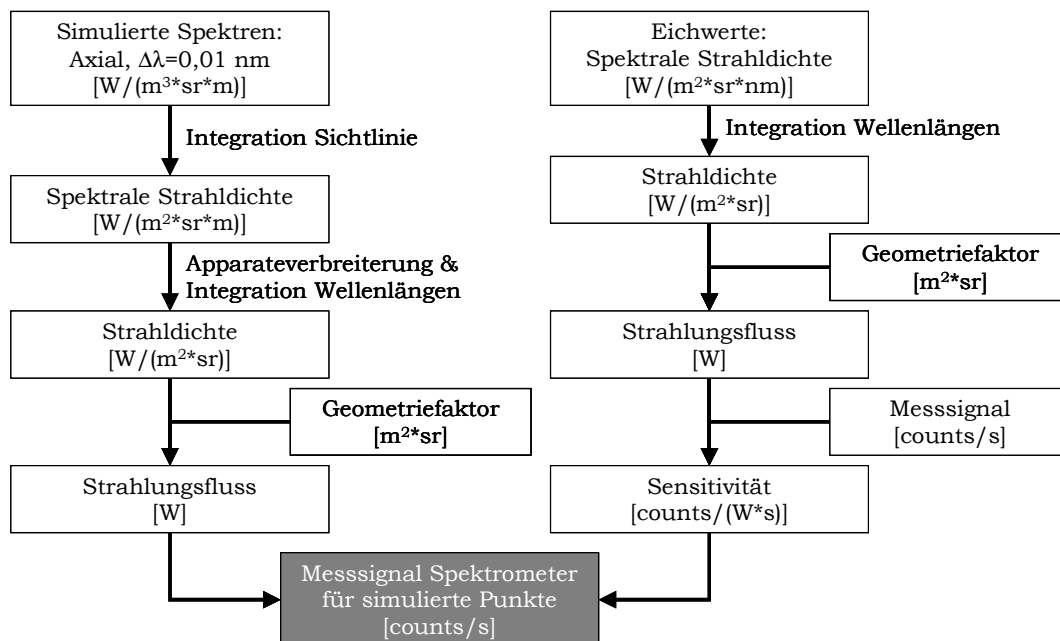


Abbildung 5.5: Schematische Vorgehensweise zur Bestimmung der absoluten Sensitivität des Spektrometersystems RESPECT.

Unter Verwendung der oben genannten Daten konnten schließlich simulierte Spektrometersignale für verschiedene Trajektorienpunkte ermittelt werden. Zur Abschätzung des Spektrometersignals wurde die Fahrzeuggeometrie 4.2 verwendet. Tabelle 1 fasst die berücksichtigten Flugzustände zusammen.

		(5 km/s, 70 km)		(6 km/s, 70 km)		(6,6 km/s, 43 km)	
		<i>Staustr.</i>	<i>Seitenpos.</i>	<i>Staustr.</i>	<i>Seitenpos.</i>	<i>Staustr.</i>	<i>Seitenpos.</i>
Strahldichte [W/(m²*sr)]		1359,1	24,4	12030,9	337,8	18996,3	168,7
	Blende G2	1 mm	2 mm	1 mm	5 mm	1 mm	2/5 mm
	Linse	1 mm	3 mm	1 mm	2 mm	1 mm	3/2 mm
	Integrationszeit	54 ms	90 ms	6 ms	11 ms	4 ms	12/17 ms

Tabelle 1: Zur Auslegung des Spektrometersystems ESPECT auf EXPERT berücksichtigte Trajektorienpunkte mit benötigten Blendendimensionen und Belichtungszeiten.

Durch eine Variation der in den Strahlengang eingebrachten Blenden konnte ein maximales Spektrometersignal von 4000 Counts für jeden Simulationspunkt erreicht werden. Die minimalen Blendendurchmesser bestimmen die vorläufige Flugkonfiguration, auf deren Basis dann die resultierende Spektrometerantwort für die einzelnen Positionen bestimmt wurde. Abbildung 5.6 zeigt exemplarisch die Ergebnisse für eine Flughöhe von 70 km über Grund bei einer Eintrittsgeschwindigkeit von 6 km/s, die für den zweiten EXPERT Flug vorgesehen ist.

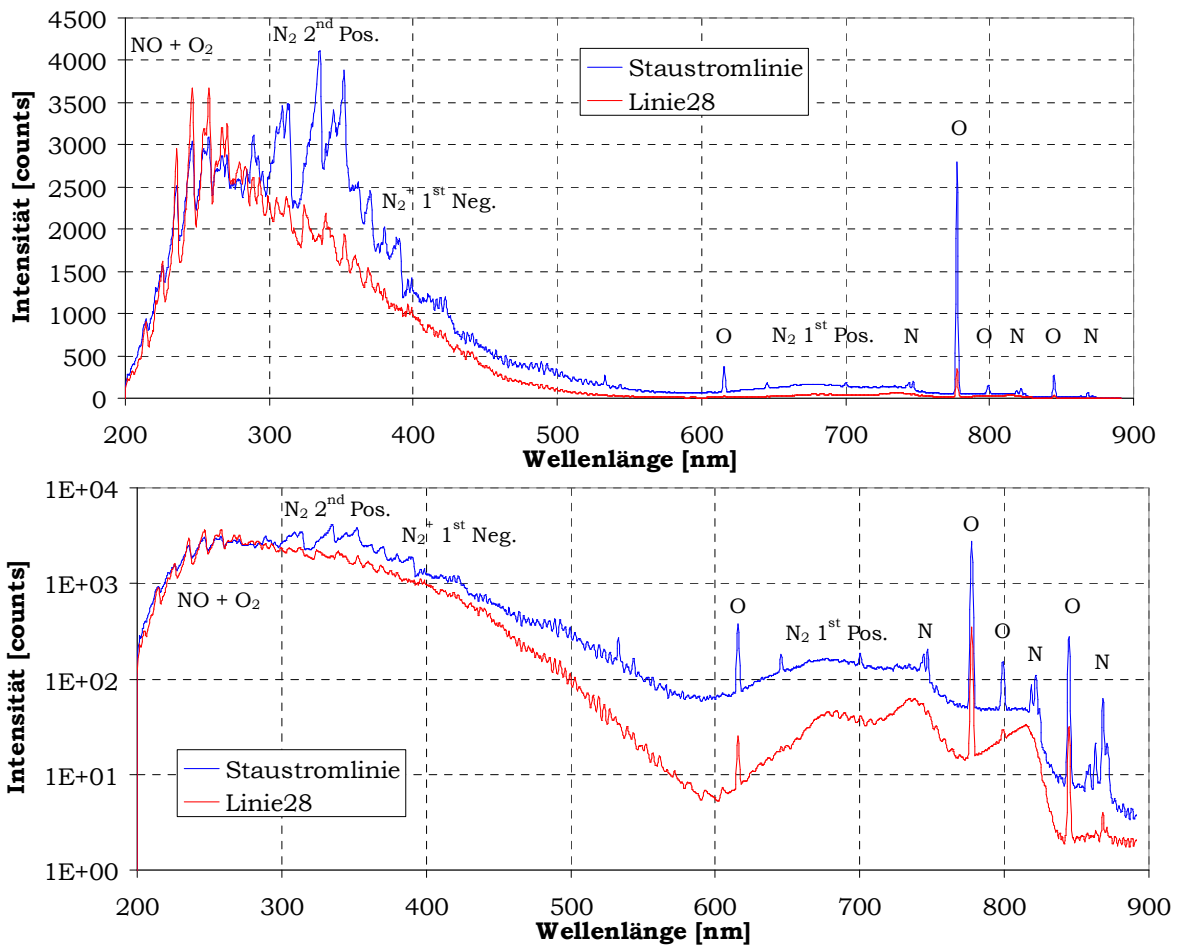


Abbildung 5.6: Simulierte Spektrometersignale in einer Höhe von 70 km bei einer Eintrittsgeschwindigkeit von 6 km/s in linearer und logarithmischer Darstellung.

Als Ergebnis dieser Untersuchungen kann das vorgeschlagene Spektrometersystem als geeignet angesehen werden, um die Strahlung aus der Nachstoßregion während des EXPERT Wiedereintritts zu detektieren. Das System kann allerdings noch nicht als endgültig dimensioniert betrachtet werden, da die EXPERT Struktur noch nicht eingefroren wurde. Zudem sind die Sensorpositionen noch nicht endgültig fixiert. Weiterhin ist noch die Entwicklung einer Regelung der Belichtungszeit nötig, die einerseits verhindert, dass ein schwingfähiges System erzeugt wird, und andererseits ermöglicht, „überbelichtete“ Spektren zur Detektion schwach strahlender Spektralbereiche zu generieren. Für eine endgültige Dimensionierung des Flugmodells wird eine Wiederholung der hier beschriebenen Experimente und Rechnungen in der finalen Konfiguration nötig sein.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Freistrahler und Probenströmung im Plasma eines magnetoplasmadynamischen Generators durch emissionsspektroskopische Messungen, Fabry-Perot-Interferometrie und elektrostatische Sonden untersucht. Zur Auswertung der emissionsspektroskopischen Messungen wurde basierend auf einer konventionellen Abel-Inversion ein Verfahren zur Rückrechnung von lokalen Werten aus den integriert gemessenen Werten entwickelt, das auch leichte Abweichungen von der Rotationssymmetrie handhaben kann.

Aus der Strahlung von atomarem Sauerstoff (O) und Stickstoff (N) wurden im Freistrahler und über die Grenzschicht hinweg elektronische Anregungstemperaturen ermittelt, die überraschend flache radiale und axiale Profile und im Vergleich zu den aus früheren Messungen erwarteten Elektronentemperaturen von bis zu 30 000 K niedrige Werte zwischen 5 000 K und 6 000 K aufwiesen. Messungen mit elektrostatischen Sonden mit einem Pendelaufbau zur Reduzierung der thermischen Lasten auf die Sondenelektroden ergaben Abschätzungen der Elektronentemperatur und -dichte, die in der Größenordnung der früheren Ergebnisse lagen. Erklärungsmöglichkeiten für die Differenz zwischen elektronischer Anregungs- und Elektronentemperatur sind durch einen verdichtenden Einfluss des Umgebungsdrucks und durch Absorptionsprozesse der Atome im Vakuum UV gegeben worden. Bevor die Ursachen für diese Diskrepanz allerdings nicht quantitativ erfasst werden können, ist eine Bestimmung der Grundzustandsdichte aus den Teilchendichten der elektronisch angeregten Niveaus nicht sinnvoll. Dies wurde auch an der Strahlung von NO gezeigt.

Im Freistrahler wurden über Messungen mit einem Fabry-Perot-Interferometer Translationstemperaturverteilungen aus der Doppler-Verbreiterung der Strahlung der Sauerstoff- und Stickstoffatome bestimmt. Bei einem Spitzenwert von etwa 10 500 K auf der Plasmawindkanalachse war die aus der N-Linie bestimmte Temperatur um etwa 1 500 K niedriger als der Wert, der aus der O-Linie berechnet wurde. Ein Einfluss durch hochfrequente Schwankungen des Plasmastrahls im kHz-Bereich ist nicht auszuschließen. Qualitativ würde dieser Einfluss eine Überhöhung der gemessenen Temperatur bewirken, er konnte aber in den durchgeführten Untersuchungen weder über zeitlich aufgelöste emissionsspektroskopische Messungen noch über Frequenzanalysen der Messungen mit elektrostatischen Sonden quantifiziert werden.

Zur Interpretation der Molekülstrahlung wurde eine Modellierung zur spektralen Simulation von zweiatomigen Molekülen entwickelt. Die Modellierung wurde anhand von spektral hoch aufgelösten Messungen von N_2^+ am Plasmawindkanal und von N_2 sowie NO an einem Mikrowellengenerator überprüft, in denen verschiedene Rotations-Vibrationsbanden spektral aufgelöst wurden. Es konnte eine gute Übereinstimmung zwischen der spektralen Simulation und den Messungen nachgewiesen werden. In niedriger spektraler Auflösung wurde die Simulation durch Nachrech-

nung eines Gleichgewichts-Luft-Plasmas mit guter Übereinstimmung überprüft. Die Messungen von N_2^+ am Plasmawindkanal haben die Gültigkeit einer Boltzmann-Verteilung für die Rotationsenergie bestätigt. Um eine orts aufgelöste Messung der Molekültemperaturen in der Grenzschicht zu ermöglichen, wurde ein Verfahren zur Bestimmung von Rotations- und Vibrationstemperatur aus spektral niedrig aufgelösten Messungen entwickelt. Die Nachstellung der gemessenen Spektren von N_2^+ und N_2 war sowohl im Freistrahler wie auch über die Grenzschicht hinweg mit guter Übereinstimmung möglich. Die Auswertung von NO beschränkte sich auf den Freistrahler. Hauptgründe waren der hohe Rechenaufwand und mögliche Mehrdeutigkeiten durch Notwendigkeit der Überlagerung von sechs verschiedenen strahlenden Systemen im betrachteten Wellenlängenbereich. Die Rotationstemperaturen der stärksten Molekülstrahler ($NO\gamma$, $NO\beta$, N_2^+) sind in relativ guter Übereinstimmung mit den gemessenen Translationstemperaturen.

Zur Charakterisierung der Prozesse in der Grenzschicht vor einer gekühlten Kupferoberfläche und vor einer glühenden SiC Materialprobe wurden Verteilungen der spektral integrierten Strahlung verschiedener Spezies gemessen und mit einer von der Arbeitsgruppe *Plasmamodellierung und -simulation* bereitgestellten Simulation der Probenumströmung verglichen. Die in der numerischen Simulation ermittelten Grenzschichtdicken konnten durch die Messungen bestätigt werden. In den Messungen wurden nahe der Kupferoberfläche zur Oberfläche hin ansteigende Emission von atomarem Sauerstoff und Stickstoff erkannt. Vor der SiC Materialprobe fiel die Strahlung dieser Spezies stattdessen ab. Dieser Effekt konnte durch die numerische Simulation nicht nachgebildet werden. Die reine Gleichgewichtsberechnung der Strahlung aus den numerischen Daten ergab ähnliche Verläufe, wie sie vor der SiC Oberfläche gemessen wurden. Eine Berechnung der Strahlung unter Verwendung einer Nichtgleichgewichtsmethode (QSS) für die elektronische Anregung zeigte für atomaren Stickstoff qualitativ ähnliche Verläufe wie in der Messung vor der Kupferoberfläche. Die QSS-Rechnung für atomaren Sauerstoff erzeugt jedoch unphysikalische Werte. Keine Berechnungsmethode konnte die Unterschiede zwischen dem gemessenen Verlauf der Strahlung vor SiC und Kupfer nachstellen. Der Grund für die deutlich unterschiedliche Strahlung wird in der im Kupfer-Modell nicht berücksichtigten unvollständigen Akkomodation vermutet. Durch Bildung vibratorisch angeregten molekularen Stickstoffs an der Oberfläche kann die Elektronentemperatur höher werden als in der jetzigen Lösung und damit die Strahlung in Wandnähe steigern.

Basierend auf den Ergebnissen der in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen wurde das Flugspektrometersystem RESPECT vorgeschlagen und für einen Mitflug auf dem Wiedereintrittsexperiment EXPERT der Europäischen Raumfahrtagentur ESA, das voraussichtlich im Jahr 2008 starten wird, ausgelegt.

Als Ausblick auf zukünftige Untersuchungen sind spektral hoch aufgelöste Messungen der Strahlung von NO im Plasmawindkanal sinnvoll. Die Bestimmung von Temperaturen aus dem Vergleich von Einzellinien, wie sie im Rahmen dieser Arbeit schon für N_2^+ durchgeführt wurde, würde die Unsicherheiten durch die Überlagerung der verschiedenen strahlenden Systeme verringern. Weiterhin sind zur genaueren Charakterisierung des Plasmazustandes verlässliche Elektronentemperaturen und -dichten nötig, die aus den vorliegenden Messungen nicht extrahiert werden konnten. Zur Minimierung der thermischen Belastung der Sondenelektroden wird dazu ein robusterer Versuchsaufbau empfohlen als der in dieser Arbeit verwendete Pendel-Aufbau.

Kapitel 7

English Summary

In this work, a free stream condition and the boundary layer around a blunt body in the subsonic plasma flow produced by a magneto plasma dynamic generator (MPG) were investigated by emission spectroscopic measurements, Fabry Perot interferometry and by electro static probes. For data reduction of the emission spectroscopic measurements, a method for a reconstruction of local intensities from the integrated measurements was developed which bases on a conventional Abel inversion with the possibility of corrections for deviations from rotational symmetry.

In stream and boundary layer, electronic excitation temperatures were determined from the emission of atomic oxygen and nitrogen. The distributions showed a surprisingly flat radial and axial profile with temperatures between 5 000 K and 6 000 K which are low compared with earlier measurements of the electron temperature showing peak values of 30 000 K on the centre line. Measurements with electro static probes with a pendulum set up which minimises the thermal loads on the probe electrodes yielded estimates of electron temperature and density in the order of the earlier results. This discrepancy between electronic excitation and electron temperature is possibly explained by a compressing influence of the static pressure in the surrounding cold gas on the plasma flow and by atomic absorption processes in the vacuum UV. Until the reasons for that discrepancy are not quantitatively known, a determination of ground state densities from particle densities of the electronically excited states does not make sense. This was demonstrated in the evaluation of the NO radiation.

Translational temperatures were determined with a Fabry-Perot interferometer from the Doppler broadening of atomic lines of oxygen (O) and nitrogen (N) in the free stream. With a maximum value of 10 500 K on the centre line the temperature determined from the N line was lower by 1 500 K than the value determined from the O emission. An influence of high frequency oscillations of the plasma flow in the kHz range can not be excluded. Qualitatively, this influence would increase the extracted temperature. The effects could neither be quantified by time resolved emission spectroscopic measurements nor by frequency analysis of the electro static probe data.

A spectral simulation of the radiation of di-atomic molecules was developed for the interpretation of molecular radiation. The modelling was verified by spectrally highly resolved measurements of the emission of N_2^+ in the plasma wind tunnel and of N_2 and NO in a micro wave generated plasma. Different rotational vibrational Bands were spectrally resolved with single rotational lines and showed a good agreement with the spectral simulation. In low spectral resolution, the simulation was verified against an equilibrium air plasma at ambient pressure. The measurements of N_2^+ in the plasma wind tunnel showed that a Boltzmann distribution for rotational energy was valid in the

plasma flows under investigation. For the spatially resolved measurement of molecular temperatures inside the boundary layer, a temperature determination method from spectrally low resolved measurements was developed. The agreement of the simulated emission of N_2^+ and N_2 was very good both in free stream and along the boundary layer. The evaluation of the NO data was only performed in the free stream. The main reasons were the high computational effort and the possible ambiguity in the superposition of six different radiative systems in this wavelength region. The rotational temperatures of the strongest molecular radiators ($NO\gamma$, $NO\beta$, N_2^+) was in relatively good agreement with the Doppler temperatures.

To characterise the boundary layer shape, the radiation of different species was measured in front of a water-cooled copper surface and a SiC material probe glowing at 1700°C. The measured data was compared with a numerical simulation provided by the numerical working group. The measured data were compared to the results of the numerical simulation along the stagnation line. The numerically simulated boundary layer thickness could be confirmed by the measurements. The measurements showed a rising emission of atomic oxygen and nitrogen towards the copper surface. In front of the SiC material probe the emission decreased. This effect was not seen in the numerical simulation. A pure equilibrium analysis of the radiation produced by the numerical results showed a similar course as the data measured in front of the SiC surface. A computation with a non-equilibrium excitation (QSS) yielded for nitrogen similar qualitative appearance as the measurement in front of the copper surface. None of the computed radiation fields showed the measured influence of the two different surfaces. The emission of atomic oxygen yielded non physical results for the QSS computation. The reason for the remarkably different results is seen in the complete energy accommodation that is included in the modelling of the copper surface. By allowing formation of vibrationally excited molecular nitrogen at the copper surface the electron temperature would be increased by coupling to the N_2 vibrational temperature.

As an outlook, future measurements of spectrally high resolved radiation of NO in the plasma wind tunnels is proposed to account for the emission of higher electronic states. The determination of molecular temperatures from single rotational lines as already performed for N_2^+ would increase the accuracy remarkably. Furthermore, reliable electron temperatures and densities which could not be extracted within this work are needed for a further characterisation of the plasma. The minimisation of the thermal loads on the probe electrodes by moving the probes quickly through the plasma beam should be realised in a more robust set up than the pendulum.

Based on the results of this work, the re-entry spectrometer system RESPECT was proposed and designed for flight on the re-entry test bed EXPERT of the European Space Agency ESA which is foreseen to be launched in 2008.

Literaturverzeichnis

- [1] Auweter-Kurtz, M., Boie, C., Habiger, H., Kaeppler, H.J., Kurtz, H.L., Sleziona, P.C., Wegmann, T., Winter, M.W.: *Numerische Simulation von MPD-Triebwerken und Vergleich mit durchzuführenden experimentellen Untersuchungen*, Endbericht zum DFG Forschungsvorhaben Au85/5-2, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, 1998.
- [2] Auweter-Kurtz, M., Boie, C., Kaeppler, H.J., Kurtz, H.L., Schrade, H.O., Sleziona, P.C., Wagner, H.P. and Wegmann, Th.: *Magnetoplasmadynamic thrusters-- design criteria and numerical simulation*, International Journal of Applied Electromagnetics in Materials, Vol. 4: pp. 383--401, 1994.
- [3] Auweter-Kurtz, M., Burkhardt, J., Fertig, M., Frühauf, H.-H., Habiger, H., Jahn, G., Messerschmid, E., Schöttle, U.: *Flugdatenauswertung der MIRKA-Experimente HEATIN und PYREX*, DGLR-JT98-203, Bremen, DGLR-Jahrestagung 1998.
- [4] Auweter-Kurtz, M., Feigl, M., Herdrich, G., Laux, T., Winter, M.: *Diagnostik mit Sonden und optischen Verfahren*, Beitrag für das Teilprojekt A3 zum Arbeits- und Ergebnisbericht 2001 des Sonderforschungsbereichs SFB 259 *Hochtemperaturprobleme rückkehrfähiger Raumtransportsysteme*, Stuttgart 2001.
- [5] Auweter-Kurtz, M., Feigl, M., Winter, M.: *Diagnostic Tools for Plasma Wind Tunnels and Reentry Vehicles at the IRS*, RTO-EN-8. AC/323(AVT)TP/23, RTO Educational Notes 8, April 2000; von Karman Institute for Fluid Dynamics, RTO AVT/VKI Special Course on Measurement Techniques for High Enthalpy Plasma Flows, Belgium, Oktober 1999.
- [6] Auweter-Kurtz, M., Fertig, M., Herdrich, G., Pidan, S., Winter, M.: *Advanced In-Flight Sensor Systems for Atmospheric Entry Manoeuvres*, 37th AIAA Thermophysics Conference, AIAA-2004-2169, 2004.
- [7] Auweter-Kurtz, M., Habiger, H., Hilfer, G., Laux, T., Wegmann, Th., Winter M.: *Comparison of a magnetoplasmadynamic and a thermal plasma wind tunnel as tools for the investigation of heatshield materials for space transportation systems*, Final Report for the DARA Grant, FKZ: 50 TT 96163, 2000.
- [8] Auweter-Kurtz, M., Herdrich, G., Komurasaki, K., Laux, T.: *Probe Measurements and Laser Absorption Spectroscopy on the IRS IPG3 Plasma Plume*, 35th AIAA Thermophysics Conference, Anaheim, CA, USA, Juni 2001.
- [9] Auweter-Kurtz, M., Semenova, N., Winter, M., Löhle, S.: *Plasmadiagnostik an*

Ionentriebwerken, Technischer Statusbericht für die Zeit vom 1.11.2002 bis zum 1.7.2003, Stuttgart, 2003.

- [10] Auweter-Kurtz, M., Wegmann, T.: *Overview of IRS Plasma Torch Facilities*, RTO-EN-8. AC/323(AVT)TP/23, RTO Educational Notes 8, April 2000; von Karman Institute for Fluid Dynamics, RTO AVT/VKI Special Course on Measurement Techniques for High Enthalpy Plasma Flows, Belgium, Oktober 1999.
- [11] Babikian, D.S., Park, C., Raiche, G.A.: *Spectroscopic Determination of Enthalpy in an Arc-Jet Wind Tunnel*, AIAA 95-0712, 33rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, 1995.
- [12] Bashkin, S., Stoner, J.O. Jr.: *Atomic Energy Levels and Grotian Diagrams, Vol.2*, North-Holland, Amsterdam, 1982.
- [13] Bergmann – Schaefer: *Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 3: Optik*, 9. Auflage, W. de Gruyter, Berlin, New York, 1993.
- [14] Born, M. und Oppenheimer, R.: *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Annalen der Physik, Vierte Folge, Band 84, Nr. 20, 1927.
- [15] Boubert, P.: *Méthodes spectroscopiques appliqués aux plasmas et aux milieux à haute enthalpie*, Dissertation, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, Frankreich, 1999.
- [16] Bronstein-Semendjajew, Taschenbuch der Mathematik, B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1991.
- [17] Cauchan, D.L., *Radiative Heating Results from the FIRE II Flight Experiment at a Reentry Velocity of 11.4. Kilometers per Second*, NASA TM X-1402, July 1967.
- [18] Charrier, P., Dubroca, B., Duffa, G., Turpault, R.: *Multigroup model for radiating flows during atmospheric hypersonic re-entry*, in Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Lissabon, Portugal, 8-10 Oktober 2003.
- [19] Chauveaux, S.: *Constitution de bases de données spectroscopiques relatives à un plasma d'air. Application au calcul de transferts radiatifs*, doctor thesis, École Centrale, Paris, France, 2001.
- [20] Christ, S.: *Messungen mit elektrostatischen Sonden in atmosphärischen Plasmen*, Studienarbeit IRS-04-S-29, Institut für Raumfahrtssystem, Universität Stuttgart, Stuttgart, Oktober 2004.
- [21] Da Silva, M. L., Dudeck, M.: *A proposed solution for Test Case One using the SESAM code*, in Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Lissabon, Portugal, 8-10 Oktober 2003.

-
- [22] Dabalà, P.: *Untersuchung des Erosionsverhaltens von Hitzeschutzmaterialien für Wiedereintrittsflugkörper unter Einsatz eines Massenspektrometers*, Dissertation, Universität Stuttgart, November 1998.
- [23] Demtröder, W.: *Experimentalphysik 3: Atome, Moleküle und*, 2. Auflage, Springer Verlag, 2000.
- [24] Demtröder, W.: *Laserspektroskopie: Grundlagen und Techniken*, 4. Auflage, Springer Verlag, 2000.
- [25] Deutsche Forschungsgemeinschaft: *Basic Research and Technologies for Two-Stage-to-Orbit Vehicles*, Final Report of the Collaborative Research Centres 253, 255 and 259, edited by Dieter Jacob, Gottfried Sachs and Siegfried Wagner, Wiley Verlag, 2005.
- [26] Dias Figueiredo, M.: *Auslegung eines variablen Systems für den Einbau von Sensoren in Thermalschutzsysteme*, Studienarbeit IRS 04-S-24, Stuttgart, Oktober 2004.
- [27] DIN 1319 T. 1: *Grundlagen der Messtechnik, Teil 1: Grundbegriffe*
- [28] Dunham, J: *The energy levels of a rotating vibrator*, Phys. Rev. 41, 721, 1932.
- [29] Eberhart, M.: *Untersuchung der Umströmung einer Enthalpiesonde für Plasma-windkanalanwendungen*, Diplomarbeit, IRS-05-S-08, Diplomarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 2005.
- [30] Erdman, P.W., Zipf, E.C., Espy, P., Howlett, L.C., Levin, D.A., Collins, R.J., Candler, G.V., *Measurements of Ultraviolet Radiation from a 5 km/s Bow Shock*, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 8, No. 3, Jul.-Sep. 1994.
- [31] Fasoulas, S., Stöckle, T., Auweter-Kurtz, M.: *Measurement of Specific Enthalpy in Plasma Wind Tunnel Flows*, AIAA-96-1852, 1996.
- [32] Feigl, M.: *Entwurf, Aufbau und Inbetriebnahme eines Lichtwellenleitersystems für ein Fabry-Perot Interferometer*, IRS 95-S-15, Studienarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme, Stuttgart, Germany, 1995.
- [33] Feigl, M.; Auweter-Kurtz, M.: *Investigation of SiO production in front of Si-based material surfaces to determine the transition from passive to active oxidation using planar laser-induced fluorescence*. 35th AIAA Thermophysics Conference, Anaheim, CA, USA, 2001.
- [34] Fertig, M. und Winter, M.: *Numerische Simulation einer Unterschall-Probenumströmung mit URANUS*, Interner Bericht IRS-06-IB3, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2006.
- [35] Fertig, M.: *Analyse von Transportkoeffizientenmodellen für Luft in einem Temperaturbereich von 250 – 30000 K*, Studienarbeit IRS 94-S-01, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Deutschland, 1994.

- [36] Fertig, M.: *Modellierung reaktiver Prozesse auf Siliziumkarbid-Oberflächen in verdünnten Nichtgleichgewichts-Luftströmungen*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 2005.
- [37] Fromm, M.A., *Charakterisierung der Probenumströmung einer Materialprobe im Plasmastrahl mit emissionsspektroskopischen Mitteln*, Diplomarbeit IRS-97-S-12, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, Germany, 1997.
- [38] Fujita, K., Abe, T.: *SPRADIAN, Structured Package for Radiation Analysis*, in *ISAS Report No. 669*, Institute of Space and Astronautical Science, Kanagawa, Japan, 1997.
- [39] Fußmann, G.: *Atom- und Molekülphysik*, Manuskript zur Vorlesung an der Humboldt-Universität zu Berlin, Sommersemester 2002.
- [40] Gericke, K.-H.: *Interaktives Vorlesungsmanuskript zur Physikalischen Chemie IV: Molekülspektroskopie und Quantenchemie*, Technische Universität Braunschweig, (<http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC4/pc4.pdf>).
- [41] Gorelov, V.A., Gladyshev, M.K., Kireev, A.Y., Yegorov, I.V., Plastinin, Y.A., Karabadzhak, G.F.: *Experimental and Numerical Study of Nonequilibrium Ultraviolet NO and N₂⁺ Emission in Shock Layer*, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 12, No. 2, April - Juni 1998.
- [42] Grau, T.: *Numerische Untersuchung von Plasmawindkanalströmungen zur Wiedereintrittssimulation*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Deutschland, 2000.
- [43] Griem, H. R.: *Plasma Spectroscopy*, McGraw-Hill Book Company, New York, USA, 1964.
- [44] Habiger, H., Auweter-Kurtz, M., Frühholz, H., Herdrich, G.: *PYREX - Pyrometric Temperature Measurement on the Ceramic TPS of the Re-Entry Capsule MIRKA*, 3rd European Workshop on Thermal Protection Systems, ESTEC, The Netherlands, March 1998.
- [45] Habiger, Harald, *Elektrostatische Sonden und Fabry-Perot Interferometer zur Untersuchung von lichtbogenbeheizten Plasmen für Triebwerksanlagen und Wiedereintrittssimulation*, . Dissertation, Universität Stuttgart, 1994.
- [46] Haken, H., Wolf, H. C.: *Atom- und Quantenphysik*, Springer Verlag, ISBN 3-540-67453-5, 7. Auflage, Berlin, 2000.
- [47] Haken, H., Wolf, H. C.: *Molekülphysik und Quantenchemie*, Springer Verlag, ISBN 3-540-63786-9, 3. Auflage, Berlin, 1997.
- [48] Herdrich, G. *Emissionsspektroskopische Untersuchung der Stickstoff-Molekülstrahlung im Plasmawindkanal*, Diplomarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme

teme, Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 1996.

- [49] Herdrich, G., Auweter-Kurtz, M., Hartling, M., Laux, T.: *PYREX-KAT38, Temperature Measurement System for the X-38 Nose Structure TPS*, 2nd Int. Symposium Atmospheric Reentry Vehicles and Systems, Arcachon, France, March 2001.
- [50] Herdrich, G., Löhle, S., Auweter-Kurtz, M., Endlich, P., Fertig, M., Pidan, S., Schreiber, E.: *IRS Ground Testing Facilities: Thermal Protection System Development, Code Validation and Flight Experiment Development*, 37th AIAA Thermophysics Conference, June 28 - July 1, 2004, Portland, Orlando.
- [51] Herdrich, G.: *Aufbau, Qualifikation und Charakterisierung einer induktiv beheizten Plasmawindkanalanlage zur Simulation atmosphärischer Eintrittsmanöver*, Dissertation, Universität Stuttgart, Deutschland, 2004.
- [52] Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure: Vol. I, Spectra of Diatomic Molecules*, D. Van Nostrand Company, LTD, 1950.
- [53] Hilfer, G.: *Experimentelle und theoretische Beiträge zur Plasma-Wand-Wechselwirkung keramischer Hitzeschutzmaterialien unter Wiedereintrittsbedingungen*. Universität Stuttgart, Dissertation, 1999.
- [54] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>
- [55] Infed, F.: *Realgas- und Katalyseeffekte beim Wiedereintritt von Raumflugkörpern aus dem erdnahen Orbit unter Berücksichtigung von Wärmeleitung und Strahlungsaustausch an der Oberfläche*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Deutschland, 2005.
- [56] Jentschke, H., Bauer, G., Behringer, K. and Hirsch, K.: *Spectroscopical investigation of an air-like plasma jet*, 5th Europ. Conf. on Atomic and Molecular Phys. Vol **19a**, Part II, 613-616, Ed. R C Thompson (Mulhouse, European Physical Society), 1995.
- [57] Jentschke, H.: *Spektroskopische Untersuchung eines luftähnlichen Plasmafreistrahls*, Dissertation, Institut für Plasmaforschung, Universität Stuttgart, 1995.
- [58] Kalibrierschein der Firma Bentam über spektrale Bestrahlungsstärke
- [59] Kalibrierschein der Firma OSRAM über spektrale Strahldichte
- [60] Kanne, S., Gogel, Th., Dupuis, M., Messerschmid, E.W., *Simulation of Radiation Experiments on Re-entry Vehicles using the new Radiation Database PARADE*, AIAA-97-2562, 32nd AIAA Thermo-physics Conference, Atlanta, GA, USA, June 1997.
- [61] Karabadzhak, G. F. et al.: *Preliminary Analysis of Exhaust Plume Radiation during Soyuz-TM Retrofirings*, AIAA 2000-2373, AIAA Thermophysics Conference,

USA, 2000.

- [62] Kawata, S., Noda, T. and Minami, S., *Spectral Searching by Fourier-Phase Correlation*, Applied Spectroscopy, Volume 41, Number 7, 1987.
- [63] Knab, O., Frühauf, H.-H., Messerschmid, E. W.: *Theory and Validation of the Physically Consistent Coupled Vibration-Chemistry-Vibration Model*, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 9, No. 2, pp 219-216, Washington, D. C., April-June 1995.
- [64] Knab, O.: *Konsistente Mehrtemperatur-Modellierung von thermochemischen Relaxationsprozessen in Hyperschallströmungen*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität stuttgart, 1996.
- [65] Krafft, H.-M.: *Bestimmung von Translationstemperatur und Plasmageschwindigkeit in Plasmen zur experimentellen Simulation des atmosphärischen Eintritts*, IRS 02-S-25, Studienarbeit, Institut für Raufahrtssysteme, Stuttgart, Germany, 2002.
- [66] Lago, V.: *Mesure des températures électroniques et rotationelles dans des jets supersoniques dans des plasmes d'air et d'azote*, thèse pour obtenir le titre de docteur en sciences, Université Paris XI, 1993.
- [67] Landolt-Börnstein: 1990, -, Vol. V of New Series, Springer
- [68] Laure, S., *Experimentelle Simulation der Staupunktströmung wiedereintretender Raumflugkörper und deren Charakterisierung mittels mechanischer Sonden*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, 1998.
- [69] Laux C. O.: *Radiation and Non-Equilibrium Collisional-Radiative Models*, VKI Special Course on Physico-Chemical Models for High Enthalpy and Plasma Flows Modeling, Belgium, June 4-7, 2002.
- [70] Laux, C. O.: *Optical Diagnostics and Radiative Emission of Air Plasmas*, HTGL Report No. T-288, Stanford University, CA, USA, August 1993.
- [71] Laux, T., *Untersuchungen zur Hochtemperaturoxidation von Siliziumkarbid in Plasmaströmungen*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Shaker Verlag Aachen, Deutschland, ISBN 3-8322-3128-5, ISSN 0945-2214, 2004.
- [72] Le Roy , R. J.: *RKR1 2.0 - A Computer Program Implementing the First-Order RKR Method for Determining Diatomic Molecule Potential Energy Functions*, Guelph-Waterloo Centre for Graduate Work in Chemistry, University of Waterloo, Waterloo, Ontario N2L 3G1, Canada, April 2004.
- [73] Melin, G.A., und Madix, R.J.: *Energy Accommodation During Oxygen Atom Recombination on Metal Surfaces*, Transactions of the Faraday Society, Bd. 67, 1971, Seiten 198–211.

-
- [74] Moore, C.: *Atomic Energy Levels, vol. III*, National Bureau of Standards, Washington. 1958
- [75] Muylaert, J.-M., Turmino, G., Caporicci, M.: *Preparing for Reentry with EXPERT: the ESA in flight ATD Research Program*, Paper IAC-03-V.5.09, 54th International Astronautical Congress, Bremen, Germany, Sept. 2003.
- [76] NIST-database: physics.nist.gov/cgi-bin/At_Data/main_asd
- [77] Nyquist, H.: *Certain topics in telegraph transmission theory*, Trans. AIEE, vol. 47, pp. 617-644, Apr. 1928.
- [78] Ocean Optics: *HR4000 and HR4000CG-UV-NIR Series High-Resolution Fiber Optic Spectrometers – Installation and Operation Manual*, Ocean Optics, Inc., 06022004 Rev. 1.1.0, 2004.
- [79] Park, C., *Calculation of Nonequilibrium Radiation in the Flight Regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles in Thermal Design of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles*, pp. 395-418, Progress in Astronautics and Aeronautics, Volume 96, AIAA, 1985.
- [80] Park, C., Raiche, G. A., Olejniczk, J., Drive, D. M., Terrazas-Sallnas, I., Hightower, T. M., Sakal, T.: *Comparison of Enthalpy Determination Methods for an Arc-jet Facility*, AIAA 2004-487, 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, 2004.
- [81] Park, C., *Stagnation Point Radiation for Apollo 4 – A Review and Current Status*, AIAA 01-3070, 35th AIAA Thermophysics Conference, 11-14 June 2001, Anaheim, CA, USA.
- [82] Park, C.: *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, John Wiley and Sons, New York, 1989.
- [83] Park, C.: *Comparison of Electron and Electronic Temperatures in Recombining Nozzle Flow of Ionized Nitrogen-Hydrogen-Mixture, Part 2: Experiment*, Journal of Plasma Physics, Vol. 9, Pt.2, pp. 217-234, 1973.
- [84] Park, C.S., Newfield, N.E., Fletcher, D.G., Gökçen, T., Sharma, S.P.: *Spectroscopic Emission Measurements Within the Blunt-Body Shock Layer in an Arcjet Flow*, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 12, No. 2, April - June 1998
- [85] Pfrommer, T., Auweter-Kurtz, M. and Winter, M.: *Fabry-Perot Interferometry on Xenon for Future Application with Radio-frequency Ion Thrusters (RIT)*, Space Technology Education Conference STEC 2005, Aalborg, Denmark, April 2005.
- [86] Pfrommer, T., Auweter-Kurtz, M., Holzhauser, E., Semenova, N., Winter, M.W.: *Emission Spectroscopy and Double Langmuir Probe Measurements on Xenon for Future Application with Radio-frequency Ion Thrusters (RIT)*, IAC-04-IAF-

S.P.02, International Astronautical Congress, Vancouver, Oct. 2004.

- [87] Pfrommer, T.: *Charakterisierung eines Niederdruck-Xenon-Plasmas über emissionspektroskopische Messungen*, IRS-05-024, Diplomarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 2005.
- [88] Pope, R.B.: *Stagnation Point Convective Heat Transfer in Frozen Boundary Layers*, AIAA Journal, Vol. 5, No. 2, 1958.
- [89] Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T.: *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [90] *Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry*, Lisbon, Portugal, 8-10 October 2003.
- [91] Quintero, M.C., Rodero, A., Garcia, M.C. and Sola, A.: *Determination of the Excitation Temperature in a Nonthermodynamic-Equilibrium High-Pressure Helium Microwave Plasma Torch*, Applied Spectroscopy, Volume 51, Number 6, 1997.
- [92] Rivière, P., Soufiani, A., Perrin, M.Y.: *Line by line and statistical narrow-band calculations of radiative transfer in some atmospheric entry problems*, in Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Lissabon, Portugal, 8-10 Oktober 2003.
- [93] Röck, W.: *Simulation des Eintritts einer Sonde in die Atmosphäre des Saturnmondes Titan in einem Plasmawindkanal*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1999.
- [94] Schäff, S.: *Einfluss der chemischen Akkomodation auf den Wärmefluss auf PWK Sonden*, Studienarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2006.
- [95] Schlutz, J.: *Auslegung eines Miniaturspektrometers zum Einsatz auf einer Wiedereintrittsmission*, Studienarbeit IRS-04 S 25, Institut für Raumfahrtssysteme, Stuttgart, 2004.
- [96] Schönemann, A., Auweter-Kurtz, M., Dabalà, P., Fasoulas, S., Frühholz, H., Habiger, H., Kurtz, H., Laure, S., Loesener, O., Röck, W.: *The Plasma Wind Tunnels PWK1 and PWK2*, Interner Bericht IRS 92-P6, Universität Stuttgart, Stuttgart, Juli 1992.
- [97] Schrade, H. O., Wegmann, T. and Rösgen, T.: *The onset phenomena explained by run-away Joule heating*, IEPC-91-022, Proceedings of the 22nd International Electric Propulsion Conference, Viareggio, Italy, 1991.
- [98] Schumacher, U., Hirsch, K. et al.: *Spektroskopie und Laserdiagnostik*; Beitrag für das Teilprojekt A1 zum Arbeits- und Ergebnisbericht 2001 des Sonderforschungsbereichs SFB 259 *Hochtemperaturprobleme rückkehrfähiger Raum-*

transportsysteme, Stuttgart 2001.

- [99] Scott, C. D., Blackwell, H.E., Arepalli, S.: *Techniques for Determining Rotational and Vibrational Temperatures in Nitrogen Arcjet Flow*, AIAA 97-2521, 32nd AIAA Thermophysics Conference, Atlanta, GA, 1997.
- [100] Semenova, N., Auweter-Kurtz, M. and Winter, M. W.: *Development of Laser-Spectroscopic Techniques on Xenon for RIT-Ion Thruster Plume Investigations*, AIAA-2004-3962, 35th Joint Propulsion Conference, Portland, OR, USA, 2004.
- [101] Shannon, C. E.: *Communication in the presence of noise*, Proc. Institute of Radio Engineers, vol. 37, no.1, pp. 10-21, Jan. 1949.
- [102] Smith A. J., Gogel T., Vandeveld P., *Plasma Radiation Database PARADE Final Report*, FGE TR28/96, April, 1996.
- [103] Smith, A. J., Wood, A., Dubois, J., Fertig, M., Pfeiffer, B.: *Plasma Radiation Database PARADE V22 Final Report Issue 3*, ESTEC contract 11148/94/NL/FG, FGE TR28/96, Issue 3, Oktober 2006.
- [104] Smith, A.J.: *ESA Plasma Radiation Database (PARADE): Development History, Status, Current Developments and Future Prospects*, in Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Lissabon, Portugal, 8-10 Oktober 2003.
- [105] Stöckle, T.: *Untersuchung der Oberflächenkatalyzität metallischer und keramischer Werkstoffe in Hochenthalpieströmungen*, Dissertation, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, 2000.
- [106] Traving, G.: *Über die Theorie der Druckverbreiterung von Spektrallinien*, Verlag G. Braun, Karlsruhe, 1960
- [107] Vennemann, D.: *Hypersonic test facilities available in Western Europe for aerodynamic/aerothermal and structure/material investigations*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 1999.
- [108] Whiting, A. J.O., Lyle, E.E. G.C.: *Line by line calculation of spectra from diatomic molecules and atoms assuming a voigt line profile*, J. Quant Spectroscop. Radiat. Transfer Vol. 9, pp. 775 - 798, Pergamon Press 1969.
- [109] Wiese, W. L., Smith, M. W. and Miles, B. M.: *Atomic Transition Probabilities, Volume I, Hydrogen through Neon*, Institute for Basic Standards, National Bureau of Standards, Washington, D. C., October 1969.
- [110] Willi, K.-P.: *Spektral hoch aufgelöste Messung der Strahlung von NO und CO zur Unterstützung der theoretischen Modellierung der Molekülstrahlung*, Diplomarbeit IRS-04-S-26, Institut für Raumfahrtssysteme, Stuttgart, 2004.
- [111] Winovich, W., Carlson, W.C.A.: *The 60-MW Shuttle Interaction Heating Facility*, ISBN 87664-434-5, © ISA 1979.

- [112] Winter, M. and Auweter-Kurtz, M.: *Status on Molecular Simulation Capabilities of PARADE and EMCAL and Comparison with Experimental Data in High Spectral Resolution*, 5th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Köln, Deutschland, 8–11.11.2004.
- [113] Winter, M., Auweter-Kurtz, M. and Kurtz, H.L.: *Spectroscopic Investigation of the Boundary Layer in Front of a Blunt Body in a Subsonic Air Plasma Flow*, AIAA 97-2526, 32nd AIAA Thermophysics Conference, Atlanta, GA, USA, June 1997.
- [114] Winter, M., Auweter-Kurtz, M., Boie, Ch., Kurtz, H. L.: *Investigation of the Plasmastate of Steady State MPD thrusters by Emission Spectroscopic Means*, 25th International Electric Propulsion Conference, August 1997, Cleveland, OH, USA.
- [115] Winter, M., Auweter-Kurtz, M., Heiermann, J., Wegmann, Th.: *Experimental and Numerical Comparison of High Power Steady State MPD-Thrusters with Radiation- and Water-Cooled Anodes*, IEPC-03-207, Proceedings of the 28th International Electric Propulsion Conference, Toulouse, France, March 17 - 21, 2003.
- [116] Winter, M., Auweter-Kurtz, M., Kurtz, H.L. and Park, C.: *Investigation of an Equilibrium Condition Boundary Layer in front of a Material Probe in a Subsonic Plasma Flow*, 31st AIAA Thermophysics Conference, New Orleans, LA, June 17-20, 1996.
- [117] Winter, M., Auweter-Kurtz, M.: *Emission Spectroscopic Investigation of a High Enthalpy Air Plasma Flow*, Paper 3.8, Proceedings of the 1. French-German Symposium on Simulation of Atmospheric Entries by Means of Ground Test Facilities, November 1999, Stuttgart, Germany.
- [118] Winter, M., Auweter-Kurtz, M.: *Translational, Electronic and Molecular Temperatures in a Subsonic Air Plasma Flow determined by Optical Methods and Langmuir Probes*, AIAA-2003-3489, 36th AIAA Thermophysics Conference, Orlando, FL, June 23-26, 2003.
- [119] Winter, M., Auweter-Kurtz: *Emission Spectroscopic Investigation of the Boundary Layer in Front of a Blunt Body in a Subsonic Air Plasma Flow*, Proceedings of the Third European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, 24th - 26th November 1998, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, ESA SP-426, December 1998.
- [120] Winter, M., Kanne, S., Lonschinski, J., Auweter-Kurtz, M., Frühauf, H.-H.: *Proposal for a Reentry Experiment Using a Newly Developed Spectrometer*, 3rd European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, ESTEC, Noordwijk, NL, November 1998.
- [121] Winter, M., Loeffler, K.: *Beschreibung eines Verfahrens zur geometrischen Abel-*

Inversion, IRS-98-IB-07, Interner Bericht, Institut für Raumfahrtsysteme, Stuttgart, 1998.

- [122] Winter, M., Pfeiffer, B., Fertig, M., Auweter-Kurtz, M., Smith, A. J.: *Recent Status of the Plasma Radiation Database PARADE*, AIAA-2004-2376, AIAA Thermophysics Conference, USA, Portland, Oregon, 2004.
- [123] Winter, M.; Auweter-Kurtz, M., Park, C.: *Emission Determination of Temperatures and Particle Densities in a subsonic High Enthalpy Plasma Flow from Emission Spectroscopic Measurements*, AIAA 2001-2931, 32nd AIAA Plasmasdynamics and Lasers Conference, Anaheim, CA, June 11-14, 2001.
- [124] Winter, M.; Auweter-Kurtz, M.: *Emission Spectroscopic Measurements of Temperatures and Boundary Layer Effects in Front of a Blunt Body in a Subsonic Air Plasma Flow*, AIAA 99-3498, 33rd AIAA Thermophysics Conference, Norfolk, VA, 28 June – 1 July, 1999.
- [125] Zube, D.: *Von Laboruntersuchungen zum Entwurf und Bau eines flugtauglichen Lichtbogentriebwerks für Kleinsatelliten*, Dissertation am Institut für Raumfahrtsysteme, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1995.

ANHANG

Anhang A: Berücksichtigte Anregungszustände der Atome

Im Folgenden werden die angeregten Zustände von atomarem Stickstoff und Sauerstoff beschrieben, die an den detektierten Atomspektren beteiligt sind. Zuerst soll ein kurzer Überblick über die verwendete Nomenklatur gegeben werden. Hierbei bezeichnen die Kleinbuchstaben s , p , d , ... die verschiedenen Orbitale, charakterisiert durch den Gesamtdrehimpuls, der die Werte $0, 1, 2, \dots$ annehmen kann. Die vorangestellte Zahl gibt die Hauptquantenzahl an, die nachgestellte Hochzahl die Anzahl der Elektronen in dem entsprechenden Orbital. Die Kennzeichnung für vollständig abgeschlossene Quantenzustände (im Falle von N und O das $1s$ Orbital) wird nicht dargestellt. Der jeweils letzte Wert gibt den Zustand des optischen Elektrons, also des Orbitals des angeregten Zustands wieder, gefolgt von einem Term, der durch einen Großbuchstaben den Bahndrehimpuls des angeregten Moleküls kennzeichnet. Eine detaillierte Beschreibung der Nomenklatur ist in [74] gegeben. In den Tabellen A1 und A2 sind die angeregten Niveaus für die betrachteten Übergänge und die entsprechenden Konstanten, die zur Temperaturbestimmung nötig sind, aufgelistet [109, 74]. Abbildung A3 zeigt die in Kapitel 2.1.1 schon für atomaren Sauerstoff dargestellten Grotrian Diagramme für atomaren Stickstoff.

Übergang	Multiplet	λ [Å]	E_i [cm^{-1}]	E_k [cm^{-1}]	g_i	g_k	A_{ki} [s^{-1}]
$2p^3 3s - 2p^3 (^4S^o)3p$	$^5S^o - ^5P$	7773.4	73768	86629	5	15	3.40E+07
		7771.96	73768	86631	5	7	3.40E+07
		7774.18	73768	86627	5	5	3.40E+07
		7775.4	73768	86625	5	3	3.40E+07
$2p^3 3p - 2p^3 (^4S^o)3d$	$^5P - ^5D^o$	8446.5	76795	88631	3	5	2.80E+07
		9265.99	86629	94720	7	9	4.19E+07
		9265.99	86631	94720	7	9	4.19E+07
		9265.99	86627	94720	7	9	4.19E+07
		9262.73	86625	94720	5	7	2.80E+07
		9260.88	86631	94720	3	5	1.47E+07
		9265.99	86627	94720	7	7	1.40E+07
		9262.73	86625	94720	5	5	2.45E+07
		9260.88	86631	94721	3	3	3.15E+07
		9265.99	86627	94720	7	5	2.79E+06
		9262.73	86625	94721	5	3	1.05E+07
		9260.88	86631	94721	3	1	4.20E+07

Tabelle A1: Spektroskopische Konstante der verwendeten Übergänge von atomarem Sauerstoff (Auszug aus [109]).

Übergang	Multiplet	λ [Å]	E_i [cm ⁻¹]	E_k [cm ⁻¹]	g_i	g_k	A_{ki} [s ⁻¹]
$2p^2 3s-2p^2$ (³ P)3p	⁴ P - ⁴ D ^o	8680.27	83337	94839	6	8	1.91E+07
		8680.27	83366	94883	6	8	1.91E+07
		8683.4	83319	94832	4	6	1.33E+07
		8686.16	83286	94795	2	4	7.90E+06
		8718.84	83366	94832	6	6	5.40E+06
		8711.71	83319	94795	4	4	1.01E+07
		8703.26	83286	94772	2	2	1.71E+07
		8747.36	83366	94795	6	4	7.90E+05
		8728.91	83319	94772	4	2	3.00E+06
	⁴ P - ⁴ P ^o	8216.32	83337	95511	6	6	1.60E+07
		8216.32	83366	95533	6	6	1.60E+07
		8210.71	83319	95495	4	4	3.63E+06
		8200.36	83286	95477	2	2	3.64E+06
		8242.37	83366	95495	6	4	1.02E+07
		8223.12	83319	95477	4	2	2.02E+07
		8184.85	83319	95533	4	6	6.30E+06
		8188.01	83286	95495	2	4	9.20E+06
	⁴ P - ⁴ S ^o	7452.2	83337	96752	12	4	3.18E+07
		7468.31	83366	96752	6	4	1.61E+07
		7442.3	83319	96752	4	4	1.06E+07
		7423.64	83286	96752	2	4	5.20E+06
	² P - ² D ^o	9395.3	86193	96834	6	10	2.17E+07
		9392.79	86221	96864	4	6	2.18E+07
		9386.81	86138	96788	2	4	1.83E+07
		9460.68	86221	96788	4	4	3.34E+06
$2p^2 3s'-2p^2$ (¹ D)3p'	² D - ² P ^o	9047.6	99663	110713	10	14	2.72E+07
		9045.88	99663	110715	6	8	2.69E+07
		9049.89	99663	110711	4	6	2.58E+07
		9049.47	99663	110711	6	6	1.80E+06
$2p^2 3p-2p^2$ (³ P)3d	² S ^o - ² P	9050.4	93582	104628	2	6	2.56E+07
		9060.72	93582	104615	2	4	2.57E+07
		9028.92	93582	104655	2	2	2.55E+07

Tabelle A2: Spektroskopische Konstanten der verwendeten Übergänge von atomarem Stickstoff (Auszug aus [109]).

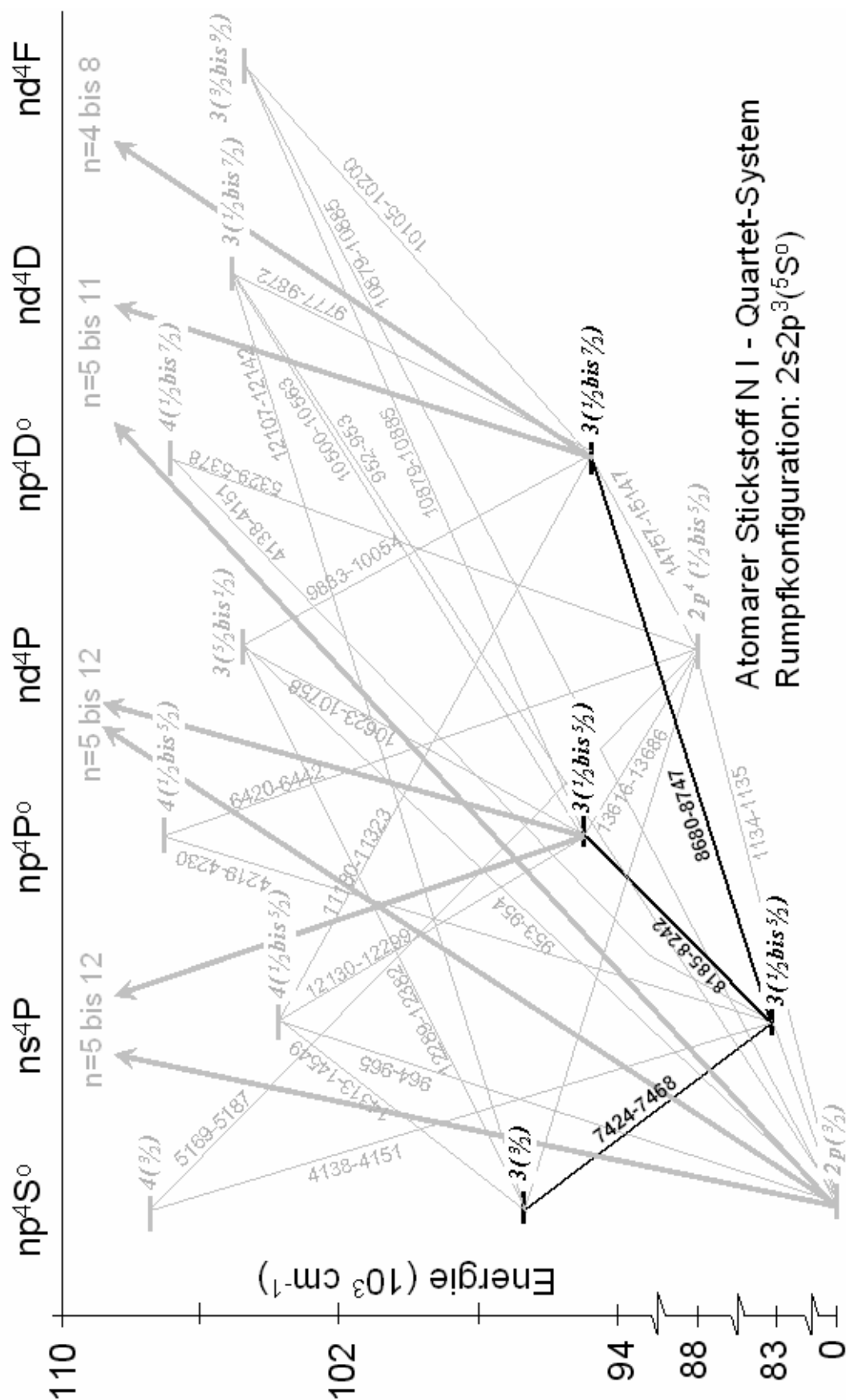


Abbildung A3: Termschemata für die angeregten Energieniveaus von atomarem Stickstoff im Quartett System (beobachtete Übergänge in schwarz).

Anhang B: Fehlerrechnung beim Boltzmann-Plot

Wie schon in Kapitel 2.1.2 gezeigt, wird für den Boltzmann-Plot eine Geradengleichung verwendet, in der ein logarithmischer Term, der die gemessenen Intensitäten enthält, gegen die Energie der angeregten Zustände aufgetragen wird. Die hieraus entstehende Geradengleichung lautet:

$$\ln\left(\frac{I_{ki}\lambda}{cA_{ki}g_k}\right) + \text{const} = -\frac{E_k}{kT_{\text{anr}}} \quad (62)$$

Die Konstante verschwindet in der weiteren Rechnung, da sich die gesuchte Temperatur

$$T_{\text{anr}} = -\frac{E_k}{kb} \quad (63)$$

aus der Steigung b der Regressionsgeraden

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2} \quad (64)$$

ergibt. Hierbei entsprechen die Ordinaten x_i den Anregungsenergien E_i , n gibt die Anzahl der berücksichtigten Einzellinien an und die Abszissen y_i sind durch die oben beschriebenen Logarithmen mit den gemessenen Intensitäten bestimmt:

$$y_i = \ln\left(\frac{I_{ki}\lambda}{cA_{ki}g_k}\right) \quad (65)$$

Für eine konventionelle Fehlerabschätzung wurde eine Fehlerfortpflanzung zufälliger Messwertabweichungen nach DIN 1319 verwendet. Die kombinierte Standardunsicherheit eines Messwertes ergibt sich dabei aus der quadratischen Fortpflanzung der einzelnen Messunsicherheiten unter Berücksichtigung der partiellen Ableitungen zu

$$u_y = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} u_{x_i}\right)^2} \quad (66)$$

Für die Temperatúrauswertung können hierbei die einzelnen Fehlerquellen als die Messunsicherheit der gemessenen Intensität, die Unsicherheit der verwendeten Einstein-Koeffizienten sowie die Abweichung der logarithmischen Terme von der ermittelten Regressionsgeraden definiert werden. Die zu verwendenden partiellen Ableitungen ergeben sich zu:

$$\frac{\partial T}{\partial b} = \frac{1}{kb^2} \quad (67)$$

$$\frac{\partial b}{\partial y} = \frac{\sum_n n E_i - \sum_n E_i}{n \sum_n E_i^2 - \left(\sum_n E_i \right)^2} \quad (68)$$

$$\frac{\partial y}{\partial I_{mess}} = \frac{1}{I_{mess}} \quad (69)$$

$$\frac{\partial y}{\partial A_{ki}} = \frac{1}{A_{ki}} \quad (70)$$

Für die fehlerbehafteten Bestimmungsgrößen wurden die Unsicherheiten durch relative Werte ausgedrückt. Zuvor wurde eine Abschätzung der systematischen Fehlerfortpflanzung durchgeführt, die ergab, dass Kalibrierfehler der absoluten Intensitäten, die sich auf alle Einzellinien gleich auswirken, keinen Einfluss auf die Temperaturbestimmung haben. Dieses Ergebnis ist allerdings nicht erstaunlich, da die Temperatur nur von den Linienverhältnissen abhängt. Als Konsequenz wird allerdings die Unsicherheit der Linienverhältnisse deutlich geringer sein als die Ungenauigkeit der absoluten Intensitäten. Sie wird in den folgenden Rechnungen mit 5% abgeschätzt. Die verwendeten Einsteinkoeffizienten sind für die betrachteten Übergänge verhältnismäßig genau bekannt. Die Unsicherheit wird daher auch mit einem Wert von 1‰ noch deutlich überschätzt werden und kann in der weiteren Rechnung vernachlässigt werden.

Der wesentliche Einfluss ist daher in der Abweichung der berücksichtigten Intensitäten von der Regressionsgeraden zu sehen. Dieser Einfluss wurde durch die empirische Standardabweichung abgeschätzt. Aufgrund der kleinen Anzahl zugrunde liegender Werte (3 Einzellinien für O, 6 Linien für N) kann nicht von einer Normalverteilung ausgegangen werden. Stattdessen wird ein Korrekturfaktor nach DIN 1319 [27] verwendet. Berücksichtigt werden Werte auf der Basis der doppelten Standardabweichung, was einer Wahrscheinlichkeit von 95,6 % für eine Lage der berechneten Temperaturen in den berechneten Fehlergrenzen entspricht. Die verwendete Standardabweichung für die Übereinstimmung mit der Regressionsgeraden u_{Gerade} ergibt sich dann zu:

$$u_{Gerade} = t \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_n (y_{i,mess} - y_{i,Gerade})^2} \quad (71)$$

Der Faktor t ist dabei abhängig von der Anzahl der Messwerte. Für $n=3$ wurde $t=1,3$ angenommen, für $n=6$ ergibt sich $t=1,15$.

Die Definitionsgleichung für den Temperaturfehler erhält man schließlich aus der kombinierten Standardunsicherheit als Fortpflanzung der Einzelunsicherheiten nach dem quadratischen Fortpflanzungsgesetz zu

$$\Delta T = \frac{1}{kb^2} \frac{1}{n \sum_n E_i^2 - \left(\sum_n E_i \right)^2} \sqrt{\sum_n \left(n E_i - \sum_n E_i \right)^2} \sqrt{\left(\frac{\Delta I_{mess}}{I_{mess}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta A_{ki}}{A_{ki}} \right)^2} + u_{Gerade}^2 \quad (72)$$

Anhang C: Unscharfe Abbildung und Strahlverfolgung

C.1: Betrachtungen zur unscharfen Abbildung

Bedingt durch die räumliche Ausdehnung des Plasmastrahls ergibt sich das über die Sichtlinie integrierte Messsignal aus einer Überlagerung der scharfen Abbildung aus der Mitte des Plasmastrahls mit in der Detektionsebene unscharf abgebildeten Querschnitten vor und hinter der Mittelachse. Als Voraussetzung für die Abel-Inversion muss geklärt werden, mit welchem Verhältnis die Signale dieser Querschnitte im Verhältnis zum scharf abgebildeten Querschnitt in das Gesamtsignal eingehen. Dazu wird ein homogen strahlendes Plasmavolumen angenommen, das in der Folge durch homogen strahlende Flächen an verschiedenen Positionen auf der optischen Achse dargestellt wird.

Die Gegenstands- und Bildweiten g und b sowie die Gegenstands- und Bildgrößen G und B gehören den klassischen Linsengesetzen:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{g} + \frac{1}{b} \quad \text{und} \quad \frac{b}{g} = \frac{B}{G} \quad (73)$$

Generell gilt für die in einen Raumwinkel Θ emittierte Intensität einer strahlenden Oberfläche mit dem Durchmesser D :

$$I = \frac{\pi}{4} D^2 \varepsilon \Theta \quad (74)$$

Der Raumwinkel, in den Strahlung emittiert wird, ist definiert durch den Öffnungswinkel θ einer Punktquelle zum nutzbaren Spiegeldurchmesser D_{Blende} mit:

$$\text{Öffnungswinkel:} \quad \tan \theta = \frac{D_{Linse,effektiv}}{2g} \quad (75)$$

$$\text{Raumwinkel:} \quad \Theta = 2\pi(1 - \cos \theta) = 2\pi \left(1 - \cos \left(\arctan \left(\frac{D_{Linse,effektiv}}{2g} \right) \right) \right) \quad (76)$$

Der Raumwinkel kann in guter Näherung als konstant über den Strahlungsquerschnitt angenommen werden und hängt nur vom effektiven Linsen- bzw. Spiegeldurchmesser und dem Abstand zur Abbildungsoptik g ab. Abbildung 7.1 verdeutlicht die geometrischen Verhältnisse und die verwendeten Größen zur Berechnung der optischen Abbildung. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass eine Fokussierung auf die Plasmawindkanalachse vorgenommen wird. Folgerichtig werden die Größen, die sich auf den scharf abgebildeten Querschnitt beziehen, mit dem Suffix *Achse* gekennzeichnet. Querschnitte zwischen der Plasmawindkanalachse und dem abbildenden Aufbau erhalten die Bezeichnung *vor*, die vom optischen Aufbau aus hinter der Plasmaachse gelegenen Querschnitte den Suffix *hinter*.

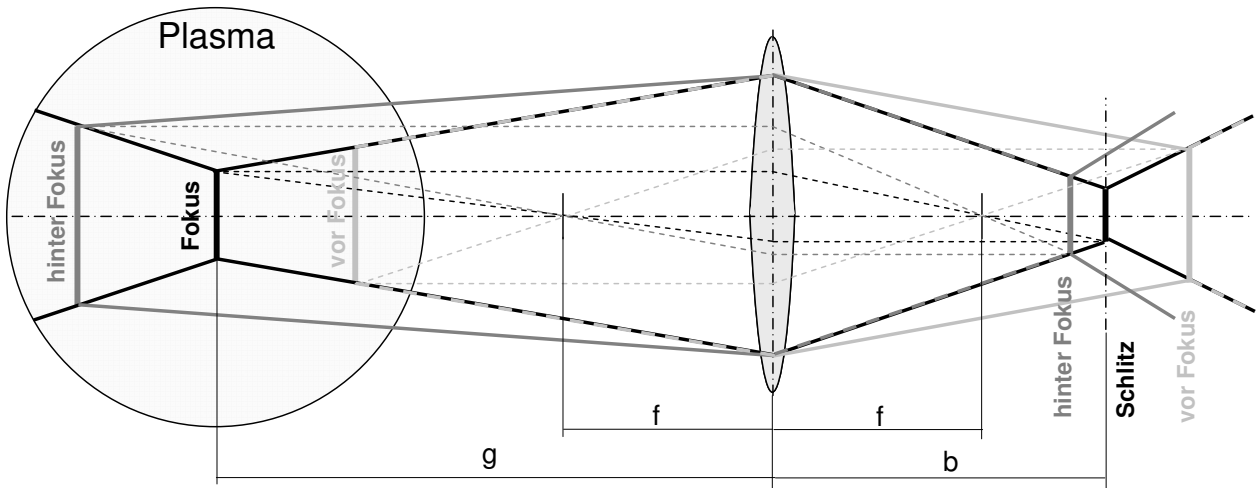


Abbildung 7.1: Abbildung von verschiedenen Plasmaquerschnitten.

Die zu verwendenden Gegenstandsgrößen können aus der Einhüllenden des Strahlengangs für den Fokusquerschnitt berechnet werden. Hierbei berechnen sich die Grenzwinkel φ der Einhüllenden vor und nach dem Fokusquerschnitt für endliche Querschnitte zu:

$$\begin{array}{cc} \text{hinter dem Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\ \tan(\varphi_{\text{hinter}}) = \frac{D_{\text{Linse, effektiv}} + G_{\text{Achse}}}{2g_{\text{Achse}}} & \tan(\varphi_{\text{vor}}) = \frac{D_{\text{Linse, effektiv}} - G_{\text{Achse}}}{2g_{\text{Achse}}} \end{array} \quad (77)$$

Hieraus ergeben sich die zu berücksichtigenden Durchmesser aus den strahlenden Flächen im jeweiligen Abstand g_i :

$$\begin{array}{cc} \text{hinter dem Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\ G_{\text{hinter}} = G_{\text{Achse}} + 2(g_{\text{hinter}} - g_{\text{Achse}})\tan(\varphi_{\text{hinter}}) & G_{\text{vor}} = G_{\text{Achse}} + 2(g_{\text{Achse}} - g_{\text{vor}})\tan(\varphi_{\text{vor}}) \end{array} \quad (78)$$

Daraus folgen die ausgesandten Strahlungsintensitäten auf der Plasmaseite:

$$\begin{array}{ccc} \text{hinter dem Fokus} & \text{im Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\ I_{\text{hinter}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{hinter}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{hinter}} & I_{\text{Achse}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{Achse}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{Achse}} & I_{\text{vor}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{vor}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{vor}} \end{array} \quad (79)$$

Die Strahlquerschnitte in der Schlitzebene ergeben sich aus der Berechnung der unscharfen Aufweitung der eigentlichen Abbildung der betrachteten Querschnitte. Für die Abbildung der Querschnitte vor der eigentlichen Fokusebene darf jetzt nicht mehr die vorher bestimmte Einhüllende des Strahlengangs für die Abbildung auf den Eingangsschlitz des Spektrometers verwendet werden. Stattdessen werden die Formeln für eine klassische Abbildung des vorher bestimmten, effektiv strahlenden Querschnitts benutzt.

$$\begin{array}{cc} \text{hinter dem Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\ \tan(\phi_{\text{hinter}}) = \frac{D_{\text{Linse, effektiv}} + B_{\text{hinter}}}{2b_{\text{hinter}}} & \tan(\phi_{\text{vor}}) = \frac{D_{\text{Linse, effektiv}} - B_{\text{vor}}}{2b_{\text{vor}}} \end{array} \quad (80)$$

$$B_{\text{hinter, Schlitz}} = B_{\text{hinter}} + 2(b_{\text{Schlitz}} - b_{\text{hinter}})\tan(\phi_{\text{hinter}}) \quad B_{\text{vor, Schlitz}} = B_{\text{vor}} + 2(b_{\text{vor}} - b_{\text{Schlitz}})\tan(\phi_{\text{vor}}) \quad (81)$$

Unter Voraussetzung einer homogenen Strahldichteverteilung im gesamten Strahlengang und Vernachlässigung von Verlusten und Abbildungsfehlern erhält man die empfangenen Strahlungsintensitäten im Schlitz.

$$\begin{array}{ccc}
 \text{hinter dem Fokus} & \text{im Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\
 I_{\text{hint er}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{hint er}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{hint er}} \frac{B_{\text{Schlitz}}^2}{B_{\text{hint er, Schlitz}}^2} & I_{\text{Achse}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{Achse}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{Achse}} & I_{\text{vor}} = \frac{\pi}{4} G_{\text{vor}}^2 \varepsilon \Theta_{\text{vor}} \frac{B_{\text{Schlitz}}^2}{B_{\text{vor, Schlitz}}^2} \quad (82)
 \end{array}$$

und somit das Verhältnis zur Strahlung aus der scharf abgebildeten Region zu:

$$\begin{array}{ccc}
 \text{hinter dem Fokus} & \text{im Fokus} & \text{vor dem Fokus} \\
 \frac{I_{\text{hint er}}}{I_{\text{Achse}}} = \frac{G_{\text{hint er}}^2}{G_{\text{Achse}}^2} \frac{\Theta_{\text{hint er}}}{\Theta_{\text{Achse}}} \frac{B_{\text{Schlitz}}^2}{B_{\text{hint er, Schlitz}}^2} & 1 & \frac{I_{\text{vor}}}{I_{\text{Achse}}} = \frac{G_{\text{vor}}^2}{G_{\text{Achse}}^2} \frac{\Theta_{\text{vor}}}{\Theta_{\text{Achse}}} \frac{B_{\text{Schlitz}}^2}{B_{\text{vor, Schlitz}}^2} \quad (83)
 \end{array}$$

Abbildung 7.2 zeigt als Beispiel das so berechnete Verhältnis der in den Schlitz eingestrahlt Leistung aus gegenüber der scharfen Abbildung verschobenen Querschnitten zur Strahlungsleistung aus dem scharf abgebildeten Querschnitt unter der Annahme homogener Profile im Strahl für den Versuchsaufbau für örtlich niedrig aufgelöste Messungen, der in Kapitel 3.2.1 beschrieben wird.

Die Näherung eines homogenen Profils im unscharfen Querschnitt gilt jedoch nur für eine Punktlichtquelle. Im Falle einer strahlenden Linie überlagern sich die einzelnen Punktlichtquellen. Wird die Aufweitung jeder einzelnen Punktlichtquelle auf einen Kreisquerschnitt mit dem Radius r angenommen und eine strahlende Linie aus einzelnen Punktlichtquellen zusammengesetzt, kann diese Überlagerung durch eine Darstellung erklärt werden, wie sie in Abbildung 7.3 für die eindimensionale Betrachtung gezeigt ist.

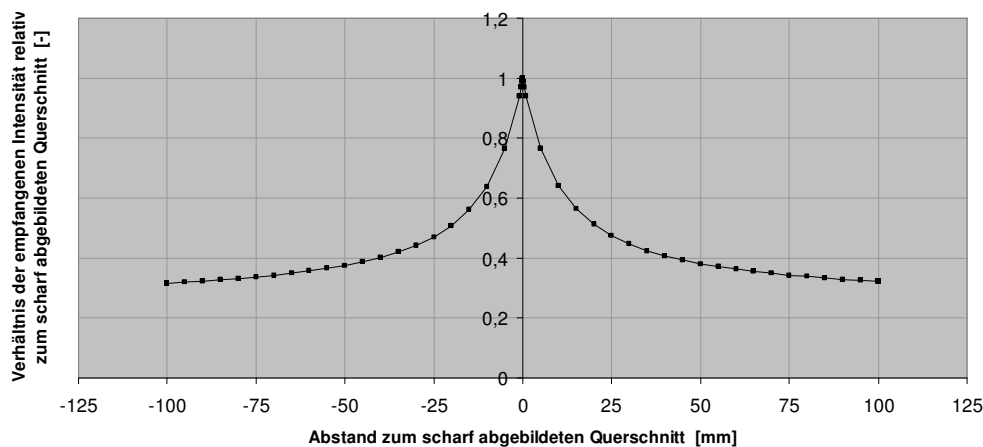


Abbildung 7.2: *Detektierte Intensität aus unscharf abgebildeten Plasmaquerschnitten relativ zur scharfen Abbildung unter Annahme homogener Strahldichte innerhalb der unscharfen Abbildung.*

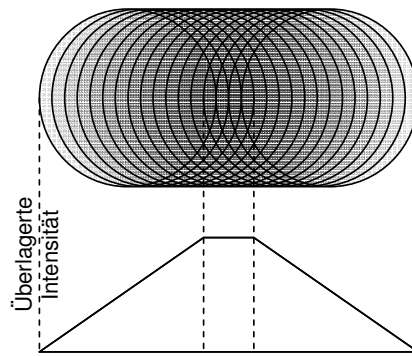


Abbildung 7.3: Veranschaulichung der Überlagerung von einzelnen Punktlichtquellen zur Ermittlung der Strahldichtevertellung in der unscharfen Abbildung eines strahlenden Linienelements zusammengesetzt aus Punktlichtquellen.

Das überlagerte Profil einer Linie aus Punktlichtquellen zeigt im äußeren Randbereich der Abbildung einen linearen Verlauf bis zu einer Tiefe des Durchmessers der aufgeweiteten Punktlichtquelle. Ab hier überlagern sich in jedem Punkt gleich viele Punktlichtquellen und es bildet sich ein Plateau konstanter Intensität aus. Zur Auswertung von strahlenden Flächen muss dieses Profil jetzt um den Mittelpunkt der Abbildung rotiert und integriert werden. Auf eine geschlossene analytische Darstellung wurde jedoch verzichtet. Stattdessen wurde eine Prozedur zur Strahlverfolgung entwickelt, da diese auch zur theoretischen Analyse eines Flugspektrometers benötigt wurde. Zur Vereinfachung dieser Betrachtungen wurde auf eine detaillierte Implementierung der optischen Eigenschaften der abbildenden Elemente verzichtet. Stattdessen wurde die eigentliche Strahlverfolgung durch Extrapolation der Geometrieverhältnisse bei der perfekten Abbildung verwendet. Die verschiedenen strahlenden Querschnitte wurden dabei in einzelne Ringe mit konstanter Einzelfläche aufgeteilt. Ausgegangen wurde dabei vom scharf abgebildeten Querschnitt, in dem eine vorgegebene Anzahl von Einzelradien generiert wurde. In allen anderen Querschnitten wurden unter Beibehaltung der strahlenden Einzelflächen zusätzliche Radialpositionen extrapoliert. An jedem Radius wurde eine konstante Anzahl von Einzelstrahlen erzeugt, die jeweils ein konstantes Raumwinkelinkrement repräsentieren. Der benutzte Gesamtraumwinkel wurde dabei aus dem maximal möglichen Strahlwinkel im strahlenden Volumen bestimmt (typischerweise im Querschnitt, der der Linse am nächsten liegt). Die Einzelstrahlintensität ist dabei proportional zum Produkt aus strahlender Ringfläche und Raumwinkelinkrement. An dieser Stelle war ein Übergang vom ebenen Problem zu einer räumlichen Darstellung notwendig. Dazu wurde jeder Einzelstrahl wiederum in eine konstante Anzahl von Einzelstrahlen unter konstanten Umfangswinkeln um die Flächennormale der strahlenden Fläche aufgeteilt. Für die notwendigen Untersuchungen war die Implementierung einer Linse und jeweils einer Blende auf der Gegenstands- und der Bildseite ausreichend, eine Erweiterung durch zusätzliche optische Elemente wäre jedoch problemlos möglich. Eine detaillierte Darstellung der Vorgehensweise ist im Anhang C dargestellt. Abbildung 7.4 zeigt eine Berechnung der Beiträge unscharf fokussierter Querschnitte im Verhältnis zur scharfen Abbildung für eine Linse mit der Brennweite 125 mm und einer scharfen Abbildung mit einer Gegenstandsweite von 2078 mm auf eine Kreisblende mit einem Durchmesser von 20 μm . Diese Konfiguration entspricht in etwa dem verwendeten Versuchsaufbau in niedriger örtlicher Auflösung. Prinzipiell ist das Ergebnis aber auch auf andere optische Konfigurationen übertragbar. Ausgehend von den oben

gemachten Vereinfachungen liefern in einem homogen strahlenden Volumen also alle Querschnitte den gleichen Beitrag zum gemessenen Signal. Damit sind die Voraussetzungen für eine Abel-Inversion gegeben.

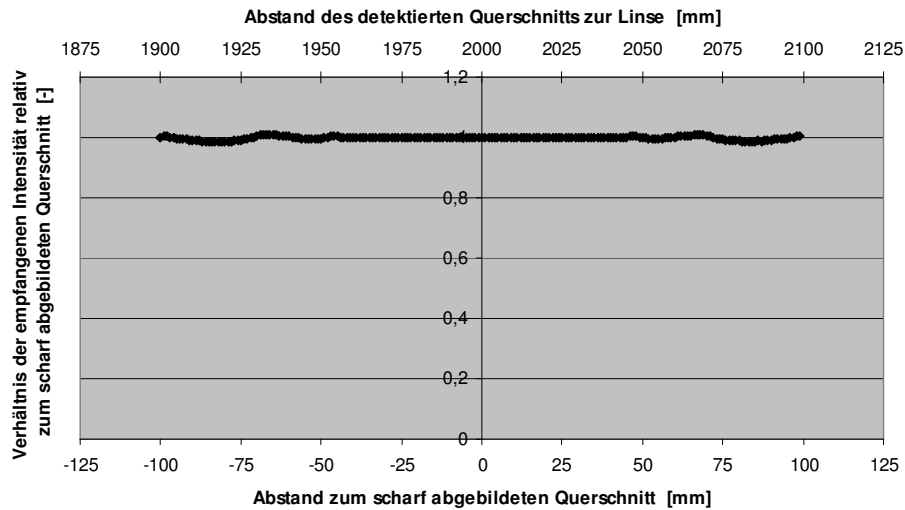


Abbildung 7.4: Detektierte Intensität aus unscharf abgebildeten Plasmaquerschnitten relativ zur scharfen Abbildung gewonnen aus einer numerischen Strahlverfolgung.

Nicht berücksichtigte Einflüsse:

Für einen realen Versuchsaufbau ergeben sich zusätzlich Abweichungen von dieser idealen Betrachtungsweise, die jedoch nicht in das Strahlverfolgungsprogramm integriert wurden. Eine dieser Abweichungen ist z.B. die maximale Auflösung des optischen Aufbaus, die durch das minimale Beugungsscheibchen beschrieben wird [13]. Die verwendete Linse oder wie im vorliegenden Falle die Spiegel begrenzen den Strahlengang und bewirken eine Beugung des Lichts. Dadurch ergibt sich analog zur Beugung am Spalt ein Beugungseffekt, der das Auflösungsvermögen des Versuchsaufbaus begrenzt. Sind zusätzliche Blenden vorhanden, so wird der wirksame Linsen- bzw. Spiegeldurchmesser zur Berechnung benutzt. Der Radius des Airy- oder Beugungsscheibchens bezeichnet den Abstand, an dem die Intensität der Abbildung einer durch Beugung aufgeweiteten Punktlichtquelle auf Null abgesunken ist und berechnet sich zu:

$$r = 0,61 \lambda f/R = 1,22 \lambda f/D \quad [13] \quad (84)$$

r : Radius des minimalen Beugungsscheibchens

R, D : Radius bzw. Durchmesser von Linse oder Blende

λ Lichtwellenlänge

Für den Versuchsaufbau zur Grenzschichtmessung (vgl. Kap 3.2.2) ergeben sich die minimalen Beugungsscheibchen zu $8,052 \cdot 10^{-3}$ bzw. $3,2208 \cdot 10^{-2}$ mm bei 200 bzw. 800 nm. Fasst man diese Werte als Aufweitung in einer unscharfen Abbildung auf, so entsprächen sie einem Abstand vom scharf abgebildeten Querschnitt von ca. 5 mm.

Weiterhin wurden in der oben beschriebenen Betrachtung keine Abbildungsfehler berücksichtigt, da eine detaillierte Berücksichtigung dieser Effekte zu aufwändig würde. Es wird allerdings davon ausgegangen, dass diese verhältnismäßig einfachen Betrachtungen ausreichen, um die Annahme zu

rechtfertigen, dass alle Querschnitte vor und hinter dem scharf abgebildeten Querschnitt im Falle eines homogenen Plasmas zu gleichen Teilen zum Endsignal beitragen würden, und dass eine Abel-Inversion ohne weitere Korrekturfaktoren für diese Querschnitte angewandt werden darf.

C.2: Programm zur Strahlverfolgung

Dem Programm werden die Basisgrößen des optischen Systems in einer Startdatei vorgegeben. Bedingt durch die Betrachtung einer perfekten Abbildung muss hierbei keine Unterscheidung zwischen Spiegeln und Linsen getroffen werden. Übergeben werden Position und Brennweite der verwendeten Linse, Durchmesser und Position des Zielquerschnitts (in der untersuchten Konfiguration der Eintrittspalt des Spektrometers) sowie Position und Durchmesser von jeweils einer Blende auf der Gegenstands- und Abbildungsseite. Zusätzlich werden die zu betrachtenden Bereiche vor und hinter der scharfen Abbildung und die Anzahl der Positionen angegeben, mit denen diese Bereiche aufgelöst werden sollen. Über die bekannten Abbildungsgesetze werden dann der Detektordurchmesser auf der Gegenstandsseite (hier im Plasmawindkanal) und seine Position relativ zur Linse sowie Öffnungswinkel und Raumwinkel gemäß Abbildung 7.5 berechnet.

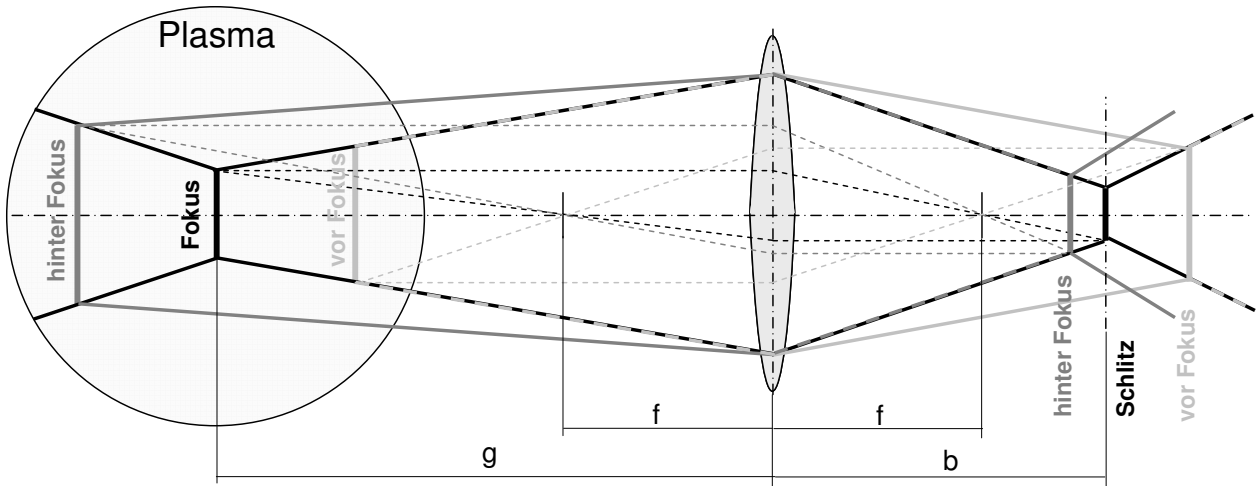


Abbildung 7.5: Abbildung von verschiedenen Plasmaquerschnitten

Die in einem Einzelstrahl enthaltene Strahlungsleistung ist proportional dem Produkt der strahlenden Fläche und des überstrichenen Raumwinkels. Für die Diskretisierung der verschiedenen Querschnitte wurde eine konstante Strahlungsleistung für jeden Einzelstrahl angestrebt. Dazu wird der fokussierte Querschnitt mit einer vorgegebenen Anzahl von Einzelradien aufgelöst, die die strahlende Fläche in gleich große Ringflächen unterteilen. Als Ursprung der Einzelstrahlen wird jeweils der Radius gewählt, der dem Flächenschwerpunkt zwischen dem Innen- und Außenradius entspricht. Aufgrund der Rotationssymmetrie kann die Strahlverfolgung als ebenes Problem behandelt werden. Jeder Einzelradius repräsentiert also die Strahlungsenergie des gesamten strahlenden Ringquerschnitts. Bei Aufteilung einer strahlenden Kreisfläche mit dem Radius r_{ges} und einer Anzahl von Flächenintervallen n_{ges} ergeben sich die jeweiligen Innen- und Außenradien sowie der Radius zum Flächenschwerpunkt zu:

$$r_{innen} = \sqrt{\frac{n-1}{n_{ges}}} * r_{ges}, \quad r_{außen} = \sqrt{\frac{n}{n_{ges}}} * r_{ges} \quad \text{und} \quad r_{Strahl} = \sqrt{\frac{1}{2} * (r_{innen}^2 + r_{außen}^2)}. \quad (85)$$

Einzige Ausnahme ist der Ausgangsradius für die Einzelstrahlen des innersten Flächenelements, der auf der Achse ($R=0$) angenommen wird. Für die strahlenden Flächen gilt dann:

$$A_n = \pi * (r_{\text{außen}}^2 - r_{\text{innen}}^2) = \frac{1}{n_{\text{ges}}} * A_{\text{ges}} = \frac{1}{n_{\text{ges}}} * \pi * r_{\text{ges}}^2 \quad (86)$$

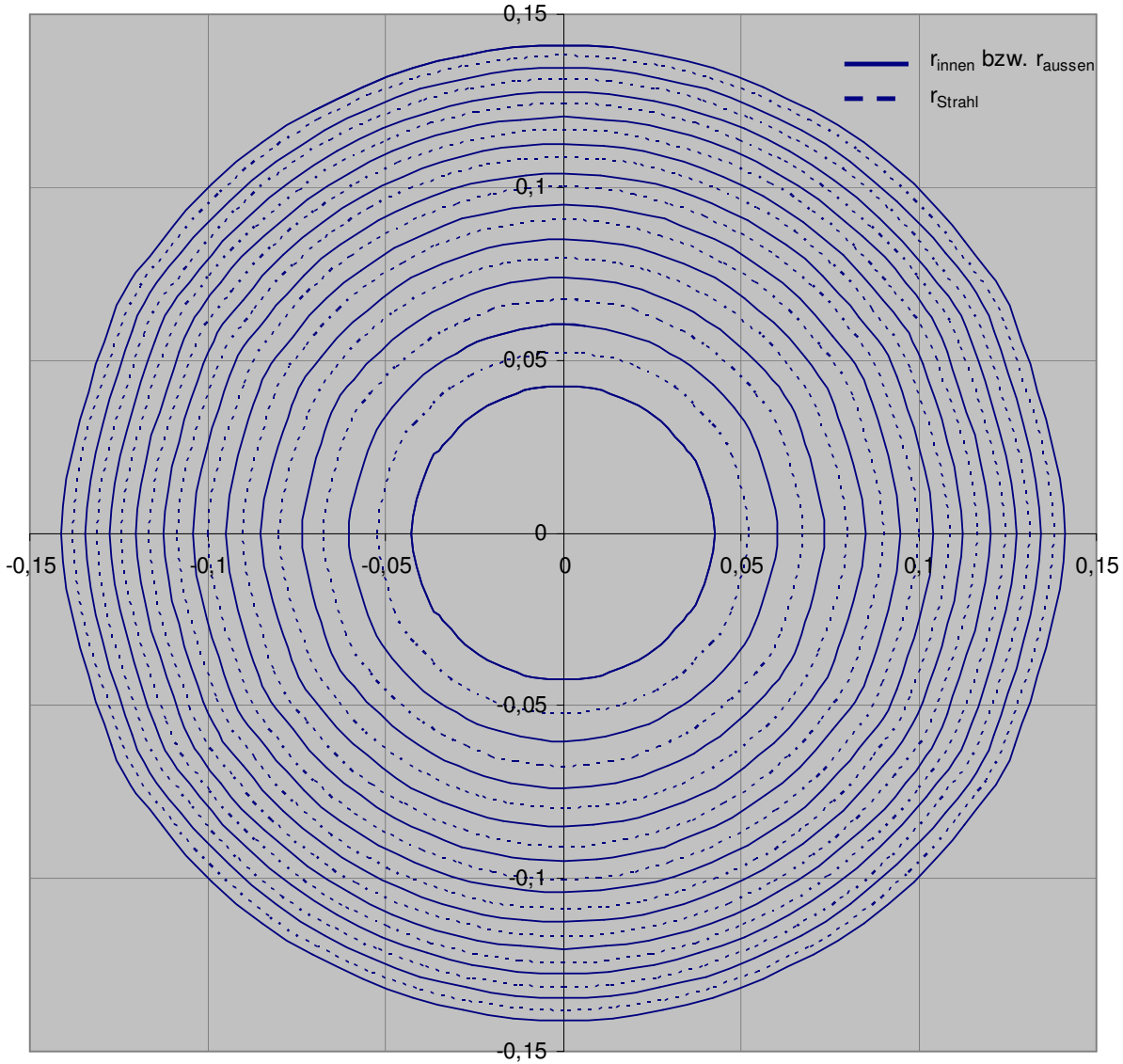


Abbildung 7.6: *Abbildung von verschiedenen Plasmaquerschnitten*

Für jeden Radiuswert wird wiederum eine konstante Anzahl von Einzelstrahlen generiert, die jeweils den gleichen Raumwinkelbereich abdecken. Auch hier werden analog zur Radienberechnung die Strahlwinkel so gewählt, dass sie im Flächenschwerpunkt des jeweiligen Raumwinkelintegrals entspringen. Im Gegensatz zur Diskretisierung der Radien müssen bei den Strahlwinkeln allerdings negative und positive Werte berücksichtigt werden. Deshalb repräsentiert jeder Einzelstrahl jeweils nur den halben Raumwinkel des zugehörigen Strahlwinkels.

$$\alpha_{\text{innen}} = \arccos\left(1 + \frac{1-n}{n_{\text{ges}}}\right) * (1 - \cos(\alpha_{\text{ges}})) \quad (87)$$

$$\alpha_{\text{au\ss en}} = \arccos\left(1 - \frac{n}{n_{\text{ges}}}\right) * (1 - \cos(\alpha_{\text{ges}})) \quad (88)$$

$$\alpha_{\text{Strahl}} = \arccos\left(\frac{1}{2} * (\cos(\alpha_{\text{innen}}) + \cos(\alpha_{\text{au\ss en}}))\right) \quad (89)$$

Auch hier gilt für den Mittelstrahl die Ausnahme $\alpha_{\text{Strahl}} = 0$. Die zugehörigen Raumwinkelinkremente ergeben sich zu:

$$\theta_n = \pi * (\cos(\alpha_{\text{innen}}) - \cos(\alpha_{\text{au\ss en}})) = \frac{1}{2 * n_{\text{ges}}} * \theta_{\text{ges}} = \frac{1}{n_{\text{ges}}} * \pi * (1 - \cos(\alpha_{\text{ges}})) \quad (90)$$

An diesem Punkt erwies es sich als notwendig, von den bisher ebenen Betrachtungen auf ein räumliches Problem überzugehen, da Punkte außerhalb der optischen Achse bezüglich der verschiedenen Raumwinkelinkremente nicht mehr die Voraussetzung der Rotationssymmetrie erfüllen. Dazu wurden die vorher bestimmten Raumwinkelinkremente wiederum aufgeteilt, indem dem Strahlwinkel Umfangswinkel um die Flächennormale überlagert wurden, in die schließlich die eigentlichen Einzelstrahlen ausgesandt wurden, die jetzt auch Komponenten senkrecht zur Zeichnungsebene in Abbildung 7.5 aufweisen. Abbildung 7.7 verdeutlicht die räumliche Geometrie.

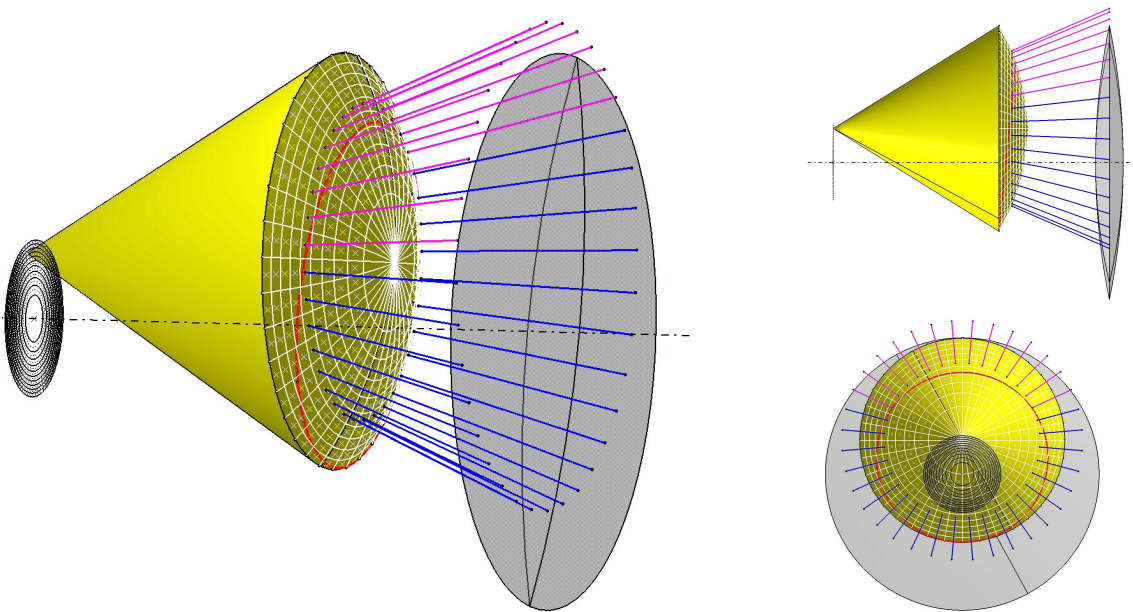


Abbildung 7.7: Übergang zur räumlichen Betrachtungsweise bei der Strahlverfolgung.

Die Querschnitte vor und hinter der scharfen Abbildung ergeben sich aus der Einhüllenden des Strahlengangs gemäß Abbildung 7.5. Die strahlenden Flächen sind grundsätzlich größer als die der scharfen Abbildung. Zur Diskretisierung dieser Flächen wurde das für die scharfe Abbildung berechnete Radiusprofil unter Beibehaltung der vorher verwendeten Einzelflächen um zusätzliche Radialpositionen ergänzt, bis der neue Grenzradius erreicht war. Zusätzlich ändert sich der Raumwinkel für jede axiale Position. Diese Änderung ist jedoch nur schwach. Um die Einzelstrahlinten-

sität für alle Positionen konstant zu halten, wurde für alle Positionen ein maximaler Raumwinkelbereich festgelegt, der immer gleich diskretisiert wurde. Damit auch alle relevanten Winkel berücksichtigt werden, wird der maximal mögliche Strahlwinkel im betrachteten Bereich ermittelt und der zu diskretisierende Raumwinkelbereich mit diesem Winkel als halbem Öffnungswinkel festgelegt. Im Allgemeinen ist dies der Winkel vom maximalen Radius im vordersten Querschnitt vor der Linse zum unteren Linsenrand.

Die eigentliche Strahlverfolgung erfolgt nach der Berechnung der Einzelstrahlwinkel in den verschiedenen Ebenen. Danach werden die korrespondierenden Radialpositionen an den verschiedenen optischen Elementen bis hin zur Linse berechnet. Wenn der Abstand zur Achse größer ist als der Radius des entsprechenden Elements (z.B. größer als der angegebene Blendendurchmesser), wird der Strahl als verloren gezählt. Ausgehend von der Linse wird ein neuer Strahlwinkel berechnet, der sich aus dem Auftreffpunkt auf der Linse und der Position in der scharfen Abbildung (die im allgemeinen Fall nicht im Spalt liegt!) gemäß den Linsengesetzen für Abbildungsweite und Vergrößerungsmaßstab ergibt. Der Strahl wird dann mit diesem Winkel weiterverfolgt. Wenn er die Kreisblende im Spaltquerschnitt trifft, wird er zur empfangenen Intensität addiert, ansonsten als verloren notiert. Abbildung 7.8 zeigt einen Programmablaufplan.

Am Beispiel des vereinfachten Versuchsaufbaus zur örtlich grob aufgelösten Untersuchung mit einer Linse der Brennweite 125 mm wird die korrekte Funktionsweise des Programms demonstriert. Dazu sind in den Abbildungen 7.9 und 7.10 die Auftreffpunkte der generierten Einzelstrahlen aus dem fokussierten Querschnitt sowie aus den beidem extremen Axialpositionen im Abstand von 100 mm vor und hinter der scharfen Abbildung im Plasmawindkanal dargestellt. Für den Linsenquerschnitt wurden die jeweils maximalen Radialpositionen, im Zielquerschnitt die Radien auf der Hälfte der strahlenden Querschnitte gewählt.

Der Ausgangsradius im scharf abgebildeten Querschnitt wird im Zielquerschnitt korrekt in einem Punkt abgebildet. Für die unscharf abgebildeten Querschnitte ist deutlich der Einfluss der räumlichen Abbildung durch die Implementierung des Umfangswinkels zu erkennen.

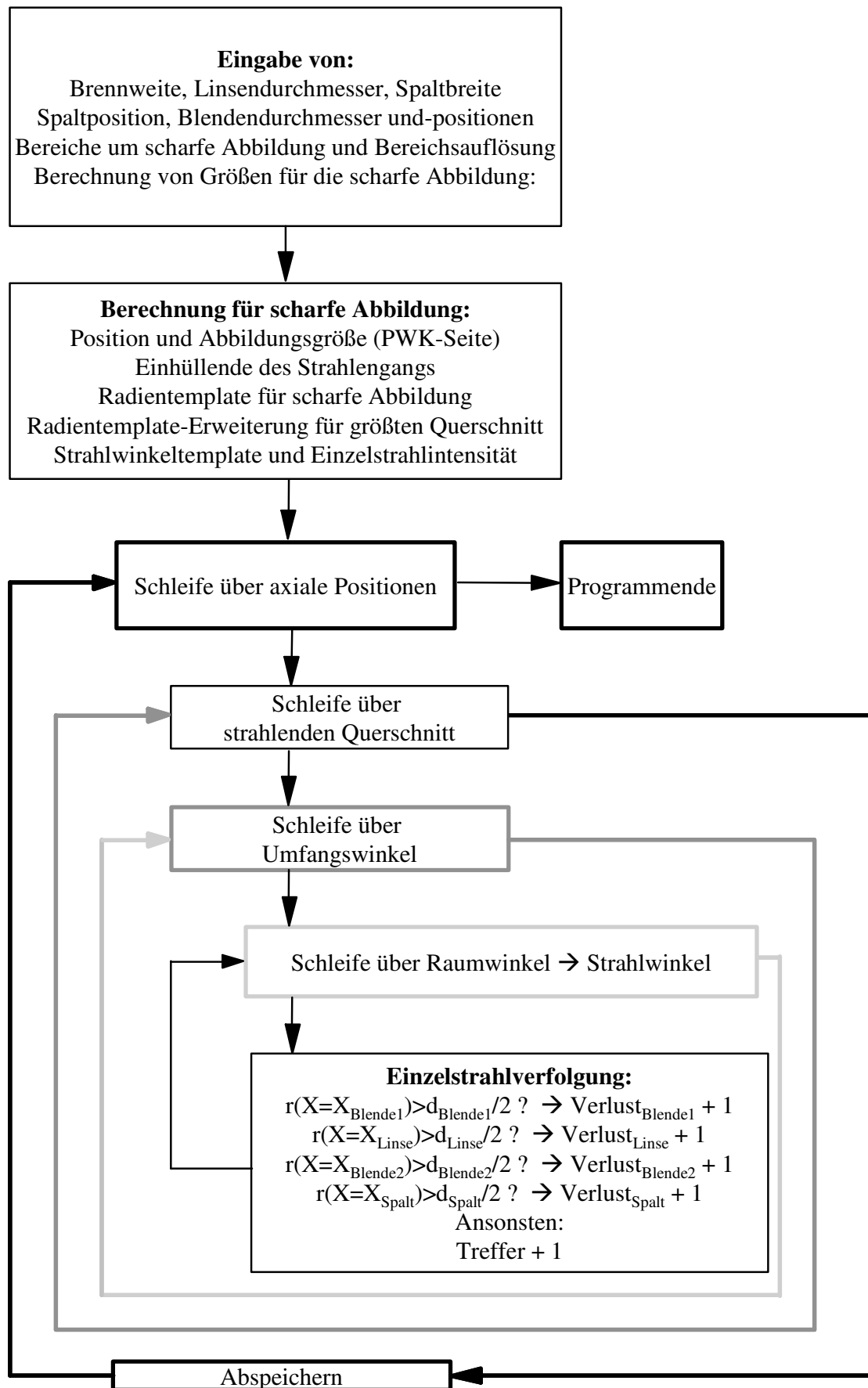


Abbildung 7.8: Programmablaufplan zur Strahlverfolgung.

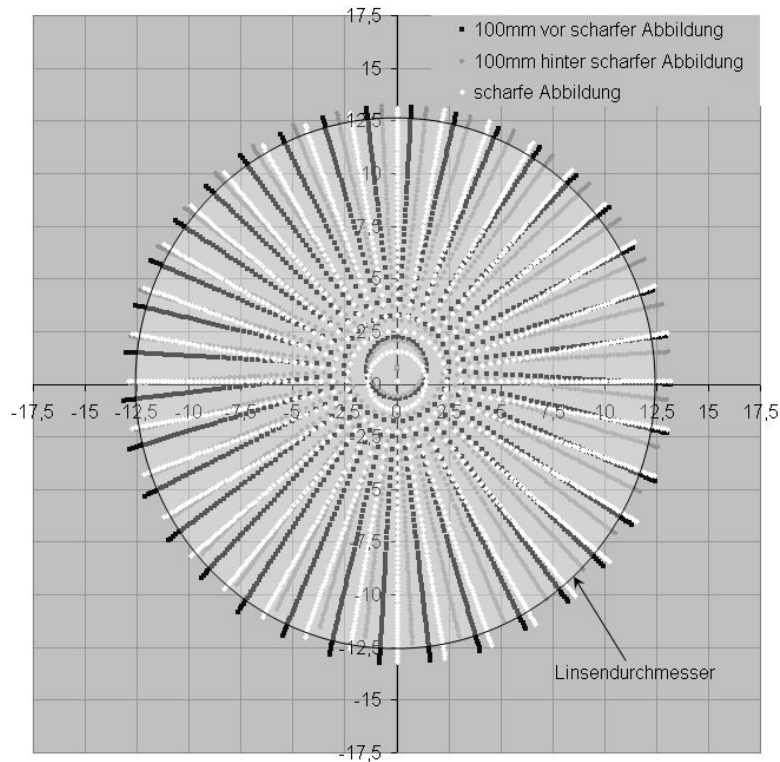


Abbildung 7.9: Auftreffpunkte der Einzelstrahlen im Linsenquerschnitt für die maximalen Radien an verschiedenen Axialpositionen.

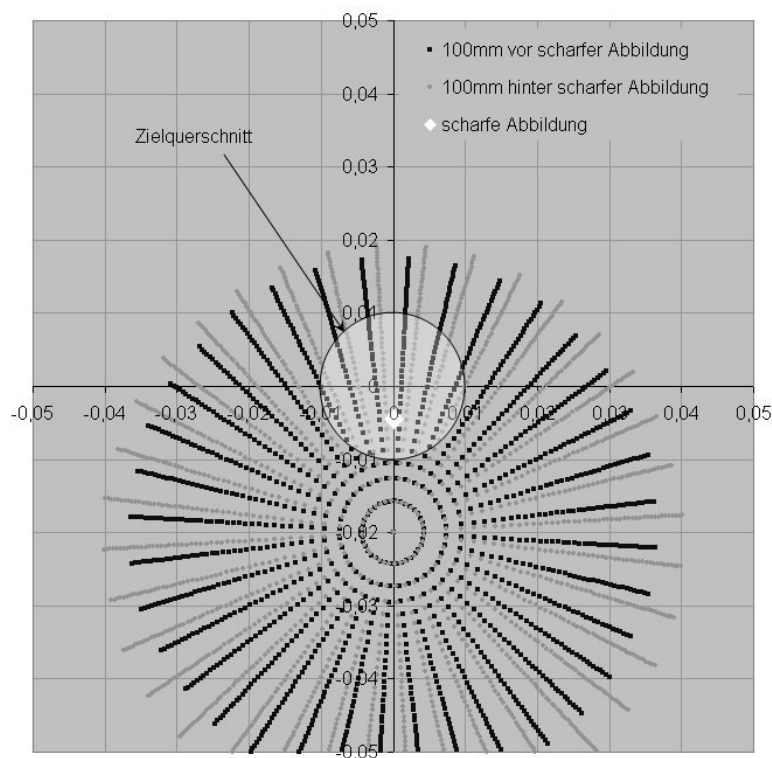


Abbildung 7.10: Auftreffpunkte der Einzelstrahlen im Spaltquerschnitt für einen Ausgangsradius auf der Hälfte des strahlenden Querschnitts.

Anhang D: Verwendete Spektroskopische Konstanten der Moleküle

D.1: Konstanten zur Ermittlung der Übergangsenergie

	$N_2 A^3\Sigma$	$N_2 B^3\Pi$	$N_2 C^3\Pi$	$N_2^+ X^2\Sigma$	$N_2^+ B^2\Sigma$
T_e	50203,66	59619,09	89136,880	0,0	25461,110
Y10 (ω_e)	1460,941	1734,025	2047,780	2207,220	2421,140
Y20 ($-\omega_e x_e$)	-13,980	-14,412	-28,9488	-16,2260	-24,070
Y30 ($\omega_e y_e$)	2,4e-2	-3,3e-3	2,24731	4,0e-3	-0,30
Y40 ($\omega_e z_e$)	-2,56e-3	-7,9e-4	-0,55145	-6,1e-3	-0,06670
Y50 ($\omega_e a_e$)	0,0	4,2e-5	0,0	3,9e-4	0,0
Y60 ($\omega_e b_e$)	0,0	-1,68e-6	0,0	-1,4e-5	0,0
Y70 ($\omega_e c_e$)	0,0	0,0	0,0	2,0e-7	0,0
Y01 (B_e)	1,4539	1,63772	1,82677	1,931710	2,085070
Y11 ($-\alpha_e$)	-0,0175	-0,01793	-0,024	-0,018816	-0,02120
Y21 (γ_e)	-1,4e-4	-1,04e-4	1,9e-3	-6,77e-5	-5e-4
Y31 (δ_e)	0,0	4,882e-6	-6,0e-4	-2,32e-6	-8,8e-5
Y41	0,0	-2,12e-7	0,0	0,0	0,0
Y51	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Y61	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Y02 ($-D_e$)	-5,84e-6	-5,527e-6	-5,147e-6	-5,92e-6	0,0
Y12 (β_e)	-3,0e-8	-9,584e-9	-2,137e-6	-3,9e-8	0,0
Y22	0,0	0,0	1,2989e-6	0,0	0,0
Y32	0,0	0,0	-2,417e-7	0,0	0,0
Y42	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Tabelle D1: Spektroskopische Konstanten zur Berechnung von N_2 und N_2^+ [70].

	NO X²Π	NO A²Σ	NO B²Π	NO C²Π	NO D²Σ
T _e	0,0	43965,7	45932,3	52179,8	53084,7
Y10 (ω _e)	1904,13455	2374,31	1042,4	2381,3	2323,9
Y20 (-ω _e x _e)	-14,088358	-16,1066	-77,726	-15,702	-22,885
Y30 (ω _e y _e)	0,0100467	-0,0465	0,11596	0,0	0,75
Y40 (ω _e z _e)	-1,53E-04	0,0	-3,96E+01	0,0	-0,22
Y50 (ω _e a _e)	-9,77E-06	0,0	0,0	0,0	0,0
Y60 (ω _e b _e)	-1,91E-07	0,0	0,0	0,0	0,0
Y70 (ω _e c _e)	-5,27E-09	0,0	0,0	0,0	0,0
Y01 (B _e)	1,70488847	1,9965	11,244	20,155	20,026
Y11 (-α _e)	-0,01754158	-0,01915	-0,013433	-0,03244	-0,02175
Y21 (γ _e)	-1,49E-05	0,0	2,99E-02	0,0	0,0
Y31 (δ _e)	0,0	0,0	-3,18E-03	0,0	0,0
Y41	-4,73E-08	0,0	0,0	0,0	0,0
Y51	1,01E-09	0,0	0,0	0,0	0,0
Y61	-6,06E-11	0,0	0,0	0,0	0,0
Y02 (-D _e)	-5,47E-06	-5,6e-6	-5,2e-6	-5,8e-6	-5,9e-6
Y12 (β _e)	-1,70E-08	-2,0e-8	-1,4e-8	-1,8e-8	-5,9e-8
Y22	-1,47E-10	0,0	0,0	0,0	0,0
Y32	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Y42	-2,64E-12	0,0	0,0	0,0	0,0

Tabelle D2: Spektroskopische Konstanten zur Berechnung von NO [70]

	CN X²Σ	CN B²Σ	O₂ X³Σ	O₂ B³Σ
T _e	0,0	27,752,801	0,0	49793,28
Y10 (ω _e)	2,068,648	2160,38	15,801,932	70,905,770
Y20 (-ω _e x _e)	-130,971	-17,744	-119,808	-1,061,408
Y30 (ω _e y _e)	-0,0124	-0,4670	0,047475	-0,05921
Y40 (ω _e z _e)	-7,0e-4	0,0	-1,27E+02	-0,0239750
Y50 (ω _e a _e)	-3,23e-5	0,0	0,0	0,00220680
Y60 (ω _e b _e)	0,0	0,0	0,0	-
Y70 (ω _e c _e)	0,0	0,0	0,0	4,43E-01
Y01 (B _e)	189,978,316	196,879	1,445,622	0,818975
Y11 (-α _e)	-0,0173720	-0,01996	-0,01593	-0,0119225
Y21 (γ _e)	-2,59E-02	-3,31e-4	6,41E+00	-6,30E+01
Y31 (δ _e)	-2,11e-7	-2,20e-5	-2,85E-01	1,57E-01
Y41	-1,61e-8	0,0	0,0	6,71E-01
Y51	0,0	0,0	0,0	-9,35E-02
Y61	0,0	0,0	0,0	2,90E-03
Y02 (-D _e)	-6,40e-6	-6,6e-6	-4,84e-6	-4,55e-6
Y12 (β _e)	-1,2e-8	0,0	-2,06e-8	-2,20e-7
Y22	0,0	0,0	0,0	0,0
Y32	0,0	0,0	0,0	0,0
Y42	0,0	0,0	0,0	0,0

Tabelle D3: Spektroskopische Konstanten zur Berechnung von O₂ Schumann-Runge und CN violett [70]

D.2: Hönl-London-Faktoren

Für die Hönl-London-Faktoren der ${}^2\Sigma \rightarrow {}^2\Pi$ Übergänge ($\text{NO}\gamma$, $\text{NO}\epsilon$) wurden die Formulierungen von Arnold und Whiting [108] verwendet, die sich entgegen den üblichen Konventionen nicht auf die Quantenzahl des oberen sondern auf die des unteren Niveaus beziehen, für alle anderen Übergänge die von Herzberg [52] angegebenen Formeln.

Zweig	R	P
Hönl-London-Faktor	$J'+1$	J'

Tabelle D4: Hönl-London-Faktoren für ${}^1\Sigma \rightarrow {}^1\Sigma$ Übergänge nach Herzberg [52], verwendet für N_2^+ B-X., O_2 Schumann-Runge, CN violett.

Zweig	Energieniveaus	Hönl-London-Faktor
Q ₂ Q ₃	$F_2'(J) \rightarrow F_2''(J)$ $F_3'(J) \rightarrow F_3''(J)$	$HL = \frac{(2J+1)\Lambda''^2}{J(J+1)}$
R ₁ R ₂ R ₃	$F_1'(J) \rightarrow F_1''(J+1)$ $F_2'(J) \rightarrow F_2''(J+1)$ $F_3'(J) \rightarrow F_3''(J+1)$	$HL = \frac{(J+1+\Lambda'')(J+1-\Lambda'')}{(J+1)}$
P ₁ P ₂ P ₃	$F_1'(J) \rightarrow F_1''(J-1)$ $F_2'(J) \rightarrow F_2''(J-1)$ $F_3'(J) \rightarrow F_3''(J-1)$	$HL = \frac{(J+\Lambda'')(J-\Lambda'')}{J}$

Tabelle D5: Hönl-London-Faktoren für ${}^3\Pi \rightarrow {}^3\Pi$ Übergänge nach Herzberg [52], verwendet für N_2 C-B.

Zweig	Energieniveaus	Hönl-London-Faktor
Q ₁ Q ₂	$F_1'(J) \rightarrow F_1''(J)$ $F_2'(J) \rightarrow F_2''(J)$	$HL = \frac{(2J+1)\Lambda''^2}{J(J+1)}$
R ₁ R ₂	$F_1'(J) \rightarrow F_1''(J+1)$ $F_2'(J) \rightarrow F_2''(J+1)$	$HL = \frac{(J+1+\Lambda'')(J+1-\Lambda'')}{(J+1)}$
P ₁ P ₂	$F_1'(J) \rightarrow F_1''(J-1)$ $F_2'(J) \rightarrow F_2''(J-1)$	$HL = \frac{(J+\Lambda'')(J-\Lambda'')}{J}$

Tabelle D6: Hönl-London-Faktoren für ${}^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$ Übergänge nach Herzberg [52], verwendet für $\text{NO}\beta$ und $\text{NO}\delta$.

Zweig	Energieniveaus	Hönl-London-Faktor
Q ₁	F ₁ '(J)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)[(4J^2+4J-1)+U(8J^3+12J^2-2J-7+2YG)]}{16J(J+1)}$
Q ₁₂	F ₁ '(J)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)[(4J^2+4J-1)-U(8J^3+12J^2-2J-7+2YG)]}{16J(J+1)}$
Q ₂₁	F ₂ '(J)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)[(4J^2+4J-1)-U(8J^3+12J^2-2J+1-2YG)]}{16J(J+1)}$
Q ₂	F ₂ '(J)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)[(4J^2+4J-1)+U(8J^3+12J^2-2J+1-2YG)]}{16J(J+1)}$
R ₁	F ₁ '(J-1)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 + (2J+1)U(4J^2+4J-7+2YG)}{16(J+1)}$
R ₁₂	F ₁ '(J-1)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 - (2J+1)U(4J^2+4J-7+2YG)}{16(J+1)}$
R ₂₁	F ₂ '(J-1)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 - (2J+1)U(4J^2+4J+1-2YG)}{16(J+1)}$
R ₂	F ₂ '(J-1)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 + (2J+1)U(4J^2+4J+1-2YG)}{16(J+1)}$
P ₁	F ₁ '(J+1)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 + (2J+1)U(4J^2+4J+1-2YG)}{16J}$
P ₁₂	F ₁ '(J+1)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 - (2J+1)U(4J^2+4J+1-2YG)}{16J}$
P ₂₁	F ₂ '(J+1)→F ₁ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 - (2J+1)U(4J^2+4J-7+2YG)}{16J}$
P ₂	F ₂ '(J+1)→F ₂ ''(J)	$HL = \frac{(2J+1)^2 + (2J+1)U(4J^2+4J-7+2YG)}{16J}$

mit $U = \frac{1}{\sqrt{Y^2 - 4Y + 2(J+1)^2}}$ [108] und $A = 123,26 - 0,1906 \cdot (v'' + 0.5) - 0,0108 \cdot (v'' + 0.5)^2$ [70].

Tabelle D7: Hönl-London-Faktoren für $^2\Sigma \rightarrow ^2\Pi$ Übergänge nach Arnold und Whiting [108], verwendet für NO γ und NO ϵ .

D.3: Kopplungskonstanten für Hund'sche Fälle

Die betrachteten Übergänge enthalten nur Σ und Π Zustände. Nach Herzberg [52] sind für derartige zweiatomige Moleküle nur die Hund'schen Fälle a) und b) von Bedeutung. Die Π Zustände gehören für kleine Rotationsquantenzahlen dem Hund'schen Fall a) an, gehen aber für große Rotationsquantenzahlen in den Hund'schen Fall b) über. Dieser Übergang wird in der verwendeten Modellierung durch den Beitrag von $Y=B_v/A$ und somit durch die Konstante A beschrieben. Die benutzten Kopplungskonstanten sind im Folgenden für die verschiedenen relevanten Niveaus dargestellt.

Elektronisches Niveau	Kopplungskonstante A	Quelle
N₂ B³Π	$42,229 - 0,389 (v+0,5) - 0,0031 (v +0,5)^2$	
N₂ C³Π	$39,088 - 0,2606 (v +0,5) - 0,198*\text{pow}(v +0,5)^2$	
NO X²Π	$123,26 - 0,1906 (v +0,5) - 0,0108 (v +0,5)^2$	Laux [70]
NO B²Π	$28,5 + 1,57 (v +0,5)$	Laux [70]
NO C²Π	7,6	Laux [70]

Tabelle D8: Konstanten für den Übergang zwischen Hund'schem Fall (a) und (b).

Anhang E: Grenzwerte für Rotationsquantenzahlen

Wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, wurden über Morse- und Hulbert-Hirschfelder-Potentiale mit Konstanten von Laux und Park Abbruchbedingungen für die Berechnung der Rotationsenergie ermittelt. In der gezeigten Temperaturbestimmung wurden die aus den Hulber-Hirschfelder-Potentiale mit den Konstanten von Laux bestimmten Grenzen für die Rotationsquantenzahlen verwendet. Die Ergebnisse für NO sind schon in Abb. 2.19 dargestellt worden. Es hat sich gezeigt, dass die Potentiale nach Hulbert-Hirschfelder grundsätzlich höhere Quantenzahlen (sowohl in der Vibration als auch in der Rotation) erlauben als die einfacheren Morse Potentiale. Die Verläufe für die restlichen betrachteten Moleküle sind in den Abbildungen E.1 bis E.7 gezeigt. Zusätzlich sind die Tabellen E.1 bis E.5 die Zahlenwerte für die Grenzrotationsquantenzahlen in den Vibrationsniveaus der verschiedenen elektronischen Zustände an.

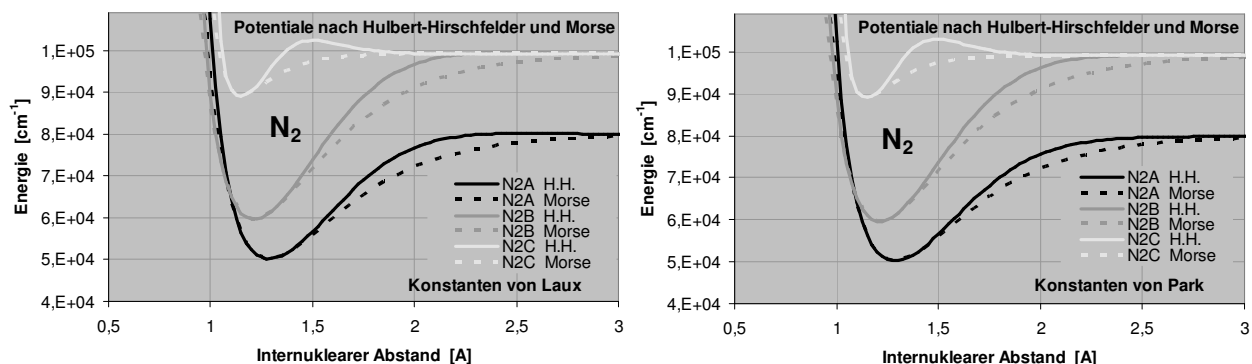


Abbildung E.1: Morse und Hulbert-Hirschfelder Potentiale für N_2 , Konstanten von Laux und Park.

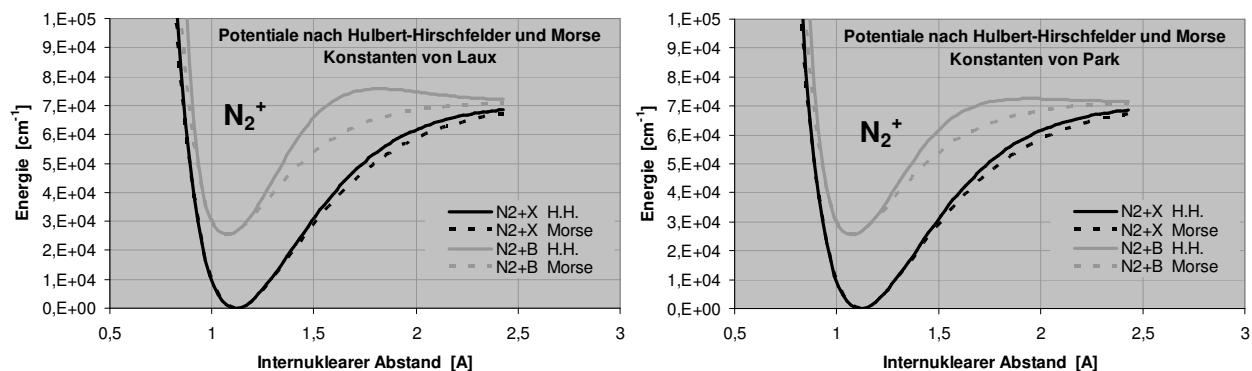


Abbildung E.2: Morse und Hulbert-Hirschfelder Potentiale für N_2^+ , Konstanten von Laux und Park.

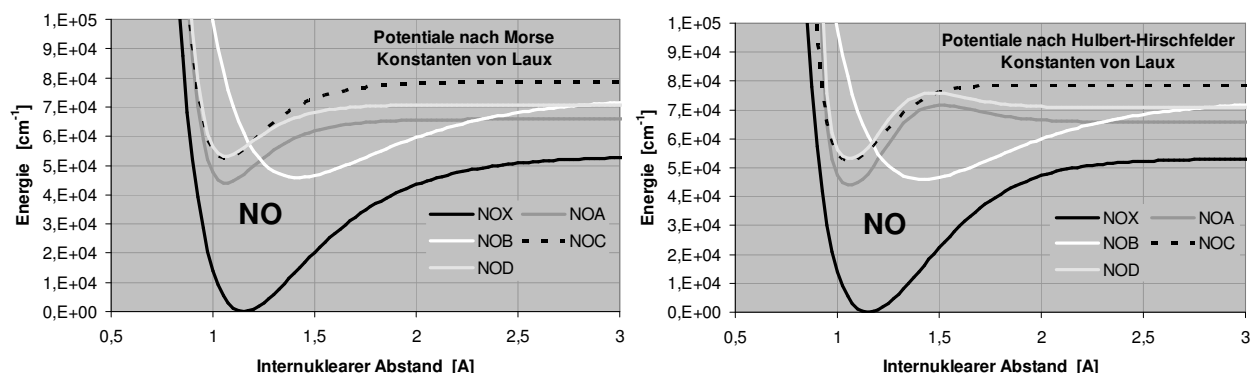


Abbildung E.3: Morse und Hulbert-Hirschfelder Potentiale für NO mit Konstanten von Laux.

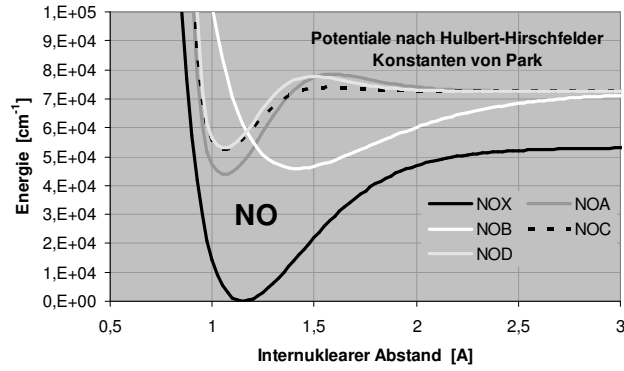


Abbildung E.4: Hulbert-Hirschfelder Potentiale für NO mit Konstanten von Park.

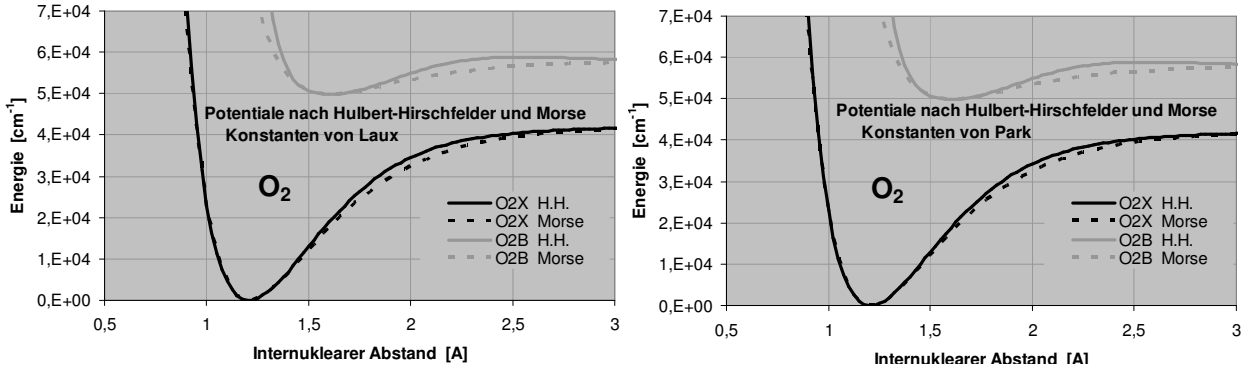


Abbildung E.5: Morse und Hulbert-Hirschfelder Potentiale für O_2 mit Konstanten von Laux.

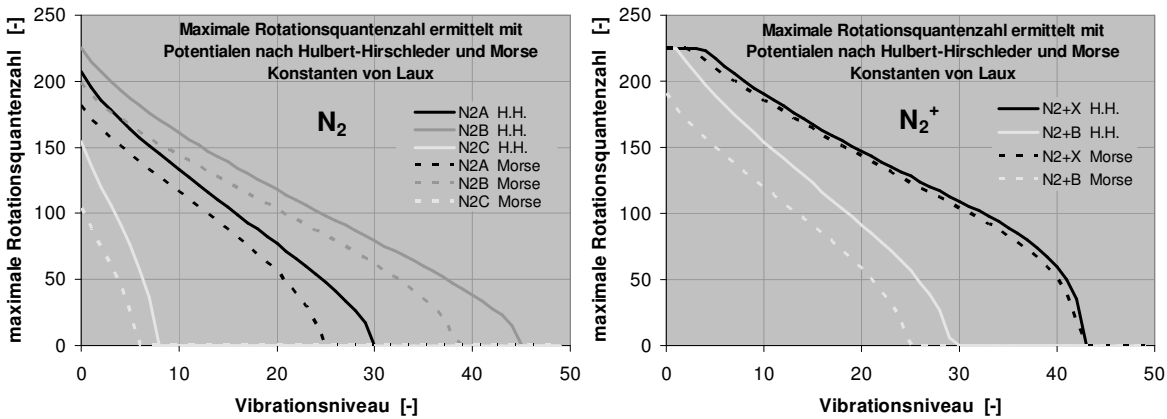


Abbildung E.6: Grenzrotationsquantenzahlen für N_2 und N_2^+ ermittelt aus Hulbert-Hirschfelder Potentzialen mit Konstanten nach Laux.

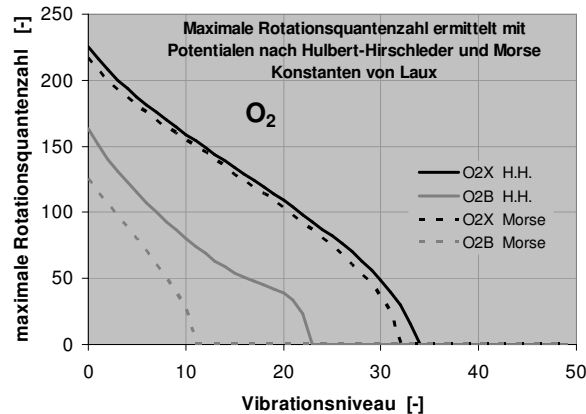


Abbildung E.7: Grenzrotationsquantenzahlen für O_2 , ermittelt aus Hulbert-Hirschfelder Potentzialen mit Konstanten nach Laux.

V	$J_{\max} N_2 A^3\Sigma$				$J_{\max} N_2 B^3\Pi$				$J_{\max} N_2 C^3\Pi$			
	Laux		Park		Laux		Park		Laux		Park	
	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse
0	207	182	181	182	225	199	222	198	154	104	158	103
1	195	172	171	172	215	190	210	188	136	88	138	84
2	186	164	164	164	207	183	201	180	120	74	120	68
3	178	157	157	157	200	177	193	173	106	60	104	50
4	171	151	151	151	193	172	186	167	91	44	87	30
5	164	145	145	145	187	167	179	161	76	25	68	0
6	157	139	139	139	182	162	172	155	58	0	46	0
7	151	133	133	133	176	157	166	150	36	0	0	0
8	145	128	128	128	171	152	160	144	0	0	0	0
9	139	122	122	122	166	148	154	139	0	0	0	0
10	133	117	116	117	161	144	148	134	0	0	0	0
11	127	111	111	111	156	140	142	128	0	0	0	0
12	121	105	105	105	152	136	137	123	0	0	0	0
13	116	100	99	99	147	131	131	118	0	0	0	0
14	110	94	93	93	143	127	126	112	0	0	0	0
15	105	88	87	87	139	123	120	107	0	0	0	0
16	99	82	81	81	134	119	114	101	0	0	0	0
17	93	76	75	75	130	115	109	96	0	0	0	0
18	88	69	68	68	126	111	103	90	0	0	0	0
19	82	63	61	61	122	107	98	84	0	0	0	0
20	77	56	53	53	118	103	92	78	0	0	0	0
21	71	48	44	44	114	99	86	72	0	0	0	0
22	66	40	34	34	110	95	80	65	0	0	0	0
23	60	30	20	20	106	91	74	58	0	0	0	0
24	54	16	0	0	102	87	68	50	0	0	0	0
25	48	0	0	0	98	83	61	40	0	0	0	0
26	41	0	0	0	94	79	54	29	0	0	0	0
27	34	0	0	0	91	75	46	10	0	0	0	0
28	26	0	0	0	87	70	37	0	0	0	0	0
29	17	0	0	0	83	66	26	0	0	0	0	0
30	0	0	0	0	79	62	4	0	0	0	0	0
31	0	0	0	0	75	57	0	0	0	0	0	0
32	0	0	0	0	72	52	0	0	0	0	0	0
33	0	0	0	0	68	47	0	0	0	0	0	0
34	0	0	0	0	64	41	0	0	0	0	0	0
35	0	0	0	0	60	35	0	0	0	0	0	0
36	0	0	0	0	56	29	0	0	0	0	0	0
37	0	0	0	0	52	21	0	0	0	0	0	0
38	0	0	0	0	47	7	0	0	0	0	0	0
40	0	0	0	0	43	0	0	0	0	0	0	0
41	0	0	0	0	38	0	0	0	0	0	0	0
42	0	0	0	0	34	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0	0	0	28	0	0	0	0	0	0	0
44	0	0	0	0	23	0	0	0	0	0	0	0
45	0	0	0	0	15	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle E.1: J_{\max} für die elektronischen Niveaus $N_2 A^3\Sigma$, $N_2 B^3\Pi$ und $N_2 C^3\Pi$.

v	$J_{\max} N_2^+ X^2\Sigma$				$J_{\max} N_2^+ B^2\Sigma$			
	Konstante von Laux		Konstanten von Park		Konstante von Laux		Konstanten von Park	
	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse
0	225	225	225	225	225	191	222	191
1	225	225	225	225	225	180	209	180
2	225	225	225	225	215	171	199	171
3	225	222	225	222	206	164	190	164
4	223	216	223	216	197	157	182	157
5	217	210	217	210	189	150	174	150
6	211	205	211	205	182	144	167	143
7	206	200	205	200	175	138	160	137
8	200	195	200	195	168	131	153	131
9	195	190	195	190	161	126	146	125
10	190	185	190	185	154	120	139	119
11	186	181	185	181	148	114	132	113
12	181	177	181	176	142	108	126	107
13	176	172	176	172	135	102	119	101
14	172	168	171	168	129	96	112	95
15	167	164	167	163	123	91	106	89
16	163	159	163	159	116	85	99	83
17	159	155	158	155	110	79	92	77
18	155	151	154	150	104	72	85	70
19	151	147	150	146	98	66	78	63
20	147	143	146	142	91	59	71	56
21	143	139	142	138	85	51	63	47
22	139	135	137	133	78	42	54	38
23	135	131	133	129	72	32	44	25
24	131	127	129	125	64	17	33	0
25	128	123	125	121	57	0	15	0
26	124	119	121	117	48	0	0	0
27	120	116	117	112	39	0	0	0
28	117	112	113	108	27	0	0	0
29	113	108	109	104	6	0	0	0
30	109	104	104	99	0	0	0	0
31	105	100	100	95	0	0	0	0
32	102	96	96	91	0	0	0	0
33	98	92	92	86	0	0	0	0
34	94	88	88	81	0	0	0	0
35	89	83	83	77	0	0	0	0
36	85	78	79	72	0	0	0	0
37	80	73	74	67	0	0	0	0
38	74	67	70	62	0	0	0	0
39	67	60	65	57	0	0	0	0
40	60	51	60	51	0	0	0	0
41	50	38	55	45	0	0	0	0
42	35	17	50	38	0	0	0	0
43	0	0	44	31	0	0	0	0
44	0	0	37	21	0	0	0	0
45	0	0	30	0	0	0	0	0
46	0	0	21	0	0	0	0	0
47	0	0	5	0	0	0	0	0
48	0	0	0	0	0	0	0	0
49	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle E.2: J_{\max} für die elektronischen Niveaus $N_2^+ X^2\Sigma$ und $N_2^+ B^2\Sigma$

	$J_{\max} O_2 X^3\Sigma$				$J_{\max} O_2 B^3\Sigma$			
v	Konstante von Laux		Konstanten von Park		Konstante von Laux		Konstanten von Park	
v	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse
0	225	217	225	217	163	126	163	127
1	216	208	215	208	151	115	150	116
2	208	200	206	200	140	106	140	107
3	200	193	199	193	131	97	131	98
4	194	187	193	187	123	89	123	89
5	187	181	186	181	115	80	115	80
6	181	176	180	176	107	71	107	71
7	176	170	175	170	100	61	100	61
8	170	165	169	165	93	51	92	50
9	165	160	164	160	87	40	85	37
10	159	155	159	155	80	26	77	18
11	154	150	154	150	74	0	70	0
12	149	145	149	145	69	0	61	0
13	144	140	144	140	63	0	53	0
14	139	135	139	135	59	0	43	0
15	134	129	134	130	54	0	32	0
16	129	124	129	125	51	0	16	0
17	124	119	124	120	48	0	0	0
18	119	114	119	115	45	0	0	0
19	114	109	114	109	42	0	0	0
20	109	103	109	104	39	0	0	0
21	104	98	104	99	34	0	0	0
22	98	92	99	94	23	0	0	0
23	93	87	93	88	0	0	0	0
24	87	81	88	82	0	0	0	0
25	82	75	82	76	0	0	0	0
26	76	68	76	70	0	0	0	0
27	70	61	70	63	0	0	0	0
28	63	54	64	56	0	0	0	0
29	56	46	57	48	0	0	0	0
30	49	37	50	40	0	0	0	0
31	40	25	41	29	0	0	0	0
32	30	0	31	10	0	0	0	0
33	16	0	16	0	0	0	0	0
34	0	0	0	0	0	0	0	0
35	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle E.3: Maximale Rotationsquantenzahlen für die elektronischen Niveaus $O_2 X^3\Sigma$ und $O_2 X^3\Sigma$.

V	J_{\max} NO $X^2\Pi$		J_{\max} NO $A^2\Sigma$		J_{\max} NO $B^2\Pi$		J_{\max} NO $C^2\Pi$		J_{\max} NO $D^2\Sigma$	
	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Mor-	H.-H.	Morse
0	225	225	199	140	200	199	209	151	183	127
1	225	216	182	126	191	190	193	138	166	112
2	221	208	169	114	184	182	180	127	151	100
3	213	202	156	103	177	174	169	117	138	88
4	206	195	144	92	170	168	158	107	125	75
5	200	190	132	81	163	161	147	98	112	63
6	194	184	120	69	157	155	137	88	99	49
7	188	179	108	57	151	148	126	78	86	31
8	182	174	96	42	144	142	115	67	71	0
9	177	169	83	21	138	136	105	55	54	0
10	171	164	68	0	132	130	93	41	30	0
11	166	159	50	0	126	124	81	21	0	0
12	161	154	23	0	120	117	68	0	0	0
13	156	149	0	0	114	111	51	0	0	0
14	151	145	0	0	108	105	28	0	0	0
15	146	140	0	0	102	99	0	0	0	0
16	141	135	0	0	95	92	0	0	0	0
17	137	130	0	0	89	85	0	0	0	0
18	132	126	0	0	82	78	0	0	0	0
19	127	121	0	0	75	71	0	0	0	0
20	122	116	0	0	67	63	0	0	0	0
21	118	111	0	0	59	54	0	0	0	0
22	113	106	0	0	50	45	0	0	0	0
23	108	101	0	0	40	33	0	0	0	0
24	104	96	0	0	27	15	0	0	0	0
25	99	91	0	0	0	0	0	0	0	0
26	94	86	0	0	0	0	0	0	0	0
27	89	81	0	0	0	0	0	0	0	0
28	84	76	0	0	0	0	0	0	0	0
29	80	70	0	0	0	0	0	0	0	0
30	75	65	0	0	0	0	0	0	0	0
31	70	59	0	0	0	0	0	0	0	0
32	65	53	0	0	0	0	0	0	0	0
33	59	46	0	0	0	0	0	0	0	0
34	54	40	0	0	0	0	0	0	0	0
35	48	32	0	0	0	0	0	0	0	0
36	43	24	0	0	0	0	0	0	0	0
37	37	11	0	0	0	0	0	0	0	0
38	32	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	26	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0
42	13	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle E.4: J_{\max} berechnet mit den Konstanten von Laux für die elektronischen Niveaus $NO X^2\Pi$, $NO A^2\Sigma$, $NO B^2\Pi$, $NO C^2\Pi$ und $NO D^2\Sigma$.

V	J_{\max} NO $X^2\Pi$		J_{\max} NO $A^2\Sigma$		J_{\max} NO $B^2\Pi$		J_{\max} NO $C^2\Pi$		J_{\max} NO $D^2\Sigma$	
	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Morse	H.-H.	Mor-	H.-H.	Morse
0	225	225	157	158	200	195	194	135	131	132
1	225	216	144	145	191	186	177	121	117	118
2	219	208	134	134	183	178	163	108	105	106
3	212	202	124	125	176	171	150	97	94	94
4	205	195	115	116	169	164	137	85	83	83
5	199	190	106	107	163	158	125	73	72	72
6	193	184	97	97	157	151	113	61	60	60
7	187	179	88	88	150	145	100	46	46	46
8	181	174	79	79	144	139	86	26	28	28
9	176	169	68	68	138	133	71	0	0	0
10	170	164	57	57	133	127	54	0	0	0
11	165	159	45	45	127	121	27	0	0	0
12	160	154	28	28	121	115	0	0	0	0
13	155	149	0	0	115	109	0	0	0	0
14	150	145	0	0	109	102	0	0	0	0
15	145	140	0	0	103	96	0	0	0	0
16	141	135	0	0	96	89	0	0	0	0
17	136	130	0	0	90	83	0	0	0	0
18	131	126	0	0	84	76	0	0	0	0
19	126	121	0	0	77	68	0	0	0	0
20	122	116	0	0	70	60	0	0	0	0
21	117	111	0	0	62	51	0	0	0	0
22	112	106	0	0	53	41	0	0	0	0
23	107	101	0	0	44	27	0	0	0	0
24	103	96	0	0	32	0	0	0	0	0
25	98	91	0	0	13	0	0	0	0	0
26	93	86	0	0	0	0	0	0	0	0
27	88	80	0	0	0	0	0	0	0	0
28	82	74	0	0	0	0	0	0	0	0
29	77	69	0	0	0	0	0	0	0	0
30	71	62	0	0	0	0	0	0	0	0
31	66	55	0	0	0	0	0	0	0	0
32	59	48	0	0	0	0	0	0	0	0
33	53	40	0	0	0	0	0	0	0	0
34	45	30	0	0	0	0	0	0	0	0
35	37	15	0	0	0	0	0	0	0	0
36	27	0	0	0	0	0	0	0	0	0
37	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0
38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle E.5: J_{\max} berechnet mit den Konstanten von Park für die elektronischen Niveaus $NO X^2\Pi$, $NO A^2\Sigma$, $NO B^2\Pi$, $NO C^2\Pi$ und $NO D^2\Sigma$.

Lebenslauf

Michael Winter , geboren am 24. April 1965 in Köln

Eltern: Veramaria und Wolfgang Winter, Siegen

Geschwister: Rüdiger Winter

Nationalität: deutsch

Familienstand: ledig

Ausbildung und Berufserfahrung:

1972-1975 Besuch der Grundschule in Euskirchen

1975-1976 Gymnasium in Euskirchen

1976-1984 Gymnasium am Löhrtor in Siegen

1984-1985 Studium der Fachrichtung Maschinenbau an der Universität-Gesamthochschule Siegen

1985 Beginn des Studiums der Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart

1991 Studienarbeit am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart mit dem Thema *Absorptionsspektroskopische Untersuchung eines Plasmastrahls zur Simulation des Wiedereintritts.*

1992-1993 Diplomarbeit an der DLR Stuttgart auf dem Bereich der Solarenergie mit dem Thema *Untersuchungen zur Receiver-Auslegung für einen Fix-Focus-Konzentrator.*

1992 Dreimonatige Arbeit als Ferienbeschäftigter im Bereich Thermo- und Aerodynamik bei Daimler Benz AG, Werk Untertürkheim. Arbeiten vor allem im Rahmen von Untersuchungen zum Zündverzöger bei monodispersen Dieseltröpfchen.

seit 1993 Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter im Bereich optische Plasmadiagnostik und Triebwerksentwicklung und -test am Institut für Raumfahrtsysteme (IRS) der Universität Stuttgart.

seit Nov. 2005 Stellvertretender Laborleiter für die Abteilung Raumtransporttechnologie am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart.

Lehrfähigkeit:

Mitarbeit an den Vorlesungen: *Messverfahren für strömende Plasmen*
Unkonventionelle Raumfahrtantriebe, Teilgebiet Sonnensegel.

Mitbetreuung von bisher 21 Studien- und 8 Diplomarbeiten.

Vorlesung *Messtechnik und Qualitätssicherung* für die Hamburger Fernfachhochschule.

Mitarbeit an Projekten:

- Experimentelle Arbeiten im Projekt *Numerische Simulation von MPD-Triebwerken und Vergleich mit experimentellen Untersuchungen* gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG,
- Optische Diagnostik im Kooperationsvorhaben *Vergleich eines Megnatoplasmadynamischen und eines thermischen Plasmawindkanals als Werkzeug zur Untersuchung von Hitzeschutzmaterialien für Raumtransportsysteme* mit der Nationalen Raumfahrtagentur von Japan (NASDA),
- Emissionsspektroskopische Untersuchungen im Rahmen des Sonderforschungsbereichs SFB 259 *Hochtemperaturprobleme von rückkehrfähigen Raumtransportsystemen* gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG,
- Modellierung der Molekülstrahlung in PARADE (Programmerweiterung im Auftrag der ESA),
- Arbeitspaket *Berührungslose Diagnostik* in der ESA-Studie *Requirements for Electric Propulsion Applications*,
- Technische Projektleitung *Plasmadiagnostik an Ionentriebwerken*, Förderprojekt des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt DLR in Kooperation mit EADS-ST,
- Technische Projektleitung *Shock-layer chemistry – RESPECT (IRS)*, Wiedereintrittsexperiment auf der europäischen Wiedereintrittskapsel EXPERT der ESA.
- Emissionsspektroskopische Beobachtung des Wiedereintritts der *Stardust* Kapsel auf einer Beobachtungsmission der NASA.