

D. Wunderlich, U. Fantz

**Anwendung und Erweiterung eines
Stoß-Strahlungsmodells für H₂ und H**

**A Collisional-Radiative Model for H₂ and H:
Extensions and Applications**

IPP 10/18

September 2001

Anwendung und Erweiterung eines
Stoß–Strahlungsmodells für H_2 und H

A Collisional-Radiative Model for H_2 and H :
Extensions and Applications

D. Wunderlich, U. Fantz

Dieser Report basiert auf einer Diplomarbeit von
D. Wunderlich,
Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik,
Universität Augsburg, November 2000

This report represents a diploma thesis of
D. Wunderlich,
Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik,
Universität Augsburg, November 2000

Abstract

Hydrogen molecules are often present in low-pressure, low-temperature plasmas which are typically used for plasma processing. Furthermore, molecules can occur in the plasma edge of fusion experiments, in particular in the divertor where the electron temperature is in the range of a few eV. For understanding kinetic processes where molecules are involved, diagnostic methods are required which are supported by equilibrium models. Since these plasmas are typically non-equilibrium plasmas, collisional-radiative models are applied, which describe the population and ionization balance in the range between the corona model (low electron density) and the Boltzmann-Saha equilibrium (LTE, high electron density, collision dominated regime).

The report is based on an already existing collisional-radiative model for H_2 and H . The underlying model is introduced and the limits of the models are discussed. It is shown that the quality of the results strongly correlates with the quality of the data implied in the model. Possible improvements and extensions of the model are suggested whereas some of the improvements, i.e. changes in transmission probabilities, are carried out and tested. Other suggestions are postponed due to the lack of data to a later time.

In a next step, systematic investigations on the equilibrium population of atomic and molecular levels are carried out. Population and depopulation processes are studied and their dependence on electron temperature and electron density is shown. The population of the electronic excited levels of the molecule is connected with molecular ground state, atomic hydrogen and the various hydrogen ions. Therefore, the composition of the ion species in representative laboratory plasmas is calculated by a simplified particle balance. In the case of populations of excited atomic levels the influence of self-absorption of Lyman lines on the emission of Balmer lines is shown.

The dependencies of level populations on plasma parameters are then used for diagnostic purposes. Applications are given for laboratory plasmas as well as for divertor plasmas. In the first case, the molecular and atomic radiation is used to determine particle densities in the plasmas. In the latter case, molecular particle fluxes are determined by the measurement of molecular radiation. For this purpose, the effective ionization and dissociation processes per emitted photon is calculated by the collisional-radiative model, taking into account the vibrational population in the ground state of the molecule. The line ratio of Balmer lines is used either to determine the degree of dissociation or the electron density of the plasma.

The last section of the report focuses on the vibrational population of the molecular electronic ground state. A remarkable vibrational population offers new reaction paths which lead to the formation of negative ions (important to know in plasma processing) and can influence the energy balance (important for the recycling regime of divertors). In order to predict vibrational populations, the original collisional–radiative model is modified by implementing new reaction channels. Since in divertor plasmas isotopes occur, a comparison of hydrogen and deuterium is carried out. For this purpose the model for the vibrational population is transferred from hydrogen to deuterium. The input data for all reactions are critically reviewed and the importance of data needs for vibrationally resolved cross sections is emphasized. A data base is preferred which is based on the same data source for the isotopes, so that in some cases not the best available cross sections are implemented in the current version of the collisional–radiative model, but the effect of the isotopes can be separated from the effect of different data sources. Examples for applications are shown, i.e. results are given for hydrogen and deuterium plasmas for electron temperature diagnostics in divertors using the molecular radiation, in particular the vibrational population in the excited electronic state.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Theorie zu Stoß–Strahlungsmodellen	9
2.1	Gleichgewichte	9
2.1.1	Thermodynamisches Gleichgewicht	10
2.1.2	Koronagleichgewicht	12
2.1.3	Stoß–Strahlungsmodelle	14
2.2	Das verwendete Stoß–Strahlungsmodell	14
2.3	Ratengleichungen und Populationskoeffizienten	18
2.4	Auftretende Probleme	22
2.4.1	Zustände mit höherer Hauptquantenzahl	22
2.4.2	Vibrationsniveaus	24
3	Besetzung der elektronischen Niveaus von H_2 und H	27
3.1	Die untersuchten Plasmen	27
3.2	Zustandekommen eines Besetzungsgleichgewichts	28
3.2.1	Anregung eines Zustands	28
3.2.2	Abregung eines Zustands	29
3.2.3	Ergebnisse der Rechnungen	30
3.3	Effektive Ratenkoeffizienten	37
3.3.1	Motivation	37
3.3.2	Abhängigkeiten	38
3.3.3	Ratenkoeffizienten für Molekülübergänge	39
3.3.4	Diagnostik für Niederdruckplasmen	45
3.3.5	Diagnostik für Divertorplasmen	47
3.4	Untersuchungen am atomaren Wasserstoff	51
3.4.1	Spektrallinien des Wasserstoffatoms	51
3.4.2	Zusammensetzung der Strahlung	51
3.4.3	Einbeziehung der optischen Dicke	55
3.4.4	Effektive Ratenkoeffizienten	58
3.4.5	Linienverhältnisse der Balmer–Linien	59
4	Vibrationsbesetzung im Grundzustand	65
4.1	Umbesetzung durch Elektronenstoß	67
4.1.1	Beschreibung des Prozesses	67

4.1.2	Erweiterung für D_2	68
4.2	Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$	70
4.2.1	Beschreibung des Prozesses	70
4.2.2	Erweiterung für D_2	72
4.3	Dissoziative Anlagerung	73
4.3.1	Beschreibung des Prozesses	73
4.3.2	Erweiterung für D_2	74
4.4	Ladungsaustausch	76
4.4.1	Beschreibung des Prozesses	76
4.5	Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$	79
4.5.1	Beschreibung des Prozesses	79
4.5.2	Erweiterung für D_2	80
4.6	Schwerteilchenstöße	84
4.6.1	Beschreibung des Prozesses	84
4.7	Stöße mit der Wand	84
4.7.1	Beschreibung des Prozesses	84
4.8	Ergebnisse der Rechnungen	86
4.9	Diagnostik am Divertor von ASDEX Upgrade	90
5	Zusammenfassung	95
A	Stoß-Strahlungsmodell für Windows 95/98	99
B	Quellen der Ratenkoeffizienten	101
B.1	Wasserstoffatom	101
B.2	Wasserstoffmolekül	102
B.3	Wasserstoffionen	104

Kapitel 1

Einleitung

Zur Charakterisierung eines Plasmas ist eine genaue Kenntnis der Plasmaparameter wie beispielsweise der Temperaturen und Dichten aller im Plasma befindlichen Teilchensorten wichtig. Diese Parameter werden typischerweise durch verschiedene Diagnostiken bestimmt, die mehr oder weniger stark von der Kenntnis anderer Plasmaparameter abhängen. So läßt sich die Elektronendichte n_e vergleichsweise unabhängig durch eine Langmuir-Sondenmessung bestimmen, geht aber selber als notwendiger Parameter in die Auswertung einer spektroskopischen Untersuchung ein. Die zur Bestimmung unbekannter Plasmaparameter aus bekannten Werten verwendeten Zusammenhänge zwischen den Parametern resultieren aus zu dem jeweiligen Plasma passenden Gleichgewichtsbedingungen. Ein Plasma kann sich beispielsweise im Koronagleichgewicht oder im Saha-Boltzmann-Gleichgewicht befinden.

Stoß-Strahlungsmodelle wurden ursprünglich dazu entwickelt, um den Gleichgewichtszustand von Plasmen zu charakterisieren, deren Elektronendichte zu hoch ist, um die Anwendung des Koronagleichgewichtes zu rechtfertigen, aber nicht hoch genug ist zur Verwendung des Saha-Boltzmann-Gleichgewichtes. In diesem Elektronendichtebereich befinden sich typischerweise Niederdruckplasmen, aber auch die Randschichtplasmen von Fusionsexperimenten. Mit dem Stoß-Strahlungsmodell lassen sich Besetzungsdichten im Gleichgewichtszustand berechnen. Diese lassen sich z.B. zur Interpretation von spektroskopisch aufgenommener Strahlung einsetzen und dienen so zur Plasmadiagnostik.

Wasserstoff ist in fast allen technischen Plasmen, wie beispielsweise bei Plasmen für Schichtabscheidungen oder Ätzvorgänge, aber auch in dem Plasma von Fusionsreaktoren vorhanden. Dabei ist in den technischen Plasmen der Wasserstoff nicht vollständig dissoziiert. Im kalten Randschichtplasma von Fusionsreaktoren sind ebenfalls Moleküle vorhanden, insbesondere im Divertorbereich. Folglich muß ein für diese Plasmen geeignetes Stoß-Strahlungsmodell sowohl Atome und Moleküle, als auch die koppelnden Prozesse zwischen beiden betrachten.

In der vorliegenden Arbeit wird ein vorhandenes, in [Saw95] vorgestelltes, Stoß-Strahlungsmodell für H_2 und H untersucht. An diesem Modell sind bereits die in [Gre96] beschriebenen Modifikationen vorgenommen worden. Bei der Untersuchung des Stoß-Strahlungsmodells werden Abhängigkeiten von der Elektronen-

temperatur, der Elektronendichte, dem Dissoziationsgrad und anderen Plasma-parametern aufgezeigt. Außerdem wird das Stoß-Strahlungsmodell um wichtige Prozesse erweitert. Beispielsweise wird die physikalisch wichtige Berücksichtigung der optischen Dicke der Lyman-Linien des Wasserstoffatoms hinzugefügt.

Ein Schwerpunkt der Arbeit ist die Erweiterung des Stoß-Strahlungsmodells vom Wasserstoffmolekül auf das nächstschwerere Isotop Deuterium. Da das Wasserstoffmolekül aus zwei identischen Atomen besteht, kann im Rahmen dieser Erweiterung die Modellierung der elektronischen Niveaus und der Prozesse zwischen diesen unverändert bleiben. Es ist allerdings eine Anpassung der Vibrationsniveaus und aller Prozesse, die diese Niveaus betreffen, notwendig. Das erweiterte Stoß-Strahlungsmodell soll zur Diagnostik an einem Niederdruckplasma und dem Divertorplasma von ASDEX Upgrade angewendet werden.

Kapitel 2

Theorie zu Stoß–Strahlungsmodellen

2.1 Gleichgewichte

Zur Beschreibung der in einem Plasma stattfindenden Prozesse werden verschiedene Modelle verwendet:

Das Flüssigkeitsmodell eignet sich zur Beschreibung von Strömungsvorgängen im Plasma. Dieses Modell behandelt identische Teilchen als eine inkompressible Flüssigkeit. Unterschiedliche Teilchen mit identischen Eigenschaften werden gegebenenfalls zu einer Flüssigkeit zusammengefasst. Die Betrachtung als Flüssigkeit ermöglicht die Aufstellung einfacher Gleichungen zur Beschreibung der im Plasma stattfindenden Strömungen. Einfachstes Beispiel für eine dieser Gleichungen ist die Kontinuitätsgleichung.

Das Teilchenmodell eignet sich dazu, Besetzungsdichten der im Plasma vorhandenen Teilchensorten zu bestimmen. Die betreffenden Teilchen sind Atome, Moleküle, Elektronen und Ionen. Es treten verschiedene Ionisationsstufen auf, die miteinander wechselwirken. Atome, Moleküle und Ionen besitzen mehrere elektronische Anregungsstufen, die ebenfalls miteinander wechselwirken.

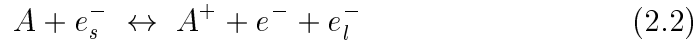
Im Rahmen dieser Arbeit sind im Plasma stattfindende Strömungen nicht relevant. Stattdessen sollen Besetzungsdichten bestimmt werden und daher wird das Teilchenmodell verwendet. Im folgenden werden die verschiedenen anregenden und abregenden Prozesse, die zwischen den Teilchen des Plasmas stattfinden, vorgestellt:

- Bei Elektronenstoßanregung trifft ein schnelles Elektron auf ein Teilchen und überträgt einen Teil seiner kinetischen Energie auf dieses. Das Teilchen wird dadurch auf ein höheres Energieniveau angehoben:



Der Umkehrprozess der Elektronenstoßanregung wird als Stoß zweiter Art bezeichnet.

- Trifft ein schnelles Elektron auf ein Teilchen und überträgt soviel kinetische Energie auf dieses, daß ein Elektron vollständig von dem Teilchen entfernt wird, so spricht man von Elektronenstoßionisation:



Der Umkehrprozess heißt Dreierstoßrekombination.

- Ein Lichtquant kann auf ein Teilchen treffen und seine Energie an dieses abgeben. Wenn sich das Teilchen danach in einem angeregten Zustand befindet, wird dieser Prozess als Absorption bezeichnet:



Der Umkehrprozess heißt spontane Emission.

- Entfernt ein auf ein Teilchen treffendes Lichtquant ein Elektron des Teilchens vollständig von diesem, so spricht man von Photoionisation:



Der Umkehrprozess der Photoionisation ist die Strahlungsrekombination.

In Abhängigkeit davon, welche dieser Prozesse mit der jeweiligen Umkehrreaktion im Gleichgewicht stehen, verändert sich die Vorgehensweise bei der Bestimmung des Besetzungsgleichgewichts. Dabei werden die beiden Grenzfälle durch das thermodynamische Gleichgewicht und das Koronagleichgewicht beschrieben.

2.1.1 Thermodynamisches Gleichgewicht

Ein Plasma ist dann im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht, wenn jeder der vier Prozesse (2.1) bis (2.4) mit seinem Umkehrprozess im Gleichgewicht steht. Zwischen allen im Plasma vorhandenen Teilchen ist ein vollständiger Energieaustausch gegeben, so daß sich eine für alle Teilchen einheitliche Temperatur T einstellt. Für die Geschwindigkeiten dieser Teilchen gilt dann die Maxwellverteilung:

$$\frac{dN}{N} = \frac{4v^2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (2.5)$$

Dabei ist dN/N der Anteil der Teilchen, deren Geschwindigkeit zwischen v und $v + dv$ liegt, m ist die Masse eines Teilchens und k die Boltzmann-Konstante. Die Besetzung der Niveaus eines Atoms bzw. Moleküls wird durch die Boltzmann-Gleichung beschrieben:

$$\frac{n_i}{n_f} = \frac{g_i}{g_f} \exp\left(-\frac{E_i - E_f}{kT}\right) \quad (2.6)$$

n_i bzw. n_f sind die Besetzungsdichten der jeweiligen Niveaus, g_i bzw. g_f die zugehörigen statistischen Gewichte und E_i bzw. E_f die Energien.

In einem Plasma liegen meist verschiedene Ionisationsstufen vor. Die Summe all dieser Ionisationsstufen entspricht der Anzahl der Elektronen, da im Plasma Quasineutralität herrscht. Will man aus Gleichung (2.6) eine Verteilungsfunktion für die verschiedenen Ionisationsstufen erhalten, so reicht es nicht, nur die statistischen Gewichte g_Z der Z -fach ionisierten Ionen zu berücksichtigen. Es müssen auch die statistischen Gewichte der freien Elektronen in die Rechnung einbezogen werden. Da Elektronen Fermionen sind, benötigen sie im Impulsraum ein Volumen von mindestens $h^3/2$. Aus der thermischen Energie ergibt sich ein tatsächliches Volumen von $(2\pi m_e kT)^{3/2}$. Unter Berücksichtigung der dieser Entartung entsprechenden statistischen Gewichte der Elektronen ergibt sich aus Gleichung (2.6) die sogenannte Sahagleichung:

$$n_e \frac{n_{Z+1}}{n_Z} = 2 \cdot \frac{Q_{Z+1}}{Q_Z} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_{ion.}}{kT}\right) \quad (2.7)$$

Dabei ist n_e die Elektronendichte, m_e die Masse eines Elektrons, h die Plancksche Konstante und $E_{ion.}$ die Energie, die aufgebracht werden muß, um den Z -fach ionisierten Zustand noch einmal zu ionisieren. Es werden nicht die Ionisationsstufen eines einzelnen elektronisch angeregten Zustands i , sondern die des gesamten Atoms bzw. Moleküls betrachtet. Aus diesem Grund werden statt statistischen Gewichten g Zustandssummen verwendet. Q_{Z+1} und Q_Z sind die Zustandssummen der Ionen, $\frac{2 \cdot (2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3}$ ist die Zustandssumme der Elektronen.

Ein sich im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht befindendes Plasma strahlt aufgrund seiner Temperatur eine Leistung pro Fläche ab, die nach dem Stefan–Boltzmann–Gesetz zur Größe der strahlenden Fläche und der 4. Potenz der Plasmatemperatur T proportional ist:

$$P_s = \sigma T^4 \quad (2.8)$$

Außerdem gilt die Planck–Formel für Schwarzkörperstrahlung und die Strahldichte ergibt sich zu:

$$L_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (2.9)$$

Dabei ist ν die Frequenz der Strahlung und c die Lichtgeschwindigkeit. Die Strahldichte gibt an, welche Leistung pro Fläche, Frequenz und Raumwinkel abgestrahlt wird.

Maxwellverteilung, Boltzmann-Gleichung, Sahagleichung, Stefan–Boltzmann–Gesetz und Planck–Formel gemeinsam gelten nur für sehr hohe Elektronendichten ($n_e \gtrsim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) und das wird in realen, irdischen¹, Plasmen selten erreicht. Um diese Plasmen zu beschreiben, wurden verschiedene Einschränkungen des totalen thermodynamischen Gleichgewichts definiert. Diese sind:

- Lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTG): Dieses Modell beschreibt lokale Bereiche eines Plasmas, in dem Temperatur- bzw. Dichtegradienten

¹Diese Einschränkung ist wichtig, denn die Fusionszone im Inneren von Sternen befindet sich im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht.

auftreten. Da Photonen eine relativ große freie Weglänge haben, kann sich kein Strahlungsgleichgewicht einstellen. Die Elektronenstoßprozesse (2.1) und (2.2) dagegen stehen noch im Gleichgewicht mit ihrem jeweiligen Umkehrprozess, das heißt, das Plasma ist stoßdominiert. Als Konsequenz sind die Maxwellverteilung, die Boltzmann-Gleichung und die Sahagleichung gültig, nicht jedoch das Stefan-Boltzmann-Gesetz und die Planck-Formel. Es ergibt sich keine für alle Teilchen einheitliche Temperatur T , sondern eine Neutralteilchentemperatur T_n , eine Elektronentemperatur T_e und eine Ionentemperatur T_i . Es gilt: $T_n \leq T_e = T_i$

- Partielles lokales thermodynamisches Gleichgewicht (PLTG): Mit abnehmender Elektronendichte wird sich das LTG ab einem bestimmten elektronischen Niveau n_p eines Teilchens einstellen. Die aus der Boltzmann-Gleichung und der Sahagleichung resultierenden Verteilungen sind ohne Korrektur auch nur noch ab diesem Niveau gültig. Um dieses mit den energetisch niedriger liegenden Niveaus in Verbindung zu bringen, werden sogenannte Unterbesetzungsfaktoren eingeführt.

Die genannten Einschränkungen des vollständigen thermodynamischen Gleichgewichts gelten somit für Plasmen, in denen zumindest ein Stoßgleichgewicht erfüllt ist, welches durch eine gewisse hohe Elektronendichte gegeben ist. Der andere Grenzfall, d.h. das Gleichgewicht für sehr niedrige Elektronendichten, soll im folgenden Abschnitt vorgestellt werden.

2.1.2 Koronagleichgewicht

Das Koronagleichgewicht wird zur Beschreibung von Plasmen verwendet, bei denen die Elektronendichte so gering ist ($n_e \lesssim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$), daß die beiden Elektronenstoßprozesse (2.1) und (2.2) nicht mehr im Gleichgewicht mit ihren jeweiligen Umkehrreaktionen stehen. Es dominiert die Hinreaktion über die immer unwahrscheinlicher werdende Rückreaktion. Zusätzlich gilt, wie beim lokalen thermodynamischen Gleichgewicht, daß die beiden Strahlungsprozesse (2.3) und (2.4) nicht im Gleichgewicht mit ihren Umkehrreaktionen stehen. Beim Koronamodell dominiert, analog zum lokalen thermodynamischen Gleichgewicht, die jeweilige Rückreaktion. Dies ermöglicht, im Koronamodell Elektronenstoßanregung mit spontaner Emission zum Besetzungsgleichgewicht bzw. Elektronenstoßionisation mit Strahlungsrekombination zum Ionisationsgleichgewicht zu bilanzieren.

Im einfachsten Korona-Besetzungsgleichgewicht ist der einzige anregende Prozess die Elektronenstoßanregung vom Grundzustand aus, bilanziert mit dem einzigen abregenden Prozeß, der spontanen Emission. Von angeregten Zuständen ausgehende Elektronenstoßanregung wird vernachlässigt, da diese Zustände nur schwach besetzt sind. Somit kann man für An- und Abregung des Niveaus i folgende Bilanzgleichung aufstellen:

$$n_0 n_e X_{0i}(T_e) = n_i \sum_{f < i} A_{if} \quad (2.10)$$

Dabei ist n_e die Elektronendichte, T_e die Elektronentemperatur, n_0 die Besetzung im Grundzustand, n_i die Besetzung des oberen Niveaus, A_{if} die Übergangswahrscheinlichkeit für die spontane Emission und X_{0i} der Anregungskoeffizient für die Elektronenstoßanregung. Spontane Emission ist für alle erlaubten Übergänge in die entsprechenden, unterhalb von i liegenden Niveaus, möglich. Den Anregungskoeffizienten erhält man als Integral über das Produkt aus dem Wirkungsquerschnitt für elektronische Anregung $\sigma_{0i}(E)$ und der Elektronenenergieverteilungsfunktion $f(E)$:

$$X_{0i}(T_e) = \int_{E_{Schw.}}^{\infty} \sigma_{0i}(E) \sqrt{\frac{2E}{m_e}} f(E) dE \quad (2.11)$$

Es ist $E_{Schw.}$ die Schwellenergie, ab der die Anregung aus den Grundzustand 0 nach i möglich ist. Die Elektronenenergieverteilungsfunktion wird häufig als Maxwellverteilung angenommen, was aber für jedes Plasma geprüft werden sollte. Führt man die Emissivität \dot{N} einer Linie als Anzahl der Übergänge pro Zeiteinheit und Volumen ein so gilt:

$$\dot{N}_{ik} = n_i A_{ik} \quad (2.12)$$

Dabei ist k der untere Zustand der zu der Linie gehörenden Emissionsübergangs. Nun läßt sich Gleichung (2.10) umformen zu:

$$\dot{N}_{ik} = n_0 n_e X_{0i}(T_e) \frac{A_{ik}}{\sum_f A_{if}} \quad (2.13)$$

Der Quotient von A_{ik} zu $\sum_f A_{if}$ wird als Verzweungsverhältnis bezeichnet. Das Verzweungsverhältnis gibt an, welcher Bruchteil der von allen erlaubten Übergängen, die vom oberen Niveau i ausgehen, emittierten Strahlung, aus dem betrachteten Übergang $i \rightarrow k$ resultiert.

Das Produkt von Verzweungsverhältnis und Anregungskoeffizient X_{0i} läßt sich zu einem Emissionsratenkoeffizienten $X_{em}(T_e)$ zusammenfassen:

$$\dot{N}_{ik} = n_0 n_e X_{em_{ik}}(T_e) \quad (2.14)$$

Das vereinfachte Koronamodell ist nur für sehr geringe Elektronendichten gültig. Es spielen auch andere Prozesse wie beispielsweise von energetisch oberhalb des Grundzustands liegenden Zuständen ausgehende Elektronenstoßanregung, Elektronenstoßabregung oder die Besetzung eines Niveaus von oben (Kaskadenprozesse) eine Rolle. Zusätzlich tritt strahlungslose Abregung durch Stöße mit schweren Teilchen (Quenching) auf. Zur Berücksichtigung dieser Prozesse läßt sich das vereinfachte Koronamodell erweitern. Als Beispiel soll hier eine Erweiterung zur Berücksichtigung von Quenching und Kaskadenprozessen gezeigt werden. Dabei erhält man durch Multiplikation der tatsächlichen Emissivität mit einem Faktor $\frac{Q}{K}$ eine effektive Emissivität \dot{N}_{eff} , die derjenigen Emissivität entspricht, die man nach dem vereinfachten Koronamodell ohne Quenching und Kaskadenprozesse erwartet:

$$\dot{N}_{eff} = \dot{N} \cdot \frac{Q}{K} \quad (2.15)$$

Dabei ist $Q > 1$ und $K > 1$, das heißt, die gemessene Emissivität wird gegenüber der effektiven durch Quenching verringert und durch Kaskadenprozesse erhöht. Die effektive Emissivität wird anstatt der tatsächlichen in die Gleichung (2.14) eingesetzt.

2.1.3 Stoß–Strahlungsmodelle

Die in den Kapiteln 2.1.1 und 2.1.2 vorgestellten Gleichgewichtsmodelle stellen also Grenzfälle dar. Das Übergangsgebiet zwischen dem Koronagleichgewicht und dem lokalen thermodynamischen Gleichgewicht wird durch Stoß–Strahlungsmodelle erfaßt. In Erweiterung zum Koronamodell setzt ein Stoß–Strahlungsmodell² nicht nur zwei Prozesse in ein Gleichgewicht, sondern im Idealfall alle in Kapitel 2.1 beschriebenen. Somit besteht für ein SSM im Gegensatz zum Koronamodell nicht die Möglichkeit, An- und Abregung für ein Niveau separat zu betrachten. Stattdessen müssen miteinander gekoppelte Bilanzgleichungen für alle im untersuchten Atom bzw. Molekül und den entsprechenden Ionen vorkommenden Niveaus aufgestellt werden. Die Lösung dieser Bilanzgleichungen läßt sich schon für wenige betrachtete Niveaus nicht mehr auf triviale Weise ermitteln. Demzufolge sind SSM zumeist als Computerprogramm realisiert. Die ersten SSM liefen in den 60er–Jahren des 20. Jahrhunderts auf Großrechnern, heute ist die Leistung eines üblichen Desktop–Rechners ausreichend. Die größte Schwierigkeit beim Erstellen eines SSM liegt nicht mehr in der Bereitstellung ausreichender Rechnerleistung, sondern resultiert aus der Komplexität der benötigten Datenmenge: In ein SSM gehen idealerweise Wirkungsquerschnitte bzw. Ratenkoeffizienten für alle in Kapitel 2.1 beschriebenen Prozesse ein. Die Qualität der vom SSM gelieferten Ergebnisse hängt maßgeblich von der Qualität der eingehenden Ratenkoeffizienten ab. Die am meisten ausgereiften SSM existieren für leichte Atome, wie Wasserstoff oder Helium, da hier viele Arbeiten zu experimentell oder theoretisch gewonnenen Wirkungsquerschnitten bzw. Ratenkoeffizienten vorliegen. Sollen, wie im vorliegenden SSM, ein Atom und ein Molekül gleichzeitig untersucht werden, so ist zu beachten, daß ein Molekül aufgrund der Möglichkeit von Schwingungen und Rotation erheblich mehr Energieniveaus besitzt, als ein Atom. Dadurch wird die Modellierung erheblich erschwert, da sich mit der Anzahl der Niveaus auch die Anzahl der möglichen Prozesse, zu denen Wirkungsquerschnitte bzw. Ratenkoeffizienten benötigt werden, erhöht. Außerdem sind die beiden Teilchensorten durch Dissoziation und Rekombination aneinander gekoppelt, wodurch sich die Modellierung zusätzlich erschwert.

2.2 Das verwendete Stoß–Strahlungsmodell

Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete SSM modelliert das Wasserstoffmolekül H_2 und das Atom H . Beide Teilchensorten können durch Aufnahme von Energie

²Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird die Abkürzung SSM für den Begriff Stoß–Strahlungsmodell verwendet werden.

in angeregte Zustände überführt werden.

Beim Atom ist dies über elektronische Anregung möglich. Es gilt für die Gesamtenergie eines Wasserstoffatoms:

$$T_{el.} = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \quad (2.16)$$

R ist die Rydberg-Konstante für das Wasserstoffatom ($R = 109677.6 \text{ cm}^{-1}$) und n die Hauptquantenzahl des Zustandes, in dem sich das Atom befindet. Die durch Formel (2.16) gegebenen Energiezustände spalten sich durch den Einfluß des Elektronenbahndrehimpulses und Elektronenspins auf. Diese Aufspaltung ist jedoch beim Wasserstoffatom äußerst gering und wird im SSM nicht betrachtet. Ein zweiatomiges Molekül besitzt zusätzlich zu den elektronischen Zuständen die Möglichkeit, Energie in Form von Schwingungen und Rotationen aufzunehmen. Eine vereinfachte Methode zur Beschreibung des elektronischen Zustandes ist die Vereinte-Atome-Näherung, die die Zustände mit einer einzigen Hauptquantenzahl n charakterisiert. In der Realität findet man anstatt der durch n beschriebenen Niveaus eine Aufspaltung in mehrere Zustände, so daß zur vollständigen Beschreibung des elektronischen Zustandes noch weitere Quantenzahlen nötig sind. Aus den einzelnen Bahndrehimpulsen der äußeren Elektronen ergibt sich ein gesamter Elektronenbahndrehimpuls \mathbf{L} . Dieser präzediert um die Verbindungsachse der beiden Kerne. Projektion auf diese Achse gibt die Drehimpulsquantenzahl Λ . Für ein gegebenes \mathbf{L} gilt:

$$\Lambda = 0, 1, 2, \dots, L \quad (2.17)$$

Diese Zustände werden mit griechischen Buchstaben bezeichnet: $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$.

Aus der durchgeführten Projektion, die in positive oder negative Richtung auf der Kernverbindungsachse möglich ist, resultiert eine Entartung. Π, Δ, \dots -Zustände sind zweifach entartet, Σ -Zustände einfach.

Die Spins der äußeren Elektronen setzen sich zu einem Gesamtspin \mathbf{S} zusammen. Auch dieser präzediert um die Kernverbindungsachse und läßt sich auf diese projizieren. Man erhält die Elektronenspinquantenzahl Σ . Diese kann folgende Werte annehmen:

$$\Sigma = -S, -(S-1), \dots, S-1, S \quad (2.18)$$

Der Elektronenspin und der Bahndrehimpuls koppeln zu einem gesamten Elektronendrehimpuls mit der Quantenzahl Ω . Es gilt:

$$\Omega = |\Lambda + \Sigma| \quad (2.19)$$

Aus Formel (2.18) folgt nun, daß für einen festen Elektronenbahndrehimpuls $2S + 1$ verschiedene Werte für Ω möglich sind. Der durch den Bahndrehimpuls charakterisierte Zustand spaltet in mehrere Multiplett-Systeme auf.

Im speziellen Fall des Wasserstoffmoleküls sind zwei äußere Elektronen vorhanden. Der daraus resultierende Gesamtspin S kann 0 oder 1 betragen. Durch Koppelung an den Bahndrehimpuls entsteht daraus ein Singulett- und ein Triplett-System. Spinänderung bei optischen Übergängen ist verboten, somit ist ein Übergang von einem Multiplett-System in das andere nur durch Elektronenstoß möglich.

Eine verbreitete Methode, den resultierenden elektronischen Zustand zu charakterisieren, benennt den Grundzustand mit X . Die angeregten Zustände im Spinsystem des Grundzustandes werden, mit steigender Energie, als A, B, C, \dots bezeichnet. Den Zuständen in anderen Multiplett-Systemen werden kleine Buchstaben zugeordnet. Hinter den zum betreffenden Zustand passenden Buchstaben wird der den Bahndrehimpuls charakterisierende griechische Buchstabe geschrieben. An diesen werden folgende Indizes gesetzt: Links oben die Multiplizität des Zustandes, rechts oben die Parität der Wellenfunktion bei $\Lambda = 0$ (+ oder $-$) und rechts unten die Symmetrie der Wellenfunktion bei Vertauschung der Kerne (g oder u). Beispielsweise wird der elektronische Grundzustand im Wasserstoffmolekül folgendermaßen bezeichnet:

$$X^1\Sigma_g^+ \quad (2.20)$$

In einem Molekül gibt es bindende und antibindende elektronische Zustände. Jeder bindende Zustand spaltet in verschiedene Vibrationsniveaus auf. Bei zweiatomigen Molekülen reicht zur Beschreibung dieser Vibrationsniveaus eine Quantenzahl. Die Potentialkurve eines bindenden elektronischen Zustandes entspricht derjenigen eines anharmonischen Oszillators und somit ergibt sich für die Energie eines Vibrationsniveaus:

$$G(v) = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - x_e\omega_e(v + \frac{1}{2})^2 + y_e\omega_e(v + \frac{1}{2})^3 - \dots \quad (2.21)$$

Dabei sind ω_e , $x_e\omega_e$ und $y_e\omega_e$ molekülspezifische Größen. Sie werden als Molekülkonstanten bezeichnet. Die Vibrationsquantenzahl v kann ganze Zahlen annehmen, mit $v \geq 0$. Eine obere Schranke für die Vibrationsquantenzahl ist durch die Dissoziationsgrenze gegeben. Ein Molekül, welches über diese Grenze hinaus vibratorisch angeregt wird, dissoziiert in zwei Einzelteile. Da das Wasserstoffmolekül ein zweiatomiges Molekül ist, ergeben sich diese beiden Einzelteile zu zwei freien Wasserstoffatomen.

Durch die Rotation des Moleküls spaltet jedes Vibrationsniveau in verschiedene Rotationsniveaus auf. Bei Verwendung des Modells der unstarren Hantel gilt für diese Energiezustände:

$$F(J) = B_e J(J+1) - D_e (J(J+1))^2 + H_e (J(J+1))^3 \dots \quad (2.22)$$

Ähnlich wie in Gleichung (2.21) treten hier die für ein gegebenes Molekül charakteristischen Molekülkonstanten B_e , D_e und H_e auf. Die Rotationsquantenzahl J kann ganze Zahlen annehmen, mit $J \geq 0$.

Die Bewegung eines Moleküls ergibt sich im Allgemeinen aus einer Überlagerung von Schwingung und Rotation. Analog zum Atom lässt sich ein Molekül auch elektronisch anregen. Somit gilt für die Gesamtenergie:

$$T = T_{el.}(n) + G(v) + F(J) \quad (2.23)$$

Das verwendete SSM berücksichtigt je 40 elektronische Niveaus im Singulett-System und im Triplett-System des Wasserstoffmoleküls sowie 40 elektronische

Niveaus im Wasserstoffatom. Dazu gehören nicht die jeweiligen Grundzustände und die Ionisationsgrenze. Für das Atom wird die Feinstrukturaufspaltung nicht berücksichtigt. Für das Molekül sind nur die Zustände mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ nach den verschiedenen Werten von Λ aufgelöst. $n = 2$ spaltet in jedem Multipllett-System in drei Unterniveaus mit den Drehimpulsquantenzahlen Σ, Σ und Π auf. Für $n > 2$ werden die elektronischen Zustände nur nach ihrer Hauptquantenzahl unterschieden. Im Singulett-System sind zusätzlich zu den 40 elektronischen Niveaus die 14 angeregten Vibrationszustände ($v > 0$) des Grundzustandes berücksichtigt. Niveaufspaltung durch Rotation wird im SSM vernachlässigt.

Abbildung 2.1 zeigt schematisch einige der betrachteten Zustände. Der Zustand $b^3\Sigma_u^+$ ist ein antibindender elektronischer Zustand. Der Kernabstand r eines Moleküls in diesem Zustand wird solange zunehmen, bis die Potentialkurve auf eine Steigung von Null abgeflacht ist. Das Molekül dissoziiert und das Potential entspricht dem zweier einzelner Wasserstoffatome.

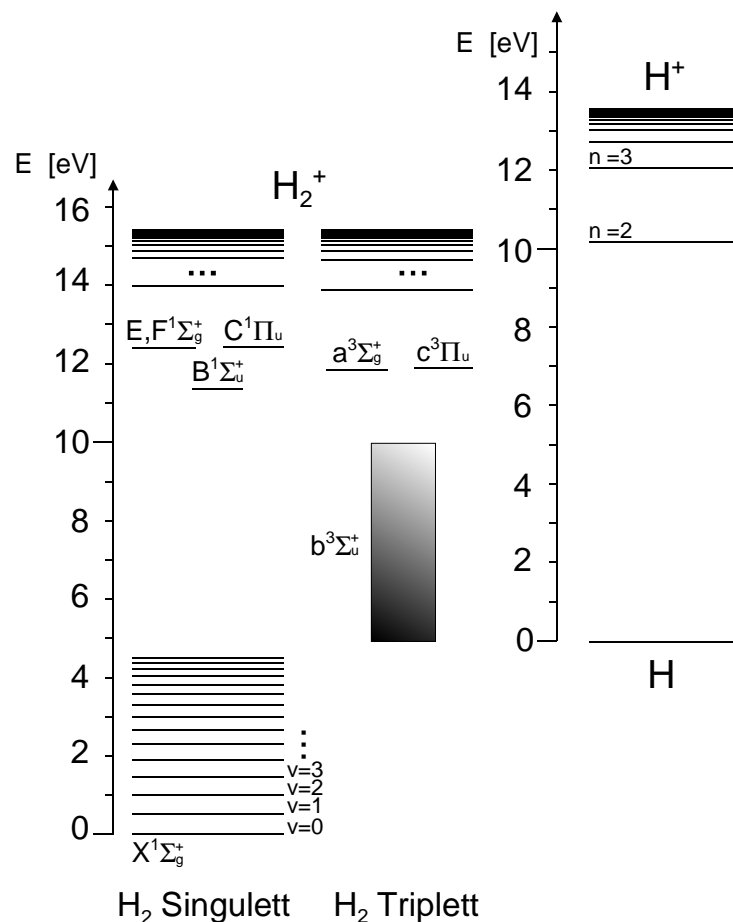


Abbildung 2.1: Im SSM berücksichtigte Energieniveaus beim Wasserstoffmolekül und Atom.

Es wird angenommen, daß die Besetzung bestimmter Teilchen zeitlich konstant ist

bzw. daß die Zeitskala, innerhalb derer sich die Besetzung dieser Teilchen ändert, sehr groß ist gegenüber der Zeitskala, in der sich eine Gleichgewichtsbesetzung zwischen den angeregten Zuständen einstellt. Aufgrund dieser unterschiedlichen Zeitskalen werden in [Gre01b] alle im SSM enthaltenen Zustände in zwei Räume unterteilt: Die Zustände mit sich langsam ändernder Besetzung liegen im P-Raum und alle Molekül- und Atomniveaus mit Ausnahme der jeweiligen Grundzustände liegen im Q-Raum der Zustände mit schneller Änderung der Besetzung.

Im P-Raum befinden sich die Wasserstoffionen H^+ und H^- , der atomare Wasserstoff H im Grundzustand, der molekulare Wasserstoff H_2 im Grundzustand und das Ion H_2^+ . Diese sind nicht in ihre unterschiedlichen Niveaus aufgespalten, sondern es wird nur der jeweilige elektronische und vibratorische Grundzustand betrachtet. Da diese Teilchen im P-Raum liegen, ist es möglich, daß ihre absolute bzw. relative Besetzung dem SSM vorgegeben werden kann. Dadurch wird das Finden einer eindeutigen Lösung für die Besetzungsdichten der Zustände im Molekül und Atom sehr erleichtert. Auf dieses Verfahren wird in Kapitel 2.3 genauer eingegangen.

Die im realen Molekül erlaubten Übergänge zwischen den Multipllett-Systemen durch Elektronenstoß sind in das SSM nicht implementiert. Stattdessen werden für beide Multipllett-Systeme separat die Besetzungen der einzelnen Niveaus bestimmt.

In die Rechnung gehen als Startwerte Ratenkoeffizienten für alle betrachteten Übergänge ein. Die Ratenkoeffizienten wurden gemäß Gleichung (2.11) aus Wirkungsquerschnitten unter Verwendung einer Maxwellverteilung berechnet. Bei den Ratenkoeffizienten wurden Kompromisse zwischen Verfügbarkeit und Genauigkeit eingegangen. So stammen beispielsweise alle Koeffizienten für Stoßanregung von $X^1\Sigma_g^+$ in die Zustände mit $n = 2$ und $n = 3$ von [Mil72]. Teilweise sind diese Koeffizienten skaliert. Darauf wird in Kapitel 2.4.1 genauer eingegangen. Sicherlich stünden neuere und genauere Daten zur Verfügung, allerdings nicht aus einer einzigen Quelle. Somit wäre die relative Vergleichbarkeit der Koeffizienten nicht mehr gegeben. Die Quellen der eingehenden Ratenkoeffizienten sind in Anhang B angegeben.

Prinzipiell berechnet das SSM die Besetzungsdichten abhängig von vorgegebenen Elektronendichten bzw. Elektronentemperaturen.

2.3 Ratengleichungen und Populationskoeffizienten

Für jedes im SSM betrachtete Niveau kann man eine Bilanzgleichung für die Zeitentwicklung der Besetzung aufstellen. Dabei muß man möglichst alle in Kapitel 2.1 beschriebenen Prozesse berücksichtigen. Im vorliegenden SSM werden die Prozesse der Absorption und der Photoionisation vernachlässigt, da in den modellierten Plasmen die Anzahl der Photonen zu gering ist, um diese Prozesse in relevanter Häufigkeit zuzulassen. Durch Stöße mit Schwerteilchen (das sind Atome, Moleküle oder Ionen) verursachte Übergänge werden vernachlässigt, ebenso

die Produktion von Wasserstoffmolekülen aus den im Plasma vorhandenen Wasserstoffatomen.

Somit gilt für die Besetzung n_i des Niveaus mit dem Index i folgende Ratengleichung:

$$\frac{dn_i}{dt} = + \sum_{f < i} C(f, i) n_e n_f \quad (2.24)$$

$$- \sum_{f < i} F(i, f) n_e n_i \quad (2.25)$$

$$- \sum_{f > i} C(i, f) n_e n_i \quad (2.26)$$

$$- S(i) n_e \quad (2.27)$$

$$- \sum_{f < i} A(i, f) n_i \quad (2.28)$$

$$+ \sum_{f > i} F(f, i) n_e n_f \quad (2.29)$$

$$+ \sum_{f > i} A(f, i) n_f \quad (2.30)$$

$$+ \alpha(i) n_e^2 n_{Ion} \quad (2.31)$$

$$+ \beta(i) n_e n_{Ion} \quad (2.32)$$

Dabei ist $C(i, f)$ der Ratenkoeffizient für Elektronenstoßanregung vom Zustand i in den Zustand f , n_i die Besetzungsdichte im Zustand i und n_e die Elektrodendichte. Die Terme (2.24) und (2.26) der Ratengleichung behandeln also die Besetzung von i durch Elektronenstöße, die von unterhalb liegenden Niveaus ausgehen und die Entvölkerung durch Stöße in oberhalb liegende Niveaus.

Der Ratenkoeffizient für einen Stoß zweiter Art vom Zustand i in den Zustand f hat die Bezeichnung $F(i, f)$. Die Entvölkerung von i durch abregende Stöße wird somit in der Zeile (2.25) behandelt, die Bevölkerung durch Stöße von oberhalb liegenden Niveaus in (2.29).

Die Elektronenstoßionisation mit dem Ratenkoeffizienten $S(i)$ und ihr Umkehrprozess, die Dreierstoßrekombination mit dem Ratenkoeffizienten $\alpha(i)$ werden in (2.27) und (2.31) berücksichtigt. Dabei ist n_{Ion} die Dichte des entsprechenden Ions, beispielsweise H_2^+ bei Anwendung der Gleichungen auf das Wasserstoffmolekül.

Es bleiben die Umkehrprozesse zur Absorption und Photoionisation: Die spontane Emission wird unter Berücksichtigung der Übergangswahrscheinlichkeiten $A(i, f)$ in den Termen (2.28) und (2.30) der Ratengleichung behandelt, die Strahlungsrekombination mit dem Ratenkoeffizienten $\beta(i)$ in (2.32).

Die vorgestellten Ratengleichungen (2.24) bis (2.32) gelten für das Wasserstoffmolekül und das Atom. Auch die zur Lösung der Gleichungen verwendeten Verfahren sind gleichermaßen für Molekül und Atom anwendbar. Im folgenden werden diese Verfahren am Beispiel des Wasserstoffmoleküls vorgestellt.

Bei Betrachtung von 40 Niveaus in einem Multiplett-System des Wasserstoffmoleküls erhält man 40 gekoppelte Differentialgleichungen. Da die Lösung dieses

Problems selbst mit einem Computer sehr zeitaufwendig wäre, betrachtet das SSM die Besetzung der einzelnen Zustände nicht in ihrer Zeitentwicklung, sondern im Gleichgewicht. Das heißt, die Besetzung ist konstant, und es gilt:

$$\frac{dn_i}{dt} = 0 \quad (2.33)$$

Somit erhält man aus den 40 gekoppelten Differentialgleichungen ebenso viele gekoppelte lineare Gleichungen. In diesen Gleichungen werden nun die Besetzungen von den im P-Raum enthaltenen Teilchensorten (also der Teilchensorten mit sich langsam ändernder Besetzung), als bekannt angenommen. Bei Rechnung für das Molekül sind das die Besetzung im Grundzustand $X^1\Sigma_g^+$ und die Besetzung des Ions H_2^+ . Nun wird das Gleichungssystem in zwei Systeme aufgeteilt. Die linke Seite dieser beiden Systeme ist identisch und behandelt Übergänge innerhalb der angeregten Niveaus der Moleküle. Diese linke Seite wird einmal an den Grundzustand gekoppelt und einmal an das Ion. Das heißt, in der rechten Seite stehen im ersten Gleichungssystem die Übergänge von $X^1\Sigma_g^+$ in die einzelnen Molekülzustände, im zweiten System die Übergänge ausgehend von H_2^+ . Sei m der Index der gekoppelten Teilchensorte, so sehen die Gleichungssysteme nach Umformen so aus:

$$n_e \cdot \begin{pmatrix} X_{1 \rightarrow \dots} & X_{2 \rightarrow 1} & X_{3 \rightarrow 1} & \cdots \\ X_{1 \rightarrow 2} & X_{2 \rightarrow \dots} & X_{3 \rightarrow 2} & \cdots \\ X_{1 \rightarrow 3} & X_{2 \rightarrow 3} & X_{3 \rightarrow \dots} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} R_m(1) \\ R_m(2) \\ R_m(3) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{m \rightarrow 1} \\ X_{m \rightarrow 2} \\ X_{m \rightarrow 3} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Dabei sind $X_{i \rightarrow f}$ die addierten Ratenkoeffizienten für alle Übergänge von i nach f , $X_{i \rightarrow \dots}$ ist die Summe der Ratenkoeffizienten aller das Niveau i entvölkernden Prozesse und $X_{m \rightarrow i}$ der Ratenkoeffizient für die Bevölkerung des Niveaus i von der betrachteten Sorte im P-Raum aus.

Als Lösungen dieser Gleichungssysteme erhält man für jede der beiden gekoppelten Teilchensorten einen Kopplungsvektor R_m . Dieser enthält die Populationskoeffizienten $R_m(i)$. Für diese gilt:

$$R_m(i) = \frac{n_{i,m}}{n_e \cdot n_m} \quad (2.35)$$

Die Populationskoeffizienten geben an, wie die Besetzung n_i eines bestimmten Niveaus des Moleküls von der bekannten Besetzung n_m der Teilchensorte m abhängt. Dabei ist $n_{i,m}$ der Anteil von n_i , der mit der entsprechenden koppelnden Sorte im Gleichgewicht steht. Die Gesamtbesetzung ergibt sich aus der Summe beider errechneter Besetzungsanteile:

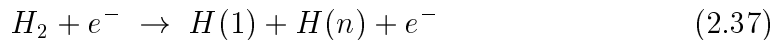
$$n_i = R_{H_2}(i) \cdot n_{H_2} \cdot n_e + R_{H_2^+}(i) \cdot n_{H_2^+} \cdot n_e \quad (2.36)$$

Durch Annahme von festen Besetzungen im Grundzustand des Moleküls und im Ion wurde diese Lösung des Gleichungssystems erst ermöglicht. Physikalisch ist die dabei vorgenommene Aufteilung in P-Raum und Q-Raum nur dann gerechtfertigt, wenn die Zeitskala, innerhalb derer sich diese angenommenen Besetzungen ändern, groß ist gegenüber der Zeitskala, innerhalb der sich das Gleichgewicht der Besetzung der Molekülzustände einstellt. Nur dann erscheinen diese beiden Teilchensorten vom Molekül aus als zeitlich konstant besetzt. Diese Bedingung ist für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Plasmen erfüllt. Detailliertere Informationen zur Gültigkeit der in einem SSM gemachten Annahmen werden in [Gre01a] gegeben.

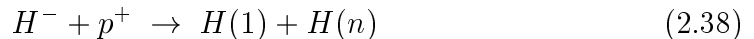
Aufgrund der nicht vollzogenen vollständigen elektronischen Auflösung der Niveaus mit Hauptquantenzahlen größer als 2, muß bei der Berechnung der Besetzung eines Niveaus welches innerhalb $n > 2$ liegt, das Verhältnis des statistischen Gewichtes des Niveaus zur Summe der statistischen Gewichte aller Niveaus mit derselben Hauptquantenzahl eingerechnet werden.

Die im Singulett-System zusätzlich betrachteten 14 Vibrationsniveaus des Grundzustandes lassen sich wahlweise dazuschalten. Informationen zu den dabei implementierten Prozessen und der Art des Einbaus sind in Kapitel 4 gegeben.

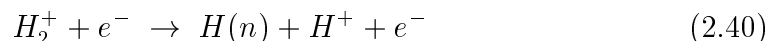
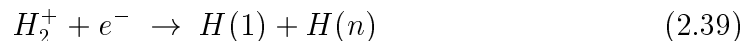
Ähnlich wie beim Molekül wird auch für das Atom ein Gleichungssystem der stattfindenden Übergänge aufgestellt, welches dann an verschiedene Teilchensorten angekoppelt wird. Die Lösung für die Besetzung eines Zustandes ergibt sich wie in Gleichung (2.36) aus der Summe der Einzellösungen für diese Teilchensorten. Beim Atom treten zusätzliche Anregungsprozesse auf. Der erste dieser Prozesse ist die dissoziative Anregung. Dabei dissoziiert das Molekül durch Elektronenstoß direkt in ein angeregtes Atom und eines im Grundzustand:



Außerdem können Wasserstoffatome durch Rekombination des negativen Ions H^- entstehen. Dabei trifft ein Proton auf das H^- -Ion und es entstehen zwei neutrale Atome:



Die letzte Teilchensorte, die an das Atom angekoppelt wird, ist das Ion H_2^+ . Dieses kann durch dissoziative Rekombination auf zwei verschiedene Möglichkeiten zur Produktion von H -Atomen beitragen:



Somit koppelt das Atom insgesamt an die fünf Teilchensorten H^+ , H^- , H im Grundzustand, H_2 im Grundzustand und H_2^+ .

Die so berechnete Besetzung n_i eines beliebigen Niveaus im molekularen bzw. atomaren Wasserstoff läßt sich zur Berechnung eines sogenannten effektiven Emissionsratenkoeffizienten verwenden. Dazu verwendet man die Gleichungen (2.12)

und (2.14) und erhält:

$$\left. \begin{array}{l} \dot{N} = n_i A(i, f) \\ \dot{N} = n_0 n_e X_{eff.}(T_e) \end{array} \right\} \Rightarrow X_{eff.}(T_e) = \frac{n_i A(i, f)}{n_0 n_e} \quad (2.41)$$

Dieser effektive Emissionsratenkoeffizient berücksichtigt alle in das SSM implementierten Prozesse, kann aber auch in den Gleichungen des Koronagleichgewichts wie beispielsweise Gleichung (2.14) eingesetzt werden. Somit ermöglicht das SSM eine wesentlich weitergehende Anpassung des Koronamodells an die im Plasma vorhandenen Bedingungen als es durch den in Kapitel 2.1.2 beschriebenen Korrekturfaktor für Kaskadenprozesse und Quenching möglich ist, ohne die Gleichungen auf irgendeine Art und Weise verändern zu müssen.

Für Prozesse, von denen nach den Molekülzuständen aufgelöste Ratenkoeffizienten vorliegen, lassen sich mit Hilfe der Populationskoeffizienten ebenfalls effektive Ratenkoeffizienten bestimmen. So gehen beispielsweise in das SSM zustandsaufgelöste Koeffizienten $S'(i)$ für die Ionisation über Elektronenstoß ein. Der effektive Ratenkoeffizient $S'_{eff.}$ ergibt sich daraus folgendermaßen³:

$$S'_{eff.} = \sum_{i>1} S'(i) \cdot R_{H_2}(i) n_e \quad (2.42)$$

2.4 Auftretende Probleme

Im SSM werden zum Aufbau der Matrizen der Ratengleichungen die dazugehörigen Ratenkoeffizienten und Übergangswahrscheinlichkeiten für das Molekül und das Atom benötigt. Die atomaren Daten sind unkritisch und es soll daher im folgenden auf einige Probleme in der Modellierung des Moleküls hingewiesen werden.

2.4.1 Zustände mit höherer Hauptquantenzahl

Das SSM löst Molekülzustände mit effektiver Hauptquantenzahl n größer als 2 nicht mehr in die elektronischen Niveaus auf. Dabei sind beispielsweise die Zustände mit $n = 3$ für die Diagnostik besonders relevant, da sie obere Zustände für einige spektroskopisch gut zugängliche Übergänge sind, wie beispielsweise den Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$) oder den Singulett-Übergang $G^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$. Die vorgenommene Näherung ist bei Beschränkung der Betrachtung nur auf die sieben elektronisch aufgelösten Zustände unproblematisch, da für die hier auftretenden Prozesse bei der Erstellung der Matrizen der Ratengleichungen Übergangswahrscheinlichkeiten und Ratenkoeffizienten verwendet werden können, die explizit für das Molekül bestimmt worden sind. Ebenso unproblematisch ist eine Betrachtung nur der nach den Hauptquantenzahlen aufgelösten Zustände: Da die effektiven Hauptquantenzahlen der Vereinte-Atome-Näherung entstammen,

³Ionisation ist auch über andere Wege möglich, beispielsweise über Ladungsaustausch. Der hier berechnete effektive Ratenkoeffizient $S'_{eff.}$ ist ein Teil des gesamten effektiven Ionisationsratenkoeffizienten $S_{eff.}$.

können hier Koeffizienten verwendet werden, die für das Wasserstoffatom bestimmt worden sind. Diese Näherung durch das Atom wird im SSM bei der Bestimmung der in die Rechnung eingehenden Ratenkoeffizienten für Stoßanregung und von Übergangswahrscheinlichkeiten für spontane Emission durchgeführt. Probleme bereitet die Kopplung zwischen den elektronisch aufgelösten und den unaufgelösten Zuständen. Hier werden gemittelte Ratenkoeffizienten verwendet, deren Korrektheit nicht immer zweifelsfrei ist. Dazu zwei Beispiele: Der Ratenkoeffizient für die Elektronenstoßanregung vom Grundzustand nach $n = 3$ im Triplett-System wird folgendermaßen berechnet:

$$\begin{aligned}
C(X^1\Sigma_g^+, n=3) = & 2 \cdot (C(X^1\Sigma_g^+, h^3\Sigma_g^+) \\
& + C(X^1\Sigma_g^+, e^3\Sigma_u^+) \\
& + C(X^1\Sigma_g^+, d^3\Pi_u) \\
& + C(X^1\Sigma_g^+, g^3\Sigma_g^+) \\
& + C(X^1\Sigma_g^+, i^3\Pi_g) \\
& + C(X^1\Sigma_g^+, j^3\Delta_g))
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Die dabei verwendeten Ratenkoeffizienten für die Anregung von $X^1\Sigma_g^+$ in die einzelnen elektronischen Zustände von $n = 3$ wurden mit Hilfe von Wirkungsquerschnitten aus [Mil72] bestimmt. Der Faktor 2 stammt nach [Saw00] aus einem Vergleich des durch Summation erhaltenen Anregungsratenkoeffizienten für $n = 3$ mit denen für $n \neq 3$. Letztere stammen für den Fall $n = 2$ aus [Mil72] (Anregung nach $a^3\Sigma_g^+$) bzw. wurden durch Mittelung von Wirkungsquerschnitten aus verschiedenen, in [Saw95] angegebenen, Literaturquellen gewonnen (Anregung in alle anderen Niveaus von $n=2$). Für $n > 3$ werden Näherungsformeln für das Atom verwendet. Für das Singulett-System wird eine ähnliche Formel mit dem ebenso erhaltenen Faktor 1.5 verwendet. Da die vorgenommene Anpassung Anregungsratenkoeffizienten aus verschiedenen Literaturquellen verwendet und diese unterschiedlich skaliert, darf dieser Punkt in zukünftigen Arbeiten zum SSM nicht vernachlässigt werden. Idealerweise sollte eine Quelle gefunden werden, die Anregungsratenkoeffizienten von $X^1\Sigma_g^+$ nicht nur nach $n = 2$ und $n = 3$ liefert, sondern auch für höhere effektive Hauptquantenzahlen.

Für spontane Emission von $n = 3$ nach $n = 2$ im Triplett-System werden die Übergangswahrscheinlichkeiten nach folgenden Formeln ermittelt:

$$A(n=3, b^3\Sigma_u^+) = \left(\frac{1}{3}\right) 27.7 \cdot 10^8 P(n=3)^{-3.3856} \left(\frac{5}{g(n=3)}\right) \tag{2.44}$$

$$A(n=3, a^3\Sigma_g^+) = 2.2 \cdot 10^8 P(n=3)^{-2.6922} \left(\frac{1}{g(n=3)}\right) \tag{2.45}$$

$$A(n=3, c^3\Pi_u) = \left(\frac{2}{3}\right) 27.7 \cdot 10^8 P(n=3)^{-3.3856} \left(\frac{5}{g(n=3)}\right) \tag{2.46}$$

Diese Formeln wurden nach [Saw00] aus Übergangswahrscheinlichkeiten für das Heliumatom unter Berücksichtigung der vorhandenen Abhängigkeiten von der effektiven Hauptquantenzahl des Wasserstoffmoleküls gewonnen. Es entspricht $P(n=3)$ einer korrigierten effektiven Hauptquantenzahl. Es gilt: $P(n=3) = 2.98$.

Das statistische Gewicht $g(n=3)$ von $n = 3$ ergibt sich zu 9. Für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten der Übergänge von $n > 3$ zu den aufgelösten Zuständen von $n = 2$ werden ähnliche Formeln verwendet. Für das Singulett-System werden dieselben Formeln wie für das Triplett-System verwendet. Die so erhaltenen effektiven Übergangswahrscheinlichkeiten enthalten keinerlei Information über den Übergang eines der sechs einzelnen Niveaus von $n = 3$ zu einem einzelnen Niveau von $n = 2$ und sind nur gültig für eine Gleichbesetzung aller Zustände von $n = 3$. Da in einem realen Plasma nicht alle Zustände von $n = 3$ gleich besetzt sein werden, wird dies zu einem Fehler in den vom SSM berechneten Besetzungen führen. Außerdem muß darauf geachtet werden, daß bei der Bestimmung von effektiven Emissionsratenkoeffizienten für einzelne Niveaus nach (2.41) die korrekte, nach oberem und unterem Zustand des Übergangs aufgelöste Übergangswahrscheinlichkeit verwendet wird.

Eine Lösung der beschriebenen Probleme wäre es, die Zustände mit $n = 3$ elektronisch aufzulösen. Eine explizit für den Zustand $d^3\Pi_u$ berechnete Besetzungsdichte führt sicherlich zu einem exakteren effektiven Ratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang, als die mit dem statistischen Gewicht $\frac{2}{9}$ skalierten Besetzungsdichten für den Zustand $n = 3$. Außerdem wären zur Berechnung des Besetzungsgleichgewichts die aus den Gleichungen (2.44), (2.45) und (2.46) stammenden effektiven Übergangswahrscheinlichkeiten nicht mehr nötig. Es könnten für die von den Zuständen des aufgelösten Niveaus $n = 3$ ausgehenden Übergänge Wahrscheinlichkeiten aus der Literatur verwendet und bei Bedarf auch aktualisiert werden.

2.4.2 Vibrationsniveaus

Als einziges elektronisches Niveau wird im SSM der Grundzustand $X^1\Sigma_g^+$ nach den vibratorischen Niveaus aufgelöst. Wie in Kapitel 2.2 beschrieben, hat das Wasserstoffmolekül aber unabhängig vom elektronischen Zustand die Möglichkeit, Vibrationsenergie aufzunehmen. Übergänge zwischen zwei Molekülzuständen sind nicht nur zwischen den jeweiligen vibratorischen Grundzuständen, sondern auch zwischen vibratorisch angeregten Niveaus möglich. Folglich muß bei der Reduzierung des realen Moleküls auf das im SSM verwendete Modell vorsichtig vorgegangen werden. Aus einer Verwendung der Wahrscheinlichkeiten für den Übergang von $v_i = 0$ nach $v_f = 0$ resultiert eine zu geringe Übergangswahrscheinlichkeit. Es müssen effektive Übergangswahrscheinlichkeiten verwendet werden, die alle beteiligten Vibrationszustände berücksichtigen.

Als besonders problematisch erwies sich eine nähere Betrachtung der Triplett-Zustände $c^3\Pi_u$ und $a^3\Sigma_g^+$. Die Energien dieser beiden Zustände liegen nur minimal auseinander (siehe Abbildung 2.2). Im SSM wird $c^3\Pi_u$ die Energie 11.87 eV zugewiesen, $a^3\Sigma_g^+$ die Energie 11.88 eV. Diese Sichtweise ist auf den jeweiligen vibratorischen Grundzustand beschränkt und läßt einen möglichen Strahlungsübergang nur von $a^3\Sigma_g^+$ nach $c^3\Pi_u$ erwarten. Im Programmquelltext sind folgende Übergangswahrscheinlichkeiten explizit festgesetzt:

$$\begin{aligned} A(a^3\Sigma_g^+, c^3\Pi_u) &= 0; \\ A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) &= 10^6 \text{ s}^{-1}; \end{aligned} \quad (2.47)$$

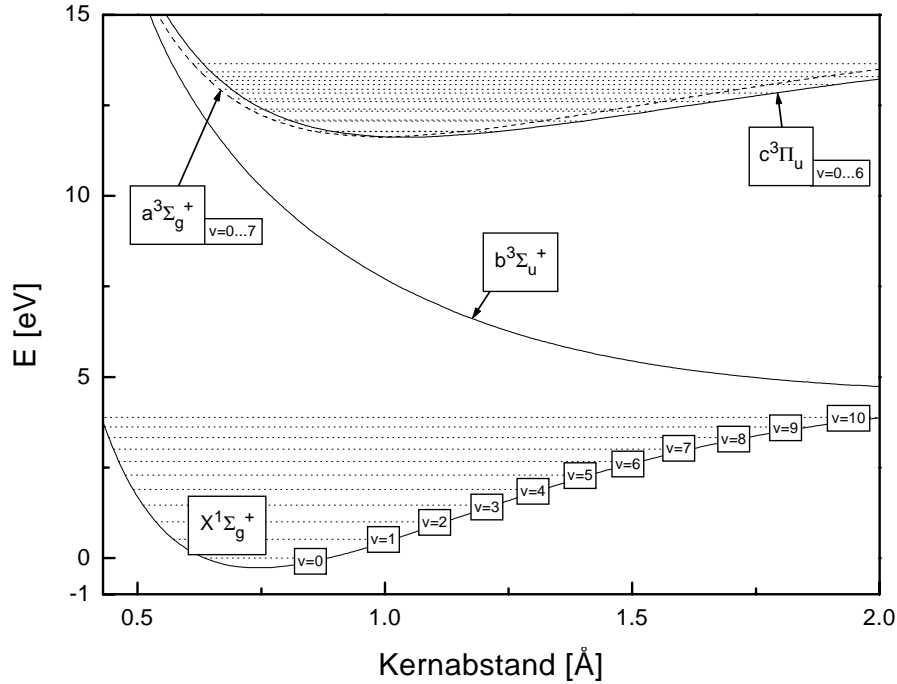


Abbildung 2.2: Potentialkurven der Zustände $a^3\Sigma_g^+$ und $c^3\Pi_u$ mit ihren Vibrationsniveaus. Die Potentiale für $X^1\Sigma_g^+$ und $b^3\Sigma_u^+$ dienen zur Verdeutlichung der Größenverhältnisse.

Die Übergangswahrscheinlichkeit $A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+)$ bezieht sich nach [Saw00] auf die angeregten vibratorischen Zustände von $c^3\Pi_u$. Dadurch wird berücksichtigt, daß bereits der Vibrationszustand $v = 1$ von $c^3\Pi_u$ energetisch hoch genug liegt, um einen Übergang durch Strahlung nach $a^3\Sigma_g^+$ zu ermöglichen.

In [Gub92] werden folgende vibrationsaufgelöste Wahrscheinlichkeiten für radiative Übergänge zwischen den beiden Zuständen gegeben:

v_i	$A(a \rightarrow c)$	$A(c \rightarrow a)$	v_i	$A(a \rightarrow c)$	$A(c \rightarrow a)$
0	$1.9 \cdot 10^2$	0	11	$2.0 \cdot 10^5$	$8.4 \cdot 10^2$
1	$3.0 \cdot 10^4$	$2.4 \cdot 10^4$	12	$1.6 \cdot 10^5$	$2.9 \cdot 10^2$
2	$6.2 \cdot 10^4$	$5.6 \cdot 10^4$	13	$1.1 \cdot 10^5$	$4.3 \cdot 10^1$
3	$9.4 \cdot 10^4$	$5.8 \cdot 10^4$	14	$6.2 \cdot 10^4$	8.5
4	$1.3 \cdot 10^5$	$4.6 \cdot 10^4$	15	$2.4 \cdot 10^4$	0
5	$1.6 \cdot 10^5$	$3.3 \cdot 10^4$	16	$1.0 \cdot 10^4$	0
6	$1.9 \cdot 10^5$	$2.1 \cdot 10^4$	17	$5.6 \cdot 10^3$	0
7	$2.2 \cdot 10^5$	$1.3 \cdot 10^4$	18	$3.2 \cdot 10^3$	0
8	$2.2 \cdot 10^5$	$7.4 \cdot 10^3$	19	$1.5 \cdot 10^3$	0
9	$2.4 \cdot 10^5$	$3.9 \cdot 10^3$	20	$6.4 \cdot 10^2$	0
10	$2.2 \cdot 10^5$	$1.9 \cdot 10^3$			

(2.48)

Alle Übergangswahrscheinlichkeiten in s^{-1}

Dabei ist v_i der vibratorische Zustand des jeweiligen Startniveaus des Übergangs.

Die gesetzten Wahrscheinlichkeiten berücksichtigen die nach Tabelle (2.48) seltener auftretende Reaktion und vernachlässigen die häufigere.

Um diese Annahmen zu überprüfen, werden im folgenden Kapitel daher drei verschiedene Ansätze der Modellierung der radiativen Übergänge zwischen $a^3\Sigma_g^+$ und $c^3\Pi_u$ untersucht:

1. Verwende die im Programm ursprünglich gesetzten Übergangswahrscheinlichkeiten nach den Gleichungen (2.47)
2. Setze die Wahrscheinlichkeit für den Strahlungsübergang von $c^3\Pi_u$ nach $a^3\Sigma_g^+$ auf 0, um den metastabilen Charakter von $c^3\Pi_u$ zu berücksichtigen.
3. Verwende folgende, durch Mittelung der Werte aus Tabelle (2.48) erhaltene effektive Wahrscheinlichkeiten:

$$\begin{aligned} A(a^3\Sigma_g^+, c^3\Pi_u) &= 1.4 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}; \\ A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) &= 2.6 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}; \end{aligned} \quad (2.49)$$

Bei der vorgenommenen Mittelung hätten idealerweise die Werte aus Tabelle (2.48) mit der Besetzungsdichte des jeweiligen Vibrationsniveaus gewichtet und dann aufsummiert werden müssen. Die Besetzungsdichten der Vibrationszustände variieren mit den im Plasma herrschenden Parametern, so daß eine Gewichtung wie beschrieben nicht möglich ist. Stattdessen stellen die angegebenen Werte den Mittelwert der in Tabelle (2.48) angegebenen Werte für $i = 0 \dots 10$ dar. Diese Vorgehensweise basiert auf der Tatsache, daß die höheren Vibrationszustände $i > 10$ nur schwach besetzt sind.

Diese dritte Annahme ist der realistischste Fall.

Das Problem der im Programm nicht durchgeführten Vibrationsauflösung von $c^3\Pi_u$ sollte in einer weiteren Arbeit am SSM nicht vernachlässigt werden. Ein Ansatz wäre es, den Zustand $c^3\Pi_u$ programmintern in zwei Niveaus aufzuteilen. Der untere Zustand bildet das metastabile Verhalten von $v = 0$ ab und gehört zum P-Raum, da sich die Besetzung eines metastabilen Niveaus im Vergleich zu der Besetzung nicht metastabiler Niveaus nur langsam ändert. Der obere Zustand würde alle höheren Vibrationszustände repräsentieren und dem Q-Raum angehören. Dieses Niveau würde der Modellierung der erlaubten Übergänge nach $a^3\Sigma_g^+$ dienen.

Kapitel 3

Besetzung der elektronischen Niveaus von H_2 und H

3.1 Die untersuchten Plasmen

Mit dem SSM wurden im Rahmen dieser Arbeit Rechnungen für zwei verschiedene Plasmatypes durchgeführt: Zum einen für Niederdruckplasmen, zum anderen für Divertorplasmen.

Ein typisches Niederdruckplasma ist die in [Lot00] beschriebene ECR-Entladung, ein Beispiel für Divertorplasmen ist das Divertorplasma von dem Fusionsexperiment ASDEX Upgrade.

Das Divertorplasma ist ein spezielles Randschichtplasma. Um durch Kontakt mit der Wand oder als Fusionsprodukt entstehende Plasmaverunreinigungen zu beseitigen, ist das einschließende Magnetfeld so konfiguriert, daß ab einer bestimmten Magnetfeldlinie, der sogenannten Separatrix, alle näher an der Wand liegenden Feldlinien auf den Prallplatten des Divertors enden. Dort können die Plasmaverunreinigungen abgepumpt werden. Die Verwendung eines Divertors erlaubt es, die Verunreinigungen in einiger Distanz vom heißen Fusionsplasma zu entfernen. Damit hat der Divertor im Vergleich zu sogenannten Limitern, die die äußere Schicht des Fusionsplasmas abschälen, den Vorteil, daß bei der Beseitigung der Verunreinigungen keine großen Mengen neuer Verunreinigungen entstehen. Außerdem hat die räumliche Trennung von der Fusionszone zur Folge, daß das Divertorplasma deutlich kälter ist, als das Fusionsplasma. Moleküle werden an der Wand durch Rekombination gebildet und dringen dann in das Plasma ein, wo sie dissoziieren und ionisiert werden. Damit ist der überwiegende Teil der neutralen Teilchen atomar und es läßt sich kein Dissoziationsgrad angeben. Eine weitergehende Beschreibung des Divertorplasmas findet sich in [Miy89].

Tabelle (3.1) zeigt typische bzw. in dieser Arbeit verwendete Plasmaparameter für Niederdruckplasmen und Divertorplasmen.

Plasma	Niederdruckplasma	Divertorplasma
T_e	1.5 – 3.5 eV	1.0 – 10 eV
T_i	450 K	$T_i \cong T_e$
n_e	10^{11} cm^{-3}	$10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Neutralteilchen	$n_{H_2} > n_H$	$\Gamma_{H_2} \leq \Gamma_H$
Häufigste Ionen	H_2^+, H_3^+	H^+
δ	1 %	
p	4 – 18 Pa	

(3.1)

Γ_{H_2} und Γ_H sind die im Divertorplasma auftretenden Flüsse des molekularen bzw. atomaren Wasserstoffs. Bei dem Divertorplasma sind für Elektronentemperatur- und dichte relativ große Intervalle angegeben. Das hat folgenden Grund: Das Verhalten des Plasmas im Divertor kann zwischen zwei Extremfällen des Recyclingregimes liegen: Im attachten Zustand rekombiniert das Plasma hauptsächlich an der Wand. Im Plasmavolumen herrschen geringe Elektronendichten und hohe Elektronentemperaturen. Im detachten Zustand findet hauptsächlich Volumenrekombination statt. Im Plasmavolumen herrschen hohe Elektronendichten und geringe Elektronentemperaturen.

3.2 Zustandekommen eines Besetzungsgleichgewichts

Da bei Stoß-Strahlungsmodellen eine Vielzahl von an- und abregenden Prozessen auftritt, wird nur ein gewisser Anteil der Besetzung, die ein bestimmtes Niveau durch direkte Anregung vom Grundzustand aus erhält, auch in dem Niveau verbleiben. Ein größerer Anteil wird sich innerhalb der Molekül- bzw. Atomzustände weiterverteilen. Zusätzlich zur Umbesetzung innerhalb des Moleküls wird auch Abregung in den P-Raum hinein eine Rolle spielen. Dazu zählen beispielsweise Abregung in den Grundzustand oder Anregung in das H_2^+ -Ion durch Elektronenstoß. Das Zusammenspiel all dieser Prozesse sorgt für die Einstellung eines Besetzungsgleichgewichts.

Es sollten Untersuchungen zur An- und Abregung von Zuständen des Wasserstoffmoleküls H_2 im Gleichgewichtszustand durchgeführt werden. Dazu wurde eine in [Gre01b] dargestellte Methode verwendet. Das SSM wurde um Ausgaberroutinen für die benötigten Matrizen erweitert. Diese Matrizen wurden dann in ein in C++ umgesetztes Programm eingelesen und nach dem in den beiden folgenden Unterkapiteln beschriebenen Verfahren ausgewertet. Zur Rechnung mit Matrizen greift das Programm dabei auf das Paket NEWMAT09 [Dav00] zurück.

3.2.1 Anregung eines Zustands

Soll bestimmt werden, wie stark ein ausgewähltes Niveau im Gleichgewicht von anderen Niveaus besetzt wird, bietet es sich an, alle anregenden Prozesse über eine Zeitentwicklung nach $t = \infty$ aufzuintegrieren. Im vorliegenden SSM läßt

sich aber eine einfachere Methode anwenden. In Kapitel 2.3 wurde beschrieben, wie aus gegebenen Besetzungen der an das Molekül bzw. Atom angekoppelten Teilchensorten aus dem P-Raum eine zeitlich konstante Besetzung der einzelnen Niveaus resultiert. Wichtigste Voraussetzung dafür ist, daß die Änderung der Besetzung der angekoppelten Teilchensorte in wesentlich größeren Zeiträumen erfolgt, als die Änderung der Besetzungen der betrachteten Niveaus im Molekül. Durch Erfüllen dieser Bedingung ist die oben erwähnte Zeitentwicklung nach unendlich bereits durchgeführt und es läßt sich direkt aus der Matrix der Ratengleichungen ermitteln, wie das Besetzungsgleichgewicht zustande kommt. In vereinfachter Form läßt sich das Ratengleichungssystem (Gleichung (2.34)) so schreiben:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{V} \quad (3.2)$$

Dabei ist \mathbf{X} die Matrix der Übergänge innerhalb des Moleküls, \mathbf{V} der Vektor, der die Übergänge von einer angekoppelten Teilchensorte zu den einzelnen Niveaus des Moleküls behandelt und \mathbf{R} enthält die Populationskoeffizienten. In den folgenden Rechnungen wird davon ausgegangen, daß die Niveaus des Moleküls nur an den molekularen Grundzustand gekoppelt sind.

Durch Auflösen von Gleichung 3.2 nach \mathbf{R} erhält man:

$$\mathbf{R} = \mathbf{X}^{-1} \cdot \mathbf{V} \quad (3.3)$$

Die Matrix \mathbf{X}^{-1} läßt sich als Gleichgewichtsoperator betrachten. Wendet man eine Anfangsbesetzung, in diesem Falle diejenige, die aus direkter Anregung vom Grundzustand aus resultiert, auf diesen Operator an, so erhält man die sich einstellende Gleichgewichtsbesetzung.

Betrachtet man den Populationskoeffizienten eines einzelnen Niveaus i , so gilt:

$$R(i) = \sum_j \mathbf{X}^{-1}(i, j) \cdot V(j) \quad (3.4)$$

Die einzelnen Summanden entsprechen dabei den Anteilen der sich einstellenden Gleichgewichtsbesetzung, die vom Molekülniveau j nach i übergegangen sind. Der i -te Summand enthält denjenigen Anteil, der direkt vom Grundzustand aus in das Niveau i angeregt wurde und dort auch verblieben ist. Im Grenzfall des Koronamodells, in dem Anregung eines Niveaus ausschließlich durch Elektronenstoß aus dem Grundzustand möglich ist, beträgt dieser Anteil 100 % der Gesamtdichte im Zustand i .

3.2.2 Abregung eines Zustands

Bei der Abregung eines Zustands soll bestimmt werden, welche Anteile einer gegebenen Besetzung eines ausgewählten Molekülzustandes in bestimmte Teilchen des P-Raums übergehen. Hierbei sind nur relative Anteile relevant, und es kann die Anfangsbesetzung des betrachteten Niveaus auf 1 gesetzt werden, die aller

anderen auf 0. In vektorieller Schreibweise sieht diese Anfangsbedingung so aus:

$$n(i)_{t=0} = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Da die Zeitskala der Übergänge innerhalb des Moleküls viel kleiner ist, als die Zeitskala der Übergänge von und zu den angekoppelten Teilchen, muß aus $n(i)_{t=0}$ zunächst die daraus resultierende Gleichgewichtsverteilung innerhalb der Molekülzustände berechnet werden:

$$n(i) = \mathbf{X}^{-1} \cdot n(i)_{t=0} \quad (3.6)$$

Erst aus dieser Gleichgewichtsverteilung können die Anteile der Übergänge zu den angekoppelten Teilchen bestimmt werden. Dazu werden vom SSM Vektoren \mathbf{H}_m erstellt. Diese enthalten die Ratenkoeffizienten für die Übergänge von den verschiedenen Molekülniveaus zu den angekoppelten Teilchen. Der Besetzungszuwachs, den das Teilchen mit dem Index m in Abhängigkeit von der Besetzung im Molekülniveau i erfährt, ergibt sich zu:

$$n(m) = \mathbf{H}_m \mathbf{X}^{-1} \cdot n(i)_{t=0} \quad (3.7)$$

3.2.3 Ergebnisse der Rechnungen

Die in den Kapiteln 3.2.1 und 3.2.2 beschriebenen Methoden zur Untersuchung des Zustandekommens eines Besetzungsgleichgewichts und der Übergänge vom Q-Raum in den P-Raum sollen für die Parameter des Niederdruckplasmas und des Divertorplasmas angewendet werden. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die in Kapitel 2.4.2 angesprochene Problematik bei der Modellierung der radiativen Übergänge zwischen $a^3\Sigma_g^+$ und $c^3\Pi_u$ gelegt. Dazu wurden in das SSM als Eingabeparameter die drei verschiedenen Annahmen über die Übergangswahrscheinlichkeiten eingesetzt. Um in der Folge die drei Fälle einfach unterscheiden zu können, werden Kürzel eingeführt.

$$\left. \begin{array}{l} A(a^3\Sigma_g^+, c^3\Pi_u) = 0 \\ A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) = 10^6 \text{ s}^{-1} \end{array} \right\} := \text{„alte } A_{ik}\text{“}$$

$$\left. \begin{array}{l} A(a^3\Sigma_g^+, c^3\Pi_u) = 0 \\ A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) = 0 \end{array} \right\} := \text{„}A_{ik} \text{ auf Null“} \quad (3.8)$$

$$\left. \begin{array}{l} A(a^3\Sigma_g^+, c^3\Pi_u) = 1.4 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1} \\ A(c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) = 2.6 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1} \end{array} \right\} := \text{„neue } A_{ik}\text{“}$$

Es soll hier nochmals erwähnt werden, daß die „neuen A_{ik} “ die Bedingungen am realistischsten wiedergeben.

Besetzungsanteil aus dem Grundzustand

Es wurden Untersuchungen am Zustand $n = 3$ im Triplettsystem durchgeführt. Zu diesem Zustand gehört unter anderem das Niveau $d^3\Pi_u$. Dieses Niveau ist der obere Zustand des Fulcher-Übergangs $d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$. Die Fulcher-Strahlung liegt im sichtbaren Bereich ($\approx 600 - 650$ nm) und wird oft zur Diagnostik verwendet. Um zu ermitteln, welcher prozentuale Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ direkt aus dem Grundzustand stammt, wurde das Verhältnis zwischen dem zum Zustand passenden Summanden aus Gleichung (3.4) und dem gesamten Populationskoeffizienten gebildet. Die Rechnungen wurden für den T_e -Bereich von 1 bis 10 eV durchgeführt. Dieser Temperaturbereich ist für die Diagnostik der Moleküle relevant. Für kleinere Elektronentemperaturen sind die elektronisch angeregten Zustände nur schwach besetzt, bei höheren T_e nimmt durch Dissoziation und Ionisation die Moleküldichte stark ab.

Abbildung 3.1 zeigt den erhaltenen Anteil, der für $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ berechnet wurde (typische Bedingungen des Niederdruckplasmas), Abbildung 3.2 den für $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (Bedingungen des Divertorplasmas).

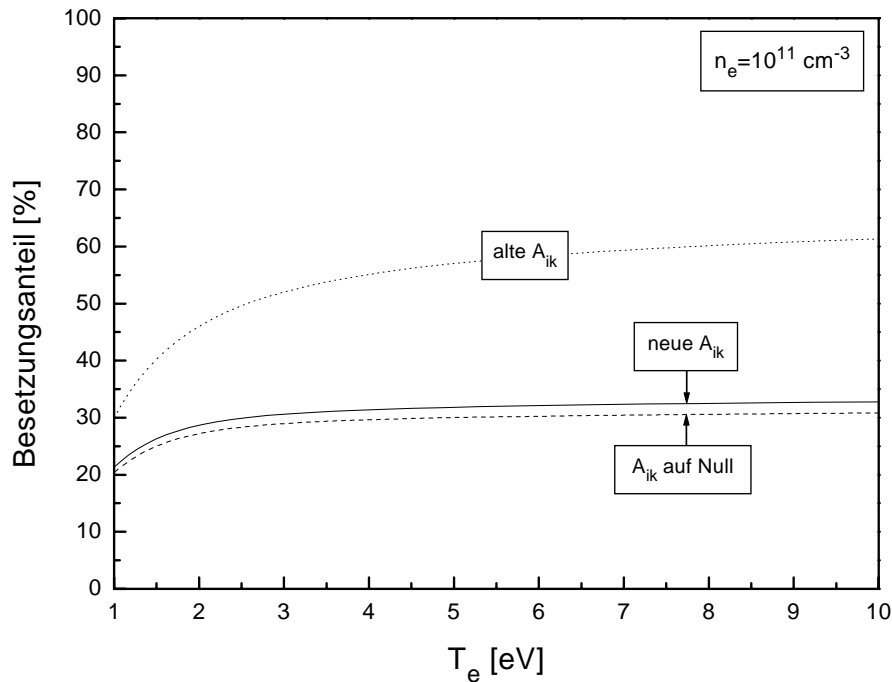


Abbildung 3.1: Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ (Triplettsystem) für $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, der aus direkter Anregung vom Grundzustand aus resultiert.

Unabhängig von der Elektronendichte zeigen die Anteile bei Variation von T_e einen relativ konstanten Verlauf. Absolut gesehen liegen die Anteile unter 60 Prozent. Dies verdeutlicht die Notwendigkeit der Verwendung von effektiven Emissionsratenkoeffizienten bei der Beschreibung von realen Plasmen.

Für die im Niederdruckplasma auftretenden Elektronendichten zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit von den verwendeten Übergangswahrscheinlichkeiten. Für

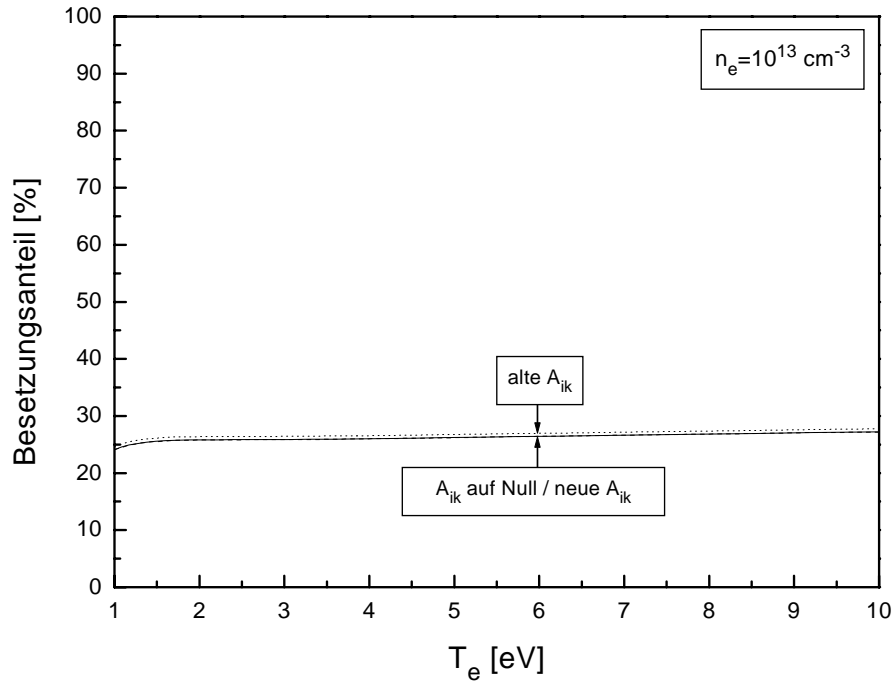


Abbildung 3.2: Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ (Triplet-System) für $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, der aus direkter Anregung vom Grundzustand aus resultiert.

die „neuen A_{ik} “ ergeben sich etwas höhere Werte als für die auf Null gesetzten A_{ik} . Für die auf Null gesetzten Übergangswahrscheinlichkeiten stammt ein großer Teil der Besetzung von $n = 3$ aus dem metastabilen $c^3\Pi_u$, der nicht durch Strahlung entvölkert werden kann. Bei Verwenden der „neuen A_{ik} “ ist der Strahlungsübergang $a^3\Sigma_g^+ \rightarrow c^3\Pi_u$ zwar wahrscheinlicher als der umgekehrte Prozess, allerdings ist $c^3\Pi_u$ aufgrund seiner Metastabilität im Gleichgewicht viel stärker besetzt als $a^3\Sigma_g^+$. Daher führt die Verwendung dieser Übergangswahrscheinlichkeiten zu einer Entvölkerung von $c^3\Pi_u$ zugunsten von $a^3\Sigma_g^+$. Der letztgenannte Zustand kann dann durch Strahlung in den Grundzustand $X^1\Sigma_g^+$ übergehen. Zusammengefasst führt dies zu einer Anhebung des aus dem Grundzustand stammenden Anteils und zu einer Verringerung des aus $c^3\Pi_u$ stammenden Anteils der Besetzung. Der weit höher liegende Verlauf der Kurve für die „alten A_{ik} “ läßt sich analog begründen. Die „alten A_{ik} “ erlauben eine starke Entvölkerung von $c^3\Pi_u$ zugunsten von $a^3\Sigma_g^+$, nicht aber den Umkehrprozess.

Bei höherem n_e liegen die berechneten Kurven für die „neuen A_{ik} “ und die auf Null gesetzten A_{ik} aufeinander. Lediglich die Kurve für die „alten A_{ik} “ zeigt etwas höhere Werte. Die Wahrscheinlichkeit für Elektronenstöße ist proportional zu n_e . Daraus folgt, daß für $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ An- und Abregung durch Elektronenstöße über die Strahlungsübergänge dominiert und folglich eine Änderung der radiativen Übergangswahrscheinlichkeiten keinen entscheidenden Einfluß hat.

Derselbe Effekt, die Unabhängigkeit des aus dem Grundzustand stammenden Besetzungsanteils von den für Strahlungsübergänge zwischen zwei Molekülzuständen

verwendeten Wahrscheinlichkeiten, ist auch bei Rechnungen für sehr kleine Elektronendichten zu erwarten. Bei diesen Dichten nähert man sich dem Koronamodell, in dem nur Anregung vom Grundzustand aus möglich ist und Übergänge zwischen angeregten Molekülzuständen keine Rolle spielen.

Besetzungsanteil aus anderen Zuständen

Es wurde gezeigt, daß die aus dem Grundzustand stammenden Besetzungsanteile von $n = 3$ im Triplettsystem nicht stark über die Elektronentemperatur variieren, über die Elektronendichte dagegen schon. Daher wird im Folgenden von der Auftragung der Besetzungsanteile in Abhängigkeit von T_e übergegangen zu einer in Abhängigkeit von n_e . Für alle Rechnungen wurde $T_e = 3$ eV gewählt, was eine in den betrachteten Plasmen relevante Temperatur ist. Es sollen die bei der Betrachtung des aus dem Grundzustand stammenden Anteils der Fulcherstrahlung beschriebenen Besetzungsmechanismen genauer untersucht werden. Dazu werden Rechnungen zum Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ durchgeführt, der aus Übergängen von den energetisch unterhalb liegenden Niveaus $c^3\Pi_u$ bzw. $a^3\Sigma_g^+$ und dem oberhalb liegenden nicht aufgelösten Niveau $n = 4$ stammt.

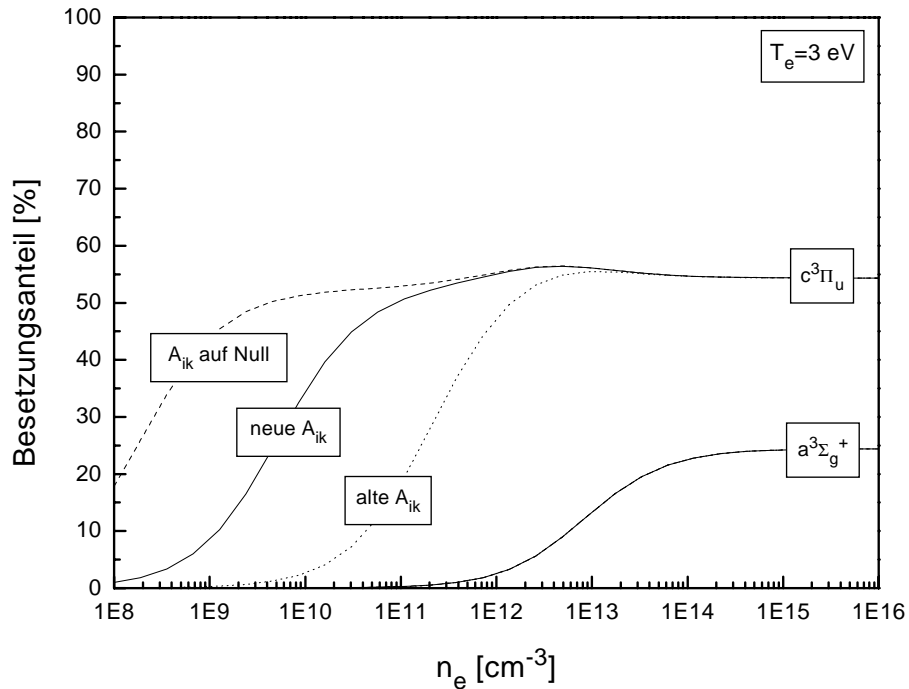


Abbildung 3.3: Relativer Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ im Triplettsystem, der aus Anregung von $c^3\Pi_u$ bzw. $a^3\Sigma_g^+$ aus resultiert.

In Abbildung 3.3 werden die relativen Anteile der Besetzung gezeigt, die aus $a^3\Sigma_g^+$ und $c^3\Pi_u$ stammen. Diese Anteile zeigen einen Verlauf, der ungefähr dem der Besetzungsdichte der beiden Zustände entspricht. An dem Anteil aus $c^3\Pi_u$

wird sehr gut der Einfluß der verschiedenen untersuchten Übergangswahrscheinlichkeiten verdeutlicht: Für sehr hohe Elektronendichten besteht kein Einfluß. Für niedrige Elektronendichten gehen die Besetzungsanteile unabhängig von den gesetzten Übergangswahrscheinlichkeiten gegen Null. Für mittlere Dichten wird $c^3\Pi_u$ bei Verwendung der „neuen A_{ik} “ stärker entvölkert als bei Verwendung der auf Null gesetzten A_{ik} und der Besetzungsanteil ist geringer. Die „alten A_{ik} “ führen zu einer stärkeren Entvölkerung von $c^3\Pi_u$ als die „neuen A_{ik} “ und somit zu einem noch geringeren Besetzungsanteil. Der Besetzungsanteil aus $a^3\Sigma_g^+$ bleibt dagegen bei Variation der A_{ik} konstant.

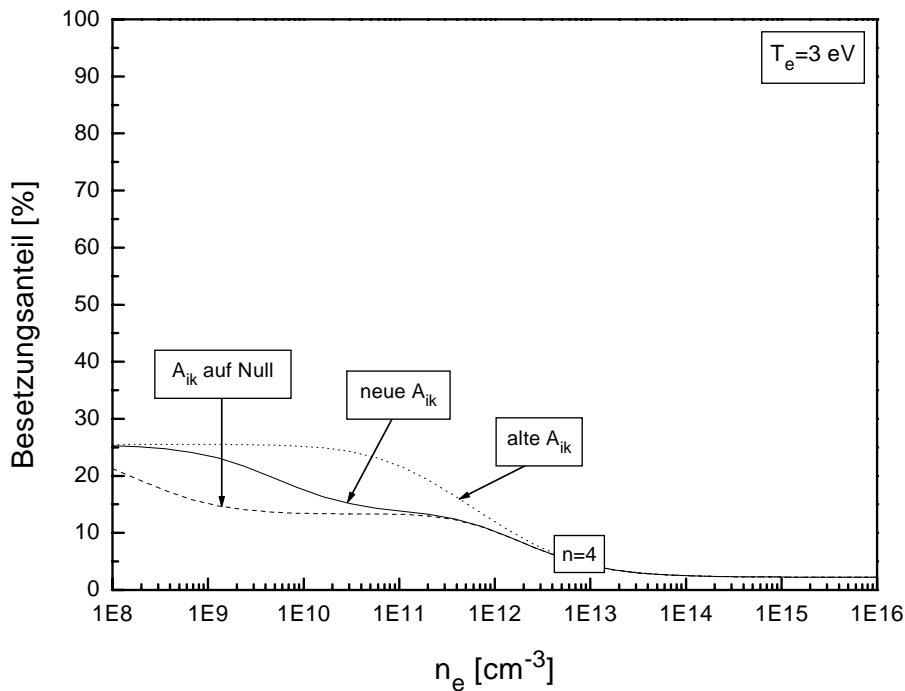


Abbildung 3.4: Relativer Anteil der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ im Triplett-System, der aus Anregung von $n = 4$ aus resultiert.

Abbildung 3.4 zeigt den relativen Verlauf der Besetzung, der aus $n = 4$ stammt. Diese geht für hohe Elektronendichten gegen Null, da die Elektronenstoßionisation mit steigendem n_e immer dominierender wird. Auch hier werden die Abhängigkeiten von den verwendeten A_{ik} sichtbar: Bei starker Entvölkerung von $c^3\Pi_u$ nach $a^3\Sigma_g^+$ steigt der relative aus $n = 4$ stammende Anteil gegenüber dem Fall der auf Null gesetzten Übergangswahrscheinlichkeiten. Die „neuen A_{ik} “ liegen auch hier zwischen den beiden extremen Fällen.

Abbildung 3.5 zeigt zusammenfassend, nur mit den „neuen A_{ik} “ gerechnet, aus welchen Niveaus $n = 3$ wie stark relativ besetzt wird. Hier wird zusätzlich zu den schon in Bildern 3.3 und 3.4 sichtbaren Effekten der mit sinkendem n_e steigende Einfluß des Grundzustands $X^1\Sigma_g^+$ deutlich. Das entspricht einer Annäherung an das Koronamodell, in dem die angeregten Zustände nur vom Grundzustand aus besetzt werden.

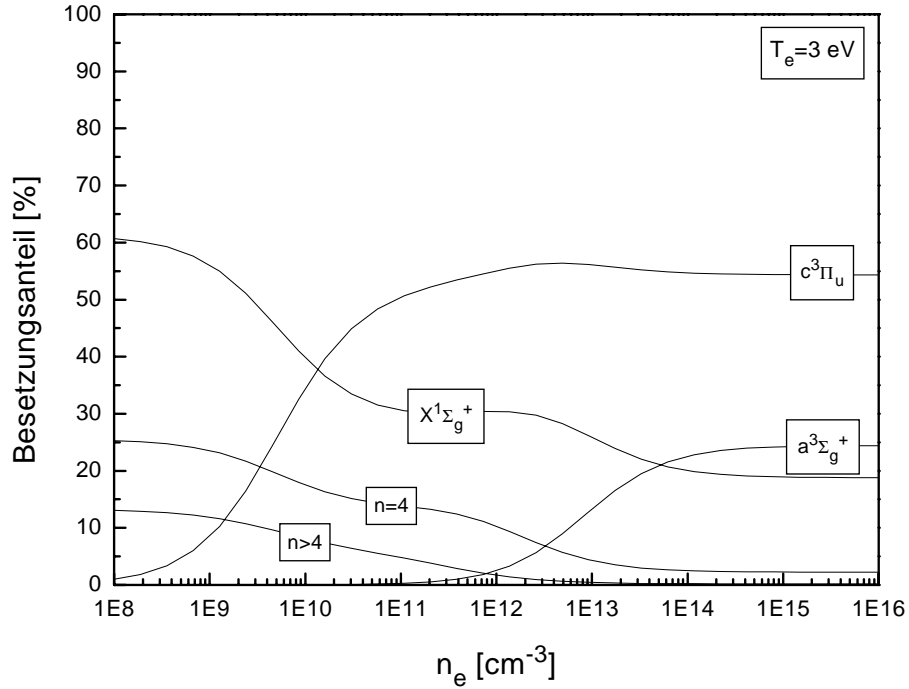


Abbildung 3.5: Relative Anteile der Gleichgewichtsbesetzung von $n = 3$ im Triplett-System, unter Verwendung der „neuen A_{ik} “ gerechnet.

Insgesamt zeigt sich deutlich ein Einfluß des metastabilen Charakters von $c^3\Pi_u$ auf die vom SSM berechneten Besetzungsdichten. Die Modellierung der Übergänge von und zu diesem Zustand muß besonders kritisch betrachtet werden. Eine endgültige Lösung könnte die angesprochene Aufteilung des Zustandes in zwei Zustände sein. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur noch Ergebnisse gezeigt, die unter Verwendung der „neuen A_{ik} “ berechnet wurden. Diese stellen den momentan realistischsten Fall dar.

Übergang zum P-Raum

Es sollen mit Hilfe von Gleichung (3.7) die Mechanismen untersucht werden, die ein Molekülniveau entvölkern. Im Singulett-System ist Abregung durch Strahlung in den Grundzustand $X^1\Sigma_g^+$ möglich, im Triplett-System nicht. Dafür existiert im Triplett-System der repulsive Zustand $b^3\Sigma_u^+$, über den Moleküle dissoziieren können.

Um diese Unterschiede zu verdeutlichen, wurde die Untersuchung für die Zustände $n = 3$ in beiden Systemen durchgeführt. Die Matrix \mathbf{H}_m mit den Ratenkoeffizienten für den Übergang vom Molekül in den P-Raum wurde für die Kopplung an den molekularen Wasserstoff im Grundzustand, das H_2^+ -Ion, und den atomaren Wasserstoff erstellt. Kopplung an den atomaren Wasserstoff bedeutet Dissoziation in zwei Atome. Diese kann entweder direkt über den Zustand $b^3\Sigma_u^+$ oder über höher angeregte Zustände erfolgen.

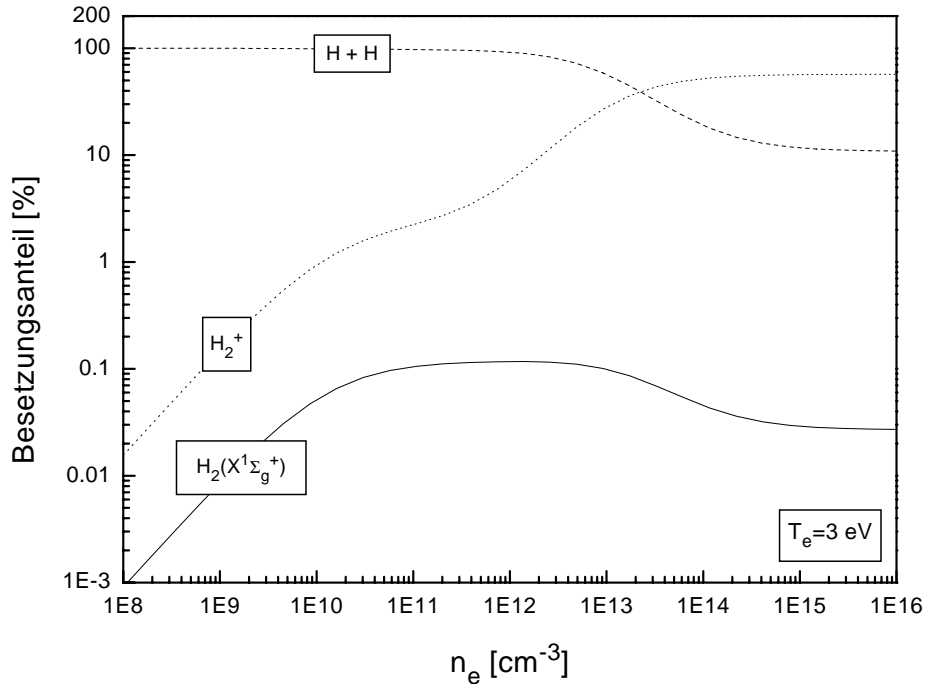


Abbildung 3.6: Anteile einer gegebenen Anfangsbesetzung von $n = 3$ im Triplettsystem, die in verschiedene Teilchen des P -Raums übergehen.

In Abbildung 3.6 sind die Ergebnisse für $n = 3$ im Triplettsystem dargestellt. Für kleine Elektronendichten spielt Dissoziation eine dominierende Rolle. Die Beiträge von Ionisation und Abregung in den Grundzustand liegen um Größenordnungen darunter. Mit steigender Elektronendichte nehmen die Wahrscheinlichkeiten für Elektronenstoßionisation und für Stoßabregung in den Grundzustand zu. Ab einem n_e von etwa 10^{12} cm^{-3} nimmt der Anteil der Ionisation so stark zu, daß die Anteile für Dissoziation und Übergang in den Grundzustand abnehmen. Für Elektronendichten ab 10^{13} cm^{-3} ist die Ionisation der dominierende entvölkernde Prozess.

Im Singulett-System ist die Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ nicht möglich, da das SSM keine Übergänge zwischen den beiden Spinsystemen mit einbezieht. Stattdessen ist der Übergang in den Grundzustand nicht nur über Elektronenstoß sondern auch über spontane Emission erlaubt. Somit ist zu erwarten, daß nicht wie im Triplettsystem, die Dissoziation der dominierende Prozess ist, sondern die Abregung in den Grundzustand. Abbildung 3.7 zeigt die Ergebnisse für $n = 3$ im Singulett-System. Für niedrige Elektronendichten geht die gegebene Besetzung fast vollständig in den Grundzustand des Moleküls über. Der in das Atom und das Ion gehende Anteil ist um Größenordnungen geringer, steigt aber mit steigendem n_e steil an. Ab einer Elektronendichte von etwa 10^{13} cm^{-3} flacht dieser Anstieg ab, und ab 10^{14} cm^{-3} verlaufen die beiden Kurven fast waagrecht. Der radiative Anteil des Übergangs in den Grundzustand spielt bei diesen Dichten keine Rolle mehr. Da die Elektronenstoßionisation wahrscheinlicher ist als die

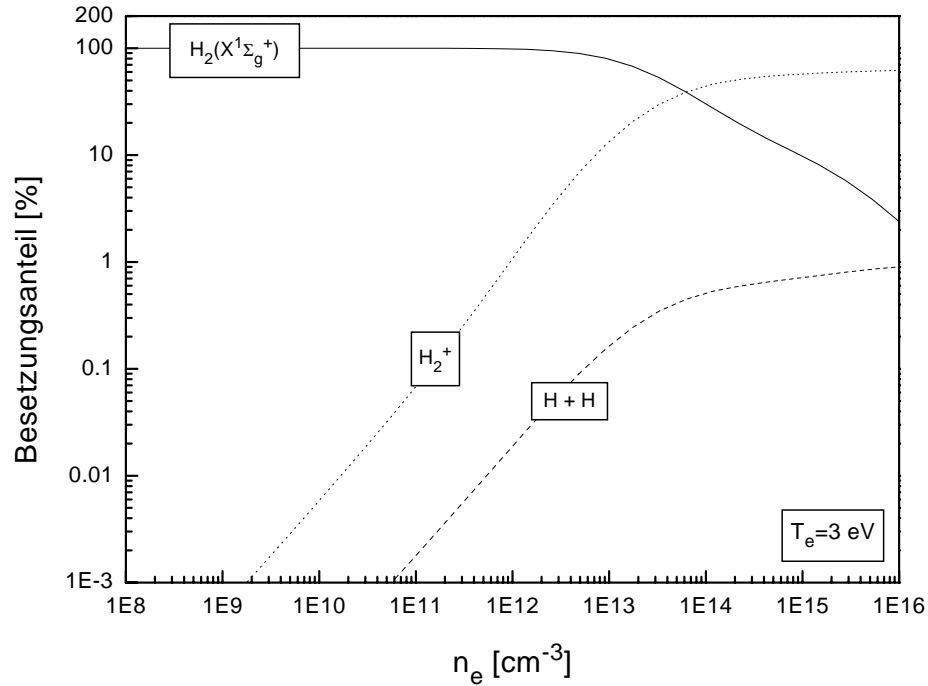


Abbildung 3.7: Anteile einer gegebenen Anfangsbesetzung von $n = 3$ im Singulett-System, die in verschiedene Teilchen des P -Raums übergehen.

Elektronenstoßabregung in den Grundzustand, ist die Ionisation der dominierende entvölkernde Prozess.

3.3 Effektive Ratenkoeffizienten

3.3.1 Motivation

Setzt man effektive Emissionsratenkoeffizienten in die Koronagleichung (Gleichung (2.14)) ein, so erhält man eine Möglichkeit, aus den durch Spektroskopie bestimmten Emissivitäten die Besetzungsdichte des Grundzustandes zu bestimmen:

$$n_0 = \frac{\dot{N}}{n_e X_{eff.}(T_e)} \quad (3.9)$$

Die Bestimmung von n_0 aus der Spektroskopie verschiedener Molekülübergänge sollte identische Ergebnisse liefern. Abbildung 3.8 zeigt ein vereinfachtes Termeschema des molekularen Wasserstoffs mit folgenden fünf ausgewählten Übergängen: Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$), Singulett-Übergang $G^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$, Kontinuum-Übergang ($a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$), Lyman-Übergang ($B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) und Werner-Übergang ($C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$). Diese Übergänge liegen im sichtbaren Wellenlängenbereich bzw. im VUV/UV. Im Folgenden werden für die fünf Übergänge mit dem SSM effektive Emissionsratenkoeffizienten berechnet und mit denen aus einem Koronamodell erhaltenen Emissionsratenkoeffizienten verglichen.

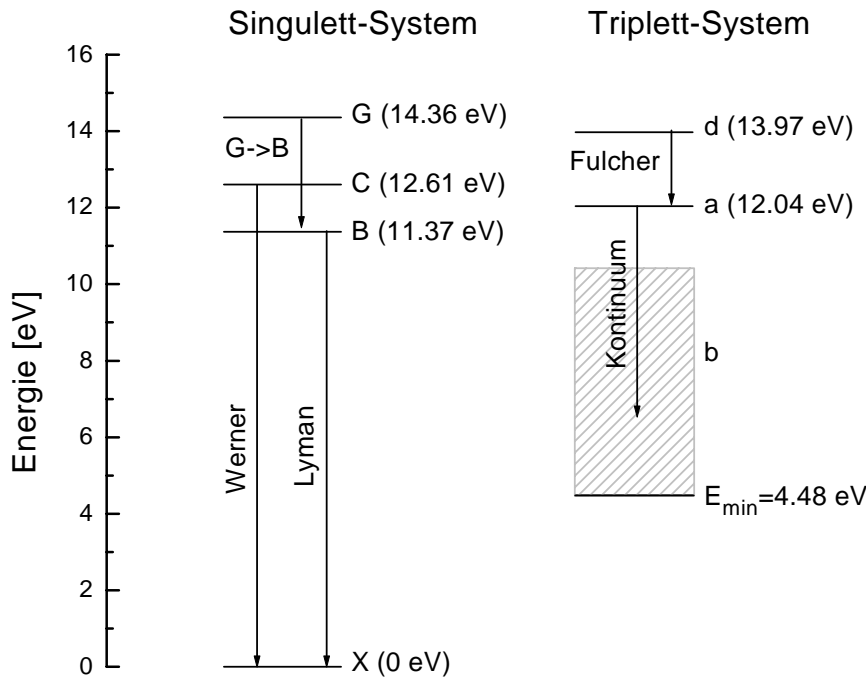


Abbildung 3.8: Vereinfachtes Termschema des Wasserstoffmoleküls mit verschiedenen emissionspektroskopisch beobachtbaren Übergängen.

3.3.2 Abhängigkeiten

Wie in Kapitel 3.2 gezeigt wurde, hängt es empfindlich von der Elektronendichte ab, wie stark ein bestimmter Molekülzustand von anderen Zuständen bevölkert wird. Daraus ergibt sich, daß effektive Ratenkoeffizienten nicht nur, wie die im Koronamodell verwendeten Ratenkoeffizienten, von der Elektronentemperatur abhängen, sondern auch von der Elektronendichte. Dies wird in Abbildung 3.9 am Beispiel des effektiven Emissionsratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$) gezeigt. Eine detaillierte Beschreibung des Fulcher-Übergangs und der Berechnung des effektiven Ratenkoeffizienten ist in Kapitel 3.3.3 gegeben.

Ab $n_e = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ nehmen die Ratenkoeffizienten mit steigender Elektronendichte zunächst zu, um bei $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ und $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ein Maximum zu erreichen. Mit weiter steigender Elektronendichte nehmen die Ratenkoeffizienten wieder ab. Zwischen den Koeffizienten für die Dichte des Niederdruckplasmas ($n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$) und denen für die typischen Dichten des Divertorplasmas ($n_e = 10^{13}$ bis 10^{15} cm^{-3}) liegt im betrachteten Temperaturbereich ein Faktor von 1.9 bis 77 für die beiden Extremfälle des Recyclingregimes. Diese starke Abhängigkeit von der Elektronendichte zeigt, daß es wichtig ist, die im betrachteten Plasma herrschende Elektronendichte zu kennen.

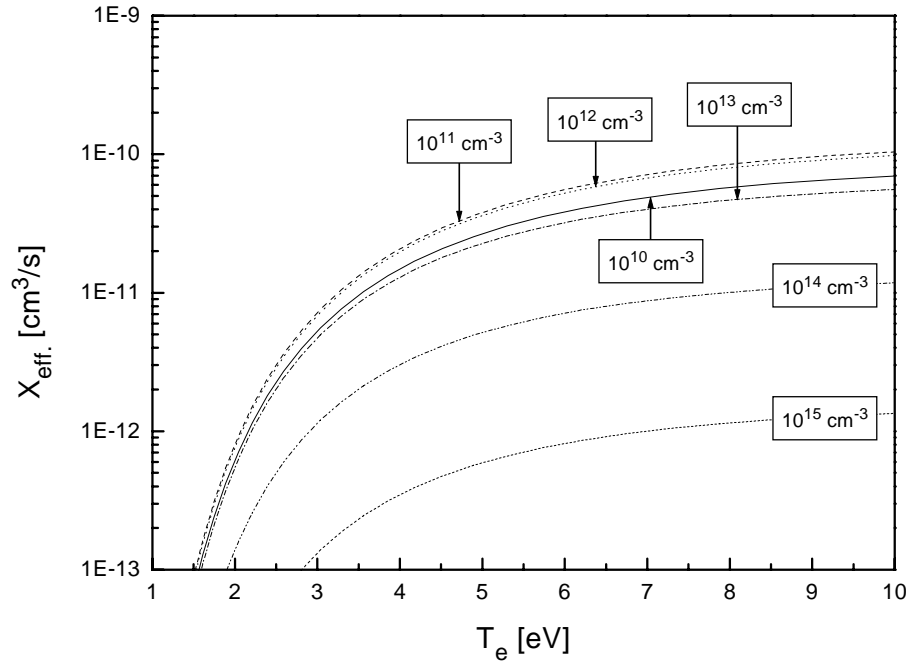


Abbildung 3.9: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$) in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

3.3.3 Ratenkoeffizienten für Molekülübergänge

Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$)

Der Fulcher-Übergang liegt im sichtbaren Wellenlängenbereich zwischen etwa 600 und 650 nm. Es gibt mehrere Schwingungsübergänge, deren Banden im Spektrum teilweise von anderen Übergängen überlagert sind. Die intensivsten dieser Schwingungsübergänge sind die diagonalen Übergänge $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ bis $v' = 5 \rightarrow v'' = 5$. Da der obere Zustand des Fulcher-Übergangs zum nicht elektronisch aufgelösten $n = 3$ gehört, mußte zur Berechnung des effektiven Emissionsratenkoeffizienten nach Formel (2.41) die Besetzung von $n = 3$ mit dem passenden Verhältnis ($\frac{2}{9}$) der statistischen Gewichte (siehe Kapitel 2.3) skaliert werden. Außerdem wurde die zu dem Übergang passende Übergangswahrscheinlichkeit ($2.53 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$) verwendet.

In Abbildung 3.10 sind die berechneten effektiven Ratenkoeffizienten für die Elektronendichten des Niederdruckplasmas und des Divertorplasmas und der in das SSM eingehende Anregungskoeffizient für Elektronenstoß aus dem Grundzustand eingetragen. Dieser stammt aus [Mil72] und wurde mit dem Faktor 2 skaliert (siehe Kapitel 2.4.1). Außerdem ist ein aus von [Möh76] experimentell bestimmten Wirkungsquerschnitten berechneter Ratenkoeffizient eingetragen. Letzterer ist nur für die Summe der vier Schwingungsbänder $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$, $v' = 1 \rightarrow v'' = 1$, $v' = 2 \rightarrow v'' = 2$ und $v' = 3 \rightarrow v'' = 3$ gegeben und wurde mit dem in [Fan98] bestimmten Faktor $\frac{50}{19.1}$ skaliert, um einen für den gesamten

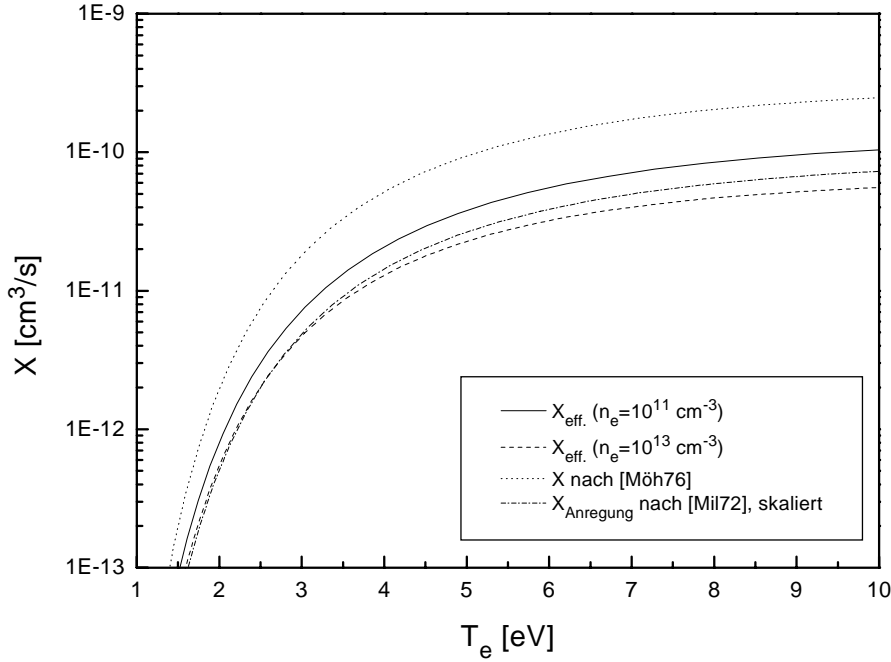


Abbildung 3.10: Emissionsratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$) in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

Übergang gültigen Ratenkoeffizienten zu erhalten. Für die in Divertorplasmen herrschenden Elektronendichten liegt der effektive Emissionsratenkoeffizient unterhalb der Anregungsratenkoeffizienten, für Niederdruckplasmen darüber. Grund dafür sind die den Zustand $d^3\Pi_u$ abregende Elektronenstoßprozesse, die mit steigendem n_e wahrscheinlicher werden.

Zwischen dem eingehenden Ratenkoeffizienten nach [Mil72] und dem Ratenkoeffizienten nach [Möh76] liegt ein Faktor von maximal 3.8. Dieser Faktor verdeutlicht die Unsicherheit der in das SSM eingehenden Ratenkoeffizienten.

Singulett-Übergang $G^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$

Der Übergang $G^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$ besitzt die spektroskopisch gut beobachtbare Schwingungsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$. Diese liegt etwa zwischen 462 und 467 nm. Da der obere Zustand dieses Übergangs zum nicht elektronisch aufgelösten $n = 3$ gehört, mußten auch hier zur Berechnung des effektiven Emissionsratenkoeffizienten das Verhältnis der statistischen Gewichte ($\frac{1}{9}$) und die zu dem Übergang passende Übergangswahrscheinlichkeit verwendet werden. Diese beträgt $4.69 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$. Für diesen Übergang liegt zum Vergleich ein experimentell bestimmter Wirkungsquerschnitt nach [Day79] vor. Dieser ist für die Summe der Linien $R2$, $R3$ und $P1$ der Schwingungsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ gegeben.

Um einen Vergleich des aus diesem Querschnitt erhaltenen Ratenkoeffizienten mit den durch das SSM berechneten effektiven Ratenkoeffizienten zu ermöglichen, muß auf die gesamte Vibrationsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ skaliert werden.

In [Day79] sind Anregungsquerschnitte σ für die einzelnen Rotationszustände gegeben, aber nur für eine Elektronenenergie und nur bis zur Rotationsquantenzahl $J' = 8$ des oberen elektronischen Zustands. Da die höheren Rotationszustände schwach besetzt sind, wird angenommen, daß die gesamte Vibrationsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ von den oberen Rotationszuständen $J' = 0 \dots 8$ ausgeht. Somit konnte mit Hilfe der Anregungsquerschnitte aus [Day79] der vorhandene Ratenkoeffizient nach [Day79] von den gegebenen drei Linien auf den gesamten R-Zweig skaliert werden. Dazu wurden die Anregungsquerschnitte für die einzelnen Rotationszustände aufsummiert und daraus folgendes Verhältnis gebildet:

$$f_1 = \frac{\sum_{R\text{-Zweig}} \sigma}{\sigma(R1, R3, P1)} = 2.23 \quad (3.10)$$

Um einen Faktor für die Skalierung des R-Zweigs auf die gesamte Vibrationsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ zu erhalten, wurden die Hönl-London-Faktoren für diesen elektronischen Übergang aus [Her53] verwendet. Nach diesen Faktoren ergeben sich für einen Übergang mit $\Delta\Lambda = 0$ die theoretischen Linienstärken S der Linien des P -, Q - bzw. R -Zweigs zu:

$$S_P = \frac{(J' + \Lambda')(J' - \Lambda')}{J'} \quad (3.11)$$

$$S_Q = \frac{(1J' + 1)\Lambda'^2}{(J' + \Lambda')J'} \quad (3.12)$$

$$S_R = \frac{(J' + 1 + \Lambda')(J' + 1 - \Lambda')}{J' + 1} \quad (3.13)$$

Da der obere Zustand ein Σ -Zustand ist, gilt: $\Lambda' = 0$ und die Formeln vereinfachen sich zu:

$$S_P = J'; \quad S_Q = 0; \quad S_R = J' + 1; \quad (3.14)$$

Unter Berücksichtigung der oberen Rotationszustände bis $J' < 9$ ergibt sich folgender Skalierungsfaktor:

$$f_2 = \frac{\sum_{J' < 9} S_P + S_R}{\sum_{J' < 9} S_R} = 2.25 \quad (3.15)$$

Zusammengenommen erhält man folgenden Faktor zur Skalierung des Ratenkoeffizienten für die Linien $R2, R3$ und $P1$ auf einen Koeffizienten für die Vibrationsbande $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$:

$$f = f_1 \cdot f_2 = 5.02 \quad (3.16)$$

Eine Skalierung des so erhaltenen Ratenkoeffizienten für $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ auf den gesamten Übergang ist aufgrund fehlender Franck-Condon-Faktoren nicht möglich.

Abbildung 3.11 zeigt die aus den Rechnungen erhaltenen effektiven Emissionsratenkoeffizienten im Vergleich mit dem Anregungsratenkoeffizienten nach [Mil72]

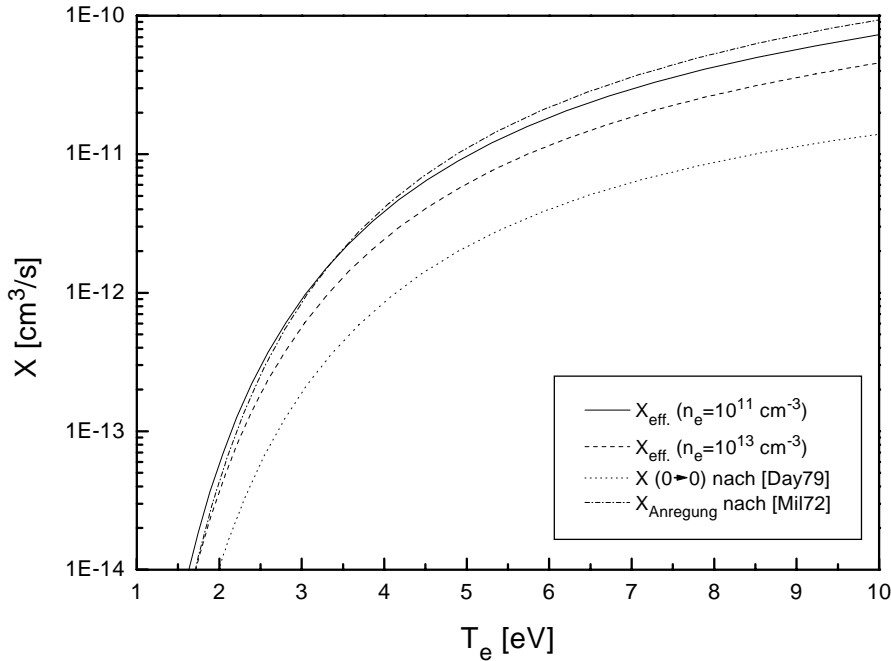


Abbildung 3.11: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für den Übergang $G^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$ in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

und den auf $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ skalierten Literaturwerten. Die effektiven Koeffizienten, die für den gesamten Übergang gelten, liegen um einen Faktor von maximal 2.8 oberhalb des Literaturwerts. Im Gegensatz zum Fulcher-Übergang liegen hier die effektiven Ratenkoeffizienten für die beiden Elektronendichten unterhalb des Anregungskoeffizienten. Die effektiven Ratenkoeffizienten zeigen mit der Elektronendichten eine vergleichbare Tendenz wie die Ratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang.

Kontinuum-Übergang ($a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$)

Die Strahlung des Kontinuum-Übergangs liegt im Wellenlängenbereich von 120 bis 600 nm. Der intensivste Teil der Strahlung tritt dabei zwischen 190 und 400 nm auf. Ist die Emissivität dieses intensivsten Teils bekannt, so lässt sich, wie in [Fan00] gezeigt, auf die Emissivität der gesamten Bande skalieren.

Abbildung 3.12 zeigt die berechneten Ratenkoeffizienten im Vergleich mit dem Anregungsratenkoeffizienten nach [Mil72] und einem aus [Lim88] stammenden, theoretisch bestimmten Koeffizienten.

Die effektiven Ratenkoeffizienten zeigen mit der Elektronendichten eine vergleichbare Tendenz wie die Ratenkoeffizienten für den Fulcher-Übergang.

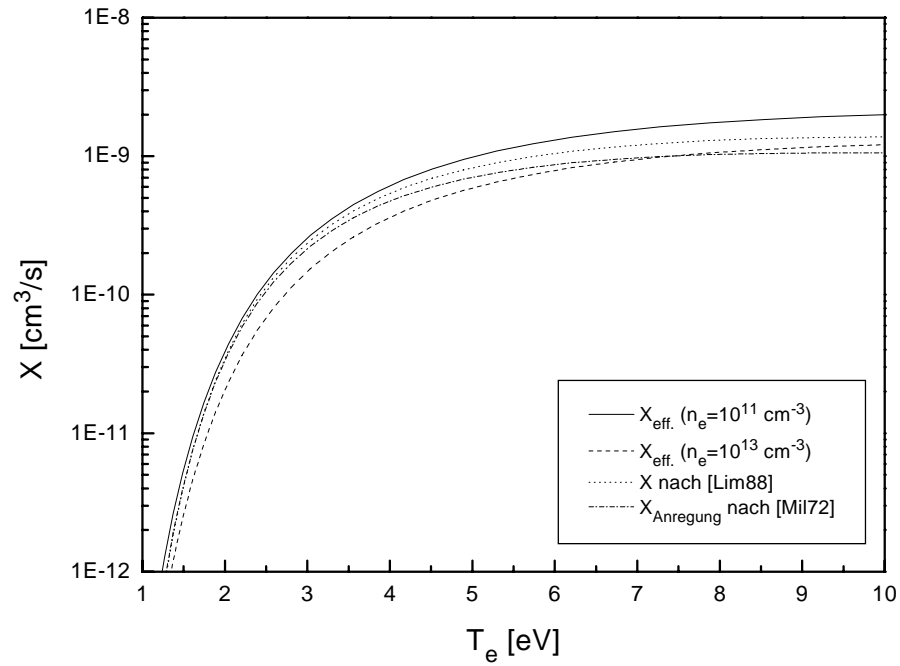


Abbildung 3.12: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für den Kontinuum-Übergang ($a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$) in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

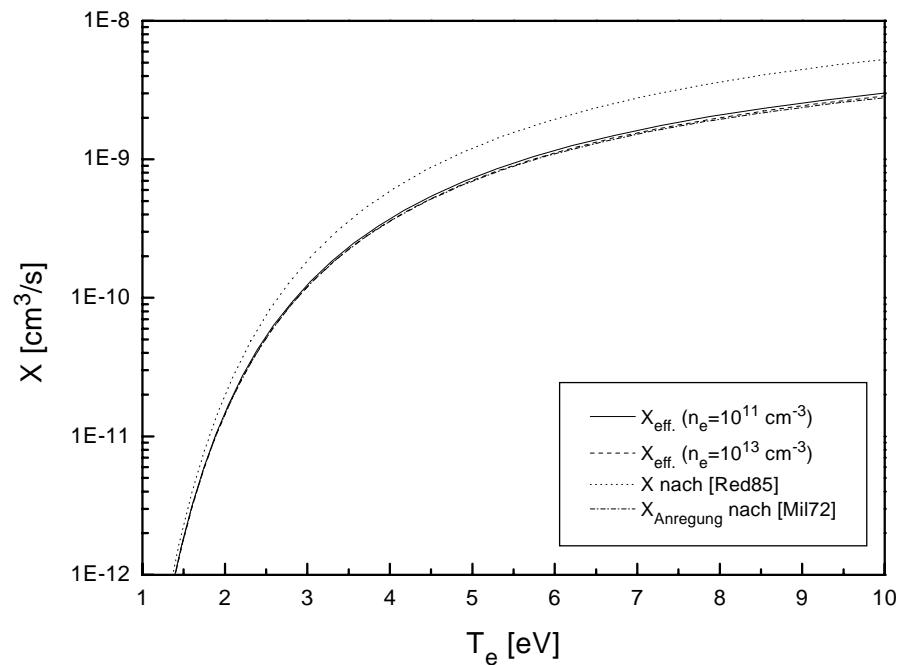


Abbildung 3.13: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für den Lyman-Übergang ($B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

Lyman-Übergang ($B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$)

Alle Vibrationsübergänge des Lyman-Systems liegen im Wellenlängenbereich von 130 bis 165 nm. In Abbildung 3.13 werden die berechneten effektiven Ratenkoeffizienten für diesen Übergang und der Anregungsratenkoeffizient aus [Mil72] dargestellt. Der zum Vergleich genommene Emissionsratenkoeffizient wurde von [Red85] theoretisch bestimmt.

Die effektiven Ratenkoeffizienten zeigen eine vernachlässigbar geringe Abhängigkeit von der Elektronendichte. Außerdem weichen sie nur minimal von dem Anregungsratenkoeffizienten ab. Grund dafür ist die hohe Wahrscheinlichkeit ($1.87 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$) für spontane Emission von $B^1\Sigma_u^+$ in den Grundzustand. Alle weiteren den Zustand $B^1\Sigma_u^+$ entvölkernden Prozesse sind vergleichsweise schwach. Somit unterscheidet sich die Lösung des Ratengleichungs-Systems (Gleichung (2.34)) nicht sehr von der Lösung der Bilanz des Koronagleichgewichts, also dem Anregungsratenkoeffizienten.

Werner-Übergang ($C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$)

Der Werner-Übergang liegt im ultravioletten Wellenlängenbereich zwischen 116 und 130 nm. Abbildung 3.14 zeigt die effektiven Ratenkoeffizienten, den Anregungsratenkoeffizienten nach [Mil72] und einen theoretisch bestimmten Emissionsratenkoeffizienten nach [MuT82].

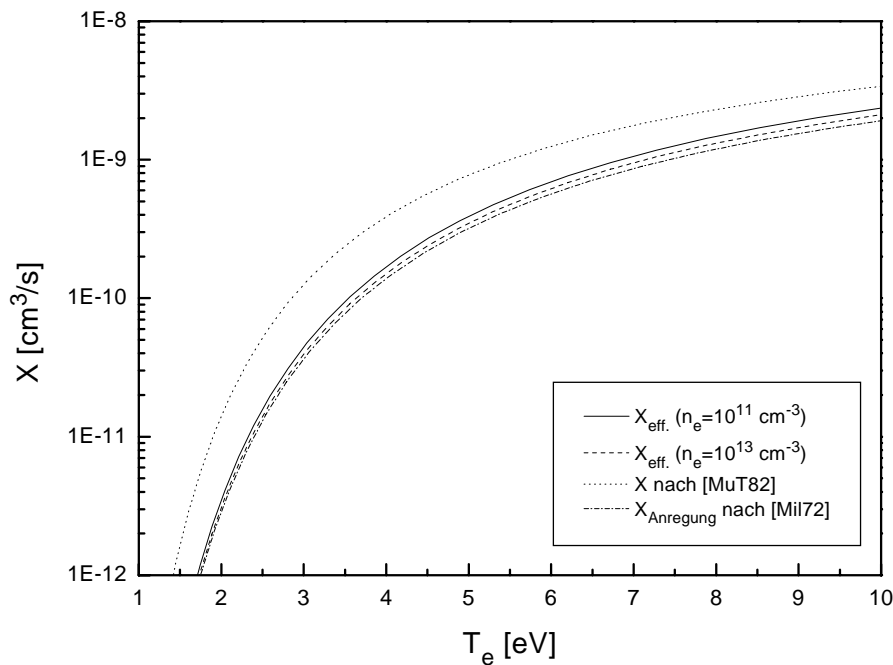


Abbildung 3.14: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für den Werner-Übergang in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.

Die effektiven Ratenkoeffizienten zeigen eine geringe Variation mit der Elektro-

nendichte und unterscheiden sich kaum vom Anregungsratenkoeffizienten. Grund für diese geringen Abweichungen ist, ähnlich wie beim Lyman-Übergang, die hohe Wahrscheinlichkeit ($1.18 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$) für spontane Emission von $C^1\Pi_u$ in den Grundzustand. Da der Zustand $C^1\Pi_u$ energetisch höher liegt, als der Zustand $B^1\Sigma_u^+$, ergibt sich eine weniger starke Annäherung an das Koronagleichgewicht als beim Lyman-Übergang. Als Folge weichen die effektiven Emissionsratenkoeffizienten für den Werner-Übergang etwas stärker von dem Anregungsratenkoeffizienten als die für den Lyman-Übergang.

Zusammenfassung

Die effektiven Emissionsratenkoeffizienten zeigen verschiedene Abhängigkeiten von der Elektronendichte n_e . Für alle betrachteten Übergänge zeigen die in das SSM eingehenden Ratenkoeffizienten große Abweichungen zu den aus der Literatur stammenden Vergleichsdaten. Dies verdeutlicht das Problem der Wahl der eingehenden Ratenkoeffizienten für das SSM.

3.3.4 Diagnostik für Niederdruckplasmen

Die mit dem SSM bestimmten effektiven Ratenkoeffizienten sollen dazu verwendet werden, für das Niederdruckplasma die Besetzungsdichte des Wasserstoffmoleküls im Grundzustand zu bestimmen. Die nötigen spektroskopischen Messungen wurden im Rahmen von Diplomarbeiten ([Heg98], [Kot99]) an Wasserstoff-Helium-Mischplasmen durchgeführt. Dabei wurde ein Spektrometer für den sichtbaren Wellenlängenbereich und ein UV-Spektrometer verwendet. In [Wün99] wurden die Ergebnisse dieser Messungen zusammengetragen und neu ausgewertet. Dabei wurde auf eine Vergleichbarkeit der verwendeten Emissivitäten geachtet. Dies wurde durch Skalieren der mit den beiden Spektrometern gemessenen Emissivitäten auf eine identische Detektorfläche erreicht. Die so erhaltenen Emissivitäten wurden in die nach der Grundzustandsdichte aufgelöste Gleichung (2.14) eingesetzt:

$$n_0 = \frac{\dot{N}}{n_e X_{eff}(T_e)} \quad (3.17)$$

Abbildung 3.15 zeigt Ergebnisse der Rechnungen für das Mischplasma 10 % H_2 , 90 % He in Abhängigkeit vom Druck. Zum Vergleich sind die aus der Massenspektrometrie erhaltenen Moleküldichten mit eingezeichnet.

Die Kurven, die idealerweise aufeinander liegen sollten, zeigen unterschiedlich starke Abweichungen von der Dichte, die mit dem kalibrierten Massenspektrometer bestimmt wurde. Vernachlässigt man die Ergebnisse aus dem Werner-Übergang, dessen Emissivität aufgrund der geringen Wellenlänge mit dem vorhandenen UV-Spektrometer nur ungenau bestimmt werden kann, reduzieren sich die Abweichungen zu den aus der Massenspektrometrie bestimmten Werten auf einen maximalen Faktor von 2.6.

Ursache für diese Abweichungen können einerseits Fehler bei der experimentellen Bestimmung der Emissivitäten sein. Diese können von der Kalibrierung der

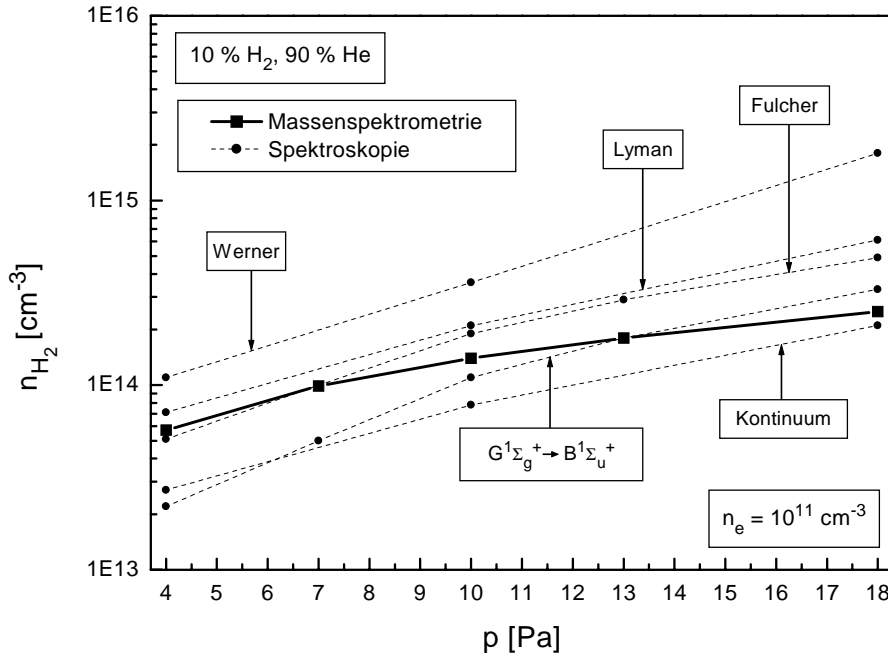


Abbildung 3.15: Aus der Strahlung verschiedener Molekülübergänge bestimmte Grundzustandsbesetzungsdichten. Zum Vergleich sind Ergebnisse aus der Massenspektrometrie mit eingezeichnet.

Spektrometer, über die Messung, bis zur Auswertung vielfältige Ursachen haben. Die Fehler in der Bestimmung der Emissivitäten sollten aber zum einen keine Abhängigkeit vom Druck zeigen und zum anderen höchstens 25 % betragen.

Andererseits können auch die mit dem SSM berechneten effektiven Ratenkoeffizienten Ungenauigkeiten beinhalten. Ein entscheidender Faktor dabei ist die Qualität der in das SSM eingehenden Daten. Als Beispiel soll der Fulcher-Übergang dienen: Wie in Kapitel 3.3.3 gezeigt wurde, liegt für diesen Übergang der Ratenkoeffizient nach [Möh76] um einen Faktor 3.8 über den in das SSM eingehenden Ratenkoeffizienten nach [Mil72]. Die Verwendung eines dementsprechend höheren eingehenden Ratenkoeffizienten resultiert in einen höheren effektiven Ratenkoeffizienten. Im Fall des Fulcher-Übergangs führt dies zu einer niedrigeren Grundzustandsdichte in Abbildung 3.15. Ein Austauschen der Anregungsratenkoeffizienten im SSM ist allerdings erst dann sinnvoll, wenn diese für alle Zustände in $n = 2$ und $n = 3$ aus einer Literaturquelle vorliegen und wurde daher im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt.

Zudem wird die in Kapitel 2.4 angesprochene fehlende vollständige Auflösung nach Vibrationszuständen bzw. elektronischen Zuständen auch Auswirkungen auf die effektiven Ratenkoeffizienten haben.

3.3.5 Diagnostik für Divertorplasmen

In Divertorplasmen von Fusionsexperimenten werden üblicherweise keine Teilchendichten bestimmt, sondern Teilchenflüsse. Ein Fluß entspricht der Anzahl von Teilchen, die pro Zeiteinheit durch eine bestimmte Fläche treten. Eine Methode zur Bestimmung des H_2 -Flusses im Plasma über Messung des aus einem optischen Übergang resultierenden Photonenflusses soll hier vorgestellt werden. Allgemein lassen sich Strömungen durch ein vektorielles Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} charakterisieren. In Kombination mit der Teilchendichte ρ ergibt sich aus dem Geschwindigkeitsfeld die Stromdichte \mathbf{j} :

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v} \quad (3.18)$$

Der Satz von Gauß sagt aus:

$$\Gamma = \iint_{\mathbf{A}'} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} = \iiint_{V'} \operatorname{div} \mathbf{j} \, dV \quad (3.19)$$

Dabei ist Γ der Fluß durch die Fläche \mathbf{A}' .

Im Divertor wird molekularer Wasserstoff ausschließlich durch Rekombination von Atomen oder Ionen an der Wand gebildet. Auf dem Weg von der Wand in das Innere des Plasmas werden die Moleküle durch Ionisation und Dissoziation vernichtet. Bei Untersuchung des molekularen Wasserstoffflusses Γ_{H_2} in geringer Entfernung von der Wand können also Ionisation und Dissoziation von H_2 als Senke in einer molekularen Wasserstoffströmung behandelt werden.

Es gilt also für die Stromdichte im Inneren des betrachteten Volumens:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = (S(T_e) + D(T_e)) \cdot n_e n_0 \quad (3.20)$$

In Verbindung mit Gleichung (3.19) folgt daraus:

$$\Gamma_{H_2} = \iiint_{V'} (S(T_e) + D(T_e)) \cdot n_e n_0 \, dV \quad (3.21)$$

Im selben Volumen V' wird auch durch Molekülübergänge Strahlung frei:

$$\Gamma_{Ph.} = \iiint_{V'} n_0 n_e X_{em}(T_e) \, dV \quad (3.22)$$

Dabei ist $\Gamma_{Ph.}$ der Fluß der das Volumen verlassenden Photonen, die aus einem Übergang resultieren und entspricht der Anzahl der im Volumen entstandenen Photonen. Aus Gleichung (3.22) folgt:

$$1 = \frac{\iiint_{V'} n_0 n_e X_{em}(T_e) \, dV}{\Gamma_{Ph.}} \quad (3.23)$$

Die Gleichungen (3.21) und (3.23) lassen sich zusammenfassen zu:

$$\Gamma_{H_2} = \frac{\iiint_{V'} (S(T_e) + D(T_e)) \cdot n_e n_0 \, dV}{\iiint_{V'} n_0 n_e X_{em}(T_e) \, dV} \cdot \Gamma_{Ph.} \quad (3.24)$$

Unter der Annahme, daß die Ratenkoeffizienten $S(T_e)$, $D(T_e)$ und $X_{em}(T_e)$ im Integrationsvolumen ungefähr konstant sind, kann man sie vor die Integrale ziehen und die restlichen Integrale kürzen. Somit ergibt sich als Endergebnis für den molekularen Wasserstofffluß:

$$\Gamma_{H_2} \approx \frac{(S(T_e) + D(T_e))}{X_{em}(T_e)} \cdot \Gamma_{Ph}. \quad (3.25)$$

Diese Formel wurde für den gesamten Raumwinkel hergeleitet, kann aber bei Annahme einer über den Raumwinkel homogenen Verteilung der Flüsse Γ_{H_2} und Γ_{Ph} , auch bei Betrachtung eines kleinen Teils des Raumwinkels, beispielsweise eines bei der Spektroskopie benutzten Sichtstrahls, verwendet werden.

Die Ratenkoeffizienten $S(T_e)$, $D(T_e)$ und $X_{em}(T_e)$ lassen sich mit dem SSM berechnen, der Photonenfluß Γ_{Ph} wird experimentell bestimmt. Somit bietet diese Methode eine Möglichkeit zur Bestimmung des molekularen Wasserstoffflusses, ohne dabei die Kenntnis genauerer Daten über den Fluß, wie beispielsweise der Geschwindigkeit der Atome, vorauszusetzen.

Da, wie in Kapitel 3.3.3 beschrieben, der Fulcher-Übergang intensiv strahlt und wenig überlagert ist, wird er im Divertor von Fusionsexperimenten für die hier beschriebene Diagnostik verwendet. In Formel (3.25) wird für $X_{em}(T_e)$ das mit dem SSM berechnete $X_{eff.}(T_e)$ für den Fulcher-Übergang und für Γ_{Ph} der experimentell bestimmte Fluß von aus dem Fulcher-Übergang resultierenden Photonen eingesetzt.

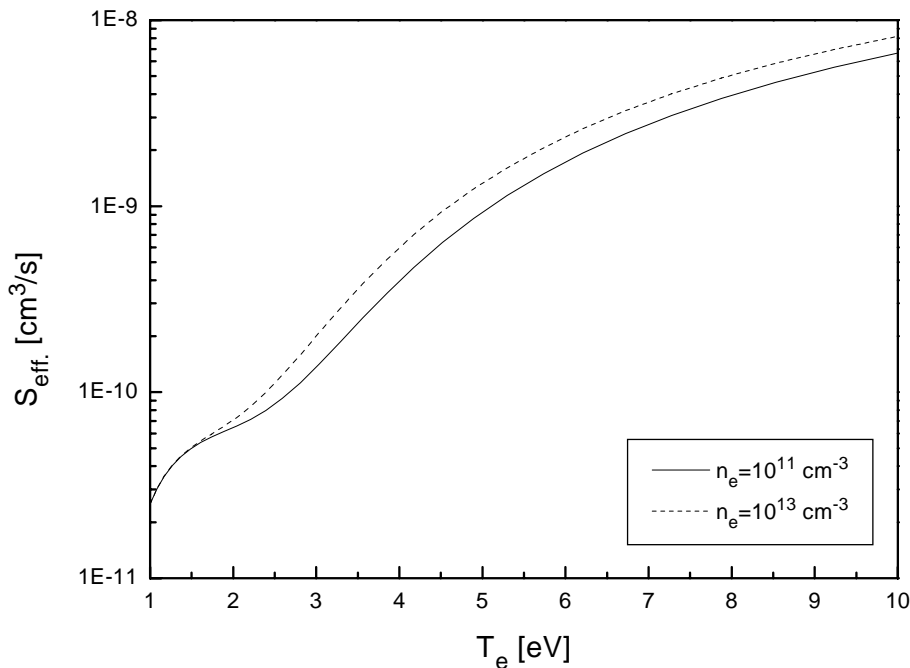
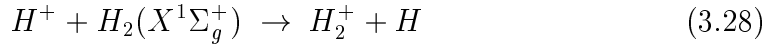
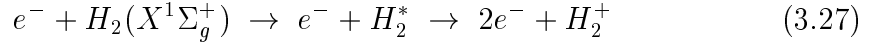
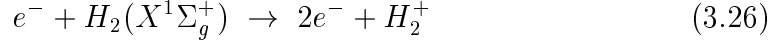


Abbildung 3.16: Effektiver Ionisationsratenkoeffizient $S_{eff.}(T_e)$ für zwei Elektronendichten.

Abbildung 3.16 zeigt den mit dem SSM für für zwei Elektronendichten berechneten effektiven Ionisationsratenkoeffizienten $S_{eff.}(T_e)$. Bei der Berechnung wurden

folgende ionisierende Prozesse berücksichtigt:



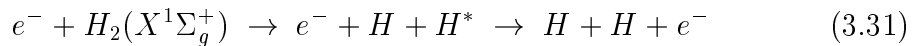
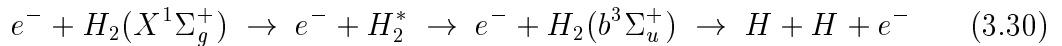
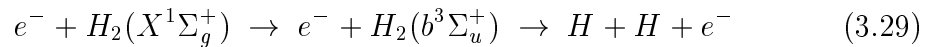
Die Ratenkoeffizienten für Reaktion (3.26) und Reaktion (3.28) stammen aus [Jan87], der Ratenkoeffizient für Reaktion (3.27) ist der mit dem SSM berechnete effektive Koeffizient S'_{eff} . (siehe Gleichung (2.42)).

Reaktion (3.28), der Ladungsaustausch ist nicht von T_e , sondern von der Energie der beiden beteiligten Stoßpartner abhängig. Diese Abhängigkeit war im SSM nicht gegeben, wurde aber im Rahmen dieser Arbeit hinzugefügt. Der dabei verwendete Fit ist für Energien von 0.1 eV bis 20 keV gültig. Im betrachteten Plasma liegt die Neutralteilchenenergie unterhalb von 0.1 eV, daher wird in die Fitformel 0.1 eV für die Energie der Wasserstoffmoleküle eingesetzt. Die Energie der Ionen entspricht der Elektronenenergie und damit der Elektronentemperatur. Es wurde angenommen, daß $n(H^+)$ gleich der Elektronendichte ist.

Für beide Elektronendichten zeigt der Ratenkoeffizient für kleine Elektronentemperaturen ein abflachendes Verhalten. Grund dafür ist der Ladungsaustausch. Die Ratenkoeffizienten für diesen Prozeß variieren bei Änderung von T_e nur schwach (siehe Abbildung 4.9). In Kombination mit einer starken Abnahme der Ratenkoeffizienten für die Prozesse (3.26) und (3.27) bei kleinen T_e resultiert daraus eine Dominanz des Ladungsaustauschs für niedrige T_e .

Der Ionisationsratenkoeffizient für $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ liegt über dem für $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, da die Elektronendichte linear in die Wahrscheinlichkeit für die Prozesse (3.26) und (3.27) eingeht.

In Bild 3.17 ist der berechnete effektive Dissoziationsratenkoeffizient für beide n_e abgebildet. Bei der Berechnung wurden folgende Prozesse berücksichtigt:



Der Ratenkoeffizient für Reaktion (3.29) stammt aus [Mil72], der Koeffizient für Reaktion (3.31) aus [Saw93]. Der Ratenkoeffizient für Reaktion (3.30) ist ein mit dem SSM berechneter effektiver Koeffizient.

Bei den Dissoziationsratenkoeffizienten zeigt sich eine vernachlässigbare Abhängigkeit von der Elektronendichte.

Abbildung 3.18 zeigt mit dem SSM berechnete Ergebnisse für $(S_{eff} + D_{eff})/X_{eff}$ für den Fulcher-Übergang bei verschiedenen Elektronendichten. Es zeigt sich eine sehr starke T_e -Abhängigkeit für kleine Elektronentemperaturen. Dies resultiert aus dem flachen Verlauf des effektiven Ionisationskoeffizienten bei diesen Temperaturen. Für höhere T_e zeigt $(S_{eff} + D_{eff})/X_{eff}$ einen flacheren Verlauf. Zwischen

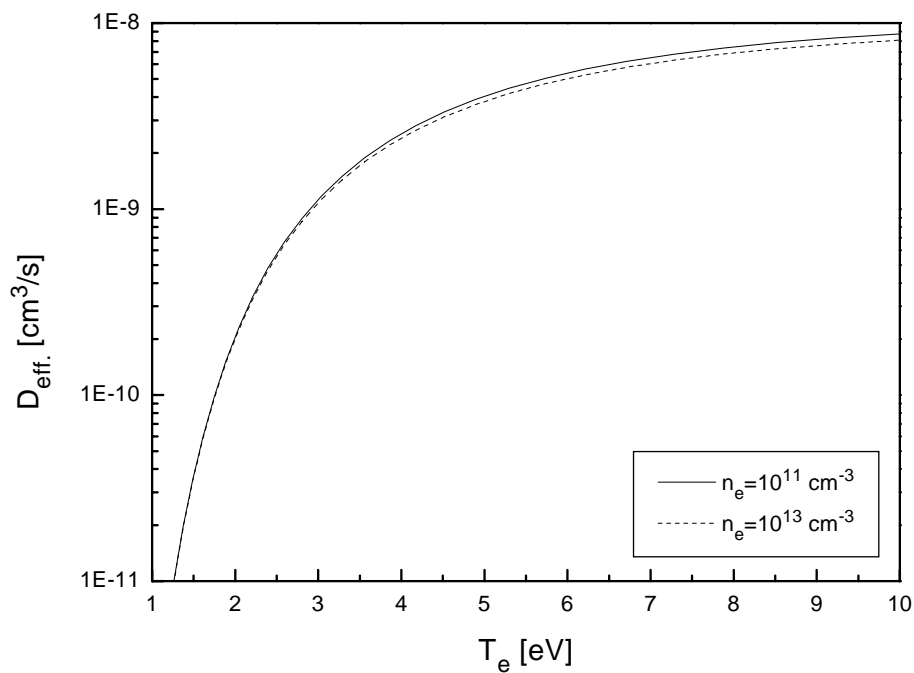


Abbildung 3.17: Effektiver Dissoziationsratenkoeffizient $D_{eff.}(T_e)$ für zwei Elektronendichten.

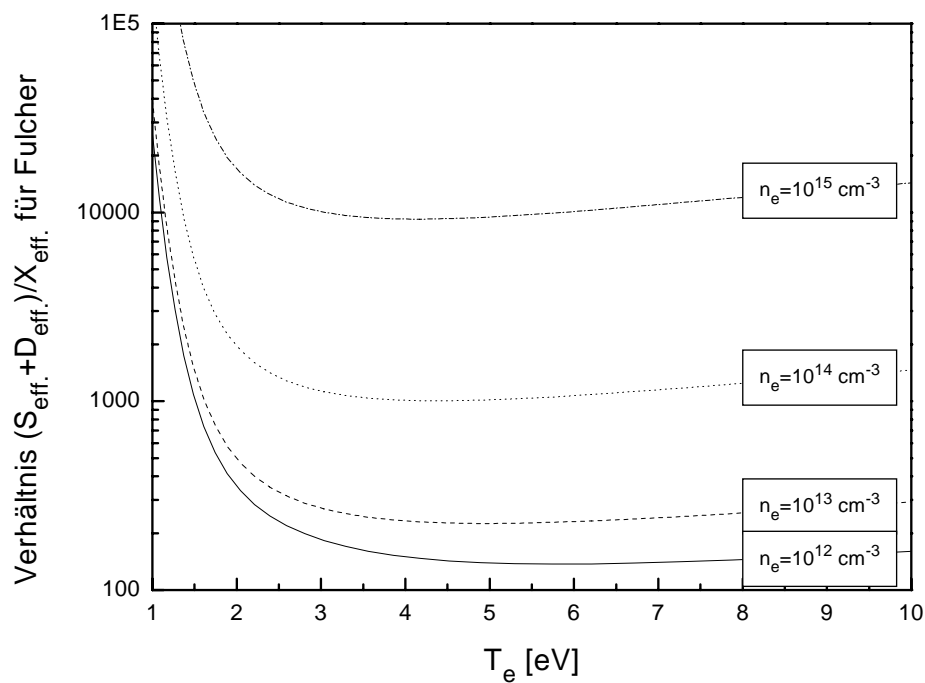


Abbildung 3.18: Verhältnis $(S_{eff.} + D_{eff.})/X_{eff.}$ für den Fulcher-Übergang bei verschiedenen Elektronendichten.

den Kurven für die unterschiedlichen Elektronendichten liegen Faktoren von mehreren Größenordnungen. Für die Bestimmung von molekularen Wasserstoffflüssen im Divertorplasma ist also eine genaue Kenntnis von T_e und n_e ein entscheidender Faktor, da diese beiden Parameter über einen weiten Bereich variieren können.

3.4 Untersuchungen am atomaren Wasserstoff

3.4.1 Spektrallinien des Wasserstoffatoms

Für die Energiezustände im Wasserstoffatom gilt:

$$T = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \quad (3.32)$$

Somit gilt für einen Übergang vom f -ten Atomniveau in das i -te:

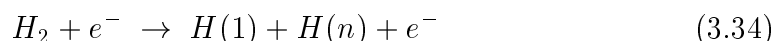
$$\bar{\nu} = R\left(\frac{1}{i^2} - \frac{1}{f^2}\right) \quad (3.33)$$

Für $i = 2$ wurde Gleichung (3.33) im Jahr 1885 von Johann Jakob Balmer aufgestellt. Die nach ihm benannte Balmer-Serie liegt im sichtbaren und nahen ultravioletten Spektralbereich. Die Linien dieser Serie werden mit zunehmendem f als $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, \dots$ bezeichnet. Weitere im Wasserstoffatom auftretende Linienserien sind unter anderem die Lyman-Serie im vakuumultravioletten Wellenlängenbereich mit $i = 1$ und die Paschen-Serie im Infraroten mit $i = 3$.

Abbildung 3.19 zeigt ein vereinfachtes Termschema des atomaren Wasserstoffs mit den im Rahmen dieser Arbeit relevanten Übergängen. Die im Wasserstoffatom durch den Einfluß von Elektronenbahndrehimpuls und Elektronenspin auftretende Aufspaltung der elektronischen Energieniveaus wird im SSM nicht betrachtet.

3.4.2 Zusammensetzung der Strahlung

Die Besetzung in den Niveaus des atomaren Wasserstoffs kommt nicht nur durch Anregung aus dem Grundzustand oder den anderen Zuständen des Atoms zustande, sondern auch durch Anregung vom P-Raum der Teilchen mit langsamer Besetzungsänderung. Ein sehr wichtiger Effekt ist beispielsweise die dissoziative Anregung, das ist die Anregung eines Niveaus im Atom durch Dissoziation eines Moleküls:



Die absolute bzw. relative Besetzung der Teilchen im P-Raum wird dem SSM vom Benutzer vorgegeben. Bei der Berechnung von Besetzungen und effektiven Emissionsratenkoeffizienten für das Atom mit fünf aus dem P-Raum angekoppelten Teilchen ist es nicht trivial, die für das betrachtete Plasmaexperiment korrekte Besetzung dieser Teilchen zu ermitteln. Zudem sind in Niederdruckplasmen und

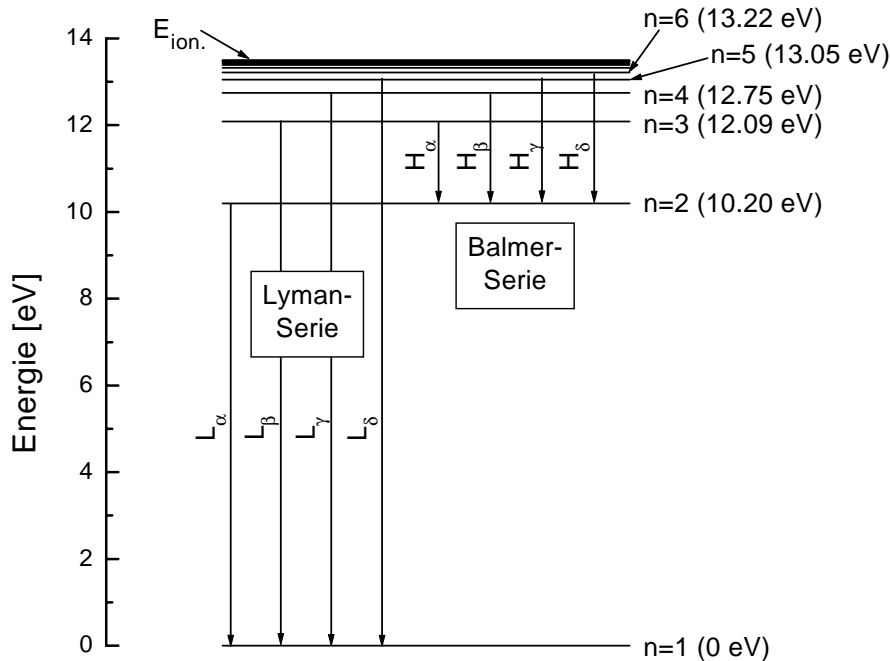


Abbildung 3.19: Vereinfachtes Termschema des Wasserstoffatoms mit der Balmer-Serie und der Lyman-Serie.

Divertorplasmen unterschiedliche Prozesse für das Zustandekommen der Besetzung der angekoppelten Teilchen relevant. Zur Bestimmung der Besetzung der angekoppelten Teilchen wurde in C++ ein Programm mit dem Namen KALLIOPE¹ geschrieben. Dieses Programm berücksichtigt nur die in Niederdruckplasmen relevanten Prozesse. Wichtigster Bestandteil vom KALLIOPE ist die selbstgeschriebene Klasse `rate.cpp`. Diese bietet mit Hilfe von dynamisch angelegten Listen einen einfachen In- und Output für Ratenkoeffizienten.

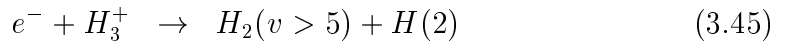
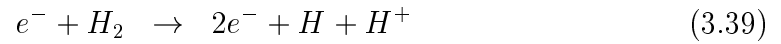
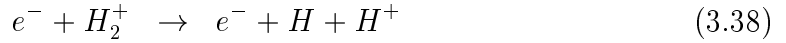
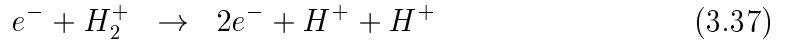
Aufgabe von KALLIOPE ist es, durch Aufstellen und Lösen von Ionenbilanzgleichungen die Dichte der Wasserstoffionen H^+ , H_2^+ und H_3^+ zu berechnen. Diese Ionen liefern besonders relevante Beiträge zur Besetzung von Zuständen im Atom. Im Gleichgewicht soll gelten:

$$\frac{dn_{H^+}}{dt} = 0; \quad \frac{dn_{H_2^+}}{dt} = 0; \quad \frac{dn_{H_3^+}}{dt} = 0; \quad (3.35)$$

Es werden für die drei Ionen Gewinn- und Verlustprozesse bilanziert, für die in [Jan87] oder dem neueren und überarbeiteten [Rei00] Ratenkoeffizienten und Wirkungsquerschnitte enthalten waren. Anhand der erwarteten Neutralteilchendichten und der Größe der Ratenkoeffizienten wurden folgende relevanten Prozesse

¹Kalliope ist in der griechischen Mythologie eine der neun Musen. Ihr Aufgabenbereich ist epische Dichtung, Rhetorik und Philosophie. Sie wird oft mit einem zusammengerollten Pergament und einen Griffel in der Hand dargestellt.

selektiert:



Die Prozesse (3.40) und (3.43) sind Schwerteilchenstöße. Die Ratenkoeffizienten dieser Prozesse sind im Vergleich mit denen der anderen Prozesse nicht von T_e und n_e abhängig, sondern von der Energie der beiden beteiligten Teilchen. Diese Abhängigkeit wurde berücksichtigt. Die dabei verwendeten Fitformeln sind für Energien von 0.1 eV bis 20 keV gültig. Im betrachteten Plasma entspricht die Neutralteilchenenergie der Gastemperatur (450 K) und liegt somit unter 0.1 eV. In den Fitformeln wird daher 0.1 eV für die Energie der Wasserstoffmoleküle eingesetzt. Die Energie der Ionen entspricht in Niederdruckplasmen der Neutralteilchenenergie. In die Fitformel zur Berechnung des Ratenkoeffizienten für Prozeß (3.43) wurde für die Ionenenergie 0.1 eV eingesetzt. Der Prozeß (3.40) setzt voraus, daß T_i gleich T_e ist. Hier wurde daher T_e als Ionenenergie eingesetzt und es wurde angenommen, daß $n(H^+)$ gleich der Elektronendichte ist.

Zusätzlich zu den aufgelisteten Prozessen wurde für die drei Ionensorten Verlust durch Diffusion mit eingerechnet. Für die aus der Diffusion resultierende Verlustrate gilt:

$$\dot{n} = \frac{n(Ion)}{\tau(Ion)} \quad (3.46)$$

Für die Einschlußzeit $\tau(Ion)$ der Ionen gilt:

$$\tau(Ion) = \tau_f + \tau_a \quad (3.47)$$

Dabei ist τ_f die aus dem stoßfreien Fall der Ionen resultierende Einschlußzeit, τ_a die aus der ambipolaren Diffusion. Für den stoßfreien Fall gilt:

$$\tau_f = \frac{\Lambda_f}{v_f} \quad (3.48)$$

Die Ionenverlustlänge Λ_f ergibt sich für die Geometrie des betrachteten ECR-Plasmas zu 4.9 cm. Für die mittlere Geschwindigkeit v_f der Ionen gilt:

$$v_f = \sqrt{\frac{2kT_e}{m_i}} \quad (3.49)$$

Dabei ist m_i die Masse der Ionen.

Für die aus der ambipolaren Diffusion resultierende Einschlußzeit gilt:

$$\tau_a = \frac{\Lambda^2}{D_a} \quad (3.50)$$

D_a ist die Diffusionskonstante für ambipolare Diffusion und Λ die Diffusionslänge. Diese ergibt sich für diese Plasmageometrie nach [Fan95] zu:

$$\frac{1}{\Lambda^2} = \left(\frac{2.405}{R_0} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{H} \right)^2 \quad (3.51)$$

Es ist H die Länge (7.5 cm) und R_0 der Radius (8.0 cm) des untersuchten Plasmas. Für die Diffusionskonstante der Ionen gilt bei $T_i = T_{gas}$:

$$D_a = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{T_e}{T_{gas}} \frac{\sqrt{kT_{gas}}}{(n_0 + n_i)\sigma_{0i}} \sqrt{\frac{m_0 + m_i}{2m_0m_i}} \quad (3.52)$$

Es ist σ_{0i} der gemittelte Stoßquerschnitt für Stöße zwischen Ionen und Neutralteilchen ($7.5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$) nach [Ell76], [Ell78], m_0 und m_i die Massen und n_0 und n_i sind die Dichten der Ionen und Neutralteilchen.

Insgesamt ergibt sich für die Einschlußzeit der drei betrachteten Wasserstoffionen:

$\tau(H^+)$	$2.5 \cdot 10^{-5} \text{ s}$
$\tau(H_2^+)$	$4.0 \cdot 10^{-5} \text{ s}$
$\tau(H_3^+)$	$5.0 \cdot 10^{-5} \text{ s}$

Es ist zu beachten, daß einige der Reaktionen ein Ion besetzen und ein anderes Ion entvölkern. Somit erhält man ein gekoppeltes lineares 3×3 -Gleichungssystem. Um eine Lösung dieses Systems zu ermöglichen, werden dem Programm verschiedene Drücke und die im betrachteten Experiment bei diesen Drücken herrschenden Elektronentemperaturen vorgegeben. Mit Hilfe der allgemeinen Gasgleichung und dem vorgegebenen Dissoziationsgrad ($\delta = 0.33 \%$) werden für jeden Druck die Dichten von H_2 und H berechnet.

In [Mei00] wurde gemessen, daß die Elektronentemperatur im Abhängigkeit vom Druck zwischen 2 und 3 eV liegt. Die Elektronendichte wurde als 10^{11} cm^{-3} unabhängig vom Druck bestimmt. Es herrscht eine Gastemperatur von 450 K.

Um die Quasineutralität zu erfüllen, sollte die Summe der Dichten aller Ionensorten der Elektronendichte entsprechen. Somit sind die drei aus KALLIOPE erhaltenen Dichten ein gutes Indiz für eine Korrektheit der vorgenommenen Modellierung.

Abbildung 3.20 zeigt die mit KALLIOPE berechneten absoluten Dichten der Wasserstoffionen für dieses Niederdruckplasma. Die dominierende Ionenspezies ist das H_3^+ -Ion. Deren absolute Dichte liegt druckunabhängig bei etwa 10^{11} cm^{-3} . Der Betrag der Dichte des H_2^+ -Ions liegt bei etwa 5 % der H_3^+ -Dichte, der Betrag der H^+ -Dichte bei etwa 0.1 % davon. Die Absolut- und Relativwerte beider Dichten zeigen bei Druckzunahme eine leichte Abnahme. Die Summe aller Dichten

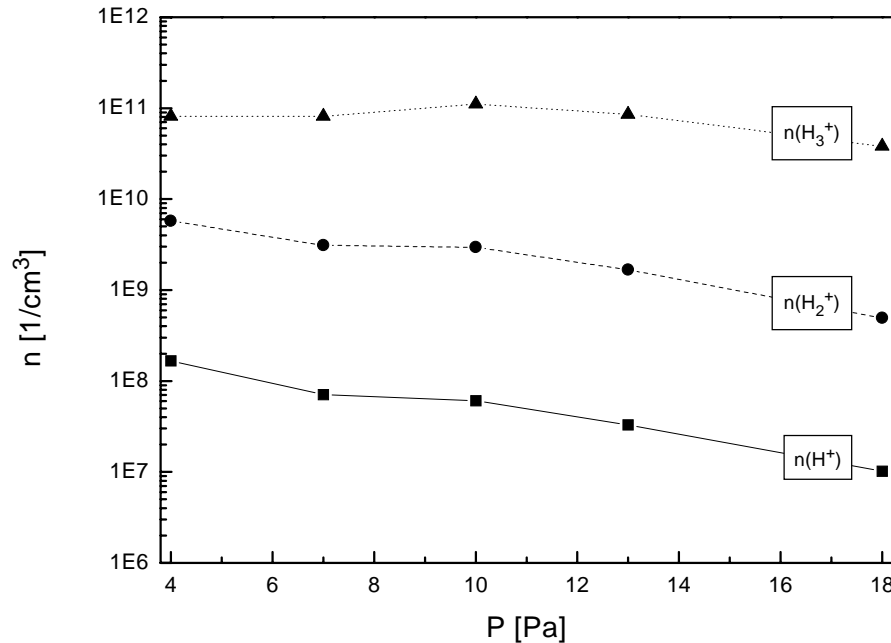


Abbildung 3.20: Dichte der Wasserstoffionen H^+ , H_2^+ und H_3^+ für ein Niederdruckplasma.

entspricht bis auf kleine Abweichungen der Elektronendichte im Plasma (10^{11} cm^{-3}).

Zusammenfassend ergibt sich, daß aufgrund der hohen Dichten der Ionen bei der Berechnung von Besetzungen der Zustände im Atom nicht nur Anregungen vom Atom selber und die dissoziative Anregung vom Molekül aus berücksichtigt werden müssen, sondern auch Anregung von den Ionen aus. Im P-Raum sind H^+ und H_2^+ enthalten, für H_3^+ liegen keine zustandsaufgelösten Ratenkoeffizienten für die dissoziative Rekombination vor.

3.4.3 Einbeziehung der optischen Dicke

Besonders die intensiv strahlenden Resonanzlinien² können beim Durchlaufen einer bestimmten Wegstrecke in einem Plasma aufgrund der hohen Besetzung im unteren Zustand des Übergangs wieder absorbiert werden. Dies führt zu einer Verringerung der von außen beobachtbaren Emissivität der betreffenden Linie. Diese Verringerung kann durch Multiplikation der Übergangswahrscheinlichkeit der Linie mit einem sogenannten Populations-Escape-Faktor Θ [Beh00] dargestellt werden. Dabei muß gelten: $\Theta \leq 1$. Der Escape-Faktor hängt ab von n_e , T_e , der Neutralteilchendichte, der Neutralteilchentemperatur, dem Linienprofil, der Plasmageometrie und dem räumlichen Strahlungsprofil. Beim Einbau dieser Faktoren in das SSM mußte beachtet werden, daß in den Ratengleichungen die mit Θ

²Das sind typischerweise Linien, die auf dem jeweiligen Grundzustand enden, im Fall des Wasserstoffatoms also die Linien der Lyman-Serie.

korrigierte Übergangswahrscheinlichkeit verwendet werden muß, bei der Bestimmung von effektiven Emissionsratenkoeffizienten nach Gleichung (2.41) jedoch die originale Wahrscheinlichkeit. Die folgenden Rechnungen wurden für Bedingungen durchgeführt, wie sie im vorliegenden Niederdruckplasma herrschen. Dabei wurden folgende, in [Beh00] berechnete, Escape-Faktoren verwendet:

$\Theta(L_\alpha)$	0.04
$\Theta(L_\beta)$	0.35
$\Theta(L_\gamma)$	0.8
$\Theta(L_\delta)$	1.0

Das heißt, die optische Dicke hat nur auf L_α und L_β einen starken Einfluß, auf L_γ nur noch einen geringen und auf L_δ und alle anderen Lyman-Linien gar keinen mehr. Zusätzlich wurden Rechnungen mit total optisch dicken Lyman-Linien durchgeführt. Dabei wurde einmal $\Theta(L_\alpha) = \Theta(L_\beta) = 0$ gesetzt und einmal $\Theta(L_\alpha) = 0$. Abbildung 3.21 zeigt die berechnete und auf die Grundzustandsbesetzung normierte Besetzung der einzelnen Atomzustände für $T_e = 3$ eV. Um die dissoziative Anregung vom Molekül aus zu berücksichtigen, wurden eine Moleküldichte von 10^{15} cm^{-3} und ein Dissoziationsgrad von 1 % angesetzt. Die Dichten für die Molekülonen wurden mit KALLIOPE berechnet.

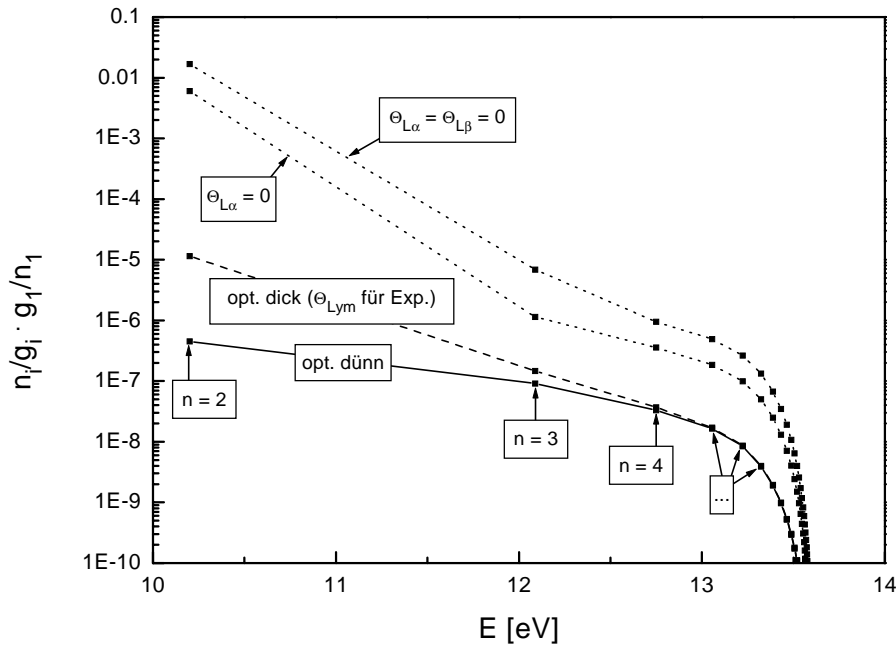


Abbildung 3.21: Besetzung der Zustände im atomaren Wasserstoff in Abhängigkeit der optischen Dicke einzelner Lyman-Linien.

Die Berücksichtigung der optischen Dicke für die Lyman-Serie führt zu einer stärkeren Gleichgewichtsbesetzung der oberen Niveaus der einzelnen Linien. Die Annahme von total optisch dicken L_α - bzw. L_α - und L_β -Linien führt zu einer

starken Überbesetzung aller Niveaus gegenüber dem optisch dünnen Fall. Aus den an das Experiment angepassten Escape-Faktoren resultiert eine mit steigendem n abnehmende Anhebung der Besetzung. Für $n = 2$ beträgt der Faktor 50, für $n = 3$ nur noch etwa 2 und für weiter steigendes n nähert sich die Besetzung immer mehr der im optisch dünnen Fall an. Der Einfluß der optischen Dicke auf $n = 2$ und höhere n ist somit stark von den verwendeten Escape-Faktoren abhängig. Diese sollten daher für jedes betrachtete Plasma separat bestimmt werden.

Die aufgrund der optischen Dicke stärker besetzten Zustände sind selber obere Zustände für Übergänge, deren Emissivität sich gegenüber dem optisch dünnen Fall ändern wird. Dies wirkt sich auf die effektiven Emissionsratenkoeffizienten aus, bei deren Berechnung folglich die optische Dicke der Resonanzlinien auch nicht vernachlässigt werden darf. Abbildung 3.22 zeigt berechnete effektive Emissionsratenkoeffizienten für H_α . Um den Effekt der optischen Dicke besonders zu verdeutlichen, wurde dabei nur Anregung aus dem Atom in die Rechnung mit einbezogen, das heißt, die Anregung aus dem Molekül und den Ionen wurde vernachlässigt.

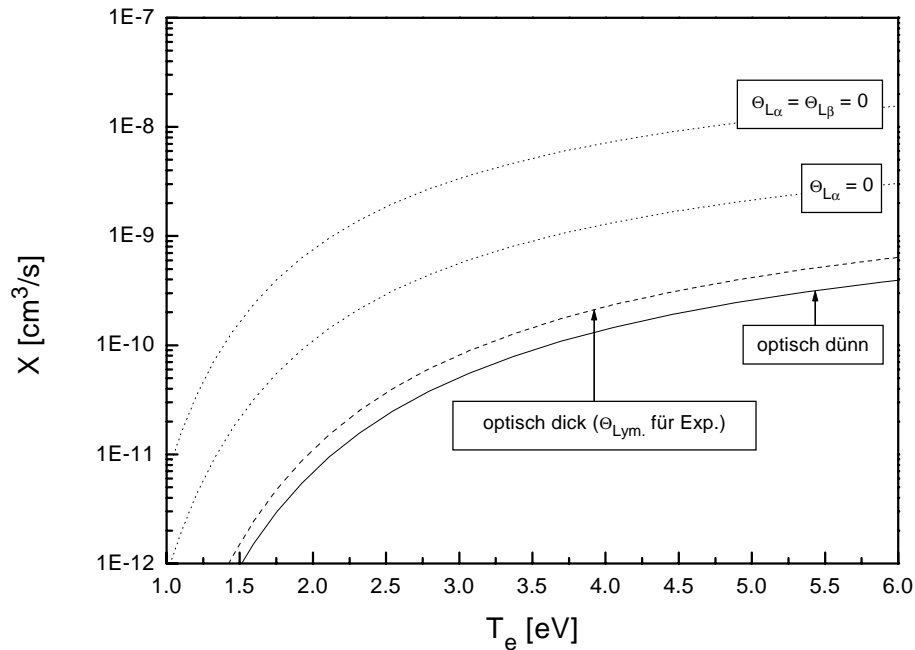


Abbildung 3.22: Aus verschiedenen angenommener optischer Dicke der Lyman-Linien resultierende effektive Emissionsratenkoeffizienten für H_α .

Wie bei der Besetzung der Atomzustände zeigt sich deutlich ein Einfluß der verwendeten Escape-Faktoren für die Lyman-Serie auf die effektiven Ratenkoeffizienten. Die auf Null gesetzten Escape-Faktoren führen zu einer Erhöhung um einen Faktor bis zu 100.

3.4.4 Effektive Ratenkoeffizienten

Unter Berücksichtigung von an das untersuchte Experiment angepassten Escape-Faktoren wurden effektive Emissionsratenkoeffizienten für die ersten vier Linien der Balmer-Serie berechnet.

Abbildung 3.23 zeigt einen Vergleich von Ratenkoeffizienten für Anregung nur aus dem Atom bzw. für Anregung aus Atom und über zusätzliche dissoziative Anregung aus dem Molekül.

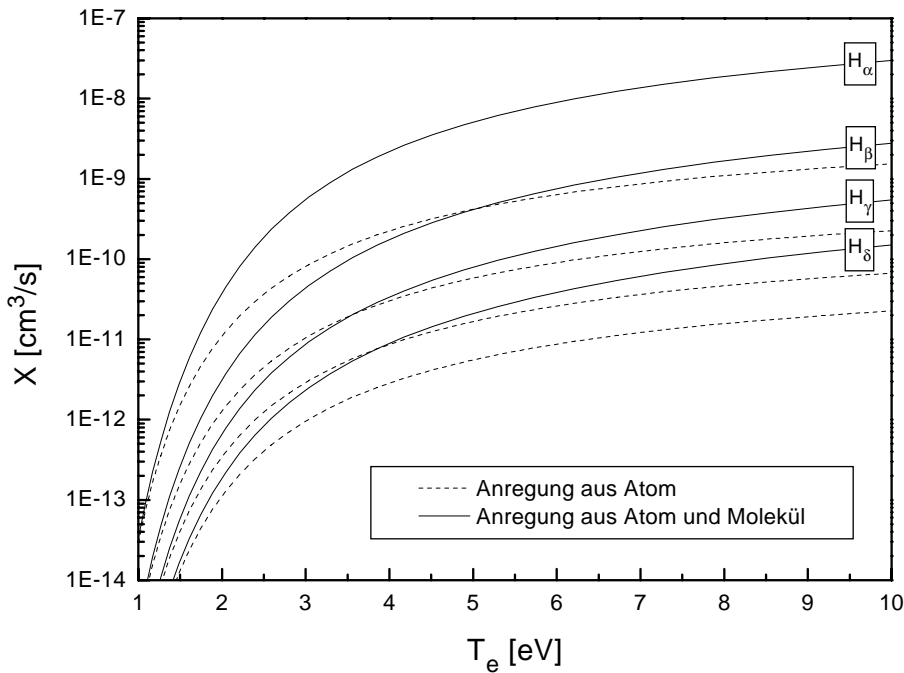


Abbildung 3.23: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für die Balmer-Linien des Wasserstoffatoms für Anregung der Atomzustände nur aus dem Atom bzw. aus Atom und Molekül ($n_{H_2} = 300 \cdot n_H$).

Die hinzugenommene Berücksichtigung der dissoziativen Anregung führt zu einer stärkeren Besetzung der Atomzustände und damit zu einer Anhebung des Ratenkoeffizienten. Diese Anhebung ist für niedrige Elektronentemperaturen noch relativ gering und nimmt mit steigendem T_e bis zu einem konstanten Faktor zu. Grund für diesen Effekt ist, daß die Schwellenergie für die das Molekül dissoziierenden Prozesse bei 17 eV liegt und somit die Dissoziation für niedrige Elektronentemperaturen relativ schwach ist.

In Abbildung 3.24 werden Balmer-Emissionsratenkoeffizienten, bei deren Berechnung Anregung der Atomniveaus vom Atom und Molekül aus berücksichtigt worden ist, mit Koeffizienten verglichen, bei denen zusätzlich Anregung von den Ionen aus mit eingerechnet wurde. Die Dichte der Moleküle ($n_{H_2} = 300 \cdot n_H$) und die Dichte der Ionen wurden als über die Elektronentemperatur konstant angenommen.

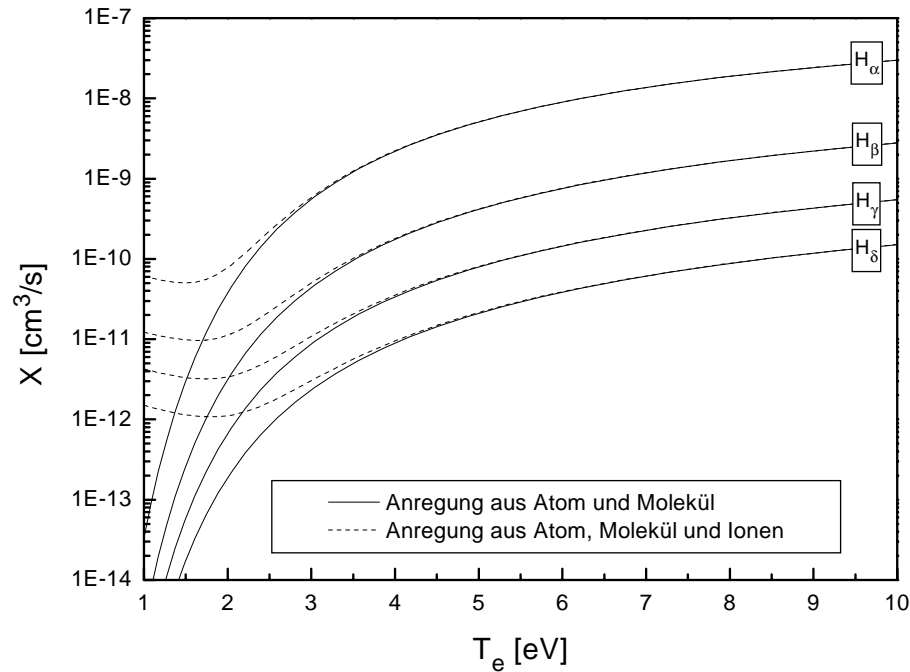


Abbildung 3.24: Effektive Emissionsratenkoeffizienten für die Balmer-Linien des Wasserstoffatoms für Anregung der Atomzustände aus dem Atom und Molekül bzw. aus Atom, Molekül und Ionen ($n_{H_2} = 300 \cdot n_H$).

Die Ratenkoeffizienten mit Berücksichtigung der von den Ionen ausgehenden Anregung zeigen ab einem bestimmten T_e einen Verlauf, der den Koeffizienten ohne Berücksichtigung der Ionen entspricht. Diese Temperatur nimmt mit steigender Quantenzahl des oberen Zustands des Übergangs zu. Sie liegt für H_α bei 3 eV und nimmt bis zu 4 eV für H_δ zu. Bei kleineren Temperaturen flachen die Kurven immer mehr ab und nehmen ab 1.5 bis 2 eV mit abnehmenden T_e sogar wieder zu. Grund für diesen Verlauf ist der Einfluß der Rekombination von Ionen zu Molekülen bzw. Atomen, die mit sinkendem T_e überwiegt. Die Anregung aus dem Atom und dissoziative Anregung aus dem Molekül nehmen mit steigendem T_e stark zu. Für kleine Elektronentemperaturen dominiert somit die Rekombination, für große Elektronentemperaturen dagegen dominieren die Prozesse aus Atom und Molekül. Mit steigender Hauptquantenzahl nähert sich das Atom energetisch immer mehr dem H^+ -Ion an und Rekombination wird wahrscheinlicher. Daraus resultiert die Zunahme der Temperatur, ab der die Ratenkoeffizienten aufeinander liegen.

3.4.5 Linienverhältnisse der Balmer-Linien

Aus experimentell bestimmten Emissivitäten von Atomübergängen bzw. Besetzungen der jeweiligen oberen Zustände lassen sich Verhältnisse der Balmerlinien H_α , H_β und H_γ bestimmen. Diese Verhältnisse lassen sich zur Diagnostik für un-

terschiedliche Plasmaparameter verwenden. Detaillierte Informationen dazu liefert [Mei00].

Zunächst sollen die Balmer-Linienverhältnisse als Diagnostik für den Dissoziationsgrad im Plasma verwendet werden. Dazu wurden mit dem SSM Werte für die Verhältnisse H_α/H_β und H_α/H_γ in Abhängigkeit von T_e berechnet. Diese Rechnungen wurden für Plasmen mit Dissoziationsgrad $\delta = 0\%$, $\delta = 0.33\%$ sowie $\delta = 100\%$ durchgeführt. Da die beiden Plasmen mit $\delta = 0\%$ und $\delta = 100\%$ absolute Extremzustände eines Niederdruckplasmas darstellen, konnte keine akzeptable Annahme gefunden werden, in welcher Form die Anregung der Ionen und die optische Dicke berücksichtigt werden müssen. Daher wurden optische Dicke und Besetzung der Atomzustände aus Ionen für diese Rechnungen vernachlässigt. Diese Effekte müssen, soweit möglich, bei der Auswertung experimentell bestimmter Werte berücksichtigt werden. So wird in [Beh00] gezeigt, wie man aus in einem optisch dicken Plasma experimentell bestimmten Linienverhältnissen die optische Dicke herausrechnet, um einen Vergleich der mit einem SSM bestimmten Verhältnisse durchführen zu können.

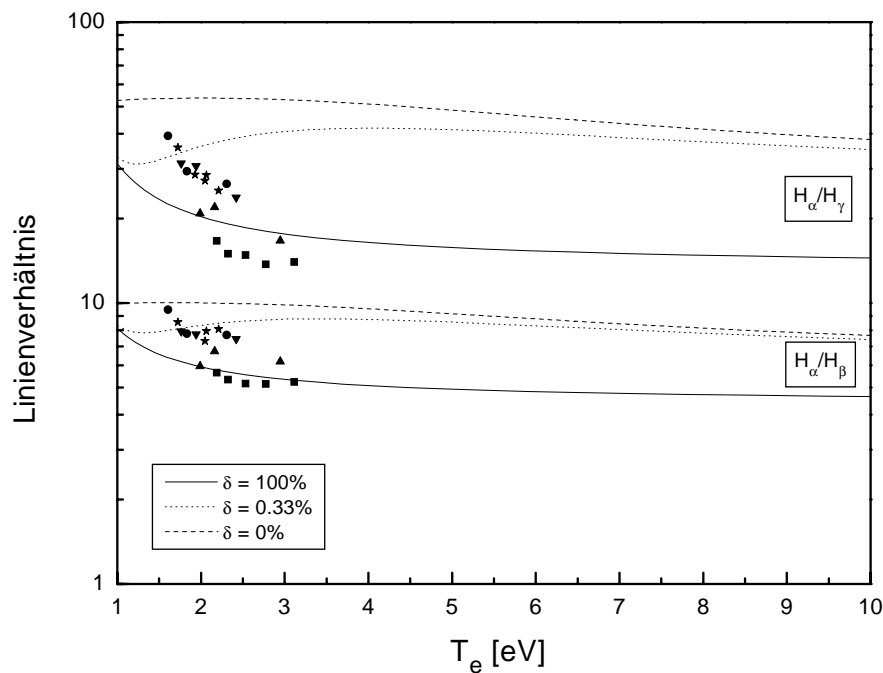


Abbildung 3.25: Berechnete Linienverhältnisse von H_α zu H_β bzw H_γ für Anregung nur aus dem Atom bzw. nur aus dem Molekül in Abhängigkeit der Elektronentemperatur. Zusätzlich sind einige experimentell bestimmte Linienverhältnisse eingezeichnet.

Abbildung 3.25 zeigt die Ergebnisse der Rechnungen im Vergleich mit auf die erwähnte Weise korrigierten experimentellen Werten. Die verschiedenen Symbole entsprechen verschiedenen Meßreihen und damit verschiedenen experimentell bestimmten Dissoziationsgraden. Der Dissoziationsgrad in einem realen Plasma liegt zwischen den beiden Extremwerten, also sollten die gemessenen Linienverhältnis-

se zwischen den beiden berechneten Kurven liegen. Die Kurve für $\delta = 0.33\%$ gibt ein Beispiel für Werte, die unter bestimmten Bedingungen für das Niederdruckplasma typisch sind. Die Bestimmung absoluter Werte für δ ist nicht möglich, da bei dem Verhältnis H_α/H_β die Punkte einer Meßreihe und bei dem Verhältnis H_α/H_γ sogar Punkte zweier Meßreihen außerhalb des erlaubten Bereichs liegen. Eine Ursache hierfür können Meßfehler sein, die aber bei maximal 25 % liegen. Eine weitere Ursache ist die nicht ausreichende Datenbasis des verwendeten SSM. Dies wird durch einen Vergleich mit dem SSM ADAS [Sum99] belegt. ADAS ist ein hauptsächlich für Untersuchungen an Atomen entwickeltes SSM und enthält eine bessere Datenbasis als das hier verwendete SSM. ADAS behandelt allerdings keine Kopplung von Atom und Molekül. Weitergehende Informationen zu ADAS sind in [Sum99] enthalten. Die von ADAS berechneten Linienverhältnisse für $\delta = 100\%$ liegen um einen Faktor von 1.4 für H_α/H_γ bzw. 1.2 für H_α/H_β unterhalb derjenigen des hier verwendeten SSM. Als Folge erlauben die von ADAS berechneten Verhältnisse eine physikalisch sinnvolle Deutung aller Meßpunkte. Daraus erhaltene Ergebnisse für den Dissoziationsgrad sind in [Beh00] zu finden.

Obwohl die vom hier verwendeten SSM berechneten Linienverhältnisse eine Bestimmung von δ nicht ermöglichen, lassen sich in Abbildung 3.25 dieselben Tendenzen erkennen, wie in [Beh00].

In [Fuj89] ist die Anwendung von Balmer-Linienverhältnissen als Diagnostik für die Elektronendichte vorgestellt. Abbildung 3.26 zeigt die Verhältnisse von H_β , H_γ und H_δ zu H_α in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur. Dabei wurde zunächst nur die Anregung der Atomzustände aus dem Atom selber, ohne optische Dicke berücksichtigt.

Für geringe und hohe Elektronendichten verlaufen die Kurven flach. In einem Bereich von etwa 10^{11} cm^{-3} bis 10^{14} cm^{-3} zeigt sich ein Hub. Die Höhe und die Breite dieses Hubs nehmen mit steigender Hauptquantenzahl des oberen Zustandes des zu H_α in Verhältnis genommenen Übergangs zu. H_β/H_α variiert um einen Faktor von 4 wogegen dieser Faktor für H_δ/H_α bei 39 liegt. Somit bietet sich das Linienverhältnis H_δ/H_α für die Verwendung als n_e -Diagnostik an. Zur Diagnostik an Niederdruckplasmen muß allerdings beachtet werden, daß die höheren Balmerlinien nur noch schwach emittieren und die Bestimmung der Emissivität damit einen großen Fehler beinhaltet. Somit wird für die Praxis die Verwendung des Verhältnisses H_γ/H_α als Kompromiß zwischen möglichst hohem Hub und möglichst genauer Bestimmung der Emissivitäten vorgeschlagen.

Für zunehmende Elektronentemperatur nehmen die Linienverhältnisse zu, jedoch bleibt die Höhe des Hubs in etwa gleich, so daß die Methode für einen großen Temperaturbereich anwendbar ist.

Abbildung 3.27 zeigt die gleichen Linienverhältnisse in Abhängigkeit von der Elektronendichte und dem Dissoziationsgrad. Es wurde für $\delta = 0\%$, $\delta = 0.33\%$ und $\delta = 100\%$ und eine Elektronentemperatur von 5 eV gerechnet. Die optische Dicke und die Anregung aus den Ionen wurden vernachlässigt.

Die Höhe des Hubs nimmt bei dem Verhältnis H_δ/H_α mit steigendem δ von einem Faktor 8 auf den Faktor 33 zu, seine Breite dagegen ist konstant. Die für $\delta = 0.33\%$ gerechneten Kurven liegen nahe an denen für $\delta = 0\%$. Diese Art der Diagnostik

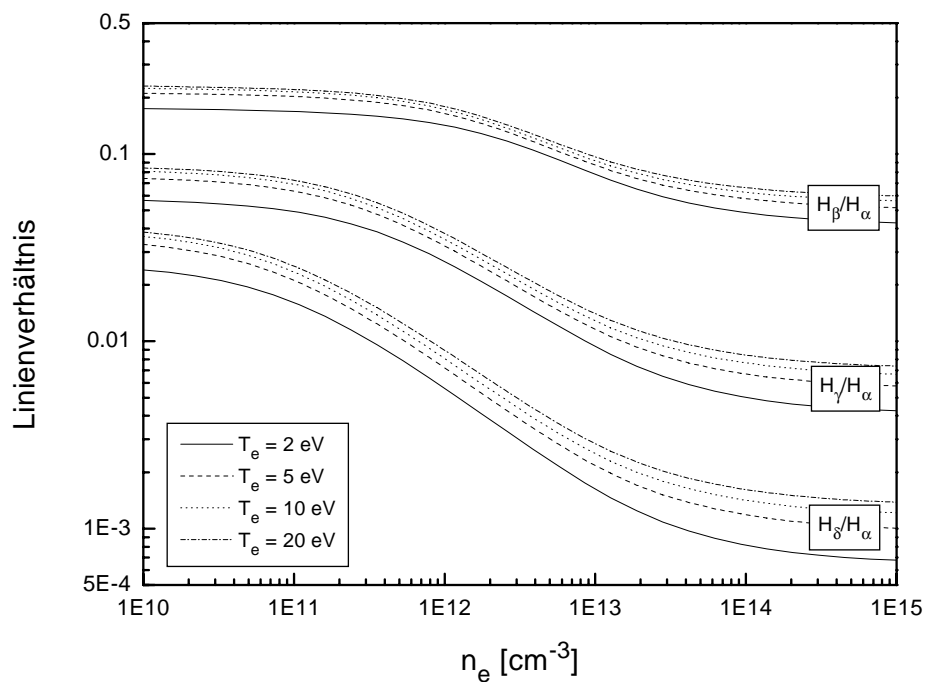


Abbildung 3.26: *Linienverhältnisse von H_β , H_γ und H_δ zu H_α für Anregung nur aus dem Atom in Abhängigkeit von der Elektronendichte und der Elektronentemperatur.*

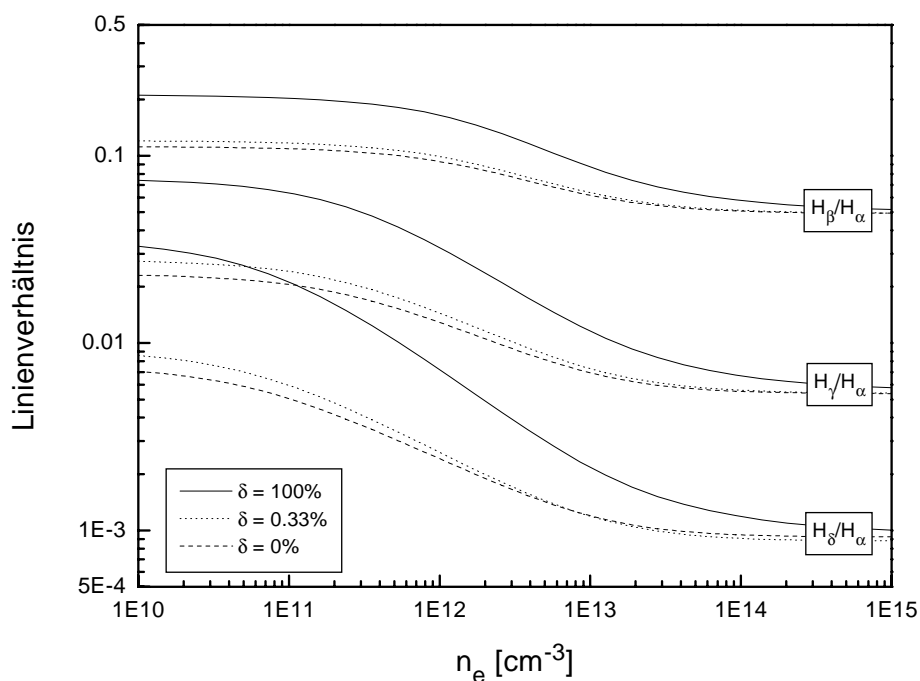


Abbildung 3.27: *Linienverhältnisse von H_β , H_γ und H_δ zu H_α in Abhängigkeit von der Elektronendichte und dem Dissoziationsgrad.*

der Elektronendichte wird somit für Plasmen mit hoher Molekülteilchendichte weniger exakte Ergebnisse liefern, als für Plasmen mit höherem Dissoziationsgrad. Für einen Vergleich mit experimentell ermittelten Linienverhältnissen müssen diese wieder unter Beachtung der optischen Dicke und der Anregung aus den Ionen korrigiert werden.

In den Abbildungen 3.26 und 3.27 wurde dargestellt, daß die Bestimmung der Elektronendichte mit Hilfe der Verhältnisse der Balmerlinien empfindlich von der Kenntnis von T_e und δ abhängt. Nach Tabelle 3.1 kann T_e in Divertorplasmen zwischen 1.0 und 10 eV variieren, je nachdem, in welchem Recyclingzustand sich das Plasma befindet. Eine Angabe von δ wird nicht verwendet, da das Divertorplasma nahezu volldissoziiert ist und nur vereinzelt Moleküle durch Rekombination an der Wand gebildet werden und in das Plasma eindringen. Zudem variieren die Plasmaparameter (n_e, T_e, n_H, n_{H_2}) entlang einer Sichtlinie, so daß man räumlich gemittelte Ergebnisse erhält.

Kapitel 4

Vibrationsbesetzung im Grundzustand

Im SSM sind für den Grundzustand $X^1\Sigma_g^+$ des Moleküls neben dem elektronischen Zustand ($v = 0$) auch 14 angeregte Vibrationszustände ($v = 1 \dots 14$) implementiert. Zur Besetzung dieser Niveaus werden sieben verschiedene Prozesse berücksichtigt. Diese Prozesse können wahlweise zugeschaltet werden:

1. Umbesetzung durch Elektronenstoß
2. Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$
3. Dissoziative Anlagerung
4. Ladungsaustausch
5. Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$
6. Schwerteilchenstöße
7. Stöße mit der Wand

Die ersten vier Prozesse waren im ursprünglichen SSM [Saw95] enthalten, der fünfte Prozess wurde auf unterschiedliche Vorgehensweisen [Sch00], [Gre01b] implementiert. Die beiden letzten Prozesse wurden von [Sch00] hinzugefügt. Diese Prozesse sind nur für Plasmen hoher H_2 -Dichte relevant, d.h. für typische Niederdruckplasmen, nicht aber für Divertorplasmen. Es ist es daher zu unterscheiden, für welche Art von Plasma die Rechnung durchgeführt wird. In Divertorplasmen sind die ersten fünf Reaktionen relevant, in Niederdruckplasmen alle sieben, wobei letztere nur ein Teil der tatsächlich stattfindenden Reaktionen sind, und exemplarisch für die Vielzahl der Möglichkeiten dienen sollen.

Programmintern hat die Mitbetrachtung der Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$ zur Folge, daß sich die Anzahl der Ratengleichungen für das Singulettssystem um 14 erhöht. Dabei wird die zunächst erstellte (40×40) -Matrix der Ratengleichungen durch Einschieben einer (14×14) -Untermatrix an geeigneter Stelle auf das vollständige Gleichungssystem erweitert. Bei Einbeziehung der Vibrationsniveaus

muß auch die Berechnung einiger effektiver Ratenkoeffizienten erweitert werden. So sind zum Beispiel Dissoziation und Ionisation nun auch von den Vibrationsniveaus aus möglich. Die betreffenden Ratenkoeffizienten müssen zu dem gesamten effektiven Ionisations- bzw. Dissoziationsratenkoeffizienten addiert werden.

Bei der im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Erweiterung des SSM auf Deuterium haben die Vibrationsprozesse eine entscheidende Bedeutung: Die räumliche und elektronische Struktur des H_2 und D_2 -Moleküls ist gleich, was zur Folge hat, daß die Potentialkurven der elektronischen Zustände bei den beiden Isotopen identisch sind. Somit können die Ratenkoeffizienten für rein elektronische Übergänge bei beiden Isotopen als identisch betrachtet werden. Einziger Unterschied zwischen H_2 und D_2 ist die doppelte Masse bei Deuterium. Aus diesem Unterschied resultieren unter anderem ein geringerer Energieunterschied zwischen den Vibrationsniveaus bei D_2 ¹ und folglich unterschiedliche Ratenkoeffizienten für Übergänge von und zu den Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$. Außerdem liegen bei D_2 aufgrund der engeren Aufeinanderfolge 20 angeregte Vibrationsniveaus innerhalb des Potentialtopfes, also 6 mehr als bei H_2 . Somit müßte eigentlich statt einer (14×14) -Matrix nun eine (20×20) -Matrix in die Matrix der Ratengleichungen eingeschoben werden. Da die obersten 6 Vibrationsniveaus nur sehr schwach besetzt sein werden, wurde auf diese aufwendige Erweiterung verzichtet.

Verschiedene Datensätze aus unterschiedlichen Quellen für Ratenkoeffizienten ein und desselben Übergangs bei einem der beiden Isotope können Abweichungen um einen Faktor bis zu 10 zeigen. Da nach der Erweiterung die Möglichkeit bestehen soll, Ergebnisse, die für D_2 bzw. H_2 berechnet werden, direkt miteinander zu vergleichen, ist es wichtig, nicht nur Ratenkoeffizienten für die Vibrationsprozesse bei Deuterium hinzuzufügen, sondern auch entsprechende, aus derselben Quelle stammende Koeffizienten für Wasserstoff. Es erwies sich als Hauptproblem bei der Erweiterung des SSM, geeignete Quellen für solche Daten in der Literatur aufzufinden.

Im allgemeinen werden in der Literatur keine Ratenkoeffizienten, sondern Wirkungsquerschnitte für den jeweiligen Prozess angegeben. Um aus diesen Ratenkoeffizienten zu berechnen, muß man eine Faltung mit einer Elektronenenergieverteilungsfunktionen vornehmen (siehe Gleichung (2.11)). Diese wird als Maxwellverteilung angenommen. Für den Einbau in das SSM wird an der so erhaltenen Kurve ein Fit durchgeführt. Dabei wird im allgemeinen folgende Form für den Verlauf eines Ratenkoeffizienten verwendet:

$$\ln(X(T_e)) = \sum_{n=0}^8 a_n (\ln(T_e))^n \quad (4.1)$$

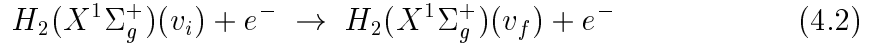
Das auf Deuterium erweiterte SSM soll dazu verwendet werden, die Vibrationsbesetzung beider Isotope unter Divertorbedingungen auszurechnen und zu vergleichen. Die Prozesse (6) und (7) sind also nicht relevant. Im Folgenden werden die Vibrationsprozesse dargestellt und die vorgenommene Erweiterung auf Deuterium detailliert erläutert.

¹Der zweite, im Rahmen des SSM aber nicht relevante, Unterschied ist eine engere Aufeinanderfolge der Rotationsniveaus.

4.1 Umbesetzung durch Elektronenstoß

4.1.1 Beschreibung des Prozesses

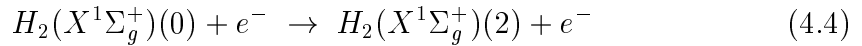
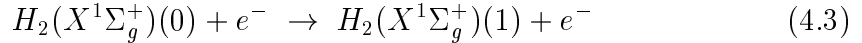
Das SSM behandelt Elektronenstoßanregung und -abregung innerhalb der 15 Vibrationsniveaus des elektronischen Grundzustandes gemeinsam:



Dabei ist v_i der Startzustand und v_f der Endzustand des Übergangs und es gilt:

$$v_i, v_f = 0 \dots 14; v_i \neq v_f$$

In [Jan87] gibt es Ratenkoeffizienten für die beiden folgenden Elektronenstoßprozesse:



Diese Ratenkoeffizienten sind im SSM enthalten. Für Elektronenstoßanregung zu $v_i \neq 0$ bzw. $v_f > 2$ werden die Ratenkoeffizienten durch Skalierung aus dem Koeffizienten für (4.3) bestimmt und für den Skalierungsfaktor f gilt nach [Gre01b]:

$$f = \frac{\exp(5 E_{v_i} - 4.44 E_{v_f})}{0.121} \quad (4.5)$$

Dabei sind E_{v_i} und E_{v_f} die Energien des unteren und des oberen Vibrationsniveaus.

Die Ratenkoeffizienten für Stöße zweiter Art werden aus denen für die Stoßanregung mit Hilfe des detaillierten Gleichgewichtes gewonnen.

Allgemein verwendet man das detaillierte Gleichgewicht zur Bestimmung von Ratenkoeffizienten für einen Prozess aus bekannten Ratenkoeffizienten für den jeweiligen Umkehrprozess. Man nimmt dabei an, daß der anregende und der abregende Prozess miteinander im Gleichgewicht stehen:

$$n_i n_e X_{i \rightarrow f} = n_f n_e X_{f \rightarrow i} \quad (4.6)$$

Sind nun die Zustände nach einer Boltzmannverteilung besetzt, so ergibt sich eine einfache Formel zur Berechnung des Ratenkoeffizienten für den Umkehrprozess:

$$X_{f \rightarrow i} = X_{i \rightarrow f} \frac{g_i}{g_f} \exp\left(\frac{\Delta W_{if}}{kT}\right) \quad (4.7)$$

Dabei ist ΔW_{if} die Energiedifferenz zwischen den beiden beteiligten Niveaus, g_i und g_f sind die entsprechenden statistischen Gewichte.

Eine ausführliche Beschreibung der im SSM ursprünglich verwendeten Ratenkoeffizienten und Skalierungsfaktoren findet sich in [Gre01b].

4.1.2 Erweiterung für D_2

In [Buc85] findet man Querschnitte für Elektronenstoßanregung von $v_i = 0$ nach $v_f = 1, 2$ für Wasserstoff und Deuterium. Aus den Abbildungen der Querschnitte wurden durch Digitalisierung Datenpunkte gewonnen. Die aus diesen Werten erhaltenen Ratenkoeffizienten wurden analog zur in Kapitel 4.1.1 beschriebenen Methode in das SSM eingebaut. In Abbildung 4.1 sind diese Ratenkoeffizienten abgebildet. Zusätzlich sind dort zum Vergleich die vorher im SSM enthaltenen Ratenkoeffizienten für H_2 nach [Jan87] abgebildet.

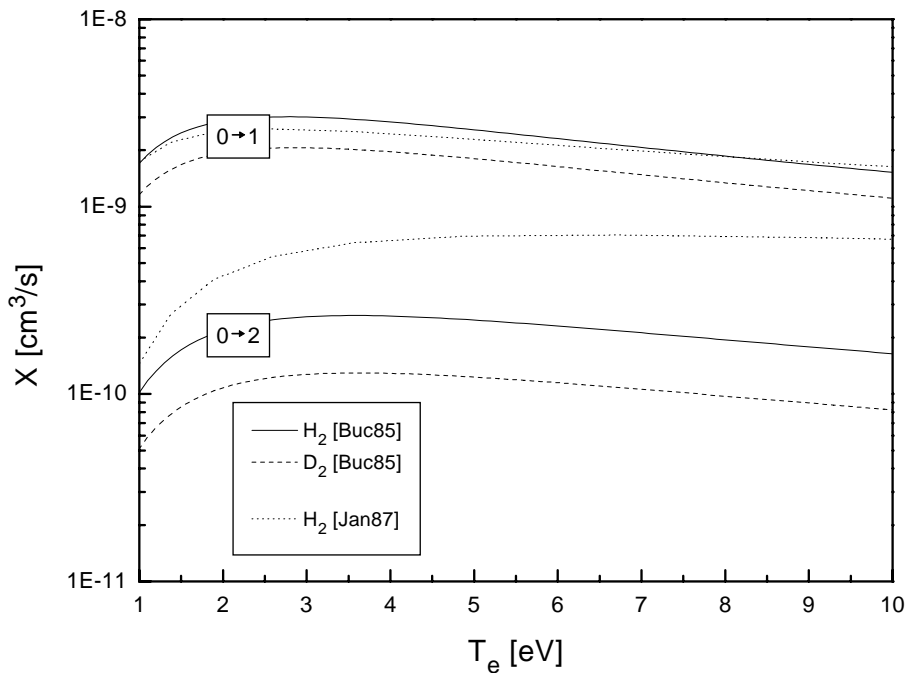


Abbildung 4.1: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Elektronenstöße von $v_i = 0$ nach $v_f = 1$ bzw. $v_f = 2$ bei H_2 und D_2 . Zum Vergleich sind die ursprüngliche Ratenkoeffizienten für H_2 eingetragen.

Für die Berechnung der Faktoren zur Skalierung des Ratenkoeffizienten für $v_i = 0$ und $v_f = 1$ auf alle anderen wurden Querschnittsdaten aus [Bar79] verwendet. Diese sind für $v_i = 0 \dots 5$ und $v_f = 0 \dots 5$ gegeben, aber nicht für jede Elektronenenergie, sondern nur für die beiden Energiewerte 3 eV und 6 eV. Mit diesen Daten wurden über die beiden Elektronenenergien gemittelte Verhältnisse der Querschnitte zu dem Querschnitt für $v_i = 0$ und $v_f = 1$ gebildet.

Das Verhältnis von Querschnitten, die einen ähnlichen Verlauf zeigen, entspricht dem Verhältnis der entsprechenden Ratenkoeffizienten. Daher wurden die erhaltenen Querschnittsverhältnisse als Skalierungsfaktoren für die Berechnung der Anregungsraten für $v_f \leq 5$ verwendet. Für höhere v_f wurde an die Skalierungsfaktoren ein zweidimensionaler Fit der Form

$$f = \frac{\exp(a_0 E_{v_i} - a_1 E_{v_f})}{a_2} \quad (4.8)$$

angepasst. Diese Form wurde gewählt, da die Erweiterung so weit wie möglich auf dem ursprünglichen SSM basieren sollte (siehe Gleichung 4.5). Es sind E_{v_i} und E_{v_f} die Energien des unteren und des oberen Niveaus. Die Fitparameter ergeben sich zu:

	H_2	D_2
a_0	4.596	7.201
a_1	4.440	6.787
a_2	$7.716 \cdot 10^{-2}$	$6.240 \cdot 10^{-2}$

(4.9)

Abbildung 4.2 zeigt die daraus gewonnenen Skalierungsfaktoren für Wasserstoff und Deuterium. Der Übersicht halber werden nur die Faktoren für $v_i = 0$, $v_i = 4$ und $v_i = 9$ gezeigt. Zum Vergleich sind die ursprünglichen, in Kapitel 4.1.1 beschriebenen Skalierungsfaktoren mit eingezeichnet.

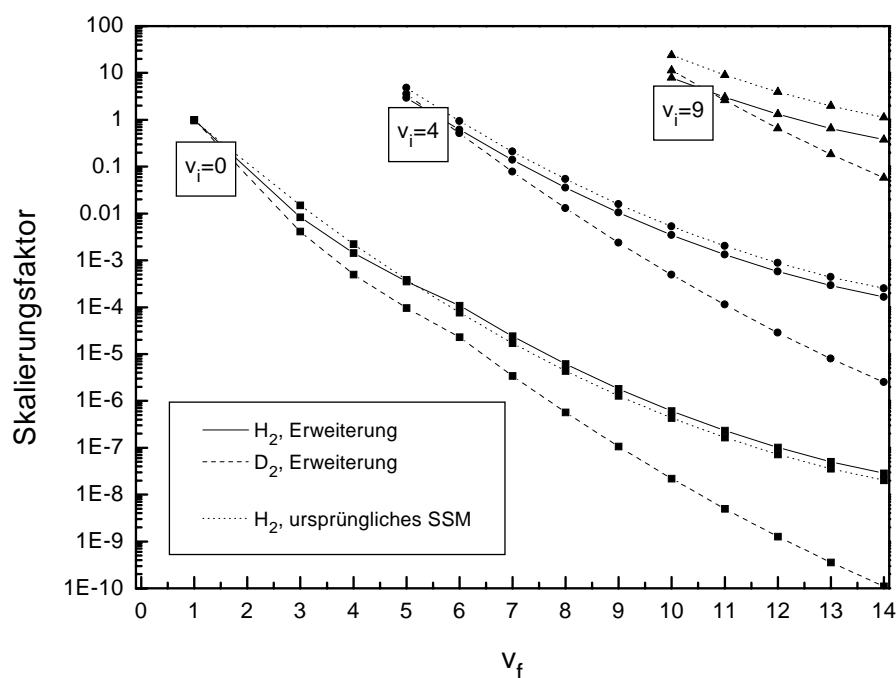


Abbildung 4.2: Im SSM verwendete Faktoren für Skalierung des Ratenkoeffizienten für $v_i = 0$ und $v_f = 1$ auf Koeffizienten für andere Vibrationszustände.

Die Annahmen des detaillierten Gleichgewichts sind für H_2 bzw. D_2 gleichermaßen gültig, so daß für die Stöße zweiter Art keine Veränderungen vorgenommen werden mußten.

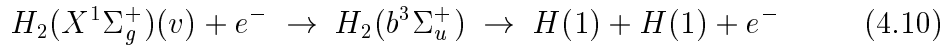
Um zwischen den verschiedenen implementierten Ratenkoeffizienten einfach umschalten zu können, wurde im Quelltext des SSM eine Variable als global verfügbarer Schalter hinzugefügt:

IeStossType = 0:	Ratenkoeffizienten für H_2 , basierend auf [Jan87]. Siehe Kapitel 4.1.1.
IeStossType = 1:	Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 , basierend auf [Buc85]. Siehe Kapitel 4.1.2,

4.2 Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$

4.2.1 Beschreibung des Prozesses

Aufgrund der antibindenden Potentialkurve von $b^3\Sigma_u^+$ wird ein in diesen Zustand übergegangenes Molekül in zwei Atome dissoziieren. Für die Elektronenstoßanregung vom vibrationsaufgelösten Grundzustand nach $b^3\Sigma_u^+$ gilt:



Im SSM wird $b^3\Sigma_u^+$ wie alle anderen Niveaus im Wasserstoffmolekül auch behandelt, mit einer Ausnahme: Um den Verlust der dissoziierten Moleküle zu modellieren, ist der Übergang in der Matrix der Ratengleichungen zwar für die Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$ als Verlust eingetragen, nicht aber als Gewinn für $b^3\Sigma_u^+$. Für die Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ verwendet das ursprüngliche SSM Ratenkoeffizienten aus zwei verschiedenen Datenquellen. Zwischen diesen Koeffizienten kann umgeschaltet werden.

Zum einen wird ein Koeffizient nach [Jan87] verwendet. Dieser ist gegeben für $v = 0$. Für alle anderen Vibrationsniveaus wird der entsprechende Ratenkoeffizient durch Skalierung ermittelt. Der Skalierungsfaktor f basiert auf Querschnitten von [Res88] und es gilt nach [Gre01b]:

$$f = \frac{\exp(0.07 E_v)}{1.0019} \quad (4.11)$$

Dabei ist E_v die Energie des jeweiligen Vibrationszustandes v . Die sich aus dieser Skalierung ergebenden Ratenkoeffizienten sind in Abbildung 4.3 dargestellt.

Die andere verwendete Datenquelle ist [Sti98]. Der Einbau in das SSM wurde von [Sch00] vorgenommen. Es liegen Querschnitte für niedrige Elektronenenergien ($E_e < 15$ eV) und für $v = 0 \dots 4$ vor. Um die Querschnitte für höhere E_e zu erhalten, wurde ein Abfall mit E_e^{-3} angenommen. Da mit steigender Vibrationsquantenzahl die Abstände der Vibrationsniveaus immer geringer werden, um schließlich in ein Kontinuum überzugehen, wird die Annahme gemacht, daß sich auch die Anregungsratenkoeffizienten für den Übergang nach $b^3\Sigma_u^+$ bei zunehmendem v immer weniger voneinander unterscheiden. Programmintern wird der Abstand für die Ratenkoeffizienten für $v = 3$ und $v = 4$ als Maßstab genommen und für die Bestimmung aller Koeffizienten für $v > 4$ immer weiter verringert, bis er bei $v = 14$ Null ist und somit der Ratenkoeffizient bei weiter steigendem v konstant bleiben würde. Abbildung 4.4 zeigt die nach diesem Verfahren berechneten Ratenkoeffizienten für die Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$.

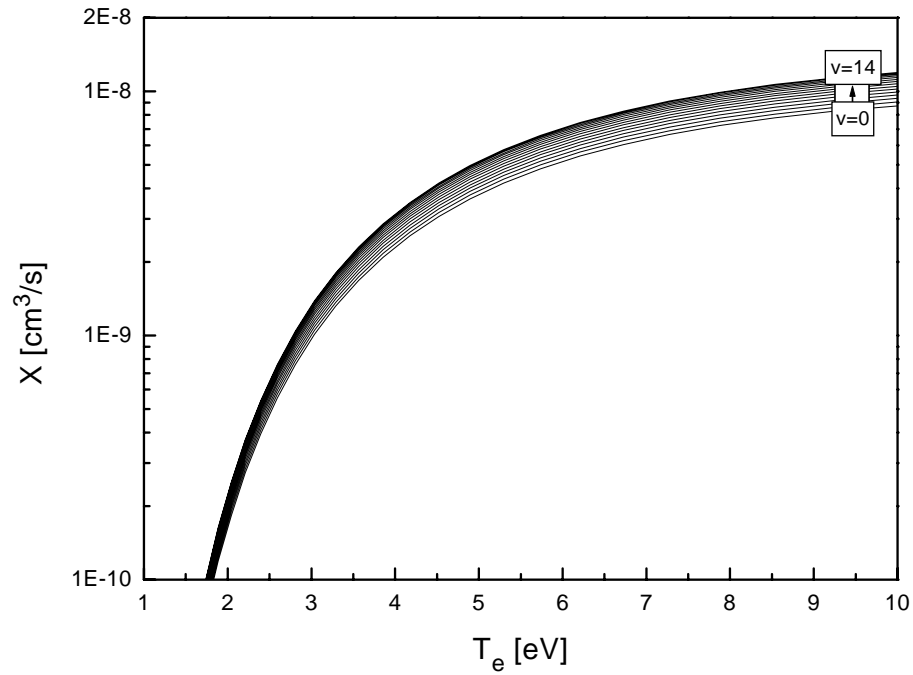


Abbildung 4.3: Ursprünglich im SSM enthaltene Ratenkoeffizienten nach [Jan87] für Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ bei H_2 .

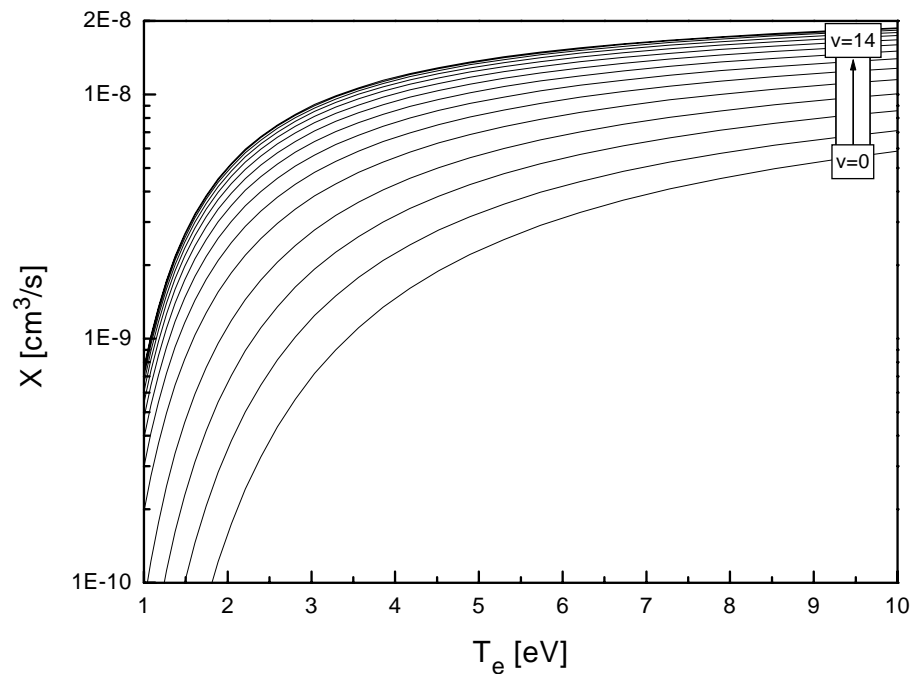


Abbildung 4.4: Ursprünglich im SSM enthaltene Ratenkoeffizienten für Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ bei H_2 nach [Sch00], basierend auf [Sti98].

Die Wirkungsquerschnitte nach [Sti98] sind mit Hilfe von R-Matrix-Rechnungen bestimmt worden, die für geringe Energien sehr genau sind, und den älteren Koeffizienten aus [Jan87], die auf Born-Näherungen beruhen, vorzuziehen. Vergleich der Abbildungen 4.3 und 4.4 zeigt, daß die Ratenkoeffizienten nach [Sti98] vor allem für höhere v größere Werte als die von [Jan87] annehmen. Somit wird die Verwendung der Ratenkoeffizienten nach [Sti98] als Ergebnis einen höheren Dissoziationsgrad des Plasmas im Besetzungsgleichgewicht zur Folge haben.

4.2.2 Erweiterung für D_2

Für die Erweiterung auf D_2 liegen keine mittels R-Matrix berechneten Ratenkoeffizienten vor. Es werden stattdessen Querschnittsdaten aus [Cel99] verwendet. Diese liegen bei H_2 für $v = 0 \dots 13$ und bei D_2 für $v = 0 \dots 19$ vor. Aus diesen Querschnitten wurden Ratenkoeffizienten berechnet, die direkt in das SSM übernommen werden konnten.

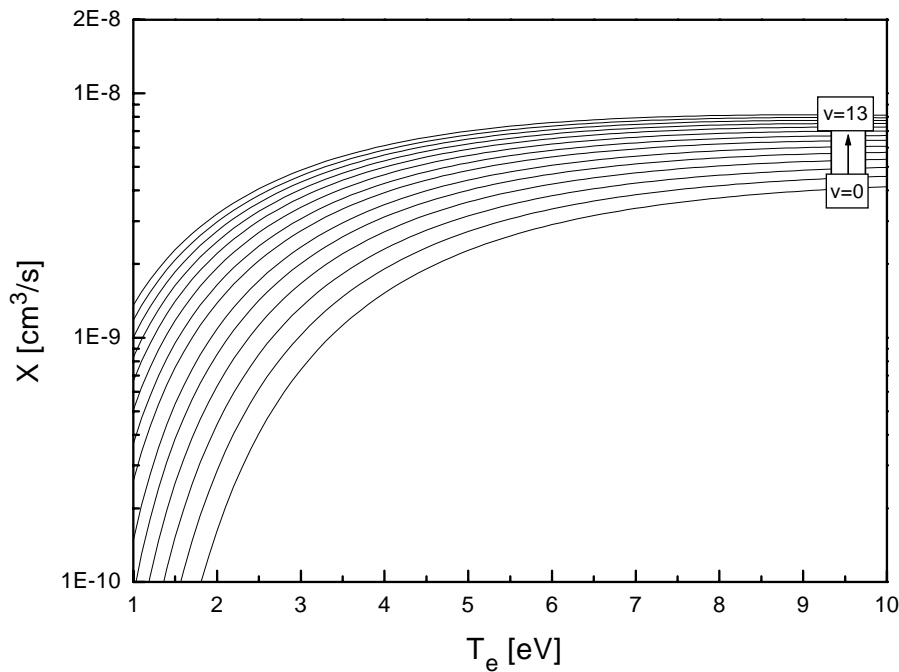


Abbildung 4.5: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ bei H_2 nach [Cel99].

Aufgrund der im SSM durchgeführten Auflösung des Zustands $X^1\Sigma_g^+$ in 15 Vibrationsniveaus fehlt für das H_2 -Molekül der Ratenkoeffizient für den obersten Vibrationszustand. Da, wie in Kapitel 4.2.1 beschrieben, die Abstände zwischen den Ratenkoeffizienten mit steigendem v immer geringer werden, wurde für $v = 14$ bei H_2 derselbe Koeffizient verwendet, wie für $v = 13$. Die Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigen die neu hinzugefügten Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 .

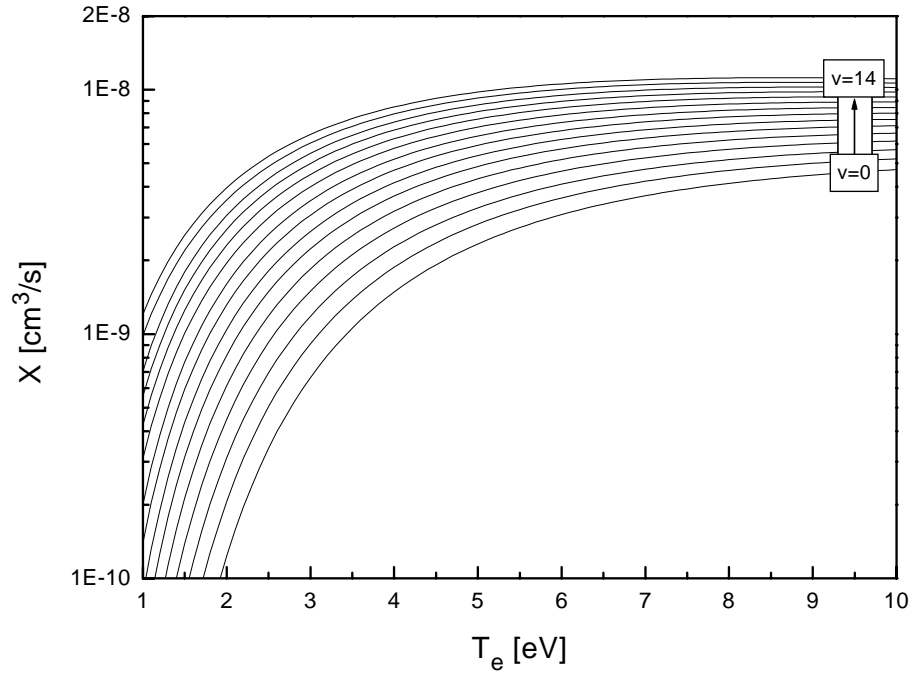


Abbildung 4.6: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$ bei D_2 nach [Cel99].

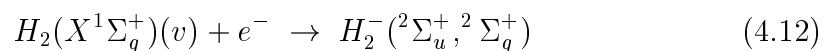
Um zwischen den verschiedenen Ratenkoeffizienten umschalten zu können, wurde folgender Schalter im SSM hinzugefügt:

iDissociationRateType = 0:	Ratenkoeffizienten für H_2 nach [Jan87].
iDissociationRateType = 1:	Ratenkoeffizienten für H_2 nach [Sti98].
iDissociationRateType = 2:	Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 [Cel99].

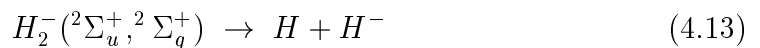
4.3 Dissoziative Anlagerung

4.3.1 Beschreibung des Prozesses

Beim Prozeß der dissoziativen Anlagerung trifft ein freies Elektron auf ein Wasserstoffmolekül im elektronischen Grundzustand und regt dieses in einen Zwischenzustand an:



Da der Zwischenzustand resonant ist, wird das Molekül in zwei einzelne Atome dissoziieren:



Der zusammengesetzte Prozess ist also für die Vibrationsbesetzung ein Verlustprozess. Das SSM enthält eine Fitformel nach [Cel99] zur Berechnung der vibra-

tionsaufgelösten Ratenkoeffizienten $X_v(T_e)$:

$$X_v(T_e) \simeq 6.69 \cdot 10^7 \sigma_v^{Schw.} \sqrt{T_e} \frac{1 + (\alpha T + 1) \frac{E_v^{Schw.}}{T_e}}{(1 + \alpha T_e)^2} \exp \frac{-E_v^{Schw.}}{T_e} \quad (4.14)$$

Dabei ist $E_v^{Schw.}$ die Schwellenergie in eV und $\sigma_v^{Schw.}$ der Schwellquerschnitt in cm^2 . Der Parameter α ist ein Fitparameter, dessen Wert beim Wasserstoffmolekül für verschiedene Vibrationsniveaus um das Mittel $\alpha = 2.27 \frac{1}{\text{eV}}$ schwankt. Die Einheit von $X_v(T_e)$ ist $\frac{\text{cm}^3}{\text{s}}$. Die Schwellenergien und Schwellquerschnitte stammen aus [Bar79]

4.3.2 Erweiterung für D_2

In [Bar79] werden vibrationsaufgelöste Werte von $E_v^{Schw.}$ und $\sigma_v^{Schw.}$ für Wasserstoff und Deuterium gegeben, nicht jedoch der Fitparameter α .

Daher wurden die benötigten Ratenkoeffizienten neu gerechnet. Es wurden die vorhandenen Werte für Schwellenergie- und Querschnitt verwendet, um nach folgender, aus [Cel99] stammender Formel energieabhängige Querschnitte zu erstellen:

$$\sigma(E_e) = \sigma_v^{Schw.} \exp \frac{(E_e - E_v^{Schw.})}{E_0} \quad (4.15)$$

Dabei ist E_0 ein molekülabhängiger Parameter und wird in [Cel99] angegeben als 0.45 eV bei Wasserstoff und 0.32 eV bei Deuterium.

Da die interne Struktur des SSM so weit wie möglich unverändert bleiben sollte, wurde an den durch Faltung aus den Querschnitten gewonnenen Ratenkoeffizienten kein Fit der Form (4.1) durchgeführt. Stattdessen wurde unter Beibehaltung der Parameter $E_v^{Schw.}$ und $\sigma_v^{Schw.}$ der Parameter α in Gleichung (4.14) solange variiert, bis eine minimale Abweichung von resultierenden Ratenkoeffizienten zum selber gefalteten Ratenkoeffizienten auftrat. Für hohe Vibrationsniveaus mußte dabei auch die Schwellenergie um einen geringen Wert verringert werden, um die Ratenkoeffizienten auf optimale Übereinstimmung zu bringen. Der so erhaltene Parameter α konnte gemeinsam mit den gegebenen $E_v^{Schw.}$ und $\sigma_v^{Schw.}$ in die ursprüngliche Fitformel (4.14) des SSM übernommen werden.

Für Vibrationsniveaus mit $v > 9$ bei H_2 bzw. $v > 13$ bei D_2 gibt [Bar79] keine Werte für $E_v^{Schw.}$ und $\sigma_v^{Schw.}$ an. Da mit steigendem v sich $E_v^{Schw.}$ immer näher der Null annähert und $\sigma_v^{Schw.}$ einen immer flacher werdenden Anstieg durchläuft, wurden für $v > c$ mit $c = 9$ für H_2 bzw. $c = 13$ für D_2 folgende angenommene Parameter eingesetzt:

$$E_v^{Schw.} = 0 \quad (4.16)$$

$$\sigma_v^{Schw.} = \sigma_c^{Schw.} \quad (4.17)$$

$$\alpha_v = \alpha_c \quad (4.18)$$

Die Abbildungen 4.7 und 4.8 zeigen die neu hinzugefügten Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 . Da die für Wasserstoff verwendeten Parameter derselben Quelle

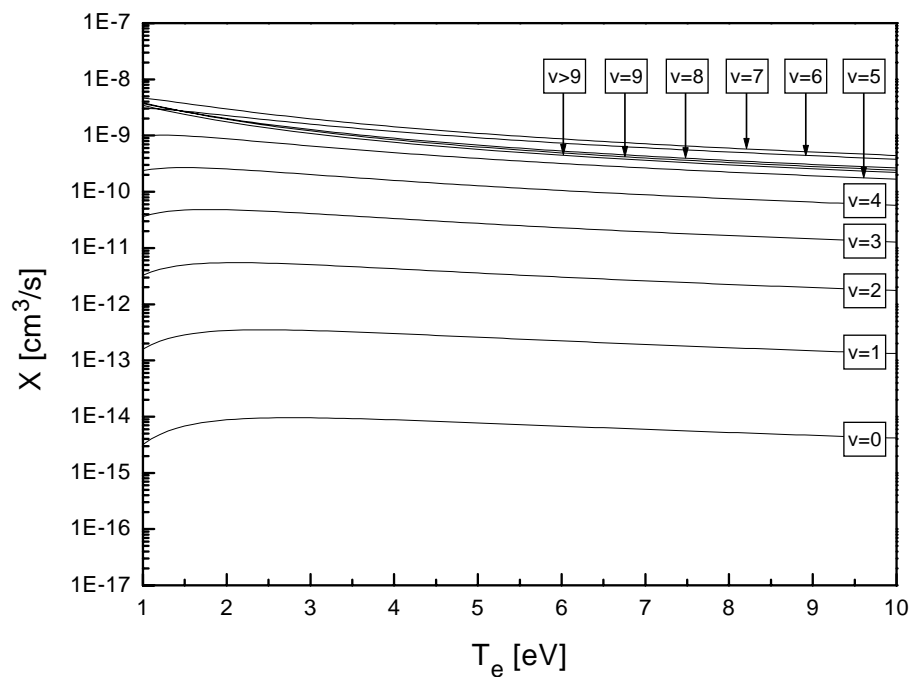


Abbildung 4.7: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für dissoziative Anlagerung bei H_2 nach [Cel99].

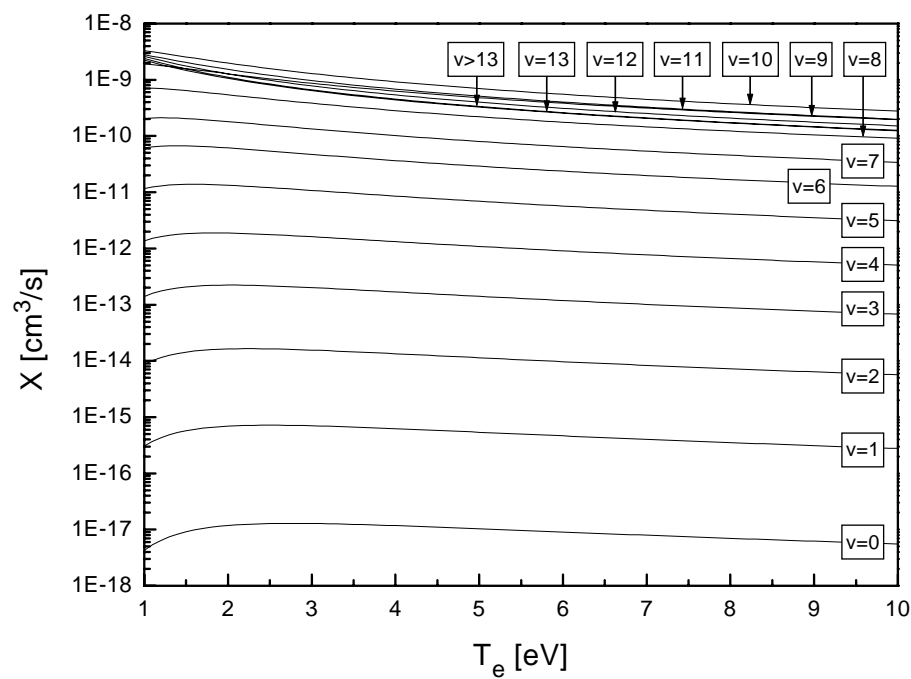


Abbildung 4.8: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für dissoziative Anlagerung bei D_2 nach [Cel99].

entstammen, stimmen die ursprünglichen und die neu implementierten Ratenkoeffizienten für Wasserstoff überein.

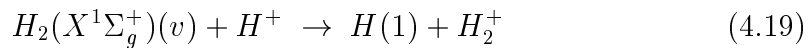
Um zwischen den verschiedenen Ratenkoeffizienten umschalten zu können, ist folgender Schalter im SSM vorhanden:

iDAType = 0:	Ratenkoeffizienten für H_2 nach [Bar79].
iDAType = 1:	Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 nach [Bar79].

4.4 Ladungsaustausch

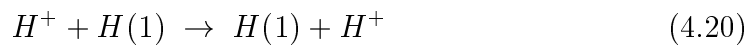
4.4.1 Beschreibung des Prozesses

Trifft ein Wasserstoffmolekül auf ein Proton, so kann ein Elektron ausgetauscht werden. Es entstehen ein neutrales Atom und ein positiv geladenes Molekül:



Diese Reaktion ist von der Energie der beiden beteiligten Stoßpartner abhängig. Im ursprünglichen SSM wurde angenommen, daß die Energie der Ionen der Elektronentemperatur T_e entspricht. Die Schwerteilchenenergie wurde als 0.37 eV gesetzt. Die Abhängigkeit von der Energie beider Stoßpartner wurde dem SSM im Rahmen dieser Arbeit hinzugefügt. Der dabei verwendete Fit ist für Energien von 0.1 eV bis 20 keV gültig. Für die betrachteten Plasmen (Divertorplasmen) ist 0.1 eV für die Energie der Wasserstoffmoleküle eingesetzt. Die Energie der Ionen entspricht der Elektronentemperatur. Es wird angenommen, daß $n(H^+)$ gleich der Elektronendichte ist.

Der Ladungsaustausch zeigt bei ungefähr 2.1 eV eine Resonanz [Ich00]. Im SSM wird angenommen, daß für den Ladungsaustausch im Resonanzfall der Ratenkoeffizient dem Ratenkoeffizienten für den Ladungsaustausch beim Atom entspricht:



Die Resonanzenergie entspricht in etwa $v = 4$ bei Wasserstoff und $v = 6$ bei Deuterium. Die Entvölkerung wird also für $v = 0 \dots 4$ bzw $v = 0 \dots 6$ ansteigen. Für höhere v wird angenommen, daß der Wirkungsquerschnitt wieder abnimmt. Da für den Ladungsaustausch weder für Wasserstoff noch für Deuterium Literaturdaten für Querschnitte zur Verfügung stehen, wurde die Abhängigkeit von den Vibrationsniveaus durch Skalierung des eingebauten Ratenkoeffizienten für $v = 0$ nach [Jan87] abgebildet. Die dazu verwendeten Skalierungsfaktoren entsprechen dem Profil einer Lorentzkurve [Gre01b]. Konkret ergibt sich der Faktor f für Skalierung auf den Koeffizienten für den Vibrationszustand v zu:

$$f = \frac{3.36}{0.0202 + (2.1 - E_v)^2} \quad (4.21)$$

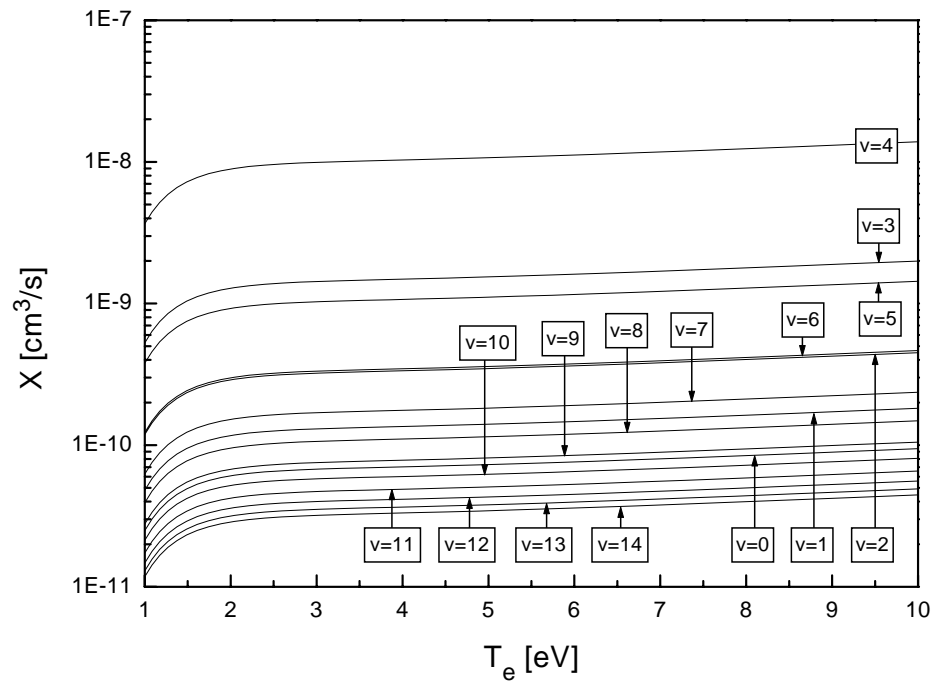


Abbildung 4.9: Im SSM enthaltene Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch bei H_2 , basierend auf [Jan87], skaliert von [Gre01b].

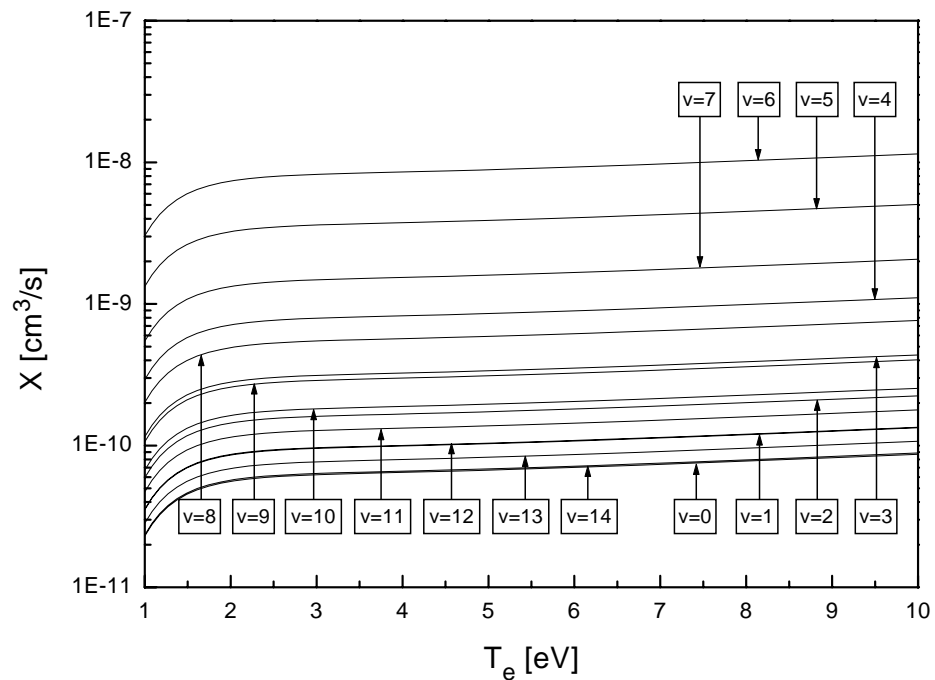


Abbildung 4.10: Im SSM enthaltene Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch bei D_2 , in analoger Weise skaliert wie Daten für H_2 .

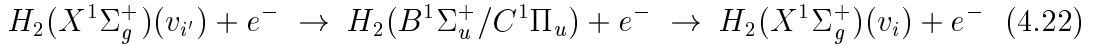
Dabei ist E_v die Energie des Vibrationszustandes v . Das Maximum dieser Lorentzkurve liegt bei $E = 2.1$ eV und hat den Wert $f = 166.3$. Dieser Faktor ergibt sich aus Vergleich der Ratenkoeffizienten für die Prozesse (4.20) und (4.19).

Die beschriebene Skalierung erfüllt aufgrund der energieabhängig gestalteten Formel die Bedingung, daß bei Deuterium der Zustand $v = 6$ resonant wird. Momentan liegen keine weitergehenden Erkenntnisse vor, die eine andere Art der Skalierung nahe legen. Somit wurde der Prozess des Ladungsaustausches unverändert belassen. Die Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen die im Programm enthaltenen Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch.

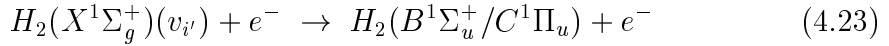
4.5 Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$

4.5.1 Beschreibung des Prozesses

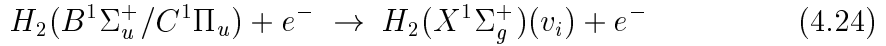
Die beiden Zustände $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$ sind der erste bzw. zweite elektronisch angeregte Zustand oberhalb des Grundzustands $X^1\Sigma_g^+$ im Singulett-System. Für die Umbesetzung der Vibrationsniveaus in $X^1\Sigma_g^+$ ist folgender Prozess von Interesse:



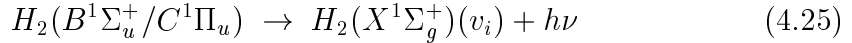
Diesen Prozess kann man sich aus drei einzelnen Prozessen zusammengesetzt vorstellen: Anregung von den Vibrationsniveaus des elektronischen Grundzustands zu $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$ ist im SSM nur über Elektronenstoß möglich:



Der umgekehrte Übergang, von $B^1\Sigma_u^+$ oder $C^1\Pi_u$ zu $X^1\Sigma_g^+(v)$, geschieht zum einen über Stoß zweiter Art:



Der zweite abregende Prozess ist die spontane Emission:



Der Umkehrprozess zur spontanen Emission, die Absorption, kann bei Molekülen aufgrund der Aufspaltung der elektronischen Niveaus vernachlässigt werden.

Diese drei Prozesse sind im SSM auf zweierlei Art implementiert. Zwischen den beiden Methoden kann umgeschaltet werden.

Die erste Implementierung wurde von [Sch00] durchgeführt. Es sind Ratenkoeffizienten für den Gesamtprozess (4.22) implementiert. Dabei stammen aus [Cel94] Querschnittsdaten für $v_{i'} = v_i$ und $v_{i'} = 0, 5, 12$. Aus den daraus resultierenden Ratenkoeffizienten werden mittels quadratischer Interpolation die Ratenkoeffizienten für $v_{i'} = v_i$ und $v_{i'} = 0 \dots 14$ bestimmt. Zur Berechnung der Ratenkoeffizienten für $v_{i'} \neq v_i$ werden Skalierungsfaktoren verwendet, die mit Hilfe von Franck-Condon-Faktoren aus [Spi69a] und [Spi69b] berechnet worden sind.

Die zweite Implementierung des Übergangs stammt von [Gre01b] und besteht aus den drei einzelnen Prozessen (4.23), (4.24) und (4.25). Die dazu notwendigen Ratenkoeffizienten für Prozess (4.23) wurden aus Querschnittsdaten nach [Cel95] berechnet, die Koeffizienten für den Umkehrprozess (4.23) werden mit Hilfe des detaillierten Gleichgewichtes bestimmt. Für Prozess (4.25) werden vibrationsaufgelöste Übergangswahrscheinlichkeiten A_{v_i} benötigt. Diese wurden durch Mittelung aus vollständig aufgelösten, also auch vom Vibrationszustand v_f von $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$ abhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten $A_{v_f v_i}$ nach [All70] gewonnen. Diese Art des Einbaus hat den Vorteil, daß der Übergang hier nicht als alleinstehender Prozeß behandelt wird, sondern durch den Eintrag der drei Einzelprozesse in die Matrix der Ratengleichungen eine echte Kopplung zwischen

den Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$ und $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$ erreicht wird. Somit sind diese beiden Niveaus neben $b^3\Sigma_u^+$ die einzigen elektronischen Niveaus, die mit den Vibrationszuständen des Grundzustands $X^1\Sigma_g^+$ gekoppelt sind. Eine detaillierte Beschreibung dieser Implementierung des Übergangs über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$ findet sich in [Gre01b].

4.5.2 Erweiterung für D_2

Die Erweiterung auf Deuterium ist nur für die verbesserte der in Kapitel 4.5.1 beschriebenen Implementierungen möglich. Für die erste Methode werden Ratenkoeffizienten benötigt, die nach dem Start- und dem Endvibrationszustand aufgelöst sind. Hierzu stehen keine ausreichenden Daten zur Verfügung. Zudem dürfen die für Wasserstoff verwendeten Skalierungen nicht ohne Änderungen für Deuterium übernommen werden.

Die Erweiterung für D_2 wird durch die Betrachtung der drei Teilprozesse durchgeführt. In [Cel95] werden Querschnitte zu Prozess (4.23) für Wasserstoff und Deuterium gegeben. Die Abbildungen 4.11 und 4.12 zeigen die daraus berechneten und in das SSM hinzugefügten Ratenkoeffizienten für Anregung von $X^1\Sigma_g^+$ nach $B^1\Sigma_u^+$, die Abbildungen 4.13 und 4.14 diejenigen für die Anregung nach $C^1\Pi_u$, jeweils für H_2 und D_2 .

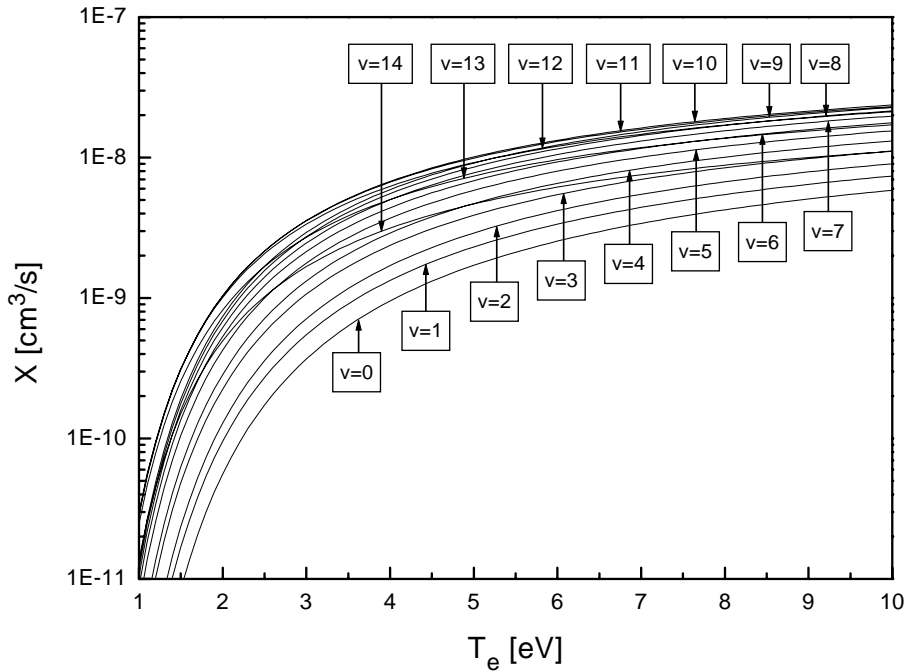


Abbildung 4.11: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Elektronenstoßanregung von $X^1\Sigma_g^+$ nach $B^1\Sigma_u^+$ bei H_2 von [Cel95].

Aus diesen Ratenkoeffizienten werden programmintern unter Verwendung des detaillierten Gleichgewichts diejenigen Ratenkoeffizienten für die Stöße zweiter Art

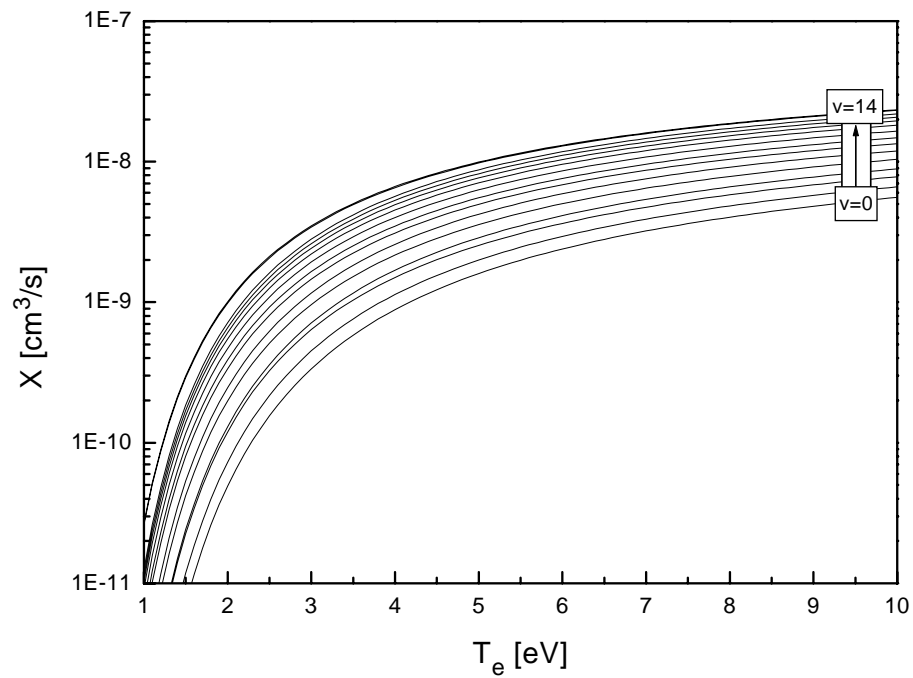


Abbildung 4.12: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Elektronenstoßanregung von $X^1\Sigma_g^+$ nach $B^1\Sigma_u^+$ bei D_2 von [Cel95].

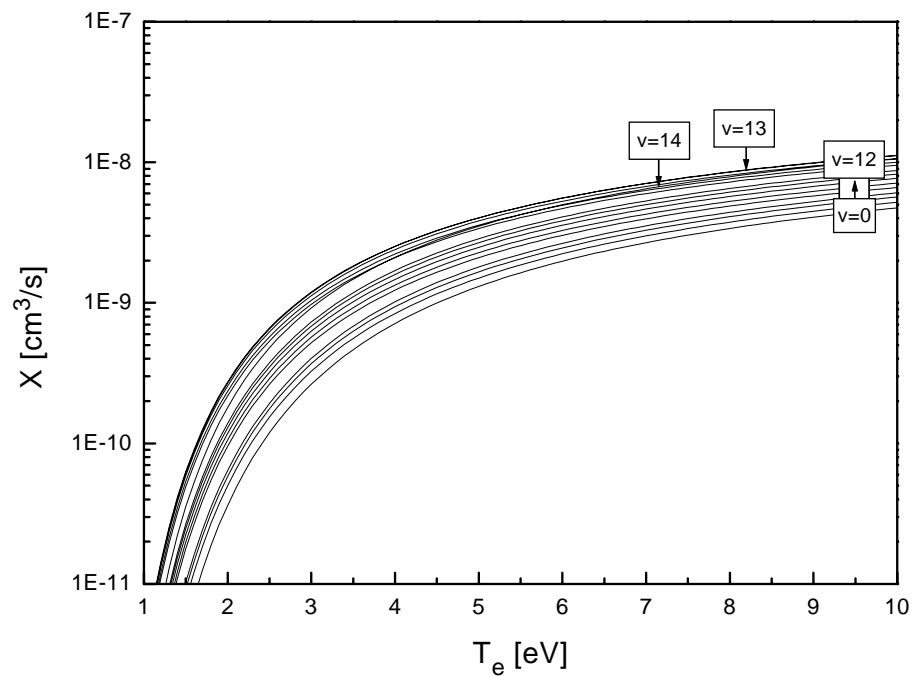


Abbildung 4.13: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Elektronenstoßanregung von $X^1\Sigma_g^+$ nach $C^1\Pi_u$ bei H_2 von [Cel95].

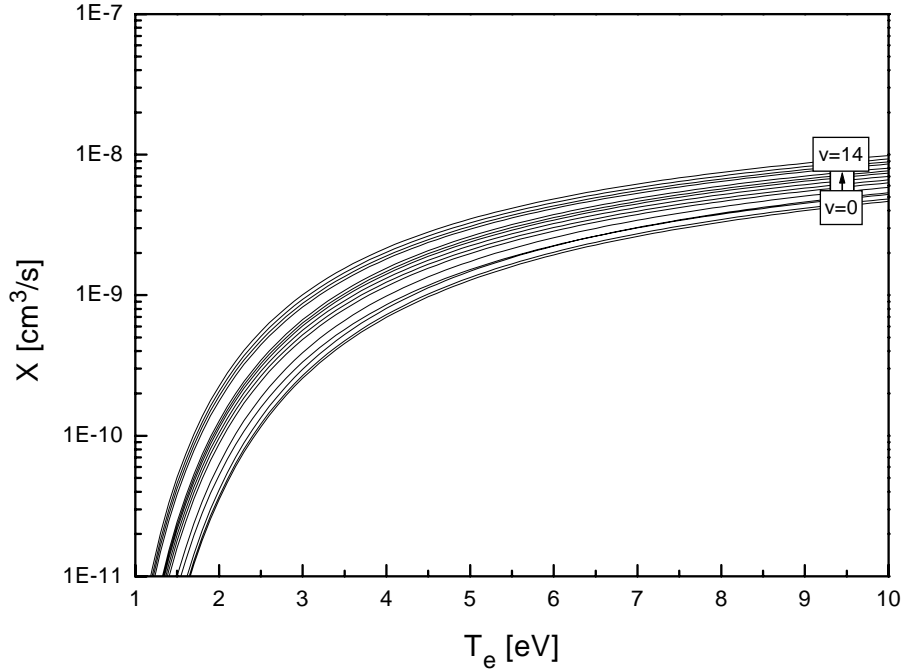


Abbildung 4.14: In das SSM eingebaute Ratenkoeffizienten für Elektronenstoßanregung von $X^1\Sigma_g^+$ nach $C^1\Pi_u$ bei D_2 von [Cel95].

bestimmt. Es werden zusätzlich die vibrationsaufgelösten Übergangswahrscheinlichkeiten für die spontane Emission benötigt. In [All70] sind für beide Isotope nach dem Vibrationszustand v_f des oberen Zustands $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$ und dem Vibrationszustand v_i des Grundzustands $X^1\Sigma_g^+$ aufgelöste Oszillatorstärken $f_{v_i v_f}$ und Übergangswahrscheinlichkeiten $A_{v_f v_i}$ gegeben. Diese mussten in nur vom Vibrationsniveau des Grundzustands abhängige Werte A_{v_i} umgerechnet werden. Dazu nimmt man an, daß Anregung der Zustände $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$ nur vom elektronischen Grundzustand aus möglich ist. Die Wahrscheinlichkeit eines solchen anregenden Übergangs zwischen zwei Niveaus ist proportional zum Betragsquadrat des zum Übergang gehörenden Dipol-Matrixelementes $R_{v_i v_f}$:

$$A_{v_i v_f} = \frac{64\pi^4 \nu_{v_i v_f}^3}{3h} |R_{v_i v_f}|^2 \quad (4.26)$$

Dabei ist h die Plancksche Konstante und $\nu_{v_i v_f}$ die Wellenzahl des betrachteten Übergangs. Durch Auflösen von Gleichung (4.26) erhält man das Dipol-Matrixelement:

$$R_{v_i v_f} \propto \sqrt{\frac{A_{v_i v_f}}{\nu_{v_i v_f}^3}} \quad (4.27)$$

Die Wellenzahl kann aus den Übergangswahrscheinlichkeiten und den Oszilla-

torstärken berechnet werden [All70]:

$$A_{v_i v_f} = \frac{1}{G} \cdot \frac{6.6702 \cdot 10^{15} f_{v_f v_i}}{\lambda_{v_i v_f}^2} \quad (4.28)$$

$$\Rightarrow \nu_{v_i v_f} = \frac{1}{n} \sqrt{G \cdot \frac{A_{v_i v_f}}{6.6702 \cdot 10^{15} f_{v_f v_i}}} \quad (4.29)$$

Dabei ist $\lambda_{v_i v_f}$ die Wellenlänge des betreffenden Übergangs und n der Brechungsindex der Luft. Die Konstante G ist vom oberen Zustand des Übergangs abhängig und beträgt 1 für $B^1\Sigma_u^+$ und 2 für $C^1\Pi_u$. Setzt man die so berechnete Wellenzahl in Gleichung (4.27) ein, so erhält man aus den vorhandenen Daten Werte für die Dipol-Matrixelemente. Aus diesen läßt sich für alle unteren Zustände v_i ein Verzweungsverhältnis bilden, das angibt, welcher Anteil der von v_i nach oben angeregten Elektronen in einem bestimmten oberen Zustand v_1 landet:

$$P_{v_i v_1} = \frac{|R_{v_i v_1}|^2}{\sum_f |R_{v_i v_f}|^2} \quad (4.30)$$

Der Laufindex f geht dabei über alle Vibrationsniveaus im oberen elektronischen Zustand. Mittelt man $P_{v_i v_1}$ nun über alle möglichen Vibrationszustände im elektronischen Grundzustand, so erhält man einen Faktor, der angibt, welcher Anteil der von allen unteren Vibrationsniveaus angeregten Elektronen in das obere Vibrationsniveau v_1 geht:

$$P_{v_1} = \frac{1}{15} \sum_{v_i} P_{v_i v_1} \quad (4.31)$$

Bei Beschränkung auf Anregung vom elektronischen Grundzustand aus geben diese Faktoren die Besetzung der Vibrationsniveaus im jeweiligen oberen elektronischen Zustand, und werden als Gewichtungsfaktoren verwendet, um aus den vollständig vibrationsaufgelösten Übergangswahrscheinlichkeiten nur noch vom unteren Vibrationszustand v_i abhängige Werte zu gewinnen:

$$A_{v_i} = A_{0v_i} P_0 + A_{1v_i} P_1 + A_{2v_i} P_2 + \dots \quad (4.32)$$

Üblicherweise wurden bei der Erweiterung des SSM auf Deuterium alte Datensätze für Wasserstoff im Programm belassen. Da sich beim Nachrechnen herausstellte, daß sowohl die Fitparameter als auch die Übergangswahrscheinlichkeiten fehlerhaft waren, wurden die Daten für H_2 korrigiert und Daten für D_2 ergänzt. Somit ist nun folgender Schalter vorhanden, um zwischen den verschiedenen Ratenkoeffizienten umschalten zu können:

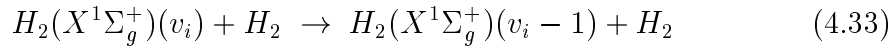
iBCRateType = 0:	Ratenkoeffizienten für H_2 nach [Cel94].
iBCRateType = 1:	Ratenkoeffizienten für H_2 und D_2 nach [Cel95].

4.6 Schwerteilchenstöße

4.6.1 Beschreibung des Prozesses

In Plasmen können eine Vielzahl von unterschiedlichen Arten von Schwerteilchenstößen stattfinden, die bei hohen Neutralteilchendichten relevant sind. Um den Einfluß solcher Prozesse zu demonstrieren, ist im SSM ein typischer dieser Stöße eingebaut:

Ein Wasserstoffmolekül kann auf ein zweites Molekül treffen und Vibrationsenergie von diesem aufnehmen. Diese wird dann in kinetische Energie umgesetzt. In das SSM ist dieser Prozess nur für Verringerung der Vibrationsquantenzahl v um 1 implementiert:



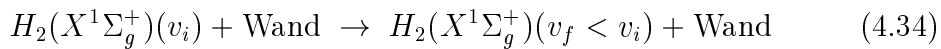
Die in das SSM implementierten Ratenkoeffizienten für diesen Prozess gelten für eine Schwerteilchentemperatur von 500 K und stammen aus [Gor92].

Da der Einbau dieses Schwerteilchenstoßes nur zu Testzwecken vorgenommen wurde und zudem keine Querschnittsdaten für Deuterium vorlagen, wurde hier keine Erweiterung auf Deuterium vorgenommen. Da dieser Prozess keine Rolle in den elektronenstoßdominierten Divertorplasmen spielt, ist eine Erweiterung auf D_2 auch nicht relevant für den Isotopenvergleich.

4.7 Stöße mit der Wand

4.7.1 Beschreibung des Prozesses

Trifft ein vibrationsangeregtes Wasserstoffmolekül auf eine Wand, so können dort verschiedene Vibrationsprozesse stattfinden. Das SSM enthält einen typischen dieser Prozesse und zwar einen abregenden:



Im SSM sind Repopulationswahrscheinlichkeiten $w(v_i, v_f)$ aus [His90] eingebaut. Diese geben die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß ein Teilchen, welches im Vibrationszustand v_i auf die Wand trifft, diese im Zustand v_f wieder verlässt. Um aus diesen Wahrscheinlichkeiten einen Ratenkoeffizienten für die Stöße mit der Wand zu berechnen, muß abgeschätzt werden, wieviele Teilchen pro Zeiteinheit auf die Wand treffen. Bei Verwendung einer Einschlußzeit τ der Wasserstoffmoleküle im Plasma ergibt sich die Rate $\dot{n}(v_f)$ der Wandstöße zu:

$$\dot{n}(v_f) = \frac{w(v_i, v_f)}{\tau} \quad (4.35)$$

Daraus folgt der Ratenkoeffizient $X(v_f)$:

$$X(v_f) = \frac{\dot{n}(v_f)}{n_e} \quad (4.36)$$

Da die Reaktion für Niederdruckplasmen realisiert ist, muß je nach Druck die Diffusion der Teilchen für molekulare und laminare Strömung berücksichtigt werden. Für das betrachtete ECR-Niederdruckexperiment befindet man sich im Übergangsbereich und die Einschlußzeit τ ergibt sich nach [Fan95] zu:

$$\tau = \tau_m + \tau_l \quad (4.37)$$

Dabei ist τ_m die aus der molekularen Strömung resultierende Einschlußzeit, τ_l die aus der laminaren Strömung. Für die laminare Einschlußzeit gilt:

$$\tau_l = \frac{\Lambda^2}{D} \quad (4.38)$$

D ist die Diffusionskonstante für Diffusion zweier Gassorten und Λ die Diffusionslänge. Diese ergibt sich für die vorhandene Geometrie nach [Fan95] zu:

$$\frac{1}{\Lambda^2} = \left(\frac{2.405}{R_0} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{H} \right)^2 \quad (4.39)$$

Es ist H die Länge (7.5 cm) und R_0 der Radius (8.0 cm) des untersuchten Plasmas und daraus ergibt sich Λ für das betrachtete Niederdruckplasma zu etwa 3 cm. Die Diffusionskonstante für Neutralteilchen folgt aus dem Hartkugelmodell:

$$D = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{\sqrt{kT_{gas}}}{(n_1 + n_2)\sigma_{12}} \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2}} \quad (4.40)$$

Dabei ist σ_{12} der gemittelte Stoßquerschnitt, m_1 und m_2 die Massen der Gasmoleküle und n_1 und n_2 die Dichten der beiden Gase. Die Gastemperatur T_{gas} entspricht der Schwerteilchentemperatur. Es muß, je nach im simulierten Plasma vorhandenen Gassorten, auf richtige Wahl von m_1 und m_2 bzw. n_1 und n_2 geachtet werden. Die vorliegende Implementierung wurde für H_2/He -Mischplasmen durchgeführt und somit werden zwei laminare Einschlußzeiten τ_{l,H_2} und $\tau_{l,He}$ bestimmt. Für die gesamte laminare Einschlußzeit gilt dann:

$$\frac{1}{\tau_l} = \frac{1}{\tau_{l,H_2}} + \frac{1}{\tau_{l,He}} \quad (4.41)$$

Die molekulare Einschlußzeit ergibt sich aus dem Verhältnis der charakteristischen Gefäßlänge d zur mittleren thermischen Geschwindigkeit v_{th} :

$$\tau_m = \frac{d}{v_{th}} \quad (4.42)$$

Dabei entspricht d dem Verhältnis von Volumen zur Oberfläche des Experiments, und ergibt sich im betrachteten Niederdruckplasma zu etwa 2 cm.

Für die mittlere thermische Geschwindigkeit gilt:

$$v_{th} = \sqrt{\frac{8kT_{gas}}{\pi m_{H_2}}} \quad (4.43)$$

Insgesamt ergibt sich für das betrachtete Plasma eine Einschlußzeit von $\tau = 5.9 \cdot 10^{-4}$ s für 10 Pa.

Wie für den in Kapitel 4.6 beschriebenen Prozess der Schwerteilchenstöße wird auf eine Erweiterung für D_2 verzichtet, da die Stöße mit der Wand keine Rolle in den elektronenstoßdominierten Divertorplasmen spielen.

4.8 Ergebnisse der Rechnungen

Für elektronenstoßdominierte Plasmen wird die Besetzung der 15 im SSM betrachteten Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$ in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur T_e bestimmt. Dazu sind jeweils die in Kapitel 4.1 bis einschließlich 4.5 beschriebenen Vibrationsprozesse aktiviert. Die berechneten Besetzungsdichten der Vibrationsniveaus zeigen eine geringe Abhängigkeit von der Elektronendichte. Die Rechnung wird zunächst zweimal für H_2 durchgeführt: Bei der ersten Rechnung waren per Schalter die ursprünglichen Ratenkoeffizienten für die einzelnen Prozesse ausgewählt, beruhend auf dem jeweils neuesten Datensatz. Die zweite Rechnung wurde mit den neu für die Erweiterung auf D_2 eingebauten Ratenkoeffizienten durchgeführt. Abbildung 4.15 und 4.16 zeigen Ergebnisse dieser Rechnungen für $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ abhängig von T_e .

Für Abbildung 4.15 wurden die erhaltenen Besetzungen der Vibrationsniveaus $v = 0 \dots 7$ auf den Zustand $v = 0$ normiert.

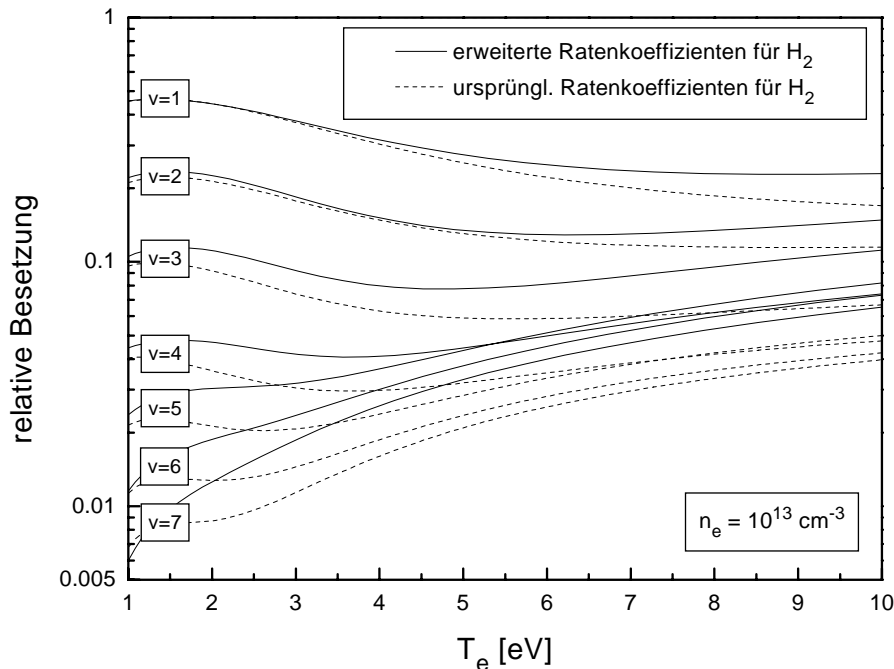


Abbildung 4.15: Relative, auf $v = 0$ normierte Besetzung der ersten acht Vibrationsniveaus von H_2 . Verglichen sind Ergebnisse unter Verwendung von verschiedenen Eingangsdaten.

Mit steigendem v nimmt die Besetzung stark ab, bei $v = 3$ beträgt sie nur noch

ungefähr 1% der Besetzung von $v = 0$. Für alle betrachteten Vibrationsniveaus liegen die mit den erweiterten Ratenkoeffizienten berechneten relativen Besetzungen bei geringer Elektronentemperatur noch sehr nahe an denen mit den ursprünglichen Koeffizienten bestimmten Besetzungen. Die Abweichungen nehmen mit steigendem T_e rasch zu und erreichen bis $T_e = 10$ eV einen Faktor von maximal 1.7 (bei $v = 7$).

Unabhängig von den verwendeten Ratenkoeffizienten fällt der Verlauf der Kurven für $v > 4$ auf: $v = 5$ ist für $T_e > 5$ eV ungefähr gleich stark oder stärker besetzt als $v = 4$. Bei Verwendung der erweiterten Ratenkoeffizienten sind ab etwa 10 eV sogar $v = 5$ und $v = 6$ stärker besetzt als $v = 4$.

Die Ursache für die hohe Besetzung von $v = 5$ und $v = 6$ ist der Ladungsaustausch, der ein resonantes Verhalten (siehe Abbildung 4.9 und 4.10) mit Maximum bei $E \simeq 2.1$ eV zeigt. Diese Energie entspricht dem Vibrationsniveau $v = 4$ bei H_2 . Aufgrund der in Kapitel 4.4 beschriebenen Skalierung der Ratenkoeffizienten durch eine Lorentzkurve wird die Entvölkerung der Niveaus $v = 0 \dots 4$ stark zunehmen und mit v dann sehr schnell wieder abnehmen. Ab $v = 9$ liegt die Entvölkerung unter der für $v = 0$.

Deutlich sichtbar wird dieser Effekt auch in Abbildung 4.16, wo die relative Besetzung der Vibrationsniveaus für drei Elektronentemperaturen aufgetragen ist.

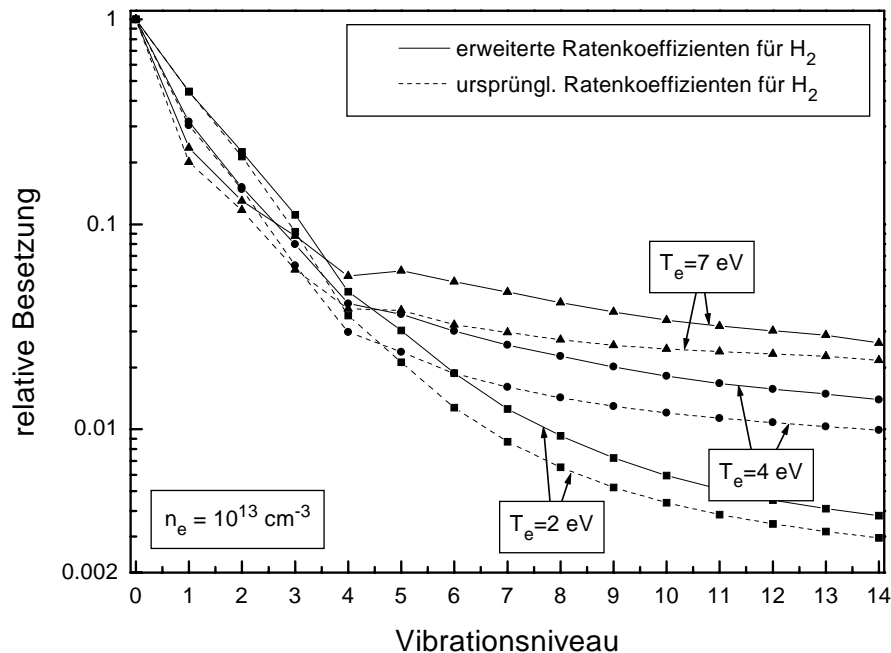


Abbildung 4.16: Relative, auf $v = 0$ normierte Besetzung aller 15 Vibrationsniveaus von H_2 für drei ausgewählte Elektronentemperaturen. Verglichen sind Ergebnisse unter Verwendung von verschiedenen Eingangsdaten.

Für höhere Elektronentemperaturen ergibt sich ein deutlich flacherer Verlauf der

Besetzung für $v > 4$.

Verantwortlich für diesen flachen Verlauf ist die Umbesetzung über $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$. Da die Ratenkoeffizienten für Stoßanregung nach $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$ mit steigendem v um einen Faktor 3 zunehmen, werden auch die mittels detailliertem Gleichgewicht berechneten Koeffizienten für Stoß zweiter Art mit steigendem v zunehmen. Dies hat zur Folge, daß die höheren Vibrationsniveaus von $X^1\Sigma_g^+$ stärker von dem angeregten elektronischen Niveau besetzt werden, als niedrige Vibrationsniveaus.

Einzeln betrachtet sorgt also die Umbesetzung über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$ für einen mit steigendem v allgemein immer flacheren Verlauf der Kurve in Abbildung 4.16. Der Ladungsaustausch sorgt für einen Knick, die Unterbesetzung des resonanten Zustands $v = 4$ und einen etwas abflachenden Verlauf bei zunehmenden v . In Kombination beider Übergänge entsteht der Knick bei dem resonanten Zustand und ein sehr flacher Verlauf für $v > 4$.

Sowohl dieser Effekt als auch der Verlauf der Besetzung für $v \leq 4$ sind deutlich von der Elektronentemperatur abhängig. Die Besetzung fällt für niedrige Vibrationsniveaus in der logarithmischen Darstellung linear ab, wenn man die Werte gegen ΔE statt gegen v aufträgt. Das heißt, man kann der Besetzung eine Vibrationstemperatur T_{vib} zuordnen. Mit steigendem T_e nimmt dann T_{vib} ab. Die Kurven für höhere v dagegen werden mit steigender Elektronentemperatur immer mehr durch den oben beschriebenen Effekt angehoben. Bei kleinen T_e , z.B. 2 eV ergibt sich kein sichtbares Abknicken der Besetzung.

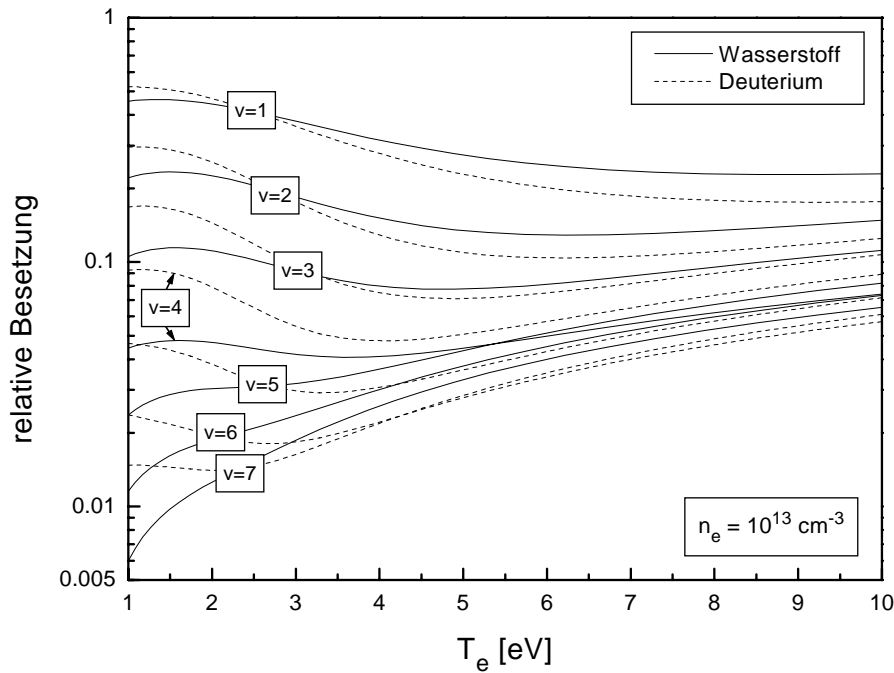


Abbildung 4.17: Relative, auf $v = 0$ normierte Besetzung der ersten acht Vibrationsniveaus von H_2 und D_2 aus Rechnung mit den neu in das SSM hinzugefügten Ratenkoeffizienten.

Der Vergleich von H_2 und D_2 wird auf der Basis der erweiterten Ratenkoeffizienten durchgeführt. Abbildung 4.17 zeigt für beide Isotope die Besetzungen der Vibrationsniveaus $v = 0 \dots 7$, normiert auf $v = 0$. Die Besetzungen der Zustände $v = 0 \dots 3$ von H_2 und D_2 zeigen nur geringe Abweichungen. Abhängig von der Elektronentemperatur ist Deuterium gegenüber Wasserstoff um einen Faktor von maximal 1.6 stärker besetzt ($v = 3$ bei 1 eV) bzw. um einen Faktor von 1.3 schwächer besetzt ($v = 1$ bei 10 eV).

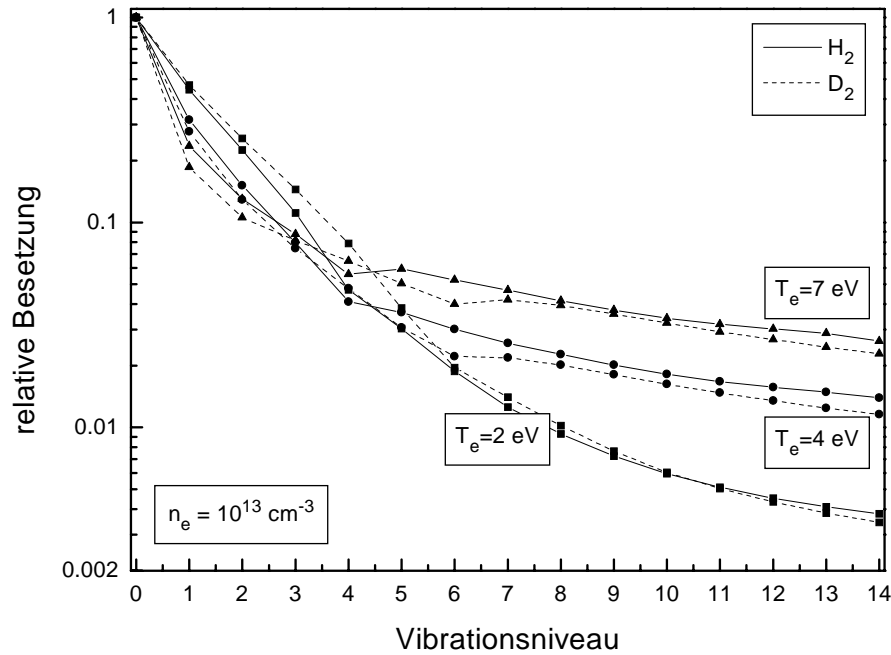


Abbildung 4.18: Relative, auf $v = 0$ normierte Besetzung aller 15 Vibrationsniveaus von H_2 und D_2 für drei ausgewählte Elektronentemperaturen aus Rechnung mit den neu in das SSM hinzugefügten Ratenkoeffizienten.

Da die Resonanz beim Ladungsaustausch energieabhängig ist, hat sich die schwache Besetzung von $v = 4$ bei Wasserstoff auf den energetisch ähnlich liegenden Zustand $v = 6$ bei Deuterium verschoben. Daraus resultiert eine höhere Besetzung von $v = 4$ und eine tiefere Besetzung von $v = 6$ bei Deuterium gegenüber Wasserstoff. Die Besetzung von $v = 5$ und für alle $v \geq 7$ ist bei beiden Isotopen ähnlich.

Abbildung 4.18 zeigt einen vergleichbaren Verlauf bei H_2 und D_2 . Das bedeutet, daß die beiden Moleküle im Plasma eine ähnliche Vibrationsbesetzung haben. Aufgrund des engeren Zusammenliegens der Vibrationslevels bei Deuterium resultiert daraus eine niedrigere mittlere Vibrationsenergie als bei Wasserstoff.

Auch das Deuterium zeigt den aus Kombination von Ladungsaustausch und Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$ resultierenden Effekt: Ein Abknicken der Kurven beim Resonanzzustand $v = 6$ und ein flacherer Verlauf der Besetzung für höhere Vibrationszustände.

4.9 Diagnostik am Divertor von ASDEX Upgrade

In Divertorplasmen liegt die Elektronendichte in der Größenordnung von etwa 10^{13} cm^{-3} , somit sind alle Prozesse relevant, die von einem Elektronenstoß ausgehen. Dies betrifft die Umbesetzung durch Elektronenstoß, die Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$, die dissoziative Anlagerung, den Ladungsaustausch und den Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ bzw. $C^1\Pi_u$.

In Divertorplasmen werden Wasserstoffmoleküle ausschließlich an der Wand erzeugt und im Plasmavolumen durch Dissoziation und Ionisation vernichtet. Die Moleküldichte in Divertorplasmen ist so gering, daß Stöße von Wasserstoffmolekülen untereinander sehr unwahrscheinlich sind. Die Ratenkoeffizienten für den Prozess der Schwerteilchenstöße (Kapitel 4.6) sind für diese Bedingungen nicht mehr gültig, somit muß dieser Prozeß deaktiviert werden. Gleiches gilt für die Stöße mit der Wand. Zudem ist die in Kapitel 4.7 beschriebene Implementierung dieser Stöße sehr stark von der Plasmazusammensetzung und der Reaktorgeometrie abhängig. Wandprozesse können außerdem vom Wandmaterial abhängen.

In Kapitel 4.8 wurde eine Abhängigkeit der mit dem SSM berechneten Grundzustandsvibrationsbesetzung von der Elektronentemperatur gezeigt. Aus dieser Tatsache läßt sich eine T_e -Diagnostik für Divertorplasmen ableiten [Fan01]. Dabei wird nach experimenteller Bestimmung der Vibrationsbesetzung diese mit aus dem SSM erhaltenen Werten für verschiedene T_e verglichen. Im Divertorplasma von ASDEX Upgrade stehen als Diagnostik für niedrige Elektronentemperaturen Emissionsspektroskopie von Rekombinationsstrahlung und für hohe T_e Messungen mit Langmuir-Sonden als Diagnostik zur Verfügung. Im Zwischenbereich bietet sich die spektroskopische Methode über die Vibrationsbesetzung von $X^1\Sigma_g^+$ als Alternative zu aufwendigen Diagnostiken wie z.B. der Thomson-Streuung an.

Die spektroskopische Methode, die Vibrationsbesetzung im Grundzustand mit den Mitteln der Emissionsspektroskopie als T_e -Diagnostik zu verwenden, basiert auf der Annahme, daß sich die Besetzung im Grundzustand nach dem Franck-Condon-Prinzip in angeregte elektronische Zustände projiziert. Anregung von anderen Zuständen als dem Grundzustand ist ebenso wie Kaskadenprozesse vernachlässigbar [Fan98]. Somit kann mit den Franck-Condon-Faktoren für den Übergang von $X^1\Sigma_g^+$ nach einem beliebigen elektronischen Zustand die Vibrationsbesetzung für diesen Zustand aus der im SSM berechneten Grundzustandsvibrationsbesetzung bestimmt werden. Als elektronisch angeregter Zustand wird $d^3\Pi_u$ verwendet. Dieses Niveau ist der obere Zustand des Fulcher-Übergangs $d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$. Mit Hilfe der entsprechenden Verzweigungsverhältnisse kann man aus den gemessenen Vibrationsbanden des Fulcher-Übergangs einen experimentell bestimmten Verlauf der Vibrationsbesetzung in $d^3\Pi_u$ bestimmen und diesen mit den durch Projektion der Werte aus dem SSM gewonnenen Verlauf vergleichen. Der Fulcher-Übergang ist für diese Methode besonders geeignet, da er im sichtbaren Bereich liegt und sich die einzelnen Linien der ersten vier diagonalen Vibrationsbanden im Spektrum gut trennen lassen.

Die Projektion der mit dem SSM gewonnenen Grundzustandsdichten in den oberen Zustand zeigen die Abbildungen 4.19 und 4.20 für H_2 und D_2 in Abhängigkeit von T_e .

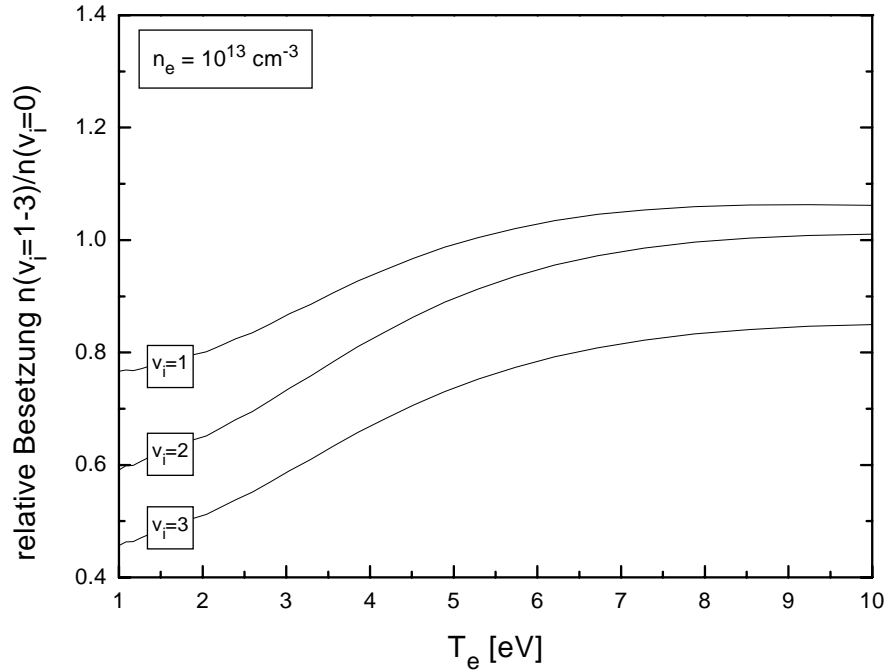


Abbildung 4.19: Relative Vibrationsbesetzung im oberen Fulcherzustand $d^3\Pi_u$ von Wasserstoff. Die Abhängigkeit von der Elektronendichte n_e ist vernachlässigbar gering.

Da Anregung in den oberen Zustand des Fulcher-Übergangs von angeregten Vibrationsniveaus des Grundzustands erfolgt, werden neben den Franck–Condon Faktoren vibrationsaufgelöste Ratenkoeffizienten für die Stoßanregung von $d^3\Pi_u$ vom Grundzustand aus verwendet. Diese wurden durch Verschieben der Schwellenergie der entsprechenden Querschnitte genähert.

Die Energieminima der Potentialkurven beider beteiligter Zustände sind nicht identisch. Somit folgt aus dem Franck–Condon–Prinzip, daß die relative Besetzung der Vibrationsniveaus in $d^3\Pi_u$ nicht der in $X^1\Sigma_g^+$ (Abbildung 4.17) entspricht.

Die Vibrationsbesetzung in $d^3\Pi_u$ zeigt für eine Elektronentemperatur von 1 bis 6 eV deutlich eine Abhängigkeit von T_e , bei höheren Temperaturen wird die Abhängigkeit aufgrund der flacher verlaufenden Kurven geringer und damit eine Diagnostik zunehmend unempfindlicher.

Mit Hilfe des SSM wird aus vorliegenden Meßdaten für zwei identische Wasserstoffentladungen von ASDEX Upgrade die Elektronentemperatur in Abhängigkeit von der Zeit bestimmt. Diese Entladungen haben die Bezeichnung Nummer 9700 und 9702 und erstreckten sich jeweils über 6 s. In dieser Zeit ändert das Divertorplasma seinen Recyclingzustand von zunächst Attachment zu einem Detachment und gegen Ende wieder in Attachment. Daraus folgt eine zunächst ansteigende

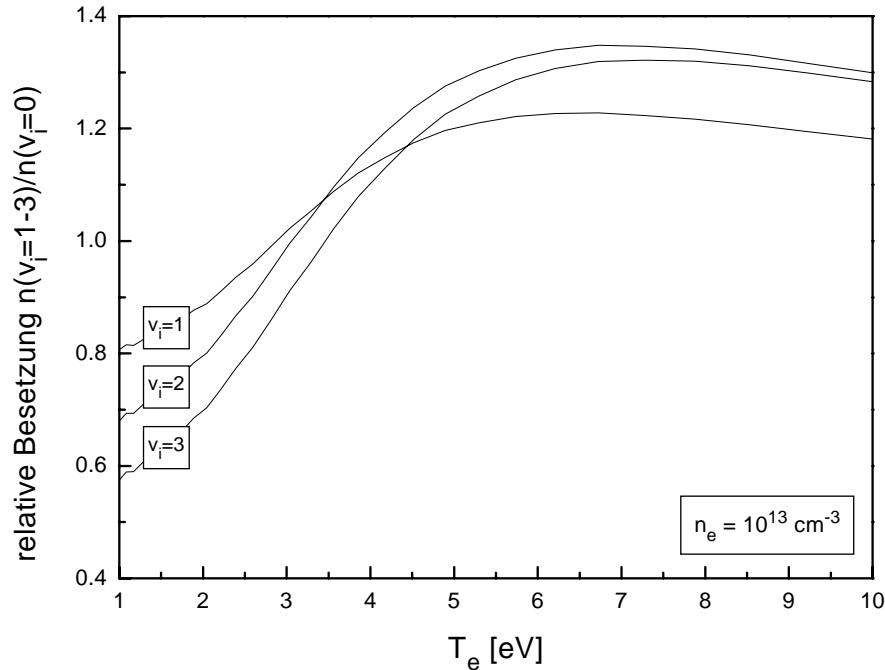


Abbildung 4.20: Relative Vibrationsbesetzung im oberen Fulcherzustand $d^3\Pi_u$ von Deuterium. Die Abhängigkeit von der Elektronendichte n_e ist vernachlässigbar gering.

und dann wieder abfallende Elektronendichte. Die Elektronentemperatur verhält sich umgekehrt.

Für die Bestimmung der Elektronentemperatur wurden neben der vorgestellten Methode der Molekülspektroskopie als Vergleich Messungen mit einer Langmuir-Sonde und Ergebnisse aus der Spektroskopie von Rekombinationsstrahlung bei vergleichbaren Sichtstrahlen verwendet. Dabei ist zu beachten, daß diese drei Diagnostiken unterschiedliche Plasmavolumina wichten und somit auch unterschiedliche Temperaturen liefern können [Fan01].

Abbildung 4.21 zeigt die aus den drei unterschiedlichen Diagnostiken erhaltenen Elektronentemperaturen. Für die Diagnostik über die Vibrationsbesetzung werden Ergebnisse aus zwei verschiedenen Sichtstrahlen (ROV014 und ROV018) verglichen, für die Rekombinationsstrahlung werden nur Ergebnisse aus einem Sichtstrahl (ROV010) dargestellt. Die Fehlerbalken zeigen die durchgeführte Mittelung über 0.5 s. Diese wurde vorgenommen, um das Signal-Rausch-Verhältnis der Molekülspektren zu verbessern.

Die Messungen mit der Langmuir-Sonde und der Spektroskopie der Molekülstrahlung liefern einen ähnlichen Verlauf der Elektronentemperatur über die Zeit. Die Werte aus Sondenmessung liegen deutlich über denen aus den anderen Diagnostiken. Dies läßt sich durch das unterschiedliche betrachtete Plasmavolumen begründen. Die Temperaturen aus Spektroskopie von Molekülen und der Rekombinationsstrahlung liegen ab etwa 3.2 s, d.h. bei geringen Elektronendichten, gut aufeinander. Dies läßt darauf schließen, daß die neu in das SSM implementierten

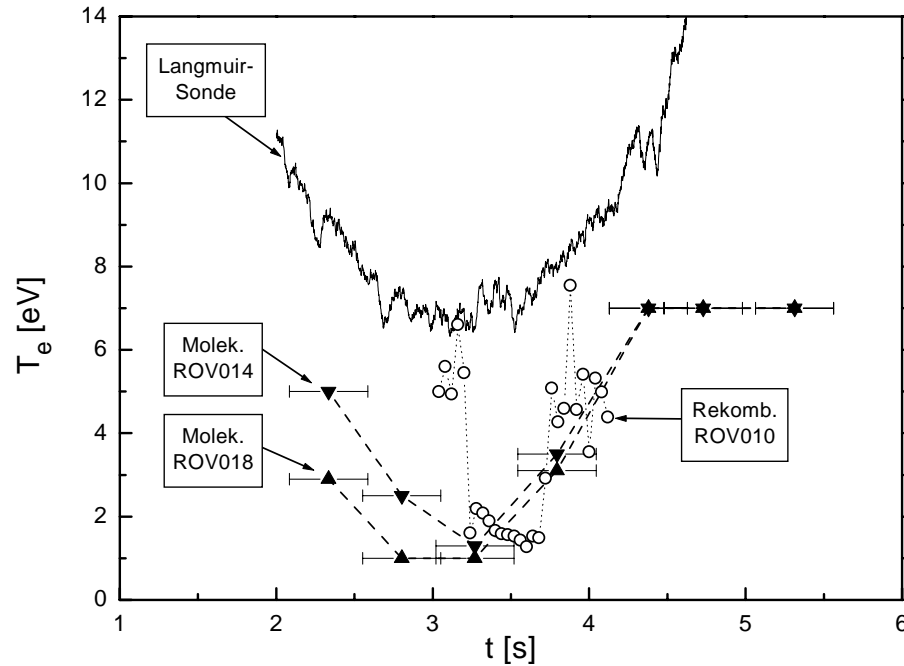


Abbildung 4.21: Elektronentemperatur aus Langmuir-Sonden-Messungen, Spektroskopie von Rekombinationsstrahlung und der Molekülspektroskopie für die identischen ASDEX Upgrade-Schüsse 9700 und 9702.

Ratenkoeffizienten für Wasserstoff die Vorgänge im Divertorplasma gut abbilden. Vergleicht man Elektronentemperaturen, die im selben Plasma zum selben Zeitpunkt aus Strahlung des Deuteriummoleküls und des Wasserstoffmoleküls bestimmt wurden, so sollten sich keine großen Abweichungen ergeben. Um einen Vergleich zwischen Ergebnissen für beide Isotope zu ermöglichen, wurden Daten zu vier identischen Deuteriumentladungen ausgewertet. Diese Entladungen haben die Bezeichnung Nummer 12554 bis 12557. Zu einem bestimmten Zeitpunkt t_1 wurde Wasserstoff in das Plasma eingeblasen. Dies ermöglicht gleichzeitige Messung der Fulcher-Bande von H_2 und D_2 . Es liegen Daten für verschiedene Sichtstrahlen vor. Die Auswertung wurde für ZOV001, ZOV002, ZOV003 und ZON003, die auf verschiedene Volumina abbilden, durchgeführt. Aus den Sichtstrahlen ZOV003 und ZON003 sollten vergleichbare Ergebnisse resultieren. Abbildung 4.22 zeigt die Ergebnisse.

Da der Wasserstoff nur zu einem bestimmten Zeitpunkt eingeblasen wurde, stehen für H_2 auch nur Ergebnisse für diesen Zeitpunkt zur Verfügung. Rechnungen für Deuterium können dagegen für den gesamten Zeitverlauf der Entladung durchgeführt werden.

Zur Bestimmung von T_e wurden experimentell erhaltene Daten für einen oder zwei Vibrationszustände mit den dazugehörigen Verläufen aus den Abbildungen 4.19 bzw. 4.20 verglichen. Dies ist in Abbildung 4.22 durch die unterschiedlichen Symbole dargestellt. Es zeigen sich für alle Sichtstrahlen und Zeiten mit Ausnah-

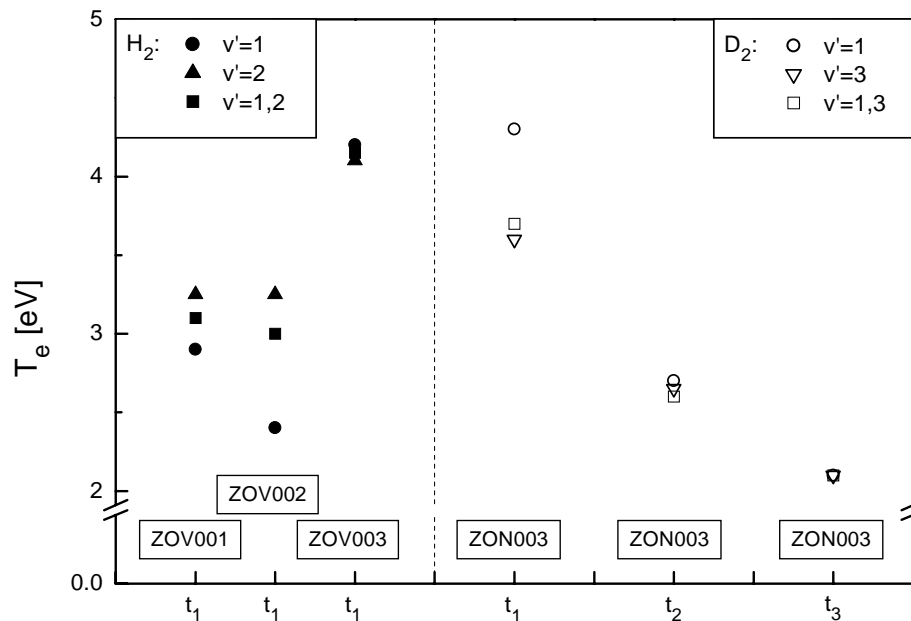


Abbildung 4.22: Elektronentemperatur aus Molekülspektroskopie für vier identische ASDEX Upgrade-Entladungen. Es wurde H_2 in eine D_2 -Entladung eingeblasen.

me von ZOV002 zum Zeitpunkt t_1 bemerkenswert geringe Abweichungen der aus verschiedenen Vibrationsniveaus bestimmten Elektronentemperaturen. Ein Vergleich der aus den beiden Gasen zum selben Zeitpunkt t_1 und aus vergleichbaren Sichtstrahlen ZOV003 bzw. ZON003 ermittelten Temperaturen zeigt auch nur geringe Abweichungen. Alle diese Übereinstimmungen lassen auf die Anwendbarkeit des SSM im erweiterten Zustand sowohl für H_2 als auch für D_2 schließen.

Abschließend kann man sagen, daß sich die vorgestellte Methode zur Bestimmung der Elektronentemperatur im Divertorplasma besonders zur Verwendung bei Entladungen anbietet, in denen T_e zwischen 1 und 6 eV liegt. Hier dient sie als Bindeglied zwischen Sondenmessungen und der Spektroskopie der Rekombinationsstrahlung. Eine detaillierte Beschreibung der vorgestellten Diagnostikmethode mit weiteren Ergebnissen findet sich in [Fan01].

Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird ein vorhandenes Stoß-Strahlungs-Modell (SSM) für das Wasserstoffmolekül und Atom vorgestellt und erweitert. Es soll zur Unterstützung der Diagnostik an einem Niederdruckplasma und dem Divertorplasma von AS-DEX Upgrade angewendet werden. Das SSM dient der Berechnung von Besetzungsdichten und ist für Bedingungen gültig, die zwischen dem thermodynamischen Gleichgewicht und dem Koronagleichgewicht liegen. Es werden je 40 angeregte Zustände im Singulett- und Triplett-System des molekularen Wasserstoffs sowie 40 angeregte Atomzustände untersucht. Der Grundzustand des Moleküls ist in 15 Vibrationsniveaus aufgelöst. Die Besetzungsdichten in den jeweiligen Grundzuständen sowie die Dichten einiger anderer Teilchensorten werden vorgegeben. Zur Bestimmung der Besetzungsdichten im Gleichgewicht werden Bilanzgleichungen aller be- und entvölkernden Prozesse aufgestellt. Diese Ratengleichungen werden als Matrix geschrieben. Die aus der Lösung dieser Matrix erhaltenen Besetzungsdichten können zur Berechnung von effektiven Ratenkoeffizienten für radiative Übergänge, aber auch für Ionisation und Dissoziation, verwendet werden. Bei dem Aufbau der Bilanzgleichungen tritt das wichtigste Problem aller SSM auf: Eine zumeist ungenügende Datenbasis. Im Idealfall sind für alle betrachteten Prozesse Ratenkoeffizienten aus einer Datenquelle vorhanden. In der Realität werden Koeffizienten aus verschiedenen Quellen oder Näherungen verwendet. Nicht vorhandene Daten werden durch Skalierungsgesetze aus vorhandenen Daten gewonnen. Die vorliegende Arbeit zeigt durch Vergleich verschiedener Daten, daß die Aussagekraft von aus dem SSM erhaltenen Ergebnissen stark von der eingehenden Datenbasis abhängt.

Mit Hilfe der invertierten Matrix der Ratengleichungen wurden Untersuchungen zum Zustandekommen eines Besetzungsgleichgewichts durchgeführt. Der Schwerpunkt wurde dabei auf den oberen Zustand des Fulcher-Übergangs ($d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+$) gelegt. Dieser Übergang geht von elektronischen Zustand $n = 3$ nach $n = 2$ und die Strahlung wird häufig zur Diagnostik von molekularem Wasserstoff eingesetzt. Es wurde zunächst gezeigt, daß nur ein kleiner Teil der Besetzungsdichte in den einzelnen Molekülzuständen direkt aus dem Grundzustand stammt. Ein weitaus größerer Teil kommt aus anderen Niveaus. Aus diesem Grund ist bei Anwendung der Koronagleichung ein effektiver Emissionsratenkoeffizient anstelle

einem mit dem passenden Verzweigungsverhältnis skalierten Anregungsratenkoeffizienten zu verwenden. Desweiteren wurde am Beispiel des Triplett-Zustandes mit $n = 3$ gezeigt, daß der direkt aus dem Grundzustand stammende Anteil der Besetzungsdichte in einem Zustand stark von der Modellierung des Verhaltens anderer Zustände abhängig sein kann. Im speziellen Beispiel wurden die Übergangswahrscheinlichkeiten für Strahlung zwischen den Niveaus $a^3\Sigma_g^+$ und $c^3\Pi_u$ variiert. Es wurden drei Fälle untersucht, die den Strahlungsübergang zwischen den beiden Übergängen unterschiedlich gewichten: Die im SSM ursprünglich enthaltenen Übergangswahrscheinlichkeiten lassen nur den Übergang von $c^3\Pi_u$ nach $a^3\Sigma_g^+$ zu und sind nicht realistisch, da auch Strahlungsübergang von den höheren Vibrationsniveaus in $a^3\Sigma_g^+$ nach $c^3\Pi_u$ erlaubt ist. Da der vibratorische Grundzustand von $c^3\Pi_u$ metastabil ist, wurden für den zweiten Fall beide Übergangswahrscheinlichkeiten auf Null gesetzt. Der dritte Fall verwendet Übergangswahrscheinlichkeiten aus der Literatur und berücksichtigt beide Strahlungsübergänge. Dieser Fall entspricht am besten der realen Situation. Je wahrscheinlicher die Entvölkerung des metastabilen $c^3\Pi_u$ gesetzt wurde, umso größer wurde die Besetzung aus dem Grundzustand in $n = 3$. Auch die Anteile der Besetzungsdichte, die aus bestimmten anderen Niveaus stammen, variieren stark. Folglich ist es von besonderer Wichtigkeit, die Übergänge zwischen diesen beiden Zuständen, aber auch den anderen Niveaus mit $n = 2$, mit korrekten Übergangswahrscheinlichkeiten zu betrachten. Zur besseren Modellierung dieser Übergänge wurde eine Aufteilung des Zustandes $c^3\Pi_u$ in zwei Zustände empfohlen. Wünschenswert wäre zudem eine Auflösung von $n = 3$ nach den elektronischen Zuständen und der Zustände mit $n = 2$ bzw. $n = 3$ nach ihren Vibrationsniveaus. Dies ist momentan jedoch aufgrund der mangelnden Datenbasis schwer zu realisieren oder muß auf weiteren Skalierungsgesetzen beruhen.

Ein sich im Besetzungsgleichgewicht befindendes Niveau wird auch in externe Teilchensorten abgeregt. Die dominierende dieser Teilchensorten ist für geringe Elektronendichten im Triplett-System aufgrund des repulsiven Zustands in diesem System das Atom und im Singulett-System das Molekül im Grundzustand. Mit steigender Elektronendichte nehmen Stoßprozesse zu und die Ionisation wird zum dominierenden Abregungsprozess.

Nachdem die Mechanismen zum Zustandekommen eines Besetzungsgleichgewichts untersucht worden sind, wurden Untersuchungen zu den Besetzungsdichten einiger Niveaus im Molekül durchgeführt. Aus den Besetzungen wurden effektive Ratenkoeffizienten für fünf spektroskopisch beobachtbare Übergänge berechnet. Mit Hilfe dieser Ratenkoeffizienten wurde aus spektroskopisch ermittelten Emissivitäten die Dichte des molekularen Wasserstoffs im Grundzustand bestimmt. Die aus den verschiedenen Übergängen erhaltenen Dichten weichen stark voneinander ab. Dies resultiert aus der nicht vollständigen Modellierung des Moleküls im SSM sowie der Anwendung von Skalierungsgesetzen. Der Fehler in der Messung und Auswertung wird auf 25 % abgeschätzt.

Für Divertorplasmen von Fusionsexperimenten wurde eine Diagnostikmethode zur Bestimmung des molekularen Wasserstoffflusses vorgestellt und die benötigten Daten zusammengestellt. Moleküle entstehen an der Wand, strömen in das

Plasma, und werden im Plasmavolumen durch Ionisation und Dissoziation vernichtet. Mit dem SSM wird das Verhältnis der effektiven Ratenkoeffizienten für Ionisation und Dissoziation zu dem effektiven Ratenkoeffizienten für einen ausgewählten Übergang berechnet. Mit Hilfe dieses Verhältnisses läßt sich aus der freiwerdenden Strahlung des Übergangs der molekulare Wasserstofffluß bestimmen.

Die Modellierung des Wasserstoffatoms im SSM bereitet weniger Schwierigkeiten als die des Moleküls: Aufgrund der geringeren Anzahl von Energieniveaus im Atom existiert eine bessere Datenbasis. Allerdings wird im SSM die Feinstrukturaufspaltung der atomaren Niveaus vernachlässigt. Bei der Modellierung des Atoms müssen aber folgende Punkte beachtet werden: Das Atom kann von einer Vielzahl externer Teilchensorten wie dem Molekül oder verschiedenen Ionen Bevölkerung erfahren. Deshalb werden für die Neutralteilchendichten experimentell bestimmte Werte verwendet und die Ionenzusammensetzung für das betrachtete Niederdruckplasma mit dem Programm KALLIOPE berechnet. Dieses Programm stellt eine vereinfachte Teilchenbilanz auf. Es wurde gezeigt, wie die Besetzungsdichte der angeregten Niveaus im Atom von der Einbeziehung der externen Teilchensorten in die Rechnung abhängt: Einbeziehung des Moleküls führt zu einer Anhebung der Besetzung vor allem für hohe Elektronentemperaturen durch die sogenannte dissoziative Anregung, die Ionen führen zu einer Anhebung für niedrige T_e durch Rekombination. Die Resonanzlinien des Atoms können Selbstabsorption erfahren. Der Einfluß der optischen Dicke wurde mit Hilfe von Populations-Escape-Faktoren dem SSM hinzugefügt. Es wurde untersucht, wie die Besetzungsdichten von den vorgegebenen Escape-Faktoren abhängen: Die Annahme von total optisch dicken Lyman-Linien führt zu hohen Überbesetzungen. Verwendung der an das betrachtete Plasma angepaßten Escape-Faktoren dagegen führt zu nur leicht höheren Besetzungen der ersten Atomzustände im Vergleich zum optisch dünnen Fall. Um die mit dem SSM berechneten Besetzungsdichten der Atomzustände zur Diagnostik zu nutzen, müssen damit die passenden Escape-Faktoren bekannt sein. Als Diagnostik können einerseits die effektiven Ratenkoeffizienten mit Hilfe der Koronagleichung zur Bestimmung der Atomdichte im Grundzustand verwendet werden. Andererseits können aus den Ratenkoeffizienten Linienverhältnisse der Balmer-Linien berechnet werden. Durch Vergleich mit experimentell bestimmten Linienverhältnissen läßt sich der Dissoziationsgrad bzw. die Elektronendichte bestimmen. Dabei muß die Elektronentemperatur und n_e bzw. δ genau bekannt sein, da die vorgestellte Diagnostikmethode empfindlich auf diese Parameter reagiert.

Es wurde eine Erweiterung des SSM auf das Deuteriummolekül vorgenommen. Mit dem so erweiterten SSM wurden Rechnungen zur Besetzung der Vibrationsniveaus des elektronischen Grundzustands durchgeführt. Diese Rechnungen wurden für eine T_e -Diagnostik für das elektronenstoßdominierte Divertorplasma von ASEDEX Upgrade verwendet. Es wurden fünf Vibrationsprozesse auf Deuterium erweitert. Das sind die Umbesetzung durch Elektronenstoß, die Dissoziation über $b^3\Sigma_u^+$, die dissoziative Anlagerung, der Ladungsaustausch und der Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$. Diese Prozesse sind Elektronenstoßprozesse. Zwei weite-

re im SSM vorhandene Reaktionen, die Schwerteilchenstöße und die Stöße mit der Wand, sind im Divertor nicht relevant. Zudem sind diese beiden Prozesse nur zur Abschätzung des Effekts näherungsweise eingebaut. Es lagen keine Daten für Deuterium vor und es wurde auf eine Erweiterung verzichtet. Um einen Vergleich der beiden Isotope bei Divertorbedingungen zu ermöglichen, wurden die Ratenkoeffizienten für Deuterium Datenquellen entnommen, die auch Ratenkoeffizienten für Wasserstoff enthielten. Diese wurden ebenfalls in das SSM eingebaut, so daß wahlweise die ursprünglichen Daten als auch die für den Isotopenvergleich ergänzten Daten verwendet werden können.

Es ergab sich im Vergleich von Rechnungen mit den erweiterten und den ursprünglichen Ratenkoeffizienten für H_2 eine stärkere Besetzung der Vibrationsniveaus für die ergänzten Koeffizienten. Eine Betrachtung der relativen Besetzungsdichten aller Vibrationsniveaus zeigt für kleine v mit zunehmendem v eine steile Abnahme und ab $v = 4$ einen flacheren Verlauf. Hier tritt zudem eine leichte Unterbesetzung auf. Grund dafür sind der Ladungsaustausch und der Übergang über $B^1\Sigma_u^+$ und $C^1\Pi_u$. Die für D_2 berechneten Besetzungsdichten der Vibrationsniveaus liegen in der Größenordnung derjenigen für H_2 . Der flachere Verlauf und die Unterbesetzung treten bei $v = 6$ auf. Grund ist das Resonanzverhalten des Ladungsaustausches, der für H_2 bei $v = 4$ und für D_2 bei $v = 6$ maximal wird.

Aus den von T_e abhängigen Besetzungsdichten der Vibrationsniveaus wurden unter Verwendung der entsprechenden Franck–Condon–Faktoren Besetzungsdichten der Vibrationsniveaus im elektronisch angeregten Zustand $d^3\Pi_u$ berechnet. Diese lassen sich mit experimentell bestimmten Besetzungen derselben Niveaus vergleichen. Durch Anpassen der Rechnung an die Messung erhält man daraus die Elektronentemperatur im untersuchten Plasma. Diese Diagnostikmethode wurde am Divertorplasma von ASDEX Upgrade angewendet. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung des so bestimmten Temperaturverlaufs mit dem aus anderen Diagnostiken erhaltenen, was die vorgenommene Erweiterung sowohl für H_2 als auch für D_2 bestätigt.

Insgesamt konnte in dieser Arbeit gezeigt werden, daß das SSM vielfältig bei der Interpretation von Strahlung sowohl in Niederdruckplasmen als auch in Divertorplasmen von Fusionsexperimenten verwendbar ist. Die im SSM vorhandene Kopplung von Atom und Molekül ist dabei ein großer Vorteil.

Allerdings ist ein SSM nur so gut, wie die eingehende Datenbasis. Die Datenbasis stellt beim betrachteten SSM aufgrund der vielen Niveaus des Wasserstoffmoleküls und der vorhandenen Kopplungen zwischen diesen Niveaus ein Problem dar. Diese Arbeit zeigt Tendenzen auf und trägt somit zum Verständnis von Besetzungsmechanismen bei. Es stellte sich heraus, daß der nächste wichtige Schritt die Aufteilung der elektronischen Niveaus von $n = 2$ in ihre Vibrationsniveaus und des elektronischen Niveaus $n = 3$ in seine einzelnen elektronischen Zustände wäre. Diese Aufteilungen würden es ermöglichen, im SSM enthaltene Näherungen und Skalierungen für $n = 2$ und $n = 3$ zu ersetzen und würden die vorgestellten Diagnostikmethoden wesentlich verbessern.

Anhang A

Stoß–Strahlungsmodell für Windows 95/98

Zu Beginn dieser Arbeit lag der in Fortran verfasste Quelltext des SSM vor. Durch Kompilation läßt sich daraus ein unter einer Shell¹ lauffähiges Programm erhalten. Der Programmaufruf geschieht folgendermaßen:

```
H2 input output
```

Dabei legt die Datei *input* fest, für welche Parameter die Rechnung durchgeführt werden soll. Im einzelnen lassen sich die Elektronendichten– und Temperaturen, das betrachtete Isotop, die in die Rechnung einzubeziehenden Vibrationsprozesse, die dabei verwendeten Ratenkoeffizienten und die Escape–Faktoren für die ersten vier Lyman–Linien des Atoms einstellen.

In *output* wird festgelegt, welche Größe in Abhängigkeit der ausgewählten Parameter bestimmt werden soll und unter welchen Dateinamen die Ergebnisse abgespeichert werden sollen. Zusätzlich kann eine Kommentarzeile angegeben werden, die in die Ergebnisdatei integriert wird.

Um den bei Verwendung des SSM unter einer Shell notwendigen Prozeß des Änderns der beiden Voreinstellungs–Dateien und anschließenden Aufrufens des SSM zu vereinfachen, wurde eine graphische Oberfläche (GUI) für die Betriebssysteme Windows 95 und Windows 98 erstellt. Um eine Kompilation des erweiterten SSM auch unter anderen Betriebssystemen weiterhin zu ermöglichen, wurde die GUI als völlig unabhängig vom Hauptprogramm konzipiert. Zur Umsetzung der GUI wurden die in VISUAL C++ erhaltenen MICROSOFT FOUNDATION CLASSES verwendet.

Abbildung A.1 zeigt das Hauptfenster der graphischen Oberfläche. Hier lassen sich alle Einstellungen vornehmen, die auch in den beiden Voreinstellungs–Dateien möglich sind. Durch Klick auf den Knopf wird ein Unterfenster aufgerufen, in dem sich die für die Modellierung der verschiedenen Vibrationsprozesse verwendeten Ratenkoeffizienten auswählen lassen.

¹Unter einer Shell versteht man eine textorientierte Benutzerschnittstelle eines Betriebssystems, also beispielsweise die Kommandozeileninterpreter von UNIX und DOS.

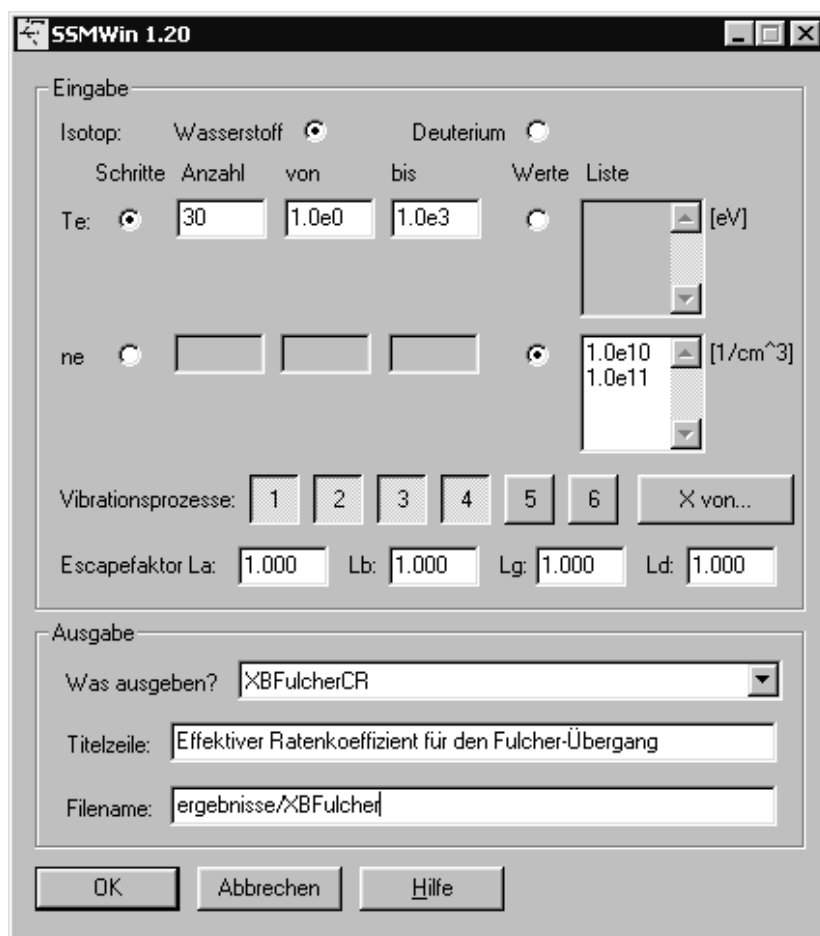


Abbildung A.1: Graphische Benutzeroberfläche für die Verwendung des SSM unter Windows 95/98.

Nach Anklicken von werden die beiden Einstellungs-Dateien erzeugt und dann das SSM in einer minimierten und versteckten DOS-Box gestartet. Um dem Benutzer eine Rückmeldung über den Verlauf der Rechnung zu geben, wurde zwischen dem Hauptprogramm und der GUI eine Kommunikation über eine unnamed Pipe realisiert. Die Pipe leitet an die DOS-Box gehende Ausgaben des SSM an die GUI um. Diese erstellt mit Hilfe der so gewonnenen Informationen einen Fortschrittsbalken für den Verlauf der Rechnung.

Nach Abschluß der Rechnung wandelt ein Unterprogramm der GUI die vom SSM erstellte lineare Ausgabedatei in eine matrixorientierte Datei um, die sich in Datenpräsentationsprogramme wie EXCEL oder ORIGIN einlesen lässt.

Anhang B

Quellen der Ratenkoeffizienten

Die Quellen der Ratenkoeffizienten für die verschiedenen Vibrationsprozesse wurden bereits in Kapitel 4 ausführlich beschrieben. Hier werden die Quellen der Ratenkoeffizienten für die Prozesse zwischen den elektronisch angeregten Niveaus angegeben. Die Parameter i und f stehen dabei für den Start- und Endzustand des jeweiligen Übergangs. Angegeben sind dabei die Hauptquantenzahlen beim Atom bzw. die aus der Vereinten-Atome-Näherung resultierenden effektiven Hauptquantenzahlen beim Molekül. Zu beachten ist, daß $n = 2$ beim Molekül in seine elektronischen Zustände aufgelöst ist. Ausführliche Informationen zu den verwendeten Ratenkoeffizienten und ihren Quellen liefert [Saw95].

B.1 Wasserstoffatom

Elektronenstoßanregung:

Prozess: $H(i) + e^- \rightarrow H(f) + e^-$, wobei gilt: $i < f$	
Ratenkoeffizient: $C_H(i, f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$i = 1$	[Saw93]
$2 \leq i \leq 10$	[Joh72] und [Vri80] Die Ratenkoeffizienten aus den beiden Quellen werden mit folgender Formel gemittelt: $C_H(i, f) = (1 - g) \cdot C_H(i, f)_{\text{[Joh72]}} + g \cdot C_H(i, f)_{\text{[Vri80]}}$ Dabei gilt: $g = \left(\frac{i-2}{8}\right)^{\frac{1}{4}}$
$i > 10$	[Vri80]

Stöße zweiter Art:

Prozess: $H(i) + e^- \rightarrow H(f) + e^-$, wobei gilt: $i > f$	
Ratenkoeffizient: $F_H(i, f)$	
Quelle des Ratenkoeffizienten:	
Die Ratenkoeffizienten berechnen sich aus denen für Elektronenstoßanregung mittels detailliertem Gleichgewicht.	

Elektronenstoßionisation:

Prozess: $H(i) + e^- \rightarrow H^+ + 2e^-$
Ratenkoeffizient: $S_H(i)$
Quelle des Ratenkoeffizienten:
Die Ratenkoeffizienten stammen aus denselben Quellen wie die für Elektronenstoßanregung. Für $2 \leq i \leq 10$ wird dieselbe Formel zur Mittelung der Koeffizienten verwendet.

Spontane Emission:

Prozess: $H(i) \rightarrow H(f) + h\nu$, wobei gilt: $i > f$
Übergangswahrscheinlichkeit: $A_H(i, f)$
Quelle der Übergangswahrscheinlichkeit:
[Joh72]

B.2 Wasserstoffmolekül**Elektronenstoßanregung:**

Prozess: $H_2(i) + e^- \rightarrow H_2(f) + e^-$, wobei gilt: $i < f$	
Ratenkoeffizient: $C_{H_2}(i, f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$i = 1, j = 2$	Das Niveau $j = 2$ ist nach den 6 elektronischen Niveaus aufgelöst. Die Ratenkoeffizienten stammen von [Mil72].
$i = 1, j = 3$	Der Ratenkoeffizient stammt von [Mil72] und wird für das Singulett-System mit 1.5 und für das Triplett-System mit 2.0 skaliert.

Elektronenstoßanregung (Fortsetzung):

$i = 1, j > 3$	Die Ratenkoeffizienten werden aus denen für das Atom mittels folgender Näherungsformel berechnet: $C_{H_2}(1, f) = \left(\frac{g_1}{(g_2+1.0)} \right) \cdot g_3 \cdot C_H(1, f)$ Dabei gilt: $g_1 = g_2$ für das Singulett-System, 1 für das Triplett-System. $g_2 = \left(\frac{0.495695}{2.0} \right) \cdot (T_e)^{1.4478}$ $g_3 = 0.909$ für $j = 4$ 0.665 für $j = 5$ 0.390 für $j = 6$ und $j = 7$ 0.140 für $j > 7$
$i = 2, j = 2$	Dies sind die Übergänge zwischen den 6 elektronisch aufgelösten Niveaus. Die Ratenkoeffizienten stammen von [Zyg87]

Stöße zweiter Art:

Prozess: $H_2(i) + e^- \rightarrow H_2(f) + e^-$, wobei gilt: $i > f$
Ratenkoeffizient: $F_{H_2}(i, f)$
Quelle des Ratenkoeffizienten:
Die Ratenkoeffizienten berechnen sich aus denen für Elektronenstoßanregung mittels detailliertem Gleichgewicht.

Elektronenstoßionisation:

Prozess: $H_2(i) + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$	
Ratenkoeffizient: $S_{H_2}(i)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$i = 1$	[Jan87]
$i > 1$	Es werden die Ratenkoeffizienten für das Atom verwendet.

Spontane Emission:

Prozess: $H_2(i) \rightarrow H_2(f) + h\nu$, wobei gilt: $i > f$	
Ratenkoeffizient: $A_{H_2}(i, f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$i \leq 2, f \leq 2$ oder $i > 3, f > 2$	[Joh72]
$i > 2, f \leq 2$	Für den Übergang von den nicht elektronisch aufgelösten Zuständen zu den aufgelösten werden die in Kapitel 2.4.1 angegebenen Näherungsformeln verwendet.

Dissoziation:

Prozess: $H_2 + e^- \rightarrow H(1) + H(f) + e^-$	
Ratenkoeffizient: $D_{H_2}(f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$1 < f < 6$	Der Ratenkoeffizient liegt vor. Es sind keine Angaben zur verwendeten Quelle vorhanden.
$f > 5$	Die Ratenkoeffizienten werden mit Hilfe einer umfangreichen Näherungsformel berechnet.

B.3 Wasserstoffionen

Dreierstoßrekombination von H^+ :

Prozess: $H^+ + e^- + e^- \rightarrow H(f) + e^-$	
Ratenkoeffizient: $\alpha_{H^+}(f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$f = 1$	[Saw93]
$f > 1$	Die Ratenkoeffizienten berechnen sich aus denen für Elektronenstoßionisation durch Gewichtung mit der zur Moleküldichte im Grundzustand ins Verhältnis gesetzten Ionendichte. Dieses Verhältnis wurde mit Hilfe der Saha-Gleichung bestimmt.

Rekombination von H^- :

Prozess: $H^- + p^+ \rightarrow H(f) + H(1)$	
Ratenkoeffizient: $Q_{3H^-}(f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$f = 2, 3$	[Jan87]
$f \neq 2, 3$	Der Ratenkoeffizient wird auf Null gesetzt.

Strahlungsrekombination von H^+ :

Prozess: $H^+ + e^- \rightarrow H(f) + h\nu$	
Ratenkoeffizient: $\beta_{H^+}(f)$	
Quelle des Ratenkoeffizienten:	
Die Ratenkoeffizienten werden mit Hilfe einer umfangreichen Näherungsformel berechnet.	

Dreierstoßrekombination von H_2^+ :

Prozess: $H_2^+ + e^- + e^- \rightarrow H_2(f) + e^-$	
Ratenkoeffizient: $\alpha_{H_2^+}(f)$	
Quelle des Ratenkoeffizienten:	
Die Ratenkoeffizienten berechnen sich aus denen für Elektronenstoßionisation durch Gewichtung mit der zur Moleküldichte im Grundzustand ins Verhältnis gesetzten Ionendichte. Dieses Verhältnis wurde mit Hilfe der Saha-Gleichung bestimmt.	

Strahlungsrekombination von H_2^+ :

Prozess: $H_2^+ + e^- \rightarrow H_2(f) + h\nu$
Ratenkoeffizient: $\beta_{H_2^+}(f)$
Quelle des Ratenkoeffizienten:
Die Ratenkoeffizienten werden mit Hilfe einer umfangreichen Näherungsformel berechnet.

Dissoziative Rekombination von H_2^+ :

Prozess: $H_2^+ + e^- \rightarrow H(f) + H^+ + e^-$	
Ratenkoeffizient: $Q_{H_2^+}^1(f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
$f = 2$	[Jan87]
$f > 2$	Der Ratenkoeffizient wird aus dem für $f = 2$ mittels folgenden Faktors durch Skalierung gewonnen: $g = \frac{2^3}{f^3}$

Dissoziative Rekombination von H_2^+ :

Prozess: $H_2^+ + e^- \rightarrow H(f) + H(1)$	
Ratenkoeffizient: $Q_{H_2^+}^2(f)$	
Quellen des Ratenkoeffizienten:	
Der aus [Jan87] stammende Ratenkoeffizient für folgenden Prozess ist im SSM gesetzt:	
$H_2^+ + e^- \rightarrow H(\sum f) + H(1)$	
Die Koeffizienten für die einzelnen f werden durch Skalierung gewonnen. Die Skalierungsfaktoren betragen:	
$g =$	
0.0 für $f = 1$	
0.10 für $f = 2$	
0.45 für $f = 3$	
0.22 für $f = 4$	
0.12 für $f = 5$	
0.069 für $f = 6$	
$\frac{10}{f^3}$ für $f > 6$	

Literaturverzeichnis

- [All70] A. C. Allison, A. Dalgarno, *Atomic Data* **1**, 289, 1970
- [Bar79] J. N. Bardsley, J. M. Wadehra, *Phys. Rev. A* **20** (4), 1398, 1979
- [Beh00] K. Behringer, U. Fantz, *New Journal of Physics* **2** 23, 2000
- [Buc85] S. J. Buckman, A. V. Phelps, *J. Chem. Phys.* **82** (11), 4999, 1985
- [Cel94] R. Celiberto, M. Capitelli, U.T. Lamanna, *Chem. Phys.* **183**, 101, 1994
- [Cel95] R. Celiberto, R. K. Janev, J. Wadehra, D. E. Atems, *INDC(NDS)-333*, International Atomic Data Agency, Wien, 1995
- [Cel99] R. Celiberto, A. Laricchiuta, M. Capitelli, R. K. Janev, J. M. Wadehra, D. E. Atems, *INDC(NDS)-397*, International Atomic Data Agency, Wien, 1999
- [Dav00] R. B. Davis, *Introduction to my C++ libraries*
(http://webnz.com/robert/cpp_lib.htm)
- [Day79] R. L. Day, R. J. Anderson, F. A. Sharpton, *J. Chem. Phys.* **71**, 3683, 1979
- [Ell76] H. W. Ellis, R. Y. Dai, E. W. McDaniel, E. A. Mason, L. A. Viehland
Atomic Data and Nuclear Data Tables **17**, 177, 1976
- [Ell78] H. W. Ellis, E. W. McDaniel, D. L. Albritton, L. A. Viehland, S. L. Lin,
E. A. Mason *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **22**, 179, 1978
- [Fan95] U. Fantz, *Plasma Phys. Control. Fusion* **40**, 1035, 1998
- [Fan98] U. Fantz, B. Heger, *Plasma Phys. Control. Fusion* **40**, 2023, 1998
- [Fan00] U. Fantz, B. Schalk, K. Behringer, *New Journal of Physics* **2**, 7, 2000
- [Fan01] U. Fantz, B. Heger, D. Wunderlich, *Plasma Phys. Control. Fusion* **43**, 907, 2001
- [Fuj89] T. Fujimoto, K. Sawada, K. Takahata, *J. Appl. Phys.* **66** (6), 2315, 1989

- [Gor92] C. Gorse, R. Celiberto, M. Cacciatore, A. Lagana, M. Capitelli, *Chem. Phys.* **161**, 211, 1992
- [Gre96] P. T. Greenland, D. Reiter, *Jül-3258*, 1996
- [Gre01a] P. T. Greenland, *Proc. R. Soc. Lond. A* **457**, 1821, 2001
- [Gre01b] P. T. Greenland, *Jül-3858*, 2001
- [Gub92] S. L. Guberman, A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **45** (5), 2784, 1992
- [Heg98] B. Heger, *Diplomarbeit*, Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik, Universität Augsburg, 1998
- [Her53] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure I. Diatomic Molecules*, D. Van Nostrand Company, New York, 1953
- [His90] J. R. Hiskes, A. M. Karo, in: M. Capitelli, J. N. Bardsley, *Nonequilibrium Processes in Partially Ionized Gases*, Plenum Press, New York, 525, 1990
- [Ich00] A. Ichihara, O. Iwamoto, R. K. Janev, *J. Phys. B* **33**, 4747, 2000
- [Jan87] R. K. Janev, W. D. Langer, K. Evans Jr., D. E. Post Jr., *Elementary Processes in Hydrogen–Helium Plasmas*, Springer–Verlag, Berlin, 1987
- [Joh72] L. C. Johnson, *Astrophys. J.* **174**, 227, 1972
- [Kot99] A. Kottmair, *Diplomarbeit*, Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik, Universität Augsburg, 1999
- [Lim88] M. A. P. Lima, T. L. Gibson, V. McKoy, *Phys. Rev. A* **38**, 4527, 1988
- [Lot00] A. Lotter, *Diplomarbeit*, Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik, Universität Augsburg, 2000
- [Mil72] W. T. Miles, *J. Appl. Phys.* **43**, 678, 1972
- [Miy89] K. Miyamoto, *Plasma Physics for Nuclear Fusion*, The MIT Press, Cambridge (Massachusetts), 1989
- [Mei00] S. Meir, *Diplomarbeit*, Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik, Universität Augsburg, 2000
- [Möh76] G. R. Möhlmann, F. J. de Heer, *Chem. Phys. Letters* **43**, 240, 1976
- [MuT82] Lee Mu-Tao, R. R. Lucchese, V. McKoy, *Phys. Rev. A* **43**, 3240, 1982
- [Red85] M. J. Redmon, B. C. Garret, L. T. Redmon, C. W. McCurdy, *Phys. Rev. A* **32**, 3354, 1985
- [Rei00] D. Reiter, *The data file AMJUEL: Additional Atomic and Molecular Data for EIRENE*, Forschungszentrum Jülich GmbH, 2000

- [Res88] T. N. Rescigno, B. I. Schneider, *J. Phys. B* **21**, L691, 1988
- [Saw93] K. Sawada, K. Eriguchi, T. Fujimoto, *J. Appl. Phys.* **73**, 8122, 1993
- [Saw95] K. Sawada, T. Fujimoto, *J. Appl. Phys.* **78** (5), 2913, 1995
- [Saw00] K. Sawada, *Persönliche Mitteilung*, 2000
- [Sch00] B. Schalk, *Persönliche Mitteilung*, 2000
- [Spi69a] R. J. Spindler Jr., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **9**, 597, 1969
- [Spi69b] R. J. Spindler Jr., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **9**, 627, 1969
- [Sti98] D. T. Stibbe, J. Tennyson, *New Journal of Physics* **1** 2, 1998
- [Sum99] H. P. Summers, *ADAS User Manual Version 2.1*
(<http://patiala.phys.strath.ac.uk/adas>), University of Strathclyde, Glasgow, 1999
- [Vri80] L. Vriens, A. H. M. Smeets, *Phys. Rev. A* **22**, 940, 1980
- [Wün99] D. Wunderlich, *Vortrag zum Fortgeschrittenenpraktikum*, Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik, Universität Augsburg, 1999
- [Zyg87] B. Zygelman, A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **35**, 4085, 1987

Hiermit möchte ich mich bei all jenen bedanken, die zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben. Insbesondere möchte ich mich bedanken bei:

- **Herrn Prof. Dr.– Ing. Kurt Behringer** dafür, daß er mir die Möglichkeit gegeben hat, am Lehrstuhl für Experimentelle Plasmaphysik diese interessante Arbeit durchzuführen und für die Unterstützung bei der Fertigstellung der Arbeit.
- **Herrn Prof. Dr. Bernd Stritzker** für die Übernahme der Zweitkorrektur.
- **Frau Dr.– Ing. Ursel Fantz** für die hervorragende Betreuung und für das jederzeit angenehme Arbeitsklima.
- **Herrn Prof. Dr. Keiji Sawada** für seine Geduld bei der Beantwortung meiner Fragen zu seinem Programm.
- **Herrn Dr. Thornton Greenland** für die sehr interessanten Gespräche über die theoretischen Grundlagen und die Gültigkeit des SSM und die Hilfe bei der Suche nach Fehlern im Programm.
- **Herrn Prof. Dr. Detlev Reiter** für die anregenden Diskussionen, die schnelle Reaktion auf meine Bitte um Zusendung von Fitparametern und die Hilfe bei der Suche nach Programmfehlern.
- **Herrn Sven Wiesen** für anregende Diskussionen und E–Mails über das SSM
- **Herrn Dr. Thomas Hamacher** für seine Dienste als Kopierer und Bote bei der Beschaffung von zahlreichen benötigten Papers und Artikeln.
- **Den Herren Dr. Hermann Paulin, Dipl. Phys. Bernd Heger, Dipl. Phys. Stefan Meir, Markus Berger, Andreas Lotter, Thomas Ondak, Thomas Pütterich, Werner Schabert und Patrick Starke** für die gute Zusammenarbeit, interessante Diskussionen und tatkräftige Unterstützung bei der Fertigstellung dieser Arbeit.