

# Simulation von Erosions- und Depositionsprozessen mehrkomponentiger Oberflächenschichten in Fusionsanlagen

Inaugural-Dissertation  
zur  
Erlangung des Doktorgrades der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von  
  
Stefan Droste  
  
aus Borken (Westfalen)

Februar 2007

Aus dem Institut für Plasmaphysik des Forschungszentrums Jülich GmbH,  
für die Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Gedruckt mit Genehmigung der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der  
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Prof. Dr. Ulrich Samm

Koreferent: Prof. Dr. Oswald Willi

Tag der mündlichen Prüfung: 10.05.2007

# Kurzfassung

Die derzeitige Wahl der Wandmaterialien in dem Tokamak-Experiment ITER, dem nächsten großen Schritt auf dem Weg zur Energiegewinnung aus der kontrollierten Kernfusion, wird zur unvermeidlichen Bildung mehrkomponentiger Oberflächenschichten aus Wolfram, Kohlenstoff und Beryllium durch Erosion und Deposition führen. Der Einfluss dieser Schichten auf die Lebensdauer der Wandkomponenten und auf die Tritiumrückhaltung ist unklar. Daher sind Vorhersagen für die Erosionsprozesse, den Verunreinigungstransport und die Depositionsprozesse mit Hilfe von Computersimulationen wichtig. Dafür wird das 3D-Monte-Carlo-Programm ERO genutzt.

Bisher wurde die Oberfläche in ERO vereinfacht als homogene Mischung der Materialien in einer Interaktionsschicht des Substratmaterials beschrieben. In dieser Arbeit wurde ERO mit dem vorhandenen Monte-Carlo-Programm SDTrimSP zu dem Programm ERO-SDTrimSP gekoppelt, um Mischprozesse in der Oberfläche korrekt zu beschreiben.

SDTrimSP beschreibt die Oberfläche, indem es den Transport von Ionen im Festkörper berechnet und über die Implantationstiefe der Ionen die Veränderung des Festkörpers tiefenaufgelöst verfolgt. In Abhängigkeit vom Konzentrationstiefenprofil ergeben sich Reflexionskoeffizienten der Projektile und Zerstäubungsausbeuten für die Atome des Festkörpers, die auf der Berechnung der Trajektorien in Bewegung gesetzter Festkörperatome beruhen. Da SDTrimSP dabei keine chemischen Prozesse berücksichtigt, wurde eine neue Methode entwickelt, die chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff in SDTrimSP zu implementieren.

Das neue Programm ERO-SDTrimSP wurde mit Experimenten am Tokamak TEXTOR verglichen, die dazu dienten, die Bildung mehrkomponentiger Oberflächenschichten zu untersuchen. Dabei wurde Methan  $\text{CH}_4$  durch Testlimiter aus Graphit und Wolfram über Bohrungen in Plasmaentladungen injiziert. Es zeigte sich eine sehr deutliche Substratabhängigkeit. Die Depositionseffizienz, d. h. das Verhältnis aus lokal deponiertem Kohlenstoff zur Menge des injizierten Kohlenstoffs, betrug für Graphit 4% und 0.3% für Wolfram. Das depositionsdominierte Gebiet auf dem Graphitlimiter bedeckte eine fünfmal größere Fläche als das auf dem Wolframlimiter.

Die Simulation dieser Experimente mit ERO-SDTrimSP zeigte ebenfalls einen klaren Substratunterschied von 2% Depositionseffizienz für Graphit und weniger als 0.5% für Wolfram in guter Übereinstimmung mit den Messungen. Der Grund für die Substratabhängigkeit liegt im Wesentlichen in der höheren physikalischen Zerstäubungsausbeute eines dünnen Kohlenstofffilms auf dem Wolframsubstrat im Vergleich zum Kohlenstoffsubstrat. Im Gegensatz zu der früher verwendeten vereinfachten Annahme einer homogenen Materialmischung kann das Phänomen der Substratabhängigkeit erst jetzt mit ERO-SDTrimSP nachvollzogen werden.

Ein wichtiges Ergebnis des Vergleichs Experiment-Simulation war, dass die effektive Haftwahrscheinlichkeit für auf die Oberfläche treffende Kohlenwasserstoffradikale praktisch gleich Null ist. Weiterhin zeigte sich, dass der lokal redeponierte Kohlenstoff Schichten bildet, deren Erosion um einen Faktor 10 höher ist als die des normalen Graphits. Dies kann mit der Bildung amorpher wasserstoffreicher Kohlenstoffschichten erklärt werden, die sich durch die Deposition mit niederenergetischen Kohlenstoffionen bilden.

Die Simulation des Verunreinigungstransports im Plasma wurde durch den Vergleich mit spektroskopischen Daten, d. h. der zweidimensionalen Verteilung der CH- und CIII-Linienemission über dem Testlimiter, überprüft. Für die noch verbleibende Abweichung der Simulation vom Experiment wird insbesondere im Fall der Graphitoberfläche vermutet, dass die Oberflächenrauigkeit, die in den Simulationen noch nicht berücksichtigt wird, eine wesentliche Rolle spielen könnte.

Mit ERO-SDTrimSP steht nun ein Werkzeug zur Simulation mehrkomponentiger Oberflächenschichten in Fusionsanlagen und damit auch für eine bessere Vorhersage der Erosions- und Depositionsprozesse in ITER zur Verfügung.



## Abstract

The next big step on the way to energy production by means of magnetic confinement fusion will be the Tokamak experiment ITER. The present choice of first wall materials in ITER will unavoidably lead to the formation of mixed carbon, tungsten and beryllium layers. The impact of these layers on life time of wall components and tritium retention in ITER is unclear. Therefore predictive modelling of erosion processes, impurity transport and deposition processes is important. For this the 3D Monte-Carlo code ERO can be used.

Until now, the surface in ERO was described simply as a homogeneous material mixture in a given interaction layer of wall components. In this thesis ERO has been coupled to the existing Monte-Carlo code SDTrimSP to describe material mixing processes in wall components correctly.

SDTrimSP describes the surface by calculating the transport of ions in solids. It keeps track of the depth dependent material concentration caused by the implantation of projectiles in the solid. The calculation of movements of the recoil atoms within the solid gives reflection coefficients and sputtering yields. Since SDTrimSP does not consider chemical processes a new method has been developed to implement chemical erosion of carbon by the impact of hydrogen projectiles.

The new code ERO-SDTrimSP was compared to TEXTOR experiments which were carried out to study the formation of mixed surface layers. In these experiments methane CH<sub>4</sub> was injected through drillings in graphite and tungsten spherical limiters into the plasma. A pronounced substrate dependence was observed. The deposition efficiency, i.e. the ratio of the locally deposited to the injected amount of carbon, was 4% for graphite and 0.3% for tungsten. The deposition-dominated area on the graphite limiter covers a five times larger area than on the tungsten limiter.

Modelling of this experiment with ERO-SDTrimSP also showed a clear substrate dependence with 2% deposition efficiency for graphite and less than 0.5% for tungsten in good agreement with the experiment. The reason for the substrate dependence is mainly explained by the higher physical sputtering yield of a thin carbon film on top of tungsten substrate compared to graphite substrate. In contrast to the simplifying assumption of homogeneous material mixing in the past, the phenomena of substrate dependence can now be understood with ERO-SDTrimSP.

An important result of the comparison between experiment and simulation was that the effective sticking of hydrocarbon radicals hitting the surface must be negligible. Furthermore, it was shown that local re-deposited carbon layers are 10 times more effectively eroded than ordinary graphite. This is explained by the formation of hydrogen-rich carbon layers which are formed by carbon ions with low impact energy.

Simulation of the impurity transport in the plasma was checked by comparison with two dimensional light emission distributions of CH and CIII lines in front of the limiters. For explaining the remaining discrepancy in the simulation of deposition on graphite the surface roughness, which is not yet included in the model, might be a key parameter.

Now that the simulation tool ERO-SDTrimSP has been supplied it can be used to model mixed surface layers in fusion facilities and, in particular, it will be used to improve the quality of predictions of erosion and deposition processes in ITER.



# Inhaltsverzeichnis

|                                                                                            |            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Abbildungsverzeichnis</b>                                                               | <b>x</b>   |
| <b>Symbole und Abkürzungen</b>                                                             | <b>xii</b> |
| <b>1 Einleitung</b>                                                                        | <b>1</b>   |
| <b>2 Grundlagen der Plasma-Wand-Wechselwirkung</b>                                         | <b>8</b>   |
| 2.1 Grundlagen der Plasmarandschicht . . . . .                                             | 9          |
| 2.1.1 Beschreibung der Abschälschicht . . . . .                                            | 9          |
| 2.1.2 Verunreinigungstransport . . . . .                                                   | 11         |
| 2.1.3 Atom- und Molekülphysik . . . . .                                                    | 12         |
| 2.1.4 Messmethoden der Plasmadiagnostik . . . . .                                          | 13         |
| 2.2 Wechselwirkung von Plasmateilchen mit Festkörpern . . . . .                            | 14         |
| 2.2.1 Analytische Beschreibung der physikalischen Zerstäubung . . . . .                    | 17         |
| 2.2.2 Chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff . . . . .                        | 20         |
| 2.2.3 Messmethoden der Oberflächenphysik . . . . .                                         | 23         |
| <b>3 Monte-Carlo-Programme ERO und SDTrimSP</b>                                            | <b>25</b>  |
| 3.1 Monte-Carlo-Programm ERO . . . . .                                                     | 25         |
| 3.1.1 Hintergrundplasma und Verunreinigungstransport in ERO . . . . .                      | 26         |
| 3.1.2 Plasma-Wand-Wechselwirkung . . . . .                                                 | 28         |
| 3.2 Monte-Carlo-Programm SDTrimSP . . . . .                                                | 31         |
| <b>4 Modell zur Beschreibung mehrkomponentiger Oberflächenschichten in Fusionsanlagen:</b> |            |
| <b>Kopplung von ERO und SDTrimSP</b>                                                       | <b>34</b>  |
| 4.1 Vergleich Flussbilanz-Oberflächenmodell mit SDTrimSP . . . . .                         | 34         |
| 4.2 Chemische Effekte in SDTrimSP . . . . .                                                | 36         |
| 4.3 Kopplung der Monte-Carlo-Programme ERO und SDTrimSP . . . . .                          | 38         |
| 4.4 Parameterstudien mit dem gekoppelten Programm . . . . .                                | 41         |
| 4.4.1 Statistische und systematische Fehler . . . . .                                      | 43         |
| 4.4.2 Das Modell für die chemische Erosion . . . . .                                       | 46         |
| 4.4.3 Einfluss der Kohlenstoffkonzentration $\rho_C$ im Hintergrundplasma . . . . .        | 47         |
| 4.4.4 Lokale Methan-Quelle . . . . .                                                       | 50         |

|                                                                                                    |           |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>5 Simulationen und Experimente</b>                                                              | <b>53</b> |
| 5.1 Injektion von $^{13}\text{CH}_4$ durch Bohrungen in kugelförmige Limiter . . . . .             | 54        |
| 5.2 Simulation der Experimente . . . . .                                                           | 61        |
| 5.2.1 Vorgehensweise bei der Modellierung von Experimenten . . . . .                               | 61        |
| 5.2.2 Simulation der Lichtemission . . . . .                                                       | 62        |
| 5.2.3 Deposition von $^{12}\text{C}$ aus dem Hintergrundplasma . . . . .                           | 65        |
| 5.2.4 Simulationen mit ERO (Flussbilanz-Oberflächenmodell) im Vergleich mit ERO-SDTrimSP . . . . . | 66        |
| 5.2.5 Einfluss des effektiven Stickings von Kohlenwasserstoffen . . . . .                          | 68        |
| 5.2.6 Einfluss der chemischen Erosion und der chemischen Reerosion . .                             | 69        |
| 5.2.7 Einfluss der Injektionsrate . . . . .                                                        | 73        |
| 5.3 Schlussfolgerungen . . . . .                                                                   | 76        |
| <b>6 Zusammenfassung</b>                                                                           | <b>78</b> |
| <b>A Simulationsparameter</b>                                                                      | <b>83</b> |
| <b>Literaturverzeichnis</b>                                                                        | <b>91</b> |

# Abbildungsverzeichnis

|      |                                                                                                                                   |    |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1  | Schematischer Aufbau eines Tokamaks . . . . .                                                                                     | 4  |
| 1.2  | Poloidaler Querschnitt durch den Fusionsreaktor ITER . . . . .                                                                    | 5  |
| 2.1  | Schema des Plasmas im Tokamak und in der Abschälschicht . . . . .                                                                 | 9  |
| 2.2  | Schema des Zwei-Körper-Stoßprozesses . . . . .                                                                                    | 16 |
| 2.3  | Oberflächenbindungsenergie $E_B$ im System Be/C . . . . .                                                                         | 18 |
| 2.4  | Mechanismen der physikalischen Zerstäubung . . . . .                                                                              | 19 |
| 2.5  | Physikalische Zerstäubungsausbeute . . . . .                                                                                      | 19 |
| 2.6  | Polarwinkelverteilung zerstäubter Teilchen . . . . .                                                                              | 20 |
| 2.7  | Chemische Erosionsausbeute in Abhängigkeit von Deuterium-Flussdichte $\Gamma_D$ und Oberflächentemperatur . . . . .               | 22 |
| 3.1  | $C^+$ -Trajektorie im konstanten $\vec{B}$ -Feld (a) bzw. im konstanten $\vec{E}$ und im konstanten $\vec{B}$ -Feld (b) . . . . . | 27 |
| 4.1  | Zerstäubung und Reflexion an Wolfram, das mit einer dünnen Kohlenstoffschicht bedeckt ist . . . . .                               | 35 |
| 4.2  | Effektive Zerstäubung und Reflexion an Wolfram, das mit einer dünnen Kohlenstoffschicht bedeckt ist . . . . .                     | 36 |
| 4.3  | Pogrammablauf für die Kopplung von ERO mit SDTrimSP . . . . .                                                                     | 40 |
| 4.4  | Energie- und Winkelverteilung von auf eine Oberfläche treffenden Teilchen . . . . .                                               | 41 |
| 4.5  | Schema für die Parametervariationen . . . . .                                                                                     | 42 |
| 4.6  | Zeitlicher Verlauf der Reflexion und Deposition für verschiedene Werte $t_{ERO}$ . . . . .                                        | 44 |
| 4.7  | Integrales Schichtwachstum und Oberflächenzusammensetzung für verschiedene Werte $t_{ERO}$ . . . . .                              | 44 |
| 4.8  | Relativer Fehler der Simulation . . . . .                                                                                         | 45 |
| 4.9  | Simulation für $\rho_C = 2\%$ : Vergleich der Modelle für die chemische Erosion von Kohlenstoff . . . . .                         | 47 |
| 4.10 | Simulationsbeispiele (Variation von $\rho_C$ ): zeitliche Entwicklung . . . . .                                                   | 48 |
| 4.11 | Simulationsbeispiele (Variation von $\rho_C$ ): Tiefenprofile der Kohlenstoffkonzentration zu verschiedenen Zeitpunkten . . . . . | 49 |
| 4.12 | Simulationsbeispiele zur Variation von $\rho_C$ : Gleichgewicht der Oberflächenkonzentration . . . . .                            | 50 |
| 4.13 | Effektive Erosionsausbeuten von injiziertem Kohlenstoff . . . . .                                                                 | 51 |
| 4.14 | Konzentration von injiziertem Kohlenstoff in der Oberfläche im Zeitverlauf . . . . .                                              | 51 |
| 5.1  | Schemazeichnung des experimentellen Aufbaus . . . . .                                                                             | 54 |
| 5.2  | Ansichten zweier sphärischer Limiter aus Wolfram und Graphit . . . . .                                                            | 55 |

|      |                                                                                                                                                                                                           |    |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 5.3  | Zeitlicher Verlauf der Injektionsrate . . . . .                                                                                                                                                           | 56 |
| 5.4  | Linienprofile der $^{13}\text{C}$ -Deposition . . . . .                                                                                                                                                   | 57 |
| 5.5  | Plasmaparameter . . . . .                                                                                                                                                                                 | 58 |
| 5.6  | Kugelförmiger Testlimiter: CH-Emission aus dem Experiment . . . . .                                                                                                                                       | 59 |
| 5.7  | Kugelförmiger Testlimiter: CIII-Emission aus dem Experiment . . . . .                                                                                                                                     | 60 |
| 5.8  | Vergleich von Experiment und Simulation der 2D-Lichtemission über einem sphärischen Testlimiter . . . . .                                                                                                 | 63 |
| 5.9  | Linienprofile der Lichtemission . . . . .                                                                                                                                                                 | 64 |
| 5.10 | $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit von der Position der LCFS . . .                                                                                                                     | 64 |
| 5.11 | Linienprofile der Nettoerosion bzw. -deposition . . . . .                                                                                                                                                 | 65 |
| 5.12 | Simulation der $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz im Flussbilanz-Oberflächenmodell im zeitlichen Verlauf . . . . .                                                                                     | 66 |
| 5.13 | Vergleich der $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz im Flussbilanz-Oberflächenmodell und im SDTrimSP-Oberflächenmodell . . . . .                                                                          | 67 |
| 5.14 | $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit vom effektiven Sticking $S_{\text{eff}}$ . . .                                                                                                      | 68 |
| 5.15 | Deposition in Abhängigkeit von der chemischen Reerosion $Y_{RE}$ . . . . .                                                                                                                                | 70 |
| 5.16 | Vergleich von Simulationen mit unterschiedlichen Werten für die chemische Reerosion $Y_{RE}$ mit den Experimenten: Linienprofile der $^{13}\text{C}$ -Deposition                                          | 70 |
| 5.17 | Deposition in Abhängigkeit von der chemischen Erosion $Y_{\text{chem}}$ . . . . .                                                                                                                         | 72 |
| 5.18 | Vergleich von Simulationen mit unterschiedlichen Werten für die chemische Erosion $Y_{\text{chem}}$ mit den Experimenten: Linienprofile des $^{13}\text{C}$ -Anteils in der deponierten Schicht . . . . . | 72 |
| 5.19 | Deposition in Abhängigkeit von der Injektionsrate . . . . .                                                                                                                                               | 73 |
| 5.20 | Vergleich der Depositionsverteilung und -linienprofile von Simulation und Experiment . . . . .                                                                                                            | 74 |
| 5.21 | $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit von der Zeit bei variabler Injektionsrate . . . . .                                                                                                 | 75 |
| 5.22 | Depositionsfläche in Abhängigkeit von der Zeit bei zeitabhängiger Injektionsrate . . . . .                                                                                                                | 75 |
| 5.23 | $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit von $Y_{RE}$ bei variabler Injektionsrate . . . . .                                                                                                 | 76 |

# Symbole und Abkürzungen

|              |                                                                                                                                                                                                   |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $E_B$        | Oberflächenbindungsenergie [eV], Seite 16                                                                                                                                                         |
| $E_F$        | Abschneideenergie, bei der die Verfolgung von Projektilen durch SDTrimSP abgebrochen wird (Projektil wurde thermalisiert)., Seite 16                                                              |
| ERO          | Computerprogramm zur Beschreibung des Transports und der Wechselwirkung eines heißen Fusionsplasmas mit der Wand des Plasmagefäßes, Seite 25                                                      |
| ERO-SDTrimSP | Monte-Carlo Programm, das durch die Kopplung von ERO mit SDTrimSP entstanden ist, Seite 38                                                                                                        |
| $\eta$       | Depositionseffizienz [%]: Verhältnis der lokal auf dem Limiter in der Nähe des Injektionslochs deponierten $^{13}\text{C}$ -Atome zur Zahl der injizierten $^{13}\text{CH}_4$ -Moleküle, Seite 53 |
| $f_{nh}$     | Verhältnis von Fluenz zur atomaren Flächendichte in einer Oberflächenschicht, Seite 39                                                                                                            |
| $\Gamma$     | Flussdichte [ $\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$ ], Seite 11                                                                                                                                            |
| $\gamma$     | Energietransfer-Faktor, Seite 15                                                                                                                                                                  |
| ITER         | lateinisch für „der Weg“, kurz vor dem Baubeginn in Frankreich befindlicher Fusionsreaktor, Seite 4                                                                                               |
| $\lambda_c$  | freie Weglänge zwischen zwei Kollisionsereignissen [m], Seite 31                                                                                                                                  |
| $\lambda_D$  | Debye-Länge [m], Seite 10                                                                                                                                                                         |
| LCFS         | letzte geschlossene Flussfläche („last closed flux surface“), Seite 9                                                                                                                             |
| $n_H$        | Anzahl der verfolgten Trajektorien in SDTrimSP („number of particle histories“), Seite 39                                                                                                         |
| $N_r$        | Anzahl der Atome bzw. Moleküle pro Testteilchen, Seite 25                                                                                                                                         |
| NRA          | Kernreaktionsanalyse („nuclear reaction analysis“), Seite 23                                                                                                                                      |
| $\Omega$     | atomare Flächendichte [ $\text{m}^{-2}$ ], Seite 30                                                                                                                                               |
| $\Phi$       | Fluenz [ $\text{m}^{-2}$ ], Seite 32                                                                                                                                                              |

- SDTrimSP Computerprogramm zur Beschreibung der Wechselwirkung schneller Teilchen mit einem Festkörper, Seite 31
- $S_{\text{eff}}$  effektive Haftwahrscheinlichkeit („effektives Sticking“) von Kohlenwasserstoffen auf Wänden in Anwesenheit von Plasmen, Seite 29
- $\langle\sigma v\rangle$  Reaktionsratenkoeffizient [ $m^3s^{-1}$ ], Seite 12
- SIMS Sekundärionen-Massenspektrometrie, Seite 23
- SOL Abschältschicht („scrape off layer“), Seite 9
- $t_{\text{ERO}}$  charakteristischer Zeitschritt für ERO (Dauer einer Iteration), Seite 25
- TEXTOR Tokamak Experiment in Jülich („Tokamak experiment for technology oriented research“), Seite 52
- $Y_{\text{chem}}$  chemische Erosionsausbeute von Kohlenstoff durch Wasserstoff, die sich aus den Anteilen  $Y_{\text{therm}}$ ,  $Y_{\text{surf}}$  und  $Y_{\text{C-C}}$  zusammensetzt, Seite 20
- $Y_{\text{eff}}$  effektive Erosionsausbeute der Simulationsrechnung (, d. h. mit der Oberflächenkonzentration gewichtete Erosionsausbeute der reinen Materialien), Seite 35
- $Y_{I\rightarrow J}$  physikalische Zerstäubungsausbeute/ Erosionsausbeute der Oberflächenkomponente  $J$  durch Projektile der Sorte  $I$  („Yield“), Seite 18

# Kapitel 1

## Einleitung

Es ist davon auszugehen, dass der Welt-Primärenergiebedarf bis 2030 um fast 60% steigt. Er wird nach dem Referenzszenario der IEA weiterhin zu über 80% mit fossilen Brennstoffen gedeckt werden, allen voran Öl, während Kohle als Energieträger die größten Wachstumsraten verzeichnen wird [Eco04]. Damit verbunden verschärfen sich schwerwiegende Probleme der Gesellschaft, für die Lösungen gefunden werden müssen:

- Längerfristig kommt es zur Verknappung der Energieträger, die schon innerhalb der nächsten Jahrzehnte zur Energieverteuerung führen kann, welche besonders die Entwicklungsländer daran hindert, die Lebensqualität ihrer Einwohner zu verbessern.
- Der CO<sub>2</sub>-Ausstoß, der maßgeblich für die globale Erwärmung der Erde während der vergangenen zwei Jahrhunderte und besonders der letzten fünfzig Jahre verantwortlich gemacht wird, steigt nach diesem Referenzszenario um 60%. Die Folgen sind unter anderem der Anstieg des Wasserspiegels der Weltmeere, vermehrte Extremwetterlagen und Dürren [UNE05].
- Die Abhängigkeit der Länder ohne oder mit zu wenig Erdölvorkommen von den Erdöl exportierenden Ländern - diese oft in politisch instabilen Regionen - bringt Konfliktpotenzial mit sich.

Um diesen Problemen entgegenzutreten, ist es unerlässlich, alle Möglichkeiten alternativer Energieversorgung optimal auszunutzen, da keine der bisher zur Verfügung stehenden Energiequellen und Energieumwandlungstechniken alleine eine nachhaltige Lösung des Energieversorgungsproblems garantieren kann.

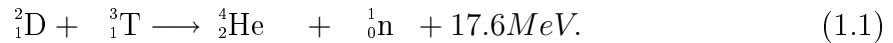
**Kontrollierte Kernfusion** könnte langfristig als bisher unerschlossene Primärenergiequelle einen wichtigen Beitrag leisten, da die für sie notwendigen Rohstoffe Deuterium und Lithium praktisch unerschöpflich gleichmäßig auf der Erde verteilt vorhanden sind und mit ihr keine Treibhausgase wie CO<sub>2</sub> ausgestoßen werden.

Potenzielle Risiken einer Freisetzung großer Mengen radioaktiven Materials können bei dem Betrieb eines Kernfusionskraftwerks prinzipiell ausgeschlossen werden: Der Fusionsreaktor benötigt immer nur einige Gramm Brennstoff und arbeitet ohne eine Kettenreaktion, die außer Kontrolle geraten könnte.

Bei der Fusion zweier Kerne zu einem schwereren Kern wird die überschüssige Bindungsenergie in Form von Bewegungsenergie der Reaktionsprodukte freigesetzt. Dies ist

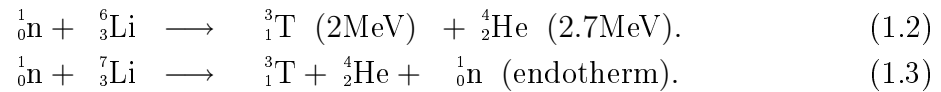
bis etwa zur Massenzahl 60 möglich, für die die Bindungsenergie pro Nukleon ein Maximum besitzt, während für große Massenzahlen der umgekehrte Prozess der Kernspaltung zu einer Freisetzung von Energie führt.

In der Sonne, die im Wesentlichen aus Protonen besteht, wird über den Proton-Proton-Zyklus Energie durch Kernfusion freigesetzt, indem über mehrere Schritte schließlich 4 Protonen zu einem Heliumkern verschmelzen. In einem Fusionsreaktor soll die Reaktion von Deuterium mit Tritium (DT-Reaktion) benutzt werden, da sie die bei weitem größte Reaktionsrate bei den Temperaturen, die in einem Fusionsreaktor realisiert werden, besitzt [Dol82]:



Die kinetische Energie von 17.6 MeV der Reaktionsprodukte verteilt sich entsprechend dem reziproken Massenverhältnis 1:4 auf Heliumkern und Neutron.

Dieser Reaktionsprozess besitzt allerdings auch Nachteile: Das hochenergetische Neutron, das zur Energiegewinnung genutzt werden muss, verursacht Strahlungsschäden in den Reaktorwänden und kann diese aktivieren. Das radioaktive Wasserstoffisotop Tritium (Halbwertszeit 12.4 Jahre) ist extrem flüchtig, kommt auf der Erde nur in vernachlässigbaren Spuren vor und muss deshalb aus Lithium mit Hilfe der Neutronen aus der Fusionsreaktion erbrütet werden:



Nur Reaktion 1.3 erzeugt auch ein Neutron, das für weitere Reaktionen zur Verfügung steht, um mit jeder Fusionsreaktion ausreichend Tritium erbrüten zu können.

Damit die Kerne fusionieren können, müssen sie sich nah genug kommen, so dass die kurzreichweitige anziehende starke Kernkraft wirksam wird. Dazu muss die elektrostatische Abstoßung der positiv geladenen Kerne (Coulombbarriere) überwunden werden. Dank des Tunneleffektes benötigen die Kerne dazu aber weniger Energie, als nach dem klassischen Verständnis nötig wäre. Für eine thermische Energieverteilung der Fusionspartner kommt noch hinzu, dass ein Bruchteil der Kerne eine viel höhere als die mittlere Energie besitzt. Die Wahrscheinlichkeit für eine DT-Reaktion ist bei  $\gtrsim 100$  Millionen Kelvin oder  $\gtrsim 10\text{keV}$  für den Betrieb eines Reaktors bereits groß genug<sup>1</sup>.

Bei diesen Temperaturen liegt das Brennstoffgemisch als vollständig ionisiertes Plasma vor, für das eine gute Wärmeisolation zur Umgebung hergestellt werden muss, damit die Plasmateilchen genügend Zeit haben, Fusionsreaktionen einzugehen, bevor sie wieder abkühlen. Diese Bedingung lässt sich mit der Energieeinschlusszeit  $\tau_E = E/P_L$  ausdrücken, dem Verhältnis aus eingeschlossener Energie  $E$  und Verlustleistung  $P_L$  durch Strahlung und Wärmetransport.

Von der Zündung des Fusionsplasmas redet man, wenn die Fusionsprozesse genügend Energie erzeugen, so dass sie sich selbst erhalten können und keine zusätzliche Heizung von außen erfolgen muss (d. h. die Leistungsverstärkung  $Q$ , das Verhältnis von

---

<sup>1</sup>Üblicherweise werden in der Plasmaphysik Temperaturen über die Boltzmannkonstante  $k_B \approx 8.610^{-5}\text{eV/K}$  mit  $E = k_B T$  in Elektronenvolt angegeben ( $1\text{eV} \hat{=} 11604\text{K}$ )

Fusionsleistung zu Heizleistung, ist unendlich). Dazu muss das *Lawson-Kriterium* erfüllt sein [Law57], welches berücksichtigt, dass nur ein Teil der Fusionsleistung das Plasma effektiv heizen kann. Für die DT-Reaktion mit gleicher Teilchendichte für D und T ( $n = n_D = n_T$ ) erhält man im Maximum der Reaktionsrate (30keV) bei optimaler Temperatur die Bedingung

$$n\tau_E \gtrsim 5 \cdot 10^{18} \text{m}^{-3}\text{s}. \quad (1.4)$$

In magnetisch eingeschlossenen Fusionsplasmen ist es wegen des maximal möglichen Plasmadrucks  $p = 3nk_B T$  angebracht, die Zündbedingung mit dem Tripelprodukt

$$n\tau_E T > 3 \cdot 10^{24} \text{m}^{-3}\text{seV} \quad (1.5)$$

zu formulieren. Die Herausforderung an die Fusionsforschung liegt darin, möglichst hohe  $n$ ,  $\tau_E$  und  $T$  zu realisieren.

Die Form des Torus hat sich für den magnetischen Einschluss bewährt. Ein rein toroidales Magnetfeld  $B_t$  würde jedoch zu keinem stabilen Plasmaeinschluss führen, da das Magnetfeld an der Innenseite des Torus am größten ist und nach außen abfällt. Dies erzeugt Kräfte, welche eine Ladungstrennung herbeiführen. Das sich aus der Ladungstrennung ergebende elektrische Feld wiederum würde eine für Ionen und Elektronen gleichgerichtete Kraft radial auswärts bewirken, welche den Plasmaeinschluss verhindert. Im helikalen Magnetfeld, dem die geladenen Plasmateilchen folgen, wird diese Ladungstrennung aufgehoben, so dass der direkte Verlust der Teilchen zur Wand abgewendet wird. Dieser Einschluss erlaubt den Aufbau hoher Plasmadichten und -temperaturen. Der Einschluss ist aber nicht perfekt, da durch Teilchenstöße, Ladungsaustausch und Turbulenzen ein bestimmter Plasmatransport senkrecht zum Magnetfeld entsteht. Dieser ist sogar nötig, damit das Helium wieder aus dem Plasma entfernt werden kann. Allerdings führt der Senkrechttransport auch zur unvermeidlichen Wechselwirkung des Plasmas mit der umgebenden Wand und ist somit verantwortlich für die Belastung der Wand des Vakuumgefäßes.

Das hierfür am weitesten entwickelte Einschlusskonzept stellt der **Tokamak** dar (russische Abkürzung für „toroidale Kammer mit Magnetspulen“). Der „Trick“ des Tokamaks besteht darin, das helikale Magnetfeld durch die Kombination aus Spulen und Plasmastrom zu generieren (Abbildung 1.1). Der induzierte Plasmastrom, der für den poloidalen Anteil des Magnetfeldes  $B_p$  verantwortlich ist, kann mit Hilfe des sich ändernden Stroms durch die Transformatorspulen eine begrenzte Zeit aufrechterhalten werden, wodurch die Plasmaentladungen zeitlich begrenzt sind.

Im alternativen Konzept des Stellarators wird das helikale Magnetfeld allein durch Spulen erzeugt. Dies hat den Vorteil des nicht-gepulsten Betriebes, allerdings auf Kosten einer wesentlich komplizierteren Spulenform [BGH<sup>+</sup>90].

Mit den heutigen Fusionsanlagen ist es gelungen, die Bedingungen für einen hinreichenden Plasmaeinschluss zu bestimmen. Der Tokamak JET in Culham (Großbritannien) erreichte ein Tripelprodukt von ca.  $8.7 \cdot 10^{23} \text{m}^{-3}\text{seV}$ , ausreichend für den „break even“ (Leistungsverstärkung  $Q = 1$ ) [KGG<sup>+</sup>99]. Für noch höhere Leistungsverstärkungen sind größere Anlagen notwendig. Deshalb wurde der Tokamak ITER (lateinisch für „der Weg“) geplant und eine Realisierung in Cadarache (Frankreich) beschlossen. ITER wird sich nach der Extrapolation heutiger Fusionsexperimente durch eine positive Energiebilanz ( $Q > 10$ ) und 500 MW Fusionsleistung auszeichnen. Damit würde die prinzipielle Mach-

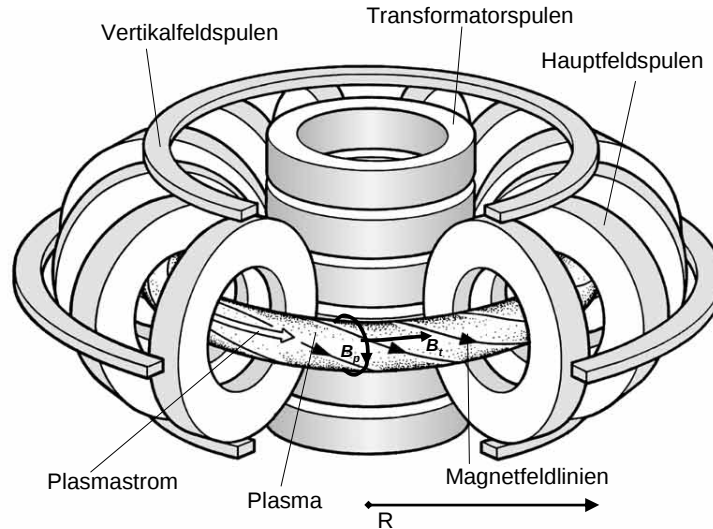


Abbildung 1.1: Schematischer Aufbau eines Tokamaks

barkeit der Fusion als Energiequelle demonstriert, während für einen wirtschaftlichen Dauerbetrieb weitere Fragestellungen geklärt werden müssen.

In diesem Zusammenhang ist eine der größten Herausforderungen in der Fusionsforschung die **Plasma-Wand-Wechselwirkung**. Durch sie wird letztlich entschieden, wie lange die erste Wand den Belastungen standhält und ob ein Reaktor wirtschaftlich betrieben werden kann. Wichtige Fragestellungen sind die mit Erosionsprozessen verbundene Lebensdauereinschränkung von Wandkomponenten und die Rückhaltung von Tritium in Wandkomponenten. Die Voraussagen zu ITER beruhen neben experimentellen Tests zu einzelnen Komponenten auf der Extrapolation der Daten heutiger Experimente. Schwierigkeiten treten vor allem auf, weil in ITER andere Materialkombinationen vorgesehen sind, wesentlich längere Plasmaentladungen stattfinden werden und andere Wärmeflüsse auf die Wand zu erwarten sind.

Für die Extrapolation werden zudem Computermodelle verwendet wie das **Monte-Carlo-Programm ERO**, das führend auf dem Gebiet der Simulationsrechnungen der Erosions- und Depositionsprozesse sowie der Tritiumrückhaltung in ITER ist [KBD<sup>+</sup>07]. Allerdings gibt es noch größere Unsicherheiten in diesen Simulationen, weil die während des Plasmabetriebs unvermeidliche Bildung gemischter Schichten aus den für die ITER-Wand vorgesehenen Elementen Wolfram, Kohlenstoff und Beryllium ([IPEG99], Abbildung 1.2) bisher nur sehr vereinfacht berücksichtigt wurde und weil auch die experimentelle Verifikation solcher Systeme nur ansatzweise erfolgte [KBB<sup>+</sup>06].

Die Wahl der Materialien für ITER ergibt sich aus den unterschiedlichen Anforderungen, die in ITER an die Wandkomponenten gestellt werden:

- Schon eine sehr geringe Akkumulation schwerer Elemente als Verunreinigung im Plasmazentrum führt zum Strahlungskollaps des Plasmas. Für den Hauptraum („main wall“) ist deshalb Beryllium (Be) vorgesehen. Beryllium ist zudem in der Lage, Sauerstoffrückstände aus dem Vakuumgefäß zu gettern.
- Die unteren Ablenkplatten („lower baffles“) und die „dome“-Region im Divertor im

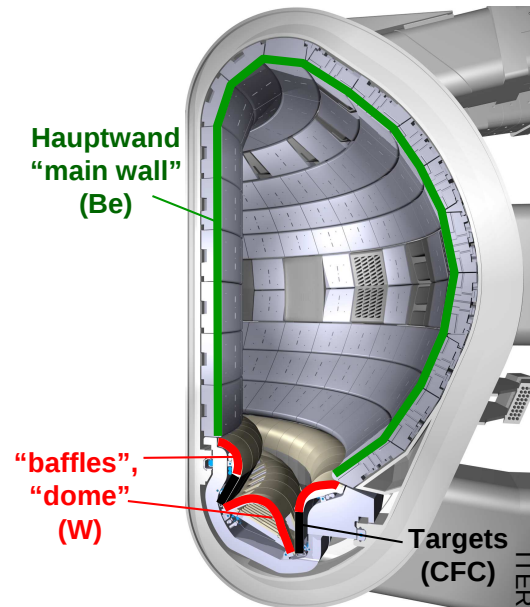


Abbildung 1.2: Poloidaler Querschnitt durch den Fusionsreaktor ITER: Materialwahl für die erste Wand

unteren Teil von ITER sollen aus Wolfram (W) bestehen, da man für diese Regionen ein Material mit niedrigen Zerstäubungsausbeuten benötigt, um eine akzeptable Lebensdauer der Komponenten zu erreichen; hier wird nämlich ein signifikanter Fluss von neutralem Wasserstoff erwartet, der bei Niedrig-Z-Materialien noch hohe physikalische Erosionsraten auslösen würde, während Wolfram sehr niedrige Netto-Erosionsraten aufweist.

- Regionen, die den höchsten Wärmeflüssen standhalten müssen („target“), sollen aus kohlenstofffaserverstärkten Kohlenstoffkacheln (CFC - „carbon fiber composite“) bestehen, da CFC nicht schmelzen kann, eine sehr hohe Sublimationstemperatur besitzt und selbst unter extremen Wärmelasten keine Verformung zeigt. Sonst könnte wegen des Verlustes von abschmelzenden Schichten eines metallischen Targets (so genannter „melt layer loss“) dieses durch kurzzeitige Belastungen zerstört werden. Für den Betrieb von ITER kann man solche kurzzeitigen Belastungen aber nicht ausschließen, wenn man bei der Erforschung der möglichen Plasmaszenarien für einen zukünftigen Fusionsreaktor mehr Spielraum haben will.

Kurzzeitige Belastungen können zum Beispiel durch Disruptionen und große Randschicht-Moden entstehen. Bei ersteren bricht das Plasma zusammen und die gesamte Energie von etwa 1 GJ wird innerhalb kurzer Zeit (etwa einer Millisekunde) an die Wand und besonders das Target abgegeben. Große Randschicht-Moden (Typ 1 ELMs - „edge localised modes“) können durch den Kollaps einer lokalen instabilen Mode in der Randschicht des Plasmas einen hohen Anteil der gespeicherten Energie (bis zu 10% und mehr) innerhalb von weniger als 1ms auf das Target abgeben.

Kohlenstoff kann zwar solchen kurzzeitigen Belastungen standhalten, besitzt aber den Nachteil hoher physikalischer Zerstäubungsausbeuten und weist außerdem chemische Erosion in Kontakt mit Wasserstoff auf. Als Folge der Erosion können Kohlenwasserstoffe durch das Plasma an weniger belastete, entfernte Orte transportiert werden und

dort amorphe Kohlenwasserstoffschichten bilden. Insbesondere diese Schichten speichern dann neben Deuterium auch das radioaktive Wasserstoffisotop Tritium, das in ITER als Brennstoff dient [III99]. Tritium wird aber auch in Berylliumschichten und durch andere Prozesse wie Diffusion und direkte Implantation eingelagert. Der Tritium-Inhalt im Vakuumgefäß ist streng limitiert, damit für den Fall einer unwahrscheinlichen Freisetzung von Tritium aus der Anlage niemand gefährdet wird. Befinden sich mehr als einige hundert Gramm Tritium im Vakuumgefäß, muss das Tritium auf Kosten der Verfügbarkeit des Experiments entfernt werden.

Das Computerprogramm ERO hat bisher solche Materialmischsysteme nur mit sehr einfachen Annahmen behandelt. Diese Arbeit zielt darauf ab, die Simulation **mehrkomponentiger Oberflächenschichten** wesentlich zu verbessern. Dabei geht es zunächst um das Zusammenspiel der Elemente Kohlenstoff, Wolfram und Wasserstoff mit dem letztendlichen Ziel, ein generelles Simulationswerkzeug zu entwickeln, mit dem auch alle in ITER oder anderen zukünftigen Fusionsanlagen eingesetzten Materialien hinreichend präzise behandelt werden können.

Die Experimente am **Tokamak TEXTOR** in Jülich spielen bei der Weiterentwicklung des Simulationsprogramms eine Schlüsselrolle. Es wurden gezielt Experimente zur Bestimmung der Deposition von Kohlenstoff auf Wolframoberflächen im Vergleich mit der auf Graphitoberflächen durchgeführt. Diese Daten bilden dann die experimentelle Grundlage zur Überprüfung der Resultate des Simulationsprogramms.

Die Erweiterung des Simulationsprogramms besteht im Wesentlichen in der Kopplung von ERO mit dem Monte-Carlo-Programm **SDTrimSP** [ME88], das den Transport von Ionen durch Festkörper berechnet und dabei hilft, die Schichtbildung für unterschiedliche Materialsysteme zu simulieren. Die Berücksichtigung der dynamischen Änderungen der Konzentrationstiefenprofile im Festkörper, welche durch SDTrimSP beschrieben werden, erlaubt eine wesentlich genauere Bestimmung der physikalischen Zerstäubungs-, Reflexions- und Implantationsprozesse. Für die Integration der komplexen Prozesse der chemischen Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff sowie der Haftwahrscheinlichkeit für Kohlenwasserstoffe und deren Radikale in SDTrimSP spielt die Einbeziehung empirischer experimenteller Daten aus dem TEXTOR-Experiment eine große Rolle.

## Gliederung

Im folgenden Kapitel werden einige wesentliche Grundlagen der Plasma-Wand-Wechselwirkung erläutert. Als erstes wird die Plasmarandschicht beschrieben und daran anschließend die Wechselwirkung von Ionen mit Festkörpern erläutert. Kapitel 3 erklärt darauf aufbauend die Monte-Carlo-Programme ERO und SDTrimSP. Kapitel 4 beschreibt die Kopplung von ERO mit SDTrimSP, nachdem zunächst die Modifikationen von SDTrimSP erläutert werden, die durchgeführt worden sind, um es an die speziellen Bedingungen der Plasma-Wand-Wechselwirkung im Tokamak anzupassen. Außerdem werden erste idealisierte Test-Simulationen besprochen, die nötig sind, um die Simulationen zu zwei Experimenten in TEXTOR zu verstehen, die sich in Kapitel 5 anschließen. Dieses beschreibt die experimentellen Bedingungen in TEXTOR und die Plasmabedingungen sowie die experimentellen Ergebnisse, die simuliert werden. Im letzten Teil dieses Kapitels werden die Schlussfolgerungen aus diesem Vergleich gezogen und mit anderen Experimenten, denen dieselbe Fragestellung zugrunde liegt, in Beziehung gesetzt. Das letzte Kapitel fasst

die wichtigsten Ergebnisse und Schlussfolgerungen der Arbeit zusammen. Es werden Möglichkeiten beschrieben, wie durch die Kopplung von ERO mit SDTrimSP wesentliche Experimente der Plasma-Wand-Wechselwirkung in TEXTOR und anderswo besser verstanden und die Vorhersagen für ITER verbessert werden können.

# Kapitel 2

## Grundlagen der Plasma-Wand-Wechselwirkung

Die Plasma-Wand-Wechselwirkung im Fusionsreaktor wird von den Transportprozessen in der Randschicht des Plasmas vermittelt. Einerseits treffen Wärme- und Teilchenflüsse auf die Wand, verändern die Oberfläche und tragen sie ab. Andererseits verunreinigt das erodierte Material das Plasma und sammelt sich an anderen Stellen zu unerwünschten Schichten, in denen der radioaktive Brennstoff eingelagert wird. Kurzzeitig höhere Belastungen z. B. durch Turbulenzen und Instabilitäten können die Wand bis zur Sublimation bzw. Schmelze erhitzen. Flüsse von Neutronen aus den DT-Fusionsreaktionen mit der Energie von 14.1 MeV aktivieren und verändern die Wandmaterialien, so dass diese verschlechterte thermische und mechanische Eigenschaften erhalten.

Um die Wechselwirkung eines Plasmas mit einer begrenzenden Wand beschreiben zu können, müssen Erosions- und Reflexionsprozesse sowie Depositionsprozesse der Teilchen aus dem Plasma berücksichtigt werden. Diese Prozesse hängen von den Eigenschaften des Plasmas ab, so dass eine gute Kenntnis seines Verhaltens in der Nähe der Wand eine wichtige Voraussetzung ist, um die Plasma-Wand-Wechselwirkung zu verstehen. Vom Plasma hängt auch der Transport von Verunreinigungen ab, die von der Wand in das Plasma gelangen. Das wird im ersten Teil dieses Kapitels erläutert.

Der zweite Teil behandelt die physikalischen und chemischen Wechselwirkungsprozesse, die auftreten, wenn einzelne Teilchen auf einen Festkörper treffen. Die Physik der Wechselwirkung von Teilchen und Festkörper kann sehr gut mit Zwei-Körper-Kollisionsprozessen angenähert werden. Diese Vorgehensweise wird im Abschnitt 2.2 erläutert. Chemische Erosion durch die Bildung von Kohlenwasserstoffen orientiert sich stärker an empirischen Erkenntnissen (2.2.2) und wird besonders bei höheren Oberflächentemperaturen ( $> 700$  K) und niedrigen Einfallsenergien ( $< 100$  eV) relevant bzw. sogar dominant ( $\sim 1000$  K und  $< 10$  eV). Bei noch höheren Oberflächentemperaturen nimmt die chemische Erosion schließlich wieder ab.

Veränderungen der Wand durch Kurzzeitbelastungen, wie die schon genannten Disruptionen, ELMS oder auch vertikale Verschiebungen der Plasmalage (VDE, „vertical displacement events“), liegen außerhalb des Rahmens dieser Arbeit.

## 2.1 Grundlagen der Plasmarandschicht

### 2.1.1 Beschreibung der Abschälschicht

Eine nützliche Beschreibung des Randschichtplasmas erfolgt in einem ein-dimensionalen Modell, wobei man die toroidale und poloidale Krümmung im Tokamak (Winkel  $\phi$  bzw.  $\theta$ ) vernachlässigt. Dies wird in Abbildung 2.1.1 verdeutlicht. Die Koordinaten und Bezeichnungen werden im Folgenden definiert.  $R = R_0$  ist der große Radius und  $r = a$  der kleine Radius des Torus. Von dem Bereich, in dem die Magnetfeldlinien in sich und in den so definierten Flussflächen geschlossen sind, also innerhalb der letzten geschlossenen Flussfläche (LCFS - „last closed flux surface“ oder auch Separatrix), werden Teilchen und Energie in den Bereich der Abschälschicht (SOL - „scrape-off layer“) transportiert.

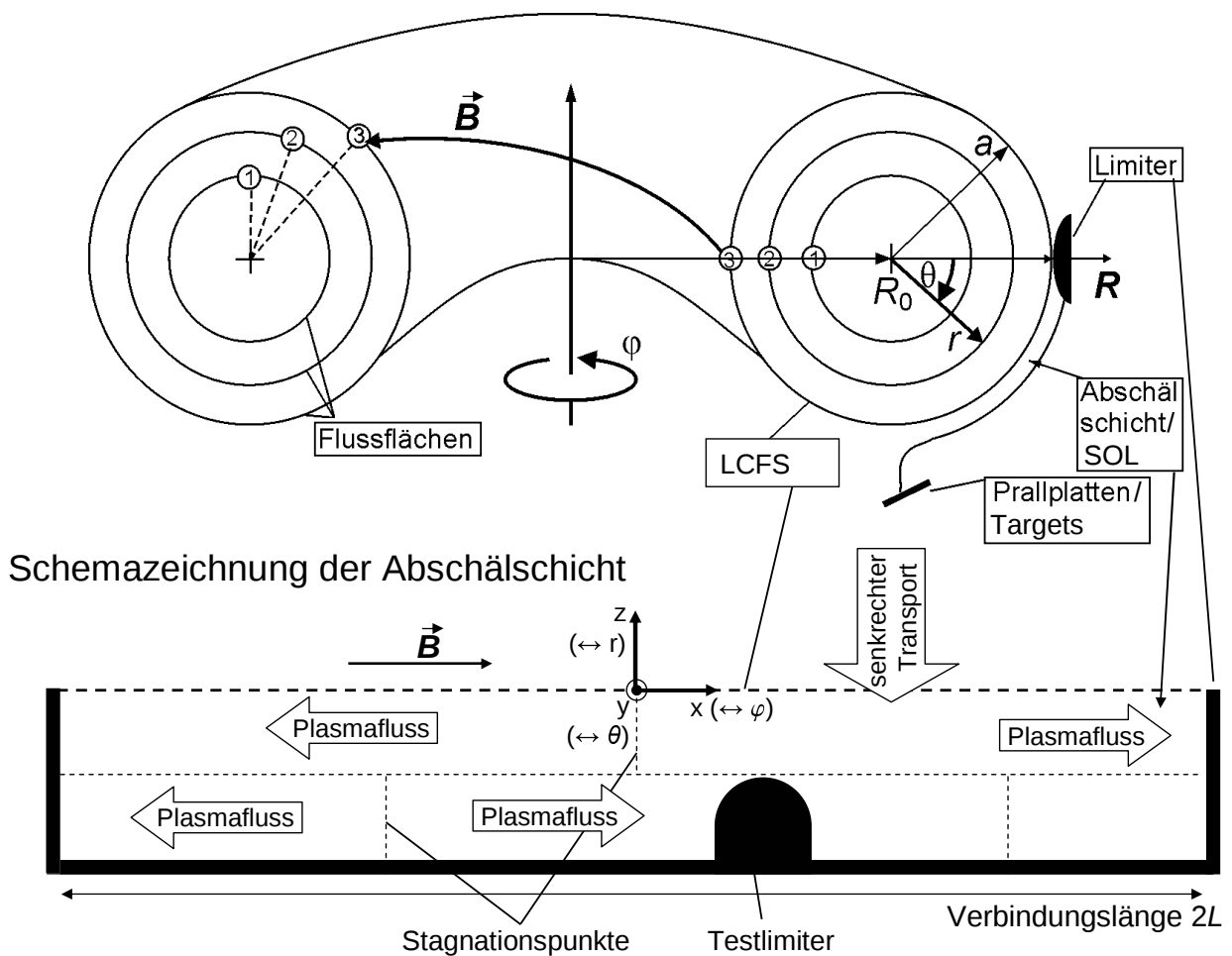


Abbildung 2.1: Schemazeichnung des Plasmas im Tokamak und in der Abschälschicht. (Befindet sich ein Testlimiter in der Abschälschicht, so bilden sich neben der Stagnationsstelle bei  $x = 0$  weitere Stagnationspunkte jeweils in der Mitte zwischen den Limitern aus.)

Dieser Transport senkrecht zum Magnetfeld hat Ursachen, die theoretisch noch nicht alle verstanden sind. Im klassischen Verständnis ist dies ein diffusiver Prozess, der nur durch Teilchenstöße zwischen Elektronen und Ionen auf ihren Gyrationen um die

Magnetfeldlinien getrieben wird. Durch den Magnetfeldgradienten des Tokamaks ( $B_t$  nimmt mit  $1/R$  nach außen hin ab) erhält man aber außerdem konvektive - so genannte neoklassische - Teilchenflüsse. Zusätzlich beobachtet man anomale Diffusion, die sich durch die Instabilität des Plasmas erklären lässt [Wes04].

Außerhalb der LCFS treffen alle Magnetfeldlinien auf die das Plasma begrenzenden Wandelemente, den Limiter oder das Target im Divertor. Die halbe Verbindungslänge entlang des  $\vec{B}$ -Feldes zwischen beiden Aufpunkten der Feldlinie auf die Wand wird mit  $L$  bezeichnet. Dort werden die geladenen Plasmateilchen neutralisiert, so dass die Wand als perfekte Senke betrachtet wird. In diesem Bild fließt das Plasma für  $x < 0$  in negative Richtung und für  $x > 0$  in positive Richtung;  $x = 0$  wird Stagnationspunkt genannt, bei dem die Plasmaflussgeschwindigkeit Null ist. In dem vereinfachten Modell geht man davon aus, dass die einzige Wasserstoffquelle innerhalb der LCFS liegt - Ionisation in der SOL wird ausgeschlossen.

Entlang des Magnetfeldes in  $x$ -Richtung können sich die Teilchen frei bewegen. Die mobileren Elektronen erreichen die Wand früher als die Ionen, so dass sich ein elektrisches Potenzial  $V$  aufbaut, dem die Kraft aus dem Druckgradienten entgegenwirkt. Dieser ergibt sich unter isothermen Bedingungen aus der Abnahme der Dichte, je näher man sich auf die Oberfläche zubewegt. Aus diesem Kräftegleichgewicht folgt, dass der Dichteverlauf der Elektronen mit einer Boltzmann-Gleichung beschrieben werden kann:

$$en_e E = kT_e \frac{dn_e}{dx}. \quad (2.1)$$

Das resultierende elektrische Feld  $E$  wird durch die freien Ladungsträger im Plasma abgeschirmt und reicht nur in der Größenordnung der Debye-Länge

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 kT_e}{n_e e^2}} \quad (2.2)$$

in das Plasma hinein<sup>1</sup>.  $\epsilon_0 \approx 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ CV}^{-1} \text{ m}^{-1}$  bezeichnet die Dielektrizitätskonstante. Diese dünne Schicht wird als Randschicht bezeichnet und das elektrische Potenzial  $V_{rs}$  der Wand als Randschicht-Potenzial [Sta00, S. 79]:

$$V_{rs} = \frac{kT_e}{2e} \ln \left[ \left( 2\pi \frac{m_e}{m_i} \right) \left( 1 + \frac{T_i}{T_e} \right) \right]. \quad (2.3)$$

Das Bohm-Kriterium besagt, dass die mittlere Flussgeschwindigkeit der Plasmateilchen an der Randschichtkante bei  $x = L$  Schallgeschwindigkeit erreicht:

$$c_s = \sqrt{\frac{k(T_e + T_i)}{m_e + m_i}}. \quad (2.4)$$

Der genaue Verlauf der Machzahl als normierte Flussgeschwindigkeit  $M(x) = \frac{v}{c_s}$  in der SOL ergibt sich, wenn in der Impulserhaltungsgleichung für die Ionen das elektrische

---

<sup>1</sup>Beispiel für einen typischen Wert in der Randschicht eines Tokamak:  $T_e = 20 \text{ eV}$ ,  $n_e = 10^{19} \text{ m}^{-3}$ :  $\lambda_D \approx 10^{-5} \text{ m}$ .

Feld mit Gleichung 2.1 ersetzt und dann integriert wird. Dazu benötigt man eine Quellverteilung für die Ionen. Nimmt man entlang  $x$  eine konstante Quelle für den Senkrechttransport  $\Gamma_\perp$  in die SOL an, erhält man:

$$M(x) = \frac{L}{x} - \sqrt{\left(\frac{L}{x}\right)^2 - 1}. \quad (2.5)$$

Aus der Impulserhaltung lässt sich damit auch der Dichteverlauf bestimmen:

$$n(x) = \frac{\Gamma_\perp x}{c_s M(x) L}. \quad (2.6)$$

Mit diesem Dichteverlauf und mit Hilfe von 2.1 ist klar, dass die Abschirmung des elektrischen Feldes durch die freien Ladungsträger des Plasmas innerhalb der SOL entlang den Feldlinien nicht perfekt ist. Man erhält das elektrische Feld der Vorschicht

$$E_\parallel(x) = \frac{k_B T_e}{e} \left( \frac{M(x)}{\sqrt{\left(\frac{L}{x}\right)^2 - 1}} \right) \quad (2.7)$$

mit dem zugehörigen Vorschichtpotenzial

$$V_{vs}(x) = \int_0^x E_\parallel(x) dx, \quad (2.8)$$

das auf den Wert

$$V_{vs}(L) = \frac{k_B T_e}{e} \ln(2) \quad (2.9)$$

an der Randschichtkante bei  $\approx L$  abfällt. Das Vorschichtpotenzial beschleunigt die Ionen und verändert deren Geschwindigkeitsverteilung, die weit entfernt von der Wand noch eine Maxwellverteilung war.

Zusätzlich zu diesem parallelen elektrischen Feld erhält man auch ein senkrechtes elektrisches Feld, da die Elektronentemperatur  $T_e(r)$  in radialer Richtung abnimmt:

$$E_\perp(r, x) = -\frac{d}{dr} V_{vs} = -\frac{k_B}{e} \frac{dT_e(r)}{dr} \cdot f(x), \quad (2.10)$$

mit  $f(x) = \ln(2(L + \sqrt{L - x}) - \ln(4L))$ .

### 2.1.2 Verunreinigungstransport

Betrachtet man einzelne geladene Teilchen, bewegen sie sich im elektromagnetischen Feld des Fusionsexperimentes gemäß der Lorentzkraft auf spiralförmigen Trajektorien um die Bahn ihres Gyrationenzentrums. Je nach Form des elektrischen und magnetischen Feldes  $\vec{E}$  bzw.  $\vec{B}$  weicht die Bewegung des Gyrationenzentrums von der Richtung des magnetischen Feldes  $\vec{B}$  ab: ein Anteil  $E_\perp$  senkrecht zu  $\vec{B}$  führt zu einer Drift in Richtung  $\vec{E} \times \vec{B}$ . Ein sich räumlich änderndes magnetisches Feld ( $\nabla \vec{B} \neq 0$ ) beispielsweise führt zu einer Drift in  $\vec{B} \times \nabla \vec{B}$  Richtung. Allgemein lässt sich zeigen, dass jede zusätzliche Kraft  $\vec{F}$ , die auf ein Plasmateilchen wirkt, zu einer Drift des Teilchens in Richtung  $\vec{F} \times \vec{B}$  führt [Che84].

In der kinetischen Beschreibung des Plasmas geht man für jede Teilchenspezies von einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$  im Phasenraum aus und stellt die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (2.11)$$

für sie auf.  $\vec{F}$  bezeichnet die Kraft, die auf die Teilchen wirkt, in diesem Fall also die Lorentzkraft  $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ . Die zeitliche Ableitung von  $f$  durch Stöße zwischen den Teilchen  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$  kann für ein ausreichend heißes Plasma oft vernachlässigt werden ( $\rightarrow$  Vlasov-Gleichung), aber in der Randschicht müssen Zwei-Teilchen-Coulombstöße berücksichtigt werden und damit erhält man die Fokker-Planck-Gleichung [Che84].

Für eine kleine Verunreinigungskonzentration  $\rho$ , das heißt das Verhältnis der Verunreinigungsdichte zur Gesamtteilchendichte ist viel kleiner als 1, lässt sich der Einfluss der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Verunreinigungen auf alle anderen *maxwell-verteilten* Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen des *Hintergrundplasmas* vernachlässigen. Man spricht dann von der *Testteilchennäherung*.

Durch Einsetzen der Maxwell-Verteilungsfunktion erhält man drei *klassische Relaxationszeiten*, welche die charakteristische Zeit angeben, wann ein monoenergetischer Teilchenstrahl in Richtung  $\vec{u}$  ( $u = |\vec{u}|$ ) eine maxwellverteilte isotrope Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion mit der Temperatur des Hintergrundplasmas besitzt. Dies sind die Abbremszeit  $\tau_s = -u/(du_{||}/dt)$  und die Ablenkzeit  $\tau_d = u^2/(du_{\perp}^2/dt)$ , welche die Zeit für eine Geschwindigkeitsänderung parallel und senkrecht zu  $\vec{u}$  charakterisieren, und die damit verbundene Energieaustauschzeit  $\tau_e = E/(dE/dt)$ .

Durch den Temperaturgradienten der Ionentemperatur in der Abschälsschicht parallel zum Magnetfeld ( $\nabla T_{i,||} \neq 0$ ) erfahren Verunreinigungsteilchen als Korrektur zu der oben getroffenen Annahme isothermaler Bedingungen zusätzlich eine Thermokraft [NSWL84] in Richtung des Gradienten  $\vec{F}_{\text{thermo}} \propto \nabla T_{i,||}$ .

### 2.1.3 Atom- und Molekülphysik

#### Ionisation und Dissoziation

Erodierte oder reflektierte Teilchen (im Allgemeinen ungeladene Atome oder Kohlenwasserstoffmoleküle) starten von der Oberfläche und können auf dem Weg durch das Plasma ionisiert oder dissoziiert werden. Die Rekombination mit den Elektronen des Plasmas spielt in den in dieser Arbeit betrachteten Situationen mit niedrigen Dichten ( $< 10^{20} \text{ m}^{-3}$ ) und hohen Temperaturen von mehreren eV keine Rolle.

Die Beschreibung der Ionisations- und Dissoziationsprozesse, die meist durch Stöße mit den Plasmaelektronen ausgelöst werden, erfolgt am einfachsten über Reaktionsratenkoeffizienten  $\langle \sigma v \rangle$ . Man erhält sie aus dem Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  für die Reaktion durch eine Integration über die zur Elektronentemperatur korrespondierende Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung  $f_M(v)$ :

$$\langle \sigma v \rangle = \int dv f_M(v) \sigma. \quad (2.12)$$

Die zeitliche Änderung der Teilchendichte  $n_0$  von Atomen oder Molekülen (eines

gegebenen Ladungszustandes) ist dann

$$\frac{dn_0}{dt} = -n_0 n_e \langle \sigma v \rangle \quad (2.13)$$

und man erhält

$$n_0(t) = n_0(t=0) e^{-t n_e \langle \sigma v \rangle} = n_0(t=0) e^{-t/\tau}. \quad (2.14)$$

$\tau = (n_e \langle \sigma v \rangle)^{-1}$  wird Ionisations- bzw. Dissoziationszeit genannt.

Bei der Ionisation werden durch Zuführung der Ionisationsenergie Valenzelektronen vom Atomkern abgetrennt. Die Energie dazu stammt vornehmlich aus Stößen mit Plasmaelektronen. Stöße mit Plasmaionen führen eher durch Ladungsaustauschprozesse zur Ionisation der Verunreinigungen, spielen aber wegen ihrer nicht resonanten Natur im Stoß mit Wasserstoff und der damit verbundenen geringen Wahrscheinlichkeit [Sta00, S. 37] keine große Rolle, so dass sie in den hier betrachteten Fällen vernachlässigt werden können. Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  für Ionisation kann theoretisch hergeleitet und experimentell bestimmt werden. Eine erste gute Näherung für  $\sigma$  liefert die Lotz-Formel [Lot67], während zu den wichtigsten Atomen für die Fusionsforschung mit der „atomic data and analysis structure“ (ADAS, [Sum02]) genauere Daten vorliegen.

Kohlenwasserstoffmoleküle (Methan  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CD}_4$  oder auch höhere Kohlenwasserstoffe  $\text{C}_x\text{H}_y$ ,  $\text{C}_x\text{D}_y$ ) zeigen Dissoziation, die Aufspaltung des Moleküls in Radikale bzw. seine atomaren Bestandteile. Für alle möglichen Reaktionen  $((e^- \text{ oder } p^+) + \text{CH}_x \longrightarrow \text{CH}_y + \dots, \text{ mit } 0 \leq y < x \leq 4)$  liegt wiederum ein Ratenkoeffizient vor [EL87, JR02, Rei06]. Bei einer Dissoziation ändern sich die Energie und der Betrag des Impulses der Kohlenwasserstoffmoleküle entsprechend der Erhaltungssätze für Impuls und Energie.

## Linienstrahlung

Im Randschichtplasma befindet sich die Anregung einer Teilchenspezies mit der Dichte  $n_k$  durch Elektronenstöße  $\langle \sigma v_e \rangle$  mit dem Übergang auf niedrigere Energieniveaus durch Strahlung im Gleichgewicht (Korona-Modell). Damit erhält man die Anzahl der emittierten Photonen  $\varepsilon$  pro Volumen und Zeit für eine bestimmte Linie über

$$\varepsilon = \frac{B_{ij}}{4\pi} n_k n_e \langle \sigma v \rangle. \quad (2.15)$$

$B_{ij} = A_{ij} / \sum_{j \leq i} A_{ij}$  bezeichnet das Verhältnis der Übergangswahrscheinlichkeit  $A_{ij}$  zu der Summe der Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen Übergänge [Pos04].

Andere Anregungsprozesse können über einen effektiven Ratenkoeffizienten  $\langle \sigma v \rangle_{\text{eff}}$  zusammengefasst werden, der sowohl theoretisch als auch experimentell bestimmt werden kann und auch über ADAS [Sum02] zur Verfügung steht.

### 2.1.4 Messmethoden der Plasmadiagnostik

Die Messmethoden, um die Plasmarandschicht zu charakterisieren, sind vielfältig. Es finden nur solche Erwähnung, die bei der Auswertung der Experimente eine wesentliche Rolle gespielt haben.

### Thermische Heliumatomstrahl-Diagnostik

Zur Bestimmung der Elektronentemperatur und -dichte  $T_e, n_e$  steht an TEXTOR ein thermischer Heliumatomstrahl zur Verfügung. Dazu werden an der Mittelebene Heliumatome ( $E_{\text{kin, He}} \approx 0.1\text{eV}$ ) über eine Düse in das Plasma eingelassen. Durch Elektronenstöße werden die Heliumatome zur Aussendung von Linienstrahlung verschiedener Wellenlängen angeregt. Senkrecht zur Strahlausbreitung misst man orts aufgelöst die Intensität dieser Linienstrahlung. Die Verhältnisse einzelner Linienintensitäten reagieren empfindlich auf eine Temperaturänderung, andere auf eine Dichteänderung. Dies liegt an den unterschiedlichen zugrunde liegenden Mechanismen, welche die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Energieniveaus bestimmen (spinverbotene/spinerlaubte Elektronenstoßanregung, Elektronenstoß- und Strahlungsabregung). Das entsprechende Linienintensitätsverhältnis lässt sich damit über die Aufstellung eines geeigneten Stoß-Strahlung-Modells direkt in Temperatur bzw. Dichte umrechnen.

### Spektroskopie

Den wichtigsten Hinweis auf die Freisetzung von Verunreinigungen in das Plasma liefert die Spektroskopie zur Messung der Intensität der Linienstrahlung des Plasmas. Filter, die das Licht nur in einem sehr beschränkten Wellenlängenbereich passieren lassen, erlauben es, die zweidimensionale Verteilung der Lichtemission während einer Plasmaentladung zu beobachten. Mit Hilfe einer Kallibration der Kamera an einer Lichtquelle bekannter Intensität lässt sich die Intensität auch quantitativ bestimmen.

Eine Schwierigkeit in der Spektroskopie liegt in der Interpretation der Messdaten, die sich aus dem komplexen Zusammenspiel der Plasmatemperatur und -dichte sowie der Ratenkoeffizienten für Ionisations- und Strahlungsübergänge und schließlich der oft gesuchten Größe der Teilchenflüsse ergeben.

## 2.2 Wechselwirkung von Plasmateilchen mit Festkörpern

Schnelle Teilchen, d. h. Ionen oder Atome mit Energien vom eV- bis in den MeV-Bereich hinein, die in Festkörper eindringen, werden an den abgeschirmten Coulombpotenzialen der Festkörperatomkerne gestreut und erfahren eine Richtungs- und Energieänderung. Zudem verlieren die Teilchen durch inelastische Streuung an Elektronen Energie. So werden sie schließlich entweder gestoppt und damit implantiert oder sie verlassen den Festkörper wieder durch Reflexion bzw. - im Falle sehr dünner Festkörper - indem sie schließlich durch ihn transmittiert werden. Zusätzlich werden Festkörperatome durch die Stöße von ihren Gitterplätzen losgelöst, so dass sie weitere Atome treffen und sich Stoßkaskaden entwickeln können. Angestoßene Atome, die den Festkörper verlassen, werden zerstäubt und tragen damit zur Erosion bei.

Es haben sich zwei Möglichkeiten etabliert, diese Prozesse zu beschreiben: In der so genannten Methode der Molekulardynamik werden die Newton'schen Bewegungsgleichungen für alle Festkörperatome in einer definierten Umgebung des Projektils aufgestellt, wobei zwischen den Teilchen oft konservative Kräfte angenommen werden,

die mittels Potenzialen beschrieben werden können. Die sich ergebenden gekoppelten Differentialgleichungen können dann numerisch gelöst werden.

$$m\ddot{r} = F(r; r_1; r_2; \dots; r_m) = \nabla\phi \quad (2.16)$$

Jedes Teilchen trägt die Parameter Ort  $r(t)$ , Geschwindigkeit  $\dot{r}(t)$  und Beschleunigung  $\ddot{r}(t)$ . Der größte Nachteil dieser Methode ist, dass sie vor allem für große Energien (einige 10eV) sehr rechenintensiv ist, da dann sehr kleine Zeitschritte verwendet werden müssen. Außerdem wird die Beschreibung der Potenziale bei den kleinen Abständen, die dann erreicht werden, zunehmend unsicher [AR03].

### Zwei-Körper-Stoßprozesse

Eine weitere Methode berücksichtigt bei der Berechnung der Stoßkaskaden immer nur Kollisionen zwischen zwei Teilchen (BCA - „Binary Collision Approximation“). Das Projektil mit der Masse  $M_1$  bewegt sich dabei mit der Geschwindigkeit  $v_0$  und der Energie  $E_0 = \frac{1}{2}M_1v_0^2$  auf das ruhende Festkörperatom der Masse  $M_2$  zu. Zusätzlich verlieren die Projektile Energie aufgrund der inelastischen Wechselwirkung mit den Elektronen. Wegen der kleinen Elektronenmasse kann aber eine Änderung der Bewegungsrichtung der Projektile dabei vernachlässigt werden.

Die maximale Energie, die von einem Stoßpartner auf den anderen übergeben werden kann, ist genau im zentralen Stoß der Stoßpartner gegeben durch

$$E_M = \frac{4A}{(1+A)^2}E_0 \equiv \gamma E_0, \quad A = \frac{M_1}{M_2}. \quad (2.17)$$

Durch die Erhaltung des Drehmoments und ein Wechselwirkungspotenzial  $V(r)$ , das nur vom Abstand  $r$  der Stoßpartner abhängt, lässt sich die Dimensionalität des Streuproblems reduzieren - der Streuvorgang spielt sich in einer Ebene ab. Man führt Polarkoordinaten  $(r, \varphi)$  (Abb. 2.2) ein und bekommt mit der Erhaltung der (Relativ-)Energie  $E_r$  im Schwerpunktsystem

$$\frac{\mu}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + V(r) = E_r, \quad (2.18)$$

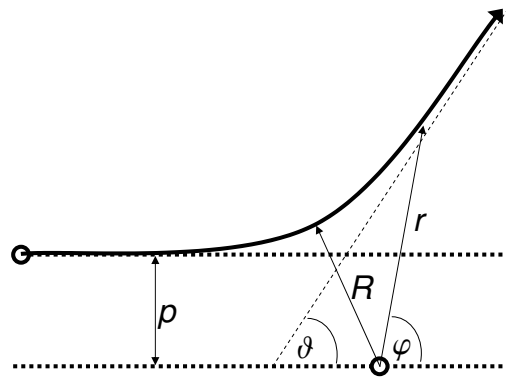
wobei  $\mu = M_1M_2/(M_1 + M_2)$  die reduzierte Masse der Stoßpartner ist. Mit der Erhaltung des Drehimpulses  $r^2\dot{\varphi} = -v_0p$  ( $p$  Stoßparameter) und mit  $E_r = \frac{1}{2}\mu v_0^2$  ergibt sich

$$\dot{r} = \pm v_0 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2}} =: \pm v_0 g(r). \quad (2.19)$$

Zusammen mit der Drehimpulserhaltung erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dr} &= \pm \frac{p}{r^2 g(r)} \\ \Rightarrow \int_{\pi}^{\vartheta} d\varphi &= 2p \int_{\infty}^R \frac{1}{r^2 g(r)} dr, \end{aligned} \quad (2.20)$$

wobei  $R$  durch  $g(R) = 0$  definiert wird.  $R$  bezeichnet den minimalen Abstand der beiden Teilchen voneinander. Es gilt jeweils das Pluszeichen für die Bewegung, bevor  $R$  erreicht

Abbildung 2.2: Schema des Zwei-Körper-Stoßprozesses in Polarkoordinaten  $(r, \varphi)$ .

wurde, oder das Minuszeichen für die Bewegung danach. Das bedeutet, die Bewegung ist symmetrisch und die Integration kann auf  $\infty$  bis  $R$  beschränkt werden. Damit erhält man durch Wahl eines geeigneten Potentials und Integration den gesuchten Streuwinkel  $\vartheta$ , der schließlich noch in das Laborsystem transformiert werden muss. Der inelastische Energieverlust durch die Streuung äußert sich nur in einer Reduzierung der kinetischen Energie, ohne den Streuwinkel zu ändern (quasi-elastische Streuung).

Gängige Potenziale zur Beschreibung des Streuproblems sind abgeschirmte Coulomb-Potenziale der Form

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a), \quad (2.21)$$

wobei  $a$  die Abschirmlänge ist.  $\Phi(r/a)$  wird häufig mit

$$\Phi(r/a) = \sum_{i=1}^n c_i e^{-d_i r/a}, \quad \sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1 \quad (2.22)$$

und den Konstanten  $c_i$ ,  $d_i$  angenähert. Damit wird berücksichtigt, dass die positive Kernladung für  $r \gg a$  durch die Elektronenwolke abgeschirmt wird.  $a$  liegt gewöhnlich in der Größenordnung des Bohr'schen Radius  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$ .

Man betrachtet verschiedene spezifische Energien, welche die Bahn der Teilchen beeinflussen:

**Abschneideenergie  $E_F$**  Numerische Rechnungen von Teilchentrajektorien werden abgebrochen, sobald die Teilchenenergie  $E_c$  kleiner als  $E_F$  wird, um in endlicher Rechenzeit zu einem Ergebnis zu kommen. Wird  $E_F$  kleiner als die Oberflächenbindungsenergie  $E_B$  gewählt, werden Zerstäubungsausbeuten richtig wiedergegeben.

**Gitterbindungsenergie  $E_G$**  Um ein Festkörperatom von seinem Gitterplatz loszulösen, muss die Gitterbindungsenergie  $E_G$  aufgewendet werden, die nur sehr ungenau bekannt ist. Um eine Gitterlücke zu produzieren, müssen ein bis mehrere eV aufgewendet werden, während zur Reproduktion von Rechnungen der Molekulardynamik mit der Zwei-Körperstoß-Näherung Werte von weniger als ein eV anzunehmen sind.

**Oberflächenbindungsenergie  $E_B$**  Ein Atom, das die Oberfläche verlassen will, muss eine Energie  $E_c > E_B$  besitzen. Das Atom verliert beim Austritt aus der Oberfläche die Energie  $E_B$ , so dass außerdem der Austrittswinkel (bei glatten Oberflächen) durch Brechung an dem planaren Oberflächenpotenzial verändert wird.

Die Oberflächenbindungsenergie als Mittelwert für die individuellen Bindungen an einer mikroskopisch inhomogenen Oberfläche kann mit der Sublimationsenergie  $H_i$  eines Stoffes  $i$  beschrieben werden.

Festkörper, die aus mehreren Atomsorten bestehen, können durch verschiedene Modelle beschrieben werden, die im Folgenden kurz vorgestellt werden: Die Oberflächenbindungsenergie für eine Atomsorte ergibt sich immer aus einer Summe über die Konzentrationen  $C_j$  multipliziert mit einem Matrixelement  $E_{ij}$ , welche die Wechselwirkungsenergien zwischen den Elementen  $i$  und  $j$  darstellen [MP02]:

$$E_{B,i} = \sum_j E_{ij} C_j. \quad (2.23)$$

Im einfachsten Fall geht man mit  $E_{ij} = H_i$  davon aus, dass also die Oberflächenkonzentrationen keinen Einfluss auf die Bindungsenergie haben. Diese Annahme ist gerechtfertigt, wenn die Bindungen zwischen den unterschiedlichen Atomsorten schwach sind. Dies ist der Fall für Edelgase, bei denen man davon ausgehen kann, dass sie keine Bindungen eingehen ( $E_B = 0$ ). Für den Fall, dass Gas in einem Festkörper adsorbiert ist, muss  $E_F$  klein genug gewählt werden, so dass Zerstäubungsausbeuten unabhängig von der Wahl von  $E_F$  sind.

Besonders interessant ist die Mischung zweier Atomsorten  $X$  und  $Y$ , die ein Molekül mit Bindungsenergie  $H_{XY}$  in der stöchiometrischen Zusammensetzung  $X_m Y_n$  bilden. Mit Hilfe der Energieerhaltung  $mE_{B,X} + nE_{B,Y} = mH_X + nH_Y + H_{XY}$  lassen sich Näherungen für verschiedene Situationen angeben: Geht man von extremen Konzentrationsverhältnissen aus, wenn zum Beispiel  $C_X \ll C_Y$ , dann gilt näherungsweise  $E_{B,X} = H_X$  und  $E_{B,Y} = H_Y + \frac{1}{n}H_{X,Y}$ . Für den Fall einer stöchiometrischen Mischung ( $C_X = 1 - C_Y = \frac{m}{n+m}$ ) ergibt sich mit Gleichung 2.23  $E_{XY} = \frac{1}{2}(H_X + H_Y) + \frac{n+m}{2nm}H_{XY}$ . Ein Beispiel für die verschiedenen Möglichkeiten wird in Abbildung 2.3 für Berylliumkarbid  $\text{Be}_2\text{C}$  gegeben, das wegen der Materialwahl in ITER von Bedeutung ist und angesichts der stark unterschiedlichen Bindungsenergien der Bindungspartner ( $E_{B,C} \approx 7.4\text{eV}$ ,  $E_{B,\text{Be}} \approx 3.4\text{eV}$ ) interessant ist. Hier findet diese Betrachtung noch keine Verwendung, aber bei der zukünftigen Anwendung der Ergebnisse dieser Arbeit wird sie wichtig.

### 2.2.1 Analytische Beschreibung der physikalischen Zerstäubung

Physikalische Zerstäubungsausbeuten  $Y_{I \rightarrow J}$ , die Anzahl der zerstäubten Teilchen  $N_J$  dividiert durch die Anzahl der einfallenden Teilchen  $N_0$ , für einatomige Festkörper zeigen ein universelles Verhalten, das durch eine analytische Formel beschrieben werden kann. Dies liegt daran, dass die Energie  $E_c$  der Festkörperatome  $J$ , die von den einfallenden Teilchen  $I$  aus dem Plasma getroffen wurden, proportional zu  $E_c^{-2}$  verteilt ist [Boh84].

Die an experimentelle und simulierte Daten angepasste Formel wurde im Laufe der Zeit immer weiter verbessert [Boh84, GRER94, Eck03]. Sie beschreibt die Zerstäubung einatomiger Festkörper ähnlich gut wie Simulationen und ist innerhalb der Schwankungsbreite der experimentellen Messungen [Sta00, S. 119] auf wenigstens einen Faktor zwei

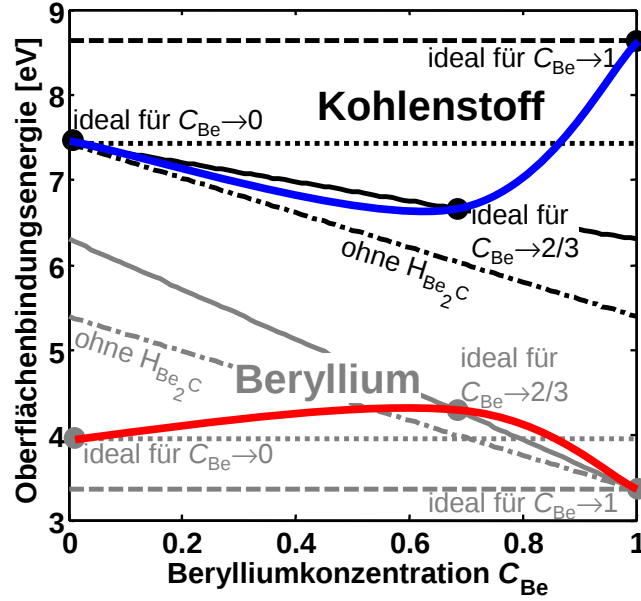


Abbildung 2.3: Oberflächenbindungsenergie im System Beryllium/Kohlenstoff in Abhängigkeit von der Beryllium-Konzentration. In schwarz:  $E_B$  von Kohlenstoff, in grau:  $E_B$  von Beryllium. Die Punkte markieren die in dem beschriebenen Modell bekannten Werte für die Bindungsenergien. Die blaue bzw. rote Linie ist deshalb eine plausible und für alle Konzentrationen universelle Annahme für die Bindungsenergie von Kohlenstoff bzw. Beryllium.

genau:

$$Y(E_0) = Q s_n(\epsilon) \left( 1 - \left( \frac{E_{th}}{E_0} \right)^{2/3} \right) \left( 1 - \frac{E_{th}}{E_0} \right)^2. \quad (2.24)$$

Sie setzt sich aus den Fit-Parametern  $Q$  und  $E_{th}$  sowie dem nuklearen Bremswirkungsquerschnitt  $s_n$  zusammen. Unsicherheiten treten vor allem wegen der Oberflächenrauigkeit auf [BR90]. Dies gilt gerade für den Energiebereich der einfallenden Projektile nahe der Schwellenergie  $E_0 \gtrsim E_{th}$  [GSKL99], ab der Zerstäubung erst möglich wird und die von  $E_B$  abhängig ist. Eine untere Grenze für  $E_{th}$  für leichte Projektile ergibt sich, wenn die maximal transferierbare Energie zwischen den Stoßpartnern  $E_M$  (siehe Gleichung 2.17) gerade gleich  $E_B$  wird:  $E_{th}/E_B > 1/\gamma$ . Wird die Zerstäubung vornehmlich durch reflektierte Projektile realisiert (Abbildung 2.4b), gilt entsprechend sogar  $E_{th}/E_B > 1/(\gamma(1-\gamma))$  als untere Grenze [EGRR93]. Der genaue Wert von  $E_{th}$  wird durch einen Fit an die experimentellen Daten aus vielen Experimenten bestimmt. An dieser Schwelle kann die Zerstäubungsausbeute über Größenordnungen innerhalb weniger eV Einfallenergie variieren (Abbildung 2.5a). Zugleich sieht man in Abbildung 2.5a, dass  $Y$  für große Energien wieder kleiner wird, weil die Energie der einfallenden Teilchen statt an der Oberfläche dann tiefer im Festkörper deponiert wird.

Die Winkelabhängigkeit der Zerstäubungsausbeute kann näherungsweise durch die analytische Formel von Yamamura [Yam84], [Eck03] beschrieben werden (Abbildung 2.5b). Sie berücksichtigt, dass bei streifendem Einfall ( $\alpha_0 > 70^\circ$ ) leichter Ionen direktes Herausschlagen von Festkörperatomen (Abbildung 2.4a) wichtiger wird als der indirekte Zerstäubungsweg (Abbildung 2.4b). Die Zerstäubungsausbeute steigt mit flacherem

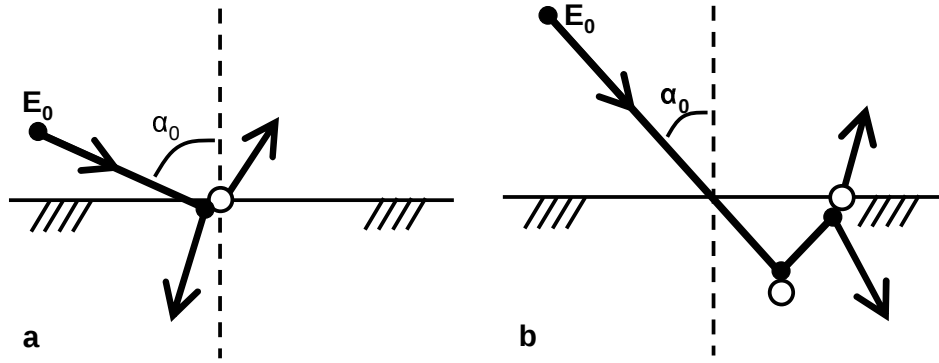


Abbildung 2.4: Mechanismen der physikalischen Zerstäubung, **a**: bevorzugt für leichte Ionen mit streifendem Einfall ( $\alpha_0 > 70^\circ$ ), **b**: bevorzugt für leichte Ionen mit kleinem Einfallswinkel  $\alpha_0$ .

Einfall an, da die deponierte Energie näher zur Oberfläche zur Verfügung gestellt wird. Bei sehr flachen Winkeln (je nach Einfallsenergie) dominiert die Reflexion der Projektile und die Zerstäubung nimmt wieder ab.

Es bleibt anzumerken, dass bei rauen Oberflächen die Winkelabhängigkeit kleiner wird, d. h. man erhält bei senkrechtem Einfall gleiche oder sogar etwas höhere Zerstäubungsausbeuten und bei flacherem Einfallswinkel etwas kleinere Zerstäubungsausbeuten als mit der analytischen Formel [KEHR99].

### Energie- und Winkelverteilung zerstäubter Atome

Zerstäubte Atome verlassen die Oberfläche in erster Näherung als Neutrale mit einer Thompson-Energieverteilung [Sta00, S.125]

$$\frac{dY}{dE_c} \propto \frac{E_c}{(E_c + E_B)^3}, \quad (2.25)$$

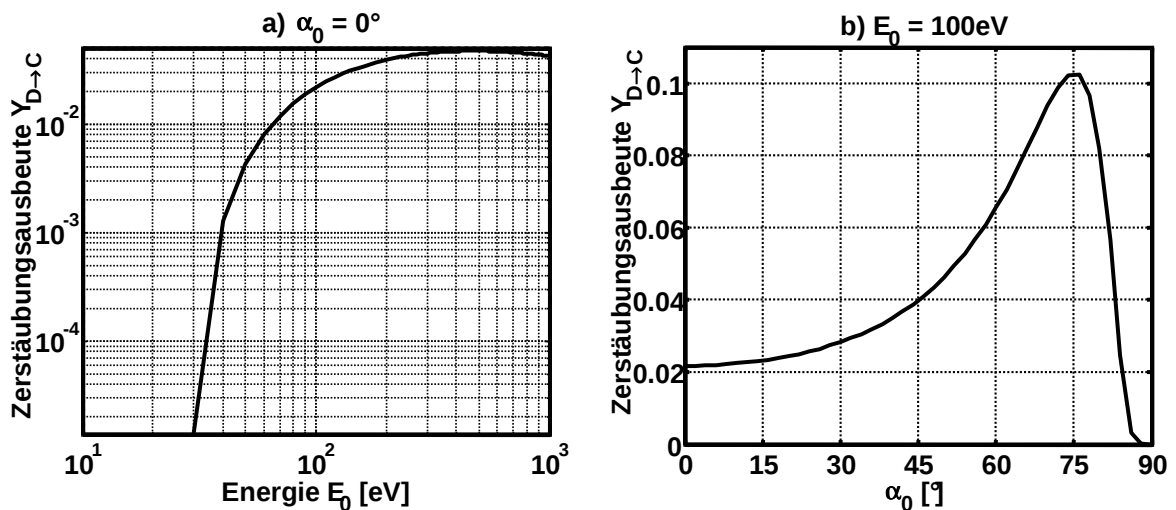


Abbildung 2.5: Physikalische Zerstäubung von Kohlenstoffatomen durch monoenergetisches Deuterium (berechnet nach [GRER94]). **a**: Abhängigkeit von der Einfallsenergie, **b**: Abhängigkeit vom Einfallswinkel.

die nach oben durch den maximalen Energieübertrag der Stoßpartner  $E_{0,max} \approx \frac{E_B E_0}{E_{th}}$  beschränkt ist [Boh84]. In polarer Richtung verlassen sie die Oberfläche mit einer Kosinus-Verteilung und in azimuthaler Richtung sind sie gleichförmig verteilt [Eck91, S. 204]. Sowohl für kleine und sehr große Einfallsennergien als auch für flachen Einfall verschiebt sich die Verteilung entsprechend. Beispiele dafür sind in Abbildung 2.6 gegeben.

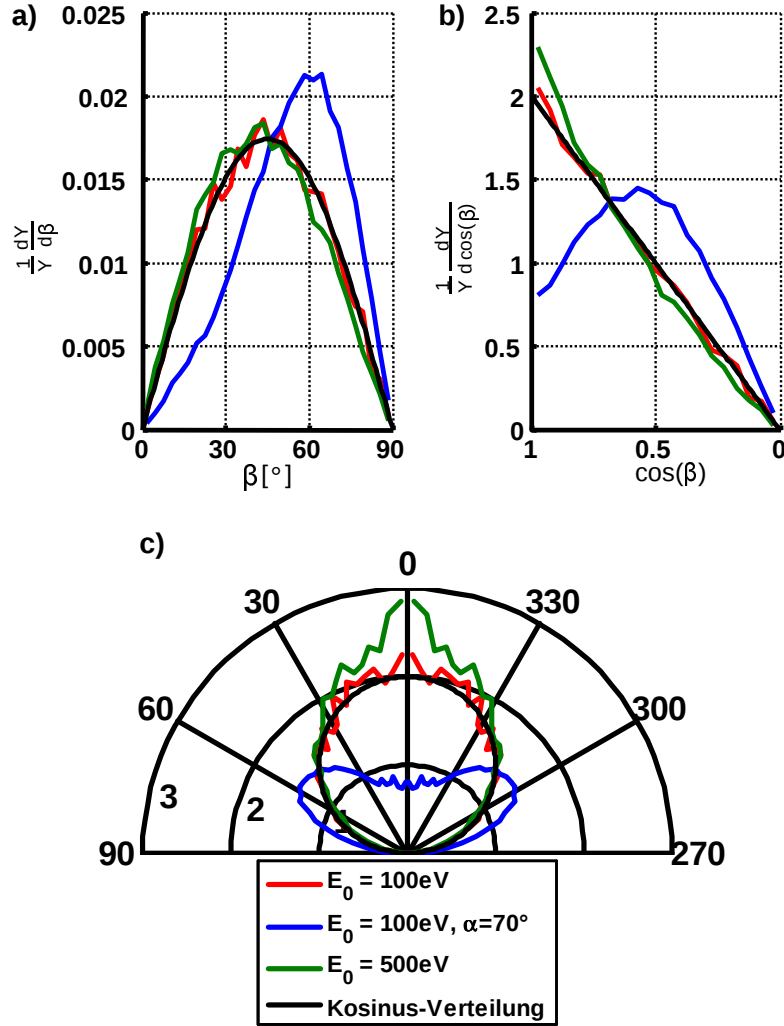


Abbildung 2.6: Polarwinkelverteilung zerstäubter Kohlenstoffatome durch monoenergetisches Deuterium berechnet mit SDTrimSP. **a:** Verteilung in Abhängigkeit von  $\beta$ . **b:** Verteilung in Abhängigkeit von  $\cos(\beta)$ . **c:** Projektion auf eine Ebene senkrecht zur Oberfläche.

### 2.2.2 Chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff

Kohlenstoff wird von einem Wasserstoffplasma durch Bildung von Kohlenwasserstoffmolekülen zusätzlich zur physikalischen Erosion auch chemisch erodiert. Diese chemische Erosion kann mit Hilfe einer analytischen Formel beschrieben werden, die den experimentellen Daten vieler Experimente angepasst wurde [RKB<sup>+</sup>05]. Sie beschreibt die

Erosionsausbeute in Abhängigkeit von Einfallenergie des Wasserstoffs  $E_0$ , Oberflächentemperatur  $T_{\text{surf}}$  und Wasserstoff-Flussdichte  $\Gamma_H$  und setzt sich aus drei Anteilen zusammen [RGR96]:

$$\begin{aligned} Y_{\text{chem}} &= Y_{\text{therm}}(T_{\text{surf}}, \Gamma_H) + Y_{\text{C-C}}(E_0, T_{\text{surf}}, \Gamma_H) + Y_{\text{surf}}(E_0, T_{\text{surf}}, \Gamma_H) \\ &= Y_{\text{therm}} \cdot [1 + D \cdot Y_{\text{phys}}(E_0)] + Y_{\text{surf}}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Qualitativ lassen sich die einzelnen Anteile  $Y_{\text{therm}}$ ,  $Y_{\text{C-C}}$  und  $Y_{\text{surf}}$  von Gleichung 2.26 mit einfachen Modellvorstellungen beschreiben:

### Thermisch aktivierte Prozesse ( $Y_{\text{therm}}$ )

Die Reaktionsflussdichte  $R$ , definiert durch  $Y_{\text{therm}} = R/\Gamma_H$ , ist proportional zur Konzentration  $C_H$  von Wasserstoff in der Oberfläche und der Wahrscheinlichkeit  $k_x = e^{-Q_1/(kT_{\text{surf}})}$ , Wasserstoff mit der Aktivierungsenergie  $Q_1$  anzutreffen.  $C_H$  ergibt sich aus dem Gleichgewicht zwischen eintreffendem Wasserstoff  $\Gamma_H(1 - \frac{C_H}{C_0})$ , begrenzt durch eine Sättigungskonzentration  $C_0$  und dem austretenden Wasserstoff  $C_H k_{-H} = C_H e^{-Q_2/(kT_{\text{surf}})}$  durch Desorption mit der Desorptionsenergie  $Q_2$  zu

$$C_H = C_0 \frac{\Gamma_H}{\Gamma_H + C_0 k_{-H}}. \quad (2.27)$$

Damit erhält man eine Erosionsausbeute durch thermalisierten Wasserstoff

$$Y_{\text{therm}} = \frac{k_x}{\Gamma_H/C_0 + k_{-H}}, \quad (2.28)$$

die ein ausgeprägtes Maximum in Abhängigkeit von  $T_{\text{surf}}$  besitzt (Abbildung 2.7a):  $R$  nimmt mit steigender Temperatur monoton zu, während die Wasserstoffkonzentration in der Oberfläche sinkt.

Zudem verschiebt sich das Maximum der Erosion bei höheren Flüssen  $\Gamma_H$  zu höheren Oberflächentemperaturen (Abbildung 2.7b).

Um die quantitativ richtige Flussabhängigkeit von  $Y_{\text{therm}}$  (und damit  $Y_{\text{chem}}$ ) zu erhalten, reicht es allerdings nicht, die Konzentration  $C_H$  zu betrachten. Streng genommen ist die Erosion proportional zur Konzentration der hydrierten Kohlenstoffbindungen, so dass die obige Bilanzgleichung zusätzlich zu  $\Gamma_H$ ,  $k_x$  und  $k_{-H}$  von Übergangswahrscheinlichkeiten bei der Hydrierung bestimmt wird. Bei hohen Temperaturen ( $\approx 1000K$ ) müssen weitere Korrekturen angewendet werden, um die bevorzugte Bildung von  $H_2$  und auftretende Änderungen in der Struktur von Graphit zu berücksichtigen.

### Aufbrechen von C-C-Bindungen ( $Y_{\text{C-C}}$ )

Chemische Erosion zeigt auch eine Abhängigkeit von der Energie  $E_0$  der Wasserstoffprojekte, die auf die Oberfläche treffen. Der Grund dafür liegt darin, dass der Wasserstoff bei der Bewegung im Gitter des Graphits Energie verliert und dabei Versetzungen erzeugt. Die C-C-Bindungen werden aufgebrochen, wodurch nachströmender Wasserstoff

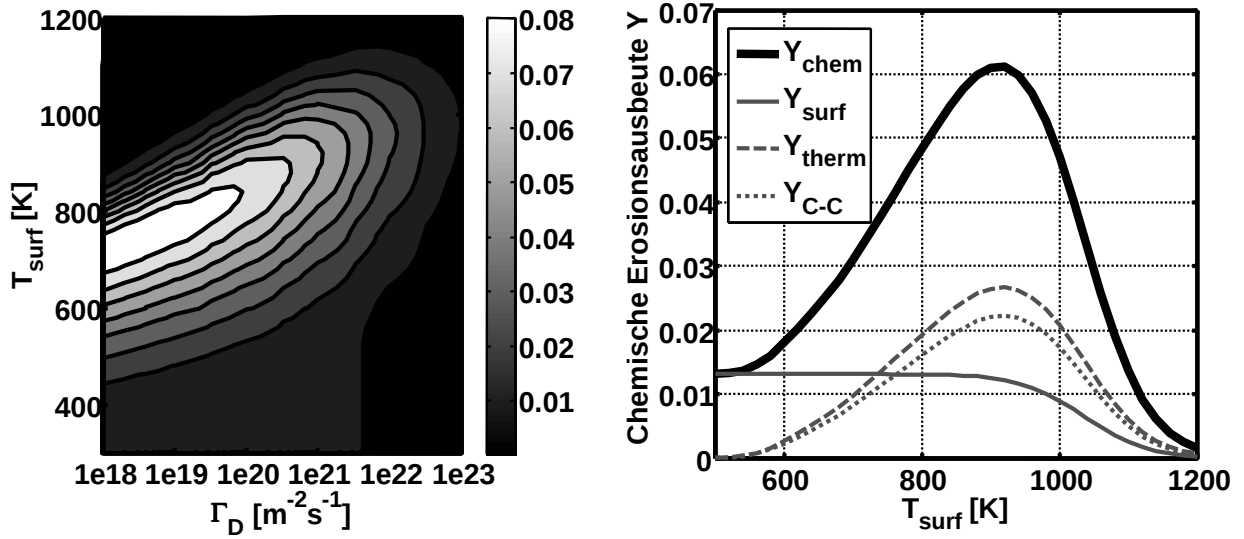


Abbildung 2.7: **a:** Chemische Erosionsausbeute in Abhängigkeit von der Deuterium-Flussdichte  $\Gamma_D$  und der Oberflächentemperatur  $T_{\text{surf}}$  bei fester Einfallenergie  $E_0 = 40 \text{ eV}$ . **b:** Chemische Erosionsausbeute und ihre Anteile in Abhängigkeit von der Oberflächentemperatur ( $E_0 = 40 \text{ eV}$ ,  $\Gamma_D = 10^{21} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ).

sich leichter an die Kohlenstoffatome bindet. Dies verstärkt die chemische Erosion durch thermisch aktivierte Prozesse, die durch  $Y_{\text{therm}}$  beschrieben werden. Der Abhängigkeit von  $E_0$  für die Erzeugung der Gitterschäden deckt sich mit der der physikalischen Erosion  $Y_{\text{phys}}$  (Gleichung 2.24), so dass eine Beschreibung mit selbiger erfolgt:

$$Y_{\text{C-C}} = D \cdot Y_{\text{therm}} \cdot Y_{\text{phys}}. \quad (2.29)$$

Der konstante, an die experimentellen Ergebnisse angepasste Faktor  $D$  ist nur abhängig von dem verwendeten Wasserstoffisotop (H, D oder T), denn der Energieübertrag beim Stoß schwererer Isotope mit Kohlenstoff ist aufgrund des größeren Massenverhältnisses größer.

### Kinetische Kohlenwasserstoff-Emission ( $Y_{\text{surf}}$ )

Experimente zeigen, dass selbst bei Raumtemperatur chemische Erosion auftritt, obwohl für die thermische Anregung Temperaturen von über  $400 \text{ K}$  notwendig sind. Auch hier zeigt sich eine Abhängigkeit von der Wahl des Wasserstoffisotops sowie eine starke Abhängigkeit von der Einfallenergie  $E_0$ . Man vermutet, dass die direkt an der Oberfläche liegenden Kohlenwasserstoffradikale nur schwach zur Oberfläche gebunden sind und (als Ganzes) leicht physikalisch zerstäubt werden können, so dass sie als Kohlenwasserstoffe die Oberfläche verlassen (ioneninduzierte Desorption):

$$Y_{\text{surf}} \propto \frac{Y_{\text{phys}}^*}{1 + e^{\frac{E_0 - 90 \text{ eV}}{50 \text{ eV}}}}. \quad (2.30)$$

$Y_{\text{phys}}^*$  ist die physikalische Zerstäubungsausbeute für Kohlenstoff durch Wasserstoff, diesmal jedoch mit niedrigerer Schwellenergie  $E_{th}$  von 1 bis 2 eV. Der Nenner beschränkt  $Y_{\text{surf}}$  auf kleine Einfallenergien ( $E_0 \lesssim 100 \text{ eV}$ ).

### Erhöhte chemische Erosion von Kohlenwasserstoffschichten

Gemessene Erosionsausbeuten sind zudem sehr stark abhängig von der Struktur des Kohlenstoffs, die mit dieser Formel nicht explizit berücksichtigt wird. Insbesondere amorphe Kohlenwasserstoffschichten (a-C:H-Schichten) mit hohem Wasserstoffanteil, so genannte weiche a-C:H-Schichten, können um Größenordnungen erhöhte Erosionsausbeuten besitzen [VH96]. Die Rate steigt dabei mit sinkender Dichte der Schicht. Sie reicht (bei  $E_0 = 0.2 - 0.3 \text{ eV}$  und  $T_{\text{surf}} = 520 \text{ K}$ ) von  $Y_{\text{chem}} = 0.15$  bei Dichten von  $1300 \text{ kg m}^{-3}$  bis zu  $Y_{\text{chem}} = 0.015$  bei Dichten von  $1800 \text{ kg m}^{-3}$  [PSP<sup>+</sup>02]. Weitere Hinweise zur erhöhten chemischen Reerosion von a-C:H-Schichten liefern jetzt auch molekulardynamische Simulationen durch Wasserstoff mit 100 eV Einfallenergie [MZRC<sup>+</sup>07]. Der Mechanismus der „ionen-induzierten Freisetzung ungesättigter Kohlenwasserstoffe“, vergleichbar mit der oben beschriebenen kinetischen Kohlenwasserstoffemission, verursacht in den Simulationen um bis zu viermal höhere Erosionsausbeuten als die physikalische Zerstäubung.

Weiche Schichten werden durch Deposition von Kohlenwasserstoff mit niedriger Energie, harte Schichten durch Deposition mit hoher Energie erzeugt.

### 2.2.3 Messmethoden der Oberflächenphysik

Messungen von Erosionsausbeuten in Ionenstrahlexperimenten werden meist über die Bestimmung der Massenänderung durchgeführt. Im Tokamak geschieht dies über Spektroskopie oder die Schichtdickenänderung von speziell hergestellten Markerproben, die aus mehreren Schichten genau bekannter Dicke bestehen. Zur Messung von Deposition und Schichtbildung existieren eine Reihe von Methoden, von denen diejenigen vorgestellt werden, die für diese Arbeit eine große Rolle gespielt haben.

Zur Messung der Wandveränderung in einem Tokamak werden die betroffenen Limiter- oder Divertorkomponenten meist ausgebaut und im Labor charakterisiert. Nur wenige dieser Verfahren lassen sich auch *in situ* durchführen, so dass eine Charakterisierung von Oberflächen während des Betriebes eines Tokamaks aufwändig und meist mit größeren Messfehlern verbunden ist.

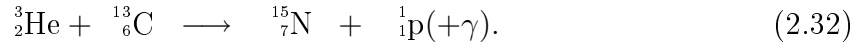
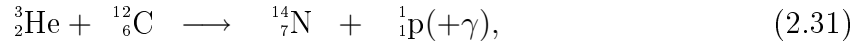
### Sekundärionen-Massenspektrometrie (SIMS)

Bei der Sekundärionen-Massenspektrometrie wird die Probe mit einem Ionenstrahl mit Energien im Bereich von 0.2-20 keV beschossen. Hierbei werden Teilchen von der Oberfläche erodiert und mit einem Massenspektrometer analysiert. So lässt sich ein Tiefenprofil des Konzentrationsverlaufs der Bestandteile der Probe bestimmen. SIMS ist eine sehr empfindliche Methode, die eine Tiefenauflösung im Nanometerbereich und die Bestimmung von Isotopenverhältnissen zulässt, im Allgemeinen aber keine absoluten Messwerte liefert.

### Kernreaktionsanalyse (NRA)

Bei der Kernreaktionsanalyse (NRA, „nuclear reaction analysis“) wird die Probe mit einem Ionenstrahl mit Energien im MeV-Bereich beschossen und die von der Oberfläche ausgehende Protonenanzahl aus den Kernreaktionen energieaufgelöst gemessen. Unter Ausnutzung der schmalen Resonanzen der Kernreaktionen lässt sich über den Vergleich

mit Kalibrationsproben die absolute Materialmenge auf der zu untersuchenden Probe bestimmen. Zum Beispiel lässt sich mit Hilfe eines  $^3\text{He}$ -Strahls  $^{12}\text{C}$  von  $^{13}\text{C}$  unterscheiden:



Diese Messmethode ist sehr empfindlich und erlaubt den Nachweis von bis zu wenigen Monolagen dünnen Schichten ( $\approx 10^{14}$  Atome  $\text{mm}^{-2}$ ). Über eine Variation der Energie des Ionenstrahls ist prinzipiell auch eine tiefen aufgelöste Messung möglich.

### Colorimetrie und Farbringanalyse

Bei der Reflexion von Licht eines bekannten Wellenlängenspektrums an dünnen Oberflächenschichten beobachtet man durch konstruktive und destruktive Interferenz der einfallenden Wellenlängen eine Veränderung des Wellenlängenspektrums, mit der sich die Dicke der Schicht bestimmen lässt. Der wellenlängenabhängige Reflexionskoeffizient des Lichtes ist außer von der Schichtdicke auch vom Einfallswinkel des Lichtes und von Brechungsindices und Absorptionskonstanten sowohl der Schicht als auch des Substrates abhängig.

Bei der Verwendung von Tageslicht lässt sich an der direkt beobachteten Farbe bei fester Anordnung und bekannten Materialkonstanten die Abschätzung der Schichtdicke auf 10 - 40 nm genau durchführen bei einer minimalen Schichtdicke von ungefähr 10 nm (Farbringanalyse). Misst man das reflektierte Licht mit einem farbgeicherten Lichtdetektor ermöglicht dies die Bestimmung der Filmdicke mit einer Auflösung im nm-Bereich (Colorimetrie) [WWW94, Wie06].

Mit dieser Methode lassen sich ausgedehnte Interferenzfarbmuster und die entsprechenden Schichtdickenverteilungen zweidimensional analysieren.

# Kapitel 3

## Monte-Carlo-Programme ERO und SDTrimSP

Die beiden in diesem Kapitel vorgestellten Programme beruhen auf der Monte-Carlo-Methode. Dabei wird eine bestimmte Anzahl numerischer Experimente mit zufälligen Anfangsbedingungen durchgeführt, um eine physikalische Größe zu berechnen. Der Erwartungswert dieser Größe ergibt sich aus dem arithmetischen Mittel des Ergebnisses der Zufallsexperimente, wenn insbesondere alle möglichen Zustände des physikalischen Systems durch die Simulation erreichbar sind. Die Monte-Carlo-Methode basiert auf dem „Gesetz der großen Zahl“. Es besagt, dass sich die relative Häufigkeit eines Zufallsergebnisses immer weiter an den Erwartungswert eines Zufallsexperimentes annähert, je häufiger das Zufallsexperiment durchgeführt wird [KW81].

### 3.1 Monte-Carlo-Programm ERO

Das Computerprogramm ERO simuliert den Transport von Verunreinigungen in einem Hintergrundplasma. ERO berücksichtigt die Wechselwirkung des Plasmas und der Plasmamaverunreinigungen mit der sich im zeitlichen Verlauf ändernden Wand des Plasmagefäßes. Es berechnet außerdem die Intensität der Linienstrahlung von Verunreinigungen im Plasma.

Dazu benutzt es die Testteilchennäherung (siehe Abschnitt 2.1.2). Testteilchen, welche Verunreinigungsteilchen repräsentieren, haben keinen Einfluss auf das Hintergrundplasma.

Konkret ordnet ERO jedem seiner Testteilchen eine echte Teilchenzahl  $N_r$  zu, die der Anzahl an Teilchen in der Wirklichkeit entspricht. Je mehr Testteilchen ERO verfolgt oder je kleiner der Zeitschritt für die Simulation  $t_{\text{ERO}}$  gewählt wird, desto geringer ist der statistische Fehler.  $t_{\text{ERO}}$  ist dabei die zeitliche Dauer, für welche die Oberfläche als konstant angenommen wird<sup>1</sup>. Das bedeutet, dass alle Teilchen, die innerhalb eines Zeitschrittes auf die Oberfläche treffen, in dieser dieselbe Verteilung der Elemente vorfinden.

Die beiden ersten Versionen von ERO wurden Anfang bis Mitte der 90er Jahre für den Limitertokamak [NBPS94] und den Divertortokamak [NBCDK93] entwickelt. Seit-

---

<sup>1</sup>Ein typischer Wert für  $t_{\text{ERO}}$  ist 0.1 s, nicht zu verwechseln mit dem Zeitschritt zur Auflösung der Gyrationbewegung der Testteilchen im Plasma ( $\sim 10^{-9}$  s).

dem wurde ERO beständig weiterentwickelt und ausführlich beschrieben [KW97, Kir00, KPWK00] und dient inzwischen auch der Simulation von Experimenten in linearen Plasmageneratoren.

Im folgenden Abschnitt werden das Hintergrundplasma sowie die Verfolgung der Teilchen in diesem Plasma erläutert. Daran anschließend wird in 3.1.2 die Wechselwirkung mit Oberflächen beschrieben.

### 3.1.1 Hintergrundplasma und Verunreinigungstransport in ERO

Das Plasma wird durch seine Teilchendichten und -temperaturen sowie die Flussgeschwindigkeit als Funktionen des Ortes charakterisiert. Zusätzlich bestimmen elektromagnetische Felder die Bewegungen der Plasmateilchen.

Für einen Limitertokamak berechnet ERO das Plasma in der Abschälschicht unter Verwendung von Messdaten für Temperatur und Dichte mit Hilfe eines einfachen Modells, das im folgenden Abschnitt vorgestellt wird. Im Falle eines Divertortokamaks ist ERO auf die Eingabe einer Lösung so genannter Plasmaprogramme wie B2-Eirene [RKW91], EDGE2D [SCR<sup>+</sup>94] oder einer aus dem „Onion-Skin model“ [Sta00] angewiesen.

#### Modell der Abschälschicht (für den Limitertokamak)

Es reicht im Allgemeinen, die Temperaturen und Dichten an der LCFS und deren exponentielle Abfalllängen in radialer Richtung zu kennen. In der SOL und in paralleler Richtung zum Magnetfeld können dann die Gleichungen 2.5 und 2.6 benutzt werden, um die parallele Abhängigkeit der Dichte und Flussgeschwindigkeit zu berechnen.

Für die mobileren Elektronen wird angenommen, dass sie keinen Temperaturgradienten in paralleler Richtung besitzen, während sich die Bestimmung der parallelen Abhängigkeit der Ionentemperatur  $T_i$  schwieriger gestaltet: Diesbezügliche Messungen für die SOL in TEXTOR liegen nicht vor und theoretische Modelle widersprechen sich. Deshalb wird in ERO ein moderater  $T_i$ -Gradient angenommen, der größer ist, als die Berechnung nach Stangeby es fordert [SE95] und kleiner als der Wert nach dem Plasmaprogramm B2-Eirene [RKW91].

Die Berechnung der elektrischen Felder erfolgt mit Hilfe der Gleichung 2.7 für den parallelen Anteil und mit Gleichung 2.10 für den senkrechten Anteil des  $\vec{E}$ -Feldes.

Der Ionenfluss der Verunreinigungen (C, O, Be, ...) aus dem Hintergrundplasma auf die Oberfläche wird relativ zur Plasmaflussdichte  $\Gamma = n_e c_s$  mit einer festen mittleren Ladung und einer Konzentration, die von der radialen Richtung abhängig ist, angenommen. Die Plasmateilchen und Verunreinigungen werden durch das Schicht- (Gleichung 2.3) und Vorschichtpotenzial (Gleichung 2.9) beschleunigt.

#### Bewegung von Verunreinigungsteilchen im Tokamak

Die Teilchen stehen in erster Linie unter dem Einfluss der Lorentz-Kraft. Die Diskretisierung der Lorentz-Kraft findet mit Hilfe des Boris-Integrators statt [BL85]. Abbildung 3.1 zeigt unter typischen Plasmabedingungen in der TEXTOR-Randschicht Trajektorien eines  $C^+$ -Ions, die mit dem Boris-Integrator berechnet wurden. Es werden automatisch Driften beschrieben, deren Ursprung allein auf der Präsenz des  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feldes begründet ist ( $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift, Grad- $\vec{B}$ -Drift, Krümmungs-Drift).

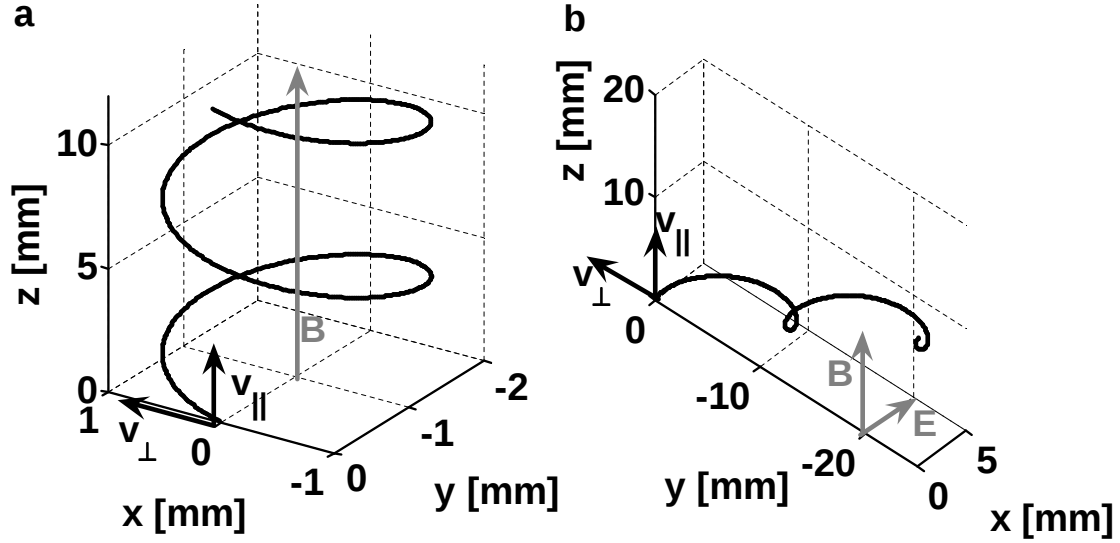


Abbildung 3.1: **a:** Trajektorie eines  $C^+$ -Ions berechnet mit Hilfe des Boris-Integrators über die Gesamtzeit von 2 Perioden ( $4\pi/\omega_L$ ). Der  $\vec{B}$ -Feldvektor wurde im Gyrationzentrum dargestellt.  $B = |\vec{B}| = 2.5$  T,  $v_{||} = v_{\perp} =$  Ionen-Schallgeschwindigkeit  $c_s = \sqrt{kT_i/m_i} \approx 2 \cdot 10^4$  m/s,  $T_i \approx 5$  eV,  $\Rightarrow$  Larmor-Frequenz/-Radius:  $\omega_L = |e|B/m_i \approx 20$  MHz,  $r_L = v_{\perp}/\omega_L \approx 1$  mm, **b:** Zusätzlich zu den Bedingungen aus (a) herrscht hier ein  $E$ -Feld in  $x$ -Richtung der Stärke  $|\vec{E}| = 0.1$  V/m. Dies führt zur Driftgeschwindigkeit  $v_{\vec{E} \times \vec{B}} = (\vec{E} \times \vec{B})/|\vec{B}|^2$ .

Die Bewegung der Teilchen berücksichtigt weiterhin Reibung mit dem Hintergrundplasma. Dazu werden die klassischen Relaxationszeiten  $\tau_s$ ,  $\tau_d$  und  $\tau_E$  berechnet (siehe Abschnitt 2.1.2) und damit die Geschwindigkeitsänderung durch Reibung, die proportional zur Differenz aus der Flussgeschwindigkeit des Hintergrundplasmas und der Teilchengeschwindigkeit ist.

Auch die Thermokraft und die anomale Senkrechtdiffusion, die in Abschnitt 2.1.2 beschrieben worden sind, werden über eine Änderung der Geschwindigkeit nach jedem Integrationsschritt der Lorentz-Kraft berücksichtigt.

### Ratenkoeffizienten für Atome und Moleküle

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Quellen für die Ratenkoeffizienten genannt, die zur Beschreibung von Ionisation, Dissoziation und Linienstrahlung nötig sind.

Die Wahrscheinlichkeit  $p$  für eine Reaktion innerhalb einer Zeitspanne  $\Delta t$  lässt sich mit Hilfe der mittleren Reaktionszeit  $\tau$  angeben (vgl. Abschnitt 2.1.3):

$$p = 1 - e^{-\Delta t/\tau}. \quad (3.1)$$

Eine Zufallszahl  $p' \in [0, 1]$  entscheidet nach jedem Integrationszeitschritt  $\Delta t$  (nicht zu verwechseln mit  $t_{\text{ERO}}$ ), ob eine Reaktion stattfindet oder nicht. Damit die vorgegebene Reaktionszeit durch die Simulation nicht überschätzt wird, darf  $\Delta t$  höchstens in der Größenordnung von  $\tau$  liegen.

Für einen Großteil der chemischen Elemente liegen Ratenkoeffizienten für die Ionisation vor. Sie sind über die Integration der Wirkungsquerschnitte bestimmt, die mit Hilfe der

Lotz-Formel [Lot67] angenähert wurden [Bel82, LBG<sup>+</sup>86, HLH<sup>+</sup>89]. Zusätzlich stehen für einige in der Fusionsforschung besonders wichtige Elemente (z. B. Be und C) aktuellere Datensätze zur Verfügung, welche neben der Abhängigkeit der Querschnitte von  $T_e$  auch die im relevanten Temperaturbereich von 1 bis 100 eV schwächere Abhängigkeit von  $n_e$  berücksichtigen [Sum02].

Für die *Dissoziation* von Kohlenwasserstoffmolekülen werden berechnete Ratenkoeffizienten benutzt [JR02, Rei06]. Bei der Richtungsänderung werden die Impulserhaltung der Zerfallsprodukte und die Änderung der kinetischen Energie durch die Dissoziation berücksichtigt.

Während der Bewegung der Verunreinigungsteilchen wird die Verweildauer der Teilchen in Teilvolumen des Beobachtungsvolumens registriert. Damit lässt sich durch Normierung auf  $t_{ERO}$  und Teilvolumen die Verunreinigungsichte  $n_k$  für jede Teilchensorte  $k$  angeben. Zur Berechnung der resultierenden *Photonenanzahl* pro Volumen und Zeit nach Gleichung 2.15 werden effektive Ratenkoeffizienten  $\langle \sigma v \rangle_{\text{eff}}$  für die Anregung von Atomen bzw. Ionen [Sum02] und für die Anregung von Kohlenwasserstoffen [Beh90] verwendet. Für den Vergleich mit den ein- oder zweidimensionalen experimentellen Ergebnissen müssen die simulierten Resultate dann entsprechend der gegebenen Sichtlinien räumlich integriert werden.

### 3.1.2 Plasma-Wand-Wechselwirkung

ERO beschreibt die Plasma-Wand-Wechselwirkung innerhalb jedes Zeitschrittes der Länge  $t_{ERO}$  in zwei Teilschritten:

Zunächst wird die *Wirkung des Hintergrundplasmas mit der Wand* bestimmt und damit die Quellstärke für die anschließende Berechnung der Bewegung der Verunreinigungsteilchen durch das Plasma festgelegt. *In einem zweiten Schritt wirken die Verunreinigungsteilchen*, die (an anderer Stelle) wieder zur Wand zurückkommen, auf die Oberfläche. Der Transport der dadurch entstehenden Verunreinigungen wird dann im nächsten Zeitschritt nach der neuerlichen Berechnung der Wechselwirkung des Hintergrundplasmas mit der Wand verfolgt.

Dabei wird die Zusammensetzung der Oberfläche nur einmal am Anfang des Zeitschrittes (entsprechend der aufsummierten Wirkungen der Wechselwirkung des letzten Zeitschrittes) verändert. Alle verfolgten Verunreinigungen treffen dann auf die gleiche Oberflächenzusammensetzung. Dies ist notwendig, damit bei der Wechselwirkung der verfolgten Teilchen mit der Oberfläche aus unterschiedlichen Quellen (physikalische Zerstäubung verschiedener Spezies, chemische Erosion von Kohlenstoff und Injektion) alle Teilchensorten gleich behandelt werden.

### Wechselwirkung des Plasmas und der Verunreinigungen mit den Oberflächen

**Reflexion und Deponierung** Ein Teil der auf eine Wand treffenden Verunreinigungen aus dem Plasma wird reflektiert, der andere deponiert. Für Energien  $> 10\text{eV}$  spielen dabei vor allem Zwei-Körper-Stoßprozesse eine Rolle, bei niedrigeren Energien werden Mehr-Körper-Wechselwirkungen immer wichtiger. Zur Beschreibung wurde eine Datenbasis aus Simulationsrechnungen erstellt, die je nach Energiebereich Daten enthält, die mit dem Programm TRIM [EH87] erstellt wurden oder aus einem molekular dynami-

schen Modell<sup>2</sup> stammen. Die TRIM-Datenbasis enthält für alle relevanten Teilchen- und Substratkombinationen, abhängig von Einfallsenergie und -winkel Reflexionskoeffizienten in Abhängigkeit vom poloidalen und azimuthalen Winkel.

Für Verunreinigungen im Hintergrundfluss wird angenommen, dass sie durch die Ablenkung im Schichtpotenzial mit einem mittleren Winkel von  $60^\circ$  auf die Oberfläche treffen [Kna97].

**Physikalische Erosion** Physikalische Erosion wird durch die analytischen Formeln von Bohdanský und Yamamura in Abhängigkeit von Energie und Winkel der auftretenden Teilchen beschrieben (siehe Abschnitt 2.2.1 gemäß [GRER94]).

Um das Hintergrundplasma zu berücksichtigen, müssen die Formeln für die Zerstäubung über das Energiespektrum der einfallenden Teilchen für einen festen Einfallswinkel integriert werden. Dazu geht man von einer Maxwell-Energieverteilung aus, die um die Energie, welche die Teilchen in Schicht- und Vorschichtpotenzial gewinnen, verschoben ist [AIPP89]. Die Winkelabhängigkeit spielt generell eine kleinere Rolle als die Energieabhängigkeit (vgl. auch Abbildung 2.5) und wird von ERO vernachlässigt, d. h. es wird senkrechter Einfall angenommen.

**Kohlenwasserstoffchemie** Die chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff wird durch die Roth-Formel 2.26 beschrieben. Es wird hauptsächlich Methan  $\text{CH}_4$  freigesetzt. Höhere Kohlenwasserstoffe spielen eine untergeordnete Rolle [KM05].

Es wurden experimentelle Beobachtungen gemacht [WEH<sup>+</sup>01], die sich mit ERO nur dann simulieren lassen, wenn man eine erhöhte Erosion für redeponiertes Material annimmt [KWP<sup>+</sup>04]. Dieser Effekt wurde auch in Experimenten außerhalb des Tokamaks unter genau definierten Erosionsbedingungen beobachtet (siehe Abschnitt 2.2.2). „Erhöhte Reerosion“ ist ein wichtiger Parameter zum Verständnis der Erosions- und Depositionsprozesse von Kohlenstoff. Die erhöhte Erosion von redeponiertem Kohlenstoff kann um mehr als einen Faktor 10 größer als die chemische Erosion von Graphit sein. Die effektive Gesamtausbeute ändert sich dabei im Allgemeinen weniger als um einen Faktor 2, da die Gesamterosion durch die höhere Konzentration des Kohlenstoffsubstrats in der Oberfläche bestimmt wird.

Kohlenwasserstoffmoleküle und -radikale, die auf eine Oberfläche treffen, unterliegen einer effektiven Haftwahrscheinlichkeit („effektivem Sticking“  $S_{\text{eff}}$ ).  $\text{CH}_x$ -Radikale werden so entweder deponiert oder bewirken die Freisetzung von  $\text{CH}_4$ -Molekülen, die mit thermischer Geschwindigkeits- und Kosinuswinkelverteilung wieder in das Plasma gelangen.

## Oberflächenmodell

Das Oberflächenmodell beschreibt, wie sich die Oberfläche aufgrund der chemischen und physikalischen Wechselwirkung mit dem Plasma verändert. Zunächst wird der einfachste Fall eines Flussbilanz-Oberflächenmodells beschrieben und werden einige Schlussfolgerungen daraus gezogen, um später mit diesen bei der Diskussion der Ergebnisse komplizierterer Modelle Vergleiche ziehen zu können. Im Normalfall verwendet ERO ein

---

<sup>2</sup>Diese sind unter Verwendung bei Divertorsimulationen mit niedrigen Plasmatemperaturen  $< 5\text{eV}$  für die Reflexion von Kohlenstoff auf Materialien aus Kohlenstoff.

Flussbilanz-Oberflächenmodell, das zusätzlich zu der Interaktionsschicht auch eine Substratschicht berücksichtigt. Dies wird im letzten Teil dieses Abschnittes erläutert. In der Kopplung mit SDTrimSP wird dann eine beliebige Anzahl von Schichten verwendet (Kapitel 4).

In einem einfachen Ansatz geht man davon aus, dass sich jede Veränderung der Schichtzusammensetzung gleichförmig in einer einzigen Schicht der Dicke  $\Delta z$  abspielt [SBD05]. Jeder Teilchensorte  $i$  mit der Konzentration  $C_i$  lässt sich dann über seine Teilchendichte  $n_i$  eine atomare Flächendichte  $\Omega_i$  zuordnen:

$$\Omega_i = n_i C_i \Delta z. \quad (3.2)$$

Im Gleichgewicht stationärer Konzentrationen  $\frac{dC_i}{dt} = 0$  ( $\Rightarrow C_i \equiv \tilde{C}_i = \text{const.}$ ) drückt eine Änderung  $\frac{d}{dt} \sum_i \Omega_i \geq 0$  Schichtwachstum bzw. Erosion aus. Im Spezialfall  $\frac{d}{dt} \sum_i \Omega_i = 0$  verändert sich die Oberfläche gar nicht. Der auf die Oberfläche auftreffende Teilchenfluss  $\Gamma = \sum_i \Gamma_i$  setzt sich aus den partiellen Teilchenflüssen  $\Gamma_i = \rho_i \Gamma$  zusammen. Physikalische und chemische Zerstäubungsausbeuten lassen sich mit der Gesamtausbeute  $Y_i = (\sum_j \Gamma_j Y_{j \rightarrow i} + \Gamma_D Y_{\text{chem}}) / \Gamma$  beschreiben, wenn man zunächst davon ausgeht, dass die auf unterschiedliche Weise freigesetzten Teilchen einer Sorte mit gleicher Wahrscheinlichkeit  $D_i$  auf der Oberfläche redeponiert werden. Eine Bilanz der ein- und ausfallenden Teilchenflüsse ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d\Omega_i}{dt} &= \left[ \Gamma_i (1 - R_i) + \Gamma Y_i \tilde{C}_i D_i \right] - \Gamma Y_i \tilde{C}_i \\ &= \Gamma \left[ \rho_i (1 - R_i) - Y_i \tilde{C}_i (1 - D_i) \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei  $R_i$  die jeweiligen Reflexionskoeffizienten sind. Somit wird die Oberfläche depositionsdominiert für  $\sum_i \rho_i (1 - R_i) > \sum_i Y_i \tilde{C}_i (1 - D_i)$  und erosionsdominiert für  $\sum_i \rho_i (1 - R_i) < \sum_i Y_i \tilde{C}_i (1 - D_i)$ . Die Gleichgewichtskonzentrationen  $\tilde{C}_i$  ergeben sich, wenn man weiter davon ausgeht, dass alle Teilchensorten dieselbe Dichte  $n$  besitzen, so dass  $\Omega_i / \sum_j \Omega_j = n_i \tilde{C}_i / (\sum_j n_j \tilde{C}_j) = \tilde{C}_i$  mit  $\sum_j \tilde{C}_j = 1$ . Durch Einsetzen von 3.3 erhält man ein quadratisches Gleichungssystem für  $\tilde{C}_i$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Omega_i &= \tilde{C}_i \sum_j \frac{d}{dt} \Omega_j = \tilde{C}_i \sum_j \Gamma \left[ \rho_j (1 - R_j) - Y_j \tilde{C}_j (1 - D_j) \right] \\ \Rightarrow 0 &= \tilde{C}_i^2 [Y_i (1 - D_i)] + \tilde{C}_i \left[ \sum_{j \neq i} \tilde{C}_j Y_j (1 - D_j) \right] \\ &+ \tilde{C}_i \left[ \sum_j \rho_j (1 - R_j) + Y_i (1 - D_i) \right] - \rho_i (1 - R_i). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Für zwei Elemente  $i = 1, 2$  ergibt sich unter Benutzung der Abkürzungen  $h_i := Y_i (1 - D_i)$ ,  $g_i := \rho_i (1 - R_i)$  und mit  $\tilde{C}_2 = 1 - \tilde{C}_1$  eine Lösung zu

$$\tilde{C}_1 = \frac{-(h_1 - h_2 + g_1 + g_2) + \sqrt{(h_1 - h_2 + g_1 + g_2)^2 + 4(h_2 - h_1)g_1}}{2(h_2 - h_1)}. \quad (3.5)$$

Im Oberflächenmodell von ERO wird außerdem angenommen, dass  $\Delta z$  unveränderlich ist, d. h. dass das Plasma innerhalb eines Zeitschrittes  $t_{\text{ERO}}$  nur mit einer beschränkten Interaktionsschicht wechselwirkt. Um Erosion und Deposition zu beschreiben, wird eine zweite Schicht mit unerschöpflicher Flächendichte des Substratmaterials  $\Omega_s \gg \sum_i \Omega_i$  eingeführt. Im Falle einer Erosion ( $\Delta\Omega = t_{\text{ERO}} \cdot \frac{d}{dt} \sum_i \Omega_i < 0$ ) wird von dieser Substratschicht  $|\Delta\Omega|$  subtrahiert und zur Interaktionsschicht addiert; im Fall der Deposition wird zur Substratschicht  $|\Delta\Omega|$  ein Teil der Interaktionsschicht addiert. Im Allgemeinen hängt die Gleichgewichtskonzentration dann nicht von der Schichtdicke der Interaktionsschicht ab, sondern liegt in der Nähe der Konzentration des Flussbilanz-Oberflächenmodells. Allerdings bestimmt sie die Dynamik der Simulation. Damit das Erreichen des stationären Zustandes dem zeitlichen Verlauf in der Realität entspricht, sollte die Interaktionsschicht so gewählt werden, dass sie der maximalen Eindringtiefe der Ionen in den Festkörper entspricht. Der Zeitschritt  $t_{\text{ERO}}$  muss dann so klein gewählt werden, dass  $\text{FY}t_{\text{ERO}} < \Delta x N$ , damit die gesamte Interaktionsschicht nicht in einem Zeitschritt erodiert werden kann.

## 3.2 Monte-Carlo-Programm SDTrimSP

In Abschnitt 2.2 wurden die Grundlagen dieses Modells mit dem Zwei-Körper-Stoßprozess bereits erläutert, während die spezielle Umsetzung in SDTrimSP („**S**tatic and **D**ynamic **T**ransport of **I**ons in **M**atter for **S**equential and **P**arallel Computer“) Gegenstand des folgenden Abschnittes ist.

Eine detaillierte Beschreibung des Programms, besser bekannt als TRIM [BH80] für statische und TRIDYN [ME88] für dynamische Anwendungen, liegt mit dem Buch von W. Eckstein vor [Eck91]. SDTrimSP ist ein dreidimensionales Monte-Carlo-Programm, das den Transport von Ionen durch einen strukturlosen Festkörper beschreibt, d. h. alle durch die Gitterstruktur des Festkörpers hervorgerufenen Effekte werden vernachlässigt. Die Streuung am Gitter kann aber neben der Streuung an Einkristallen nur eine Rolle spielen, wenn das polykristalline oder amorphe Target mit einem Teilchenstrahl beschossen wird, dessen Durchmesser kleiner als die Korngröße ist. Für die Plasma-Wand-Wechselwirkung spielen diese Effekte deshalb keine Rolle. Der Abstand  $\lambda_c$  zwischen zwei Stoßstellen wird also nicht durch eine vorbestimmte Position der Festkörperatome, sondern im so genannten Flüssigkeitsmodell mit der Teilchendichte  $n$  festgelegt durch

$$\lambda_c = n^{-1/3}. \quad (3.6)$$

Dies ist eine gute Näherung für die Wahrscheinlichkeitsdichte der freien Weglänge der Projektile, welche man in Simulationsprogrammen erhält, die das Atomgitter berücksichtigen [Eck91]. Damit nicht nur Reflexion und Deposition sondern auch physikalische Zerstäubung richtig beschrieben wird, müssen auch Festkörperatome als Projektile verfolgt werden, die durch einen Stoß genügend Energie erhalten haben, um ihren Gitterplatz zu verlassen.

Nachfolgend werden Parameter zur Beschreibung der Zwei-Körper-Stöße diskutiert, die für Rechnungen in dieser Arbeit nicht verändert wurden. Sie haben sich im Laufe der über zwanzigjährigen Entwicklungszeit des Programms etabliert, da mit ihnen gute Übereinstimmungen mit Experimenten erzielt wurden.

**Simultane elastische Kollisionen** Bei kleinen Einfallsenergien in der Ordnung von  $E_B$  wird die kollektive Wechselwirkung der Projektile mit den Festkörperatomen immer wichtiger. Deshalb berücksichtigt SDTrimSP elastischen Energieverlust durch  $k$  simultane Kollisionen mit weiter entfernten Atomen und entsprechend größeren, zufällig bestimmten Stoßparametern  $p < n^{-1/3}\sqrt{i\pi}$ ,  $i = 1, 2, \dots, k$  (vgl. Gleichung 3.6). Hier wird  $k = 2$  angenommen, da die Beiträge von noch weiter entfernten Stoßpartnern vernachlässigbar sind. Weiterverfolgt werden nur Festkörperatome mit  $i = 1$  ( $\sim 1\%$  Unterschätzung der zu verfolgten Festkörperatome).

**Inelastischer Energieverlust** Lokaler elektronischer Energieverlust nach Oen und Robinson [OR76] geht von der Vermischung der Elektronenwolken der kollidierenden Atome aus. Beim kontinuierlichen elektronischen Energieverlust nach Lindhard und Scharff [LS61] wird das freie Elektronengas des Festkörpers wie ein viskoses Medium für das sich bewegende Ion behandelt. Hier wird von einem Mittelwert aus beiden Modellen ausgegangen. Für die Abbremsung von Wasserstoff liegen tabellierte Daten vor, die besonders für größere Energien ( $\gtrsim$  keV) besser mit experimentellen Daten übereinstimmen [AZ77].

**Wechselwirkungspotenzial** Bei der Berechnung der Zwei-Körper-Stöße stehen verschiedene Potenziale zur Verfügung. Bei allen Rechnungen dieser Arbeit wurde das Krypton-Kohlenstoff (Kr-C)-Potenzial gewählt (siehe Gleichung 2.21, abgeschirmtes Coloumb-Potenzial mit  $c_1 = 0.191$ ,  $c_2 = 0.474$ ,  $c_3 = 0.335$ ,  $d_1 = 0.279$ ,  $d_2 = 0.637$ ,  $d_3 = 1.919$ ), das für viele Ionen-Festkörper-Kombinationen ein gutes mittleres Potenzial darstellt.

**Integrator** Zur Integration von Gleichung 2.20 wird die schnelle, so genannte „magic formula“-Näherung verwendet, die den Streuwinkel abhängig vom Streuparameter  $p$  mit maximal 5% relativem Fehler liefert [Eck91, S. 24].

## Das Oberflächenmodell von SDTrimSP

In SDTrimSP gibt man als Anfangsbedingung die Auflösung des Festkörpers in der Tiefe vor, indem man Schichten der Dicke

$$z_{i,0} = \frac{z_{\max}}{N_L}, \quad i = 1 \dots N_L \quad (3.7)$$

definiert, gegeben durch die Anzahl der Schichten  $N_L$  und die unbeeinflusste Tiefe  $z_{\max}$ . Damit besitzt jede Schicht  $i$  je nach Zusammensetzung mit den Atomsorten  $j = 1 \dots N_S$  eine Gesamtflächendichte

$$\Omega_i = z_i \sum_{j=1}^{N_S} C_j n_j, \quad (3.8)$$

wobei  $C_j$  die Konzentration,  $n_j$  die jeweilige Atomdichte [ $m^{-3}$ ] und  $z_i$  die momentane Schichtdicke darstellt.

Jedes deponierte bzw. erodierte Testteilchen der Sorte  $k$  in einer Schicht  $i$ , das eine Fluenz  $\Phi_{i,k}$  (d. h. Atome pro Fläche) repräsentiert, führt zu einer Veränderung der Schichtdicke um  $\Delta z_i = \Phi_{i,k}/n_k$  und damit zu veränderten Konzentrationen.

Um numerische Fehler zu vermeiden, muss sichergestellt sein, dass  $\Delta z_i$  nicht zu groß ist, d. h.

$$\frac{\Delta z_i}{z_i} = \frac{\Phi_{i,k}}{n_k z_i} \ll 1. \quad (3.9)$$

Sättigungseffekte werden simuliert, indem maximale Konzentrationen für einzelne Atomsorten vorgegeben werden. Wird die Sättigungskonzentration in einer Schicht erreicht, können keine Testteilchen mehr in dieser Schicht deponiert werden, sondern es wird angenommen, dass sie wieder emittiert werden.

Verändert sich eine Schicht so stark, dass sie um die Hälfte ihrer anfänglichen Tiefe  $z_{i,0}$  erodiert wird, so wird sie mit einer benachbarten Schicht zusammengefasst. In dem Fall, dass eine Schicht durch Deposition auf  $1.5z_i$  anwächst, wird sie in zwei neue Schichten unterteilt.

Die Oberfläche des Festkörpers wird immer durch die Ebene  $z = 0$  definiert (auch nachdem Material erodiert bzw. deponiert wurde). Zur Darstellung von Zwischenergebnissen werden die Konzentrationen der veränderten Schichtdicken auf die ursprüngliche Anzahl äquidistanter Schichten interpoliert. Durch die Angabe der Verschiebung der Oberfläche über die Summe der Veränderung der Schichtdicken

$$\Delta z_{\text{tot}} = \sum_i \Delta z_i \quad (3.10)$$

erfährt man, ob die Dicke zu- oder abgenommen hat, d. h. sich der Festkörper in der Gesamt-Netto-Erosion oder Gesamt-Netto-Deposition befindet.

# Kapitel 4

## Modell zur Beschreibung mehrkomponentiger Oberflächenschichten in Fusionsanlagen: Kopplung von ERO und SDTrimSP

Die grundlegende Verbesserung bei der Beschreibung der Wechselwirkung des Plasmas mit der Wand des Plasmagefäßes konnte durch die Benutzung eines neuen Modells für die Beschreibung der Oberfläche erreicht werden, indem ERO mit SDTrimSP gekoppelt wurde. Mit SDTrimSP wird die Implantationstiefe bei der Vermischung von unterschiedlichen Materialien berücksichtigt und damit auch das Verständnis der Dynamik bei Plasma-Wand-Wechselwirkungsprozessen verbessert.

### 4.1 Vergleich Flussbilanz-Oberflächenmodell mit SDTrimSP

Beschreibt man die Oberfläche mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell (Annahme einer homogenen Mischung der Komponenten, Abschnitt 3.1.2) können sich Schwierigkeiten ergeben, sobald sich mehrere Elemente vermischen: Die Tiefe der Interaktionsschicht kann für verschiedene Elemente unterschiedlich sein, so dass die Dynamik der Simulation mit fester Tiefe  $\Delta z$  nicht mit dem Experiment übereinstimmt. Zudem können die Konzentrationsverhältnisse in Abhängigkeit von der Tiefe die Zerstäubungsausbeuten und Reflexionskoeffizienten stark beeinflussen, was mit einer homogenen Mischung nicht beschrieben werden kann.

Dies wird in Abbildung 4.1 deutlich: Hier werden Ergebnisse einer Simulation mit SDTrimSP gezeigt, in der eine Kohlenstoffschicht der Dicke  $\Delta z_C$  auf einem Wolframsubstrat angenommen wird. Auf diese Oberfläche treffen unter senkrechtem Einfall zur Illustration der Zerstäubung Deuteriumionen und zur Illustration der Reflexion  $C^{3+}$ -Ionen mit einer Maxwell-Energieverteilung der Temperatur  $T_i = T_e$ , welche durch das Schicht- und Vorschichtpotenzial (Gleichungen 2.3 und 2.8) zu höheren Energien verschoben ist. Diese Wahl der Projektile als Beispiel behandelt gleichzeitig auch die oft wichtigsten Prozesse für die Beschreibung der ersten Wand in einem Tokamak, die hauptsächlich aus

kohlenstoffhaltigen Materialien besteht: Kohlenstofferosion durch das Wasserstoffplasma ist oft der dominierende Erosionskanal, während an anderer Stelle Deponierung dieser Verunreinigungen zur Bildung von Kohlenstoffschichten führt.

Man erkennt: Je dünner die Schicht und je größer die Energie der erodierenden (Abbildung 4.1a) bzw. reflektierten (Abbildung 4.1b) Teilchen ist, desto wichtiger wird das Wolframsubstrat, für das die Teilchen einen höheren Reflexionskoeffizienten besitzen. Am Substrat reflektierte Projektile besitzen aufgrund der großen Massendifferenz der Teilchen mehr Energie als an Kohlenstoff reflektierte Teilchen (vgl. Gleichung 2.17), die dann zur Verfügung steht, Kohlenstoff von der Oberfläche zu zerstäuben (gemäß Abbildung 2.4b) bzw. die Oberflächenbindungsenergie zu überwinden und den Festkörper wieder zu verlassen. Durch die Kopplung von ERO mit SDTrimSP werden diese Effekte berücksichtigt.

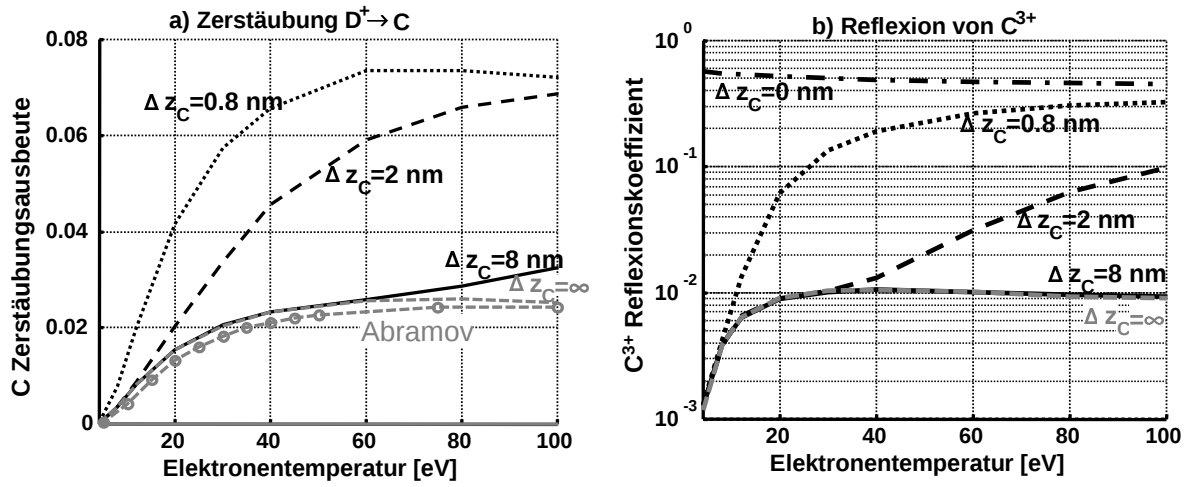


Abbildung 4.1: Berechnungen mit SDTrimSP ausgehend von einer dünnen Kohlenstoffschicht unterschiedlicher Dicke  $\Delta z_C$  auf Wolframsubstrat ( $\Delta z_C = 0 \hat{=}$  reine Wolframoberfläche). **a**: Zerstäubungsausbeuten von Kohlenstoff (in grau mit Kreisen „Abramov“: Zerstäubung nach [AIPP89]). **b**: Reflexionskoeffizienten von  $C^{3+}$ .

Die tatsächlichen Auswirkungen der Kopplung auf die Simulationen lassen sich am besten mit Hilfe des Beispiels in Abbildung 4.2 verstehen. Dazu wurde die Elektronentemperatur zu  $T_e = 40$  eV gewählt. Die maximale Eindringtiefe von Deuterium in Wolfram beträgt 10 nm für diese Bedingungen. Für das Flussbilanz-Modell wird also eine Interaktionsschichtdicke von  $\Delta z = 10$  nm gewählt. Damit ergeben sich effektive Zerstäubungsausbeuten  $Y_{D \rightarrow C, \text{eff}} = Y_{D \rightarrow C} \cdot C_C$  und Reflexionskoeffizienten  $R_{C, \text{eff}} = C_C \cdot R_{C \rightarrow C} + C_W \cdot R_{C \rightarrow W}$  durch die Gewichtung der Werte für die reinen Materialien mit der Konzentration  $C_C = \Delta z_C / \Delta z$  und  $C_W = (\Delta z - \Delta z_C) / \Delta z$ . In den Grenzfällen reiner Oberflächen ( $\Delta z_C = 0$  (reines Wolfram) bzw.  $\Delta z_C = 10$  nm (reiner Kohlenstoff)) liefern beide Modelle identische Ergebnisse. Für die Zerstäubung gilt, dass im Flussbilanz-Modell bei dünnen Kohlenstoffschichten, also kleinen Kohlenstoffkonzentrationen  $C_C$ , die effektive Kohlenstoffzerstäubung kleiner wird, während mit SDTrimSP gerade hier maximale Ausbeuten erreicht werden. Bei der Reflexion ist es genau umgekehrt: Schon sehr dünne Kohlenstoffschichten führen dazu, dass die sehr effektive Kohlenstoffreflexion an Wolfram stark unterdrückt wird, während im Flussbilanz-Modell durch kleine Werte

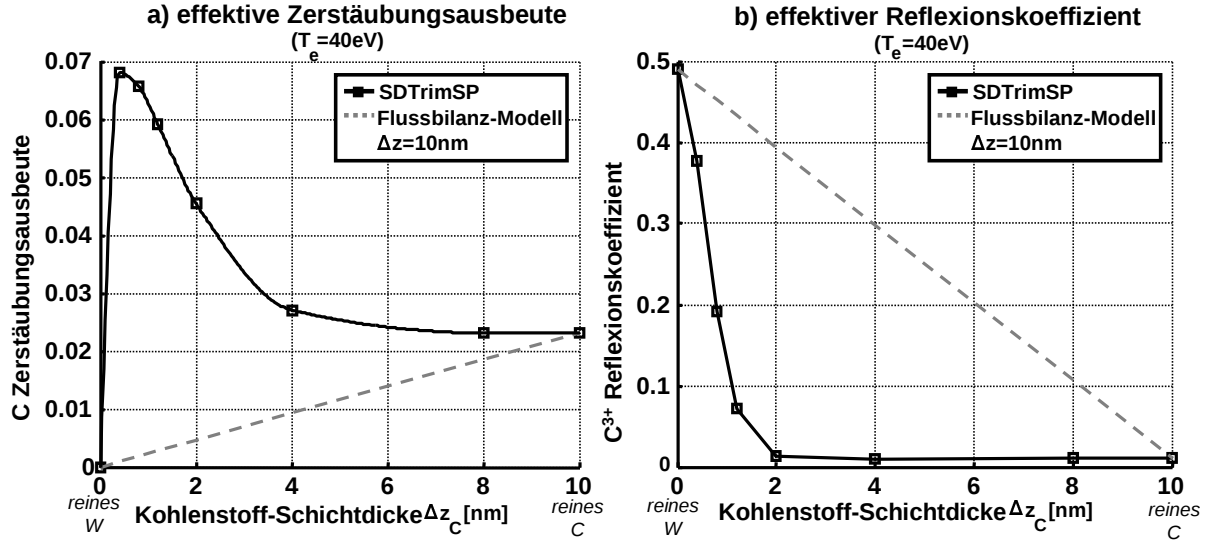


Abbildung 4.2: Vergleich des Flussbilanz-Oberflächenmodells (Interaktionsschicht  $\Delta z = 10\text{nm}$ ) mit SDTrimSP bei  $T_e = 40\text{eV}$  ausgehend von einer dünnen Kohlenstoffschicht unterschiedlicher Dicke auf Wolframsubstrat. **a:** Effektive Zerstäubungsausbeuten von Kohlenstoff. **b:** Effektive Reflexionskoeffizienten von  $C^{3+}$ .

$C_C$  die Reflexion an Wolfram dominiert.

Das bedeutet für die Deposition von Kohlenstoff auf Wolfram, dass Kohlenstoffdeposition zunächst stark unterdrückt wird. Sobald aber eine kleine (die Oberfläche bedeckende) Schicht Kohlenstoff aufgebaut wurde, bei der keine starke Erhöhung der Ausbeute mehr vorliegt (im Beispiel  $\gtrsim 4\text{ nm}$ ), kann die vollständige Unterdrückung der Reflexion am Wolframsubstrat die Grundlage für schnelleres Schichtwachstum liefern, als es mit dem Flussbilanz-Modell beschrieben wird.

## 4.2 Chemische Effekte in SDTrimSP

SDTrimSP ist ursprünglich nur zur Beschreibung von physikalischen Zwei-Körper-Stößen vorgesehen und chemische Effekte werden nicht berücksichtigt. Insbesondere die chemische Erosion von Kohlenstoff durch das Wasserstoffplasma im Tokamak spielt aber eine große Rolle für die Lebenszeit von Wandkomponenten und die Kodeposition von Wasserstoff in deponierten Schichten, so dass entsprechende Effekte in das Modell integriert wurden. Es sollen alle chemischen Effekte, die mit ERO zur Simulation der Experimente umgesetzt sind (Abschnitt 3.1.2: chemische Erosion, erhöhte chemische Erosion, effektives Sticking von Kohlenwasserstoffen) auch in der Kopplung mit SDTrimSP simuliert werden können.

Die prinzipiellen Auswirkungen dieser Effekte auf die Simulationsergebnisse von SDTrimSP werden in Abschnitt 4.3 anhand von Beispielen diskutiert.

### Chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff

Zur Realisierung der chemischen Erosion in SDTrimSP wurden im Rahmen dieser Arbeit drei verschiedene Modelle umgesetzt, die alle die Angabe einer chemischen Erosionsaus-

beute ( $Y_{\text{chem}}$ ) benötigen. Alle Modelle sollen den Mechanismus beschreiben, dass durch den Wasserstofffluss  $\Gamma_{\text{H}}$  ein Kohlenstofffluss  $\Gamma_{\text{H}} C_{\text{C}} Y_{\text{chem}}$  die Oberfläche mit der Kohlenstoffkonzentration  $C_{\text{C}}$  in Form von  $\text{CH}_4$  verlässt.

In der Literatur existieren mehrere Vorschläge, die berücksichtigen, dass zur Bildung der Moleküle die Projektile zunächst thermalisiert sein müssen. Die Eindringtiefe der Wasserstoffprojektile lässt sich mit einer Gauß-Verteilung annähern. Damit ist es möglich, die chemische Erosion in der Umgebung der mittleren Eindringtiefe von Wasserstoff gemäß einem Gauß-Profil anzuwenden [SR03].

Da SDTrimSP die tatsächliche Eindringtiefe von Wasserstoff direkt liefert, wurde auf die Verwendung dieses Vorschlags verzichtet. Drei andere Modelle, die aufeinander aufbauen, wurden verglichen, um herauszufinden ob die Simulationen der Experimente auf ein einziges Modell der chemischen Erosion beschränkt werden können:

1. Chemische Erosion findet mit der Wahrscheinlichkeit  $Y_{\text{chem}}$  direkt an den Orten statt, an denen Wasserstoffprojektile durch die Verfolgung von SDTrimSP soweit abgebremst wurden, dass ihre vorgegebene Abschneideenergie  $E_F$  unterschritten wird (gestoppte Wasserstoffprojektile, [OK01]). Die effektive Erosionsausbeute  $Y_{\text{chem,eff}}$  liegt damit unter dem vorgegebenen Wert  $Y_{\text{chem}}$ , da aus dem Fluss mit dem Reflexionskoeffizienten  $R_{\text{H}}$  reflektierte Ionen dann nicht zur Erosion beitragen:  $Y_{\text{chem,eff}} = (1 - R_{\text{H}}) Y_{\text{chem}}$ .
2. Chemische Erosion findet zu einem Teil in der obersten Oberflächenschicht statt (beschrieben durch  $Y_{\text{surf}}$  siehe Gleichung 2.30) und für den verbleibenden Anteil mit der Wahrscheinlichkeit  $(Y_{\text{chem}} - Y_{\text{surf}})$  an den Orten, an denen Wasserstoffprojektile gestoppt wurden.
3. Wie Modell 2, aber unter Berücksichtigung des reflektierten Wasserstoffs: Wurden seit dem letzten gestoppten Wasserstoffprojektil andere Projektile reflektiert, wird die Fluenz dieser Teilchen bei der Berechnung der erodierten Methanmoleküle berücksichtigt, so dass wieder  $Y_{\text{chem,eff}} = Y_{\text{chem}}$  gilt.

In Fällen, in denen die Formel für chemische Erosion (Gleichung 2.26) nicht angewendet wird (z. B. falls keine orts aufgelöste Oberflächentemperatur bekannt ist oder keine konkreten experimentellen Informationen zur chemischen Erosion vorliegen), entfällt die Aufteilung in  $Y_{\text{chem}} - Y_{\text{surf}}$  und  $Y_{\text{surf}}$  in Modell 2 und 3. Chemische Erosion findet dann immer an den Orten statt, an denen die Wasserstoffprojektile gestoppt werden (Modell 1 und 2 sind dann identisch, Modell 3 wird um den reflektierten Anteil korrigiert). Erhöhte chemische Erosion für redeponierte Kohlenstoffschichten (wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben) wird in Form eines Multiplikators  $f_{\text{chem}}$  an die Erosionsausbeuten  $Y_{\text{chem}} - Y_{\text{surf}}$  bzw.  $Y_{\text{surf}}$  für Graphit berücksichtigt.

Die Auswirkungen der unterschiedlichen Modelle werden in Abschnitt 4.4.2 diskutiert. Für die Simulationen der Experimente wurde das am weitesten entwickelte Modell 3 verwendet.

### Sticking von Kohlenwasserstoffen

Um den Einfluss von effektivem Sticking  $S_{\text{eff}}$  auch mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell untersuchen zu können, wird für jedes Kohlenwasserstoffprojektil durch einen Zufallspro-

zess bestimmt, ob es gemäß der vorgegebenen Wahrscheinlichkeit  $S_{\text{eff}}$  die Oberfläche verlassen darf oder nicht.

Angenommen, es wurde durch den Zufallsprozess bestimmt, dass das Kohlenwasserstoffradikal an der Oberfläche haften bleibt. In diesem Fall wird ein Projektil, das nach der Verfolgung der Trajektorie durch SDTrimSP den Festkörper hätte verlassen, d. h. reflektiert werden müssen, an der Oberfläche gestoppt und dort als Kohlenstoff deponiert. Im umgekehrten Fall, d. h. wenn durch den Zufallsprozess bestimmt wurde, dass das Kohlenwasserstoffradikal reflektiert wird, wird das Projektil, das im Festkörper gestoppt wurde, nicht deponiert, sondern wieder als  $\text{CH}_4$  emittiert.

Diese Projektile können aber durchaus zur Zerstäubung des Festkörpers beitragen.

### 4.3 Kopplung der Monte-Carlo-Programme ERO und SDTrimSP

Durch die Kopplung von ERO mit SDTrimSP zu ERO-SDTrimSP werden alle Prozesse, die sich im Festkörper abspielen (Reflexion, Deposition, Zerstäubung) von SDTrimSP berechnet und der Transport im Plasma von ERO. ERO übergibt Winkel- und Energieverteilung von auf die Oberfläche treffenden Teilchen an SDTrimSP. Umgekehrt liefert SDTrimSP die Winkel- und die Energieverteilung für Teilchen, die den Festkörper wieder verlassen.

Die Transportprozesse im Plasma verglichen mit denen im Festkörper laufen auf unterschiedlichen Zeitskalen ab. Während Verunreinigungsteilchen im Plasma Mikro- bis Milli-Sekunden benötigen, um ausgehend von ihrem Ursprungsort wieder an anderer Stelle deponiert zu werden, werden die Projektile im Festkörper innerhalb von Femto- bis Piko-Sekunden abgebremst oder reflektiert. Wichtiger für die Kopplung ist aber, dass die Zeitkonstante, mit der sich die Oberfläche wesentlich durch das Plasma ändert (für gewöhnlich  $\gtrsim 0.1\text{s}$ ), größer als die Transportzeit durch das Plasma ist. Dadurch kann man annehmen, dass alle Teilchen eines Zeitschrittes  $t_{\text{ERO}}$  mit derselben Oberflächenzusammensetzung wechselwirken. Die Änderung der Oberfläche wird durch die Fluenz bestimmt ( $\Phi = \Gamma t_{\text{ERO}}$ ) und dies kann deshalb zur Verwendung kleiner Zeitschritte  $t_{\text{ERO}}$  zwingen, wenn der Plasmafluss  $\Gamma$  groß ist.

Konkret teilt man die Oberflächen bei ERO in Oberflächenzellen ein und startet von allen diesen eine ausreichende Anzahl von Testteilchen  $n_{H,\text{ERO}}$ , die jeweils eine Anzahl  $N_{r,\text{ERO}}$  realer Teilchen repräsentieren. Die Anzahl der Testteilchen muss groß genug sein, damit die statistischen Fehler der Observablen von Interesse in einem Zeitschritt  $t_{\text{ERO}}$  (Licht-Emission und/oder Fluenz-Verteilung auf die Oberfläche) hinreichend klein werden. Gewöhnlich ist der statistische Fehler kleiner als der experimentelle Fehler der Observablen, mit der man die Simulationen vergleicht.

Auch im einfachen Mischmodell mit fester Interaktionsschichtdicke  $\Delta z$  muss sichergestellt werden, dass  $N_{r,\text{ERO}} \ll n_i \Delta z A$  gilt, damit auf die Fläche  $A$  der Oberflächenzelle auftreffende Testteilchen eines Zeitschrittes die Konzentration in der Oberfläche nicht zu stark ändern können.

Die Anzahl der Teilchen, die ERO verfolgen muss, damit die Statistik gut genug und die Rechenzeit vertretbar ist, reicht im Allgemeinen für eine gute Statistik in SDTrimSP nicht aus. Nach Gleichung 3.9 muss ganz ähnlich für SDTrimSP  $N_{r,\text{TRIM}} \ll n_k z_i A$  gelten,

mit der Ausnahme, dass die Schichtdicke  $z_i$  nicht wie  $\Delta z$  in der Größenordnung der maximalen Eindringtiefe der energiereichsten Projektile liegt. Die  $z_i$  müssen klein genug gewählt werden, um das Implantationsprofil aller Projektile aufzulösen. Dies liegt bei den betrachteten Energien der Projektile in der Größenordnung weniger Atomlagen (weniger als  $\approx 1$  nm) und damit um einen Faktor 100 kleiner als  $\Delta z$ .

Deshalb werden die Testteilchen von ERO für gewöhnlich in mehrere SDTrimSP-Teilchen aufgespalten, so dass die resultierende Fluenz der Testteilchen in SDTrimSP höchstens den festen Anteil  $f_{nh}$  der Flächendichte der kleinsten Oberflächenzelle ausmacht:

$$\frac{\Phi_{i,k}}{n_k z_i} = f_{nh}, \quad (4.1)$$

beispielsweise  $f_{nh} = 0.01$ .

Um für alle Oberflächenzellen  $k$  identische absolute Genauigkeiten für die Reflexionskoeffizienten und Zerstäubungsausbeuten zu erhalten, orientiert sich die Zahl der berechneten Testteilchen

$$n_{H, \text{TRIM}} = \frac{\Phi_k A_k}{N_{r, \text{TRIM}}} \quad (4.2)$$

an der Zelle, für die  $\Phi_k A_k$  maximal ist. Der statistische Fehler ist damit für jede Zelle proportional zu  $1/\sqrt{n_{H, \text{TRIM}}}$ .

In speziellen Situationen sind selbst sehr geringe Verunreinigungskonzentrationen im Plasma von Interesse<sup>1</sup>. Dann ist es notwendig, dass man eine minimale Anzahl  $n_{H, \text{min}}$  festlegt, damit sichergestellt ist, dass beispielsweise eine bestimmte Erosionsausbeute statistisch relevant bleibt. Damit kann auch sichergestellt werden, dass die relativen Fehler von ERO und SDTrimSP vergleichbar bleiben. Eine Diskussion dieser Fehler findet in Abschnitt 4.4.1 statt.

Aufgrund der größeren Teilchenanzahl, die gewöhnlich mit SDTrimSP verfolgt wird, liefert SDTrimSP oft auch mehr reflektierte oder zerstäubte Testteilchen, als von ERO weiterverfolgt werden können. Darum wird aus diesen Testteilchen ein Bruchteil zufällig ausgewählt und  $N_{r, \text{ERO}}$  entsprechend der nicht weiter verfolgten Testteilchen skaliert. Im anderen Fall, dass SDTrimSP weniger reflektierte oder zerstäubte Testteilchen berechnet, als von ERO erwartet werden, startet ERO auch nicht mehr Testteilchen.

Abbildung 4.3 zeigt den Programmablaufplan für die Kopplung der beiden Programme. SDTrimSP wird demnach zweimal von ERO aufgerufen, einmal um die Deposition und die Zerstäubung zu berechnen (4.3, Schritt 3) und ein zweites Mal, um die Reflexion der verfolgten Teilchen zu bestimmen (4.3, Schritt 5). Beim zweiten Mal werden die Konzentrationsprofile nicht verändert („statisch“, d. h. nur TRIM), damit alle verfolgten Teilchen eines Zeitschrittes mit derselben Oberflächenzusammensetzung wechselwirken. Dies ist notwendig, um die Gleichzeitigkeit der Wechselwirkung von Teilchen aus verschiedenen Quellen (physikalische Erosion, chemische Erosion, Injektion von Teilchen durch eine Düse) zu gewährleisten. Die Teilchenflüsse der durch das Plasma verfolgten Teilchen tragen dann im nächsten Zeitschritt *gleichzeitig* mit der Wechselwirkung des Hintergrundplasmas zur Erosion und Deposition bei. Diese Vorgehensweise spielt vor allem eine Rolle, wenn man Teilchenquellen an der Oberfläche hat, die in der Größenordnung der Flüsse aus dem Hintergrundplasma liegen. Durch diese Maßnahme wird

<sup>1</sup>Beispielsweise für den Vergleich mit einem Experiment, in dem Wolframlinien spektroskopisch beobachtet wurden. Wolfram besitzt sehr geringe Zerstäubungsausbeuten.

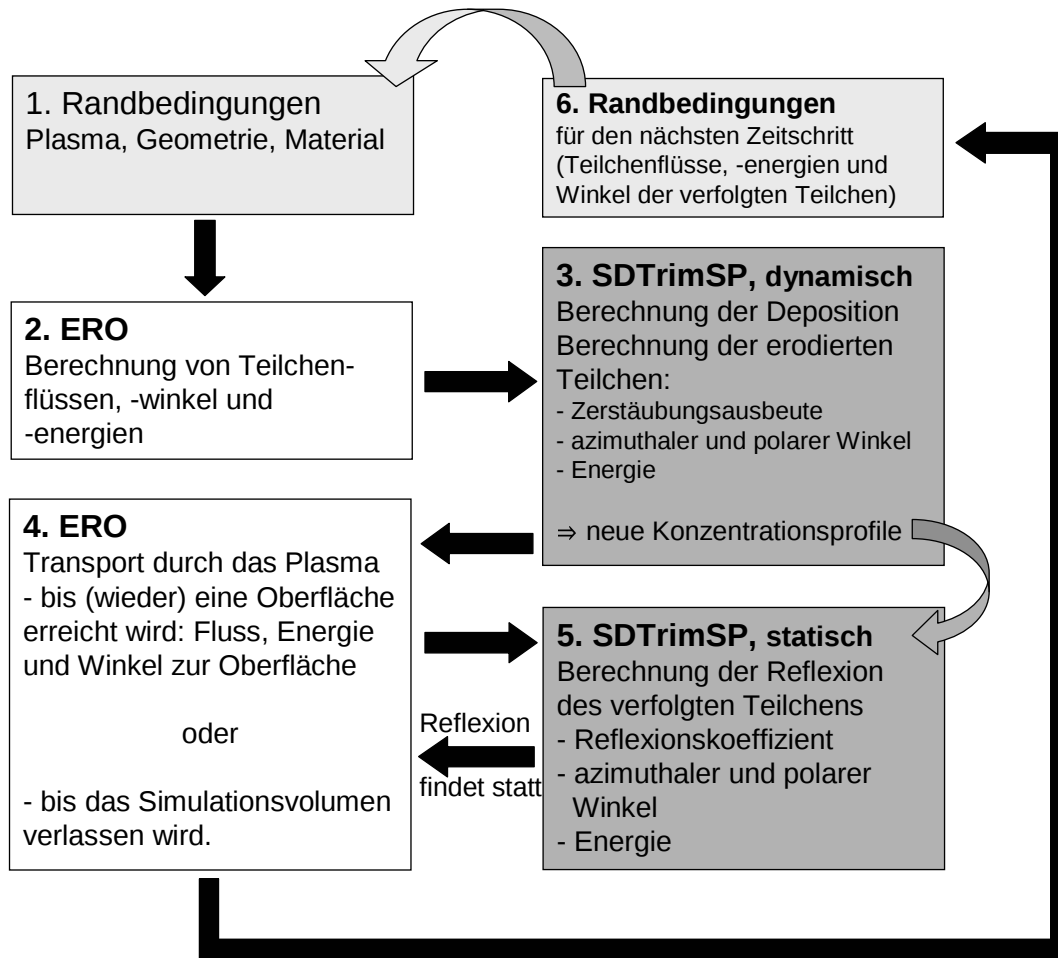


Abbildung 4.3: Programmablauf für die Kopplung von ERO mit SDTrimSP

die Simulation auch weitgehend unabhängig von der Wahl von  $t_{\text{ERO}}$ , solange es nicht zu groß gewählt wird (einzig die Reflexionskoeffizienten ändern ihren Wert nur im zeitlichen Abstand von  $t_{\text{ERO}}$ ).

In Abbildung 4.4 wird ein Beispiel gezeigt, das den Informationsaustausch zwischen den beiden Programmen verdeutlicht. Es handelt sich um eine typische Energie- und Winkelverteilung der auf die Oberfläche treffenden von ERO verfolgten Verunreinigungsteilchen. Diese Energie- und Winkelverteilung wird im nächsten Zeitschritt dazu benutzt, die Veränderung der Wand durch Zerstäubung und Deposition gleichzeitig mit dem auf die Oberfläche treffenden Teilchen des Hintergrundplasmas mit Hilfe von SDTrimSP zu berechnen. In dem Beispiel handelt es sich um durch ein Injektionsloch in ein konstantes Plasma eingelassenes Methan (Situation in Abbildung 4.5).

Da die Zerstäubungsraten und Reflexionskoeffizienten bei flachen Einfallswinkeln ( $> 50^\circ$ ) und niedrigen Energien ( $< 100 \text{ eV}$ ) die größte Abhängigkeit von diesen Größen zeigen, wurde die Diskretisierung nicht äquidistant gewählt. Diese Optimierung erfolgte, um den Arbeitsspeicher des Computers optimal auszunutzen.

Teilchen, die als Atome bzw. Ionen auf die Oberfläche zurückkommen, haben sich in diesem Fall zuvor weit von dieser entfernt ( $\approx 1 \text{ cm}$  und weiter) und wurden zum Teil mehrfach ionisiert. In dem Energiespektrum befinden sich die Maxima also bei Vielfa-

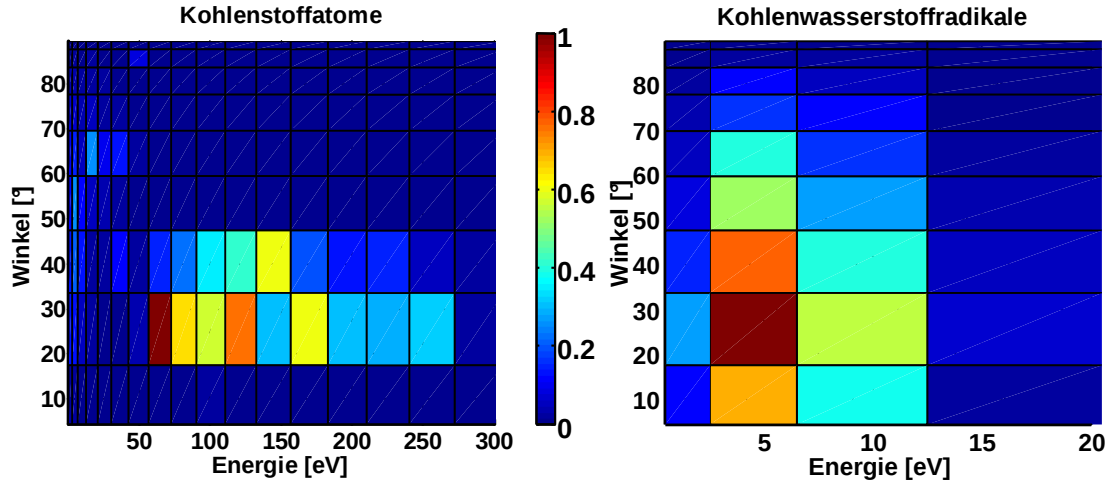


Abbildung 4.4: Typische normierte Energie- und Winkelverteilungen von auf eine Oberfläche treffenden Atomen bzw. Radikalen aus einer  $\text{CH}_4$ -Injektionsquelle. Die Intensitäten sind farbcodiert dargestellt. Maxima im Energiespektrum finden sich bei den Vielfachen des Schichtpotenzials von 80 eV. Die Diskretisierung der Energie- und Winkelverteilung erfolgte nicht äquidistant.

chen des Schichtpotenzials (in diesem Fall  $\approx 80\text{ eV}$ ). Das elektrische Feld, das sich aus dem Schichtpotenzial ergibt, steht außerdem senkrecht zur Oberfläche, so dass die Winkelverteilung Maxima bei kleinen Winkeln besitzt. Die Moleküle bzw. Radikale hingegen erreichen die Oberfläche in diesem Fall oft auch als Neutrale, indem sie bei einer Dissoziation ihre Richtung geändert haben. Damit nehmen sie nicht die Energie aus dem Schichtpotenzial auf und die Winkelverteilung ist gleichmäßiger über alle Winkel verteilt.

## 4.4 Parameterstudien mit dem gekoppelten Programm

Anhand einiger einfacher Beispiele werden in diesem Abschnitt die Effekte diskutiert, die bei der Interpretation der Simulation der Experimente eine Rolle spielen. Der zeitliche Verlauf der Oberflächenzusammensetzung und der daraus folgenden Reflexion, Deposition und Zerstäubung widerspricht manchmal der ersten intuitiven Vorstellung, die man von diesen Abläufen haben kann. Deshalb ist es um so wichtiger, ein gutes Verständnis von allen möglichen Zeitverläufen zu haben, um die Simulationen nicht zu früh abubrechen und damit Ergebnisse falsch zu interpretieren. Insbesondere der für eine bestimmte Zeit konstante Verlauf von Reflexion, Deposition und Zerstäubung reicht nicht aus, um zu entscheiden, ob sich diese Werte auch im weiteren Verlauf nicht mehr ändern werden. Allein die konstante Oberflächenzusammensetzung lässt bei konstanten äußeren Bedingungen diesen Schluss zu, wie später gezeigt wird. Dabei müssen stabile Konzentrationsprofile von instabilen unterschieden werden, um somit statistische Schwankungen in den Profilen von relevanten Änderungen unterscheiden zu können.

Voraussetzung für die Simulation ist immer, dass der dynamische Bereich über eine geeignete Wahl der Anfangsbedingung für  $\Delta z_{\text{max}}$  (Gleichung 3.7) groß genug ist, so dass alle Projektile und durch diese in Bewegung gesetzten Teilchen in diesem Bereich zum Stillstand kommen. Im Fall von Netto-Erosion ist es sogar notwendig, dass  $\Delta z_{\text{max}}$  so groß

ist, dass bis zum Erreichen einer Gleichgewichtskonzentration die am tiefsten liegende Oberflächenschicht bei  $z = \Delta z_{\max}$  durch die Simulation nicht verändert wurde. Falls dies nicht zutrifft, würde durch SDTrimSP die Zusammensetzung des Substratmaterials verfälscht, das aber gemessen an der simulierten Zeitdauer im Allgemeinen unendliche Dicke besitzt.

Die Parameterstudien sollen dazu dienen, einzelne Effekte isoliert zu betrachten. Dazu wird nur eine einzige Oberflächenzelle benötigt, so dass somit relativ kurze Rechenzeiten erreicht werden. Dadurch lassen sich alle wichtigen Parameter über einen größeren Bereich variieren.

Zunächst müssen statistische und eventuelle systematische Fehler diskutiert werden. Außerdem spielen bei der Beschreibung der experimentellen Ergebnisse die Kohlenstoffkonzentration im Plasma  $\rho_C$ , Ausbeuten für chemische Erosion  $Y_{\text{chem}}$  und Reerosion  $Y_{RE}$  sowie der Einfluss einer lokalen Teilchenquelle eine große Rolle, so dass deren Einfluss unabhängig voneinander untersucht wird.

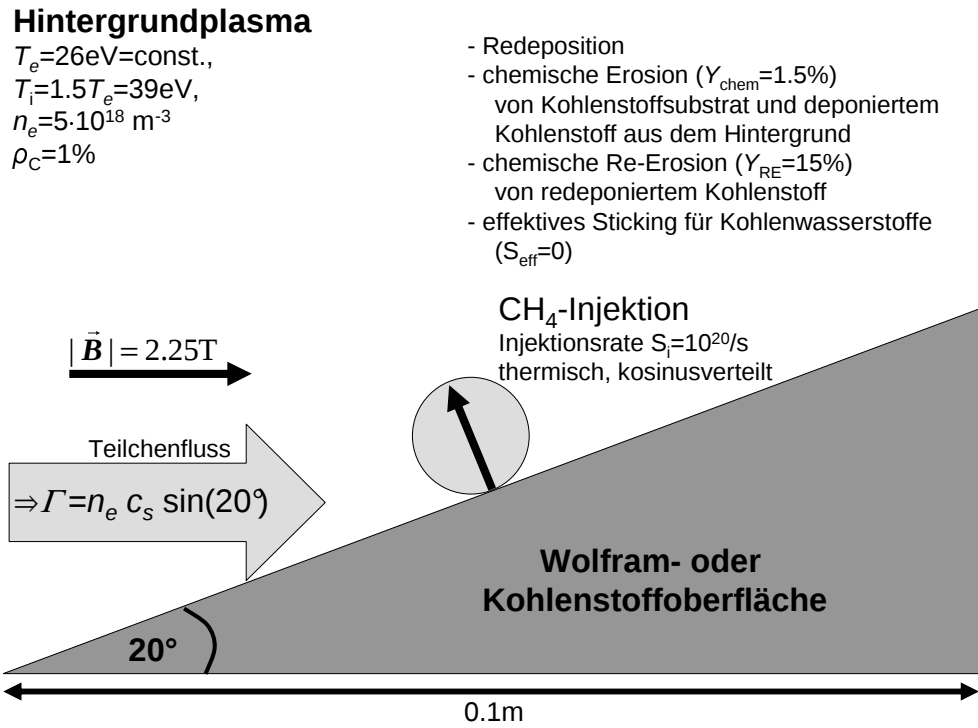


Abbildung 4.5: Schema für die Parametervariationen zur Illustration der Effekte, die mit dem gekoppelten Programm simuliert werden können

Als Ausgangsbasis dient dabei eine Situation, wie sie in Abbildung 4.5 zu sehen ist. Diese Basis wurde so gewählt, dass an der Oberfläche realistische Bedingungen herrschen, wie man sie auch in typischen Testlimiter-Experimenten in TEXTOR erwartet (wie in Kapitel 5). Allerdings wurde auf jede Ortsabhängigkeit verzichtet.

Zusätzlich sollen die Ergebnisse möglichst empfindlich auf jede Änderung der Simulationsparameter reagieren, damit Unterschiede zwischen ERO-SDTrimSP und ERO mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell schneller offensichtlich werden. Dies ist der Fall, wenn eine Situation simuliert wird, die „gerade noch“ von Netto-Erosion dominiert wird, so dass sich die Oberflächenzusammensetzung im Zeitverlauf stark ändert. Betrachtet

man hingegen Zustände mit Netto-Deposition, so ändert sich die Oberflächenzusammensetzung zunächst zwar auch stark, die Entwicklungen der Konzentrationsverhältnisse in der Oberfläche sind vielfach jedoch schon mit dem einfachen Flussbilanz-Modell zu verstehen und tragen zu dem Verständnis der Besonderheiten des Oberflächenmodells wenig bei.

Es wird ein Plasma gewählt, dessen Parameter im Simulationsvolumen konstant sind ( $T_e = 26\text{eV}$ ,  $T_i = 1.5T_e$ ,  $n_e = 5e18\text{m}^{-3}$ ). Die Kohlenstoffverunreinigung ist  $\rho_C = 1\%$ . Eine ebene Oberfläche befindet sich im Winkel von  $20^\circ$  geneigt zum Magnetfeld ( $B = 2.25\text{T}$ ). Dadurch wird ein gewisser Prozentsatz an Redeposition von erodierten und reflektierten Teilchen auf die Oberfläche gesichert. Schließlich wird in Abschnitt 4.4.4 dieser Parameterstudien zusätzlich eine Teilchenquelle für thermisches Methan in der Mitte des ca. 10cm breiten Limiters angenommen.

Eine genaue Dokumentation und Gegenüberstellung der wichtigsten Simulationsparameter für alle in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen findet sich im Anhang A.

#### 4.4.1 Statistische und systematische Fehler

Im Folgenden wird sowohl das optimale Verhältnis  $f_{nh}$  aus Fluenz und Flächendichte bestimmt als auch die Wahl von  $t_{\text{ERO}}$  diskutiert. Die Simulationsergebnisse dürfen keine Abhängigkeit von diesen Parametern zeigen. Außerdem soll die Rechenzeit der Simulationen, die von der Anzahl der Oberflächenzellen, von  $\Delta z$ , von der gewünschten Statistik „auf der Plasmaseite“ in ERO und insbesondere auch von  $f_{nh}$  abhängt, möglichst kurz sein.

##### Simulationszeitschritt $t_{\text{ERO}}$ von ERO

Es ist mit einer systematischen Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Länge des gewählten Zeitschrittes zu rechnen, da sich die Oberflächenzusammensetzung während eines Zeitschrittes  $t_{\text{ERO}}$  für die Berechnung der Reflexion von verfolgten Verunreinigungsteilchen nicht ändert. In ERO (mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell) ist die Abhängigkeit von der Länge des gewählten Zeitschrittes sogar größer, da auch die Zerstäubung auf der statischen Oberflächenzusammensetzung eines Zeitschrittes beruht, während sich in ERO-SDTrimSP die Oberfläche für die Zerstäubung (für alle Zerstäubungskanäle gleichzeitig) dynamisch mit dem viel kleineren effektiven Zeitschritt

$$\frac{t_{\text{ERO}}}{n_{H,\text{TRIM}}} = \frac{N_{r,\text{TRIM}}}{\Gamma_k A_k} \quad (4.3)$$

ändert, der unabhängig von  $t_{\text{ERO}}$  ist, wie man mit Hilfe von Gleichung 4.2 sieht (da  $n_{H,\text{TRIM}} \propto t_{\text{ERO}}$ ). Eine Vergrößerung von  $t_{\text{ERO}}$  geht dann allerdings zu Lasten der statistischen Genauigkeit der Zerstäubungsausbeuten ( $\propto 1/\sqrt{n_H} \propto 1/\sqrt{t_{\text{ERO}}/f_{nh}}$ ) in jedem Zeitschritt, so dass eine Verkleinerung des Zeitschrittes schließlich nur noch Sinn hat, wenn man auch  $f_{nh}$  verkleinert (auch wenn das Simulationsergebnis nach derselben Gesamtzeit dasselbe bleibt, abgesehen von der im nächsten Abschnitt im Zusammenhang mit  $f_{nh}$  zu besprechenden systematischen Ungenauigkeit für große  $t_{\text{ERO}}$ ).

Abbildung 4.6a zeigt den zeitlichen Verlauf der akkumulierten Kohlenstoff- bzw. Wolframdeposition auf dem Wolframlimiter für verschiedene Werte von  $t_{\text{ERO}}$ . Für die Deposition des Kohlenstoffs aus dem Hintergrundplasma ergibt sich erwartungsgemäß keine

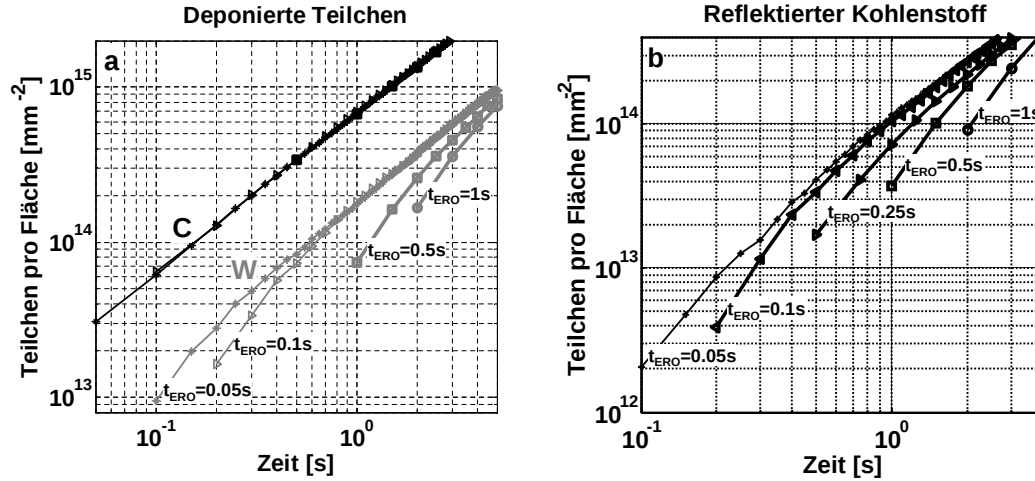


Abbildung 4.6: Simulationen (für einen Wolframlimiter) des zeitlichen Verlaufs für verschiedene Werte von  $t_{\text{ERO}}$  von **a**: akkumulierter Deposition von Kohlenstoff aus dem Hintergrundplasma bzw. von zuvor zerstäubtem Wolfram, **b**: Reflexion von zuvor zerstäubtem Kohlenstoff

Abhängigkeit vom Zeitschritt, da hier die von ERO verfolgten und reflektierten Teilchen nur im Prozentbereich eine Rolle spielen. Wolframatome, die zunächst erodiert werden müssen, um dann deponiert werden zu können, machen dies bei kleinen Zeitschritten schon zeitlich früher als bei großen Zeitschritten, so dass anfänglich die Wolframkonzentration in der Oberfläche bei kleinen Zeitschritten größer ist. Dies sieht man auch an der zeitlichen Entwicklung der Reflexion von erodiertem Kohlenstoff in Abbildung 4.6b, da die Reflexionskoeffizienten von Kohlenstoff auf Wolfram größer sind als für Kohlenstoff auf Kohlenstoff. Abbildung 4.7b zeigt Kohlenstoffkonzentrationsprofile bei  $t=5\text{s}$ . Die erste ansteigende Flanke ist für jede Wahl von  $t_{\text{ERO}}$  identisch, was darauf hindeutet, dass die Gleichgewichtskonzentration für alle Fälle identisch wird. Allerdings fällt die Konzentration für kleinere  $t_{\text{ERO}}$  aufgrund der höheren Wolfram-Redeposition geringfügig

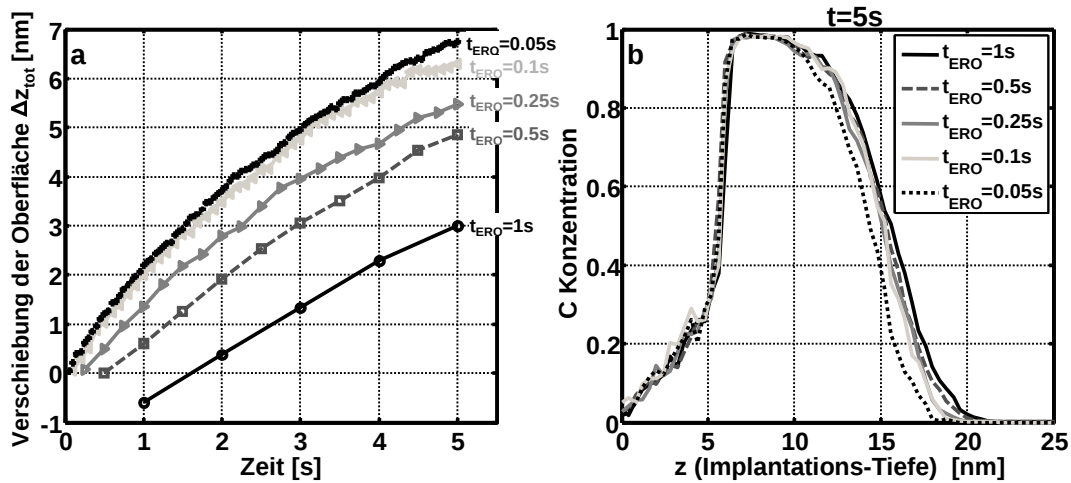


Abbildung 4.7: **a**: Insgesamt deponierte Schicht, **b**: Kohlenstoffkonzentration nach 5s, jeweils für verschiedene Werte  $t_{\text{ERO}}$

schneller ab. Die verschiedene Redeposition von zerstäubtem Material äußert sich auch in der insgesamt deponierten Schicht<sup>2</sup>  $\Delta z_{\text{tot}}$ , wie man in Abbildung 4.7a sieht. In dem großen Zeitschritt findet über diese Zeit keine Redeposition statt, so dass mehr Substratmaterial erodiert wird. Um solche Effekte auszuschließen, wurde für alle Simulationen von Experimenten der Zeitschritt  $t_{\text{ERO}} = 0.1\text{s}$  gewählt. Der Unterschied zum nächstkleineren dargestellten Zeitschritt liegt dann fast schon in der statistischen Genauigkeit der Simulation.

### Verhältnis $f_{nh}$ aus Fluenz zur Flächendichte in einer Oberflächenschicht

Systematische Fehler in der Simulation können dadurch entstehen, dass durch die Zerstäubung eines Projektils eine Anzahl  $N_{\text{err}}$  Atome mehr aus einer Oberflächenschicht entnommen werden müsste, als darin vorhanden ist. Dies lässt sich verhindern, wenn die Fluenz jedes Projektils kleiner gewählt wird als die in einer Oberflächenschicht minimal vorhandene atomare Flächendichte einer Atomsorte, d. h. indem  $f_{nh}$  (Gleichung 4.1) klein genug gewählt wird. In dem Beispiel des Wolfram-Testlimiters ist  $N_{\text{err}}$  für redeponierten Kohlenstoff am größten, da dieser die kleinsten Oberflächenkonzentrationen aufweist und deshalb am häufigsten vollständig aus einer Oberflächenschicht erodiert wird. Für den redeponierten Kohlenstoff zeigt Abbildung 4.8 das mittlere Verhältnis von  $N_{\text{err}}$  zu dem im jeweiligen Zeitschritt insgesamt redeponierten Kohlenstoff in Abhängigkeit von  $f_{nh}$ . Damit können die Fehler mit den relevanten Änderungen der Simulation in Beziehung gesetzt werden. Für  $f_{nh} = 0.01$  liegt auch der systematische Fehler fast immer unter 0.01 der redeponierten Kohlenstoffatome (mittlerer relativer Fehler ist 0.007), für  $f_{nh} = 0.001$  tritt nur noch sporadisch ein numerischer Fehler unter 0.001 der deponierten Atome auf (mittlerer relativer Fehler ist  $10^{-4}$ ).

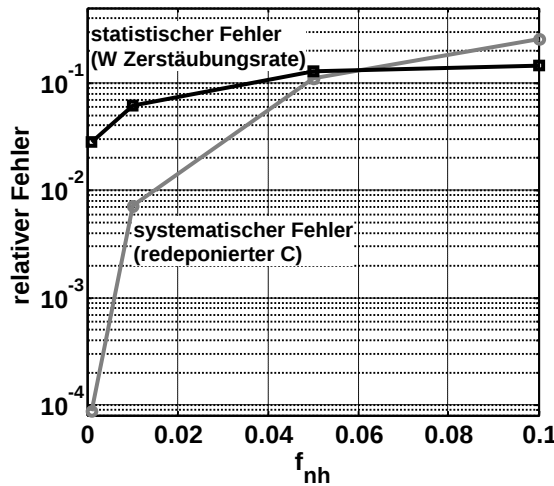


Abbildung 4.8: Mittlerer relativer Fehler der Simulation in Abhängigkeit vom Verhältnis  $f_{nh}$  aus Fluenz zur Flächendichte in einer Oberflächenschicht

Der statistische relative Fehler ( $\propto 1/\sqrt{n_H}$ ) kann in derselben Abbildung für die Zerstäubungsausbeute von Wolfram angegeben werden, weil sich die Wolframkonzentration

<sup>2</sup>Die Definition findet sich in Gleichung 3.10

sehr nah an der Oberfläche in den ersten fünf Sekunden kaum ändert (siehe auch Abbildung 4.7b). Wolframatome, die genügend Energie haben, um die Oberfläche zu verlassen, stammen ausschließlich aus dem Bereich  $z < 1$  nm. Zusätzlich ist der angegebene *relative* Fehler für die Wolfram-Zerstäubungsausbeute von  $\overline{Y_W} \approx 2.5 \cdot 10^{-3}$  auch der größte dieser Simulation, da Wolfram die kleinsten absoluten Zerstäubungsausbeuten der betrachteten Elemente besitzt.

Für die nachfolgenden Simulationen wurde über die Wahl von  $f_{nh} = 0.01$  sichergestellt, dass der systematische Fehler bei maximal 1% Prozent der vorliegenden Deposition bzw. Erosion des Elements mit der kleinsten Konzentration liegt (für andere Elemente ist dieser systematische Fehler nicht vorhanden). Für den statistischen Fehler ergibt sich dann bei der gewünschten Schichtauflösung von 0.5 nm ein *absoluter* Fehler für die Zerstäubungsausbeuten von ungefähr  $5 \cdot 10^{-4}$ . In den Bereichen des Testlimiters, welche signifikanten Teilchenflussdichten ausgesetzt sind, liegen die Zerstäubungsausbeuten im Prozentbereich oder knapp darunter, so dass diese Genauigkeit ausreichend ist.

#### 4.4.2 Das Modell für die chemische Erosion

Die Situation aus Abbildung 4.5 wird wieder ohne Injektionsquelle betrachtet, um die Modelle für die chemische Erosion zu erläutern. Um die Modelle einfacher vergleichbar zu machen, wurde die Elektronentemperatur allerdings auf 10 eV gesenkt und mit  $\rho_C = 2\%$  ein größerer Anteil von Kohlenstoff im Wasserstoffplasma angenommen: Dadurch wird der Einfluss der physikalischen Erosion weitgehend unterdrückt und alle Modelle führen dann zu Situationen, die depositionsdominiert sind.

Wie man in Abbildung 4.9a sieht, steigt die effektive chemische Erosion<sup>3</sup>  $Y_{\text{chem,eff}}$  innerhalb der ersten Sekunde steil an. Dies liegt an der Erosion von zuvor redeponiertem Kohlenstoff, der zehnmal effektiver erodiert wird als das Substratmaterial und der aus dem Hintergrund deponierte Kohlenstoff. Für den Kohlenstofflimiter ändert sich die effektive chemische Erosionsausbeute  $Y_{\text{chem,eff}}$  danach im Zeitverlauf nicht wesentlich (unabhängig vom Modell), da sich auch die Konzentrationsverhältnisse (nicht gezeigt) nicht mehr wesentlich ändern. Modelle 1 und 2 (siehe Abschnitt 4.2), die nicht die Erosion durch reflektierte Teilchen berücksichtigen, zeigen ähnliche Zerstäubungsausbeuten, während Modell 3 (aufgrund der Berücksichtigung der Erosion durch reflektierten Wasserstoff) erwartungsgemäß um ungefähr  $1/(1 - R)$  darüber liegt.

Der Wolframlimiter wird nach und nach mit Kohlenstoff überdeckt, so dass der Wert von  $Y_{\text{chem,eff}}$  sich immer mehr an den Wert für den des Kohlenstofflimiters annähert. Dabei liefert Modell 1 durchgehend etwas größere Zerstäubungsausbeuten als Modell 2, da dort die niedrige Kohlenstoffkonzentration in den obersten Oberflächenschichten im Vergleich zu der gesamten Interaktionsschicht an Bedeutung gewinnt (Abbildung 4.9c bzw. 4.9b). Modell 3, das auch die Erosion durch reflektierten Wasserstoff berücksichtigt, liegt wieder über der Zerstäubungsausbeute von Modell 1 und 2.

Für die Simulationen im anschließenden Kapitel wurde das am weitesten entwickelte Modell 3 benutzt. Die effektive Zerstäubungsausbeute ist hier näher an der experimentell gemessenen Ausbeute  $Y_{\text{chem}}$ , die als Eingabeparameter für die Simulation verwendet

---

<sup>3</sup>Die effektive chemische Erosion ergibt sich aus der Wichtung der einzelnen Ausbeuten  $Y_{\text{chem}}$  und  $Y_{RE}$  mit der relevanten Konzentration von Graphit bzw. redeponiertem Material.

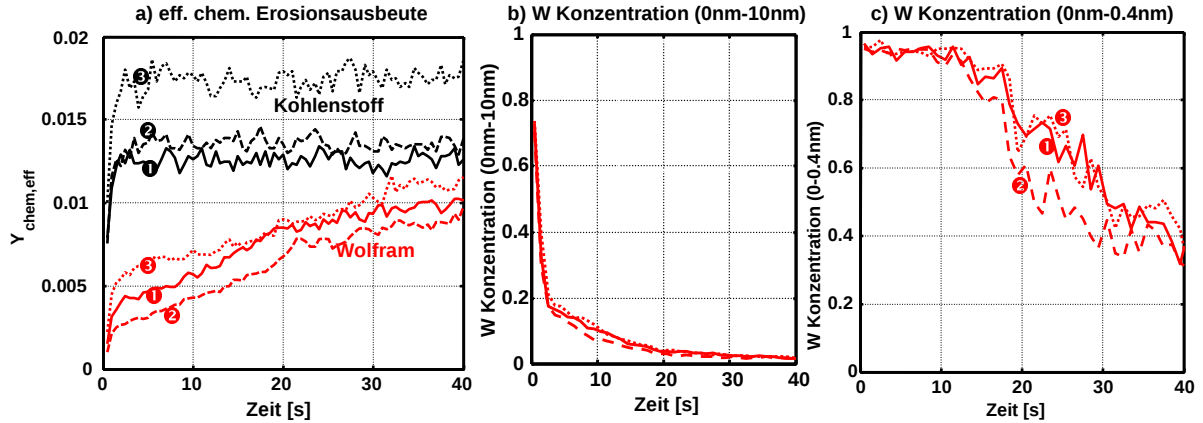


Abbildung 4.9: Vergleich der Modelle 1-3 für die chemische Erosion von Kohlenstoff an einem Kohlenstoff-Testlimiter bzw. Wolfram-Testlimiter, **a:** effektive chemische Erosion  $Y_{\text{chem,eff}}$ , **b:** Wolframkonzentration im Wolframlimiter (gesamte Interaktionsschicht 0-10 nm), **c:** Wolframkonzentration im Wolframlimiter (oberste Schicht 0-0.4 nm)

wird. Der Unterschied zu Modell 1 ist aber kleiner, als man aufgrund der großen Reflexionskoeffizienten für Wasserstoff auf Wolfram erwarten würde, und gleicht sich hier durch die geringere Konzentration von Kohlenstoff an der Oberfläche wieder aus.

#### 4.4.3 Einfluss der Kohlenstoffkonzentration $\rho_C$ im Hintergrundplasma

Bei der Diskussion des Einflusses der Kohlenstoffkonzentration  $\rho_C$  im Hintergrundplasma auf Deposition und Erosion wird wieder keine Injektionsquelle angenommen. Es konnte bereits gezeigt werden, dass die Simulationen mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell verglichen mit ERO-SDTrimSP für einen Graphitlimiter wie erwartet keinen signifikanten Unterschied bezüglich der Deposition von Kohlenstoff aus dem Hintergrundplasma zeigen [DBK<sup>+</sup>06]. Der einzige Unterschied liegt darin, dass sich in ERO-SDTrimSP schneller größere Konzentrationen von redeponiertem Kohlenstoff direkt an der Oberfläche bilden können. Redeponierter Kohlenstoff trifft wegen seiner kleineren Ladung mit geringerer Energie als der Kohlenstoff aus dem Hintergrund auf die Oberfläche und besitzt deshalb geringere Eindringtiefen. Damit stehen größere Konzentrationen von redeponiertem Kohlenstoff für die physikalische Zerstäubung zur Verfügung als im Flussbilanz-Modell, so dass im Flussbilanz-Oberflächenmodell immer etwas mehr redeponierter Kohlenstoff auf der Oberfläche verbleibt. Derselbe Effekt tritt auch bei der Diskussion der lokalen Injektionsquelle in Abschnitt 4.4.4 auf und wird dort genauer besprochen. Das Augenmerk dieser Analyse liegt deshalb in der Simulation mit ERO-SDTrimSP und bei der Erklärung der Deposition von Kohlenstoff auf dem Wolframlimiter.

Für  $\rho_C = 0$  befindet sich der Limiter immer und unabhängig von seinem Material in der Netto-Erosionszone. Es kann aber für jede beliebige Wahl der Plasmamparameter ein Wert  $\rho_C$  gefunden werden, bei dem die Bedingungen von der Netto-Erosion zur Netto-Deposition wechseln, solange die Selbstzerstäubungsausbeute von Kohlenstoff  $< 1$  ist. Dies ist in Testlimiterexperimenten nur sehr selten der Fall, da es nur bei Einfallswinkeln

$> 60^\circ$  und gleichzeitig hohen Einfallsenergien  $> 300\text{eV}$  auftritt.

Einen Überblick erhält man mit Abbildung 4.10a. Dort wird die Verschiebung der Oberfläche <sup>4</sup> im Zeitverlauf für verschiedene  $\rho_C$  für Kohlenstoff und Wolfram als Substratmaterial gezeigt. Das Wolframsubstrat ist bei  $\rho_C = 2\%$  noch erosionsdominiert, während das Kohlenstoffsubstrat schon durch Deposition dominiert wird.

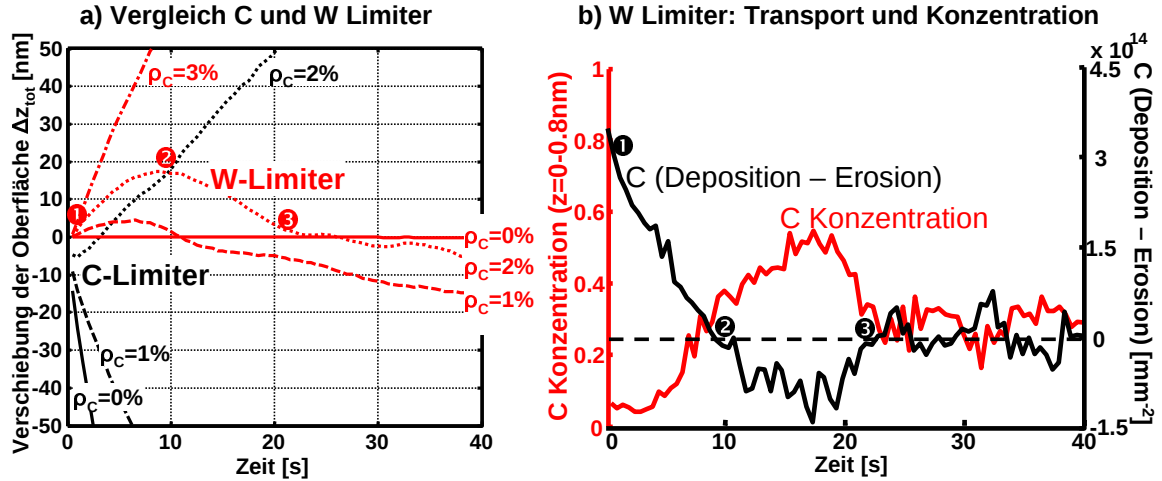


Abbildung 4.10: Simulationsbeispiele: Variation von  $\rho_C$ . Die Phasen 1, 2 und 3 werden im Text beschrieben. **a:** zeitliche Entwicklung der deponierten Schichten auf Kohlenstoff- und Wolframsubstrat, **b:** zeitliche Entwicklung der Kohlenstoffkonzentration im Wolframsubstrat für  $\rho_C = 2\%$  im Bereich von  $z=0\text{nm}$  bis  $z=0.8\text{nm}$  (in rot), zeitliche Entwicklung der deponierten Kohlenstoffatome minus der erodierten Kohlenstoffatome (in schwarz).

In jedem Fall stellt sich nach einiger Zeit ein stationäres Konzentrationsprofil ein: Bei dem Kohlenstofflimiter wird im Fall der Netto-Erosion dann in jedem Zeitschritt mehr Kohlenstoff erodiert als deponiert, in der Netto-Deposition ist dies umgekehrt. Die Ausbeuten können sich im Zeitverlauf ändern, da für redeponierten Kohlenstoff andere chemische Erosionsausbeuten angenommen werden als für Substratmaterial ( $Y_{RE} = 0.15$  im Gegensatz zu  $Y_{\text{chem}} = 0.015$ ).

Bei dem Wolframlimiter ist es so, dass im depositionsdominierten Fall das Wolframsubstrat vollständig überdeckt wird, bis sich in der Interaktionsschicht nur noch Kohlenstoff und redeponierter Kohlenstoff befinden. Im Falle der Netto-Erosion wird nach Erreichen der Gleichgewichtskonzentration in jedem Zeitschritt gleich viel Kohlenstoff erodiert wie deponiert, während eine konstante Menge an Wolfram erodiert wird. Das Erreichen der Gleichgewichtskonzentration kann unter TEXTOR-Bedingungen mehrere Entladungen in Anspruch nehmen, da es von der sehr niedrigen Zerstäubungsausbeute von Wolfram mitbestimmt wird, wie man am Beispiel für  $\rho_C = 2\%$  sieht (Abbildung 4.10b). Die Entwicklung der Schichtbildung lässt sich in drei Phasen einteilen:

**Phase 1 (0s - 10s)** Es wird mehr Kohlenstoff deponiert als erodiert (Abbildung 4.10b: Deposition - Erosion  $> 0$ ).

<sup>4</sup>Die Verschiebung der Oberfläche ist die für alle Teilchensorten in einer Länge ausgedrückte Netto-Erosion bzw. -Deposition (Gleichung 3.10).

Kohlenstoff wird unterhalb der obersten Oberflächenschichten deponiert, so dass physikalische Zerstäubung für Kohlenstoff nicht wirksam werden kann. Gleichzeitig wird das darüberliegende Wolfram nach und nach durch das Plasma erodiert, so dass der deponierte Kohlenstoff immer näher an die Oberfläche rückt (Konzentrationsprofile für  $t = 0.5\text{s}$ ,  $2.5\text{s}$ ,  $5\text{s}$ ,  $10\text{s}$ , Abbildung 4.11).

**Phase 2 (10s-20s)** Es wird mehr Kohlenstoff erodiert als deponiert (Abbildung 4.10b: Deposition - Erosion  $< 0$ ).

Der zuvor deponierte Kohlenstoff ist an die Oberfläche gelangt und kann jetzt auch verstärkt physikalisch zerstäubt werden (Konzentrationsprofile für  $t = 10\text{s}$ ,  $15\text{s}$ ,  $20\text{s}$ , Abbildung 4.11).

**Phase 3 ( $>20\text{s}$ )** Es wird genauso viel Kohlenstoff erodiert wie deponiert (Abbildung 4.10b: Deposition - Erosion  $\approx 0$ ).

Das Konzentrationsprofil ändert sich nicht mehr. Es hat sich ein Gleichgewicht zwischen dem unterhalb der Oberfläche implantierten und dem an der Oberfläche erodierten Kohlenstoff eingestellt (Konzentrationsprofile für  $t = 20\text{s}$ ,  $40\text{s}$ , Abbildung 4.11).

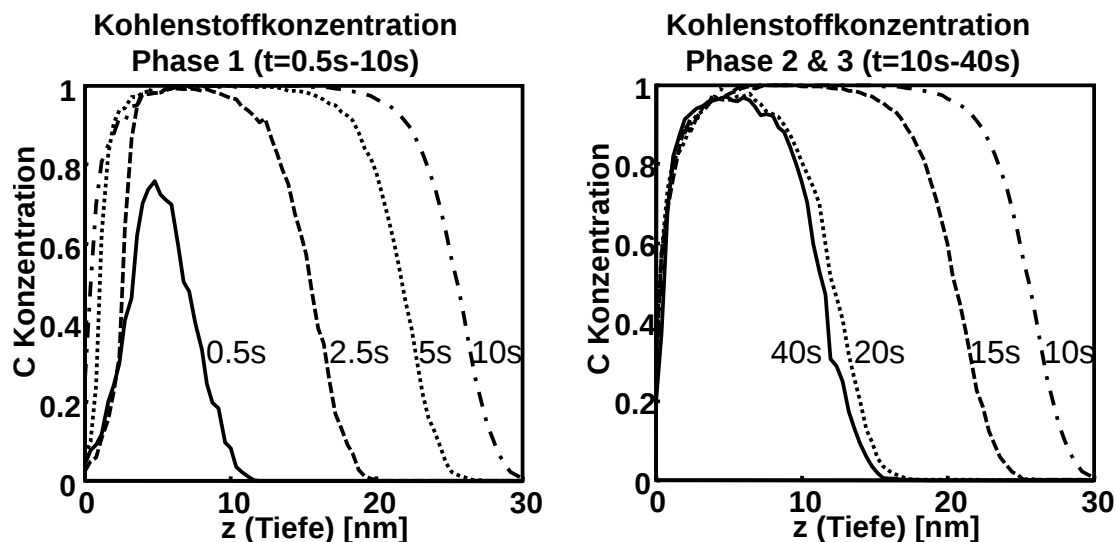


Abbildung 4.11: Tiefenprofile der Kohlenstoffkonzentration im Wolframsubstrat zu verschiedenen Zeitpunkten

Man sieht in Abbildung 4.12, dass sich der Übergang von Erosion zu Deposition (negative bzw. positive Bewegung der Oberfläche) für Kohlenstoff bei  $\rho_C = 1.7\%$  und Wolfram  $\rho_C = 2\%$ , also bei ähnlichen Kohlenstoffkonzentrationen vollzieht. Verringert man die chemische Erosionsausbeute von  $0.015$  auf  $0$ , wird der Unterschied des Übergangs zwischen den Substratmaterialien sogar noch kleiner. Dies liegt daran, dass der mehrfach geladene Kohlenstoff aus dem Plasma durch das Schichtpotenzial beschleunigt, dadurch einige Nanometer tief implantiert wird und dort zunächst nicht physikalisch erodiert werden kann. Erst wenn die darüberliegende Wolfram- oder Kohlenstoffschicht erodiert wurde, kann der implantierte Kohlenstoff physikalisch erodiert werden. Diese Schicht ist dann aber dick genug, so dass das Substratmaterial für die physikalische Erosion keine

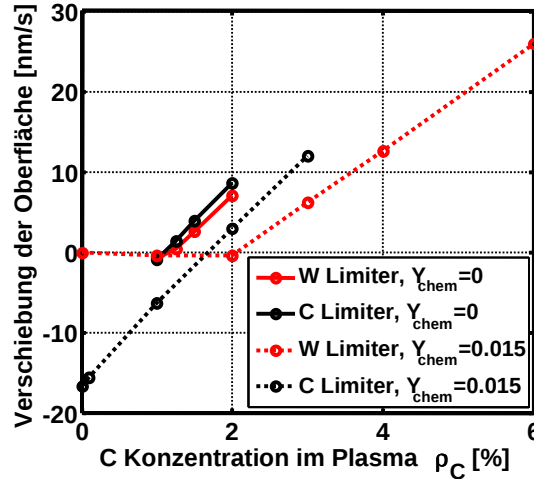


Abbildung 4.12: Simulationsbeispiele zur Variation von  $\rho_C$ : Verschiebung der Oberfläche im Gleichgewicht der Oberflächenkonzentrationen für den Kohlenstoff- und Wolfram-Testlimiter mit ( $Y_{chem} = 0.015$ ) und ohne ( $Y_{chem} = 0$ ) chemische Erosion

große Rolle mehr spielt (vgl. Abbildung 4.1: bei 20 bis 30 eV für mehr als 2 nm und kleiner als 8 nm Kohlenstoffschichtdicke).

#### 4.4.4 Lokale Methan-Quelle

Die Deponierung von Kohlenstoff aus einer lokalen Methan-Quelle unterscheidet sich von der Deponierung aus dem Hintergrundplasma insbesondere durch die kleinere Energie der auf die Oberfläche treffenden Kohlenstoffteilchen. Die Methanmoleküle starten mit thermischer Energieverteilung ( $\sim 0.05$  eV) von der Oberfläche und können durch Dissoziation eine Richtungsänderung erfahren, die eine Rückkehr zur Oberfläche bewirkt, bevor sie ionisiert sind. Kohlenstoff aus dem Hintergrundplasma hingegen ist im Mittel in TEXTOR vierfach ionisiert und wird deshalb im Schichtpotenzial entsprechend beschleunigt. Bei der Beschreibung des Festkörpers durch SDTrimSP kommt es dadurch für injizierten Kohlenstoff zu einer sehr oberflächennahen Implantation. Dies hat Auswirkungen auf die effektiven Erosionsausbeuten, die sich aus deren Faltung mit den Konzentrationen ergeben.

Wie man in Abbildung 4.13 sieht, ist in allen Fällen die effektive Erosionsausbeute des injizierten Kohlenstoffs<sup>5</sup> zunächst Null, da noch kein injizierter Kohlenstoff auf dem Limiter deponiert wurde. Nach einem anfänglichen starken Anstieg erreicht die Erosionsausbeute ein Maximum und fällt dann immer langsamer ab. Der Grund für diesen Abfall liegt in der Verdünnung des injizierten Kohlenstoffs durch den deponierten Hintergrundkohlenstoff, der nicht der erhöhten Erosionsausbeute  $Y_{RE} = 0.15$  unterliegt.

In der Simulation mit ERO (Flussbilanz-Oberflächenmodell, Abbildung 4.13a) spielt physikalische Erosion eine untergeordnete Rolle. Die Simulation mit ERO-SDTrimSP hingegen zeigt die chemische Erosion und physikalische Erosion als fast gleichberechtigt. Im Gleichgewicht der Oberflächenkonzentrationen bei 15s ist die Gesamterosion für beide

<sup>5</sup>Gemeint ist die effektiv beobachtete Ausbeute, die sich aus der Wichtung der *a priori* angenommenen erhöhten chemischen Erosion von  $Y_{RE}=0.15$  mit der Konzentration ergibt.

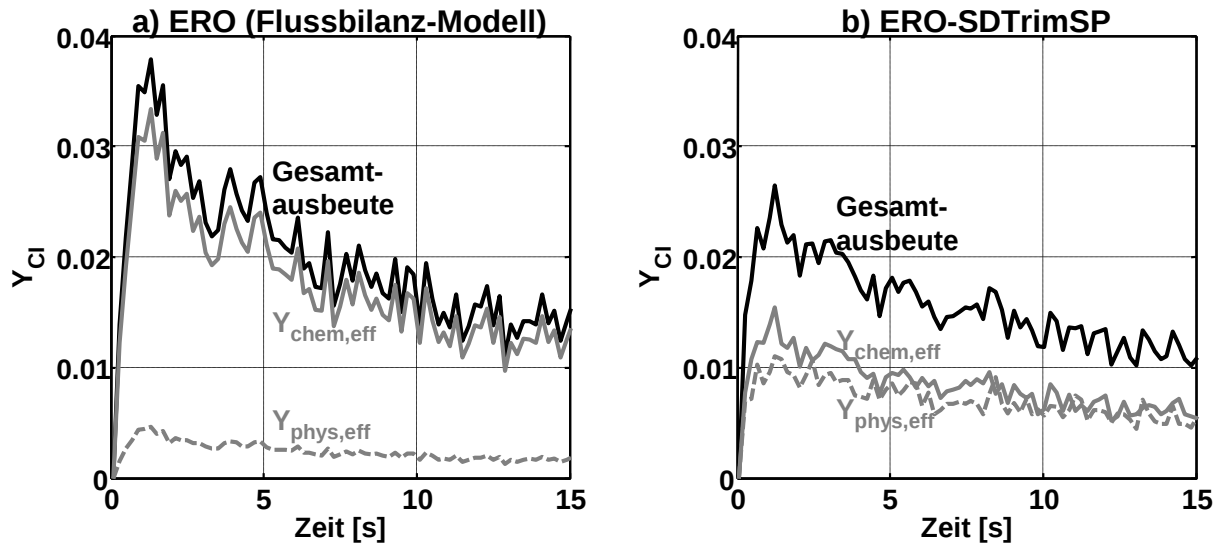


Abbildung 4.13: Effektive Erosionsausbeuten von injiziertem Kohlenstoff im Zeitverlauf (Graphitlimiter). **a:** ERO mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell, **b:** ERO-SDTrimSP

Simulationen ungefähr gleich.

Da die Ausbeuten für die reinen Komponenten in beiden Modellen bis auf wenige Prozent identisch sind, ist der Grund für die unterschiedliche Form der Erosion in der Konzentration zu suchen. Abbildung 4.14 zeigt den Verlauf der Konzentration des injizierten Kohlenstoffs, der auf die Oberfläche deponiert wurde. Bei ERO-SDTrimSP ergeben sich unmittelbar an der Oberfläche (0nm-0.8nm) ungefähr doppelt so hohe Konzentrationen wie bei ERO mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell. Diese Schicht bestimmt in ERO-SDTrimSP die physikalische Zerstäubung. Festkörperatome, die tiefer als 0.8nm in der Oberfläche angestoßen werden, haben nur noch eine geringe Wahrscheinlichkeit, noch mit ausreichend Energie an die Oberfläche zu gelangen und dort die Oberflächenbin-

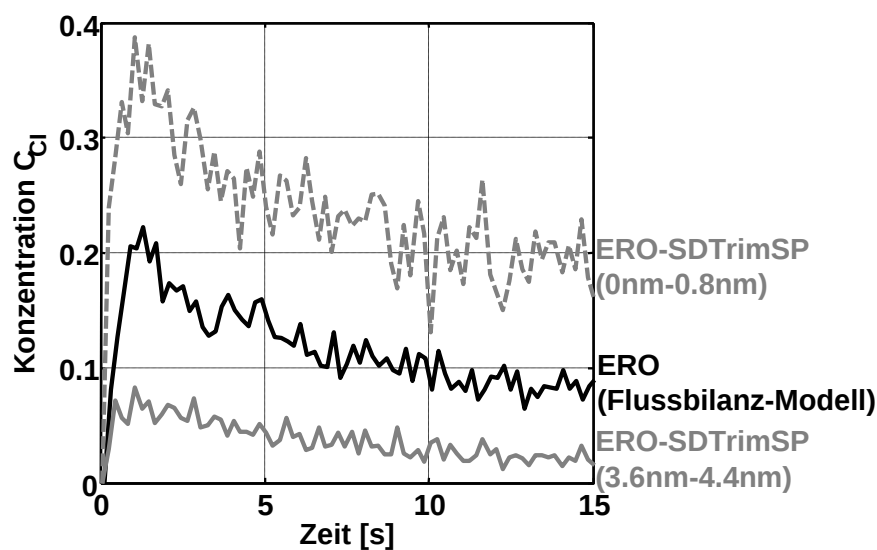


Abbildung 4.14: Konzentration von injiziertem Kohlenstoff in der Oberfläche des Graphitlimiters im Zeitverlauf

dungsenergie zu überwinden. Etwas tiefer in der Oberfläche (3.6nm-4.4nm) ergeben sich dreimal kleinere Konzentrationen als bei ERO mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell. An diesem Ort liegt die mittlere Eindringtiefe des Wasserstoffs aus dem Hintergrundplasma, so dass hier ein Großteil der chemischen Erosion stattfindet.

Physikalisch erodierter Kohlenstoff verlässt die Oberfläche mit einer Thompson-Verteilung um die Oberflächenbindungsenergie (Abschnitt 2.2.1), während das Methan, das durch chemische Erosion entstanden ist, mit der viel kleineren thermischen Energie die Oberfläche verlässt. Physikalisch erodierter Kohlenstoff besitzt deshalb eine geringere Wahrscheinlichkeit, redeponiert zu werden, so dass diese Umverteilung der Erosionsmechanismen bei der Berücksichtigung der Implantationstiefe auch zu einem leicht verkleinerten Schichtwachstum führt.

# Kapitel 5

## Simulationen und Experimente mit mehrkomponentigen Oberflächenschichten

Im Folgenden werden zwei Experimente mit den Wandmaterialien Kohlenstoff und Wolfram vorgestellt, die am Tokamak TEXTOR („Tokamak experiment for technology oriented research“) durchgeführt wurden. Anschließend werden sowohl das Simulationsmodell ERO (mit Flussbilanz-Oberflächenmodell) als auch das gekoppelte Simulationsmodell ERO-SDTrimSP benutzt, um die experimentellen Ergebnisse zu beschreiben. Im letzten Teil dieses Kapitels werden dann Schlussfolgerungen zusammengefasst und in Kontext zu anderen Experimenten gesetzt, die sich mit derselben Fragestellung auseinandersetzen.

Zur experimentellen Untersuchung der Plasma-Wand-Wechselwirkung steht in Jülich die Anlage TEXTOR zur Verfügung. TEXTOR ist ein Tokamak mittlerer Größe mit einem großen Radius von  $R = 1.75\text{m}$  und einem kleinen Radius von  $r = 0.46\text{m}$ . Details zum Design von TEXTOR wurden erst kürzlich wieder aktualisiert veröffentlicht [Sam05, NCG<sup>+</sup>05].

Typische TEXTOR-Plasmen erreichen zentrale Elektronendichten  $n_e$  im Bereich von einigen  $10^{19}\text{m}^{-3}$  bei Temperaturen  $T_e$  im Plasmazentrum in der Größenordnung von einigen keV. Die Toroidalfeld-Spulen von TEXTOR erzeugen auf der Torus-Mittelachse magnetische Felder von bis zu 2 – 3T über die Entladungsdauer von typischerweise 5 – 6s. TEXTOR verfügt zur Aufheizung des Plasmas über zwei Neutralteilcheninjektoren, Elektronen-Zyklotron-Resonanz-Heizung (ECRH) und Ionen-Zyklotron-Resonanz-Heizung (ICRH). Es stehen zahlreiche Diagnostiken zur Charakterisierung des Plasmas sowohl im Zentrum als auch in der Randschicht zur Verfügung.

TEXTOR ist mit zwei Limiterschleusen ausgestattet, die es erlauben, Testlimiter an den Plasmarand zu schieben und nach der Exposition auszuwechseln, ohne die Vakuum-Bedingungen von TEXTOR zu beeinflussen. Limiterschleuse LL1 („limiter lock 1“) erlaubt den Zugang zum Plasma von der Unterseite des Vakuumgefäßes, Limiterschleuse LL3 von der Oberseite aus. Die Testlimiter werden von gegenüber (vertikale Beobachtung) und von der Seite (horizontale Beobachtung) mit Hilfe von Kameras und Spektrometern beobachtet. Vor den Kameras lassen sich verschiedene Filter zur Selektion bestimmter Wellenlängen zwischen zwei Entladungen austauschen. Dies erlaubt die zweidimensionale Beobachtung der Emission in einem eingeschränkten Wellenlängenbereich

entsprechend einer gewünschten Linie im Emissionsspektrum des Plasmas oder von Verunreinigungen.

## 5.1 Injektion von $^{13}\text{CH}_4$ durch Bohrungen in kugelförmige Limiter aus Graphit und Wolfram

Bei diesen Experimenten wurde  $^{13}\text{CH}_4$  (Methan) durch eine Bohrung (Durchmesser 1-2 mm) in den sphärischen Testlimiter injiziert, der in Limiterschleuse LL1 an den Plasma- rand geschoben wurde (Abbildung 5.1, siehe auch [KBB<sup>+</sup>06]). Das stabile Kohlenstoffiso-

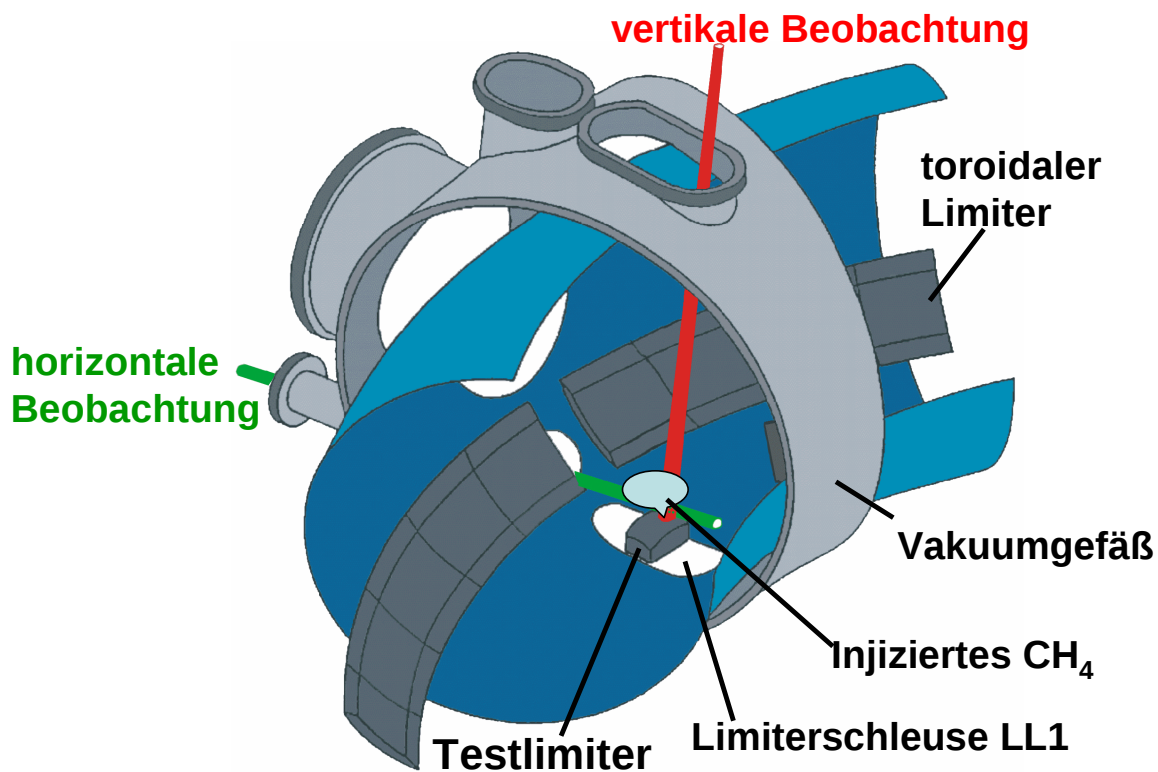


Abbildung 5.1: Schemazeichnung des experimentellen Aufbaus. In Limiterschleuse LL1 befindet sich ein sphärischer Limiter, durch den Methan  $^{13}\text{CH}_4$  injiziert wird.

top  $^{13}\text{C}$  kann bei der Nachanalyse der Limiter von dem intrinsischen  $^{12}\text{C}$  in TEXTOR unterschieden werden. Damit stellt man die genaue Menge Kohlenstoff fest, die lokal auf dem Limiter um das Injektionsloch herum deponiert wurde und definiert mit dem Verhältnis zur eingeblasenen Menge die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz  $\eta$  (vgl. Abbildung 5.2).

In den Experimenten wurden vergleichbare Mengen  $^{13}\text{CH}_4$  ( $5.5 \cdot 10^{20}$  Moleküle für den Graphit- und  $5.7 \cdot 10^{20}$  Moleküle für den Wolframlimiter) im Verlauf von jeweils acht identischen Plasmaentladungen mit einer Ventilöffnungszeit von 2s eingelassen. Daher wird bei der Simulation zunächst von einer konstanten Einlassrate von  $3.5 \cdot 10^{19}$  Molekülen/s ausgegangen.

Mit Hilfe einer Testinjektion, bei der alle anderen Gasquellen in TEXTOR ausgeschaltet werden, lässt sich über den Druckanstieg im Vakuumgefäß und unter Berücksichtigung

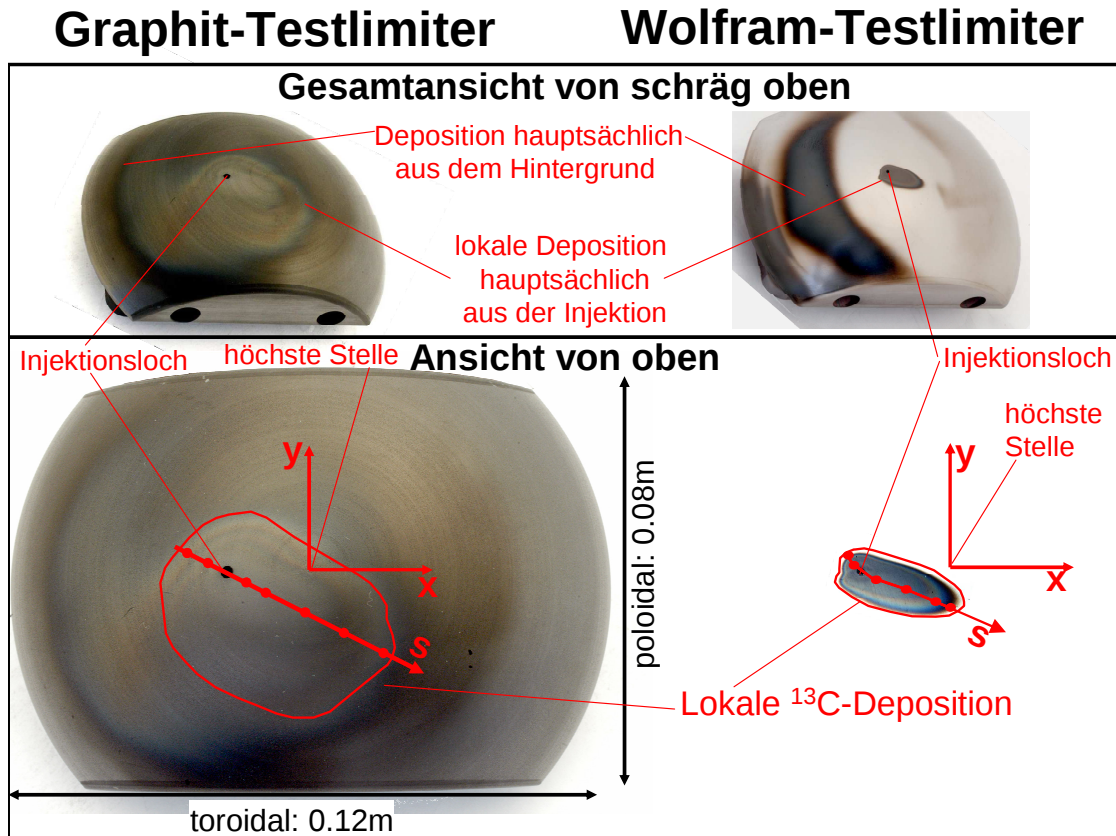


Abbildung 5.2: Ansichten von zwei sphärischen Limitern (Krümmungsradius 0.07 m) aus Graphit und Wolfram nach der Exposition in TEXTOR. Gekennzeichnet ist der Bereich der lokalen Deposition aufgrund der  $^{13}\text{CH}_4$  Injektion bis zur Nachweisgrenze von 10 nm Schichtdicke (Farbringanalyse) und damit das Gebiet für die Definition der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz  $\eta$ . Die Koordinate  $s$  mit dem Ursprung am Injektionsloch führt durch die längste Achse der depositionsdominierten Fläche. Die  $x$ - und  $y$ -Koordinaten weisen in toroidale bzw. poloidale Richtung mit dem Ursprung an der höchsten Stelle des Limiters.

der Pumpleistung von TEXTOR der Zeitverlauf der Injektion in das Vakuumgefäß messen. Man erkennt in Abbildung 5.3, dass es nach dem Ende der direkten Injektionsphase durch die Düse bei  $t \approx 2.5\text{s}$  noch etwa 0.7s dauert, bis die Injektionsrate auf die Hälfte des Maximums gesunken ist.

Der Limiter wurde während der Experimente auf 400-450°C geheizt. Die chemische Erosion  $Y_{\text{chem}}$  nach der Roth-Formel 2.26 nimmt bei diesen Temperaturen und den experimentellen Bedingungen (Einfallsenergie  $\sim 100 - 200\text{eV}$ , Deuterium-Flussdichte  $(2 - 5) \cdot 10^{22}\text{s}^{-1}\text{m}^{-2}$ ) Werte von 0.01 bis 0.02 an. Bei Messungen der Temperatur mit Hilfe von Thermoelementen im Inneren unter der Oberfläche des Limiterkopfes konnte während der Experimente keine signifikante Erhöhung festgestellt werden. Man kann daher davon ausgehen, dass sich die Oberflächentemperatur während der Entladung durch den Leistungseintrag des Plasmas nur wenig geändert hat. Eine Erhöhung der Oberflächentemperatur auf nur 500°C würde zu  $Y_{\text{chem}} = 0.03$  führen. Für die meisten der folgenden Rechnungen wurde der Wert  $Y_{\text{chem}} = 0.015$  gewählt und die Auswirkungen

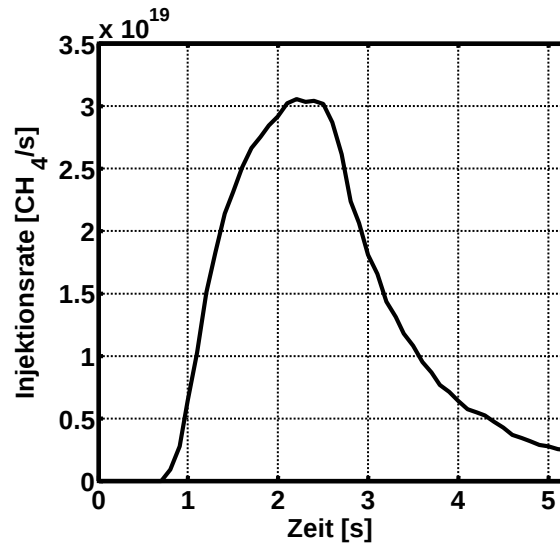


Abbildung 5.3: Zeitlicher Verlauf der Injektionsrate ( $t = 0\text{s}$  markiert den Beginn der Heizung des Plasmas durch Neutralteilchen-Injektoren). Die Gesamtmenge der injizierten  $^{13}\text{CH}_4$ -Moleküle pro Entladung beträgt ca.  $7 \cdot 10^{19}$ .

anderer Annahmen für  $Y_{\text{chem}}$  diskutiert.

Die Experimente wurden so durchgeführt, dass der Limiter am Injektionsloch ohne die Injektion erosionsdominiert wäre. Durch die Injektion ändert sich das Flussverhältnis Kohlenstoff zu Deuterium lokal um die Injektionsstelle so stark, dass eine örtlich begrenzte Kohlenstoffschicht aufwachsen kann, die sowohl  $^{13}\text{C}$  aus der Injektion als auch  $^{12}\text{C}$  aus dem Hintergrundplasma enthält.

Getrennt durch einen Bereich mit Netto-Erosion tiefer in der Abschältschicht beginnt dann das Gebiet, das schon durch den Hintergrundkohlenstoff alleine depositionsdominiert ist (siehe Abbildung 5.2 oben, „Hintergrunddepositionsgebiet“). Dies liegt zum Teil an dem in Abbildung 5.5 gezeigten Abfall der Elektronentemperatur und -dichte mit  $r$ , welche die Erosions- und Depositionsrate des deponierten Kohlenstoffs bestimmt. Zusätzlich steigt in TEXTOR die Konzentration der Kohlenstoffverunreinigung  $\rho_C$  mit  $r$  an [SBH<sup>+</sup>89].

### Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse aus der Nachanalyse der Limiter

Durch die Kombination verschiedener Oberflächenanalysetechniken war es möglich, die deponierte  $^{13}\text{C}$ -Menge und das Verhältnis von  $^{13}\text{C}$  zu  $^{12}\text{C}$  orts aufgelöst zu bestimmen. Abbildung 5.4a zeigt Ergebnisse der NRA-Messungen mit der Flächendichte der  $^{13}\text{C}$ -Atome entlang der Linie s. Im Maximum wird auf Graphit doppelt soviel  $^{13}\text{C}$  deponiert wie auf Wolfram. Auch die Ausdehnung in dieser Richtung unterscheidet sich ungefähr um einen Faktor zwei. Die Deponierung auf Wolfram besitzt klar abgegrenzte scharfe Ränder (exponentielle Abfalllänge der Schichtdicke  $0.7 - 3.1\text{mm}$ ), während auf Kohlenstoff die Deponierung einen unschärferen Rand hat (exponentielle Abfalllänge  $4 - 6\text{mm}$ ). Auf dem Kohlenstofflimiter ist in negativer x-Richtung (vgl. Abbildung 5.2) die Abgrenzung der Depositionszone von der Injektion nicht mehr klar von der Depositionszone aus

dem Hintergrundplasma zu trennen.

Die  $^{13}\text{C}$ -Konzentration  $C_{^{13}\text{C}}$  (Anzahl der  $^{13}\text{C}$ -Atome zur Anzahl der  $^{13}\text{C}$ - und  $^{12}\text{C}$ -Atome in der Schicht) in Abbildung 5.4b konnte für den Wolframlimiter aus der NRA-Messung bestimmt werden, während für den Graphitlimiter zusätzlich SIMS-Tiefenprofile des Isotopenverhältnisses gemessen wurden, um das  $^{12}\text{C}$  in der deponierten Schicht vom  $^{12}\text{C}$  des Substrats trennen zu können. Die Abgrenzung der Oberflächenschicht zum Substratmaterial erfolgte dabei über den Abfall des  $^{13}\text{C}$ -Signals auf die Nachweisgrenze für die SIMS-Messung. Nahe dem Injektionsloch ist für beide Limiter die  $^{13}\text{C}$ -Konzentration ca. 0.9.

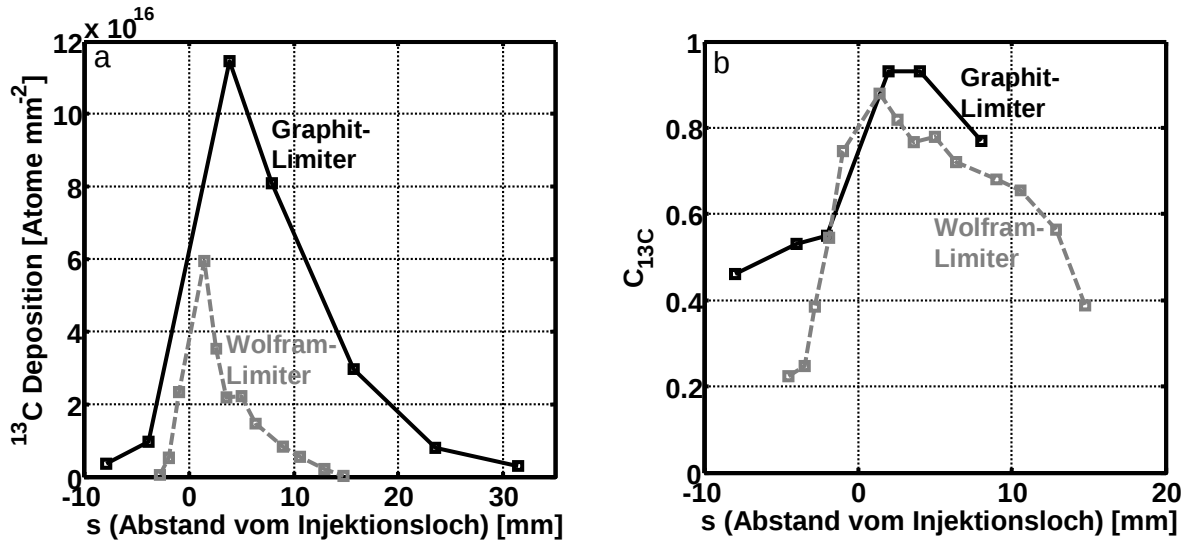


Abbildung 5.4: Linienprofile der  $^{13}\text{C}$ -Deposition entlang  $s$  (vgl. Abbildung 5.2), **a**: Anzahl der deponierten  $^{13}\text{C}$ -Atome pro Fläche, **b**: Verhältnis von deponierten  $^{13}\text{C}$ -Atomen zum insgesamt deponierten Kohlenstoff ( $C_{^{13}\text{C}} = \frac{^{13}\text{C}}{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}}$ )

|                                                                | Graphitlimiter      | Wolframlimiter    |
|----------------------------------------------------------------|---------------------|-------------------|
| $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz                          | 4%                  | 0.3%              |
| Fläche lokaler Deposition [ $\text{mm}^2$ ]                    | 712                 | 123               |
| Maximale $^{13}\text{C}$ -Deposition [Atome $\text{mm}^{-2}$ ] | $1.1 \cdot 10^{17}$ | $6 \cdot 10^{16}$ |
| Abfalllängen der Schichtdicke [mm]                             | 0.7-3.1             | 4-6               |

Tabelle 5.1: Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse

Die in der lokalen Depositionszone insgesamt gemessene  $^{13}\text{C}$ -Menge konnte dann in Verbindung mit der Farbringanalyse bestimmt werden. Die Farbringanalyse liefert zunächst eine zweidimensionale Verteilung der Schichtdicke, die man mit Hilfe der Dichte der Schicht (für a-C:H-Schichten  $(4.3 - 6.5) \cdot 10^{19} \text{mm}^{-3}$ , Annahme hier  $5 \cdot 10^{19} \text{mm}^{-3}$ ) in eine atomare Kohlenstoff-Flächendichte umrechnen kann. Aus dem  $C_{^{13}\text{C}}$ -Verhältnis aus der NRA- bzw. SIMS-Messung erhält man schließlich die  $^{13}\text{C}$ -Gesamtmenge. Für den Wolframlimiter wurden zusätzliche NRA-Messungen vorgenommen, um Depositionsmuster und -menge zu verifizieren. Für die Limiter wurde ein großer Unterschied in der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz von ungefähr einem Faktor 10 gemessen (für W: 0.3%, für

C: 4%). Dieser Unterschied ist hauptsächlich durch die unterschiedliche Ausbreitung der Deponierung bedingt und nicht durch die Dicke der deponierten Schicht (siehe Tabelle 5.1).

Die Hintergrunddeposition wurde bei der Nachanalyse mittels Kernreaktionsanalyse (auf dem Wolframlimiter) und indirekt mittels SIMS (auf dem Kohlenstofflimiter) an einer Stelle quantifiziert. Es wurde hauptsächlich  $^{12}\text{C}$  gefunden, jedoch auch  $^{13}\text{C}$  (auf dem Wolframlimiter noch ungefähr 30% und auf dem Kohlenstofflimiter ungefähr 40%). Die Schichtdicke ist allerdings um ungefähr einen Faktor 10 geringer als die der lokalen Deposition. Der Übergang von der Erosionszone zur Depositionszone wurde (auf der Limiterseite des Injektionslochs für beide Substratmaterialien) bei ungefähr  $x = -25\text{mm}$  bis  $x = -35\text{mm}$  beobachtet.

### Gemessene Plasmaparameter

Die Plasmaparameter  $n_e$  und  $T_e$  im radialen Bereich von  $r = 0.45\text{m}$  bis  $r = 0.48\text{m}$ , der für die Simulation benötigt wird, wurden mit Hilfe der Heliumatomstrahl-Diagnostik (siehe Abschnitt 2.1.4) bestimmt. Sie liefert zeit- und ortsabhängige Werte mit einem relativen Fehler von maximal 20%. Die zeitlich gemittelten radialen Linienprofile werden nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate mit Exponentialfunktionen der Form  $y = A \cdot \exp(-r/\lambda)$  angenähert. Dies wird für eine repräsentative Entladung (#95351) der beiden Versuchsreihen in Abbildung 5.5 gezeigt: An der LCFS bei  $r = 0.46\text{m}$  ergeben sich  $T_{e,\text{LCFS}} \approx 36\text{eV}$  und  $n_{e,\text{LCFS}} \approx 1.6 \cdot 10^{19}\text{m}^{-3}$  mit den Abfalllängen  $\lambda_T \approx 0.047\text{m}$  bzw.  $\lambda_n \approx 0.01\text{m}$ .

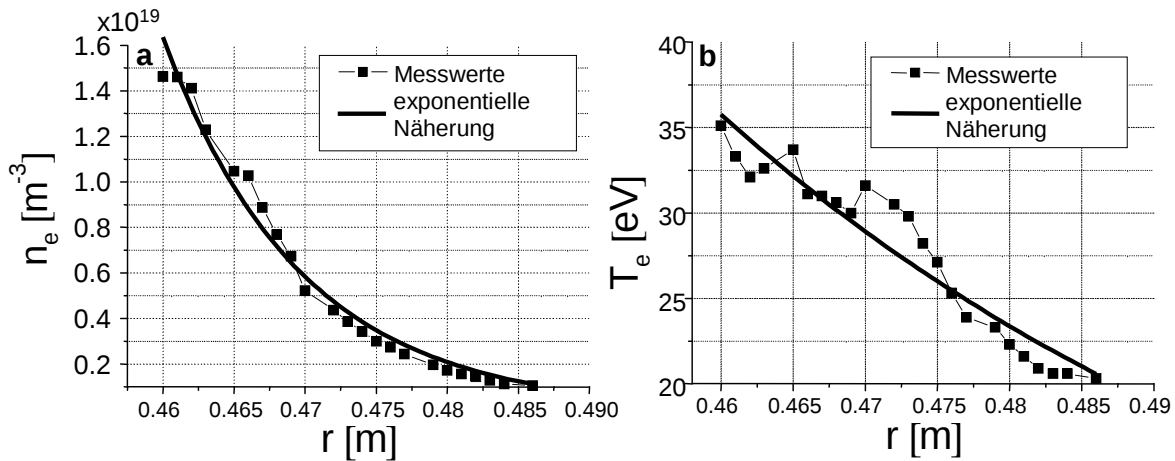


Abbildung 5.5: Exponentielle Näherung an die Daten der Heliumatomstrahl-Diagnostik (Entladung #95351) für **a**: Elektronendichte und **b**: Elektronentemperatur

Die Ionentemperatur  $T_i$  liegt in der Randschicht von TEXTOR für mit Neutralteilchen geheizten Plasmen mit zentralen Dichten von  $3.5 \cdot 10^{19}\text{m}^{-3}$  um ungefähr einen Faktor 1.5 über der Elektronentemperatur [HPU<sup>+</sup>00].

### Gemessene Lichtemission

Bei beiden Experimenten wurde die Intensitätsverteilung einer Emissionslinie des CD- bzw. CH-Moleküls bei der Wellenlänge  $\lambda_{\text{CD}} = 431\text{nm}$  von der Seite beobachtet. Bei

dem Experiment mit dem Kohlenstofflimiter wurde zusätzlich eine CIII-Linie (d. h. von zweifach ionisiertem Kohlenstoff  $\text{C}^{2+}$ ) bei  $\lambda_{\text{CIII}} = 465\text{nm}$  beobachtet.

Für alle nachfolgenden Darstellungen wurden zwei Bilder erzeugt, von denen eines die Emission vor der Injektion beinhaltet und eines die während der Injektion. Gezeigt wird die Differenz aus beiden Bildern, um nur die Emission zu vergleichen, welche direkt durch die Injektion entstanden ist. Um das Signal/Rausch-Verhältnis zu verbessern, wurden immer 25 Bilder aus der Videosequenz summiert (d. h. über die Zeitdauer von 0.5s integriert).

Die Kontur des sphärischen Limiters wurde mit einer roten Linie gekennzeichnet. Neben bzw. unter den Falschfarbenbildern werden über die Breite von 4mm gemittelte Profile in radialer bzw. toroidaler Richtung gezeigt, die auf das Maximum der Intensität normiert sind.

Die radialen Profile liegen am Ort des Injektionsloches, die toroidalen Profile wurden durch das Maximum der Emission in radialer Richtung gelegt. Die weißen Linien in den Falschfarbenbildern deuten den Bereich an, in dem die Intensitäten gemittelt wurden.

Abbildung 5.6 zeigt ein Beispiel der CH-Emission über dem Kohlenstoff- (5.6a, Entladung #95351) bzw. Wolframlimiter (5.6b, Entladung #94531). Die Lichterscheinun-

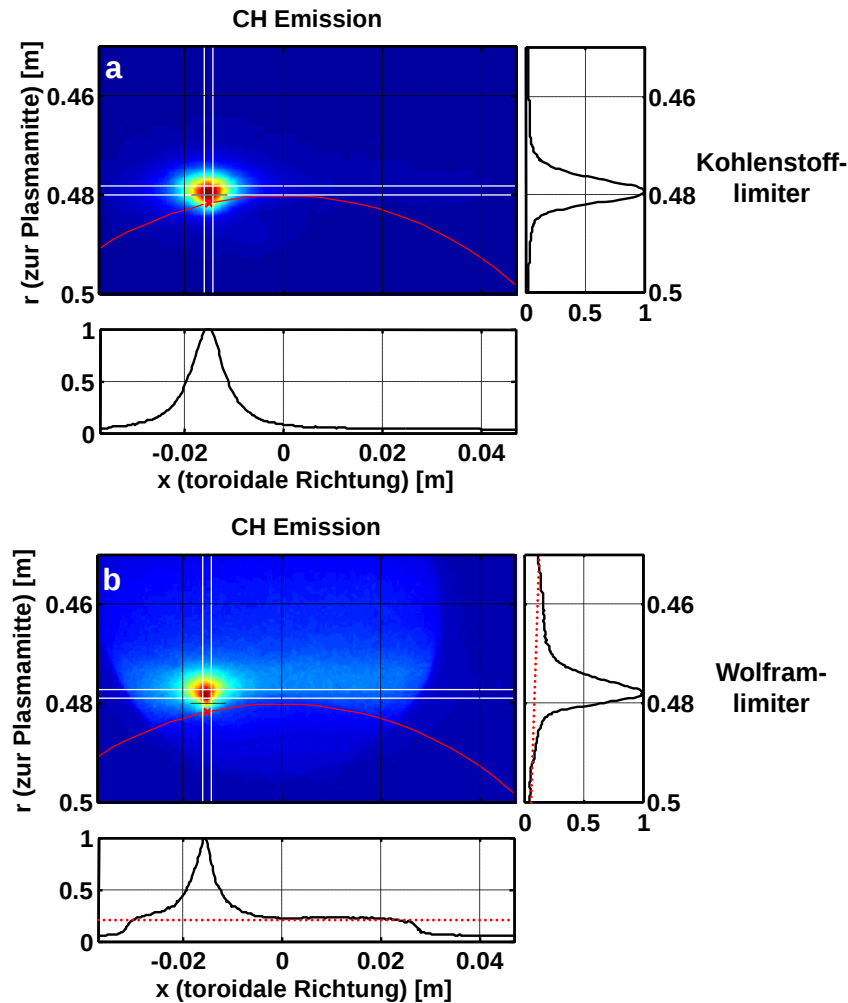


Abbildung 5.6: Beobachtete CH-Lichtemission ( $\lambda = 431\text{nm}$ , während der Injektion unter Abzug des Lichtes vor der Injektionsphase), Limiter von der Seite (Kontur in rot), Linienprofile in radialer und toroidaler Richtung gemittelt über die mit weißen Linien angedeutete Fläche, **a**: Experiment mit Kohlenstoff-Testlimiter, Entladung #95351, **b**: Experiment mit Wolfram-Testlimiter, Entladung #94531

gen sind sehr lokalisiert am Injektionsloch; die mittlere Eindringtiefe beträgt ungefähr 4mm. Das Maximum der Intensität in radialer Richtung liegt bei  $r = 0.478m$  für den Kohlenstoff- und bei  $r = 0.479m$  für den Wolframlimiter und damit innerhalb der Genauigkeit des Bildmaßstabes ( $\pm 2mm$ ), der durch visuelle Anpassung der Kreislinie an die Limiterkontur gewonnen wurde. Die Profile in Abbildung 5.6b (Wolframlimiter) lassen einen gleichmäßigen Untergrund erkennen, der durch gestrichelte rote Linien gekennzeichnet und in 5.6a (Kohlenstofflimiter) nicht zu sehen ist. Für den Wolframlimiter wird offensichtlich durch die Injektion vermehrt Wolfram zerstäubt, das um die Wellenlänge  $\lambda = 430nm$  mehrere Emissionslinien aufweist und damit zu der Intensität beiträgt. Der Vergleich mit den Simulationen beschränkt sich deshalb auf Abbildung 5.6a.

Die Emission von CIII ist im Vergleich zur CH-Emission stärker über das Observationsvolumen verteilt, wie man in Abbildung 5.7 am Beispiel des Kohlenstofflimiters sieht (für den Wolframlimiter wurde die CIII-Emission nicht gemessen). Im Vergleich der beiden Aufnahmen aus der ersten Hälfte der Injektionsphase zu der am Ende fällt auf, dass

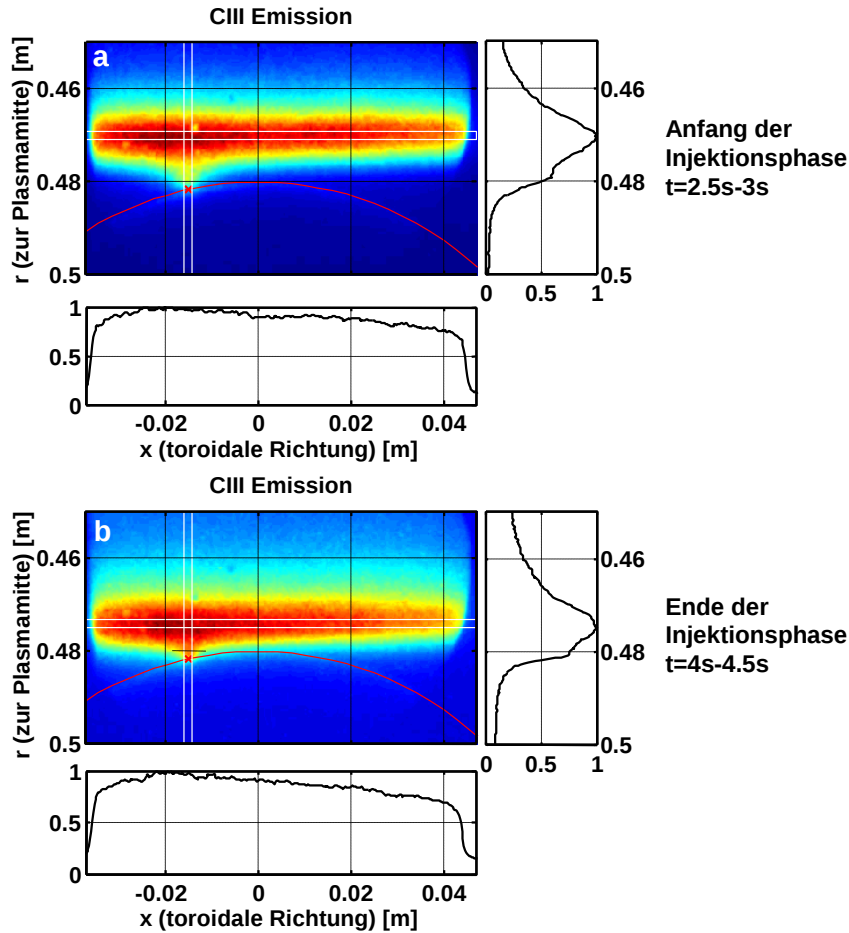


Abbildung 5.7: Beobachtete CIII-Lichtemission ( $\lambda = 465nm$ , während der Injektion unter Abzug des Lichtes vor der Injektionsphase), Kohlenstoff-Testlimiter (Entladung #95345) von der Seite (Kontur in rot), Profile in radialer und toroidaler Richtung gemittelt über die mit weißen Linien angedeutete Fläche. **a**: Anfang der Injektionsphase (gemittelt über  $t=2.5s-3s$ ) **b**: Ende der Injektionsphase (gemittelt über  $t=4.0s-4.5s$ )

sich das Maximum der Intensität in allen Entladungen um bis zu 5mm in Richtung zum Limiter von  $r = 0.47\text{m}$  zu  $r = 0.475\text{m}$  verschiebt. Diese Veränderung ergibt sich aus einer unbeabsichtigten Verschiebung der Plasmaposition. Dafür gibt es einen weiteren Hinweis in der Verschiebung der  $\text{H}_\alpha$ -Emission ( $\lambda = 656\text{nm}$ ), die über den gesamten poloidalen Querschnitt beobachtet wird.

Der Vergleich mit der Simulation beschränkt sich daher auf das Licht aus dem ersten Teil der Injektionsphase. Festzuhalten bleibt aber, dass die experimentellen Plasmabedingungen einen Versatz von maximal 5mm zulassen. Demgegenüber lassen sich alle anderen Fehler bei der Aufnahme der Bilder vernachlässigen.

## 5.2 Simulation der Experimente

### 5.2.1 Vorgehensweise bei der Modellierung von Experimenten

Neben den eher technischen Eingabeparametern, welche beispielsweise die Geometrie des zu simulierenden Experimentes festlegen, benötigt ERO die Eingabe einer Reihe von physikalischen Randbedingungen, die durch direkte experimentelle Messungen zur Verfügung stehen. Diese sind mit Messfehlern behaftet bzw. konnten unter Umständen am Experimentiertag aus technischen Gründen nicht durchgeführt werden. Dazu gehören:

**Plasmaparamter**  $T_e$ ,  $T_i$  und  $n_e$  als Funktion des Ortes

**Magnetfeldstärke**  $\vec{B}$  kann in dem von ERO betrachteten Beobachtungsvolumen als konstant angesehen werden.

**Konzentration  $\rho_C$  und mittlerer Ladungszustand  $Q_C$**  von atomarem Kohlenstoff im Randschichtplasma von TEXTOR als Funktion des kleinen Radius

Weiterhin werden physikalische (Eingabe-)Parameter benötigt, die experimentell nicht oder nur indirekt zu bestimmen sind, aber für die Durchführung der Rechnung benötigt werden. Die Bestimmung dieser Parameter ist von großem Interesse für das Verständnis der Experimente und stehen im Mittelpunkt der Untersuchungen:

**Effektives Sticking  $S_{\text{eff}}$**  von Kohlenwasserstoffen an Wänden mit Plasmakontakt (vergleiche Abschnitt 3.1.2).

**Chemische Erosionsausbeute  $Y_{\text{chem}}$  und erhöhte (chemische) Reerosion  $Y_{RE}$**  von deponiertem Kohlenstoff (vergleiche Abschnitt 3.1.2).

Weitere (im Allgemeinen kleinere) Unsicherheiten bei der Simulation entstehen durch die Verwendung der atomaren Daten (Ratenkoeffizienten für Ionisation, Dissoziation und Linienstrahlung sowie Zerstäubungsausbeuten und Reflexionskoeffizienten). Zusätzlich zur Kohlenstoffkonzentration  $\rho_C$  ist das Plasma auch in kleineren Mengen durch Sauerstoff verunreinigt. Die Sauerstoffkonzentration  $\rho_O$  ist an der radialen Position des Limiters ungefähr halb so groß wie die Kohlenstoffkonzentration [SBH<sup>+</sup>89] und wird in der Simulation nicht berücksichtigt. Sauerstoff tritt nur als erodierende Spezies auf. Die Erosion von Kohlenstoff durch Bildung von CO und CO<sub>2</sub> erfolgt proportional zur chemischen Erosion durch den Wasserstofffluss, so dass auf eine eigene Diskussion verzichtet

werden kann. Sie wird in der Simulation also implizit in Form einer weiteren Unsicherheit der Erosion durch das Hintergrundplasma berücksichtigt.

Demgegenüber stehen die Beobachtungen, die mit dem Ergebnis der Simulation verglichen werden können. Ihre Anpassung kann zur genaueren Festlegung der Eingabeparameter dienen:

**Lichtemission** für unterschiedliche Wellenlängen von freigesetzten Verunreinigungen

**Schichtdickenverteilung und -zusammensetzung** und Erosionszonenverteilung auf dem Testlimiter

Zunächst wird immer die Lichtemission von Experiment und Simulation verglichen und damit, wenn notwendig, eine erste Korrektur an den aus dem Experiment nur mit einer gewissen Genauigkeit bekannten Plasmaparametern vorgenommen. Die Werte von  $n_e$  und  $T_e$  in der Randschicht werden zum Beispiel mit der Heliumatomstrahl-Diagnostik an anderer Stelle gemessen als an dem Ort der Limiterschleuse. Die Plasmaparameter üben im Gegensatz zu allen anderen Eingabeparametern einen vergleichsweise großen Einfluss auf den Transport der Verunreinigungen und damit auf alle Ergebnisse der Simulation aus. Andere Eingabeparameter aus der obigen Aufzählung wie  $Y_{RE}$ ,  $Y_{chem}$  und  $S_{eff}$  haben keinen Einfluss auf den qualitativen Transport durch das Plasma und damit nur sekundären Einfluss auf die Lichtemissionsverteilung, so dass diese Parametervariation an zweiter Stelle ausgeführt wird.

Durch einen Vergleich von Simulation und Experiment der Kohlenstoffdeposition auf den Limitern aus dem Hintergrundplasma kann  $\rho_C$  näher bestimmt werden. Der Übergang von Erosionsgebieten (Orte, an denen mehr Atome erodiert als deponiert werden) zu Depositionsgebieten (Orte, an denen mehr Atome deponiert als erodiert werden) bei gegebenen Plasmaparametern hängt nämlich hauptsächlich vom Flussverhältnis Wasserstoff zu Kohlenstoff ab.

Die genauere Quantifizierung der Deposition ist nur über eine Variation der Parameter  $S_{eff}$ ,  $Y_{chem}$  und  $Y_{RE}$  zu erreichen.

Die Modellierung ist immer ein iterativer Prozess dieser einzelnen Arbeitsschritte, bei der Darstellung wird die dargelegte Reihenfolge eingehalten.

### 5.2.2 Simulation der Lichtemission

In Abbildung 5.8 wird die Lage der LCFS variiert. Man sieht eine generelle Übereinstimmung der simulierten und beobachteten Emissionsmuster nur für die Simulation mit der LCFS bei  $r=0.47m$  (1. Spalte). Die Simulationen mit den Bedingungen, wie sie mit der He-Atomstrahl-Diagnostik in der Mittelebene gemessen wurden (LCFS bei  $r=0.46m$ , 3. Spalte), zeigen eine schlechtere Übereinstimmung mit der Beobachtung. Dies lässt sich noch besser mit Hilfe der normierten Profile durch die Emissionsmuster feststellen.

Abbildung 5.9 zeigt einen detaillierten Vergleich normierter Profile durch die Abbildungen in 5.8 in radialer Richtung am Ort der Injektion sowie in toroidaler Richtung in der Nähe des Maximums der Emission. Die beste Übereinstimmung mit dem Experiment zeigt sich immer bei der Simulation mit der LCFS bei  $r=0.47m$ . Nur die Profile für die CIII-Emission in toroidaler Richtung (Abbildung 5.9) stimmen für  $x > 0$  besser mit der Simulation mit der LCFS bei  $r=0.465m$  überein, während für  $x < 0$  der Vergleich mit

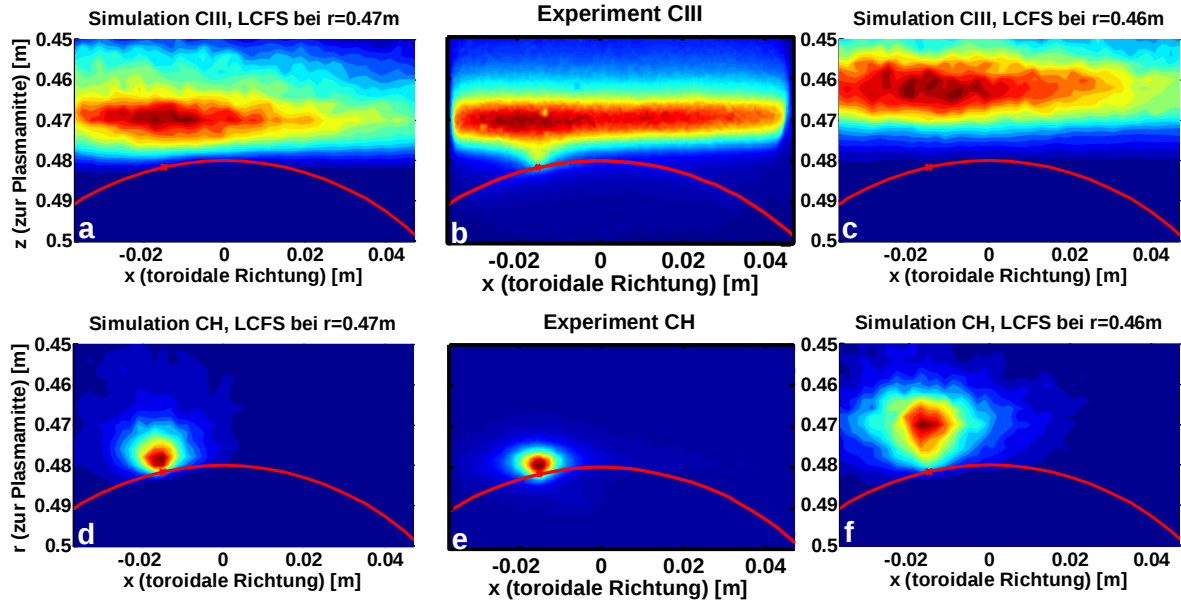


Abbildung 5.8: Vergleich von Experiment und Simulation der 2D-Lichtemission (CH und  $C^{2+}$ ) über den sphärischen Kohlenstofflimiter. Die beiden experimentellen Bilder (b und e) sind identisch mit Abbildung 5.6a bzw. Abbildung 5.7a.

der LCFS bei  $r=0.47m$  ein besseres Resultat liefert. Sehr gute Übereinstimmung wird insbesondere für das CH-Profil in toroidaler Richtung (5.9c) sowie für das CIII-Licht in radialer Richtung (5.9b) erreicht, aber auch der erste Anstieg der CH-Emission in radialer Richtung (5.9a) wird richtig wiedergegeben. Andere Parametervariationen, die in Frage kommen, um die beobachteten Linienemissionen zu reproduzieren, führen zu keiner Verbesserung der Übereinstimmung. Dazu zählen Senkrecht-Diffusionskoeffizient, Plasmaflussgeschwindigkeit in der SOL, effektives Sticking von Kohlenwasserstoffen  $S_{\text{eff}} > 0$  und Temperatur des eingelassenen Gases. Die Profile deuten also darauf hin, dass das Plasma an der Stelle des Limiters radial auswärts um wenigstens 5 – 10mm verschoben ist.

Diese These wird dadurch gestützt, dass die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz  $\eta$  bei der Simulation mit der LCFS bei  $r_{\text{LCFS}} = 0.46m$  für beide Testlimiter höher als im Experiment ist und für eine Verschiebung von bis zu 10mm in Richtung Limiter kleiner wird (siehe Abbildung 5.10). Ausschlaggebend für diesen Trend sind die größere Elektronentemperatur und -dichte an der Limiteroberfläche (Limiterspitze: 29eV statt 23eV) und die damit steigenden Zerstäubungsraten, sowohl durch höhere Zerstäubungsausbeuten als auch durch die höhere Flussdichte von erodierendem Wasserstoff auf die Oberfläche. Einen kleineren Einfluss übt die mit steigender Temperatur und Dichte verringerte Eindringtiefe der  $^{13}\text{CH}_4$ -Moleküle in das Plasma aus, die somit mit größerer Wahrscheinlichkeit erneut auf die Oberfläche treffen (für  $r_{\text{LCFS}} = 0.46m$  zu 63%, für  $r_{\text{LCFS}} = 0.47m$  zu 81%).

Für die weitere Diskussion wird der mit den experimentellen Beobachtungen am besten übereinstimmende Wert gewählt, d. h. mit der LCFS bei  $r = 0.47m$ .

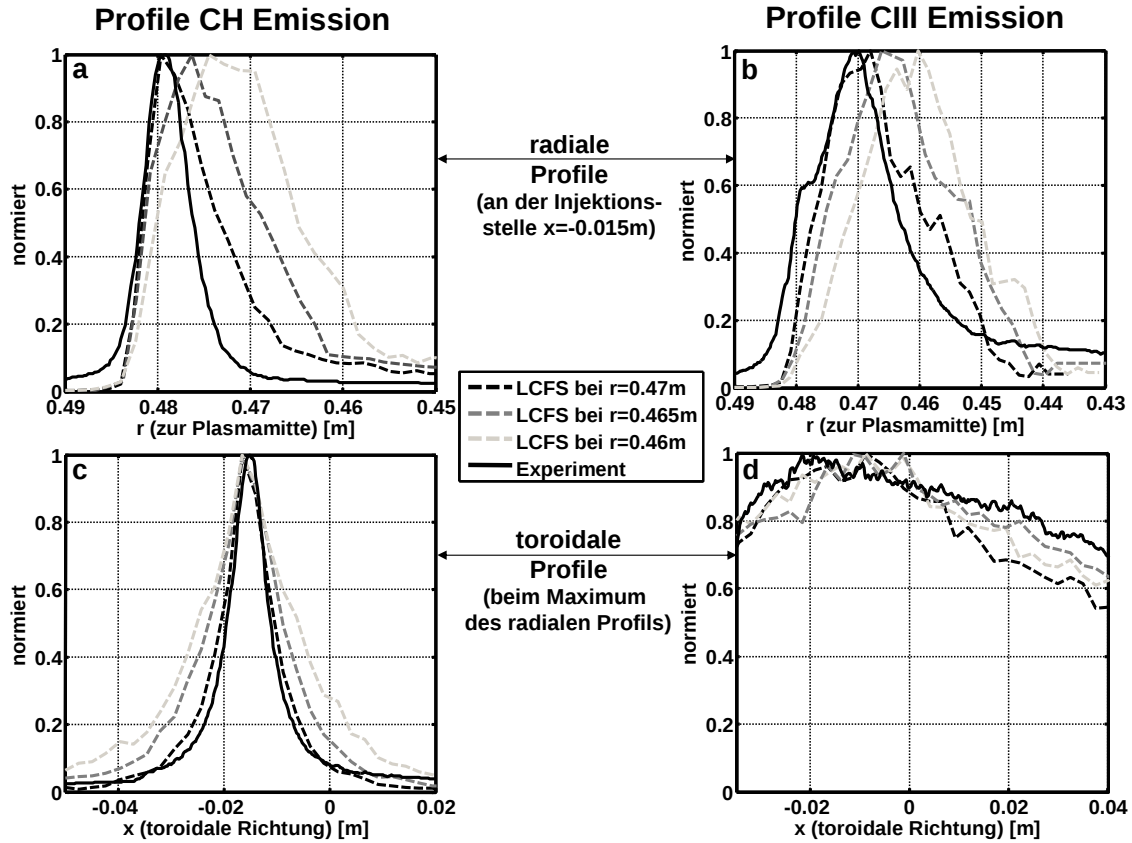


Abbildung 5.9: Linienprofile der Licht-Emission, **links**: CH-Emission ( $\lambda = 430.7\text{nm}$ ), **rechts**:  $\text{C}^{2+}$  ( $\lambda = 426.3\text{nm}$ ), **oben**: Profile in Richtung Plasamitte ( $x = -0.15\text{m}$ ), **unten**: Profile in toroidaler Richtung durch das Maximum der Emission ( $z = 0.47\text{m}$  bzw.  $z = 0.478\text{m}$ ).

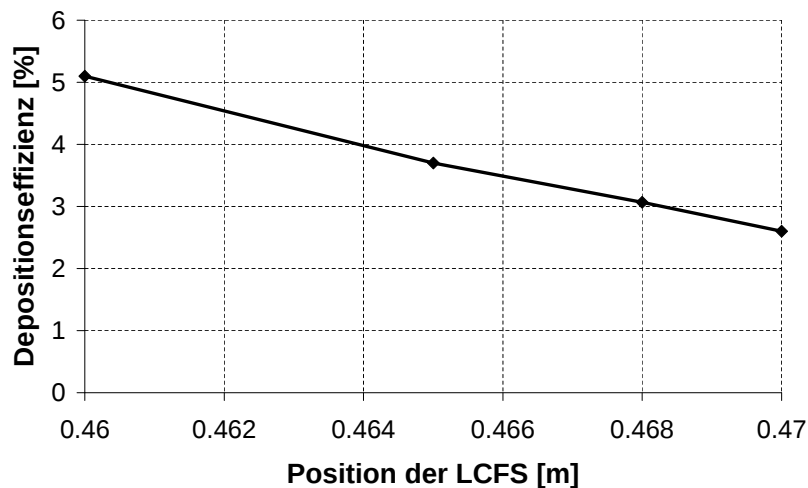


Abbildung 5.10: Simulation der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz mit ERO-SDTrimSP in Abhängigkeit von der Position der LCFS für den Wolframlimiter. Eine Diskussion der wichtigsten Simulationsparameter folgt in den folgenden Abschnitten. Hier lauten sie:  $Y_{\text{chem}} = 0.015$ ,  $Y_{RE} = 0.15$ ,  $S_{\text{eff}} = 0$ ,  $\rho_C = 1\%$ .

### 5.2.3 Deposition von $^{12}\text{C}$ aus dem Hintergrundplasma

Da es bei diesem Experiment gelungen ist, die vom Hintergrund bestimmte Deposition von der lokalen Deposition des  $^{13}\text{C}$  durch die Positionierung des Limiters in der LCFS weitgehend räumlich zu trennen, ist es möglich, über die Variation von  $\rho_C$  die experimentelle  $^{12}\text{C}$ -Deposition zu reproduzieren. Damit ist die Simulation in der Lage, die Kohlenstoffkonzentration, die während des Experimentes vorherrschte, abzuschätzen. Die  $^{12}\text{C}$ -Konzentration  $\rho_C$  beeinflusst die lokale  $^{13}\text{C}$ -Deposition, so dass eine genaue Kenntnis wünschenswert ist.

Es ist am einfachsten,  $\rho_C$  über die Simulation der Beobachtungen am Graphitlimiter abzuschätzen. Bei der Deponierung von Kohlenstoff auf Graphit aus dem Hintergrundplasma ändert sich die Oberflächenkonzentration nur geringfügig durch die Redeposition von Kohlenstoff (und die damit verbundene Bildung amorpher Kohlenwasserstoffschichten). Die Erosion bzw. Deposition wird in Abbildung 5.11 deutlich gemacht. Es werden Profile von der höchsten Stelle und der Mitte des Limiters zum Rand des Limiters in toroidaler Richtung über die Netto-Erosion bzw. Deposition des Limiters gezeigt. Ausgedrückt wird dies in der Verschiebung der Oberfläche in Nanometer für verschiedene Kohlenstoffkonzentrationen  $\rho_C$ . Für chemische Erosion von  $Y_{\text{chem}} = 1.5\%$  (Abbildung

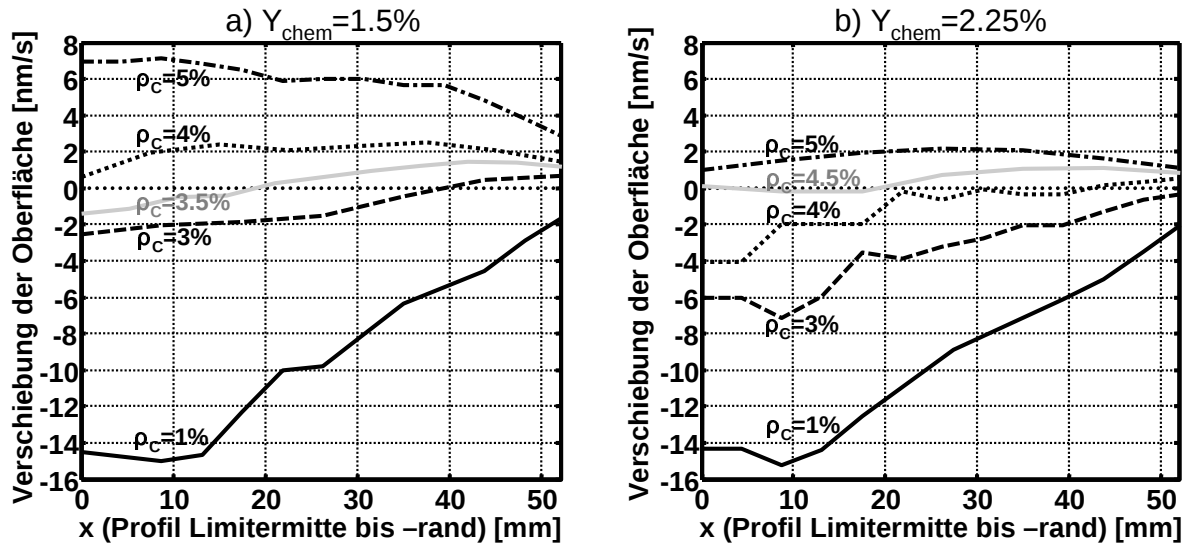


Abbildung 5.11: Simulation der Erosion bzw. Deposition von Kohlenstoff aus dem Hintergrund auf dem Graphitlimiter: Profile für verschiedene Werte von  $\rho_C$  von der Mitte des Limiters zum Rand des Limiter in toroidaler Richtung, **a)** chemische Erosion  $Y_{\text{chem}} = 1.5\%$ , **b)** chemische Erosion  $Y_{\text{chem}} = 2.25\%$

5.11a) erhält man den Übergang von Erosion zu Deposition wie im Experiment zwischen  $x = 20\text{mm}$  bis  $x = 30\text{mm}$  für  $\rho_C = 3.5\%$ , während für  $Y_{\text{chem}} = 2.25\%$  der Übergang dort bei  $\rho_C = 4\%$  liegt.  $\rho_C = 3\%$  bzw.  $\rho_C = 5\%$  lassen sich für beide Erosionsausbeuten schon als absolute Unter- und Obergrenze angeben, da sich dann der Limiter schon vollständig in der Netto-Erosion bzw. Netto-Deposition befindet.

Für  $x > 30\text{mm}$  und  $\rho_C = 3.5\%$  bzw.  $\rho_C = 4.5\%$  besitzt die Depositionsrate, wie auch im Experiment beobachtet, ein - wenn auch schwach ausgeprägtes - Maximum.

Für die meisten weiteren Simulationen wird  $\rho_C = 3.5\%$  gewählt, so dass für alle

Annahmen von  $Y_{\text{chem}}$  sichergestellt ist, dass das Injektionsloch sich wie im Experiment in der Netto-Erosion befindet, solange kein  $^{13}\text{CH}_4$  injiziert wird.

### 5.2.4 Simulationen mit ERO (Flussbilanz-Oberflächenmodell) im Vergleich mit ERO-SDTrimSP

Bei der Simulation der Limiter aus Wolfram bzw. Kohlenstoff mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell ergibt sich für die unterschiedlichen Substratmaterialien kein signifikanter Unterschied. Dies sieht man in Abbildung 5.12a daran, dass sich die momentane  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz im zeitlichen Verlauf sehr schnell einem konstanten und für beide Materialien identischen Wert nähert ( $\sim 16\%$ ,  $6\%$  oder  $3\%$  für  $Y_{RE} = 0.015$ ,  $0.15$  bzw.  $0.3$ ). Wolfram wird in den durch die Injektion depositionsdominierten Gebieten innerhalb der ersten zwei Sekunden vollständig mit Kohlenstoff überdeckt, so dass dort danach kein Unterschied mehr zwischen den beiden Limitern besteht.

Die (akkumulierte)  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz (Abbildung 5.12b) nähert sich asymptotisch der stationären momentanen  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz an. Sie liegt wegen den in der Anfangsphase noch größeren Reflexionskoeffizienten für Wolfram nach 6s noch unter der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz für Kohlenstoff.

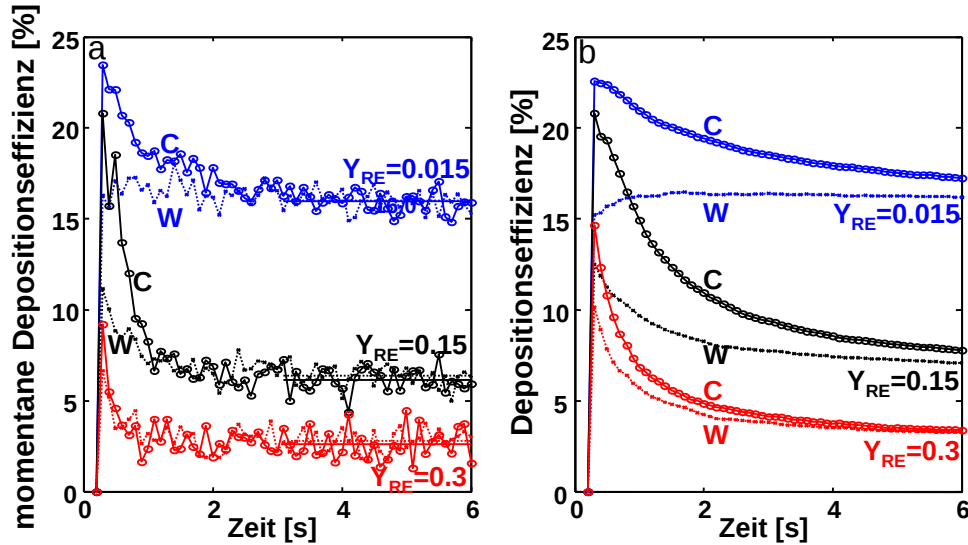


Abbildung 5.12:  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz auf Wolfram (punktierte Linie) und Kohlenstoff (durchgezogene Linie) simuliert mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell im zeitlichen Verlauf für verschiedene Werte  $Y_{RE}$ , **a**: momentane  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in einem Zeitschritt ( $t_{ERO} = 0.1\text{s}$ ), **b**:  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz (akkumuliert)

Das Depositionsmuster ist für beide Limiter um die Injektionsquelle lokalisiert und unterscheidet sich nicht qualitativ.

Der Unterschied in Abhängigkeit vom Substratmaterial in der lokalen Deposition ist grundsätzlich größer für kleinere Kohlenstoffkonzentrationen  $\rho_C$  im Hintergrundplasma, wie später noch mit Hilfe der Simulation mit ERO-SDTrimSP gezeigt wird. Dieser Kohlenstoff trägt nämlich zur Überdeckung des Wolframsubstrats bei. Für diese Simulation wurde deshalb eine sehr kleine Kohlenstoffkonzentration ( $\rho_C = 1\%$ ) angenommen. Au-

ßerdem wurde für diese Rechnungen  $S_{\text{eff}} = 0$  angenommen, da andere Annahmen für  $S_{\text{eff}} > 0$  unrealistisch hohe  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienzen liefern.

Die Rechnungen mit dem gekoppelten Programm liefern mit denselben Eingabeparametern ausnahmslos kleinere  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienzen als ERO mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell, die damit auch näher an den experimentellen Beobachtungen liegen. Das liegt daran, dass injiziertes  $^{13}\text{C}$  zu einem großen Teil als Neutralteilchen mit relativ kleiner Energie zur Oberfläche zurückkehren (vergleichbar mit dem Energiespektrum in Abbildung 4.4) und damit von SDTrimSP in den obersten Oberflächenschichten implantiert wird. Die auf diese Schichten beschränkte physikalische Zerstäubung, auch durch injizierte (ionisierte) Kohlenstoffatome, wirkt dann effizienter als im Flussbilanz-Oberflächenmodell, da sich dort von Anfang an eine höhere  $^{13}\text{C}$ -Konzentration einstellt. Sie wird weniger als im Flussbilanz-Oberflächenmodell durch den Hintergrundfluss und den Substratkohlenstoff verdünnt. Zudem wird physikalisch erodierter Kohlenstoff im Mittel mit höherer Energie als chemisch erodierter Kohlenstoff freigesetzt. Das bedeutet, dass chemisch erodierter Kohlenstoff mit größerer Wahrscheinlichkeit wieder redeponiert wird. Ein genauer Vergleich dieser Gegebenheiten mit Hilfe der Betrachtung der Konzentrationsverhältnisse in einer einzelnen Oberflächenzelle findet sich in Abschnitt 4.4.4.

Als ein Beispiel für die Auswirkungen der integralen Deposition auf den sphärischen Limiter wird in Abbildung 5.13 der Vergleich der ERO-Rechnung (Flussbilanz-Oberflächenmodell, Fall  $Y_{RE} = 0.15$ ) zu ERO-SDTrimSP mit identischen Eingabeparametern dargestellt. Es wird der Zeitverlauf der Simulation gezeigt, bis die Menge an injizier-

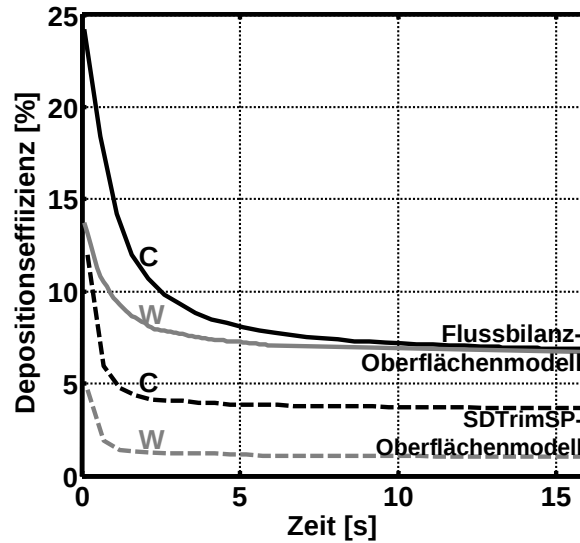


Abbildung 5.13: Vergleich der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienzen im zeitlichen Verlauf, die mit dem Flussbilanz- und mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell für den Testlimiter aus Graphit und aus Wolfram berechnet werden

tem  $^{13}\text{C}$  mit der experimentell injizierten Menge übereinstimmt ( $5.6 \cdot 10^{20}$  Moleküle nach 16s). Bei der Simulation mit ERO-SDTrimSP besitzt zu diesem Zeitpunkt noch nicht jede Oberflächenzelle des Limiters eine Gleichgewichtskonzentration, trotzdem ändert sich die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz nicht mehr wesentlich. Die deponierte Menge wird durch von Beginn der Simulation an depositionsdominierte Oberflächenzellen bestimmt. Dagegen tragen Oberflächenzellen, die sich wie am Beispiel im vorherigen Kapitel (Ab-

bildung 4.10) nur knapp im erosions- bzw. depositionsdominierten Bereich befinden, zur Gesamtdeposition auf dem Limiter nur wenig bei. Deshalb kann man die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz und -verteilung auf dem Limiter schon nach 5s Simulationszeit mit Hilfe der dann *momentanen*  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz sehr genau abschätzen.

Beim Vergleich der beiden Simulationen fällt auf, dass die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz für Kohlenstoff- und Wolframlimiter mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell um einen Faktor 2 bzw. 6 kleiner ist und dass in diesem Falle mit SDTrimSP sich ein signifikanter Substrateffekt zeigt.

Das Flussbilanz-Oberflächenmodell reicht offensichtlich nicht aus, um die experimentellen Ergebnisse beschreiben zu können. Alle nachfolgenden Rechnungen wurden deshalb mit ERO-SDTrimSP durchgeführt.

### 5.2.5 Einfluss des effektiven Stickings von Kohlenwasserstoffen

Für  $S_{\text{eff}} = 0.5$  und  $S_{\text{eff}} = 1$  ergibt sich für die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz kein Unterschied zwischen den beiden Substratmaterialien ( $\eta = 40\%$  bzw.  $\eta = 70\%$ , Abbildung 5.14). Dies gilt sogar für die hier getroffene extreme Annahme von  $\rho_C = 1\%$ , für die der gesamte Limiter - mit Ausnahme der lokalen Deposition durch die Injektion - erosionsdominiert ist. Nimmt man größere und realistischere Werte für  $\rho_C$  an (vgl. Abschnitt 5.2.3), wird die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz jeweils größer. Diese Werte für  $S_{\text{eff}}$  bewirken, dass das Gebiet, in dem der überwiegende Teil der injizierten Teilchen zur Oberfläche zurückkehrt, depositionsdominiert ist. Sobald das Wolframsubstrat durch eine Kohlenstoffschicht überdeckt wurde, die dicker als die Eindringtiefe der Ionen in den Festkörper ist, besteht bezüglich der lokalen  $^{13}\text{C}$ -Deposition kein Unterschied mehr zwischen den Simulationen des Wolfram- und des Graphitlimiters.

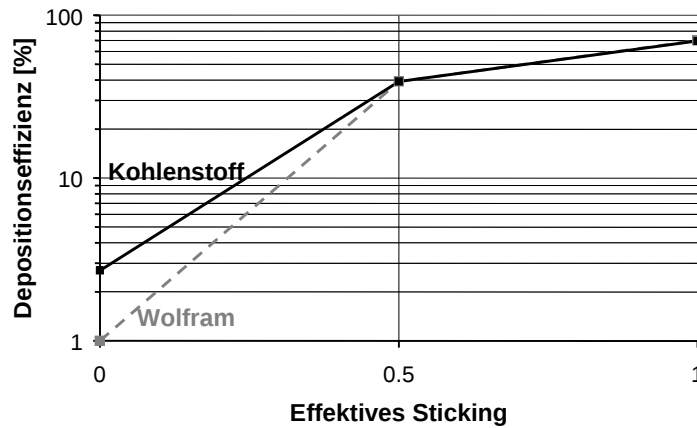


Abbildung 5.14:  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit vom effektiven Sticking  $S_{\text{eff}}$  für den Limiter aus Graphit und den Limiter aus Wolfram mit ERO-SDTrimSP und  $\rho_C = 1\%$

Bei  $S_{\text{eff}} = 0$  wird auf dem Wolframlimiter nur noch 1% des injizierten  $^{13}\text{CH}_4$  deponiert, während auf Graphit 3% deponiert werden, das heißt wesentliche Teile des Gebietes, in dem die injizierten Teilchen zur Oberfläche zurückkehren, sind erosionsdominiert. Für die weitere Diskussion wird also  $S_{\text{eff}} = 0$  angenommen.

Diese Annahme musste auch schon in der Vergangenheit bei der Simulation von Kohlenstoff-Transportprozessen im Tokamak getroffen werden [WEH<sup>+</sup>01], [KPPW01], [KWP<sup>+</sup>04], [OITT07]. Dies steht im *scheinbaren* Widerspruch zu Sticking-Experimenten mit Hilfe von Hohlräumen oder linearen Plasmareaktoren [HSSJK00, May04, Boh05]. Dort wurde die Sticking-Wahrscheinlichkeit für einzelne Kohlenwasserstoffe als sehr hoch angegeben und nur für einige Radikale wurde eine vernachlässigbare Sticking-Wahrscheinlichkeit gemessen. Diese Messungen wurden jedoch ohne den Einfluss eines erodierenden Wasserstoffplasmas durchgeführt. Hier treten zwei gegenläufige Prozesse in Erscheinung, die eine Ursache für  $S_{\text{eff}} = 0$  liefern: Wenn die Moleküle auf die Oberfläche gelangen, benötigen sie eine gewisse Adsorptionszeit, bevor sie aus ihrer Bindung als so genannter „Precursor“ heraus einen geeigneten Bindungspartner an der Oberfläche finden. Gleichzeitig werden durch den einfallenden Wasserstoff aus dem Plasma Bindungspartner zur Verfügung gestellt, so dass die Moleküle, die sich auf der Oberfläche niederschlagen, wieder reerodiert bzw. desorbiert werden können [Möl93, Keu02]. Ist die Desorptionszeit kleiner als die Adsorptionszeit, kann kein Schichtwachstum durch Moleküle oder Radikale stattfinden.

Auch bei den Simulationen mit ERO-SDTrimSP werden ähnlich niedrige  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienzen wie im Experiment also nur erreicht, wenn vernachlässigbares effektives Sticking für Kohlenwasserstoffe angenommen wird.

### 5.2.6 Einfluss der chemischen Erosion und der chemischen Reerosion

Amorphe Kohlenwasserstoffschichten (a-C:H-Schichten) besitzen je nach Wasserstoffgehalt und -dichte größere Erosionsausbeuten als Graphitoberflächen. Weiche Kohlenwasserstoffschichten mit hohen Erosionsausbeuten und hohem Wasserstoffgehalt werden durch Kohlenstoffteilchen mit niedriger Energie erzeugt (Abschnitt 2.2.2). Bei der Simulation wird dies berücksichtigt, indem für redeponierten Kohlenstoff, der wegen seines geringeren Ionisationszustands kleinere Energien besitzt, als der Kohlenstoff aus dem Hintergrundplasma, eine höhere Erosion  $Y_{RE}$  als für den übrigen Kohlenstoff ( $Y_{\text{chem}}$ ) angenommen wird.

Eine Veränderung der chemischen Reerosion  $Y_{RE}$  wirkt sich direkt auf die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz und die Größe des Depositionsmusters aus, wie man in Abbildung 5.15 sieht. Der relative Unterschied für  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz und -fläche des Musters steigt auf unterschiedlichen Substratmaterialien von 15-30% für  $Y_{RE} = 0.015$  zu einem Faktor 2-3 bei  $Y_{RE} = 0.3$  an.

Der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen in Abbildung 5.16 zeigt, dass man für die beste Übereinstimmung für die Simulation des Graphitlimiters  $Y_{RE} \approx 0.15$  annehmen muss und für die Simulation des Wolframlimiters  $Y_{RE} \approx 0.15 - 0.3$ . Diese zu treffenden Annahmen deuten darauf hin, dass durch die Injektion auch ähnliche a-C:H-Schichten entstehen, die wesentlich effektiver chemisch erodiert werden als Graphit (siehe Abschnitt 2.2.2).

Die Verteilung des  $^{13}\text{C}$ -Anteils in der deponierten Schicht ist dann für den Graphitlimiter etwas zu breit (Abbildung 5.16a). Eine größere Hintergrundkonzentration  $\rho_C$  verschmälert zwar diese Verteilung, führt aber außerdem zu einem noch niedrigeren Maximum. Aus Abbildung 5.16c wird deutlich, dass die simulierte  $^{13}\text{C}$ -Deposition besonders

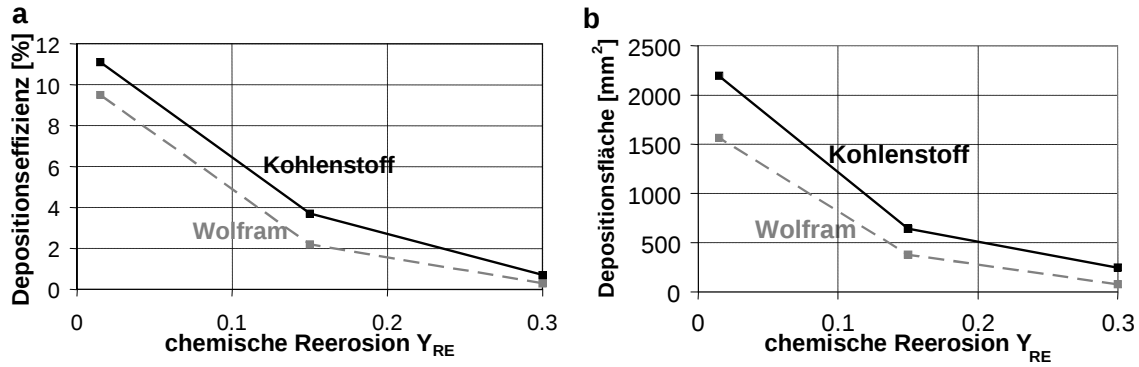


Abbildung 5.15: Simulation der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz (a) und Fläche der Deposition (b) für den Limiter aus Graphit und den Limiter aus Wolfram in Abhängigkeit von der chemischen Reerosion  $Y_{RE}$  bei  $Y_{\text{chem}} = 0.015$

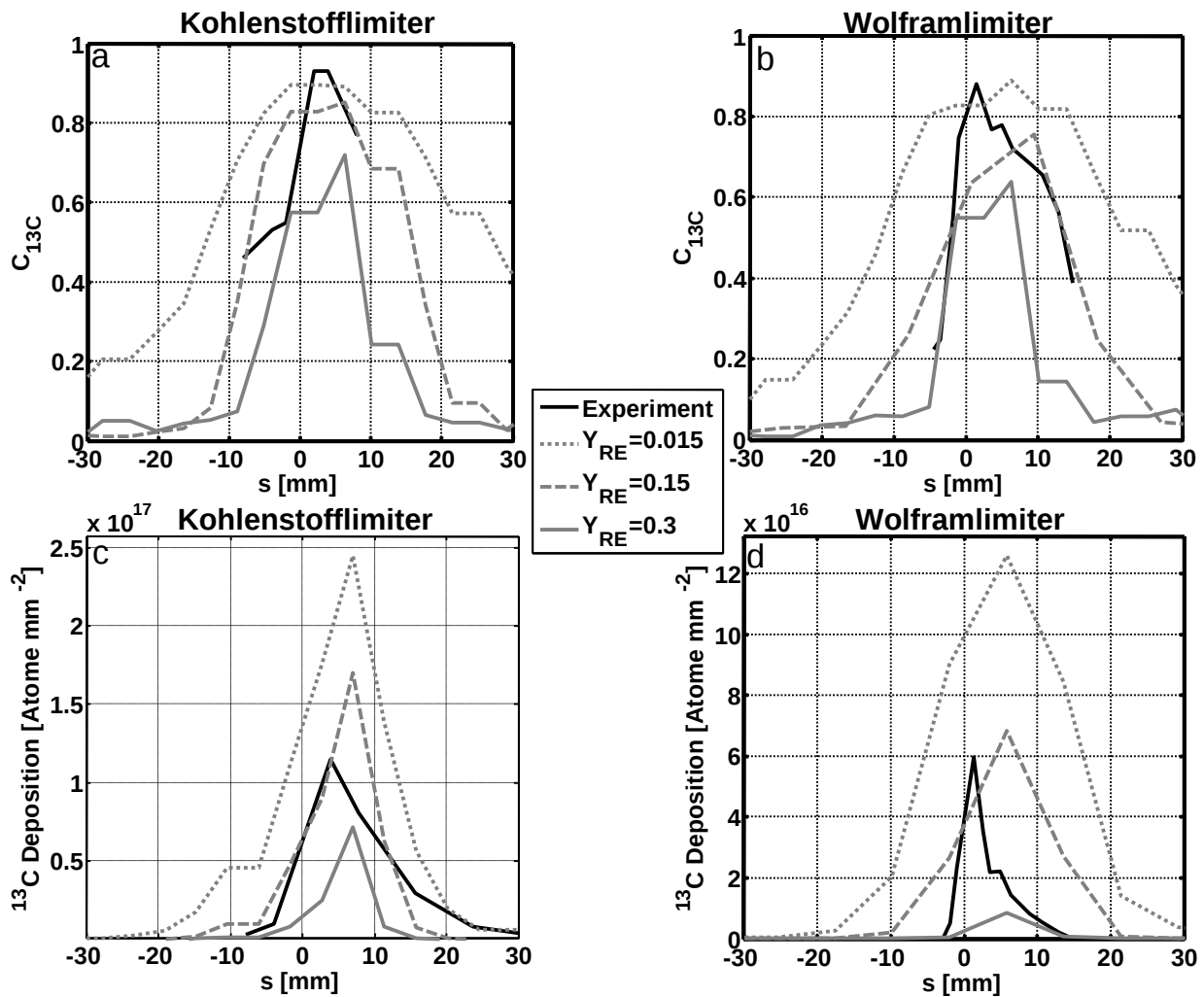


Abbildung 5.16: Vergleich von Simulationen mit unterschiedlichen Werten für die chemische Reerosion  $Y_{RE}$  mit den Experimenten, a, b: Profile des  $^{13}\text{C}$ -Anteils in der deponierten Schicht, c, d: Profile der  $^{13}\text{C}$ -Deposition

in positiver  $s$ -Richtung (entlang der längsten Achse der Deposition) etwas schneller abfällt als im Experiment. Eine mögliche Erklärung für diese Abweichung könnte in der Oberflächenrauigkeit liegen, die in den Simulationen nicht berücksichtigt wird. Auf rauen Graphitoberflächen werden mehr Verunreinigungen deponiert. Dies kann mit der erhöhten Redepositionswahrscheinlichkeit erklärt werden, weil zunächst reflektierte Projektile nach Verlassen der Oberfläche sofort wieder auf hervorstehende Oberflächenmerkmale treffen können [KEHR99]. Aus denselben Gründen ist die Erosionsausbeute im Allgemeinen für streifenden Einfall kleiner. Für senkrechten Einfall ist die Zerstäubung rauer Oberflächen hingegen meist leicht erhöht. Ein allgemeines Modell zur Beschreibung der Oberflächenrauigkeit konnte bislang nicht gefunden werden, denn es scheint, dass einzelne Energie- und Winkelbereiche individuelle Näherungen der Zerstäubungsrate nötig machen, um die Oberflächenrauigkeit zu berücksichtigen [SD02].

Der  $^{13}\text{C}$ -Anteil in der deponierten Schicht bei der Simulation des Wolframlimiters mit  $Y_{RE} = 0.15$  stimmt gut mit dem experimentell gemessenen Profil überein (Abbildung 5.16b). Die  $^{13}\text{C}$ -Deposition in Abbildung 5.16d deutet jedoch darauf hin, dass  $Y_{RE}$  etwas größer als 0.15 eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment liefert. Zudem zeigt sich in allen Profilen, dass das Maximum der simulierten Profile in allen Fällen um etwa 3-5mm vom Injektionsloch weiter entfernt liegt als im Experiment. In den Simulationen wird direkt am Injektionsloch weniger Material deponiert, da hier mehr Erosion durch Selbstzerstäubung stattfindet.

Hält man  $Y_{RE}$  (Ausbeute für redeponiertes Material, d. h.  $^{13}\text{C}$ ) konstant und variiert die chemische Erosion  $Y_{\text{chem}}$  (für das Substrat, d. h.  $^{12}\text{C}$ ), ändert sich die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz erwartungsgemäß kaum (Abbildung 5.17). Die Depositionsfläche, die in den Randbereichen anteilmäßig mehr  $^{12}\text{C}$  enthält (siehe Abbildung 5.18), schrumpft mit wachsendem  $Y_{\text{chem}}$  leicht.

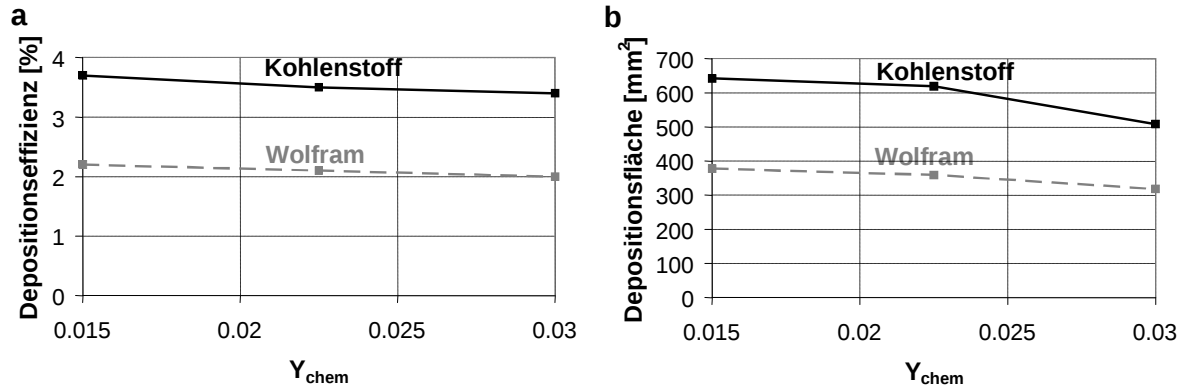


Abbildung 5.17: Simulation der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz und Fläche der Deposition für den Limiter aus Graphit und den Limiter aus Wolfram in Abhängigkeit von chemischer Erosion  $Y_{\text{chem}}$  bei  $Y_{\text{RE}} = 0.15$

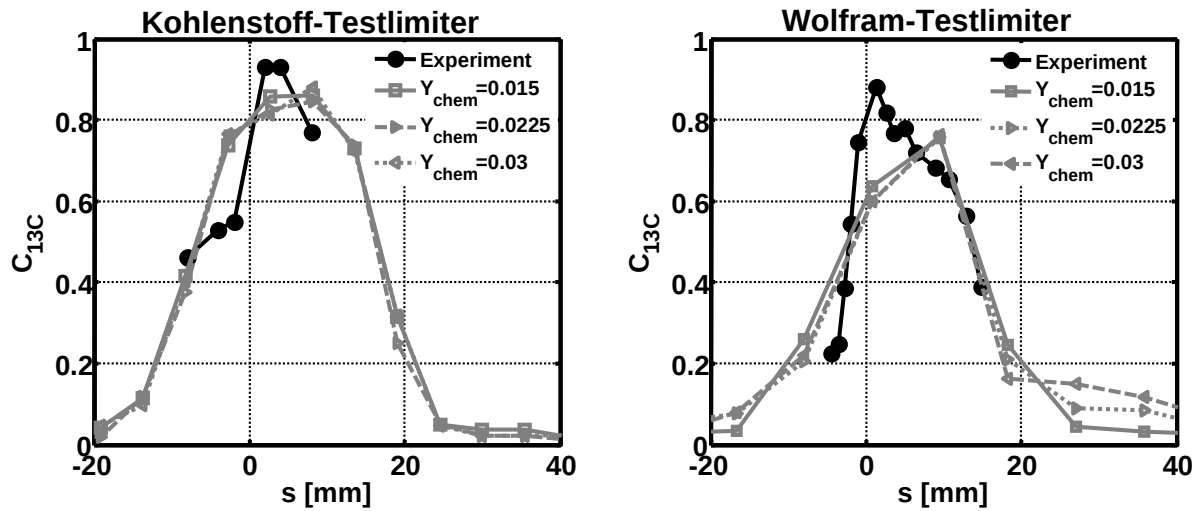


Abbildung 5.18: Vergleich von Simulationen mit Experimenten: Profile des  $^{13}\text{C}$ -Anteils in der deponierten Schicht für unterschiedliche Werte  $Y_{\text{chem}}$

### 5.2.7 Einfluss der Injektionsrate

Die Annahme einer Injektionsphase von 2s Dauer mit konstanter  $^{13}\text{CH}_4$ -Injektionsrate ist nicht gerechtfertigt, wie man an dem Zeitverlauf der experimentell gemessenen Rate erkennt (vgl. Abbildung 5.3). Die Injektionsrate hat auf die Deposition aber einen großen Einfluss, wie man in Abbildung 5.19 sieht. Für eine Injektionsrate von  $10^{19}/\text{s}$  befinden sich sowohl der Kohlenstoff- als auch der Wolframlimiter fast ausschließlich in der Netto-Erosion, während bei  $7 \cdot 10^{19}/\text{s}$  bei beiden Limitern etwa 6% des injizierten Kohlenstoffs wieder auf die Oberfläche deponiert werden.

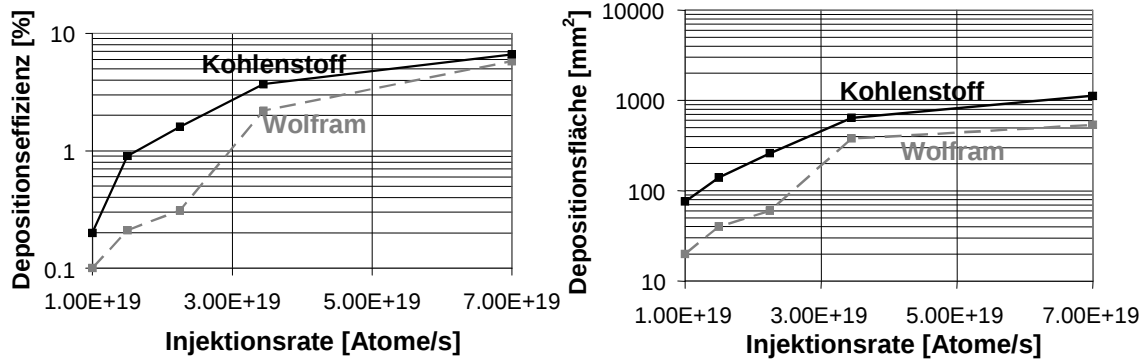


Abbildung 5.19:  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz und -fläche der Deposition für den Limiter aus Graphit (durchgezogene Linie) und den Limiter aus Wolfram (gestrichelte Linie) in Abhängigkeit von der Injektionsrate ( $Y_{\text{chem}} = 0.015$ ,  $Y_{\text{RE}} = 0.15$ ). Für die vorangegangenen Rechnungen wurde  $3.5 \cdot 10^{19}/\text{s}$  angenommen

Der größte Unterschied zwischen Kohlenstoff- und Wolframsubstrat in der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz zeigt sich für die Injektionsrate von  $2.3 \cdot 10^{19}/\text{s}$  mit 0.3% für den Wolframlimiter und mit 1.8% für den Kohlenstofflimiter. Für diesen Fall sieht man in Abbildung 5.20 einen detaillierten Vergleich der Ergebnisse der experimentellen Oberflächenanalysen mit der Simulation. Die Maxima der  $^{13}\text{C}$ -Deposition (5.20a) stimmen sowohl auf dem Wolfram- als auch auf dem Kohlenstofflimiter gut mit den simulierten Ergebnissen überein, wenn man von dem in 5.2.6 beschriebenen Versatz des Maximums absieht. Das experimentelle Depositionsmuster auf Graphit fällt in positiver  $s$ -Richtung deutlich langsamer ab. Der  $^{13}\text{C}$ -Anteil in der deponierten Schicht auf Graphit fällt im Experiment größer aus als in der Simulation, während für den Wolframlimiter eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen ist. Beim Vergleich der zweidimensionalen Depositionsmuster in Abbildung 5.20c und d wird der Unterschied in der bedeckten Fläche zwischen Wolfram und Kohlenstoff auch in der Simulation deutlich. Auch die Ausrichtung der Deposition, d. h. der Winkel zwischen der  $s$ - und der  $x$ -Achse, wird in beiden Fällen richtig durch die Simulation wiedergegeben. Die größte Diskrepanz findet sich in der Ausbreitung der Depositionsmuster in negativer  $x$ -Richtung, die für beide Fälle (Wolfram und Kohlenstoff) in der Simulation etwas stärker ausgeprägt ist.

Der Umstand, dass der Limiter während ungefähr der halben Dauer der Plasmaentladung von 5-6s einer Injektionsrate  $< 10^{19}/\text{s}$  ausgesetzt war, legt nahe, dass in dieser Zeit die physikalische Zerstäubung des Kohlenstoffs auf dem Wolframlimiter größer als auf dem Kohlenstofflimiter gewesen sein könnte und zu den beobachteten Unterschieden beiträgt. Deshalb wurden auch Rechnungen mit der in Abbildung 5.3 dargestellten

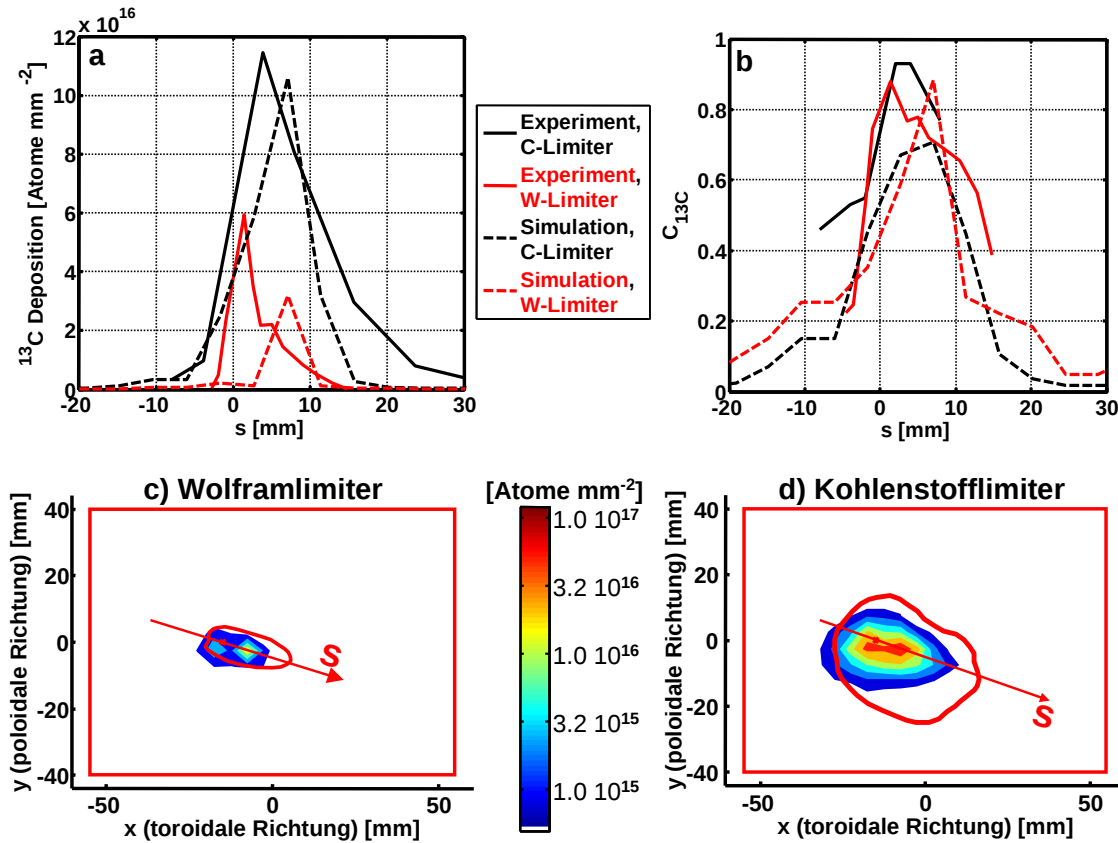


Abbildung 5.20: Vergleich von Simulation und Experiment für die Injektionsrate  $2.25 \cdot 10^{19}/\text{s}$ . **a:** Profile der  $^{13}\text{C}$ -Deposition, **b:** Profile des  $^{13}\text{C}$ -Anteils in der deponierten Schicht, **c, d:** Zweidimensionale Ansicht von oben. Deposition unterhalb der Nachweisgrenze der Farbringanalyse ( $\lesssim 5 \cdot 10^{14} \text{ Atome mm}^{-2} \hat{=} 10 \text{ nm}$  Schichtdicke) ist in weiß dargestellt. Die rote Linie kennzeichnet die Konturlinie der im Experiment beobachteten lokalen Deposition (vgl. Abbildung 5.2)

zeitabhängigen Injektionsrate durchgeführt.

### Einfluss einer zeitabhängigen Injektionsrate

Die momentane  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz korreliert im Zeitverlauf etwa mit der Änderung der Injektionsrate (vgl. Abbildung 5.21 mit Abbildung 5.3), da bei einer hohen Injektionsrate ( $> 2.5 \cdot 10^{19}/\text{s}$ ) auch eine höhere  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz vorliegt. Noch entscheidender ist aber, dass zu Anfang jeder Injektionsphase die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz besonders hoch wird, da sich erst eine hohe  $^{13}\text{C}$ -Oberflächenkonzentration aufbauen muss, bevor das  $^{13}\text{C}$  wieder effektiv erodiert werden kann.

Die Depositionsfläche (Abbildung 5.22) schwankt nur geringfügig und nähert sich langsamer als bei der konstanten Injektionsrate einem Gleichgewichtszustand an.

Es wurden Simulationen für verschiedene Reerosionsausbeuten  $Y_{RE}$  durchgeführt. Abbildung 5.23 lässt erkennen, dass der Unterschied in der Deposition zwischen den Materialien nicht größer als ein Faktor 2-3 wird. Für den Wolframlimiter zeigt sich die beste Übereinstimmung mit dem Experiment bei  $Y_{RE} = 0.15$ , für den Graphitlimiter ist die Übereinstimmung bei  $Y_{RE} = 0.075$  am größten.

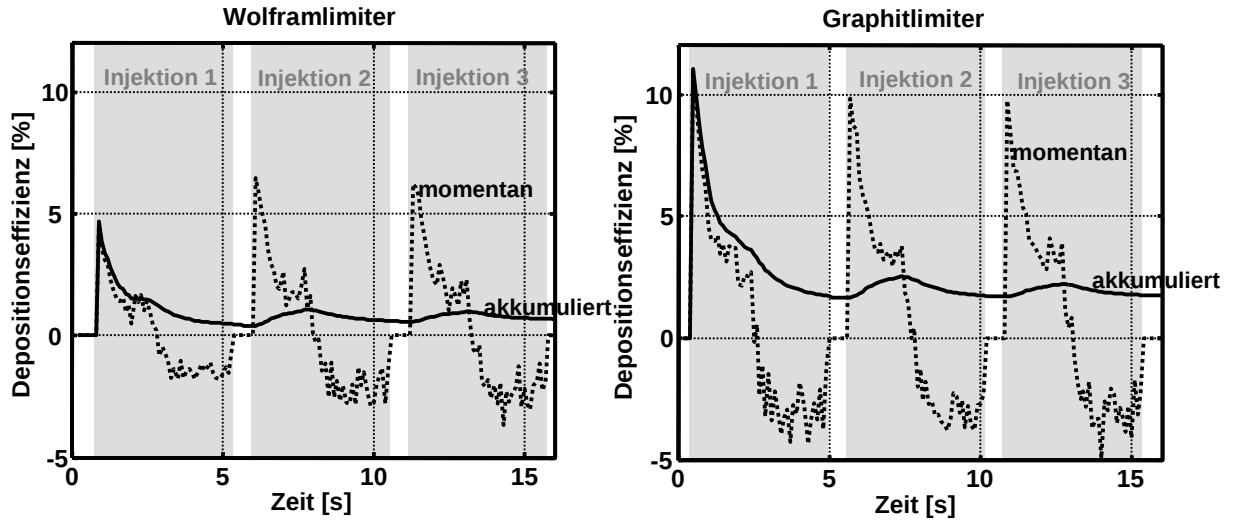


Abbildung 5.21: Simulation der Deposition in Abhängigkeit von der Zeit bei zeitabhängiger Injektionsrate (siehe Abbildung 5.3,  $Y_{\text{chem}} = 0.015$ ,  $Y_{RE} = 0.15$ )

Die Simulationen mit zeitabhängiger Injektionsrate lassen sich in die Ergebnisse mit konstanter Injektionsrate einordnen, wenn man sie mit der mittleren und maximalen Injektionsrate vergleicht: Die Deposition mit zeitabhängiger Injektion ist größer, als sie bei der konstanten mittleren Injektionsrate ( $\sim 1.25 \cdot 10^{19}/s$ ) ist, und kleiner, als sie bei der konstanten maximalen Injektionsrate ( $\sim 3.1 \cdot 10^{19}/s$ ) ist.

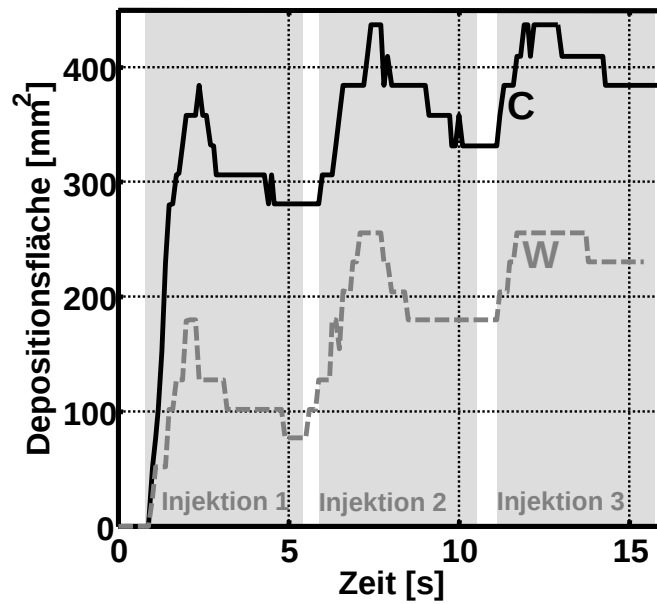


Abbildung 5.22: Simulation der Depositionsfläche in Abhängigkeit von der Zeit bei variabler Injektionsrate (siehe Abbildung 5.3,  $Y_{\text{chem}} = 0.015$ ,  $Y_{RE} = 0.15$ )

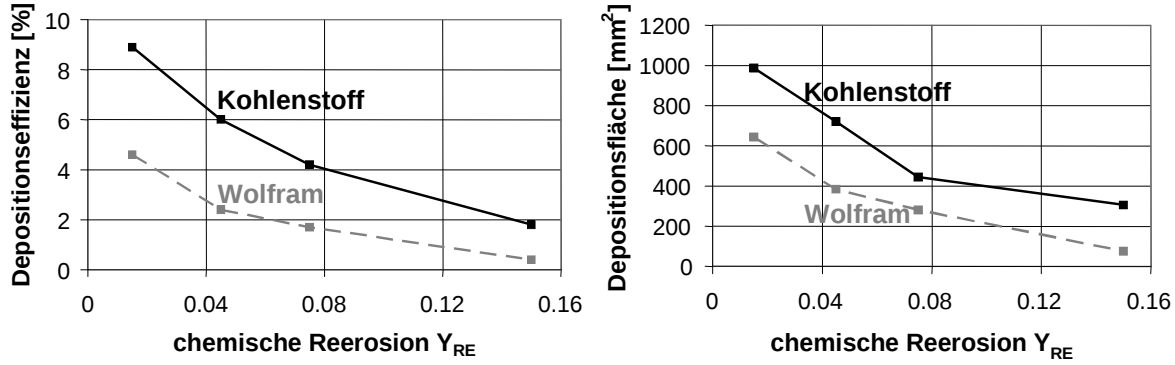


Abbildung 5.23: Simulation der  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz in Abhängigkeit von  $Y_{RE}$  bei variabler Injektionsrate (siehe Abbildung 5.3,  $Y_{chem} = 0.015$ )

### 5.3 Schlussfolgerungen

Bei der Simulation der  $^{13}\text{CH}_4$ -Injektionsexperimente in TEXTOR können verschiedene Beobachtungsgrößen nahezu unabhängig voneinander betrachtet werden. Es bietet sich an, zunächst die räumliche Verteilung der Lichtemission zu modellieren, da diese im Wesentlichen durch die Plasmaparameter beeinflusst wird. Anschließend kann die  $^{12}\text{C}$  Hintergrunddeposition simuliert werden, die wesentlich von den Plasmaparametern, der Konzentration von  $^{12}\text{C}$  im Hintergrundplasma und der chemischen Erosionsausbeute abhängig ist. Auf dieser Grundlage lässt sich dann die lokale  $^{13}\text{C}$ -Deposition simulieren, die in erster Linie vom effektiven Sticking der Kohlenwasserstoffe, der chemischen Reerosion und der Injektionsrate abhängt.

Die indirekt durch die Simulation bestimmte Konzentration von Kohlenstoff im Hintergrundplasma lag bei beiden Experimenten zwischen 3% und 4.5%, wenn man eine Schwankung der chemischen Erosion von 1.5% bis 2.25% zulässt.

Für beide Substratmaterialien gilt, und zwar sowohl für die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz als auch für die Depositionsfläche: Größere Elektronentemperatur am Injektionsloch (von  $\sim 22\text{eV}$  bis  $\sim 29\text{eV}$ ) bedeutet größere Zerstäubungsraten und damit kleinere Deposition.

Die Simulation mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell liefert auf Graphit, verglichen mit dem Flussbilanz-Oberflächenmodell, typischerweise halb so große  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienzen, da Material aus der Injektion zum großen Teil mit kleiner Energie sehr oberflächennah implantiert wird. Dort können sich dann in kurzer Zeit durchgehend sehr hohe Konzentrationen aufbauen und damit die absolute Erosion vergrößern. Beim Flussbilanz-Oberflächenmodell wird die Konzentration stärker durch die  $^{12}\text{C}$ -Flussdichte aus dem Hintergrundplasma und aus dem Substratmaterial verdünnt. Auf Wolframsubstrat sieht man, dass ausschließlich bei der Simulation mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell und nur unter bestimmten Bedingungen um zwei bis dreimal weniger  $^{13}\text{C}$  deponiert wird, im Extremfall bis zu sechsmal weniger. Ursache dafür ist die erhöhte Reflexion am Substratmaterial und eine damit verbundene erhöhte Zerstäubung des oberflächennah deponierten  $^{13}\text{C}$  vor allem durch Selbstzerstäubung.

Es hat sich bei diesen Simulationen gezeigt, dass die größere oder kleinere  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz analog zu den experimentellen Ergebnissen zum Großteil über die Veränderung der bedeckten Fläche zu erklären ist.

Letztlich wird aber mit dem SDTrimSP-Oberflächenmodell nur ein Teil des in diesem

Experiment beobachteten Unterschieds zwischen der Deponierung auf Wolfram und der auf Graphit erklärt. Der Unterschied in  $\eta$  belief sich maximal auf den Faktor 6, in den meisten Fällen war nur ein Faktor 2-3 zu beobachten, während sich im Experiment der Unterschied auf einen Faktor 10 beläuft.

Die lokale Änderung der Plasmaparameter durch die Injektion wird von ERO nicht berücksichtigt. Die Änderung der Plasmaparameter würde für beide Limiter gleichermaßen gelten und kommt somit zur Erklärung des Unterschieds nicht in Frage.

Durch die Simulationen in dieser Arbeit wurde die Wiederholung des Experimentes mit einem poliertem Graphitlimiter angeregt. Einer ersten quantitativen Abschätzung zufolge wurden unter 1%  $^{13}\text{C}$  lokal deponiert und der visuelle Eindruck des Farbmusters der lokalen Deposition auf dem polierten Limiter zeigt eine kleinere depositionsdominierte Fläche verglichen mit der Deposition auf dem unpolierten Graphitlimiter. Um eine klare Aussage bzgl. der Simulation dieses neuen Experimentes geben zu können, muss zunächst eine genaue quantitative Analyse der Deposition vorliegen und die in diesem Experiment aus technischen Gründen verminderte Injektionsrate, die auch einen entscheidenden Einfluss auf die  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz hat, genauer ausgewertet werden. Der beobachtete Substrateffekt lässt sich vermutlich also zu einem Teil auf die Oberflächenrauigkeit zurückführen.

Auch Experimente von Injektionen durch planare Limiter (aus Wolfram, Molybdän und (poliertem) Graphit) anstatt durch sphärische Testlimiter zeigten kürzlich eine deutlich kleinere Substratabhängigkeit der Depositionsmuster und der Depositionseffizienz. Durch Simulationen mit dem neu entwickelten Modell kann jetzt festgestellt werden, welchen Einfluss die Geometrie des Limiters auf die Deposition von Kohlenstoff auf unterschiedlichen Substraten hat.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Die prinzipielle Machbarkeit der Energiegewinnung aus der kontrollierten Kernfusion soll das Experiment ITER nachweisen, mit dessen Bau in Cadarache (Frankreich) in Kürze begonnen wird. Die Elemente Kohlenstoff, Beryllium und Wolfram sind als Materialien für die Wand von ITER vorgesehen, abhängig von den Anforderungen an den unterschiedlichen Orten der Wand in ITER durch Teilchen- und Leistungsflussdichte aus dem Fusionsplasma. Die Wand unterliegt durch Erosions- und Depositionsprozesse Lebensdauereinschränkungen. Außerdem findet in den Wandkomponenten eine Einlagerung des radioaktiven Brennstoffes Tritium statt, die in ITER aus Sicherheitsgründen limitiert sein wird. Die Lebensdauereinschränkungen der Wand und die Rate der Brennstoffrückhaltung werden somit die Verfügbarkeit von ITER bestimmen.

Mit Hilfe von Simulationen des 3D-Monte-Carlo-Programms ERO können diese Werte vorhergesagt werden. Die Simulationen mit ERO sind aber noch mit großen Unsicherheiten behaftet, weil die unvermeidbare Bildung mehrkomponentiger Oberflächenschichten durch Erosion und Deposition der in ITER verwendeten Elemente bislang nur sehr vereinfachend berücksichtigt wurde.

Um diese Unsicherheiten zu beseitigen, wurde in dieser Arbeit ERO mit dem vorhandenen Monte-Carlo-Programm SDTrimSP zu dem neuen Programm ERO-SDTrimSP gekoppelt. Das verbesserte Programm wurde mit Experimenten verglichen, die dazu gezielt am Tokamak TEXTOR durchgeführt wurden. Die Experimente beschäftigen sich mit der Fragestellung der Erosion und Deposition von Kohlenstoff auf Wolfram- und Graphitoberflächen und konnten dazu genutzt werden, die offenen Modellparameter zu bestimmen.

Das Programm ERO berechnet zunächst die Wechselwirkung von Hintergrundplasma und Wandkomponenten. Verunreinigungen des Plasmas können deponiert und Wandmaterialien können (chemisch und physikalisch) erodiert werden. Daraufhin wird mittels Testteilchen der Transport der erodierten Teilchen durch das Plasma berechnet, bis diese wieder auf Wandkomponenten treffen und erneut deponiert werden bzw. zur Erosion beitragen oder aber das Observationsvolumen verlassen. Die Testteilchen starten in der Regel ungeladen von der Oberfläche und werden entsprechend ihrer Ionisationswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Dichte und Temperatur des Plasmas ionisiert; Moleküle können zudem dissoziiert werden. Beim Teilchentransport werden die Lorentzkraft im elektromagnetischen Feld (Verfolgung der Gyrationbewegung unter Berücksichtigung von Driften), Reibungskräfte, thermische Kräfte und eine effektive anomale

Senkrecht-Diffusion berücksichtigt.

Mit ERO war es bisher nicht möglich, den dynamischen Prozess des Schichtwachstums zu beschreiben. Die Oberfläche wurde in ERO vereinfacht als homogene Mischung der Materialien durch Angabe der Konzentrationen in einer Interaktionsschicht des Substratmaterials beschrieben. Es wird eine Flussbilanz aus allen Teilchen gezogen, die vom Plasma oder Substrat in die Interaktionsschicht mit fester Dicke fließen und umgekehrt von der Interaktionsschicht in das Plasma oder das Substrat.

SDTrimSP beschreibt das Schichtwachstum, indem es den Transport von Ionen im Festkörper simuliert, die als Projektile mit einer bestimmten Energie und unter einem bestimmten Winkel auf den Festkörper treffen. Dazu werden Zwei-Körper-Stoßkaskaden berechnet. Über die Implantationstiefe der Ionen kann die Veränderung des Festkörpers tiefenaufgelöst verfolgt werden. In Abhängigkeit vom Konzentrationstiefenprofil ergeben sich Reflexionskoeffizienten der Projektile und Zerstäubungsausbeuten für die Atome des Festkörpers, die auf der Berechnung der Trajektorien in Bewegung gesetzter Festkörperatome beruhen.

Am deutlichsten zeigt sich der Unterschied in der Beschreibung des Festkörpers durch SDTrimSP zu der des Flussbilanz-Oberflächenmodells von ERO anhand eines Beispiels: Nimmt man Deuteriumprojektile eines 40 eV heißen Plasmas an, die auf eine 2 nm dünne Kohlenstoffschicht über einem Wolframsubstrat treffen, so erhält man sehr unterschiedliche Werte für die effektive Zerstäubungsausbeute in dieser Materialzusammensetzung. Mit SDTrimSP ergibt sich eine Ausbeute von 0.045, die um fast den Faktor 10 über der Ausbeute von 0.005 im Flussbilanz-Modell liegt. Dies liegt daran, dass Deuterium bei der Beschreibung durch SDTrimSP sehr effektiv an den tiefer liegenden schweren Wolframatomten reflektiert wird. Dabei verliert das Deuteriumatom kaum Energie, die deshalb zur Zerstäubung des oberflächennahen Kohlenstoffs zur Verfügung steht. Solche Prozesse werden im Flussbilanz-Oberflächenmodell nicht berücksichtigt.

Durch die Kopplung von ERO und SDTrimSP wurde das Flussbilanz-Oberflächenmodell in ERO durch SDTrimSP ersetzt. Eine Schwierigkeit bei der Kopplung bestand darin, zu berücksichtigen, dass in SDTrimSP das Schicksal jedes Testteilchens von der Wechselwirkung der vorherigen Testteilchen abhängt, da jedes Testteilchen eine Veränderung der Oberfläche herbeiführt. Bei der Berechnung der Wechselwirkung mit der Wand wird deshalb in der gekoppelten Version das Testteilchen, das als nächstes mit der Wand in Wechselwirkung tritt, über einen Zufallsprozess aus den Testteilchen der unterschiedlichen Teilchenquellen (physikalisch erodierte Atome, chemisch erodierte Kohlenwasserstoffmoleküle oder injizierte Teilchen) ausgewählt. Im Flussbilanz-Oberflächenmodell hingegen werden alle Testteilchen, die in einem Zeitschritt mit der Oberfläche in Wechselwirkung treten, unabhängig voneinander betrachtet.

SDTrimSP berücksichtigt nur physikalische Zwei-Körper-Stöße und keine chemischen Prozesse. Im Rahmen dieser Arbeit wurde deshalb eine neue Methode entwickelt, die chemische Erosion von Kohlenstoff durch Wasserstoff in SDTrimSP zu implementieren. Aus Experimenten mit Wasserstoffatomstrahlen ist bekannt, dass Kohlenstoff verstärkt zu einem bestimmten Teil direkt von der Oberfläche durch so genannte „kinetische Kohlenwasserstoffemission“ erodiert wird. Ein anderer Teil des freigesetzten Kohlenwasserstoffs wird in tieferen Schichten des Festkörpers gebildet und gelangt dann durch Diffusion an die Oberfläche.

Bei der Umsetzung in SDTrimSP wurde dies berücksichtigt: Ein Teil der chemischen

Erosion findet an der obersten Festkörperschicht statt und ein weiterer Teil an den Orten, an denen die Wasserstoffprojekte aus dem Plasma im Festkörper zum Stillstand kommen. Die Anzahl der erodierten Kohlenstoffatome wird - wie im Experiment - auf den Wasserstofffluss normiert, der auf die Oberfläche trifft. Dadurch wird die durch den reflektierten Wasserstofffluss erfolgende chemische Erosion berücksichtigt. Aus Experimenten ist außerdem bekannt, dass Kohlenstoff, der mit kleiner Energie ( $< 50$  eV) auf die Oberfläche trifft, weiche amorphe Kohlenwasserstoffschichten (a-C:H-Schichten) bildet. Diese unterliegen einer im Vergleich zu Graphit oder CFC erhöhten, aber quantitativ nicht genau bekannten Erosion. Dies kann in den Modellierungen durch eine erhöhte Erosionsausbeute  $Y_{RE}$  berücksichtigt werden.

Über die Haftwahrscheinlichkeit von Kohlenwasserstoffmolekülen auf Oberflächen, die unter dem Einfluss eines Plasmas in der Abschältschicht eines Tokamaks stehen (so genanntes „effektives Sticking“  $S_{\text{eff}}$ ), gibt es keine direkten Messungen. Durch Vergleich der Simulationen mit den Experimenten an TEXTOR konnte herausgefunden werden, dass - anders als bei Experimenten ohne den Einfluss eines Plasmas - die Haftwahrscheinlichkeit vernachlässigbar klein sein muss. Um dies zu berücksichtigen, wird unabhängig von der Berechnung der Trajektorie durch SDTrimSP anhand eines Eingabeparameters  $S_{\text{eff}}$  festgelegt, ob ein Molekül deponiert oder reflektiert wird, und dies entsprechend bei der Schichtbildung berücksichtigt.

Diese Annahme für das effektive Sticking kann man erklären, wenn man von einer Desorption der Kohlenwasserstoffmoleküle durch Methanbildung in Synergie mit dem Wasserstofffluss auf die Oberfläche ausgeht, unmittelbar nachdem die Moleküle an der Oberfläche adsorbiert wurden und bevor sie Zeit haben, einen geeigneten Kohlenstoff-Bindungspartner an der Oberfläche zu finden.

Bei den am Tokamak TEXTOR durchgeführten Experimenten zum Vergleich der in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen wurde  $^{13}\text{CH}_4$  durch Testlimiter mit Bohrungen in das Plasma injiziert, um den Methan-Transport und die Erosion und Deposition von Kohlenstoff auf Graphit und Wolfram zu untersuchen. Das aus der Injektion deponierte  $^{13}\text{C}$  kann mit Hilfe spezieller Analysetechniken (SIMS, NRA) von dem Graphit-Substratmaterial  $^{12}\text{C}$  und dem in TEXTOR intrinsischen  $^{12}\text{C}$  unterschieden werden. Somit wurden die  $^{12}\text{C}$  - und  $^{13}\text{C}$ -Depositionsverteilungen auf dem Limiter mit den Simulationen verglichen; als dritte Beobachtungsgröße wurde die zweidimensional aufgelöste Intensität der Linienemission (CH- und CIII-Emissionslinien) über den Testlimitern verglichen. In den Experimenten konnten für alle Injektionen vergleichbare experimentelle Bedingungen realisiert werden, wie aus Messungen der Elektronentemperatur und -dichte in der Randschicht mit Hilfe einer Heliumatomstrahl-Diagnostik hervorgeht.

Die Experimente zeigen eine klare Trennung zwischen der Deposition, die durch die Injektion um die Injektionsstelle verursacht wird, und der Deposition, die sich durch Ablagerung der Kohlenstoffverunreinigungen aus dem Hintergrundplasma ergibt. Zwischen diesen beiden depositionsdominierten Zonen, in denen mehr Kohlenstoff deponiert als erodiert wird, liegt ein erosionsdominierter Bereich. Dieser zeichnet sich dadurch aus, dass dort mehr Kohlenstoff erodiert als deponiert wird oder aber ein Gleichgewicht zwischen Kohlenstofferosion und -deposition besteht, so dass dort keine Kohlenstoffschicht aufwachsen kann. Nur auf dem Graphitlimiter besteht eine geringfügige Überschneidung der beiden Depositionszonen in einer Richtung. Der Vorteil dieser Trennung der Depositionsmuster liegt darin, dass so die  $^{12}\text{C}$ -Hintergrundkonzentration, die in dem Experiment

unbekannt ist, aber Einfluss auf die  $^{13}\text{C}$ -Deposition aus der Injektion hat, unabhängig mit Hilfe der Simulationen bestimmt werden konnte. Die  $^{12}\text{C}$ -Hintergrundkonzentration konnte auf einen Bereich (3%-4.5% relativ zum Deuteriumfluss auf den Testlimiter) eingeschränkt werden, in dessen Variationsbreite kein großer Einfluss auf die Simulation der  $^{13}\text{C}$ -Deposition besteht.

Es werden für die beiden Materialien Wolfram und Kohlenstoff sehr unterschiedliche deponierte Mengen und Formen der Depositionsmuster beobachtet. Auf dem Wolframlimiter wurden nur 0.3% des injizierten  $^{13}\text{C}$  lokal um die Injektionsstelle deponiert und die depositionsdominierte Fläche war mit scharfen Übergängen zur erosionsdominierten Fläche sehr stark um das Injektionsloch lokalisiert. Diese so genannte  $^{13}\text{C}$ -Depositionseffizienz beträgt auf dem Kohlenstofflimiter 4% und die depositionsdominierte Fläche war mehr als fünfmal so groß wie auf dem Wolframlimiter mit signifikant flacherem Übergang zu erosionsdominierten Gebieten.

Die experimentell beobachtete zweidimensionale Verteilung der CH- und CIII-Linienemission über den Testlimitern, die von der Emission der Zerfallsprodukte aus der  $^{13}\text{CH}_4$ -Injektion dominiert wird (d. h. Recycling an der Oberfläche lässt die Lichtverteilung nahezu unverändert, diese ist damit unabhängig vom Oberflächenmodell), ist in guter Übereinstimmung mit den simulierten Ergebnissen. Daraus wird geschlossen, dass der Verunreinigungstransport durch das Plasma und die Teilchenflüsse auf den Limitern richtig beschrieben werden.

Bei den Simulationen mit ERO-SDTrimSP werden auf dem Wolframlimiter weniger als 0.5% des injizierten Materials deponiert und auf dem Kohlenstofflimiter ca. 2%. Außerdem werden sowohl die unterschiedliche Ausdehnung der depositionsdominierten Fläche, als auch der sehr hohe  $^{13}\text{C}$ -Anteil von ungefähr 90% im Maximum der aufgewachsenen Schicht direkt am Injektionsloch insbesondere für den Wolframlimiter sehr gut wiedergegeben. Auch das absolute Maximum der  $^{13}\text{C}$ -Deposition ist mit den gemessenen Werten vergleichbar. Dazu muss das effektive Sticking von Kohlenwasserstoffen gewählt und eine erhöhte Reerosionsausbeute für deponierte Schichten von  $Y_{RE} = 0.15$  und damit zehnmal höher als für das Substratmaterial angenommen werden.

Im Gegensatz dazu wird bei der Benutzung des Flussbilanz-Oberflächenmodells unter keiner Annahme der physikalischen Randbedingungen eine gute Übereinstimmung der experimentell gemessenen  $^{13}\text{C}$ -Deposition auf den Testlimitern mit den Simulationen hergestellt. Insbesondere liefern die Simulationen durchgehend identische Ergebnisse für beide Substratmaterialien. Der Wolframlimiter wird in einer beispielhaften Simulation schon nach 2s durch Kohlenstoff überdeckt, so dass im Widerspruch zum Experiment anschließend kein Unterschied mehr zwischen den Simulationen für Graphit- und Wolframlimiter besteht.

Die Parameterstudien mit ERO-SDTrimSP zu den Experimenten zeigen, dass die Abhängigkeit der  $^{13}\text{C}$ -Deposition vom Substratmaterial nur unter bestimmten Voraussetzungen beobachtet wird<sup>1</sup>: Die Injektionsrate muss klein sein ( $< 3 \cdot 10^{19}/\text{s}$ ), genau wie die  $^{12}\text{C}$ -Konzentration im Hintergrundfluss ( $< 4\%$ ), die Elektronentemperatur und -dichte an dem Injektionsloch darf nicht zu klein sein ( $> 27\text{ eV}$  bzw.  $2 \cdot 10^{18}\text{m}^{-3}$ ), das effektive Sticking für Kohlenwasserstoffe muss vernachlässigbar sein und die erhöhte Reerosion

---

<sup>1</sup>Die angegebenen Zahlenwerte beziehen sich jeweils auf ein Referenzszenario mit chemischer Erosion von 0.015,  $Y_{RE} = 0.15$ , Kohlenstoffkonzentration im Hintergrundplasma von 3.5%, Injektionsrate  $\sim 2 \cdot 10^{19}/\text{s}$ .

muss groß sein ( $Y_{RE} \gtrsim 0.15$ ). Damit ist klar, dass jede Begünstigung der Bedeckung des Substratmaterials durch die Änderung der Randbedingungen zu einer Verkleinerung der Substratabhängigkeit der Deposition führt. (Trivial ist der umgekehrte Fall, dass auch kein Unterschied zwischen den Substratmaterialien zu beobachten ist, wenn auf beiden Limitern gar keine Netto- $^{13}\text{C}$ -Deposition mehr stattfindet.)

Weiterhin zeigte sich mit den Parameterstudien, dass die Injektionsrate, die zunächst als konstant angenommen wurde, einen großen Einfluss auf die Depositionseffizienz ausübt. Mit kleineren Injektionsraten sinkt auch die Depositionseffizienz, bis bei einer Rate von ca.  $1 \cdot 10^{19}$  Moleküle/s der gesamte deponierte Kohlenstoff auch wieder erodiert wird. Daraufhin wurden auch Simulationen mit der experimentell gemessenen zeitabhängigen Injektionsrate durchgeführt. Dies führt zu Depositionseffizienzen, die sowohl für den Graphit- als auch für den Wolframlimiter leicht über der Depositionseffizienz bei konstanter mittlerer Injektionsrate liegen.

Der neue Code ERO-SDTrimSP erlaubt nun eine wesentlich bessere Beschreibung von Erosions- und Depositionsprozessen bei der Bildung mehrkomponentiger Oberflächenschichten. Die noch verbleibenden Abweichungen vom Experiment gilt es in zukünftigen Weiterentwicklungen zu beseitigen. So ist z. B. anzumerken, dass die Simulation des Graphitlimiters ein etwas kleineres  $^{13}\text{C}$ -Depositionsmuster mit schärferen Übergängen zur Erosionszone als im Experiment zeigt. Dadurch fällt die Depositionseffizienz mit ungefähr 2% in der Simulation um einen Faktor zwei kleiner aus als im Experiment. Da der Graphitlimiter im Gegensatz zum Wolframlimiter nicht poliert war und damit eine höhere Oberflächenrauigkeit besaß, bietet er dem auf die Oberfläche treffenden  $^{13}\text{C}$  eine größere effektive Oberfläche niedrigere Reflexionskoeffizienten und ist nach der Deposition besser durch das umgebende  $^{12}\text{C}$  vor Erosion durch das Plasma geschützt. Im Vergleich zu einem Experiment mit einem polierten Graphitlimiter, das durch diese Untersuchung angeregt wurde und dessen genaue Auswertung noch aussteht, bleibt der bislang kaum verstandene Effekt der Oberflächenrauigkeit zu untersuchen.

Die Simulationen, die bislang mit ERO für ITER gemacht wurden, um die Lebensdauer der Wandkomponenten und das Tritiuminventar in ITER abzuschätzen, sind mit großen Unsicherheiten behaftet. Durch die Simulation mit SDTrimSP wurde gezeigt, dass die bislang in den Vorhersagen angenommene erhöhte Reerosion zur Hälfte durch physikalische Erosion von oberflächennah deponiertem Kohlenstoff erklärt werden kann. Dies führt einerseits zu einer insgesamt kleineren freigesetzten Menge an Kohlenstoff und andererseits wird physikalisch erodierter Kohlenstoff mit größerer Energie von der Oberfläche freigesetzt als chemisch erodierter Kohlenstoff. Mit Hilfe dieses Wissens können jetzt neue Rechnungen mit ERO-SDTrimSP gestartet werden, um die Lebensdauer von Wandkomponenten und Tritium-Inventar von ITER genauer vorherzusagen.

Mit ERO-SDTrimSP wurde in dieser Arbeit ein Werkzeug zur Simulation mehrkomponentiger Oberflächenschichten in Fusionsanlagen zur Verfügung gestellt, das auch die Simulation beliebiger anderer Materialkombinationen zulässt. Insbesondere der Einfluss von Beryllium (und die Bildung von Berylliumcarbid) auf Erosions- und Depositionsprozesse in Fusionsanlagen wird jetzt mit ERO-SDTrimSP untersucht.

# Anhang A

## Simulationsparameter

Zur besseren Übersicht werden auf Seite 84 die wichtigsten Simulationsparameter für alle Rechnungen dieser Arbeit einander gegenübergestellt. Die wichtigsten Simulationsparameter, die für alle Simulationen identisch sind, lauten (wenn nicht explizit anders in der Abbildung angegeben):

| Simulationsparameter                   | Wert     |
|----------------------------------------|----------|
| Oberflächenmodell                      | SDTrimSP |
| Modell für die chemischen Erosion      | 3        |
| $S_{\text{eff}}$                       | 0        |
| $f_{nh}$                               | 0.01     |
| $ \vec{B} $                            | 2.25 T   |
| radiale Position der LCFS              | 0.47 m   |
| exponentielle Abfalllänge von $T_e$    | 0.047 m  |
| exponentielle Abfalllänge von $T_i$    | 0.047 m  |
| exponentielle Abfalllänge von $n_e$    | 0.0097 m |
| exponentielle Abfalllänge von $\rho_C$ | -0.14 m  |

## Gegenüberstellung der wichtigsten Simulationsparameter

| Abbildung    | Substrat | $n_{e,LDFS} [m^{-3}]$      | $T_{e,LDFS} [eV]$ | $T_{i,LDFS} [eV]$ | $\rho_C [\%]$ | $Y_{chem}$   | $Y_{RE}$   | $S_i$ [Moleküle/s]               |
|--------------|----------|----------------------------|-------------------|-------------------|---------------|--------------|------------|----------------------------------|
| 4.6,4.7      | C, W     | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 1             | 0.015        | 0.15       | 0                                |
| 4.8          | W        | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 1             | 0.015        | 0.15       | 0                                |
| 4.9          | C, W     | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 16, const.        | 24, const.        | 2             | 0.015        | 0.15       | 0                                |
| 4.10a        | C, W     | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 0-3           | 0.015        | 0.15       | 0                                |
| 4.10b,4.11   | W        | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 2             | 0.015        | 0.15       | 0                                |
| 4.12         | C, W     | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 0-6           | 0, 0.015     | 0.15       | 0                                |
| 4.13,4.14    | C        | $5 \cdot 10^{18}$ , const. | 26, const.        | 39, const.        | 1             | 0.015        | 0.15       | $1 \cdot 10^{20}$                |
| 5.8,5.9,5.10 | C        | $1.6 \cdot 10^{13}$ *      | 36*               | 54*               | 1             | 0.015        | 0.15       | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.11         | C        | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 1-5           | 0.015, 0.025 | 0.15       | 0                                |
| 5.12         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 1             | 0.015        | 0.015-0.3  | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.13         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 1             | 0.015        | 0.15       | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.14         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 1             | 0.015        | 0.15       | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.15,5.16    | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.015        | 0.015-0.3  | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.17,5.18    | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.015-0.03   | 0.15       | $3.5 \cdot 10^{19}$              |
| 5.19         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.15         | 0.15       | $(1-7) \cdot 10^{19}$            |
| 5.20         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.15         | 0.15       | $2.25 \cdot 10^{19}$             |
| 5.21,5.22    | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.15         | 0.15       | $\bar{S}_i = 1.25 \cdot 10^{19}$ |
| 5.23         | C, W     | $1.6 \cdot 10^{13}$        | 36                | 54                | 3.5           | 0.15         | 0.015-0.15 | $\bar{S}_i = 1.25 \cdot 10^{19}$ |

\*Verschiebung der LCFS

## Abkürzungen:

|                    |                                                                                                   |
|--------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| C/ W               | Kohlenstoff/ Wolfram                                                                              |
| $n_{e,LDFS}$       | Elektronendichte an der LCFS                                                                      |
| $T_{e,LDFS}$       | Elektronentemperatur an der LCFS                                                                  |
| $T_{i,LDFS}$       | Ionentemperatur an der LCFS                                                                       |
| $\rho_C$           | Verunreinigungskonzentration                                                                      |
| $Y_{chem}/ Y_{RE}$ | chemische Erosion (Graphit oder Kohlenstoff aus dem Hintergrundplasma/ redeponierter Kohlenstoff) |
| $S_i/ \bar{S}_i$   | Injektionsrate/ mittlere Injektionsrate                                                           |

# Literaturverzeichnis

- [AIPP89] ABRAMOV, V. ; IGITKHANOV, Y. ; PISTUNOVICH, V. ; POZHAROV, V.: First wall and divertor plate sputtering in a tokamak reactor. In: *Journal of Nuclear Materials* 162-164 (1989), S. 462
- [AR03] ALMAN, D.A. ; RUZIC, D.N.: Molecular dynamics calculation of carbon/hydrocarbon reflection coefficients on a hydrogenated graphite surface. In: *Journal of Nuclear Materials* 313-316 (2003), S. 182
- [AZ77] ANDERSEN, H.H. ; ZIEGLER, J.F.: Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements. In: ZIEGLER, J. F. (Hrsg.): *Stopping and Ranges of Ions in Matter* Bd. 3. Pergamon Press, 1977
- [Beh90] BEHRINGER, K.: Measurement of CH<sub>4</sub>/CD<sub>4</sub> fluxes and of chemical carbon erosion from CH/CD band emission. In: *Journal of Nuclear Materials* 176-177 (1990), S. 606
- [Bel82] BELL, K.L. et a.: *Atomic and Molecular Data for Fusion, Part I*. Culham Laboratory, Abingdon, 1982. – Rep. CLM-R216
- [BGH<sup>+</sup>90] BEIDLER, C. ; GRIEGER, G. ; HERRNEGGER, F. ; HARMEYER, E. ; KISSLINGER, J. ; LOTZ, W. ; MAASSBERG, H. ; MERKEL, P. ; NUHRENBURG, J. ; RAU, F. ; SAPPER, J. ; SARDEI, F. ; SCARDOVELLI, R. ; SCHLUTER, A. ; WOBIG, H.: Physics and engineering design for Wendelstein VII-X. In: *Fusion Technology* 17 (1990), Nr. 1, S. 148
- [BH80] BIRSACK, J.P. ; HAGGMARK, L.G.: A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 174 (1980), S. 257
- [BL85] BIRDSALL, C. ; LANGDAN, A.B.: *Plasma physics via computer simulation*. New York : McGraw-Hill, 1985
- [Boh84] BOHDANSKY, J.: A universal relation for the sputtering yield of monoatomic solids at normal ion incidence. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 2 (1984), S. 587
- [Boh05] BOHMEYER, W. et a.: Transport and deposition of injected hydrocarbons in plasma generator PSI-2. In: *Journal of Nuclear Materials* 337-339 (2005), S. 89

- [BR90] BROOKS, J.N. ; RUZIC, D.N.: Modeling and analysis of surface roughness effects on sputtering, reflection and sputtered particle transport. In: *Journal of Nuclear Materials* 176-177 (1990), S. 278
- [Che84] CHEN, F.F.: *Introduction to plasma physics and controlled fusion*. Bd. 1: Plasma Physics. 2. New York : Plenum Press, 1984
- [DBK<sup>+</sup>06] DROSTE, S. ; BORODIN, D. ; KIRSCHNER, A. ; KRETER, A. ; PHILIPPS, V. ; SAMM, U.: Impurity Transport Modelling in Edge Plasmas of Fusion Devices with the Monte Carlo Code ERO. In: *Contributions to Plasma Physics* 7-9 (2006), S. 628
- [Dol82] DOLAN, T.J.: *Fusion research*. Pergamon Press, 1982
- [Eck91] ECKSTEIN, W.: *Springer Series in Materials Science*. Bd. 10: *Computer Simulation of Ion-Solid Interaction*. Berlin : Springer, 1991
- [Eck03] ECKSTEIN, W.: New fit formulae for the sputtering yield. In: *Journal of Nuclear Materials* 320 (2003), S. 209
- [Eco04] ECONOMIC ANALYSIS DIVISION ; IEA, OECD/ (Hrsg.): *World energy outlook*. IEA Publications, 2004
- [EGRR93] ECKSTEIN, W. ; GARCIA-ROSALES, C. ; ROTH, J.: Threshold energy for sputtering and its dependence on angle of incidence. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 83 (1993), S. 95
- [EH87] ECKSTEIN, W. ; HEIFETZ, D.: Data sets for Hydrogen reflection and their use in neutral transport calculations. In: *Journal of Nuclear Materials* 145-147 (1987), S. 332
- [EL87] EHRHARDT, A.B. ; LANGER, W.D.: *Collisional processes of hydrocarbons in hydrogen plasmas*. Princeton University, New Jersey, 1987. – Princeton Plasma Physics Laboratory Report 2477
- [GRER94] GARCÍA-ROSALES, C. ; ECKSTEIN, W. ; ROTH, J.: Revised formulae for sputtering data. In: *Journal of Nuclear Materials* 218 (1994), S. 8
- [GSKL99] GUSEVA, M.I. ; SUVOROV, A.L. ; KORSHUNOV, S.N. ; LAZAREV, N.E.: Sputtering of beryllium, tungsten, tungsten oxide and mixed W-C layers by deuterium ions in the near-threshold energy range. In: *Journal of Nuclear Materials* 266-269 (1999), S. 222
- [HLH<sup>+</sup>89] HIGGINS, M.J. ; LENNON, M.A. ; HUGHES, J.G. ; BELL, K.L. ; GILBODY, H.B. ; KINGSTON, A.E. ; SMITH, F.J.: *Atomic and Molecular Data for Fusion, Part III*. Culham Laboratory, Abingdon, 1989. – Rep. CLM-R294
- [HPU<sup>+</sup>00] HUBER, A. ; POSPIESZCZYK, A. ; UNTERBERG, B. ; BRIX, M. ; MERTENS, Ph. ; PHILIPPS, V. ; SCHWEER, B: Spectroscopic measurements of the ion temperature profile in front of a limiter in TEXTOR-94. In: *Plasma Phys. Control. Fusion* 42 (2000), Nr. 5, S. 569

- [HSSJK00] HOPF, C. ; SCHWARZ-SELINGER, T. ; JACOB, W. ; VON KEUDELL, A.: Surface loss probabilities of hydrocarbon radicals on amorphous hydrogenated carbon film surfaces. In: *Journal of Applied Physics* 87 (2000), Nr. 6, S. 2719
- [III99] ITER PHYSICS BASIS EDITORS ; ITER PHYSICS EXPERT GROUPS ; ITER JOINT CENTRAL TEAM. *ITER Physics Basis*. Nuclear Fusion 12. 1999
- [IPEG99] ITER PHYSICS EXPERT GROUPS, et a.: ITER Physics Basis: Chapter 4: Power and particle control, Abschnitt 3.9.: Choice of wall materials. In: *Nuclear Fusion* 12 (1999), S. 2431
- [JR02] JANEV, R.K. ; REITER, D.: *Collision processes of hydrocarbon species in hydrogen plasmas: I. The methane family*. Forschungszentrum Jülich, 2002. – Bericht Jül-3966
- [KBB<sup>+</sup>06] KRETER, A. ; BORODIN, D. ; BREZINSEK, S. ; DROSTE, S. ; HIRAI, T. ; KIRSCHNER, A. ; LITNOVSKY, A. ; MAYER, M. ; PHILIPPS, V. ; POSPIESZCZYK, A. ; SAKAWA, Y. ; SAMM, U. ; SCHMITZ, O. ; SERGIENKO, G. ; TANABE, T. ; UEDA, Y. ; WIENHOLD, P.: Investigation of carbon transport by  $^{13}\text{CH}_4$  injection through graphite and tungsten test limiters in TEXTOR. In: *Plasma Phys. Control. Fusion* 48 (2006), Nr. 9, S. 1401
- [KBD<sup>+</sup>07] KIRSCHNER, A. ; BORODIN, D. ; DROSTE, S. ; PHILIPPS, V. ; SAMM, S. ; FEDERICI, G. ; KUKUSHKIN, A. ; LOARTE, A.: Modelling of tritium retention and target lifetime of the ITER divertor using the ERO code. In: *Journal of Nuclear Materials* im Druck (2007)
- [KEHR99] KÜSTNER, M. ; ECKSTEIN, W. ; HECHTL, E. ; ROTH, J.: Angular dependence of the sputtering yield of rough beryllium surfaces. In: *Journal of Nuclear Materials* 265 (1999), S. 22–27
- [Keu02] VON KEUDELL, A.: Formation of polymer-like hydrocarbon films from radical beams of methyl and atomic hydrogen. In: *Thin Solid Films* 402 (2002), S. 1
- [KGG<sup>+</sup>99] KEILHACKER, M. ; GIBSON, A. ; GORMEZANO, C. ; LOMAS, P.J. ; THOMAS, P.R. ; WATKINS, M.L. ; ANDREW, P. ; BALET, B. ; BORBA, D. ; CHALLIS, C.D. ; COFFEY, I. ; COTTRELL, G.A. ; ESCH, H.P.L. D. ; DELIYANAKIS, N. ; FASOLI, A. ; GOWERS, C.W. ; GUO, H.Y. ; HUYSMANS, G.T.A. ; JONES, T.T.C. ; KERNER, W. ; KÖNIG, R.W.T. ; LOUGHLIN, M.J. ; MAAS, A. ; MARCUS, F.B. ; NAVE, M.F.F. ; RIMINI, F.G. ; SADLER, G.J. ; SHARAPOV, S.E. ; SIPS, G. ; SMEULDERS, P. ; SÖLDNER, F.X. ; TARONI, A. ; TUBBING, B.J.D. ; VON HELLERMANN, M.G. ; WARD, D.J. ; JET TEAM: High fusion performance from deuterium-tritium plasmas in JET. In: *Nuclear Fusion* 39 (1999), Nr. 2, S. 209

- [Kir00] KIRSCHNER, A.: *Modellierung der Plasma-Wand-Wechselwirkung und des lokalen Teilchentransportes in der Plasmarandschicht von Tokamaks*, Universität Bochum, Forschungszentrum Jülich, Diss., 2000. – Bericht Jül-3741
- [KM05] KAWAKAMI, R. ; MITANI, T.: Simulation study on influence of chemically eroded higher hydrocarbons on SOL impurity transport and effect of dynamical material mixing on erosion/deposition of tungsten surfaces exposed to boundary plasmas. In: *Journal of Nuclear Materials* 337-339 (2005), S. 45
- [Kna97] KNAUF, H.: *Numerische Modellierung von Rückstreuung und Desorption an Wandoberflächen zur Interpretation von spektroskopischen Messungen in der Plasmarandschicht von Tokamaks*, Heinrich Heine Universität Düsseldorf, Diss., 1997
- [KPPW01] KIRSCHNER, A. ; PHILIPPS, V. ; POSPIESZCZYK, A. ; WIENHOLD, P.: Monte-Carlo simulations of chemical erosion in TEXTOR-94 with the ERO-TEXTOR code. In: *Physica Scripta* T91 (2001), S. 57
- [KPWK00] KIRSCHNER, A. ; PHILIPPS, V. ; WINTER, J. ; KÖGLER, U.: Simulation of the plasma-wall interaction in a tokamak with the Monte Carlo code ERO-TEXTOR. In: *Nuclear Fusion* 40 (2000), S. 989
- [KW81] KALOS, M.H. ; WHITLOCK, P.A.: *Monte Carlo Methods, Volume I: Basics*. New York : Wiley, 1981
- [KW97] KÖGLER, U. ; WINTER, J.: *ERO-Textor - 3D-MonteCarlo Code for Local Impurity-Modeling in the Scrape-Off-Layer of TEXTOR, Version 2.0*. Institut für Plasmaphysik, Forschungszentrum Jülich, 1997. – Bericht Jül-3361
- [KWP<sup>+</sup>04] KIRSCHNER, A. ; WIENHOLD, P. ; PHILIPPS, V. ; COAD, J. P. ; HUBER, A. ; SAMM, U.: Modelling of carbon transport in fusion devices: evidence of enhanced re-erosion of in-situ re-deposited carbon. In: *Journal of Nuclear Materials* 328 (2004), S. 62
- [Law57] LAWSON, J.D.: Some criteria for a power producing thermonuclear reactor. In: *Proceedings of Physical Society* B70 (1957), S. 6
- [LBG<sup>+</sup>86] LENNON, M.A. ; BELL, K.L. ; GILBODY, H.B. ; HUGHES, J.G. ; KINGSTON, A.E. ; MURRAY, M.J. ; SMITH., F.J.: *Atomic and Molecular Data for Fusion, Part II*. Culham Laboratory, Abingdon, 1986. – Rep. CLM-R270
- [Lot67] LOTZ, Wolfgang: An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. In: *Zeitschrift für Physik A: Hadrons and Nuclei* 206 (1967), Nr. 2, S. 205
- [LS61] LINDHARD, J. ; SCHARFF, M.: Energy dissipation by ions in the keV region. In: *Physical Review* 124 (1961), S. 128

- [May04] MAYER, M. et al.: Carbon Erosion and Migration in Fusion Devices. In: *Physica Scripta* T111 (2004), S. 55
- [ME88] MÖLLER, W. ; ECKSTEIN, W.: TRIDYN - Binary collision simulation of atomic collisions and dynamic composition changes in solids. In: *Computer Physics Communications* 51 (1988), S. 355
- [Möl93] MÖLLER, W.: Plasma and surface modeling of the deposition of hydrogenated carbon films from low-pressure methane plasmas. In: *Applied Physics* A56 (1993), S. 527
- [MP02] MÖLLER, W. ; POSSELT, M.: *TRIDYN\_FZR User Manual*. Forschungszentrum Rossendorf, 2002. – wissenschaftlich-technische Berichte FZR-317
- [MZRC<sup>+</sup>07] MARIAN, J. ; ZEPEDA-RUIZ, L.A. ; COUTO, N. ; BRINGA, E.M. ; GILMER, G.H. ; STANGEBY, P.C. ; ROGNLIEN, T.D.: Characterization of sputtering products during graphite exposure to deuterium ions by molecular dynamics. In: *Journal of Applied Physics* 101 (2007), S. 044506
- [NBCDK93] NAUJOKS, D. ; BEHRISCH, R. ; COAD, J.P. ; DE KOCK, L.C.J.M.: Material transport by erosion and redeposition on surface probes in the scrape-off layer of JET. In: *Nuclear Fusion* 33 (1993), Nr. 4, S. 581
- [NBPS94] NAUJOKS, D. ; BEHRISCH, R. ; PHILIPPS, V. ; SCHWEER, B.: Erosion and redeposition on carbon probes in the boundary plasma of TEXTOR. In: *Plasma Phys. Control. Fusion* 36 (1994), S. 2021
- [NCG<sup>+</sup>05] NEUBAUER, O. ; CZYMEK, G. ; GIESEN, B. ; HÜTTEMANN, W. ; SAUER, M. ; SCHALT, W. ; SCHRUFF, J.: Design features of the Tokamak TEXTOR. In: *Fusion Science and Technology* 47 (2005), S. 76
- [NSWL84] NEUHAUSER, J. ; SCHNEIDER, W. ; WUNDERLICH, R. ; LACKNER, K.: Modelling of impurity flow in the tokamak scrape-off layer. In: *Nuclear Fusion* 24 (1984), S. 39
- [OITT07] OHYA, K. ; INAI, K. ; TANABE, T. ; TAKENAGA, H.: Modeling of asymmetric redeposition distribution between inner and outer regions of the w-shaped divertor in JT-60U. In: *Journal of Nuclear Materials* im Druck (2007)
- [OK01] OHYA, Kaoru ; KAWAKAMI, Retsuo: A Modified EDDY Code to Simulate Erosion/Redeposition of Carbon Target in an ITER-FEAT Divertor. In: *Jpn. J. Appl. Phys.* 40 (2001), Nr. 9A, S. 5424
- [OR76] OEN, S. ; ROBINSON, M.T.: Computer studies of the reflection of light ions from solids. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 132 (1976), S. 647
- [Pos04] POSPIESZCZYK, A.: Spectroscopy. In: *Fusion Science and Technology* 45 (2004), Nr. 2T, S. 426

- [PSP<sup>+</sup>02] PHILIPPS, V. ; STAMP, M. ; POSPIESZCZYK, A. ; HUBER, A. ; KIRSCHNER, A. ; VIETZKE, E.: Chemical erosion behaviour of carbon materials in fusion devices. In: *Journal of Nuclear Materials* 313-316 (2002), S. 354
- [Rei06] REITER, D. *Eirene - atomic and molecular database*. [http://www.eirene.de/html/a\\_m\\_data.html](http://www.eirene.de/html/a_m_data.html). 2006
- [RGR96] ROTH, J. ; GARCÍA-ROSALES, C.: Analytic description of the chemical erosion of graphite by hydrogen ions. In: *Nuclear Fusion* 36 (1996), Nr. 12, S. 1647. – Corrigendum: *Nucl. Fusion* 37 (1997) 897
- [RKB<sup>+</sup>05] ROTH, J. ; KIRSCHNER, A. ; BOHMEYER, W. ; BREZINSEK, S. ; CAMBE, A. ; CASAROTTO, E. ; DOERNER, R. ; GAUTHIER, E. ; FEDERICI, G. ; HIGASHIJIMA, S.: Flux dependence of carbon erosion and implication for ITER. In: *Journal of Nuclear Materials* 337-339 (2005), S. 970
- [RKW91] REITER, D. ; KEVER, H. ; WOLF, G.H.: Helium removal from tokamks. In: *Plasma Phys. Control. Fusion* 33 (1991), S. 1579
- [Sam05] SAMM, U.: TEXTOR: a pionieering device for new concepts in plasma-wall interaction, exhaust, and confinement. In: *Fusion Science and Technology* 47 (2005), S. 73
- [SBD05] SCHMID, K. ; BALDWIN, M. ; DOERNER, R.: Influence of beryllium plasma seeding on the erosion of carbon. In: *Journal of Nuclear Materials* 337-339 (2005), S. 862
- [SBH<sup>+</sup>89] SAMM, U. ; BOGEN, P. ; HARTWIG, H. ; HINTZ, E. ; HOTHKER, K. ; LIE, Y. T. ; POSPIESZCZYK, A. ; RUSBULDT, D. ; SCHWEER, B. ; YU, Y. J.: Plasma edge physics in the textor tokamak with poloidal and toroidal limiters. In: *Journal of Nuclear Materials* 162-164 (1989), S. 24
- [SCR<sup>+</sup>94] SIMONINI, R. ; CORRIGAN, G. ; RADFORD, G. ; SPENCE, J. ; TARONI, A.: Models and numerics in the multi-fluid 2-D edge plasma code EDGE2D/U. In: *Contributions to Plasma Physics* 34 (1994), Nr. 2-3, S. 368
- [SD02] STEPANOVA, M. ; DEW, S. K.: Sputtering from ion-beam-roughened Cu surfaces. In: *Physical Review B* 66 (2002), Nr. 12, S. 125407
- [SE95] STANGEBY, P.C. ; ELDER, J.D.: Impurity retention by divertors, Part I: One Dimensional Model. In: *Nuclear Fusion* 35 (1995), S. 1391
- [SR03] SCHMID, K. ; ROTH, J.: Erosion of high-Z metals with typical impurity ions. In: *Journal of Nuclear Materials* 313-316 (2003), S. 302
- [Sta00] STANGEBY, P. ; STOTT, P. (Hrsg.) ; WILHELMSSON, H. (Hrsg.): *The plasma boundary of magnetic fusion devices*. Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, 2000 (Plasma Physics Series)
- [Sum02] SUMMERS, H.P.: *ADAS User Manual*. JET Joint Undertaking, 2002. – Rep. JET-IR(94), <http://adas.phys.strath.ac.uk/>

- [UNE05] UNEP, UNEP/GRID-ARENDA: *Vital Climate Change Graphics Update*. United Nations Environment Programme and GRID-Arendal, 2005
- [VH96] VIETZKE, E. ; HAASZ, A.A.: Chemical Erosion. In: HOFER, W.O. (Hrsg.) ; ROTH, J. (Hrsg.): *Physical Processes of the Interaction of Fusion Plasmas with Solids*. San Diego : Academic Press, Inc., 1996
- [WEH<sup>+</sup>01] WIENHOLD, P. ; ESSER, H. G. ; HILDEBRANDT, D. ; KIRSCHNER, A. ; MAYER, M. ; PHILIPPS, V. ; RUBEL, M.: Investigation of carbon transport in the scrape-off layer of TEXTOR-94. In: *Journal of Nuclear Materials* 290-293 (2001), S. 362
- [Wes04] WESSON, J.: *Tokamaks*. 3. Oxford : Clarendon Press, 2004
- [Wie06] WIENHOLD, P.: *Leitfaden zur colorimetrischen Bestimmung der Dicke transparenter Filme aus Interferenzfarben*. 2006. – Unveröffentlichter Bericht
- [WWW94] WIENHOLD, P. ; WESCHENFELDER, F. ; WINTER, J.: Colorimetry of interference colours to investigate thickness changes of protective coatings in TEXTOR. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 94 (1994), S. 503
- [Yam84] YAMAMURA, Y.: A simple analysis of the angular dependence of light-ion sputtering. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (1984), S. 578

# Danksagung

An erster Stelle danke ich Herrn Prof. Dr. U. Samm, der mir die Möglichkeit zur Bearbeitung dieser interessanten Aufgabenstellung gab und die Arbeit betreute. In zahlreichen Diskussionen zeigte er mir immer wieder den Wald, der mir manchmal vor lauter Bäumen verborgen blieb.

Bei Herrn Prof. Dr. O. Willi möchte ich mich für die Übernahme des Koreferates bedanken.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Dr. A. Kirschner für die umfassende Betreuung der Arbeit. Er war jederzeit dazu bereit, mit mir über meine Vorstellungen zu diskutieren. Ohne sein kritisches Hinterfragen der Simulationsrechnungen wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Herr Dr. D. Borodin hat an vielen dieser Diskussionen teilgenommen und viele fruchtbare Beiträge dazu beigesteuert. Seiner Arbeit ist es maßgeblich zu verdanken, dass die Simulationsergebnisse leichter darzustellen waren.

Herrn Dr. A. Kreter möchte ich für die Bereitstellung vieler experimenteller Daten danken. Er beantwortete geduldig jede meiner Fragen zu den Details der Experimente.

Herr Dr. P. Wienhold bin ich ebenfalls zu Dank verpflichtet, da er mich durch das sorgfältige Lesen des Manuskriptes zu vielen Verbesserungen angeregt hat.

Herrn Dr. A. Litnovsky danke ich insbesondere für die Einweisung in die Oberflächenanalytik und ihre Tücken. Herr Dr. V. Philipps hat wegweisende Anregungen für diese Arbeit beigesteuert. Herr Dr. E. Vietzke konnte mir mit seiner langjährigen Erfahrung auf dem Gebiet der chemischen Erosion voranhelfen.

Herr Dr. O. Schmitz hat die Daten der He-Atomstrahl-Diagnostik bereitgestellt. Herrn Dr. S. Brezinsek danke ich für Daten aus der Spektroskopie.

Von Herrn Dr. G. Sergienko, Herrn Dr. B. Unterberg und Herrn Dr. A. Pospieszczyk stammen weitere Ideen zu dieser Arbeit.

Herr C. Niehoff war über zwei Jahre ein Kollege, mit dem ich gerne das Büro geteilt habe und der mich den ein oder anderen programmiertechnischen Trick gelehrt hat.

Meinem Schwiegervater, Herrn Studiendirektor K. Herbst, danke ich für die aufmerksame Durchsicht des Manuskriptes.

Vom IPP Greifswald danke ich Herrn Dr. R. Schneider für die Bereitstellung des Quellcodes von SDTrimSP und dem werten Herrn Dr. A. Mutzke für die prompte Beantwortung aller Anfragen zu diesem Quellcode. Herrn Dr. W. Eckstein vom IPP Garching danke ich für wertvolle Hinweise zur Interpretation der Ergebnisse von SDTrimSP und für seinen Besuch in Jülich.

Dem Zentralinstitut für Mathematik sei die Bereitstellung seiner zentralen Rechenanlagen gedankt, welche hervorragende Voraussetzungen für die Simulationen geschaffen haben.

Allen „Bewohnern“ des Doktorandenflurs möchte ich für die freundliche Arbeitsatmosphäre danken, die sie geschaffen haben: Herrn F. Irrek, Herrn E. Uzgel, Herrn M. Mitri, Herrn M. Krychowiak, Herrn Dr. U. Kruezi, Herrn Dr. O. Schmitz, Herrn Dr. C. Busch und Herrn J. Coenen.

Schließlich haben mich meine Freunde, meine Familie und besonders meine Eltern unterstützt, wo es ihnen möglich war. Den meisten Dank schulde ich meiner geliebten Frau Julia, die mir mit ihrer Unterstützung, Geduld und mit motivierenden Worten stets zur Seite stand.

**Erklärung:**

Die hier vorgelegte Dissertation habe ich eigenhändig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt. Die Dissertation wurde in der vorgelegten oder in ähnlicher Form noch bei keiner anderen Institution eingereicht. Ich habe bisher keine erfolglosen Promotionsversuche unternommen.

Düsseldorf, den 28.02.2007

— — — — —

(Stefan Droste)