

KfK 4671
Februar 1990

Simulation der Aufbauphase einer Hochspannungs- Niederdruckgasentladung mit Monte-Carlo-Methoden

W. Nießen
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

KfK 4671

Simulation der Aufbauphase einer
Hochspannungs-Niederdruckgasentladung
mit Monte-Carlo-Methoden *)

Wolfgang Nießen **)

*) von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe
genehmigte Diplomarbeit

**) Permanente Adresse:
University College, Swansea SA 28PP

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Inhaltsverzeichnis

Seite

Zusammenfassung	
Einleitung	3
1 Die Pseudofunkenentladung	5
2 Methoden zur Berechnung von Gasentladungen	7
2.1 Die Boltzmann-Gleichung	7
2.2 Die Kontinuitätsgleichung	9
2.3 Integralgleichungen	10
2.4 Die Monte-Carlo-Methode	11
2.4.1 Das Konzept	12
2.4.2 Berechnung des freien Weges bzw. der Zeit zwischen zwei Stößen / Null-Kollisions-Technik	13
3 Modell, Näherungen, Grenzen	17
4 Präsentation und Diskussion der Ergebnisse	20
4.1 Testrechnungen	20
4.2 Teilchenströme	23
4.3 Teilchendichten	28
4.4 Energieverteilungen	33
4.5 Relative Reaktionshäufigkeiten	38
4.6 Absolute Skalierung	42
5 Kurzer Ausblick	44
Anhang	45
A1 Herleitung des Paschengesetzes	46
A2 Wirkungsquerschnitte / Sekundärelektronenkoeffizienten / Rückstreukoeffizienten der Elektronen	47
A3 Programmbeschreibung	52
Literaturverzeichnis	81

Zusammenfassung

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Simulation der Vorentladung einer Pseudofunkenkammer im Bereich zwischen Anode und Kathode mit Monte-Carlo-Rechnungen. Unter Vorentladung ist in diesem Zusammenhang die frühe Entladungsphase zu verstehen, während der die internen elektrischen und magnetischen Felder noch vernachlässigt werden können. Das Modell beruht auf einer Entladung, die sich zwischen zwei unendlich ausgedehnten Kondensatorplatten aufbaut. Elf verschiedene Stoßreaktionen und zwei Elektrodenoberflächeneffekte fanden Berücksichtigung. Es wurde ein FORTRAN-Programm entwickelt, mit dem die Berechnung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung der Entladung möglich ist. Die Besonderheiten des Codes liegen darin, daß nicht nur Elektronen und Ionen berücksichtigt werden, sondern auch schnelle ungeladene Atome und Moleküle.

Es wurden drei verschiedene Diodenlänge-Spannungs-Paare bei unterschiedlichen Drücken untersucht: 350 kV/5.0 cm, 30 kV/10.0 cm und 6.9 kV/0.7 cm. Das Füllgas war Wasserstoff. Berechnet wurden:

- die Paschenkurve
- die zeitliche Entwicklung der Teilchenstromdichten der einzelnen Teilchensorten an der Anode (für Elektronen) bzw. an der Kathode (für schwere Teilchen)
- die raum- und zeitabhängigen Teilchendichten
- die zeitabhängigen Energieverteilungen der verschiedenen Teilchensorten
- die relativen Häufigkeiten der verschiedenen Stoßreaktionen.

Die Untersuchungen zeigten, daß Ladungsaustausch zwischen Ionen und neutralen Molekülen die häufigste Reaktion ist. So sind von allen Stößen des H_2^+ -Ions bei 350 kV und 25 Pa 41 % Umladungen, bei 30 kV und 18 Pa 76 % und bei 6.9 kV und 200 Pa 87 %. Die angegebenen Drücke entsprechen ungefähr dem dreifachen Zündmindestdruck. Dies hat zum einen zur Folge, daß die Neutralteilchenstromdichten größer sind als die Ionenstromdichten, zum anderen begrenzen Umladungen die Energieaufnahme der Ionen im elektrischen Feld. Bei 350 kV beträgt die Durchschnittsenergie der H_2^+ -Ionen beim Erreichen der Kathode 2 % der maximalen Energie $e*U$, die der Protonen 14 %.

Die Energieausbeute der Elektronen ist wesentlich besser. Bei hoher Spannung durchlaufen mehr als die Hälfte aller Elektronen die gesamte Spannung. Ihr Beitrag zur Ionisation des Gases ist dann gering. Nur 10 % aller Ionisationen werden durch Elektronenstoß verursacht. Der Rest geht auf das Konto der schweren Teilchen. Dieses Verhältnis kehrt sich mit abnehmender Diodenspannung langsam um, so daß bei 6.9 kV schon 76 % der Ionisationen von Elektronen gemacht werden.

ABSTRACT

Simulation of the Build-up Phase of a High Voltage Low Pressure Gas Discharge Using Monte-Carlo-Methods.

In this report the simulation of a Pseudospark predischARGE between anode and cathode using Monte-Carlo-Methods is described. In the early phase of the discharge electric and magnetic self-fields can be neglected. The model is based on a discharge between two infinitely extended capacitor plates. Eleven different collision reactions and two electrode surface effects are taken into account. A Fortran program was developed that computes the built-up of the discharge in time and space. A specialty of the code is, that not only electrons and ions are taken into account, but also fast neutral atoms and molecules.

Three pairs of diode-length and voltage were investigated at different pressures: 350 kV / 5.0 cm, 30 kV / 10.0 cm and 6.9 kV / 0.7 cm. The working gas was hydrogen. The computations included:

- the Paschen-curve
- the time evolution of the current densities of the electrons at the anode and the ions at the cathode
- the space- and time-dependent particle densities
- the time-dependent energy distributions of the different particle species
- the relative number of the different collision reactions.

The investigations show, that charge exchange between ions and neutral molecules is the dominant reaction. 41 % of all collisions of the H_2^+ -ion at 350 kV and 25 Pa are charge exchanges, 76 % at 30 kV and 18 Pa, and 87 % at 6.9 kV and 200 Pa. The pressures mentioned are about three times higher than the minimum pressure required for ignition. From this follows first, that the neutral current densities are higher than the ion current densities, and second that the ions take up less energy in the electric field. At 350 kV the average energy of the H_2^+ -ions is only 2 % and that of the protons 14 % of the maximum energy $e \cdot U$.

The electrons are accelerated much more. At high voltage more than 50 % of the electrons experience the full voltage. Their contribution to the ionisation of the gas is then small. Only 10 % of all ionisations are due to electron collisions. The rest is due to heavy particles. This ratio is turned upside-down for decreasing voltage: At 6.9 kV already 76 % of the ionisations are made by electrons.

Einleitung

Seit 1979 ist das KfK an der Entwicklung von Quellen für hochintensive Teilchenstrahlen in der Größenordnung kA/cm^2 beteiligt. Durch Beschuß von Targets mit solchen Teilchenstrahlen kann man Materie verdichten und dabei ihr Verhalten unter extremen Bedingungen studieren. Ein Fernziel solcher Untersuchungen könnte die Realisierung der Trägheitsfusion sein.

Neben Hochvakuumdioden bietet die von C. Schultheiß und J. Christiansen erstmals 1979 beschriebene Pseudofunkenkammer [1] [2] eine Möglichkeit zur Ionenstrahlerzeugung. Desweiteren liefert dieser Diodentyp auch Elektronen [3] sowie elektromagnetische Strahlung im Röntgenbereich [4] mit Eigenschaften, die ihn z. B. für eine Anwendung in der Mikrofertigung interessant machen. Eine praktische Verwendung findet er schon als Schalter für große Leistungen aufgrund seines schnellen Stromanstieg von ca. 10^{11}A/s [5] [6].

Die Pseudofunkendiode ist eine Gasentladungskammer, die bei niedrigem Druck (10 - 100 Pa) und hoher Spannung (1 - 400 kV) betrieben wird. Das Füllgas ist gewöhnlich Wasserstoff. Durch eine Bohrung in Kathode und/oder Anode können Ionen, Elektronen und schnelle Neutrale die Entladekammer als Teilchenstrahlen verlassen und einer Diagnostik zugeführt werden.

Obwohl der Pseudofunken seit nunmehr einem Jahrzehnt in verschiedenen Gruppen im In- und Ausland untersucht wird, fehlt immer noch ein vollständiges und quantitatives Verständnis der für den gesamten Entladevorgang verantwortlichen physikalischen Prozesse. Dies liegt zum Teil daran, daß es bisher nur wenige theoretische Arbeiten über ihn gibt. Da aber nach momentanem Wissensstand die Entladung eine Kette von unterschiedlichen Vorgängen ist, die sich zeitlich und räumlich überschneiden und sich gegenseitig beeinflussen, wird es wohl nicht möglich sein, eine geschlossene und einfache Theorie für sie zu entwickeln. Auf dem Weg zu einem besseren Verständnis kann die Computersimulation weitere Fortschritte bringen. Die heutigen Großrechenanlagen sind immerhin leistungsfähig genug, um grundlegende Teilaspekte des Gesamtproblems numerisch zu lösen, wenn auch eine vollständige Behandlung noch versagt bleibt. Ziel dieser Diplomarbeit ist die Simulation der Aufbauphase der Gasentladung zwischen Anode und Kathode, um die zeitabhängigen Reaktionsvorgänge zwischen Elektronen, Ionen und neutralen Molekülen besser zu verstehen.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert: Nach einer kurzen Beschreibung der momentanen Vorstellung von einer Pseudofunkenentladung in Kapitel 1 wird in Kap. 2 etwas ausführlicher auf die Erörterung verschiedener Methoden zur theoretischen Beschreibung von Gasentladungen eingegangen. Das physikalische

Modell, welches dem Computerprogramm zugrunde liegt, wird in Kapitel 3 genau beschrieben. Schließlich folgt in Kap. 4 die Präsentation und Diskussion der Ergebnisse, der in Kap. 5 ein kurzer Ausblick folgt. Im Anhang sind zu finden: eine Herleitung des Paschengesetzes, Schaubilder der Wirkungsquerschnitt-Energie-Abhängigkeiten der verschiedenen Stoßreaktionen sowie der Quelltext des Simulationsprogramms.

1 Die Pseudofunkenentladung

Im folgenden Kapitel wird zunächst die momentane Vorstellung von einer Pseudofunkenentladung in groben Zügen wiedergegeben. Diese Darstellung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und geht nicht auf Detailunterschiede ein, die z. B. durch Änderung des Füllgases oder des Produktes $p \cdot d$ hervorgerufen werden.

Abb. 1.1 stellt eine vereinfachte Form der Diode dar. Sie besteht im wesentlichen aus einer Anodenplatte und einer dazu parallelen Kathodenplatte mit einer Bohrung. Diese Bohrung führt in den Kathodenraum, welcher das entscheidende Charakteristikum einer Pseudofunkenkammer darstellt. In ihm sind die elektrostatischen Felder wesentlich schwächer als zwischen den Platten. Anode und Kathode sind an ihren Rändern über einen Isolator verbunden. Der Innenraum der Diode ist mit Gas gefüllt. Die angelegte Spannung liegt in der Regel zwischen 1kV und 400kV, der Elektrodenabstand zwischen 0,5cm und 10cm und der Druck zwischen 10Pa und 100Pa. Damit ist die Entladung (genauer die Vorentladung) im linken Teil der Paschenkurve angesiedelt.

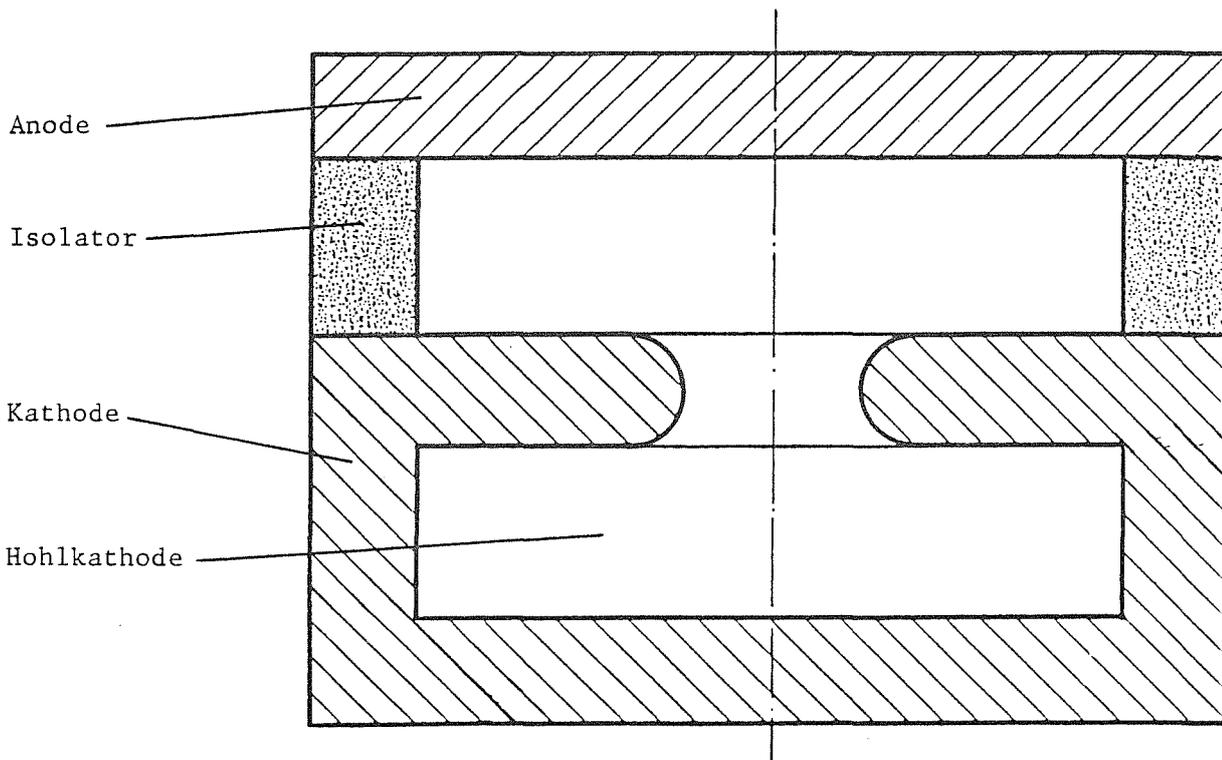


Abb. 1.1: vereinfachte Darstellung einer Pseudofunkenkammer

Unmittelbar nach Anlegen der Spannung setzen sich die wenigen Ladungsträger, die infolge natürlicher radioaktiver Strahlung oder Feldemission vorhanden

sind, entsprechend ihren Ladungsvorzeichen in Richtung Elektroden in Bewegung. Dabei stoßen sie mit Füllgasteilchen und können neue Elektron-Ion-Paare erzeugen. Kurz: es baut sich eine Townsendentladung auf. Bedingung dafür ist, daß die Diodenspannung größer als die Zündspannung ist. Neben Ionen und Elektronen entstehen durch Ladungsaustausch auch schnelle Neutrale, die vor allem bei hohem Verhältnis zwischen elektrischer Feldstärke und Gasteilchendichte E/n ($\geq 10^{-17} \text{Vm}^2$) wesentlich zur Ionisierung des Gases beitragen und, genauso wie die Ionen, beim Aufprall auf die Kathode Elektronen herausschlagen können.

Ein Teil der schweren Teilchen (Ionen und schnelle Neutrale) gelangt durch die Bohrung in den Kathodenhohlraum und bildet dort eine virtuelle Anode. Elektronen, die durch Photoeffekt und Aufprall schwerer Teilchen aus den Wänden herausgelöst werden, verursachen weitere Ionisationen, weil sie bei der geringen Feldstärke in der Hohlkathode einen hohen Wirkungsquerschnitt haben. Schließlich zerfallen auch die hochangeregten Neutrale durch Stöße in Ionen und Elektronen. Die Mitte des Kathodenraums ist jetzt mit einem dichten Plasma ausgefüllt. Es emittiert Elektronen, die durch das Loch in Richtung Anode abgesaugt werden und einen schnellen Stromanstieg verursachen. Die Hauptentladung ist damit in Gang gesetzt. Die Diode wird sehr gut leitend, bis die Spannung zusammenbricht.

Die Voraussetzung für das Einsetzen der Hauptentladung ist, wie Computerrechnungen gezeigt haben, an eine gewisse Mindestdichte des Hohlkathodenplasmas gebunden. Diese hängt von der Geometrie der Diode, und der angelegten Spannung ab. Auf keinen Fall darf unbedingt erwartet werden, daß, wenn die Paschenbedingung gerade erfüllt ist, die Diode auch zündet. Die Paschenbedingung stellt nur eine notwendige Bedingung für die Pseudofunkenentladung dar.

Der gesamte Entladeprozess kann also in drei Phasen eingeteilt werden:

- die Vorentladung, d. h. die Townsendentladung zwischen Anode und Kathode. Sie liefert die Ionen zur Ausbildung der virtuellen Anode im Hohlkathodenraum.
- der Aufbau des Hohlkathodenplasmas
- die Hauptentladung, während welcher ein starker Elektronenstrahl aus dem Hohlkathodenplasma in das Beschleunigungsgap extrahiert wird.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Simulation der Vorentladung im Raum zwischen Anode und Kathode, d. h. die Simulation einer Townsendentladung. Ein Code, mit dem die Berechnung der Vorgänge in der Hohlkathode möglich ist, wurde bereits von K. Mittag entwickelt. Ziel weiterer Arbeiten ist die Verbindung beider Programme zu einem einzigen, welches dann die Pseudofunkenentladung vollständig auf dem Rechner nachvollziehen kann.

2 Methoden zur Berechnung von Gasentladungen

2.1 Die Boltzmann-Gleichung

Ein fundamentales Konzept zur Beschreibung von Vielteilchensystemen ist das der Phasenraumdichte. Die Phasenraumdichte $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ ist im allgemeinen eine Funktion von sieben Variablen, den drei Ortskomponenten und den drei Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen sowie der Zeit. Ihr Wert gibt die Teilchenzahl der betrachteten Teilchensorte pro Einheitsraumelement des Ortsraumes und pro Einheitsraumelement des Geschwindigkeitsraumes wieder. Neben der räumlichen Verteilung enthält $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ auch die vollständige Information über die Geschwindigkeitsverteilung. Diese ist vor allem dann notwendig, wenn sich die Teilchen nicht im thermischen Gleichgewicht befinden, ihre Verteilungsfunktion also nicht mit der Maxwellverteilung übereinstimmt. In einem solchen Fall kann sich das System in seinem Verhalten beträchtlich von dem eines Gleichgewichtssystems unterscheiden. Durch Integration von f über den gesamten Geschwindigkeitsraum erhält man die Teilchendichte im Ortsraum:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v$$

Die zeitliche und phasenräumliche Entwicklung von f genügt der Boltzmann-Gleichung [7]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c, \quad (2.1.a)$$

wobei m die Teilchenmasse und \mathbf{F} die auf die Teilchen wirkende Kraft bedeuten. $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$ steht als Symbol für Stoßterme, die den Einfluß der gegenseitigen Teilchenwechselwirkungen — wie z. B. Coulombstöße oder Teilchenvernichtung- und Erzeugung — auf f beschreiben. Kann man Stöße vernachlässigen, so wird die rechte Seite der Boltzmann-Gleichung gleich null gesetzt. Ein Beispiel dafür ist die Vlasov-Gleichung, die auf Plasmen anwendbar ist, welche hauptsächlich durch äußere, elektromagnetische Felder dominiert werden [8]:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

Der Index α bezeichnet die Teilchenart (Elektronen, einfach geladene Ionen u.s.w.). Sollen bei der Lösung der Vlasov-Gleichung zusätzlich noch innere Felder berücksichtigen werden, so ist dies durch simultanes Lösen der Poisson-Gleichung oder, wenn nötig, aller vier Maxwell-Gleichungen möglich [9]. Dabei sind die Ladungsdichte ρ und die Stromdichte \mathbf{j} folgendermaßen mit f_α verknüpft:

$$\rho = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} d^3 v \qquad j = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} v d^3 v$$

Beim Pseudofunken wird die Anwendung der Vlasov-Gleichung wahrscheinlich erst bei der Behandlung der Hauptentladung sinnvoll, da dann — verursacht durch hohe Strom- und Raumladungsdichten — die inneren elektromagnetischen Kräfte im Vergleich mit Stoßreaktionen an Bedeutung gewinnen. Bei der Beschreibung der Vorentladung kann man jedoch die inneren Felder vernachlässigen, während die Ladungsträgervermehrung unbedingt zu berücksichtigen ist.

Ein einfaches Modell dafür ist folgendes: Anode ($x=0$) und Kathode ($x=d$) sind zwei unendlich ausgedehnte Kondensatorplatten. Das bedeutet, daß das E -Feld homogen ist. f hängt nur noch von x , v_x und t ab. v_y und v_z müssen nicht berücksichtigt werden, da die Bewegung der Ladungsträger so gut wie parallel zu E verläuft. Die betrachteten Stoßreaktionen seien:



Die unterstrichenen Teilchen haben kinetische Energie, während die nicht unterstrichenen in Ruhe sind. Da die Durchschnittsenergie der Ladungsträger mehrere keV beträgt, können Energieverluste durch Ionisation sowie Anfangsenergien vernachlässigt werden. Beim Erreichen der Elektroden werden die Ladungsträger vernichtet, wobei die Ionen in Abhängigkeit von ihrer Energie mehrere Elektronen aus der Kathode herausschlagen können. Die Boltzmann-Gleichungen lauten nun:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + v \frac{\partial f_1}{\partial x} - \frac{eE}{m_1} \frac{\partial f_1}{\partial v} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_c$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + v \frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{eE}{m_2} \frac{\partial f_2}{\partial v} = \left(\frac{\partial f_2}{\partial t} \right)_c$$

Der Index 2 bedeutet Elektronen, 1 bedeutet H_2^+ -Ionen. Die Stoßterme kann man wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_c &= \delta(v) \int f_1(x,v) n_0 \sigma_1 |v| dv && \text{Erzeugung von Elektronen durch} \\ & && \text{Stoßreaktion 1} \\ &+ \delta(v) \int f_2(x,v) n_0 \sigma_2 |v| dv && \text{Erzeugung von Elektronen durch} \\ & && \text{Stoßreaktion 2} \\ &+ \delta(v) \delta(x-d) \int f_2(d,v) |v| \gamma(v) dv && \text{Sekundärelektronenemission durch} \\ & && \text{Ionenaufprall an der Kathode} \end{aligned}$$

δ ist die Dirac'sche Delta-Funktion. Sie bringt zum Ausdruck, daß Sekundär-

elektronen bei ihrer Entstehung die Geschwindigkeit null haben. γ ist der Sekundärelektronenkoeffizient für das Kathodenmaterial und n_0 die Dichte des Füllgases. $\left(\frac{\partial f_2}{\partial t}\right)_c$ läßt sich analog zu $\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_c$ formulieren, jedoch mit dem Unterschied, daß die Indizes vertauscht werden und der dritte Term wegfällt.

Die numerische Lösung des Gleichungssystems bereitet wegen den singulären Gliedern $\delta(x-d)$ und $\delta(v)$ Schwierigkeiten. Die Unstetigkeit in v ließe sich zwar noch durch die Einführung einer realistischeren Geschwindigkeitsverteilung für die neu entstandenen Teilchen beheben, nicht jedoch die räumliche Diskontinuität an den Elektroden. Allgemein kann man feststellen, daß die Boltzmann-Gleichung bei der Berechnung von Vielteilchensystemen vorteilhaft ist, wenn Stöße und Randeffekte keinen dominierenden Einfluß haben; wenn also die rechte Seite vernachlässigbar ist oder zumindest einfach abgeschätzt werden kann. Auch geht der Trend mit der ständig zunehmenden Leistungsfähigkeit der Rechenanlagen immer mehr weg von der Boltzmann-Gleichung hin zu Monte-Carlo-Simulationen [10] [11], welche Lösungen liefern, die den Lösungen der Boltzmann-Gleichung äquivalent sind.

2.2 Die Kontinuitätsgleichung

Durch Integration der Gleichung (2.1a) über den gesamten Geschwindigkeitsbereich erhält man die Kontinuitätsgleichung [8], [12]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n\bar{u})}{\partial r} = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c \quad (2.2.a)$$

\bar{u} ist die mittlere Teilchengeschwindigkeit, auch Driftgeschwindigkeit genannt. $\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c$ steht für Erzeugungs- und Vernichtungsterme. Da in den Größen n und \bar{u} – die nur noch von Ort und Zeit abhängen – keine Information über die Geschwindigkeitsverteilung enthalten ist, eignet sich Gleichung (2.2a) zur Beschreibung von Vielteilchensystemen nur dann, wenn ihre rechte Seite ebenfalls von der Geschwindigkeitsverteilung unabhängig ist. Für Gasentladungen bedeutet dies, daß die von den Ladungsträgern im elektrischen Feld aufgenommene Energie im Mittel durch Stöße wieder abgegeben werden muß, was bei einem E/n Wert von unter $5 \cdot 10^{-18} \text{ Vm}^2$ der Fall ist. Bei der typischen Auslegung einer Pseudofunkenkammer mit einem Druck von 20 Pa, einem Elektrodenabstand von 5 cm und einer Entladespannung von 350 kV, beträgt E/n mehr als 10^{-15} Vm^2 . Im Hohlkathodenbereich liegen die Werte der Feldstärke jedoch wesentlich niedriger, so daß dort die Anwendung der Kontinuitätsgleichung sinnvoll ist [13].

Da Gleichung (2.2a) allein unterbestimmt ist, wird noch eine zweite Bedingung für die Driftgeschwindigkeit benötigt um die Dichte n eindeutig

bestimmen zu können. \mathbf{u} ist im allgemeinen parallel zu den Feldlinien und dem Betrag nach abhängig von E :

$$\mathbf{u} = \mu(E/n_0)\mathbf{E}$$

Wobei μ , die Beweglichkeit, eine durch Experiment, Berechnung oder Simulation ermittelte Funktion der reduzierten Feldstärke E/n_0 ist.

Die Erzeugungsglieder der Gleichung (2.2a) lassen sich im einfachen Fall der Ladungsträgerzeugung durch Stoßionisation wie folgt schreiben [12]:

$$\left(\frac{\partial n_1}{\partial t}\right)_c = \left(\frac{\partial n_2}{\partial t}\right)_c = \alpha n_1 u_1 + \beta n_2 u_2$$

Die Indizes 1 und 2 deuten wieder Elektronen und Ionen an. α und β sind der erste und zweite Townsendkoeffizient. Sie geben die Zahl der Ionisationen an, die ein Elektron bzw. Ion pro Einheitswegstrecke verursacht.

Oft ist es nötig, Raumladungseffekte zusätzlich zu berücksichtigen. Dies kann wieder durch simultanes Lösen der Poisson-Gleichung geschehen. Es sei hier noch als Beispiel ein Gleichungssystem für das in 2.1 beschriebene Modell einer Gasentladung – diesmal jedoch unter Hinzunahme der inneren elektrostatischen Felder – angegeben:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial n_1 u_1}{\partial x} = -\alpha n_1 u_1 + \beta n_2 u_2 + \delta(x-d) n_2(d) u_2(d) \gamma$$

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} + \frac{\partial n_2 u_2}{\partial x} = -\alpha n_1 u_1 + \beta n_2 u_2$$

$$\frac{\partial E_{int}}{\partial x} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad \rho = (n_2 - n_1)e \quad E = E_{ext} + E_{int}$$

$$u_1 = \mu_1(E)E \quad u_2 = \mu_2(E)E$$

2.3 Integralgleichungen

Eine weitere Methode zur Berechnung von Gasentladungen, die jedoch nur für eindimensionale Systeme geeignet ist, wird im folgenden kurz skizziert. Sie wurde von Lauer u. a. zur Beschreibung einer Wasserstoffgasentladung benutzt [14]. Es sollen wieder die in 2.1 genannten Näherungen gelten. Die in diesem Modell berechneten Zustandsgrößen sind $R(x,t)$, die Ionen- bzw. Elektronenproduktionsrate pro Einheitsstrecke, und $I(t)$, die Elektronenerzeugungsrate an der Kathode.

Entsteht zum Zeitpunkt t' am Ort x' durch Stoßionisation ein Ion, so kann dieses selber nach einer gewissen Zeit eine weitere Ionisation verursachen. Für

die Zeit t_c zwischen zwei Stößen gilt:

$$t_c = t - t' = \sqrt{\frac{2 m_1 d (x - x')}{e U}}$$

x und t sind Ort bzw. Zeitpunkt des neuen Stoßes. Die Energie des Ions ist dabei $eU(x-x')/d$. Für das Elektron kann man die gleiche Überlegung anstellen, mit dem Unterschied, daß seine Flugzeit vernachlässigt werden darf. $R(x,t)$ läßt sich nun wie folgt ausdrücken:

$$R(x,t) = I(t) n_0 \sigma_1 (eU(x-x')/d) + \int_x^d R(x',t) n_0 \sigma_1 (eU(x-x')/d) dx' + \int_0^x R(x',t-t') n_0 \sigma_2 (eU(x-x')/d) dx' \quad (2.3a)$$

Der erste Summand ist der Ionisierungsbeitrag der von der Kathode emittierten Elektronen. Der zweite beschreibt den Beitrag der Elektronen, die im Gas entstehen und der dritte den Ionenbeitrag. Der Sekundärelektronenstrom $I(t)$ ist gegeben durch:

$$I(t) = \int_0^d R(x',t-t') \gamma (eU(x-x')/d) dx' \quad (2.3b)$$

γ ist der energieabhängige Sekundärelektronenkoeffizient. Die beiden Gleichungen (2.3a) und (2.3b) bilden ein vollständiges Integralgleichungssystem, welches eindeutig gelöst werden kann. Es ist auch möglich, durch Hinzunahme zusätzlicher Gleichungen Umladungsprozesse zwischen Ionen und Restgasteilchen, Ionsationen durch schnelle Neutrale sowie Elektronenrückstreuung an der Anode mit einzu- beziehen.

Ein Vorteil der Lauer'schen Beschreibung –im Vergleich zur Kontinuitätsgleichung– ist, daß sie die elementaren Stoßprozesse auf atomarer Ebene berücksichtigt und deshalb auch bei hohen E/n -Werten gültig ist. Die Beschränkung auf eine Dimension reduziert jedoch ihre Anwendbarkeit. So ist diese Methode auch nur ganz speziell und bezüglich der Allgemeinheit nicht mit den beiden vorigen gleichzustellen.

2.4 Die Monte-Carlo-Methode

In den nächsten beiden Unterkapiteln wird die Monte-Carlo-Methode vorgestellt. Da in der vorliegenden Arbeit Gasentladungen nach diesem Konzept berechnet werden, wird nach einer kurzen Einleitung auf Details wie z. B. die Bestimmung des freien Weges (das ist der Weg, der zwischen zwei Stößen

zurückgelegt wird) eingegangen. Gute Darstellungen findet man in den Veröffentlichungen von E. Kunhardt und Y. Tzeng bzw. J. P. Boeuf und E. Marode [15], [16].

2.4.1 Das Konzept

Monte-Carlo-Methoden haben, wie der Name schon nahelegt, etwas mit Zufall zu tun. Sie sind besonders für solche Systeme geeignet, deren Verhalten durch viele stochastische Einzelereignisse bestimmt ist. Bei der Simulation von Gasentladungen geht man dabei folgendermaßen vor:

Am Anfang wird im Rechner –entsprechend $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t=0)$ – eine representative Testmenge mit N_0 Teilchen generiert. Die Testmenge vertritt die gesamte Population der betrachteten Teilchenart(en). Je größer die Zahl der Testteilchen gewählt wird, um so geringer wird der statistische Fehler und um so besser spiegelt die Simulation die Wirklichkeit wieder. Allerdings nimmt auch die erforderliche Rechenzeit und der Speicherplatz linear mit der Testteilchenzahl zu, so daß N_0 in der Praxis typisch auf einige tausend bis eine Million beschränkt ist. Größen wie z. B. Teilchendichte, Teilchenstromdichte und interne Feldstärke, die sich aus den Daten der Testmenge berechnen lassen, kann man durch Multiplikation mit dem Wichtungsfaktor $w=N_{0r}/N_0$ in reale Größen umrechnen. N_{0r} ist die wirkliche Teilchenzahl zur Zeit $t=0$.

Nun werden die Testteilchenbahnen unter Berücksichtigung der Stoßreaktionen ermittelt. Das heißt: a) Zwischen den Stößen eines Teilchens wird seine Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \quad (2.4.1a)$$

gelöst. i ist der Teilchenindex, m_i die Teilchenmasse und \mathbf{F}_i die auf das Teilchen wirkende Kraft. b) Findet eine Kollision statt, so werden Teilchengeschwindigkeit gemäß der speziellen Reaktion geändert und, wenn nötig, neue Teilchen erzeugt (z. B. bei Ionisierungsstößen). Nach festen, dem Problem angepaßten Zeitintervallen, kann dann über alle Testteilchen Zwischenbilanz gezogen werden und interessierende Größen wie Teilchendichte, Teilchenstrom, Feldverteilung u. s. w. aus den Teilchendaten \mathbf{r}_i und \mathbf{v}_i berechnet werden.

Bei Systemen mit wachsender Teilchenzahl ist es nötig, das Testteilchenensemble immer dann zu reduzieren, wenn es eine gewisse Größe übersteigt. Dadurch wird ein Überlauf des Rechenspeichers vermieden. Dieses "Abspecken" erfolgt durch zufälliges Löschen von Testteilchen bis eine vorgegebene Mindesttestteilchenzahl N_{\min} erreicht ist. Nach der Reduzierung erhalten die Test-

teilchen den neuen Wichtungsfaktor $w \leftarrow wN_v/N_{\min}$. N_v ist die Testteilchendichte vor der Renormierung. Diese Prozedur kann im Hinblick auf eine Minimierung von statistischen Fehlern noch verfeinert werden, indem man jedem Teilchen einen eigenen Wichtungsfaktor zuordnet. Dieser wird dann je nach Teilchenart und Teilchenenergie bei einer Reduzierung unterschiedlich verändert [15]. Darauf soll hier jedoch nicht näher eingegangen werden, da dies den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde.

2.4.2 Berechnung des freien Weges bzw. der Zeit zwischen zwei Stößen / Null-Kollisions-Technik

Im folgenden werden nur Kollisionen mit nicht angeregten und nicht ionisierten Füllgasteilchen betrachtet. Ihre Dichte n_0 soll sich während des Entladevorgangs nicht ändern. Das bedeutet, daß die Konzentration der angeregten und ionisierten Teilchen gegenüber n_0 noch zu vernachlässigen ist.

Ist der totale Wirkungsquerschnitt σ eines Teilchens von seiner Energie unabhängig, so genügt die mittlere freie Weglänge $\langle l_c \rangle$ der Beziehung:

$$\langle l_c \rangle = \frac{1}{n_0 \sigma} \quad (2.4.2a)$$

Im allgemeinen ist Gleichung (2.4.2a) zur Ermittlung des freien Weges jedoch nicht geeignet. Dies hat zwei Gründe: zum einen gilt sie nicht mehr, wenn σ mit der Teilchenenergie variiert, was über genügend große Energiebereiche immer der Fall ist. Zum anderen trägt sie dem stochastischen Charakter von Stoßprozessen nicht Rechnung. Es ist nämlich durchaus möglich, daß ein Teilchen zwischen zwei Stößen eine kürzere oder längere Strecke als $\langle l_c \rangle$ zurücklegt. Um dies zu berücksichtigen, benötigt man die statistische Weglängenverteilung. Dazu folgende Überlegungen:

Betrachtet wird ein Strahl mit N Teilchen, der eine infinitesimal dünne Schicht aus Füllgasteilchen der Dicke dx durchquert. Infinitesimal dünn bedeutet in diesem Zusammenhang so dünn, daß sich die Füllgasteilchen, in Strahlrichtung gesehen, nicht überlappen. Die Kollisionswahrscheinlichkeit dp_c ist dann gegeben durch:

$$dp_c = -\frac{dN}{N} = \frac{\sigma A dx n_0}{A}, \quad (2.4.2b)$$

wobei $-dN$ die Anzahl der Stöße, A die Querschnittsfläche des Strahls und $\sigma A dx n_0$ die Summe aller Wirkungsflächen im Volumen $A dx$ ist. Integration der Gleichung (2.4.2b) liefert:

$$\frac{N}{N_0} = \exp\left(-n_0 \int_0^{l_c} \sigma(E(x)) dx\right) \quad (2.4.2c)$$

N ist nun die Zahl der nach Durchquerung der Strecke l_c ungestreuten Teilchen, $E(x)$ die Teilchenenergie und N_0 die Zahl aller Teilchen. Gleichung (2.4.2c) berücksichtigt die Energieänderung des Teilchens (z. B. durch elektrostatische Felder) und die damit verbundene Änderung des Wirkungsquerschnitts. Der Quotient N/N_0 ist die Wahrscheinlichkeit dafür daß ein Teilchen mindestens den Weg l_c zurücklegt, bevor es mit einem Füllgasteilchen zusammenstößt. Die Wahrscheinlichkeit p_c mindestens einmal entlang l_c zu kollidieren, ist folglich:

$$p_c = 1 - \exp\left(-n_0 \int_0^{l_c} \sigma(E(x)) dx\right) \quad (2.4.2d)$$

mit der Substitution $dx=vdt$ kann Gleichung (2.4.2d) in die Form

$$p_c = 1 - \exp\left(-n_0 \int_0^{t_c} \sigma(E(x)) v dt\right) \quad (2.4.2e)$$

gebracht werden. (2.4.2d) und (2.4.2e) sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen des freien Weges l_c bzw. der dazu gehörenden Zeit t_c .

Mit diesen Gleichungen ist es möglich, l_c oder t_c vor jedem Stoß zu bestimmen. Dazu generiert der Rechner für p_c eine Zufallszahl mit Gleichverteilung zwischen null und eins und integriert dann unter Berücksichtigung der Bewegungsgleichung (2.4.1a) stückchenweise das Argument der Exponentialfunktion so weit, bis beide Seiten von (2.4.2d) bzw. (2.4.2e) gleich sind. Um Rechenzeit zu sparen, kann diese Integration jedoch mit einem Trick, der sogenannten Null-Kollisions-Technik, umgangen werden [17].

Hierzu wird der totale Wirkungsquerschnitt σ um einen fiktiven Null-Kollisions-Querschnitt σ_{null} erhöht, daß der so erhaltene Wirkungsquerschnitt σ' proportional zu $1/v$ ist:

$$\sigma' = \frac{Q}{v} = \sigma + \sigma_{\text{null}}$$

Q ist eine Konstante. Setzt man σ' in Gleichung (2.4.2e) ein, läßt sich das Integral analytisch lösen. Auflösung nach t_c ergibt:

$$t_c = - \frac{\ln(1-p_c)}{n_0 Q}$$

Die Vorteile dieser Methode liegen darin, daß t_c ohne großen Rechenaufwand bestimmt werden kann. Als Nachteil nimmt man in kauf, daß Stöße infolge von

σ_{null} fiktiv sind, also die Teilchenbahn- und zahl nicht verändern, ihre Behandlung aber dennoch Rechenzeit erfordert.

Da eine Kollision im allgemeinen mehrere Reaktionskanäle hat, muß davon noch einer "ausgewürfelt" werden. σ' ist der Null-Kollisions-Querschnitt plus der gesamte Wirkungsquerschnitt, d. h. die Summe der Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Reaktionen:

$$\sigma' = \sum_1 \sigma_i + \sigma_{\text{null}}$$

i ist der Kanalindex. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß bei dem betrachteten Stoß die i -te Reaktion auftritt ist σ_i/σ' . Wiederum wird eine Zufallszahl (p_k) zwischen null und eins erzeugt. Die Bedingung dafür, daß die k -te Reaktion stattfindet lautet dann:

$$\frac{1}{\sigma'} \sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i \leq p_k < \frac{1}{\sigma'} \sum_{i=1}^k \sigma_i$$

k läuft von eins bis zur Anzahl der Reaktionskanäle. Ist obige Ungleichungskette für kein k erfüllt, bedeutet dies eine Null-Kollision, das Testteilchen erfährt also keinen Stoß.

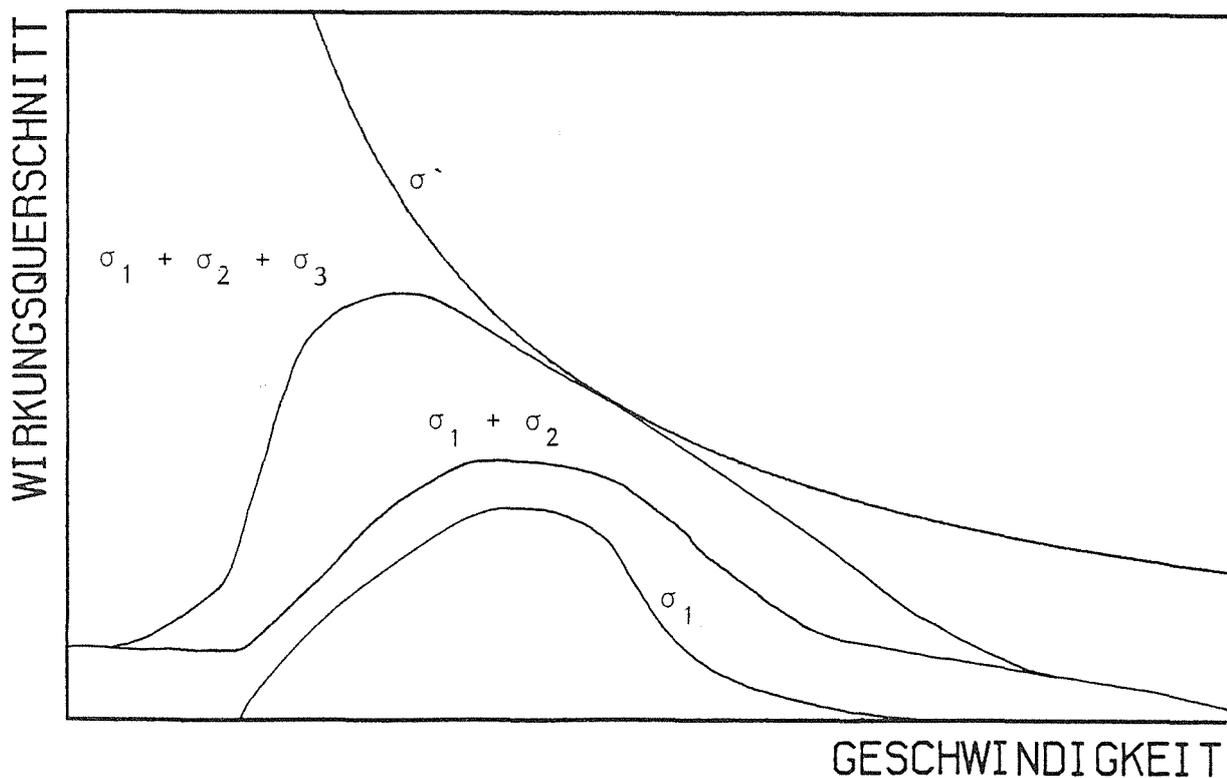


Abb. 2.4.2: σ' und $\sigma = \sum \sigma_i$ als Funktion der Teilchengeschwindigkeit

Noch ein paar Bemerkungen zur Null-Kollisions-Technik. Sie erhöht zwar künstlich die Stoßfrequenz der Testteilchen, doch der damit verbundene Zeitverlust wird im allgemeinen durch den Wegfall der Integration mehr als ausgeglichen. Auch läßt sich der Anteil der Null-Stöße reduzieren indem der interessierende Energiebereich in mehrere Intervalle unterteilt wird und in jedem Energieintervall ein eigenes Q benutzt wird, so daß $\sigma_{\text{null}} = \sigma' - \sigma$ möglichst klein ist.

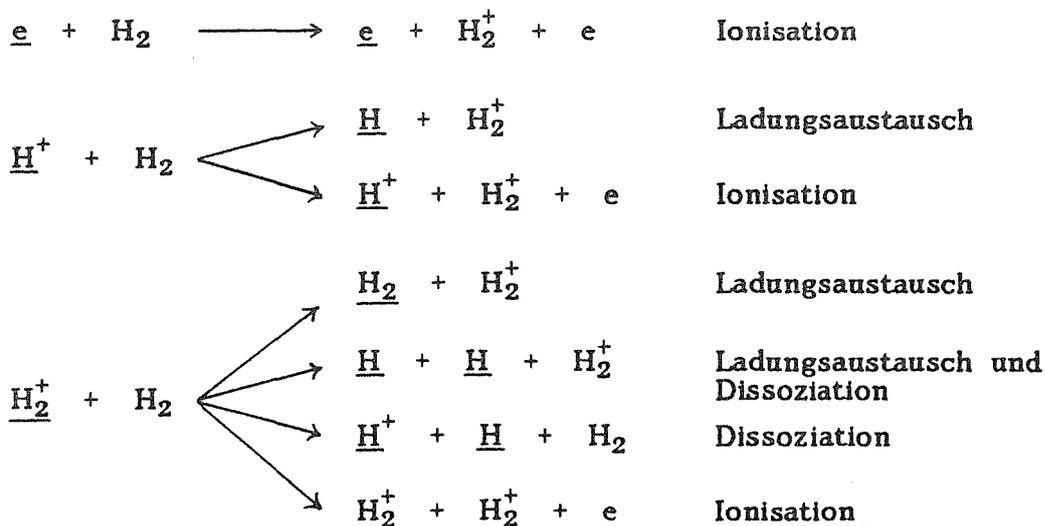
3 Modell, Näherungen, Grenzen

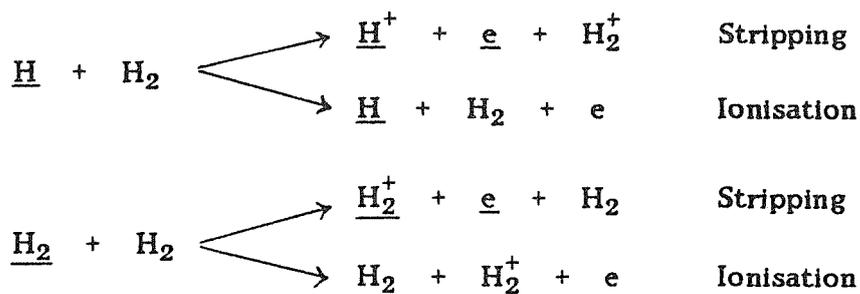
Vor der Erstellung des Programmcodes ist es zunächst nötig, ein Modell für die zu berechnende Vorentladung zu entwickeln. In dieses Modell können nicht alle physikalischen Prozesse, die sich im realen Experiment abspielen, eingebaut werden. Ein Grund dafür liegt in der begrenzten Rechnerkapazität, bezogen sowohl auf den Speicherplatz wie auch auf die Rechengeschwindigkeit. Ein weiterer Grund ist der Mangel an quantitativer und qualitativer Kenntnis sämtlicher prinzipiell denkbaren physikalischen Vorgänge. So ist z.B. der Einfluß, den verunreinigte Elektroden auf die auf ihnen stattfindenden Oberflächenreaktionen haben, noch wenig verstanden. Jedoch ist es möglich die wichtigsten und tragenden Aspekte zu berücksichtigen und in einem Modell zusammenzufassen. Dieses wird im folgenden dargestellt, wobei auch auf seine Grenzen und Unzulänglichkeiten eingegangen wird.

Wie in dem in Kapitel 2.1 skizzierten Beispiel besteht die Modelldiode aus zwei unendlich ausgedehnten parallelen Metallplatten (genauer Molybdän). Die anliegende Spannung hat beim Einschalten sofort den den Wert U_0 , der sich dann nicht mehr ändert.

$$U(t) = \Theta(t) U_0$$

Das äußere elektrostatische Feld ist homogen. Interne elektromagnetische Felder, verursacht durch Raumladungen und Ladungsströme, werden vernachlässigt. Eine solche Näherung ist vernünftig, da, wie schon erwähnt, während der Vorentladung die Ionen- und Elektronendichten noch gering sind. Besonderes Augenmerk muß dagegen auf die verschiedenen Stoßreaktionen gerichtet werden. Hier eine Liste der betrachteten Kollisionen:





Reaktionen ohne Beteiligung von Füllgasmolekülen (z. B. Rekombinationen) werden nicht berücksichtigt. Ihre Stoßraten sind nämlich proportional zu dem Produkt der Konzentrationen beider Partner $n_\alpha n_\beta$. Dem gegenüber steht $n_\alpha n_0$ als Maß für die Raten der obigen Reaktionen. Während der Vorentladung kann jedoch $n_\alpha n_\beta$ gegenüber $n_\alpha n_0$ vernachlässigt werden. n_0 wird als konstant angesehen.

Wieder haben die unterstrichenen Teilchen kinetische Energie und die nicht unterstrichenen keine. Bei Ionen und schnellen Neutralen wird angenommen, daß sich die Geschwindigkeiten durch einen Stoß nicht ändern, d. h., daß Energieverluste durch Ionisation, Dissoziation oder Umladung vernachlässigt werden. Diese Näherung ist vernünftig, da solche Reaktionen erst ab mehreren hundert eV eine Rolle spielen. Im Vergleich dazu sind die 15,5eV Ionisierungsenergie für H_2 wenig. Dem ist nicht so bei Elektronen, die bei 80eV ihren maximalen Wirkungsquerschnitt haben. Im Modell wird dem Rechnung getragen.

Elastische und inelastische Stöße zwischen Elektronen und Wasserstoffmolekülen werden vernachlässigt, weil sie bei den betrachteten hohen E/n -Werten keine Rolle mehr spielen. Ferner werden die Wechselwirkungen zwischen Photonen und Gasmolekülen außer Acht gelassen, da die Photonenenergie – von Bremsstrahlung abgesehen – kleiner als 15,5eV ist. Es können also nur Atome und angeregte Moleküle ionisiert werden, was aber aufgrund ihrer geringen Konzentration unwahrscheinlich ist.

Da auch Oberflächeneffekte eine Rolle spielen, werden die beiden wichtigsten in das Modell mitaufgenommen:

- Sekundärelektronenemission an der Kathode durch Aufprall von Ionen und schnellen Neutralen
- Rückstreuung von Elektronen an der Anode

Die Energieabhängigkeiten der Emissions- und Rückstreukoeffizienten werden ebenfalls berücksichtigt. Ionen und schnelle Neutrale werden an der Kathode nicht zurückgestreut. Bei der Reflexion der Elektronen liegt der Streuwinkel (der Winkel zwischen Einfallslot und Reflexionsstrahl) – senkrechten Einfall vorausgesetzt – mit einer Wahrscheinlichkeit von $\cos\vartheta d\vartheta$ zwischen ϑ und $\vartheta+d\vartheta$

[18]. Ist der Einfallswinkel ϑ_{in} von null verschieden, so werden die Teilchen mit einer gewissen Verschmierung um den Ausfallswinkel $\vartheta = \vartheta_{in}$ zurückgestreut. Die Verschmierung ist um so kleiner je größer ϑ ist. Es wird daher näherungsweise davon ausgegangen, daß Elektronen mit einem Einfallswinkel von weniger als $30^\circ \cos \vartheta$ -verteilt reflektiert werden; während für die restlichen $\vartheta = \vartheta_{in}$ gelten soll. Für den Energieverlust durch die Rückstreuung wird 20% der Einfallsenergie angenommen, falls diese größer als 10 keV ist. Unter 10 keV soll das Elektron elastisch reflektieren.

Die Emission von Photoelektronen wird aus folgendem Grund vernachlässigt: Zwar entstehen im Gas ungefähr so viele Photonen wie Ionen; ihr Sekundärelektronenkoeffizient (maximal 0,1 [19]) ist jedoch deutlich geringer als der der schweren Teilchen (maximal 6,0).

Da sich die schweren Teilchen praktisch nur parallel zum äußeren elektrostatischen Feld bewegen, reicht eine Dimension im Ortsraum bzw. zwei im Phasenraum zu ihrer Beschreibung (x, v_x). Die Elektronen erhalten jedoch durch die Rückstreuung an der Kathode auch eine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zum Feld. Diese kann durch Hinzunahme einer weiteren Geschwindigkeitskoordinate v_\perp in die Bewegungsgleichung einbezogen werden. Die Einführung der entsprechenden Ortskoordinate ist wegen der Translationsinvarianz der Modelldiode in y - und z -Richtung überflüssig. Aufgrund der hohen Maximalenergie der Elektronen von bis zu mehreren hundert keV, die schon im Bereich der Elektronenruheenergie von 511 keV liegt, wird für sie die relativistische Bewegungsgleichung benutzt.

Es sei schließlich noch deutlich darauf hingewiesen, daß das oben entworfene Modell nur die Vorentladung hinreichend beschreiben kann. Sobald die Ladungsdichten und -ströme nicht mehr zu vernachlässigen sind, müssen ihre Felder miteinbezogen werden. Auch sollte dann die Rechnung im Ortsraum zweidimensional sein, um die Bündelung der Ladungsträger auf der Rotationsachse erklären zu können. Ferner muß man sich die Frage stellen, inwieweit Stöße ohne Beteiligung von Füllgasmolekülen und der Einfluß von Photonen eine Rolle spielen. Trotz der Vereinfachungen vermag dieses Modell dennoch eine Reihe von Teilaspekten zu beleuchten, die auch in der Hauptentladung von Bedeutung sein können.

4 Präsentation und Diskussion der Ergebnisse

Im folgenden Kapitel 4 werden die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation ausführlich dargestellt und erörtert. In 4.1 werden die Verifikation des Paschengesetzes sowie der Vergleich mit bereits vorliegenden Rechnungen behandelt. In den Unterkapiteln 4.2 bis 4.5 folgen Resultate für jeweils drei verschiedene Diodenspannung/Elektrodenabstand-Paare (350 kV/5,0 cm, 30 kV/10,0 cm, 6,9 kV/0,7 cm), für die es auch experimentelle Untersuchungen gibt [20], [21]. So ist 4.2 den Stromdichten der verschiedenen Teilchensorten gewidmet; in 4.3 werden die raum- und zeitabhängigen Teilchendichten präsentiert, in 4.4 die Energieverteilungen und die mittleren freien Weglängen und in 4.5 die relativen Häufigkeiten der einzelnen Stoßreaktionen. Da die Zahlenwerte in 4.2 und 4.3 für Strom- und Teilchendichten nicht in absoluten Einheiten skaliert sind, wird dies in 4.6 durch eine grobe Abschätzung, die auch eine Aussage über den zeitlichen Gültigkeitsbereich der Simulation zulässt, nachgeholt.

Sämtliche Rechnungen wurden mit einer Anfangstestteilchenzahl von 569000 durchgeführt. Die Maximalzahl war auf 910400 beschränkt. Trotz dieser großen Testteilchenzahl sind noch statistische Fehler auf den Abbildungen in Form kleiner ungleichmäßiger Oszillationen erkennbar. Sie beeinträchtigen jedoch nicht die Interpretation der Ergebnisse. Man muß sich nur bewußt sein, daß es keine systematischen Effekte sind.

Es wurde angenommen (sofern nicht explizit etwas anderes erwähnt wird), daß im Füllgas schon zu Beginn der Entladung eine geringe Menge von H_2^+/e -Paaren, gleichmäßig verteilt, vorhanden ist.

4.1 Testrechnungen

Zur Prüfung des FORTRAN-Codes SPARK (siehe Anhang 3) dienen die Verifikation des Paschengesetzes und der Vergleich mit der Arbeit von Lauer u. a. [14].

Das Paschengesetz $U=f(pd)$ muß für das verwendete Modell streng gelten, da von eindimensionaler Geometrie ausgegangen wird und nur Stöße mit Füllgas-Teilchen in Betracht gezogen werden (siehe Anhang 1). Diese Gültigkeit konnte mit SPARK bestätigt werden: Für eine Entladespannung bei 30 kV und einem Elektrodenabstand von 10 cm lieferte die Simulation einen Zünddruck (der Druck ab dem die Gasentladung selbständig ist) von 5,2 Pa. Demnach sollte man bei gleicher Spannung, aber halbem Elektrodenabstand 10,4 Pa Zünddruck erwarten. Genau dieser Wert konnte mit dem Programm ermittelt werden. Analog dazu

ergab 6,9kV und 0,7cm einen Zünddruck von 84Pa und 6,9kV und 5,0cm einen von 11,8Pa ($= 84\text{Pa} \cdot 0,7/5,0$). Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß mit diesem Test noch lange nicht gezeigt ist, daß auch die Paschenkurve korrekt wiedergegeben wird (siehe Kap.4.2.).

Der Vergleich mit den Lauer'schen Rechnungen lieferte ähnlich befriedigende Resultate. Die Abbildung 4.1 zeigt den von der Kathode emittierten Elektronenstrom als Funktion der Zeit; einmal mit SPARK berechnet und das andere mal nach Lauer u. a.. Ferner sind noch die Kathodenströme der H_2^+ -Ionen und schnellen H_2 -Molekülen der SPARK-Simulation dargestellt. Die Einheiten sind willkürlich. Lauer läßt in den ersten paar Nanosekunden einen pulsformigen, extern getriggerten Elektronenstrom aus der Kathode fließen und berücksichtigt in seinem Modell weder Protonen noch schnelle H-Atome. Diese Verhältnisse wurden bei der Testrechnung in SPARK eingebaut um mit Lauer vergleichen zu können. Der Strompeak wäre auch in Abb. 4.1 zu sehen; jedoch beginnt der Computerplot erst nach dessen Abklingen. Da in beiden Fällen die Stromdichte einem konstanten Wert zustrebt, befriedigen die Diodenparameter (U, d, p) gerade die Zündbedingung. Die gute Übereinstimmung beider Zünddrücke ist ein positives Testergebnis.

Zu den Unterschieden folgende Erläuterungen: Lauer u. a. gingen von konstanten freien Weglängen für die schnellen H_2 -Moleküle aus; während in SPARK das gesamte statistische Weglängenspektrum auch für Neutrale realisiert ist. Dies kann der Grund für die unterschiedliche Lage der Elektronenstrommaxima sein (15ns, 20ns). So rühren auch die feinen Oszillationen in der Lauer'schen Kurve von den konstanten freien Weglängen her. In Wirklichkeit erwartet man eine glatte Kurve.

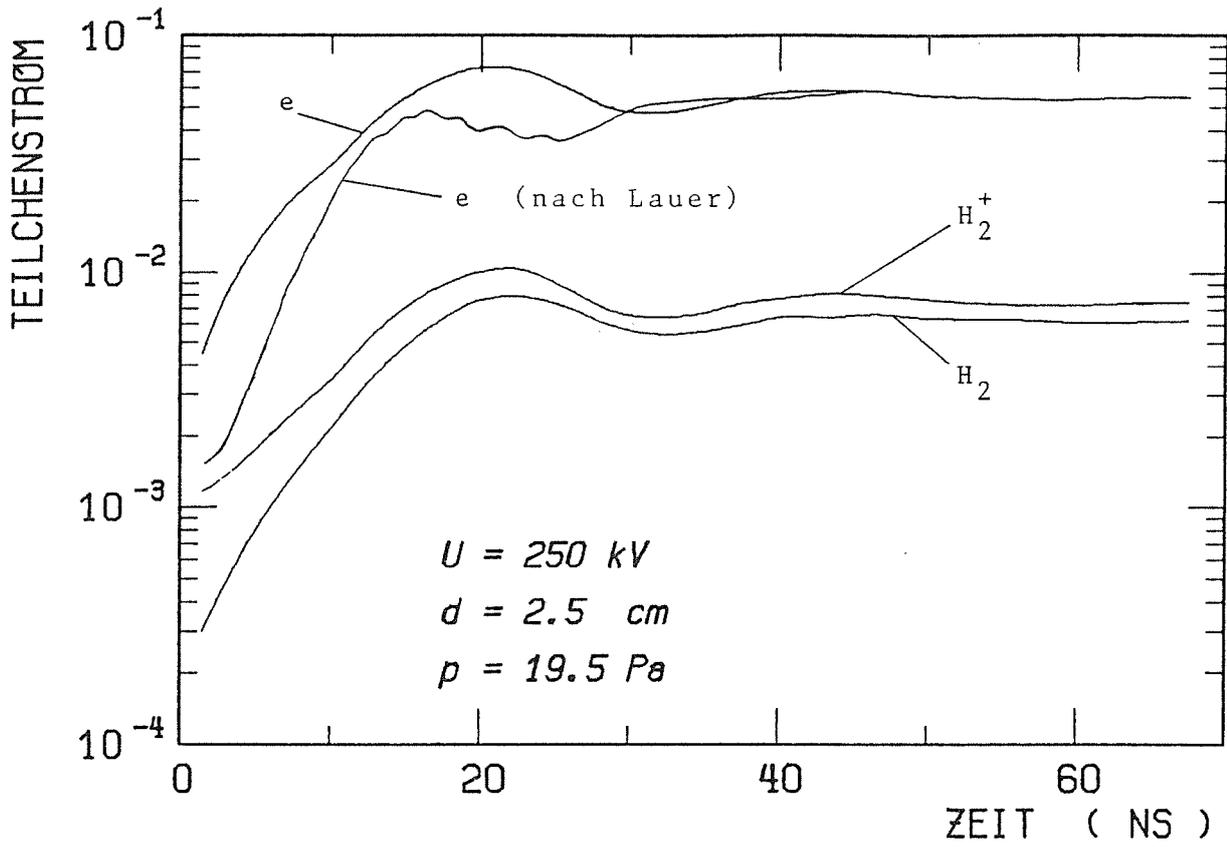


Abb. 4.1: Stromdichten der Elektronen (von Lauer berechnet bzw. mit SPARK), der H_2^+ -Ionen und der schnellen H_2 -Teilchen (mit SPARK berechnet) an der Kathode

4.2 Teilchenströme, Paschenkurve

Auf den Seiten 25 bis 27 sind die zeitlichen Entwicklungen der Teilchenstromdichten und die Paschenkurve dargestellt. Die Zahlenwerte der Stromdichten sind in relativen Einheiten angegeben. Sie wurden durch Division mit der maximalen Stromdichte des aus den Anfangselektronen resultierenden Anodenstromes gewonnen. Dieses Maximum tritt kurz nach Anlegen der Diodenspannung auf (genauer: zu dem Zeitpunkt, an dem die Primärelektronen, welche unmittelbar vor der Kathode starteten, die Anode erreichen) und ist in den Abbildungen nicht eingezeichnet. Eine Skalierung in absoluten Einheiten ist nicht ohne weiteres möglich, da die absolute Teilchendichte von Elektronen bzw. H_2^+ -Ionen zur Zeit $t=0$, d. h. der natürliche Ionisierungsgrad, nicht genau bekannt ist. Die Schwer- teilchenströme beziehen sich wieder auf die Kathode.

Die Maxima in Abb. 4.2a und 4.2b zeigen die Ankunft der Lawine an, die durch die letzten Primärionen (H_2^+ -Ionen, die schon bei $t=0$ existierten) verursacht wurde. Nach diesem Ereignis nehmen die Ströme wieder ab oder steigen zumindest weniger stark an (siehe Abb. 4.2c-4.2e) um dann in einen von folgenden drei Zustände überzugehen:

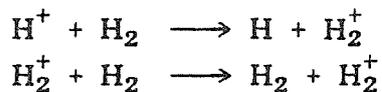
- exponentielles Abklingen der Ströme, wenn $p < p_{zünd}$
- Ströme bleiben konstant, wenn $p = p_{zünd}$
- exponentieller Anstieg der Ströme, wenn $p > p_{zünd}$

Abb. 4.2a zeigt also den Fall der unselbständigen Entladung. Wenn nicht dauernd Ladungsträger durch externe Quellen bereitgestellt werden, stirbt die Entladung mit einer Halbwertszeit von 22ns aus. In Abb. 4.2b wurde der Druck auf 7,5Pa erhöht. Dies entspricht fast dem Zünddruck von 7,8Pa. Die Ströme bleiben nach einer Initialphase von ungefähr 100ns annähernd konstant. Die Auswirkungen einer weiteren Druckzunahme auf 25Pa sind Abb. 4.2c zu entnehmen. Nach ca. 80-100ns ist der Endzustand erreicht; die Ströme wachsen exponentiell an. Ihre Verdoppelungszeit beträgt 6,3ns. Die Abbildungen 4.2d und 4.2e zeigen diesen Fall für die anderen beiden Dioden (30kV/10,0cm und 6,9kV/0,7cm). Der Druck ist 18,0Pa ($p_{zünd}=5,2$ Pa) bzw. 200Pa ($p_{zünd}=84$ Pa), die Verdoppelungszeit 56,8ns bzw. 9,3ns. Daraus kann man folgern, daß bei gleichbleibendem Verhältnis $p/p_{zünd}$ die Verdoppelungszeit mit wachsender Feldstärke abnimmt, was auch zu erwarten ist.

Erstaunlicher hingegen sind die Verhältnisse der einzelnen Teilchenstromdichten. So sind die Ströme der Neutralteilchen H und H_2 stärker als die der Ionen; außer in Abb. 4.2a und 4.2b, wo der H_2^+ -Ionenstrom an dritter Stelle noch vor dem H-Strom steht. Der Elektronenstrom steht an der Spitze. Dies liegt daran, daß ein Ion durch Aufbruch und/oder mehrfache Umladung mehrere

schwere Teilchen generieren kann, die ihrerseits wiederum mehrere Elektronen aus der Kathode herausschlagen können. Bei dem in Abb. 4.2c dargestellten Fall entstehen nur 27% aller Elektronen durch Ionisation des Füllgases, bei dem in Abb. 4.2d dagegen schon 62%, also mehr als die Hälfte und bei den Diodenparametern 6,9 kV/0,7 cm/200 Pa stammen 80% der Elektronen aus der Gasphase. Je kleiner die Entladespannung und je größer das Verhältnis $p/p_{z\ddot{u}nd}$, desto unbedeutender ist also der Einfluß der Sekundäremission. Diesen Sachverhalt kann man wie folgt verstehen: Mit abnehmender Spannung verringert sich die Durchschnittsenergie der schweren Teilchen und mit zunehmendem $p/p_{z\ddot{u}nd}$ der mittlere freie Weg, somit auch wieder die Durchschnittsenergie, was schließlich kleinere Sekundärelektronenkoeffizienten bedeutet (siehe Anhang 2)

Der hohe Neutralteilchenanteil ist auf die großen Wirkungsquerschnitte der beiden Umladungsreaktionen



zwischen 0,5 keV und 80 keV bzw. zwischen 0 keV und 80 keV zurückzuführen (siehe Anhang 2).

In Abb. 4.2f sind neben der mit SPARK berechneten Paschenkurven noch drei andere dargestellt: eine von Lauer berechnete [14] und zwei von R. B. Quinn [22] bzw. G. W. McClure [23] gemessene. Die Quinn'sche Kurve bezieht sich auf Nickelelektroden. Damit läßt sich zum Teil auch die starke Abweichung erklären. Nickel hat einen größeren Sekundärelektronenkoeffizient als Molybdän. Eine Nickeldiode zündet daher leichter als eine Molybdendiode. Der Vergleich der anderen Kurven untereinander zeigt, daß die Simulation mit SPARK näher an die Messungen von McClure heranreicht als die Rechnungen von Lauer. Die höheren Zündspannungen beim Lauer'schen Modell haben hauptsächlich zwei Gründe: zum einen berücksichtigt Lauer weder Protonen noch schnelle Wasserstoffatome. Aber genau diese Teilchen tragen –wie aus 4.5 hervorgeht– bei hoher Spannung erheblich zur Ionisation von Füllgasmolekülen bei. Zum anderen werden auch Aufbrüche von H_2^+ -Ionen vernachlässigt. Ein Aufbruch hat jedoch zur Folge, daß zwei neue Teilchen entstehen (H und H^+), deren Gesamtsekundärelektronenkoeffizient über dem des H_2^+ -Ions liegt. Beide Effekte senken die Zündspannung.

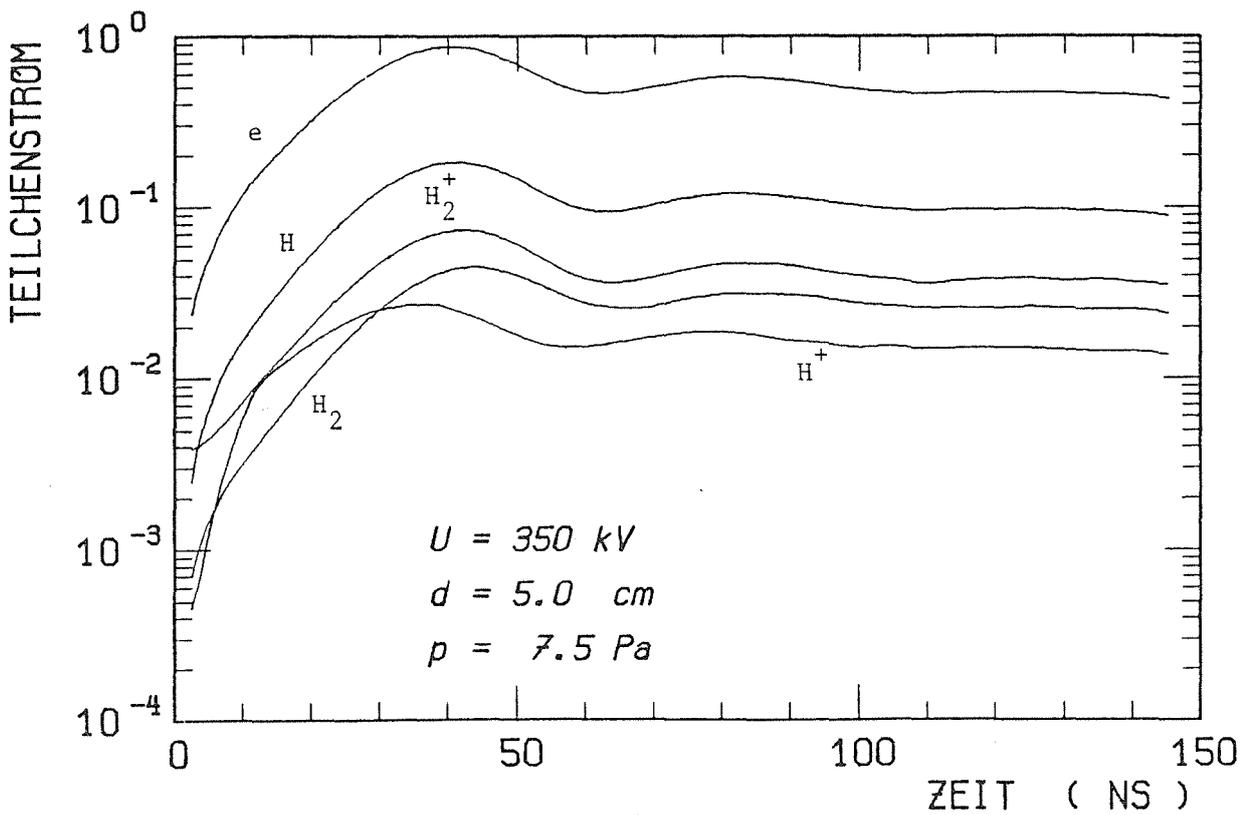
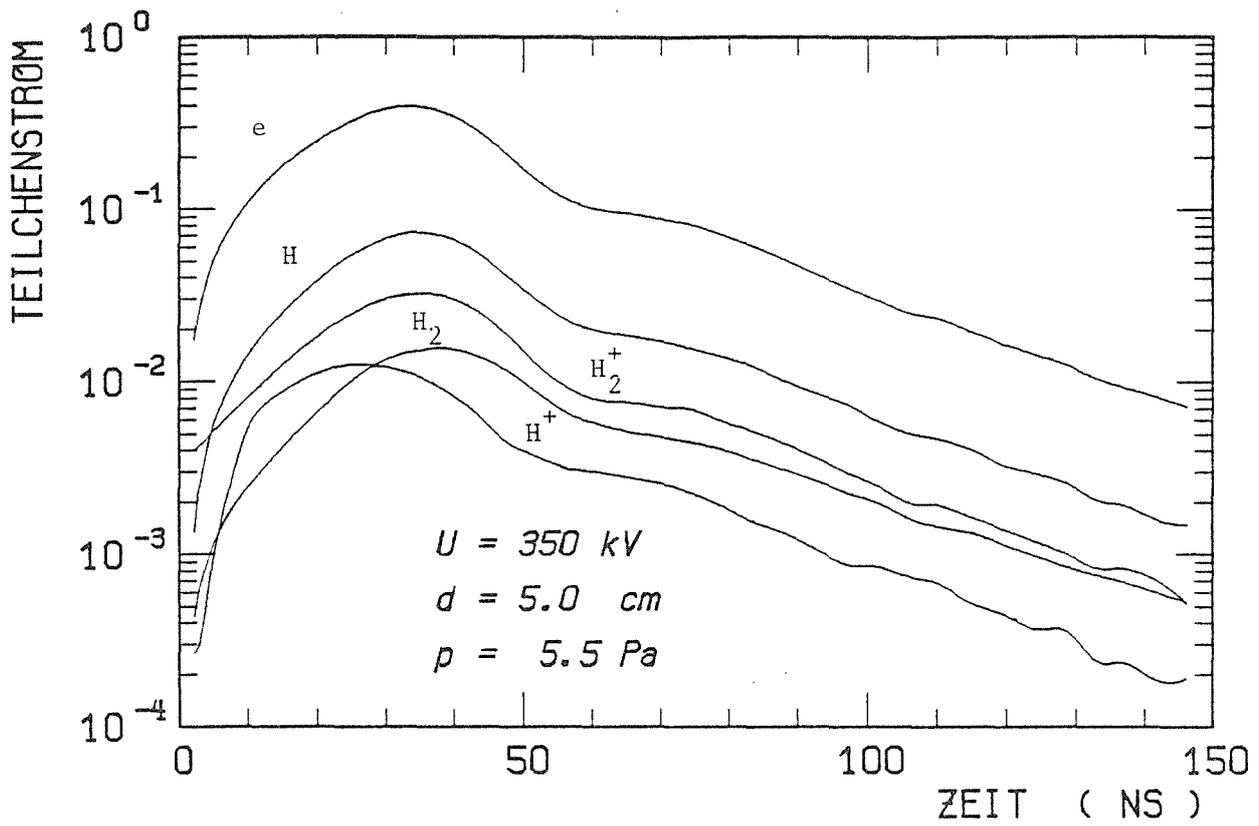


Abb. 4.2a und 4.2b: Teilchenstromdichten der Schwerteilchen an der Kathode und der Elektronen an der Anode als Funktion der Zeit

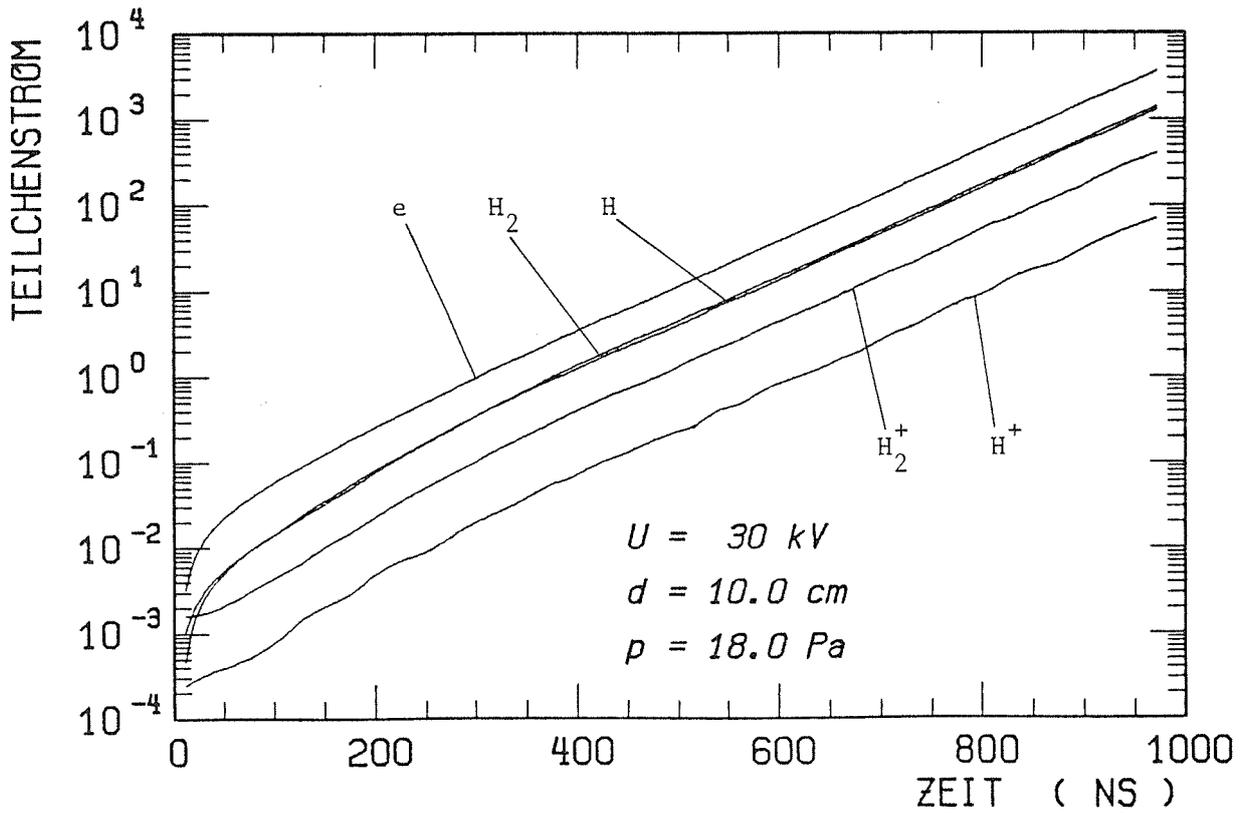
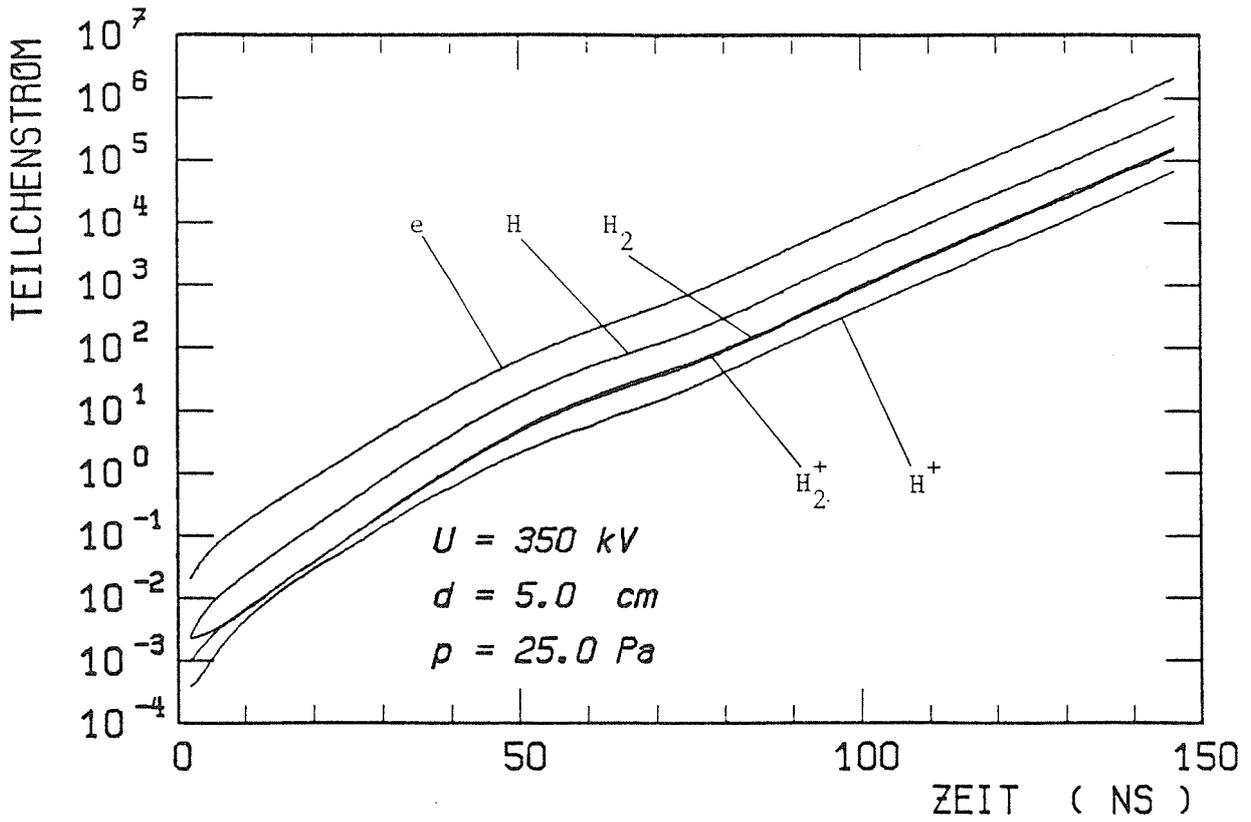


Abb. 4.2c und 4.2d: Teilchenstromdichten der Schwerteilchen an der Kathode und der Elektronen an der Anode

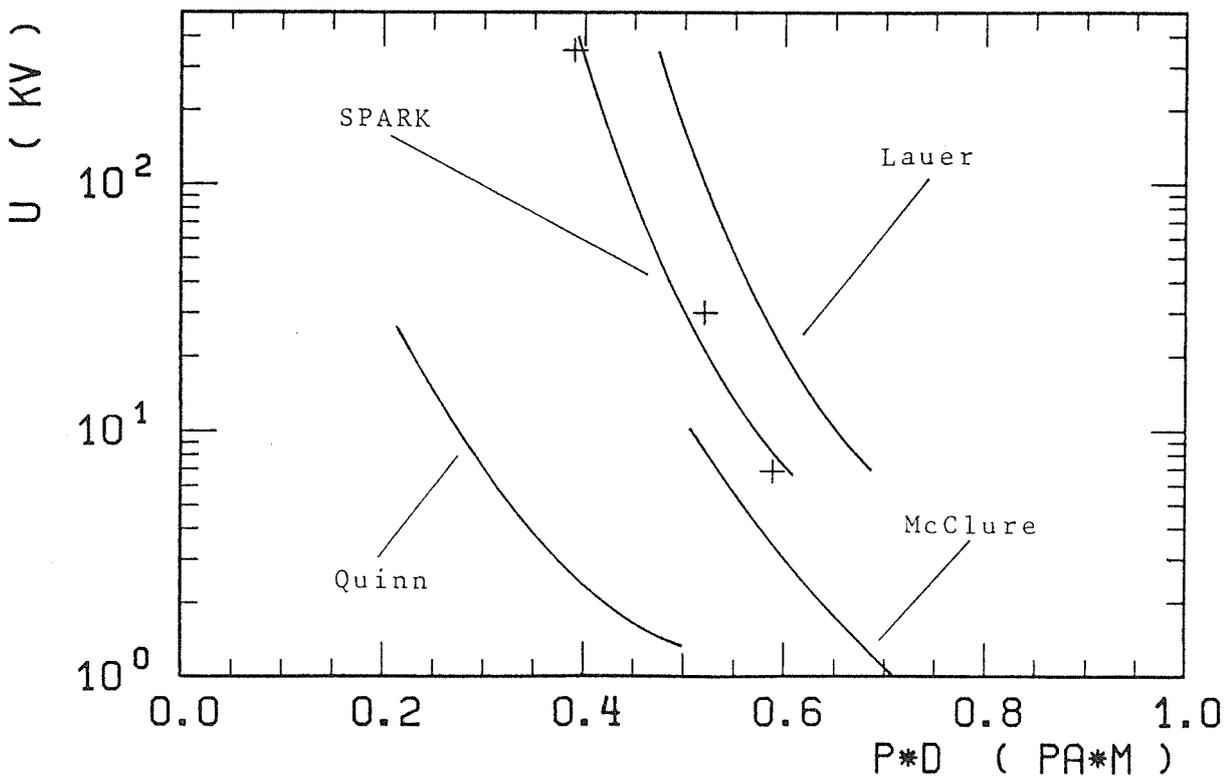
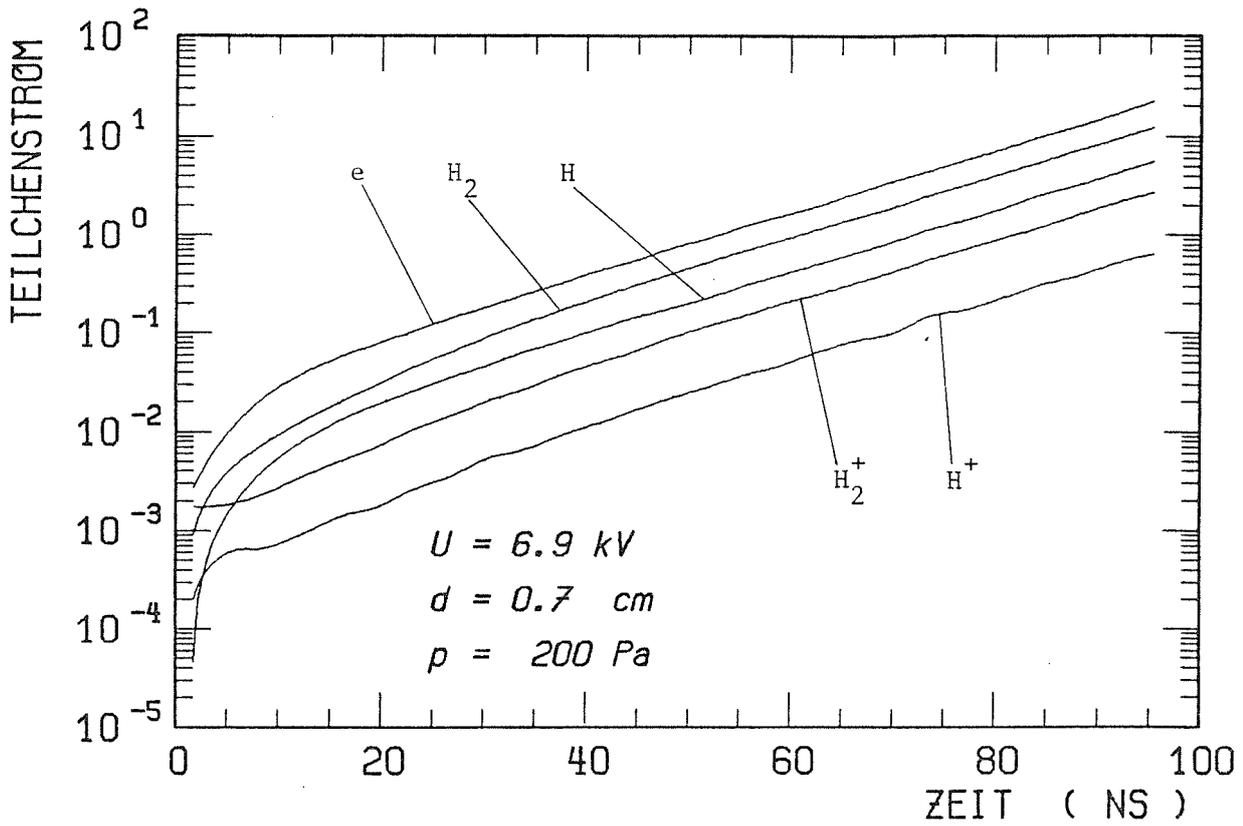


Abb. 4.2e: Teilchenstromdichten der Schwerteilchen an der Kathode und der Elektronen an der Anode / **Abb. 4.2f:** berechnete Paschenkurven und gemessene (letzte von G. W. McClure bzw. R. B. Quinn)

4.3 Teilchendichten

Die Abbildungen 4.3a bis 4.3f zeigen die zeit- und ortsabhängige Dichten verschiedener Teilchensorten. Ihre Zahlenwerte beziehen sich auf die räumlich konstante H_2^+ -Ionen- bzw. Elektronendichte zum Zeitpunkt $t=0$. Die Anode liegt bei $x=0$. Das rechte Ende der x -Achse ist mit der Kathode identisch.

Abb. 4.3a bis 4.3d gehören zum Parametertripel 350 kV/5,0 cm/7,5 Pa, einem Punkt, der wie aus Abb. 4.2b zu ersehen ist, ungefähr auf der Paschenkurve liegt ($p/p_{zünd} \approx 1$). Charakteristisch für die Elektronen (Abb. 4.3a) ist das geringfügige Abfallen der Dichte von der Anode bis kurz vor die Kathode. Dem schließt sich ein starker Anstieg bis zur Kathode an. Dieser rührt von der Elektronenemission an der Kathode her. Die Sekundärelektronen haben bei ihrer Entstehung die kinetische Energie bzw. Geschwindigkeit null und verweilen deswegen relativ lang im Kathodenbereich. Ähnlich sind die Verhältnisse in Abb. 4.3e (30 kV/10,0 cm/18 Pa/ $p:p_{zünd}=3,5$). Jedoch ist die Elektronenvermehrung durch Ionisation von Gasmolekülen stärker ausgeprägt, während die hohe Elektronenkonzentration an der Kathode nachläßt. Beide Effekte lassen sich damit erklären, daß mit zunehmendem Verhältnis $p/p_{zünd}$ und abnehmender Diodenspannung die Sekundäremission von Elektronen an der Kathode abnimmt, weil die auftreffenden Schwerteilchen weniger Energie und damit einen geringeren Emissionskoeffizienten haben (siehe Anhang 2). Gleichzeitig gewinnt die Ionisation – vor allem durch Elektronen – in der Gasphase an Bedeutung.

Abb. 4.3b bis 4.3d zeigen die Schwerteilchendichten. Sie besitzen alle etwa den gleichen Verlauf: Sie wachsen langsam mit steigender Tendenz von null an der Anode bis zur Kathode. Einen Zentimeter vor der Kathode ($\approx 20\%$ der Diodenlänge) betragen ihre Dichten noch nicht die Hälfte der Werte an der Kathode. Über 60% der positiven Raumladung befinden sich in diesem Zentimeter. Das hat einen Kathodenfall zur Folge. Dieser wird hauptsächlich durch H_2^+ -Ionen verursacht, welche ca. neun mal häufiger vertreten sind als Protonen und ca. fünf mal häufiger als Elektronen. Die Dichte der schnellen Neutralen liegt – was auf Grund ihrer Stromanteile zu erwarten ist – im gleichen Größenordnungsbereich wie die der H_2^+ -Teilchen. Die Konzentration der H-Atome (Abb. 4.3d) ist rund 18 mal größer als die der H^+ -Ionen, H_2 -Moleküle (keine Abbildung) haben immerhin noch die gleiche Raumdichte wie H_2^+ -Ionen.

Das zunehmende räumliche Anwachsen der H_2^+ -Ionendichte von Anode zu Kathode ist in Abb. 4.3f (30 kV/ $p:p_{zünd}=3,5$) in ein lineares Anwachsen übergegangen. Kurz vor der Kathode ist dem noch ein verstärkter Anstieg überlagert. Dieser hat seinen Ursprung in der H_2^+ -Produktionsrate durch von der Kathode stammende Elektronen. Bei weiterer Spannungsverminderung und $p/p_{zünd}$ -Ver-

größerung wachsen die Schwerteilchendichte mit sinkender Tendenz zur Anode hin an. Auch das kann man verstehen: Ionisierungen von Gasmolekülen werden immer häufiger von Elektronen verursacht. Da die Elektronendichte von Kathode zu Anode ansteigt, ist die Ionisationsrate und damit die räumliche Anwachsrate der Ionendichte im Anodenbereich am größten. Dieser Effekt wird noch durch die an der Anode zurückgestreuten Elektronen begünstigt.

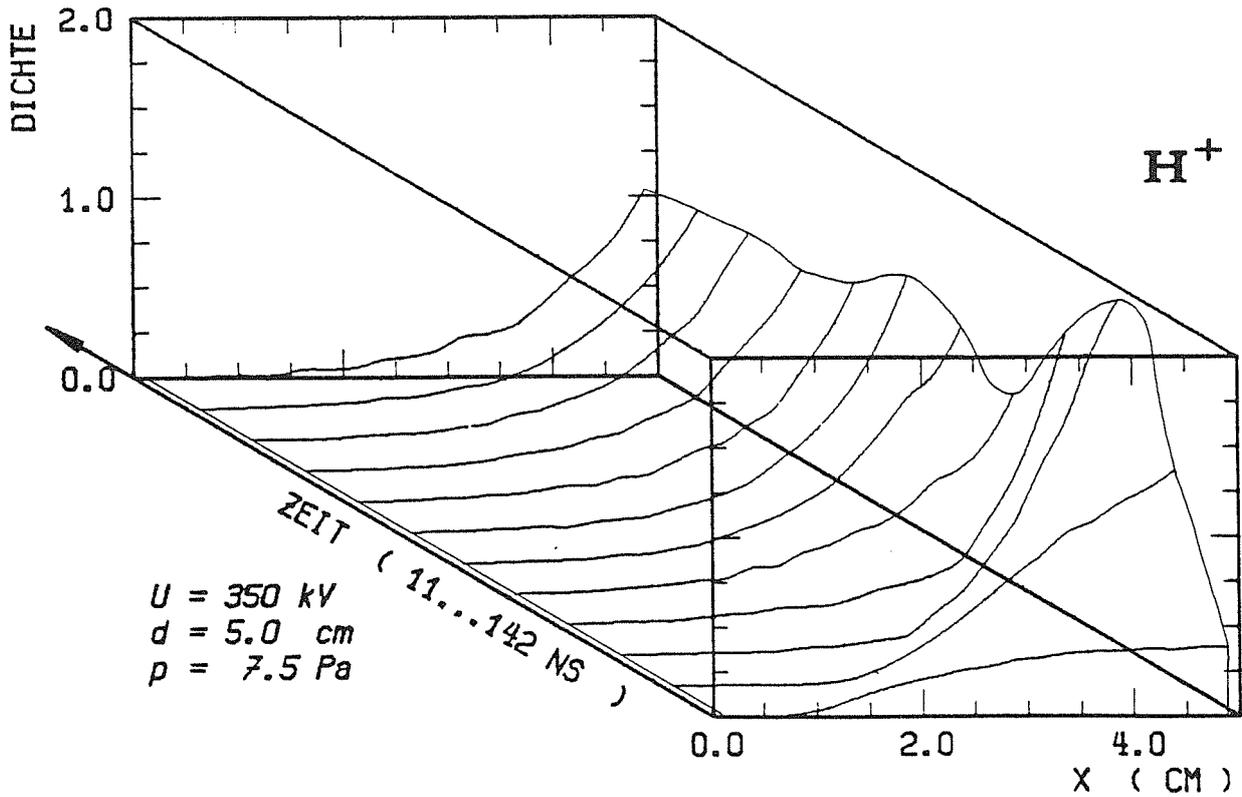
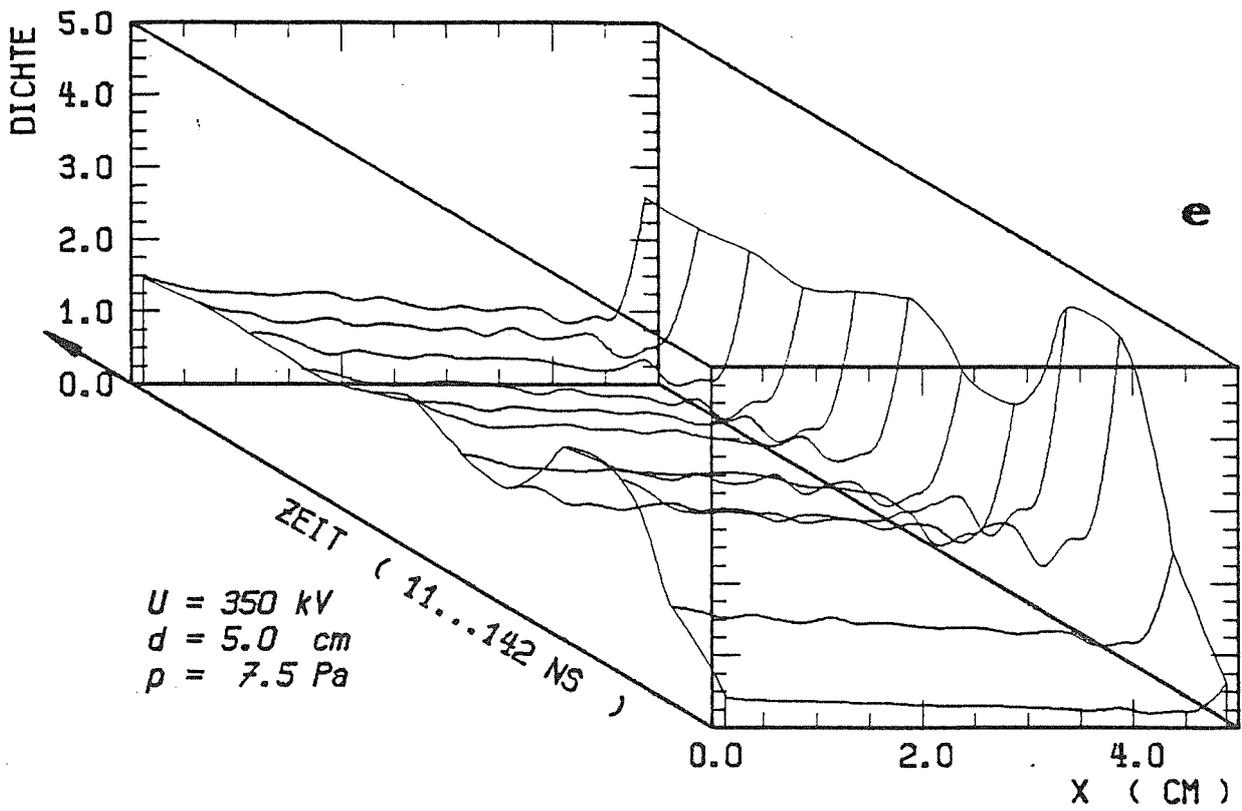


Abb. 4.3a und 4.3b: räumliche Dichte der Elektronen bzw. Protonen als Funktion des Ortes und der Zeit

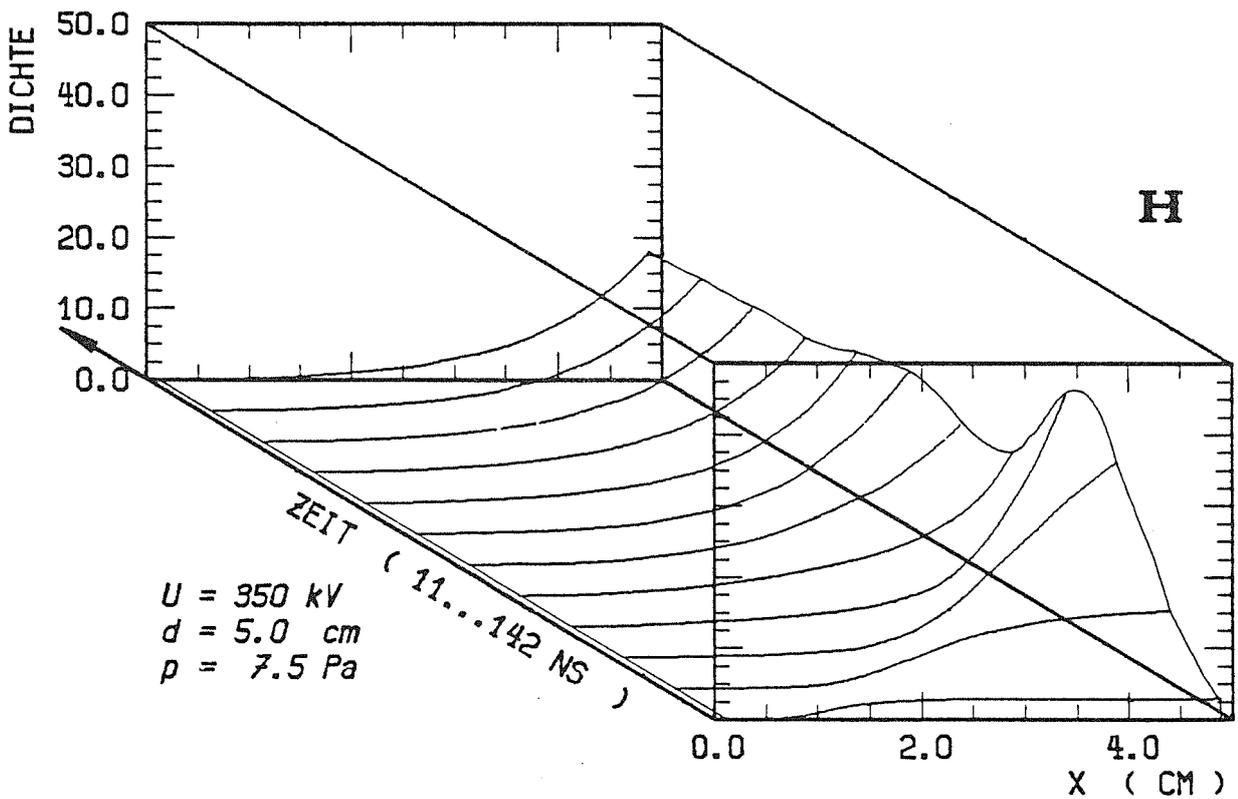
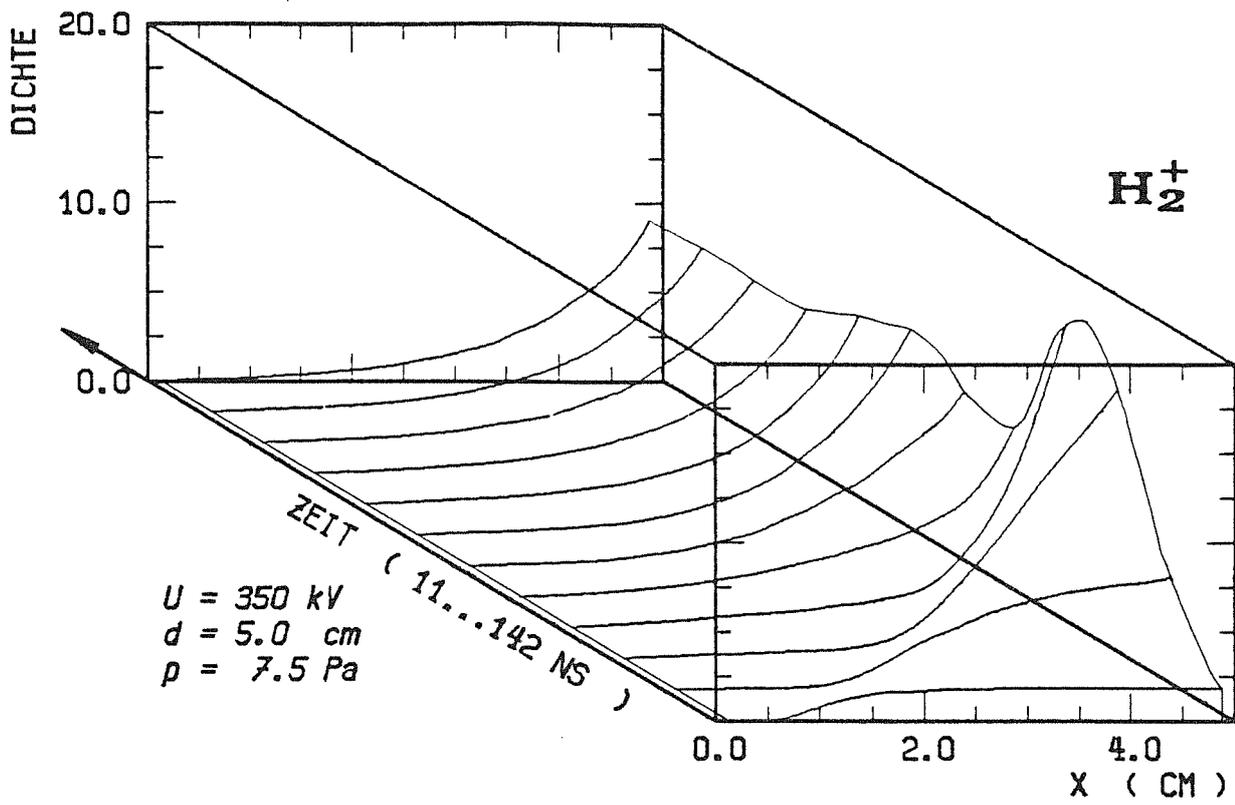


Abb. 4.3c und 4.3d: räumliche Dichte der H_2^+ -Ionen bzw. der schnellen H-Atome als Funktion des Ortes und der Zeit

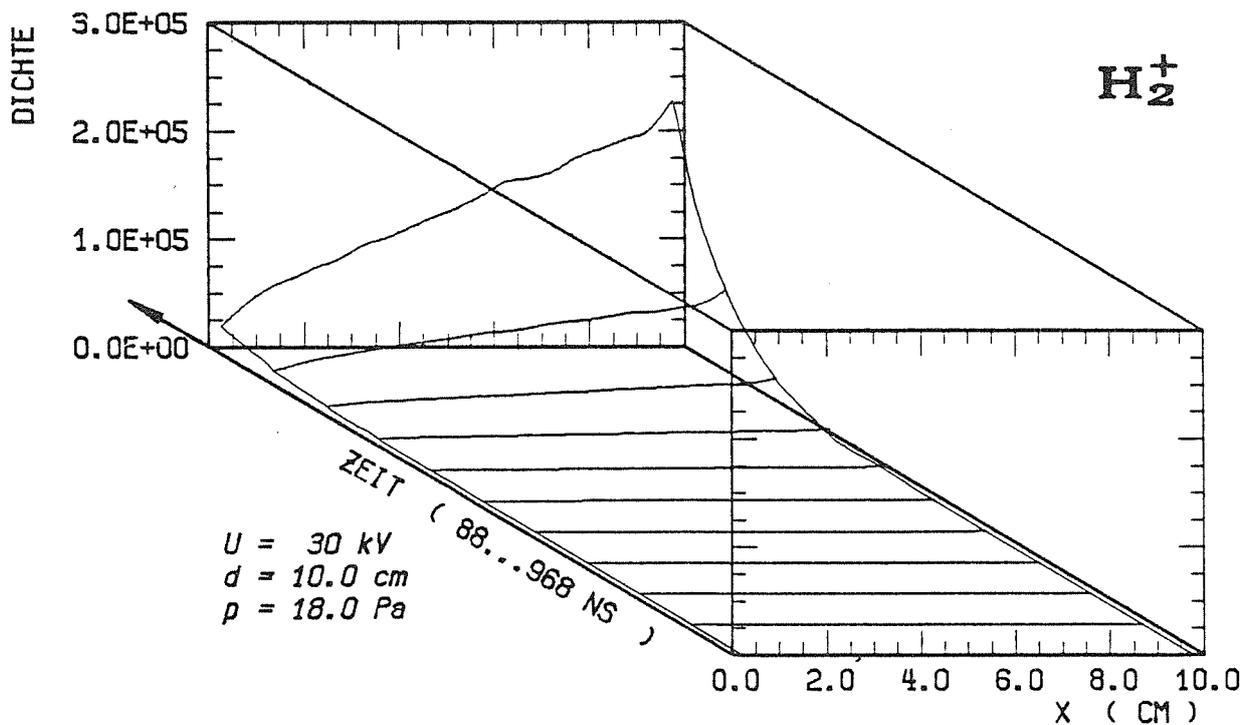
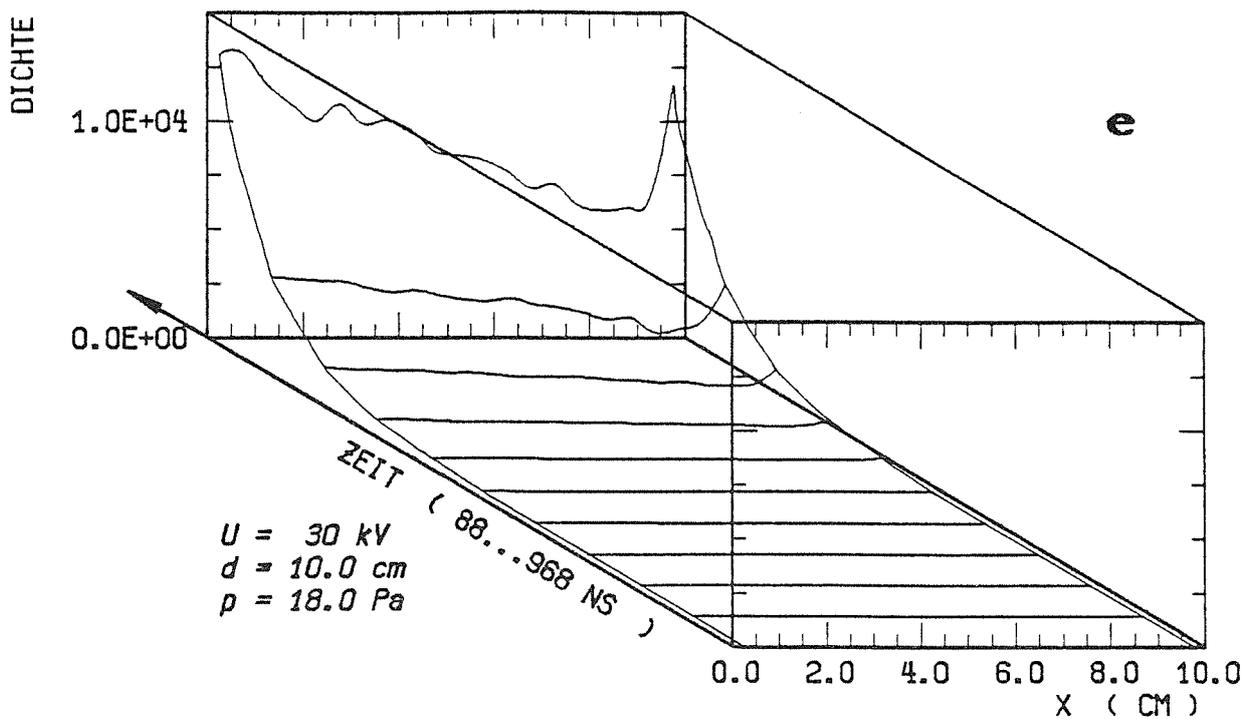


Abb. 4.3e und Abb. 4.3f: räumliche Dichte der Elektronen bzw. der H₂⁺-Ionen als Funktion des Ortes und der Zeit

4.4 Energieverteilungen

Es folgt nun die Diskussion der Energieverteilungen. Auf den Seiten 35 bis 37 sind zeitabhängige Energiespektren der Ionen und schnellen Neutralteilchen an der Kathode zu finden. Auf eine graphische Darstellung des Elektronenspektrums an der Anode wurde verzichtet. Es ist jedoch nötig, ein paar Bemerkungen darüber zu machen.

Ein großer Teil der Elektronen entsteht, wie schon erwähnt, an der Kathode. Da der Wirkungsquerschnitt oberhalb 1keV klein ist, sind Stöße im Gas selten. Viele Elektronen werden zu "Runaway-Teilchen" (das sind Teilchen, deren Wirkungsquerschnitt so klein ist, daß sie nicht mehr stoßen). Der Energieverlust auf dem Weg zur Anode ist also sehr gering. Dies hat zur Folge, daß die Verteilung aus zwei Komponenten besteht: einem ausgeprägten Peak bei der Maximalenergie $e \cdot U$ und einem kontinuierlichen Spektrum zwischen null und $e \cdot U$, verursacht durch die in der Gasphase produzierten Elektronen. Diese Verteilung sieht ungefähr so aus wie die Dichteverteilung der Elektronen. Mit abnehmendem $p/p_{\text{zünd}}$ und zunehmender Diodenspannung wird der Peak immer größer. So haben bei 350 kV Spannung und $p/p_{\text{zünd}} = 1$ rund 60% aller an der Anode auftreffenden Elektronen die Maximalenergie von 350 keV. Dies läßt an eine Verwendung der Pseudofunkenkammer als Elektronenquelle denken.

Bei den Schwerteilchen sind die Verhältnisse komplizierter, da ihnen mehrere Reaktionskanäle zur Verfügung stehen, die je nach Teilchenenergie unterschiedliche Stoßraten haben. Abb. 4.4 a bis 4.4 d zeigen die Spektren der Schwerteilchen für $U=350$ kV und $p/p_{\text{zünd}} = 3,2$. Auffallend bei den H_2^+ -Ionen ist, daß die Verteilung ihr Maximum bei null hat und dann ungefähr exponentiell abnimmt. 93% der Ionen haben weniger als 20 keV. Ihre Durchschnittsenergie beträgt nur 7,1 keV, (2% der Maximalenergie) was einem mittleren freien Weg von einem Millimeter entspricht (die Diode ist 50 mm lang). Besser ist die Energieaufnahme der Protonen. Ihre Durchschnittsenergie ist 48 keV (14% der Maximalenergie). Für den schlechten Energiegewinn der H_2^+ -Ionen sind vor allem die großen Wirkungsquerschnitte von Ladungsaustausch und Ladungsaustausch mit Dissoziation unterhalb 100 keV verantwortlich. Bei diesen Reaktionen geht die gesamte Energie des Ions auf schnelle Neutrale über, die im elektrostatischen Feld keine Energie mehr aufnehmen können. Unterhalb 20 keV sind die Wirkungsquerschnitte annähernd konstant. Die Verteilung der freien Weglänge l_c ist dann proportional zu $\exp(-n_0 \sigma l_c)$. Damit ist auch das exponentielle Abklingen des Energiespektrums erklärt.

Eine Erhöhung der Diodenspannung würde die mittlere Energie vergrößern, somit den Wirkungsquerschnitt der Austauschreaktionen senken und den der

erwünschten Ionisationen heben. Um einen optimalen Energiegewinn zu erhalten, sollte jedoch zusätzlich eine differentiell leergepumpte Nachbeschleunigungskammer verwendet werden. Ansonsten müßten die Ionen auf der Anode entstehen und ohne Austauschstöße die Kathode erreichen um die Maximalenergie $e \cdot U$ zu erhalten. Dies ist dann aber keine Gas- sondern eine Vakuumentladung mit aktiver Anode.

Die Spektren der schnellen Neutralen sind in Abb. 4.4c und 4.4d dargestellt. Ihre Durchschnittsenergien von 8,0 keV und 7,8 keV sind immerhin mit der der H_2^+ -Ionen vergleichbar. Abb. 4.4e und 4.4f zeigen die Ionenspektren bei $U=30$ kV und $p/p_{\text{zünd}} = 3,5$. Wie zu erwarten, liegen die Verhältnisse von mittlerer Energie (1,4 keV für Protonen und 0,59 keV für H_2^+ -Ionen) zu Maximalenergie unter den oben erwähnten.

Es wurden auch Spektren für 6,9 kV Diodenspannung berechnet (keine Abbildung). Diese konnten mit den experimentellen Daten von W. Benker [21], welche während der Hauptentladung gemessen wurden, verglichen werden. Dabei zeigte sich, daß das simulierte Protonenspektrum gut mit den Messungen übereinstimmte; nicht so das Spektrum der H_2^+ -Ionen. Wahrscheinlich liegt das daran, daß während der Hauptentladung der Ionisationsgrad des Gases so groß ist, daß Ladungsaustausch zwischen H_2^+ -Teilchen und Wasserstoffmolekülen stark an Bedeutung verliert. Für Protonen fiel dieser Umstand nicht so sehr ins Gewicht, da ihr Wirkungsquerschnitt unterhalb 1 keV rund 30 mal kleiner ist.

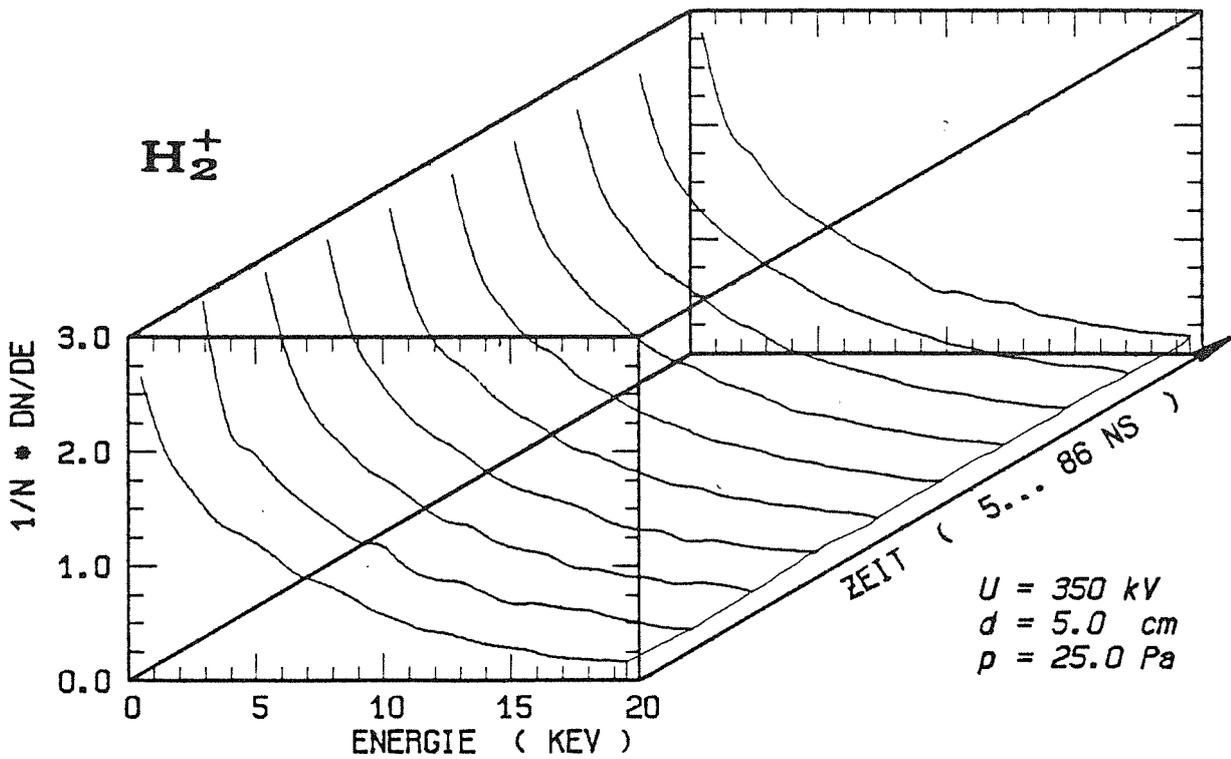
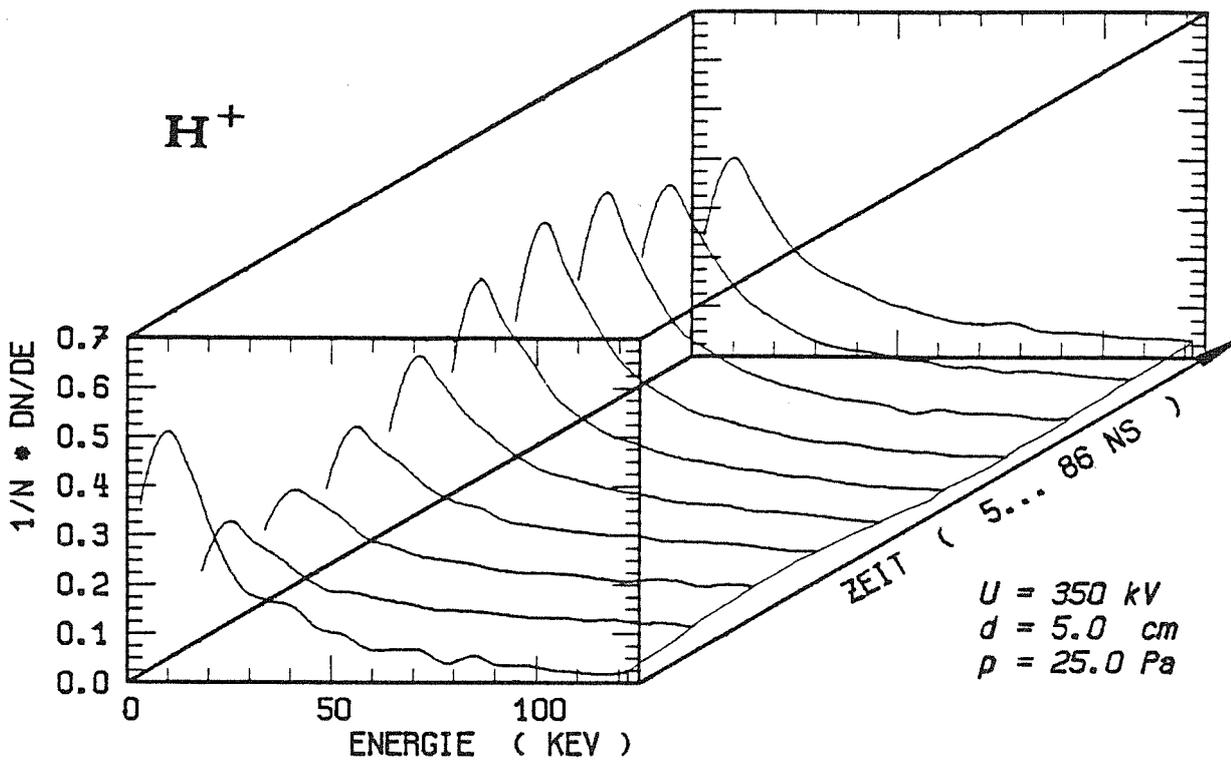


Abb. 4.4a und Abb. 4.4b: zeitabhängiges Energiespektrum der Protonen und der H₂⁺-Ionen

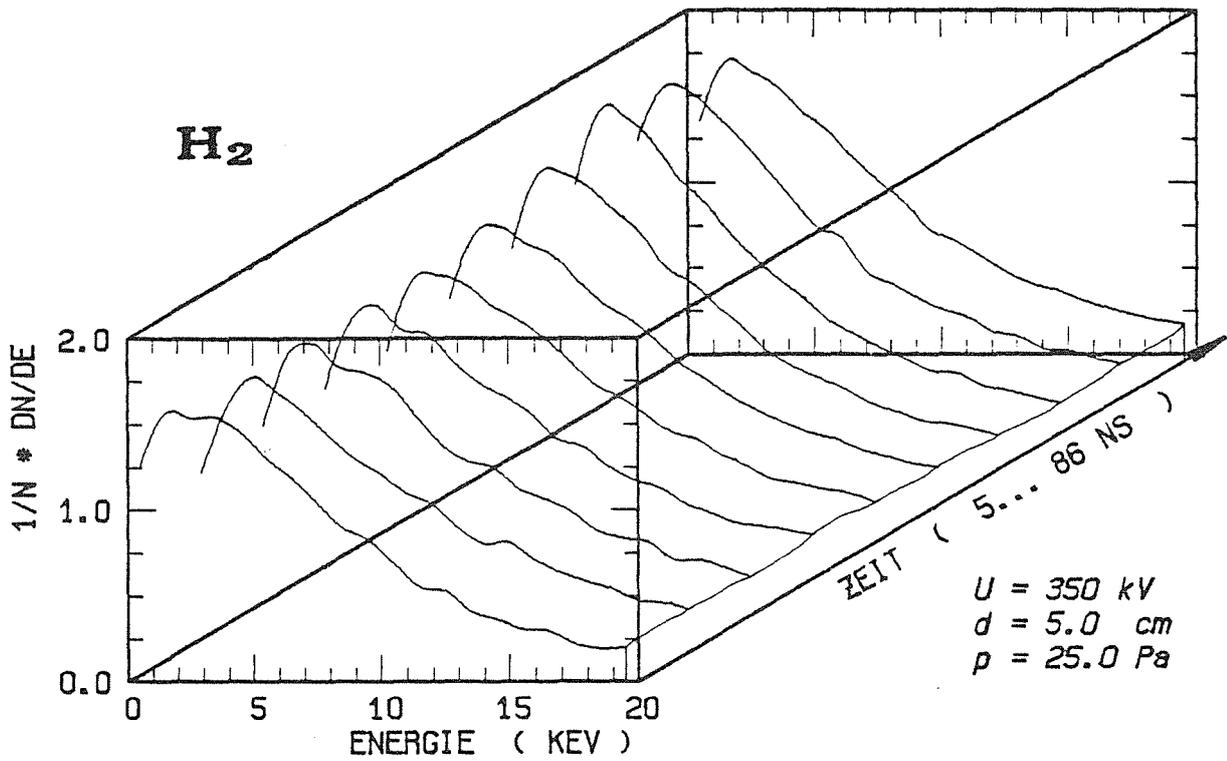
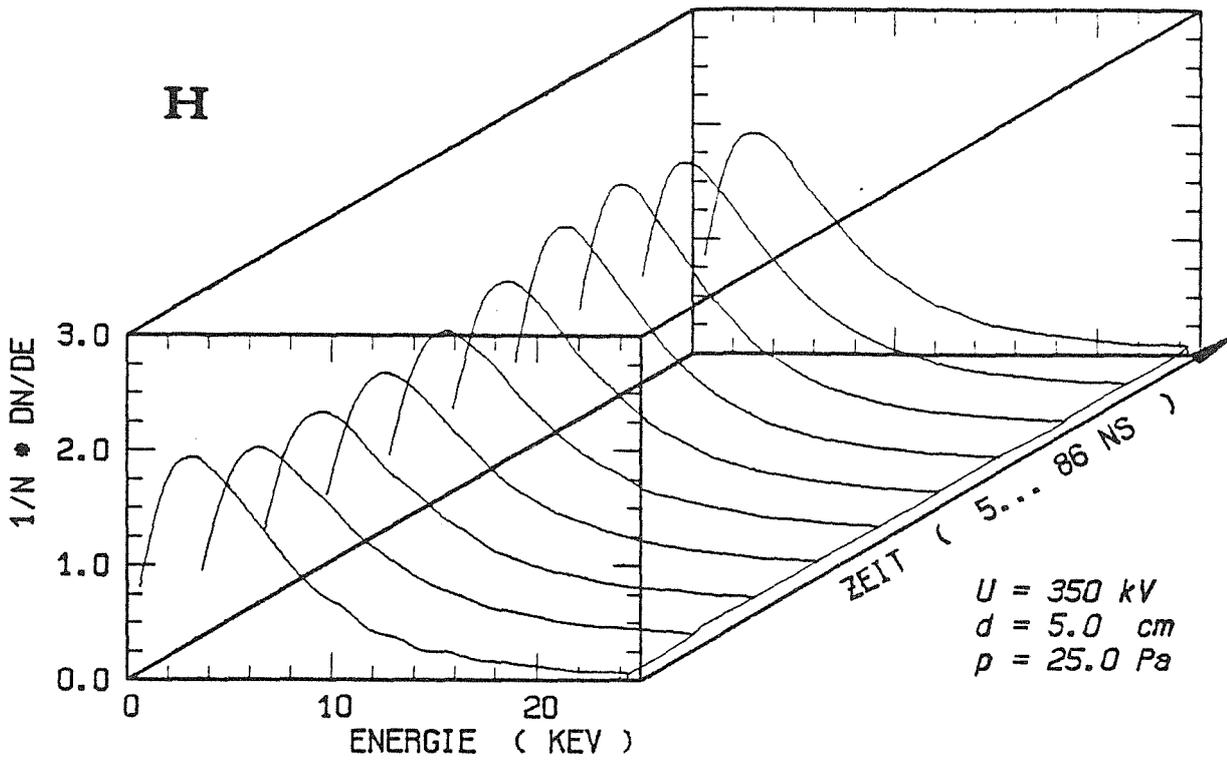


Abb. 4.4c und 4.4d: zeitabhängiges Energiespektrum der schnellen H-Atome und der schnellen H₂-Moleküle

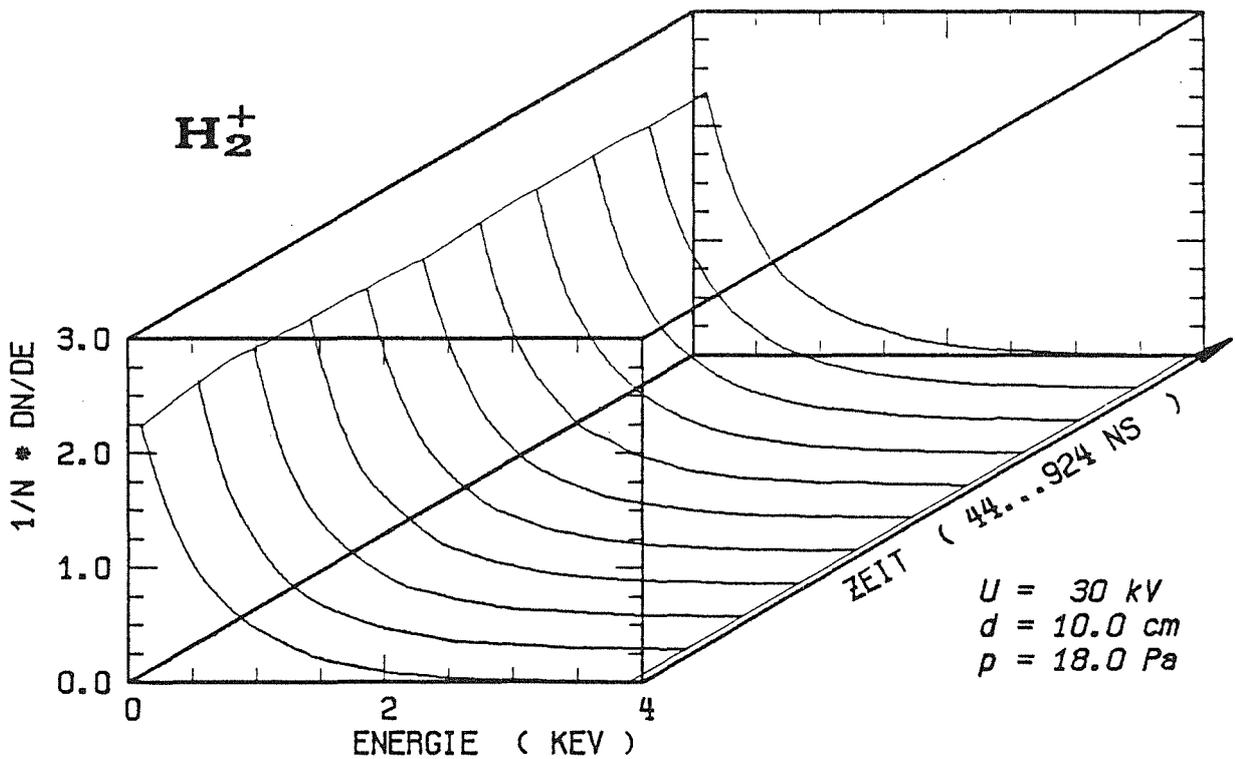
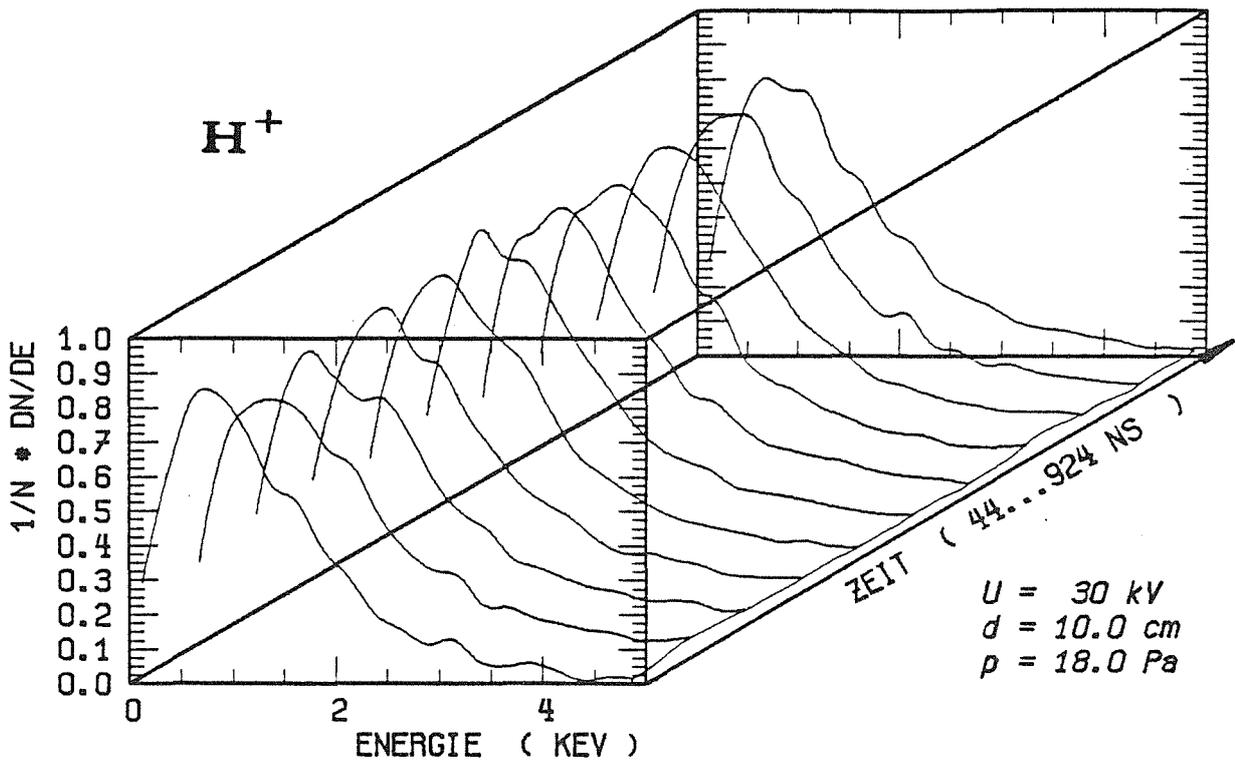


Abb. 4.4e und Abb. 4.4f: zeitabhängiges Energiespektrum der Protonen und der H₂⁺-Ionen

4.5 Relative Reaktionshäufigkeiten

Als letztes Ergebnis der Simulation wird im folgenden die Bedeutungen und Häufigkeiten der einzelnen Reaktionen behandelt. Auf den Seiten 39 bis 41 sind dazu jeweils drei Schaubilder zu finden. Sie zeigen Rechtecke, die in kleinere Flächen unterteilt sind. Diese Flächen stellen relative Häufigkeiten dar; im obersten Rechteck die relativen Häufigkeiten von Ionisationen durch Elektronen, durch Protonen u. s. w. bezogen auf die Gesamthäufigkeit von Ionisationen. Aus der mittleren Abbildung ist die Verteilung der verschiedenen Protonenreaktionen zu entnehmen und aus der unteren die der H_2^+ -Reaktionen. Bei der Beurteilung muß man berücksichtigen, daß die relativen Gewichte der Reaktionen nicht nur von der Diodenspannung abhängen, sondern auch von $p/p_{z\ddot{u}nd}$. Eine Variation von $p/p_{z\ddot{u}nd}$ ändert die mittleren freien Weglängen, damit die mittleren Energien, wodurch sich auch die Verhältnisse der Wirkungsquerschnitte ändern können.

Betrachtet man Abb. 4.5a ($U=350\text{ kV}$, $p/p_{z\ddot{u}nd}=3,2$), so fällt auf, daß nur rund 10% aller Ionisationen von Elektronen verursacht werden, obwohl der Elektronenstrom 2,3 mal stärker ist als der Strom der schweren Teilchen. Dies liegt in der Energieabhängigkeit des Ionisationswirkungsquerschnitts der Elektronen begründet. Nach einem Maximum von 10^{-20} m^2 bei 80 eV fällt er steil ab. Die mittlere freie Weglänge für Teilchen mit 10^{-20} m^2 Wirkungsquerschnitt in einem Gas bei 25 Pa Druck beträgt 1,6 cm. Nach dieser Strecke hat ein Elektron aber schon eine Energie von 113 keV und einen Wirkungsquerschnitt von $6 \cdot 10^{-23}\text{ m}^2$. Es ist zu einem "Runaway-Teilchen" geworden.

Bemerkenswert ist der hohe Ionisationsbeitrag der schnellen Neutralen von ca. 60% in Abb. 4.5a. Diese Spitzenstellung nehmen bei $U=30\text{ kV}$ und $p/p_{z\ddot{u}nd}=3,5$ (Abb. 4.5d) die Elektronen mit 47% ein. In Abb. 4.5g ($U=6,9\text{ kV}$, $p/p_{z\ddot{u}nd}=2,4$) dominieren sie mit 77% noch stärker. Daneben besitzen nur noch die schnellen H_2 -Moleküle eine nennenswerte Ionisationsrate.

Vergleicht man bei den Protonen das Verhältnis von Umladungen zu Ionisationen, so ist auch dort eindeutig ein Trend zu erkennen: Je kleiner die Spannung, desto häufiger sind Umladungen. Schon bei 30 kV ist nur noch jeder 20. Stoß ein Ionisationsstoß. Ähnlich so bei den H_2^+ -Ionen, jedoch mit dem Unterschied, daß vor allem bei hoher Spannung noch Dissoziationen und Dissoziationen mit Umladungen eine Rolle spielen.

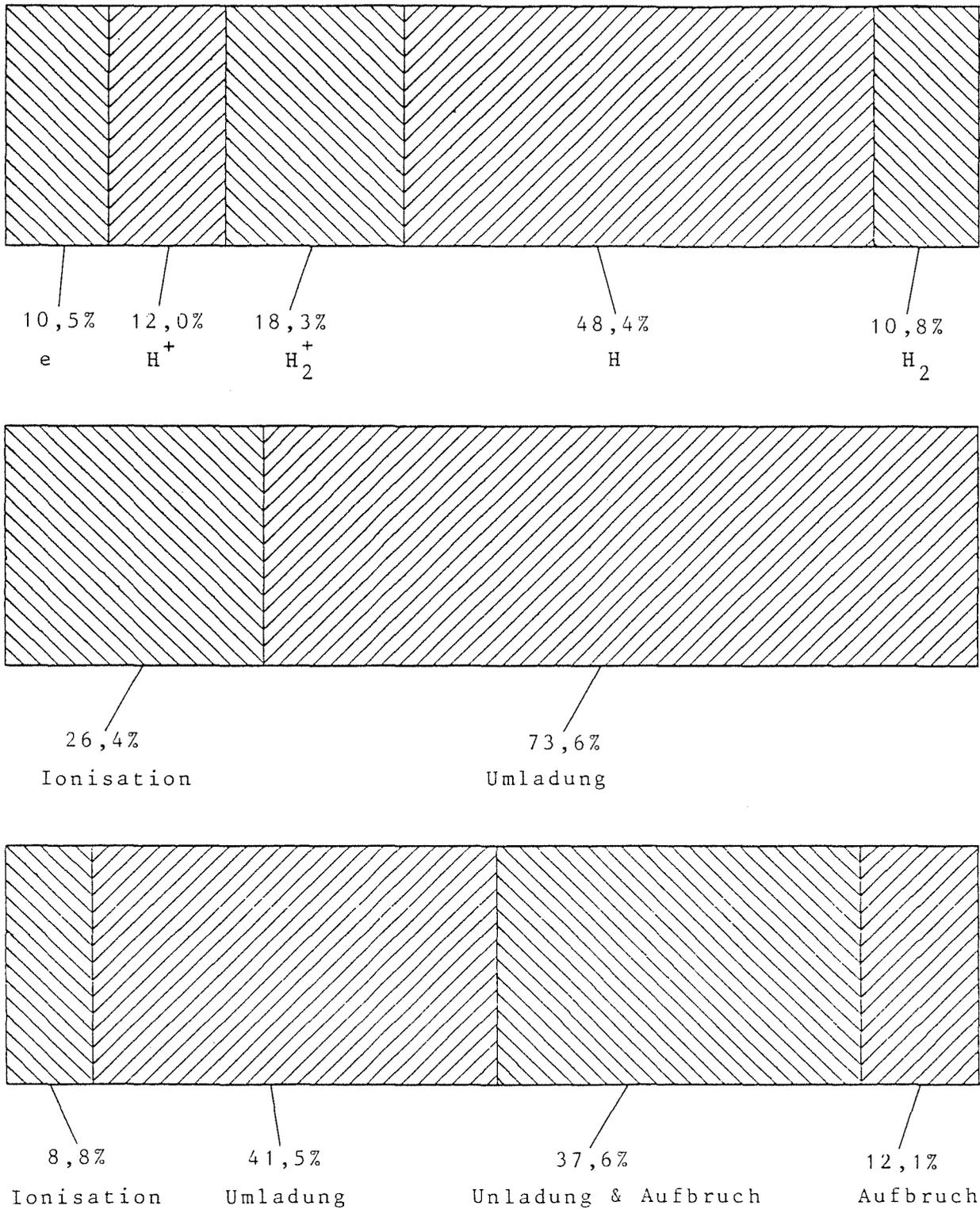
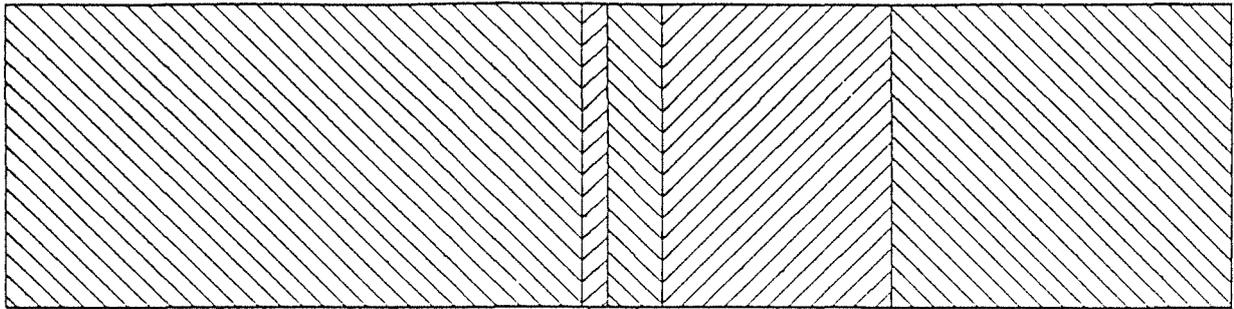


Abb. 4.5a: relative Häufigkeit der Ionisation durch Elektronen, durch Protonen u. s. w. / **Abb. 4.5b:** relative Häufigkeit der Ionisation und der Umladung bei Protonen / **Abb. 4.5c:** relative Häufigkeit der Ionisation, der Umladung, der Umladung mit Aufbruch und des Aufbruchs bei H₂⁺-Ionen (alle drei für U=350kV, p/p_{zünd} =3,2)



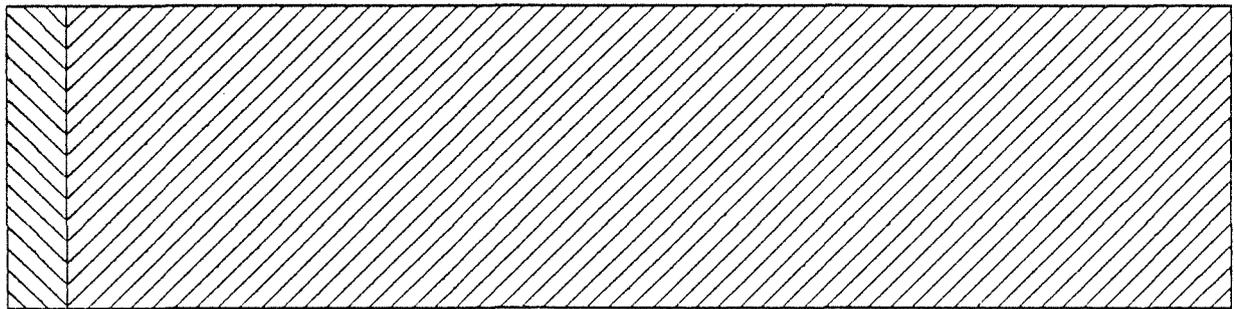
46,7%
e

2,0%
H⁺

4,4%
H₂⁺

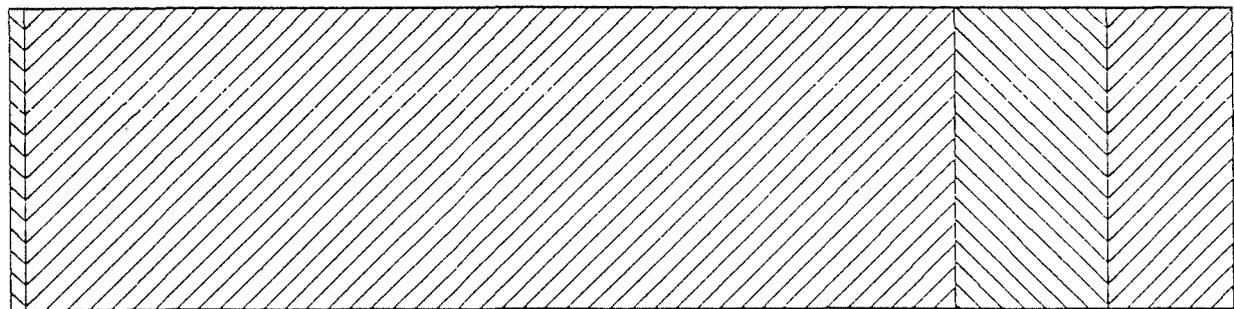
18,8%
H

28,1%
H₂



4,8%
Ionisation

95,2%
Umladung



1,2%
Ionisation

75,8%
Umladung

12,5%
Umladung & Aufbruch

10,5%
Aufbruch

Abb. 4.5d: relative Häufigkeit der Ionisation durch Elektronen, durch Protonen u. s. w. / **Abb. 4.5e:** relative Häufigkeit der Ionisation und der Umladung bei Protonen / **Abb. 4.5f:** relative Häufigkeit der Ionisation, der Umladung, der Umladung mit Aufbruch und des Aufbruchs bei H₂⁺-Ionen (alle drei für U=30kV, $p/p_{zünd} = 3,5$)

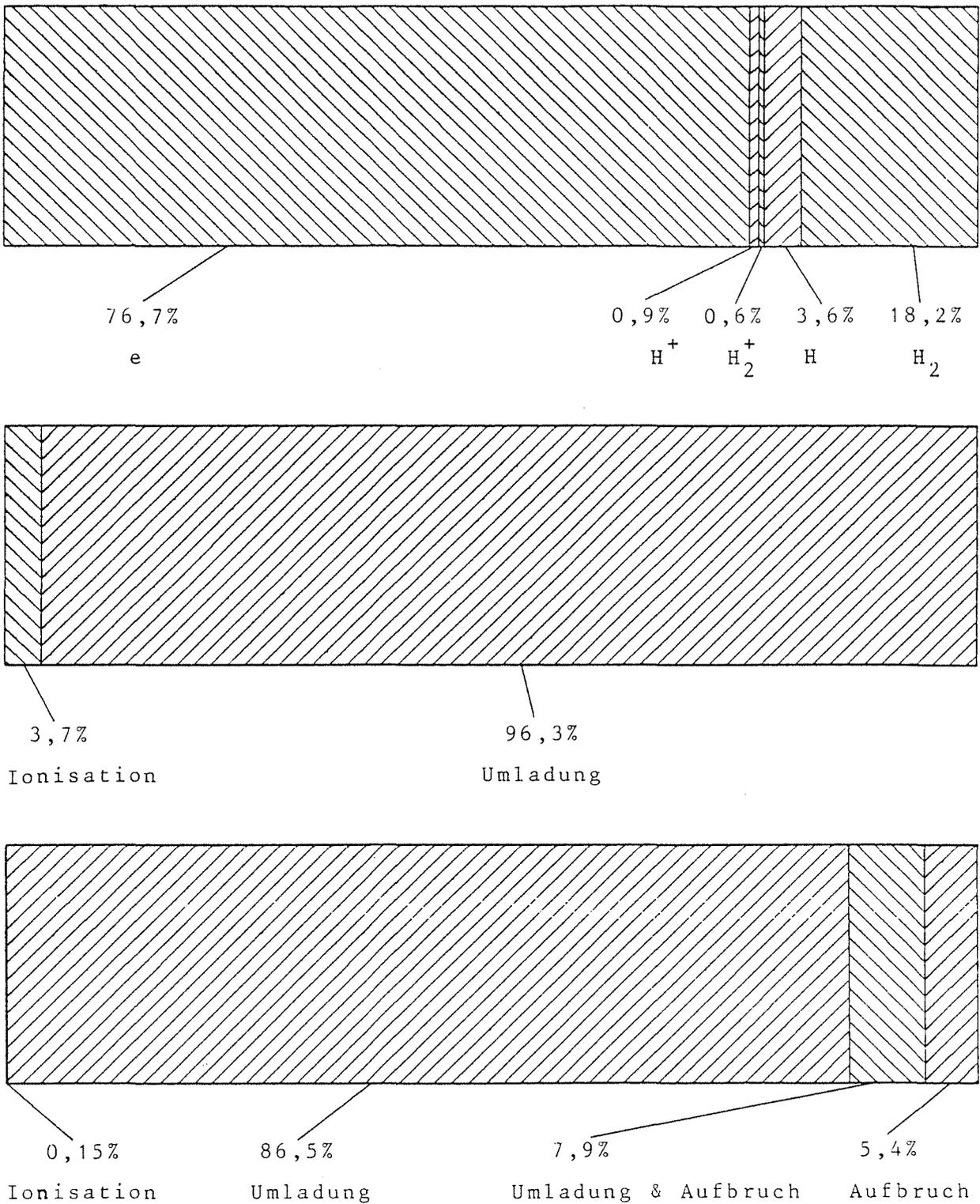


Abb. 4.5g: relative Häufigkeit der Ionisation durch Elektronen, durch Protonen u. s. w. / **Abb. 4.5h:** relative Häufigkeit der Ionisation und der Umladung bei Protonen / **Abb. 4.5i:** relative Häufigkeit der Ionisation, der Umladung mit Aufbruch und des Aufbruchs bei H₂⁺-Ionen (alle drei für U=6,9kV, $\rho/\rho_{\text{Zünd}} = 2,4$)

4.6 Absolute Skalierung

Um die Stromdichten und Teilchendichten in absoluten Einheiten zu skalieren, ist es nötig zu einem bestimmten Zeitpunkt entweder die Stromdichten oder die Teilchendichten zu kennen.

Dazu wurde angenommen, daß das Füllgas schon vor dem Anlegen der Diodenspannung durch kosmische Strahlung und Radioaktivität der Erdkruste ständig ionisiert wird. Die dabei entstehenden Elektron-Ion-Paare rekombinieren nach einer gewissen Zeit wieder. Im stationären Zustand ist die Elektronen- bzw. Ionendichte gegeben durch [24]:

$$n_i = n_e = \sqrt{\frac{1}{r} \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{erz}}} \quad (4.6a)$$

$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{erz}}$ ist die Ionisationsrate und r der Rekombinationskoeffizient. Ihre Werte sind für Luft $1,6 \cdot 10^6 \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (bei 1bar) und $1,6 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Sie können in erster Näherung auch für Wasserstoff benutzt werden. Es ergeben sich damit folgende Stromdichten an der Kathode:

$$U=350 \text{ kV} / d=5,0 \text{ cm} / p=25 \text{ Pa} : j = 0,125 \text{ Acm}^{-2} \text{ nach } 146 \text{ ns}$$

$$U=30 \text{ kV} / d=10,0 \text{ cm} / p=18 \text{ Pa} : j = 0,076 \text{ mAcm}^{-2} \text{ nach } 972 \text{ ns}$$

$$U=6,9 \text{ kV} / d=0,7 \text{ cm} / p=200 \text{ Pa} : j = 0,78 \mu\text{Acm}^{-2} \text{ nach } 95 \text{ ns}$$

Zur Abschätzung der Ladungsdichten und der damit verbundenen inneren elektrostatischen Felder wurden nur die H_2^+ -Ionen in Betracht gezogen. Die Dichte der Elektronen und der Protonen kann vernachlässigt werden. Es ist klar, daß die durch die positive Ladungsschicht verursachten Felder an den Elektroden am größten sind. Man kann sie dort nach der Gleichung

$$E = \frac{\sigma}{2 \epsilon_0}$$

berechnen. σ ist die auf die Einheitsfläche bezogene Ladungsmenge zwischen Anode und Kathode. Man bekommt folgende Zahlenwerte für die H_2^+ -Teilchendichte n und E :

$$U=350 \text{ kV} / d=5,0 \text{ cm} / p=25 \text{ Pa} : n = 1,6 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}, \quad E = 7,2 \cdot 10^4 \text{ Vm}^{-1} \\ \text{nach } 146 \text{ ns}$$

$$U=30 \text{ kV} / d=10,0 \text{ cm} / p=18 \text{ Pa} : n = 1,7 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}, \quad E = 1,5 \cdot 10^3 \text{ Vm}^{-1} \\ \text{nach } 968 \text{ ns}$$

$$U=6,9 \text{ kV} / d=0,7 \text{ cm} / p=200 \text{ Pa} : n = 5,7 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}, \quad E = 3,6 \text{ Vm}^{-1} \\ \text{nach } 96 \text{ ns}$$

Man sieht, daß das interne Feld gegenüber dem äußeren noch vernachlässigt werden kann. Exponentielles Wachstum der Raumladungen angenommen, würden ihre Feldstärken nach 187 ns bzw. 1400 ns bzw. 264 ns schon 10% der Diodenfeldstärke betragen. Spätestens dann ist die Grenze des Modells erreicht.

Die obigen Abschätzungen sind sehr grob, da der Ionisationsgrad zum Zeitpunkt $t=0$ –nach Gl. (4.6a) berechnet– nur einen Mittelwert darstellt. In der Pseudofunkenkammer kann er durchaus wesentlich geringer sein, da durch Metallwände die ionisierende Strahlung zum Teil aufgehalten wird. Schließlich ist es nicht sicher, daß die hochenergetische Strahlung der einzige Mechanismus ist, der Primärladungsträger bereitstellt. So kann z. B. bei Feldstärken von über 10^7 V/m an den Elektrodenoberflächen auch Feldemission eine Rolle spielen.

5 Kurzer Ausblick

Fernziel unserer theoretischen Arbeit zum Pseudofunken ist die Verbindung von SPARK mit dem Code zur Berechnung der Hohlkathode. Erst diese Vereinigung würde eine komplette Berechnung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung der Entladung ermöglichen.

Doch bevor diese Verbindung sinnvoll wird, muß SPARK zunächst auf zwei Dimensionen (r, z) erweitert werden. Dies gilt nicht nur für die Bewegungsgleichungen der Teilchen, sondern auch für das elektrostatische Feld. Erst dadurch ist es möglich die Bündelung des Plasmastrahls auf der Achse zu beschreiben. Das Hauptproblem bei der Erweiterung wird das numerische Lösen der Bewegungsgleichungen mit sich bringen. Bisher konnte darauf verzichtet werden, da die auf die Teilchen wirkende Kraft als konstant angesehen wurde. Um den zeitlichen Rechenaufwand, der zur Lösung der vielen tausend Bewegungsgleichungen nötig ist, in Grenzen zu halten, scheint eine Reduzierung der Testteilchenzahl sinnvoll zu sein. Dies wiederum macht die Implementierung einer ausgefeilteren Renormierung –wie sie in Kap. 2.4 kurz angedeutet wurde– nötig, damit die statistischen Fehler nicht überhand nehmen.

Ist all dies getan, kann auch an die Berücksichtigung von Raumladungen gedacht werden. Dazu ist das simultane numerische Lösen der Poissongleichung nötig, wofür bereits ein Unterprogramm zur Verfügung steht. Die nächste Stufe wäre dann die Berücksichtigung der internen magnetischen Felder.

Schließlich muß auch daran gedacht werden, der Abnahme der Füllgasteilchendichte mit zunehmendem Ionisierungsgrad Rechnung zu tragen und auch Stöße ohne Beteiligung dieser Füllgasteilchen zu berücksichtigen, wie z. B. Rekombinationen.

Anhang

A1 Herleitung des Paschengesetzes

In den meisten Büchern über Gasentladungsphysik wird das Paschengesetz mit Hilfe des Townsend-Konzeptes hergeleitet. Die dabei vorausgesetzten Näherungen wie z. B., daß der Ionisierungskoeffizient α nur von E/n abhängt, gelten jedoch nicht mehr bei hohen E/n -Werte ($> 5 \cdot 10^{-18} \text{ Vm}^2$). Formuliert man das Problem im Rahmen der statistischen Theorie unter Verwendung der Stoßwirkungsquerschnitte, so läßt sich zeigen, daß der Gültigkeitsbereich des Gesetzes nicht an einen beschränkten E/n -Bereich gebunden ist. Dies soll im folgenden geschehen.

$p_c(x)$ sei die Verteilung der freien Weglänge eines geladenen Teilchens. Die Diodenspannung sei U , der Elektrodenabstand d und die Gasdichte n_0 . Geht man bei gleichbleibender Spannung zum Abstand kd und der Dichte n_0/k über, so gilt das Paschengesetz dann, wenn die neue Weglängenverteilung $p'_c(x)$ mit der alten durch die Ähnlichkeitsbeziehung

$$p'_c(kx) = p_c(x) \quad (\text{A1})$$

verknüpft ist. $p(x)$ ist nach Gleichung (2.4.2d) gegeben durch:

$$p_c(x) = 1 - \exp\left(-n_0 \int_0^x \sigma\left(\frac{U}{d} x'\right) dx'\right)$$

$p'_c(kx)$ kann man also wie folgt ausdrücken:

$$p'_c(kx) = 1 - \exp\left(-\frac{n_0}{k} \int_0^{kx} \sigma\left(\frac{U}{kd} x'\right) dx'\right)$$

Durch die Substitution $x' = kz$ wird daraus:

$$p'_c(kx) = 1 - \exp\left(-\frac{n_0}{k} \int_0^x \sigma\left(\frac{U}{kd} kz\right) kdz\right) = p_c(x)$$

Somit ist Bedingung (A1) erfüllt, das Paschengesetz also gültig. Anders formuliert: Eine Entladung zwischen zwei unendlich ausgedehnten, parallelen und ebenen Elektroden ist (bis auf ihre zeitliche Entwicklung) eindeutig durch die Angabe von U und $p \cdot d$ festgelegt.

Allerdings hat man bei dieser Herleitung –neben der Vernachlässigung der Raumladungen– vorausgesetzt, daß die Stoßwahrscheinlichkeit eines Teilchens nur proportional zur Füllgasdichte ist und unabhängig von der Ionen- und Elektronendichte. Die Wahrscheinlichkeit von Rekombinationen ist aber proportional dem Produkt $n_1 n_e$ dieser Dichten. Rekombinationen müssen also vernachlässigbar sein, damit obige Überlegungen sinnvoll bleiben. Immer wenn Prozeßraten dem Produkt aus n_1 und n_e oder höheren Potenzen proportional sind, sind Ähnlichkeitsbeziehungen, wie z. B. das Paschengesetz, verletzt [25].

A2 Wirkungsquerschnitte / Sekundärelektronenkoeffizienten / Rückstreuoeffizient der Elektronen

Auf den folgenden Seiten sind die verwendeten Energiabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte, der Sekundärelektronenkoeffizienten und des Rückstreuoeffizienten graphisch dargestellt. Dazu folgende Erläuterungen:

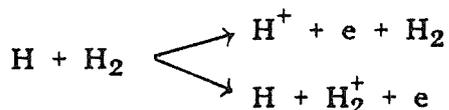
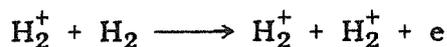
Daten für sämtliche Reaktionen wurden dem Oak Ridge National Laboratory Report "Atomic Data for Controlled Fusion Research" [26] entnommen. Da in diesem Report nicht alle Wirkungsquerschnitte und Koeffizienten über einen genügend großen Energiebereich tabelliert sind, wurden einige Daten durch andere Quellen bzw. Extrapolationen ergänzt. So wurde der Wirkungsquerschnitt für



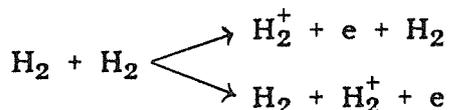
unter $4,0 \cdot 10^3 \text{ eV}$ und über $2,0 \cdot 10^5 \text{ eV}$ nach der Formel

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \left(\frac{E}{E_0} \right)^s$$

linear in doppelt logarithmischer Skalierung extrapoliert. $\sigma_0(E_0)$ ist dabei der erste (letzte) Tabellenwert. s kann aus den beiden ersten (letzten) bekannten σ - E -Paaren bestimmt werden. Ebenso wurden die Daten der Stoßreaktionen



für Energien über $1,76 \cdot 10^5 \text{ eV}$ bzw. über $3,3 \cdot 10^5 \text{ eV}$ erweitert. Unter $1,5 \cdot 10^5 \text{ eV}$ wurde der Wirkungsquerschnitt der letzten Reaktion mit dem Ionisierungsquerschnitt von Protonen gleichgesetzt. Ferner kann man näherungsweise davon ausgehen, daß beide Reaktionskanäle gleich wahrscheinlich sind [27]. Der Wirkungsquerschnitt für



wurde über $1,2 \cdot 10^5 \text{ eV}$ nach

$$\sigma = \frac{C}{\sqrt{E}}$$

extrapoliert. Auch hier sind, wie man aus Symmetrieüberlegungen folgern kann,

Stripping und Ionisierung gleich stark vertreten.

Sekundärelektronenkoeffizienten von schnellen Wasserstoffatomen und schnellen Wasserstoffmolekülen waren in der Literatur nicht zu finden. Sie wurden mit denen der Protonen bzw. H_2^+ -Ionen, welche ausreichend tabelliert sind, gleichgesetzt. Dies ist vernünftig, da die schnellen Neutrale beim Eindringen in das Elektrodenmetall sich ihrer Elektronen entledigen. Da durch Anlagerung von Wasserstoff an den Metalloberflächen die Elektronenemission zunimmt, wurden alle Koeffizienten mit 2,15 multipliziert [14]. Der Rückstreu- koeffizient der Elektronen wurde über $2,0 \cdot 10^4 eV$ mit dem letzten Tabellenwert gleichgesetzt.

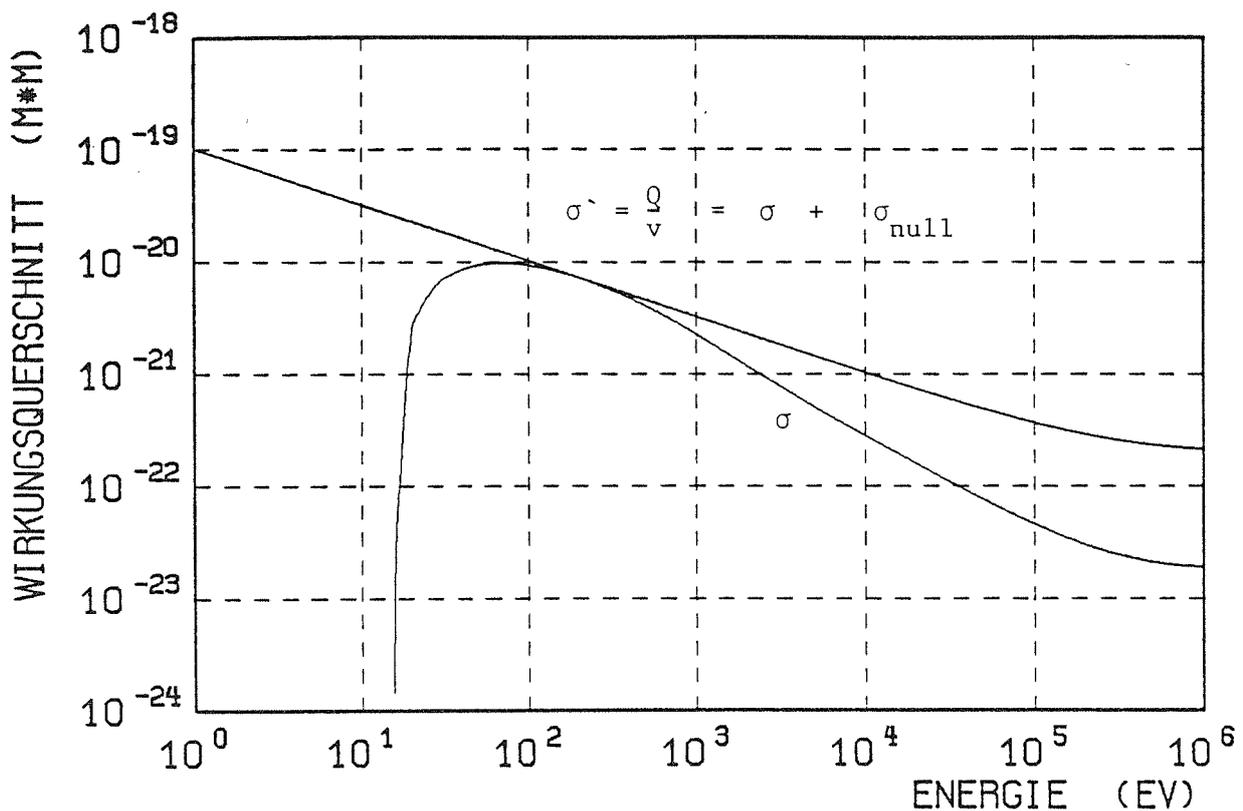


Abb.1 Ionisierungswirkungsquerschnitt σ für Elektronen [26] / Summe von σ und Null-Kollisions-Querschnitt $\sigma' = \sigma + \sigma_{null}$

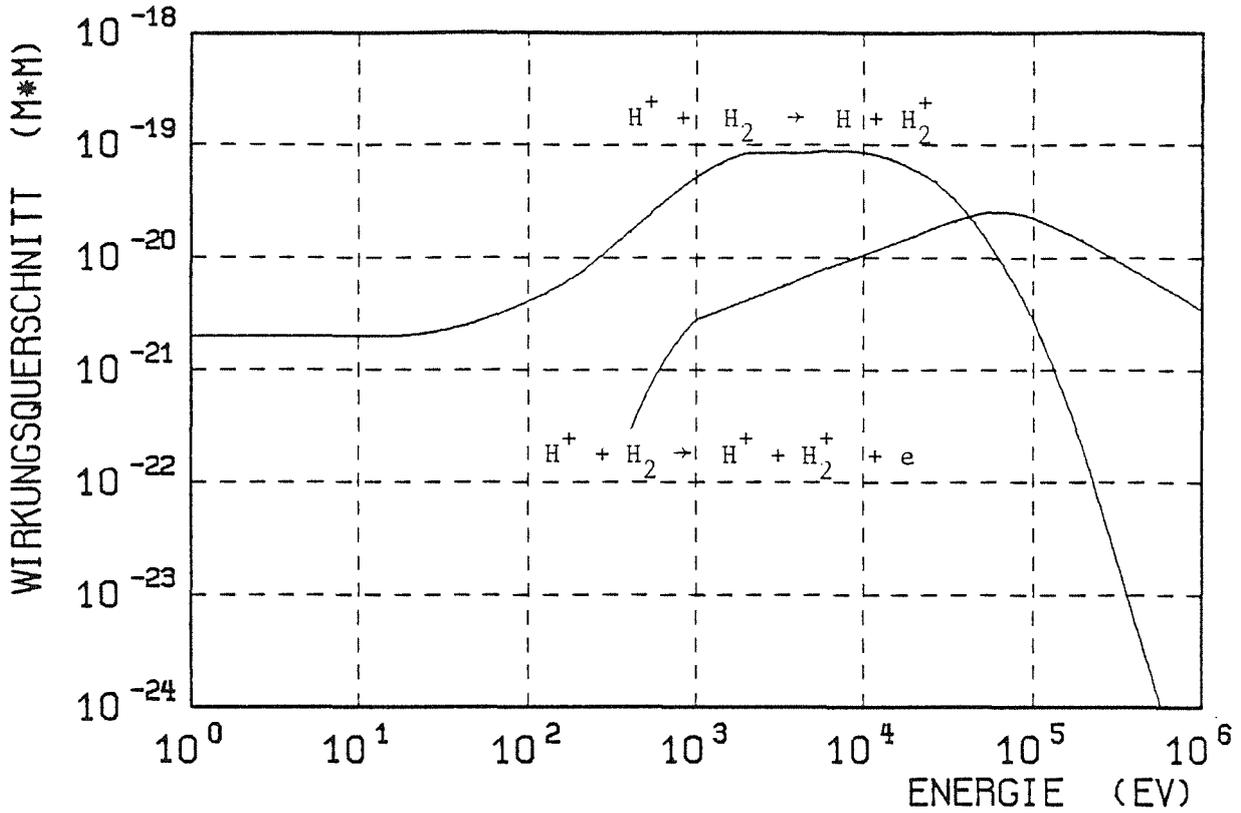


Abb.2 Protonenquerschnitte für Ionisierung und Umladung [26], [28]

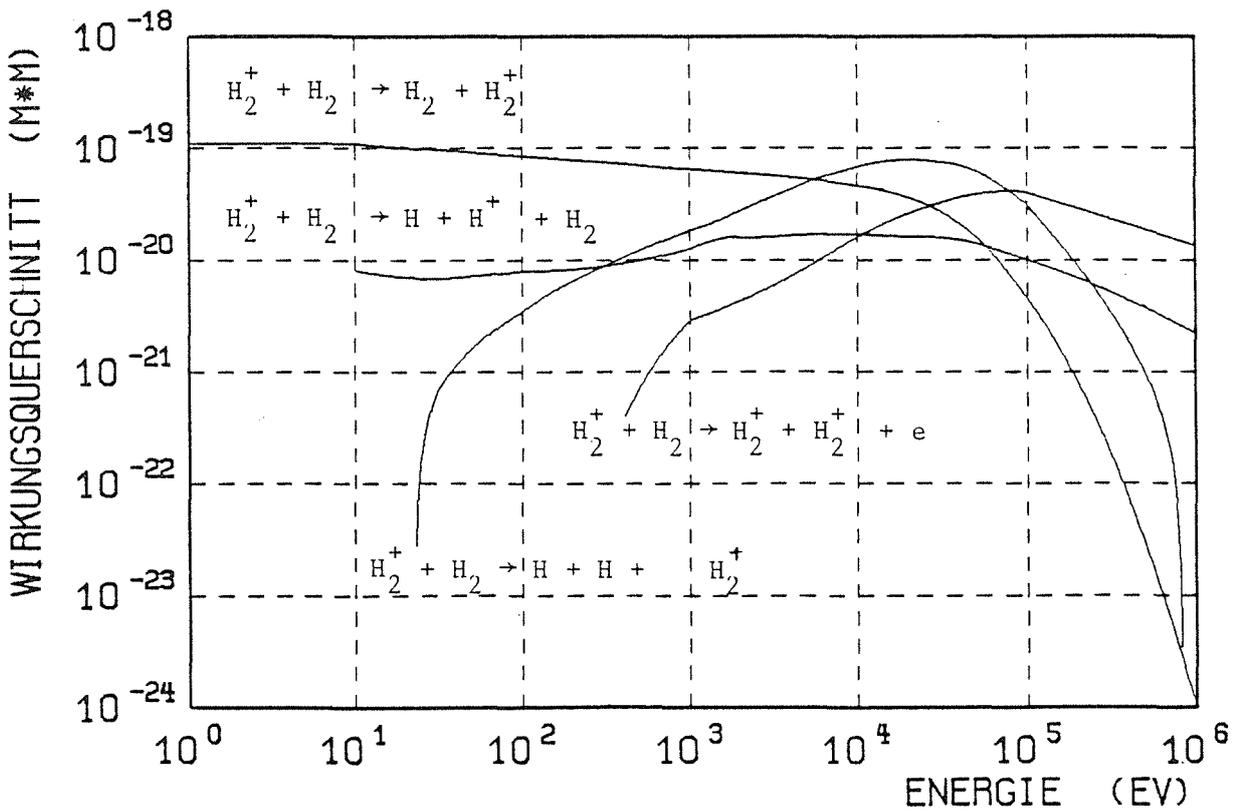


Abb.3 H_2^+ -Querschnitte für Ionisierung, Umladung, Dissoziation und Dissoziation mit Umladung [26], [28], [29], [30]

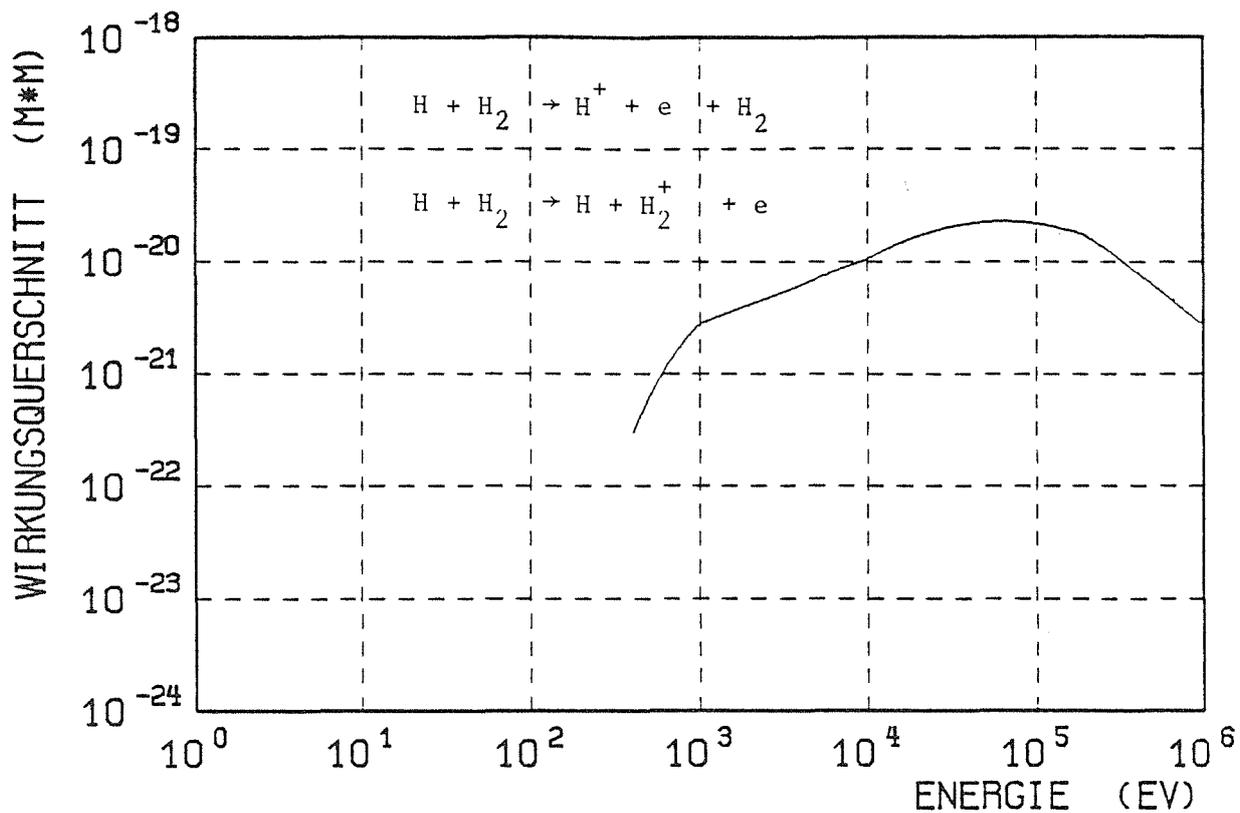


Abb.4 Ionisierungs- und Strippingquerschnitt für schnelle Wasserstoffatome [26], [28]

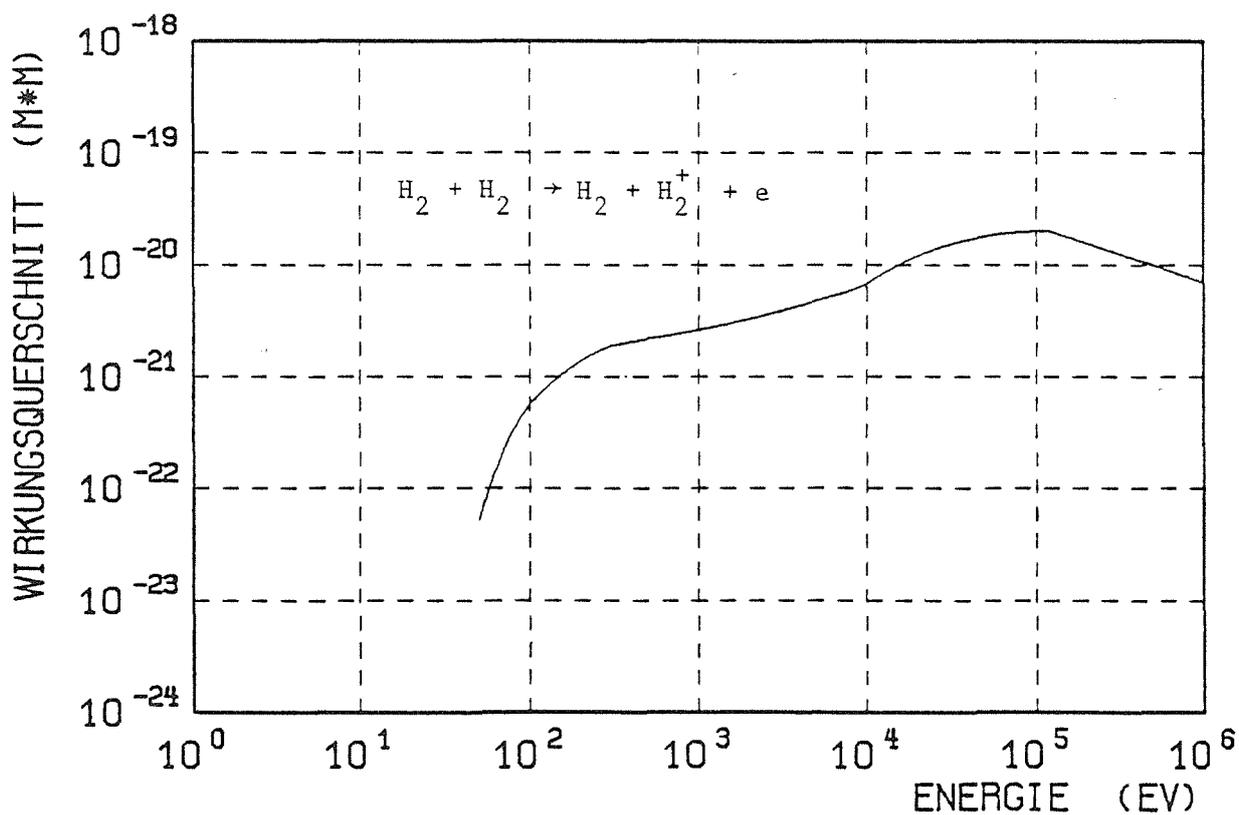


Abb.5 Ionisierungsquerschnitt für schnelle Wasserstoffmoleküle [26]

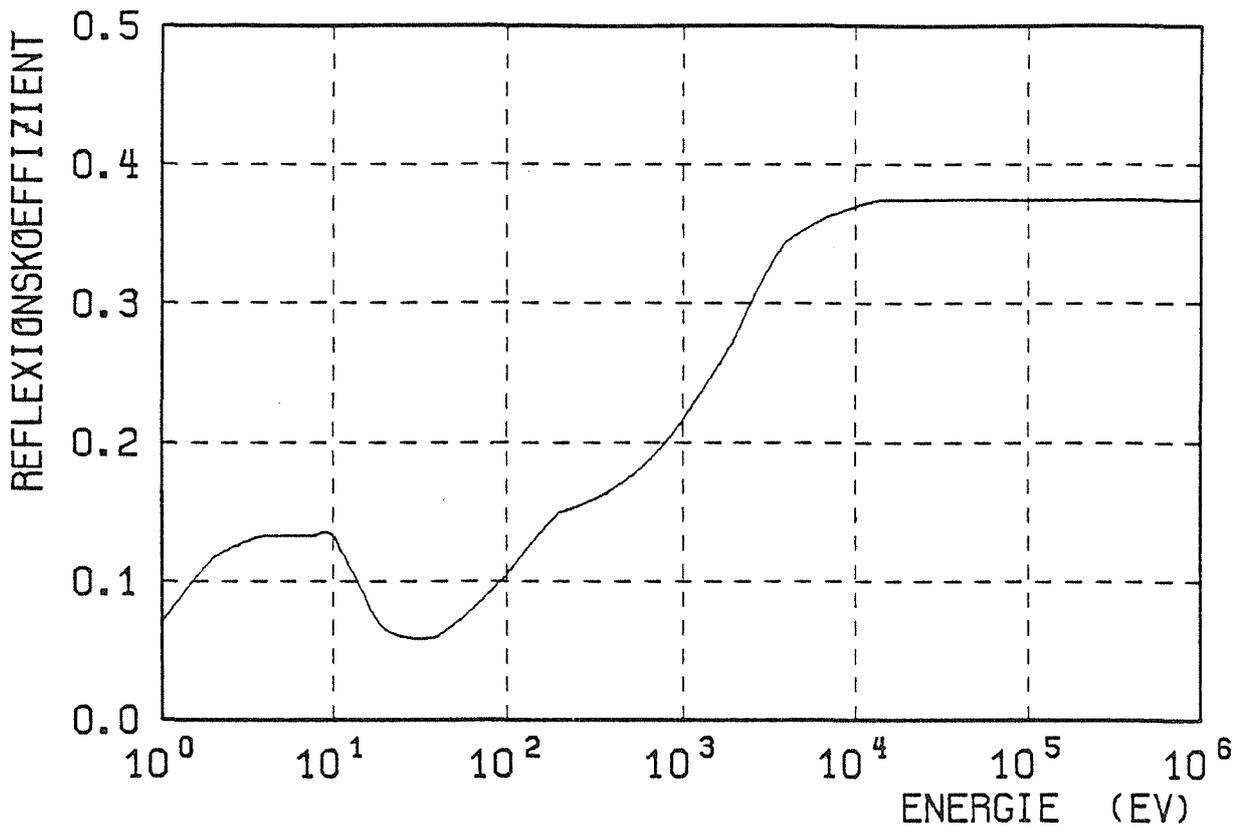


Abb.6 Elektronenrückstreukoeffizient für Molybdän [26]

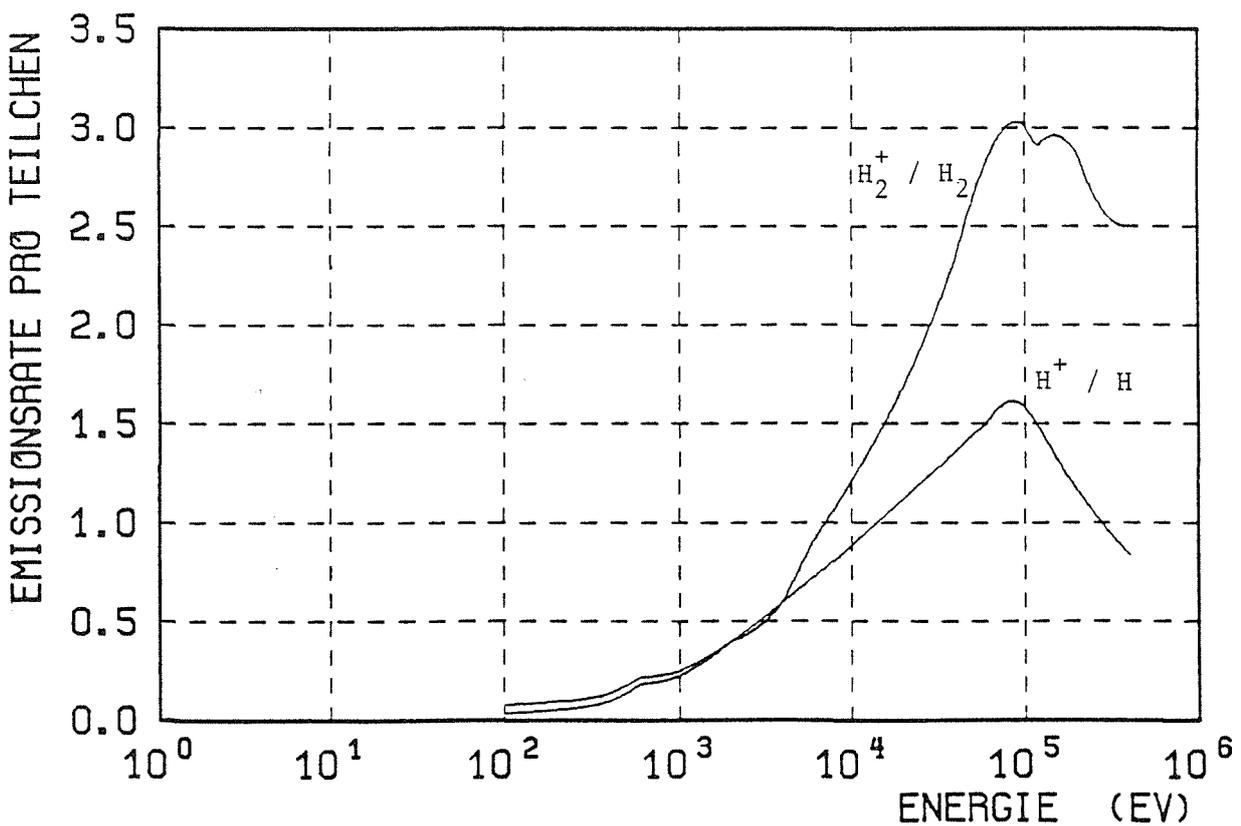


Abb.7 Sekundärelektronenemissionskoeffizienten für H⁺/Mo bzw. H/Mo und H₂⁺/Mo bzw. H₂/Mo [26], [31]

A3 Programmbeschreibung

Die Monte-Carlo-Rechnungen wurden mit dem Programm SPARK ausgeführt. SPARK ist ein FORTRAN-Code mit insgesamt 942 Zeilen und 16 Unterprogrammen. Die einzelnen Programmeinheiten haben folgende Bedeutung:

Hauptprogramm SPARK: In Zeile 12 bis 18 werden zunächst Eingabedaten eingelesen. In den 101*101-Feldern TC2 und TC3 sind die Verteilungen der Zeiten zwischen zwei Stößen für Protonen und H_2^+ -Teilchen gespeichert. EFIELD, GAPLEN und PRESSU sind Variablen für die Diodenparameter elektrisches Feld, Elektrodenabstand und Druck. MAXTIM ist die Größe des Zeitbereichs, für den die Entladung berechnet wird und DT die Größe der Zeitintervalle, nach denen über die Testmenge Zwischenbilanz gezogen wird. In der WHILE-Schleife 30 (Zeile 28 bis 45) wird das gesamte Testteilchenregime auf den neusten Zeitstand gebracht. In der WHILE-Schleife 10 (34 bis 37) wird das Testteilchenensemble auf den neusten Stand gebracht.

Die Unterprogramme PHYSCO, INITZ, RNSEED, RESEND und INIT dienen der (Anfangs)wertzuweisung diverser Variablen. In INIT wird die phasenräumliche Verteilung des Testensembles zum Zeitpunkt $t=0$ festgelegt; wobei eine räumlich gleichmäßige Belegung mit ruhenden e/H_2^+ -Paaren angenommen wird.

Unter Berücksichtigung von Stoßreaktionen und dem äußeren elektrischen Feld werden im Unterprogramm UPDATE die Daten eines Teilchens für den Zeitpunkt TIME berechnet. Dies geschieht indem die WHILE-Schleife 10 (17 bis 456) so oft durchlaufen wird (d. h. indem das Teilchen I so oft stößt), bis die Teilchenzeit $T(I)$ größer als TIME ist. Wird das Teilchen vorher jedoch vernichtet, so wird UPDATE mit RETURN verlassen. In der Schleife werden auch neue Teilchen erzeugt.

Die Funktion TC berechnet die Zeit zwischen zwei Stößen in Abhängigkeit der Teilchenart PAKIND, der Zufallszahl RND und des Teilchenimpulses P unmittelbar nach dem letzten Stoß. Für Elektronen findet die Null-Kollisions-Technik Anwendung, für Ionen wird TC durch lineare Interpolation der in TCOLL gespeicherten Werte ermittelt. Diese Werte werden nach Gl. (2.4.2d) mit Hilfe des Programms COLLTIME (siehe Seite 79) separat für 101*101 äquidistante RND-P-Punkte berechnet. Für die schnellen Neutralen wird die Gleichung

$$t_c = - \frac{\ln(RND)}{v n_0 \sigma(E)}$$

benutzt. v und E sind Teilchengeschwindigkeit bzw. Teilchenenergie.

Die Unterprogramme DELETE und GENERE sind für die "Vernichtung" und "Erzeugung" von Testteilchen zuständig. Dies geschieht indem die Zeiger der verketteten Liste, in welcher die Daten der Teilchen gespeichert sind, in geeigneter Weise umgebogen werden.

Das Unterprogramm RENORM reduziert den Umfang der Testmenge auf einen Wert von MINN durch zufälliges "vernichten" von Testteilchen. Alle fünf Teilchenarten werden um den selben Faktor verringert. Dadurch wird eine unterschiedliche Wichtung vermieden.

Die Programmeinheit OUTPUT und BOOKKE geben Daten (Teilchenstromstärke, Teilchendichte u. s. w.) auf Terminal bzw. Magnetplatte aus.

Die Funktion QN liefert das Produkt $n_0\sigma$ aus Gasdichte n_0 und Wirkungsquerschnitt σ in Abhängigkeit von Teilchenenergie und Reaktionsnummer. Von QN werden die Unterprogramme FITQNW und FITYX2 aufgerufen.

Die Funktion SIGMAT berechnet für Elektronen die Summe aus realem Wirkungsquerschnitt und Null-Kollisions-Querschnitt, ebenfalls in Abhängigkeit der Energie. SIGMAT wird von TC aufgerufen.

```
*****
*
*           MAIN PROGRAM           SPARK
*
*****

*   MAXN IS THE MAXIMUM NUMBER OF TESTPARTICLES.
*   THE TEST PARTICLE SET IS REDUCED TO MINN TEST PARTICLES
*   IF THE NUMBER OF TEST PARTICLES EXCEEDS A GIVEN VALUE.
001  PARAMETER( MAXN = 91040, MINN = 56900)
002  INTEGER PAKIND, DNANOD, DNKATH
003  REAL    MAXTIM

*   X      : PARTICLE POSITION
*   PPA    : PARALLEL MOMENTUM COORDINATE OF THE PARTICLE
*   PPE    : PERPENDICULAR MOMENTUM COORDINATE OF THE PARTICLE
*   E      : CLASSICAL KINETIC ENERGY OF A HEAVY PARTICLE,
*           RESP. TOTAL RELATIVISTIC ENERGY OF AN ELECTRON
*   T      : PARTICLE'S TIME
*   PAKIND : KIND OF PARTICLE
*           1 MEANS ELECTRON, 2 MEANS PROTON,
*           3 MEANS H2+, 4 MEANS FAST H,
*           5 MEANS H2
004  COMMON /PDATA/ X(MAXN), PPA(MAXN), PPE(MAXN), E(MAXN), T(MAXN),
&          PAKIND(MAXN)

*   PHYSICAL CONSTANTS
005  COMMON /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR

*   POINTERS OF THE CONCATENATED LIST IN WHICH THE PARTICLE
*   DATA ARE STORED
006  COMMON /POINTE/ ITAIL, IFIN, ISUCC( 0:MAXN )

*   DIODE PARAMETERS
007  COMMON /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU

008  COMMON /MISCEL/ NPARTI(5), DNANOD(5), DNKATH(5), FACTOR, EKIMA
009  COMMON /TIMES/  TIME, DT, MAXTIM

*   DISTRIBUTION OF THE TIME BETWEEN TWO COLLISIONS
*   TC2 : PROTONS, TC3 : H2+
010  COMMON /COLTIM/ TC2(0:100,0:100),TC3(0:100,0:100)

011  COMMON /PMAx/ PMAx2, PMAx3

012  READ(7) TC2
013  READ(8) TC3
014  READ(1,*) EFIELD
015  READ(1,*) GAPLEN
016  READ(1,*) PRESSU
017  READ(1,*) MAXTIM
018  READ(1,*) DT

*   FUNCTION QN IS CALLED TO CALCULATE THE BACK GROUND GAS
*   DENSITY
019  DUMMY = QN(2,0.)
```

```
020      EKIMA   = UNICHA * EFIELD * GAPLEN
021      PMAX2   = SQRT( 2. * PMASS * EKIMA )
022      PMAX3   = SQRT( 2. * H2MASS* EKIMA )

      *      INIT RELATES INITIAL DATA TO VARIABLES X, ... IFIN      *
023      CALL INIT( X, PPA, PPE, E, T, PAKIND, NPARTI, ISUCC, ITAIL,IFIN,
      &          MAXN,MINN )

      *      INITIAL RANDOM SEED      *
024      CALL RNSEED

      *      RESNEND CANCELS THE ENERGY DISTRIBUTION DATA IN THE      *
      *      ARRAY ENEDIS      *
025      CALL RESEND

026      FACTOR = 1.
027      TIME   = DT

028      DO 30, WHILE ( TIME .LT. MAXTIM )

029          DO 40, I = 1, 5
030              DNKATH(I) = 0
031              DNANOD(I) = 0
032      40      CONTINUE

033          K = 0

      *      THE WHILE LOOP UPDATES THE WHOLE TEST PARTICLE REGIME      *
      *      FROM TIME - DT TO TIME.      *
034      DO 10, WHILE ( K .NE. ITAIL )
035          I = ISUCC(K)

      *      UPDATE UPDATES THE DATA OF PARTICLE I FROM TIME - DT *
      *      TO TIME AND TAKES INTO ACCOUNT COLLISION REACTIONS. *
036      CALL UPDATE( K, I )

037      10      CONTINUE

038      CALL OUTPUT

      *      BOOKKE STORES ENRGY DISTRIBUTIONS OF THE PARTICLES,      *
      *      THE DENSITY DISTRIBUTION OF THE PARTICLES AND THE      *
      *      PARTICLE CURRENT ON AN EXTERNAL FILE.      *
039      CALL BOOKKE( X, E, PAKIND, ISUCC )

      *      NTOTNE: NUMBER OF OCCUPIED LIST ELEMENTS AFTER UPDATING      *
040      NTOTNE = NPARTI(1)+NPARTI(2)+NPARTI(3)+NPARTI(4)+NPARTI(5)

      *      CRITERION FOR TEST PARTICLE REDUCTION      *
041      IF ( NTOTNE .GT. MAXN * 0.75 ) THEN

      *      TEST PARTICLE REDUCTION      *
042      CALL RENORM( ISUCC, ITAIL, IFIN, FACTOR, NPARTI, MINN )

043      ENDIF
```

044 TIME = TIME + DT
045 30 CONTINUE
046 END

001 BLOCKDATA PHYSCO

002 COMMON /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR

003 DATA UNICHA / 1.602192 E-19 /
004 DATA EMASS / 9.10956 E-31 /
005 DATA PMASS / 1.67261 E-27 /
006 DATA H2MASS / 3.34613 E-27 /
007 DATA CSQR / 8.987554 E+16 /
008 DATA EOSQR / 6.703133 E-27 /

009 END

001 BLOCKDATA INITZ

* Z1 ... Z11 ARE THE NUMBERS OF REACTION MADE BY THE *
* ELECTRONS ... FAST H2-MOLECULES DURING THE WHOLE TIME *
002 COMMON /NOREAC/ Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8, Z9, Z10, Z11

* EMEAN(I) ARE THE MEAN ENERGIES OF THE PARTICLES *
* IMPINGING THE ELECTRODES. *
003 COMMON /EMEAN/ EMEAN(5), TNUM(5)

004 DATA Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8, Z9, Z10, Z11 / 11 * 0. /
005 DATA (EMEAN(I), I=1,5) / 5*0.0 /
006 DATA (TNUM(I), I=1,5) / 5*0.0 /

007 END

001 SUBROUTINE RNSEED

002 CALL TIME(IGEN)
003 CALL FA04DS(IGEN)

004 END

001 SUBROUTINE RESEND

002 COMMON /ENEDIS/ ENEDIS(5,20), ENNORM(5)

```
003      DO 10, I = 1, 5
004          DO 20, J = 1,20
005              ENEDIS(I,J) = 0.
006      20      CONTINUE
007          ENNORM(I) = 0.
008      10      CONTINUE

009          END
```

```
*****
001      SUBROUTINE      INIT( X, PPA, PPE, E, T, PAKIND, NPARTI, ISUCC,
&                  ITAIL, IFIN, MAXN, MINN )
*****
```

```
002      INTEGER  PAKIND
003      REAL      NEO

004      DIMENSION X(*), PPA(*), PPE(*), E(*), T(*), PAKIND(*),
&              ISUCC(0:*), NPARTI(5)
005      COMMON  /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR
006      COMMON  /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU
007      COMMON  /NEO/ NEO
```

```
008      EO = SQRT(EOSQR)
```

```
*      THE DO-LOOP GENERATES A INITIAL TEST PARTICLE SET.  THE      *
*      TEST PARTICLES ARE UNIFORMLY DISTRIBUTED OVER THE WHOLE      *
*      GAP AND HAVE NO INITIAL KINETIC ENERGY.                      *
```

```
009      DO 10, I = 1, MAXN
010          X(I)      = I*GAPLEN/(MINN+1)
011          E(I)      = EO*MOD(I+1,2)
012          PAKIND(I) = 1+MOD(I,2)*2
013          PPA(I)    = 0.
014          PPE(I)    = 0.
015          T(I)      = 0.
016          ISUCC(I-1) = I
017      10      CONTINUE
```

```
018      ITAIL = MINN
019      IFIN  = MAXN
020      NPARTI(1) = MINN/2
021      NEO      = NPARTI(1)
022      NPARTI(2) = 0
023      NPARTI(3) = NPARTI(1)
024      NPARTI(4) = 0
025      NPARTI(5) = 0
```

```
026      END
```

```
*****
001      SUBROUTINE  UPDATE( K, I )
*****
```

```
002      PARAMETER( MAXN = 91040 )
```

```

003     INTEGER  PAKIND,  DNANOD, DNKATH
004     LOGICAL  FLAG

005     COMMON  /PDATA/ X(MAXN), PPA(MAXN), PPE(MAXN), E(MAXN), T(MAXN),
&        PAKIND(MAXN)
006     COMMON  /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR
007     COMMON  /POINTE/ ITAIL, IFIN, ISUCC( 0:MAXN )
008     COMMON  /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU
009     COMMON  /PHYSIK/ DENSIT
010     COMMON  /MISCEL/ NPARTI(5), DNANOD(5), DNKATH(5), FACTOR, EKIMA
011     COMMON  /TIMES/  TIME
012     COMMON  /NOREAC/ Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8, Z9, Z10, Z11
013     COMMON  /EMEAN/ EMEAN(5), TNUM(5)
014     COMMON  /ENEDIS/ ENEDIS(5,20)
015     COMMON  /IEKATH/ IEKATH

016     FLAG = .TRUE.

017     DO 10, WHILE (FLAG)

*      COMPUTATION OF TIME BETWEEN TWO COLLISIONS      *
018     DT  = TC( PAKIND(I), PPA(I), FA04AS(1), I )

019     IF ( T(I) + DT .GE. TIME ) THEN
020         DT  = TIME - T(I)
021         T(I) = TIME
022         FLAG = .FALSE.
023     ELSE
024         T(I) = T(I) + DT
025     ENDIF

026     IF ( PAKIND(I) .EQ. 1 ) THEN

*      E L E C T R O N S :      *
027     PPA(I) = PPA(I) - UNICHA*EFIELD*DT
028     EOLD = E(I)
029     E(I) = SQRT( EOSQR + CSQR*( PPA(I)*PPA(I) + PPE(I)*PPE(I) ) )
030     X(I) = X(I) - (E(I)-EOLD)/UNICHA/EFIELD

031     IF ( X(I) .LT. 0. ) THEN
032         DX  = -X(I)
033         X(I) = 0.
034         E(I) = E(I) - UNICHA*EFIELD*DX
035         POLD = PPA(I)
036         PPA(I) = -SQRT( (E(I)*E(I)-CSQR*PPE(I)*PPE(I)-EOSQR)/CSQR )
037         T(I) = T(I) + (POLD-PPA(I))/UNICHA/EFIELD
038         EKIN = ( E(I) - SQRT(EOSQR) ) / UNICHA

*      BACKSCATTERING OF ELECTRONS AT THE ANODE:      *
039     ETA = QN(57,EKIN)/DENSIT
040     IF ( FA04AS(1) .LE. ETA ) THEN
041         IF ( ABS(PPA(I)) .GT. 0.577*ABS(PPE(I)) ) THEN
042             THETA = ASIN( FA04AS(1) )
043         ELSE
044             THETA = ABS( ATAN( PPE(I)/PPA(I) ) )
045         END IF
046     IF ( EKIN .GE. 1.E4 ) THEN

```

```
047      E(I) = 0.2*SQRT(EOSQR) + 0.8*E(I)
048      ENDIF
049      PPA(I) = SQRT( (E(I)*E(I)-EOSQR) / CSQR ) * COS(THETA)
050      PPE(I) = ABS( PPA(I) * TAN(THETA) )
051      IF ( T(I) .LT. TIME ) FLAG = .TRUE.

052      ELSE
053      EKIN = EKIN * UNICHA
*      D I V I D I N G      T H E      E L E C T R O N S      I N      *
*      2 0      S E P A R A T E      E N E R G Y      I N T E R -      *
*      V A L L S      A N D      C O U N T I N G      T H E M      *
054      INDEX = INT( EKIN / EKIMA * 19.9999 ) + 1
055      EMEAN(1) = EMEAN(1) + FACTOR*EKIN
056      TNUM(1) = TNUM(1) + FACTOR
057      IF ( INDEX .LE. 20 ) THEN
058          ENEDIS(1,INDEX) = ENEDIS(1,INDEX) + FACTOR
059      ELSE
060          WRITE(*,*) ' ELECTRON ENERGY : ', EKIN
061      END IF

*      DELETE(K,I) CANCELS THE PARTICLE I      *
062      CALL DELETE( K, I )

063      DNANOD(1) = DNANOD(1) + 1
064      NPARTI(1) = NPARTI(1) - 1
065      RETURN

066      ENDIF

*      R E A C T I O N S      W I T H I N      T H E      G A P :      *

067      ELSE IF (FLAG) THEN
068          EKIN = ( E(I) - SQRT(EOSQR) ) / UNICHA
069          F = QN(47,EKIN) / DENSIT / SIGMAT(EKIN)

070      IF ( FA04AS(1) .LE. F ) THEN
*      IONISATION      E + H2 --> 2 E + H2+ :
071          Z1 = Z1 + FACTOR

*      GENERE CREATES A NEW PARTICLE      *
072      CALL GENERE

073      NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
074      PAKIND(ITAIL) = 1
075      X(ITAIL) = X(I)
076      PPA(ITAIL) = 0.
077      PPE(ITAIL) = 0.
078      E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
079      T(ITAIL) = T(I)
080      E(I) = E(I) - 2.4E-18
081      COSTHE = PPA(I) / SQRT( PPA(I)*PPA(I) + PPE(I)*PPE(I) )
082      PPA(I) = SQRT( (E(I)*E(I)-EOSQR)/CSQR ) * COSTHE
083      PPE(I) = ABS( PPA(I) ) * SQRT( 1./COSTHE/COSTHE -1. )
084      CALL GENERE
085      NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
086      PAKIND(ITAIL) = 3
087      X(ITAIL) = X(I)
```

```
088          PPA(ITAIL) = 0.
089          E(ITAIL) = 0.
090          T(ITAIL) = T(I)
091          END IF

092          END IF

093          ELSE IF ( PAKIND(I) .EQ. 2 ) THEN

* H+ IONS: *
094          PPA(I) = PPA(I) + UNICHA*EFIELD*DT
095          EOLD = E(I)
096          E(I) = 0.5*PPA(I)*PPA(I)/PMASS
097          X(I) = X(I) + (E(I)-EOLD)/UNICHA/EFIELD
098          IF ( X(I) .LT. 0. ) THEN
099             STOP ' H+ BEHIND ANODE '
100          ELSE IF ( X(I) .GT. GAPLEN ) THEN
101             DNKATH(2) = DNKATH(2) + 1
102             DX = GAPLEN-X(I)
103             E(I) = E(I) + UNICHA*EFIELD*DX
104             POLD = PPA(I)
105             PPA(I) = SQRT( 2*PMASS*E(I) )
106             T(I) = T(I) - (POLD-PPA(I))/UNICHA/EFIELD

*          DIVIDING THE H+ IONS IN 20 SEPARATE *
*          ENERGY INTERVALLS AND COUNTING THEM *
107          INDEX = INT( E(I) / EKIMA * 19.9999 ) + 1
108          EMEAN(2) = EMEAN(2) + FACTOR*E(I)
109          TNUM(2) = TNUM(2) + FACTOR
110          IF ( INDEX .LE. 20 )
&             ENEDIS(2,INDEX) = ENEDIS(2,INDEX) + FACTOR

*          EMISSION OF SECONDARY *
*          ELECTRONS BY H+ - IMPACT *
*          AT THE CATHODE : *
111          DELTA = 2.159 * QN(58,E(I)/UNICHA) / DENSIT
112          INTDEL = INT(DELTA)

113          DO 40, J = 1, INTDEL
114             CALL GENERE
115             IEKATH = IEKATH + 1
116             NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
117             PAKIND(ITAIL) = 1
118             X(ITAIL) = GAPLEN
119             PPA(ITAIL) = 0.
120             PPE(ITAIL) = 0.
121             E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
122             T(ITAIL) = T(I)
123          40 CONTINUE

124          IF ( FA04AS(1) .LE. DELTA-INTDEL ) THEN
125             CALL GENERE
126             IEKATH = IEKATH + 1
127             NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
128             PAKIND(ITAIL) = 1
129             X(ITAIL) = GAPLEN
130             PPA(ITAIL) = 0.
```

```

131         PPE(ITAIL) = 0.
132         E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
133         T(ITAIL) = T(I)
134     END IF

135         CALL DELETE( K, I )
136         NPARTI(2) = NPARTI(2) - 1
137         RETURN

*           R E A C T I O N S           W I T H I N           T H E           G A P : *

138     ELSE IF (FLAG) THEN
139         SN2 = QN(2,E(I)/UNICHA)
140         SN25 = QN(25,E(I)/UNICHA)
141         SNTOT = SN2 + SN25
142         RND = FA04AS(1)

143     IF ( RND*SNTOT .LE. SN2 ) THEN
*           CHARGE EXCHANGE           H+ + H2 --> H + H2+ :           *
*           100 * UNICHA IS THE LOWEST TABULATED H-ENERGY           *
*           ( IN EV ) FOR PRODUCING SECONDARY ELECTRONS AT A           *
*           A MO-SURFACE.                                           *
144         Z2 = Z2 + FACTOR
145         IF ( E(I) .GE. 100.*UNICHA ) THEN
146             CALL GENERE
147             NPARTI(4) = NPARTI(4) + 1
148             PAKIND(ITAIL) = 4
149             X(ITAIL) = X(I)
150             PPA(ITAIL) = PPA(I)
151             E(ITAIL) = E(I)
152             T(ITAIL) = T(I)
153         END IF
154         CALL GENERE
155         NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
156         PAKIND(ITAIL) = 3
157         X(ITAIL) = X(I)
158         PPA(ITAIL) = 0.
159         E(ITAIL) = 0.
160         T(ITAIL) = T(I)
161         CALL DELETE(K,I)
162         NPARTI(2) = NPARTI(2) - 1
163         RETURN

164     ELSE
*           IONIZATION           H+ + H2 --> H+ + H2+ E           *
165         Z3 = Z3 + FACTOR
166         CALL GENERE
167         NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
168         PAKIND(ITAIL) = 1
169         X(ITAIL) = X(I)
170         PPA(ITAIL) = 0.
171         PPE(ITAIL) = 0.
172         E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
173         T(ITAIL) = T(I)
174         CALL GENERE
175         NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
176         PAKIND(ITAIL) = 3

```

```

177             X(ITAIL) = X(I)
178             PPA(ITAIL) = 0.
179             E(ITAIL) = 0.
180             T(ITAIL) = T(I)
181         END IF

182     END IF

183     ELSE IF ( PAKIND(I) .EQ. 3 ) THEN

*   H2+ IONS:   *
184         PPA(I) = PPA(I) + UNICHA*EFIELD*DT
185         EOLD = E(I)
186         E(I) = 0.5*PPA(I)*PPA(I)/H2MASS
187         X(I) = X(I) + (E(I)-EOLD)/UNICHA/EFIELD

188     IF ( X(I) .LT. 0. ) THEN
189         STOP ' H2+ BEHIND ANODE '

190     ELSE IF ( X(I) .GT. GAPLEN ) THEN
191         DNKATH(3) = DNKATH(3) + 1
192         DX = GAPLEN-X(I)
193         E(I) = E(I) + UNICHA*EFIELD*DX
194         POLD = PPA(I)
195         PPA(I) = SQRT(2*H2MASS*E(I))
196         T(I) = T(I) - (POLD-PPA(I))/UNICHA/EFIELD

*           DIVIDING THE H2+ IONS IN 20 SEPARATE *
*           ENERGY INTERVALLS AND COUNTING THEM *
197         INDEX = INT( E(I) / EKIMA * 7.5 * 19.9999 ) + 1
198         EMEAN(3) = EMEAN(3) + FACTOR*E(I)
199         TNUM(3) = TNUM(3) + FACTOR
200         IF ( INDEX .LE. 20 )
&           ENEDIS(3,INDEX) = ENEDIS(3,INDEX) + FACTOR

*           EMISSION OF SECONDARY *
*           ELECTRONS BY H2+ - IMPACT AT *
*           THE KATHODE : *
201         DELTA = 2.159 * QN(59,E(I)/UNICHA) / DENSIT
202         INTDEL = INT(DELTA)
203         DO 50, J = 1, INTDEL
204             CALL GENERE
205             IEKATH = IEKATH + 1
206             NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
207             PAKIND(ITAIL) = 1
208             X(ITAIL) = GAPLEN
209             PPA(ITAIL) = 0.
210             PPE(ITAIL) = 0.
211             E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
212             T(ITAIL) = T(I)
213     50 CONTINUE
214     IF ( FA04AS(1) .LE. DELTA-INTDEL ) THEN
215         CALL GENERE
216         IEKATH = IEKATH + 1
217         NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
218         PAKIND(ITAIL) = 1
219         X(ITAIL) = GAPLEN

```

```
220          PPA(ITAIL) = 0.
221          PPE(ITAIL) = 0.
222          E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
223          T(ITAIL) = T(I)
224          END IF
225          CALL DELETE( K, I )
226          NPARTI(3) = NPARTI(3) - 1
227          RETURN

228          ELSE IF (FLAG) THEN
*           R E A C T I O N S       W I T H I N       T H E       G A P       :       *
229          SN4 = QN(4,E(I)/UNICHA)
230          SN20 = QN(20,E(I)/UNICHA)
*           T H E       O R N L - C R O S S       S E C T I O N       A . 3 . 8       I S       1 / 2 * S N 2 0 + S N 2 1       *
231          SN21 = QN(21,E(I)/UNICHA) - 0.5*SN20
232          IF ( SN21 .LT. 0. )      SN21 = 0.
233          SN28 = QN(28,E(I)/UNICHA)
234          SNTOT = SN4 + SN20 + SN21 + SN28
235          RND = FA04AS(1)

236          IF ( RND*SNTOT .LE. SN4 ) THEN
*           C H A R G E       E X C H A N G E       H 2 + + H 2 --> H 2 + H 2 + : *
*           50. * U N I C H A       I S       T H E       L O W E S T       T A B U L A T E D       H 2 - E N E R G Y       *
*           ( I N       E V )       F O R       I O N I Z A T I O N       O F       O T H E R       H 2 - M O L E C U L E S . *
237          Z4 = Z4 + FACTOR
238          IF ( E(I) .GE. 50.*UNICHA ) THEN
239          CALL GENERE
240          NPARTI(5) = NPARTI(5) + 1
241          PAKIND(ITAIL) = 5
242          X(ITAIL) = X(I)
243          PPA(ITAIL) = PPA(I)
244          E(ITAIL) = E(I)
245          T(ITAIL) = T(I)
246          END IF
247          PPA(I) = 0
248          E(I) = 0
249          ELSE IF ( RND*SNTOT .LE. SN4+SN20 ) THEN
*           P R O D U C T I O N       O F       F A S T       N E U T R A L S       A N D       F A S T       P R O T O N S       *
*           H 2 + + H 2 --> H + H + + H 2 : *
*           100 * U N I C H A       I S       T H E       L O W E S T       T A B U L A T E D       H - E N E R G Y       *
*           ( I N       E V )       F O R       P R O D U C I N G       S E C O N D A R Y       E L E C T R O N S       A T       A       *
*           A       M O - S U R F A C E . *
250          Z5 = Z5 + FACTOR
251          IF ( E(I) .GE. 200.*UNICHA ) THEN
252          CALL GENERE
253          NPARTI(4) = NPARTI(4) + 1
254          PAKIND(ITAIL) = 4
255          X(ITAIL) = X(I)
256          PPA(ITAIL) = 0.5*PPA(I)
257          E(ITAIL) = 0.5*E(I)
258          T(ITAIL) = T(I)
259          END IF
260          CALL GENERE
261          NPARTI(2) = NPARTI(2) + 1
262          PAKIND(ITAIL) = 2
263          X(ITAIL) = X(I)
264          PPA(ITAIL) = 0.5*PPA(I)
```

```
265          E(ITAIL) = 0.5*E(I)
266          T(ITAIL) = T(I)
267          CALL DELETE(K,I)
268          NPARTI(3) = NPARTI(3) - 1
269          RETURN
270          ELSE IF ( RND*SNTOT .LE. SN4+SN20+SN21 ) THEN
*          PRODUCTION OF FAST NEUTRALS  H2+ + H2 --> 2H + H2+ : *
*          100 * UNICHA IS THE LOWEST TABULATED H-ENERGY *
*          ( IN EV ) FOR PRODUCING SECONDARY ELECTRONS AT A *
*          A MO-SURFACE. *
271          Z6 = Z6. + FACTOR
272          IF ( E(I) .GE. 200.*UNICHA ) THEN
273              CALL GENERE
274              NPARTI(4) = NPARTI(4) + 1
275              PAKIND(ITAIL) = 4
276              X(ITAIL) = X(I)
277              PPA(ITAIL) = 0.5*PPA(I)
278              E(ITAIL) = 0.5*E(I)
279              T(ITAIL) = T(I)
280              CALL GENERE
281              NPARTI(4) = NPARTI(4) + 1
282              PAKIND(ITAIL) = 4
283              X(ITAIL) = X(I)
284              PPA(ITAIL) = 0.5*PPA(I)
285              E(ITAIL) = 0.5*E(I)
286              T(ITAIL) = T(I)
287          END IF
288          PPA(I) = 0
289          E(I) = 0
290          ELSE
*          IONIZATION  H2+ + H2 --> H2+ + H2+ E *
291          Z7 = Z7 + FACTOR
292          CALL GENERE
293          NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
294          PAKIND(ITAIL) = 1
295          X(ITAIL) = X(I)
296          PPA(ITAIL) = 0.
297          PPE(ITAIL) = 0.
298          E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
299          T(ITAIL) = T(I)
300          CALL GENERE
301          NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
302          PAKIND(ITAIL) = 3
303          X(ITAIL) = X(I)
304          PPA(ITAIL) = 0.
305          E(ITAIL) = 0.
306          T(ITAIL) = T(I)
307          END IF

308          END IF

309          ELSE IF ( PAKIND(I) .EQ. 4 ) THEN

*          H ATOMS : *
310          X(I) = X(I) + PPA(I)/PMASS*DT
311          IF ( X(I) .LT. 0. ) THEN
312          STOP ' H BEHIND AN'
```

```
313      ELSE IF ( X(I) .GT. GAPLEN ) THEN
314          DNKATH(4) = DNKATH(4) + 1
315          DX = GAPLEN - X(I)
316          T(I) = T(I) + DX/PPA(I)*PMASS

*          DIVIDING THE H ATOMS IN 20 SEPARATE          *
*          ENERGY INTERVALLS AND COUNTING THEM          *
317          INDEX = INT( E(I) / EKIMA * 6. * 19.9999 ) + 1
318          EMEAN(4) = EMEAN(4) + FACTOR*E(I)
319          TNUM(4) = TNUM(4) + FACTOR
320          IF ( INDEX .LE. 20 )
&              ENEDIS(4,INDEX) = ENEDIS(4,INDEX) + FACTOR

*          EMISSION OF SECONDARY ELECTRONS BY H-IMPACT AT THE KATHODE:          *
321          DELTA = 2.159 * QN(58,E(I)/UNICHA) / DENSIT
322          INTDEL = INT(DELTA)
323          DO 60, J = 1, INTDEL
324              CALL GENERE
325              IEKATH = IEKATH + 1
326              NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
327              PAKIND(ITAIL) = 1
328              X(ITAIL) = GAPLEN
329              PPA(ITAIL) = 0.
330              PPE(ITAIL) = 0.
331              E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
332              T(ITAIL) = T(I)
333 60          CONTINUE
334          IF ( FA04AS(1) .LE. DELTA-INTDEL ) THEN
335              CALL GENERE
336              IEKATH = IEKATH + 1
337              NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
338              PAKIND(ITAIL) = 1
339              X(ITAIL) = GAPLEN
340              PPA(ITAIL) = 0.
341              PPE(ITAIL) = 0.
342              E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
343              T(ITAIL) = T(I)
344          END IF

345          CALL DELETE( K, I )
346          NPARTI(4) = NPARTI(4) - 1
347          RETURN

348      ELSE IF ( FLAG ) THEN
*          IONIZATION      H + H2 --> H+ + E + H2      ( H + H2+ + E )          *
*          DECISION OF THE THE REACTION CHANNEL          *
349          IF ( FA04AS(1) .LE. 0.5 ) THEN
350              Z8 = Z8 + FACTOR
351              CALL GENERE
352              NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
353              PAKIND(ITAIL) = 1
354              X(ITAIL) = X(I)
355              V = PPA(I)/PMASS
356              PPA(ITAIL) = EMASS * V / SQRT( 1. - V*V/CSQR )
357              PPE(ITAIL) = 0.
358              E(ITAIL) = SQRT( EOSQR + PPA(ITAIL)*PPA(ITAIL)*CSQR )
```

```

359          T(ITAIL) = T(I)
360          NPARTI(2) = NPARTI(2) + 1
361          PAKIND(I) = 2
362          NPARTI(4) = NPARTI(4) - 1
363      ELSE
364          Z9 = Z9 + FACTOR
365          CALL  GENERE
366          NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
367          PAKIND(ITAIL) = 1
368          X(ITAIL) = X(I)
369          PPA(ITAIL) = 0.
370          PPE(ITAIL) = 0.
371          E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
372          T(ITAIL) = T(I)
373          CALL  GENERE
374          NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
375          PAKIND(ITAIL) = 3
376          X(ITAIL) = X(I)
377          PPA(ITAIL) = 0.
378          E(ITAIL) = 0.
379          T(ITAIL) = T(I)
380      END  IF
381  END IF

382      ELSE IF ( PAKIND(I) .EQ. 5 ) THEN

*   H2 MOLECULES :   *
383          X(I) = X(I) + PPA(I)/H2MASS*DT
384          IF ( X(I) .LT. 0. ) THEN
385              STOP ' H2 BEHIND ANODE '

386          ELSE IF ( X(I) .GT. GAPLEN ) THEN
387              DNKATH(5) = DNKATH(5) + 1
388              DX = GAPLEN - X(I)
389              T(I) = T(I) + DX/PPA(I)*H2MASS

*   DIVIDING THE H2 ATOMS IN 20 SEPARATE   *
*   ENERGY INTERVALLS AND COUNTING THEM   *
390          INDEX = INT( E(I) / EKIMA * 7.5 * 19.9999 ) + 1
391          EMEAN(5) = EMEAN(5) + FACTOR*E(I)
392          TNUM(5) = TNUM(5) + FACTOR
393          IF ( INDEX .LE. 20 )
&          ENEDIS(5,INDEX) = ENEDIS(5,INDEX) + FACTOR

*   EMISSION OF SECONDARY ELECTRONS BY H2-IMPACT AT THE KATHODE:   *
394          DELTA = 2.159 * QN(59,E(I)/UNICHA) / DENSIT
395          INTDEL = INT(DELTA)
396          DO 70, J = 1, INTDEL
397              CALL  GENERE
398              IEKATH = IEKATH + 1
399              NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
400              PAKIND(ITAIL) = 1
401              X(ITAIL) = GAPLEN
402              PPA(ITAIL) = 0.
403              PPE(ITAIL) = 0.
404              E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
405              T(ITAIL) = T(I)

```

```
406 70      CONTINUE
407          IF ( FA04AS(1) .LE. DELTA-INTDEL ) THEN
408            CALL GENERE
409            IEKATH = IEKATH + 1
410            NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
411            PAKIND(ITAIL) = 1
412            X(ITAIL) = GAPLEN
413            PPA(ITAIL) = 0.
414            PPE(ITAIL) = 0.
415            E(ITAIL) = SQRT(EOSQR)
416            T(ITAIL) = T(I)
417          END IF

418          CALL DELETE( K, I )
419          NPARTI(5) = NPARTI(5) - 1
420          RETURN

421          ELSE IF ( FLAG ) THEN
*          IONIZATION      H2 + H2 --> H2+ + E + H2      *
*          DECISION WHICH PARTICLE WILL BE IONIZED      *
422          IF ( FA04AS(1) .LE. 0.5 ) THEN
423            Z10 = Z10 + FACTOR
424            CALL GENERE
425            NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
426            PAKIND(ITAIL) = 1
427            X(ITAIL) = X(I)
428            V = PPA(I)/H2MASS
429            PPA(ITAIL) = EMASS * V / SQRT( 1. - V*V/CSQR )
430            PPE(ITAIL) = 0.
431            E(ITAIL) = SQRT( EOSQR + PPA(ITAIL)*PPA(ITAIL)*CSQR )
432            T(ITAIL) = T(I)
433            NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
434            PAKIND(I) = 3
435            NPARTI(5) = NPARTI(5) - 1
436          ELSE
437            Z11 = Z11 + FACTOR
438            CALL GENERE
439            NPARTI(1) = NPARTI(1) + 1
440            PAKIND(ITAIL) = 1
441            X(ITAIL) = X(I)
442            PPA(ITAIL) = 0.
443            PPE(ITAIL) = 0.
444            E(ITAIL) = SQRT( EOSQR )
445            T(ITAIL) = T(I)
446            CALL GENERE
447            NPARTI(3) = NPARTI(3) + 1
448            PAKIND(ITAIL) = 3
449            X(ITAIL) = X(I)
450            PPA(ITAIL) = 0.
451            E(ITAIL) = 0.
452            T(ITAIL) = T(I)
453          END IF
454        END IF

455      END IF

456 10      CONTINUE
```

457 K = I

458 END

```
*****  
001 FUNCTION TC( PAKIND, P, RND, I )  
*****
```

* THIS FUNCTION COMPUTES THE PATH LENGTH BETWEEN TWO COLLISIONS. *

```
002 PARAMETER( MAXN = 91040, A = 6.0457E-14 )  
003 INTEGER PAKIND  
004 REAL MAXPRO  
005 DIMENSION MAXPRO(2:3)  
006 COMMON /COLTIM/ TCOLL( 0:100, 0:100, 2:3 )  
007 COMMON /PMAX/ PMAX(2:3)  
008 COMMON /PDATA/ X(MAXN), PPA(MAXN), PPE(MAXN), E(MAXN), T(MAXN)  
009 COMMON /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU  
010 COMMON /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR  
011 COMMON /PHYSIK/ DENSIT  
012 COMMON /TIMES/ TIME, DT
```

```
013 DATA MAXPRO(2), MAXPRO(3) /1., 1./
```

* FAST H-ATOMS *

```
014 IF ( PAKIND .EQ. 4 ) THEN  
015 EEV = E(I) / UNICHA  
016 IF ( EEV .GE. 4.E2 ) THEN  
017 TC = -LOG(RND) * PMASS / QN(30,EEV) / ABS(PPA(I))  
018 ELSE  
019 TC = 1.1 * DT  
020 END IF  
021 RETURN
```

* FAST H2-MOLECULES *

```
022 ELSE IF ( PAKIND .EQ. 5 ) THEN  
023 EEV = E(I) / UNICHA  
024 IF ( EEV .GE. 5.E1 ) THEN  
025 TC = -LOG(RND) * H2MASS / QN(31,EEV) / ABS(PPA(I))  
026 ELSE  
027 TC = 1.1 * DT  
028 END IF  
029 RETURN
```

* ELECTRONS *

```
030 ELSE IF ( PAKIND .EQ. 1 ) THEN  
031 TC = -LOG( RND ) / DENSIT / A  
032 RETURN
```

```
033 END IF
```

```
034 RND = 1. - RND ** ( 5./PRESSU )
```

* PROTONS AND H2+ *

```
035 IF ( RND .LT. MAXPRO(PAKIND) ) THEN
```

```
036      PNORM = P * 100. / PMAX(PAKIND)
037      RNDNOR = 100. * RND / MAXPRO(PAKIND)
038      J = INT(PNORM)
039      K = INT(RNDNOR)
040      SJ = TCOLL(J+1,K,PAKIND)-TCOLL(J,K,PAKIND)
041      SK = TCOLL(J,K+1,PAKIND)-TCOLL(J,K,PAKIND)
042      TC = TCOLL(J,K,PAKIND) + SJ*(PNORM-J) + SK*(RNDNOR-K)
043      ELSE
044      TC = 1.1*DT
045      ENDIF

046      DEBUG SUBCHK
047      END
```

```
*****
001      SUBROUTINE DELETE( K, I )
*****
```

```
002      PARAMETER( MAXN = 91040 )
003      COMMON /POINTE/ ITAIL, IFIN, ISUCC( 0:MAXN )
004      COMMON /MISCEL/ NPARTI(5)

005      ISUCC( K ) = ISUCC( I )
006      ISUCC( IFIN ) = I
007      IFIN = I
008      IF ( I .EQ. ITAIL ) THEN
009      ITAIL = K
010      IF ( ITAIL .EQ. 0 ) THEN
011      WRITE(*,*) NPARTI(1) + NPARTI(2) + NPARTI(3) + NPARTI(4)
&      + NPARTI(5)
012      STOP ' POPULATION HAS DIED! '
013      END IF
014      END IF

015      DEBUG SUBCHK
016      END
```

```
*****
001      SUBROUTINE GENERE
*****
```

```
002      PARAMETER( MAXN = 91040 )
003      COMMON /POINTE/ ITAIL, IFIN, ISUCC( 0:MAXN )
004      COMMON /MISCEL/ NPARTI(5)

005      ITAIL = ISUCC( ITAIL )
006      IF ( ITAIL .EQ. IFIN ) THEN
007      WRITE(*,*) ' NUMTOT = ', NPARTI(1)+NPARTI(2)+NPARTI(3)
&      +NPARTI(4)+NPARTI(5)
008      STOP 'ARRAY IS TO SMALL'
009      END IF

010      DEBUG SUBCHK
011      END
```

```
*****
001          SUBROUTINE RENORM( ISUCC, ITAIL, IFIN, FACTOR,
      &          NPARTI, MINN )
*****
*   THE SUBROUTINE RENORM REDUCES THE SET OF TEST PARTICLES *
*   TO A NUMBER OF MINN TEST PARTICLES. *
002          PARAMETER( MAXN = 91040 )
003          INTEGER    PAKIND
004          DIMENSION  ISUCC(0:*), NPARTI(5), NPARTN(5)
005          COMMON  /PDATA/ X(MAXN), PPA(MAXN), PPE(MAXN), E(MAXN), T(MAXN),
      &          PAKIND(MAXN)
006          NTOTOL = NPARTI(1)+NPARTI(2)+NPARTI(3)+NPARTI(4)+NPARTI(5)
007          PRODEL = 1. - DBLE( MINN ) / NTOTOL
008          WRITE(*,*) ' RENORMIERUNG: '
009          WRITE(*,*) ' PRODEL = ', PRODEL
010          WRITE(*,*) ' NPARTI BEFORE = ', NPARTI
011          DO 30, J = 1, 5
012             NPARTN(J) = NINT( NPARTI(J) * ( 1. - PRODEL ) )
013 30        CONTINUE
014          NTOTNE = NPARTN(1)+NPARTN(2)+NPARTN(3)+NPARTN(4)+NPARTN(5)
015          FACTOR = FACTOR * DBLE( NTOTOL ) / NTOTNE
016          N = NTOTOL
017          DO 20, WHILE( N .GT. NTOTNE )
018             K = 0
019             I = ISUCC(0)
020             DO 10, WHILE ( I .NE. ITAIL .AND. N .GT. NTOTNE )
021                J = PAKIND(I)
022                IF ( FA04AS(1) .LT. PRODEL
      &                .AND. NPARTN(J) .LT. NPARTI(J) ) THEN
023                   NPARTI(J) = NPARTI(J)-1
024                   N          = N - 1
025                   ISUCC( K )  = ISUCC( I )
026                   ISUCC( IFIN ) = I
027                   IFIN       = I
028                ELSE
029                   K = I
030                END IF
031                I = ISUCC( K )
032 10        CONTINUE
033                J = PAKIND(I)
034                IF ( FA04AS(1) .LT. PRODEL .AND.
      &                NPARTN(J) .LT. NPARTI(J) ) THEN
035                   NPARTI(J) = NPARTI(J)-1
036                   N          = N - 1
037                   ITAIL = K
038                END IF
```

```
039 20 CONTINUE
040 WRITE(*,*) ' NPARTI = ', NPARTI
041 WRITE(*,*) ' FACTOR = ', FACTOR
042 END
```

```
*****
001 SUBROUTINE OUTPUT
*****
```

```
* THIS SUBROUTINE PRINTS A TABLE WITH THE NUMBERS OF THE *
* PARTICLES. *
```

```
002 LOGICAL FLAG
003 INTEGER RNPART
004 REAL MAXTIM

005 DIMENSION RNPART(5)
006 COMMON /CONST/ UNICHA
007 COMMON /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU
008 COMMON /MISCEL/ NPARTI(5), DNANOD(5), DNKATH(5), FACTOR, EKIMA
009 COMMON /TIMES/ TIME, DT, MAXTIM
010 COMMON /NOREAC/ Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8, Z9, Z10, Z11
011 COMMON /EMEAN/ EMEAN(5), TNUM(5)
012 SAVE FLAG
```

```
013 DATA FLAG / .TRUE. /
```

```
014 DO 70, I = 1, 5
015 RNPART(I) = NINT( FACTOR * NPARTI(I) )
016 70 CONTINUE
```

```
* IN THE FOLLOWING IF-BLOCK THE HEAD OF THE TABLE IS PRINTED. *
```

```
017 IF ( FLAG ) THEN
018 WRITE(*,10)
019 10 FORMAT(1H , ' | TIME |', 5(' NUMBER OF |' ) )
020 WRITE(*,20)
021 20 FORMAT(1H , ' | IN |', ' ELECTRONS |', ' H+ IONS |',
& ' H2+ IONS |', ' H ATOMS |', ' H2 MOLECU. |' )
022 WRITE(*,30)
023 30 FORMAT(1H , ' | NANOSEC. |', 5(' WITHIN |' ) )
024 WRITE(*,40)
025 40 FORMAT(1H , ' | |', 5(' THE GAP |' ) )
026 WRITE(*,50)
027 50 FORMAT(1H , ' |-----|', 5('-----|' ))
028 FLAG = .FALSE.
029 END IF
```

```
030 WRITE(*,60) TIME*1.E9, RNPART(1), RNPART(2), RNPART(3),
& RNPART(4), RNPART(5)
031 60 FORMAT(1H , '|', F8.2, '|', 5(I10, '|' ) )
```

```
032 IF ( TIME .GE. MAXTIM-DT ) THEN
033 WRITE(*,*) NPARTI(1), NPARTI(2), NPARTI(3), NPARTI(4), NPARTI(5)
034 ZTOT = Z1 + Z2 + Z3 + Z4 + Z5 + Z6 + Z7 + Z8 + Z9 + Z10 + Z11
```

```

035     WRITE(*, '(/)')
036     WRITE(*,*) ' GAPABSTAND : ', NINT(GAPLEN*1000), ' MM'
037     WRITE(*,*) ' SPANNUNG   : ', NINT(GAPLEN*EFIELD), ' V'
038     WRITE(*,5) PRESSU
039     WRITE(*,6) ' E + H2 --> 2E + H2+ : ', Z1/ZTOT*100.
040     WRITE(*,6) ' H+ + H2 --> H + H2+ : ', Z2/ZTOT*100.
041     WRITE(*,6) ' H+ + H2 --> H+ + E + H2+ : ', Z3/ZTOT*100.
042     WRITE(*,6) ' H2+ + H2 --> H2 + H2+ : ', Z4/ZTOT*100.
043     WRITE(*,6) ' H2+ + H2 --> H + H+ + H2 : ', Z5/ZTOT*100.
044     WRITE(*,6) ' H2+ + H2 --> H + H + H2+ : ', Z6/ZTOT*100.
045     WRITE(*,6) ' H2+ + H2 --> H2+ + E + H2+ : ', Z7/ZTOT*100.
046     WRITE(*,6) ' H + H2 --> H+ + E + H2 : ', Z8/ZTOT*100.
047     WRITE(*,6) ' H + H2 --> H + H2+ + E : ', Z9/ZTOT*100.
048     WRITE(*,6) ' H2 + H2 --> H2+ + E + H2 : ', Z10/ZTOT*100.
049     WRITE(*,6) ' H2 + H2 --> H2 + H2+ + E : ', Z11/ZTOT*100.
050     WRITE(*,*)
051     WRITE(*,*) 'EMEAN = ', ( NINT( EMEAN(I)/TNUM(I)/UNICHA ), I=1,5 )
052     WRITE(*,*)
053     5  FORMAT( ' DRUCK           : ', F4.1, ' PA', / )
054     6  FORMAT( A36, F6.3, ' %' )
055     ENDIF

056     END

```

```

*****
001     SUBROUTINE     BOOKKE( X, E, PAKIND, ISUCC )
*****
002     INTEGER        PAKIND, DNANOD, DNKATH
003     REAL            NEO, IMAX0, IEM, IHP, IH2P, IH, IH2, KATHOI
004     DIMENSION      X(*), E(*), PAKIND(*), ISUCC(0:*), DENSIT(5,20)
005     COMMON         /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR
006     COMMON         /POINTE/ ITAIL, IFIN
007     COMMON         /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU
008     COMMON         /MISCEL/ NPARTI(5), DNANOD(5), DNKATH(5), FACTOR
009     COMMON         /TIMES/  TIME, DT
010     COMMON         /NEO/ NEO
011     COMMON         /ENEDIS/ ENEDIS(5,20), ENNORM(5)
012     COMMON         /IEKATH/ IEKATH

013     DATA M, N / 11, 0 /
014     DATA KATHOI, ANODEI / 0., 0. /
015     SAVE N, KATHOI, ANODEI, IMAX0

016     N = N+1

017     ENNORM(1) = ENNORM(1) + FACTOR * DNANOD(1)
018     DO 110, I = 2, 5
019         ENNORM(I) = ENNORM(I) + FACTOR * DNKATH(I)
020     110 CONTINUE

021     IF ( MOD(N,M) .EQ. 0 ) THEN

022         IF ( N .EQ. M ) THEN
023             WRITE(9,*) ' PARTICLE DENSITY DEPENDENT ON SPACE AND
&TIME'

```

```
024      WRITE(9,*)
025      WRITE(9,80)  NINT(EFIELD*GAPLEN/1000.), GAPLEN*100., PRESSU
026      WRITE(9,*)
027      WRITE(11,*)  ' ENERGY DISTRIBUTION DEPENDENT ON SPACE AND
& TIME'
028      WRITE(11,*)
029      WRITE(11,80) NINT(EFIELD*GAPLEN/1000.), GAPLEN*100., PRESSU
030      WRITE(11,*)
031      DENSIO = NEO / GAPLEN
032      END IF

*      R E S E T      T H E      A R R A Y S      O F      *
*      P A R T I C L E D E N S I T Y      *
033      DO 50, I = 1, 5
034          DO 60, J = 1,20
035              DENSIT(I,J) = 0
036      60      CONTINUE
037      50      CONTINUE

*      U P D A T E      T H E      A R R A Y S      O F      *
*      P A R T I C L E      D E N S I T Y :      *
038      I = ISUCC(0)
039      DO 10, WHILE ( I .NE. ITAIL )
040          INDEX = INT(X(I)/GAPLEN*20)+1
041          DENSIT(PAKIND(I),INDEX) = DENSIT(PAKIND(I),INDEX)
&                                     + FACTOR
042      I = ISUCC(I)
043      10      CONTINUE
044          INDEX = INT(X(ITAIL)/GAPLEN*20)+1
045          DENSIT(PAKIND(ITAIL),INDEX) = DENSIT(PAKIND(ITAIL),INDEX)
&                                     + FACTOR

*      W R I T E      T H E      A R R A Y S      O N      T H E      *
*      E X T E R N A L      F I L E      *
*      D E N S I T Y . D A T A . D A T A      *
046      WRITE(9,90)  TIME*1.E9
047      WRITE(11,100) NINT( ( TIME - DBLE(M)/2.*DT ) * 1.E9 )
048      DO 20, I = 1, 20
049          WRITE(9,30)  DENSIT(1,I)/DENSIO/GAPLEN*20.,
&                      DENSIT(2,I)/DENSIO/GAPLEN*20.,
&                      DENSIT(3,I)/DENSIO/GAPLEN*20.,
&                      DENSIT(4,I)/DENSIO/GAPLEN*20.,
&                      DENSIT(5,I)/DENSIO/GAPLEN*20.
050      WRITE(11,30)  ENEDIS(1,I) / ENNORM(1),
&                  ENEDIS(2,I) / ENNORM(2),
&                  ENEDIS(3,I) / ENNORM(3),
&                  ENEDIS(4,I) / ENNORM(4),
&                  ENEDIS(5,I) / ENNORM(5)
051      20      CONTINUE
052      WRITE(9,*)
053      WRITE(11,*)
054      CALL RESEND

055      END IF
```

* *****

```
*      P A R T I C L E      C U R R E N T      *
*      A T      T H E      E L E C T R O D E S      *

056      IF ( N .EQ. 2 ) THEN
057          IMAXO = ( NEO + 1 ) / GAPLEN * SQRT( ( SQRT(EOSQR)
&              + UNICHA*EFIELD*GAPLEN ) ** 2 - EOSQR ) /
&              ( SQRT(EOSQR) + UNICHA*EFIELD*GAPLEN ) * SQRT(CSQR)

058          WRITE(10,*) ' PARTICLE CURRENT AT THE ELECTODES'
059          WRITE(10,*)
060          WRITE(10,80) NINT(EFIELD*GAPLEN/1000.), GAPLEN*100., PRESSU
061          WRITE(10,*)
062          WRITE(10,*)
&          ' TIME (NS)   E           H+           H2+           H           H2
&          ( IEA-IEK ) / IEK '
063          WRITE(10,*)
064          END IF

*      C O M P U T A T I O N      O F      *
*      E L E C T R O D E      C U R R E N T :      *

065          KATHOI = KATHOI + FACTOR*IEKATH
066          ANODEI = ANODEI + FACTOR*DNANOD(1)
067          IF ( MOD(N,3) .EQ. 0 ) THEN
068              KATHOI = KATHOI + FACTOR*IEKATH
069              ANODEI = ANODEI + FACTOR*DNANOD(1)
070              IEM = DNANOD(1)*FACTOR / DT / IMAXO
071              IHP = DNKATH(2)*FACTOR / DT / IMAXO
072              IH2P = DNKATH(3)*FACTOR / DT / IMAXO
073              IH = DNKATH(4)*FACTOR / DT / IMAXO
074              IH2 = DNKATH(5)*FACTOR / DT / IMAXO
075              WRITE(10,70) (TIME-1.5*DT)*1.E9, IEM, IHP, IH2P, IH, IH2,
&              ( ANODEI - KATHOI ) / KATHOI
076              KATHOI = 0.
077              ANODEI = 0.
078          END IF
079          IEKATH = 0

*      *****      *
080      30  FORMAT( 5(1P,E11.3) )
081      70  FORMAT( F7.2, 6(1P,E11.3) )
082      80  FORMAT( 'U = ', I3, ' KV           D = ', F3.1, ' CM           P = ',
&              F4.1, ' PA ' )
083      90  FORMAT( 'TIME = ', F5.1, ' NS ' )
084      100 FORMAT( 'TIME = ', I3, ' NS ' )

085          END

*****
001          REAL FUNCTION QN(ICROSS,ENERGY)
*****

*      QN      = CROSS SECTION * DENSITY (M**-3 * M**2 = 1/M)
*      ICROSS  = INDEX OF CROSS SECTION
*      ENERGY = PARTICLE ENERGY (EV)
*      MQ      = DIMENSION FOR NUMBER OF CROSS SECTIONS
```

* MW = DIMENSION FOR NUMBER OF ENERGY VALUES FOR EACH CROSS SECTION

```
002     PARAMETER(MQ=59,MW=30)
003     CHARACTER*80   TEXTQ(4,MQ)
004     COMMON /CROSS/  NQ
005     COMMON /FLAGS/  KPRINT,KCROSS(MQ)
006     COMMON /GETQWI/ QFIT(MW,MQ),QNWFIT(3,MW,MQ),
      &                WFIT(MW,MQ),WFITL(MW,MQ),
      &                NW(MQ),KQZERO(MQ)
007     COMMON /PARAME/ DUMMY1, DUMMY2, DRUCK
008     COMMON /PHYSIK/ DICHTE
009     COMMON /TEXT/   TEXTQ
010     DATA KFIT/0/
011     SAVE

012     IF(KFIT.EQ.1) GO TO 100
013     DO 10 I=1,MQ
014     KCROSS(I) = 0
015     10 CONTINUE

016     READ(2,*) KPRINT
017     READ(2,*) KCROSS
018     WRITE(6,210) KPRINT
019     WRITE(6,211) KCROSS

020     CALL FITQNW
021     KFIT = 1

022     BOLTZ = 1.38054D-23
023     TEMP  = 293.15D0
024     DICHTE = DRUCK / (BOLTZ*TEMP)
025     WRITE(6,290) BOLTZ,TEMP,DRUCK,DICHTE
026     CALL FITNQW

027     100 IF(ENERGY.GE.WFIT(1,ICROSS)) GO TO 110
028     IF(KQZERO(ICROSS).EQ.0) THEN
029         QN = 0
030     ELSE
031         QN = DICHTE*QFIT(1,ICROSS)
032     END IF
033     RETURN

034     110 DO 120 J=1,NW(ICROSS)-2
035     IF(ENERGY.LE.WFIT(J+1,ICROSS)) GO TO 130
036     120 CONTINUE
037     IF(ENERGY.LE.WFIT(NW(ICROSS),ICROSS)) THEN
038         JW = NW(ICROSS) - 2
039         GO TO 140
040     ELSE
041         QN = 0
042         RETURN
043     END IF

044     130 JW = J
045     140 X = LOG(ENERGY)
046     QN = EXP( QNWFIT(1,JW,ICROSS)
      &        + X*( QNWFIT(2,JW,ICROSS) + X*QNWFIT(3,JW,ICROSS)) )
047     RETURN
```

```
048 210 FORMAT('1KPRINT = 0: PRINTS NO CROSS SECTIONS '/
      &' KPRINT = 1: PRINTS CROSS SECTIONS USED IN THIS RUN'/
      &' KPRINT = 2: PRINTS ALL CROSS SECTIONS'/
      &' KPRINT = ',I1,' IN THIS RUN',/,
      &' KCROSS = INDICES OF CROSS SECTIONS CONSIDERED IN THIS RUN')
049 211 FORMAT(' KCROSS = ',40I3)
050 290 FORMAT('OBOLTZMANN CONSTANT = ',1P,D12.5,' (N*M/K);',
      &' TEMPERATURE = ',3P,D11.2,'(K);',/,
      &' PRESSURE = ',1P,D10.3,' (N/M**2 = 1E-2 MILLIBAR);',
      &' DENSITY = ',D10.3,' (M**-3);')
051 END
```

```
*****
001 SUBROUTINE FITQNW
*****
* CALL FITQNW READS AND WRITES TABULATED CROSS SECTIONS QFIT(WFIT)
*
* ENTRY FITQNW HAS TO BE RECALLED FOR EACH NEW VALUE OF "DICHTE"
* ENTRY FITQNW CALCULATES LOG(DICHTE*QFIT), LOG(WFIT)
* NEXT, FITS CUBIC FUNCTION TO THESE DATA
* STORES ITS COEFFICIENTS IN QNWFIT(K,J,I), I = CROSS SECTION NUMBE
* AT RETURN THE FUNCTIONS QN(W) ARE READY FOR USE FOR EACH I = 1,NQ
*
* KQZERO(I) = 0 THEN QN(W) = 0 IF W < WFIT(1,I)
* KQZERO(I) = 1 THEN QN(W) = DICHTE * QFIT(1,I) IF W < WFIT(1,I)
* NQ = TOTAL NUMBER OF CROSS SECTIONS
* NW(I) = NUMBER OF ENERGY VALUES FOR CROSS SECTION I
* NWMAX = MAXIMUM OF NW(I)
* WFIT(J,I) = ENERGY IN EV MUST BE # 0 IN QN(W)!!!!!!!!!!!!!!
* QFIT(J,I) = CROSS SECTION IN M**2 MUST BE # 0 IN QN(W)!!!!!!!!!!!!!!
* QN(W,ICROSS) = FUNCTION DENSITY * CROSS SECTION IN M**-3 * M**2 = 1/M
* FOR THE CROSS SECTION NUMBER ICROSS
* W = ENERGY IN EV
*
* IXXX = INDEX IN LOOP
* JXXX = INDEX IN LOOP
* KXXX = FLAG TO CONTROL PROGRAM FLOW
* MXXX = DIMENSION OF ARRAY XXX
* NXXX = NUMBER OF ELEMENTS OF THE VARIABLE XXX USED AT PRESENT
*****
```

```
002 PARAMETER(MQ=59,MW=30)
003 REAL AFIT(3),QNFITL(MW),XFIT(3),YFIT(3)
004 CHARACTER*80 TEXTQ(4,MQ)
005 CHARACTER*52 TEXT(MW)
006 COMMON /CROSS/ NQ
007 COMMON /FLAGS/ KPRINT,KCROSS(MQ)
008 COMMON /GETQWI/ QFIT(MW,MQ),QNWFIT(3,MW,MQ),
      & WFIT(MW,MQ),WFITL(MW,MQ),
      & NW(MQ),KQZERO(MQ)
009 COMMON /PHYSIK/ DICHTE
010 COMMON /TEXT/ TEXTQ
011 IF(KPRINT.EQ.1.OR.KPRINT.EQ.2) WRITE(6,1)
012 1 FORMAT('0IF W < WFIT(1,I) THEN: IF KQZERO(I) = 0 THEN QN(W) = 0',
```

```
&,
&TE * QFIT(1,I)')
IF KQZERO(I) = 1 THEN QN(W) = DIC

013      DO 10 I=1,MQ
014      WFIT(1,I) = -1
015      10 CONTINUE

016      ICROSS = 1
017      20 READ(3,*) I,NQ,NW(I),NWMAX,KQZERO(I)
018      READ(3,25) (TEXTQ(J,I),J=1,3)
019      READ(3,30) (WFIT(J,I),QFIT(J,I),TEXT(J),J=1,NW(I))
020      25 FORMAT(A80/A80/A80)
021      30 FORMAT(2D10.3,A52)

022      IF(KPRINT.EQ.0) GO TO 40
023      IF(KPRINT.EQ.2) GO TO 33
024      IF(I.NE.KCROSS(ICROSS)) GO TO 40
025      ICROSS = ICROSS + 1
026      33 WRITE(6,35) I,NQ,NW(I),NWMAX,KQZERO(I)
027      WRITE(6,36) (TEXTQ(J,I),J=1,3)
028      WRITE(6,37) (WFIT(J,I),QFIT(J,I),TEXT(J),J=1,NW(I))
029      35 FORMAT('0I = ',I2,' NQ = ',I2,' NW = ',I3,' NWMAX= ',I3,
&' KQZERO = ',I1)
030      36 FORMAT(1H ,A80)
031      37 FORMAT(1H ,1P,2D10.3,A52)
032      40 IF(I.LT.NQ) GO TO 20

033      RETURN

034      ENTRY FITNQW

035      DO 100 I=1,NQ
036      IF(WFIT(1,I).LT.0) GO TO 100
037      DO 50 J=1,NW(I)
038      WFITL(J,I) = LOG(WFIT(J,I))
039      QNFITL(J) = LOG(DICHTE*QFIT(J,I))
040      50 CONTINUE

041      DO 90 J=1,NW(I)-2
042      DO 60 K=1,3
043      XFIT(K) = WFITL(J+K-1,I)
044      60 YFIT(K) = QNFITL(J+K-1)
045      CALL FITYX2(YFIT,XFIT,AFIT)
046      DO 80 K=1,3
047      QNWFIT(K,J,I) = AFIT(K)
048      80 CONTINUE
049      90 CONTINUE
050      100 CONTINUE
051      RETURN
052      END
```

```
*****
001      SUBROUTINE FITYX2(Y,X,A)
*****
```

* FITS THE QUADRATIC FUNCTION $Y = A(3)*X**2 + A(2)*X + A(1)$

* TO 3 GIVEN DATA POINTS (X(I),Y(I),I=1,3)
* Y, X = INPUT
* A = OUTPUT

```
002      REAL      A(3),X(3),Y(3)

003      DYDX = (Y(2) - Y(1)) / (X(2) - X(1))
004      X1X2 = X(1) + X(2)
005      A(3) = ( Y(3) - Y(1) - DYDX*(X(3) - X(1)) ) /
&      ( X(3)*(X(3) -X1X2) + X(1)*X(2) )
006      A(2) = DYDX - A(3)*X1X2
007      A(1) = Y(1) - X(1)*( A(3)*X(1) +A(2) )
008      RETURN
009      END
```

```
001      FUNCTION      SIGMAT( E )
```

```
* THE FUNCTION RETURNS THE VALUE OF THE *
* A/V - CROSS SECTION FOR ELECTRONS *
```

```
002      LOGICAL      FLAG
003      PARAMETER ( A = 6.0457E-14 )
004      COMMON /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR
005      DATA FLAG / .TRUE. /
006      SAVE FLAG

007      IF ( FLAG ) THEN
008          EO = SQRT( EOSQR )
009          FLAG = .FALSE.
010      END IF

011      EKIN = E * UNICHA
012      SIGMAT = A / SQRT( (EKIN*EKIN+2*EO*EKIN) * CSQR ) * ( EO + EKIN )

013      END
```

```
*****
*
*           MAIN PROGRAM   COLLTIME
*
*****

*  THIS PROGRAM COMPUTES THE TIME BETWEEN TWO COLLISIONS (TC),
*  DEPENDENT ON THE INITIAL PARTICLE'S MOMENTUM AND THE PROBABILITY
*  THAT AT LEAST ONE COLLISION HAPPENS BETWEEN 0 AND TC.
*

001      REAL  INTEGR, MAXPRO
002      DIMENSION  TC( 0:100, 0:100 )
003      COMMON  /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR
004      COMMON  /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU
005      COMMON  /PB/PB
006      EXTERNAL  FUNCTI

007      DATA  ( (TC(I,K), K=0,100), I=0,100 )/10201*150.E-9/
008      READ(1,*)  EFIELD
009      READ(1,*)  GAPLEN
010      READ(1,*)  PRESSU

011      MAXPRO = 1.
012      RFACTO = 100./MAXPRO

013      PMAX   = SQRT( 2. * H2MASS * UNICHA * EFIELD * GAPLEN )
014      TMAX   = PMAX / UNICHA / EFIELD
015      WRITE(*,*)  ' TMAX = ',TMAX,'S', ' PMAX = ',PMAX,'KG*M/S'

016      DT = TMAX/4000.
017      DP = PMAX/100.

018      DO 10,  I = 0, 100
019          PB      = I*DP
020          INTEGR = 0.
021          DO 20,  K = 0, 3999
022              T = K*DT
023              DINTEG = TRAPEZ( T, T+DT, FUNCTI )
024              INTEGR = INTEGR + DINTEG
025              R = 1. - EXP(-INTEGR)
026              INDEXK = INT(R*RFACTO+0.9999999)
027              TC(I,INDEXK) = T+DT
028      20  CONTINUE
029          TC(I,0) = 0.
030      10  CONTINUE

031      WRITE(4)  TC

033      END

*****
001      FUNCTION          TRAPEZ( XLOW, XUPP, F )
*****

002      TRAPEZ = 0.5 * ( F(XLOW) + F(XUPP) ) * ( XUPP - XLOW )
```

003 END

```
*****  
001 FUNCTION FUNCTI( T )  
*****
```

```
* THIS FUNCTION COMPUTES THE PRODUCT OF THE DENSITY OF BACK GROUND *  
* GAS AND THE TOTAL CROSS SECTION AND THE VELOCITY OF THE COLLIDING *  
* PARTICLE. *
```

```
002 COMMON /CONST/ UNICHA, EMASS, PMASS, H2MASS, CSQR, EOSQR  
003 COMMON /PARAME/ EFIELD, GAPLEN, PRESSU  
004 COMMON /PB/PB
```

```
005 P = PB + UNICHA * EFIELD * T  
006 E = 0.5 * P * P / H2MASS
```

```
* KINETIC ENERGY IN EV: *
```

```
007 E = E / UNICHA
```

```
* VELOCITY: *
```

```
008 V = ABS( P / H2MASS )
```

```
009 SN1 = QN(4,E)
```

```
010 SN2 = QN(20,E)
```

```
011 SN3 = QN(21,E) - 0.5*SN2
```

```
012 IF ( SN3 .LT. 0. ) SN3 = 0.
```

```
013 SN4 = QN(28,E)
```

```
* H2+ - IONS *
```

```
014 FUNCTI = ( SN1 + SN2 + SN3 + SN4 ) * V
```

```
* PROTONS *
```

```
C FUNCTI = ( QN(2,E) + QN(25,E) ) * V
```

```
015 END
```

```
*****  
002 INCLUDE (PHYSICO)  
*****
```

```
*****  
001 INCLUDE (CROSS)  
*****
```

Literaturverzeichnis

- [1] J. Christiansen, Ch. Schultheiss
"Production of High Current Particle Beams by Low Pressure Spark Discharges"
Z. Physik A, 290, 35 (1979)
- [2] Ch. Schultheiss
"Erzeugung von Hochstromteilchenstrahlen aus Niederdruckfunkenentladungen"
Dissertation, Physikalisches Institut der Universität Erlangen (1979)
- [3] M. Rübiger
"Skalierung des Elektronenstromes einer Pseudofunkenentladung"
Diplomarbeit, Physikalisches Institut I der Universität Düsseldorf (1986)
- [4] W. Bauer, A. Citron, H. Ehrler, A. Rogner, W. Schimassek, Ch. Schultheiss
"High Power Pseudo Spark as an Ion- and X-Ray Source"
XVIII International Conference on Phenomena in Ionized Gases, 4-718 (1987)
- [5] G. F. Kirkman, M. A. Gundersen
"Low Pressure, Light Initiated Glow Discharge Switch for High Power Applications"
App. Phys. Lett. 49 (9), 494 (1986)
- [6] K. Frank, E. Boggasch, J. Christiansen, A. Goertler, W. Hartmann, C. Kozlik
"High Repetition Rate Pseudo Spark Switches for Laser Applications"
SPIE Vol. 735 Pulse Power for Lasers (1987)
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifschitz
"Lehrbuch der theoretischen Physik" Band 10, 1. Auflage S. 8-10
Akademie-Verlag Berlin (1962)
- [8] F. F. Chen
"Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion", Vol. 1, 2. Auflage, S. 233
Plenum Press, New York (1984)
- [9] N. A. Krall, A. W. Trivelpiece
"Principles of Plasma Physics" S. 368-369
McGraw-Hill, New York (1973)
- [10] H. T. Salee, L. Lucas
"Simulation of Electron Swarm Motion in Hydrogen and Carbon Monoxide for high E/N"
J. Phy. D: App. Phys. 10, 343 (1977)
- [11] J. D. Reid, S. R. Hunter
Aust. J. Phys. 32, 255 (1979)
- [12] A. J. Davies, C. J. Evans
"The Theory of Ionisation Growth in Gases and Pused and Static Fields"
CERN Report 73-10 (1973)

- [13] K. Mittag, W. Nießen
"Numerical Simulation of a Pseudo Spark Gas Discharge"
Int. AMSE Conference on Modelling and Simulation, Karlsruhe (1987)
- [14] E. J. Lauer, S. S. Yu, D. M. Cox
"Onset of Self-Breakdown in a low Pressure Spark Gap"
Phys. Rev. 23, 2250 (1981)
- [15] E. Kunhardt, Y. Tzeng
"Monte Carlo Technique for Simulating the Evolution of an Assembly of Particles
Increasing in Number"
J. of Comp. Phys. 67,2 279 (1986)
- [16] J. P. Boeuf, E. Marode
"A Monte Carlo Analysis of an Electron Swarm in a Nonuniform Field: The Cathode
Region of a Glow discharge Helium"
J. Phys. D: Appl. Phys. 65 2169 (1982)
- [17] H. R. Skullerud
J. Phys. D: 1 1567 (1968)
- [18] J. I. Goldstein, H. Yakowitz, D. E. Newbury, E. Lifshin, J. W. Colby, J. R. Coleman
"Practical Scanning Electron Microscopy" 3. Auflage S. 57-69
Plenum Press New York (1975)
- [19] W. C. Walker, O. P. Rustgi, G. L. Weissler
J. Opt. Soc. Am. 49 471 (1959)
- [20] A. Rogner
"Untersuchung der Intensitäts- und Energieverteilung intensiver gepulster Ionenstrahlen"
Diplomarbeit Kernforschungszentrum und Universität Karlsruhe (1985)
- [21] W. Benker
"Messung der ionischen Energieverteilung von Niederdruckgasentladungen mit der
Gegenfeldmethode"
Diplomarbeit Universität Erlangen-Nürnberg (1983)
- [22] R. B. Quinn
"Sparking Potentials at Low Pressures"
Phys. Rev. 55 482 (1939)
- [23] G. W. McClure
J. Electron. Control 7 439 (1959)
- [24] K. Simonyi
"Physikalische Elektronik" S. 514-516
Teubner Stuttgart (1972)
- [25] K. Wiesemann
"Einführung in die Gaselektronik: Grundlagen der Elektrizitätsleitung in Gasen"
1. Auflage S. 51-52 Teubner Stuttgart (1976)

- [26] C. F. Barnett, J. A. Ray, E. Ricci, M. J. Wilker, E. W. McDaniel, E. W. Thomas,
H. B. Gilbody
"Atomic Data for Controlled Fusion Research"
Vol. I, II of ORNL-5206 (1977)

- [27] L. J. Puckett, G. O. Taylor, D. W. Martin
Phys. Rev. 178 (1969)

- [28] Gilbody, Hasted
Proc. Roy. Soc. London 240 A 382 (1957)

- [29] Afrosimov et al.
Sov. Phys. JETP 7 968 (1958)

- [30] A. V. Phelps
private Mitteilungen

- [31] M. v. Ardenne
"Tabellen zur angewandten Physik" Band 1, S. 106, 3. Auflage
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften Berlin (1975)

Für die Möglichkeit, daß ich diese Arbeit am Institut für Kernphysik II durchführen konnte, danke ich Herrn Professor Dr. A. Citron, Herrn Professor Dr. W. Schmidt und Herrn Dr. W. Bauer. Desweiteren gilt mein besonderer Dank Herrn Dr. K. Mittag, der mich betreute und Herrn Dr. Ch. Schultheiss für seine anregenden Diskussionen. Beide trugen nicht unwesentlich zum Gelingen dieser Arbeit bei. Schließlich möchte ich mich noch bei Frau D. Hamdi für die Bereitstellung ihrer Schreibmaschine bedanken.