

Bestimmung der Wolframerosion mittels optischer Spektroskopie unter ITER-relevanten Plasmabedingungen

INAUGURAL-DISSERTATION

zur

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

vorgelegt von

Marko Laengner
aus Daun

Düsseldorf, Juni 2016

Aus dem Institut für Energie- und Klimaforschung des Forschungszentrums
Jülich GmbH für die Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

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

Referent: Prof. Dr. Ulrich Samm
Korreferent: Prof. Dr. Georg Pretzler
Tag der mündlichen Prüfung: 21. November 2016

Kurzfassung

Wolfram (W) wird als Wandmaterial in gegenwärtigen Fusionsexperimenten verwendet und ist eine Materialwahl für zukünftige Maschinen wie ITER [4] und DEMO [80]. Jedoch führt erodiertes Wolfram auf dem Weg ins Plasmazentrum aufgrund seiner Energieabstrahlung zu starken Strahlungsverlusten und somit zur kritischen Kühlung des Zentralplasmas [33]. Daher ist eine genaue Untersuchung der Wechselwirkung zwischen Wolfram und Plasma notwendig. Der Verlauf der Emissionsprofile von Linienstrahlung im Plasma wird charakterisiert durch Anregung und Ionisation. Quantitativ lässt sich die Ionisation in Form der Ionisationsratenkoeffizienten beschreiben. Deren Kenntnis ist notwendig zur Interpretation spektroskopischer Daten, insbes. zur Bestimmung der durch Erosion erzeugten Wolfram-Flüsse ins Plasma. Bisher wurden die Ionisationsratenkoeffizienten im Fall des neutralen Wolfram-Atoms außer für den Plasmatemperaturbereich unter 20 eV [88] nicht experimentell bestimmt. Für höhere Temperaturen liegen ausschließlich unsichere theoretische (z.B. [22, 89]) bzw. semi-experimentelle Daten [54] vor. In der vorliegenden Arbeit wurden daher erstmals die Ionisations- und Emissionsprozesse von Wolfram durch Wolfram-Zerstäubung im Plasmatemperaturbereich zwischen (41 ± 8) eV und (81 ± 8) eV am Tokamak TEXTOR untersucht und Ionisationsratenkoeffizienten experimentell bestimmt. Gemessene Emissionsprofile der W I (400.88 nm)-Linie weisen den typischen exponentiellen Abfall auf, der durch die Ionisation der neutralen Wolfram-Atome verursacht wird. Darüber hinaus steigt die Emission jedoch im Bereich von 1 bis 2 mm vor der zerstäubten Oberfläche zunächst auf ein Maximum an. Durch die Einführung einer Relaxationszeit zwischen 0.5 und 1 μ s bis zum Erreichen des Gleichgewichts in der Besetzung des emittierenden Niveaus kann der Anstieg der Emissionsprofile reproduziert werden. Die Simulation der Emissionsprofile mittels einer in dieser Arbeit entwickelten Monte-Carlo-Simulation ergibt Ionisationsratenkoeffizienten, die mit den Werten nach der semi-empirischen LOTZ-Formel [48, 54] übereinstimmen. Die notwendige Erweiterung der Datenbasis bzgl. des neutralen Wolframs begründet auch das Interesse an einer möglichst einfach handhabbaren Wolfram-Quelle zur Kalibration. Diese konnte durch die Injektion von WF_6 an TEXTOR realisiert werden. Das mittels der WF_6 -Injektion ins Plasma eingebrachte Wolfram wurde auf Vergleichbarkeit mit aus einem Zerstäubungsprozess stammenden Wolfram-Atomen geprüft. Dabei wurde die WF_6 -Injektion erstmalig zur Ermittlung von Konversionsfaktoren – den sogenannten Photoeffizienzen – zur Berechnung von Wolfram-Flüssen aus spektroskopisch gemessenen Photonenströmen benutzt. Für die gegebenen Temperatur-Dichte-Kombinationen im Bereich von (20 ± 5) eV bis (82 ± 5) eV bzw. von $(2.2 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bis $(6.8 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ergibt sich für W I (400.88 nm) ein konstanter mittlerer Wert von $\langle E_{\text{Ph}}^{\text{W I}(400.88 \text{ nm})} \rangle = 49 \pm 16$. Zum Test dieser Werte konnten Zerstäubungsausbeuten aus der Menge erodierter Wolfram-Atome ermittelt werden, die gut mit den experimentellen Referenzwerten [19] und Rechnungen aus [34] übereinstimmen. Die dabei herrschenden Plasmabedingungen liegen im Bereich dessen, was auch für den ITER-Divertor während ELMs zu erwarten ist [12, 21, 47, 71]. Die gefundenen experimentellen Resultate sind in sich konsistent und bestätigen damit die Übereinstimmung der WF_6 -Photoeffizienzen mit solchen für zerstäubtes W.

Abstract

Tungsten (W) is used in present fusion experiments and is as well a material choice for future reactors like ITER [4] and DEMO [80]. However, tungsten eroded from the wall leads to high radiation losses in the plasma and the transport to the plasma center to critical plasma cooling [33]. Therefore a detailed investigation of the interaction between eroded tungsten and the plasma is necessary. The emission of tungsten line radiation in the plasma and thus the shape of the emission profiles is characterised by excitation and ionisation. Quantitatively the ionisation can be described in terms of the ionisation rate coefficients. This knowledge is necessary for the interpretation of spectroscopic data and especially to determine tungsten fluxes into the plasma that are caused by tungsten erosion. Up to now, ionisation rate coefficients for neutral tungsten were not determined except for the plasma temperature range below 20 eV [88]. For higher temperatures only uncertain calculated data (e.g. [22, 89]) or semi-empirical data [54] is available. Therefore, within this thesis for the first time ionisation and emission processes of tungsten originating from tungsten erosion were investigated in the temperature range between (41 ± 8) eV and (81 ± 8) eV at the tokamak TEXTOR and ionisation rate coefficients were determined experimentally. Measured emission profiles of the W I (400.88 nm)-line show a typical exponential decrease that is caused by the ionisation of the neutral tungsten atoms. But moreover, at a distance of 1 to 2 mm away from the sputtered surface the emission initially increases to a maximum. By introducing a relaxation time between 0.5 and 1 μ s before reaching the equilibrium of the population of the emitting energy level of this line the increase of the emission profiles can be reproduced. Simulating the emissions profiles through a Monte-Carlo-simulation that was developed in the scope of this thesis results in ionisation rate coefficients that are identical with values calculated through using the semi-empirical LOTZ-formula [48, 54]. The necessary extension of the atomic data base regarding neutral tungsten leads to the interest in a tungsten source that can easily be used for calibration purposes. This was realised at TEXTOR through the injection of WF₆. The tungsten that was brought into the plasma via WF₆-injection was investigated regarding the comparability to tungsten originating from a sputtering process. Moreover was WF₆ used for the first time to determine conversion factors—the so-called photon efficiencies—to calculate tungsten fluxes from spectroscopically measured photon fluxes. For the given combinations of temperature and density from (20 ± 5) eV to (82 ± 5) eV and from $(2.2 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ to $(6.8 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, respectively, for the W I (400.88 nm)-line a constant average value of $\langle E_{\text{Ph}}^{\text{W I}(400.88 \text{ nm})} \rangle = 49 \pm 16$ is found. To test these values sputtering yields were determined from the amount of eroded tungsten atoms. These sputtering yields are in line with experimental reference values [19] and calculations from [34]. The prevailing investigated plasma conditions are in the range of what can be expected considering the ITER divertor during ELMs [12, 21, 47, 71]. The found experimental results are consistent and confirm the match between WF₆-photon efficiencies and photon efficiencies of sputtered tungsten.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abstract	iii
Inhaltsverzeichnis	vi
1 Einleitung	1
2 Monte-Carlo-Code zur Simulation von W-Erosion	4
3 Physikalische Erosion von Wolfram	8
3.1 Zerstäubungsprozess	8
3.2 Einfluss der Plasmarandschicht	9
3.3 Plasmafluss	10
3.4 Zerstäubungsausbeute	15
3.5 Redeposition	15
3.6 Sigmund-Thompson-Geschwindigkeitsverteilung	17
3.7 „Kosinus“-Verteilung	19
4 Spektroskopie zur Bestimmung der W-Erosion	21
4.1 Emission und Ionisation	21
4.2 Linienverhältnisse	23
4.3 Teilchenflüsse	24
4.4 Photoeffizienz und S/XB -Wert	25
4.5 Eindringtiefen	27
5 Datenlage der Ionisations- und Anregungskoeffizienten	28
5.1 Ionisationsratenkoeffizienten	28
5.2 Anregungskoeffizienten	31
5.3 Photoemissionsratenkoeffizienten	33
6 Experimenteller Aufbau	35
6.1 Das Fusionsexperiment TEXTOR	35
6.1.1 Aufbau	35
6.2 Messung der Plasmaparameter am Plasmarand	37
6.3 Spektroskopischer Aufbau	38
6.4 Absolutkalibration der spektroskopischen Systeme	39
6.5 W-Zerstäubung	43
6.6 WF_6 -Injektion	46

7	Experimentelle Untersuchung der Anregung und Ionisation von W^0	48
7.1	Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungs- experiment	48
7.1.1	Emissionsprofile für W I (400.88 nm)	57
7.1.2	Untersuchung der Anregung von W^0 mit einem Stoß-Strahlungs- Modell	58
7.1.3	Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten für W^0 mit PSICO .	64
7.1.4	Experimentelle Näherung: Bestimmung von S aus der Abfalllänge λ_{eff}	87
7.2	Zerstäubung einer abgelagerten W-Schicht bei einfacher Geometrie	88
7.3	Vergleich der ermittelten Ionisationsratenkoeffizienten	97
7.4	Zusammenfassung der Resultate dieses Kapitels	97
8	WF_6-Injektion als kontrollierbare W-Quelle	99
8.1	Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einer WF_6 -Quelle .	100
8.1.1	Erweiterung des analytischen Modells um die WF_6 -Dissoziation . .	109
8.1.2	Erweiterung von PSICO um die WF_6 -Dissoziation	118
8.1.3	Profilvergleich für zerstäubtes und injiziertes W	127
8.1.4	Zusammenfassung der Resultate dieses Kapitels	129
9	Vergleich der experimentellen Linienverhältnisse	131
10	Anwendung der WF_6-Injektion: Bestimmung von Photoeffizienzen	142
10.1	Photoeffizienzen für W I- und W II-Linien	146
10.2	Vergleich mit unabhängigen Experimenten	155
10.3	Vergleich mit PSICO	156
10.4	Einfluss der WF_6 -Injektion auf die lokalen Plasmaparamter	170
11	W-Flussbestimmung in Zerstäubungsexperimenten durch Anwendung der Pho- toeffizienzen	173
12	Zusammenfassung der Resultate	181
	Literatur	IX
	Danksagung	X
	Erklärung	XII

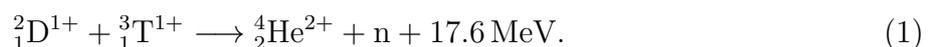
1 Einleitung

Zu Beginn des 21. Jahrhunderts steht die Menschheit vor der Aufgabe, neue Konzepte zur Energieerzeugung zu finden und umzusetzen. Die diesbezüglich getroffenen und zukünftig zu treffenden politischen Entscheidungen machen sich nicht nur bereits heute im Ausbau und der zu leistenden Finanzierung erneuerbarer Energien, der Stilllegung von Kernkraftwerken und dem Aufbau großangelegter Stromtrassen bemerkbar, sondern bilden die Grundlage der Energieversorgung auch zukünftiger Generationen, mit weitreichenden Konsequenzen. Abzusehen ist, dass der unweigerlich steigende Energiebedarf der Menschheit nur dann bedient werden kann, wenn neue Technologien zur Energiegewinnung Hand in Hand gehen mit neuen Technologien zur Energieeinsparung. Weltweit gesehen bleiben die Anstrengungen führender Nationen allerdings in ihrer Bedeutung gering, da der Fokus wirtschaftlich aufstrebender Nationen nicht auf der Einsparung von Energie und Effizienzsteigerung, sondern zunächst an erster Stelle auf dem wirtschaftlichen Wachstum liegt, was immer auch an die Verbrennung fossiler Energieträger gekoppelt ist. Vor dem Hintergrund des menschengemachten Treibhauseffektes muss dieser Entwicklung durch neue Technologien entgegengewirkt werden. Daraus ergeben sich auch die Forderungen an neue Formen der Energiegewinnung: Bezahlbarkeit, uneingeschränkte Verfügbarkeit der Rohstoffe, Grundlastfähigkeit, Umweltverträglichkeit. [28, 49]

Große Fortschritte haben die Technologien zur Stromerzeugung durch Photovoltaik, sowie Wind- und Wasserkraft gemacht und etablieren sich als Konzepte zur dezentralen Energieversorgung. Die Probleme betreffend der Grundlastfähigkeit, der Netzstabilität durch Fluktuationen von Sonnenschein und Wind und der unzureichenden Energiespeicher bestehen jedoch nach wie vor. [2] Die Energieerzeugung durch Kernspaltung ist nicht mehr gesellschaftlich akzeptiert und das weitere Aufbrauchen fossiler Ressourcen weder wirtschaftlich noch vor dem Hintergrund des Einflusses auf das Weltklima vertretbar [49].

Die Kernfusion nach dem Konzept des magnetischen Einschlusses kann mit all ihren positiven Aspekten – Wasser und Gestein als einfach verfügbare Rohstoffe, hohe Effizienz, inhärent sicher, wenig radioaktiver Abfall, kein CO₂-Ausstoß – Teil eines zukünftigen Energiemixes sein. [69] Die Verschmelzung leichter Atomkerne mit Massenzahl kleiner als 56 setzt aufgrund des Masseneffekts die Bindungsenergie der Nukleonen in Form der Bewegungsenergie der Reaktionsprodukte frei, die dann konventionell in Elektrizität umgewandelt werden kann.

Die unter irdischen Bedingungen günstigste Reaktion mit dem höchsten Wirkungsquerschnitt bei heute ohne Weiteres erreichbaren Temperaturen von 4×10^7 K ist die Fusion von Deuterium- und Tritiumkernen zu einem α -Teilchen (He^{2+}) und einem schnellen Neutron als Reaktionsprodukt:



Die Nutzbarkeit der Kernfusion zur Energiegewinnung nach dem Prinzip des magnetischen Einschlusses eines Plasmas in einer torusförmigen Konfiguration (Tokamak-Prinzip) konnte beim Europäischen Fusionsexperiment JET (**J**oint **E**uropean **T**orus) bereits 1997

demonstriert werden. [85] Im nächsten Schritt soll der Testreaktor ITER (**I**nternational **T**o-**k**amak **E**xperimental **R**eaktor, Akronym für lat. der Weg) [4] zeigen, dass dieses Prinzip auch im großen Maßstab mit positiver Energiebilanz bei einem Verhältnis von erzeugter Energie zu aufgewandter Energie von 10 und einer Nettoleistung von 500 MW funktioniert.

Ein essenzieller Aspekt bei der Umsetzung eines Fusionsreaktors spielt dabei das Material der das Plasma umgebenden ersten Wand. Diese muss hohen Wärme- und Teilchenflüssen standhalten. [60] Als Material stand zunächst Kohlenstoff (C) im Fokus, da es sich hierbei um ein sogenanntes Niedrig- Z -Material handelt (mit der Kernladungszahl Z) und dieser sich darüber hinaus bei hohen Temperaturen nicht verflüssigt, sondern sublimiert. Niedrig- Z -Materialien sind insofern von Bedeutung, als dass diese aufgrund der kleineren Anzahl an Elektronen schnell komplett ionisiert im Plasma vorliegen und somit insbesondere das Zentralplasma nicht mitunter starken Energieverlusten durch weitere Ionisationsvorgänge und die Lichtemission angeregter Atome ausgesetzt ist. Ein entscheidender Nachteil liegt jedoch in der starken Erodierbarkeit des C infolge von chemischer und physikalischer Erosion durch selbst leichte Elemente wie D und T. Darüber hinaus stellt die Einlagerung von radioaktivem T, das dann nicht mehr für die Fusionsreaktion zur Verfügung steht, ein großes Problem dar. [61]

Aus diesen Gründen ist Wolfram (W) wieder ins Blickfeld der Forschung gerückt, obwohl es bei $Z = 74$ den großen Nachteil eines Hoch- Z -Materials mit sich bringt. [54,63] Vorteile sind die hohe Schmelztemperatur bei 3422°C , die im Vergleich zu C geringere Zerstäubung durch die Fusionsrohstoffe wie auch durch Plasmaverunreinigungen [54] und die geringe T-Aufnahme [31].

Diese Vorteile werden durch den Nachteil einer aufgrund des Abstrahlungspotentials nur sehr geringen Tolerierbarkeit von W im Plasmazentrum erkauft, deren Grenze bei nur etwa 10^{-5} W-Atomen pro Wasserstoff-Atom liegt [33] und Tropfenbildung im Falle des Schmelzens [60].

Damit ist die Notwendigkeit gegeben, die Prozesse der W-Zerstäubung am Plasmarand genau zu untersuchen und vor allem zu quantifizieren, um so z.B. über in ITER zu erwartende W-Flüsse Aussagen machen zu können. Die Wechselwirkung mit dem Plasma ist in Form der Eindringtiefe bis zur nächsten Ionisationsstufe zu beschreiben, sowie durch die Anregung der Atome zur Abstrahlung von Photonen und damit der Emission von Energie auf diesem Weg. Da Fusionsplasmen optisch dünn sind und somit die emittierten Photonen nicht mehr vom Plasma absorbiert werden, führt dies zur Kühlung des Plasmas, die nur durch zusätzliches Heizen kompensiert werden kann. Die Charakterisierung der Wechselwirkung des Plasmas mit W erfolgt über die Größen des Anregungs- bzw. Photoemissionsratenkoeffizienten [3, 83] und des Ionisationsratenkoeffizienten [68]. Darüber hinaus ist die Quantifizierung der W-Erosion mit Hilfe von Photoeffizienzen* das Ziel. Mittels dieser Konversionsfaktoren ist die Umrechnung der während des Eindringens ins Plasma emittierten Photonen in die zugehörige Anzahl erodierter W-Atome möglich [68].

Bisher ist die Datenbasis hinsichtlich der atomaren Daten für W jedoch sehr lücken-

*Je nach Definition wird anstelle von Photoeffizienzen auch von *inversen* Photoeffizienzen gesprochen.

haft, was hinsichtlich der Kompliziertheit der atomphysikalischen Prozesse innerhalb des W-Atoms durch hunderte von Energieniveaus umso stärker zum Tragen kommt. [6, 89] Sowohl für die Ionisationsratenkoeffizienten als auch die Photoemissionsratenkoeffizienten des neutralen W-Atoms, also gerade die Größen, von denen das Verhalten beim Eintritt ins Plasma bestimmt wird, existieren bisher außer im Temperaturbereich unterhalb von 20 eV[†] [88] ausschließlich gerechnete Daten, während der Temperaturbereich darüber hinaus ebenso von praktischem Interesse für die Modellierung des W-Transports im Plasma ist. [6, 37, 54, 89]

In dieser Arbeit werden Anregungs- und Ionisationsvorgang des neutralen Wolframs anhand von Emissionsprofilen der W I (400.88 nm)-Linie unter unterschiedlichen Plasmabedingungen untersucht. Dazu wurde eine W-Probe im Randschichtplasma des Fusions-experiments TEXTOR (Forschungszentrum Jülich) exponiert und der Erosion ausgesetzt. Über die experimentelle Untersuchung der Anregung hinaus werden erstmalig Ionisationsratenkoeffizienten des neutralen W-Atoms experimentell und semi-experimentell für den Bereich über 20 eV durch eine in dieser Arbeit entwickelte Monte-Carlo-Simulation bestimmt und mit den bisher verfügbaren Datensätzen verglichen.

Des Weiteren wird die Eignung des erstmalig in dieser Funktion in TEXTOR eingesetzten Gases WF₆ zur Benutzung als künstliche W-Quelle untersucht, auch im Hinblick auf die experimentelle Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten.

Eine Anwendung der WF₆-Injektion stellt die experimentelle Bestimmung der im Allgemeinen temperatur- und dichteabhängigen Photoeffizienzen an TEXTOR im Bereich zwischen 20 eV und 85 eV dar. Diese werden abschließend nach der Diskussion der Übertragbarkeit auf Zerstäubungsexperimente auch auf die in TEXTOR durchgeführten W-Erosionsexperimente zur Quantifizierung der W-Erosion angewandt. Die dabei vorliegenden Dichte- und Temperaturwerte liegen im Bereich dessen, was auch für den ITER-Divertor während sogenannter ELMs (**E**dge-**L**ocalized **M**odes) [12, 21, 47, 71] erwartet werden kann.

In Kapitel 2 wird zunächst die Monte-Carlo-Simulation PSICO beschrieben, die auch die folgenden Kapitel 3 und 4 über die Grundlagen der W-Erosion und der Spektroskopie zur Bestimmung der W-Erosion illustriert. Eine Übersicht der in dieser Arbeit verwendeten und diskutierten Datensätze bzgl. der Ionisations-, Anregungs- sowie Photoemissionsratenkoeffizienten ist in Kap. 5 gegeben. Es folgt die Beschreibung des Fusions-experiments TEXTOR, an dem die Experimente durchgeführt wurden, sowie des W-Zerstäubungs- und des WF₆-Injektionsexperiments. Kapitel 7 bzw. 8 stellt die Auswertung und die Ergebnisse des W-Zerstäubungs- bzw. des WF₆-Injektionsexperiments dar. Nach einem Vergleich beider Experimente anhand von Linienverhältnissen in Kap. 9 folgt die Anwendung und Diskussion der WF₆-Injektion zur experimentellen Bestimmung von Photoeffizienzen in Kap. 10. Im vorletzten Kapitel 11 wird das W-Zerstäubungsexperiment abschließend durch Anwendung der Photoeffizienzen ausgewertet. Die Arbeit schließt mit der Zusammenfassung aller gefundenen Ergebnisse in Kap. 12.

[†]In der Plasmaphysik werden die Ionen- und Elektronentemperaturen üblicherweise in der einer Temperatur T [K] gemäß $E = k_B T$ äquivalenten Energie in der Einheit eV angegeben (mit der BOLTZMANN-Konstanten $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K = 8.63×10^{-5} eV/K). Damit gilt: $1 \text{ eV} \approx 11600 \text{ K}$.

2 Monte-Carlo-Code zur Simulation von W-Erosion

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine 3D-Monte-Carlo-Simulation entwickelt, um die physikalischen Prozesse der ab Kap. 6 beschriebenen W-Zerstäubungs- und WF_6 -Injektionsexperimente begleitend zu untersuchen. Diese wird im Folgenden als PSICO (**P**lasma **S**urface **I**nteraction **C**ode) bezeichnet. Physikalische Prozesse, deren exakte analytische Beschreibung gar nicht oder nur mit großem Aufwand gefunden werden kann, können mit Hilfe von Monte Carlo-Simulationen modelliert werden (z.B. [27]). Dabei werden die physikalisch relevanten Vorgänge am Rechner nachgebildet. Die experimentellen Beobachtungen, die in dieser Arbeit beschrieben werden – insbesondere die in den Experimenten gemessenen Emissionsprofile für neutrales Wolfram – können mit den simulierten verglichen werden, womit Rückschlüsse auf die zugrundeliegende Physik möglich sind. Der Test, inwieweit sich die in verschiedenen Datenbasen zur Verfügung stehenden, bisher nur gerechneten Ionisationsratenkoeffizienten S [54, 89] und Photonenemissionsratenkoeffizienten \mathcal{PEC} [37] zur Reproduktion experimenteller Emissionsprofile eignen, ist hierbei von besonderem Interesse.

Bevor im nächsten Kapitel die in PSICO berücksichtigte und für die Experimente relevante Physik beschrieben wird, soll in diesem Kapitel zunächst die Struktur von PSICO erläutert werden. Die Beschreibung der Umsetzung erfolgt konkret in den nächsten beiden Kapiteln. PSICO stellt eine prozedurale Routine dar, die in der proprietären Sprache der Datenanalyse-Software MATLAB [52] umgesetzt wurde. In Abb. 1 ist die Struktur der Routine schematisch dargestellt. Die Eingabedaten stellen die Experimentgeometrie und die am Fusionsexperiment TEXTOR gemessenen Dichte- und Temperaturprofile dar sowie gerechnete Datensätze für Ionisationsratenkoeffizienten, Photonenemissionsratenkoeffizienten und Zerstäubungsausbeuten (Anzahl erodierter W-Atom pro einfallendem Plasmateilchen) für die W-Erosion durch Kohlenstoff.

Nach Vorgabe der Anzahl N nacheinander zu simulierender Monte-Carlo-Teilchen (MC-Teilchen) N_{MC} , deren Zähler i nach der Ionisation des aktuellen Teilchens um eins erhöht wird, richtet sich der Ablauf zunächst nach der Wahl des zu simulierenden Experiments: W-Zerstäubung oder WF_6 -Injektion.

Im Falle der Zerstäubung wird das 3D-Modell einer W-Probe generiert. Der Ortsvektor $r_0(x, y, z)$ der Startposition jedes W-MC-Teilchens wird durch die Probengeometrie und die Gewichtung von Plasmafluss (abhängig von der Plasmaelektronendichte n_e und der Plasmaelektronentemperatur T_e) und T_e -abhängiger Zerstäubungsausbeute bestimmt. Die Richtung des Teilchens ergibt sich aus der sogenannten „Kosinus“-Verteilung, die Geschwindigkeit v_W aus der THOMPSON-Geschwindigkeitsverteilung [79], die von T_e und der W-Bindungsenergie E_B abhängt.

Auf seinem Weg bis zur Ionisation emittiert das Teilchen in Abhängigkeit des Photonenemissionsratenkoeffizienten $\mathcal{PEC}(n_e, T_e)$ und der effektiven Anregungszeit des emittierenden Energieniveaus τ_{Fit} Photonen bei einer bestimmten Energie, also einer bestimmten Spektrallinie. Der Photonen-Zähler $N_{Ph}(x, y, z)$ wird nach jedem Zeitintervall $\Delta t = \text{const.}$ (vorher festgelegt) um $n_e \cdot \mathcal{PEC} \cdot \Delta t$ erhöht und registriert die Anzahl der pro Volumenintervall emittierten Photonen.

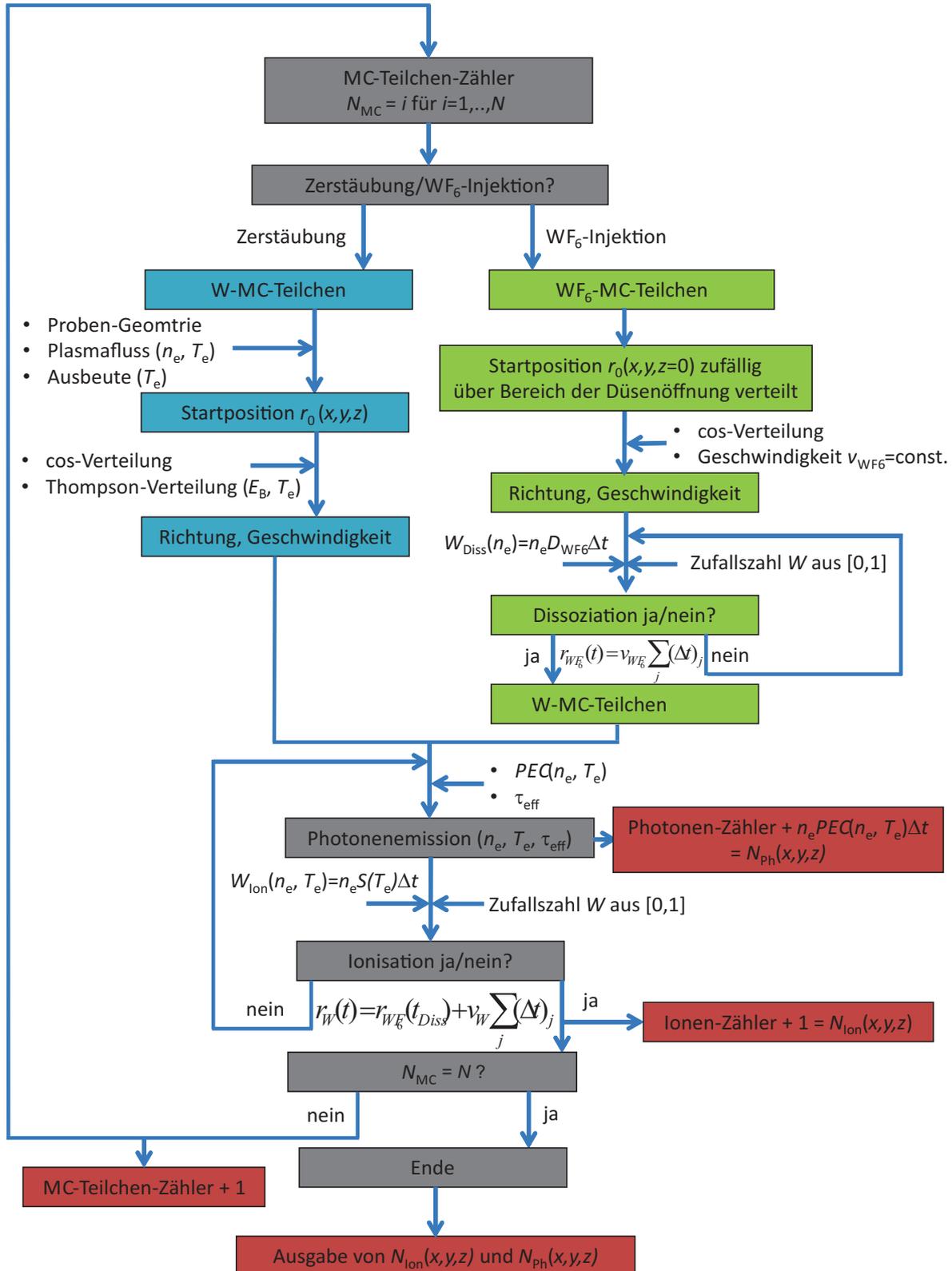


Abbildung 1: Darstellung der Abläufe innerhalb der Monte-Carlo-Simulation PSICO.

Nach diesem Zeitintervall wird auch auf Ionisation des Teilchens durch Vergleich der Ionisationswahrscheinlichkeit $W_{\text{Ion}} = n_e \cdot S(T_e) \cdot \Delta t$ mit einer von MATLAB im Intervall $[0,1]$ generierten Zufallszahl W verglichen. Falls $W_{\text{Ion}} \geq W$, erfolgt die Ionisation, der Ionen-Zähler N_{Ion} wird um eins erhöht. Für $N_{\text{MC}} = N$ wird die letzte Schleife durchlaufen und die Simulation endet. Die Ergebnisse $N_{\text{Ph}}(x, y, z)$ und $N_{\text{Ion}}(x, y, z)$ werden in Form von Profilen und simulierten Kamerabildern ausgegeben. Andernfalls wird der Zähler i der generierten MC-Teilchen um eins erhöht und die Simulation startet von vorne.

Für beide Fälle ergibt sich der Gesamtweg gemäß $r_{\text{W}}(t) = r_{\text{WF}_6}(t_{\text{Diss}}) + v_{\text{W}} \sum_j (\Delta t)_j$. Hierbei ist $r_{\text{WF}_6}(t_{\text{Diss}})$ der Ort, an dem für die Simulation der WF_6 -Injektion nach einer Zeit t_{Diss} die Dissoziation des WF_6 stattfindet und somit ab dort ein atomares W-Teilchen verfolgt wird. Für den Zerstäubungsfall ist $r_{\text{WF}_6}(t_{\text{Diss}}) = 0$.

Zur Simulation der WF_6 -Injektion muss vor dem Test auf Ionisation eines W-Atoms zunächst die Dissoziation des WF_6 -Moleküls überprüft werden, damit ein W-Atom entstehen kann. Die Startposition des WF_6 -Moleküls wird zufällig über die Fläche der simulierten Austrittsöffnung der Injektionsdüse verteilt. Die Richtung wird über die „Kosinus“-Verteilung bestimmt, die Geschwindigkeit v_{WF_6} kann vorgegeben werden. Nach jedem Zeitintervall Δt wird analog zur Ionisation auf Dissoziation getestet. Dazu wird die Dissoziationswahrscheinlichkeit $W_{\text{Diss}} = n_e \cdot D_{\text{WF}_6} \cdot \Delta t$ wieder mit einer Zufallszahl $W \in [0, 1]$ verglichen, wobei D_{WF_6} einen effektiven (von n_e und T_e unabhängigen) WF_6 -Dissoziationsratenkoeffizienten darstellt. Findet die Dissoziation nach einer Gesamtzeit t_{Diss} statt, wird das MC-Teilchen nun als W-Atom wie oben beschrieben weiterverfolgt. Andernfalls setzt das WF_6 -Teilchen seinen Weg $r_{\text{WF}_6}(t) = v_{\text{WF}_6} \sum_j (\Delta t)_j$ fort und nach Δt wird wieder auf Dissoziation getestet.

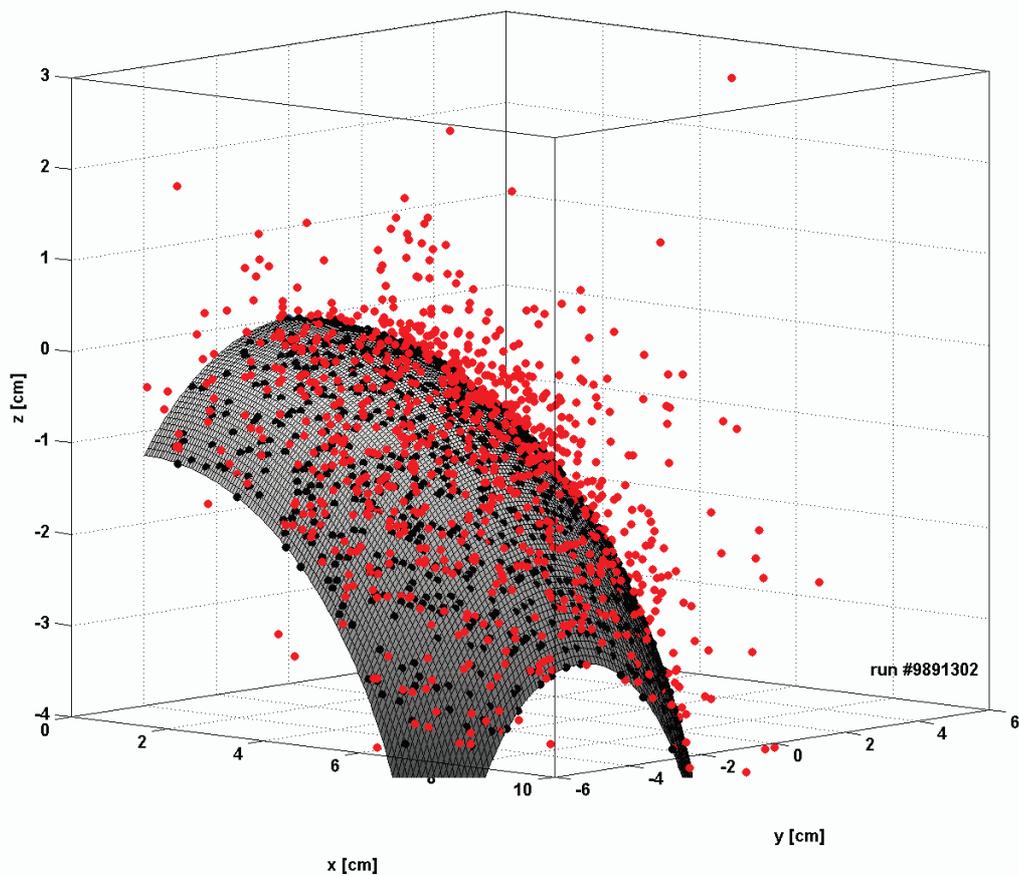


Abbildung 2: 3D-Simulation der Erosion eines in den Plasmarand eingebrachten Kugellements bestehend aus W, die den in Kap. 7.1 beschriebenen Zerstäubungsexperimenten entspricht. Schwarze Punkte stellen den Startpunkt der erodierten Teilchen auf dem Limiter dar, rote Punkte den Ort der Ionisation im Plasma.

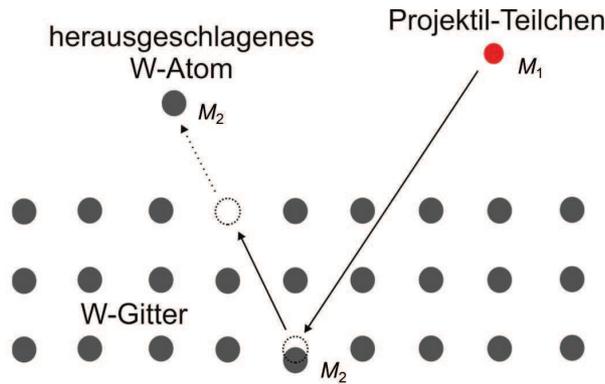


Abbildung 3: Schematische Darstellung der W-Zerstäubung im einfachsten Fall.

3 Physikalische Erosion von Wolfram

3.1 Zerstäubungsprozess

Ein W-Atom kann im einfachsten Fall aus dem W-Gitter herausgeschlagen werden, indem es durch ein Projektilteilchen, das zuvor an einem zweiten, tieferliegenden W-Atom reflektiert wurde, von hinten aus dem Substrat gestoßen wird (Abb. 3). Dies ist derjenige Prozess, bei dem die meiste kinetische Energie auf das zerstäubte Teilchen übertragen werden kann. Stoßprozesse mit geringerem Energieübertrag sollen hier nicht betrachtet werden. Das maximal mögliche Verhältnis des Energieübertrags beim elastischen Stoß zweier Teilchen mit unterschiedlichen Massen M_1 und M_2 kann aus der Energie- und Impulserhaltung hergeleitet werden:

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}. \quad (2)$$

Somit besitzt das mit der kinetischen Energie E_0 und der Masse M_1 einschlagende Projektilteilchen nach dem ersten Stoß innerhalb des Substrats noch eine Energie $E'_0 = E_0 - \gamma E_0$. Durch einen weiteren Stoß nun wieder Richtung Substratoberfläche wird ein W-Atom herausgelöst, dessen kinetische Energie sich aus dem Energieübertrag abzüglich der Gitter-Bindungsenergie E_B ergibt:

$$E_{ej} = \gamma E_0(1 - \gamma) - E_B \quad (3)$$

(ej für engl. ejected: herausgelöst). Die Schwellen-Energie E_{th} (th für engl. threshold: Schwelle), die ein einschlagendes Teilchen für diesen Fall mindestens besitzen muß um ein W-Atom gerade herauszulösen ($E_{ej} = 0 \text{ eV}$), ergibt sich also aus dem zweimaligen Energieübertrag und der Bindungsenergie, die für Wolfram 8.8 eV beträgt[‡], zu [79]:

$$E_{th} = \frac{E_B}{\gamma(1 - \gamma)}. \quad (4)$$

[‡]Bindungsenergien für Metalle liegen typischer Weise im Bereich von $E_B = 2 - 9 \text{ eV}$

Damit ist die zur Zerstäubung *minimal notwendige* Projektilenergie bestimmt. Diese Gleichung verliert allerdings, je weiter man sich dem Extremfall $M_1 = M_2$ (Selbstzerstäubung) nähert, ihre Gültigkeit, da bei diesem einfachen Zwei-Stoß-Modell für gleiche Massen bereits beim ersten elastischen zentralen Stoß innerhalb des Substrats alle Energie und aller Impuls übertragen werden. Somit wird das Projektilteilchen nicht Richtung Oberfläche zurückreflektiert. Bereits für $M_1/M_2 > 0.2$ wird die Näherung durch Gl. 4 schlechter. Für diese Fälle liefert ein Fit an experimentell gewonnene Daten

$$E_{\text{th}} = 8E_B \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^{2/5}. \quad (5)$$

Für die im Folgenden betrachteten Fälle der W-Zerstäubung durch Kohlenstoff (C) in TEXTOR stellt Gl. 4 eine ausreichend gute Näherung dar [1]: $E_{\text{th,C}} = 49 \text{ eV}$.

3.2 Einfluss der Plasmarandschicht

Die *maximal mögliche* Projektilenergie – und damit auch die maximal mögliche kinetische Energie des zerstäubten W-Atoms (Cut-Off-Energie, Kap. 3.6) – hängt vom Ladungszustand Z des einfallenden Teilchens sowie Elektronen- und Iontemperatur des Plasmas ab. Es muss berücksichtigt werden, dass einfallende Ionen durch eine negative Potentialdifferenz Φ zwischen Plasma und Wand innerhalb der Plasmarandschicht (engl. sheath) auf die Wand beschleunigt werden. Diese Potenzialdifferenz kommt dadurch zustande, dass sich die Elektronen aufgrund ihrer geringeren Masse und damit verbundenen größeren Beweglichkeit schneller auf die (typischer Weise gegenüber dem Plasma geerdete) Wand bewegen als die Ionen. Somit bildet sich auf der Wand eine negative Ladung aus, durch die die Ionen, die sich innerhalb der Plasmarandschicht befinden, beschleunigt werden. Die Energie, die ein einfach geladenes Ion durch diese Beschleunigung gewinnt, ergibt sich aus:

$$E_{i,\text{sheath}} = -e\Phi = \frac{T_e}{2} \ln \left[\left(2\pi \frac{m_e}{m_i} \right) \left(1 + \frac{T_i}{T_e} \right) \right] \quad (6)$$

wobei m_e bzw. m_i Elektronen- bzw. Ionenmasse darstellen und T_e bzw. T_i Elektronen- bzw. Iontemperatur *außerhalb* der Randschicht [79]. Die gesamte kinetische Energie, die ein Z -fach geladenes Ion nach Durchlaufen der Randschicht besitzt, ergibt sich dann als [1, 79]

$$E_0 = \underbrace{2T_i}_{E_{i,\text{Plasma}}} + \underbrace{3ZT_e}_{E_{i,\text{sheath}}} = 2f_T T_e + 3ZT_e. \quad (7)$$

Der erste Term stellt den Anteil der kinetischen Energie dar, den ein in die Randschicht einlaufendes Ion aufgrund der Maxwell-Energieverteilung außerhalb der Randschicht besitzt. Über einen Faktor $f_T = \frac{T_i}{T_e}$ kann eine Beziehung zwischen Elektronen- und Iontemperatur hergestellt werden. Im Falle des thermodynamischen Gleichgewichts zwischen Elektronen und Ionen gilt also $f_T = 1$. Der Energiegewinn durch die Beschleunigung innerhalb der Randschicht wird durch den zweiten Term beschrieben. Der Faktor $3 \approx \frac{-e\Phi}{T_e}$

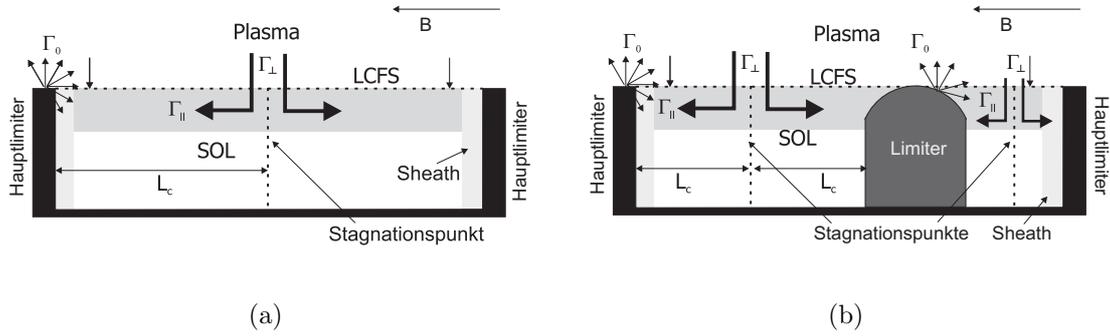


Abbildung 4: (a) Die Lage der LCFS wird durch die Höhe des Hauptlimiters links und rechts bestimmt. Die Pfeile innerhalb der SOL stellen den Plasmafluss dar. Jenseits der LCFS (relativ zum Plasmazentrum) teilt sich der zum B -Feld senkrechte Fluss Γ_{\perp} in den von r und s abhängigen parallelen Fluss Γ_{\parallel} auf. s bezeichnet den Abstand zum Stagnationspunkt, der im Zentrum zwischen beiden Hauptlimiterseiten liegt. Deren Abstand beträgt eine Verbindungslänge L_c , woraus sich $s(L_c/2) = 0$ ergibt. (b) Testlimiter in der SOL. (Abbildungen abgeändert aus [10])

($Z = 1$) spiegelt dabei ein typisches Verhältnis zwischen Elektronentemperatur vor der Randschicht und dem Energiegewinn innerhalb der Schicht wieder.

Die Schichtdicke x_{sheath} liegt typischer Weise in der Größenordnung der Debye-Länge

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 T_e}{e^2 n_e}} \quad (8)$$

mit der Dielektrizitätszahl ϵ_0 und der Elementarladung e . Innerhalb einer Debye-Länge fällt der Betrag des Schichtpotentials $|V(x)|$ auf $|V(x)|/\exp(-1)$ ab. Sie ist damit ein Maß für den Abstand, innerhalb dessen die Neutralität des Plasmas verletzt ist. Für ein TEXTOR-Plasma mit $n_e = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ und $T_e = 55 \text{ eV}$ in Wandnähe ergibt sich damit $x_{\text{sheath,TEXTOR}} = 4.7 \times 10^{-5} \text{ m} = 0.047 \text{ mm}$.

3.3 Plasmafluss

Der Fluss erodierter Teilchen von einer Oberfläche weg

$$\Gamma_{\text{ero}} = \Gamma_i Y \quad (9)$$

hängt vom Fluss einfallender Teilchen (Ionen) Γ_i und deren Zerstäubungsausbeute Y (Kap. 3.4) ab. Abb. 4(a) zeigt schematisch die Situation im Tokamak TEXTOR. Hier wird ein sogenannter Limiter (engl. Begrenzer), bestehend beispielsweise aus C und/oder W, als plasmabegrenzendes Element in die Abschältschicht, die sogenannte SOL (engl. Scrape-Off-Layer), eingebracht und dort dem Plasmafluss ausgesetzt. Im betrachteten

Fall grenzt der kugelsymmetrische Limiter (Radius $r_{\text{Limiter}} = 0.07 \text{ m}$) nicht an das Hauptplasma, sondern liegt mit dem höchsten Punkt (Apex) hinter der letzten geschlossenen Flussfläche LCFS (engl. **L**ast **C**losed **F**lux **S**urface). Deren Lage relativ zum Plasmazentrum wird durch den Rand (in radialer Richtung) des Hauptlimiters links und recht im Bild bestimmt. Hierbei ist ein und derselbe Limiter senkrecht geteilt dargestellt, wodurch eine kreisförmige Symmetrie aufgeklappt werden kann. Die LCFS definiert sich als jene Flussfläche, jenseits derer (vom Plasmazentrum aus) die Magnetfeldlinien nicht mehr geschlossen, sondern von begrenzendem Element zu begrenzendem Element verlaufen, im Bild also über die Verbindungslinie von einem zum anderen Rand des Hauptlimiters.

Im Allgemeinen kann der Teilchenfluss im Plasma nach

$$\Gamma = nv \tag{10}$$

aus der Teilchendichte n und der (mittleren) Teilchengeschwindigkeit v berechnet werden. Vor der LCFS findet man einen zum Magnetfeld B senkrechten Fluss $\Gamma_{\perp}(r)$, der hinter der LCFS zum einen radial mit Dichte und Temperatur abfällt. Zum anderen teilt er sich in den zum B -Feld parallelen Fluss Γ_{\parallel} in Richtung der begrenzenden Elemente auf (Abb. 4(b)). Dieser kann für eine festgehaltene radiale Position bei Kenntnis von $\Gamma_{\perp}(r = \text{const.})$ berechnet werden [34, 79]:

$$\Gamma_{\parallel}(s) = \Gamma_{\perp}(r = \text{const.}) \frac{s}{L_c/2}. \tag{11}$$

Hierbei ist s der Abstand zum Stagnationspunkt, an dem sich der senkrechte Fluss in die parallelen Flüsse aufteilt (Abb. 4(b)) und L_c die Verbindungslänge (c für engl. connection length) von Rand zu Rand. Der Stagnationspunkt definiert sich als der Ort genau zwischen den Seiten des Hauptlimiters, an dem der Abstand zu beiden Seite eine halbe Verbindungslänge L_c beträgt. Am Stagnationspunkt gilt $s(L_c/2) = 0$. Mit Gl. (10) im Allgemeinen und (11) im Speziellen liegen nun zwei Formulierungen vor, mit denen eine Aussage über den Dichteverlauf hinter der LCFS gemacht werden kann:

$$n(s) = \frac{\Gamma_{\parallel}(s)}{v}. \tag{12}$$

Dazu muß allerdings noch die Ionengeschwindigkeit v_i hinter der LCFS und parallel zum Limiter bekannt sein. Mit Definition der Ionenschallgeschwindigkeit

$$c_{S,0} = \sqrt{\frac{T_i + T_e}{m_i}} \tag{13}$$

(S für engl. sound) und unter Berücksichtigung des Bohm-Kriteriums

$$c_{S\parallel\text{sheath edge}} = c_{S,0}, \tag{14}$$

wobei $c_{S\parallel\text{sheath edge}}$ die parallele Ionengeschwindigkeit ab der Schichtkante (engl. sheath edge) über der Limiteroberfläche darstellt (Kap. 3.2), kann eine von s abhängige parallele

Teilchengeschwindigkeit hinter der LCFS (in Richtung Wand) hergeleitet werden:

$$v_i = c_S(s) = c_{S,0} \cdot \left(\frac{L_c}{2s} - \sqrt{\left(\frac{L_c}{2s}\right)^2 - 1} \right). \quad (15)$$

Somit kann mit Gl. (10) und (12) folgende Beschreibung der Dichte hinter der LCFS gefunden werden:

$$n_e(r, s) = n_{e,LCFS} \cdot \frac{s^2/L_c}{\frac{L_c}{2} - \sqrt{\left(\frac{L_c}{2}\right)^2 - s^2}} \cdot e^{-\frac{r}{\lambda_{ne}}} \quad (16)$$

(λ_{ne} : Abfalllänge der Elektronendichte). Dabei ist bereits berücksichtigt, dass $n_e = n_e(r, s)$ hinter der LCFS eine Funktion sowohl des Radius r ,

$$n_e(r, s = 0) = n_{e,LCFS} \cdot e^{-\frac{r}{\lambda_{ne}}}, \quad (17)$$

als auch, in toroidaler Richtung, eine Funktion des Abstands s zum Stagnationspunkt ist (Abb. 4(b)).

Dort, wo der parallele Fluss bei $s = \frac{L_c}{2}$ auf einen Limiter trifft, gilt mit Gleichung (16)

$$n_e(r, s = \frac{L_c}{2}) = \frac{1}{2} \cdot n_{e,LCFS} \cdot e^{-\frac{r}{\lambda_{ne}}}. \quad (18)$$

Die Dichte vor der Limiteroberfläche fällt also relativ zur Dichte am Stagnationspunkt auf die Hälfte ab.

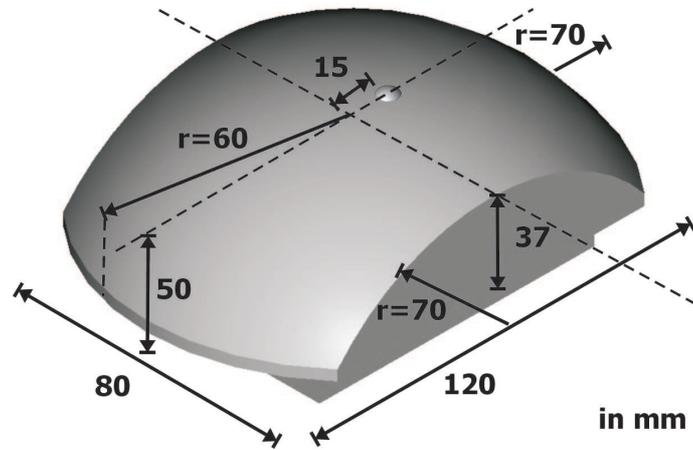
Umgekehrt kann nun bei Kenntnis von $n_e(r, s)$ und $c_S(s)$ mit Gl. (12) der zum B -feld parallele Fluss $\Gamma_{\parallel}(r, s)$ hinter der LCFS bzw. der zerstäubende Fluss direkt am Ort des Limiters (also für $c_S(s) = c_{S,0}$) berechnet werden:

$$\Gamma_{\parallel}(r, s) = n_e(r, s) \cdot c_S(s). \quad (19)$$

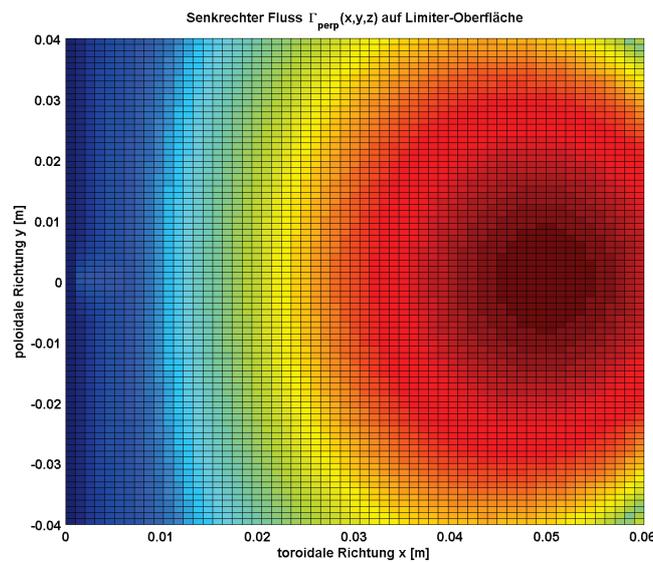
Schließlich muss zusätzlich der Einfluss des Winkels α zwischen den Oberflächennormalen an jedem Punkt und dem zum Magnetfeld parallelen Fluss berücksichtigt werden, falls die Limiterfläche nicht immer senkrecht zum Fluss steht. Der Flussanteil senkrecht zur Limiter-Oberfläche beträgt damit

$$\Gamma_{\text{Limiter}} = \Gamma_{\parallel} \cos \alpha. \quad (20)$$

Abb. 5(b) zeigt eine PSICO-Simulation, die den zerstäubenden senkrechten Fluss auf die in die Ebene projizierte Oberfläche eines Limiters darstellt, der von der Symmetrie her ein Kugelausschnitt ist (Abb. (a)). Dieser wurde auch in den ab Kap. 6 beschriebenen Experimenten verwendet). Darin ist die Änderung des senkrechten Flusses auf den gekrümmten Limiter sowohl in x - als auch in y -Richtung zu beobachten. Die Farbe gibt (von blau nach rot zunehmend) die relative Intensität des Flusses wieder. Zwar entspricht einer weiter

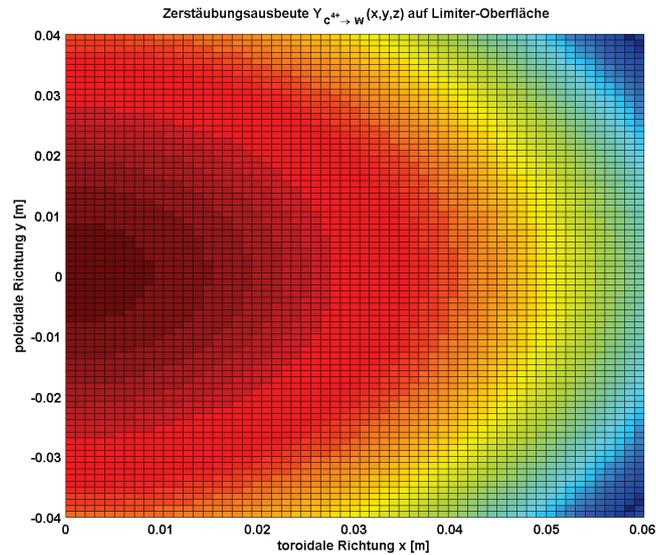


(a)

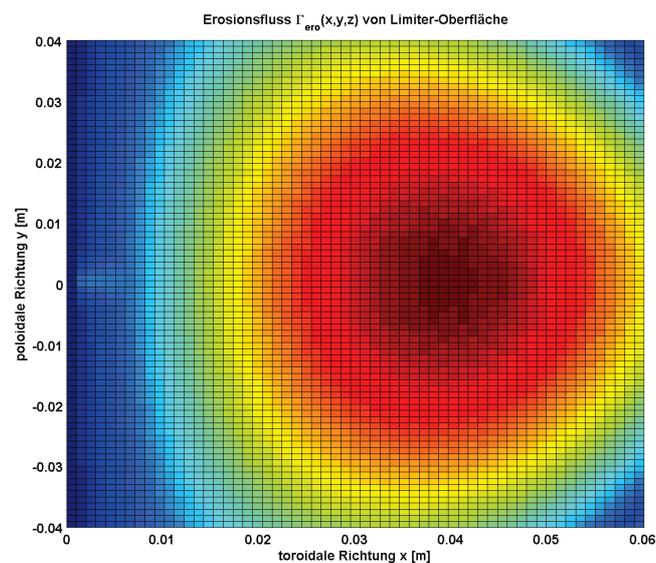


(b)

Abbildung 5: (a) Bemaßungen des während der Zerstäubungsexperimente eingesetzten Test-Limiters. [10] (b) PSICO-Simulation des Projektteilchenflusses auf eine Hälfte der Limiteroberfläche (Projektion in die xy -Ebene). Die Farben kodieren (von blau nach rot zunehmend) die relative Intensität des Flusses. Sowohl r und s -Abhängigkeit als auch die Winkelabhängigkeit bzgl. der Oberflächennormalen sind berücksichtigt. Damit ergibt sich ein kreisförmiges Flussmaximum bei $x = 5$ cm und $y = 0$ cm.



(a)



(b)

Abbildung 6: (a) Darstellung der Zerstäubungsausbeute $Y_{C^{4+} \rightarrow W}(T_e)$, die sich in Abhängigkeit der Temperatur sowohl in x - als auch in y -Richtung ändert (Kohlenstoff-Teilchen höherer Ionisationszustände bilden die Hauptursache bei der Erosion von Wandelementen in TEXTOR [72]). Das Maximum liegt am Ampex als dem Punkt der höchsten Temperatur. (b) Der vom Limiter erodierte W-Fluss ergibt sich als Faltung des Plasmaflusses senkrecht auf den Limiter aus Abb. 5(b) mit der Zerstäubungsausbeute. Dadurch verschiebt sich das Flussmaximum weiter nach links zu $x = 3.9$ cm.

vom Apex entfernten toroidalen Position aufgrund der Krümmung der Limiter-Oberfläche auch eine größere Entfernung vom Plasmazentrum in radialer Richtung und damit eine Abnahme des Flusses. Jedoch nimmt auch α in x -Richtung von 0 am Ursprung bis 90° am Limiterrand zu. Damit steht die Flächennormale am Ursprung senkrecht zum Fluss, am Rand parallel, sodass dort der Fluss senkrecht auf den Limiter trifft. Die Überlagerung der Abhängigkeiten des Flusses von radialer und toroidaler Position sowie dem Einfallswinkel α ergibt in der Simulation ein kreisförmiges Flussmaximum, das bei $x = 5$ cm und $y = 0$ cm zu finden ist.

3.4 Zerstäubungsausbeute

Die Zerstäubungsausbeute (engl. yield) $Y(E_0) = \frac{\text{Anzahl zerstäubter Atome}}{\text{Anzahl einfallender Ionen}}$ drückt eine Effektivität der in Kap. 3.1 beschriebenen grundlegenden Prozesse aus. Sie ist eine von der kinetischen Energie E_0 der zerstäubenden Teilchen abhängige Größe und gibt die Anzahl der pro Projektilteilchen aus einer Oberfläche herausgelösten Teilchen wieder. Zur Berechnung des Flusses erodierter Teilchen $\Gamma_{\text{ero}} = \Gamma_i Y(E_0)$ bei bekanntem Projektilteilchen-Fluss Γ_i muss bei einem nicht homogenen Plasma also diese Energieabhängigkeit bekannt sein. Abbildung 7(a) zeigt Messungen der Zerstäubungsausbeute für verschiedene Projektilteilchen (H, D, ^{12}C , W) auf eine W-Probe bei senkrechtem Einfall. Über Gleichung (7) wird aus der Abhängigkeit der Ausbeute von der Einfallenergie eine Abhängigkeit von der Plasmatemperatur.

Um also die Zerstäubung der Limiteroberfläche zu simulieren, muss der radiale Verlauf der Ausbeute $Y(E_0(r))$ in Form einer von r abhängigen Gewichtung mitberücksichtigt werden.

3.5 Redeposition

Aus einem Substrat erodierte Neutralteilchen können sich unabhängig vom B -Feld eines Tokamaks oder Plasmagenerators bewegen. Dies ist nicht mehr der Fall, nachdem sie vom Plasma ionisiert worden sind und die Lorentzkraft

$$F_L = v_{i\perp} \times B \quad (21)$$

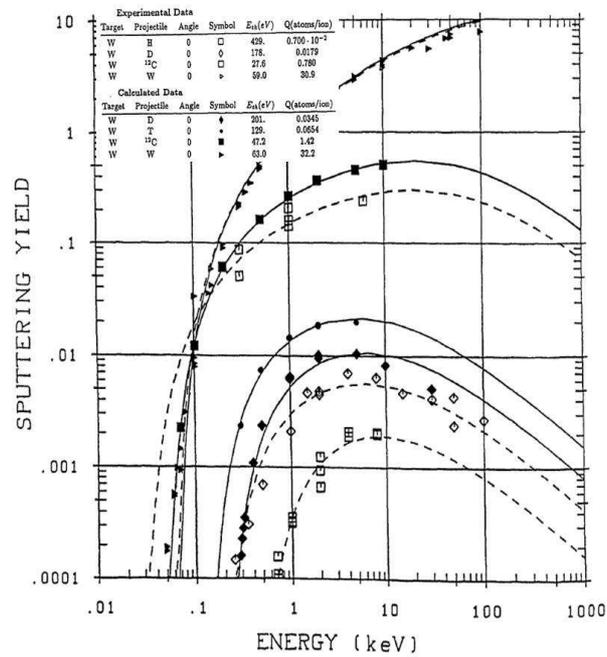
auf sie wirken kann ($v_{i\perp}$: zum B -Feld senkrechter Geschwindigkeitsanteil der Ionen). Diese zwingt Z -fach geladene Ionen auf eine Kreisbahn um die magnetischen Feldlinien mit dem Gyrationradius

$$r_g = \frac{m_i v_{i\perp}}{|Ze|B}. \quad (22)$$

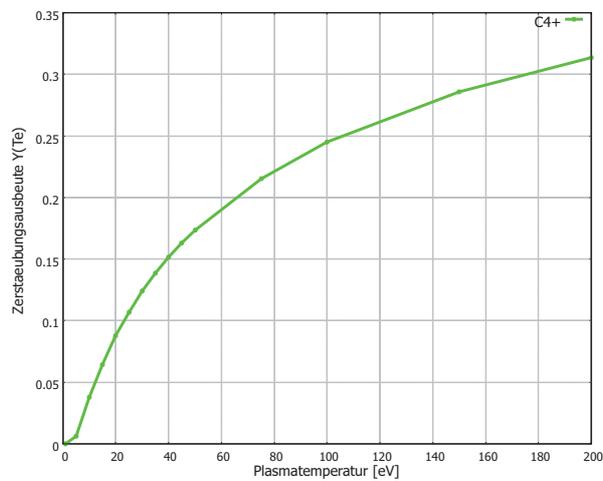
Als Konsequenz daraus folgt, dass erodierte Teilchen, für deren Ionisationslänge λ_i

$$\lambda_i \leq 2r_g \quad (23)$$

gilt, innerhalb einer Gyration auf die Oberfläche zurückkehren können und dort prompt redopponiert und schließlich wieder re-erodiert werden können (Abb. 8). Es muss also davon



(a)



(b)

Abbildung 7: Einfallenergieabhängige Zerstäubungsausbeute $Y(E_0)$ für den senkrechten Einfall von (a) H, D, C und W auf eine W-Probe in Messung (offene Symbole) und Rechnung (ausgefüllte Symbole). Die gerechneten Daten ergeben sich unter Benutzung des TRIM.SP-Codes [19] (b) Temperaturabhängige Zerstäubungsausbeute $Y_{\text{C}^{4+} \rightarrow \text{W}}(T_e)$ für C^{4+} auf W. [34]

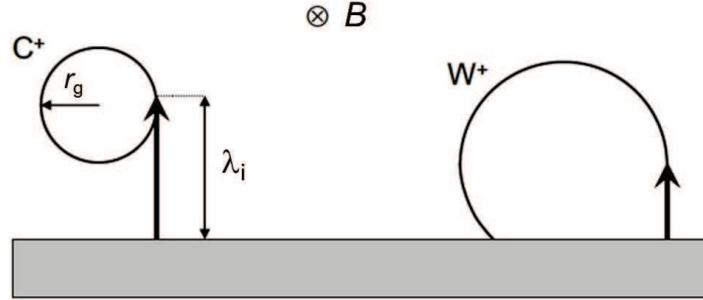


Abbildung 8: Schematische Darstellung des prompten Depositionsprozesses: falls $\lambda_i \leq 2r_g$, können die Ionen innerhalb eines Gyroradius auf die Oberfläche zurückkehren. Die prompte Redeposition ist also möglich für W^+ , nicht jedoch für C^+ . [1]

ausgegangen werden, dass ein gewisser Anteil von erodiertem Material unter der in Gl. (23) gegebenen Bedingung wieder auf die Oberfläche zurückkehrt [54]. Durch diesen Prozess wird die spektroskopische Bestimmung eines Nettoerionflusses von einer Oberfläche

$$\Gamma_{\text{net}} = \Gamma_{\text{ero}} - \Gamma_{\text{redep}} \quad (24)$$

erschwert, da nur ein Anteil der emittierten Photonen des Flusses Γ_{redep} gemessen wird, bevor sich die Teilchen wieder auf der Oberfläche ablagern. Somit wird die Gesamtzahl erodierter Teilchen in Richtung zu niedriger Werte verfälscht.

3.6 Sigmund-Thompson-Geschwindigkeitsverteilung

Sind Einfallenergie der Projektilteilchen E_0 und die Bindungsenergie $E_B(W) = 8.7 \text{ eV}$ für W bekannt, kann hieraus nach

$$f_{\text{Th}} = k_{\text{norm}} \frac{E_{\text{ej}}}{(E_{\text{ej}} + E_B)^3} \quad (25)$$

eine Sigmund-Thompson-Geschwindigkeitsverteilung[§] mit einer Normierungskonstanten k_{norm} berechnet werden (Abb. 9) [1, 79]. Experimentell gefundene Verteilungen für Zerstäubung durch schwere Ionen mit Energien im 1 keV-Bereich und unter senkrechtem Einfall können hiermit in guter Näherung beschrieben werden, während für leichte Ionen und andere Einfallswinkel Abweichungen auftreten [1]. Das Maximum dieser Verteilung findet sich bei einer Energie der herausgelösten Teilchen, die der halben Bindungsenergie $E_{\text{ej,w}} = \frac{E_B(W)}{2}$ entspricht. $E_{\text{ej,w}}$ stellt also die *wahrscheinlichste* Energie dar. Die mittlere Energie errechnet sich aus

$$\langle E_{\text{ej}} \rangle = \frac{\int_0^{E_{\text{cut-off}}} f_{\text{Th}} E_{\text{ej}} dE_{\text{ej}}}{\int_0^{E_{\text{cut-off}}} f_{\text{Th}} dE_{\text{ej}}}. \quad (26)$$

[§]Oft einfach als Thompson-Geschwindigkeitsverteilung zitiert.

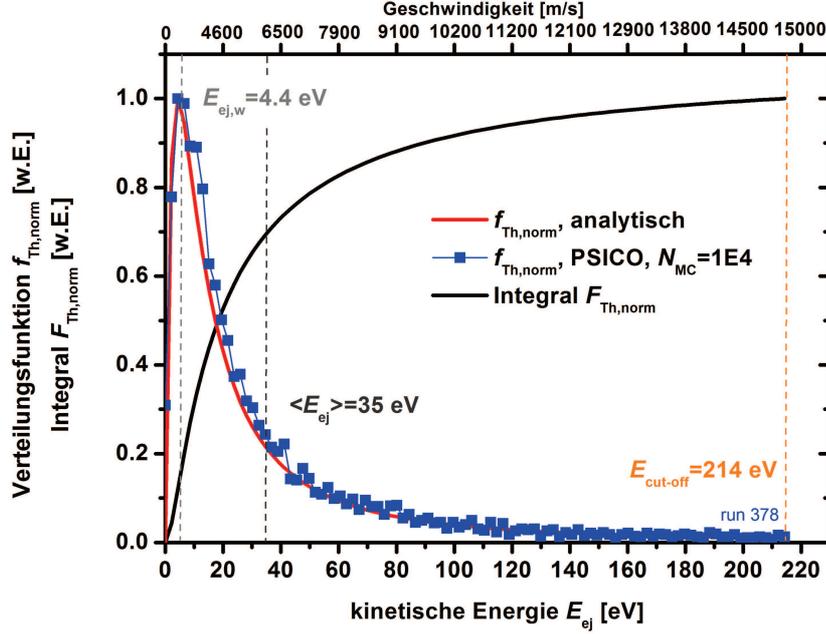


Abbildung 9: Normierte analytische Rechnung (rote Kurve) und PSICO-Simulation (blaue Kurve/Quadrate) einer Thompson-Geschwindigkeitsverteilung $f_{\text{Th,norm}}$ und Integral $F_{\text{Th,norm}}$ der Verteilung (schwarze Kurve) in Abhängigkeit der kinetischen Energie E_{ej} (bzw. Geschwindigkeit v_{ej}) der erodierten Teilchen. Ebenso angegeben sind die wahrscheinlichste Energie $E_{\text{ej,w}}$, die mittlere Energie $\langle E_{\text{ej}} \rangle$ und die Grenzenenergie $E_{\text{cut-off}}$. Berechnet wurde die Verteilung mit $E_{\text{B}}(W) = 8.7 \text{ eV}$, $E_0 = 85 \text{ eV}$ und $N_{\text{MC}} = 10000$ Monte-Carlo-Teilchen.

Zu höheren Energien hin ($E_{\text{ej}} \gg E_{\text{B}}$) erfolgt der Abfall der Verteilung gemäß $1/E_{\text{ej}}^2$. Die Grenzenenergie $E_{\text{cut-off}}$ (engl. cut-off energy) der Verteilung ergibt sich nach Gleichung (3) aus der Energie E_0 der Projektilteilchen.

Die Berechnung der Teilchengeschwindigkeit in PSICO ist durch den Vergleich einer gewürfelten Zufallszahl im Intervall $[0,1]$ mit den für diskrete Energien E'_{ej} errechneten bestimmten Integralen für f_{Th} in den Grenzen $[0, E'_{\text{ej}}]$ realisiert ($k_{\text{norm}} = 1$),

$$F_{\text{Th}}(E'_{\text{ej}}) = \int_0^{E'_{\text{ej}}} \frac{E_{\text{ej}}}{(E_{\text{ej}} + E_{\text{B}})^3} dE_{\text{ej}} = \left[\frac{1}{2E_{\text{B}}} - \frac{E_{\text{ej}} + \frac{E_{\text{B}}}{2}}{(E_{\text{ej}} + E_{\text{B}})^2} \right]_0^{E'_{\text{ej}}}, \quad (27)$$

die auf das Integral im Intervall $[0, E_{\text{cut-off}}]$ normiert wurden:

$$F_{\text{Th,norm}}(E'_{\text{ej}}) = \frac{\int_0^{E'_{\text{ej}}} f_{\text{Th}} dE_{\text{ej}}}{\int_0^{E_{\text{cut-off}}} f_{\text{Th}} dE_{\text{ej}}}. \quad (28)$$

Damit liegen auch alle Werte für $F_{\text{Th,norm}}(E'_{\text{ej}}) = W(E'_{\text{ej}})$ in $[0,1]$ und können als die

Wahrscheinlichkeit $W(E'_{ej})$ interpretiert werden, ein W-Atom mit einer Energie im Intervall $[0, E'_{ej}]$ freizusetzen.

Abb. 9 zeigt die normierte analytische Verteilung f_{Th} und die Reproduktion der Verteilungsfunktion in PSICO, wobei für $N_{MC} = 10000$ Monte-Carlo-Teilchen die Startgeschwindigkeit gewürfelt wurde. Ebenso ist der Verlauf des bestimmten Integrals $F_{Th, norm}$ dargestellt. Die Grenzenergie $E_{cut-off} = 214 \text{ eV}$ ergibt sich in diesem Fall unter der Annahme eines TEXTOR-Szenarios, in dem vierfach ionisierte Kohlenstoffatome C^{4+} mit einer Temperatur an der LCFS von $T_{i, LCFS} = 85 \text{ eV}$ ($f_T = 1$) auf einen Wolframlimiter beschleunigt werden. Aus der W-Bindungsenergie folgt eine wahrscheinlichste Energie von $E_{ej, w} = 4.4 \text{ eV}$ (entspricht einer Geschwindigkeit von $v_{ej, w} = 2122 \text{ m/s}$). Die mittlere Energie ergibt sich aus der Verteilung zu $\langle E_{ej} \rangle = 35 \text{ eV}$ (entspricht einer Geschwindigkeit von $\langle v_{ej} \rangle = 5220 \text{ m/s}$).

3.7 „Kosinus“-Verteilung

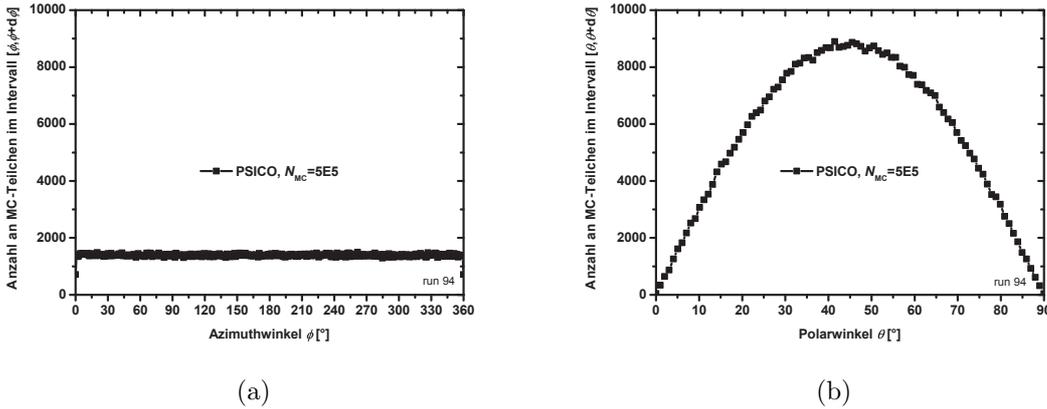


Abbildung 10: Mit PSICO simulierte absolute Winkelverteilung $f(\phi)$ und $g(\theta)$ für $N_{MC} = 500000$ Monte-Carlo-Teilchen. Während $f(\phi)$ in (a) homogen ist, besitzt in (b) $g(\theta)$ ein Maximum bei $\theta = 45^\circ$.

Die räumliche Verteilung von Teilchen, die nach einem Zerstäubungsprozess durch Projektilteilchen eine Oberfläche verlassen, kann in vielen Fällen durch eine sogenannte „Kosinus“-Verteilung beschrieben werden [25, 42]:

$$dN = \frac{N}{\pi} \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi. \quad (29)$$

Hierbei beschreibt dN den Anteil aller Teilchen N , die die Oberfläche unter dem Polarwinkel θ zur Oberflächennormalen und dem Azimutwinkel ϕ verlassen. Die Austrittswinkel der Teilchen (Polarwinkel θ) aus der Oberfläche treten also mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit auf, deren Verteilung durch (29) beschrieben wird. Die Wahrscheinlichkeit

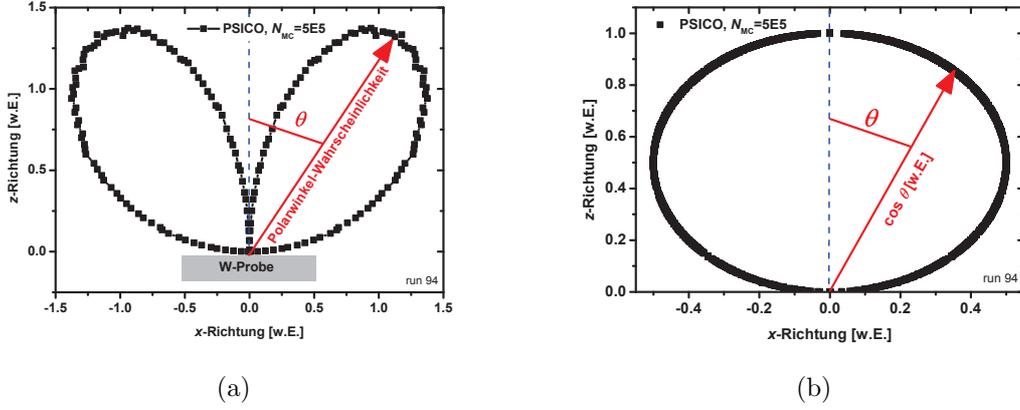


Abbildung 11: (a) PSICO-Simulation der Winkelwahrscheinlichkeit $g(\theta)$ erodierter Teilchen in Abhängigkeit der x - und z -Position für $N_{MC} = 500000$ Monte-Carlo-Teilchen. Die so ermittelte Verteilung ist *nicht* identisch mit der *Projektion* der im Experiment beobachteten *kosinusförmigen Teilchenverteilung* in (b) [25], die aus $f(\phi)$ und $g(\theta)$ resultiert.

$f(\phi)$ für ein Teilchen, die Oberfläche mit einem Azimuthwinkel im Intervall $[\theta, \theta + d\theta]$ zu verlassen, ergibt sich durch Integration von Gl. (29) in $[0, \pi/2]$ über alle möglichen Polarwinkel θ :

$$f(\phi) = \frac{dN_\phi}{Nd\phi} = \frac{1}{2\pi}. \quad (30)$$

Integration von Gl. (29) in $[0, 2\pi]$ über alle möglichen Azimuthwinkel ϕ liefert:

$$g(\theta) = \frac{dN_\theta}{Nd\theta} = \sin(2\theta). \quad (31)$$

Nun muss eine Möglichkeit gefunden werden, sowohl ϕ als auch θ so zu formulieren, dass eine gewürfelte Zufallszahl $R \in [0, 1]$ in einen $f(\phi)$ - bzw. $f(\theta)$ -verteilten Winkel transformiert werden kann. Für $\phi \in [0, 2\pi]$ findet sich hier die triviale Normierung

$$\phi = R_1 2\pi. \quad (32)$$

Für $\theta \in [0, \pi/2]$ ergibt sich folgende Normierung [81]:

$$\theta = \arcsin(\sqrt{R_2}). \quad (33)$$

Abb. 10(a) bzw. Abb. 10(b) zeigt die unter Benutzung von Gl. (32) und (33) simulierte Winkelverteilung für ϕ bzw. θ . Während ϕ in der Substratebene (xy -Ebene) homogen verteilt ist, ergibt sich für θ ein Maximum bei 45° . Abb. 11(a) zeigt die Winkelwahrscheinlichkeit $f(\theta)$ in Abhängigkeit der z - und x -Koordinate (z verläuft senkrecht zum Substrat). Diese θ -Wahrscheinlichkeitsverteilung ist jedoch *nicht* identisch mit der beobachteten *kosinusverteilten Projektion des Teilchenflusses* aus dem Raum in die Ebene hinein (Abb. 11(b)), die der Verteilung ihren Namen gibt.

4 Spektroskopie zur Bestimmung der W-Erosion

4.1 Emission und Ionisation

Ein sich im Zustand i befindliches Atom kann durch Stöße mit den Elektronen des Rand-schichtplasmas in einen höherliegenden Zustand j angeregt werden, wobei sich die Popu-lation der Energieniveaus ändert. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, dass ein Atom durch einen Elektronenstoß eine Anregung $i \rightarrow j$ erfährt, ergibt sich als Produkt aus Elektronendichte n_e und Elektronenstoßanregungskoeffizient $X_{i \rightarrow j} = \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j}$ (X für engl. „eXitation“) und wird auch als Anregungsrate bezeichnet:

$$R_X = n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j}. \quad (34)$$

Hierbei sei σ_X der Anregungsquerschnitt des Überganges $i \rightarrow j$. Der Elektronenstoßan-regungskoeffizient stellt den Mittelwert einer Faltung einer von der Elektronentem-peratur T_e abhängigen MAXWELL-Geschwindigkeitsverteilung $f_{v_e}(T_e)$ mit dem ebenfalls von T_e abhängigen Anregungswirkungsquerschnitt des betrachteten Überganges dar:

$$\langle v_e \sigma_X \rangle \equiv \frac{1}{n_e} \int v_e f_{v_e}(T_e) \sigma_X(T_e) dv_e. \quad (35)$$

Somit ist $\langle v_e \sigma_X \rangle = \langle v_e \sigma_X \rangle(T_e)$ im Allgemeinen temperaturabhängig.

Für ein Ensemble von Atomen mit der Zustandsdichte n_i ausgehend erhält man dement-sprechend für die pro Zeit- und Volumeneinheit nach j angeregten Atome

$$\frac{dn_i}{dt} = n_i n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j}. \quad (36)$$

Ein mit der Stoßanregung konkurrierender Prozess ist die Stoßionisation, die zur Entvölke-rung des Niveaus i führt. Analog zum Anregungskoeffizienten $\langle v_e \sigma_X \rangle$ kann mit der Geschwindigkeitsverteilung $v_e(T_e)$ und dem Ionisierungswirkungsquerschnitt σ_S (S für „ioniSation“) der Elektronenstossionisationsratenkoeffizient $S_{i \rightarrow \text{Ion}} = \langle v_e \sigma_S \rangle_{i \rightarrow \text{Ion}}(T_e)$ de-finiert werden. Damit ergibt sich für die Ionisationsrate

$$I = n_e \langle v_e \sigma_S \rangle_{i \rightarrow \text{Ion}} \quad (37)$$

und für die pro Zeit- und Volumeneinheit aus dem Niveau i ionisierten Atome

$$\frac{dn_i}{dt} = n_i n_e \langle v_e \sigma_S \rangle_{i \rightarrow \text{Ion}}. \quad (38)$$

Die Gesamtanzahl der in dt pro Volumeneinheit ionisierten Atome ergibt sich entsprechend als $dn_i = n_i n_e \langle v_e \sigma_S \rangle_{i \rightarrow \text{Ion}} dt$. Bei passender Wahl von Δt im diskreten Fall kann $dn_i < 1$ als Ionisationswahrscheinlichkeit W_{Ion} interpretiert werden. Diese kann dann innerhalb der Monte-Carlo-Simulation mit einer gewürfelten Zufallszahl $W = \text{rand}(1, 1) \in [0, 1]$ (MATLAB) verglichen werden. Für den Fall $W_{\text{Ion}} \geq W$ wird das Atom ionisiert, andernfalls wird der

Test nach einem Zeitintervall Δt wiederholt, währenddessen sich das Testteilchen um ein von der Teilchengeschwindigkeit v abhängiges Streckenintervall $\Delta r = v\Delta t$ weiter ins Plasma hinein bewegt hat. Eine für kleine Δt äquivalente Formulierung der Ionisationswahrscheinlichkeit stellt $P = 1 - \exp(-n_e S \Delta t)$ dar. Obiger Term ergibt sich dann aus dieser Formulierung durch eine Reihenentwicklung. Zur besseren Vergleichbarkeit in der Entwicklungsphase von PISCO mit anderen Codes wurde die exponentielle Form gewählt. Hier erfolgt dann analog die Ionisation, wenn $P \geq W$.

Im Allgemeinen müssen über die Stoßanregung und -ionisation hinaus weitere konkurrierende Prozesse betrachtet werden, die einen Einfluss auf die Besetzungsdichte eines Energieniveaus haben. Dies sind im einzelnen Stoßabregung, Absorption von Linienstrahlung und Rekombination. Damit lässt sich die Bilanzgleichung, die die zeitliche Änderung der Besetzungsdichte n_j beschreibt, folgendermaßen formulieren, unter der Berücksichtigung, dass alle Prozesse auch von einem angeregten Zustand mit $i > 1$ aus stattfinden können und somit über alle möglichen Zustände i summiert werden muss:

$$\begin{aligned}
 \frac{dn_j}{dt} = & \underbrace{\sum_{i \neq j} n_i n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j}}_{\text{Stoßanregung}} - \underbrace{\sum_{i \neq j} n_j n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{j \rightarrow i}}_{\text{Stoßabregung}} + \\
 & + \underbrace{\sum_{i \neq j} n_i A_{ij}}_{\text{Strahlungsanregung}} - \underbrace{\sum_{i \neq j} n_j A_{ji}}_{\text{Strahlungsabregung}} - \\
 & - \underbrace{n_i n_e \langle v_e \sigma_S \rangle_{j \rightarrow \text{Ion}}}_{\text{Ionisation}} + \underbrace{n_{\text{Ion}} n_e \langle v_e \sigma_S \rangle_{\text{Ion} \rightarrow j}}_{\text{Rekombination}}
 \end{aligned} \tag{39}$$

Die Einsteinkoeffizienten A_{ji} bzw. A_{ij} geben die Wahrscheinlichkeit einer Photonenemission bzw. -absorption an, was einem Niveauswechsel unter Abstrahlung bzw. Aufnahme der Energienivaudifferenz ΔE_{ji} entspricht. Unter der Berücksichtigung, dass die Abregung über unterschiedlich wahrscheinliche Kanäle vonstatten gehen kann, muss über alle möglichen Einsteinkoeffizienten summiert werden. Der Ausdruck $n_{\text{Ion}} \langle v_e \sigma_S \rangle_{\text{Ion} \rightarrow i}$ stellt eine Rekombinationrate aus einem Ionisationszustand n_{Ion} dar.

Im Folgenden soll die Änderung der Niveaupopulation nur bis zu nächsten Ionisation betrachtet werden, wodurch die letzten beiden Terme unerheblich werden und n_i sowie n_j die Besetzungsdichten neutraler Teilchen beschreiben. Weiter können in der sogenannten Korona-Näherung für optisch dünne Plasmen und im Grenzfall kleiner Elektronendichten n_e die Terme für Stoßabregung, Photonenabsorption und Rekombination vernachlässigt werden [65]. Im Gleichgewichtszustand halten sich hierbei also Anregung durch Elektronenstöße und Abregung durch Photonenemission die Waage, die Abregungszeit durch Emission ist klein im Vergleich zur Zeit zwischen zwei Kollisionen. Gleichung (39) vereinfacht sich damit zu

$$\frac{dn_j}{dt} = \sum_{i < j} n_i n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j} - \sum_{i < j} n_j A_{ji} = 0 \tag{40}$$

und kann umformuliert werden zu

$$\sum_{i < j} n_i n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{i \rightarrow j} = n_j \sum_{k < j} A_{jk}. \quad (41)$$

Dies vereinfacht sich für die Annahme einer Stoßanregung nur aus dem Grundzustand ($i = 1$) weiter zu [65]

$$n_1 n_e \langle v_e \sigma_X \rangle_{1 \rightarrow j} = n_j \sum_{k < j} A_{jk}. \quad (42)$$

Die während der Abregung eines angeregten Niveaus j am Ort r pro Raumwinkel-, Zeit- und Volumeneinheit für einen einzelnen Übergang $j \rightarrow k$ ausgesandte Photonenmenge, die sogenannte Emissivität, ergibt sich somit unter der Annahme eines ortsabhängigen Dichteprofiles $n_e(r)$ aus

$$\epsilon(r) = \frac{1}{4\pi} n_j(r) A_{jk} = \frac{B_{jk}}{4\pi} n_j \sum_{k \leq j} A_{jk} = \frac{B_{jk}}{4\pi} n_1(r) n_e(r) \langle v_e \sigma_X \rangle_{1 \rightarrow j} \quad (43)$$

wobei $B_{jk} = \frac{A_{jk}}{\sum_{k \leq j} A_{jk}}$ (B für engl. “Branching ratio“) das Verzweigungsverhältnis des betrachteten Übergangs zur Summe aller möglichen Strahlungsübergänge in niedrigere Niveaus bezeichnet. Da sich die Neutralteilchendichte n_1 durch ortsabhängige Ionisationsprozesse ändert (Kap. 4.3), muss auch sie selbst als vom Ort abhängig betrachtet werden. Für die spektroskopisch zugängliche, *gesamte entlang des Weges r integrierte* (entspricht der Sichtlinie) Lichtintensität bei der beobachteten Wellenlänge λ erhält man mit der dem betrachteten Übergang entsprechenden Photonenenergie $\Delta E_{jk} = h\nu_{jk}$ (h : Plancksches Wirkungsquantum, ν_{jk} : Frequenz der zum ausgesandten Photon äquivalenten Lichtwelle)

$$I_\lambda^{\text{ges}} = h\nu \int_{r_1=0}^{r_2} \epsilon(r) dr = B_{jk} \frac{h\nu}{4\pi} \int_{r_1=0}^{r_2} n_1(r) n_e(r) \langle v_e \sigma_X \rangle_{1 \rightarrow j} dr \quad (44)$$

4.2 Linienverhältnisse

Aus den experimentell beobachteten Spektren lassen sich Verhältnisse der Intensitäten der Spektrallinien bilden. Aus Gleichung 44 ergibt sich durch Verhältnisbildung für zwei Spektrallinien der Intensitäten I_{λ_1} und I_{λ_2} mit den allgemein verschiedenen Grundzustandsbesetzungsdichten n_1 und n_2 die Beziehung

$$\begin{aligned} \frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} &\approx \frac{B_1 h \nu_1 n_1 \langle v_e \sigma_X \rangle_1}{B_2 h \nu_2 n_2 \langle v_e \sigma_X \rangle_2} \\ &= \frac{A_1 \Delta E_1 n_1 \langle v_e \sigma_X \rangle_1}{A_2 \Delta E_2 n_2 \langle v_e \sigma_X \rangle_2} \end{aligned} \quad (45)$$

wobei hier eine Dichte- und Temperaturänderung entlang des Weges r als vernachlässigbar angenommen wurde, womit die Integrale wegfallen. Diese Beziehung kann umformuliert werden zu

$$\begin{aligned}
 \frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} &\sim \frac{n_1 e^{-\frac{\Delta E_1}{T_e}}}{n_2 e^{-\frac{\Delta E_2}{T_e}}} \\
 &\sim \frac{n_1}{n_2} e^{-\frac{\Delta E_{12}}{T_e}} \\
 &\sim e^{\frac{-\Delta E_{12}}{T_W}} e^{-\frac{\Delta E_{12}}{T_e}}
 \end{aligned} \tag{46}$$

mit der Differenz der abgestrahlten Energien $\Delta E_{12} = \Delta E_1 - \Delta E_2$ und der zu einer Grundzustandsenergie äquivalenten Temperatur T_W [6]. Das Linienverhältnis ist also im Allgemeinen eine Funktion der Grundzustandsenergie T_W und der Plasmatemperatur T_e : $\frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} = f(T_W, T_e)$.

Man erkennt jedoch, dass für $T_e \gg \Delta E_{12} = 2 - 3 \text{ eV}$, was für die Randschichttemperaturen eines TEXTOR-Plasmas mit $T_e > 20 \text{ eV}$ näherungsweise gegeben ist, die Abhängigkeit des Linienverhältnisses von der Plasmatemperatur gegen Null geht. Es gilt also $\frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} \neq f(T_e)$, wohingegen mit $e^{-\frac{\Delta E_{12}}{T_W}}$ weiter eine Abhängigkeit von der Grundzustandsbesetzung besteht.

Findet nun eine Anregung zweier Linien aus demselben Grundzustandsniveau statt, es gilt also $n_1 = n_2$, bleibt lediglich die Abhängigkeit von der Plasmatemperatur erhalten:

$$\begin{aligned}
 \frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} &\sim \frac{n_1}{n_1} e^{-\frac{\Delta E_{12}}{T_e}} \\
 &\sim e^{-\frac{\Delta E_{12}}{T_e}}
 \end{aligned} \tag{47}$$

Wird das Korona-Gleichgewicht vorausgesetzt, kann hier eine Abhängigkeit von der Plasmadichte n_e vernachlässigt werden. Diese muss erst wieder bei höheren Dichten, bei denen die Korona-Näherung nicht mehr gilt, berücksichtigt werden.

4.3 Teilchenflüsse

Unter der Annahme vernachlässigbarer Rekombination erhält man für die Anzahl der pro Zeiteinheit ionisierten Atome, d.h. die zeitliche Änderung der Neutralteilchendichte n_A ,

$$\frac{dn_A}{dt} = -n_A n_e \langle v_e \sigma_S \rangle. \tag{48}$$

Durch Einbeziehung des Neutralteilchenflusses $\Gamma_A(r) = n_A(r) v_A$ von einer Oberfläche entlang des Weges r und unter Verwendung der Beziehung $\frac{d\Gamma_A}{dr} = \frac{d(n_A v_A)}{dr} = \frac{dr dn_A}{dt dr} = \frac{dn_A}{dt}$ lässt sich dies umformulieren zu

$$\frac{d\Gamma_A}{dr} = -n_A n_e \langle v_e \sigma_S \rangle. \tag{49}$$

Durch Integration entlang des Weges r ergibt sich der neutrale atomare Fluss [65]

$$\Gamma_A = \int_{r_1=0}^{r_2} n_A(r)n_e(r)\langle v_e\sigma_S \rangle dr \quad (50)$$

4.4 Photoeffizienz und S/XB -Wert

Beziehung (50) kann mit Gleichung (44) erweitert werden zu

$$\Gamma_A = \frac{4\pi}{Bh\nu} I_\lambda^{\text{ges}} \frac{\int_{r_1}^{r_2} n_A(r)n_e(r)\langle v_e\sigma_S \rangle dr}{\int_{r_1}^{r_2} n_A(r)n_e(r)\langle v_e\sigma_X \rangle dr} \quad (51)$$

worin der Teilchenfluss nun über die spektroskopisch gemessenen Intensität I_λ dargestellt werden kann und somit Teilchenfluss und Lichtintensität ins Verhältnis zueinander gesetzt werden. [65, 66, 68] Das Verhältnis von totalem atomarem Fluss Γ_A und totalem Photonenfluss $\phi_{\text{Ph}}(\lambda) = \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}}$

$$\frac{\Gamma_A}{\phi_{\text{Ph}}} = \frac{\int_{r_1}^{r_2} n_A(r)n_e(r)\langle v_e\sigma_S \rangle dr}{B \int_{r_1}^{r_2} n_A(r)n_e(r)\langle v_e\sigma_X \rangle dr} \quad (52)$$

$$= E_{\text{Ph}}(\lambda) \quad (53)$$

soll im Folgenden als *Photoeffizienz*[¶] E_{Ph} bezeichnet werden. Ist diese bekannt, kann so ein spektroskopisch gemessener Photonenfluss in einen Neutralteilchenfluss konvertiert werden. Umgekehrt kann bei Kenntnis von Γ_A und ϕ_{Ph} der Konversionsfaktor für die gegebenen experimentellen Bedingungen – also Dichte- und Temperaturprofile – bestimmt werden. Denn hierbei sind sowohl $n_e = n_e(r)$, $T_e = T_e(r)$ als auch $\langle v_e\sigma_X \rangle = f_X(r) = f_X(T_e)$ und $\langle v_e\sigma_S \rangle = f_S(r) = f_S(T_e)$ Funktionen des Ortes bzw. der Temperatur am jeweiligen Ort. Theoretisch ist eine Bestimmung von E_{Ph} also auch durch Berechnung der Integrale möglich, was das Bekanntsein einer jeden Größe an jedem Ort voraussetzt. Da dies experimentell oft nicht zu bewerkstelligen ist, muss nach einer Möglichkeit gesucht werden, Gleichung (51) zu vereinfachen. Dies kann geschehen unter der Annahme einer vernachlässigbaren Änderung von $\langle v_e\sigma_S \rangle(r)$ und $\langle v_e\sigma_X \rangle(r)$ entlang des kleinen Wegstücks dr :

$$\frac{d\langle v_e(r)\sigma_S \rangle}{dr} = \frac{d\langle v_e(T_e)\sigma_S \rangle}{dT_e} \approx 0 \quad (54)$$

$$\Rightarrow \langle v_e(r)\sigma_S \rangle \approx \text{const.},$$

$$\frac{d\langle v_e(r)\sigma_X \rangle}{dr} = \frac{d\langle v_e(T_e)\sigma_X \rangle}{dT_e} \approx 0 \quad (55)$$

$$\Rightarrow \langle v_e(r)\sigma_X \rangle \approx \text{const.},$$

[¶]Je nach Definition auch als *inverse* Photoeffizienz bezeichnet.

sodass sich ergibt

$$\begin{aligned}
 \Gamma_A &= \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}} \frac{\int_{r_1=0}^{r_2} n_A(r) n_e(r) \langle v_e \sigma_S \rangle(r) dr}{B \int_{r_1=0}^{r_2} n_A(r) n_e(r) \langle v_e \sigma_X \rangle(r) dr} = \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}} E_{\text{Ph}}(\lambda) \\
 &\approx \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}} \frac{\langle v_e \sigma_S \rangle}{\langle v_e \sigma_X \rangle B} \frac{\int_{r_1=0}^{r_2} n_A(r) n_e(r) dr}{\int_{r_1=0}^{r_2} n_A(r) n_e(r) dr} \\
 &= \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}} \frac{\langle v_e \sigma_S \rangle}{\langle v_e \sigma_X \rangle B} \\
 &= \frac{4\pi}{h\nu} I_\lambda^{\text{ges}} \frac{S}{XB} \tag{56}
 \end{aligned}$$

In diesem Fall ist der Konversionsfaktor E_{Ph} also gleich dem sogenannten S/XB -Wert als dem Verhältnis von Ionisationsratenkoeffizient $S \equiv \langle v_e(r) \sigma_S \rangle$ zum Anregungsratenkoeffizienten $X \equiv \langle v_e(r) \sigma_X \rangle$ einer Linie mit dem Verzweigungsverhältnis B . Während hier davon ausgegangen wurde, dass sowohl X als auch S im betrachteten Integrationsbereich nur vernachlässigbar von T_e abhängig sind, dass also bei einer Parametrisierung z.B. über die Temperatur am Maximum eines Emissionsprofils die Änderung der Temperatur und damit von S und X über die Profildicke hinweg vernachlässigbar ist, ist diese Vereinfachung im Allgemeinen nicht zulässig, solange kein homogenes Plasma mit konstanten n_e - und T_e -Werten vorliegt. Somit muss also $S/XB = (S/XB)(T_e)$ berücksichtigt werden. Für ein anderes Profil, gemessen bei einer anderen Temperatur, ergibt sich auch ein anderer S/XB -Wert – somit wird der S/XB -Wert (in Form einer Stufenfunktion) wieder temperaturabhängig. Sind die Gradienten der Plasmaparameter zu steil, ist die Gleichheit $E_{\text{Ph}} = S/XB$ nicht mehr gegeben.

In allen Fällen wird immer das Intensitätsintegral I_λ^{ges} entlang des *gesamten* Emissionsprofils benötigt. Weitere Voraussetzungen drüber hinaus sind ein ionisierendes Plasma, bei dem Rekombination vernachlässigt werden kann, ein Korona-Gleichgewicht und ein genügend großes Beobachtungsvolumen, das gewährleistet, dass alle in das Plasma hineinlaufenden Teilchen innerhalb des spektroskopisch erfassbaren Bereiches ionisiert werden. Mit dem letzten Punkt ist für die Integrationsgrenzen $r_1 = 0$ und $r_2 = r(I_\lambda = 0)$ gefordert und sichergestellt, dass bis zur Ionisation eines Teilchens alle ausgesandten Photonen erfasst werden. In kühlen, dichten Divertorplasmen beispielsweise sind die genannten Voraussetzungen nicht immer erfüllt, sodass hier auf effektive, von Experiment und Beobachtungsort abhängige Konversionsfaktoren $E_{\text{Ph,eff}}$ zurückgegriffen werden muss und insbesondere $E_{\text{Ph,eff}} = S/XB$ nicht mehr gilt.

Darüber hinaus müssen im allgemeinen Fall zur vollständigen Beschreibung sowohl die Ionisationen aus allen Niveaus i als auch alle möglichen Anregungen von diesen Niveaus aus auf das Niveau j und von dort die möglichen Abregungen auf das Niveau k berücksichtigt werden (z.B. [5]):

$$\Gamma_A = \sum_i \frac{4\pi}{h\nu_{jk}} I_{jk} \frac{S_i}{X_{ij} B_{jk}}. \tag{57}$$

4.5 Eindringtiefen

Gleichung (49) kann unter der Annahme, dass die Geschwindigkeitsänderung des Teilchens auf seinem Weg durch das Plasma vernachlässigbar ist, umformuliert werden zu

$$v_A \frac{dn_A}{n_A} = -n_e S dr. \quad (58)$$

Durch Integration entlang des Weges r erhält man folgenden Zusammenhang, der ausgehend von einer initialen Neutralteilchenanzahl $n_A(r_0)$ die nach einer Weglänge r noch verbliebenen Neutralteilchen angibt:

$$n_A(r) = n_A(r_0) \cdot \exp\left(-\frac{r}{\lambda_{\text{Ion}}}\right) \quad (59)$$

Hierbei wurde die Ionisationslänge

$$\lambda_{\text{Ion}} = \frac{v_A}{n_e S} \quad (60)$$

eingeführt, die eine mittlere Weglänge darstellt, nach der die initiale Neutralteilchenanzahl auf $1/e$ abgefallen ist, und die auch als Eindringtiefe bezeichnet wird. Auch dies gilt wieder nur unter der Annahme eines auf der betrachteten Weglänge sich vernachlässigbar ändernden Ionisationsratenkoeffizienten S und unter der Annahme einer mittleren MAXWELL-verteilten Teilchengeschwindigkeit $v_A = \frac{1}{n_A} \int v_A f_{v_A}(T_e) dv$. Aus Gleichung (60) wird die Bedeutung des Ionisationsratenkoeffizienten S deutlich: neben Plasmadichte und Teilchengeschwindigkeit bestimmt er als atomare Größe, welchen mittleren Weg ein Teilchen im Plasma innerhalb einer bestimmten Ionisationsstufe bis zur nächsten Ionisation zurücklegen kann. Damit stellt er eine elementare Größe dar, um die Wechselwirkung eines Teilchens mit dem Plasma beschreiben zu können und deren Kenntnis daher von hoher Wichtigkeit ist.

5 Datenlage der Ionisations- und Anregungsratenkoeffizienten

Zur Beschreibung der Ionisations- und Anregungsvorgänge, die in ein Plasma einlaufende Teilchen erfahren, sind nach Kap. 4.1 die Ionisationsratenkoeffizienten $S(T_e) = \langle v_e \sigma_S \rangle(T_e)$ des relevanten Ionisationszustandes und die Anregungsratenkoeffizienten $X(T_e) = \langle v_e \sigma_X \rangle(T_e)$ der betrachteten Linie die elementaren Größen. In diesem Kapitel soll eine Übersicht über die verschiedenen in dieser Arbeit verwendeten Datensätze gegeben werden.

5.1 Ionisationsratenkoeffizienten

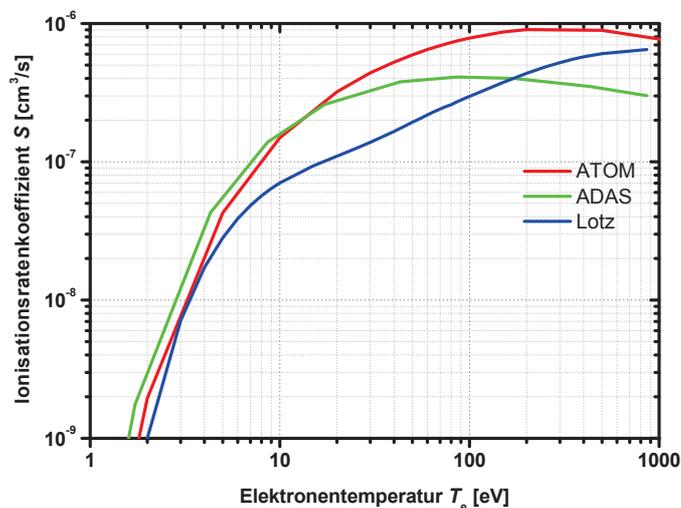
Für den neutralen Zustand des Wolframs existieren für S außer im Bereich um $T_e = 20$ eV [88] keine Messwerte, sondern ausschließlich gerechnete Daten. Direkte Atomstrahlexperimente für W^0 sind bisher nicht realisiert worden, da dazu eine Quelle neutralen Wolframs steuerbarer Intensität notwendig ist. Im Gegensatz dazu kann die Anzahl der Atome höherer Ionisationszustände durch Massenspektrometer bestimmt werden. Abbildung 12(a) zeigt die mit dem ATOM-Code [89] und von ADAS [22] bezogene Ionisationsratenkoeffizienten fuer W^0 sowie die Resultate für Rechnungen mit der LOTZ-Formel [48].

ATOM-Datensatz Die in [89] beschriebenen und in dieser Arbeit als Ausgangspunkt der PSICO-Simulationen benutzten Ionisationsratenkoeffizienten wurden unter Verwendung des ATOM-Codes [64] in der BORN-Näherung errechnet, wobei sowohl direkte Einfach- und Mehrfachionisation als auch Autoionisation berücksichtigt wurden. Rechnerisch sind die Ionisation von W^+ zu W^{2+} und von W^0 zu W^+ ähnlich behandelbar. Dabei können die ermittelten Ratenkoeffizienten für W^+ durch experimentelle Daten überprüft werden und stimmen damit innerhalb von 20% Abweichung überein, während direkte Atomstrahlexperimente für W^0 nicht existieren. Daher wird hier angenommen, dass sich für die Ionisationsratenkoeffizienten von W^0 aufgrund der ähnlichen Behandelbarkeit eine vergleichbare Genauigkeit ergibt.

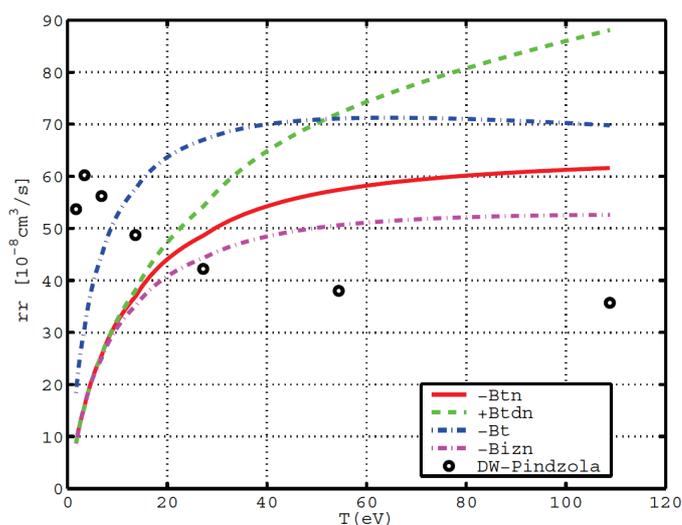
In Abbildung 12(b) sind die Ergebnisse der ATOM-Rechnungen dargestellt. Der gegen die Elektronentemperatur aufgetragene Faktor $rr(T_e)[10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}]$ wird in [89] zur einfacheren Berechnung eingeführt und ist über

$$\langle v_e \sigma_S \rangle = rr \times 10^{-8} \times \exp(-\Delta E/T_e) \quad (61)$$

unter Verwendung einer MAXWELLSchen Geschwindigkeitsverteilung mit dem Ionisationsratenkoeffizienten verknüpft. Die Größe ΔE stellt in diesem Fall die erste Ionisierungsenergie des W-Atoms von 7.86 eV dar. Aufgetragen sind die Äquivalente der Wirkungsquerschnitte der einzelnen Ionisationsprozesse. „-Bt“ bzw. „-Btn“ stellen unnormiert bzw. normiert die totalen Wirkungsquerschnitte der Einzelionisation $W \rightarrow W^+ + e^-$ dar, wobei „-Bizn“ den Anteil der direkten Ionisation bezeichnet. „+Btdn“ ist die Summe von Einzel- und Doppelionisation $W \rightarrow W^{2+} + 2e^-$ (höhere Ionisationsschritte sind vernachlässigbar). Die im Folgenden verwendeten Ionisationsratenkoeffizienten wurden unter Verwendung



(a)



(b)

Abbildung 12: (a) Vergleich der berechneten Ionisationsratenkoeffizienten für $W^0 \rightarrow W^+$ nach ATOM (rot), ADAS (grün) und LOTZ (blau) in Abhängigkeit der Elektronentemperatur. (b) [89] Darstellung der Beiträge zu den in dieser Arbeit genutzten Ionisationsratenkoeffizienten „+Btdn“ in Abhängigkeit der Elektronentemperatur. Die Größe rr ist über $\langle v_e \sigma_S \rangle = rr \times 10^{-8} \times \exp(-\Delta E/T_e)$ mit dem Ionisationsratenkoeffizienten verknüpft. „-Bt“ bzw. „-Btn“: unnormierter bzw. normierter totaler Wirkungsquerschnitt der Einzelionisation $W \rightarrow W^+ + e^-$. „-Bizn“: Anteil der direkten Ionisation. „+Btdn“: Summe von Einzel- und Doppelionisation $W \rightarrow W^{2+} + 2e^-$. Zum Vergleich sind die Werte einer weiteren Rechnung zur Bestimmung der direkten Ionisation durch Pindzola und Griffin [62] mittels der *distorted wave*-Methode gezeigt („DW-Pindzola“).

der Summe „+Btdn“, die sowohl Einfach- und Zweifach- als auch Autoionisation beinhaltet, berechnet.

Zum Vergleich sind die Werte einer weiteren Rechnung zur Bestimmung der direkten Ionisation durch Pindzola und Griffin [62] mittels der *distorted wave*-Methode gezeigt („DW-Pindzola“), die einmal mehr die möglichen Abweichungen, die sich unter Verwendung unterschiedlicher Methoden ergeben, verdeutlichen. Es ist zu erkennen, wie „+Btdn“ und „DW-Pindzola“ im Bereich um 5 eV maximal um etwa einen Faktor 6 voneinander abweichen, während sich das Verhältnis um 55 eV umkehrt und dann die Pindzola-Werte etwa einen Faktor 0.6 tiefer liegen.

ADAS-Datensatz Als grüne Kurve in Abb. 12(a) gezeigt sind die Ionisationsratenkoeffizienten der ADAS-Datenbasis [82], die tabelliert in der Datei `ca09_w.dat` (Stand: 05.08.2014) unter [22] aufgerufen werden können. Diese Daten werden unter Verwendung der semi-empirischen Näherungsformel nach Burgess and Chidichimo [82]

$$\sigma_S^{\text{Burg,Chid}}(z, \chi_i, \zeta_i, E_{\text{ein}}) = C \zeta_i (I_{\text{H}}/E_{\text{ein}}) (I_{\text{H}}/\chi_i) \ln(E_{\text{ein}}/\chi_i) w(E_{\text{ein}}/\chi_i) \pi a_0^2 \quad (62)$$

ermittelt mit der Normierung auf das Ionisationspotential des Wasserstoffs I_{H} und dem BOHRschen Atomradius a_0 . Dabei wird die jeweilige Schalenstruktur der Schale i über die Schalenbesetzung ζ_i und die Ionisationspotentiale χ_i berücksichtigt. Die Größen C und $w(E_{\text{ein}}/\chi_i)$ stellen Anpassungsfaktoren dar, wobei letzterer das Verhalten in der Nähe der Schwellenenergie für neutrale Systeme verbessert. Werden die Ionisationsquerschnitte mehrerer Schalen zu Gruppen I zusammengefasst, ergibt sich die Näherungsformel

$$\sigma_S^{\text{approx}}(E_{\text{ein}}) = \sum_I c_I \sum_{i \in I} \sigma_S^{\text{Burg,Chid}}(z, \chi_i, \zeta_i, E_{\text{ein}}), \quad (63)$$

wobei hier über die Gruppen I summiert wird und c_I einen von der Schalengruppe abhängigen Anpassungsparameter darstellt. Diese Zusammenfassung der Schalen zu Gruppen stellt einen Vorteil der ADAS-Berechnungen dar, da dadurch die Rechnungen deutlich vereinfacht werden können.

Darüber hinaus müssen, je nach Größe des Beitrags, auch Autoionisationsprozesse mit einbezogen werden.

Letztlich werden die Ionisationsquerschnitte dann zur Bestimmung der Ionisationsratenkoeffizienten für eine mittlere Elektronentemperatur T_e über eine MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung integriert.

Lotz-Datensatz Die blaue Kurve in Abb. 12(a) stellt die Rechnungen unter Verwendung der semi-empirischen LOTZ-Formel [48] dar, die den totalen Wirkungsquerschnitt σ_S für die einfache Ionisation aus dem Grundzustand angibt:

$$\sigma_S = \sum_{i=1}^N a_i q_i \frac{\ln(E_{\text{ein}}/P_i)}{E_{\text{ein}}/P_i} \{1 - b_i \exp[-c_i(E_{\text{ein}}/P_i - 1)]\} \text{ mit } E_{\text{ein}} \geq P_i. \quad (64)$$

Hierin ist E_{ein} die kinetische Energie des einfallenden Elektrons, P_i die Bindungsenergie eines Elektrons der Schalen $i = 1, \dots, N$, über die summiert wird, q_i die Anzahl der Elektronen innerhalb einer Schale und a_i , b_i und c_i drei freie Parameter, die vom Element und der Schale i abhängen. Die Werte dieser Parameter müssen durch Vergleiche mit gemessenen Daten gefunden [8, 54] oder extrapoliert werden, falls – wie für W^0 – keine experimentellen Daten zur Verfügung stehen.

5.2 Anregungsratenkoeffizienten

Die temperaturabhängigen Anregungsratenkoeffizienten $X_{ij}(T_e)$ für die Anregung von einem Niveau i aus auf ein höhergelegenes Niveau j lassen sich unter bestimmten Voraussetzungen nach der semi-empirischen VAN REGEMORTER-Formel [90] errechnen:

$$X_{ij}(T_e)[\text{cm}^3\text{s}^{-1}] = 0.11 \times 10^{-16} \cdot \frac{g_j}{g_i} \cdot A_{ji} \cdot \left(\frac{R_y}{\Delta E_{ji}} \right)^3 \cdot \bar{g}(T_e) \cdot \exp(-\beta_{\text{ex}}) \quad (65)$$

mit

g_j, g_i : statistische Gewichtung der Übergänge

A_{ji} : Übergangswahrscheinlichkeit vom angeregten Niveau j auf das tiefergelegene Ausgangsniveau i

R_y : Rydbergkonstante

ΔE_{ji} : Energiedifferenz der Niveaus j und i

$\bar{g}(T_e) = \sqrt{\beta} \ln(2 + 1/(1.78\beta_{\text{ex}}))$ GAUNT-Faktor

$\beta = R_y/T_e$

$\beta_{\text{ex}} = \Delta E/T_e$

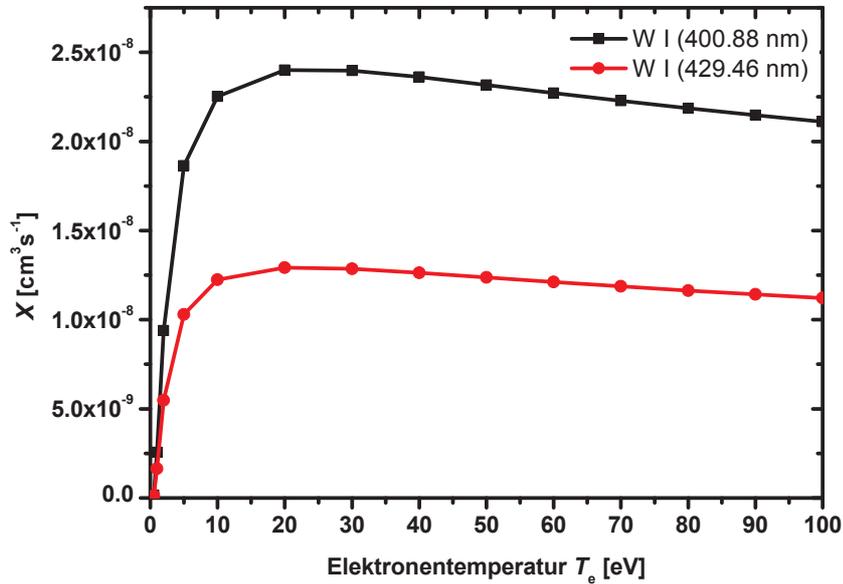
Die Anwendung der im Allgemein nach VAN REGEMORTER benannten Formel beschränkt sich auf optisch erlaubte Dipolübergänge (mit der Änderung der Drehimpulszahl $\Delta l = \pm 1$).

In einer anderen Formulierung, aus der obige Gleichung hervorgeht, ist die Beziehung zwischen Stoßquerschnitt σ_X und dem effektivem GAUNT-Faktor \bar{g} gegeben:

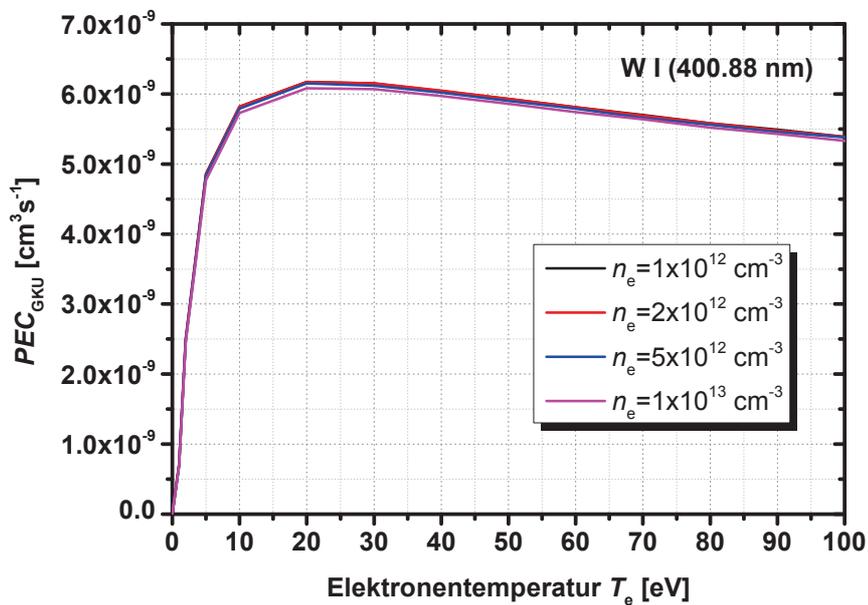
$$\sigma_X = \frac{8\pi}{\sqrt{3}} \frac{1}{E_{\text{ein}}[\text{Ry}]} \frac{f_{ij}}{\Delta E_{ji}[\text{Ry}]} \bar{g} \pi a_0^2, \quad (66)$$

mit der Oszillatorstärke f_{ij} des Überganges von i nach j und dem BOHRschen Radius a_0 . Der effektive GAUNT-Faktor ist ein Korrekturfaktor für die semiklassische Behandlungen von Absorptionsvorgängen [26] und muss zur Errechnung der Anregungsratenkoeffizienten bekannt sein. Hierzu nahm VAN REGEMORTER an, dass \bar{g} für jeden optisch erlaubten Übergang in jedem positiven Ion als Funktion der Energie E_{Streu} des im Verlauf der Anregung gestreuten Elektrons geschrieben werden kann [74]:

$$\bar{g} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \ln \left(\left(\frac{E_{\text{Streu}}}{\Delta E_{ji}} \right)^2 \right). \quad (67)$$



(a)



(b)

Abbildung 13: (a) Nach der VAN REGEMORTER-Formel berechnete Anregungsratenkoeffizienten X für die Linien W I (400.88 nm) (schwarz) und W I (429.46 nm) (rot). (Die atomaren Daten beider Linien sind in Tabelle 10 zu finden.) (b) GKU-Berechnung [6] des PEC_{GKU} für W I (400.88 nm).

Für Einfallenergien $E_{\text{ein}} \approx E_{\text{Streu}} \gg 1$ gilt dann: $\bar{g} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \ln\left(\left(\frac{E_{\text{Streu}}}{\Delta E_{ji}}\right)^2\right) = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \ln\left(\frac{E_{\text{ein}}}{\Delta E_{ji}}\right)$. Da \bar{g} für kleine Einfallenergien zunächst unbekannt ist, wählte VAN REGEMORTER \bar{g} so, dass Gleichung (66) in Übereinstimmung mit den zu dieser Zeit verfügbaren experimentellen und theoretischen Resultaten war.

Abb. 13(a) zeigt die für den Übergang der W I (400.88 nm)-Linie errechneten Werte mit [58]

oberem Niveau j : $5d^5(^6S)6p\ ^7P^\circ\ 4$,

unterem Niveau i : $5d^5(^6S)6s\ ^7S\ 3$,

$g_j = 4$,

$g_i = 3$,

$A_{ji}(400.88\text{ nm}) = 1.63 \times 10^7\text{ s}^{-1}$,

$\Delta E = E_j - E_i = 3.457879\text{ eV} - 0.365913\text{ eV} = 3.0920\text{ eV}$.

5.3 Photoemissionsratenkoeffizienten

Im Korona-Gleichgewicht ist die Anzahl der Anregungsvorgänge eines Niveaus j ausgehend von einem Niveau i gleich der Anzahl der Abregungsvorgänge in Form emittierter Photonen. Welcher Bruchteil an Photonen beim Übergang vom oberen Niveau j auf ein tiefergelegenes Niveau i' abgestrahlt wird, hängt vom Verzweigungsverhältnis $B_{ji'}$ ab. Zusätzlich wird der Besetzungs- und Abregungsvorgang durch eine mögliche Besetzung aus höheren Zuständen heraus durch Kaskadierung und durch Niveau-Mischung verkompliziert.

Zur Berechnung der Teilchenflüsse ist man effektiv an der Anzahl der tatsächlich bei einer Linie emittierten Photonen interessiert. Daher ist es hilfreich, für die betrachteten Linien einen Photoemissionsratenkoeffizienten $\mathcal{PEC}_{ji'}$ zu definieren. Dieser lässt sich beispielsweise mit dem Stoß-Strahlungs-Code GKU [6, 7] auch unter Berücksichtigung von Niveau-Mischung und Besetzungsvorgängen eines Niveaus von oben durch Kaskaden berechnen:

$$\mathcal{PEC}_{ji'} = \frac{n_j A_{ji'}}{n_i n_e} \quad (68)$$

mit n_i der Teilchendichte der Atome im unteren Zustand und n_j der Dichte der Atome im angeregten Zustand.

Der GKU-Code löst dabei ein System von Bilanzgleichungen, das die zeitliche Änderung in der Population der Energieniveaus n_j wie in Gleichung (39) in Abhängigkeit von Plasmadichte und -temperatur beschreibt. Die Anzahl der an dieser Bilanz effektiv beteiligten Niveaus ist zwar begrenzt, kann aber dennoch für komplizierte Systeme wie ein W-Atom sehr groß sein. Berücksichtigt in den GKU-Rechnungen sind Elektronenstoßanregung, Strahlungsabregung und Elektronenstoßionisation aus dem Grundzustand, während die Photorekombination unter den gegebenen optisch dünnen Plasmen bei kleinen Dichten in der TEXTOR-Randschicht, die hier ausschließlich betrachtet werden, vernachlässigbar ist, ebenso wie Ionenstöße.

Die von GKU benötigten Eingabeparameter sind die Ionisationsratenkoeffizienten, die wie oben beschrieben mit dem ATOM-Code berechnet wurden, die Niveauenergien $E_{i=1,\dots,N}$, die Wellenlängen der abgestrahlten Linien $\lambda_{ji'}$ sowie deren Übergangswahrscheinlichkeiten $A_{ji'}$, die der NIST-Datenbasis entnommen werden können [58]. Die Anregungsratenkoeffizienten werden mittels der VAN REGEMORTER-Formel berechnet, womit hier aufgrund der komplizierten Kopplung von Konfigurationen im W-Atom eine Vereinfachung in Form der Dipol-Näherung gemacht wird.

Eine weitere Annahme muss für die Besetzung der fünf niedrigsten Energieniveaus – der „Grundzustände“ – des neutralen W-Atoms gemacht werden. Diese liegen energetisch weniger als 1 eV voneinander entfernt, weshalb, da die tatsächliche Besetzung dieser Zustände unbekannt ist, angenommen wird, dass die Startpopulation gemäß einer BOLTZMANN-Verteilung vor Interaktion mit dem Plasma über diese Niveaus verteilt ist. Diese Verteilung wird mit dem Parameter T_W für die Grundzustandenergie beschrieben, der für die errechneten $\mathcal{PEC}_{\text{GKU}}$ mit $T_W = 0.3 \text{ eV}$ angenommen wurde, da sich somit Werte ergeben, die mit den experimententellen Befunden am besten übereinstimmen [6].

Abb. 13(b) zeigt die für die W I (400.88 nm)-Linie errechneten $\mathcal{PEC}_{\text{GKU}}$ in Abhängigkeit der Temperatur. Da die \mathcal{PEC} effektive Werte darstellen, ist nach Gleichung (68) auch eine schwache Dichteabhängigkeit gegeben, die im betrachteten Dichtebereich aber vernachlässigbar ist [36].

Für den einfachsten anzunehmenden Fall eines oberen Niveaus j , das aus genau einem unteren Niveau i ohne Kaskaden aus höheren Niveaus oder Niveau-Mischung befüllt wird und sich dann über Photoemission auf ein Niveau i' mit dem Verzweigungsverhältnis $B_{ji'}$ abregt, gilt

$$\frac{S}{X_{ij}B_{ji'}} = \frac{S}{\mathcal{PEC}_{ji'}}, \quad (69)$$

mit dem $\mathcal{PEC}_{ji'}$ dieses speziellen Überganges $j \rightarrow i'$. Im Allgemeinen ist dieser einfache Zusammenhang jedoch nicht erfüllt. Das in der Praxis zu verwendende Verhältnis ist dann durch die rechte Seite der Gleichung gegeben.

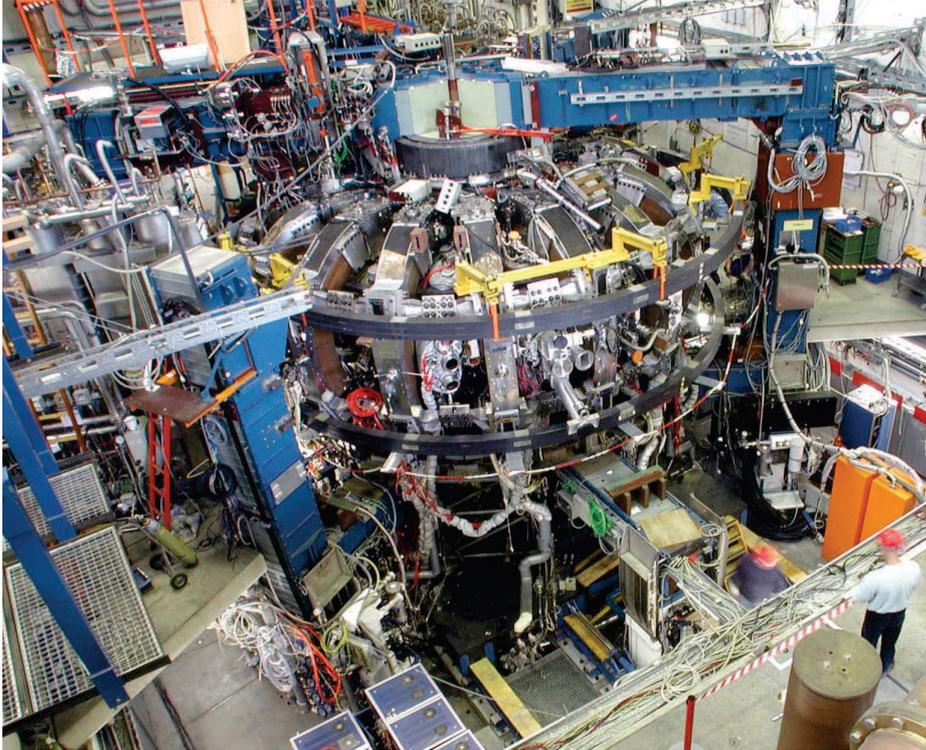


Abbildung 14: Ansicht von TEXTOR während einer Umbauphase. In blau zu sehen sind die Transformatorjoche. Das eigentliche Plasmagefäß ist nur an einigen Stellen in den Lücken zwischen den 16 Toroidal­feldspulen zu sehen, die das Gefäß umgeben. Ebenfalls zwischen diesen Spulen zu sehen sind einige Flansche, die als Zugang für verschiedenste diagnostische Systeme dienen.

6 Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel sollen die für diese Arbeit relevanten Daten bzgl. des Fusionsexperiments TEXTOR und eine Beschreibung sowohl des W-Zer­stäubungsexperiments als auch des WF_6 -Injektionsexperiments gegeben werden. Grundlegend sind hierbei die spektroskopischen Systeme und die Diagnostiken zur Messung von Elektronendichte und -temperatur am Plasmarand.

6.1 Das Fusionsexperiment TEXTOR

6.1.1 Aufbau

Der Name TEXTOR steht für **T**orus **EX**periment for **T**echnology **O**riented **R**esearch. TEXTOR (Abb. 14) ist ein Tokamak-Experiment mittlerer Größe mit großem Radius

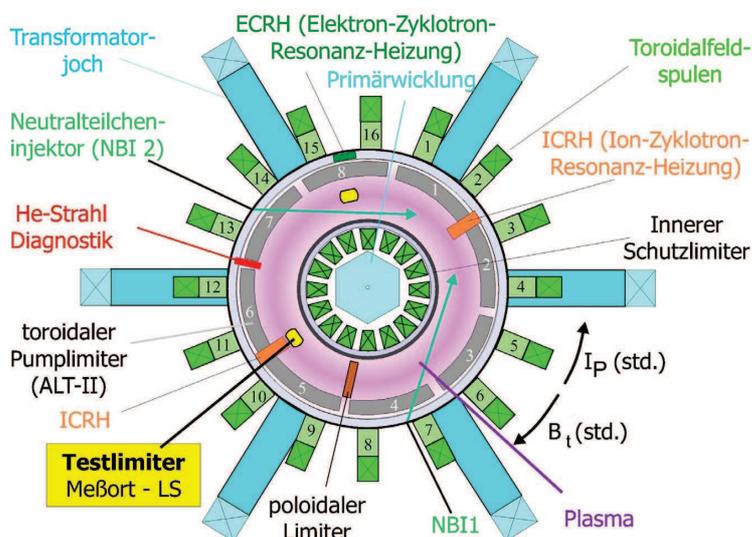


Abbildung 15: Toroidaler Schnitt durch TEXTOR.

$R = 1.75$ m (entspricht dem Abstand TEXTOR-Zentrum – Plasmazentrum) und kleinem Radius $a = 0.46$ m (entspricht dem Abstand Plasmazentrum – LCFS) [73, 78]. Das Experiment wurde im Jahre 1981 in Betrieb genommen und stellt nach dem Tokamak- bzw. Transformatorprinzip ein Experiment zur Untersuchung der Plasmarandschicht und der Plasma-Wand-Wechselwirkung dar [55, 73]. Bis zum Dezember 2013 (letzte Plasmaentladung: #121007) wurde es vom Institut für Energie- und Klimaforschung 4 – Plasma-physik im Forschungszentrum Jülich sowie im Zusammenschluss des Trilateral European Clusters (TEC) betrieben und danach rückgebaut.

Maximal ist eine Pulslänge von etwa 10 s möglich, wobei die stationäre Phase (Flat-Top-Phase) der in dieser Arbeit betrachteten Entladungen für die WF₆-Experimente bei etwa 5 s lag. Während der Zerstäubungsexperimente wurden während derselben Entladung 4 unterschiedliche Flat-Top-Phasen von je etwa 1 s Dauer gefahren (Abb. 21).

In Abbildung 15 ist eine Aufsicht in die Mittelebene von TEXTOR mit einer Übersicht der im Folgenden genannten Schleusen, begrenzenden Elemente, Heizungen und Diagnostiken gezeigt. Die toroidale Koordinate ϕ_{tor} hat ihren Ursprung zwischen Sektion 1 und 16 und läuft gegen den Uhrzeigersinn.

Die erste Wand des TEXTOR-Gefäßes, Liner genannt, besteht aus Inconel625, wird standardmäßig zum Ausdampfen flüchtiger Spezies wie Sauerstoff und Wasser auf 420 K geheizt und liegt mit einem Radius von $r = 0.55$ m im Abstand von 9 cm hinter der LCFS. Diese wird durch den toroidalen, aus 28 Graphitziegeln bestehenden Pumplimiter ALT-II (engl. **A**dvanced **L**imiter **T**est) auf der Niederfeldseite des Magnetfeldes bei $r_{\text{LCFS}} = 0.46$ cm definiert. Aufgeteilt sind diese 28 Ziegel auf acht sogenannte Blätter [84].

Die 16 das Plasmagefäß umgebenden Toroidalfeldspulen erzeugen das zum Einschluss des Plasmas erforderliche toroidal Magnetfeld B_t . Dessen Stärke im Plasmazentrum kann zwischen 1.8 T und 2.8 T variiert werden und lag für alle Entladungen dieser Arbeit standardmäßig bei $B_t = 2.25$ T. Die Transformatorjoche dienen zur Verstärkung des Magnetfeldes der Primärfeldspulen im Zentrum von TEXTOR, welches nach dem Transformatorprinzip einen Plasmastrom I_P zwischen 0.2 MA und 0.8 MA bei standardmäßig $I_P = 0.35$ MA induziert und das Plasma durch seinen eigenen Widerstand nach dem OHMSchen Prinzip mit etwa $P_{\text{OHM}} = 0.5$ MW heizt.

Die Einspeisung der Leistung wird über das Zusatzheizsystem (engl. auxiliary heating) der Wasserstoff- und Deuterium-Neutralteilcheninjektoren (engl. **N**eutral **B**eam **I**njection, NBI) mit $P_{\text{aux}} = 1.2$ MW erhöht. Diese nutzen zur Injektion eine Beschleunigungsspannung von maximal 55 kV und injizieren die Teilchen bzgl. des Plasmastroms in Co- bzw. Counter-Richtung mit jeweils bis zu 2 MW [87]. Darüber hinaus stehen eine Ion-Zyklotron-Resonanz-Heizung (engl. ion cyclotron resonance heating, ICRH) mit zwei Antennen zu jeweils bis zu 2 MW Heizleistung [59] sowie eine Elektron-Zyklotron-Resonanz-Heizungen (engl. **E**lectron **C**yclotron **R**esonance **H**eating, ECRH) mit bis zu 0.2 MW Heizleistung [77] zur Verfügung (in den nachfolgend beschriebenen Experimenten nicht eingesetzt).

In den beiden Schleusensystemen LL1 (engl. **L**imiter **L**ock) und LL3 (in dieser Arbeit nicht genutzt, Benennung historisch bedingt) ist das Einbringen sogenannter Test-Limiter (also zusätzlicher plasmabegrenzender Elemente, die dem Plasmafluß ausgesetzt werden) in das Plasmagefäß möglich. Diese befinden sich bei $\phi_{\text{tor}} = 22.5^\circ$ bzw. 135° . LL1 befindet sich an der Unterseite des Gefäßes beim poloidalen Winkel $\theta_{\text{pol}} = 270^\circ$, gemessen gegen den Uhrzeigersinn mit dem Ursprung in der Mittelebene auf der Hochfeldseite (siehe auch Abb. 16). LL3 ist an der Oberseite des TEXTOR-Gefäßes bei $\theta_{\text{pol}} = 90^\circ$ positioniert.

Essentiell zur Charakterisierung eines Plasmas sind die Elektronendichte und die Elektronentemperatur. Im Plasmazentrum wird die liniengemittelte Dichte mit dem HCN-Interferometer bestimmt [38], während die Elektronentemperatur über die ECE (engl. **E**lectron **C**yclotron **E**mission) ermittelt wird [86]. Beispiele zur Messung der Zentrumsdaten sind in Abb. 21 gezeigt.

6.2 Messung der Plasmaparameter am Plasmarand

Da die für diese Arbeit durchgeführten Experimente den Plasmarand betreffen, ist die Messung der Randdaten von besonderer Wichtigkeit.

Die dazu genutzte aktive He-Strahl-Diagnostik ist in Sektion 12 und 13 etwa 5° oberhalb der äußeren Mittelebene bei $\phi_{\text{tor}} = 90^\circ$ positioniert [76]. Eine weitere aktive Diagnostik zur Messung dieser Parameter ist die Überschall-He-Strahl-Diagnostik SHE (engl. **S**uper **S**onic **H**ELium **B**eam) zwischen Sektion 1 und 2 an der Oberseite des Gefäßes [39].

Hierbei wird vorausgesetzt, dass die Plasmaparameter, gemessen an der jeweiligen Position der He-Diagnostiken, mit denen am Ort von LL1 übereinstimmen, obwohl sich dieser poloidal und toroidal von der Position der Diagnostiken unterscheidet. Diese Übereinstimmung wurde in [44] durch lokale Messungen gezeigt.

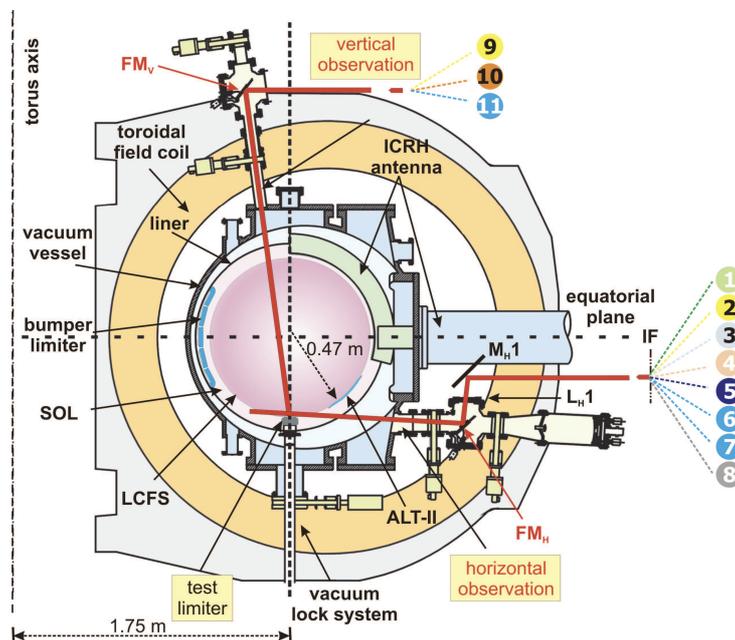


Abbildung 16: Poloidaler Schnitt durch TEXTOR.

6.3 Spektroskopischer Aufbau

Zur spektroskopischen Analyse der nachfolgend beschriebenen Experimente wurden die Daten dreier Systeme an LL1 ausgewertet, deren Sichtlinie auf den Test-Limiter bzw. die WF_6 -Injektion jeweils die gleiche war [13, 15] (siehe rote horizontale Sichtlinie in Abb. 16), und die in Kombination eine gute räumliche, zeitliche als auch spektrale Auflösung erlauben:

1. Zur räumlichen Beobachtung der Emissionsmuster eine 2D CCD-Kamera (Proxitronic, RL4) mit MCP-Verstärkern (Proxifier mit S20-Kathode) und einem 18:11 optischem und UV-Faser-Taber. Die zeitliche Auflösung betrug 40 ms. Vorgesetzt war ein Filtrerrad, das mit maximal vier Interferenzfiltern gleichzeitig bestückt werden kann. Folgende Filter wurden eingesetzt:

$$\lambda = (400.8 \pm 0.5) \text{ nm für } W \text{ I (400.88 nm)}$$

$$\lambda = (505.3 \pm 0.8) \text{ nm für } W \text{ I (505.33 nm)}$$

$$\lambda = (522.5 \pm 0.5) \text{ nm für } W \text{ I (522.47 nm)}.$$

2. Ein räumlich integrierendes CZERNY-TURNER-Kompaktspektrometer (*Avantes AvaSpec*) im Wellenlängenbereich $\lambda = 195 - 463 \text{ nm}$ und einer Integrationszeit von 32 ms.
3. Ein hochauflösendes räumlich integrierendes Echelle-Spektrometer (*Spectrelle 20000*) im Wellenlängenbereich $\lambda = 364 - 715 \text{ nm}$ mit Echelle-Gitter und einem Prisma als

prä-dispersivem Element, sowie einem EMCCD-Detektor mit einstellbarer elektronischer Verstärkung. Die spektrale Auflösung dabei beträgt annähernd konstant $\lambda/\Delta\lambda = 20000$ [14]. Dieses Spektrometer bildet die Hauptdiagnostik zur Messung der diversen W-Linien (Kap. 9) und zur Bestimmung der W-Photoeffizienzen (Kap. 10). Die Integrationszeit betrug in den meisten Fällen 200 ms.

6.4 Absolutkalibration der spektroskopischen Systeme

Zur Bestimmung der W-Photoeffizienzen als dem Verhältnis von im Plasma befindlichen W-Teilchen zur Anzahl der bis zur nächsten Ionisationsstufe emittierten Photonen ist es notwendig, die Spektrometer absolut zu kalibrieren. Dies bedeutet, mittels einer Quelle bekannter Intensität (z.B. in Photonen/s) den wellenlängenabhängigen Umrechnungsfaktor (Response-Faktor) zwischen auf dem Spektrometer-Chip ausgelösten Zählern (Counts) und der entsprechenden Anzahl eingefallener Photonen zu bestimmen – die Quantenausbeute. Dazu wurde eine Ulbrichtkugel am Ort der Experimente während einer TEXTOR-Öffnung im Gefäß positioniert und mit den beschriebenen Diagnostiken aufgenommen. Am Beispiel der Absolutkalibration des Echelle-Spektrometers *Spectrelle 20000* [14] soll dies illustriert werden.

Hierzu wurde als Lichtquelle definierter Stärke eine Ulbrichtkugel von $d_{\text{USS600}} = 6 \text{ in} = 15.2 \text{ cm}$ Durchmesser mit einer Öffnung von $d_{\text{Port,USS600}} = 2 \text{ in} = 5.1 \text{ cm}$ (Labsphere, USS600), die zuvor mit einer zertifizierten Ulbrichtkugel mit $d_{\text{USS1200}} = 12 \text{ in} = 30.5 \text{ cm}$ und $d_{\text{Port,USS1200}} = 4 \text{ in} = 10.2 \text{ cm}$ (Labsphere, USS1200) kreuzkalibriert wurde. Für die große Referenzquelle USS1200 wurde die Intensität der Lichtemission bereits vom Hersteller vermessen. Damit ist es nun möglich, die Intensität der USS600 in $\frac{\text{Photonen}}{\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \mu\text{m}}$ anzugeben. Im Gegensatz zur Referenzquelle kann die kleinere USS600 auch am Ort des Experiments in TEXTOR zur Absolutkalibration eingesetzt werden. Beide Ulbrichtkugeln wurden mittels eines Mehrkanalspektrometers (*Avantes AvaSpec*) mit $\lambda = 298\text{-}889 \text{ nm}$ kreuzkalibriert.

Abbildung 17(a) zeigt die vom Hersteller gelieferte Absolutkalibration der spektralen Radianz [$\text{mW}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \mu\text{m})$] der USS1200. Mit dieser kann über die Kreuzkalibration (nach Untergrundkorrektur) die spektrale Radianz [$\text{mW}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \mu\text{m})$] der USS600 in

6.4 Absolutkalibration der spektroskopischen Systeme

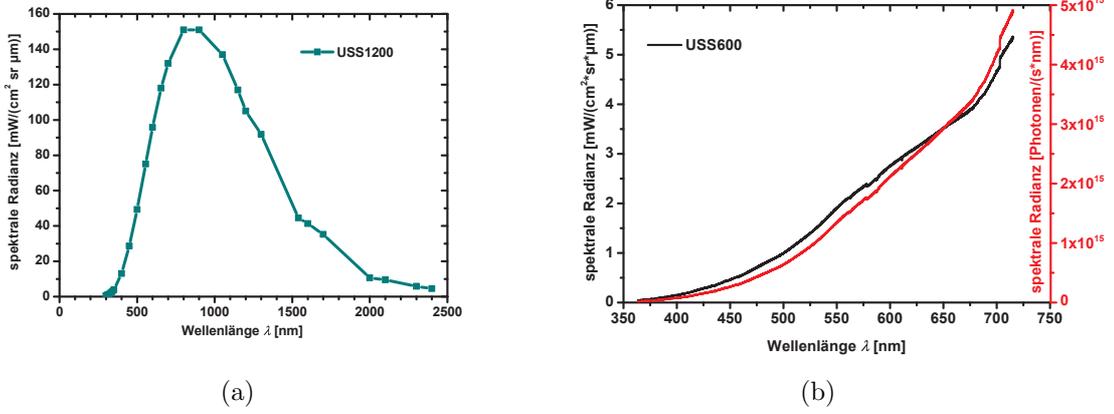


Abbildung 17: (a) Diskrete spektrale Radianz der USS1200 wie vom Hersteller zertifiziert. (b) Kreuzkalibrierte spektrale Radianz der USS600 in $\text{mW}/(\text{cm}^2 \text{ s sr } \mu\text{m})$ bzw. in $\text{Photonen}/(\text{s nm})$ (entspricht dem Photonenstrom pro nm).

Abb. 17(b) ermittelt werden. Die weitere Umrechnung ergibt sich folgendermaßen:

$$[R_{\text{spek, USS600}}(\lambda)] = \frac{\text{mW}}{\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \mu\text{m}} \quad (70)$$

$$= \frac{\text{W}}{1000 \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot 1000\text{nm}} = \frac{\text{W}}{1 \times 10^6 \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{nm}} \cdot 4\pi$$

$$[4\pi R_{\text{spek, USS600}}(\lambda)] = \frac{\text{W}}{1 \times 10^6 \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{nm}} \cdot A_{\text{Port, USS600}}$$

$$[4\pi R_{\text{spek, USS600}}(\lambda) A_{\text{Port, USS600}}] = \frac{\text{W}}{1 \times 10^6 \cdot \text{nm}}$$

$$= \frac{\text{J}}{1 \times 10^6 \cdot \text{s} \cdot \text{nm}} \cdot \div h\nu(\lambda)$$

$$[I_{\text{Ph, USS600}}(\lambda)] = \frac{\text{Photonen}}{1 \times 10^6 \cdot \text{s} \cdot \text{nm}} \cdot \text{Dispersion}[\text{nm}/\text{Kanal}]$$

$$[I_{\text{Ph, USS600}}(\text{Kanal})] = \frac{\text{Photonen}}{1 \times 10^6 \cdot \text{s} \cdot \text{Kanal}} \quad (71)$$

Da die Position der Lichtemission während des Experiments mit der der Ulbrichtkugel während der Kalibration übereinstimmt, muss kein Raumwinkel berücksichtigt werden. Dieser ist in beiden Fällen identisch und die Radianz kann im ersten Schritt mit 4π multipliziert werden, um die gesamte von einem Punkt in den kompletten Raum abgestrahlte Lichtmenge zu erhalten. Im zweiten Schritt wird mit der abstrahlenden Fläche der Kugelöffnung multipliziert, womit sich die insgesamt von allen Flächenelementen in alle Raumrichtungen abgestrahlte Energie pro Wellenlängenintervall ergibt. Diesen Wert durch die Energiemenge $E = h\nu(\lambda)$ des Photons der entsprechenden Wellenlänge dividiert

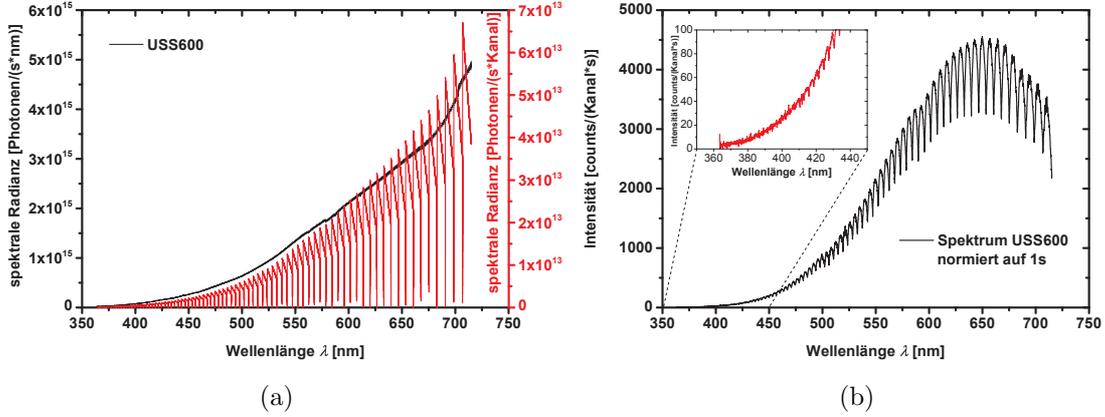


Abbildung 18: (a) Kreuzkalibrierte spektrale Radianz der USS600 in Photonen/(s nm) (entspricht dem Photonenstrom pro nm) bzw. Photonenstrom pro Kanal in Photonen/(s Kanal). Die Einbrüche nach unten kommen durch das Zusammenspiel von Prisma und Echelle-Gitter beim internen Wechsel der Ordnungen zustande. (b) Gemessenes Emissionsspektrum der in TEXTOR am Ort des Experiments positionierten USS600 während der Absolutkalibration nach Abzug des Untergrunds.

ergibt die Anzahl der pro Zeiteinheit und Wellenlängenintervall abgestrahlten Photonen (Abb. 17(b), rechte y -Achse oder Abb. 18(a)). Wird als nächstes noch die Dispersion des detektierenden Spektrometers in nm/Kanal berücksichtigt, erhält man den auf jeden Kanal einfallenden Photonenstrom I_{Ph} in Photonen pro Sekunde und Kanal (Abb. 18(a), rechte y -Achse).

Während der Kalibration mit der Ulbrichtkugel im TEXTOR-Gefäß wurde das in Abb. 18(b) gezeigt Spektrum der USS600 in der Einheit counts pro Sekunde und Kanal aufgenommen und um den elektronischen wie auch den systematischen Untergrund korrigiert. In der Abbildung ist der Ausschnitt für das Wellenlängenintervall zwischen 350 nm und 450 nm vergrößert dargestellt, da die Kalibration um $\lambda = 401$ nm von besonderer Bedeutung für die spätere Auswertung der W I (400.88 nm)-Linie ist. Hiermit lässt sich nun, indem der bekannte abgestrahlte Photonenstrom pro Kanal durch die gemessene Intensität dividiert wird, die wellenlängen- bzw. kanalabhängige Response-Funktion in Photonen pro ausgelöstem count errechnen (Abb. 19):

$$\text{Respons(Kanal)}[\text{Photonen/count}] = \frac{I_{Ph, \text{USS600}}(\text{Kanal})[\text{Photonen}/(\text{s} \cdot \text{Kanal})]}{I_{\text{Spektrale}}(\text{Kanal})[\text{counts}/(\text{s} \cdot \text{Kanal})]} \quad (72)$$

Mit dieser Konversionsfunktion können nun die im Experiment gemessenen Counts durch Multiplikation des Spektrums mit der Konversionsfunktion in Photonen umgerechnet werden (siehe z.B. das absolutkalibrierte Echelle-Spektrum einer WF₆-Injektion in Abb. 79). Berücksichtigt werden müssen dabei evtl. vorgesetzte Graufilter und die Einstellungen des EMCCD-Gain.

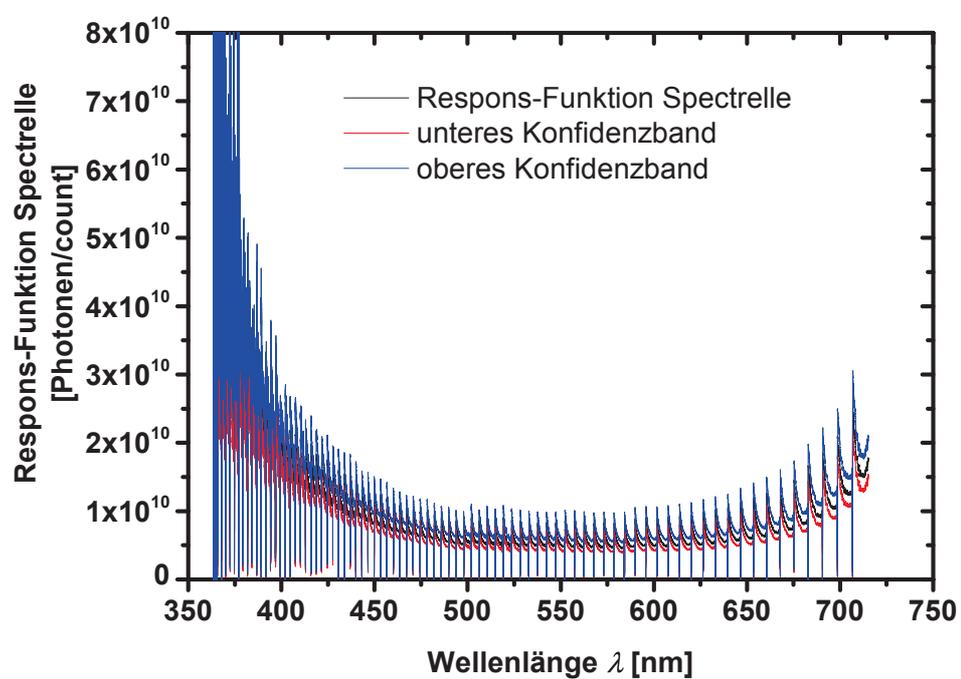


Abbildung 19: Response-Funktion des Spectrelle 20000 mit unterem und oberem Konfidenzband.

Die Ulbrichtkugeln werden mit stromstabilisierten Netzteilen betrieben, sodass Fluktuationen in der Helligkeit aufgrund von Stromschwankungen vernachlässigbar sind. Ebenso wird die Änderung der Helligkeit über die Öffnung der Kugel hinweg vom Hersteller mit 1% angegeben. Ein systematischer Fehler bei der Kreuzkalibration kann mit etwa 6% bis 16% abgeschätzt werden. Die bei Weitem größere Fehlerquelle stellt die geringe Emission der Kugel im Bereich um $\lambda = 401\text{ nm}$ dar (die geringe Intensität ist hier durch die in Richtung UV abnehmende thermische Emission der W-Glühdrähte innerhalb der USS600 bedingt), die über den Weg der optischen Aufbauten durch die Schleuse bis hin zum Spektrometer weiter abnimmt. Hier muss der statistische Fehler zwischen 25% und 35% angenommen werden. Um diesen Fehler so weit wie möglich zu minimieren, wurde das Spektrum im Bereich bis 500 nm mit einer Integrationszeit von 60 s aufgenommen und 10 mal gemittelt. Im restlichen Wellenlängenbereich wurde die von der Software als optimal ermittelte Integrationszeit von 6.7 s mit 100maliger Mittelung benutzt. Beide Teile des Spektrums wurden zu dem in Abb. 18(b) zusammengefügt und auf 1 s sowie einen EMCCD-Gain von 250 normiert.

Die charakteristischen Ausbrüche der roten Kurve in Abb. 18(a) nach unten nach Berücksichtigung der Dispersion kommen Spectrelle-intern durch den Wechsel der beitragenden Ordnung an dieser Stelle zustande und liegen im Zusammenspiel der Dispersion von Prisma und Echelle-Gitter begründet (siehe auch [29]). Je größer die Wellenlänge innerhalb einer bestimmten Ordnung, desto kleiner wird der auf einen Kanal fallende Wellenlängenbereich, bis dieser gegen Null geht, wenn ein Sprung zur nächsten Ordnung erfolgt. Diese Einbrüche können intern softwareseitig korrigiert werden. Da diese Korrektur aus Kontrollgründen aber auch während der Messungen nicht eingesetzt wurde, musste das entsprechende Verhalten mitkalibriert werden. Dies äußert sich dann auch konsequent in der Response-Funktion in Abb. 19). Aufgrund der geringen emittierten Intensität der Ulbrichtkugel wird der statistische Fehler zu kleineren Wellenlängen hin sehr groß, bis die Funktion jenseits von etwa 375 nm im Rauschen untergeht.

6.5 W-Zerstäubung

Im Zerstäubungsexperiment wurde ein sogenannter Twin-Limiter (Zwillings-Limiter), bestehend aus einer Hälfte aus Kohlenstoff (EK98), zur anderen Hälfte aus Wolfram (Plansee, 99.97% Reinheit) 0.5 cm hinter der LCFS bei $r = 46.5\text{ cm}$ im SOL exponiert. Um eine vergleichbare Oberflächenrauigkeit beider Hälften zu erreichen, wurde die Kohlenstoffhälfte zuvor poliert. Im Vorfeld des Experiments wurde der Limiter auf dieselbe Temperatur wie die TEXTOR-Wand gebracht (420 K) um flüchtige Spezies ausgasen zu lassen. Pyrometermessungen auf der Limiter-Oberfläche während des Experiments zeigen einen Anstieg der Oberflächentemperatur verursacht durch den Plasmafluss auf den Limiter. Abbildung 20 zeigt den Twin-Limiter nach einer Plasmaexposition von etwa 200 s (Flat-Top-Phase).

Während einer Serie von reproduzierbaren Entladungen wurde jeweils innerhalb einer einzigen Entladung stufenweise die zentrale Dichte und damit auch die Temperatur durch Erhöhung der Arbeitsgasmenge (Deuterium) variiert. Die Zusatzheizleistung durch

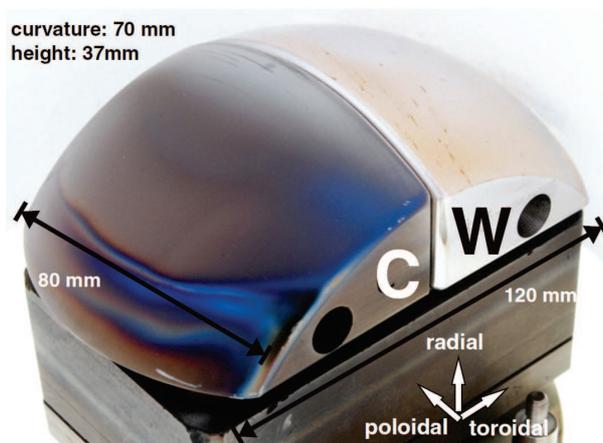


Abbildung 20: Sogenannter Twin-Limiter (eine Hälfte bestehend aus C, eine aus W) zum Einbringen in die Plasmarandschicht mittels der Schleusensysteme und der Untersuchung der Erosion unter unterschiedlichen Plasmabedingungen.

Phase #113114	$n_{e,Zentrum}$ [cm^{-3}]	$T_{e,Zentrum}$ [keV]	$n_{e,Apex}(r = 46.5\text{cm})$ [cm^{-3}]	$T_{e,Apex}(r = 46.5\text{cm})$ [eV]
I	1.8×10^{13}	2.27	$(6.0 \pm 0.6) \times 10^{12}$	85 ± 8
II	2.7×10^{13}	1.95	$(8.5 \pm 1.7) \times 10^{12}$	60 ± 6
III	3.4×10^{13}	1.68	$(10.5 \pm 2.3) \times 10^{12}$	45 ± 8
IV	6.2×10^{13}	1.43	(14.5×10^{12})	(32)

Tabelle 1: Plasmaparameter während der vier Phasen des W-Zerstäubungsexperiments.

Neutralteilcheninjektion von Wasserstoff (H) (mit dem Verhältnis der H-Menge zu Summe der H- und D-Menge $\frac{H}{H+D} \approx 0.24$) betrug standardmäßig $P_{aux} = 1.2$ MW. Zwischen den Entladungen wurden Helium-Glimmentladungen von etwa 4 min Dauer zur Reinigung der Wand durchgeführt um bei der folgenden Entladung eine gute Dichtekontrolle zu erzielen und somit reproduzierbare Entladungen zu erzeugen. Abbildung 21 zeigt die zentralen Dichte- und Temperaturdaten sowie den zeitlichen Verlauf von toroidalem Magnetfeld B_t , Plasmastrom I_P , totaler Heizleistung P_{tot} , der Heizleistung von NBI1 P_{NBI1} und der abgestrahlten Leistung P_{rad} . In Tabelle 1 sind die Daten der vier Phasen für das Plasmazentrum und am Ort des Limiter-Apex ($r_{Apex} = 46.5$ cm) zusammengefasst (die Randschichtdichte für Phase IV wurden aufgrund zu großer Unsicherheiten in der Gültigkeit des zugrundeliegenden atomaren Modells in diesem Dichtebereich nicht verwendet).

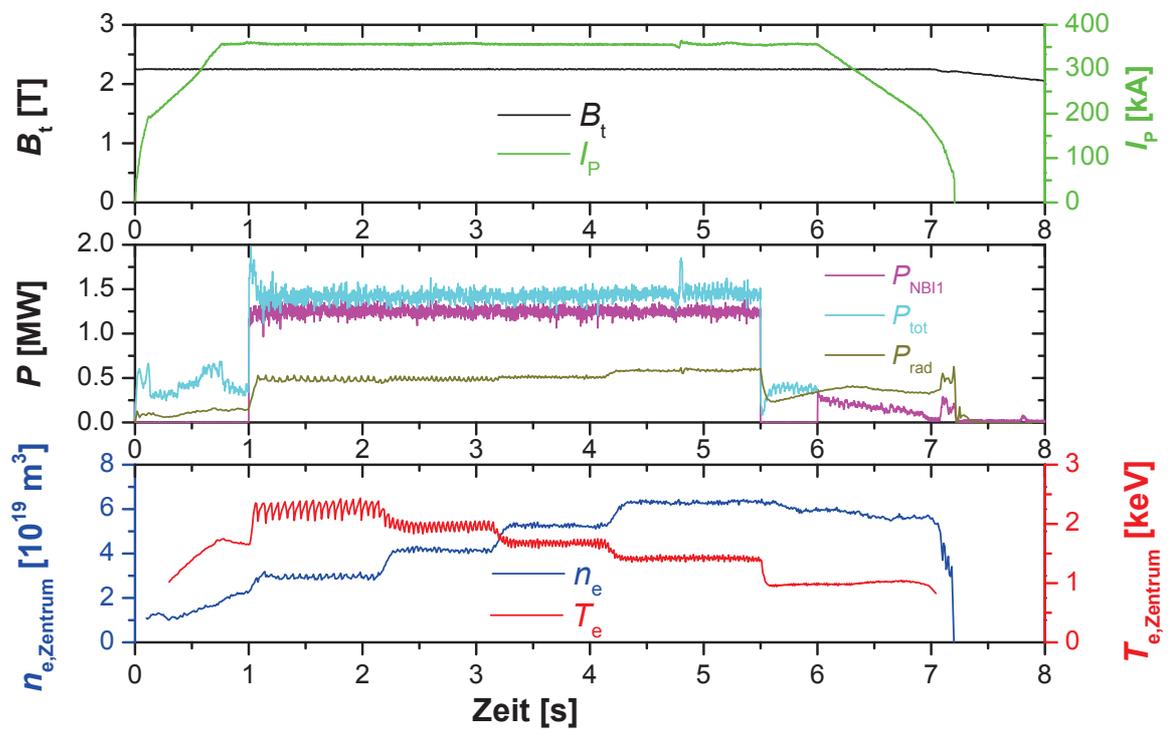


Abbildung 21: TEXTOR-Parameter und zentrale Elektronendichte und -temperatur im Zeitverlauf der Entladung #113114.

6.6 WF_6 -Injektion

Eigenschaften des WF_6 Wolframhexafluorid (WF_6) – auch Wolfram(VI)-fluorid – ist ein anorganisches, farbloses, nichtentzündliches Gas, das hauptsächlich in der Halbleiterindustrie bei der Herstellung von Schaltkreisen Anwendung findet, um W durch chemische Gasabscheidung (**C**hemical **V**apor **D**eposition, CVD) bei Niedrigdruck oder in Plasmen auf Platinen aufzubringen. [45,46] Es ist unter Standardbedingungen eines der schwersten bekannten Gase. Die wichtigsten physikalischen Eigenschaften sind in Tabelle 2 wiedergegeben. Wichtig für die praktische Verwendung ist die Einstufung als sehr giftiges (T+) Gas, das ätzend (C) auf Augen, Haut und Atemwege wirkt und in Kontakt mit Wasser sehr giftige Lösungen bilden kann [46], weshalb für die Verwendung besondere Sicherheitsvorkehrungen getroffen werden müssen. Die WF_6 -Dissoziationsstemperatur wird in der Literatur experimentabhängig [43] (wobei dort die Dissoziation wahrscheinlich auch durch Stöße mit Atomen und Ionen erfolgt und nicht nur mit den Plasma-Elektronen) mit Werten zwischen $T_{\text{Diss}} = 600 - 1100 \text{ K}$ (equivalent zu $< 0.1 \text{ eV}$) angegeben. Eine niedrige Dissoziationsstemperatur ist insofern von Vorteil, da zu vermuten ist, dass die injizierten Moleküle dann schnell in ihre atomaren Bestandteile zerfallen. Es zeigt sich aber, dass diese Annahme nicht erfüllt ist und die Dissoziationsprozesse einen Einfluss auf die Breite der radialen Emissionsprofile haben (Kap. 8).

Aufbau Das WF_6 wurde in LL1 (Sektion 10/11, unten) durch eine Gaseinlassdüse (Durchmesser: 4 mm) bei Radien zwischen $r = 47.0 - 50.0 \text{ cm}$ relativ zum Plasmazentrum in das Plasma der SOL, 1 – 4 cm hinter der LCFS, injiziert.

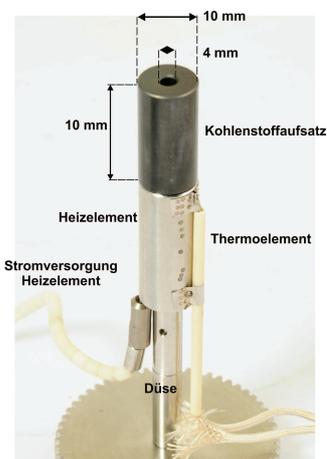


Abbildung 22: Aufbau des Düsensystems zur WF_6 -Injektion in LL1.

Zusammen mit einer zwischen Kohlenstoffkopf und Düse eingefügten Heizvorrichtung zu sehen, die dazu diente, die Düsentemperatur künstlich zu erhöhen um den Einfluss auf die WF_6 -Dissoziation zu untersuchen. Die Temperatur des Heizelements und damit des Kohlenstoffaufsatzes kann über ein eingebautes Thermolement kontrolliert werden.

Aus Sicherheitsgründen wurde immer nur eine kleine Menge WF_6 aus der Flasche ausgelassen, sodass nur das sich im Volumen zwischen Flasche und Ventil befindliche Gas zur Injektion benutzt wurde, während die Flasche geschlossen blieb. Dieses Volumen setzt sich aus einem kleinen Reservoir und dem Schlauch zwischen Reservoir und Ventil zusammen und beträgt $V_{\text{Reservoir}} = 2.1 \text{ l}$. Auch wurde das WF_6 durch eine elektronische Sicherung immer nur dann injiziert, wenn auch wirklich eine Plasmaentladung stattfand, nie in das leere Vakuumgefäß (beispielsweise nach einer Disruption). Aus dem Druckabfall innerhalb des Gasvolumens kann nach jeder Injektion die Anzahl der injizierten WF_6 -Moleküle ermittelt werden (Kap. 10).

Zum Schutz der Edelstahldüse gegen ein Schmelzen im Kontakt mit dem Plasma dient ein Aufsatz aus Kohlenstoff (Durchmesser: 10 mm). In Abb. 22 ist der Düsenaufbau zu-

Eigenschaften des WF ₆	
Phase	gasförmig
Dichte (bei 25 °C)	3.44 g/cm
molekulares Gewicht	297.83 g/mol
molares Volumen	86.6 cm ³ /mol
Schmelzpunkt	2.3°C
Siedepunkt	17.5°C

Tabelle 2: Eigenschaften des WF₆ [45,91].

Die lokalen Plasmaparamter wurden durch die Veränderung der radialen Düsenposition zwischen $r = 47.0 - 50.0$ cm variiert, was in einer Veränderung von $n_e(r)$ und $T_e(r)$ am Ort der Injektion resultiert. Als Vordruck im Gasvolumen wurde typischer Weise etwa $P_{\text{pre}} = 6.0$ mbar eingestellt. Nach einer Injektionsdauer von 1.0s ergab sich so ein Druckabfall von etwa 0.2 mbar auf $P_{\text{post}} = 5.8$ mbar, was nach der idealen Gasgleichung einer Anzahl von typischer Weise $N_{\text{WF}_6} = 1.2 \times 10^{19}$ injizierten WF₆-Molekülen entspricht (siehe Kap. 10).

7 Experimentelle Untersuchung der Anregung und Ionisation von W^0

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

Im Folgenden sollen die Ergebnisse des W-Zerstäubungsexperiments an TEXTOR dargelegt werden. In Abb. 23 sind in der erste Spalte die während der drei Phasen der TEXTOR-Entladung #113112 mit der CCD-Kamera durch einen Interferenzfilter bei 400.8 ± 0.5 nm aufgenommenen und während die Flat-Top-Phasen (über ca. 0.5 s) gemittelten Bilder dargestellt. Auf der linken Seite (Ionendrift-Seite) ist die C-Hälfte des Limiters zu sehen [10], auf der rechten Seite (Elektronendrift-Seite) die W-Hälfte. Die Beschreibung und Auswertung des Experiments soll sich im Weiteren auf die für die untersuchten Prozesse relevante W-Seite des Limiters beschränken. In der zweiten Spalte sind die Ergebnisse der PSICO-Simulation abgebildet (siehe Kap. 7.1.3). Die erste bzw. zweite Spalte in Abb. 24 zeigt die mit der He-Strahl-Diagnostik gemessenen Dichte- bzw. Temperaturprofile der jeweiligen Phase zusammen mit dem exponentiellen Fit [37] an die gemessenen Kurven (Fitparameter siehe Tab. 4). Eine vierte Phase wurde aufgrund der Dichtewerte von $n_e = 14.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, die sich am Rande der Gültigkeit des der Diagnostik zugrunde liegenden Stoß-Strahlungsmodells befinden, nicht zur Auswertung in diesem Kapitel genutzt, wohl aber abschließend in der Betrachtung der W-Erosion in Kap. 11.

Für alle drei Phasen ist zu beobachten, wie zerstäubtes W in das Randschichtplasma eindringt und sich dabei über der Limiter-Oberfläche ein Emissionsmuster ausbildet. Das Maximum des Emissionsmusters wandert während der drei Phasen sowohl in radialer als auch in toroidaler Richtung der Limiterkrümmung folgend weiter nach unten, das Emissionsmuster wird schmaler und breiter. Dabei ändert sich der Winkel zum Lot durch den Limiter-Apex von 13° über 17° zu 21° (Tab. 4). Der Grund hierfür ist im komplexen Zusammenspiel von Dichte- und Temperaturänderung von Phase zu Phase zu sehen und der damit einhergehenden temperaturabhängigen Änderungen in Ionisationsrate, Anregungsrate und der Zerstäubungsausbeute.

Die Zunahme der Dichte um knapp einen Faktor 2 von $6.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ auf $10.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ (Abb. 25) bedingt nach $\lambda_{\text{Ion}} = \frac{v_W}{n_e S(T_e)}$ in weniger tiefes Eindringen der W-Teilchen, da die Teilchen schneller ionisiert werden. Die Absolutzahl der neutralen Teilchen nimmt also im Vergleich mit den anderen Phasen schneller ab, das Emissionsmuster wird in radialer Richtung schmaler (siehe auch Profile für eine feste Position in Abb. 27(a)). Im Gegensatz zur Dichte nimmt die Temperatur von Phase zu Phase um knapp einen Faktor 2 von 85 eV auf 45 eV ab. Dies führt zwar aufgrund der Abnahme von $S(T_e)$ mit T_e zu einem gegenläufigen Effekt (der Ionisationsratenkoeffizient verringert sich um einen Faktor 1.3 von $7.4 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$ auf $5.6 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$), der aber wegen der verhältnismäßig geringen Temperaturabhängigkeit in diesem Temperaturbereich nur schwach ist und die lineare Abhängigkeit zwischen λ_{Ion} und n_e nicht kompensiert. Die Ionisationsrate als Produkt aus n_e und S nimmt also trotzdem zu (siehe Abb. 26(a) und Tab. 3

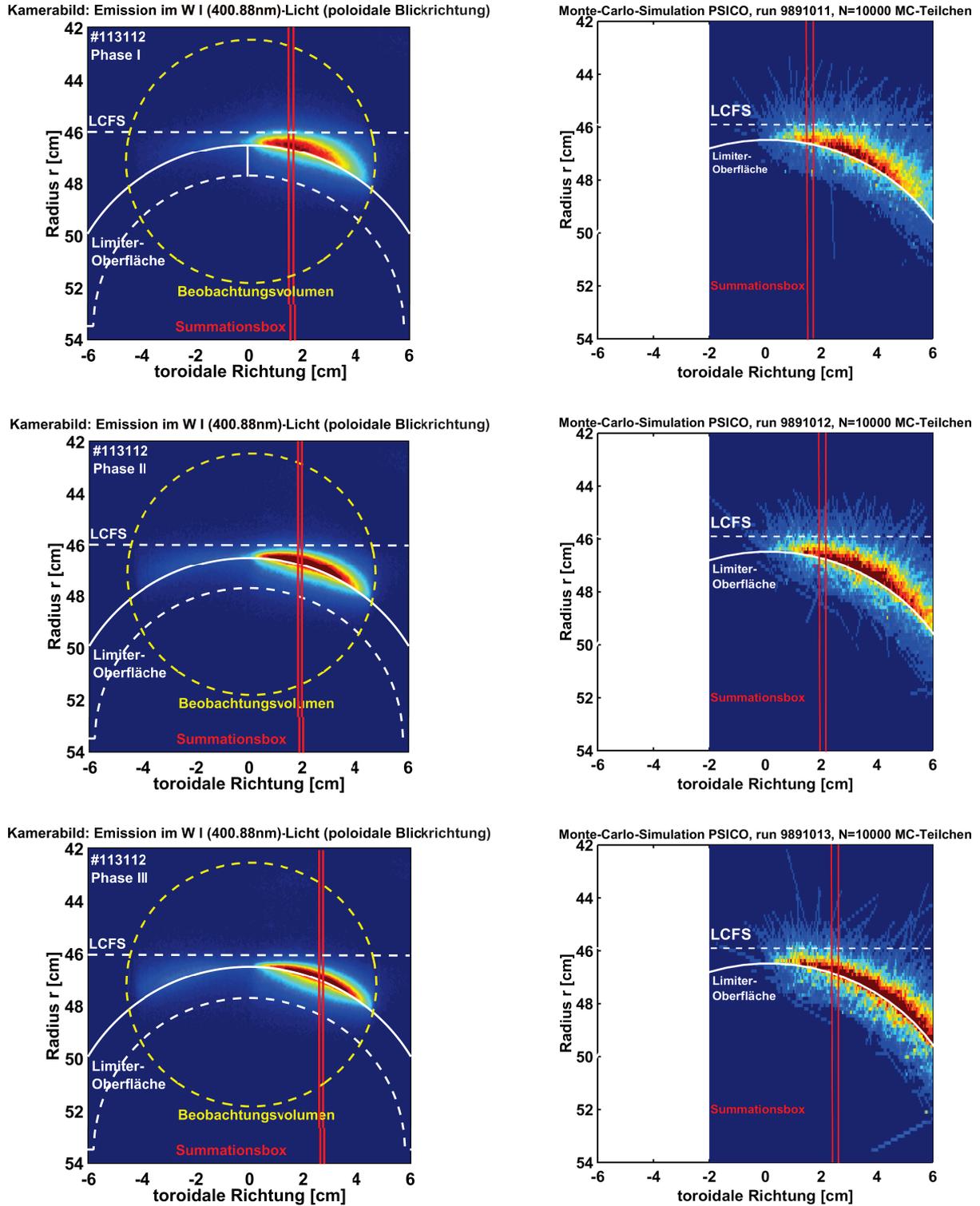


Abbildung 23: Kameraaufnahme der W I (400.88 nm)-Emission für die Phasen I bis III (von oben nach unten) im Vergleich mit den 2D-Bildern der PSICO-Simulation.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

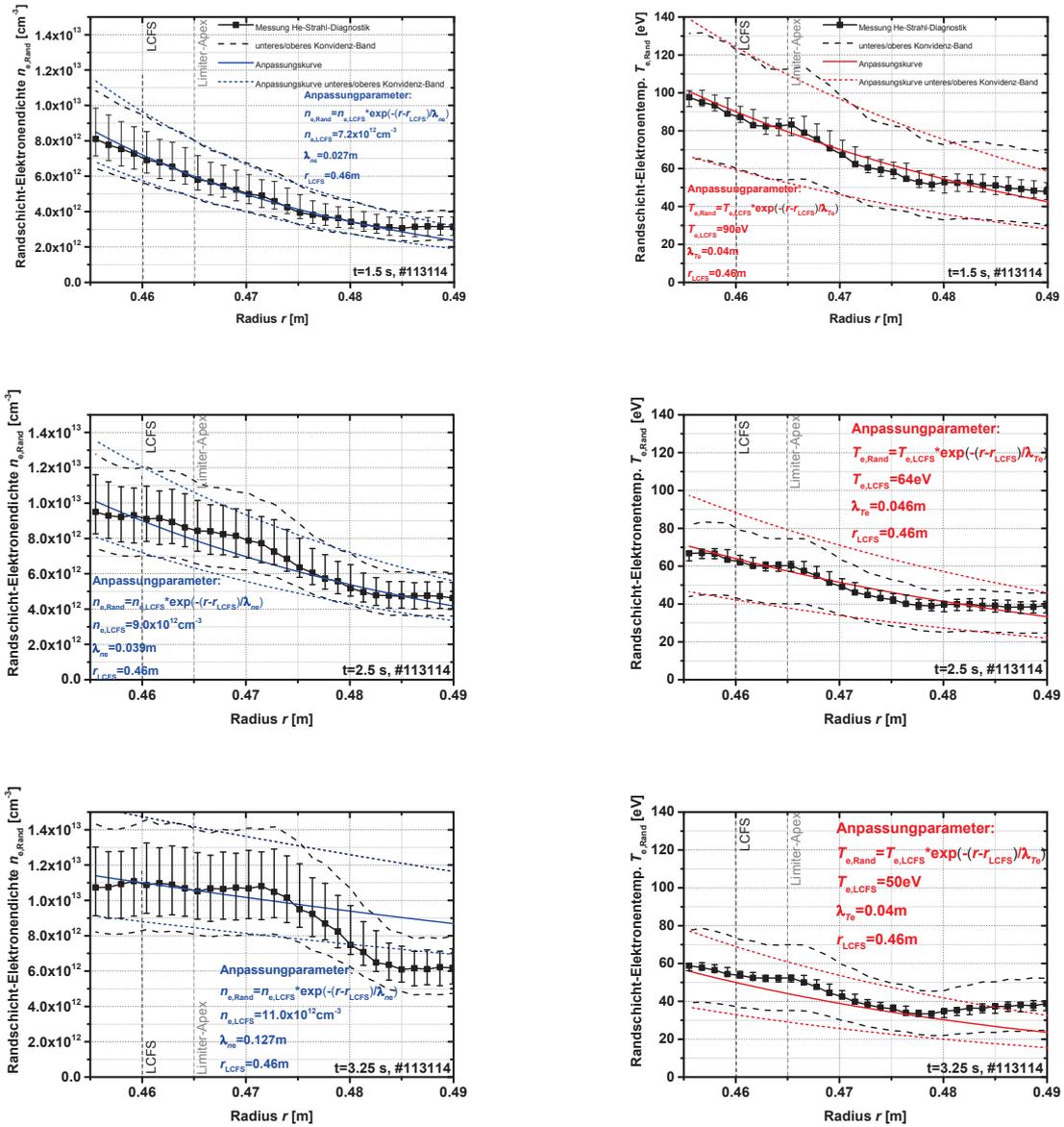


Abbildung 24: Dichte- und Temperaturdaten der He-Strahl-Diagnostik zur jeweiligen Kameraaufnahme.

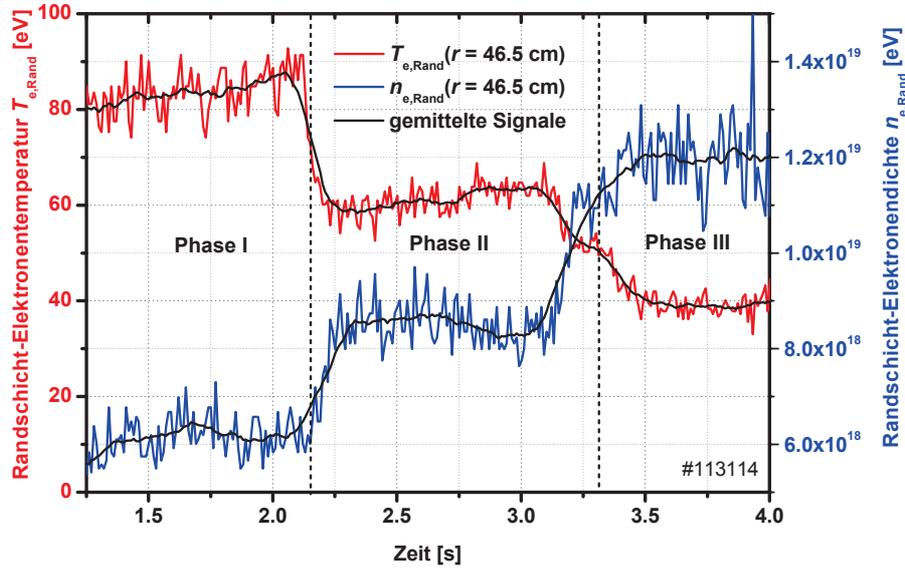
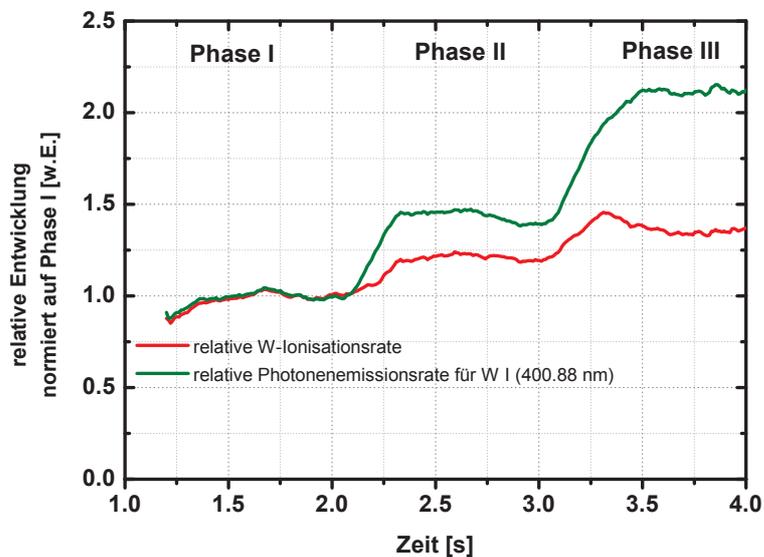


Abbildung 25: Dichte- und Temperaturmessung der He-Strahl-Diagnostik bei $r = 46.5$ cm im Zeitverlauf.

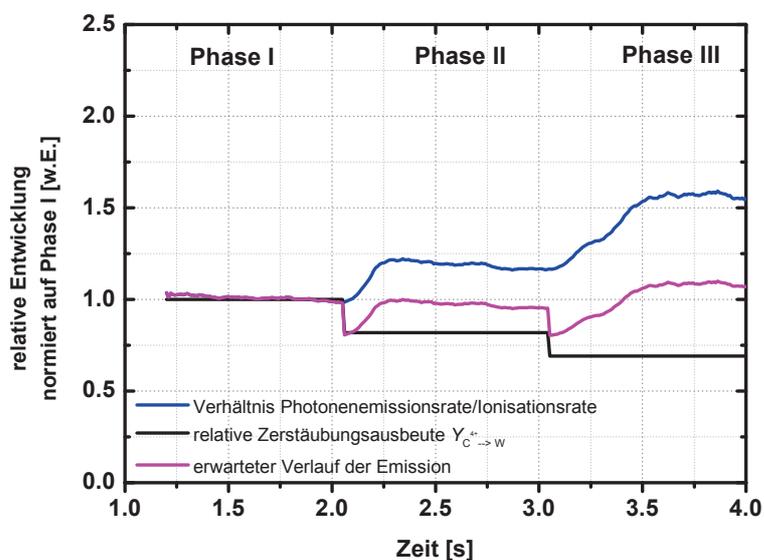
mit Rechnungen auf Basis der ATOM-Ionisationsratenkoeffizienten [89] und der GKU-Photonenemissionskoeffizienten [37]). Ebenso nimmt der Photoemissionsratenkoeffizient von $5.5 \times 10^{-9} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$ auf $5.9 \times 10^{-9} \text{ cm}^{-3}/\text{s}$ leicht um etwa einen Faktor 1.1 zu, die Emissionsrate, in die auch die Dichte eingeht, somit um einen Faktor 1.9. Das Verhältnis aus Emissions- und Ionisationsrate – also die Anzahl emittierter Photonen pro ionisiertem Teilchen – nimmt als Resultat um einen Faktor 1.6 zu. In Abb. 26(a) und 26(b) sind die relativen Verläufe unter Berücksichtigung aller Abhängigkeiten im Vergleich gezeigt. Die Gesamtzahl der pro Bild detektierten Photonen (äquivalent counts/Bild) ist in Abb. 27(b) gegen die jeweilige Phase aufgetragen (zusammen mit den PSICO-Ergebnissen, Kap. 7.1.3) und zeigt sich annähernd konstant.

Zur vollständigen Beschreibung muss weiter berücksichtigt werden, dass die Anzahl emittierender Teilchen nicht nur durch die Ionisation der Neutralteilchen im Plasma beeinflusst wird, sondern auch vom temperaturabhängigen Zerstäubungsvorgang. Die Ausbeute $Y_{C \rightarrow W}(T_e)$ (Anzahl zerstäubter W-Atome pro einfallendem C-Ion) ist stark von der Plasmatemperatur bzw. von der Energie abhängig, die einfallende Ionen im Sheath gewinnen (Kap. 3.2 und 3.4). Abbildung 7(a) stellt die Beziehung zwischen Ausbeute für verschiedene auf W einfallende Teilchen und der Einfallsenergie dar. Auf Grundlage der Rechnungen in [34] (Abb. 111) ist in Abbildung 26(b) auch die relative Entwicklung der Zerstäubungsausbeute $Y_{C^{4+} \rightarrow W}(T_e)$ gezeigt, da die höheren Ionisationszustände von Plasmapureungen wie C die Hauptursache der W-Zerstäubung darstellen, während D aufgrund der geringeren Masse nur einen kleinen Anteil daran besitzt [18, 72]. Wie zu sehen ist, nimmt die Ausbeute von Phase I bis Phase III um einen Faktor 0.7 ab. Damit

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

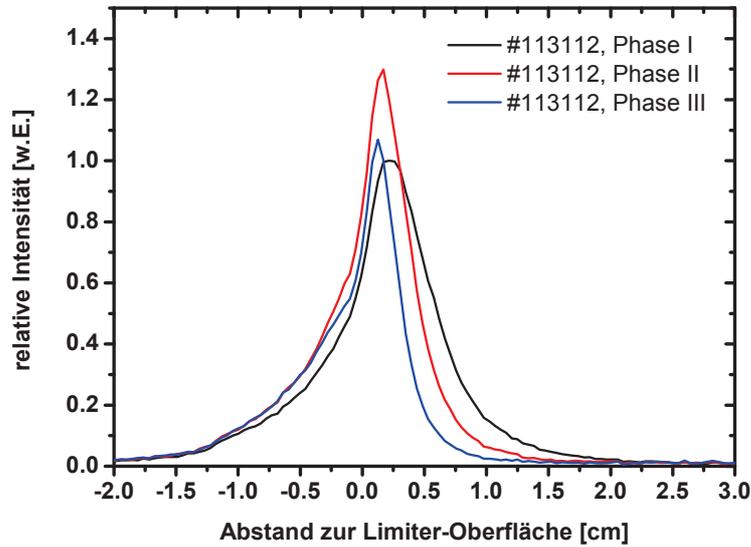


(a)

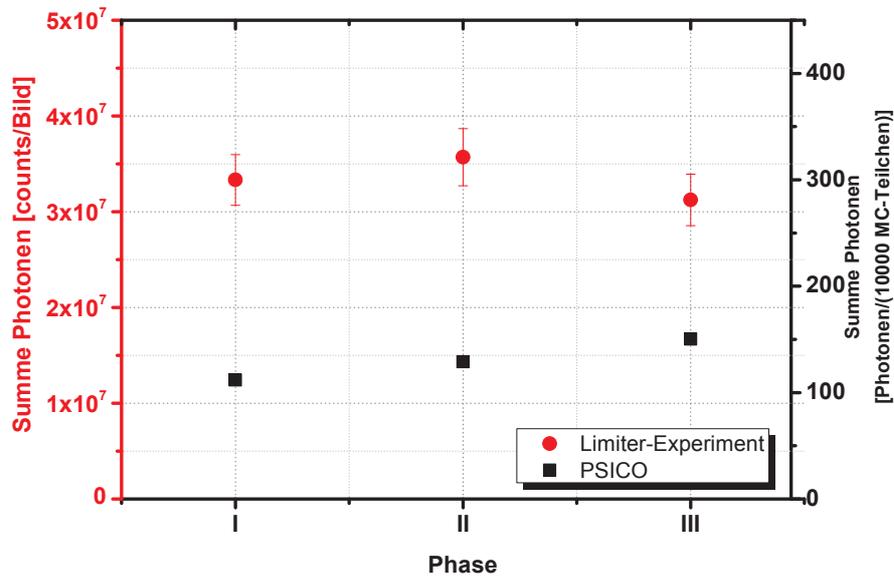


(b)

Abbildung 26: (a) Relative Entwicklung der Ionisations- [89] (rot) und Photonenemissionsrate (grün) [37] sowie (b) das Verhältnis (blau) im Verlauf der Zeit für eine feste Position bei $r = 46.5$ cm (Limiter-Apex) zusammen mit der Entwicklung der Zerstäubungsausbeute für C^{4+} -Ionen auf W [34] (schwarz) und der Entwicklung der zu erwartenden Photonenemission (pink).



(a)



(b)

Abbildung 27: (a) Emissionsprofile der drei Phasen entlang einer festen Summationsbox (entspricht der Summationsbox aus Phase I). Die Profiltbreiten nehmen systematisch mit zunehmender Dichte ab. (b) Vergleich der insgesamt pro Bild detektierten Photonen (in counts/Bild) zusammen mit den Ergebnissen der PSICO-Simulation (für 10000 Monte-Carlo-Teilchen, siehe Kap. 7.1.3)

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

Phase	$n_{e,\text{Apex}}$ ($r = 46.5\text{cm}$) [cm^{-3}]	$T_{e,\text{Apex}}$ ($r = 46.5\text{cm}$) [eV]	S_{ATOM} [$10^{-7} \text{cm}^3\text{s}^{-1}$]	\mathcal{PEC} [$10^{-9} \text{cm}^3\text{s}^{-1}$]	$n_e S_{\text{ATOM}}$ [10^6s^{-1}]	$n_e \mathcal{PEC}$ [10^4s^{-1}]
I	6.0×10^{12}	85	7.4	5.5	4.4	3.3
II	8.5×10^{12}	60	6.5	5.8	5.5	4.9
III	10.5×10^{12}	45	5.6	5.9	5.9	6.2

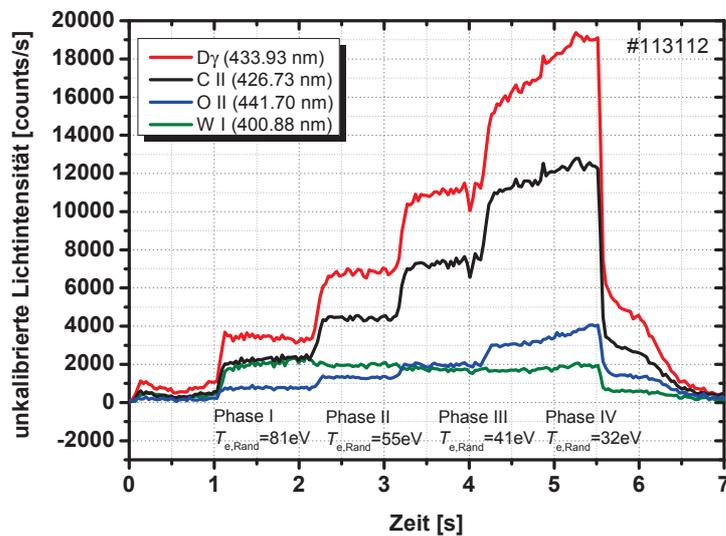
Tabelle 3: Randschichtparameter während der drei Phasen des W-Zerstäubungsexperiments (Messunsicherheiten der Dichte- und Temperaturmessungen siehe Tab. 1).

Phase	$n_{e,\text{LCFS}}$ ($r = 46.0\text{cm}$) [cm^{-3}]	λ_{n_e} [cm]	$T_{e,\text{LCFS}}$ ($r = 46.0\text{cm}$) [eV]	λ_{T_e} [cm]
I	7.2×10^{12}	2.7	90	4.0
II	9.0×10^{12}	3.9	64	4.6
III	11.0×10^{12}	12.7	50	4.0

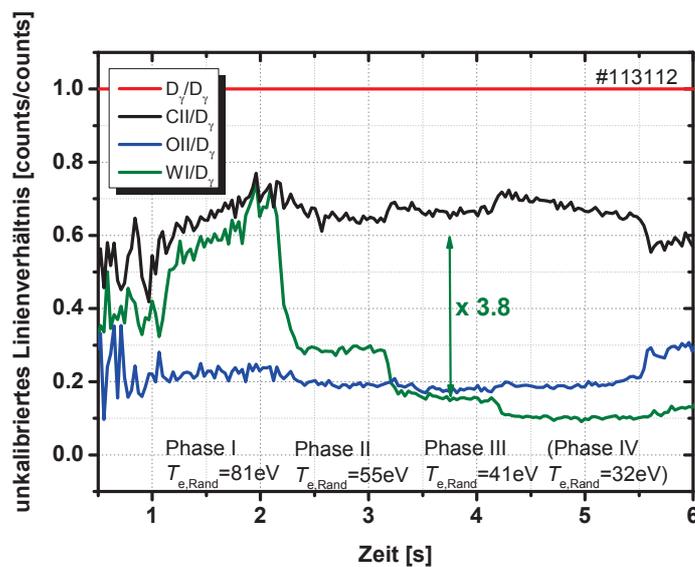
Tabelle 4: Parameter [37] der in Abb. 23 gezeigten Fits an die gemessenen Kurven der He-Strahl-Diagnostik.

sollte also ähnlich wie in Abb. 26(b) auch im Experiment in allem nur eine schwache Entwicklung der Lichtemission von W über die Phasen hinweg zu beobachten sein.

Diese Überlegungen können im Experiment gut bestätigt werden. In Abb. 28(a) ist die zeitliche Entwicklung des Deuteriumflusses (gemessen anhand der D_γ -Linie bei D I (434.93 nm)), des W-Erosionsflusses (W I (400.88 nm)) und der Plasmaverunreinigungen C (C II (426.73 nm)) und O (O I (441.70 nm)) dargestellt. Der D-Fluss ist als Recycling-Fluss ein Maß des auf den Limiter einfallenden Flusses, dessen Ionen auf dem Limiter rekombinieren und danach als Neutrale wieder ins Plasma laufen. Beim Einfall ist der D-Fluss spektroskopisch nicht detektierbar, da er nur als Protonenfluss vorliegt. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Intensität des D-Lichts von Phase I zu Phase III um einen Faktor 3 zunimmt (bis Phase IV Faktor 4.5), die Intensitäten der Verunreinigungsflüsse nehmen ebenfalls stufenweise zu, während das Licht des W-Erosionsflusses sich nur schwach ändert und leicht abnimmt. Die W-Intensität normiert auf den D-Fluss lässt einen deutlicheren Blick auf die Entwicklung der W-Zerstäubung zu: bei konstantem D-Fluss nimmt die W-Intensität stufenweise bis Phase III um einen Faktor 3.8 ab, obwohl das Verhältnis von Photoemissionsrate zu Ionisationsrate – also die pro Ion emittierten Photonen – wie in Abb. 26(b) im abnehmender Temperatur sogar *zunimmt*. Verantwortlich für die Reduzierung des Erosionsflusses muss demnach die temperaturabhängige Änderung der Zerstäubungsausbeute sein. Die W-Erosion kann also deutlich durch Verringerung der Temperatur reduziert werden, sogar bei Zunahme des erodierenden Flusses. Eine quantitative Betrachtung folgt in Kap. 11.



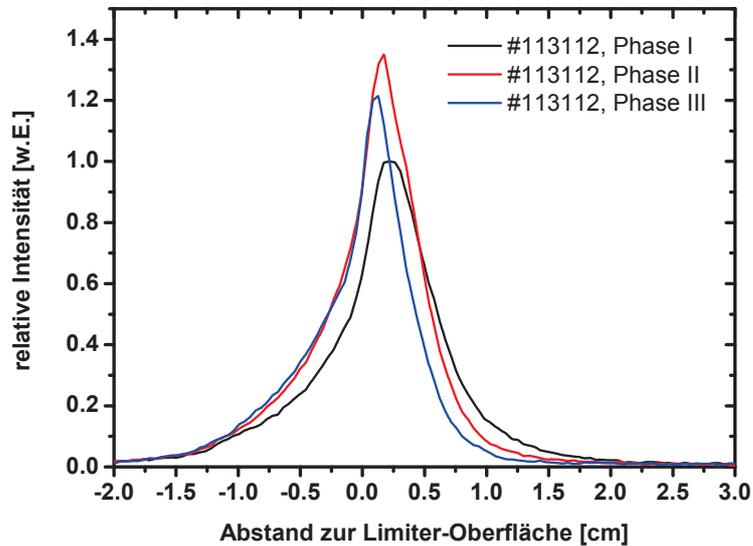
(a)



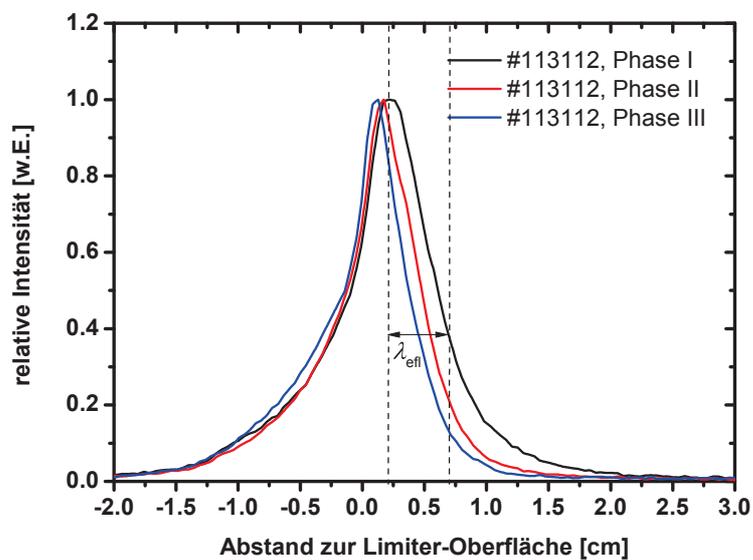
(b)

Abbildung 28: (a) Zeitliche Entwicklung des Deuteriumlichts (gemessen anhand der D_γ -Linie bei $D I$ (434.93 nm)), des W-Lichts ($W I$ (400.88 nm)) und des Lichts der Plasmaverunreinigungen C ($C II$ (426.73 nm)) und O ($O I$ (441.70 nm)). Während die D-Intensität und die Intensität der Verunreinigungen von Phase zu Phase zunehmen, ist für die W-Intensität eine leichte Abnahme zu erkennen. (b) Auf den D-Fluss normierte Intensitäten. Bei konstantem D-Fluss nimmt die W-Intensität stufenweise bis Phase III um einen Faktor 3.8 ab, obwohl das Verhältnis von Photoemissionsrate zu Ionisationsrate sogar *zunimmt*. Ursache ist die Zerstäubungsausbeute, die durch Verringerung der Temperatur reduziert wird.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment



(a)



(b)

Abbildung 29: (a) Emissionsprofile der drei Phasen entlang der Summationsboxen aus Abb. 23, normiert auf Phase I. Die Profildbreiten nehmen systematisch mit zunehmender Dichte ab. (b) Auf das jeweilige Maximum normierte Emissionsprofile mit Definition der Abfalllänge.

Phase	$n_{e,\text{Maximum}}$ [cm ⁻³]	$T_{e,\text{Maximum}}$ [eV]	λ_{eff} [cm]	θ_{Max} [°]
I	$(6.2 \pm 1.6) \times 10^{12}$	(81 ± 8)	0.45 ± 0.03	13 ± 0.4
II	$(7.6 \pm 1.9) \times 10^{12}$	(55 ± 6)	0.39 ± 0.03	17 ± 0.4
III	$(10.0 \pm 2.5) \times 10^{12}$	(41 ± 8)	0.34 ± 0.03	21 ± 0.4

Tabelle 5: Dichte- und Temperaturwerte am Ort des Emissionsmaximums (Spalte 1 und 2). Spalte 3 zeigt die Abfalllängen $\lambda_{\text{eff}} = r(I_{\text{Maximum}}/e) - r(I_{\text{Maximum}})$ der Lichtintensität I , die den gemessenen Emissionsprofile entnommen wurden. In Spalte 4 ist der Winkel θ_{Max} relativ zum Lot durch den Limiter-Apex wiedergegeben, an dem sich das Emissionsmaximum der jeweiligen Phase befindet.

7.1.1 Emissionsprofile für W I (400.88 nm)

Zur Gewinnung der Emissionsprofile für W I (400.88 nm) wurde für jede Phase in radialer Richtung eine Auswertebox der Breite 2 mm durch das jeweilige Maximum der Emission gelegt und der Inhalt der Pixel in x -Richtung aufsummiert. Dabei wurde über die Dauer einer Phase (ca. 0.5 s) gemittelt, was bei einer Aufnahmefrequenz von 50 frames/s etwa 25 Bildern entspricht. Ein über die ersten 10 Bilder der Aufnahme gemittelter elektronischer Untergrund ohne Plasma wurde subtrahiert. Somit ergeben sich in radialer Richtung die in Abb. 29(a) dargestellten Emissionsprofile, die auf das Profil aus Phase I normiert sind, um die absolute Entwicklung der Profile zueinander zu zeigen. Aufgetragen sind die Intensitäten gegen den Abstand d zur Limiter-Oberfläche, auf der der Nullpunkt liegt. Dieser Nullpunkt bewegt sich in den Aufnahmen in Abb. 23 aufgrund der radialen und toroidalen Lageänderung des Emissionsmaximums von Phase zu Phase radial weiter nach unten. Die Abbildung 29(b) und alle folgenden Profildarstellungen zeigen die drei auf das jeweilige Maximum normierten Emissionsprofile. Neben der räumlichen Skala am unteren Bildrand, die den Abstand d von der Limiter-Oberfläche angibt, ist am oberen Rand auch eine zeitliche Skala gegeben, die sich bei vorhandener räumlicher Kalibration des Kamerabildes mit $t = v_{\text{W}}/d$ ergibt. Dabei wird eine (wahrscheinlichste) Geschwindigkeit des zerstäubten Wolframs von $v_{\text{W}} = 2100$ m/s angenommen, die aus dem Maximum der THOMPSON-Verteilung resultiert (Kap. 3.6).

Abbildung 30 zeigt die drei gemessenen Profile in der Reihenfolge der Phasen von oben nach unten übereinander. Sowohl in den Diagrammen als auch in Tabelle 5 sind die Plasmaparameter am Maximum des Emissionsprofils zusammen mit den daraus bestimmten Abfalllängen λ_{eff} (Distanz zwischen der maximalen Intensität I_{Max} und der auf I_{Max}/e abgefallenen Intensität) gezeigt. Es ist zu beobachten, wie die Profile mit zunehmender Dichte und damit zunehmender Ionisation von oben nach unten systematisch schmaler werden.

Darüber hinaus lassen sich für jedes Profil drei Bereiche unterscheiden, die in In Abb. 30 farblich gekennzeichnet sind. Die Profile können von links nach rechts aufgliedern werden in:

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

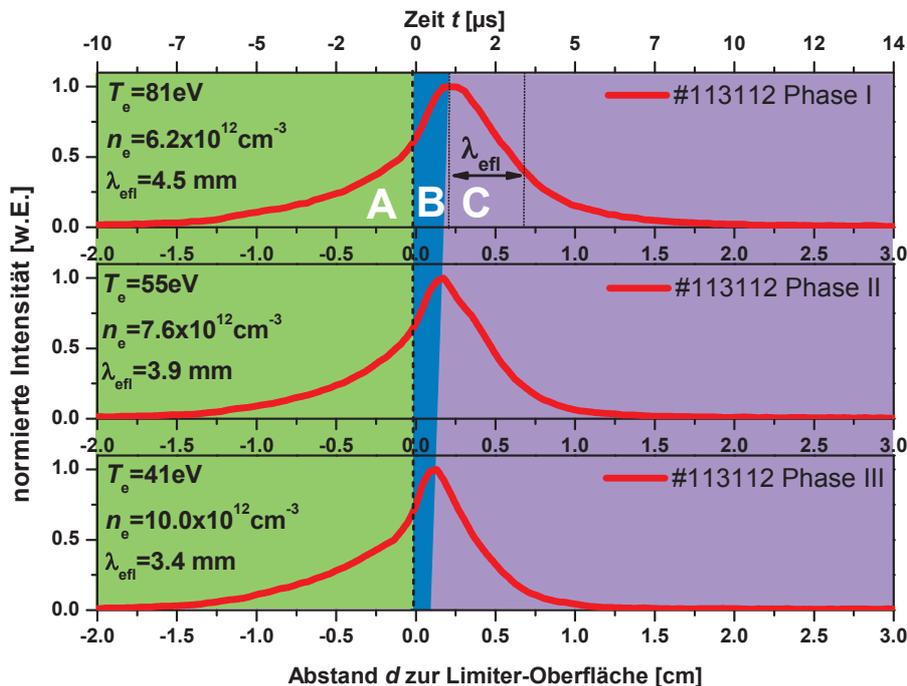


Abbildung 30: Gemessene Limiter-Profile für die Phasen I bis III (von oben nach unten).

- A: einen Anstieg für $d < 0$
- B: einen weiteren Anstieg für $d_{\text{Max}} > d > 0$, wobei d_{Max} den Ort des Emissionsmaximums bezeichnet und die Maxima der Profile etwa $d \approx 1\text{--}2$ mm vor der Oberfläche liegen
- C: einen Abfall für $d > d_{\text{Max}}$

Teil A für $d < 0$ ist wesentlich durch die Limitergeometrie bestimmt, da die Sichtlinie mit abnehmendem Abstand zum Nullpunkt zunehmend streifend zur Oberfläche liegt. Somit wird ein immer größerer Teil des emittierten Lichts entlang der Sichtlinie aufsummiert und die Intensität steigt damit an. Der abfallende Teil C für $d > d_{\text{Max}}$ kann durch die Ionisation der bis dahin neutralen W-Atome erklärt werden, da sich die Anzahl der emittierenden Teilchen immer weiter reduziert. Es bleibt also alleine der Anstieg in B für $d_{\text{Max}} > d > 0$ zu erklären. Um den Profilverlauf für die Bereiche B und C genauer zu untersuchen und analytisch zu beschreiben, wird im Folgenden ein Stoß-Strahlungs-Modell aufgestellt.

7.1.2 Untersuchung der Anregung von W^0 mit einem Stoß-Strahlungs-Modell

Neben den Ionisationsvorgängen ist das beobachtete Emissionsprofil weiter auch von den An- und Abregungsvorgängen mitbestimmt, die sich im Anregungskoeffizienten $X(T_e)$ und der Übergangrate (EINSTEIN-Koeffizient) A_{jk} manifestieren. Die folgende

Bilanzgleichung der zeitlichen Änderung einer auf das Niveau j angeregten Anzahl von neutralen Atomen beruht auf dem Korona-Modell, also auf der Annahme kleiner Dichten, sodass die Anregung über Elektronenstöße, die Abregung ausschließlich über Strahlung erfolgt. Prozesse der Stoßabregung werden nicht betrachtet. Die zeitliche Änderung der Besetzungsdichte des Niveaus j ergibt sich netto aus der Differenz der mit X angeregten Teilchen im unteren Zustand $n_i(t)$ und der sich mit der Rate A_{jk} durch Photonen-Emission auf das Niveau k abregenden Teilchen $n_j(t)$:

$$\begin{aligned}\frac{dn_j(t)}{dt} &= \overbrace{n_e n_i(t) X}^{\text{Anregung}} - \overbrace{n_j(t) A_{jk}}^{\text{Abregung}} \\ &= n_e n_i(t_0) e^{-t n_e S} X - n_j(t) A_{jk}.\end{aligned}\quad (73)$$

Mit der Zeit reduziert sich die Anzahl der Ausgangsteilchen $n_i(t_0)$ durch Ionisation exponentiell, weswegen $n_i(t) = n_i(t_0) e^{-t n_e S}$ gilt. Betrachtet wird hier nur eine Ionisation aus dem unteren Zustand n_i , Ionisationsvorgänge aus angeregten Zuständen werden vernachlässigt. Folgende Lösung der Bilanzgleichung kann gefunden werden:

$$n_j(t) = \frac{n_e n_i(t_0) X}{A_{jk} - n_e S} (e^{-t n_e S} - e^{-t A_{jk}}) \quad (74)$$

$$= \frac{n_e n_i(t_0) X}{A_{jk} - n_e S} (e^{-\frac{t}{\tau_{\text{Ion}}}} - e^{-\frac{t}{\tau_A}}), \quad (75)$$

mit der Ionisationszeit $\tau_{\text{Ion}} = \frac{1}{n_e S}$ und der Abregungszeit $\tau_A = \frac{1}{A_{jk}}$. Bei Parametrisierung über die Distanz d zur Oberfläche ergibt sich mit $t = d/v_W$ entsprechend

$$n_j(d) = \frac{n_e n_i(d_0) X}{A_{jk} - n_e S} (e^{-d \frac{n_e S}{v_W}} - e^{-d \frac{A_{jk}}{v_W}}) \quad (76)$$

$$= \frac{n_e n_i(d_0) X}{A_{jk} - n_e S} (e^{-\frac{d}{v_W \tau_{\text{Ion}}}} - e^{-\frac{d}{v_W \tau_A}}), \quad (77)$$

Für den Fall dass $n_e S > A_{jk}$ (d.h. $\tau_{\text{Ion}} < \tau_A$), nimmt der Bruch einen negativen Wert an. Durch eine lineare Taylor-Entwicklung der Exponentialfunktionen kann jedoch gezeigt werden, dass in diesem Fall auch der Klammerausdruck negativ wird. Die gesamte Lösung bleibt positiv und damit physikalisch sinnvoll. Für $\tau_A \gg \tau_{\text{Ion}}$ allerdings ergibt sich kein physikalisch sinnvoller Verlauf des Profils mehr, da die Lösung für $\tau_A \rightarrow \infty$ gegen einen konstanten Wert läuft (Abb. 31). Das Profil nimmt nicht mehr mit der Ionisation ab, wie man physikalisch erwarten würde, sondern nur durch die Abregung des oberen Niveaus n_j . Der Grund liegt darin, dass in diesem Modell zum einen eine erneute Befüllung des unteren Zustandes durch die Abregung nicht berücksichtigt ist. Zum anderen sind die Atome im angeregten Zustand nicht mehr von der Ionisation betroffen, da diese nur aus dem unteren Zustand heraus stattfindet. Befindet sich das Ensemble einmal im angeregten Zustand, wird sein Verhalten im Modell also nur noch von τ_A bestimmt. (In der in Kapitel 7.1.3 folgenden Monte-Carlo-Simulation liegt diese Beschränkung nicht vor, Ionisation und

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

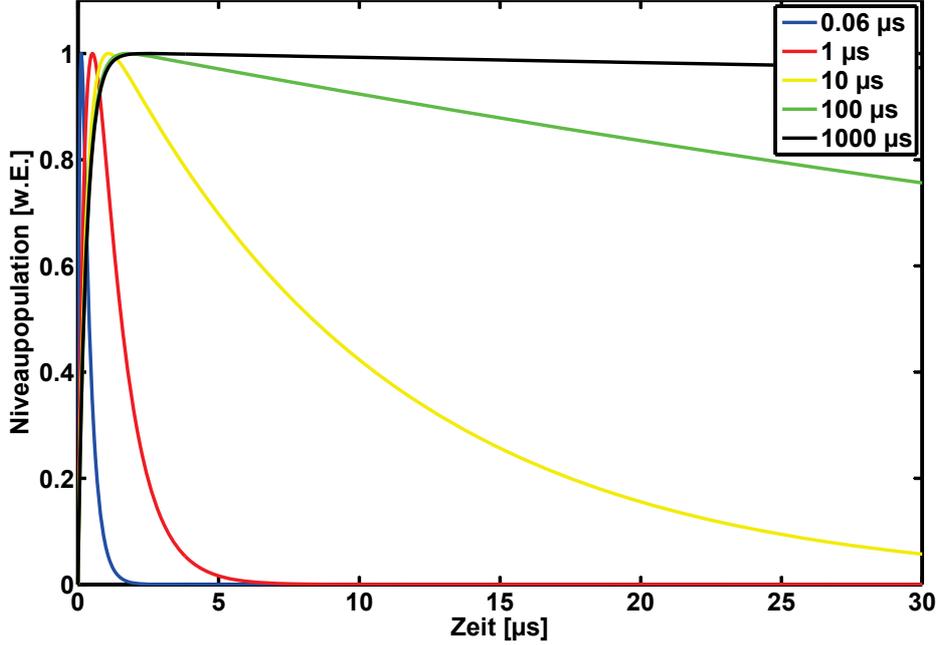


Abbildung 31: Demonstration des Einflusses von τ_{Fit} auf den Verlauf des Emissionsprofils.

Photonenemission sind unabhängig von einander.) Somit stellt das Modell für den Fall $\tau_A \lesssim \tau_{\text{Ion}}$ eine gute Näherung dar, für $\tau_A \gg \tau_{\text{Ion}}$ gilt es nicht mehr. Für diesen Fall sehr großer Abregungszeiten kann das Modell sowohl um eine zusätzliche Bedingung zur zeitlichen Entwicklung des unteren Zustandes n_i erweitert werden,

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \underbrace{-n_e n_i(t) S}_{\text{Ionisation}} - \underbrace{n_e n_i(t) X}_{\text{Anregung}} + \underbrace{n_j(t) A_{jk}}_{\text{Abregung aus } n_j} \quad (78)$$

(wobei im jetzt vorliegenden Zwei-Niveau-System $k = i$ gilt), als auch um die Ionisation mit dem Ionisationsratenkoeffizienten S^* aus dem angeregten Zustand n_j ,

$$\frac{dn_j(t)}{dt} = \underbrace{n_e n_i(t_0) e^{-t n_e S}}_{\text{Anregung aus } n_i} X - \underbrace{n_j A_{jk}}_{\text{Abregung}} - \underbrace{n_e n_j(t) S^*}_{\text{Ionisation}}. \quad (79)$$

Gleichung (78) beschreibt die Entvölkerung des Grundzustandes durch Ionisation und Anregung auf das Niveau j sowie die Wiedervervölkerung aus dem sich abregenden Niveau j . Diese Beschreibung ist jedoch nur dann korrekt, falls das Niveau j wieder ohne Kaskaden direkt in den unteren Zustand relaxiert, also $k = i$ gilt. Beide Ergänzungen führen auf sehr komplizierte Lösungen. Es zeigt sich aber, dass das beschriebene einfache Modell bereits eine gute Reproduktion der gemessenen Profile erlaubt. Darüber hinaus liefert eine Näherungslösung der Form

$$n_j(t) \sim n_i(t_0) e^{-\frac{t}{\tau_{\text{Ion}}}} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_{\text{Fit}}}}\right) \quad (80)$$

auch für den Fall $\tau_{\text{Fit}} \gg \tau_{\text{Ion}}$ einen physikalisch sinnvollen Verlauf (Abb. 36). Diese wird innerhalb der Monte-Carlo-Simulation Anwendung finden (Kap. 7.1.3).

Anfitten der analytischen Lösung Mit Gl. (76) ist es nun möglich, über ein Anfitten der gemessenen Profile mit S als freiem Parameter die Ionisationsratenkoeffizienten zu bestimmen und darüber hinaus eine Aussage über die Besetzungs- und Abregungsprozesse zu treffen. Gefittet wurden nur die Kurvenbereiche B und C, da A wie beschrieben auf die Limiter-Geometrie zurück zu führen ist, die in das Modell nicht eingeht. Die Fit-Prozedur wurde mit der IDL-Routine [20] MPFITFUN [51] durchgeführt, die auf der Methode der kleinsten Fehlerquadrate basiert. Die Ergebnisse für ein auf diese Weise minimiertes χ^2 sind für alle drei Phasen als schwarze Kurven in den Abb. 32(a) und 32(b) gezeigt. Als freier Parameter wurde für die Fits in Abb. 32(a) nur S gewählt, während $A_{ji}(400.88 \text{ nm}) = 1.63 \times 10^7 \text{ s}^{-1} = \text{const.}$ festgehalten wurde. Es ist deutlich zu sehen, dass die Fits die gemessenen Profile nur unzureichend reproduzieren können. Der Anstieg auf das Maximum erfolgt zu schnell, die Kurven sind dadurch zu schmal. Wird sowohl S als auch $A_{\text{Fit}} = A_{ji}$ als freier Parameter gewählt, ergeben sich die Kurven in Abb. 32(b), die die gemessenen Profile sehr gut reproduzieren. In Form von A_{Fit} liefert das Modell eine Information über die Anregungs- bzw. Abregungsvorgänge im Atom. Es zeigt sich, dass sich das resultierende A_{Fit} von im Mittel $\langle A_{\text{Fit}} \rangle = (1 \pm 0.5) \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ um mehr als eine Größenordnung von der tatsächlichen atomaren Größe $A_{ji}(400.88 \text{ nm}) = 1.63 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ unterscheidet. Das bedeutet, dass die Zeit von im Mittel $\langle \tau_{\text{Fit}} \rangle = 1/\langle A_{\text{Fit}} \rangle = (1 \pm 0.4) \mu\text{s}$ um mehr als eine Größenordnung größer ist als die dem Kehrwert der A_{ji} entsprechende Abregungszeit $\tau_A = 1/A_{ji} = 0.06 \mu\text{s}$. Eine Unsicherheit in der Geschwindigkeit, die ebenfalls im Produkt des Exponenten auftritt, kann diesen Faktor nicht kompensieren, da diese dazu um etwa einen Faktor 10 größer sein müsste als die angenommene. Dies lässt sich durch die THOMPSON-Verteilung, die experimentell etabliert ist, nicht erklären.

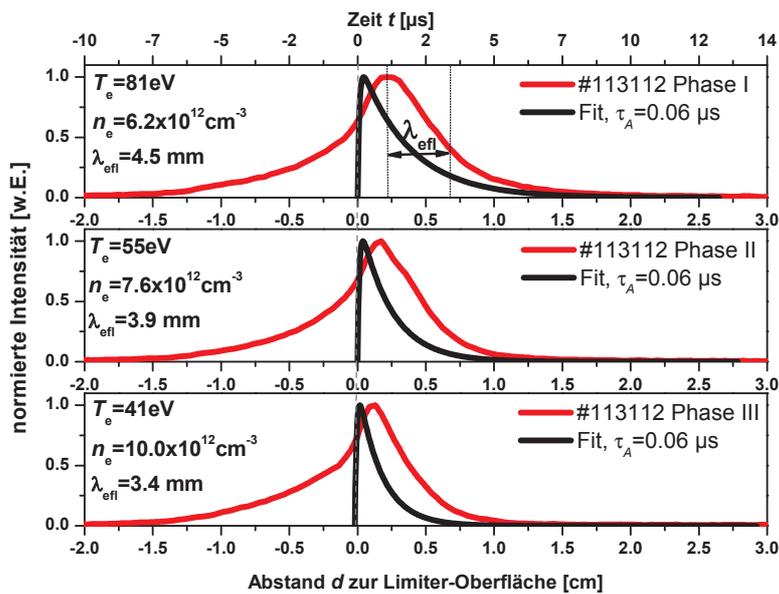
Sowohl Messung als auch Fit zeigen, dass ein stationärer Zustand mit Gleichgewicht zwischen An- und Abregung, der zum Zeitpunkt $t = t_1$ vorliegt und für den gilt

$$\begin{aligned} \frac{dn_j(t_1)}{dt} &= n_e n_i X - n_j(t_1) A_{ji} = 0 \\ \Rightarrow n_e n_i X &= n_j(t_1) A_{ji}, \end{aligned} \quad (81)$$

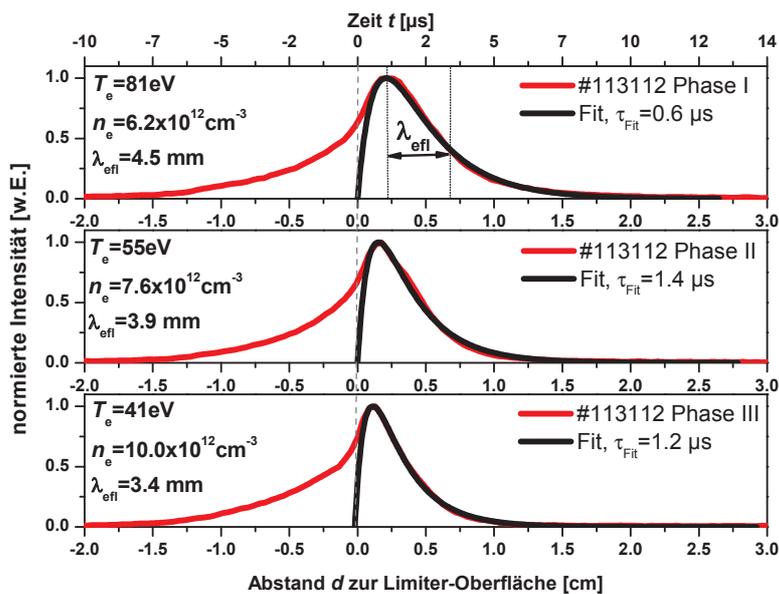
nicht von Anfang an gegeben ist. Somit stellt das ermittelte A_{Fit} einen Parameter dar, der einen bis zum Zeitpunkt t_1 zeitlich sich verändernden Anregungsvorgang mit der Relaxationszeit $\tau_{\text{Fit}} = 1/A_{\text{Fit}}$ beinhaltet, der offensichtlich bei der Beschreibung der Emissionsprofile *nicht* vernachlässigbar ist. Eine positive Nettoanregung ist notwendig, um den Profilanstieg im Bereich B zu reproduzieren.

Dieses Verhalten kann anhand des GROTRIAN-Termschemas (Abb. 33) verstanden werden. Gleichung 81 beschreibt einen Gleichgewichtszustand zwischen der Anregung vom unteren, metastabilen Niveau i ($5d^5(^6S)6s^7S^3$) auf das obere Niveau j ($5d^5(^6S)6p^7P^o_4$) mit $X = X_{ij} = X_{7S_3 \rightarrow 7P_4}$ und der Abregung von dort zurück auf das gleiche Ausgangsniveau 7S_3 mit der Rate A_{ji} . Dabei ist zwingend erforderlich, dass das Niveau i bereits

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment



(a)



(b)

Abbildung 32: Gemessene Emissionsprofile für die Phasen I bis III (von oben nach unten) als rote Kurven zusammen mit den aus den Profilen entnommenen Abfalllängen λ_{eff} und den Dichte- und Temperaturwerten an der radialen Position des Emissionsmaximums. Die schwarzen Kurven ergeben sich aus der Anpassung des Stoß-Strahlungs-Modells für (a) *einen* freien Fitparameter S während $A_{ji}(400.88 \text{ nm}) = 1.63 \times 10^7 \text{ s}^{-1} = \text{const.} \Rightarrow \tau_A = 0.06 \mu\text{s}$ (b) *zwei* freie Fitparameter S und A_{Fit} .

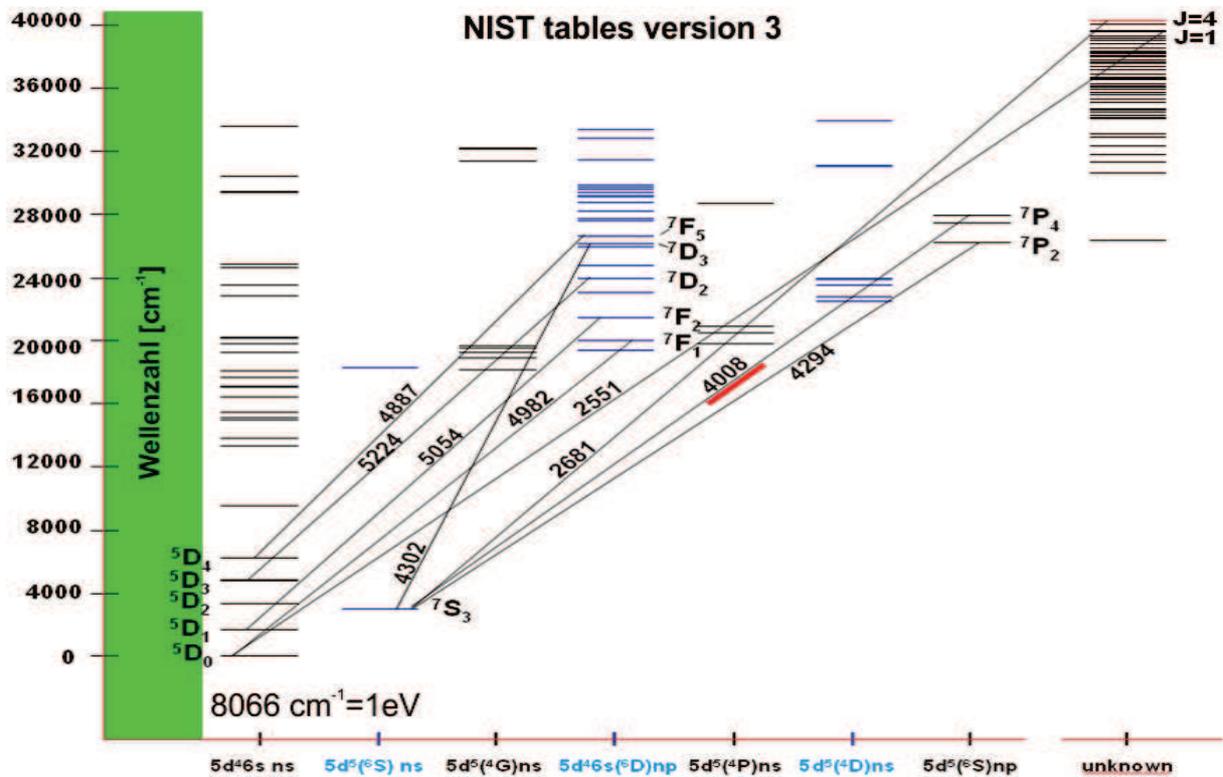


Abbildung 33: Grotrian-Diagramm ausgewählter Übergänge [58]. Das Niveau $5d^5(6S)6p\ ^7P^{\circ} 4$, von dem aus die W I (400.88 nm)-Linie emittiert wird, muss zuerst aus dem metastabilen Niveau $5d^5(6S)6s\ ^7S 3$ mit dem Anregungskoeffizienten X angeregt werden. Zuvor muss dieses Niveau jedoch selbst bevölkert worden sein. Dies kann durch Stoßanregung aus den untersten fünf Niveaus – den „Grundzuständen“ – 5D_0 bis 5D_4 geschehen oder durch Kaskaden aus höhergelegenen Niveaus herab, die ihrerseits zunächst aus dem Grundzuständen heraus besetzt worden sein müssen.

besetzt ist. Ist dieses nicht bereits ab initio der Fall, wird eine bestimmte Zeitspanne benötigt, um das Niveau i entweder direkt durch Besetzung aus den Zuständen 5D_0 bis 5D_4 aufzufüllen oder durch Kaskaden von höheren Niveaus aus wie 7D_3 . Somit muss sich diese Zeit auch im Experiment als eine verzögerte Anregung bemerkbar machen, zu deren Beschreibung im analytischen Modell die Größen X und A_{ji} alleine nicht ausreichen, und die sich im Fit als ein Fitparameter A_{Fit} äußert. Vielmehr muss statt eines einzelnen Anregungsprozesses, der durch $X = X_{ij}$ geschrieben wird, eine Summe von vorgelagerten Anregungen über mehrere Niveaus berücksichtigt werden, und somit ein System von Differenzialgleichungen. Diese Metastabilität ist in diesem einfachen Stoß-Strahlungs-Modell und der Lösung (76) nicht berücksichtigt, was sich im Parameter $\tau_{Fit} \gg \tau_A$ äußert, in dem An- und Abregungsvorgang vermischt werden. Dies zeigt sich auch in den durch den Fit ermittelten S , die als schwarzen Punkte in Abb. 34 gezeigt sind. Wie zu sehen ist, liegen diese für Phase II und III zwischen den Werten der ADAS- und LOTZ-Datensätzen,

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

während sich für Phase I eine starke Abweichung zeigt. Im Vergleich mit Messwerten, die sich aus der experimentellen Näherung ergeben (Kap. 7.1.4), liegen die gefitteten Werte für Phase II und III etwa viermal höher. Diese Abweichung ist durch den Einfluss von τ_{Fit} zu erklären, der durch die hohen S kompensiert wird. Für Phase I findet sich eine Übereinstimmung mit dem gemessenen S , da hier durch die große Breite des gemessenen Profils im Vergleich mit den anderen Profilen die Anstiegsdauer kurz gegenüber der Abfallsdauer ist. Der Einfluss von τ_{Fit} ist hier somit kleiner. Durch die Näherung in Gl. (80) hingegen ergibt sich ein S , das mit den Messwerten aus Abb. 34 übereinstimmt, da hierin der Anregungsvorgang durch die Produktlösung vom Ionisationsvorgang separiert wird. Unter Annahme des *simple SOL*-Modells erhöhen sich sowohl die Messwerte als auch die Fit-Werte beider Lösungen um einen Faktor 2, da die Dichte nach Gl. (60) in die S -Bestimmung mit eingeht.

Ein Anfitten der gemessenen Kurven links des Nullpunktes ist nicht möglich, der Fit konvergiert nicht. Der Kurvenverlauf hinter der Limiter-Oberfläche ist durch die Limiter-Geometrie zu erklären, die in das verwendete analytische Modell nicht eingeht. Dies findet in der folgenden Monte Carlo-Simulation, die auch diesen Teil A des Profils reproduzieren kann, Bestätigung.

7.1.3 Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten für W^0 mit PSICO

Unberücksichtigt in der analytischen Beschreibung der Ionisations- und An-/Abregungsvorgänge blieben bisher

1. Dichte- und Temperaturprofile (bisher wurden für das gesamte Profil die Werte am Maximum der Emission angenommen)
2. die Geschwindigkeitsverteilung der zerstäubten W-Atome (THOMPSON-Verteilung)
3. die geometrische Verteilung der zerstäubten W-Atome (cos-Verteilung)
4. die Probengeometrie des Limiters
5. die temperaturabhängige Zerstäubungsausbeute für W durch die einfallenden Plasmateilchen.

Da eine analytische Beschreibung unter Berücksichtigung all dieser Verteilungen zu komplex ist und keine Lösung mehr liefert, wurde an dieser Stelle das Experiment mit dem Monte-Carlo-Code PSICO simuliert, der zu diesem Zweck innerhalb dieser Arbeit entwickelt wurde (Kap. 2). Als Ausgangsdaten der PSICO-Simulation wurden die mit ATOM gerechneten Ionisationsratenkoeffizienten S_{ATOM} verwendet (rote Kurve in Abb. 34). Unter Benutzung dieser Daten zeigt sich in Abb. 35(a) für alle Phasen allerdings eine deutliche Abweichung zwischen den gemessenen und den simulierten Emissionsprofilen: die experimentellen Profile dringen, gemessen an der Abfalllänge λ_{eff} , je nach Phase um mindestens einen Faktor 2 tiefer ein, als es die Simulation reproduzieren kann (Beispiel Phase III: $\lambda_{\text{eff,Messung}} = 0.34 \text{ mm}$, $\lambda_{\text{eff,PSICO}} = 0.16 \text{ mm}$). Legt man überschlagsweise den linearen

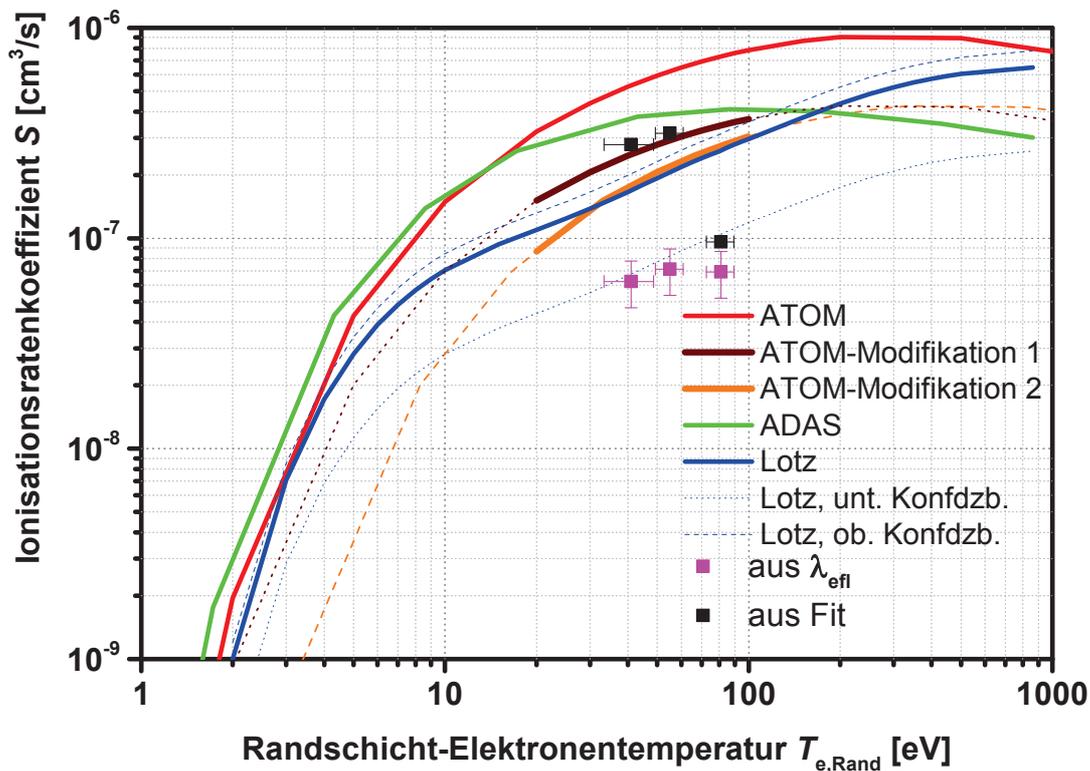
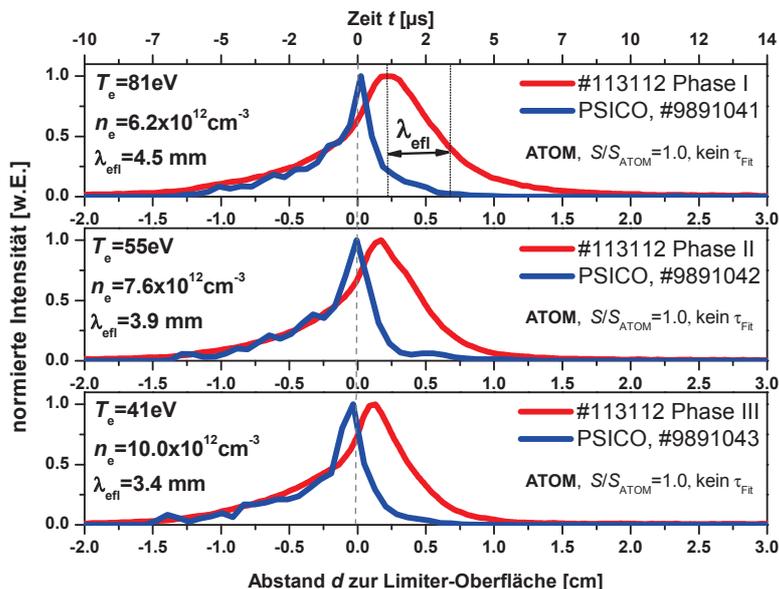
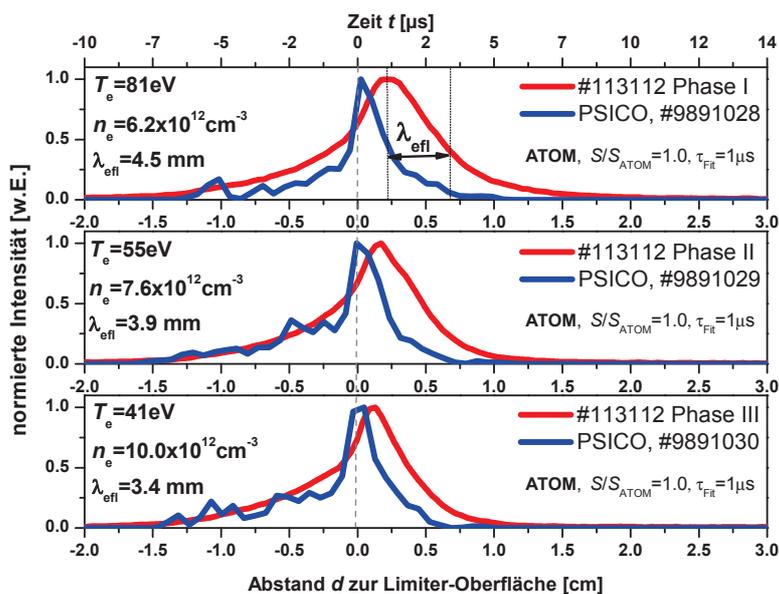


Abbildung 34: Die Ergebnisse zur Ermittlung der Ionisationsratenkoeffizienten sind im Vergleich mit den errechneten Werten (ATOM (rot), ADAS (grün), LOTZ (blau)) aufgetragen. In braun bzw. orange sind die Stufen der Modifikation der ATOM-Daten, mit denen in PSICO gestartet wurde, bis zur besten Anpassung zu sehen. Modifikation 1: Verminderung der ATOM-Daten um einen Faktor 0.5. Modifikation 2: Verschieben des gesamten ATOM-Datensatzes nach rechts auf der Temperaturachse. Die blau gestrichelten Kurven geben die Unsicherheit des LOTZ-Datensatzes bzgl. der PSICO-Simulation an, die sich aus den Unsicherheiten der Dichte- und Temperaturmessungen ergibt. Die schwarzen bzw. rosa Quadrate zeigen die Werte, die mittels des analytischen Modells bzw. der direkten Messung der Abfalllänge ermittelt wurden. Unter Annahme des *simple SOL*-Modells erhöhen sich sowohl die Messwerte (rosa) als auch die Fit-Werte beider Lösungen um einen Faktor 2, da die Dichte nach Gl. (60) in die S -Bestimmung mit eingeht

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment



(a)



(b)

Abbildung 35: (a) Gemessene Profile im Vergleich mit den Ergebnissen der PSICO-Simulation für den unmodifizierten ATOM-Datensatz. Es sind keine Anregungszeit τ_{Fit} und keine Abweichungen von Dichte und Temperatur berücksichtigt. (b) Unmodifizierter ATOM-Datensatz mit $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$.

Zusammenhang $\lambda_{\text{eff}} = \frac{v_W}{n_e S(T_e)}$ zugrunde, so zeigt sich, dass, unter der Annahme korrekter S , dies nur durch eine 2 mal höhere Teilchengeschwindigkeit oder durch eine 2 mal niedrigere Plasmadichte kompensiert werden könnte (zusätzlich zur in PSICO verwendeten Annahme des *simple SOL*-Modells [79] (Kap. 3.3), das eine Absenkung der Dichte hinter der LCFS um 50% beinhaltet). Eine um einen Faktor 2 niedrigere Dichte liegt außerhalb des unteren Konfidenzintervalls (80% der gemessenen Dichte) und kann daher als alleinige Ursache ausgeschlossen werden. Ebenso würde eine um den Faktor 2 erhöhte wahrscheinlichste Geschwindigkeit v_W der W-Teilchen eine Verschiebung des Maximums der THOMPSON-Verteilung zu einer Geschwindigkeit von 4200 m/s hin bedeuten, was die Theorie der THOMPSON-Verteilung nicht hergibt, da sich das Maximum bei einer Geschwindigkeit von 2100 m/s, die der halben Bindungsenergie von $E_{\text{ej,W}} = 4.4$ eV entspricht, befinden muss und damit ebenso als alleinige Fehlerquelle ausgeschlossen werden kann.

Aus diesen Gründen wurde also der Einfluss von Variationen der vorhandenen ATOM-Daten sowie des Parameters τ_{Fit} und der Unsicherheit von Dichte und Temperatur auf die Simulation untersucht. Dabei wurde die Dichte- und Temperatur-Abhängigkeit innerhalb eines Konfidenzintervalls untersucht, das sich aus einem systematischen Fehler der Dichte- und Temperaturmessung von 10% (Dichte) bzw. 30% (Temperatur) ergibt, und im Folgenden als 1σ -Unsicherheit bezeichnet werden soll. Hierzu wurde für unterschiedliche Parameterkombinationen S_{ATOM} mit einem Faktor zwischen 1 und 0.1 multipliziert, also testweise abgesenkt, und die Übereinstimmung der simulierten Emissionsprofile mit den gemessenen durch einen χ^2 -Test für Phase III quantifiziert. Bestimmt wurde das χ^2 über

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (I_{i,\text{Exp}} - I_{i,\text{PSICO}})^2}{I_{i,\text{PSICO}}}, \quad (82)$$

worin $I_{i,\text{Exp}}$ bzw. $I_{i,\text{PSICO}}$ die gemessenen bzw. simulierten normierten Intensitäten der W I (400.88 nm)-Linie an den Messpunkten (Pixeln) i in radialer Richtung darstellen. Durch Division durch die Anzahl der Messpunkte entlang des Emissionsprofils, mit denen verglichen wurde, wurden die χ^2 -Werte normiert.

Als Ergebnis des Stoß-Strahlungs-Modells ergab sich, dass die analytische Beschreibung des Besetzungsvorganges durch den Anregungskoeffizienten X und die Übergangsraten A_{ji} nicht ausreicht, um den zeitlichen Verlauf der Besetzung vollständig zu beschreiben, was sich effektiv im Parameter A_{Fit} äußert. Zur Einbeziehung des Besetzungsvorganges in der Simulation wurde in PSICO eine Befüllung des oberen Niveaus j aus einem unteren Niveau i' heraus gemäß

$$\begin{aligned} n_j(t) &= n_{i'}(t_0) - n_{i'}(t_0)e^{-t/\tau_{\text{Fit}}} \\ &= n_{i'}(t_0)(1 - e^{-t/\tau_{\text{Fit}}}) \end{aligned} \quad (83)$$

angenommen. Hiermit wird die Besetzung des oberen Niveaus j ($5d^5(^6S)6p\ ^7P^\circ\ 4$) aus einem unteren Zustand i (5D_J mit $J = 0, \dots, 5$) über den Umweg des metastabilen Zustands $5d^5(^6S)6s\ ^7S\ 3$ effektiv durch eine Besetzung aus einem unteren Zustand i' beschrieben,

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

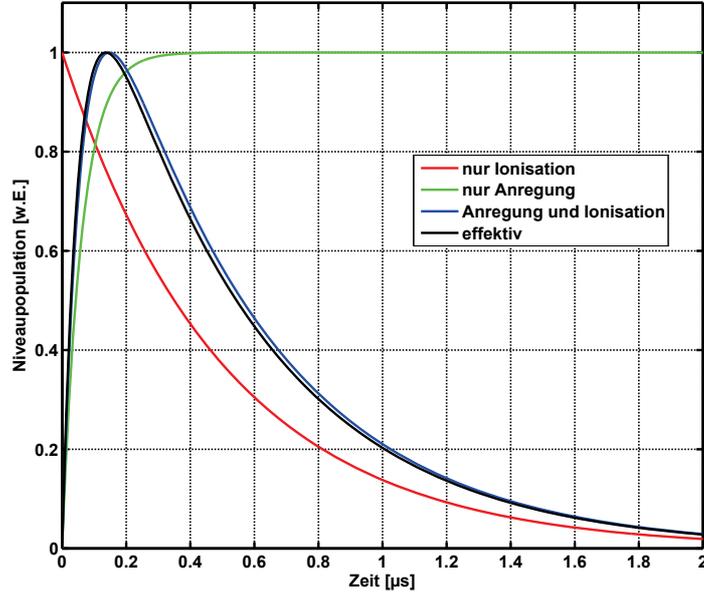


Abbildung 36: Analytische Berechnung des Emissionsprofils nach Gl. (76) in blau. Die Näherung nach Gl. (85) (schwarze Kurve) setzt sich zusammen aus der durch die Ionisation (Gl. (84)) exponentiell abfallenden Neutralteilchendichte (rote Kurve) und dem Anstieg der Teilchendichte mit nach Gl. (83) effektiv angeregtem oberem Niveau.

der die Niveaus $5d^5(^6S)6s\ ^7S\ 3$ und 5D_J ersetzt. So, wie Niveau i' mit der Zeit durch Anregung entvölkert wird, nimmt die Besetzung von Niveau j zu. Die Anzahl der emittierten Photonen wird also zu jedem Zeitpunkt t mit dem Faktor $f_{\text{ex,Fit}} = \frac{n_j(t)}{n_{i'}(t_0)} = (1 - e^{-t/\tau_{\text{Fit}}})$, der den zeitlichen Anregungsvorgang effektiv beschreibt, gewichtet. Diese Formulierung stellt eine Nettobesetzung des oberen Niveaus dar, die zunächst zunimmt und dann konstant bleibt, wenn sich Anregung und Abregung die Waage halten (Abb. 36, grüne Kurve). Da die \mathcal{PEC} nur für diesen Gleichgewichtszustand mit $\frac{dn_j(t)}{dt} = 0$ definiert sind, können diese erst nach dessen Erreichen unverändert benutzt werden. Gleichzeitig bewirkt die Ionisation der Teilchen aus dem unteren Zustand heraus, dass die für eine Anregung zur Verfügung stehenden Neutralteilchen kontinuierlich abnehmen.

Zur Illustration sind in Abb. 36 die Komponenten, die zum Zustandekommen des Emissionsprofils beitragen, aufgeschlüsselt. Wie in Kap. 4.5 dargestellt, kann die Ionisation analytisch beschrieben werden durch

$$n_{i'}(t) = n_{i'}(t_0)e^{-tn_eS} \quad (84)$$

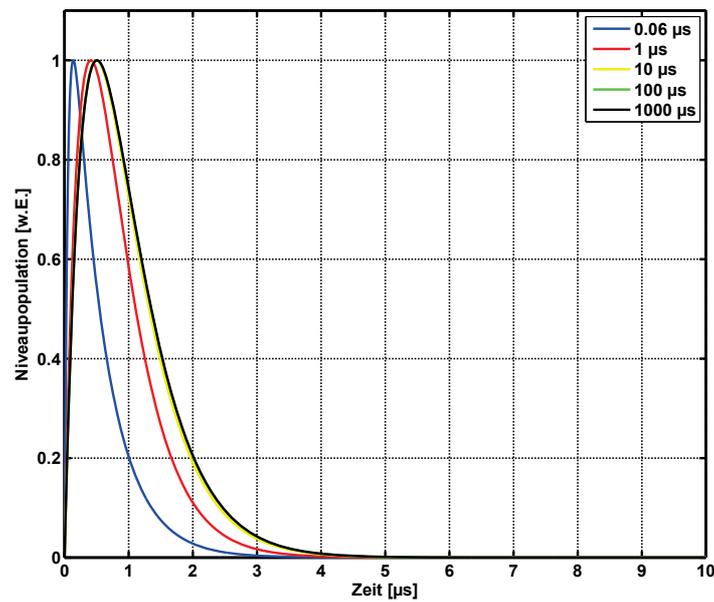


Abbildung 37: Demonstration des Einflusses von τ_{Fit} auf den Verlauf des Emissionsprofils: für ein $\tau_{Fit} > 10 \mu s$ hat der Parameter keine Auswirkung mehr auf die Kurvenbreite. Zum Vergleich entspricht $\tau_{Fit} = \tau_{A_{ji}} = 1/A_{ji}(400.88nm) = 1/1.63 \times 10^7 s^{-1} = 0.06 \mu s$ der mittleren Abregungszeit des oberen Niveaus, die sich aus der Übergangswahrscheinlichkeit $A_{ji}(400.88nm)$ ergibt. Diese Rechnung ergibt also einen Kurvenverlauf ohne ein künstlich erhöhtes τ_{Fit} .

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

(rote Kurve Abb. 36), woraus für die vollständige Näherung des Emissionsprofils (schwarze Kurve Abb. 36) folgt:

$$\begin{aligned} n_j(t) &= n_{i'}(t)(1 - e^{-t/\tau_{\text{Fit}}}) \\ &= n_{i'}(t_0)e^{-tn_e S}(1 - e^{-t/\tau_{\text{Fit}}}). \end{aligned} \quad (85)$$

Der Profilanstieg bis zum Maximum der Emission ist also von den Prozessen zum Erreichen eines Gleichgewichtszustands zwischen Besetzung und Abregung des emittierenden Niveaus geprägt. Jenseits des Maximums dominiert die Ionisation, die zeitgleich kontinuierlich die Anzahl potentiell anregbarer Teilchen abnehmen lässt. Ein Vergleich der Näherung mit der exakten analytischen Beschreibung nach Gl. (76) ist durch die blaue Kurve gegeben. In Abbildung 37 ist der Einfluss auf das Emissionsprofil in einer analytischen Rechnung für verschiedene τ_{Fit} gezeigt. Es ist zu sehen, dass sich jenseits von $1 \mu\text{s}$ die Näherungen immer weniger unterscheiden, der Einfluss von τ_{Fit} auf die Breite der simulierten Profile also gleich bleibt, womit der Bereich zwischen $1 \mu\text{s}$ und $10 \mu\text{s}$ hinsichtlich des Einflusses auf die Breite des Emissionsprofils als obere Grenze für τ_{Fit} betrachtet werden kann. Auch zeigt der χ^2 -Test (Abb. 38 und 39), dass zwischen $1 \mu\text{s}$, $10 \mu\text{s}$ bzw. $50 \mu\text{s}$ nicht mehr signifikant unterschieden werden kann. (Darüber hinaus wird die Übereinstimmung der mittels der WF₆-Injektion (Kap. 6.6) bestimmten Photoeffizienzen für diese Linie für Anregungszeiten größer als $1 \mu\text{s}$ ebenfalls immer schlechter (Kap. 10.3)).

In den Abbildungen 38 und 39 sind die Resultate der verschiedenen χ^2 -Tests wiedergegeben. Zunächst ist zu beobachten, wie in Abb. 38 mit zunehmenden τ_{Fit} sowohl ein Absenken der Kurven hin zu kleineren χ^2 -Werten als auch eine Verbreiterung erfolgt. Eine deutliche Änderung in der Kurvenform des χ^2 -Tests ist zwischen $\tau_{\text{Fit}} = 0.1 \mu\text{s}$ und $1 \mu\text{s}$ zu beobachten. Die Rechnungen ohne τ_{Fit} bzw. mit $\tau_{\text{Fit}} \leq 0.1 \mu\text{s}$ unterscheiden sich wenig, ebenso im Bereich zwischen $1 \mu\text{s}$ und $50 \mu\text{s}$. Hierbei wurde als günstigstes Szenario, was die Breiten der simulierten Emissionsprofile betrifft, gleich mit einer Abweichung der Dichte vom gemessenen Wert innerhalb des 1σ -Konfidenzintervalls zu niedrigeren Werten hin getestet (siehe Dichte- und Temperaturprofile in Abb. 23). Ein absolutes χ^2 -Minimum findet sich für $\tau_{\text{Fit}} = 50 \mu\text{s}$ (dunkelblaue Kurve) bei $S/S_{\text{ATOM}} = 0.5$ mit $\chi_{\text{norm}}^2 = 0.0034$. Aus den vorgenannten Gründen wurde im Folgenden für die Läufe zur Optimierung der Anpassung jedoch konservativ ein $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ gewählt.

In Abb. 39 ist des Weiteren der Einfluss der 1σ -Fehler gezeigt. Ohne Berücksichtigung einer Verminderung von Dichte- und Temperatur kann für das Beispiel von $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ mit $\chi^2 = 0.004$ ein Minimum bei $S/S_{\text{ATOM}} = 0.3$ ausgemacht werden (braune Kurve). Ein 1σ -Fehler in Dichte und Temperatur führt zu einer Verschiebung des Minimums bei vergleichbarem $\chi^2 = 0.0041$ zu $S/S_{\text{ATOM}} = 0.5$ (rote Kurve). Somit macht eine geringere Anpassung von S_{ATOM} bei vergleichbarem χ^2 -Wert eine Absenkung von Dichte und Temperatur im 1σ -Bereich notwendig.

Der Vergleich der Fits bei $S/S_{\text{ATOM}} = 0.3$ und 0.5 in Abb. 44 bzw. 42(b) zeigt aber tendenziell für 0.5 eine bessere Übereinstimmung, was die Breite des Profils betrifft. Ein Absenken der Ratenkoeffizienten führt nämlich primär zu einem flacheren Abfallen des Profils (Abb. 40(a)), wie es für eine negative Kurvensteigung $a = -1/\tau_{\text{Ion}} = -n_e S$ auch zu

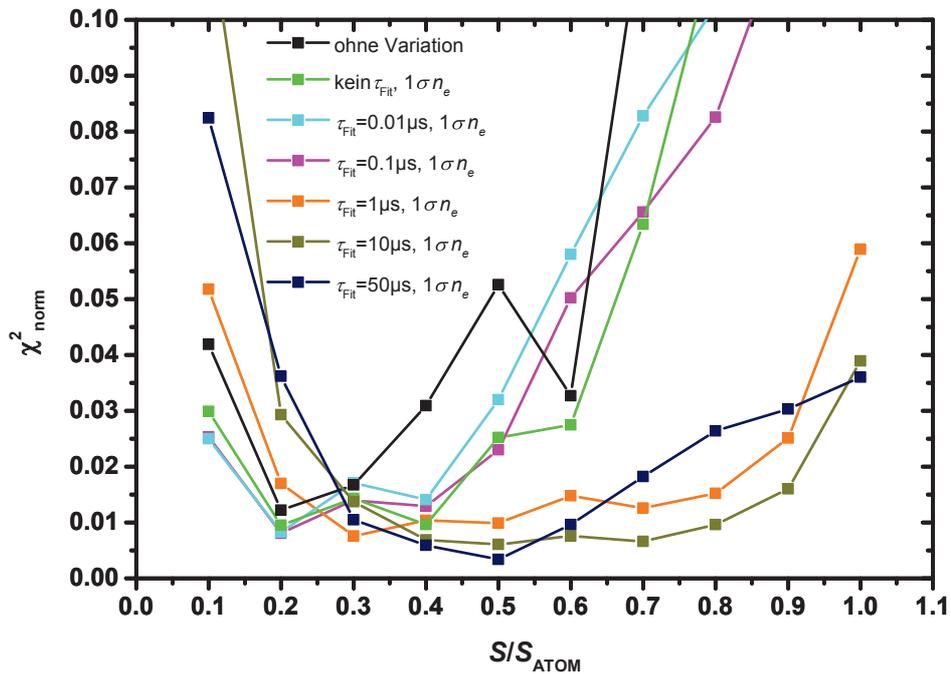


Abbildung 38: χ^2 -Test in Abhängigkeit des Verhältnisses S/S_{ATOM} für zunehmendes τ_{Fit} . Die schwarze Kurve stellt die Referenz ohne τ_{Fit} und ohne Variation in Dichte oder Temperatur dar. Mit zunehmendem τ_{Fit} ist ein Absenken und eine Verbreiterung der Kurven zu beobachten. Zum einen wird eine Anpassung der simulierten Profile also mit größerem τ_{Fit} immer besser, zum anderen sind die Minima der Kurven weniger stark ausgeprägt, wobei die χ^2 -Werte für kleine und große Verhältnisse S/S_{ATOM} immer noch deutlich ansteigen. Ein Unterschied im Verlauf des χ^2 -Tests wird für $\tau_{\text{Fit}} > 0.1 \mu\text{s}$ erkennbar.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

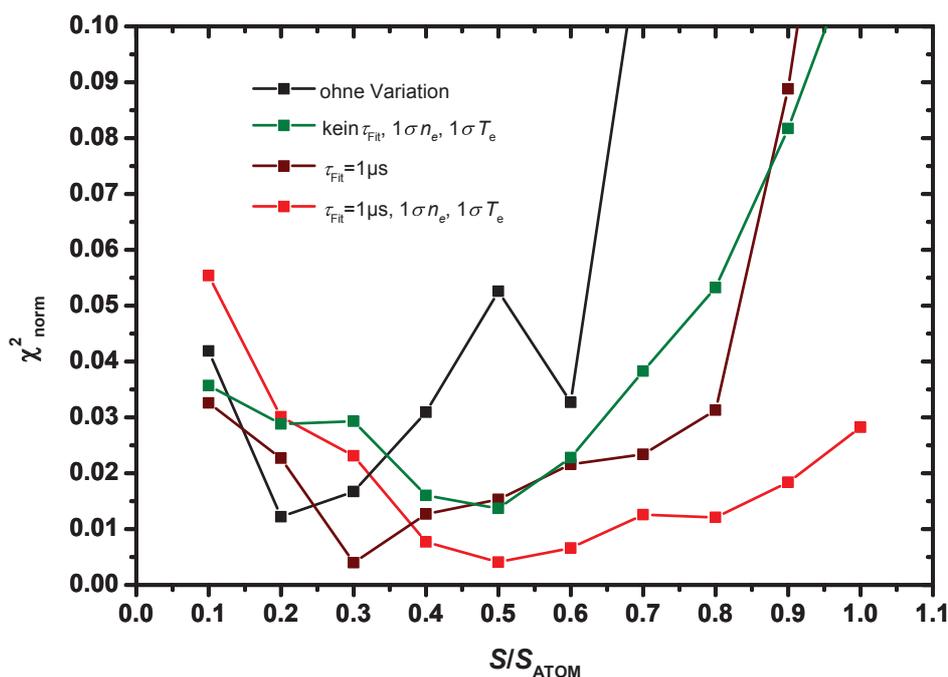
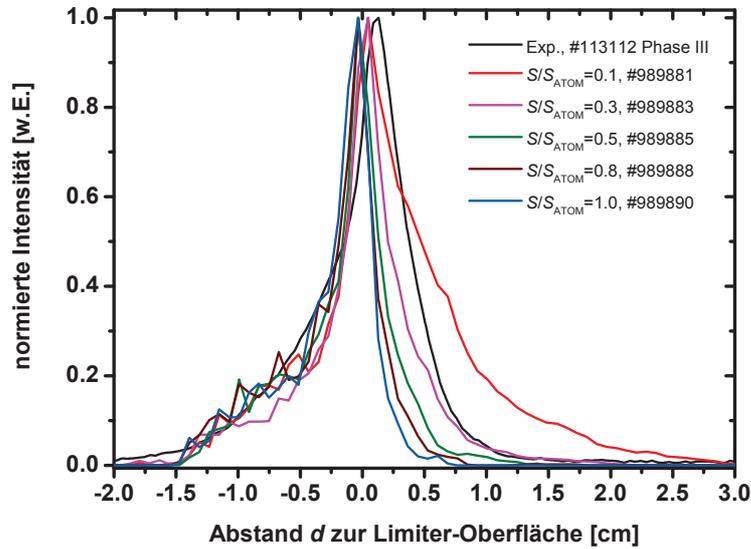
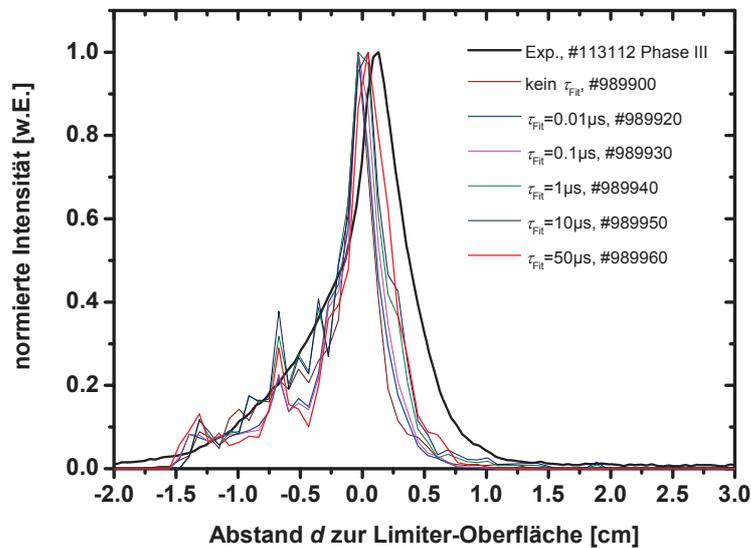


Abbildung 39: Darstellung der Abhängigkeit des χ^2 -Tests unter Berücksichtigung der 1σ -Unsicherheit von Dichte und Temperatur in Richtung niedrigerer Werte. Dieser führt zu einer Absenkung der Kurve (rot). Darüber hinaus ist die Kurve gegenüber dem χ^2 -Test bei gleichem τ_{Fit} aber ohne Berücksichtigung des 1σ -Fehlers (braune Kurve) nach rechts zu einem höheren Wert $S/S_{\text{ATOM}} = 0.5$ verschoben (rote Kurve). Vergleichbare χ^2 -Minima zwischen 0.003 und 0.004 ergeben sich also für ein kleineres Verhältnis $S/S_{\text{ATOM}} = 0.3$ ohne Absenkung von n_e und T_e (braune Kurve) oder für $S/S_{\text{ATOM}} = 0.5$ mit 1σ -Fehler in Dichte und Temperatur (rote Kurve) bzw. durch höheres $\tau_{\text{Fit}} > 1\mu\text{s}$ (bei Absenkung von ausschließlich der Dichte, blaue Kurve Abb. 38).



(a)



(b)

Abbildung 40: (a) Einfluss der Absenkung der ATOM-Daten um bis zu einen Faktor $S/S_{\text{ATOM}} = 0.1$. Mit kleiner werdendem Verhältnis geht ein weniger steiles Abfallen der simulierten Kurven einher. (b) Darstellung des Einflusses von τ_{Fit} für Läufe ohne τ_{Fit} bis maximal $\tau_{\text{Fit}} = 50 \mu\text{s}$. Dabei nimmt die Breite der Kurven zu, während die Steigung der abfallenden Flanken etwa gleich bleibt. Um die gemessene Kurve zu reproduzieren sind also sowohl eine Absenkung der Ratenkoeffizienten als auch eine Anregungszeit τ_{Fit} notwendig.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

erwarten ist. Dagegen verbreitern sich die Profile bei gleich steilem Abfall durch Erhöhung von τ_{Fit} (Abb. 40(b)). Die Änderung von $10 \mu\text{s}$ nach $50 \mu\text{s}$ kann nach den vorherigen Erkenntnissen aus Abb. 36 nicht mehr als signifikant angesehen werden. Somit reduziert sich der für die Simulation passendste Parameterbereich der Anregungszeit auf ein Intervall zwischen $1 \mu\text{s}$ und $10 \mu\text{s}$. Damit ist unter konservativer Annahme einer Anregungszeit von $1 \mu\text{s}$ für die beste Anpassung zunächst die Annahme einer 1σ -Abweichung von Dichte und Temperatur von den gemessenen Werten notwendig.

Die besseren Ergebnisse durch eine 1σ -Temperaturabweichung zu niedrigeren T_e -Werten hin lassen aber auch eine andere Interpretation zu. Eine Minderung der Temperatur führt auf der einen Seite zu einer Minderung der Energie der zerstäubenden Teilchen. Damit verkürzt sich der Cut-Off der THOMPSON-Verteilung, die erodierten W-Teilchen haben daher im Mittel eine geringere Geschwindigkeit und können somit weniger tief bis zur Ionisation ins Plasma eindringen. Dieser Effekt würde also sogar zu schmaleren Emissionsprofilen führen! Gegenläufig wirkt aber ein anderer Aspekt. Ein Absenken der Temperatur bedeutet im betrachteten Temperaturbereich bis max. 100 eV gleichzeitig ein Absenken der Ionisationsratenkoeffizienten $S(T_e)$. Während also ein Absenkung der Plasmatemperatur selbst direkt keinen positiven Effekt für die beobachtete Verbreiterung der Emissionsprofile hat, so haben es doch die dadurch abgesenkten Ratenkoeffizienten. Umgekehrt kann daraus geschlossen werden, dass nicht notwendiger Weise die Unsicherheit der Temperaturmessung zur Erklärung bemüht werden muss, sondern, dass der Verlauf der Ratenkoeffizienten anders aussehen muss, als durch die ATOM-Daten gegeben. Abbildung 34 stellt die unterschiedlichen Stadien der Variation der ATOM-Ratenkoeffizienten dar:

1. Braune Kurve: Absenkung der Werte um den Faktor 0.5.
2. Orange Kurve: Verschiebung der S zu höheren Temperaturen hin, was einer Translation der x-Achse gemäß $x' = x + x \cdot 0.66$ entspricht, wobei der Faktor 0.66 der 1σ -Abweichung der Temperaturmessung nach unten entspricht.

Damit decken sich die gefundenen Werte im untersuchten Temperaturbereich mit den nach der LOTZ-Methode bestimmten!

In den Abb. 35(a) bis 45(b) sind die unterschiedlichen Stufen der Annäherung an die gemessenen Emissionsprofile für alle drei Phasen dargestellt. Tabelle 6 und Abb. 41 gibt einen Überblick über die im jeweiligen PSICO-Lauf benutzten Parameter und das Ergebnis der χ^2 -Tests. Für alle Parameterkombinationen ist zu erkennen, wie die Übereinstimmung der gemessenen mit den simulierten Profilen von Phase I zu Phase III immer besser wird. Eine mögliche Erklärung könnte das Fehlerintervall der Dichte sein, sodass sich der in der Simulation angenommene Wert für Phase III näher am realen Wert befindet als für Phase I. Eine Konsequenz ist, dass die Positionen der Emissionsmaxima sich von Phase I zu Phase III in Messung und Simulation immer besser decken (siehe Abb. 23). Als toroidale Position zur Auswertung der Profile wurde in der Simulation immer die der Messung benutzt, um alle Einflüsse vergleichbar zu halten. Sind die Maxima von Messung und Simulation gegeneinander verschoben, hat dies auch Einfluss auf den Profilverlauf. Für

Abbildung	PSICO-Lauf	Datensatz	S/S_{Daten}	τ_{Fit}	$1\sigma_{n_e}$	$1\sigma_{T_e}$	χ^2_{norm}
35(a)	# 9891043	ATOM	1.0	–	–	–	0.262
35(b)	# 9891030	ATOM	1.0	$1\ \mu\text{s}$	–	–	0.075
42(a)	# 9891056	ATOM	0.47	$1\ \mu\text{s}$	–	–	0.009
42(b)	# 989871	ATOM	0.47	$1\ \mu\text{s}$	×	×	0.003
43(a)	# 9891073	ATOM	0.47	$1\ \mu\text{s}$	×	–	0.005
43(b)	# 9891076	ATOM	0.47	$1\ \mu\text{s}$	–	×	0.005
44	# 9891091	ATOM	0.3	$1\ \mu\text{s}$	–	–	0.004
45(a)	# 9891079	Lotz	1.0	–	–	–	0.015
45(b)	# 9891027	Lotz	1.0	$1\ \mu\text{s}$	–	–	0.004
46(a)	# 9891085	Lotz	1.0	$1\ \mu\text{s}$	×	–	0.006
46(b)	# 9891088	Lotz	1.0	$1\ \mu\text{s}$	–	×	0.008
49(a)	# 9891024	ADAS	1.0	$1\ \mu\text{s}$	–	–	0.021

Tabelle 6: Überblick über die im jeweiligen PSICO-Lauf benutzten Parameter und das Ergebnis der χ^2 -Tests.

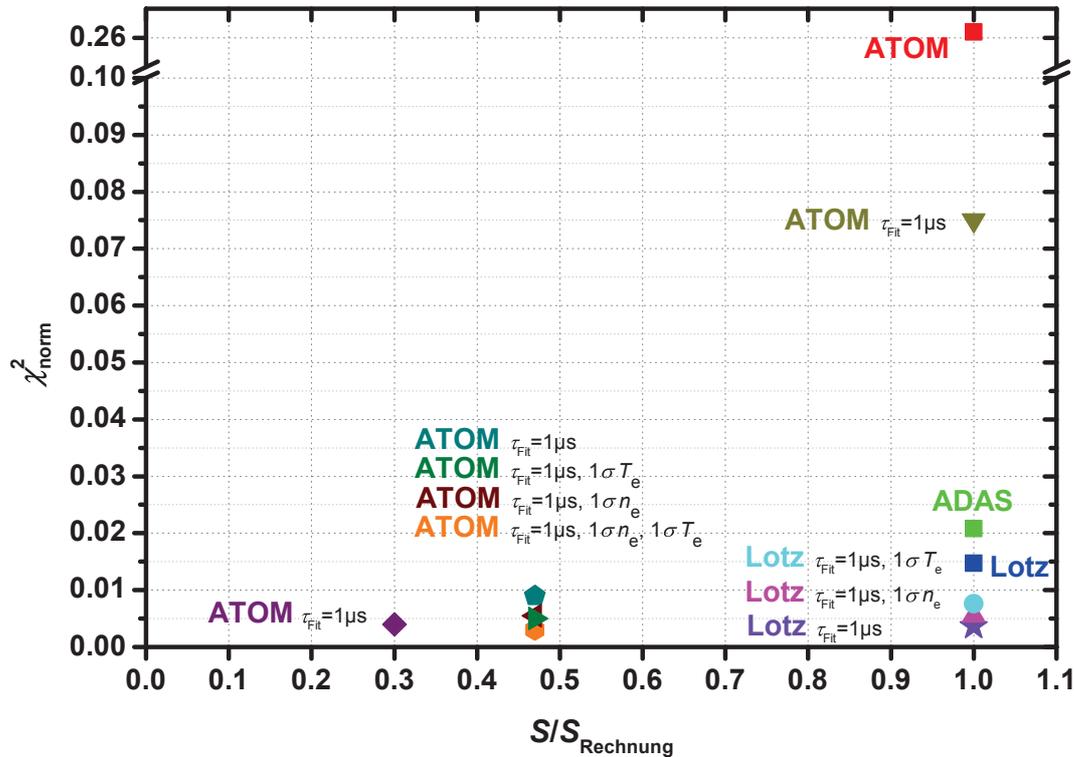


Abbildung 41: Ergebnisse der besten χ^2 -Tests sind zusammen mit den Tests für unveränderte Datensätze.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

Phase III ist die beste Übereinstimmung gegeben. Über den direkten, linearen Einfluss der Dichte auf die Profile hinaus ist auch ein Einfluss auf den Anregungsvorgang, der in PSICO dichteunabhängig beschrieben wird, möglich. Denn je kleiner die Dichte ist (n_e nimmt von Phase I bis III zu), umso langsamer dürfte auch die Besetzung durch Elektronenstöße vonstatten gehen und die Profile somit verbreitern. Dies stimmt mit den experimentellen Befunden überein. Dies bedeutet, dass eine Dichteabhängigkeit des Anregungsvorgangs, bevor der \mathcal{PEC} einen konstanten Wert annimmt, zu berücksichtigen ist.

In den Abbildungen 45(a) bis 46(b) sind die simulierten Emissionskurven unter Anwendung der LOTZ-Daten gezeigt ($\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$). Abbildung 49(a) stellt das Ergebnis der Anwendung des unveränderten ADAS-Datensatzes (bei $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$) dar. Wie zu erwarten ist, stimmen die Kurven für die höheren Ratenkoeffizienten aus der ADAS-Datenbank schlechter mit der Messung überein als unter Verwendung der LOTZ-Daten, die sich (zumindest im untersuchten Temperaturbereich) als beinahe deckungsgleich mit den modifizierten ATOM-Daten erwiesen haben. Bei Anwendung der LOTZ-Daten liefert eine Minderung der Dichte Verbesserung hinsichtlich des χ^2 -Tests (Abb. 46(a)). Eine Absenkung der Temperatur führt wie erwartet auch hier zu einem weniger steilen Abfall, die Anpassung insgesamt ist aber schlechter (Abb. 46(b)).

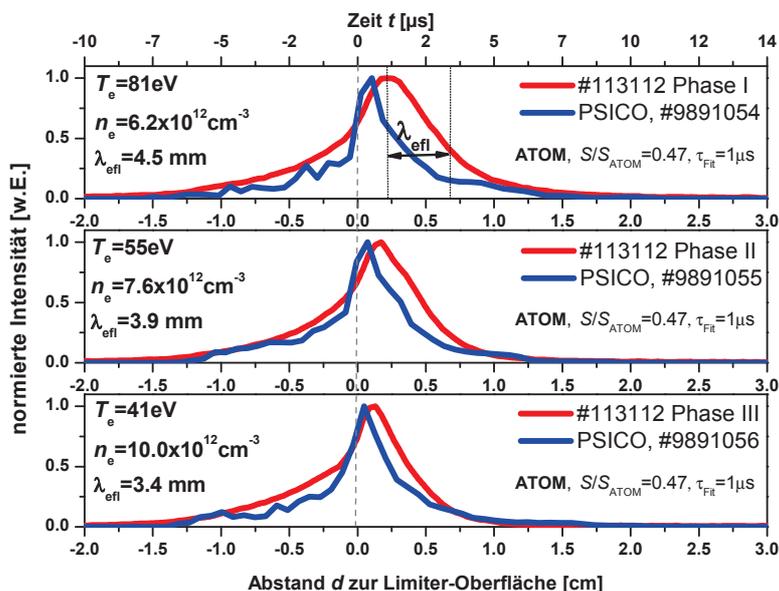
Um den Einfluss der Unsicherheit der Dichte- und Temperaturmessung auf die Ermittlung des S zu testen, wurde unter Annahme von Dichte- und Temperaturdaten auf dem oberen bzw. unteren Konfidenzband der LOTZ-Datensatz (wie zuvor die ATOM-Daten) so durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor variiert, dass die beste Übereinstimmung mit den gemessenen Profilen wieder erreicht werden konnte. Abb. 47(a) zeigt die Ermittlung des Faktors S/S_{LOTZ} für die unteren Konfidenzbänder, Abb. 47(b) für die oberen. Mit den sich so ergebenden Faktoren $S/S_{\text{LOTZ}} = 1.2$ unter Annahme des unteren Bandes und $S/S_{\text{LOTZ}} = 0.4$ unter Annahme des oberen Bandes ergeben sich die in den Abb. 34, 58 und 68 gezeigten Unsicherheiten des LOTZ-Datensatzes als Resultat der Messunsicherheiten für n_e und T_e . In den Diagrammen 48(a) und 48(b) sind die Ergebnisse der Simulationen für die unteren Konfidenzbänder und $S/S_{\text{LOTZ}} = 1.2$ sowie die oberen Konfidenzbänder und $S/S_{\text{LOTZ}} = 0.4$ gezeigt. Innerhalb dieser Unsicherheiten können alle Phasen – insbesondere auch Phase I – gut reproduziert werden.

In den Abbildungen 50(a) bzw. 50(b) ist die sukzessive Annäherung an die beste Anpassung für Phase III ausgehend sowohl vom ATOM- als auch vom Lotz-Datensatz dargestellt.

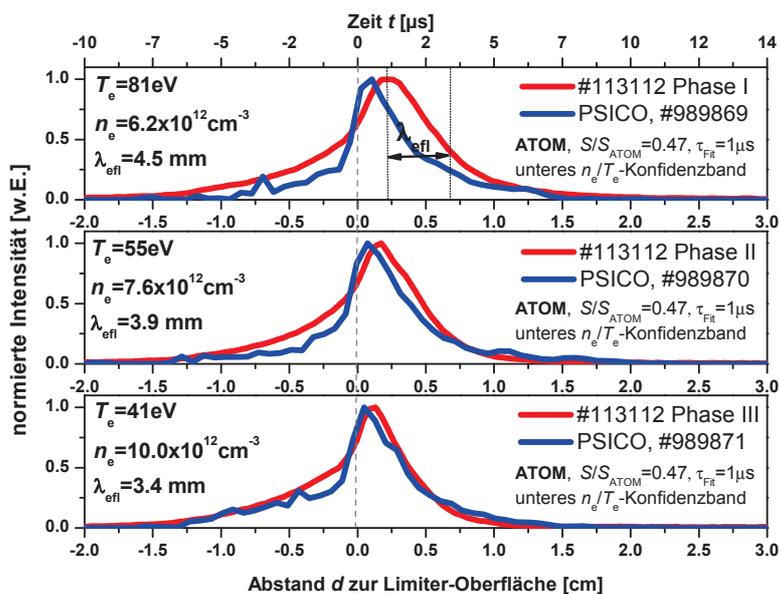
Abbildung 49(b) zeigt eine Abschätzung des Fehlers der räumlichen Kalibration. Zu sehen ist, dass die Unsicherheit in der Kurvenbreite keine kritische Größe darstellt. Stärker fällt der Fehler der Positionierung des Emissionsmaximums relativ zur Limiteroberfläche ins Gewicht, die durch die Unsicherheit in der Angabe des Pixels bestimmt ist, dem der Rand der Oberfläche zuzuordnen ist. Für diese muss sowohl nach oben als auch nach unten ein Fehler von $\Delta d(\text{Max, Oberfl}) = \pm 1$ Pixeln angenommen werden, was zu einem Fehler im Abstand des Maximums von der Düse von $\Delta d(\text{Max, Oberfl}) = \pm 0.5$ mm führt. Auch mit dieser Unsicherheit ist das Maximum der Emission noch immer vor der Düsenoberfläche zu lokalisieren. Es kann nicht durch einen geometrischen Effekt erklärt werden,

wie beispielsweise eine Summation der Intensität entlang der Limiteroberfläche in radialer Richtung zum Plasmazentrum hin. Zwar summiert sich entlang der Sichtlinie mit abnehmendem Radius immer mehr Intensität, da sie durch die Krümmung des Limiters einen immer größer werdenden Bereich der Oberfläche streift, bis sie tangential dazu verläuft. Der Anstieg links des Maximums ist dieser Tatsache geschuldet, wie beim Anfitzen des analytischen Modells vermutet und durch die Simulation nun auch belegt. Spätestens bei tangentialer Sicht müsste die Intensität aber abfallen, da kontinuierlich abfallende Anteile in summa keinen Anstieg zur Folge haben können. Ein Maximum vor der Oberfläche nur durch geometrisches Aufaddieren ist somit unmöglich und das Maximum müsste in diesem Falle direkt an der Kante liegen. Der Anstieg muss somit atomphysikalisch bestimmt sein.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

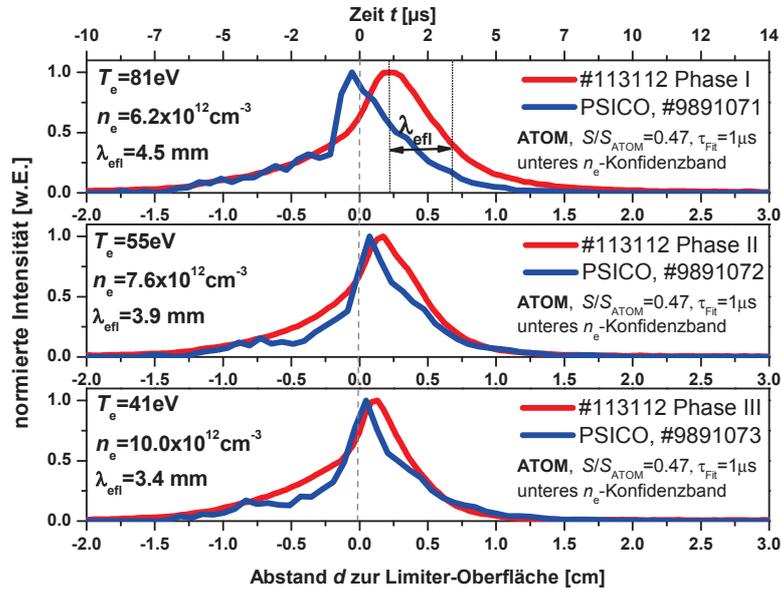


(a)

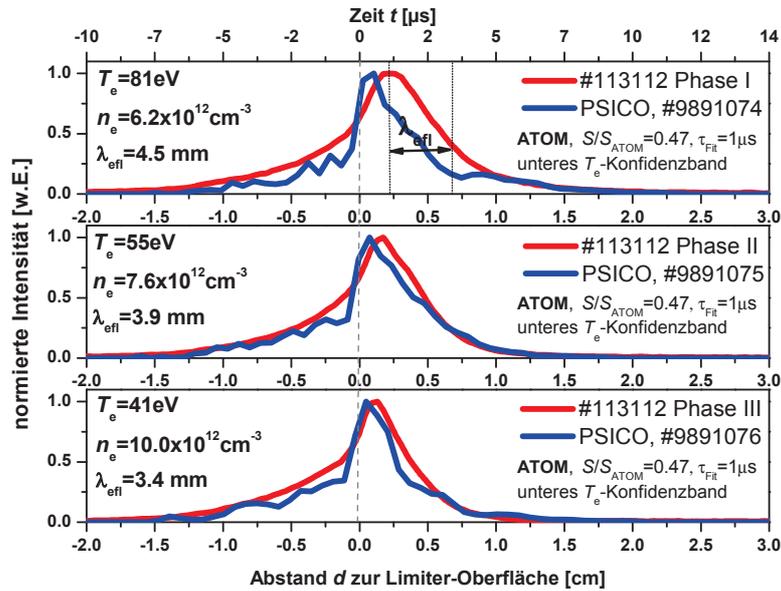


(b)

Abbildung 42: (a) Modifizierter ATOM-Datensatz mit $S/S_{\text{ATOM}} = 0.47$ und $\tau_{\text{Fit}} = 1\mu\text{s}$. (b) Modifizierter ATOM-Datensatz mit $S/S_{\text{ATOM}} = 0.47$, $\tau_{\text{Fit}} = 1\mu\text{s}$ und 1σ -Abweichung nach unten von n_e und T_e . Dies stellt die beste Näherung für Phase III mit $\chi_{\text{norm}}^2 = 0.003$ dar.



(a)



(b)

Abbildung 43: Einfluss der 1σ -Abweichung nach unten in n_e und T_e : Modifizierter ATOM-Datensatz mit $S/S_{\text{ATOM}} = 0.47$, $\tau_{\text{Fit}} = 1\mu\text{s}$ und (a) 1σ -Abweichung von n_e (b) von T_e .

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

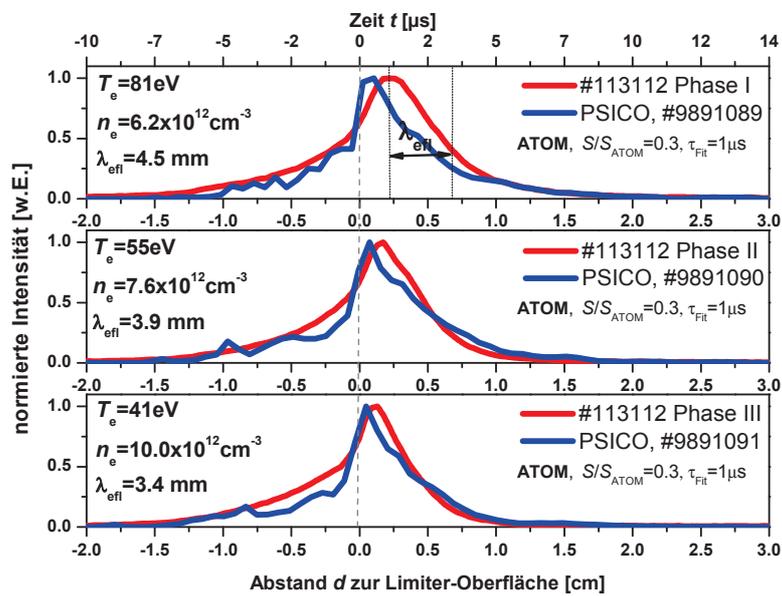
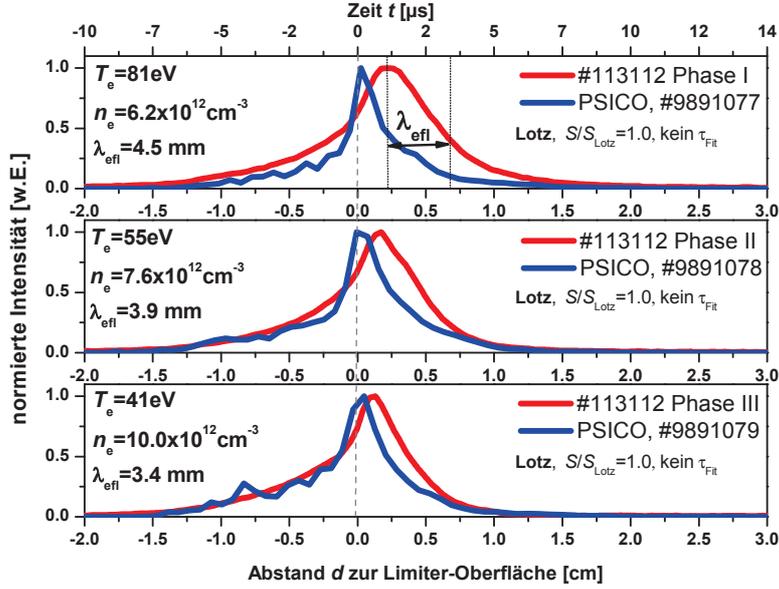
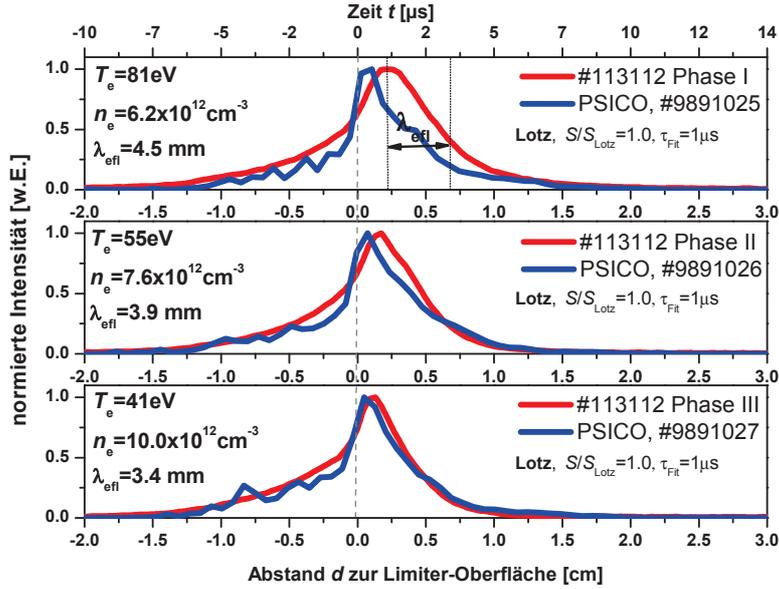


Abbildung 44: Modifizierter ATOM-Datensatz mit $S/S_{\text{ATOM}} = 0.3$, $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ ohne 1σ -Abweichung von n_e und T_e . Dies stellt die zweitbeste Näherung für Phase III dar mit $\chi_{\text{norm}}^2 = 0.004$ dar.



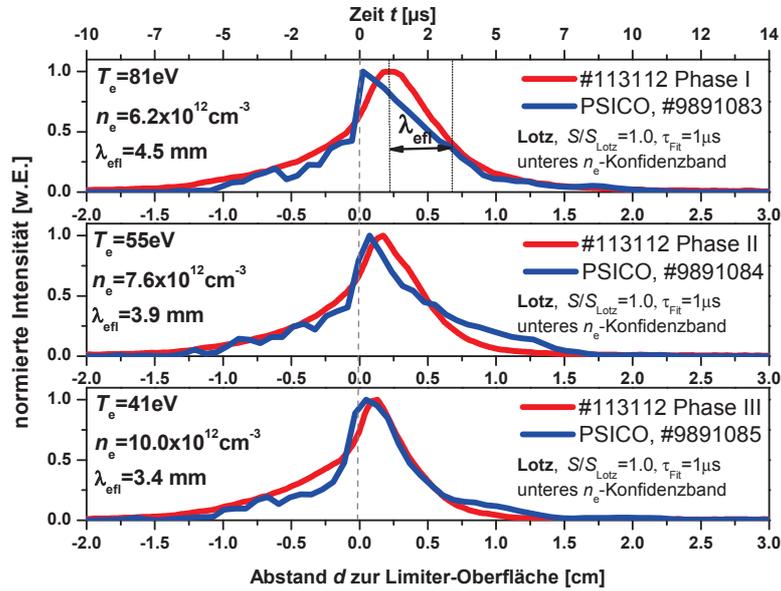
(a)



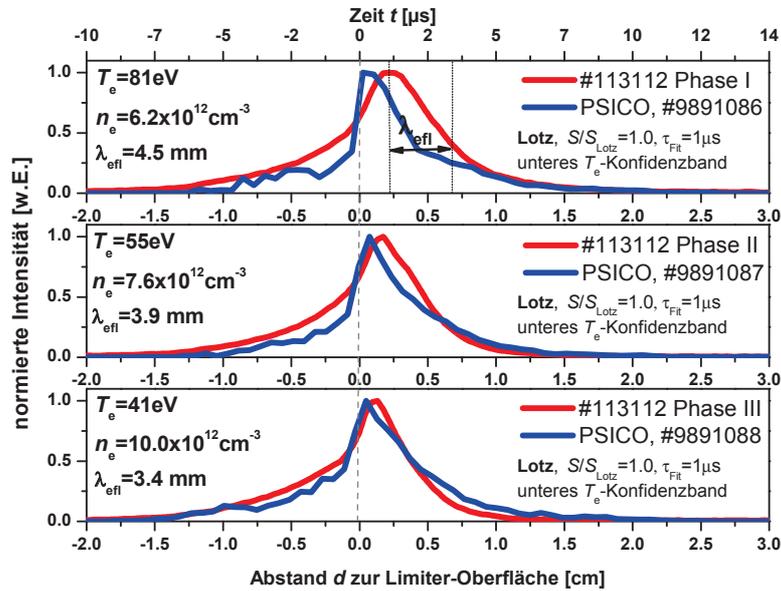
(b)

Abbildung 45: (a) Gemessene Profile im Vergleich mit den Ergebnissen der PSICO-Simulation für den unmodifizierten LOTZ-Datensatz. Es sind keine Anregungszeit τ_{Fit} und keine Abweichungen von Dichte und Temperatur berücksichtigt. (b) Unmodifizierter LOTZ-Datensatz mit $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$. Dies stellt die beste Näherung für Phase III unter Benutzung des LOTZ-Datensatzes dar mit $\chi_{\text{norm}}^2 = 0.004$.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

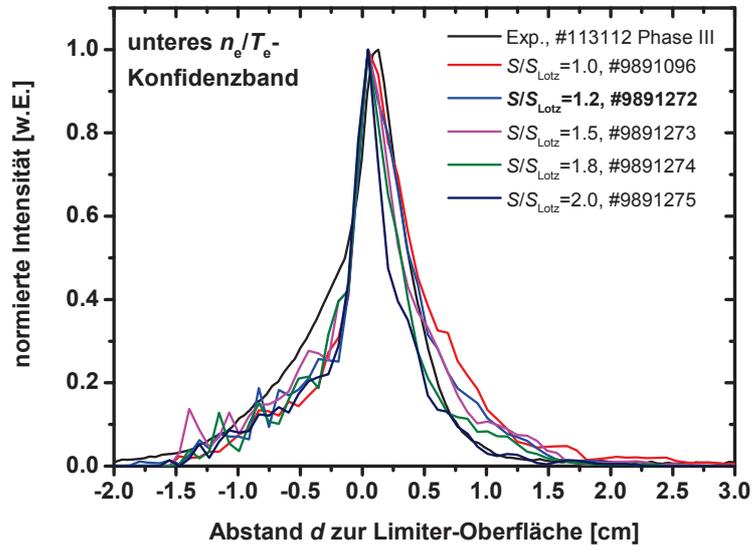


(a)

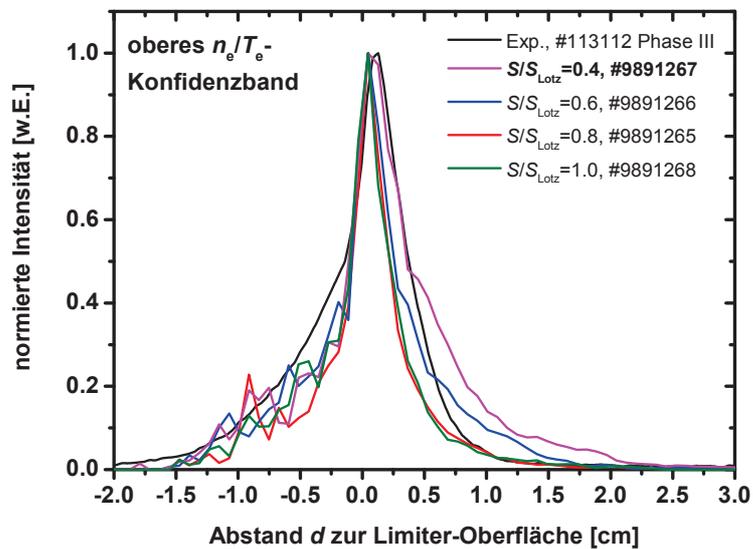


(b)

Abbildung 46: Einfluss der 1σ -Abweichung in n_e und T_e : Unmodifizierter LOTZ-Datensatz mit $S/S_{\text{Lotz}} = 1.0$, $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ und (a) 1σ -Abweichung von n_e (b) von T_e .



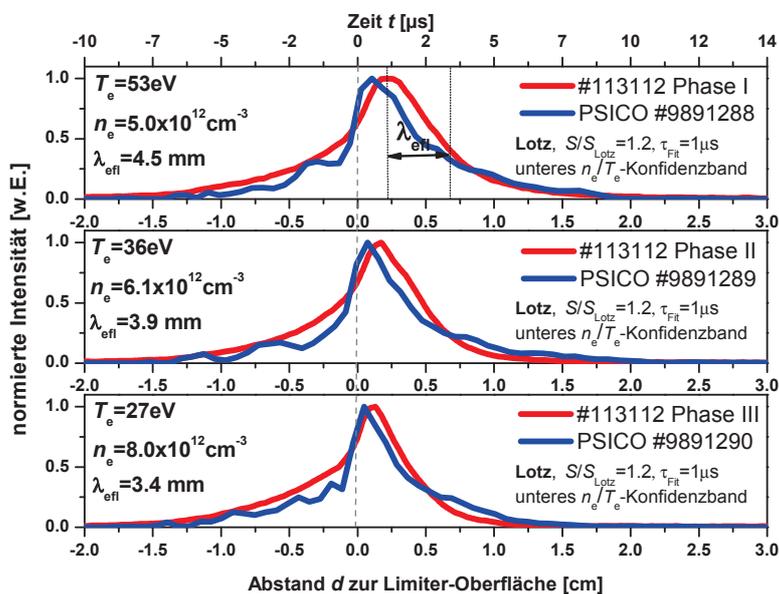
(a)



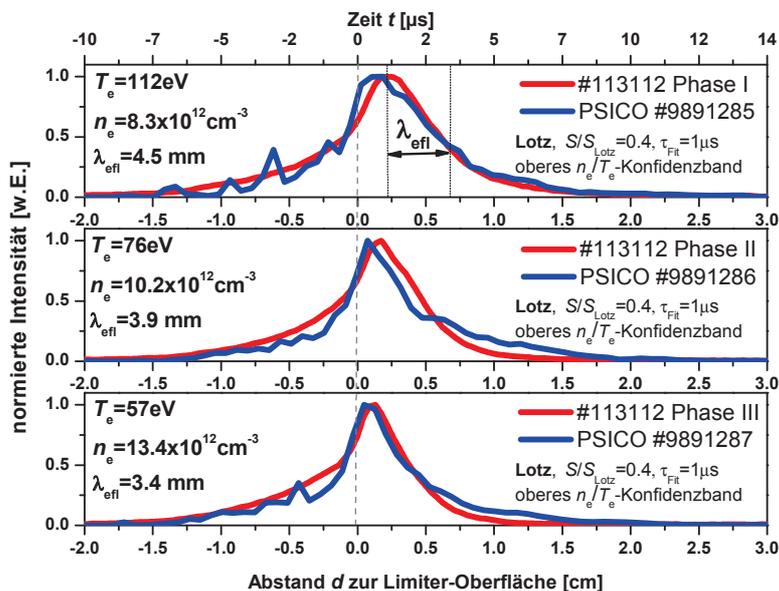
(b)

Abbildung 47: Untersuchung des Einflusses (a) der unteren Konfidenzbänder von n_e bzw. T_e (b) der oberen Konfidenzbänder von n_e bzw. T_e und den sich daraus ergebenden Faktor $S/S_{LOTZ} = 1.2$ für die unteren Bänder und $S/S_{LOTZ} = 0.4$ für die oberen Bänder.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment

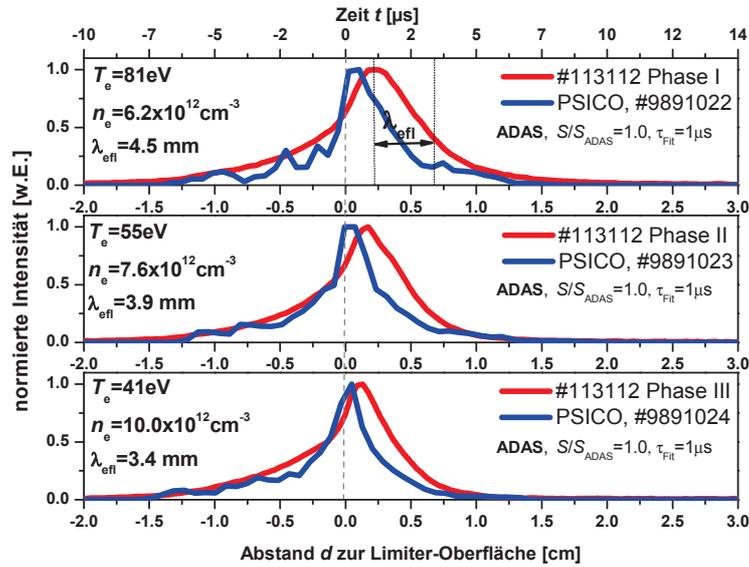


(a)

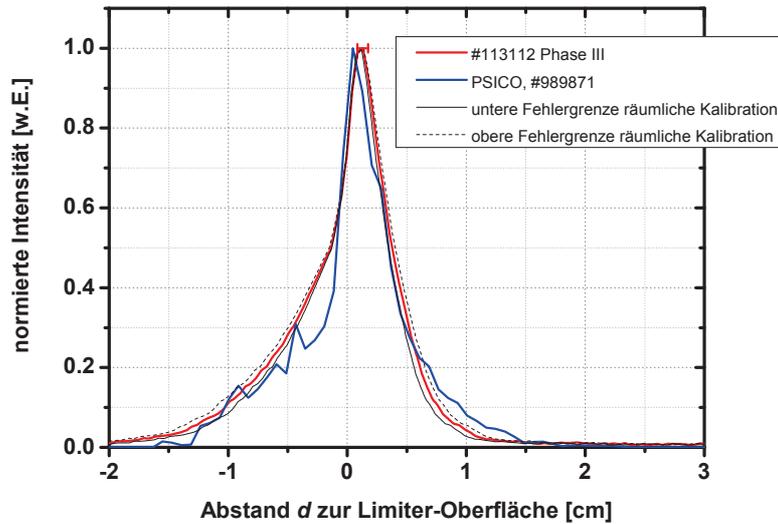


(b)

Abbildung 48: Beste Anpassung des LOTZ-Datensatzes mit (a) $S/S_{\text{Lotz}} = 1.2$ für die unteren Konfidenzbänder (b) $S/S_{\text{Lotz}} = 0.4$ für die oberen Konfidenzbänder.



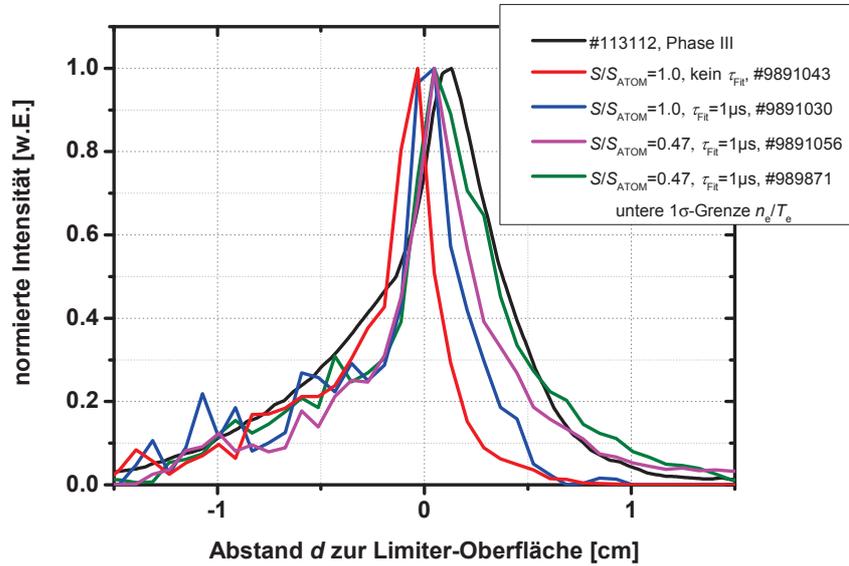
(a)



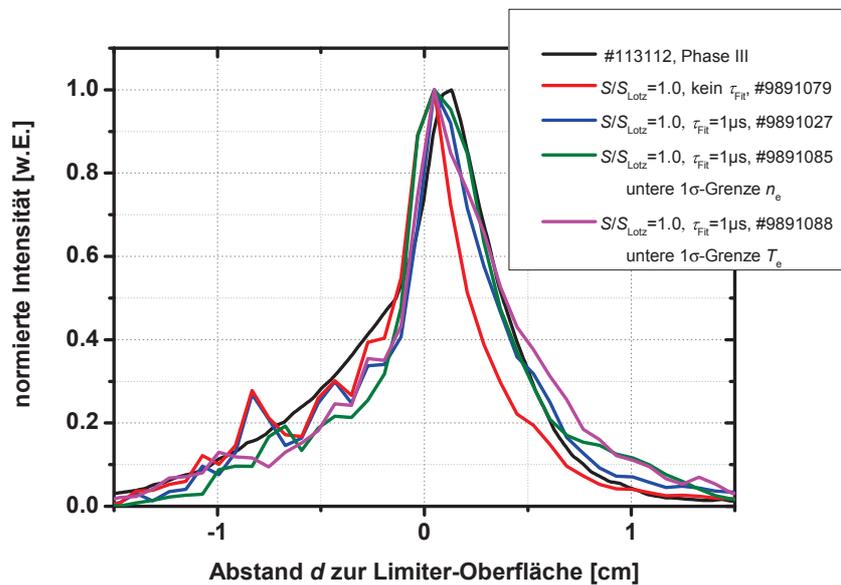
(b)

Abbildung 49: (a) Gemessene Profile im Vergleich mit den Ergebnissen der PSICO-Simulation für den unmodifizierten ADAS-Datensatz mit $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$. Es sind keine keine Abweichungen von Dichte und Temperatur berücksichtigt. (b) Darstellung der absoluten Ortsunsicherheit des Maximums relativ zur Limiter-Oberfläche (roter Fehlerbalken) und des oberen und unteren Fehlers in der räumlichen Kalibration (schwarze gestrichelte Kurven). Der Kalibrationsfehler stellt demnach keine kritische Größe beim Vergleich mit den simulierten Profilen dar, da durch Änderung der Parameter größere Änderungen in der Kurvenbreite erzeugt werden als durch Berücksichtigung des Fehlers. Auch liegt das Maximum unter Berücksichtigung des Ortsfehlers immer noch *vor* der Limiter-Oberfläche.

7.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einem W-Zerstäubungsexperiment



(a)



(b)

Abbildung 50: Überblick der stufenweisen Annäherung der simulierten Profile an die gemessenen auf Grundlage des (a) ATOM-Datensatzes (b) LOTZ-Datensatzes.

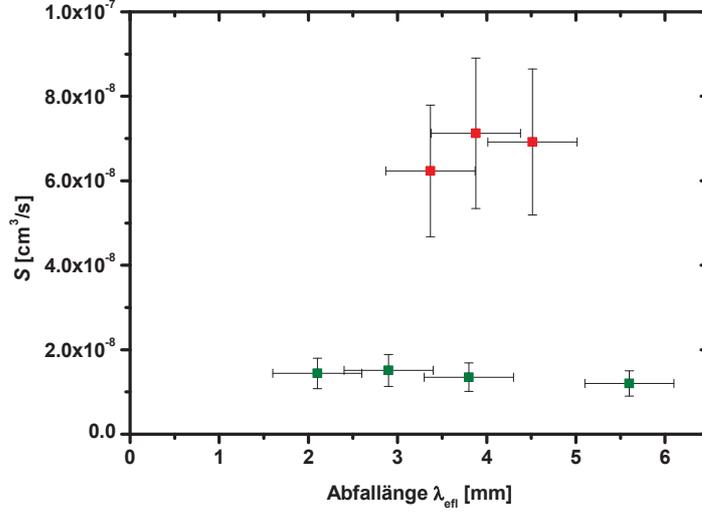


Abbildung 51: Gegen die den gemessenen Emissionsprofilen entnommene Abfalllängen λ_{eff} sind die daraus mit Hilfe von Dichte und Teilchengeschwindigkeit bestimmten Ionisationsratenkoeffizienten aufgetragen. Rote Quadrate: Limiter-Experiment, grüne Quadrate: WF₆-Injektion (siehe Kap. 6.6).

7.1.4 Experimentelle Näherung: Bestimmung von S aus der Abfalllänge λ_{eff}

Die Lösung der Differentialgleichung

$$\frac{dn_A}{dd} = -\frac{n_A n_e S}{v_W}, \quad (86)$$

die die örtliche Abnahme der der Neutralteilchen durch Ionisationsvorgänge beschreibt, liefert

$$n_A(d) = n_A(d_0) e^{-\frac{d}{\lambda_{\text{Ion}}}} = n_A(d_0) e^{-\frac{dn_e S}{v_W}} \quad (87)$$

mit der Ionisationslänge

$$\lambda_{\text{Ion}} = \frac{v_W}{n_e S}. \quad (88)$$

Im Gegensatz zur Abfalllänge λ_{eff} ist die Ionisationslänge λ_{Ion} experimentell u.U. nicht direkt zugänglich, da die Form des Emissionsprofils und damit auch die messbare Abfalllänge nicht alleine durch den Ionisationsvorgang, sondern die experimentelle Geometrie (wie z.B. die Probenform) und die räumliche Verteilung der zerstäubten Teilchen bestimmt wird. Wird in erster, oft experimentell angewandter Näherung die Annahme $\lambda_{\text{Ion}} \approx \lambda_{\text{eff}}$ gemacht, kann S dann bei Kenntnis von n_e , v_W und λ_{eff} mit

$$S = \frac{v_W}{n_e \lambda_{\text{Ion}}} \quad (89)$$

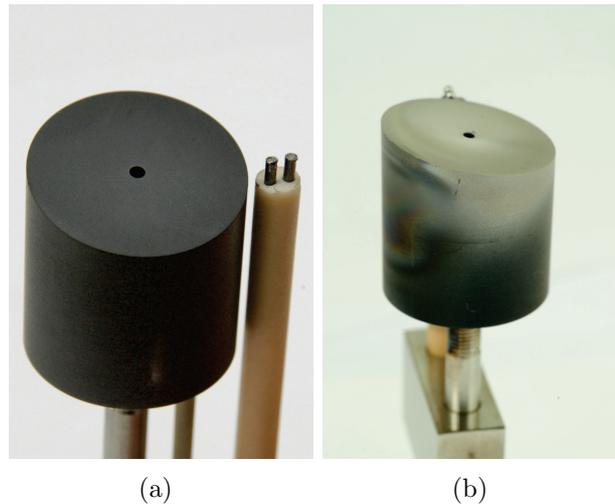


Abbildung 52: WF_6 -Injektionsdüse aus Kohlenstoff (a) vor dem Experiment (b) nach dem Experiment. Seitlich und auf der Düse ist die W-Beschichtung zu erkennen, deren Zerstäubung während der Plasmaentladung #111592 im Licht der W I (400.88 nm)-Linie beobachtet wurde. Neben der Düse ist die LANGMUIR-Doppelsonde zu erkennen, die allerdings während des Experiments aufgrund einer zu hohen Wärmebelastung schmolz.

bestimmt werden. Auch in dieser Näherung wird S über die Profile hinweg als konstant angenommen. Mit $v_W = 2100 \text{ m/s}$ ergeben sich die in Abb. 51 gezeigten Ionisationsratenkoeffizienten (rote Quadrate), deren Mittel für den Temperaturbereich der drei Phasen des Zerstäubungsexperiments bei $\langle S(T_e = 45\text{--}85 \text{ eV}) \rangle = 7 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ liegt. Unter Annahme des *simple SOL*-Modells ergeben sich um einen Faktor 2 höhere S . In Diagramm 34 sind die ermittelten S (rosa Quadrate) im Vergleich mit den gerechneten Kurven gezeigt. Es zeigt sich, dass die gefundenen S etwa einen Faktor 5 bis 10 unterhalb der von ATOM gerechneten Ionisationsratenkoeffizienten liegen. Im *simple SOL*-Modell sind sie in Übereinstimmung mit den LOTZ-Daten, mit denen die Emissionsprofile durch PSICO reproduziert werden konnten.

7.2 Zerstäubung einer abgelagerten W-Schicht bei einfacher Geometrie

Als Test der gewonnenen Erkenntnisse bietet sich ein Nebenprodukt der in Kap. 8 beschriebenen WF_6 -Injektion zur Realisierung einer kontrollierbaren W-Quelle an, der hier vorgegriffen werden soll. Im Gegensatz zum Limiter-Experiment liegt hier eine im Vergleich mit dem Kugel-Limiter deutlich einfachere Geometrie vor, sodass geometrische Effekte als Einfluss (besonders auf den Anstieg der Emissionskurve) weitestgehend ausgeschlossen werden können. Zusätzlich bietet sich hier die Gelegenheit, die Güte der PSICO-Simulation in einem zweiten Szenario zu testen.

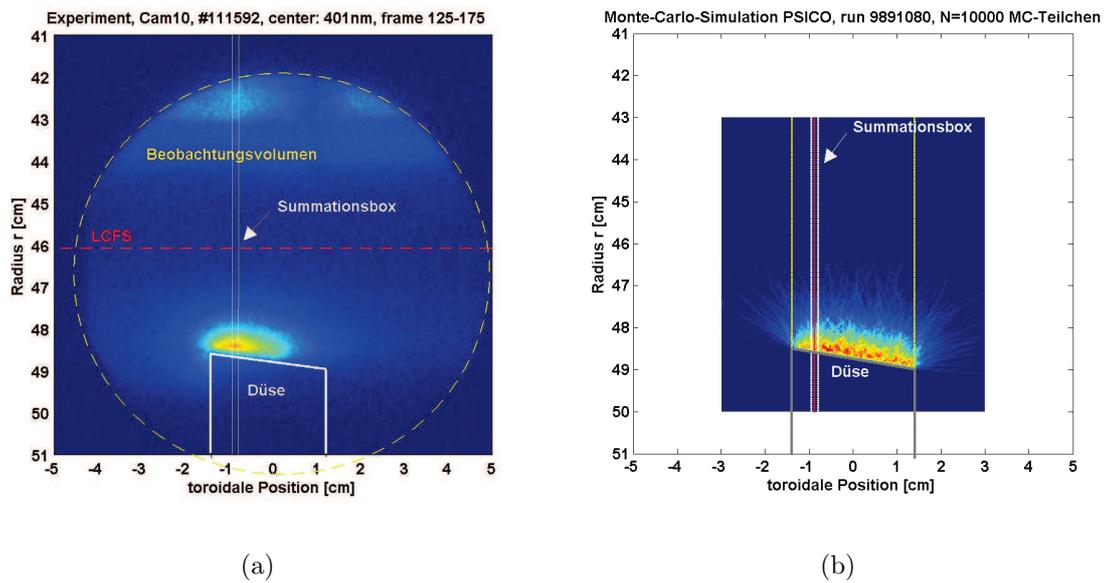
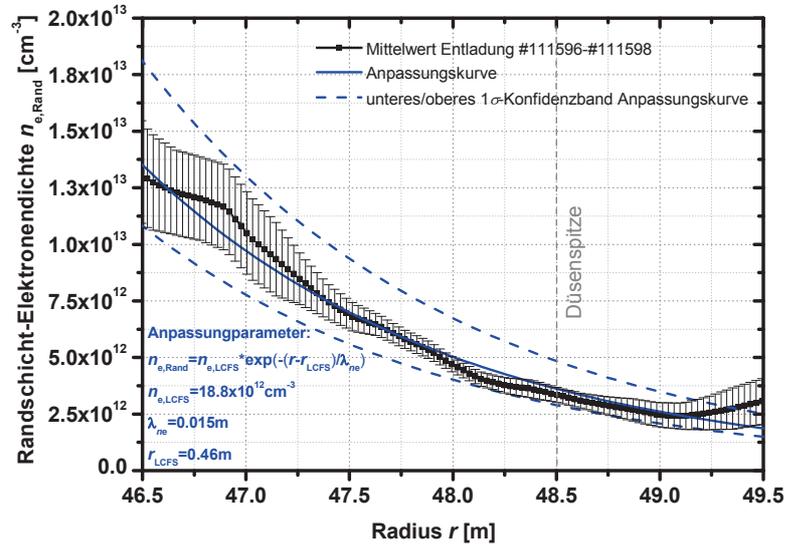
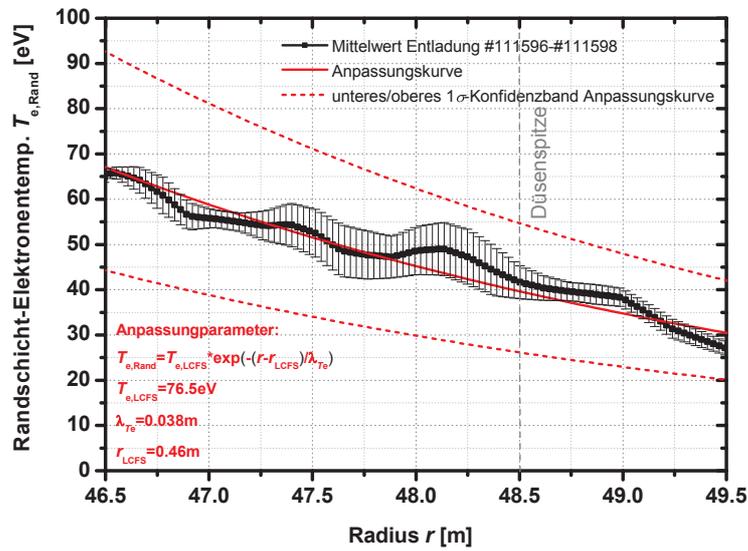


Abbildung 53: (a) Kamerabild der W-Zerstäubung auf der Düsenoberfläche während der Plasmaentladung #111592 im Licht der $W \text{ I}$ (400.88 nm)-Linie. (b) PSICO-Simulation der W-Zerstäubung. Das Emissionsprofil erstreckt sich hier im Gegensatz zum Experiment über den gesamten Bereich der oberen Düsenoberfläche, da im Gegensatz zur inhomogenen Beschichtung im Experiment eine homogene W-Schicht angenommen wurde. Aufgrund einer Ionisationslänge von $\langle \lambda_{Ion} \rangle = 7.8 \text{ mm}$ kann der Einfluss der Zerstäubung rechts vom Nullpunkt auf das simulierte Emissionsprofil (Abb. 55(a)) aber vernachlässigt werden.

7.2 Zerstäubung einer abgelagerten W-Schicht bei einfacher Geometrie



(a)



(b)

Abbildung 54: Über die identischen Entladungen #111596-#111598 gemittelt (a) Dichte- und (b) Temperaturprofil mit Standardabweichungen und Anpassungskurve.

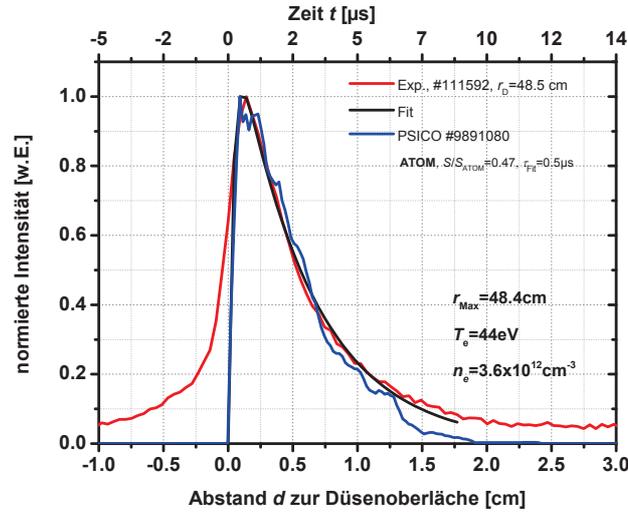
Während des Verlaufs des Injektionsexperiments wurde das Anwachsen einer W-Ablagerung auf der Düsenoberfläche beobachtet (siehe Vergleich der Düse vor/nach dem Experiment in Abb. 52(a)/52(b)). Während einer Plasmaentladung ohne WF₆-Injektion gegen Ende des Experiments wurde die Zerstäubung dieser Schicht im Licht der W I (400.88 nm)-Linie beobachtet (Abb. 53(a)). Die gemessenen Plasmaparameter sind in Abb. 54(a)/54(b) zusammen mit den Anpassungskurven gezeigt. Nach dem gleichen Verfahren wie zuvor konnte aus diesen Bildern das in Abb. 55(a) dargestellte Emissionsprofil gewonnen werden. Abbildung 53(b) zeigt das simulierte 2D-Bild. Als deutlichster Unterschied beim Vergleich beider Bilder fällt die Ausdehnung der Emissionswolke ins Auge. Im Experiment erstreckt sich diese auf etwa 3/4 der Düse während in der Simulation an jedem Ort der Düsenoberfläche Zerstäubung stattfindet. Dies ist einfach darauf zurückzuführen, dass die Düse während der WF₆-Injektion inhomogen beschichtet wurde. Da der linke Teil der Düse durch die Anströmung näher an der Injektionswolke liegt als der rechte, abfallende Teil, ist es auch wahrscheinlicher, dort eine stärkere Beschichtung vorzufinden. In der Simulation wurde eine homogene Beschichtung der kompletten Düsenoberfläche angenommen. Bei einer durch die mittlere Ionisationslänge definierten mittleren Reichweite der simulierten W-Teilchen von $\langle \lambda_{\text{Ion}} \rangle = 7.8 \text{ mm}$ hat der Anteil der Zerstäubung rechts vom Nullpunkt jedoch nur noch einen vernachlässigbaren Einfluss auf des Emissionsprofil innerhalb der Summationsbox.

Wie in den Abb. 55(a) und 56(a) zu sehen ist, kann die gemessene Kurve sowohl mit den modifizierten ATOM-Daten als auch mit dem unveränderten LOTZ-Datensatz gut reproduziert werden. Hierzu müssen keine Unsicherheiten der n_e/T_e -Daten berücksichtigt werden. Jedoch liefert ein $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ (Abb. 55(a) und 56(a)) eine bessere Übereinstimmung als $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ (Abb. 56(b)), was für beide Datensätze zu einer zu breiten Emissionskurve führt. Mit der schwarzen Kurve ist wieder das Ergebnis der Anpassung mittels des analytischen Modells gezeigt. Damit findet sich für den den Fitparameter $S_{\text{Fit}} = (9.5 \pm 2.5) \times 10^{-8}$, was sehr gut mit dem aus der Abfalllänge $\lambda_{\text{eff}} = 5.6 \text{ mm}$ ermittelten $S_{\text{eff}} = (1.0 \pm 0.26) \times 10^{-7}$ und dem Ergebnis der Simulation übereinstimmt (Abb. 58). Insbesondere bei Berücksichtigung der Dichteabsenkung bei Anwendung des *simple SOL*-Modells stimmen alle Ergebnisse sehr gut überein. Als graue Kurve ist in den Abb. 56(a) und 56(b) das Ergebnis einer Simulation ohne ein τ_{Fit} gezeigt, welches die gemessene Kurve ganz deutlich nicht reproduzieren kann und somit ein weiterer Beleg für die Notwendigkeit einer Berücksichtigung eines Anregungsvorganges ist. In Abb. 57(a) ist das Ergebnis der Simulation unter Verwendung der LOTZ-Daten und bei Berücksichtigung der n_e/T_e -Konfidenzbänder gezeigt.

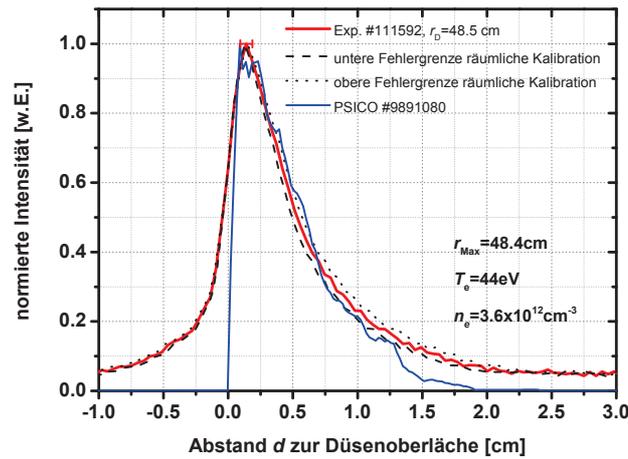
Die Abschätzung des Fehlers der räumlichen Kalibration in Abb. 55(b) zeigt wie auch zuvor beim Limiter-Experiment, dass die Unsicherheit in der Kurvenbreite keine kritische Größe ist. Stärker fällt auch hier wieder der Fehler der Positionierung des Emissionsmaximums relativ zur Düsenoberfläche ins Gewicht, die durch die Unsicherheit in der Angabe des Pixels bestimmt ist, an dem die Düsenoberfläche beginnt. Diese ist sowohl nach oben als auch nach unten mit $\Delta d(\text{Max.}, \text{Oberfl.}) = \pm 1 \text{ Pixel}$ anzusetzen, was zu einem Fehler im Abstand des Maximums von der Düse von $\Delta d(\text{Max.}, \text{Oberfl.}) = \pm 0.5 \text{ mm}$ führt. Auch mit dieser Unsicherheit ist das Maximum der Emission noch immer vor der Düsenoberfläche

zu lokalisieren. Dieses ist nicht durch einen geometrischen Effekt zu erklären, wie beispielsweise eine Summation der Intensität entlang der Seite der Düse, auf der sich ebenfalls eine Beschichtung befindet (Abb. 52(b)). Die seitliche Beschichtung hätte zwar links vom Maximum einen Anstieg des Profils zur Folge, wie es auch zu beobachten ist, spätestens ab der Düsenkante müssen aber beide Anteile – der seitliche und der der Düsenoberfläche – abfallen. Das geometrische Aufaddieren zu einem Maximum vor der Düse ist auch hier somit unmöglich, das Maximum läge in diesem Falle wieder direkt an der Kante. Dies ist ein weiterer Beleg für einen atomphysikalisch bestimmten Anstieg.

In Abb. 57(b) ist der Vergleich des Profils der Zerstäubung des abgelagerten W auf der Düsenoberfläche mit den Profilen der drei Phasen des Limiter-Zerstäubungsexperiments gezeigt. Systematisch dringen die Profile mit zunehmender Dichte weniger tief ins Plasma ein, wobei sich das Profil der zerstäubten W-Schicht sehr schön in diese Systematik einfügt.

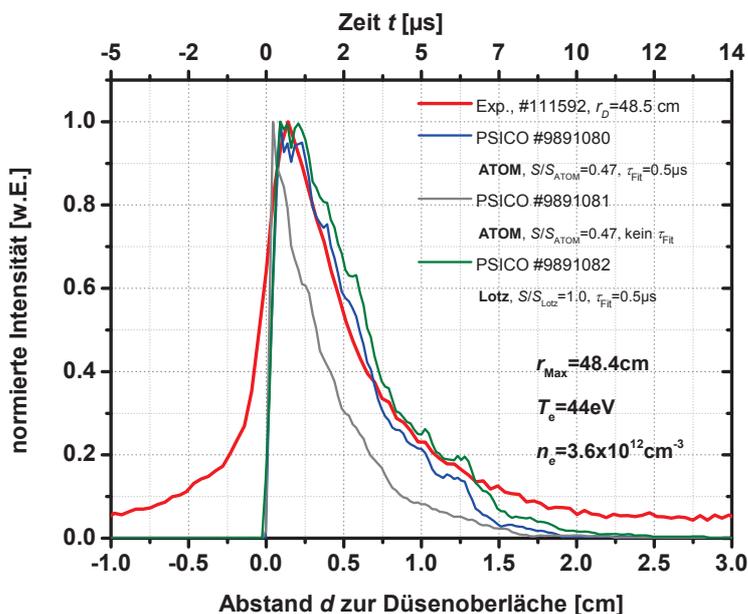


(a)

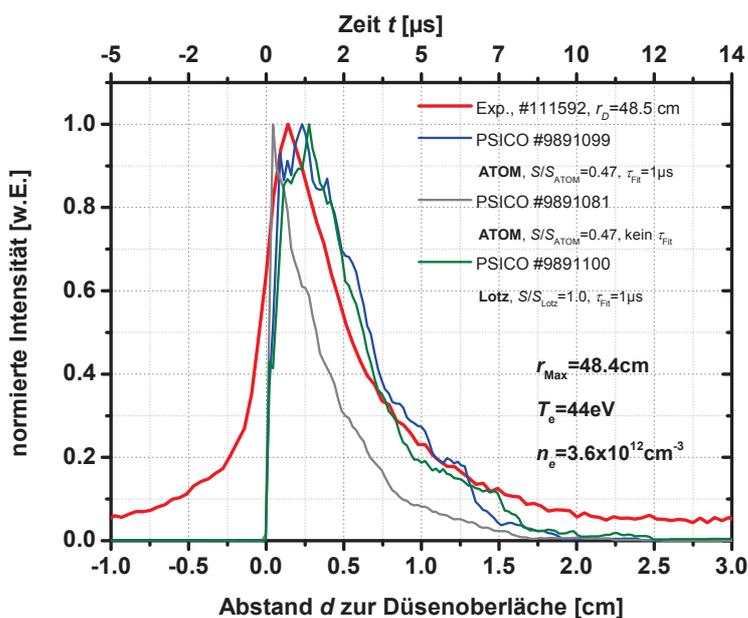


(b)

Abbildung 55: (a) Vergleich des gemessenen (rot) mit dem simulierten Emissionsprofil (blau) auf Grundlage des ATOM-Datensatzes für die Parameterkombination $S/S_{\text{ATOM}} = 0.47$ und $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ zusammen mit der analytischen Anpassung (schwarz). Als n_e - und T_e -Werte angegeben sind die Messwerte am Ort des Maximums der Emissions bei $r_{\text{Max}} = 48.4 \text{ cm}$. (b) Darstellung der absoluten Ortsunsicherheit des Maximums relativ zur Limiter-Oberfläche (roter Fehlerbalken) und des oberen und unteren Fehlers in der räumlichen Kalibration (schwarze gestrichelte Kurven). Der Kalibrationsfehler stellt auch hier keine kritische Größe beim Vergleich mit den simulierten Profilen dar, da durch Änderung der Parameter größere Änderungen in der Kurvenbreite erzeugt werden als durch Berücksichtigung des Fehlers. Auch liegt das Maximum unter Berücksichtigung des Ortsfehlers immer noch *vor* der Düsenoberfläche.

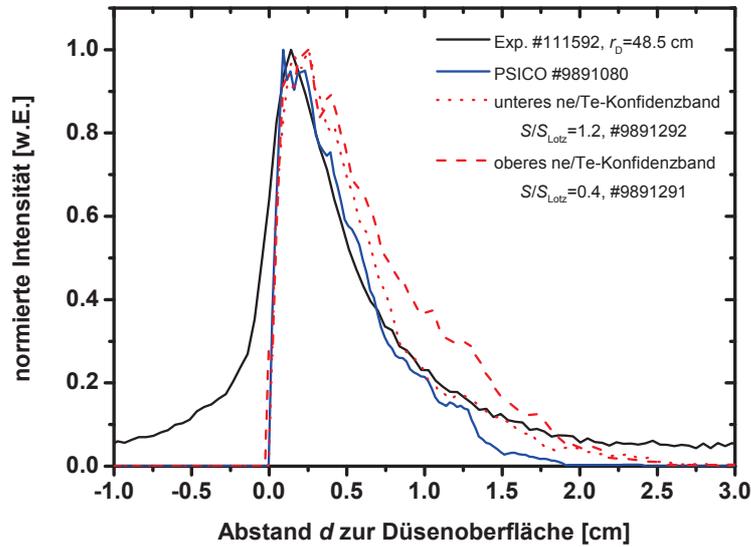


(a)

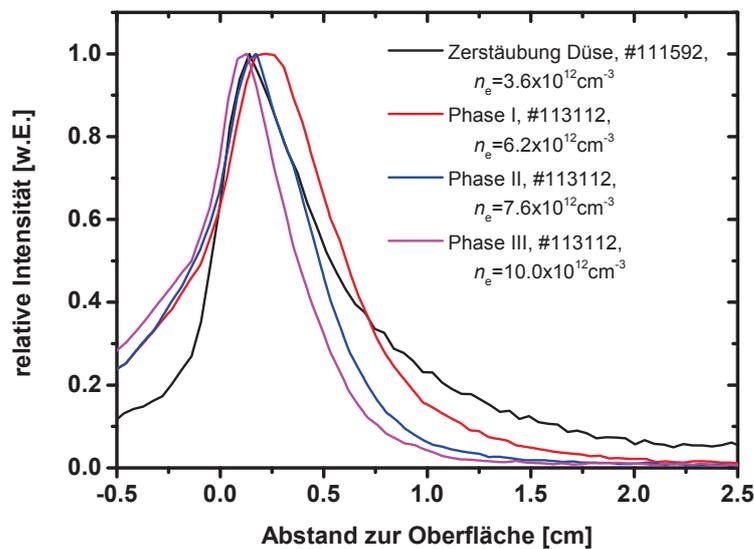


(b)

Abbildung 56: Vergleich der Ergebnisse der PSICO-Simulation unter Verwendung des ATOM-Datensatzes ($S/S_{\text{ATOM}} = 0.47$, blaue Kurven) und des unmodifizierten LOTZ-Datensatzes (grüne Kurven) für (a) $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ und (b) $\tau_{\text{Fit}} = 1.0 \mu\text{s}$ sowie ohne Berücksichtigung eines τ_{Fit} (graue Kurve). Der Einfluss des τ_{Fit} auf die Kurvenbreite und insbesondere deren Anstieg ist deutlich zu sehen. Für ein $\tau_{\text{Fit}} = 1.0 \mu\text{s}$ dringen die simulierten Profile weiter als die gemessenen ein, während sich für $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ eine gute Übereinstimmung ergibt.



(a)



(b)

Abbildung 57: (a) Einfluss der variierten LOTZ-Datensätze mit $S/S_{LOTZ} = 1.2$ für die unteren n_e/T_e -Konfidenzbänder und $S/S_{LOTZ} = 0.4$ für die oberen n_e/T_e -Konfidenzbänder. (b) Vergleich des Profils der Zerstäubung von abgelagertem W auf der Düsenoberfläche (schwarze Kurve, siehe Kap. 7.2) mit den Profilen der drei Phasen des Limiter-Zerstäubungsexperiments. Systematisch dringen die Profile mit zunehmender Dichte weniger tief ins Plasma ein.

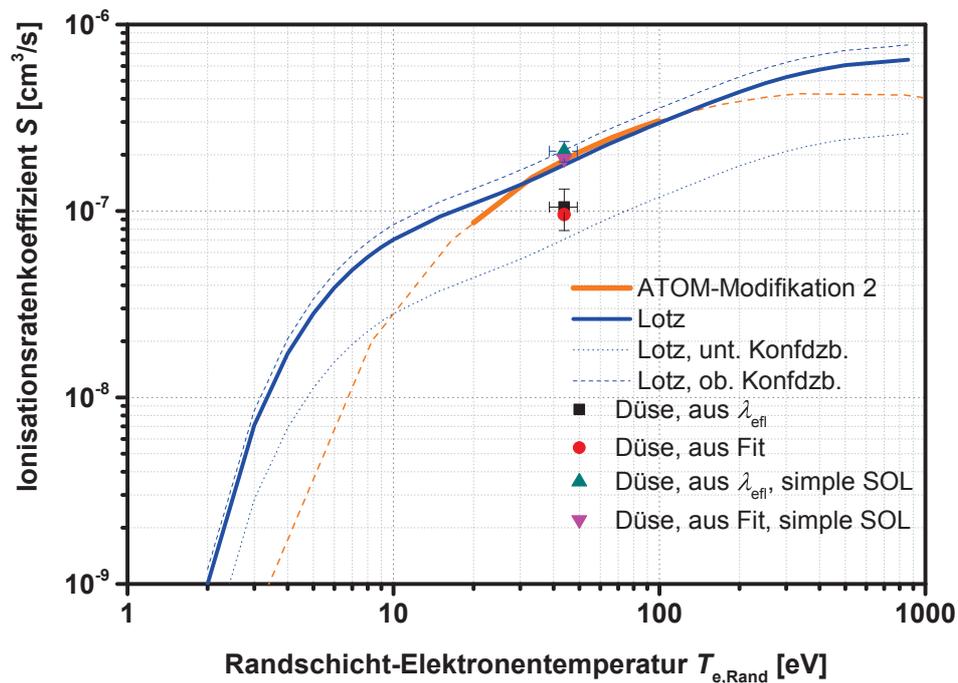


Abbildung 58: Vergleich des modifizierten ATOM-Datensatzes (orange) mit den unmodifizierten LOTZ-Daten (blau) sowie den aus der Abfalllänge λ_{eff} und dem analytischen Modell ermittelten Ionisationsratenkoeffizienten (schwarzer bzw. roter Punkt). Es ist zu sehen, wie alle Methoden übereinstimmende Ionisationsratenkoeffizienten ergeben, die sich mit den LOTZ-Daten decken. Insbesondere bei Berücksichtigung des *simple SOL*-Modells findet sich eine sehr gute Übereinstimmung.

7.3 Vergleich der ermittelten Ionisationsratenkoeffizienten

Unter Verwendung der LOTZ-Ionisationsratenkoeffizienten werden in der Simulation die besten Übereinstimmungen mit den gemessenen Emissionsprofilen erzielt. Dies trifft jedoch nur unter der Voraussetzung einer Anregungszeit von $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ (beste Anpassung im Falle der Emission über der Düse) bzw. $\tau_{\text{Fit}} = 1 - 10 \mu\text{s}$ (beste Anpassung im Limiter-Experiment) zu. Über längere Anregungszeiten kann hier aufgrund der Beschränkung des Modells keine Aussage gemacht werden. Unter Verwendung der modifizierten ATOM-Daten, die sich immer noch im Verlauf von den LOTZ-Daten unterscheiden, führt eine Absenkung der Dichte auf die untere Konfidenzgrenze zum besten Ergebnis. Dies ist für die LOTZ-Daten zur Reproduktion von Phase III nicht notwendig. Unter Berücksichtigung der n_e/T_e -Konfidenzbänder können jedoch alle Phasen reproduziert werden. In jedem Fall zeigt sich aber, dass die ATOM-Daten um einen Faktor 2 bis 3 zu hoch angesetzt sind.

Im Vergleich der Ergebnisse der untersuchten drei Bestimmungsmöglichkeiten zeigt sich, dass innerhalb der Messunsicherheiten und des *simple SOL*-Modells alle Ergebnisse miteinander übereinstimmen. Das Anpassen der Profile durch die Näherungslösung Gl. (80) des analytisches Stoß-Strahlungs-Modells liefert Werte, die mit den Ratenkoeffizienten aus der Abfalllänge des Emissionsprofils übereinstimmen. Die Lösung aus Gl. (76) ergibt durch die gegenseitige Beeinflussung von τ_{Fit} und S streuende Werte. Im Fall kleiner Dichten und somit breiterer Emissionsprofilen, wird die Übereinstimmung für Lösung (76) besser, da dann der Abfall des Profils gegenüber dem Anstieg stärker ins Gewicht fällt. Verteilungen, insbesondere die Geschwindigkeits- und die räumliche (cos-)Verteilung, sind im analytischen Modell sowie in der experimentellen Näherung unberücksichtigt.

Für den Fall der Wolframzerstäubung auf der Düsenoberfläche liefern beide analytischen Lösungen sowie die Bestimmung über λ_{eff} übereinstimmende Ergebnisse, da auch hier wie bei Phase I kleine Dichten vorliegen. Alle Ergebnisse stimmen mit dem der PSICO-Simulation überein.

7.4 Zusammenfassung der Resultate dieses Kapitels

1. Der nicht geometrisch bedingte Teil des Anstiegs der $W \text{ I}$ (400.88 nm)-Linie des neutralen W ist auf den Besetzungsvorgang des oberen Niveaus $5d^5(6S)6p^7P^o 4$ vor Erreichen des Gleichgewichtszustandes zwischen An- und Abregung zurückzuführen.
2. Dieser Besetzungsvorgang kann über einen Parameter τ_{Fit} beschrieben werden, der auf einen Wert zwischen $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ und $10 \mu\text{s}$ beziffert werden konnte.
3. Die Interpretation von $\tau_{\text{Fit}} > \tau_A = 1/A_{jk}(400.88 \text{ nm}) = 1/1.63 \times 10^7 \text{ s}^{-1} = 0.06 \mu\text{s}$, das mindestens eine Größenordnung über der Relaxationszeit τ_A liegt, ist eine verlängerte Anregungszeit durch eine vorgelagerte Besetzung des metastabilen Niveaus $5d^5(6S)6s^7S 3$.
4. Der Photoemissionsratenkoeffizient $\mathcal{PEC}(400.88 \text{ nm})$ ist erst für die Zeit nach Erreichen den Gleichgewichtszustandes definiert. Somit hat eine nicht-vernachlässigbare

Zeit zum Erreichen dieses Zustandes Auswirkung auf den (zeitlichen) Gültigkeitsbereich des \mathcal{PEC} (siehe Kapitel 6.6).

5. Der LOTZ-Datensatz der Ionisationsratenkoeffizienten für neutrales W erweist sich im Gegensatz zu den ATOM- und ADAS-Daten als passend zur Reproduktion der experimentell gewonnenen Emissionsprofile.
6. Damit liegen (bei einer Elektronentemperatur von $T_e=50$ eV) die ATOM-Daten einen Faktor 3, die ADAS-Daten einen Faktor 2 zu hoch.
7. Die mittels der PSICO-Simulation und die direkt aus der Abfalllänge λ_{eff} bestimmten Ionisationsratenkoeffizienten stimmen überein.

8 WF₆-Injektion als kontrollierbare W-Quelle

Aus Wolfram bestehende Wandelemente eines Fusionsreaktors sind zwangsläufig Plasmaflüssen ausgesetzt, die zu einer Erosion des Wandmaterials führen. Die so freigesetzten Wolframatome treten in Wechselwirkung mit dem Plasma. Um diese Wechselwirkungen systematisch untersuchen zu können, wäre es erstrebenswert, eine kontrollierbare W-Quelle zur Verfügung zu haben. Kontrollierbar bedeutet, die Quellstärke, das heißt, die Anzahl der sich im Plasma befindlichen W-Atome, quantitativ steuern zu können. Dies stellt die eigentliche Herausforderung dar, denn der im Zerstäubungsexperiment (Kapitel 7.1) beschriebene W-Limiter stellt zwar auch eine W-Quelle dar, deren Quellstärke ist jedoch nicht direkt einstellbar, wird vom Erosionsfluss bestimmt und ist zudem zunächst unbekannt. Eine Bestimmung der Quellstärke ist bei Kenntnis der Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}} = \frac{\text{W-Atome}}{\text{emittiertePhotonen}} = \frac{\Gamma_{\text{W}}}{\phi_{\text{Ph}}}$ (mit dem W-Atom-Fluss Γ_{W} bzw. dem Photonfluss ϕ_{Ph}) möglich durch die spektroskopische Absolutmessung der von den erodierten W-Atomen bis zur ersten Ionisation emittierten Photonen einer bestimmten Linie (z.B. W I (400.88 nm)) gemäß

$$\Gamma_{\text{W}} = E_{\text{Ph}}\phi_{\text{Ph}}. \quad (90)$$

Hierzu muss aber E_{Ph} zunächst einmal bekannt sein, weshalb es wiederum einer W-Quelle bekannter Stärke bedarf, um die Photoeffizienz aus dem Verhältnis der insgesamt ins Plasma laufenden W-Atome und der auf dem Weg bis zur ersten Ionisation emittierten Gesamtzahl an Photonen einer Emissionslinie bestimmen zu können. Die Photoeffizienz E_{Ph} ist ein experimenteller, von der Elektronentemperatur abhängiger Wert, dem unter idealen Bedingungen der theoretische S/XB -Wert (Kap. 4.4) entspricht. Die Diskussion zur Vergleichbarkeit beider Größen soll in Abschnitt 10.3 geführt werden.

Erstmalig wurde zur Realisierung einer solchen W-Quelle gasförmiges Wolframhexafluorid (WF₆) an TEXTOR zur Anwendung gebracht (Kap. 6.6). Die Bestimmung von Photoeffizienzen für unterschiedliche Elektronentemperaturen ist dabei als Anwendung der WF₆-Injektion von besonderem Interesse (Kap. 10). Bisher konnten diese nur über Gewichtsverlustmessungen an linearen Plasmaanlagen wie PISCES [56, 57] und PSI-2 (Berlin) [88] oder durch W(CO)₆-Sublimation an ASDEX [23, 24] bestimmt werden ($T_e \lesssim 20$ eV für beide). Die WF₆-Injektion bietet den Vorteil, die Menge an injiziertem W *direkt* über Einstellung des Drucks im Gasreservoir wählen zu können. In den TEXTOR-Experimenten wurde der Temperaturbereich zwischen $T_e \approx 20$ eV und 85 eV untersucht.

Diese Temperaturen sind auch für den normaler Weise kühlen Divertorbereich (während Detachment im Steady-State-Fall $T_e \approx 5$ eV [40]) in Tokamak-Anlagen während sogenannter ELMs (**E**dge-**L**ocalized **M**odes) zu erwarten. Solche ELMs treten als disruptive Instabilitäten in der Randschicht von Tokamak-Plasmen auf und sind daher auch für den Betrieb von zukünftigen Anlagen wie ITER und DEMO (**DEMO**nstration Power Plant) relevant [12, 21, 47, 71]. Trotz der niedrigen Temperaturen im Divertor-Bereich, die nur zu einer minimalen Zerstäubungsausbeute der W-Bestandteile des Divertors durch Projektteilchen wie z.B. C-Ionen führen (siehe Diagramm 7(a)), können hier ELMs zu nicht

vernachlässigbaren W-Erosionsflüssen führen, weshalb hohe Elektronentemperaturen also auch für den Divertor-Bereich relevant sind.

Hinsichtlich der Frage, inwieweit durch Injektion von molekularem WF_6 nach einem Dissoziationsprozess entstandenes atomares W mit zerstäubtem W, wie es in einem Fusionsreaktor nach Plasma-Wand-Kontakt zu erwarten ist, vergleichbar ist, sind folgende Punkte zu untersuchen:

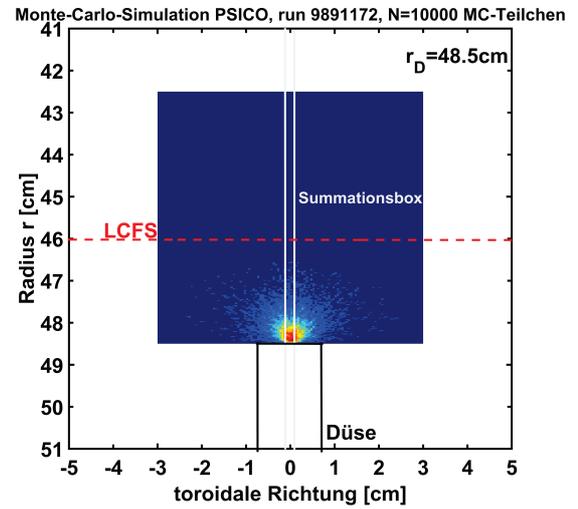
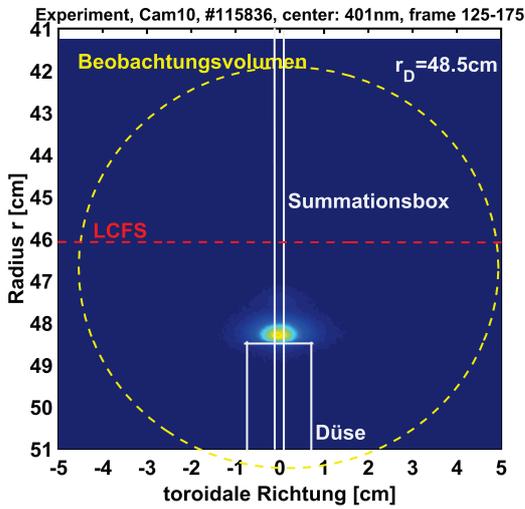
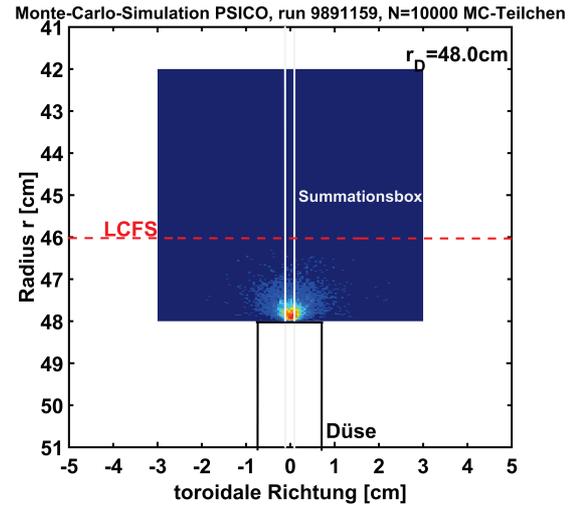
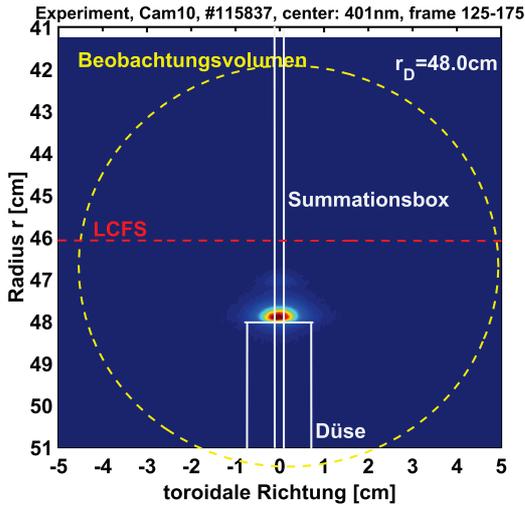
1. Wie stellt sich das Eindringverhalten von injiziertem W im Vergleich mit zerstäubtem W dar?
2. Wirkt sich der Dissoziationsprozess auf die Eindringtiefe und allgemein die Form der Emissionsprofile des atomaren Wolframs aus?
3. Kann WF_6 zur Bestimmung der Ionisationsratenkoeffizienten unter unterschiedlichen Plasmabedingungen nach den in Kapitel 7.1 dargestellten Methoden genutzt werden?
4. Wie vergleichbar sind die Linienverhältnisse für W der unterschiedlichen Freisetzungsmechanismen?
5. Stimmen die über die WF_6 -Injektion ermittelten Photoeffizienzen mit den Photoeffizienzen von zerstäubtem W überein?
6. Wie vergleichbar ist die experimentell ermittelte Photoeffizienz E_{Ph} mit einem theoretischen S/XB -Wert?

Auf die ersten drei Punkte soll in diesem Kapitel eingegangen werden. Die Betrachtung von Punkt 4 erfolgt in Kap. 9. Die Punkte 5 und 6 werden abschließend in Kap. 10.3 und 11 diskutiert.

8.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einer WF_6 -Quelle

In Abbildung 59 sind auf der linken Seite die während des WF_6 -Injektionsexperiments gewonnenen Kamerabilder im Licht der W I (400.88 nm)-Linie dargestellt. Wie auch im Zerstäubungsexperiment wurden die Bilder mit einer CCD-Kamera mit einer Aufnahme­frequenz von 50 frames/s durch einen Interferenzfilter bei (400.8 ± 0.5) nm aufgenommen, durch Untergrundaufnahmen korrigiert und über 1 s ($t = 2.5\text{--}3.5$ s) gemittelt. Der gelbe Kreis stellt das Beobachtungsvolumen der Kamera dar, die rote Linie die LCFS bei $r = 46.0$ cm TEXTOR-Radius. Abbildung 60(a) zeigt die Entwicklung der die Emissionsprofile entlang der Summationsboxen relativ zueinander.

Die rechte Spalte in Abb. 59 stellt die Ergebnisse der PSICO-Simulation dar (siehe Kap. 8.1.1). Simuliert wurde mit 10000 Monte-Carlo-Teilchen. Zum korrekten Vergleich müssen die normierten Emissionsprofile sowie die Anzahl der pro Ionen emittierten Photonen mitberücksichtigt werden (Kap. 10).



8.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einer WF_6 -Quelle

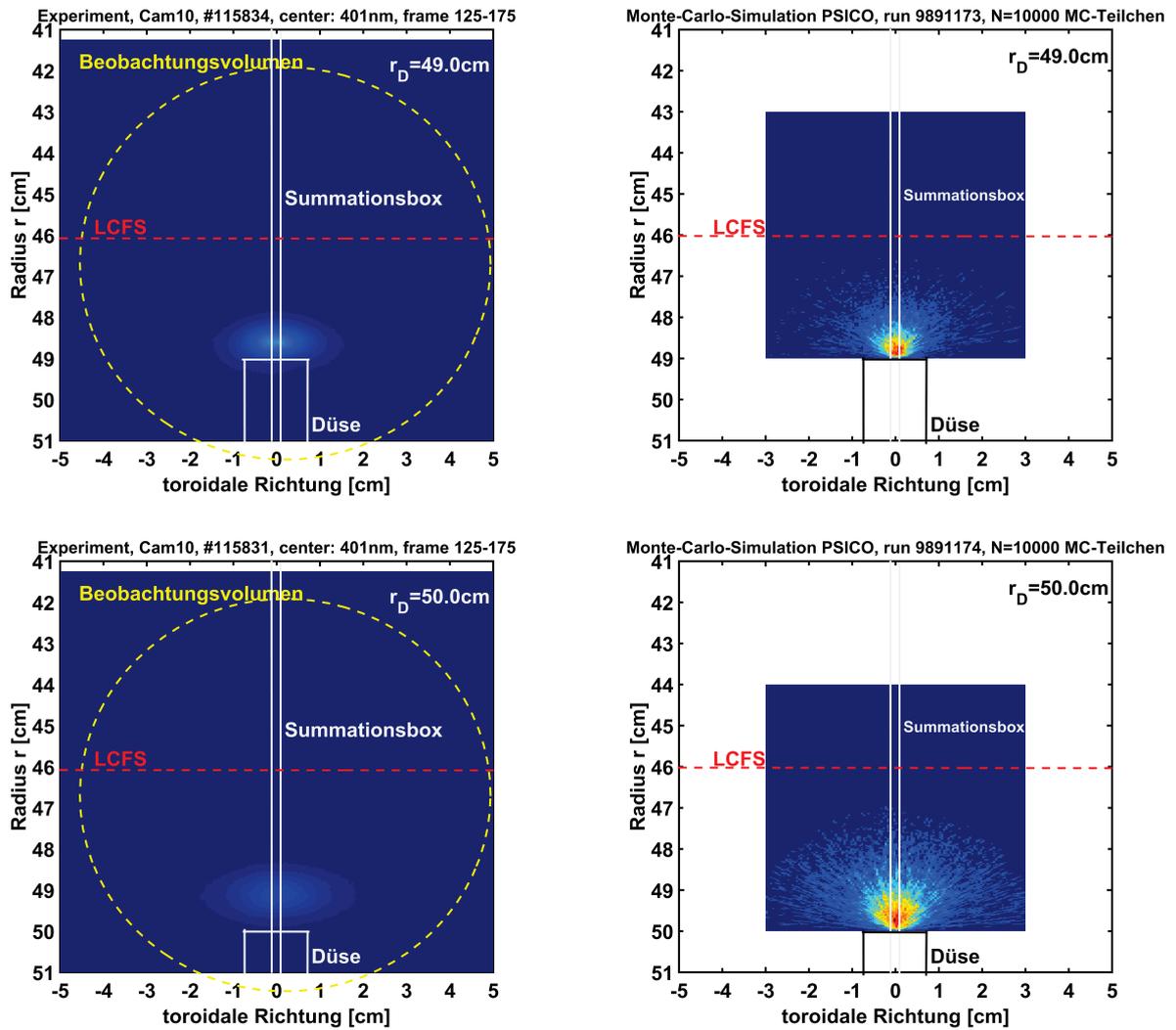
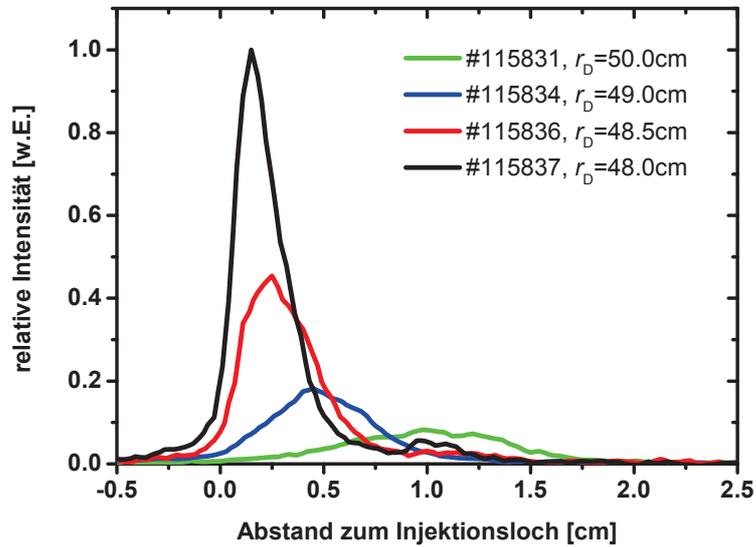
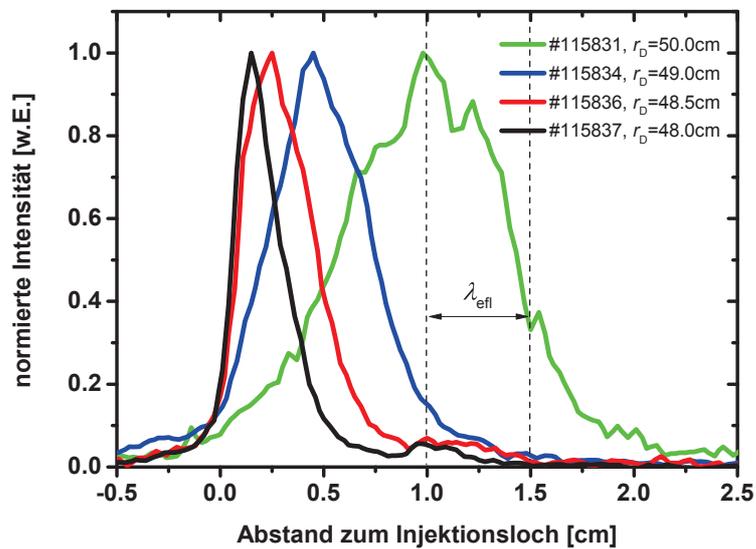


Abbildung 59: Linke Spalte: Kameraaufnahmen der WF_6 -Injektionen bei Düsenpositionen zwischen $r_D = 48.0\text{ cm}$ und 50.0 cm im Licht der $W\text{ I}$ (400.88 nm)-Linie. Rechte Spalte: Ergebnisse der PSICO-Simulation (siehe Kap. 8.1.2).

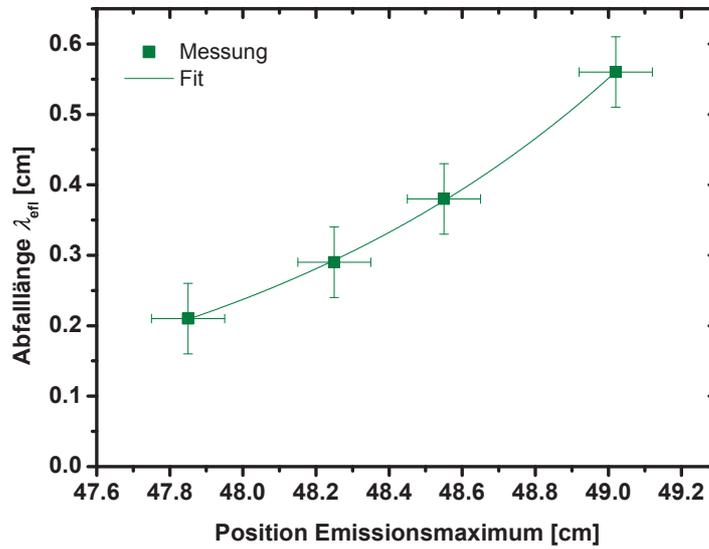


(a)

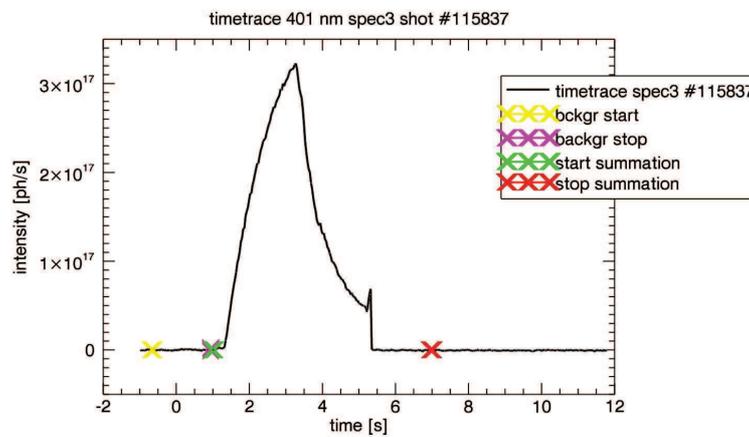


(b)

Abbildung 60: (a) Relativer und (b) normierter Vergleich der entlang der Summationsboxen in Abb. 59 gemessenen Emissionsprofile.



(a)



(b)

Abbildung 61: (a) Den Emissionsprofilen aus Abb. 60(a) entnommene Abfalllängen in Abhängigkeit der Position des Emissionsmaximums relativ zum Plasmazentrum. (b) Mit volumenintegrierendem Spektrometer aufgenommene Zeitspur der Intensitätsentwicklung einer WF_6 -Injektion (#115837).

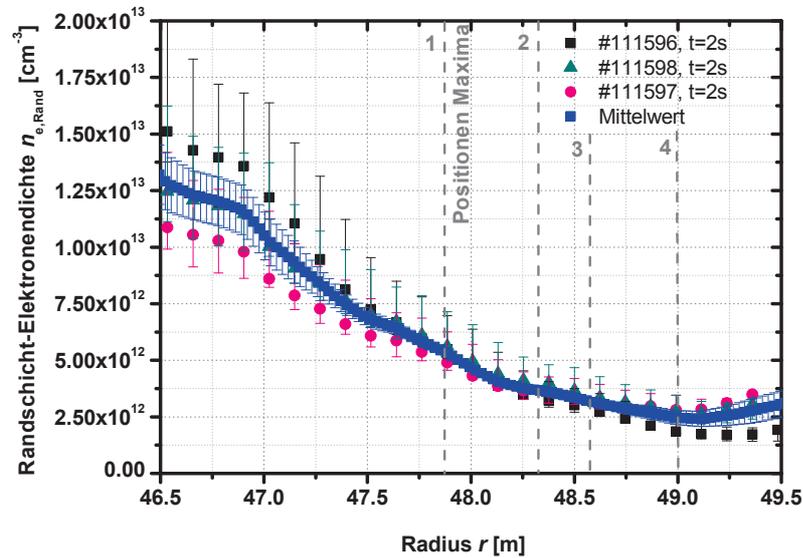
Entladung	$n_{e,\text{Max}}$ [cm ⁻³]	$T_{e,\text{Max}}$ [eV]	S_{LOTZ} [10 ⁻⁷ cm ³ s ⁻¹]	$\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ [10 ⁻⁹ cm ³ s ⁻¹]	$n_e S_{\text{LOTZ}}$ [10 ⁶ s ⁻¹]	$n_e \mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ [10 ⁴ s ⁻¹]
115837	$(5.5 \pm 0.4) \times 10^{12}$	47 ± 5	1.9	5.9	1.0	3.2
115836	$(3.8 \pm 0.3) \times 10^{12}$	47 ± 6	1.8	5.9	0.7	2.2
115834	$(3.2 \pm 0.3) \times 10^{12}$	41 ± 3	1.7	6.0	0.5	1.9
115831	$(2.5 \pm 0.5) \times 10^{12}$	38 ± 2	1.6	6.0	0.4	1.5

Tabelle 7: Randschichtparameter am Maximum der Emissionsprofile während der betrachteten vier Entladungen des WF₆-Experiments.

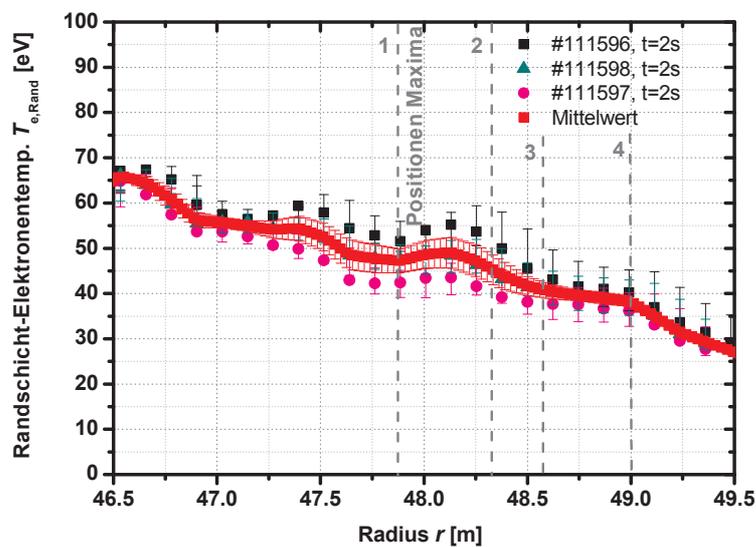
Von Aufnahme 1 (oben) bis Aufnahme 4 (unten) wurde die Position der Injektionsdüse im Randschichtplasma von TEXTOR bei konstantem WF₆-Fluss von Radius $r_D = 48.0$ cm auf $r_D = 50.0$ cm verändert. Damit einher geht eine Abnahme von Dichte und Temperatur von oben nach unten von $n_{e,\text{Max}} = 5.5 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ auf $2.5 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ bzw. $T_{e,\text{Max}} = 47 \text{ eV}$ auf 38 eV (gemessen jeweils an der Position des Emissionsmaximums). Im Gegensatz zum Limiter-Experiment verhalten sich hier Dichte und Temperatur also nicht gegenläufig. Tabelle 7 gibt die am Ort des Emissionsmaximums gemessenen Plasmaparameter zusammen mit den entsprechenden Ionisationsratenkoeffizienten S_{LOTZ} (gemäß des in Kap. 7.1 als am geeignetsten gefundenen LOTZ-Datensatzes), den Photoemissionsratenkoeffizienten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ (gemäß GKU) sowie den daraus errechneten lokalen Ionisations- und Anregungsraten wieder. Die Abbildungen 62(a) bzw. 62(b) zeigen die mit der He-Strahl-Diagnostik gemessenen Dichte- bzw. Temperaturprofile. Zu sehen sind jeweils drei Dichte- und Temperaturmessungen (identische Entladungen #111596 bis #111598), über die gemittelt wurde. Die blaue bzw. rote Kurve stellt die Mittelwerte für Dichte bzw. Temperatur mit ihren Standardabweichungen dar. (Zur Benutzung in PSICO wurden diese Mittelwerte gefittet, was in den Abb. 54(a)/54(b) zusammen mit den Konfidenzbändern gezeigt ist.) Die Werte bei einem Radius größer 49.5 cm sind nicht mehr verlässlich anzugeben. In den folgenden Darstellungen der Emissionsprofile werden aber die Dichte- und Temperaturwerte am Maximum der Emissionen (das für eine Düsenposition bei $r_D = 50.0$ cm im Abstand von 1 cm vor der Injektionsdüse liegt) angegeben, sodass die Werte für Radien jenseits von 49.5 cm keine Verwendung finden. In den Abbildungen 54(a) bzw. 54(b) sind die Anpassungskurven und die Mittelwerte gezeigt, wie sie auch bereits in Kap. 7.2 als Eingabedaten für die Dichte- und Temperaturprofile in PSICO benutzt wurden und ebenso in diesem Kapitel bei der Simulation der WF₆-Injektionen mit PSICO wieder Anwendung finden werden.

Die aus den Kameraaufnahmen durch die eingezeichnete Summationsbox extrahierten Emissionsprofile sind als grüne Kurven in den Abbildungen 64(a) bis 65 dargestellt. Dazu wurde das untergrundkorrigierte Profil jedes Frames auf das Maximum normiert, die so erhaltenen Profile wurden während des Maximums des WF₆-Injektionspulses zwischen $t = 2.5 \text{ s}$ und 3.5 s über 1 s gemittelt.

Abbildung 61(b) zeigt die absolut kalibrierte Zeitspur einer Spektrometeraufnahme eines WF₆-Injektionspulses zwischen $t = 1 \text{ s}$ und 5 s , für die die Zähler bei $\lambda = 400.8 \pm 0.5 \text{ nm}$



(a)



(b)

Abbildung 62: Über die identischen Entladungen #111596 - #111598 gemittelt (a) Dichte- und (b) Temperaturprofil mit Standardabweichungen und Positionsangaben des jeweiligen Emissionsmaximums.

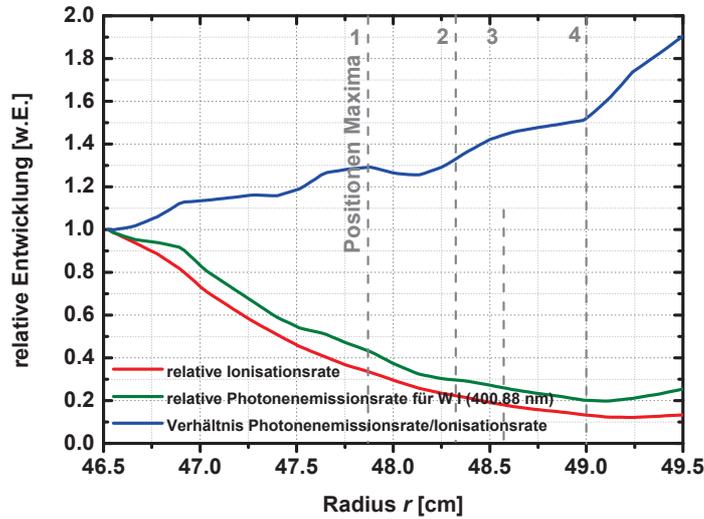
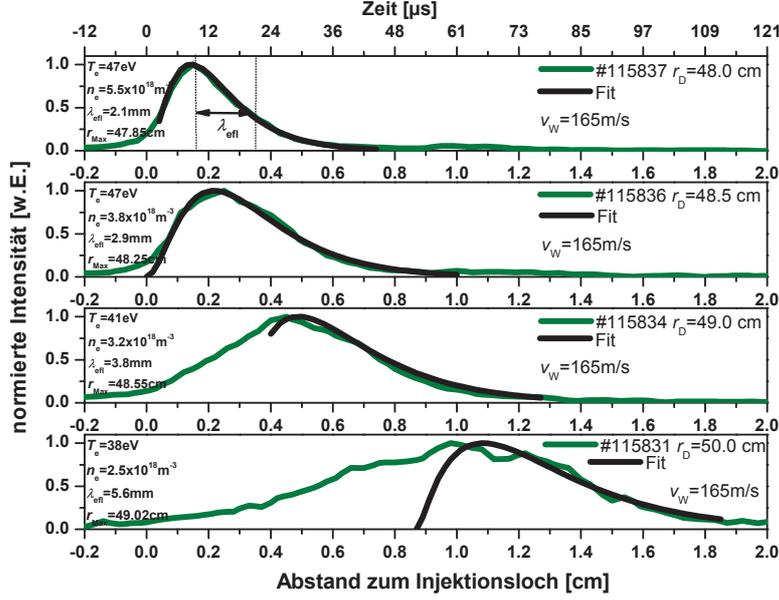
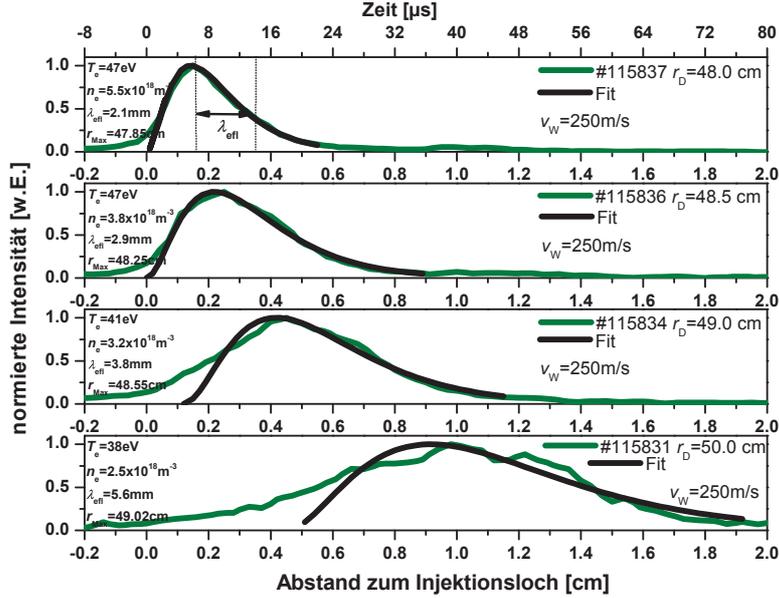


Abbildung 63: Relative Entwicklung der Ionisations- [89] (rot) und Photonenemissionsrate (grün) [37] sowie das Verhältnis (blau) in Abhängigkeit des Radius.

für jeden Frame (Integrationszeit: 32 ms) aufsummiert wurden. Der Nullpunkt der x -Achse in Abb. 64(a) liegt auf der Düsenoberfläche. In den Diagrammen ist von oben nach unten zu erkennen, wie in immer größerer Entfernung vom Plasmazentrum und somit abnehmender Dichte und Temperatur das Maximum des Emissionsprofils immer weiter von der Düsenoberfläche weg wandert und sich die Kurve gleichzeitig verbreitert. In den Kamerabildern in Abb. 59 ist darüber hinaus zu erkennen, wie die Intensität pro Pixel von oben nach unten immer weiter abnimmt, während sich die Injektionswolke immer weiter ins Plasma hinein erstreckt, wie es auch in den normierten Profilen sehr deutlich zu beobachten ist. Einerseits nimmt die Ionisationsrate von oben nach unten ab, wie in Abb. 63 gezeigt ist, wo die Entwicklung von Ionisationsrate und Photonenemissionsrate entlang des Radius darstellt wird. Dadurch können die W-Atome tiefer ins Plasma eindringen und länger emittieren, die Wolke hat eine größere Ausdehnung. Andererseits nimmt aber gleichzeitig auch die Emissionsrate ab (Abb. 63). Die Absolutzahl an emittierten Photonen hängt dabei also vom Verhältnis von Ionisations- zu Emissionsrate (blau in Abb. 63) ab (und darüber hinaus von der Richtungsverteilung). Das Verhältnis von Anzahl der ins Plasma hineinlaufenden Teilchen, die früher oder später ionisiert werden, zur Anzahl der auf diesem Wege emittierten Photonen stellt die Größe zur Charakterisierung der Wechselwirkung von Ionisation und Anregung bzw. Emission dar – die Photoeffizienz E_{Ph} (Kap. 10).



(a)



(b)

Abbildung 64: (a) Gemessene (grün) und analytisch angepasste Emissionsprofile (schwarz) der WF_6 -Injektion im Licht der $W\text{ I}$ (400.88 nm)-Linie unter Benutzung des LOTZ-Datensatzes bei (a) $v_W = 165\text{ m/s}$ und (b) $v_W = 250\text{ m/s}$. Für (a) liegt die effektive Anregungszeit im Mittel bei $\langle\tau_{\text{Fit}}\rangle = (2.2 \pm 1.8)\mu\text{s}$, der mittlere effektive WF_6 -Dissoziationsratenkoeffizient bei $\langle D_{WF_6}\rangle = (1.3 \pm 1.1) \times 10^{-8}\text{ cm}^3/\text{s}$, für (b) bei $\langle\tau_{\text{Fit}}\rangle = (6.3 \pm 2.6)\mu\text{s}$ und $\langle D_{WF_6}\rangle = (2.8 \pm 1.5) \times 10^{-9}\text{ cm}^3/\text{s}$.

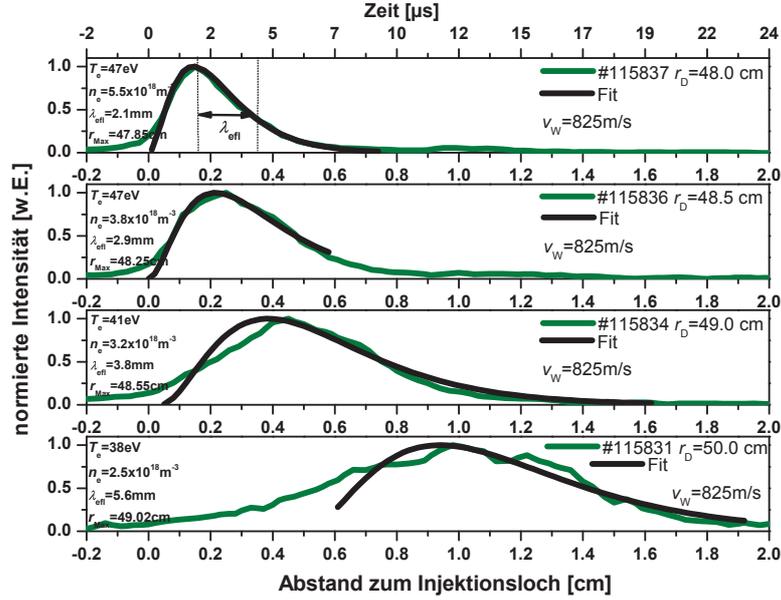


Abbildung 65: Gemessene (grün) und analytisch angepasste Emissionsprofile (schwarz) der WF₆-Injektion im Licht der W I (400.88 nm)-Linie unter Benutzung des LOTZ-Datensatzes für $v_W = 825 \text{ m/s}$ mit $\langle \tau_{\text{Fit}} \rangle = (1.4 \pm 1.0) \mu\text{s}$ und $\langle D_{\text{WF}_6} \rangle = (1.9 \pm 1.5) \times 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$.

8.1.1 Erweiterung des analytischen Modells um die WF₆-Dissoziation

Da davon ausgegangen werden muss, dass sich der Dissoziationsvorgang des WF₆, aus dem das atomare W entsteht, auch auf des Emissionsprofil auswirkt, wurde das analytische Modell aus Kap. 7.1.2 um einen WF₆-Dissoziationsratenkoeffizienten $D_{\text{eff}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} \equiv D_{\text{WF}_6}$ erweitert. Dieser Dissoziationsratenkoeffizienten ist ein effektiver Wert, der den Dissoziationsprozess insgesamt beschreibt ohne alle Dissoziationssschritte der Kette $\text{WF}_6 \rightarrow \text{WF}_5 + \text{F} \rightarrow \text{WF}_4 + 2\text{F} \rightarrow \dots \rightarrow \text{W} + 6\text{F}$ im Einzelnen zu berücksichtigen. Eine Abhängigkeit von der Temperatur wird in dieser vereinfachten Betrachtung ebenfalls nicht berücksichtigt. Die Bilanzgleichung 73 wird folgendermaßen modifiziert:

$$\begin{aligned}
 \frac{dn_j(t)}{dt} &= n_e n_i(t) X - n_j A_{jk} \\
 &= n_e n_i(t_0) e^{-t n_e S} X - n_j A_{jk} \\
 &= n_e n_{\text{WF}_6} (1 - e^{-t n_e D_{\text{WF}_6}}) e^{-t n_e S} X - n_j A_{jk},
 \end{aligned} \tag{91}$$

worin $n_i(t_0) = n_{\text{WF}_6}(t_0)(1 - e^{-t n_e D_{\text{WF}_6}})$ die zeitliche Entstehung des atomaren Wolframs im unteren Zustand mit der Dichte n_i durch die Dissoziation der vorhandenen WF₆-Moleküle aus n_{WF_6} beschreibt. (n_j stellt wieder die Dichte der Atome mit angeregtem Niveau j dar, X den Anregungsratenkoeffizienten vom Ausgangszustand auf das angeregte Niveau und A_{jk} die Übergangsrate vom angeregten Niveau aus in einen tieferen Zustand k .) Es ergibt

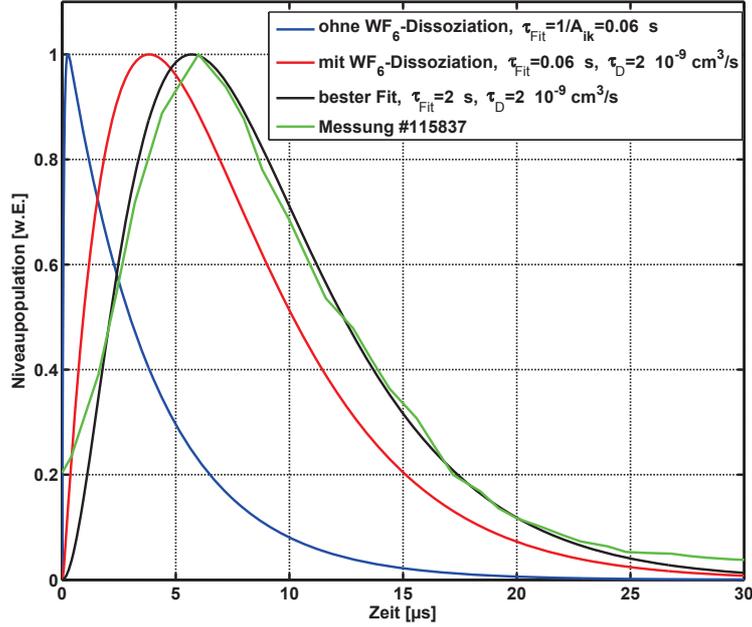


Abbildung 66: Relative Population des oberen Niveaus in Abhängigkeit der Zeit im analytischen Modell. Blaue Kurve: Modell ohne Dissoziation, $\tau_{\text{Fit}} = 1/A_{ji} = 0.06 \mu\text{s}$. Rote Kurve: ein $D_{WF_6} = 2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$ führt bei gleichem $\tau_{\text{Fit}} = 0.06 \mu\text{s}$ zu einer deutlichen Veränderung der Kurvenform und zu einem tieferen Eindringen. Die schwarze Kurve ($v_W = 250 \text{ m/s}$) zeigt die beste Anpassung des analytischen Modells an die Emissionskurve der Messung #115837 (grün) für $\tau_{\text{Fit}} = 2 \mu\text{s}$ und $D_{WF_6} = 2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3/\text{s}$

sich folgende Lösung der Bilanzgleichung (z.B. mit [50]):

$$n_k(t) = n_{WF_6} n_e X \left(\frac{\tau_{\text{Ion}} \left(1 - e^{\left(\frac{-t \left(1 - \frac{\tau_{\text{Ion}}}{\tau_A} \right)}{\tau_{\text{Ion}}} \right)} \right)}{1 - \frac{\tau_{\text{Ion}}}{\tau_A}} + \frac{\tau_D \tau_{\text{Ion}} \left(1 - e^{\left(\frac{-t \left(\tau_D - \frac{\tau_{\text{Ion}} \tau_D}{\tau_A} + \tau_{\text{Ion}} \right)}{\tau_S \tau_D} \right)} \right)}{\frac{\tau_{\text{Ion}} \tau_D}{\tau_A} - \tau_{\text{Ion}} - \tau_D} \right) e^{\left(\frac{-t}{\tau_A} \right)}, \quad (92)$$

mit der mittleren Ionisationszeit $\tau_{\text{Ion}} = n_e S$, der mittleren Anregungszeit τ_{Fit} und der mittleren WF_6 -Dissoziationszeit $\tau_D = n_e D_{WF_6}$ als Fit-Parametern. Abbildung 66, in der die relative Population des oberen Niveaus in Abhängigkeit der Zeit dargestellt ist, zeigt den Einfluss von D_{WF_6} . Die Einführung des D_{WF_6} (rote Kurve) führt bei gleichem τ_{Fit} im Vergleich zur blauen Kurve zu einer deutlichen Veränderung der Kurvenform und zu einem tieferen Eindringen. Die schwarze Kurve zeigt die beste Anpassung des Modells an die Emissionskurve der Messung #115837. Ohne eine durch D_{WF_6} beschriebene Dissoziation ist eine Übereinstimmung nicht zu erreichen. Darüber hinaus stellt nun aber auch die

Geschwindigkeit des W nach der Dissoziation einen zusätzlichen unbekanntem Parameter dar.

W-Geschwindigkeit nach WF₆-Dissoziation Für die Zerstäubung von W ergibt sich die Geschwindigkeit der zerstäubten W-Teilchen aus der THOMPSON-Verteilung. Für die aus der WF₆-Dissoziation entstehenden W-Atome ist die Geschwindigkeit aber unbekannt. Eine erste Einschätzung kann über die gemessenen Abfalllängen vorgenommen werden, in dem diese mit den Abfalllängen aus der W-Zerstäubung verglichen werden. Die WF₆-Moleküle werden mit der im Gasreservoir herrschenden Raumtemperatur $T_{\text{Raum}} \approx 27^\circ\text{C} = 300\text{ K}$ injiziert. Ein Geschwindigkeitsgewinn aufgrund des Vordrucks im Reservoir ist erst bei Drücken im bar-Bereich zu erwarten (siehe z.B. [39]), während im WF₆-Experiment im mbar-Bereich injiziert wurde. Dieser Reservoirtemperatur entspricht eine Geschwindigkeit der W-Atome von $v_W = 165\text{ m/s}$. Damit ergeben sich in erster Näherung nach Gleichung (60) gemäß $S = \frac{v_W}{n_e \lambda_{\text{eff}}}$ die in Abb. 51 gegen die gemessenen Abfalllängen aufgetragenen Ionisationsratenkoeffizienten (grüne Quadrate). Es zeigt sich, dass auch bei vergleichbaren Abfalllängen zwischen 3 mm und 5 mm die aus der WF₆-Injektion bestimmten Ionisationsratenkoeffizienten etwa einen Faktor 5 niedriger liegen als die aus der Zerstäubung bestimmten. Zu erwarten wäre, dass das nur von der Temperatur abhängige $S(T_e)$ im Bereich gleicher Temperaturen für beide Experimente übereinstimmt. Um diese Diskrepanz zu erklären, müssten im äußersten Fall entweder Dichte oder Abfalllänge um einen Faktor 5 falsch gemessen worden sein. Da dies weit außerhalb der Fehlergrenzen liegt und somit ausgeschlossen werden kann, bleibt als alternative Folgerung, dass die Teilchengeschwindigkeit zu niedrig angesetzt wurde. Die Konsequenz ist, dass sich das atomare W nach der Dissoziation mit einer Geschwindigkeit v_W bewegt, die fünfmal höher ist als die Geschwindigkeit, mit der sich die Atome bei Raumtemperatur bewegen würden, wenn sie die anfängliche W-Geschwindigkeit $v_W(T_{\text{Raum}})$ beibehielten: $v_W = 5 \times v_W(T_{\text{Raum}}) = 5 \times 165\text{ m/s} = 825\text{ m/s}$. Darüber hinaus wird die Situation durch einen Dissoziationsvorgang der WF₆-Moleküle weiter verkompliziert wird. An diesem Punkt darf eine Geschwindigkeit von $v_W = 865\text{ m/s}$ nur als ein *Parameter* betrachtet werden, der auch den Dissoziationsvorgang beinhaltet. Das heißt, darin ist inbegriffen, dass Form und Breite des Profils durch eine der Ionisation der W-Atome vorgelagerte Dissoziation der WF₆-Moleküle und einen damit verbundenen Energiegewinn der W-Atome beeinflusst sind.

Der Dissoziationsprozess Kann ein solcher Geschwindigkeitsgewinn von $\Delta v_W = v_W - v_W(T_{\text{Raum}}) = (825 - 165)\text{ m/s} = 660\text{ m/s}$ durch einen Energiegewinn im Rahmen des Dissoziationsprozesses erklärt werden? Die im Reservoir herrschende Temperatur als Ursache dieser erhöhten Geschwindigkeit kann ausgeschlossen werden, da bereits eine Erhöhung der Molekülgeschwindigkeit um 100 m/s einer Erhöhung der Temperatur um 123 K entsprechen würde, was eine Temperatur im Reservoir von 423 K bedeuten würde, die ausgeschlossen werden kann.

Für Experimente zur Erzeugung von W-Beschichtungen durch WF₆-Dissoziation sind

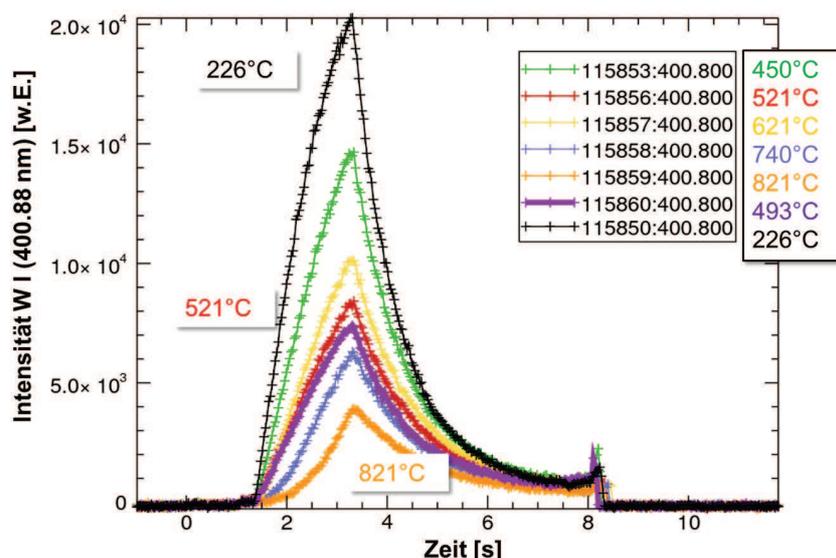


Abbildung 67: Zeitspuren der Intensität der W I (400.88 nm)-Linie in Abhängigkeit der Düsentemperatur.

in der Literatur (z.B. [43, 70, 75, 92]) experimentell im Bereich von $T_{\text{Diss}} \approx 500$ bis 1100 K angegeben, was einer Dissoziationsenergie von $\lesssim 0.1$ eV entsprechen würden. Auch konnte eine Zersetzung des WF_6 innerhalb der Druckflasche bereits bei Raumtemperatur bzw. bei Durchströmen einer geheizten Injektionsdüse beobachtet werden. Hierbei liegt aber durch Stöße mit Atomen und Molekülen auf der Oberfläche ein anderer Dissoziationsmechanismus zugrunde, als bei Elektronenstößen im Plasma. Abbildung 67 zeigt hierfür die Zeitspuren der Intensität der W I (400.88 nm)-Linie in Abhängigkeit der Düsentemperatur. Dazu wurde die Kohlenstoffdüse durch eine darunter befindliche Heizspirale (Abb. 22) auf Temperaturen zwischen etwa 226°C und 821°C aufgeheizt.

Wie in [32] für die Dissoziation von Methan (CH_4) beschrieben, führt die Wechselwirkung der Plasmaelektronen mit den Molekülen ab einer bestimmten Schwellenenergie durch einen Energieübertrag $\Delta E > E_{\text{Diss}}$, der größer ist als die Bindungs- bzw. Dissoziationsenergie, zunächst zu einem angeregten Zustand des Moleküls. Infolgedessen dissoziiert das Molekül, und die dabei entstehenden Produkte erhalten insgesamt die Differenz zwischen Bindungsenergie und Energieübertrag als kinetische Energie $E_{\text{kin,ges}} = \Delta E_{\text{ges}} - E_{\text{Diss,ges}}$, die sich den Gesetzen der Energie- und Impulserhaltung folgend über die Dissoziationsprodukte unterschiedlicher Masse verteilt.

Überträgt man diese Betrachtung auf den WF_6 -Dissoziationsprozess, so bedeutet dies, dass die gemessene Geschwindigkeitsdifferenz von ca. 660 m/s einer in summa über alle Dissoziationen auf ein einzelnes W-Atom übertragenen kinetischen Energie von $E_{\text{kin,W}} = 0.42$ eV entspricht, die das letztlich hervorgehende atomare W für den betrachteten Temperaturbereich erhält. Ein Gewinn an kinetischer Energie durch den Dissoziationsprozess ist also notwendig zur Erklärung der experimentellen Befunde, der Dissoziationsvorgang

v_W m/s	$\langle D_{WF_6} \rangle$ [cm ³ s ⁻¹]	$\langle \tau_{Fit} \rangle$ [μs]	$\langle S_{Fit} \rangle$ [cm ³ s ⁻¹]
165	$(1.3 \pm 1.1) \times 10^{-8}$	2.2 ± 1.8	$(2.7 \pm 0.2) \times 10^{-8}$
250	$(2.8 \pm 1.5) \times 10^{-9}$	6.3 ± 2.6	$(4.7 \pm 0.5) \times 10^{-8}$
825	$(1.9 \pm 1.5) \times 10^{-8}$	1.4 ± 1.0	$(1.4 \pm 0.1) \times 10^{-7}$

Tabelle 8: Mittelwerte der Fitparameter der jeweils vier analytischen Anpassungen in Abhängigkeit der Teilchengeschwindigkeit.

ist somit nicht vernachlässigbar. In [17] und [30] ist die insgesamt zur WF₆-Dissoziation notwendige Energie mit (729 ± 3) kcal/mol = (32.67 ± 0.13) eV/WF₆ angegeben, die möglicherweise der Summe der über der eigentlichen Gesamtdissoziationsenergie $E_{Diss,ges}$ liegenden Schwellenergien entspricht. Ein daraus resultierender Gewinn an kinetischer Energie von $E_{kin,W} = 0.42$ eV kann also bei Weitem abgedeckt werden.

In den Abbildungen 64(a) bis 65 sind die besten Anpassungen an die Emissionsprofile für W-Geschwindigkeiten von 165 m/s bzw. 250 m/s (entspricht einem Energiegewinn von 0.01 eV) und 825 m/s (entspricht einem Energiegewinn von 0.42 eV) gezeigt, für die auch die Monte-Carlo-Simulation die besten Ergebnisse liefert. Tabelle 8 gibt die Ergebnisse der Fits (Mittelwerte der jeweils vier Anpassungen) in Abhängigkeit der Teilchengeschwindigkeit wieder.

Vergleichbare Werte und Kurvenverläufe ergeben sich, wenn statt der Lösung (92) analog zum Anfitten der Kurven der WF₆-Zerstäubung in Kapitel 7.1.2 die Näherungslösung

$$n_j(t) \sim n_i(t) e^{\frac{-t}{\tau_{Ion}}} (1 - e^{\frac{-t}{\tau_{Fit}}}) \quad (93)$$

$$\sim n_{WF_6}(t_0) (1 - e^{-tn_e D_{WF_6}}) e^{\frac{-t}{\tau_{Ion}}} (1 - e^{\frac{-t}{\tau_{Fit}}}) \quad (94)$$

bzw.

$$n_j(d) \sim n_i(d) e^{\frac{-d}{v_W \tau_{Ion}}} (1 - e^{\frac{-d}{v_W \tau_{Fit}}}) \quad (95)$$

$$\sim n_{WF_6}(d_0) (1 - e^{\frac{-dn_e D_{WF_6}}{v_W}}) e^{\frac{-d}{v_W \tau_{Ion}}} (1 - e^{\frac{-d}{v_W \tau_{Fit}}}) \quad (96)$$

verwendet wird. Im Vergleich zum Zerstäubungsexperiment, wo durch die zwei unterschiedlichen Lösungen von einander abweichende S gefunden wurden, liefern hier beide Lösungsansätze gleiche S .

Die ermittelten Anregungszeiten liegen etwas höher als für die beste Übereinstimmung im Zerstäubung-Fall ($0.5 \mu s$ bis $1 \mu s$), jedoch immer noch innerhalb der als Gültigkeitsgrenze des Modells angegebenen $10 \mu s$. Diese Erhöhung könnte durch eine im Vergleich zur Zerstäubung unterschiedliche Niveaubesetzung infolge der Dissoziation zurückzuführen sein. Es kann aber nicht ausgeschlossen werden, dass im Rahmen der Anpassungsprozedur ein beispielsweise zu kleines D_{WF_6} durch ein zu hohes τ_{Fit} kompensiert wird. Weiter ist

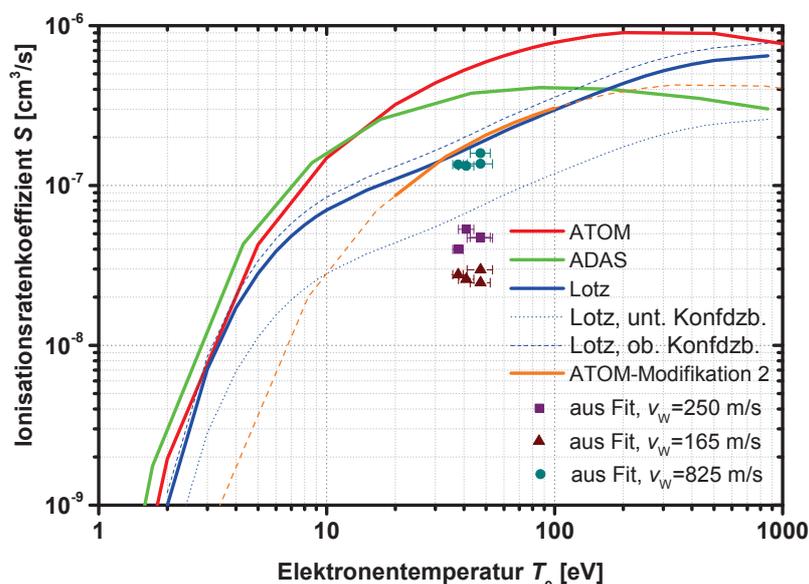


Abbildung 68: Durch das Anfitzen des Stoß-Strahlungs-Modells für 165 m/s, 250 m/s, und 825 m/s bestimmte Ionisationsratenkoeffizienten (Parameter siehe Tabelle 8) im Vergleich mit den unterschiedlichen Datensätzen. Im Rahmen des *simple SOL*-Modell erhöhen sich die im Fit ermittelten S wieder um einen Faktor 2.

zu erkennen, dass eine höhere Geschwindigkeit insbesondere für die jeweils unteren beiden Diagramme bei kleinen Dichten zu einer deutlich besseren Übereinstimmung führt. In Abb. 68 sind die durch die Fits ermittelten Ionisationsratenkoeffizienten zur jeweiligen Geschwindigkeit im Vergleich mit den gerechneten Datensätzen gezeigt. Im *simple SOL*-Modell erhöhen sich die ermittelten S wieder um einen Faktor 2. Für 165 m/s liegen die Werte in jedem Fall außerhalb des Konfidenzbereiches der LOTZ-Daten, der durch PSI-CO für das Zerstäubungsexperiment ermittelt wurde. Für 250 m/s ist eine Annäherung bis auf einen Faktor 4.5 an die LOTZ-Daten zu beobachten. Unter Berücksichtigung des *simple SOL*-Modells heben sich die Werte um einen weiteren Faktor 2 und liegen damit vollständig im Konfidenzbereich. Für 825 m/s zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den LOTZ-Daten. Unter Anwendung des *simple SOL*-Modells liegen diese Werte zwischen den LOTZ- und den ADAS-Werten.

Somit erlaubt die WF_6 -Injektion nur dann die Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten, wenn Annahmen über die W-Teilchengeschwindigkeit und darüber hinaus zusätzlich über die Dissoziationsratenkoeffizienten und die Anregungsdauer gemacht werden. Damit ergibt sich ein vierdimensionaler Parameterraum, für den keine eindeutige Kombination als beste Lösung gefunden werden kann. Das Eindringen der Neutralteilchen ins Plasma, woraus letztlich auf das S geschlossen wird, ist im Falle der WF_6 -Injektion zu stark vom Dissoziationsvorgang geprägt, über den bisher zu wenig bekannt ist. Dies führt über mehrere denkbare Effekte zu einer Beeinflussung bzw. Verbreiterung der Emissions-

kurven:

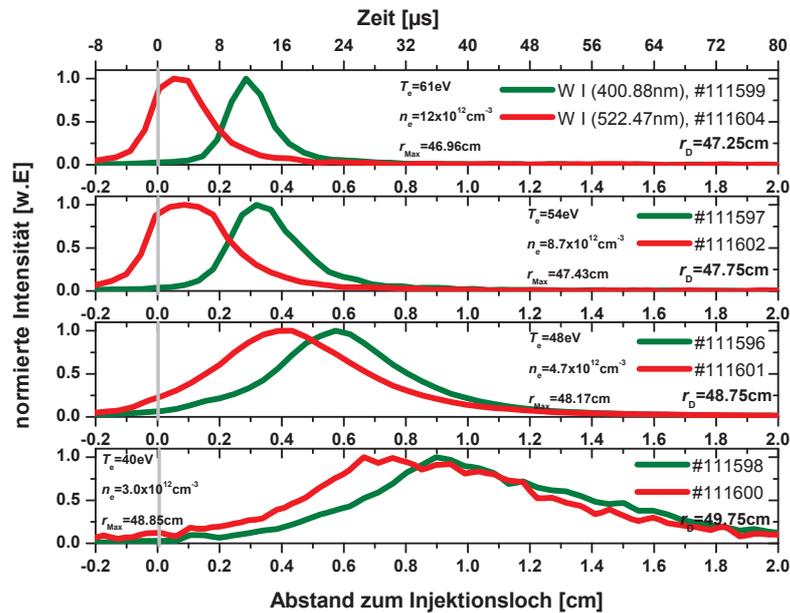
1. Die Dissoziation selbst. Die WF₆-Moleküle legen bereits eine bestimmte Strecke zurück, bevor sie zu W dissoziieren, welches sich dann wiederum bis zur Ionisation weiterbewegt.
2. Aus dem Dissoziationsvorgang resultiert ein Geschwindigkeitsgewinn, der die Strecke der entstandenen W-Atome bis zur Ionisation vergrößert.
3. Durch den Dissoziationsprozess geht die zur Abstrahlung der W I (400.88 nm)-Linie nötige Niveaubesetzung nicht notwendiger Weise genau so vonstatten, wie beim Zerstäubungsprozess.

Zu Punkt 3 ist anzumerken, dass für höhere Ionisationszustände die Beeinflussung der Niveaubesetzung durch die Dissoziation immer geringer werden sollte. Daher bietet sich die Beobachtung von W II-Linien an, um diesen Einfluss zu minimieren. Nachteile experimenteller Arte entstehen bei der Beobachtung von W II-Linien jedoch insofern, als dass diese häufig im UV-Bereich zu finden sind, wofür also der spektroskopische Aufbau entsprechend durchlässig sein muss oder die Linien im sichtbaren Bereich schwächer als die W I-Linien auftreten und teilweise zusätzlich durch andere Linien von Plasmaverunreinigungen wie O geblendet sind. Ein Beispiel ist die zwar im sichtbaren Bereich beobachtbare W II (434.81 nm)-Linie, die aber von mehreren O II-Linien zwischen 434.56 nm und 434.94 nm überlagert wird. Aus diesen Gründen sind auch die Standarddiagnostiken z.B. an JET auf die prominenten W I-Linien bei z.B. 400.88 nm und 522.47 nm ausgelegt, wofür die vorausgegangenen Untersuchungen wieder relevant sind.

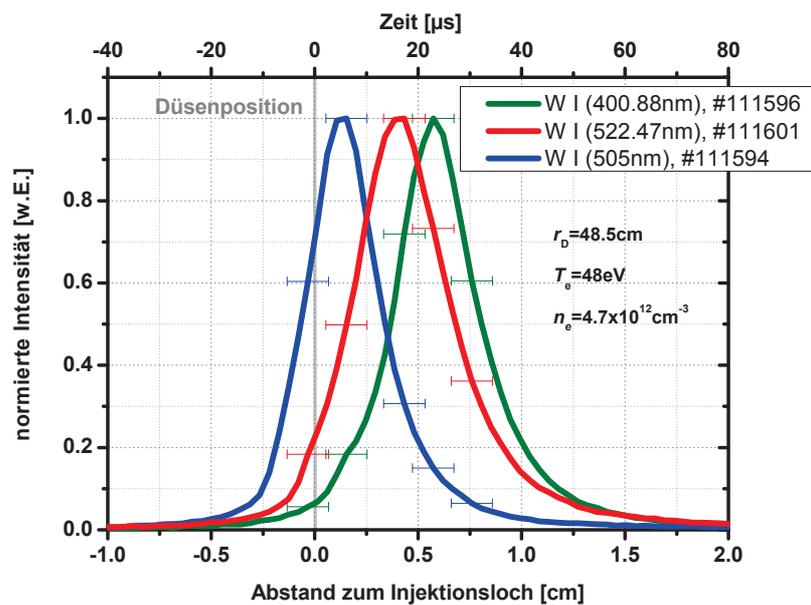
Vergleich der W I-Emissionsprofile für 400.88 nm, 505.33 nm und 522.47 nm Neben den Emissionsprofilen der W I (400.88 nm)-Linie konnten auf gleiche Weise mit weiteren Interferenzfiltern auch Profile der W I (505.33 nm)-Linie und der W I (522.47 nm)-Linie gewonnen werden (zentrale Wellenlängen der Filter: (400.8 ± 0.5) nm, (505.3 ± 0.8) nm, (522.5 ± 0.5) nm). Abbildung 69(a) zeigt die Ergebnisse eines weiteren Experiments (mit angeschrägter Düse, siehe Abb. 52(a) und auch Vergleich in Abb. 77), bei dem Emissionsprofile für unterschiedliche Düsenpositionen und damit unterschiedliche Dichte- und Temperaturwerte gemessen wurden. Der Radius der Düsenposition r_D ist auf der Höhe des Injektionslochs gegeben. Neben der W I (400.88 nm)-Linie (grüne Kurven) sind diesmal auch die Profile der W I (522.47 nm)-Linie (rote Kurven) dargestellt. Es ist für alle Positionen zu erkennen, wie die 522.47 nm-Linie früher ansteigt als die 400.88 nm-Linie. Hier muss allerdings von einer relativ großen Unsicherheit in der radialen Positionsbestimmung des Injektionslochs von mindestens ± 1 mm ausgegangen werden, die aus der Arretierung der Düsen nach deren radialer Verschiebung resultiert und die Position der Düse in den Kamerabildern nicht immer eindeutig auszumachen ist. Diese Unsicherheit ist in Abb. 69(b) in Form der Fehlerbalken in x -Richtung für alle Profile dargestellt.

Neben der 400.88 nm- und der 522.47 nm-Linie (entspricht Diagramm 3 von oben bei $r_D = 48.75$ cm) ist hier auch das Profil der 505.33 nm-Linie dargestellt. Alle drei Kurven

8.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einer WF_6 -Quelle



(a)



(b)

Abbildung 69: (a) Vergleich der Profile der W I (400.88 nm)-Linie (grüne Kurven) mit denen der W I (522.47 nm)-Linie (rote Kurven) für unterschiedliche Düsenpositionen. (b) Vergleich der Profile der W I (400.88 nm)-, der W I (505.33 nm)-, und der W I (522.47 nm)-Linie.

wurden bei dergleichen Position des Injektionslochs von $r_D = 48.75$ cm aufgenommen (was einer Position der Spitze der Düse bei $r = 48.50$ cm entspricht). Aufgrund der Breite des Filters, der für die 505.33 nm-Linie benutzt wurde, tragen hier auch drei weitere, unmittelbar benachbarte Linien zum Profil bei, von denen jedoch die 505.33 nm-Linie mit 63% [58] den größten Anteil hat: W I (505.22 nm) (5%), W I (505.46 nm) (24%) und W I (505.55 nm) (8%). In Tabelle 10 sind die Eigenschaften aller untersuchten Übergänge zusammengestellt.

Für alle drei Linien ist zu erkennen, wie die Reihenfolge ihres Erscheinens der Reihenfolge der Energieniveaus entspricht, aus denen die Linien angeregt werden (siehe GRO-TRIAN-Diagramm in Abb. 33), und dass von einer zeitlich unterschiedlichen Besetzung auszugehen ist:

1. Besetzung aus und Abregung auf 5D_1 unter Emission der 505.33 nm-Linie
2. Besetzung aus und Abregung auf 5D_3 unter Emission der 522.47 nm-Linie
3. Besetzung aus und Abregung auf 7S_3 unter Emission der 400.88 nm-Linie

Insbesondere stützt dieser Befund die These, dass eine Besetzung des Niveaus $^7P^{\circ}_4$, von wo aus die 400.88 nm-Linie emittiert wird, bis zum Gleichgewicht zwischen An- und Abregung längere Zeit in Anspruch nimmt (im Vergleich der drei betrachteten Linien die längste), da dazu zuerst das metastabile Niveau 7S_3 über Abregung des Niveaus 7D_3 unter Emission der W I (430.21 nm)-Linie besetzt werden muss. Dieses Niveau wiederum muss zuvor seinerseits erst besetzt worden sein. Allerdings ist diese Beobachtung hier zunächst auf die Anregung von W-Atomen nach einer WF₆-Dissoziation beschränkt, welche einen Einfluss auf die Niveaubesetzung haben kann. Die entsprechenden Vorgänge für zerstäubtes W sind außerhalb dieser Arbeit weiter zu untersuchen.

Dichteabhängigkeit der Ionisationsratenkoeffizienten Unabhängig vom Absolutwert von W-Geschwindigkeit und Dissoziationsratenkoeffizient liefert das analytische Modell ein weiteres wichtiges Ergebnis. Über die vier Messungen hinaus, die in Kap. 8.1.1 beschrieben wurden (#115831, -34, -36, -37), wurde die Anpassungsprozedur auf weitere Profile – auch unterschiedlicher Linien – angewandt. Als Fitparameter ergibt sich direkt die Ionisationsrate $I_{\text{Fit}} = n_{e,\text{Rand}} \cdot S_{\text{Fit}}$. Abbildung 70 zeigt die so ermittelten Ionisationsraten aufgetragen gegen die Randschichtdichten zwischen $2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und $12.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (am Maximum der Emission). Da das erhaltene S_{Fit} wie zuvor gesehen von der angenommenen Geschwindigkeit abhängt, wird hier die Ionisationsrate in willkürlichen Einheiten angegeben, was für die folgende Beobachtung aber unbedeutend ist. Es zeigt sich, dass für den gesamten Dichtebereich der Zusammenhang zwischen Ionisationsrate und Dichte linear ist. Die Ionisationsrate steigt also wie erwartet mit der Dichte an. Da $n_{e,\text{Rand}}$ ebenso wie S linear in die Ionisationsrate eingeht, bedeutet dies, dass $S = \text{const.}$ Sollte S eine Funktion von Temperatur *und* Dichte sein, die für die betrachteten Profile beide mit zunehmendem Abstand vom Plasmazentrum abnehmen, so müsste sich diese Abhängigkeit genau kompensieren.

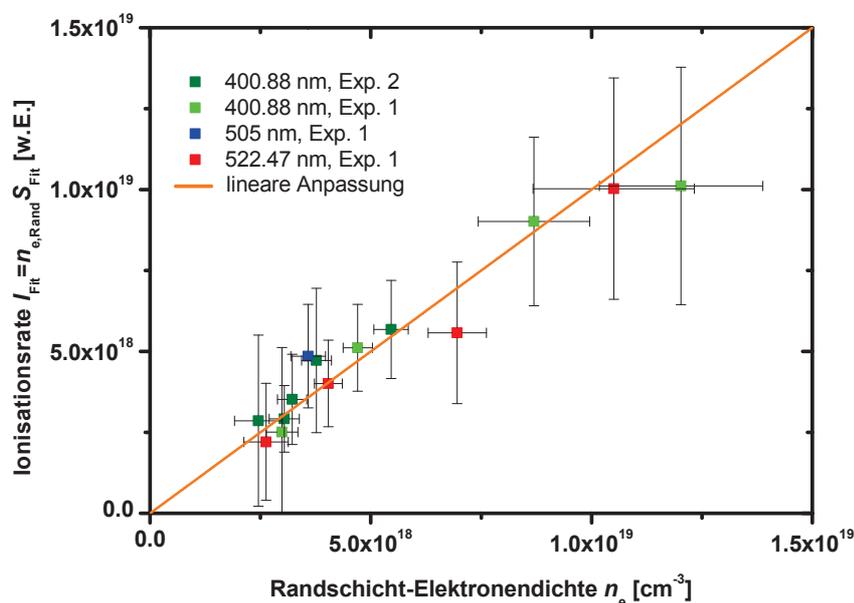


Abbildung 70: Im analytischen Modell ermittelte Ionisationsraten [w.E.] aufgetragen gegen die Randschichtdichte für zwei unabhängige Experimente und drei verschiedene W I-Übergänge bei 400.88 nm, 505.33 nm und 522.47 nm. Für den gesamten Dichtebereich stellt sich der Zusammenhang als linear dar. Die Ionisation aus den oberen Niveaus wirkt sich also nicht auf die Ionisationsrate aus und ist somit vernachlässigbar.

Darüber hinaus ist die Abhängigkeit zwischen Ionisationsrate und Ionisationsratenkoeffizient für alle betrachteten Linien die gleiche. Das bedeutet, dass der Einfluss der oberen Niveaus, von denen aus die Linien emittiert werden, vernachlässigbar ist und damit auch die Ionisation aus diesen Niveaus heraus.

Den größten Anteil an der Ionisation hat demnach die Ionisation aus dem unteren Zustand.

8.1.2 Erweiterung von PSICO um die WF_6 -Dissoziation

Auch wenn aufgrund der Verkomplizierung durch den Dissoziationsvorgang keine eindeutige Lösung für die vier unbekannt Parameter gefunden werden kann, können dennoch mögliche Lösungen mit der Monte-Carlo-Simulation weiter untersucht werden. Greift man dabei auf die Erkenntnisse über S aus den Zerstäubungsexperimenten zurück und gibt diese somit vor, kann der Parameterraum auf einen dreidimensionalen reduziert werden. Durch die Auswertung und Simulation der Zerstäubungsexperimente konnten zuvor ja eindeutige Werte für S bestimmt werden. Zwar kann damit an dieser Stelle keine weitere Erkenntnis über S , jedoch über die drei zusätzlichen Größen gewonnen werden.

WF₆-Dissoziationsvorgang in PSICO Dazu wird PSICO um die Möglichkeit der Simulation einer effektiven Dissoziation erweitert. Ein Testteilchen, das ins Plasma eintritt, wird in dieser Erweiterung zunächst nicht wie zuvor bei Simulation der Zerstäubungsexperimente als neutrales W-Atom betrachtet, sondern als WF₆-Molekül mit der Geschwindigkeit $v_{\text{WF}_6}(T_{\text{Raum}}) = 165 \text{ m/s}$ losgeschickt. Während der Existenz als Molekül wird nicht auf Ionisation, jedoch auf Dissoziation getestet. Hierzu wird der effektive Dissoziationsratenkoeffizient D_{WF_6} in der Routine eingeführt. Analog zur Ionisationsrate $I[\frac{\text{Ionisationen}}{\text{Sekunde}}] = n_e S$ mit dem Ionisationsratenkoeffizienten S (siehe Gleichung (37)) wird die Dissoziationsrate

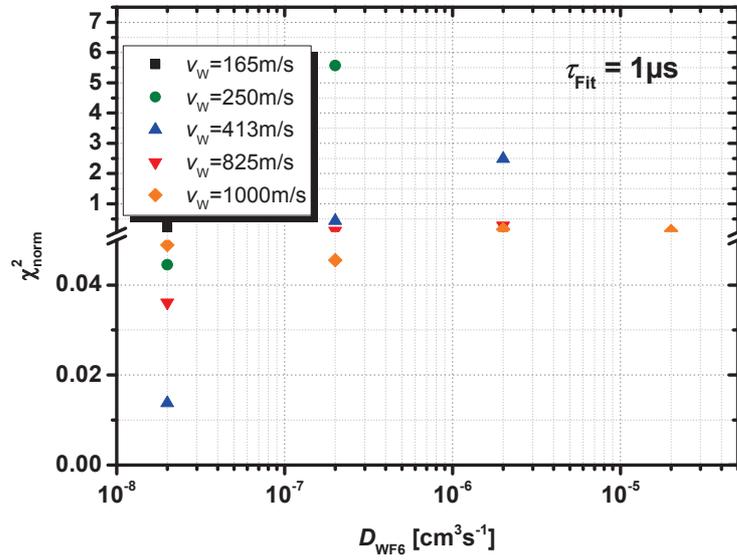
$$R_{\text{Diss}} \left[\frac{\text{Ionisationen}}{\text{Sekunde}} \right] = n_e D_{\text{WF}_6} \quad (97)$$

definiert. Die Gesamtanzahl an Dissoziationen N_{Diss} im Zeitintervall Δt ergibt sich dann als

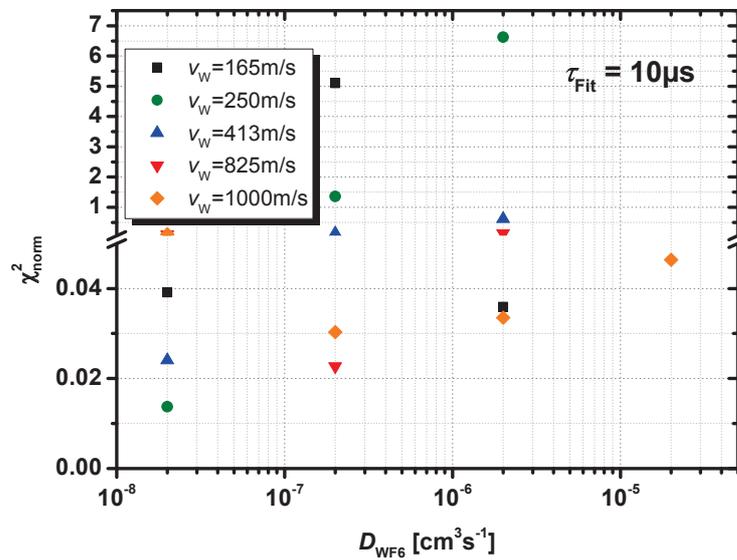
$$N_{\text{Diss}} = R_{\text{Diss}} \Delta t = n_e D_{\text{WF}_6} \Delta t. \quad (98)$$

Wird Δt in der Simulation so gewählt, dass $N_{\text{Diss}} < 1$ gilt, kann $N_{\text{Diss}} = W_{\text{Diss}}$ auch als Dissoziationswahrscheinlichkeit $W_{\text{Diss}} \in [0,1]$ angesehen werden. Diese Wahrscheinlichkeit wird dann wie beim Ionisationsvorgang mit einer gewürfelten Zufallszahl $W = \text{rand}(1,1) \in [0,1]$ (MATLAB) verglichen. Für den Fall $W_{\text{Diss}} > W$ dissoziiert das WF₆-Molekül, andernfalls wird der Test nach einem Zeitintervall Δt wiederholt, währenddessen sich das Testteilchen um ein von v_{WF_6} abhängiges Streckenintervall $\Delta r = v_{\text{WF}_6} \Delta t$ weiter ins Plasma hinein bewegt hat. Ist das Molekül dissoziiert, wird das Testteilchen als atomares W angesehen. Ab hier wird der Test auf Ionisation wie beim Zerstäubungsexperiment durchgeführt.

Dabei wird der Dissoziationsvorgang wesentlich vereinfacht, indem angenommen wird, dass das Molekül sofort vom WF₆ zum W zerfällt, ohne dass die gesamte WF₆-Zerfallskette dargestellt wird, für die auch keine Daten verfügbar sind. Daher kann auch hier wie schon im analytischen Modell nur von einem effektiven Dissoziationsratenkoeffizienten $D_{\text{eff}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} \equiv D_{\text{WF}_6}$ gesprochen werden, der darüber hinaus im Modell nicht von der Plasmatemperatur abhängt. In der Realität wird der Dissoziationsvorgang dagegen von der Plasmatemperatur beeinflusst sein, wobei zu erwarten ist, dass die Dissoziationsrate mit zunehmender Temperatur ansteigt. In Anbetracht der Tatsache, dass hierzu bisher keine Datenbasis besteht, kann der gefundene Wert für D_{WF_6} nur ein erster Orientierungswert sein. Auch muss in der Realität in Betracht gezogen werden, dass sich das W-Atom nach der Dissoziation durch eine Impulsänderung in anderer Richtung weiterbewegen kann, als das ursprüngliche WF₆-Molekül, was sich wahrscheinlich auf die Profilverformung auswirkt. Dies wird in der Simulation dadurch angenähert, dass sich ein entstandenes W-Atom entweder mit der zusätzlichen durch die Dissoziation gewonnenen Geschwindigkeit Δv_W in der ursprünglichen Richtung mit $v_W^+ = v_{\text{WF}_6} + \Delta v_W$ weiterbewegt oder mit der Differenzgeschwindigkeit mit Δv_W in entgegengesetzter Richtung zurück und dann die Differenzgeschwindigkeit $v_W^- = v_{\text{WF}_6} - \Delta v_W$ besitzt.



(a)



(b)

Abbildung 71: Resultate der χ^2 -Tests für (a) $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ und (b) $\tau_{\text{Fit}} = 10 \mu\text{s}$ in Abhängigkeit von D_{WF_6} und v_W .

PSICO-Lauf	v_W [m/s]	$\langle D_{WF_6} \rangle$ [cm ³ s ⁻¹]	$\langle \tau_{Fit} \rangle$ [μs]	S-Datensatz
‡ 9891193	250	2×10^{-8}	10	LOTZ
‡ 9891204	825	2×10^{-7}	10	LOTZ

Tabelle 9: Parameter der besten Übereinstimmungen der PSICO-Simulation mit den Messungen.

Wie zuvor für die Zerstäubungsexperimente wird die Güte der Annäherung an die gemessenen Profile durch einen χ^2 -Test quantifiziert. Die Abbildungen 71(a) und 71(b) zeigen die Ergebnisse der χ^2 -Tests. Hierzu wurde anhand der Entladung ‡115837 der Einfluss der drei Parameter v_W , D_{WF_6} , und τ_{Fit} getestet und die simulierten Profile mit dem experimentellen verglichen. Als Ionisationsratenkoeffizienten wurde der LOTZ-Datensatz benutzt. Für fünf verschiedene Geschwindigkeiten und zwei unterschiedliche τ_{Fit} wurden jeweils drei bis vier Werte für D_{WF_6} getestet. Die Angaben der W-Geschwindigkeit beziehen sich auf die maximale Geschwindigkeit, die ein W-Atom nach der Dissoziation in Vorwärtsrichtung haben kann: $v_W = v_W^+$.

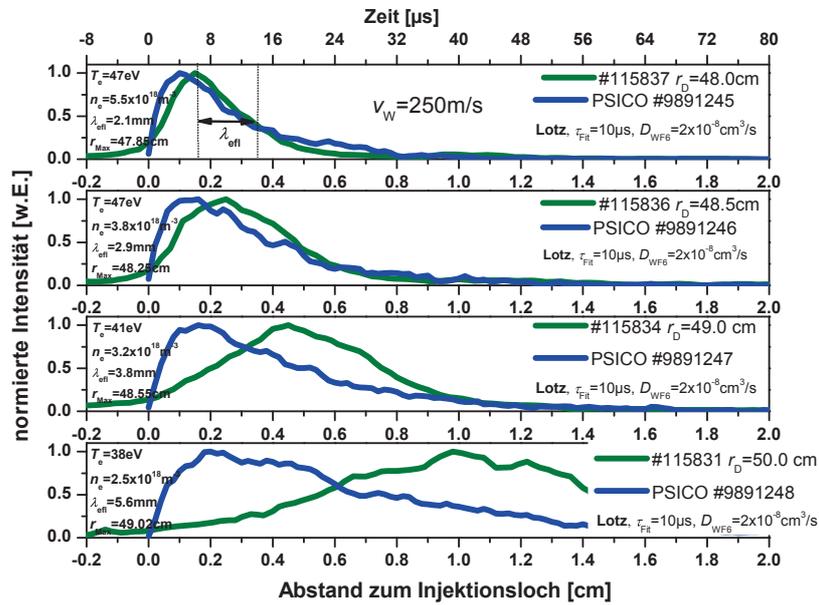
Es zeigt sich, dass sich tendenziell niedrigere χ^2 -Werte, das heißt, bessere Übereinstimmungen, für $\tau_{Fit} = 10 \mu\text{s}$ ergeben, während die beste Anpassung der Zerstäubungsexperimente bei $\tau_{Fit} = 0.5 \mu\text{s} - 1 \mu\text{s}$ gefunden wurde. Diese verlängerte Anregungszeit kann auf den Dissoziationsvorgang zurückzuführen sein. Zwar liefert bei 413 m/s und $D_{WF_6} = 2 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ auch $\tau_{Fit} = 1 \mu\text{s}$ ein vergleichbar kleines χ^2 (Abb. 71(a), blaue Dreiecke), ein Vergleich der Profile untereinander in Abb. 74 zeigt aber eine bessere Übereinstimmung für 250 m/s bzw. 825 m/s. Ein weiteres Indiz für eine längere Anregungsdauer liefert auch der damit verbundene Absolutwert der simulierten emittierten Photonen, der in die Simulation der Photoeffizienzen E_{Ph} eingeht und sich für $\tau_{Fit} = 10 \mu\text{s}$ besser mit den gemessenen Werte deckt (Kapitel 10).

Zur Minimierung des χ^2 ist immer eine W-Geschwindigkeit größer als den der Raumtemperatur entsprechenden 165 m/s erforderlich. Für die beiden Minima der χ^2 -Tests für $\tau_{Fit} = 10 \mu\text{s}$ bei 250 m/s und 825 m/s wurden alle vier WF₆-Injektionen mit PSICO simuliert (Abb. 72(a) und 72(b)). Die benutzten Parameter und damit die besten Parameterkombinationen sind in Tabelle 9 zusammengefasst. In den Abbildungen 73(a) und 73(b) sind die Injektionen für $v_W = 250 \text{ m/s}$ unter Berücksichtigung der unteren und oberen Konfidenzbänder für Dichte und Temperatur simuliert. 72(b) Abbildung 59 zeigt in der rechten Spalte die Ergebnisse der Simulation der Kamerabilder zum Vergleich mit den experimentellen. Während die ersten beiden simulierten Profile bei hoher Plasmadichte und -temperatur noch gut mit den gemessenen übereinstimmen, wird das Ergebnis der Simulation für die letzten beiden Diagramme für kleinere Dichte- und Temperaturwerte immer schlechter. Auch in den simulierten Kamerabildern ist zu sehen, wie sich die Intensitätsverteilung von oben nach unten immer deutlicher von den experimentellen Bildern unterscheidet. Zwar dehnt sich auch hier die Wolke von oben nach unten immer weiter aus,

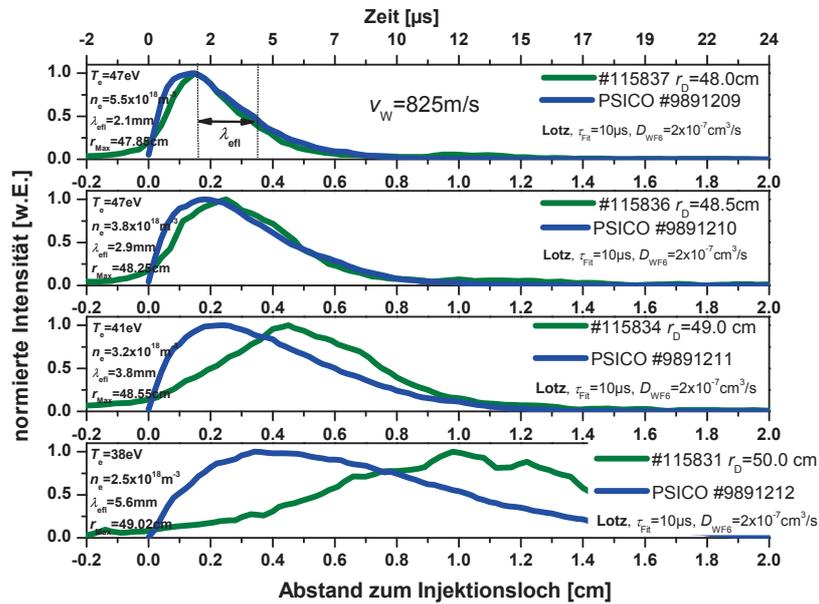
sie unterscheidet sich aber immer stärker in Form und Lage des Maximums, das aufgrund der im Vergleich zum Experiment asymmetrischen Wolke näher an der Düse liegt.

Auch hier ist die Ursache wahrscheinlich in der unzureichenden Berücksichtigung des Dissoziationsvorganges zu suchen, der für größere Dichten und Temperaturen schneller vonstatten gehen sollte und sich damit weniger auf die Profilform auswirkt als bei kleineren Werten. Auch ist zu sehen, dass sich die Profilform von oben nach unten zunehmend unterscheidet, der langsame Anstieg zum Maximum kann nicht reproduziert werden. Die besonders für die unteren Diagramme zu beobachtende Spiegelsymmetrie von Profilanstieg und -abfall kann in der Verteilung der Bewegungsrichtungen der W-Atom nach der Dissoziation begründet sein. Wie beschrieben ist davon auszugehen, dass sich die Geschwindigkeitsvektoren nach der Dissoziation ändern, sodass sich der Schwerpunkt der WF_6 -Wolke nach wie vor mit $v_{WF_6} = 165 \text{ m/s}$ bewegt, während die W-Atome durch die Dissoziation bzgl. dieses Schwerpunktes in alle Raumrichtungen ohne Vorzugsrichtung beschleunigt werden können. Es ist anzunehmen, dass diese Prozesse im Detail – wie auch schon für CH_4 [32] – sehr aufwendig simuliert werden müssen, wofür bisher keine Datenbasis zur Verfügung steht. Einen Anhaltspunkt bietet nun jedoch der effektive Dissoziationsratenkoeffizient, der durch den χ^2 -Test auf einen Wert im Bereich $D_{WF_6} = 2 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ bis $2 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$ festgemacht werden kann. Es kann jedoch nicht ausgeschlossen werden, dass sich für eine Geschwindigkeit über 1000 m/s hinaus weitere passende Kombinationen finden lassen. Zur Untersuchung des Einflusses der einzelnen Parameter sind in den Abb. 75 bis 76(b) die Ergebnisse der Tests dargestellt, bei denen im Vergleich mit dem gemessenen Profil aus Entladung #115837 jeweils immer zwei Parameter konstant gehalten wurden, während der dritte variiert wurde. Die festgehaltenen Werte entsprechen denen des besten χ^2 -Tests: $v_W = 165 \text{ m/s}$, $D_{WF_6} = 2 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$, $\tau_{Fit} = 10 \mu\text{s}$. Abbildung 75 zeigt den Einfluss der W-Geschwindigkeit. Für zunehmende Geschwindigkeiten ist zu erkennen, wie das Rauschen der Kurven zunimmt. Dies liegt darin begründet, dass die Atome aufgrund der höheren Geschwindigkeit weniger Photonen pro Volumeneinheit emittieren. Aufgrund der Verbreiterung der Kurven, bleibt die Gesamtzahl an Photonen aber in etwa konstant (die Kurven sind auf das Maximum normiert). Die Änderung der Kurvenbreite mit dem Dissoziationsratenkoeffizienten ist in Abb. 76(a) gezeigt. Dieser trägt maßgeblich zur Verbreiterung der Kurve bei, ebenso wie τ_{Fit} (Abb. 76(b)). Beide Parameter erweisen sich als notwendig zur Reproduktion der Profile.

Die Darstellung des Fehlers der räumlichen Kalibration und der Absolutlage des Emissionsmaximums in Abb. 78 zeigt die Signifikanz der zuvor betrachteten Abhängigkeiten.



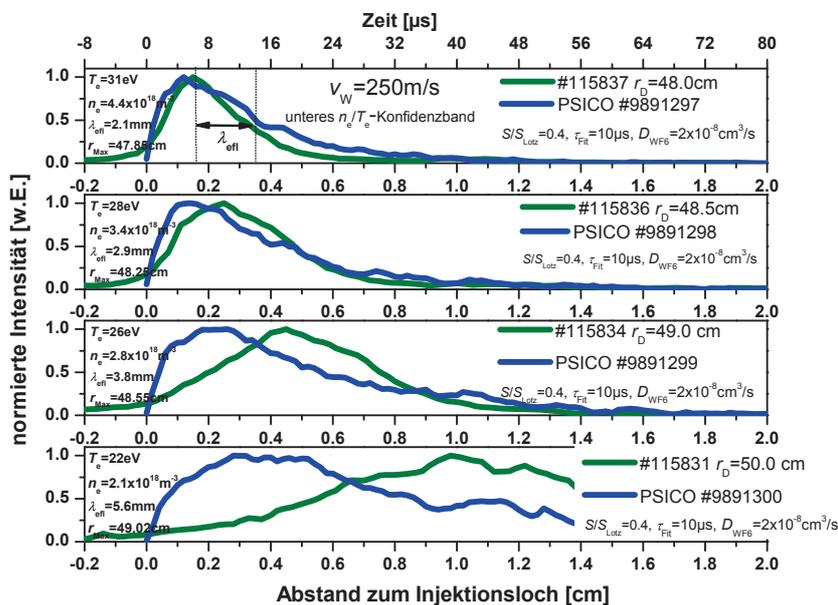
(a)



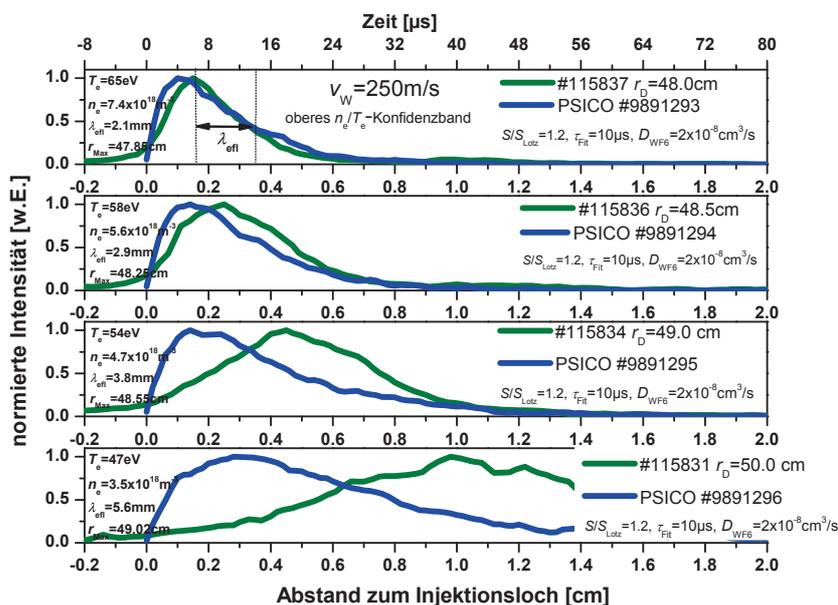
(b)

Abbildung 72: Ergebnisse der PSICO-Läufe für die Parameter aus Tab. 9 für (a) 250 m/s und (b) 825 m/s.

8.1 Untersuchung der Emissionsprofile für atomares W aus einer WF_6 -Quelle



(a)



(b)

Abbildung 73: Ergebnisse der PSICO-Läufe für die Parameter aus Tab. 9 unter Benutzung des (a) unteren n_e/T_e -Konfidenzbandes und (b) oberen n_e/T_e -Konfidenzbandes.

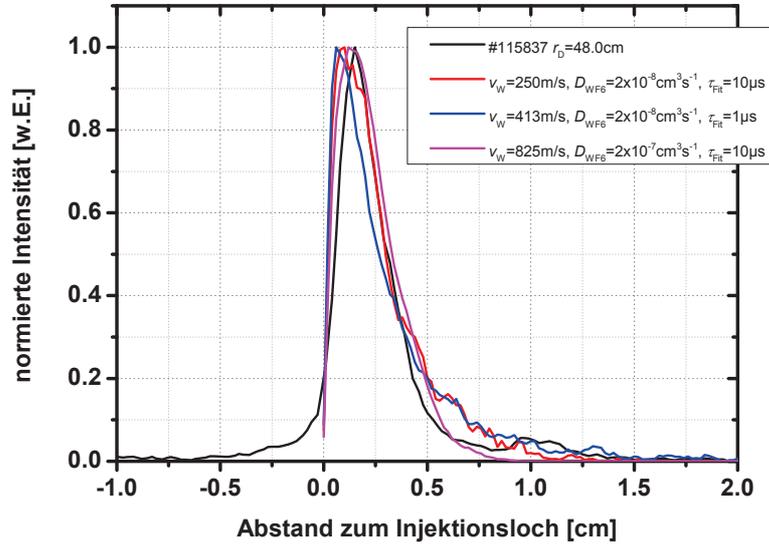


Abbildung 74: Vergleich der drei Profile mit der besten Übereinstimmung.

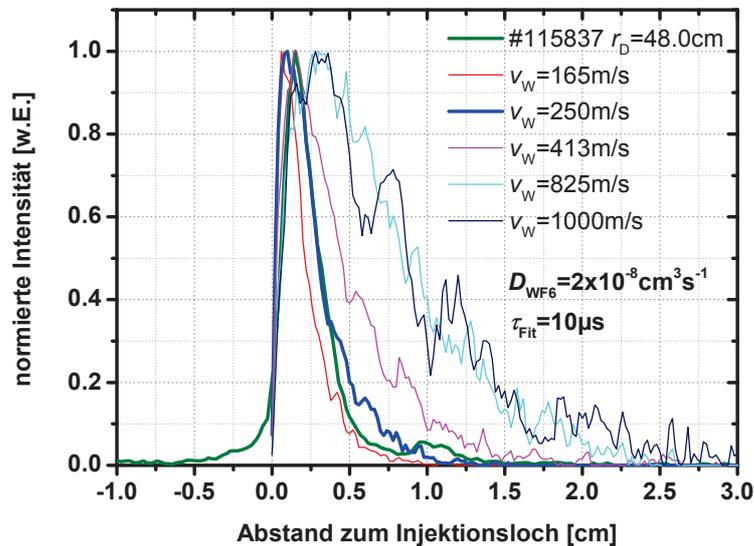
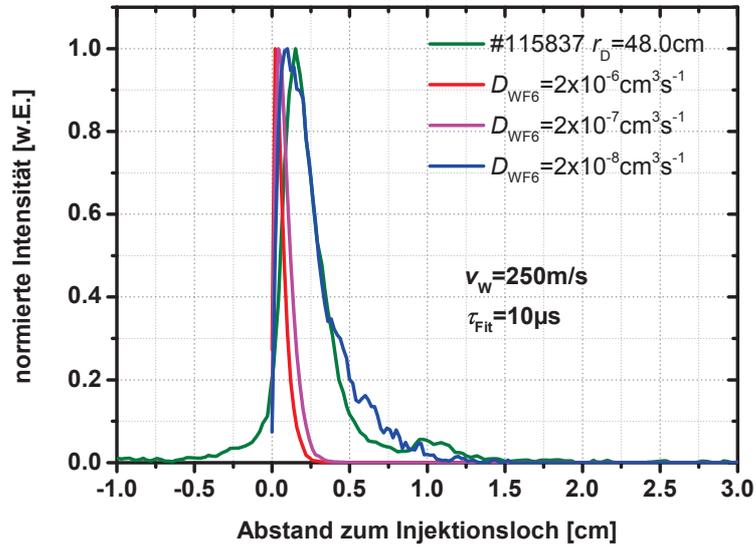
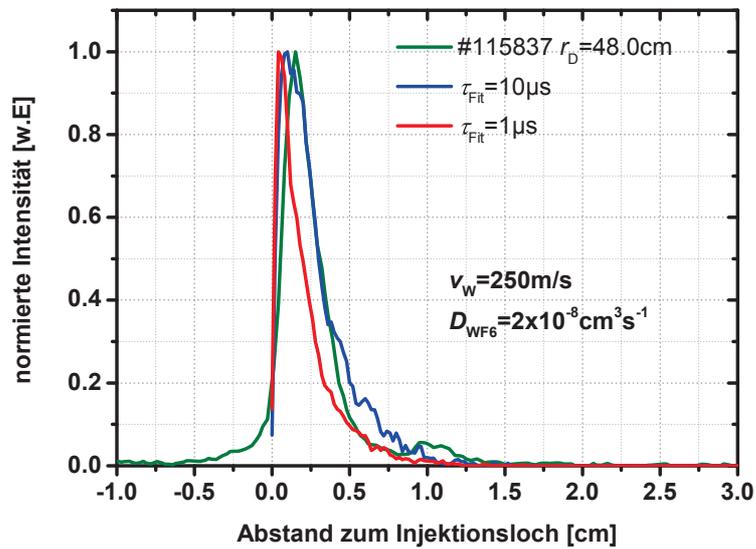


Abbildung 75: Untersuchung des Einflusses von v_W auf die Profilform bei festgehaltenem D_{WF_6} und τ_{Fit} .



(a)



(b)

Abbildung 76: (a) Untersuchung des Einflusses von D_{WF_6} auf die Profilform bei festgehaltenem v_W und τ_{Fit} . (b) Untersuchung des Einflusses von τ_{Fit} auf die Profilform bei festgehaltenem v_W und D_{WF_6} .

8.1.3 Profilvergleich für zerstäubtes und injiziertes W

In Abbildung 77 ist ein Vergleich des Profils der Zerstäubung von abgelagertem W auf der Düsenoberfläche (siehe Kap. 7.2) mit zwei während der WF₆-Injektion gemessenen Profilen gezeigt. Die Düsenposition aller drei Messungen lag bei $r_D = 48.5$ cm, die Plasmapbedingungen sind damit die gleichen. Somit können also direkt Unterschiede zwischen Zerstäubung und Injektion bzgl. der Profileform aufgezeigt werden. Im Vergleich der schwarzen Kurve (Zerstäubung, #111592) und der grünen Kurve (Injektion, #115836) zeigt sich, wie die aus der Zerstäubung stammenden Teilchen deutlich tiefer ins Plasma eindringen, während die rechte Flanke des grünen Profils sehr schnell abfällt. Dies ist dadurch zu erklären, dass die zerstäubten Teilchen entsprechend der THOMPSON-Geschwindigkeitsverteilung mit einer wahrscheinlichsten Geschwindigkeit von 2122 m/s ins Plasma laufen, während die Geschwindigkeit der aus der WF₆-Dissoziation stammenden Teilchen demnach deutlich niedriger liegen muss. Geschwindigkeiten um 2122 m/s können also, insbesondere bei Berücksichtigung einer Dissoziationsverbreiterung der Kurve, ausgeschlossen werden.

Auch die Lage des Maximums ist gegenüber dem schwarzen Profil weiter ins Plasma hinein verschoben, wobei die beobachtete Verschiebung hier bereits in der Größenordnung der Messunsicherheit liegt (siehe Ortsunsicherheit des Maximums relativ zur Limiter-Oberfläche in Abb. 78). Dies stellt jedoch ein weiteres Indiz für eine Verzögerung des Anstiegs der Kurve durch den Dissoziationsvorgang und/oder eine im Vergleich mit den aus der Zerstäubung resultierenden Teilchen nochmals verzögerten Anregung des oberen Niveaus dar. Die Ergebnisse der Simulation mit $\tau_{\text{Fit,Inj}} = 10 \mu\text{s} > \tau_{\text{Fit,Zerst}} = 1 \mu\text{s}$ weisen in diese Richtung, wobei *beide* Effekte berücksichtigt sind.

Die grüne und die rote Kurve (#111596) sind von der Form her miteinander vergleichbar, wobei die rote deutlich tiefer eindringt. Dies ist wahrscheinlich auf die Form der in diesem Experiment 1 benutzten Düse zurückzuführen (siehe auch Abb. 53(a) und 52(a)), die durch die Abschrägung der Düse möglicherweise zu einem Abschattungseffekt geführt hat. Um diesen Effekt zu vermeiden, wurde in späteren Experimenten eine flache Düse verwendet. Unabhängig von diesem Effekt zeigt sich aber auch bei diesem Profil der deutliche Unterschied im Abfall der rechten Flanke im Vergleich mit dem Zerstäubungsprofil.

Damit ist gezeigt, wie grundsätzlich unterschiedlich das Verhalten eines W-Ensembles beim Eindringen ins Plasma ist, abhängig davon, ob seine Quelle die W-Zerstäubung oder die WF₆-Injektion ist. Hinsichtlich der Profilform verhält sich also die WF₆-Injektion aufgrund einer anderen Geschwindigkeitsverteilung, des Dissoziationsprozesses und möglicherweise einer unterschiedlichen Anregung gegenüber der W-Zerstäubung sehr unterschiedlich.

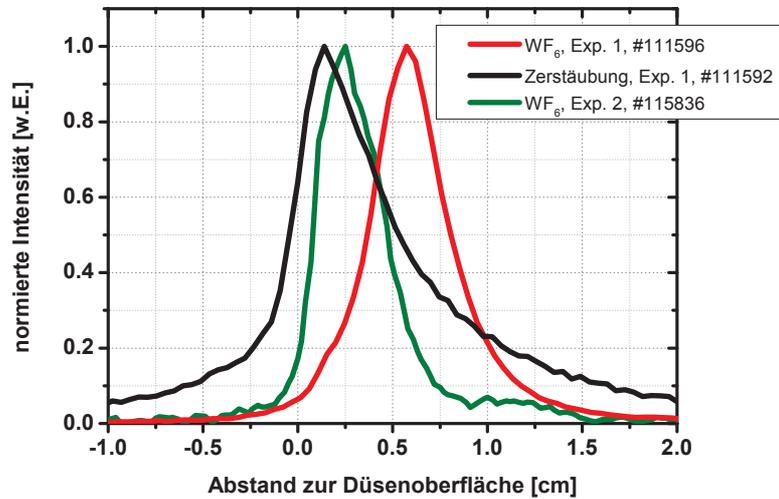


Abbildung 77: Vergleich des Profils der Zerstäubung von abgelagertem W auf der Düsenoberfläche (schwarze Kurve, siehe Kap. 7.2) mit zwei während der WF_6 -Injektion gemessenen Profilen bei $r_D = 48.5$ cm für alle drei Entladungen.

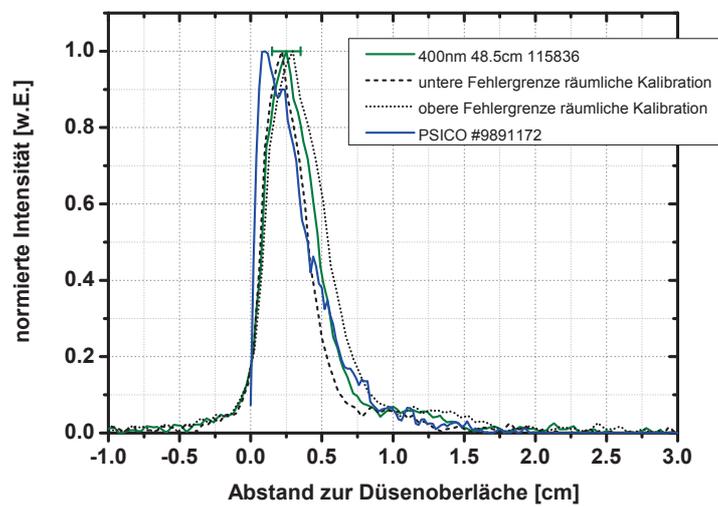


Abbildung 78: Darstellung der absoluten Ortsunsicherheit des Maximums relativ zur Limiter-Oberfläche (grüner Fehlerbalken) und des oberen und unteren Fehlers in der räumlichen Kalibration (schwarze gestrichelte Kurven). Das gemessene und das experimentelle Profil unterscheidet sich über die Fehlergrenzen hinaus voneinander, diese Abweichung wird mit weiter abnehmenden Dichte- und Temperaturwerten größer.

8.1.4 Zusammenfassung der Resultate dieses Kapitels

In Rückbezug auf die zu Anfang dieses Kapitels aufgeworfenen Fragen hinsichtlich der Vergleichbarkeit von zerstäubtem und injiziertem Wolfram kann folgendes gesagt werden:

1. Eine Geschwindigkeit von 165 m/s, welche der Raumtemperatur im Gasreservoir entspricht, und mit der entsprechend die WF₆-Moleküle ins Plasma eindringen, ist nicht ausreichend, um die gemessenen Profile zu reproduzieren, sofern diese Geschwindigkeit auch für die nach der WF₆-Dissoziation entstehenden W-Atome beibehalten wird.
2. Daraus folgt, dass ein Geschwindigkeitsgewinn erforderlich ist, der nur durch den Dissoziationsprozess zu erklären ist.
3. Der Dissoziationsvorgang ist also zur korrekten Beschreibung der WF₆-Injektion nicht vernachlässigbar.
4. Durch die Einführung eines effektiven Dissoziationsratenkoeffizienten D_{WF_6} können die gemessenen Profile mit durch das analytische Modell und die Monte-Carlo-Simulation angenähert werden.
5. Da aber neben der Geschwindigkeit und dem Dissoziationsratenkoeffizienten auch die Anregungsdauer τ_{Fit} einen freien Parameter darstellt, können mehrere mögliche Parameterkombinationen zur Reproduktion der gemessenen Profile gefunden werden (Tabelle 9 fasst die zwei Kombinationen, die zur besten Übereinstimmung führen, zusammen).
6. Mit möglichen Geschwindigkeiten zwischen 250 m/s und 825 m/s liegt die Geschwindigkeit von W-Atomen, die der WF₆-Dissoziation entstammen, einen Faktor 8.5 bzw. 2.6 unter der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit zerstäubter W-Atome von 2122 m/s.
7. Mit einem Wert für D_{WF_6} von $2 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ bzw. $2 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$ (Abhängig von der gewählten Geschwindigkeit) kann erstmalig eine Größe quantifiziert werden, die die WF₆-Dissoziation effektiv beschreibt.
8. Der Wert für τ_{Fit} liegt mit $10 \mu\text{s}$ bei injiziertem W einen Faktor 10 bis 20 höher als bei zerstäubtem W. Dies deutet darauf hin, dass auch der Anregungsvorgang des oberen Niveaus durch die Dissoziation beeinflusst ist. Es kann jedoch nicht ausgeschlossen werden, dass eine Überschätzung des Dissoziationsratenkoeffizienten zu einer Überschätzung der effektiven Anregungsdauer führt.
9. Die Dissoziation führt somit sowohl zu einer Verbreiterung der Profile durch eine Verzögerung der Freisetzung und einen Geschwindigkeitsgewinn der W-Atome als auch möglicherweise zu einer Verschiebung des Emissionsmaximums weiter hinein ins Plasma durch eine Verzögerung der Anregung.

10. Somit erlaubt die WF_6 -Injektion nur dann die Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten, wenn Annahmen über die W-Teilchengeschwindigkeit und darüber hinaus zusätzlich über die Dissoziationsratenkoeffizienten und die Anregungsdauer gemacht werden. Dies ist jedoch mit großen Unsicherheiten behaftet.

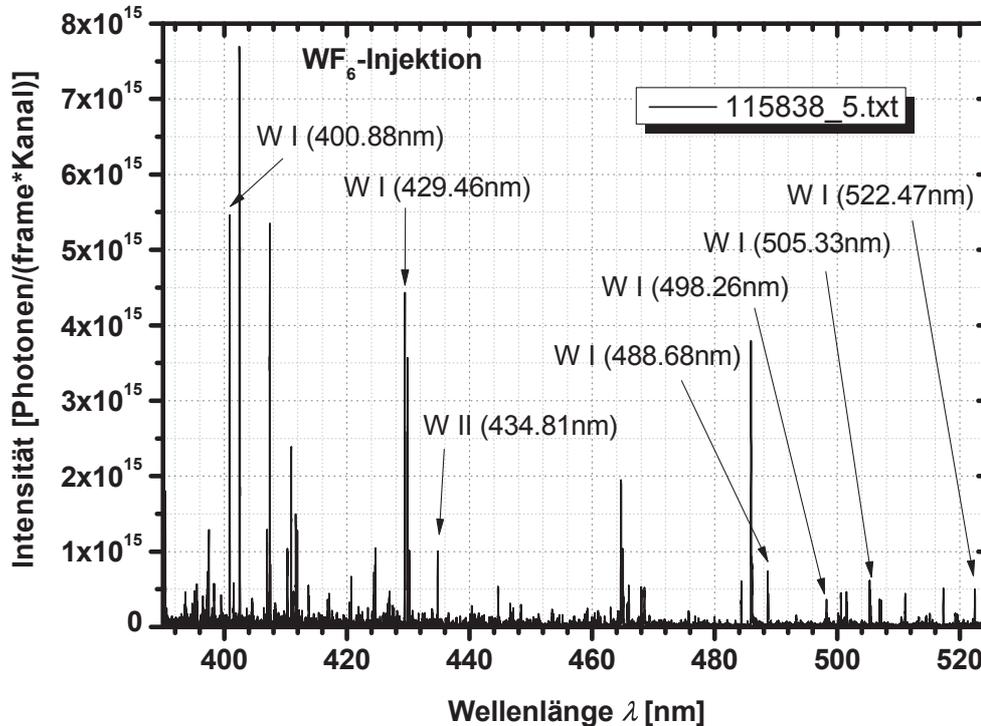
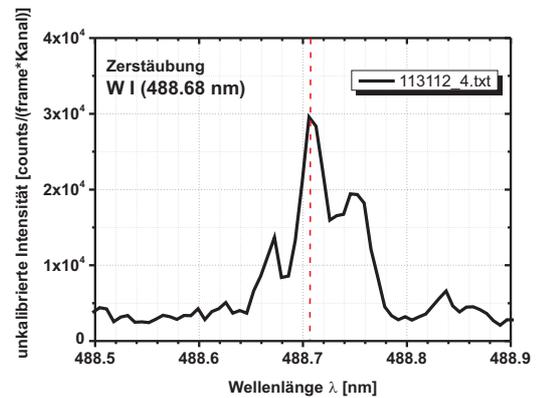
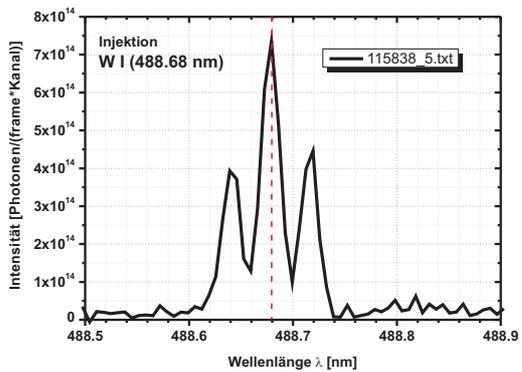
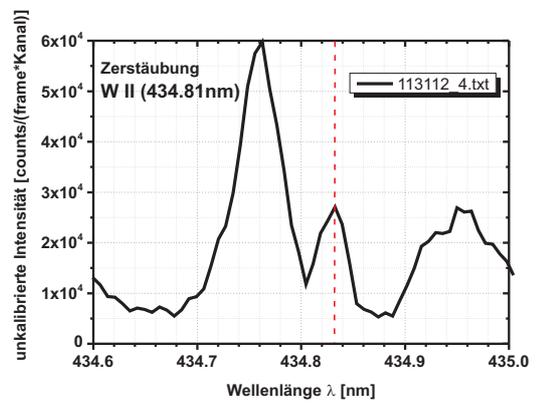
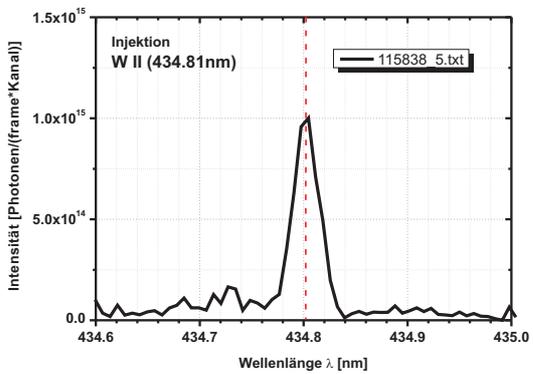
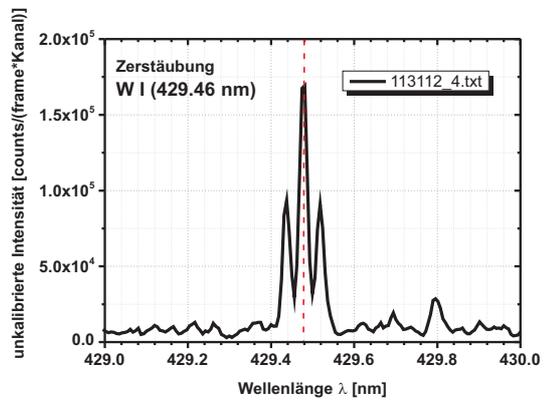
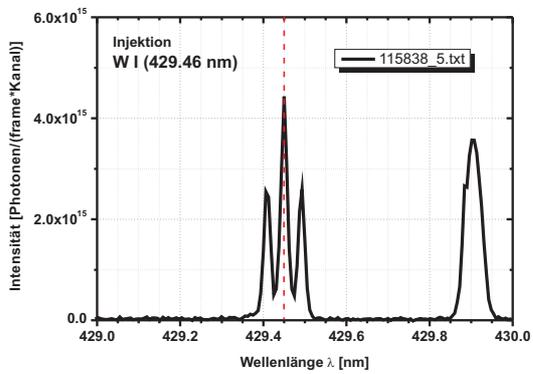
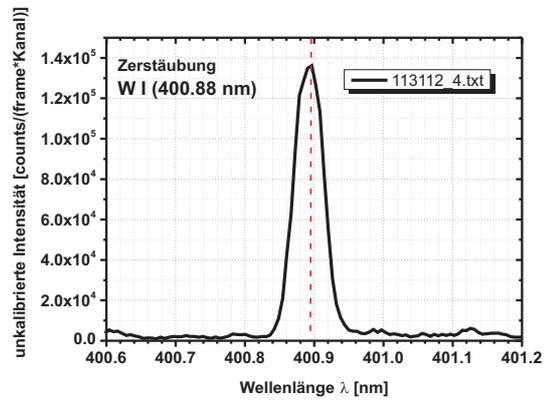
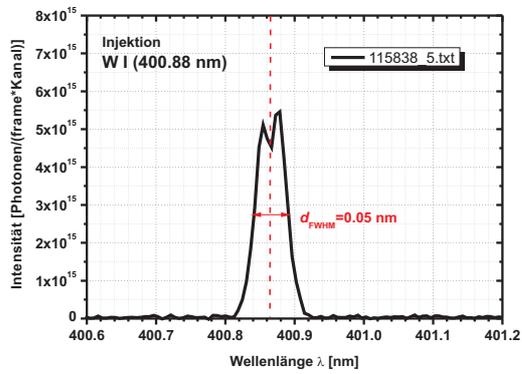


Abbildung 79: Übersicht der ausgewerteten W I- und W II-Linien im absolutkalibrierten Spektrum des Echelle-Spektrometers während einer WF_6 -Injektion (#115838, frame 5).

9 Vergleich der experimentellen Linienverhältnisse

Im vorhergehenden Kapitel wurden WF_6 -Injektion und W-Zerstäubung anhand der Emissionsprofile und Eindringtiefen miteinander verglichen. Ein weiterer wichtiger Aspekt beim Vergleich beider Experimente und insbesondere hinsichtlich der Frage, ob die mittels einer WF_6 -Quelle bestimmten Photoeffizienzen mit denen aus Zerstäubungsprozessen identisch sind, sind die Verhältnisse der Emissionslinien und deren Entwicklung mit der Plasmatemperatur. Diese können Aufschluss darüber geben, ob die Besetzungen der Energieniveaus der W-Atome, die unterschiedlichen Freisetzungsmechanismen entstammen, vergleichbar sind oder ob Unterschiede vorliegen, die dem Entstehungsprozess geschuldet sind.

Zur Untersuchung dieser Zusammenhänge und zur späterem Bestimmung der Photoeffizienzen mittels WF_6 -Injektion (Kap. 10) wurde – wie zuvor für das Limiter-Experiment beschrieben – die zentrale Plasmadichte durch Variation der Neutralgasmenge in TEXTOR in den Entladungen #113966-70 und 73-74 zwischen Werten von $n_{e,Zentrum} = 2.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ und $n_{e,Zentrum} = 5.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ variiert und dadurch gegenläufige Temperaturänderungen induziert. In der Randschicht (Düsenposition $r_D = 48.5 \text{ cm}$) konnten so



9 VERGLEICH DER EXPERIMENTELLEN LINIENVERHÄLTNISSE

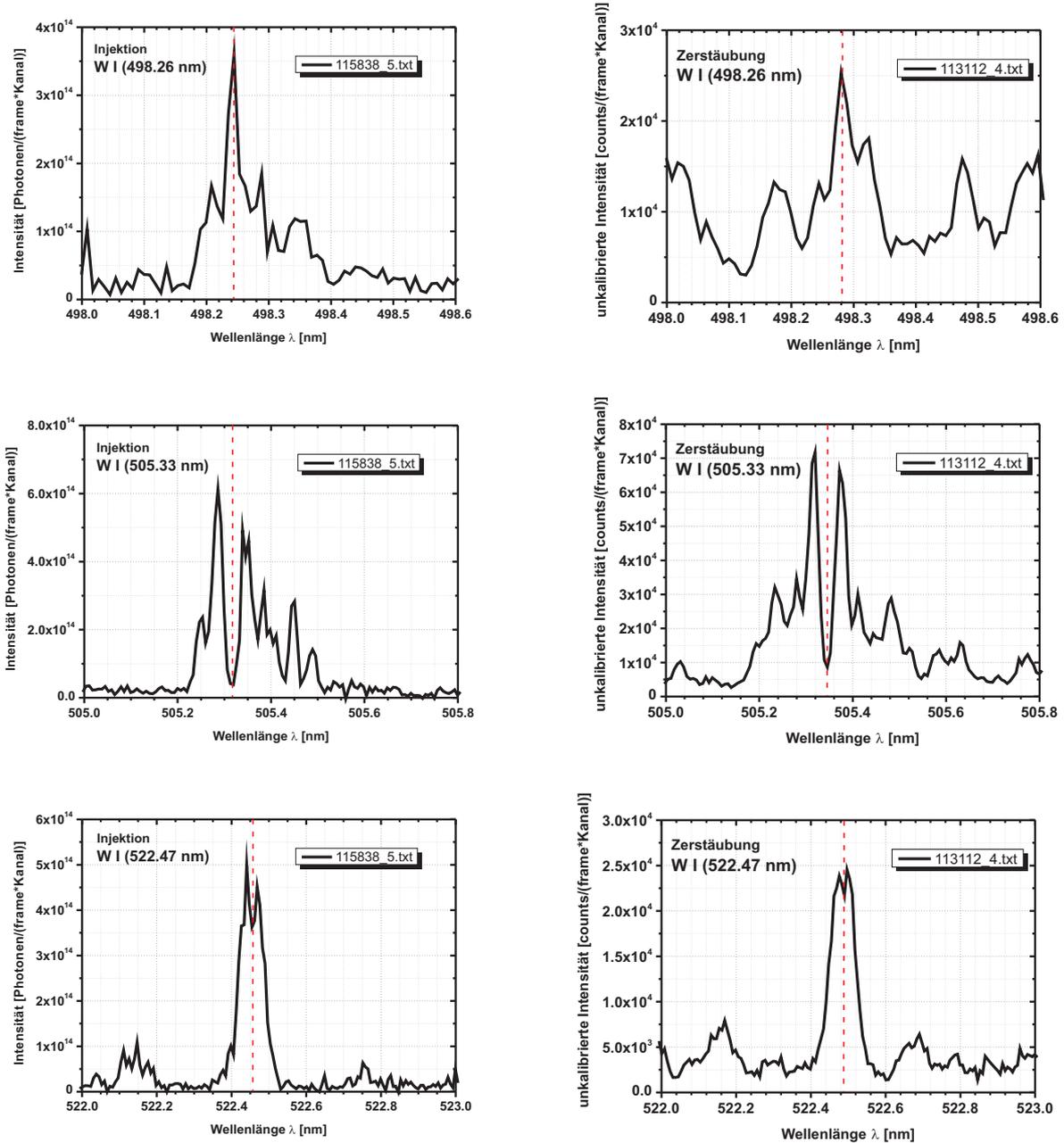


Abbildung 80: Darstellung aller ausgewerteten Linien sowohl des Injektion- als auch des Zerstäubungsexperiments in einer Aufnahme des Echelle-Spektrometers (Injektion: #115383, Zerstäubung: #113112).

die Dichte- und Temperaturwerte zwischen $n_{e,\text{Rand}} = 2.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bzw. $T_e = 82 \text{ eV}$ und $n_{e,\text{Rand}} = 6.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bzw. $T_e = 20 \text{ eV}$ variiert werden.

Die Abbildung 79 zeigt ein mit dem hochauflösenden Echelle-Spektrometer während der WF₆-Injektion #115838 aufgenommenes, absolutkalibriertes Spektrum (frame 5) mit einer Auswahl an W I- und W II-Linien, die ausgewertet wurden. In der Zusammenstellung in Abb. 80 sind die angezeigten Linien einzeln im Vergleich mit dem Zerstäubungsexperiment aufgeführt.

Beispielhaft für die Auwertung sind in Abbildung 81(a) die während der WF₆-Injektion #113973 mit dem Echelle-Spektrometer aufgenommenen Zeitspuren (nicht absolutkalibriert) der Linien W I (400.88 nm) und W I (429.46 nm) und das daraus gebildete Verhältnis $R = \frac{I_{429.46 \text{ nm}}}{I_{400.88 \text{ nm}}}$ gezeigt. Zur Gewinnung der Zeitspuren wurden die Counts pro Integrationszeit von 200 ms über die Breite der jeweiligen Linie hinweg (siehe Abb. 80) aufsummiert. Aufgrund der hohen spektralen Auflösung beträgt die zeitliche Auflösung für das Echelle-Spektrometer lediglich etwa 23 frames/4.6 s. Die Linienverhältnisse wurden über das Zeitintervall der Injektion zwischen etwa 1 s und 2.5 s gemittelt. Abbildung 81(b) zeigt die Zeitspuren der gleichen Linien und des Verhältnisses für das Limiter-Experiment zusammen mit den Temperaturstufen, Abb. 82 entsprechend für die W II (434.81 nm)-Linie des einfach ionisierten Wolframs.

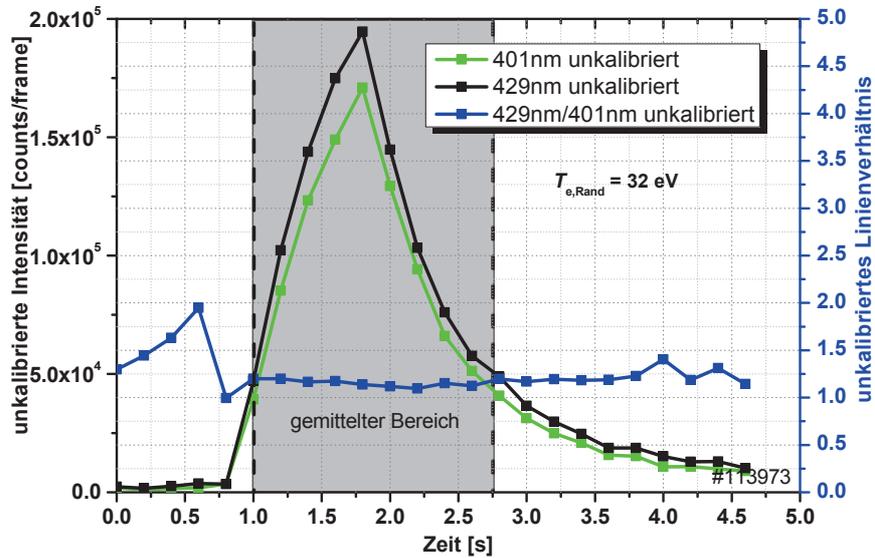
Der Vergleich der auf diese Weise ermittelten, unkalibrierten Linienverhältnisse für das Injektions- und das Zerstäubungsexperiment ist in Abb. 83 dargestellt. Die Verhältnisse wurde gebildet für

- W I (429.46 nm)
- W II (434.81 nm)
- W I (488.68 nm)
- W I (498.26 nm)
- W I (505.33 nm)
- W I (522.47 nm)

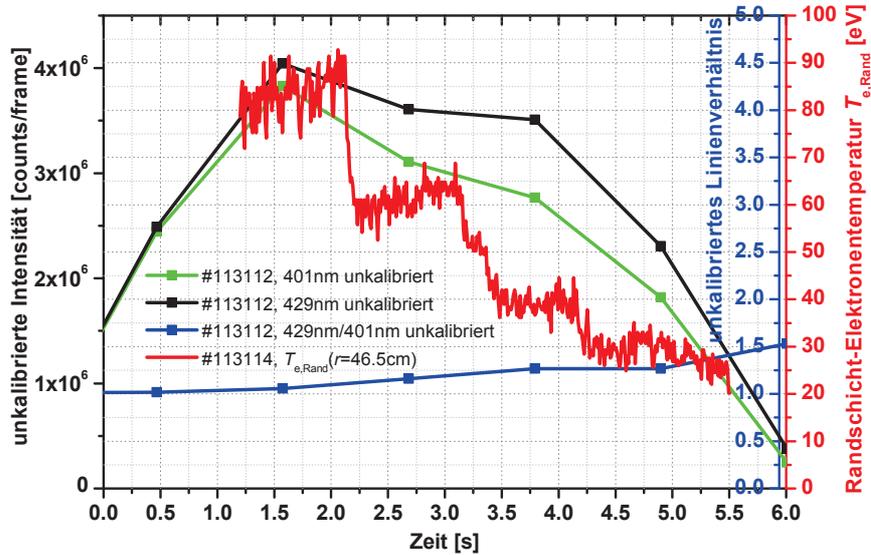
jeweils relativ zu W I (400.88 nm). Die Fehler der Temperaturmessungen sind überall dieselben wie für das Verhältnis „429nm/401nm“ angegeben.

Wie zu sehen ist, sind die Verhältnisse für W I (429.46 nm), W I (498.26 nm) und W I (505.33 nm) innerhalb der Streuung im Mittel identisch für beide Freisetzungsprozesse. Dies bedeutet, dass die Niveaupopulation dieser Linien unabhängig vom Freisetzungsprozess ist und nur von den Plasmaparametern bestimmt wird.

Relativ zueinander ist für die Verhältnisse des Zerstäubungsexperiments bis auf die W I (505.33 nm)-Linie eine Abnahme mit steigender Temperatur zu beobachten. Für die Linien W I (488.68 nm) und W I (522.47 nm) zeigt sich auch absolut im Vergleich mit den Injektions-Verhältnissen ein deutlicher Unterschied. Für das Injektionsexperiment verlaufen beide Verhältnisse absolut höher. Beide Linien werden aus Niveaus angeregt



(a)



(b)

Abbildung 81: Beispiel nicht-absolutkalibrierter Zeitspuren des Echelle-Spektrometers für die Linien W I (400.88 nm)- und W I (429.46 nm) sowie deren Verhältnis. (a) WF₆-Injektion (#113973). Der grau hinterlegte Bereich stellt das Zeitintervall dar, über welches das Verhältnis zur Darstellung in Abb. 83 gemittelt wurde. (b) Die vier Phasen des Limiterexperiments (#113112) incl. der Temperaturentwicklung bei $r_{Apex} = 46.5$ cm.

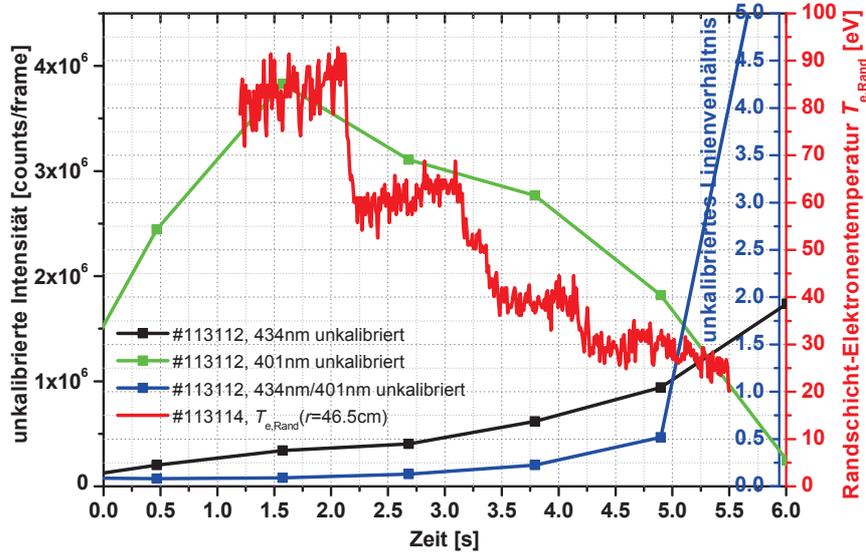


Abbildung 82: Nicht-absolutkalibrierter Zeitspuren des Echelle-Spektrometers für die Linien W I (400.88 nm)- und W I (434.81 nm) sowie deren Verhältnis für die vier Phasen des Limiterexperiments (#113112) incl. der Temperaturentwicklung bei $r_{\text{Apex}} = 46.5$ cm.

λ [Å]	Wellenzahl [cm ⁻¹]		Übergang		A_{ji} [s ⁻¹]	B [%]
	unteres Niveau	oberes Niveau	unterer	oberer		
4008.75	2951.29	27889.68	b_7S3	d_7P4	1.6e+7	99
4294.61	2951.29	26229.77	b_7S3	d_7P2	1.2e+7	94
4886.90	6219.33	26676.48	a_5D4	c_7F5	8.1e+5	100
4982.59	0.00	20064.30	a_5D0	c_7F1	4.2e+5	79
5053.28	1670.29	21453.90	a_5D1	c_7D1	1.9e+6	52
5224.66	4830.00	23964.67	a_5D	c_7D	1.2e+6	

Tabelle 10: Übersicht der Eigenschaften der ausgewerteten Linien mit a:=5d⁴(⁵D)6s², b:=5d5(⁶S)6s, c:=5d⁴(⁵D)6s6p, d:= 5d5(⁶S)6p [6, 58].

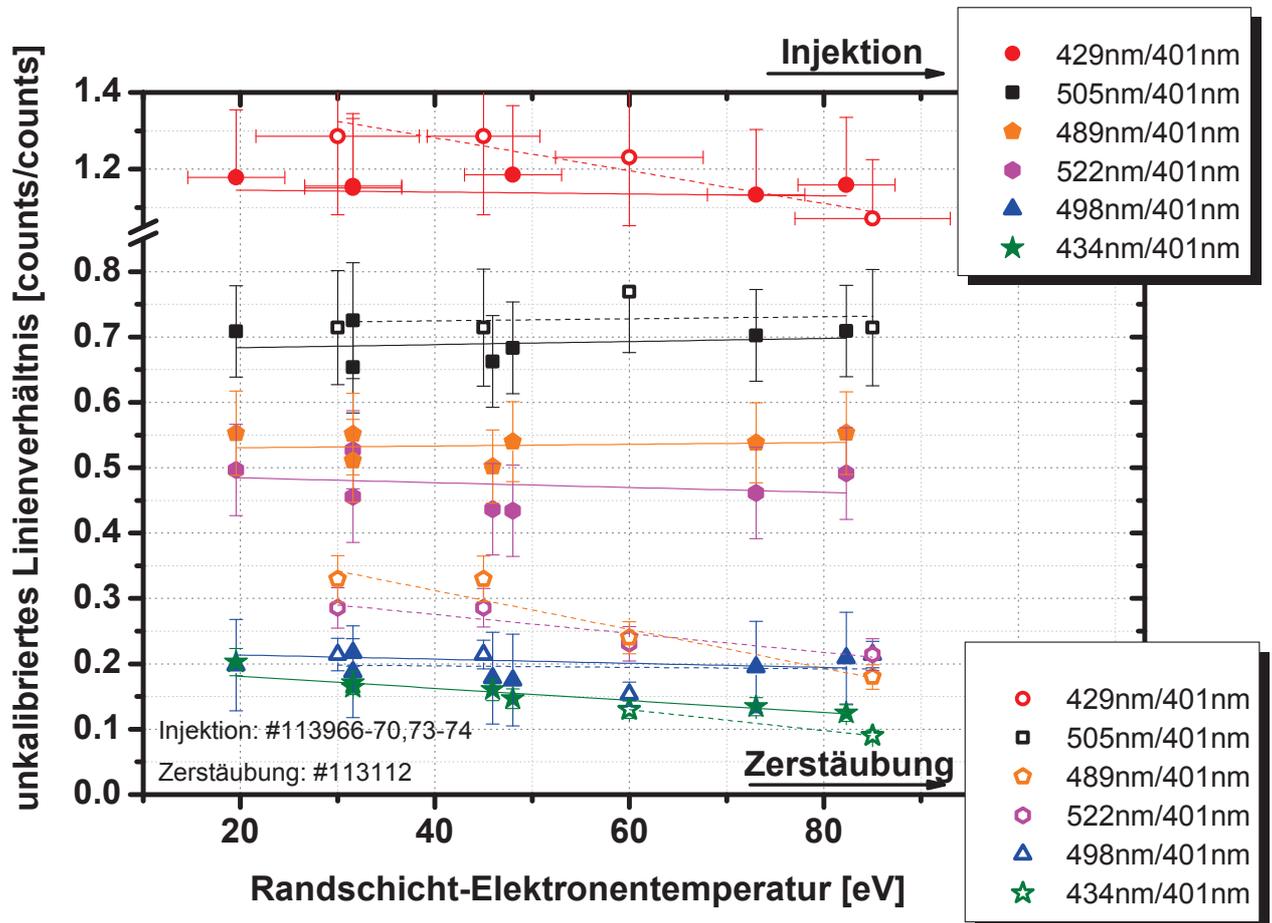


Abbildung 83: Gemittelte Linienverhältnisse der unkalibrierten Zeitspuren des WF_6 -Injektionsexperiments (#113966–70 und 73–74) im Vergleich mit dem Zerstäubungsexperiment (#113112) aufgetragen gegen die Randschicht-Elektronentemperatur am Emissionsmaximum zusammen mit Anpassungsgeraden. Die Verhältnisse für W_I (429.46 nm), W_I (498.26 nm) und W_I (505.33 nm) sind innerhalb der Streuung im Mittel identisch für beide Freisetzungsprozesse. Für die Linien W_I (488.68 nm) und W_I (522.47 nm) zeigt sich auch absolut im Vergleich mit den Injektions-Verhältnissen ein deutlicher Unterschied. Für die W_{II} (434.81 nm)-Linie zeigt sich für beide Experimente eine Abnahme des Verhältnisses mit steigender Temperatur. Ebenso liegen für diese Linie die Zerstäubungsverhältnisse absolut etwas tiefer als die Injektionsverhältnisse.

(5D_4 bzw. 5D_3 , siehe Grotrian-Diagramm in Abb. 33), die im Vergleich mit den anderen Ausgangsniveaus energetisch am höchsten liegen. Offensichtlich werden diese im Verlaufe der Dissoziation stärker besetzt als dies bei der Anregung von zerstäubten W-Atomen der Fall ist. Auch ist mit zunehmender Temperatur eine Abnahme dieser Verhältnisse für die Zerstäubung zu beobachten, während die Verhältnisse der Injektion innerhalb des Fehlers für alle Linien außer der W II (434.81 nm)-Linie konstant bleiben. Eine Erklärung könnte wiederum eine gleichmäßigere Besetzung aller Niveaus durch den Dissoziationsprozess sein, während im Falle der Zerstäubung die Besetzung des die W I (400.88 nm)-Linie emittierenden Niveaus mit höheren Temperaturen zunimmt. Es zeigt sich, dass also auch die Linienverhältnisse im Allgemeinen nicht unbeeinflusst vom Dissoziationsprozess sind.

Auch die W II (434.81 nm)-Linie zeigt sogar in beiden Fällen eine Abnahme des Verhältnisses mit zunehmender Temperatur. Aufgrund der Überlagerung der Linie mit einer benachbarten O II (434.74 nm)-Linie (siehe auch Abb. 80), die im Zerstäubungsexperiment vom aus dem Limiter austretenden O stammt und mit den Phasen und damit steigender Dichte zunimmt ([67]) und die Phasen III und IV möglicherweise verfälscht, wurden hier nur die Phasen I und II bei 85 eV und 60 eV zur Auswertung benutzt. Im Fall dieser Linie nimmt möglicherweise auch die prompte Redeposition der W-Ionen auf dem Limiter Einfluss auf das Verhältnis. Die Beeinflussung der Besetzung des oberen Niveaus im Injektionsfall durch den Dissoziationsprozess hingegen sollte mit dem Erreichen immer höherer Ionisationsstufen abnehmen. W-Teilchen, die sich nach der Ionisation unter TEXTOR-Bedingungen durch eine Gyrationbewegung mit dem Larmorradius $r_L = 1.8 \text{ mm}$ zurück auf die Oberfläche bewegen und dort vor dem nächsten Ionisationsschritt wieder abgelagert werden (Abb. 8), strahlen entsprechend weniger Photonen ab, das Verhältnis zu einer W I-Linie muss also kleiner sein als für den Fall, dass alle Photonen emittiert werden können. Unter der Voraussetzung, dass bei der WF₆-Injektion ein nur kleiner Teil der W⁺-Ionen auf der Düse redeponiert wird und das Verhältnis damit in erster Näherung unbeeinflusst vorliegt, hätte dies für den Limiter aufgrund des Unterschieds im Verhältnis von mindestens 25% eine Redeposition von ebenfalls mindestens 25% der W⁺-Ionen zur Folge. Werden die O II- und die W II-Linie angefittet (Abb. 86) und die W II-Linie so um den Anteil der O II-Linie korrigiert [11], findet sich ein Unterschied der Verhältnisse von 50%. Abbildung 84 zeigt noch einmal die PSICO-Simulation der W I (400.88 nm)-Linie zusammen mit der Entwicklung von Molekül-, Neutralteilchen- und Ionendichte in Abhängigkeit des Düsenabstandes und die Gyrationbewegung eines W¹⁺-Ions, das sich nach der Dissoziation mit einer Geschwindigkeit von 250 m/s bzw. 825 m/s bewegt. Hier wird beim Vergleich des Verlaufs der Ionendichte mit der Strecke, die die Ionen aufgrund ihrer Gyration wieder Richtung Düse zurücklegen können, deutlich, dass ein Anteil der Ionen von 10–40% wieder deponiert werden kann. Die Redeposition muss also auch im Injektionsfall berücksichtigt werden, wofür auch die Beschichtung der Düse im Verlauf des Experiments spricht (siehe Abb. 52(b)). Somit liegt das Verhältnis $R_{\text{Injektion}} = \frac{I_{434.81 \text{ nm}}}{I_{400.88 \text{ nm}}}$ tatsächlich wahrscheinlich höher als gemessen. Dies insbesondere bei höheren Tempera-

^{||} $r_L = \frac{m_W v_W}{q B_t}$; Ladung $q = 1.6 \times 10^{19} \text{ C}$, toroidale Magnetfeldstärke $B_t = 2.25 \text{ T}$, W-Geschwindigkeit $v_W = 2122 \text{ m/s}$

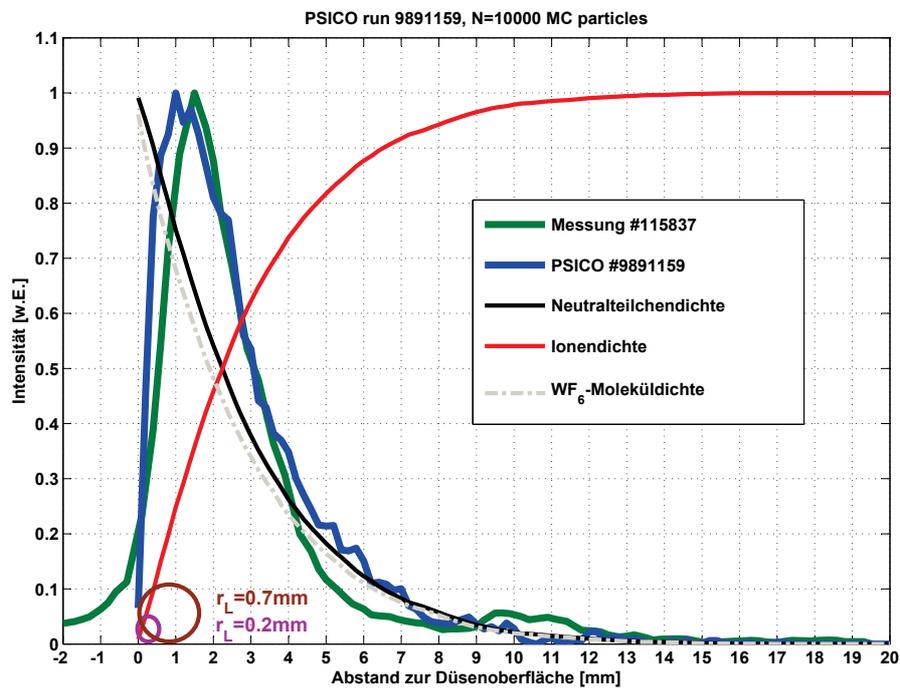


Abbildung 84: PSICO-Simulation der W I (400.88 nm)-Linie zusammen mit der Entwicklung von Molekül-, Neutralteilchen- und Ionendichte in Abhängigkeit des Düsenabstandes und Gyrationbewegung eines W¹⁺-Ions, das sich nach der Dissoziation mit einer Geschwindigkeit von 250 m/s (pinke Bahn) bzw. 825 m/s (braune Bahn) bewegt.

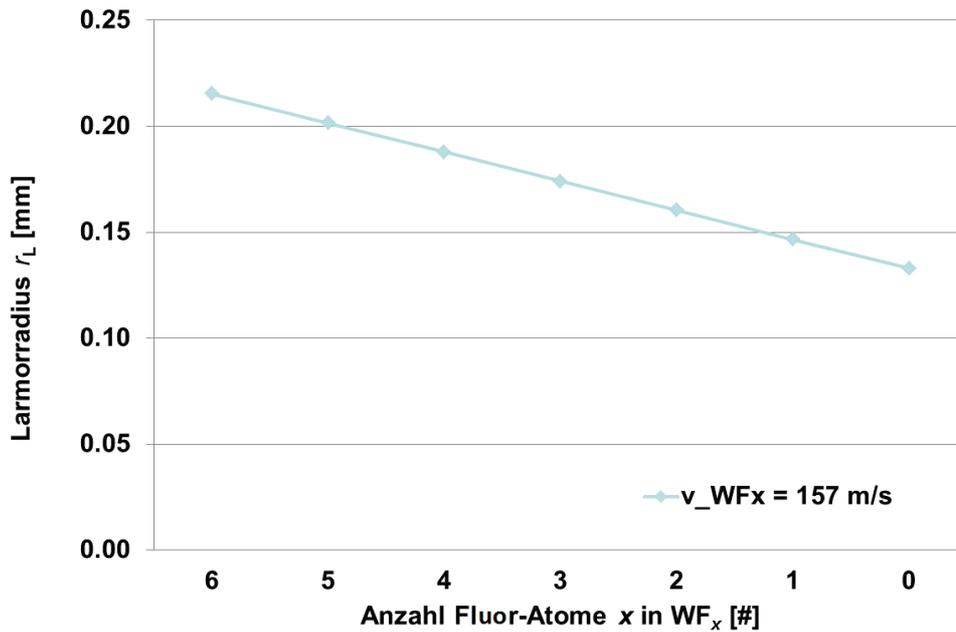


Abbildung 85: Larmorradien für WF_x^{1+} bei gleichbleibender Molekülgeschwindigkeiten $v_{WF_x}(T_{Raum}) = 157 \text{ m/s}$ als untere Grenze.

turen, da hier die Ionisation schneller stattfindet und die Teilchen sich so noch nicht weit vom Limiter wegbewegt haben und damit die Wahrscheinlichkeit der Redeposition noch höher ist.

Tatsächlich ist für die WF_6 -Injektion eine Abnahme des Verhältnisses dieser W II-Linie mit zunehmender Temperatur um 40% zu beobachten. Dies äußert sich auch in der Anwendung der Photoeffizienzen für diese Linie zur Erosionsmessung in Abweichungen im Vergleich mit der W I (400.88 nm)-Linie (Kap. 10). Letztlich hat die Unterschätzung des Injektions-Verhältnisses als Referenzwert zur Folge, dass eine Redeposition auf dem Limiter von 50% eine untere Grenze darstellt [11].

Daneben besteht auch für die WF_6 -Moleküle vor der Dissoziation die Möglichkeit, redeponiert zu werden, falls sie einen Ionisationsvorgang erfahren. Aufgrund der geringen Geschwindigkeit der WF_6 -Moleküle bei Raumtemperatur beträgt der Abstand zur Düse, innerhalb dessen die Molekül-Ionisation stattfinden müsste, maximal etwa $d_{Gyro} = 2r_L = 2 \cdot 0.22 \text{ mm} = 0.54 \text{ mm}$. Abbildung 85 zeigt für gleichbleibende Molekülgeschwindigkeiten als untere Grenze die möglichen Radien nach einer oder mehreren Dissoziationen für WF_x^{1+} .

Die Verfälschung der Intensitäten der Linien durch Re-Erosion des abgelagerten Wolframs ist weniger kritisch zu beurteilen. Betrachtet man in Abb. 109(b) die Lichtintensität der WF_6 -Emission im Verhältnis zur Intensität, die bei Zerstäubung der W-Schicht auf der Düse (Kap. 7.2) gemessen werden kann, so liegt diese für die Profile im Prozentbereich, sodass die Signale der Injektion durch die Zerstäubung kaum beeinflusst werden.

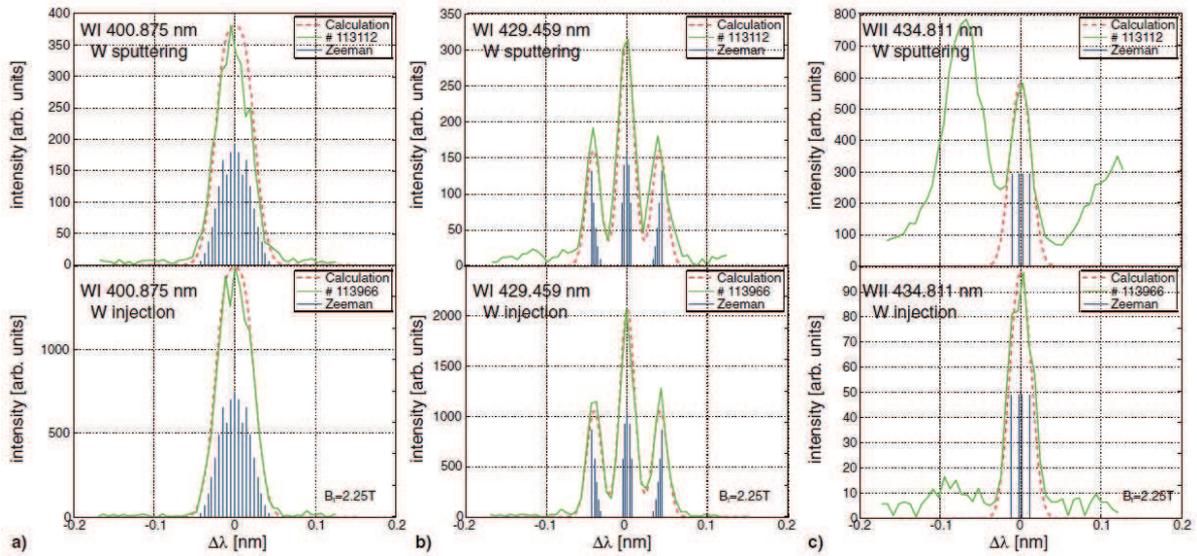


Abbildung 86: Gemessene und angefitzte W I- und W II-Linien im sichtbaren Bereich, aufgenommen während der WF_6 -Injektionsexperimente (oben) und während der W-Zerstäubungsexperimente (unten): a) W I (400.88 nm), b) W I (429.46 nm) und c) W II (434.81 nm). [11, 36]

Zur Bestimmung der Linienvverhältnisse wurden Übergänge ausgehend von energetisch sehr unterschiedlichen Niveaus gewählt, da Linien, die aus eng benachbarten Niveaus stammen, auch ähnliche Linienvverhältnisse zur Folge hätten, wie am Beispiel der Linien W I (400.88 nm) und W I (429.46 nm) bzw. W I (488.68 nm) und W I (522.47 nm) gut zu sehen ist.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass sich die Linien W I (429.46 nm), W I (498.26 nm) und W I (505.33 nm) im Verhältnis zur W I (400.88 nm)-Linie für beide Freisetzungprozesse gleich verhalten. Für W I (488.68 nm) und W I (522.47 nm) zeigen sich deutliche Unterschiede. Für die W II (434.81 nm)-Linie muss eine zusätzliche Beeinflussung durch den Redepositionsprozess in Betracht gezogen werden.

10 Anwendung der WF₆-Injektion: Bestimmung von Photoeffizienzen

Als abschließende Anwendung der WF₆-Injektion wird in diesem Kapitel die experimentelle Bestimmung der Photoeffizienzen E_{Ph} an TEXTOR beschrieben (Abschn. 10.1). Hierbei soll $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ die Photoeffizienzen des aus einer WF₆-Dissoziation entstandenen W bezeichnen und $E_{\text{Ph}}^{\text{Zerst}}$ die Photoeffizienzen für aus einem Zerstäubungsprozess resultierendes W. Es wird diskutiert, ob die Gleichsetzung $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = E_{\text{Ph}}^{\text{Zerst}}$ zulässig ist, beide Größen also identisch sind. Somit dürfte $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ bei W-Zerstäubungsexperimenten als Konversionsfaktor zur Ermittlung von W-Flüssen aus dem Photonenfluss einer bestimmten Linien gemäß $\Gamma_{\text{W}} = E_{\text{Ph}} \phi_{\text{Ph}}$ benutzt werden (Abschn. 10.3).

Folgende Bedingungen an das Plasma und den experimentellen Aufbau müssen erfüllt sein:

1. Alle in das Plasma einlaufenden Neutralteilchen werden ionisiert und rekombinieren nicht (es muss also ein ionisierendes Plasma vorliegen).
2. Alle bis zum Erreichen der nächsten Ionisationsstufe emittierten Photonen werden detektiert.

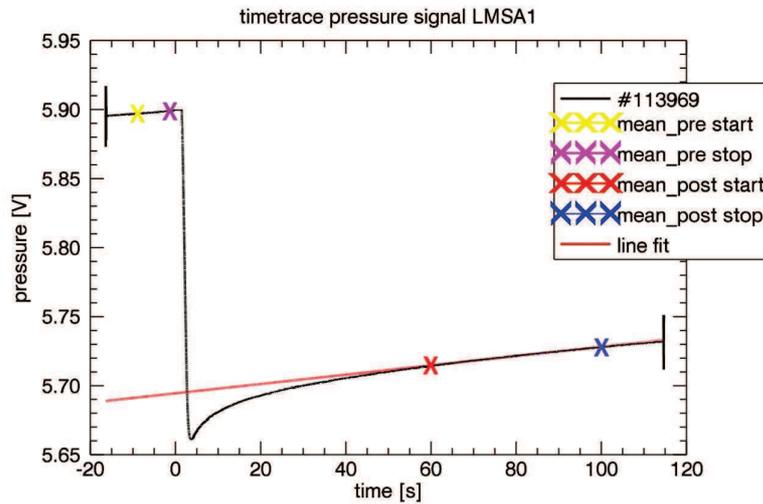
Weiter ist die Annahme $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = E_{\text{Ph}}^{\text{Zerst}}$ nur dann erfüllt, falls

1. alle WF₆-Moleküle im Plasma ohne Verluste zu W dissoziieren (somit gilt $N_{\text{WF}_6} = N_{\text{W}}$) und danach die Ionisation der neutralen W-Atome den einzigen Verlustkanal darstellt,
2. die aus der WF₆-Dissoziation stammenden W-Atome mit gleicher Niveaubesetzung vorliegen wie nach einem Zerstäubungsvorgang und damit auch in gleichen Zeiten die gleiche Anzahl an Photonen emittieren, sodass gilt $N_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = N_{\text{Ph}}^{\text{Zerst}}$.

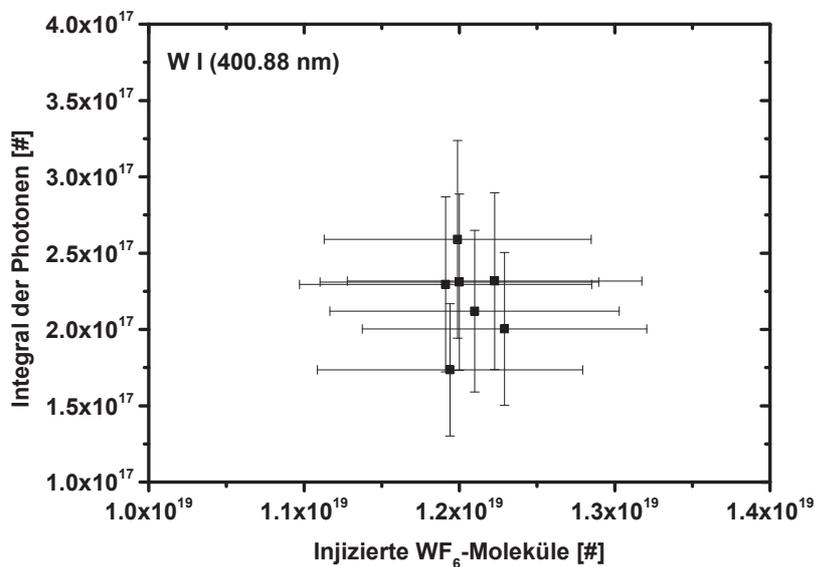
Durch diese Bedingungen ergeben sich bei Betrachtung der Linienverhältnisse im vorigen Kapitel bereits Einschränkungen (Diskussion Abschn. 10.1). Zur Ermittlung der Photoeffizienzen muss der Neutralteilchenfluss bzw. die Gesamtmenge der im Plasma befindlichen neutralen W-Atome bekannt sein. Diese wird für die WF₆-Injektion unter der Annahme von $N_{\text{WF}_6} = N_{\text{W}}$ durch die Messung des Druckabfalls Δp im Gas-Reservoir nach der idealen Gasgleichung

$$N_{\text{W}} = \frac{\Delta p V_{\text{Reservoir}}}{k_{\text{B}} T} \quad (99)$$

bestimmt. Hierbei ist $V_{\text{Reservoir}} = 2.1 \text{ l} = 0.0021 \text{ m}^3$ das Volumen des Gas-Reservoirs, $k_{\text{B}} = 1.38 \times 10^{23} \text{ J/K}$ die BOLTZMANN-Konstante und $T = T_{\text{Raum}} = 293 \text{ K}$ die Temperatur im Reservoir, welche der Raumtemperatur entspricht. Der WF₆-Einlass wurde 1 s nach Plasmastart für 1 s geöffnet. Ein Beispiel für die Messung des Druckabfalls (TEXTOR-Signal LMSA1) ist in Abb. 87(a) dargestellt. Der Druckabfall wird in Volt gemessen, was



(a)



(b)

Abbildung 87: (a) Beispiel für die Messung des Druckabfalls aus dem TEXTOR-Signal LMSA1. Der Druckabfall wird in Volt gemessen, die vom Betrag her direkt der Einheit mbar entsprechen. (b) Für die Plasmaentladungen #113966–70, 73–74 ist die gemessene Menge an Photonen (für W I (400.88 nm)) gegen die aus dem Druckabfall bestimmte Menge injizierter WF_6 -Moleküle aufgetragen.

vom Betrag her direkt der Einheit mbar entspricht. Zur Bestimmung des Start- und Enddrucks wurde jeweils über mindestens 9000 Zeitpunkte gemittelt, weshalb der statistische Fehler im Promille-Bereich hier vernachlässigbar ist. Zur Korrektur des adiabatischen Unterschingers am Ende des Druckabfalls wurde eine Gerade an den linearen rechten Teil angepasst und der Druckwert am Schnittpunkt mit der abfallenden Flanke bestimmt. Der Anstieg der Gerade kommt durch ein langsames Nachfüllen des Gasreservoirs als systematischer Fehler zustande.

Weiterhin ist zur Anwendung dieser Methode ein ionisierendes Plasma Voraussetzung, da nur dann sichergestellt ist, dass nach der Ionisation keine Rekombination stattfindet und somit die Anzahl Photonen emittierender Neutralteilchen genau bekannt ist. Auch kann nur unter dieser Voraussetzung davon ausgegangen werden, dass früher oder später alle Neutralteilchen zu Ionen werden und somit die Beziehung

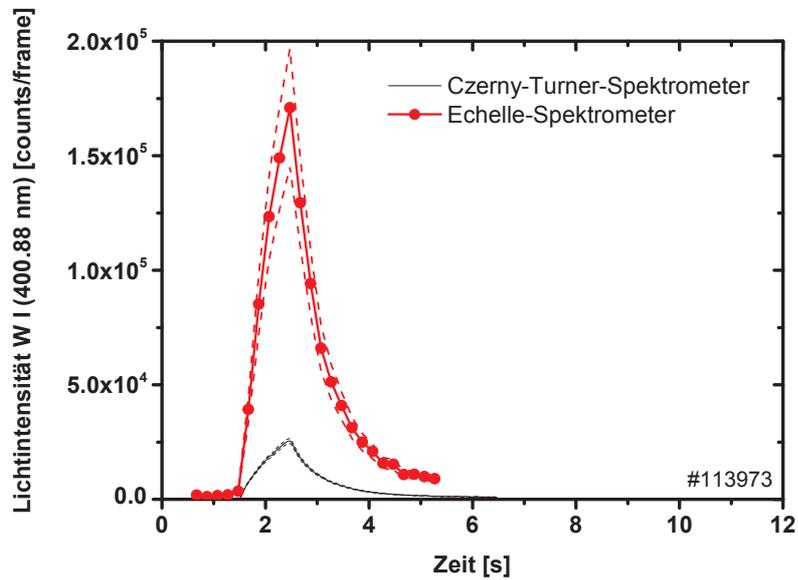
$$E_{\text{Ph}} = \frac{\Gamma_{\text{W}}}{\phi_{\text{Ph}}} = \frac{\int_A \int_{t_1=0}^{t_2=r(I=0)} \Gamma_{\text{W}} dt dA}{\int_A \int_{t_1=0}^{t_2=r(I=0)} \phi_{\text{W}} dt dA} = \frac{\text{Neutralteilchen gesamt}}{\text{Photonen gesamt}} = \frac{\text{Ionen gesamt}}{\text{Photonen gesamt}} \quad (100)$$

erfüllt ist, mit der dann die Bestimmung des Flussverhältnisses auf die Bestimmung des Verhältnisses der Gesamtanzahl von Neutralteilchen zur Gesamtanzahl von Photonen zurückgeführt ist. Mit $t_2 = r(I = 0)$ ist die Zeit bezeichnet, bei der die Lichtintensität wieder auf 0 abgefallen ist und damit ab nun alle Atome ionisiert vorliegen. A bezeichnet den Beobachtungsquerschnitt, auf dem sich das Beobachtungsvolumen aufbaut. Durch prompte Redeposition der ionisierten Teilchen auf der Oberfläche der Injektionsdüse in Folge einer Gyrationbewegung im Magnetfeld besteht die Gefahr eines zusätzlichen Verlustkanals, der allerdings erst Auswirkung auf die W II Linien zeigen kann. Darüber hinaus ist auch eine Redeposition ionisierter WF_6 -Moleküle vor der Dissoziation denkbar (siehe Diskussion Abschn. 9).

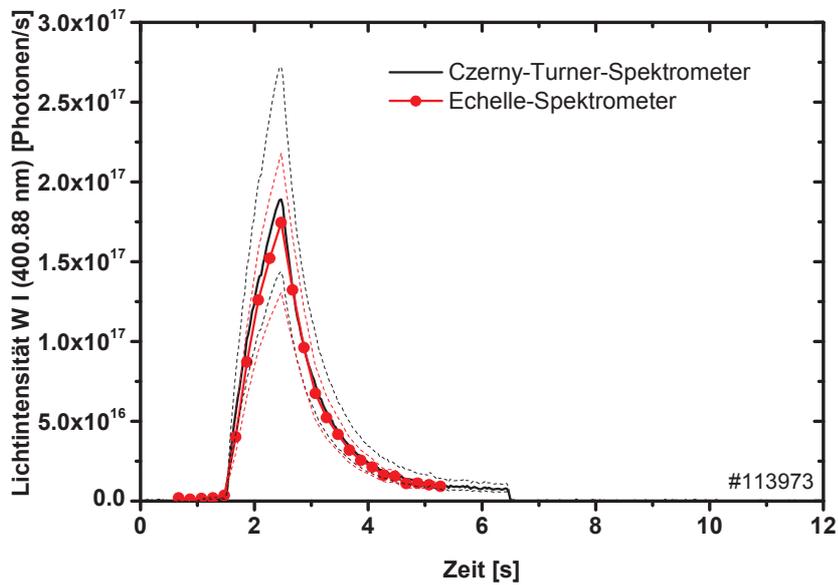
Wichtig für den experimentellen Aufbau ist weiter, zu gewährleisten, dass die Neutralteilchen das Beobachtungsvolumen nicht vor der Ionisation verlassen und damit ebenfalls obige Gleichung ungültig wird. In diesem Fall wird eine zu kleine Anzahl an Photonen und nicht das gesamte Integral entlang des Weges bis zur Ionisation gemessen. Die Kameraaufnahmen in Abb. 59 zeigen, dass diese Bedingung erfüllt ist, da die Emission innerhalb des eingezeichneten Volumens nach allen Richtungen vollständig abfällt.

Zur Messung des Integrals aller Photonen wurden das Echelle- und das CZERNY-TURNER-Kompaktspektrometer mit einer Ulbrichtkugel, die im TEXTOR-Gefäß installiert wurde, absolutkalibriert (Kap. 6.4). Abbildung 79 zeigt ein Beispiel eines in Photonen/(frame:Spektrometerkanal) absolutkalibrierten Echelle-Spektrums. Durch Summation der Counts bzw. Photonen über die Linienbreite hinweg können so die in Abb. 88(a) unkalibriert bzw. in 88(b) absolutkalibriert dargestellten zeitlichen Verläufe der Injektion gewonnen werden.

Während mit dem Kompaktspektrometer lange Aufnahmen bei hoher zeitlicher Auflösung (32 ms Integrationszeit) aber geringerer spektraler Auflösung (im Mittel 0.13 nm/Kanal) möglich waren, wurden mit dem Echelle-Spektrometer bei hoher Spektraler Auflösung von



(a)



(b)

Abbildung 88: (a) Unkalibrierte und (b) absolutkalibrierte Zeispur einer WF_6 -Injektion (#113973) sowohl des Echelle- als auch des Kompaktspektrometers mit Fehlergrenzen.

im Mittel 0.008 nm/Kanal maximal 23 Aufnahmen bei einer Integrationszeit von 200 ms aufgenommen.

Die Dauer der Plasmaentladungen lag zwischen 4 s und 7 s (Flat-Top-Phase). Wie in Abb. 89(a) zu sehen ist, kann das Echelle-Spektrometer durch die begrenzte Anzahl an Aufnahmen bedingt nicht die gesamte Photonenemission erfassen, während das Kompakt-Spektrometer alle Intensität bis zum Ende der Entladung registriert, die hier aber immer noch nicht vollständig abgeklungen ist, da ein kleiner Gasanteil aus der Düsenöffnung nachströmt und so den Ausläufer des Signals verursacht. Dadurch ergibt sich eine systematische Unterschätzung der Photonen bei der Auswertung. Aus dem Integralverhältnis der Zeitspuren beider Spektrometer in Abb. 89(a) ergibt sich, dass die vom Echelle-Spektrometer insgesamt registrierte Intensität um 1-3% nach oben korrigiert werden muss. Eine ähnliche Korrektur ergibt sich aus dem Abbruch der Emission durch das Ende der Entladung. In Abb. 89(b) kann für eine besonders lange Entladung von 8.5 s durch einen exponentiellen Fit an die abfallende Flanke die Unterschätzung an Photonen auf etwa 6% abgeschätzt werden. Im Ganzen muss so für die Echelle-Messungen eine systematische Unterschätzung von etwa 10% berücksichtigt werden.

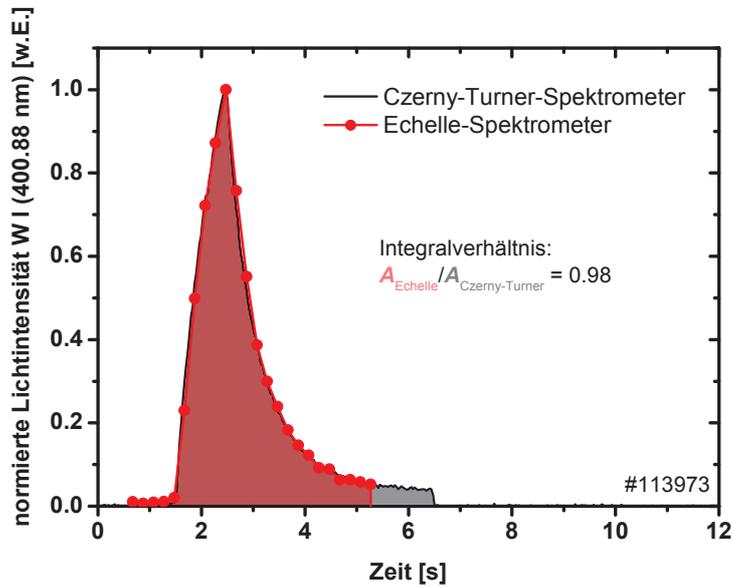
Schließlich kann die Menge an emittierten Photonen für eine bestimmte Linie aus dem Integral unter der absolutkalibrierten Zeitspur (wie beispielsweise in Abb. 88(b)) gemessen werden. Für die Plasmaentladungen #113966-70, 73-74 ist die gemessene Menge an Photonen (für W I (400.88 nm)) in Abb. 87(b) gegen die aus dem Druckabfall bestimmte Menge injizierter WF_6 -Moleküle aufgetragen. Als Verhältnis daraus ergibt sich unter der Voraussetzung, dass genauso viele W-Atome im Plasma leuchten wie WF_6 -Moleküle injiziert worden sind, gemäß Gl. (100) die Photoeffizienz $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = \frac{\text{WF}_6\text{-Moleküle gesamt}}{\text{Photonen gesamt}}$.

10.1 Photoeffizienzen für W I- und W II-Linien

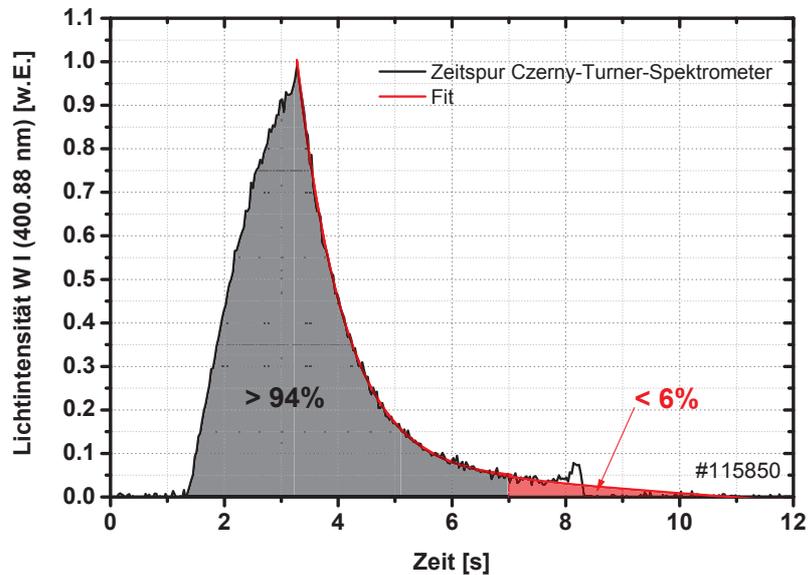
Für folgende Linien wurden die Photoeffizienzen mittels der WF_6 -Methode mit dem Echelle-Spektrometer bestimmt:

- W I (400.88 nm) (Abb. 90(a))
- W I (429.46 nm) (Abb. 93(a))
- W II (434.81 nm) (Abb. 93(b))
- W I (488.68 nm) (Abb. 94(a))
- W I (522.47 nm) (Abb. 94(b)).

Die Abbildungen 90(a) und 93(a) bis 94(b) zeigen die in den Entladungen #113966-70, 73-74, die durch Variation der Neutralgasmenge und damit von n_e (n_e -Scan) und der dadurch induzierten Änderung von T_e ermittelt wurden. Die relativen Fehler setzen sich im Wesentlichen aus dem Fehler der Absolutkalibration für die jeweilige Linie, der etwa 25-35% der Photonenanzahl betragen kann, und zu einem kleineren Teil dem Fehler aus der Bestimmung der W-Menge mit im Mittel 8% zusammen. Nach unten können die



(a)



(b)

Abbildung 89: Aus dem Integralverhältnis der Zeitspuren beider Spektrometer in (a) ergibt sich, dass die vom Echelle-Spektrometer insgesamt registrierte Intensität um 1–3% nach oben korrigiert werden muss. (b) Eine weitere ähnliche Korrektur ergibt sich aus dem Abbruch der Emission durch das Ende der Entladung. Für eine besonders lange Entladung #115850 von 8.5 s kann durch einen exponentiellen Fit an die abfallende Flanke der Verlust an Photonen auf etwa 6% abgeschätzt werden.

Werte absolut durch den Verlust von Photonen durch das Ende der Entladung um etwa 6% abweichen.

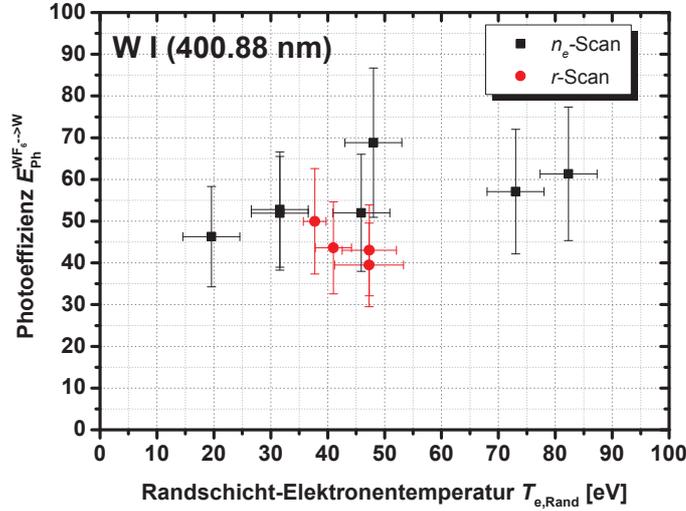
W I (400.88 nm) Abbildung 90(a) zeigt die in den Entladungen #115931, 34, 36–37 während des r -Scans (siehe zugehörige Kamera-Bilder in Abb. 59) gemessenen Photoeffizienzen für W I (400.88 nm) zusammen mit den Werten für die Entladungen #113966–70, 73–74. Die Messwerte zeigen einen konstanten Verlauf mit einem mittleren Wert für den n_e -Scan bei $\langle E_{\text{Ph}}^{n_e\text{-Scan}} \rangle = 54 \pm 14$ und für den r -Scan bei $\langle E_{\text{Ph}}^{r\text{-Scan}} \rangle = 43 \pm 11$. Beide Messungen zusammen ergeben eine mittlere Photoeffizienz von $\langle E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} \rangle (T_e = 20\text{--}82 \text{ eV}) = 49 \pm 16 = \text{const.}$

Die roten Punkte liegen absolut etwas tiefer als die schwarzen, beide Kurven liegen aber innerhalb ihrer Fehlergrenzen. In Abb. 91(a) sind die Werten noch einmal gegen die gemessenen Dichten aufgetragen. Dichte und Temperatur verhalten sich in beiden Experimenten gegensätzlich, wie Abb. 91(b) zeigt, worin die Photoeffizienzen zusätzlich durch die roten und schwarzen Zahlenwerte an den Punkten angegeben sind. Tendenziell könnte für die gemessenen Photoeffizienzen auch eine Dichteabhängigkeit vorliegen, was auch zur Beobachtung der Entwicklung der Emissionsprofile mit der Dichte im Limiter-Experiment passen würde. Innerhalb der Messunsicherheit kann dies aber nicht belegt werden.

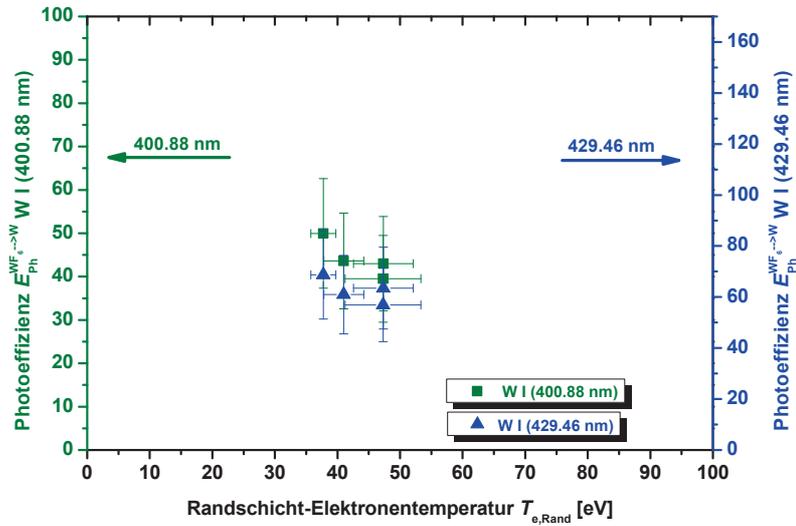
Abbildung 92(a) bzw. 92(b) zeigt $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ aufgetragen gegen die Energiedichte $w_{\text{Rand}} = n_{e,\text{Rand}} \cdot T_{e,\text{Rand}}$ des Plasmas am Ort der Injektion bzw. gegen die Ionisationsraten I , die aus den gemessenen Dichtewerten und S_{LOTZ} berechnet wurden. Sowohl in w_{Rand} als auch in I ist somit der Einfluss von n_e und T_e berücksichtigt. Während die Werte des r -Scans in beiden Fällen einen größeren Bereich abdecken, sind die des n_e -Scans stärker bei einer Energiedichte bzw. Ionisationsrate konzentriert.

W I (429.46 nm) In Abb. 90(b) sind für dieses Experiment zusätzlich die Photoeffizienzen der W I (429.46 nm)-Linie mit $\langle E_{\text{Ph}}^{r\text{-Scan}} \rangle = 62 \pm 16$ im Vergleich gezeigt [41]. Da die Niveaus beider Linien energetisch sehr nahe beieinander liegen (siehe GROTRIAN-Diagramm in Abb. 33), ergeben sich auch ähnliche Photoeffizienzen. Abbildung 93(a) zeigt die entsprechenden Werte für den n_e -Scan. Auch hier bleiben die Werte konstant mit steigender Temperatur.

W II (434.81 nm) Die Werte der W II (434.81 nm)-Linie sind in Abb. 93(b) dargestellt. Diese müssen jedoch aufgrund der Redeposition der W^+ -Ionen (siehe Diskussion in Kap. 9) als mit einer größeren systematischen Unsicherheit behaftet angesehen werden. Es ist zu beobachten, wie $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ mit zunehmender Temperatur steiler verläuft als dies für andere Linien der Fall ist. Dies deutet, wie bereits diskutiert, darauf hin, dass mit zunehmender Temperatur mehr W-Ionen vor Erreichen des nächsten Ionisationszustandes auf der Düsenoberfläche deponiert werden und somit auch weniger Photonen emittiert werden können; damit nimmt $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ zu. Diese großen Unsicherheiten müssen im Zusammenhang mit diesen Werten berücksichtigt werden.

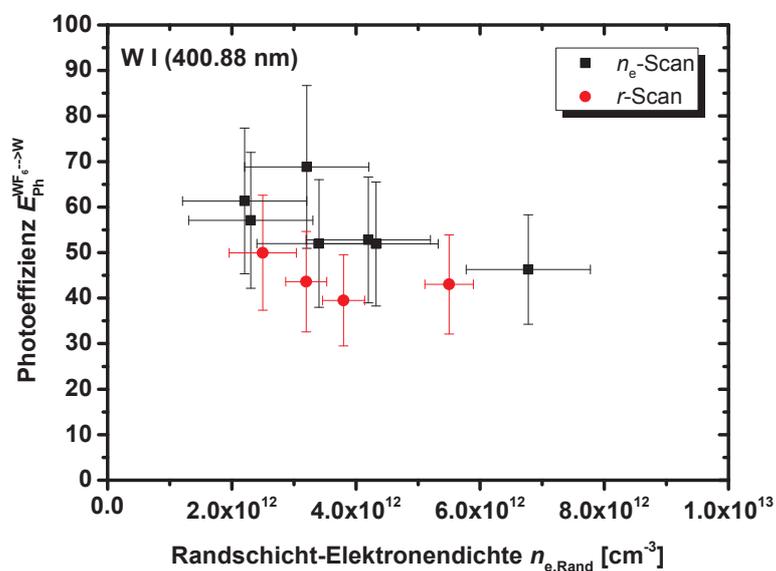


(a)

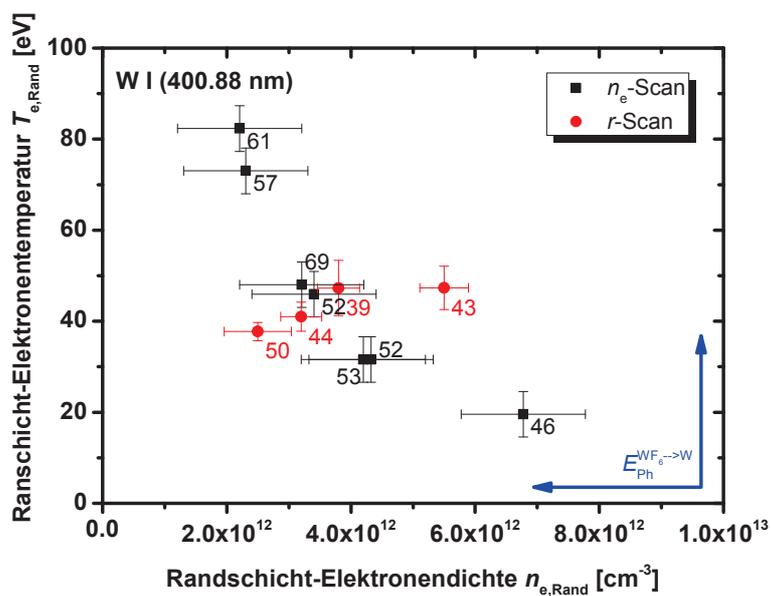


(b)

Abbildung 90: (a) Mittels WF_6 -Injektion bestimmte Photoeffizienzen $E_{Ph}^{WF_6 \rightarrow W}(T_e)$ der W I (400.88 nm)-Linie. Für den n_e -Scan (schwarze Quadrate) wurde die zentrale Dichte über Änderung der Neutralgasmenge variiert, für den r -Scan (rote Punkte) die Position der Düse im Randschichtplasma. (b) $E_{Ph}^{WF_6 \rightarrow W}$ der W I (400.88 nm)- (grüne Quadrate) und W I (429.46 nm)-Linie (blaue Dreiecke) für den r -Scan im Vergleich.

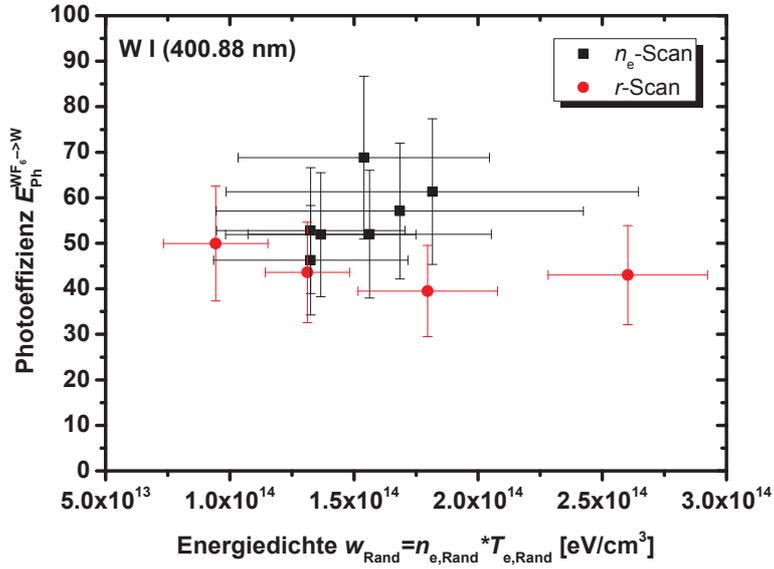


(a)

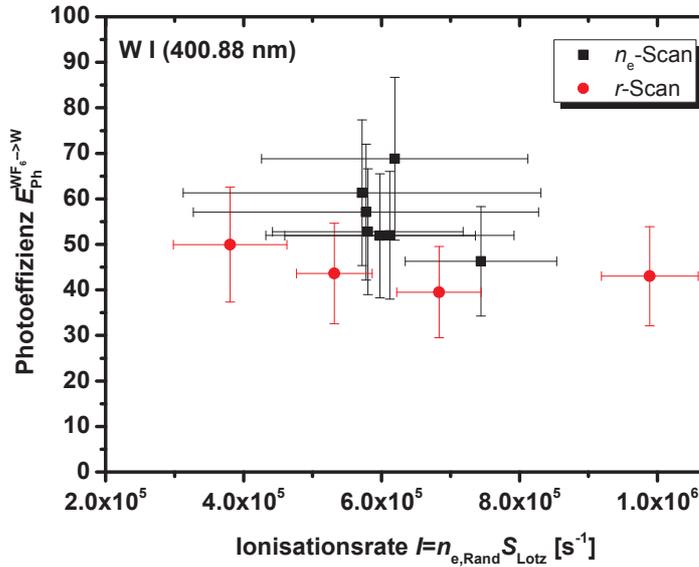


(b)

Abbildung 91: (a) $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ aufgetragen gegen die Randschicht-Elektronendichte. (b) Dichte und Temperatur verhalten sich für beide Experimente gegensätzlich. Die roten und schwarzen Zahlenwerte neben den Messpunkten geben die gemessenen Photoeffizienzen wieder.

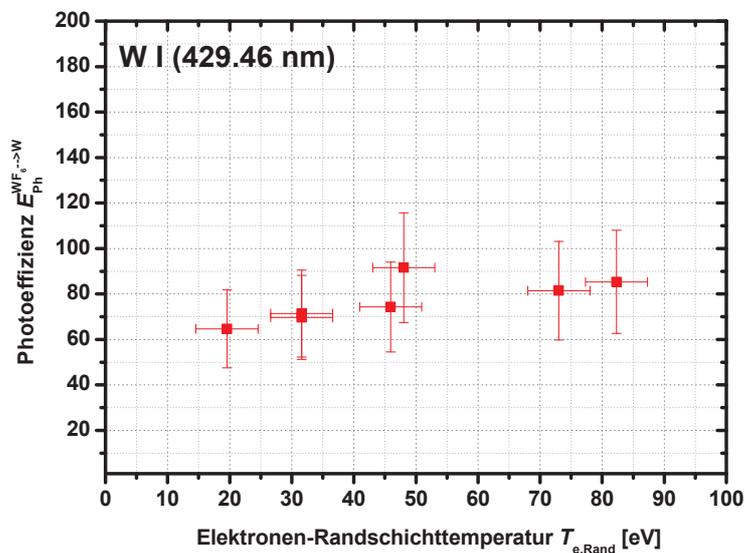


(a)

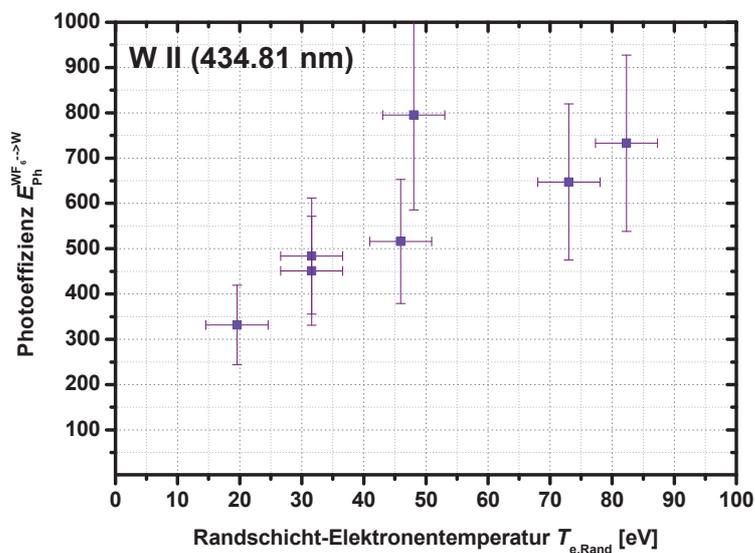


(b)

Abbildung 92: $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}(T_e)$ aufgetragen gegen (a) die Energiedichte $w_{\text{Rand}} = n_{e,\text{Rand}} \cdot T_{e,\text{Rand}}$ des Plasmas am Ort der Injektion (b) die Ionisationsraten berechnet aus den gemessenen Dichtewerten und S_{LOTZ} . Während die Werte des r -Scans in beiden Fällen einen größeren Bereich abdecken, sind die des n_e -Scans stärker bei einer Energiedichte bzw. Ionisationsrate konzentriert.

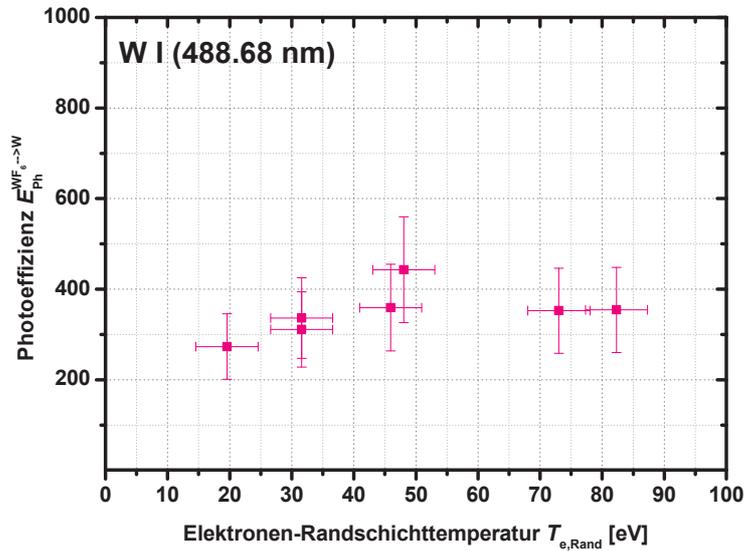


(a)

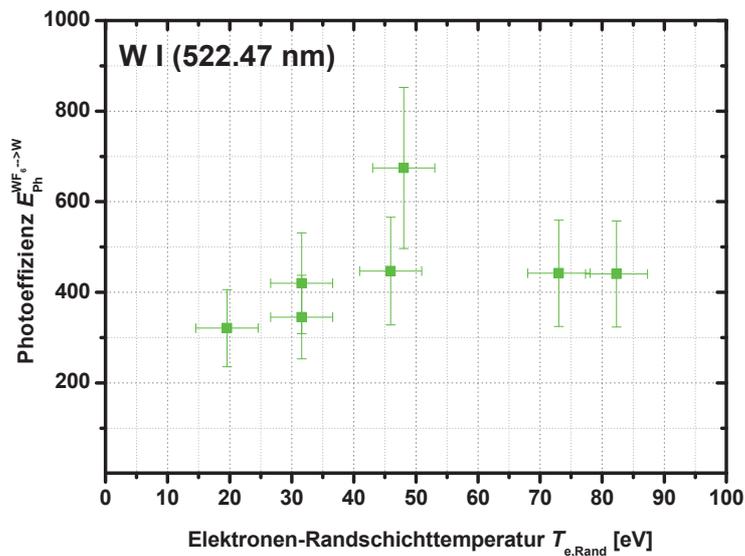


(b)

Abbildung 93: Mittels WF_6 -Injektion bestimmte Photoeffizienzen $E_{Ph}^{WF_6 \to W}(T_e)$ der (a) W I (429.46 nm)-Linie (b) W II (434.81 nm)-Linie. Hier nimmt die Kurve im Vergleich zu den W I-Linien einen steileren Verlauf, was wahrscheinlich auf einen mit der Temperatur zunehmenden Verlust der W^+ -Ionen durch Redeposition auf der Düsenoberfläche zurückzuführen ist.



(a)



(b)

Abbildung 94: Mittels WF_6 -Injektion bestimmte Photoeffizienzen $E_{Ph}^{WF_6 \to W}(T_e)$ der (a) W I (488.68 nm)-Linie (b) W I (522.47 nm)-Linie. Die Konversionsfaktoren beider Linien sind wahrscheinlich durch unterschiedliche Besetzungen der oberen Niveaus während des Dissoziationsvorganges um etwa einen Faktor 2 unterschätzt.

W I (488.68 nm) und W I (522.47 nm) Die Photoeffizienzen der W I (488.68 nm)- und W I (522.47 nm)-Linien sind in den Abb. 94(a) und 94(b) gezeigt. Auch hier bleiben die Werte ab etwa 45 eV konstant mit steigender Temperatur. Für diese beiden Linien muss nach Vergleich der Linienverhältnisse in Kap. 9 jedoch in Betracht gezogen werden, dass für die WF₆-Injektion deren obere Niveaus stärker besetzt sind als im Zerstäubungsfall. Da die beiden oberen Niveaus nahe benachbart liegen, äußert sich dies auch für beide Linien ähnlich. Somit sind diese beiden Linien zur W-Flussbestimmung nicht geeignet bzw. nur unter der Berücksichtigung, dass die Besetzungen der Niveaus im Zerstäubungsfall gemäß Abb. 83 um einen Faktor 2 höher liegen kann und die Konversionsfaktoren somit um einen Faktor 2 unterschätzt wären.

Abschließend kann gesagt werden, dass sich die Linien W I (400.88 nm) und W I (429.46 nm)-Linie am besten zur W-Flussmessung eignen, während bei den anderen untersuchten Linien im Linienverhältnis teils erhebliche Unterschied zwischen Injektions- und Zerstäubungsexperiment zu beobachten sind. Die Photoeffizienzen zeigen sich konstant für die vorliegenden Kombinationen aus Dichte und Temperatur bei $n_e = (2.2 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bis $(6.8 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ und $T_e = 20 \pm 5 \text{ eV}$ bis $82 \pm 5 \text{ eV}$. Inwieweit die Photoeffizienzen auch für andere Dichte-Temperatur-Kombinationen einen konstanten Verlauf nehmen, wäre experimentell zu zeigen. Innerhalb der untersuchten Bedingungen sind die Photoeffizienzen *effektiv* unabhängig von Plasmadichte- und Temperatur und damit auch unabhängig von deren Profilen.

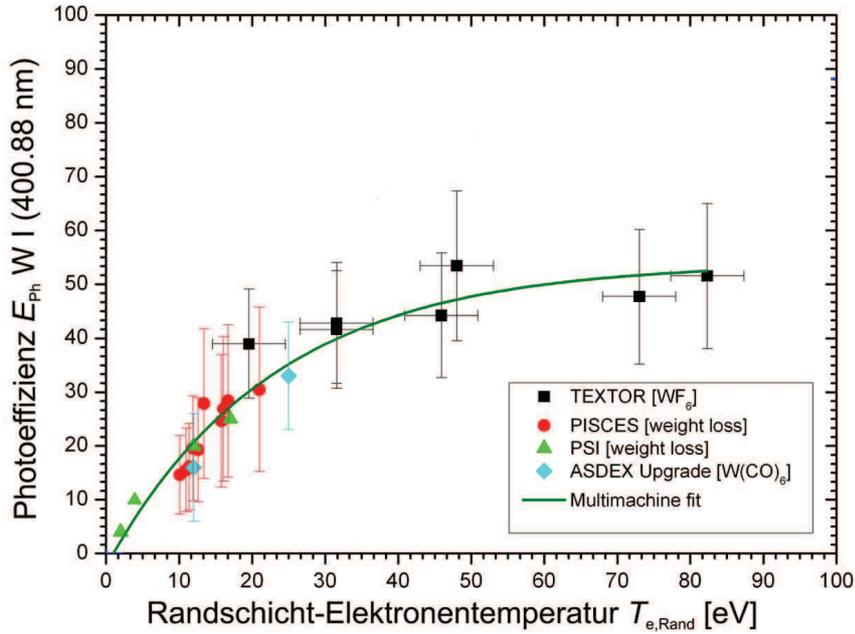


Abbildung 95: Multi-Maschinen-Fit aller bisher experimentell an unterschiedlichen Maschinen bestimmter Photoeffizienzen der W I (400.88 nm)-Linie:

$E_{Ph}(T_e) = 53.7 \times (1 - 1.04 \times \exp(-\frac{T_e}{22.1}))$ [9]. Für steigende Temperaturen nimmt der Fit einen zunehmend konstanten Verlauf. Sowohl die Ergebnisse von Gewichtsverlustmessungen an linearen Maschinen im niedrigeren Temperaturbereich bis etwa 20 eV wie PISCES [56, 57] und PSI-2 [88] sind gezeigt als auch die der $W(CO)_6$ -Sublimationsexperimente an ASDEX [23, 24] und der WF_6 -Injektionen an TEXTOR.

10.2 Vergleich mit unabhängigen Experimenten

Der Grund der häufigen Verwendung der W I (400.88 nm)-Linie liegt in der guten Beobachtbarkeit, da sie sowohl als verhältnismäßig starke Linie und zudem gut isoliert von den Linien anderer Elemente im optisch noch zugänglichen Bereich auftritt, sodass auch keine Beeinflussung durch eine UV-Undurchlässigkeit der Beobachtungssysteme vorliegt. So wird diese Linie sowohl an unterschiedlichen Maschinen zur Bestimmung von Photoeffizienzen herangezogen als auch unter Benutzung dieser Werte zu W-Spektroskopie genutzt.

Abbildung 95 zeigt eine Zusammenstellung aller bisher experimentell bestimmten Photoeffizienzen der W I (400.88 nm)-Linie in Abhängigkeit der Randschichttemperatur. Hierbei sind sowohl die Ergebnisse von Gewichtsverlustmessungen an linearen Maschinen im nied-

rigeren Temperaturbereich bis etwa 20 eV wie PISCES [56, 57] und PSI-1 (Berlin) [88] gezeigt als auch die der $W(\text{CO})_6$ -Sublimationsexperimente an ASDEX [23, 24] und der WF_6 -Injektionen an TEXTOR (die hier dargestellten Werte wurden mit dem Kompaktspektrometer bestimmt und unterscheiden sich daher innerhalb der Messgenauigkeit leicht von den mit dem Echelle-Spektrometer gemessenen). Ebenso dargestellt ist der Graph der Fit-Funktion dieses Multi-Maschinen-Fits

$$E_{\text{Ph}}(T_e) = 53.7 \times \left(1 - 1.04 \times \exp\left(-\frac{T_e}{22.1}\right) \right), \quad (101)$$

die zur Interpolation der Photoeffizienzen für die benötigte Temperatur benutzt werden kann [9].

Obwohl die Daten an völlig unterschiedlichen Maschinen und damit unter sehr unterschiedlichen Einflüssen von Plasmaprofilen und Geometrien gewonnen wurden, stimmen sie für vergleichbare Temperaturen innerhalb der Messunsicherheiten gut überein. Alle Messwerte passen sich systematisch in einen abfallenden Verlauf für fallende Temperaturen ein. Für steigende Temperaturen nimmt der Fit einen zunehmend konstanten Verlauf.

Inwieweit die Gleichsetzung $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = E_{\text{Ph}}^{\text{Zerst}}$ für die mittels WF_6 -Injektion an TEXTOR ermittelten Photoeffizienzen der $W \text{ I}$ (400.88 nm)-Linie zulässig ist, ob diese also mit den Konversionsfaktoren für zerstäubtes W identisch sind, soll im folgenden Abschnitt zunächst anhand der PSICO-Simulationen diskutiert werden. Bewiesen werden kann die Gültigkeit aber nur durch Anwendung auf Erosionsexperimente, da im TEXTOR-Temperaturbereich der direkte Vergleich mit Photoeffizienzen aus Zerstäubungsexperimenten aufgrund fehlender Messdaten bisher nicht möglich ist. Dies folgt in Kap. 11. Ebenso soll untersucht werden, wie stark der Einfluss der Dichte- und Temperaturprofile ist und ob die Näherung $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}} = E_{\text{Ph}}^{\text{homogen}}$ erlaubt ist, wobei $E_{\text{Ph}}^{\text{homogen}}$ die Photoeffizienz für ein homogenes Plasma mit konstanter Dichte und Temperatur darstellt. Davon ist abhängig, wie sehr sich ein aus den *Integralen* von Neutralteilchen und Photonen bestimmter Konversionsfaktor, der berücksichtigt, dass sich Anregung und Ionisation über die Profildicke ändern, unterscheidet von einem für konstante Plasmaparameter und somit über den Fehler der Konversion bestimmt.

10.3 Vergleich mit PSICO

Alle Betrachtungen im Folgenden beziehen sich ausschließlich auf die $W \text{ I}$ (400.88 nm)-Linie und müssen speziell für Linien, deren Niveaus für die verschiedenen Freisetzungsmechanismen unterschiedlich besetzt werden, nicht allgemein zutreffen.

Ändern sich Ionisations- und Anregungskoeffizient entlang des Weges, den ein W -Atom bis zur nächsten Ionisationsstufe in einem Plasma zurücklegt, so kann aus dem Verhältnis der Gesamtmenge einlaufender Teilchen und emittierter Photonen experimentell zwar eine allgemein temperaturabhängige Photoeffizienz $E_{\text{Ph}}(T_e)$ ermittelt werden. Diese ist aber nach Gleichung (53) zunächst ein von den Dichte- und Temperaturprofilen des jeweiligen Experiments abhängiger Wert, der im Allgemeinen jedoch nicht mit der

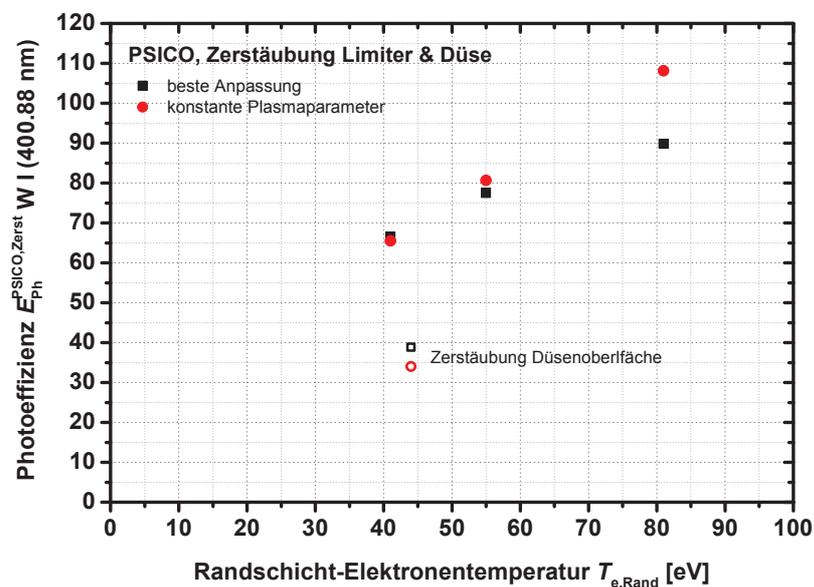
Größe $E_{\text{Ph}}^{\text{homogen}}$ übereinstimmen muss, die man in einem homogenen Plasma mit konstanten Dicht- und Temperaturwerten messen würde. Somit ist $E_{\text{Ph}}(T_e) = E_{\text{Ph}}^{\text{Exp}}(T_e)$ im Allgemeinen ein *experimentabhängiger* Konversionsfaktor. Damit die gemessenen Photoeffizienzen auch für andere Profile angewendet werden dürfen, muss also der Einfluss der Dichte- und Temperaturgradienten für beide Experimente vernachlässigbar sein. Hinzu kommt, dass die Anzahl emittierter Photonen von der Besetzung des emittierenden Niveaus abhängt, die nach einem Dissoziationsprozess wie im WF₆-Fall anders aussehen kann als im Zerstäubungsfall (was für einige der untersuchten Niveaus auch der Fall ist, Abb. 80). Es ist also zu untersuchen,

1. ob die Bedingung eines homogenen Plasmas hinreichend erfüllt ist,
2. welchen Einfluss die in Kap. 7 eingeführte Relaxationszeit τ_{Fit} auf die Gesamtmenge der emittierten Photonen hat und welche Konsequenz daraus für den Photoemissionsratenkoeffizienten \mathcal{PEC} folgt,
3. ob die durch WF₆-Injektionen bestimmten Photoeffizienzen denen im Zerstäubungsfall entsprechen, ob also ein möglicher Einfluss der Dissoziation auf die Photoeffizienzen vernachlässigt werden kann.

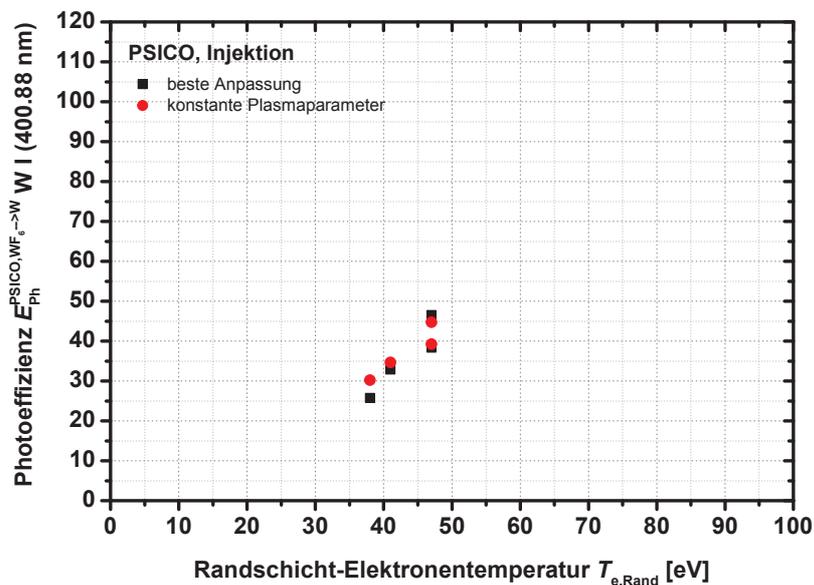
Durch die Simulation sowohl der Zerstäubungsexperimente als auch der Injektionsexperimente mit PSICO ist es möglich, die gleichen Experimente auch unter homogenen Plasmabedingungen zu testen. Als konstante Dichte- und Temperaturwerte wurden dazu die Werte am jeweiligen Maximum des Emissionsprofils benutzt, worüber auch die gemessenen Photoeffizienzen parametrisiert wurden. In den Abbildungen 96(a) und 96(b) sind die Photoeffizienzen gezeigt, die sich gemäß

$$E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO}} = \frac{N_{\text{W}^0}^{\text{MC}}}{N_{\text{Ph}}^{\text{MC}}} \quad (102)$$

errechnet als Verhältnis aus der Anzahl der ins Plasma geschickten Monte-Carlo-Wolfram-Neutralteilchen $N_{\text{W}^0}^{\text{MC}} = N_{\text{W}^+}^{\text{MC}} = 10000 = \text{const.}$ (entspricht letztlich der Anzahl ionisierter Teilchen) zur Gesamtanzahl der bis zur Ionisation emittierten Photonen $N_{\text{Ph}}^{\text{MC}}$. Die schwarzen Quadrate stellen jene Werte dar, die sich für die beste Anpassung sowohl der Zerstäubungsexperimente als auch der Injektionsexperimente unter den gemessenen Plasmabedingungen ergeben. Als rote Punkte eingezeichnet sind die Ergebnisse für konstante Dichte- und Temperaturwerte. Während sich die Werte im Temperaturbereich unterhalb von 80 eV im Zerstäubungsfall um maximal 4% ändern (13% im Falle der Düsenbeschichtung, hier sind die n_e/T_e -Profile steiler als im Limiter-Experiment), findet sich die größte Abweichung mit etwa 20% wieder für Phase I bei 81 eV. Hier ist die Dichte im Vergleich aller Phasen am kleinsten, was bedeutet, dass die Teilchen verhältnismäßig tief eindringen können und damit auch einer größeren Änderung der Temperaturprofile ausgesetzt sind. Nimmt die Dichte im homogenen Plasma dagegen *nicht* radial zu, nimmt auch die Emissionsrate nicht zu (wie in Kap. 7 beschrieben ist der Einfluss der Temperaturänderung kleiner als die der Dichteänderung), die Gesamtanzahl der emittierten Photonen ist

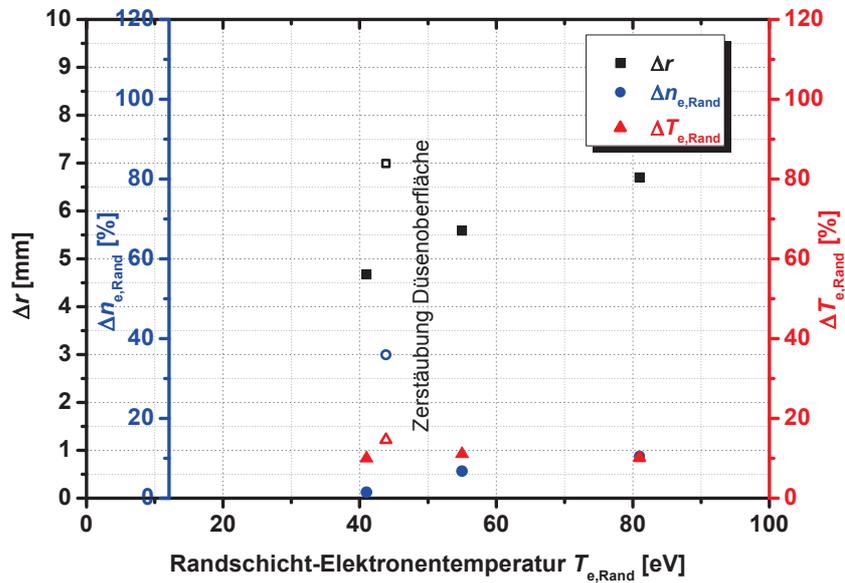


(a)

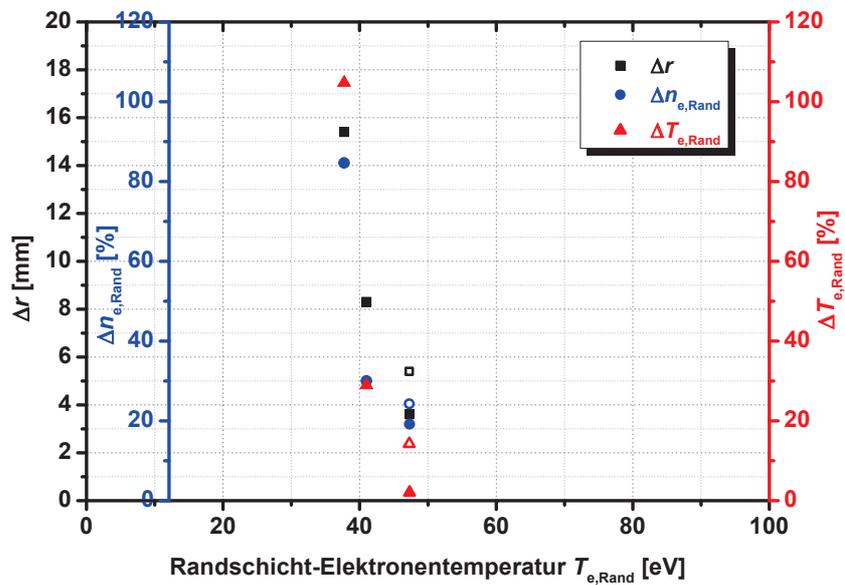


(b)

Abbildung 96: Vergleich der E_{Ph}^{PSICO} , die sich für die beste Anpassung sowohl der (a) Zerstäubungsexperimente als auch der (b) Injektionsexperimente unter den gemessenen Plasmabedingungen ergeben. Als rote Punkte eingezeichnet sind die Ergebnisse $E_{Ph}^{PSICO, \text{homogen}}$ eines homogenen Plasmas mit konstante Dichte- und Temperaturwerten.



(a)



(b)

Abbildung 97: Vergleich der Dichte- und Temperaturänderungen über die Breite Δr des Emissionsprofils von der Oberfläche bis zum Abfall auf $1/e$ hinweg für (a) das Zerstäubungsexperiment (b) das Injektionsexperiment, beide parametrisiert über die Temperatur am Emissionsmaximum.

damit kleiner. Da aber die Anzahl der Ionisationen durch die Vorgabe der Anzahl an MC-Teilchen immer konstant ist, wird die Photoeffizienz damit größer.

Im Injektionsfall in Abb. 96(b) zeigt sich für den Wert bei der kleinsten Temperatur der gleiche Dichteeffekt: hier nehmen mit der Positionierung der Düse bei immer größeren Radien Dichte als auch Temperatur gleichzeitig ab. Für geringe Dichten ist das W-Atom damit auch wieder größeren Änderungen des Temperaturprofils ausgesetzt, der Unterschied im Vergleich zum konstanten Plasma nimmt also mit kleineren Dichten zu.

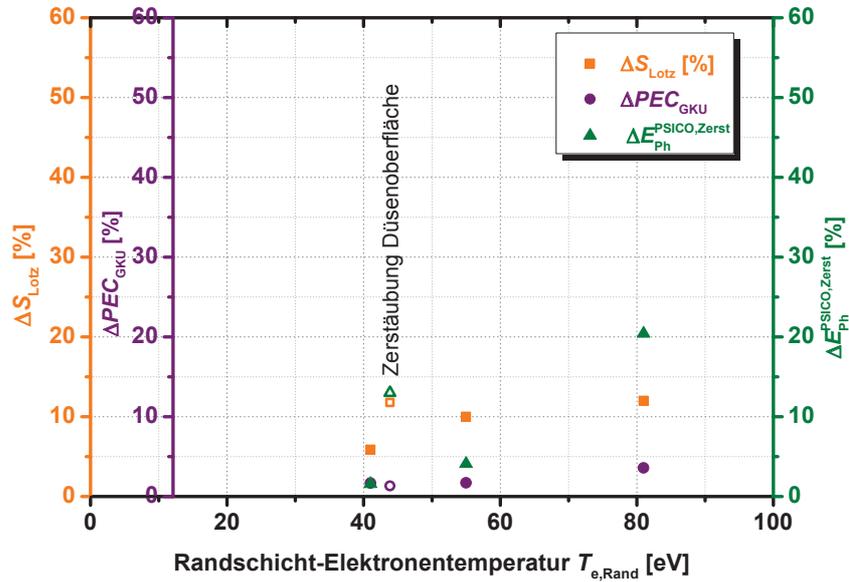
In Abb.97(a) bzw. 97(b) sind die Dichte- und Temperaturänderungen über die Breite Δr des Emissionsprofils von der Oberfläche bis zum Abfall auf $1/e$ hinweg für das Zerstäubungsexperiment bzw. das Injektionsexperiment dargestellt, beide parametrisiert über die Temperatur am Emissionsmaximum. Die Abbildungen Abb.98(a) bzw. 98(b) zeigen die Änderung der Photoeffizienzen im Vergleich der Simulationen für die gemessenen Plasmaparameter mit denen eines homogenen Plasmas. Die größten $\Delta E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO}}$ sind korreliert mit den kleinsten Dichten sowie den stärksten Änderungen in der Plasmadichte (Abb. 99(a) und 99(b), hier sind die simulierten $\Delta E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO}}$ zusammen mit den Dichte- und Temperaturänderungen noch einmal über die Dichte am Emissionsmaximum parametrisiert).

In der Plasmadichte liegt auch die Ursache der Diskrepanz der $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO}}$ für die Zerstäubung auf dem Limiter bzw. der Düse (Abb. 96(a)): für denselben Temperaturbereich liegt die Dichte im Düsen-Fall einen Faktor 3 unter der des Limiter-Experiments (Phase III). Abbildung 100(a) zeigt im Vergleich die simulierten Photoeffizienzen gegen die am Emissionsmaximum gemessenen Dichten aufgetragen. Eine Änderung der Dichte im untersuchten Intervall hat also einen offensichtlich nicht vernachlässigbaren Einfluss. Temperatur *und* Dichte müssen bei der Parametrisierung der Photoeffizienzen berücksichtigt werden, insbesondere bei der Anwendung der Photoeffizienzen unter anderen experimentellen Bedingungen. In Abb. 100(b) sind die Photoeffizienzen gegen die Ionisationsraten $I = n_e S_{\text{LOTZ}}(T_e)$ – berechnet mit den Werten des LOTZ-Datensatzes – aufgetragen. Mit der Ionisationsrate ist die Abhängigkeit sowohl von n_e als auch von T_e berücksichtigt. Damit ergibt sich ein systematischerer Verlauf der Werte.

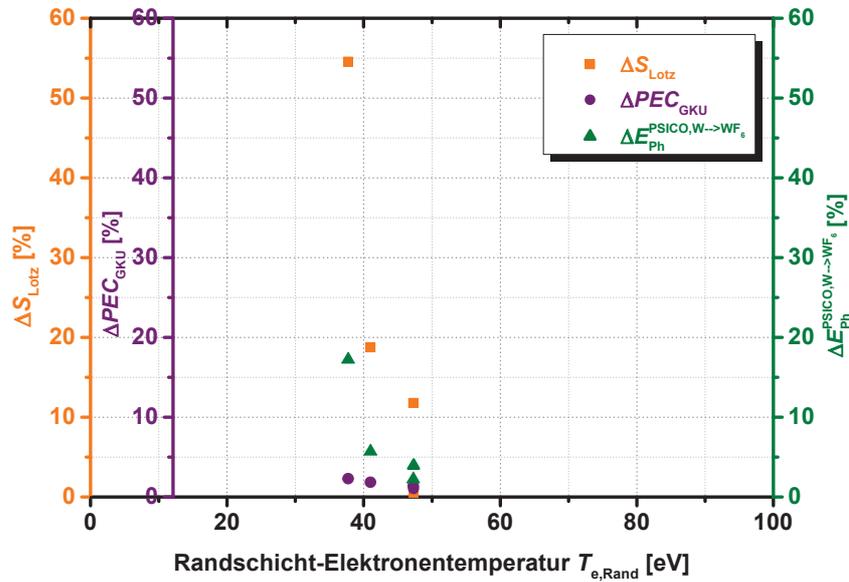
In den Abb. 101(a) und 101(b) ist der Einfluss der Variation von Dichte und Temperatur innerhalb der unteren und oberen Konfidenzbänder auf die simulierten Photoeffizienzen gezeigt (siehe Dichte- und Temperaturprofile in Abb. 23 und 62(a) bzw. 62(b)). Für die unteren bzw. oberen Konfidenzbänder ergab sich dementsprechend $S/S_{\text{LOTZ}} = 1.2$ bzw. $S/S_{\text{LOTZ}} = 0.4$.

Der Einfluss der effektiven Anregungszeit τ_{Fit} auf $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO}}$ ist in Abb. 102(a) dargestellt. Mit den Resultaten des Limiter-Experiments konnte τ_{Fit} auf einen Wert im Bereich bis $10 \mu\text{s}$ eingegrenzt werden. Im Falle der Zerstäubung auf der Düsenoberfläche ergab sich die beste Anpassung der Profile für $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$. Für $\tau_{\text{Fit}} = 0.5 \mu\text{s}$ bis $1 \mu\text{s}$ stimmen auch die simulierten Photoeffizienzen am besten mit den gemessenen überein.

In Abb. 102(b) ist die Auswirkung einer Variation der Teilchengeschwindigkeit v_W der W-Atome nach der Dissoziation gezeigt.

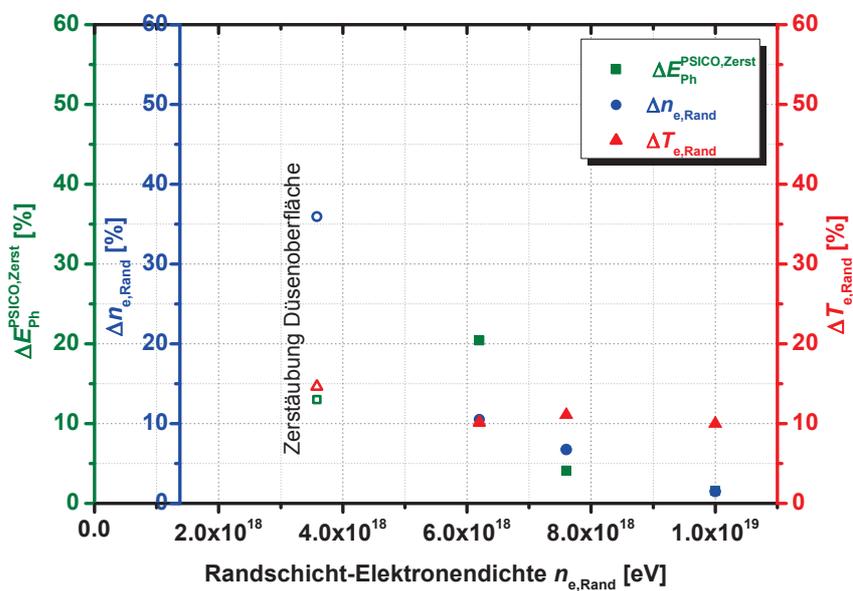


(a)

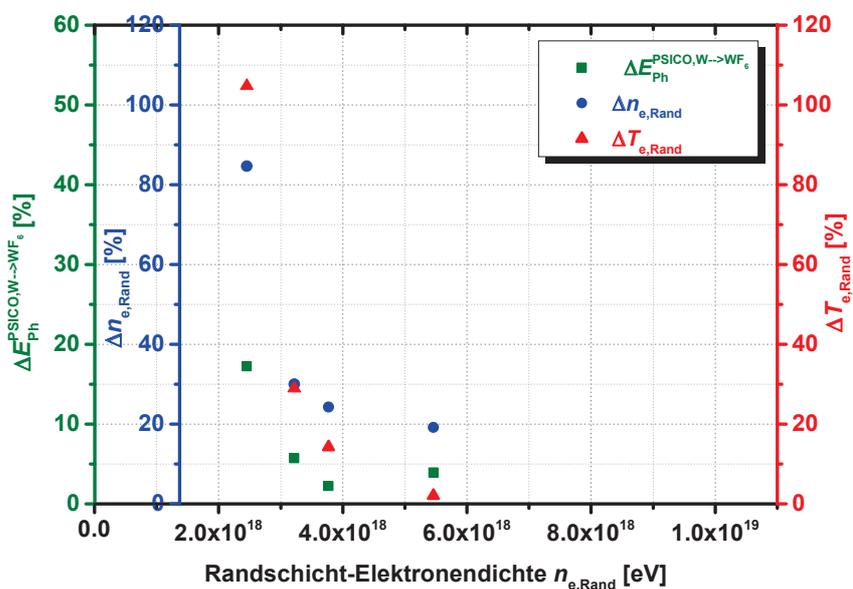


(b)

Abbildung 98: Vergleich der Änderungen in S_{LOTZ} und PEC_{GKU} über die Breite Δr des Emissionsprofils von der Oberfläche bis zum Abfall auf $1/e$. Mit ΔE_{Ph}^{PSICO} sind die Änderung der Photoeffizienzen im Vergleich der Simulationen für die gemessenen Plasma-parameter mit denen eines homogenen Plasmas angegeben. (a) Zerstäubungsexperiment (b) Injektionsexperiment, beide parametrisiert über die Temperatur am Emissionsmaximum.

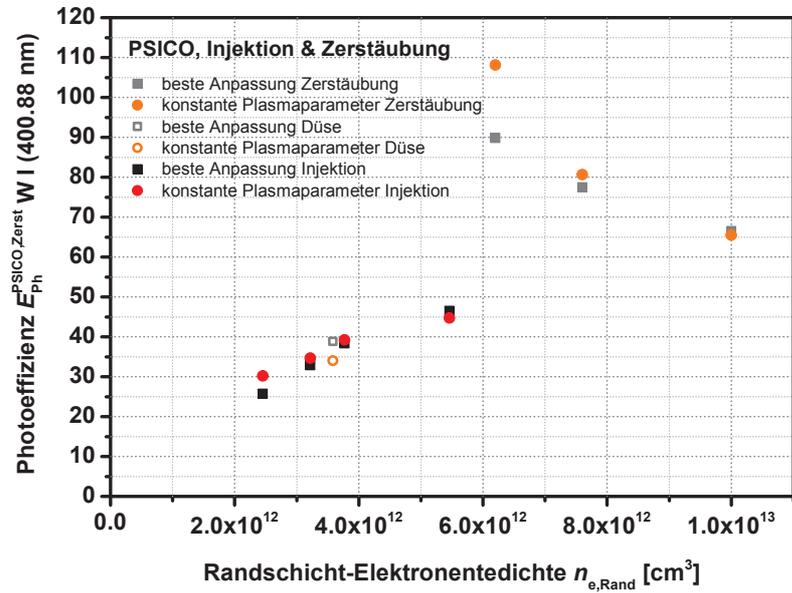


(a)

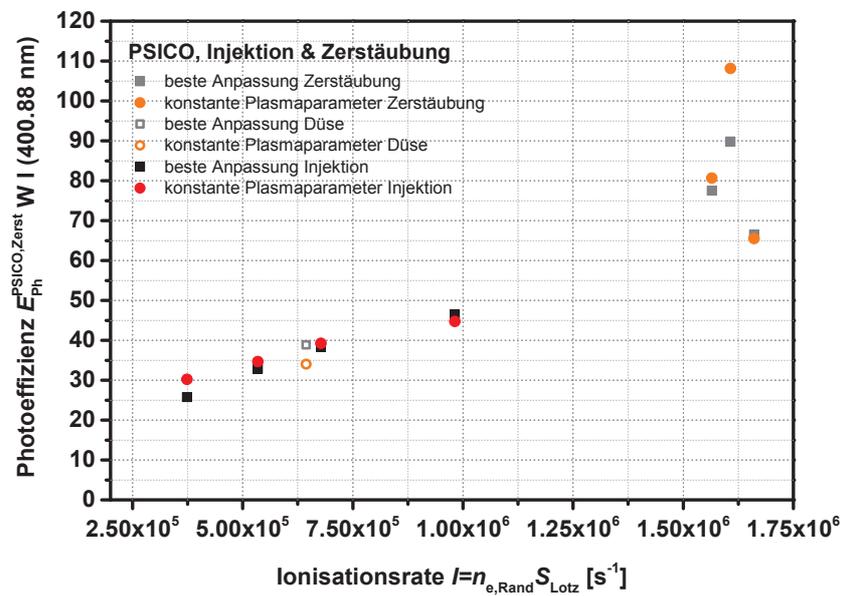


(b)

Abbildung 99: Vergleich der Dichte- und Temperaturänderungen über die Breite Δr des Emissionsprofils hinweg zusammen mit ΔE_{Ph}^{PSICO} für (a) das Zerstäubungsexperiment (b) das Injektionsexperiment, beide parametrisiert über die Dichte am Emissionsmaximum.

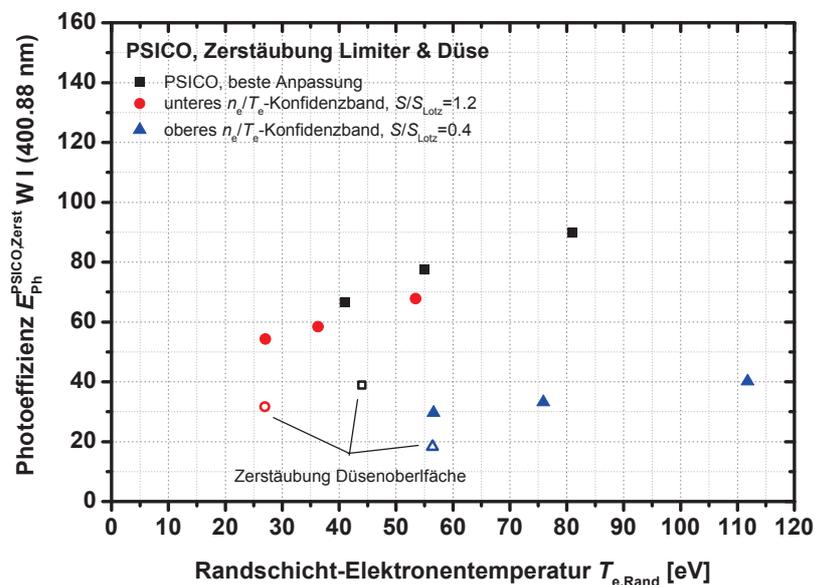


(a)

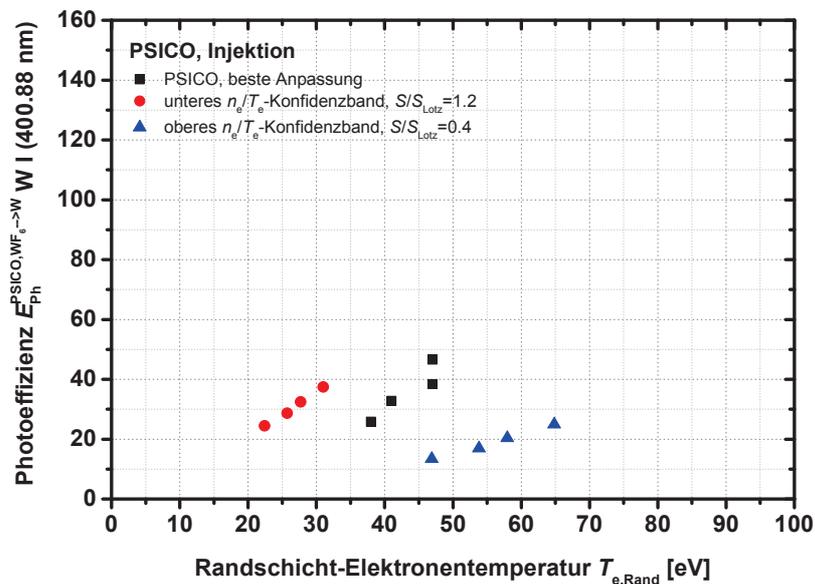


(b)

Abbildung 100: Simulierte Photoeffizienzen aufgetragen gegen (a) die am Ort des Emissionsmaximums gemessene Dichte (b) die aus der gemessenen Dichte und den LOTZ-Ionisationsratenkoeffizienten berechnete Ionisationsrate.

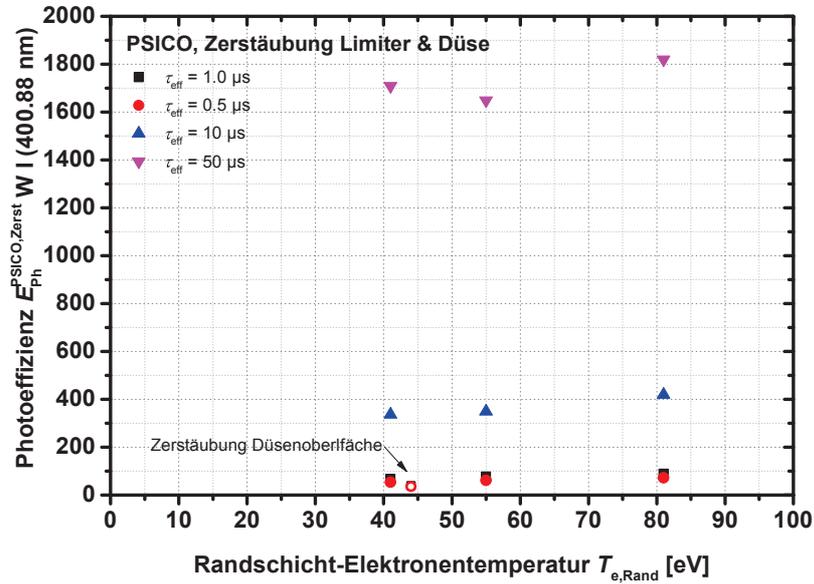


(a)

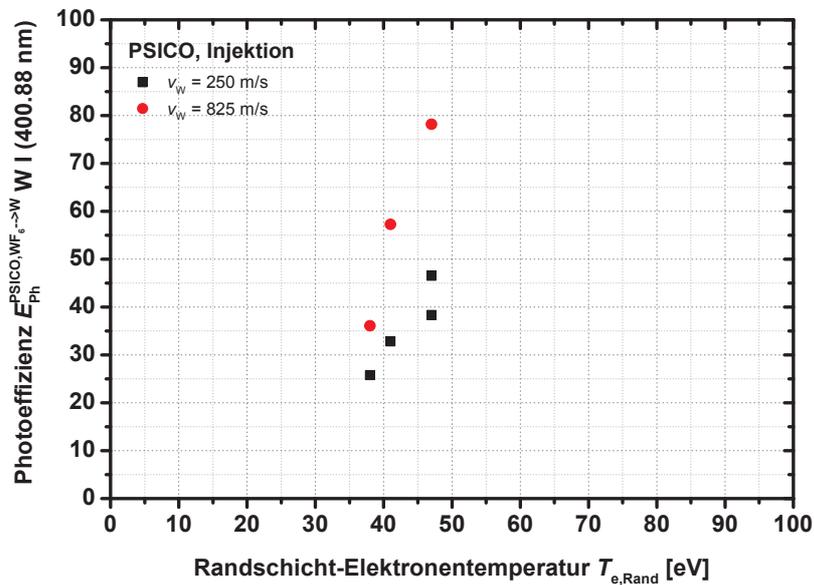


(b)

Abbildung 101: Variation der simulierten Photoeffizienzen mit den Unsicherheiten der Dichte- und Temperaturmessungen unter Benutzung der Werte der unteren und oberen Konfidenzbänder und dementsprechend $S/S_{LOTZ} = 1.2$ bzw. $S/S_{LOTZ} = 0.4$ für (a) Zerstäubungs-Experiment und (b) WF_6 -Injektion. (Dichte- und Temperaturprofile in Abb. 23 und 62(a) bzw. 62(b)).



(a)



(b)

Abbildung 102: (a) Einfluss der effektiven Anregungszeit τ_{Fit} auf $E_{Ph}^{PSICO,Zerst}$ (b) Auswirkung einer Variation der Teilchengeschwindigkeit v_W der W-Atome nach der Dissoziation auf $E_{Ph}^{PSICO,Wf_6 \rightarrow W}$

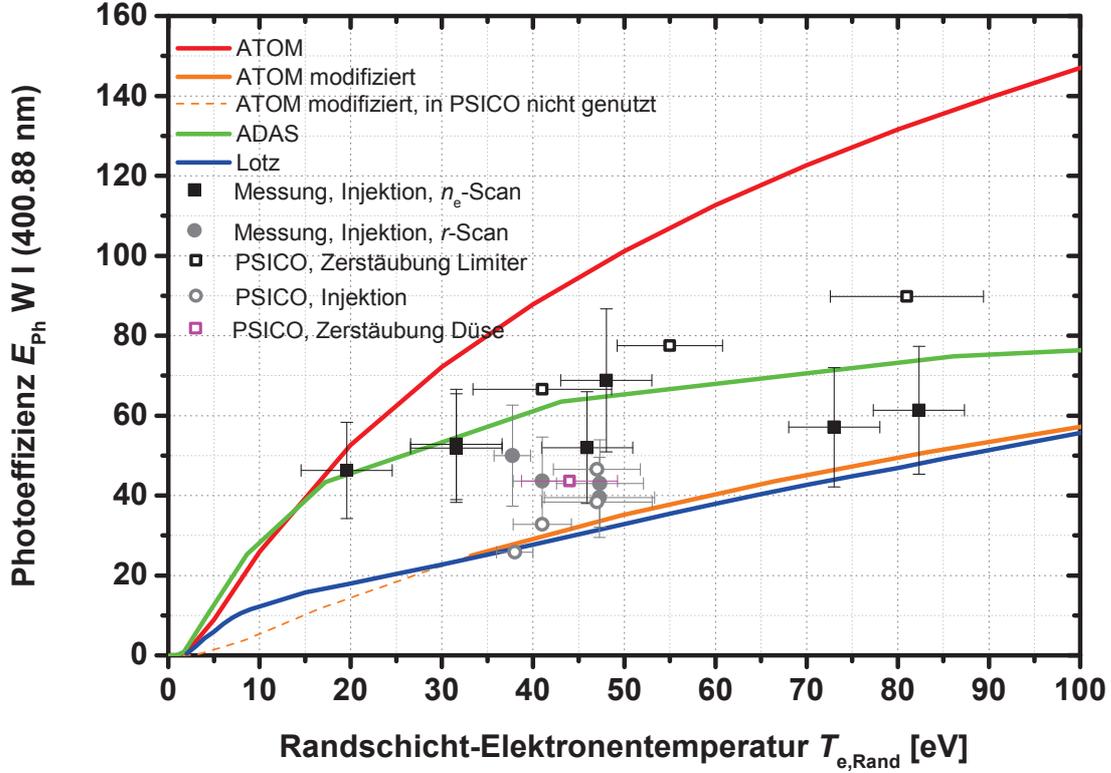


Abbildung 103: Vergleich der simulierten Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Zerst}}$ für den Zerstäubungs- bzw. $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ für den Injektionsfall mit den mittels der WF_6 -Injektion an TEXTOR gemessenen $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ für die W I (400.88 nm)-Linie, sowie der Photoeffizienzen, die sich rechnerisch aufgrund der unterschiedlichen Datenbasen als Verhältnis der Ionisationsratenkoeffizienten S_{ATOM} , $S_{\text{ATOM,mod}}$, S_{ADAS} und S_{LOTZ} zu den Photoemissionsratenkoeffizienten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ ergeben. Diese Werte stellen auch die Eingabeparameter der PSICO-Simulationen dar.

Nach Untersuchung des Einflusses all dieser Abhängigkeiten kann nun ein Vergleich der simulierten Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Zerst}}$ für den Zerstäubungs- bzw. $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ für den Injektionsfall mit den gemessenen $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ durchgeführt werden. In Abbildung 103 sind alle experimentellen und simulierten Photoeffizienzen sowie die sich aufgrund der Datenbasen rechnerisch ergebenden zusammengefasst.

Die ATOM-Daten, die modifizierten ATOM-Daten, die ADAS-Daten, die LOTZ-Daten als auch die $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ stellen die Eingabe-Daten der beschriebenen PSICO-Simulationen dar.

Erklärung der aufgeführten Daten:

- rote Kurve: Datensatz der ATOM-Ionisationsratenkoeffizienten $S_{\text{ATOM}}(T_e)$ dividiert durch die GKU-Photonenemissionskoeffizienten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}(T_e)$, was an jedem Punkt

der errechneten Photoeffizienz $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM,GKU}}(T_e)$ für ein homogenes Plasma bei konstanten n_e - und T_e -Werten entspricht:

$$E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM,GKU}}(T_e) = \frac{S_{\text{ATOM}}(T_e)}{\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}(T_e)} \quad (103)$$

- orange Kurve: $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM mod.,GKU}}(T_e) = S_{\text{ATOM,mod}}/\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ unter Benutzung der modifizierten ATOM-Daten (gestrichelt dargestellt ist der in den Simulationen nicht benutzte Bereich)
- grüne Kurve: $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ADAS,GKU}}(T_e) = S_{\text{ADAS}}/\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$
- blaue Kurve: $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{LOTZ,GKU}}(T_e) = S_{\text{LOTZ}}/\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$
- schwarze Quadrate: experimentelle Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ ermittelt durch den Dichte-Scan
- graue Punkte: experimentelle Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ ermittelt durch den Radius-Scan
- offene schwarze Quadrate: für die drei Phasen des Limiter-Zerstäubungs-Experiments simulierte Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Zerst}}$
- offene graue Punkte: für die WF₆-Injektion mit Radius-Scan simulierte Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$
- offenes rosa Quadrat: für die W-Zerstäubung auf der Düsen-Oberfläche simulierte Photoeffizienz $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Duese}}$

Folgendes kann festgestellt werden:

1. Der für die Düsen-Zerstäubung simulierte Wert $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Duese}}$ (offenes rosa Quadrat) stimmt mit den für die WF₆-Injektion (Radius-Scan) simulierten $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ überein: $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,Duese}} = E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$.
2. Die für die WF₆-Injektion (Radius-Scan) simulierten Werte $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ (offene graue Punkte) stimmen bis auf einen Punkt innerhalb des Fehlers mit den für den Radius-Scan gemessenen Werten $E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ überein, $E_{\text{Ph}}^{\text{PSICO,WF}_6 \rightarrow \text{W}} = E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$. Die simulierten Werte zeigen eine systematische Abnahme mit der Temperatur.
3. Im Rahmen der Messunsicherheiten stimmen die in unterschiedlichen WF₆-Experimenten gemessenen Werte (volle schwarze Quadrate und volle graue Punkte) für vergleichbare Temperaturen überein.
4. Bis auf Phase III bei 81 eV stimmen die für die Limiter-Zerstäubung simulierten Werte (offene schwarze Quadrate) mit den gemessenen Werten für den n_e -Scan der WF₆-Injektion im Rahmen der Messunsicherheit für vergleichbare Temperaturen überein und zeigen eine systematische Abnahme mit der Temperatur.

5. Die $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM,GKU}}$ liegen für Werte größer als 20 eV systematisch höher als die gemessenen/simulierten Werte.
6. Die $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ADAS,GKU}}$ stimmen *effektiv* im Mittel mit gemessenen/simulierten Werten überein.
7. Die $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM mod.,GKU}}(T_e)$ und $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{LOTZ,GKU}}(T_e)$ liegen tendenziell niedriger als die gemessenen/simulierten Werte. Eine Abweichung zu den simulierten Punkten ergibt sich, obwohl die Datensätze, die auch den gezeigten Kurven zugrunde liegen, ebenso die Eingabeparameter der Simulation darstellen und damit mit den Ergebnissen der Simulation identisch sein sollten. Die dargestellten $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM mod.,GKU}}(T_e)$ und $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{LOTZ,GKU}}(T_e)$ (sowie auch $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ATOM,GKU}}(T_e)$ und $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ADAS,GKU}}(T_e)$) wurden jedoch mit den $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ für den Gleichgewichtszustand mit $\frac{dn_k(t)}{dt} = 0$ (Kap. 7.1.2) in homogenen Plasmen berechnet. In PSICO wird $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C} = \mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}(t)$ aber zeitabhängig, da ein Profilanstieg nur durch eine Situation erklärt werden kann, in der die Besetzung des oberen Niveaus j noch zunimmt und somit noch gilt: $\frac{dn_k(t)}{dt} \neq 0 \Rightarrow \mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}(t) \neq \text{const.}$. Bis zum Erreichen der Gleichgewichtssituation nimmt $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}(t)$ also kontinuierlich zu. In Abhängigkeit von τ_{Fit} ist daher das Integral aller emittierten Photonen kleiner, als wenn von Anfang an ein Gleichgewichtszustand vorausgesetzt wird, und damit die simulierte Photoeffizienz größer. Um zu zeigen, wie sich die simulierten Photoeffizienzen mit und ohne Berücksichtigung von τ_{Fit} unter gleichen Plasmabedingungen verhalten, ist in Abb. 104 die Abnahme der Anzahl emittierter Photonen mit $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ im Verhältnis zur Photonenzahl ohne τ_{Fit} in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Die Anzahl insgesamt über die Profildbreite hinweg emittierter Photonen wird dadurch für die drei Phasen des Limiter-Experiments im Mittel um etwa 40% geringer als mit den $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ für den Gleichgewichtszustand. Dieser Einfluss nimmt mit steigender Temperatur bzw. fallender Dichte ab, da der Anteil der Photonen während des Kurvenanstiegs im Verhältnis zu Gesamtzahl aufgrund der breiteren Emissionsprofile kleiner wird. Zwar ergeben sich in der Simulation die Photoeffizienzen unter der Benutzung von n_e - und T_e -Profilen, während bei der Berechnung der $E_{\text{Ph,calc}}$ *homogene Plasmen* angenommen werden. Der Vergleich mit der Simulation homogener Plasmen in den Abb. 96(a) und 96(b) zeigt aber, dass diese Abweichung im Vergleich mit dem Einfluss von τ_{Fit} kleiner ist. Unter Berücksichtigung von τ_{Fit} würden somit alle unter Benutzung eines konstanten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$ gerechneten Kurven etwa 40% höher liegen.

Folgende Schlüsse können gezogen werden:

1. Unter Benutzung der gerechneten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ und unter Berücksichtigung von τ_{Fit} ergeben sich simulierte Photoeffizienzen, die mit den gemessenen übereinstimmen, womit die $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ für den Gleichgewichtszustand experimentell bestätigt werden können.
2. Mit den Parametern, für die die beste Anpassung der simulierten an die gemessenen Profile erreicht werden konnte, ergeben sich Photoeffizienzen für die Injektion als

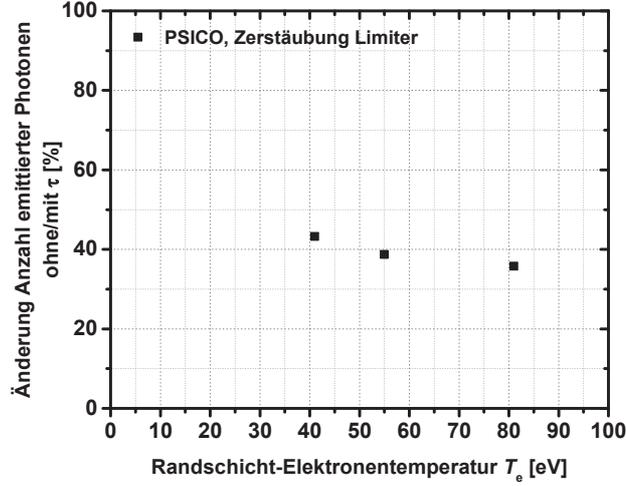


Abbildung 104: Abnahme der Anzahl emittierter Photonen in der Simulation mit $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ im Verhältnis zur Photonenzahl ohne τ_{Fit} für die drei Phasen des Limiter-Experiments. Im Mittel werden also über die Breite des Emissionsprofils hinweg unter Anwendung von $\tau_{\text{Fit}} = 1 \mu\text{s}$ 40% weniger Photonen im Vergleich zur Emission ohne τ_{Fit} emittiert.

auch die Zerstäubung, die im jeweiligen Temperaturbereich übereinstimmen. Dies ergibt sich jedoch nur unter der Voraussetzung, dass die Photoemissionsratenkoeffizienten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}_{\text{GKU}}$ der W I (400.88 nm)-Linie für W, entstanden aus der Dissoziation von WF₆, als auch für zerstäubtes W identisch sind. Die Linienverhältnisse in Kap. 9 zeigen, dass dies nicht für alle Linien der Fall sein muss und von der Besetzung der Energieniveaus nach der Dissoziation abhängig ist. (Dass diese Annahme aber gerechtfertigt ist, zeigt die abschließende Anwendung der Photoeffizienzen zur W-Erosionsmessung in Kap. 11.)

- Die gemessenen Photoeffizienzen zeigen einen konstanten Verlauf mit der Temperatur. Damit ist für diesen Bereich eine Unabhängigkeit von der Plasmatemperatur gegeben, und damit auch vom Temperaturprofil. Dieses Verhalten ergibt sich jedoch möglicherweise nur für die überprüften Plasmamparameter und kann bei anderen n_e/T_e -Kombinationen anders aussehen.
- Weiter folgt mit dem Vergleich in Abb. 96(a), dass für die TEXTOR-Messungen mit einer Abweichung von maximal 20% gilt:

$$E_{\text{Ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W, TEXTOR}}(T_e) \approx E_{\text{Ph}}^{\text{homogen}}(T_e). \quad (104)$$

Damit zeigt PSICO eine Vernachlässigbarkeit der Wirkung der Plasmaprofile über die Breite des Emissionsprofils hinweg. Wie gut dies auch für größere Gradienten in n_e und T_e erfüllt ist, muss im Einzelfall untersucht werden.

5. Das Zusammenfallen der gemessenen Photoeffizienzen mit den $E_{\text{Ph,calc}}^{\text{ADAS,GKU}}$ ist nur eine *effektive* Übereinstimmung. Als Ergebnis aus Kap. 7.1.3 ergab sich, dass S_{ADAS} zu hoch angesetzt ist und eine Simulation mit S_{LOTZ} die besten Ergebnisse liefert. Durch Division der S_{ADAS} durch einen konstanten $\mathcal{P}\mathcal{E}\mathcal{C}$, der durch die Zeitunabhängigkeit ebenfalls zu hoch angesetzt wird, wird die Überschätzung kompensiert.
6. Dadurch, dass zur Erklärung und Simulation der gemessenen Profile auch Zeiten berücksichtigt werden müssen, für die $\frac{dn_k(t)}{dt} \neq 0$ gilt, ist die Voraussetzung zur Gleichsetzung von E_{Ph} und $\frac{S}{XB}$ gemäß der Definition aus Gl. (56) formal nicht gegeben:

$$E_{\text{Ph}} \neq \frac{S}{XB}. \quad (105)$$

Hierin beschreibt $X = X_{ij}$ die Anregung des oberen Niveaus j aus dem unteren Niveaus i unter der Gleichgewichtsbedingung $\frac{dn_j(t)}{dt} = 0$, die aber im Experiment nicht von Anfang an gilt.

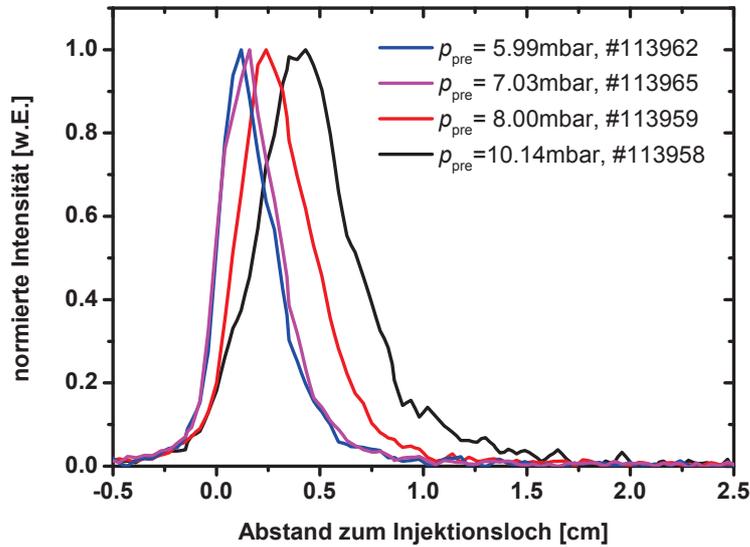
10.4 Einfluss der WF₆-Injektion auf die lokalen Plasmaparamter

In anderen an TEXTOR durchgeführten Injektionsexperimenten ist der Effekt der Plasmakühlung durch Einblasen von Verunreinigungen wie z.B. Methan (CH₄) untersucht [32] und in [35] auch modelliert worden. Dort konnte eine signifikante Verminderung der Temperatur bei einer CH₄-Injektionsrate von $6 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ nachgewiesen werden. Dies deckt sich gut mit dem theoretischen Befund von $4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$. Grund der Temperaturminderung innerhalb der Injektionswolke ist der Energieverlust des Plasmas durch die Ionisation und Anregung der C- und H-Atome. Ähnliches ist also auch für eine WF₆-Injektion zu erwarten. Nimmt man überschlagsweise an, dass sich die kritische Injektionsrate antiproportional zur Ionisationsenergie verhält, so kann diese Rate über die ersten Ionisationsenergien E_{Ion} von C, H, W und F abgeschätzt werden. Mit $E_{\text{Ion}}^{\text{C} \rightarrow \text{C}^{1+}} = 11.3 \text{ eV}$, $E_{\text{Ion}}^{\text{H} \rightarrow \text{H}^+} = 13.6 \text{ eV}$, $E_{\text{Ion}}^{\text{W} \rightarrow \text{W}^{1+}} = 8.0 \text{ eV}$ und $E_{\text{Ion}}^{\text{F} \rightarrow \text{F}^{1+}} = 17.4 \text{ eV}$ ergibt sich aus dem Verhältnis der Gesamtionisationsenergien $E_{\text{Ion,CH}_4} = E_{\text{Ion}}^{\text{C} \rightarrow \text{C}^{1+}} + 4E_{\text{Ion}}^{\text{H} \rightarrow \text{H}^+}$ für CH₄ und $E_{\text{Ion,WF}_6} = E_{\text{Ion}}^{\text{W} \rightarrow \text{W}^{1+}} + 6E_{\text{Ion}}^{\text{F} \rightarrow \text{F}^{1+}}$ für WF₆

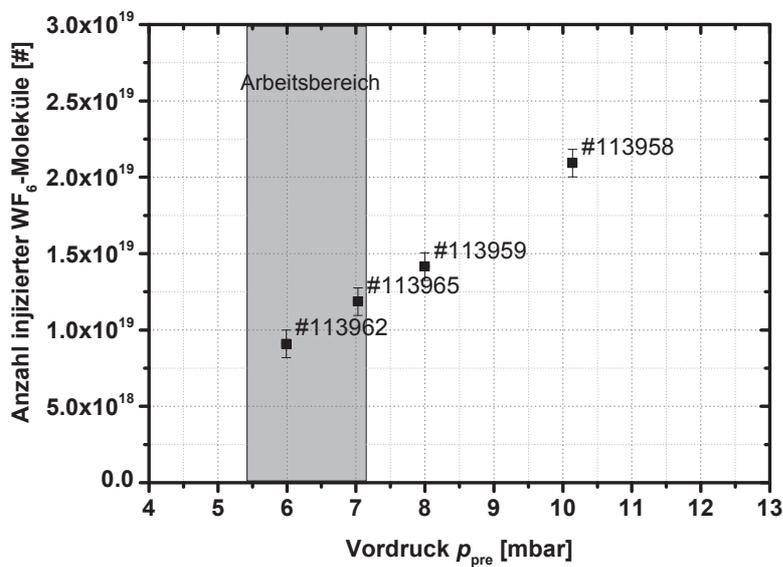
$$\frac{E_{\text{Ion,CH}_4}}{E_{\text{Ion,WF}_6}} = \frac{66 \text{ eV}}{113 \text{ eV}} = 0.6. \quad (106)$$

Daraus folgt eine kritische Injektionsrate von $R_{\text{krit,WF}_6} = 0.6 \cdot R_{\text{krit,CH}_4} = 2.3 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$, die auch im Experiment mit $R_{\text{WF}_6} = (2.2 \pm 0.1) \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ erreicht wurde.

Dieses Ergebnis deckt sich sehr gut mit den Beobachtungen im Falle der WF₆-Experimente. In Abb. 105(a) sind Emissionsprofile gezeigt, wie sie für steigende Vordrücke p_{pre} und somit steigende Anzahl injizierte WF₆-Moleküle gemessen wurden (Abb. 105(b)). Anhand der Profile ist klar zu sehen, wie die Teilchen mit steigendem Vordruck immer tiefer ins Plasma eindringen. Dies ist nicht auf eine höhere Geschwindigkeit zurückzuführen, die



(a)



(b)

Abbildung 105: (a) Emissionsprofile gemessen für steigende Vordrücke p_{pre} und somit steigende Anzahl injizierte WF_6 -Moleküle. Anhand der Profile ist zu sehen, wie die Teilchen mit steigendem Vordruck immer tiefer ins Plasma eindringen. (b) Anzahl injizierter WF_6 -Moleküle aufgetragen gegen den Vordruck im Gasreservoir. (Der Fehler der Druckmessung liegt im Promillebereich.)

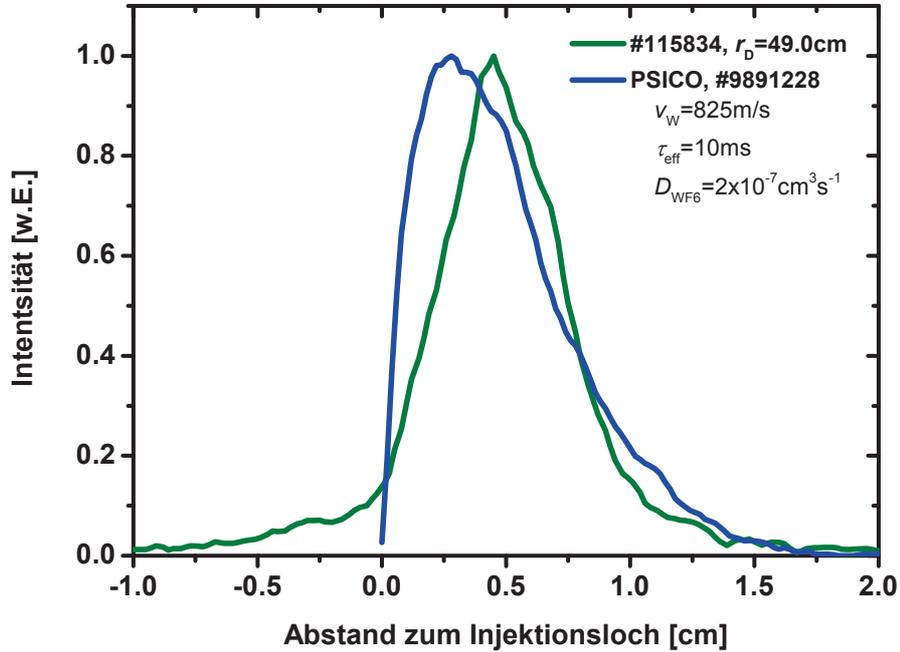


Abbildung 106: Einfluss der Kühlung auf das simulierte Profil für die Entladung #113974. Hier wurde eine Absenkung der Temperatur um 50% angenommen.

die Teilchen aufgrund des höheren Vordrucks gewinnen, da ein signifikanter Einfluss des Vordrucks erst bei Drücken im bar-Bereich auftritt (siehe z.B. [39]), wogegen im WF₆-Experiment im mbar-Bereich injiziert wurde. Die Ursache muss hier also in einer Kühlung des Plasmas liegen, die von der Menge injizierter Teilchen abhängt.

Aufgrund der Messungen in Abb. 105(a) wurden als Arbeitsbereich Vordrücke von 5.5–7.1 mbar gewählt, da ab etwa 7 mbar eine Änderung der Eindringtiefen gerade beobachtet werden konnte. Andererseits konnte so die maximal mögliche Menge an Teilchen injiziert werden um eine hohe Intensität der Emissions zu erhalten.

Der Einfluss der Kühlung auf die Profile wurde in Abb. 106 für die Entladung #113974 simuliert. Hier wurde eine Absenkung der Temperatur um 50% angenommen. Zwar kann dadurch das Eindringen der Teilchen ins Plasma vergrößert werden da die Ionisationsratenkoeffizienten mit T_e abnehmen. Es zeigt sich aber immer noch eine grundlegend andere Kurvenform, die also auch durch die Kühlung nicht zu erklären ist.

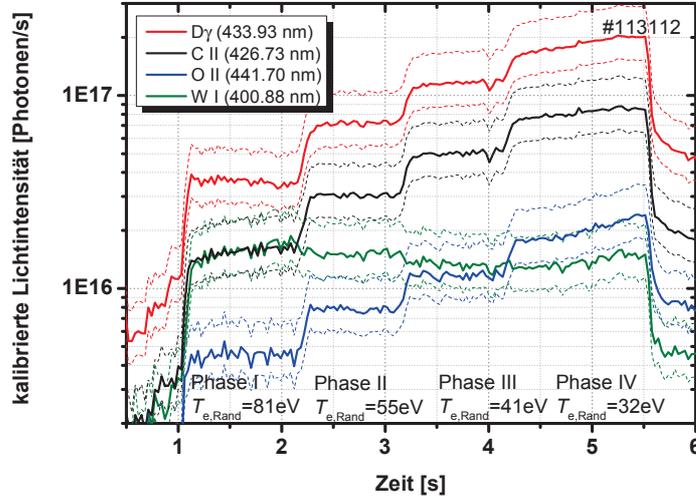
11 W-Flussbestimmung in Zerstäubungsexperimenten durch Anwendung der Photoeffizienzen

Zur Überprüfung, ob die in der WF_6 -Injektion bestimmten Photoeffizienzen mit denen für neutrales zerstäubtes W identisch sind, wird im Folgenden die Anzahl erodierter W-Atome sowohl für das Limiter-Experiment als auch für den Fall der Zerstäubung der abgelagerten W-Schicht auf der Düsenoberfläche aus dem Licht der W I (400.88 nm)-Linie bestimmt. Aus dem so ermittelten W-Erosionsfluss wird eine experimentelle Zerstäubungsausbeute bestimmt, die mit Referenzmessungen verglichen werden kann.

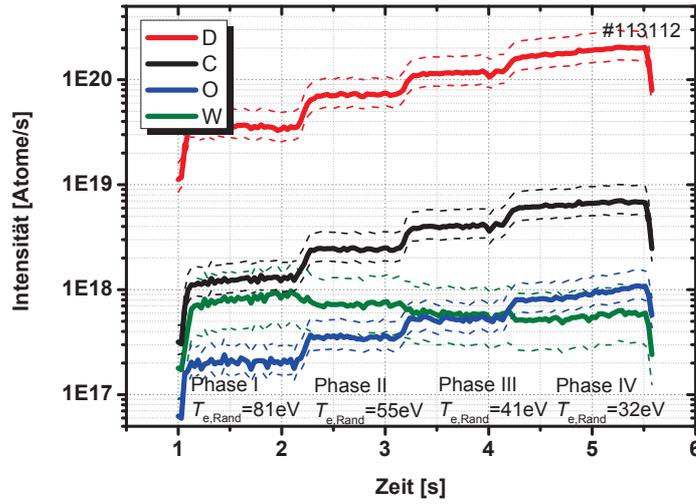
Dazu sind in Abb. 107(a) die nun absolutkalibrierten Zeitspuren des Deuteriumlichts (gemessen anhand der D_γ -Linie bei D I (434.93 nm)), des W-Lichts (W I (400.88 nm)) und der Plasmaverunreinigungen C (C II (426.73 nm)) und O (O I (441.70 nm)) für das Limiter-Experiment jeweils mit Fehlern dargestellt (entspricht dem unkalibrierten Diagramm in Abb. 28(a)). Nach Anwendung der gemessenen Photoeffizienzen $E_{Ph}^{W\ I\ (400.88\ nm)}(T_e)$ für W I (400.88 nm) auf die W-Spur und der Photoeffizienzen $E_{Ph}^{D\ I\ (433.93\ nm)} = 1000$ (mit Korrektur zum molekularen Beitrag [11, 15, 82]), $E_{Ph}^{C\ II\ (426.73\ nm)} = 80$ [11, 68] und $E_{Ph}^{O\ I\ (441.70\ nm)} = 45$ [11, 68] (jeweilige Änderungen mit der Temperatur vernachlässigbar) auf die jeweils anderen Spuren ergeben sich die Teilchenströme in Abb. 107(b).

Aus dem Zeitintegral des W-Teilchenstroms über die jeweilige Phase ergibt sich der Absolutwert der pro Phase von der Limiter-Oberfläche erodierten W-Atome. Die Integralwerte und Flüsse Γ_W sind in Abb. 108(a) dargestellt zusammen mit der Intensität des W I (400.88 nm)-Lichts (linke Achse in counts/frame, rechte Achse in Photonen/s), der Intensität des D I (434.93 nm)-Lichts (gestrichelte Linie, nur linke Achse in counts/frame) und dem sich aus den zeit- bzw. temperaturabhängigen Photoeffizienzen (blau) ergebenden W-Teilchenstrom (scharze Achse rechts). Als W-Flüsse sind die mittleren Flüsse für die Oberfläche des W-Limiters ($52.8\ cm^2$) und das Zeitintervall der jeweiligen Phase angegeben. Abbildung 109(a) zeigt für jede Phase die Absolutanzahl an Photon, die benutzten Konversionsfaktoren $E_{Ph}^{W\ I\ (400.88\ nm)}(T_e)$ und die damit ermittelte Absolutanzahl erodierter W-Teilchen jeweils mit den Messunsicherheiten (die im Wesentlichen durch die Absolutkalibration bestimmt sind) im Überblick. Die Zeitspur und das Photonen- bzw. W-Teilchen-Integral der Zerstäubung auf der Düsenoberfläche ist in Abb. 108(b) wiedergegeben. Alle Integrale liegen in der gleichen Größenordnung; davon vermittelt auch Abb. 109(b) noch einmal einen Eindruck, in der die Profile der ausgewerteten Kamerabilder, die auf Filtertransmissionen und Blendenöffnungen normiert wurden, für alle Experimente im Vergleich dargestellt sind (das trotz höherer Intensität stärkere Rauschen beim Injektionsexperiment ist auf die Mittelung über weniger Frames zurückzuführen). Die Maxima der Signale der WF_6 -Injektion liegen zwei Größenordnungen über denen der Zerstäubung, was auch dem Verhältnis der injizierten/zerstäubten Teilchen entspricht (vergl. Abb. 108(a) und 108(b)).

Bei einem Vergleich der Menge der erodierten W-Atome, die für die Phasen I und II mit dem Signal der W II (434.81 nm)-Linie bestimmt wird, ergibt sich eine 3- bzw. 4mal so große Menge, was nach der Diskussion in Kap. 9 ein weiteres Indiz ist, dass



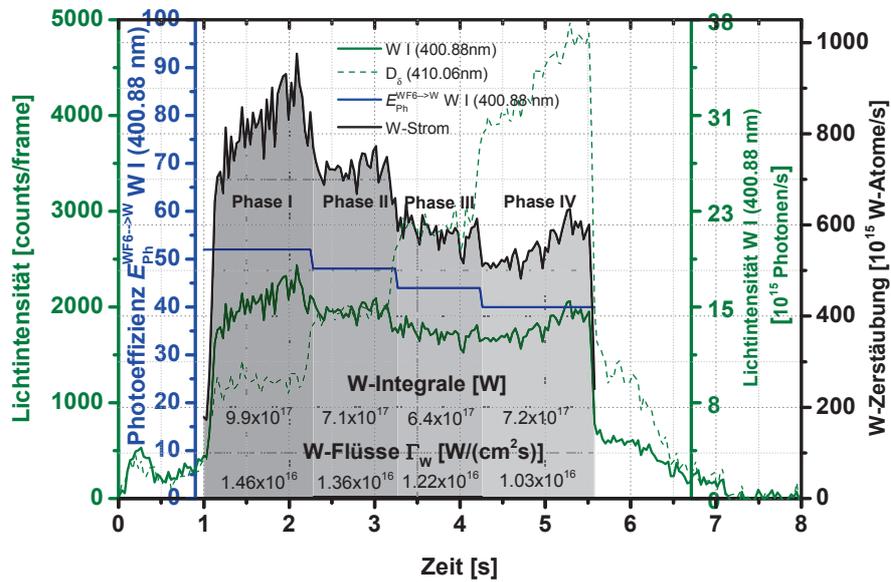
(a)



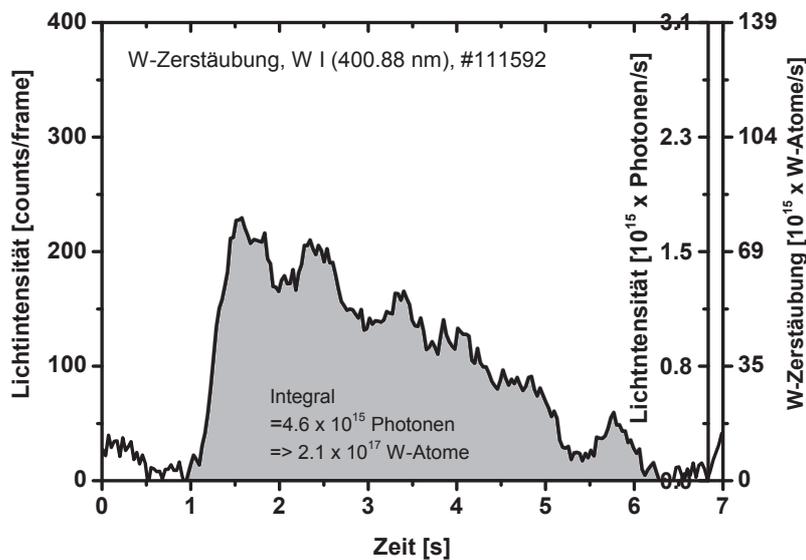
(b)

Abbildung 107: (a) Absolutkalibrierte Zeitspuren des Deuteriumlichts (gemessen anhand der D_γ -Linie bei D I (434.93 nm)), des W-Lichts (W I (400.88 nm)) und der Plasmapureinungen C (C II (426.73 nm)) und O (O I (441.70 nm)) für das Limiter-Experiment (entspricht dem unkalibrierten Diagramm in Abb. 28(a)). (b) Nach Anwendung der gemessenen Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{W I (400.88 nm)}}(T_e)$ für W I (400.88 nm) auf die W-Spur und der Photoeffizienzen $E_{\text{Ph}}^{\text{D I (433.93 nm)}} = 1000$ (mit Korrektur zum molekularen Beitrag [11, 15, 82]), $E_{\text{Ph}}^{\text{C II (426.73 nm)}} = 80$ [11, 68] und $E_{\text{Ph}}^{\text{O II (441.70 nm)}} = 45$ [11, 68] auf die jeweils anderen Spuren ergeben sich die Teilchenströme.

11 W-FLUSSBESTIMMUNG IN ZERSTÄUBUNGSEXPERIMENTEN DURCH ANWENDUNG DER PHOTOEFFIZIENZEN

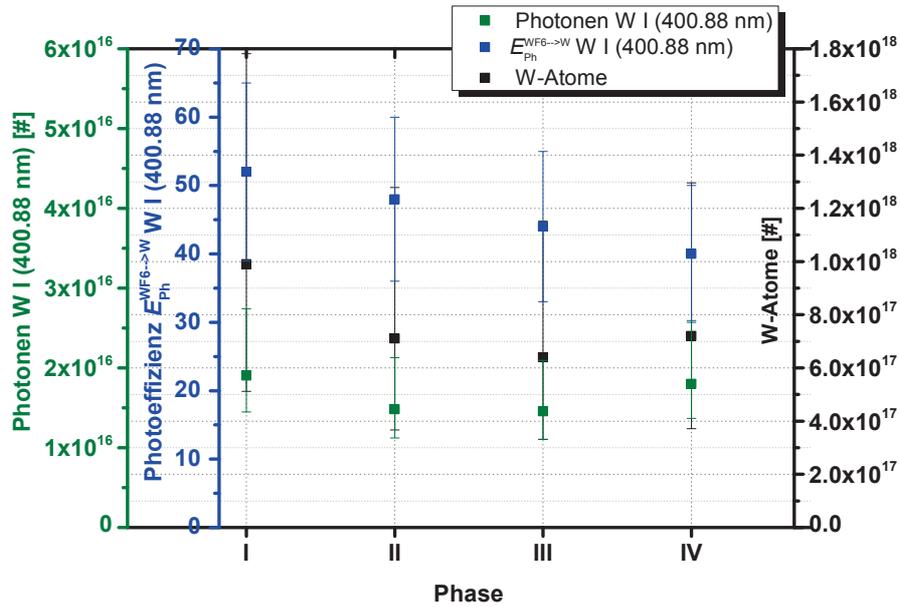


(a)

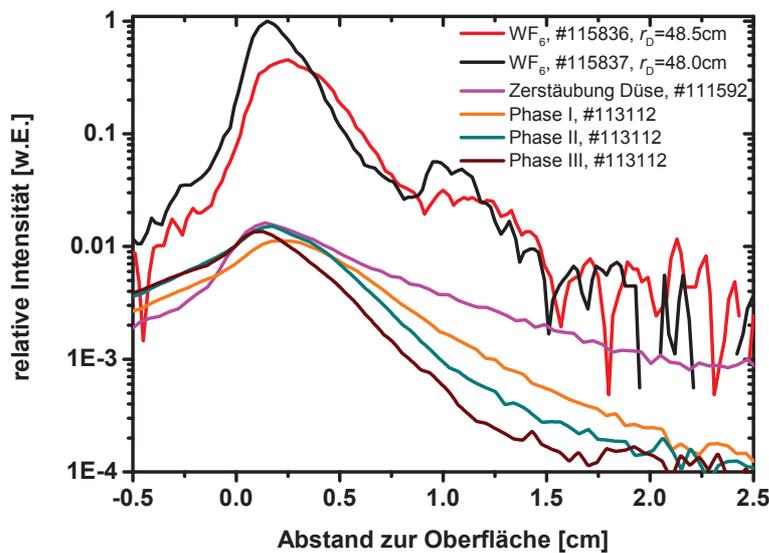


(b)

Abbildung 108: (a) Integralwerte und Flüsse Γ_W der pro Phase erodierten W-Atome zusammen mit der Intensität des W I (400.88 nm)-Lichts (linke Achse in counts/frame, rechte Achse in Photonen/s), der Intensität des D I (434.93 nm)-Lichts (gestrichelte Linie, nur linke Achse in counts/frame) und dem sich aus den zeit- bzw. temperaturabhängigen Photoeffizienzen (blau) ergebenden W-Teilchenstrom (scharze Achse rechts). (b) W I (400.88 nm)-Zeitspur und das Photonen- bzw. W-Teilchen-Integral der Zerstäubung auf der Düsenoberfläche.



(a)



(b)

Abbildung 109: (a) Photonanzahl, die benutzten Konversionsfaktoren $E_{Ph}^{W I (400.88 \text{ nm})}(T_e)$ und die damit ermittelte Absolutanzahl erodierter W-Teilchen für jede Phase jeweils mit den Messunsicherheiten (die im Wesentlichen durch die Absolutkalibration bestimmt sind) im Überblick. (b) Profile der ausgewerteten Kamerabilder, die auf Filtertransmissionen und Blendenöffnungen normiert wurden, für alle Experimente im Vergleich. Die Maxima der Signale der WF_6 -Injektion liegen zwei Größenordnungen über denen der Zerstäubung, was auch dem Verhältnis der injizierten/zerstäubten Teilchen entspricht.

die Photoeffizienzen der W II (434.81 nm)-Linie um mindestens einen Faktor 2 zu hoch sind und die Größe der Abweichung dabei aufgrund der steigenden Redeposition mit der Temperatur zunimmt.

Mit den Absolutwerten der Teilchenflüsse können nun auch analog zu Abb. 28(b) die Verhältnisse daraus bestimmten werden. Diese sind in Abb. 110(a) relativ zum D-Fluss dargestellt. Interessant bei der Betrachtung der W-Zerstäubung ist das Verhältnis des W-Flusses zu dem der Plasmaverunreinigungen wie C und O, die aufgrund ihrer Masse den wesentlichen Anteil an der Zerstäubung haben, während die Ausbeute $Y_{D \rightarrow W}$ vernachlässigbar ist [18, 19, 72]. Das Verhältnis des W-Flusses zum D-Fluss und dem der Verunreinigungen – also die Zerstäubungsausbeute $Y_{X \rightarrow W}$ (mit X: einfallendes Element) – ist in Abb. 110(b) gezeigt.

Das Verhältnis der Plasmaverunreinigungen C und O zu D ist Abb. 110(a) zu entnehmen. Somit liegt der Anteil von C, der zur W-Zerstäubung beiträgt, über die gesamte Entladung hinweg bei etwa $4 \pm 2\%$, der von O bei etwa $0.5 \pm 0.3\%$, wie dies auch für typische Entladungen in TEXTOR zu erwarten ist. Den entscheidenden Anteil an der W-Zerstäubung haben die Verunreinigungen mit höheren Ionisationszuständen wie C^{3+} und C^{4+} [72], während der Anteil von D aufgrund der geringen Zerstäubungsausbeute im Bereich < 0.0001 zerstäubter W-Atome pro Deuteron [19] auch unter Berücksichtigung des Energiegewinns im Sheath für diesen Temperaturbereich vernachlässigbar ist.

Werden die Teilchenflüsse aus dem Plasma zum W-Fluss ins Verhältnis gesetzt, ergeben sich daraus effektive Zerstäubungsausbeuten (Abb. 110(b)). *Effektiv* deshalb, da in jedem Verhältnis auch der Zerstäubungsanteil der anderen Elemente inbegriffen ist. Jedes davon trägt in Abhängigkeit der jeweiligen Ausbeute und dem jeweiligen Fluss zur Erzeugung des W-Flusses Γ_W bei:

$$\Gamma_W = Y_{D \rightarrow W} \Gamma_D + Y_{C \rightarrow W} \Gamma_C + Y_{O \rightarrow W} \Gamma_O (+ \dots + Y_{X \rightarrow W} \Gamma_X). \quad (107)$$

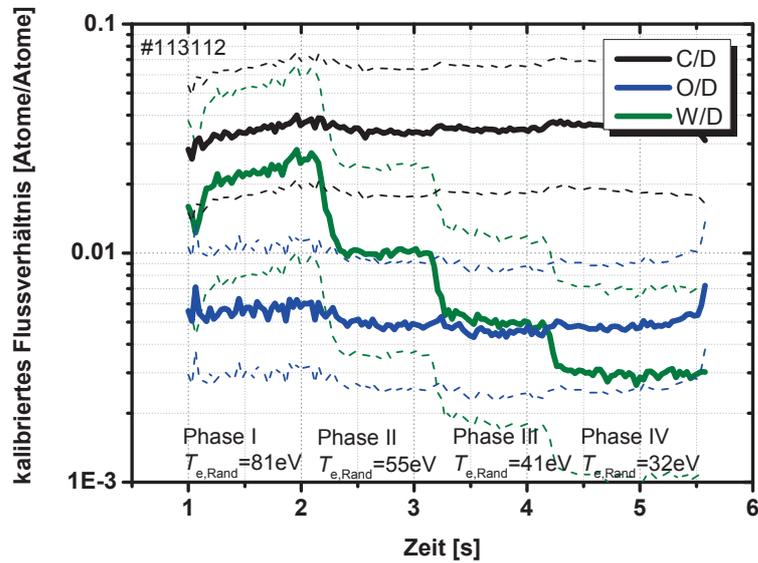
(mit im Allgemeinen etwaigen anderen Elementen X). Hierbei ist die Ausbeute $Y_{D \rightarrow W}$ vernachlässigbar. Auch wenn der D-Fluss den Fluss der Verunreinigungen bei weitem überwiegt, kann dies die geringe Ausbeute nicht kompensieren. Für $Y_{O \rightarrow W}$ finden sich in [19] für gleiche Ladungszustände (4+) und damit gleiche Energien aufgrund der höheren Masse Ausbeuten, die etwas höher liegen als für C. Dies wird aber in diesem Fall genau umgekehrt kompensiert, da der O-Fluss um beinahe einen Faktor 10 kleiner ist als der C-Fluss. Somit liegt die tatsächliche Ausbeute des für die W-Zerstäubung entscheidenden Elements C, die sich gemäß

$$Y_{C \rightarrow W} = \frac{\Gamma_W}{\Gamma_C} - Y_{D \rightarrow W} \frac{\Gamma_D}{\Gamma_C} - Y_{O \rightarrow W} \frac{\Gamma_O}{\Gamma_C} \quad (108)$$

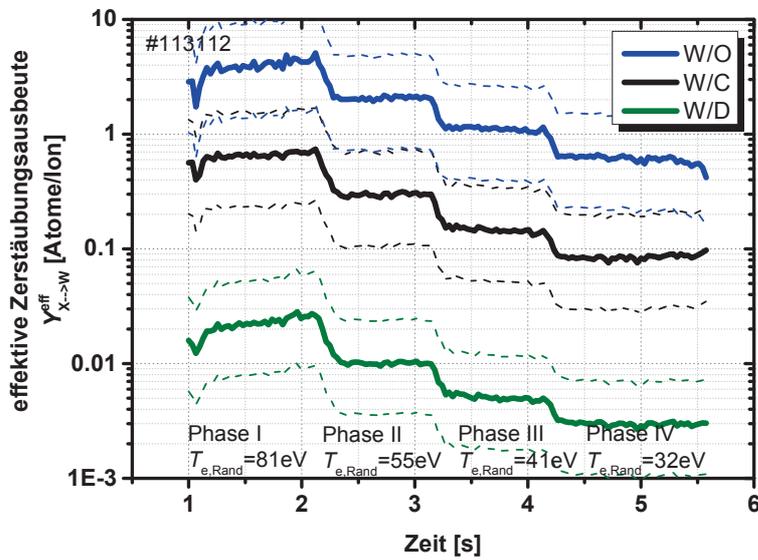
$$\approx \frac{\Gamma_W}{\Gamma_C} \quad (109)$$

ergibt, in guter Näherung beim W/C-Flussverhältnis aus Abb. 110(b).

In Abbildung 111 sind die gemessenen Ausbeuten $Y_{C \rightarrow W}$, die aus dem Diagramm in Abb. 110(b) extrahiert sind, gegen die Randschicht-Elektronentemperatur aufgetragen



(a)



(b)

Abbildung 110: (a) Verhältnis der Teilchenflüsse relativ zum D-Fluss (analog zu Abb. 28(b)). (b) Zerstäubungsausbeute $Y_{X \rightarrow W}$ als Verhältnis des W-Flusses zum D-Fluss und dem der Verunreinigungen.

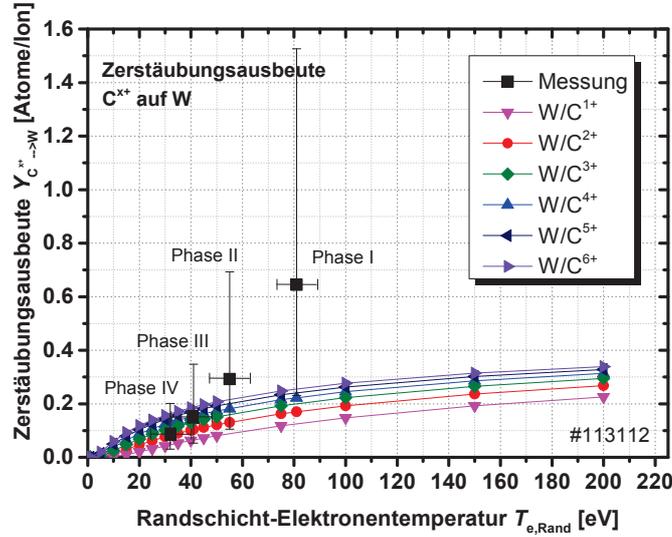


Abbildung 111: Vergleich der gemessenen Ausbeuten $Y_{C \rightarrow W}$, die aus dem Diagramm in Abb. 110(b) extrahiert sind (schwarze Quadrate), aufgetragen gegen die Randschicht-Elektronentemperatur. Bunt dargestellt sind die Ausbeuten, die sich in Abhängigkeit des Ladungszustandes für C errechnen lassen [34].

und mit den Ausbeuten verglichen, die sich in Abhängigkeit des Ladungszustandes für C errechnen lassen [34]. Dabei zeigt sich zum einen, dass sich für alle Phasen eine Übereinstimmung mit den Rechnungen findet. Zum anderen lässt der Vergleich den Rückschluss zu, dass tendenziell eher die Verunreinigungen mit höherer Ladung für die Zerstäubung verantwortlich sind. Hierbei zu berücksichtigen ist allerdings, dass das aufgenommene C II (426.73 nm)-Licht nicht nur den Recycling-Fluss des aus dem Plasma stammenden C-Flusses als Ursprung hat, sondern ein Anteil auch vom benachbarten C-Teil des Limiters stammt, dessen erodierte C-Ionen auch zur W-Hälfte transportiert werden [11]. Mit einer Selbstzerstäubungsausbeute $Y_{C \rightarrow C} \approx 0.1$ [19] für die Erosion vom C des Limiters durch das einschlagende C aus dem Plasma lässt sich jedoch der C-Anteil, der von der benachbarten C-Hälfte stammt, in der Größenordnung von etwa 10% abschätzen. Dieses C liegt jedoch noch in einer niedrigeren Ionisationsstufe vor und trägt damit weniger zur Erosion bei. Damit ergibt sich ein systematischer Fehler, der die gemessene Kurve in Abb. 111 um maximal 10% nach oben verschiebt.

Das effektive Flussverhältnis Γ_W/Γ_D aus Abb. 110(b) weicht im vorliegenden Temperaturbereich um Größenordnungen von der reinen Zerstäubungsausbeute $Y_{D \rightarrow W} \approx 0.0001$ ab. In Abb. 112 ist der Vergleich von W/D-Flussverhältnissen in Abhängigkeit der Temperatur, wie sie unter unterschiedlichen Plasmabedingungen an TEXTOR, ASDEX Upgrade und JET gemessenen wurden, dargestellt [12], ebenso wie Berechnungen für unterschiedliche Verunreinigungskonzentrationen durch C und Beryllium (Be) (durchgezogene Linien). Hier ordnen sich die in Abb. 110(b) gezeigten Ausbeuten für W durch D sehr gut in die

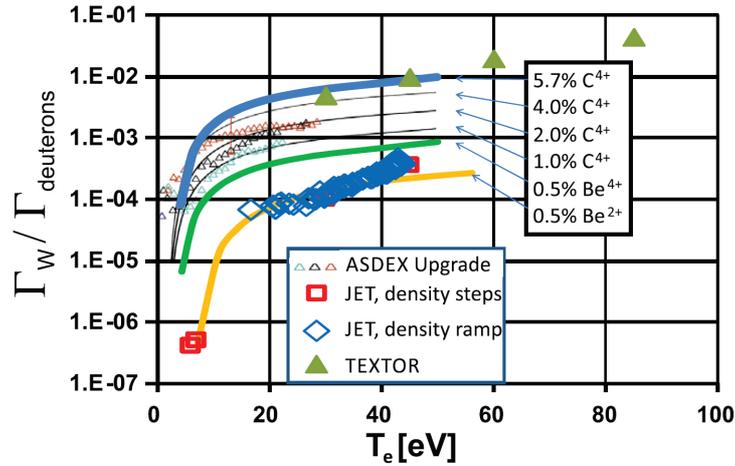


Abbildung 112: Vergleich von Zerstäubungsausbeuten $Y_{D \rightarrow W}$ in Abhängigkeit der Temperatur, wie sie unter unterschiedlichen Plasmabedingungen an TEXTOR, ASDEX Upgrade und JET gemessen wurden [12]. Berechnungen für unterschiedliche Verunreinigungskonzentrationen durch C und Beryllium (Be) sind durch die durchgezogenen Linien dargestellt.

gezeigten Verläufe ein. Die gezeigten Rechnungen weisen eine sehr gute Übereinstimmung mit den an TEXTOR ermittelten Flussverhältnissen für einen C-Anteil des Ladungszustandes 4+ auf, was genau den vorangegangenen Schlussfolgerungen entspricht. Weiter ist zu erkennen, wie das Flussverhältnis mit abnehmendem Verunreinigungsgrad – also zunehmender Reinheit des Plasmas – kleiner wird, sich die W-Zerstäubung somit reduziert. Während im TEXTOR- und im ASDEX-Plasma die W-Zerstäubung im Wesentlichen durch C bestimmt wird, ist in JET mit der neuen ITER-ähnlichen Wand (JET-ILW [53]) bestehend aus W und Be das Be das entscheidende Element. Bedingt durch die im Vergleich geringere Masse ($M_{\text{Be}} = 9 \text{ u}$), findet sich auch eine geringere Zerstäubung, wobei sich unterhalb von 20 eV ein starker Abfall des Flussverhältnisses zeigt, da hier die zur W-Zerstäubung notwendige Schwellenenergie unterschritten wird.

Es findet sich hier letztlich über die Absolutkalibration der spektroskopischen Systeme und die experimentelle Bestimmung der Photoeffizienzen als Konversionsfaktoren mittels der WF_6 -Injektion eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Die Anwendung der gemessenen $E_{\text{ph}}^{\text{WF}_6 \rightarrow \text{W}}$ auf W-Erosionsexperimente zeigt konsistente Ergebnisse, womit die Nutzbarkeit im Rahmen der untersuchten Dichte- und Temperaturbereiche bewiesen ist. Die in der WF_6 -Injektion bestimmten Photoeffizienzen sind identisch mit denen für neutrales zerstäubtes W. Umgekehrt ist damit auch bestätigt, dass die Besetzung des Niveaus $5d^5(^6S)6p^7P^{\circ} 4$, von dem die W I (400.88 nm)-Linie ausgeht, für W, entstanden aus der Dissoziation von WF_6 , sowie für zerstäubtes W gleich ist.

12 Zusammenfassung der Resultate

Die Kernfusion stellt hinsichtlich der Energiekosten, der Rohstoffgewinnung und der Umweltverträglichkeit einen attraktiven Kandidaten zur Deckung der Grundlast in einem zukünftigen Energiemix dar. Ein kritischer Aspekt bzgl. der Kosten der Energieerzeugung ist dabei die Lebensdauer der ersten Wand. Wolfram wird aufgrund seiner hohen Schmelztemperatur, der geringen Zerstäubung durch das Plasma und der geringen Tritium-Einlagerung [16,60] nicht nur in gegenwärtigen Fusionsexperimenten als Wandmaterial verwendet, sondern ist auch als Materialwahl für zukünftige Maschinen wie ITER [4] und DEMO [80] wieder in den Fokus gerückt. Dennoch stellt Wolfram durch seine Energieabstrahlung im Plasma und der damit verbundenen Kühlung des Zentralplasmas einen kritischen Faktor für den Betrieb eines Fusionsreaktors dar [33], weshalb die Interaktion mit dem Plasma gründlich zu untersuchen ist.

Die Emission der Linienstrahlung der Wolfram-Atome im Plasma und somit der Verlauf der Emissionsprofile wird charakterisiert durch Anregung und Ionisation. Quantitativ lässt sich die Ionisation in Form der Ionisationsratenkoeffizienten beschreiben. Die Kenntnis der Ionisationsratenkoeffizienten ist notwendig zur Interpretation spektroskopischer Daten, insbesondere zur Bestimmung der durch Erosion erzeugten Wolfram-Flüsse ins Plasma. Bisher wurden die Ionisationsratenkoeffizienten im Fall des neutralen Wolfram-Atoms außer für den Bereich unter 20 eV [88] nicht experimentell bestimmt. Für höhere Temperaturen liegen ausschließlich unsichere theoretische (z.B. [22,89]) bzw. semi-experimentelle [54] Daten vor. In der vorliegenden Arbeit wurden daher erstmals die Ionisations- und Emissionsprozesse von Wolfram durch Wolfram-Zerstäubung im Plasmatemperaturbereich zwischen (41 ± 8) eV und (81 ± 8) eV am Tokamak TEXTOR untersucht.

Während dieses Zerstäubungsexperiments, bei dem ein plasmabegrenzendes Element aus Wolfram dem Plasma ausgesetzt wurde, konnten **Emissionsprofile der W I (400.88 nm)-Linie gemessen** werden. Diese weisen den typischen exponentiellen Abfall auf, der durch die Ionisation der neutralen Wolfram-Atome verursacht wird. Darüber hinaus **steigt die Emission jedoch im Bereich von 1 bis 2 mm vor der Oberfläche zunächst auf ein Maximum an**, bevor sie in den exponentiellen Abfall übergeht. Mit Hilfe eines **analytischen Stoß-Strahlungs-Modells** ist eine Interpretation dieses Phänomens möglich. Durch die **Einführung einer Relaxationszeit bis zum Erreichen des Gleichgewichts in der Besetzung des oberen Niveaus j der W I (400.88 nm)-Linie** kann der Anstieg der Emissionsprofile reproduziert werden. Diese Relaxationszeit beinhaltet sowohl die Anregung des emittierenden oberen Niveaus j als auch die vorgelagerte Besetzung des Ausgangsniveaus i . Dies ist erklärbar mit dem Termschema des neutralen Wolfram-Atoms [58]. Der Gleichgewichtszustand zwischen dem emittierenden Niveau und dem Ausgangsniveau wird erst mit signifikanter Verzögerung erreicht, sodass das Emissionsmaximum erst wenige mm von der Wolframquelle entfernt auftritt. Da auch das Ausgangsniveau i zuerst besetzt werden muss, folgt daraus direkt, dass der gesamte Anregungsvorgang nicht durch einen einzigen Anregungsratenkoeffizienten $X_{ij} := \langle v_e \sigma_{ij} \rangle$ (mit der Elektronengeschwindigkeit v_e und dem Stoßanregungsquerschnitt σ_{ij}) alleine beschrieben werden kann, sondern es liegt eine Summe von vorgelagerten

Prozessen vor, was in der ermittelten Relaxationszeit seine experimentelle Entsprechung findet.

In einem weiteren Schritt wurden die Emissionsprofile zur detaillierteren Interpretation durch ein in Rahmen dieser Arbeit entwickeltes **Simulationsprogramm unter Benutzung der Monte-Carlo-Methode** reproduziert und mit gemessenen Profilen verglichen. Die gemessenen Dichte- und Temperaturprofile des Plasmas, die Geschwindigkeitsverteilung der zerstäubten Wolfram-Atome sowie die gemessenen Emissionsprofile stellen die Eingabewerte dar. Als Resultat liefert das Programm simulierte Emissionsprofile, die mit den gemessenen verglichen werden. Ein freier Parameter dabei ist die Relaxationszeit. Die beste Anpassung der simulierten Emissionsprofile an die gemessenen ergibt sich für eine **Relaxationszeit zwischen 0.5 und 1 μ s**. Die Gesamtzahl der emittierten Photonen wird in der Simulation auf Grundlage der Photoemissionsratenkoeffizienten der W I (400.88 nm)-Linie errechnet, die außerhalb dieser Arbeit mit dem Stoß-Strahlungs-Code GKU [6, 37] bestimmt wurden. Ermittelt wurden diese unter der Annahme des *Gleichgewichtszustandes* des emittierenden Niveaus j . Unter den Plasmabedingungen des Zerstäubungsexperiments mit Temperaturen von (41 ± 8) eV bis (81 ± 8) eV und Dichten von $(6.2 \pm 1.6) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bis $(10.0 \pm 2.5) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ am Emissionsmaximum führt die verzögerte Besetzung in den Gleichgewichtszustand zu einer Überschätzung der emittierten Photonen um im Mittel maximal 40%.

Darüber hinaus wurden in diesem Zerstäubungsexperiment mit der vorliegenden Arbeit **erstmalig experimentell die Ionisationsratenkoeffizienten $S := \langle v_e \sigma_{\text{Ion}} \rangle$ für W^0** (mit dem Stoßionisationsquerschnitt σ_{Ion}) in Abhängigkeit der Elektronentemperatur am Ort des Emissionsmaximums mit Werten zwischen (41 ± 8) eV und (81 ± 8) eV bestimmt. Dabei wurden die in der Simulation benutzen Ionisationsratenkoeffizienten als freie Parameter angepasst, bis die beste Übereinstimmung der simulierten Emissionsprofile mit den gemessenen Profilen erreicht war. Als Ausgangsdaten wurden die Ionisationsratenkoeffizienten verschiedener Quellen getestet und miteinander verglichen. Die Simulation liefert die beste Übereinstimmung mit den gemessenen Profilen für **Ionisationsratenkoeffizienten, die mit den Lotz-Daten übereinstimmen** [54]. Diese wurden auf Grundlage der semi-empirischen LOTZ-Formel [48] ermittelt. Der Vergleich mit Datensätzen aus Rechnungen des ATOM-Codes [89] sowie der ADAS-Datenbank [22] zeigt, dass (bei einer Plasmatemperatur von 50 eV) die ATOM-Ionisationsratenkoeffizienten einen Faktor 3, die ADAS-Ionisationsratenkoeffizienten einen Faktor 2 zu hoch liegen. Die Unsicherheiten, die sich bei der Angabe der LOTZ-Daten als dem passendsten Datensatz für die Simulation ergeben, belaufen sich bei Betrachtung der Konfidenzbänder für Plasmadichte und -temperatur nach unten auf -60%, nach oben auf +20%, womit sowohl die ADAS- als auch die ATOM-Daten außerhalb des Fehlerintervalls der Simulation liegen. Daneben zeigt sich, dass die in der Simulation ermittelten Ionisationsratenkoeffizienten mit jenen übereinstimmen, die in erster experimenteller Näherung aus der Abfalllänge des Emissionsprofils bestimmt werden können (ohne einen Einbezug der Relaxationszeit). Dies zeigt, dass die Bestimmung der Ionisationsratenkoeffizienten aus der Abfalllänge bereits eine einfache Möglichkeit darstellt und sowohl die Geometrie der Probe als auch die der Emissionswolke im untersuchten Experiment einen vernachlässigbaren Einfluss auf die

Abfalllänge hat.

Die notwendige Erweiterung der Datenbasis bzgl. des neutralen Wolframs begründet auch das Interesse an einer möglichst einfach handhabbaren Wolfram-Quelle zur Kalibration, bei der die Menge des ins Plasma eingebrachten Wolframs steuerbar sein soll. Eine solche Quelle konnte durch die Injektion von WF_6 an TEXTOR realisiert werden. Das mittels der WF_6 -Injektion ins Plasma eingebrachte Wolfram wurde auf Vergleichbarkeit mit aus einem Zerstäubungsprozess stammenden Wolfram-Atomen geprüft.

Dabei wurde die WF_6 -Injektion erstmalig **zur Ermittlung von Konversionsfaktoren – den sogenannten Photoeffizienzen – zur Berechnung von Wolfram-Flüssen aus spektroskopisch gemessenen Photonenströmen** benutzt. So konnten in Abhängigkeit von Temperatur und Dichte Photoeffizienzen für die Linien

- W I (400.88 nm)
- W I (429.46 nm)
- W II (434.81 nm)
- W I (488.68 nm)
- W I (522.47 nm)

bestimmt werden. Für die gegebenen Temperatur-Dichte-Kombinationen im Bereich von (20 ± 5) eV bis (82 ± 5) eV bzw. von $(2.2 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bis $(6.8 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ zeigen sich die Verläufe der Photoeffizienzen aller untersuchten Linien bis auf W II (434.81 nm) innerhalb der Messunsicherheiten als konstant bzgl. der Abhängigkeit von Temperatur und Dichte. Diese Temperatur- und Dichtewerte liegen im Bereich dessen, was auch für den ITER-Divertor während ELM-Ereignissen zu erwarten ist [12, 21, 47, 71]. Die Temperaturunabhängigkeit stellt einen großen Vorteil zur Anwendung der Messmethode in ITER dar, da die Photoeffizienzen im untersuchten Temperaturintervall zwischen 20 eV und 82 eV ohne Berücksichtigung der vorliegenden Plasmatemperatur angewendet werden dürfen. Aus den Vergleichen der Linienverhältnisse ergibt sich, dass sich die relativen Niveaubesetzungen der W I-Linien bei 400.88 nm sowie bei 429.46 nm sowohl für das WF_6 -Injektionsexperiment als auch für das Zerstäubungsexperiment gleich verhalten. Darüber hinaus sind sie konstant über den gesamten Temperatur- und Dichtebereich. **Für die W I (400.88 nm)-Linie ergibt sich eine über den Messbereich gemittelte Photoeffizienz von $\langle E_{\text{Ph}}^{\text{WI}(400.88 \text{ nm})} \rangle = 49 \pm 16$.**

Zum Test der Anwendbarkeit der gefundenen Photoeffizienzen wurden unter deren Benutzung an TEXTOR **Zerstäubungsausbeuten von Wolfram durch Kohlenstoff ermittelt. Diese stimmen gut mit den Zerstäubungsausbeuten aus Laborexperimenten [19] und Rechnungen aus [34] überein.** Diese Konsistenz ist die experimentelle Bestätigung dafür, dass die **durch die WF_6 -Injektion ermittelten Konversionsfaktoren mit den Photoeffizienzen für zerstäubtes Wolfram identisch sind.**

Diskussion der Übertragbarkeit Zur Nutzung der in TEXTOR bestimmten Photoeffizienzen in anderen Maschinen muss geprüft werden, ob die dort vorliegenden Plasmabedingungen mit denen in TEXTOR vergleichbar sind. Die Simulation konnte zeigen, dass sich die Photoeffizienzen, die für die in TEXTOR vorliegenden Temperatur- und Dichteprofile bestimmt wurden, **um maximal 20% (bei kleinen Dichten) von Photoeffizienzen in homogenen Plasmen gleicher Temperatur und Dichte (gemessen am Maximum des Emissionsprofils) unterscheiden**. Hierbei beträgt die Änderung in Temperatur und Dichte über die Breite des Emissionsprofils hinweg 10%. Die Abweichungen nehmen mit Abnahme der Dichte zu, da die Teilchen dann einen größeren Dichte- und Temperaturgradienten durchlaufen. Somit können die mittels WF_6 -Injektion an TEXTOR bestimmten Photoeffizienzen auch an anderen Experimenten angewandt werden. Die Voraussetzung ist, dass sich die Änderung der Plasmaprofile im beschriebenen Rahmen bewegt und die Kombination der Absolutwerte von Dichte und Temperatur vergleichbar ist.

Indizien für die Geschwindigkeit von Wolfram-Atomen freigesetzt durch die Dissoziation von WF_6 Die gemessenen WF_6 -Emissionsprofile wurden hinsichtlich der Geschwindigkeit der Wolfram-Atome nach dem WF_6 -Dissoziationsprozess analysiert. Es zeigt sich, dass die Wolfram-Atome **durch die WF_6 -Dissoziation an Geschwindigkeit gegenüber den WF_6 -Molekülen gewinnen und somit nicht-thermisch vorliegen**. Die Wolfram-Geschwindigkeit nach der Dissoziation muss mindestens 250 m/s betragen, um die gemessenen Emissionsprofile annähernd zu reproduzieren und Werte für S zu erhalten, die mit den anderen Messungen übereinstimmen. Dies entspricht pro Wolfram-Atom einem Gewinn an kinetischer Energie durch die Dissoziation von 0.01 eV. Die Geschwindigkeit ist damit um einen Faktor 8.5 geringer als die wahrscheinlichste Geschwindigkeit zerstäubter Wolfram-Atome mit ca. 2122 m/s. Zur Beschreibung der Dissoziation in der Monte-Carlo-Simulation wurde ein **Dissoziationsratenkoeffizient** eingeführt, der sich in Kombination mit dieser Geschwindigkeit zu $D_{\text{WF}_6} = 3 \times 10^{-8} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ ergibt. Aufgrund der stark vereinfachten Simulation der WF_6 -Dissoziation kann dies aber nur einen ersten Orientierungswert darstellen. Für die Anregungszeit im WF_6 -Fall wurde eine Relaxationszeit von 10 μs gefunden. Da die gemessenen Profile zumindest für verhältnismäßig große Dichten und Temperaturen auch mit anderen Parameterkombinationen annähernd reproduziert werden können, muss diese Parameterkombination jedoch kritisch betrachtet werden. Hier ist eine weitere detaillierte Untersuchung und Simulation des Dissoziationsprozesses gefragt. Damit ist die WF_6 -Injektion aufgrund der großen Unsicherheiten vor allem in der Geschwindigkeit der aus der Dissoziation entstehenden Wolfram-Atome auch nur bedingt geeignet zur Bestimmung von lokalen Ionisationsratenkoeffizienten, im Gegensatz zu den durchgeführten Zerstäubungsexperimenten.

Literatur

- [1] Eighth Carolus Magnus Summer School on Plasma and Fusion Energy Physics. *Transactions of Fusion Science and Technology*, 53 No 2T, Feb. 2008:1–483, 2008.
- [2] *Erneuerbare Energien: Innovation durch Forschung, Jahresbericht 2013 zur Forschungsförderung*. Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi), <http://www.bmwi.de/BMWi/Redaktion/PDF/E/erneuerbare-energien-innovation-durch-forschung-jahresbericht-2013-zur-forschungsfoerderung.pdf>, 2014.
- [3] ADAS. ADAS503: PEC - graph and fit photon emissivity coefficients, <http://www-cfadc.phy.ornl.gov/adas/docs/idl-manual/chap6-03.pdf>, Februar 2015.
- [4] R. Aymar, P. Barabaschi, and Y. Shimomura. The ITER design, doi:10.1088/0741-3335/44/5/304. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 44(5):519, 2002.
- [5] K. Behringer, H.P. Summers, B. Denne, M. Forrest, and M. Stamp. Spectroscopic determination of impurity influx from localized surfaces. *Plasma Ph*, 31 No. 14:2059–2099, 1989.
- [6] I. Beigman, A. Pospieszczyk, G. Sergienko, I. Yu Tolstikhina, and L. Vainshtein. Tungsten spectroscopy for the measurement of W-fluxes from plasma facing components, doi:10.1088/0741-3335/49/11/006. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 49(11):1833, 2007.
- [7] I L Beigman, G Kocsis, A Pospieszczyk, and L A Vainshtein. The line emission of carbon and lithium beams in the plasma edge of TEXTOR, <http://stacks.iop.org/0741-3335/40/i=10/a=003>. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 40(10):1689, 1998.
- [8] K.L. Bell and et al. Atomic and Molecular Data for Fusion, Part I. Technical report, 1982.
- [9] S. Brezinsek. Persönliche Kommunikation mit S. Brezinsek.
- [10] S. Brezinsek. *Untersuchung von atomarem und molekularem Wasserstoff vor einer Graphitoberfläche in einem Hochtemperatur-Randschichtplasma*. PhD thesis, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 2001.
- [11] S. Brezinsek, D. Borodin, J.W. Coenen, D. Kondratjew, M. Laengner, A. Pospieszczyk, U. Samm, and the TEXTOR team. Quantification of tungsten sputtering at W/C twin limiters in TEXTOR with the aid of local WF6 injection, doi:10.1088/0031-8949/2011/T145/014016. *Physica Scripta*, 2011(T145):014016, 2011.

- [12] S. Brezinsek, JET-EFDA contributors, et al. Plasma-surface interaction in the Be/W environment: Conclusions drawn from the JET-ILW for ITER, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.12.007>. *Journal of Nuclear Materials*, 463:11–21, Aug 2015.
- [13] S. Brezinsek, A. Kreter, R. Ding, T. Hirai, A. Kirschner, V. Philipps, A. Pospieszczyk, U. Samm, B. Schweer, O. Schmitz, K. Sugiyama, T. Tanabe, Y. Ueda, and the TEXTOR team. Comparison of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ and $^{13}\text{CH}_4$ injection through graphite and tungsten limiters in TEXTOR, <http://stacks.iop.org/1402-4896/2009/i=T138/a=014022>. *Physica Scripta*, 2009(T138):014022, 2009.
- [14] S. Brezinsek, A. Pospieszczyk, G. Sergienko, Ph. Mertens, and U. Samm. Use of a High-Resolution Overview Spectrometer for the Visible Range in the TEXTOR Boundary Plasma. *Plasma and Fusion Research*, Volume 3, S1041, 2008.
- [15] S. Brezinsek, G. Sergienko, A. Pospieszczyk, Ph. Mertens, U. Samm, and P.T. Greenland. Characterization of the deuterium recycling flux in front of a graphite surface in the TEXTOR tokamak, <http://stacks.iop.org/0741-3335/47/i=4/a=003>. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 47(4):615, 2005.
- [16] R. Dux, V. Bobkov, A. Herrmann, A. Janzer, A. Kallenbach, R. Neu, M. Mayer, H.W. Müller, R. Pugno, T. Pütterich, V. Rohde, and A.C.C. Sips. Plasma-wall interaction and plasma behaviour in the non-boronised all tungsten ASDEX Upgrade, [doi:10.1016/j.jnucmat.2009.01.225](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.01.225). *Journal of Nuclear Materials*, 390-391(0):858–863, 2009. Proceedings of the 18th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Device Proceedings of the 18th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Device.
- [17] K.G. Dyll. Bond dissociation energies of the tungsten fluorides and their singly-charged ions: a density functional survey. *J. Phys. Chem.*, 1999.
- [18] W. Eckstein. Calculated sputtering, reflection and range values ipp-report ipp 9/132. Technical report, IPP Garching, 2002.
- [19] W. Eckstein, C. García-Rosales, J. Roth, and W. Ottenberger. Sputtering data. Technical report, IPP Garching, 1993.
- [20] EXELIS. IDL, <http://www.exelisvis.com/ProductsServices/IDL.aspx>, Februar 2015.
- [21] G. Federici, P. Andrew, P. Barabaschi, J. Brooks, R. Doerner, A. Geier, A. Herrmann, G. Janeschitz, K. Krieger, A. Kukushkin, et al. Key ITER plasma edge and plasma-material interaction issues, [doi:10.1016/S0022-3115\(02\)01327-2](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01327-2). *Journal of Nuclear Materials*, 313:11–22, 2003.

-
- [22] A. Foster. Resolved Specific Ion Data Collections, http://open.adas.ac.uk/detail/adf04/coparf%5D%5B74/arf40_ca%5D%5Bw0.dat, Mai 2009.
- [23] A. Geier, K. Asmussen, A. Bard, R. Neu, and K. Krieger. A sublimation probe for the injection of high-Z impurities into fusion devices, <http://dx.doi.org/10.1063/1.1149575>. *Review of Scientific Instruments*, 70(1):63–67, 1999.
- [24] A. Geier, H. Maier, R. Neu, K. Krieger, and the ASDEX Upgrade Team. Determination of the tungsten divertor retention at ASDEX Upgrade using a sublimation probe, <http://stacks.iop.org/0741-3335/44/i=10/a=302>. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 44(10):2091, 2002.
- [25] J. Greenwood. The correct and incorrect generation of a cosine distribution of scattered particles for monte-carlo modelling of vacuum systems, [http://dx.doi.org/10.1016/S0042-207X\(02\)00173-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0042-207X(02)00173-2). *Vacuum*, 67(2):217 – 222, 2002.
- [26] H.R. Griem. *Plasma Spectroscopy*. McGraw-Hill, 1964.
- [27] J.M. Hammersley and D.C. Handscomp. *Monte Carlo Methods*. Methuen And Co Ltd, 1975.
- [28] K. Heinloth. *Die Energiefrage*. Vieweg Verlag, 2003.
- [29] G. Hermanns. Bestimmung der Wasserstoffkomposition in der Randschicht eines Fusionsplasmas mittels eines hochauflösenden Kreuzdispersionsspektrometers. Master's thesis, Universität Duisburg-Essen, 2009.
- [30] D.L. Hildebrand. *J. Chem. Phys.*, 62, 1975.
- [31] Y. Hirooka, M. Bourham, J.N. Brooks, R.A. Causey, G. Chevalier, R.W. Conn, W.H. Eddy, J. Gilligan, M. Khandagle, and Y. Ra. Evaluation of tungsten as a plasma-facing material for steady state magnetic fusion devices, [doi:10.1016/S0022-3115\(06\)80022-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(06)80022-X). *Journal of Nuclear Materials*, 196-198(0):149 – 158, 1992. Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices Proceedings of the Tenth International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices.
- [32] R.K. Janev and D. Reiter. Collision processes of CH_y and CH+y hydrocarbons with plasma electrons and protons. *AIP PHYSICS OF PLASMAS*, 9, 2002.
- [33] A. Kallenbach, R. Neu, R. Dux, H.-U. Fahrbach, J.C. Fuchs, L. Giannone, O. Gruber, A. Herrmann, P.T. Lang, B. Lipschultz, C.F. Maggi, J. Neuhauser, V. Philipps, T. Pütterich, V. Rohde, J. Roth, G. Sergienko, A. Sips, and ASDEX Upgrade Team. Tokamak operation with high-Z plasma facing components, [doi:10.1088/0741-3335/47/12B/S16](https://doi.org/10.1088/0741-3335/47/12B/S16). *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 47(12B):B207, 2005.

- [34] U. Kögler and J. Winter. ERO-TEXTOR 3D-MonteCarlo Code for Local Impurity-Modeling in the Scrape-Off-Layer of TEXTOR, Version 2.0, <http://hdl.handle.net/2128/4458>. *Forschungszentrum Jülich*, Jül-3361.
- [35] M. Koltunov and M.Z. Tokar. Modification of local plasma parameters by impurity injection, <http://stacks.iop.org/0741-3335/53/i=6/a=065015>. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 53(6):065015, 2011.
- [36] D. Kondratyev, I. Beigman, and L. Vainshtein. Persönliche Kommunikation mit D. Kondratyev, I. Beigman.
- [37] D. Kondratyev, D. Borodin, A. Kirschner, S. Brezinsek, J.W. Coenen, M. Laengner, H. Stoschus, L. Vainshtein, A. Pospieszczyk, and U. Samm. Simulation of spectroscopic patterns obtained in W/C test-limiter sputtering experiment at TEXTOR, doi:10.1016/j.jnucmat.2013.01.066. *Journal of Nuclear Materials*, 438, Supplement(0):S351 – S355, 2013. Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices.
- [38] H.R Koslowski and H Soltwisch. Electron density and q profile measurements with the far-IR interferometer-polarimeter on the TEXTOR tokamak, [http://dx.doi.org/10.1016/S0920-3796\(96\)00683-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0920-3796(96)00683-7). *Fusion Engineering and Design*, 34-35:143 – 150, 1997. Fusion Plasma Diagnostics.
- [39] U. Kruenzi. *Entwicklung einer Heliumstrahldiagnostik zur Messung der Elektronendichte und -temperatur mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung*. PhD thesis, Heinrich Heine Universität Düsseldorf, 2007.
- [40] A.S. Kukushkin, H.D. Pacher, A. Loarte, V. Komarov, V. Kotov, M. Merola, G.W. Pacher, and D. Reiter. Analysis of performance of the optimized divertor in ITER, <http://stacks.iop.org/0029-5515/49/i=7/a=075008>. *Nuclear Fusion*, 49(7):075008, 2009.
- [41] M. Laengner, S. Brezinsek, J.W. Coenen, A. Pospieszczyk, D. Kondratyev, D. Borodin, H. Stoschus, O. Schmitz, V. Philipps, and U. Samm. Penetration depths of injected/sputtered tungsten in the plasma edge layer of TEXTOR, doi:10.1016/j.jnucmat.2013.01.187. *Journal of Nuclear Materials*, 438, Supplement(0):S865 – S870, 2013. Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices.
- [42] J.M. Lafferty. *Foundations of vacuum science and technology*. Wiley, 1998.
- [43] E. Lassner and W.-D. Schubert. *Tungsten - Properties, Chemistry, Technology of the Element, Alloys, and Chemical Compounds*. Springer ISBN 0-306-45053-4, 1999.
- [44] M. Lehnen. Untersuchungen der Plasmarandschichtstrukturim Tokamak TEXTOR-94 mittels der Heliumstrahldiagnostik. Technical report, Forschungszentrum Jülich, Institut für Plasmaphysik, EURATOM Association, Trilateral Euregio Cluster.

-
- [45] Air Liquide. Gas Encyclopaedia: WF6, Oktober 2012.
- [46] Air Liquide. WF6-Sicherheitsdatenblatt, Oktober 2012.
- [47] A. Loarte, B. Lipschultz, A.S. Kukushkin, G.F. Matthews, P.C. Stangeby, N. Asakura, G.F. Counsell, G. Federici, A. Kallenbach, K. Krieger, et al. Power and particle control, <http://dx.doi.org/10.1088/0029-5515/47/6/S04>. *Nuclear Fusion*, 47(6):S203, 2007.
- [48] Wolfgang Lotz. An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section, <http://dx.doi.org/10.1007/BF01325928>. *Zeitschrift für Physik*, 206(2):205–211, 1967.
- [49] D. MacKay. *Sustainable energy - without the hot air*. UIT, 2008.
- [50] Maplesoft. Maple, <http://www.maplesoft.com/products/maple/>, Februar 2015.
- [51] C.B. Markwardt. MPFITFUN for IDL, <http://www.physics.wisc.edu/~craigm/idl/down/mpfitfun.pro>, Februar 2015.
- [52] MathWorks. MATLAB, <http://de.mathworks.com/products/matlab/>, März 2015.
- [53] G. Matthews. JET ITER-like and wall-overview and experimental programme, dx.doi.org/10.1088/0031-8949/2011/T145/014001. 2015.
- [54] D. Naujoks, K. Asmussen, M. Bessenrodt-Weberpals, S. Deschka, R. Dux, W. Engelhardt, A.R. Field, G. Fussmann, J.C. Fuchs, C. Garcia-Rosales, S. Hirsch, P. Ignacz, G. Lieder, K.F. Mast, R. Neu, R. Radtke, J. Roth, and U. Wenzel. Tungsten as target material in fusion devices, <http://iopscience.iop.org/0029-5515/36/6/I01>. *Nuclear Fusion*, 36(6):671, 1996.
- [55] O. Neubauer, G. Czymek, B. Giesen, P.W. Hüttemann, M. Sauer, W. Schalt, and J. Schruff. Design features of the tokamak TEXTOR. *Fusion Science and Technology*, 47, 2005.
- [56] D. Nishijima, R. P. Doerner, M. J. Baldwin, A. Pospieszczyk, and A. Kreter. Experimental determination of S/XB values of W I visible lines, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3270108>. *Physics of Plasmas*, 16(12), 2009.
- [57] D. Nishijima, R. P. Doerner, M. J. Baldwin, A. Pospieszczyk, and A. Kreter. Erratum: Experimental determination of S/XB values of W I visible lines [Phys. Plasmas 16, 122503 (2009)], <http://dx.doi.org/10.1063/1.3532971>. *Physics of Plasmas*, 18(1), 2011.
- [58] NIST. NIST Atomic Spectra Database Lines Form, http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html, Februar 2015.
-

- [59] G. Van Oost, V. P. Bhatnagar, T. Delvigne, P. Descamps, F. Durodié, R. Koch, A. M. Messiaen, D. I. C. Pearson, P. E. Vandenplas, A. Vanderstraeten, R. Van Nieuwenhove, G. Van Wassenhove, R. R. Weynants, W. Kohlhaas, C. Stickelmann, A. Cosler, B. Giesen, B. Goerg, S. Haltrich, P. Huettemann, and M. Korten. The High-Power (3-MW) Long-Pulse (3-s) Radio-Frequency System for Ion Cyclotron Resonance Heating Experiments on TEXTOR. *Fusion Science and Technology*, 12:449–475, 1987.
- [60] V. Philipps. Tungsten as material for plasma-facing components in fusion devices, doi:10.1016/j.jnucmat.2011.01.110. *Journal of Nuclear Materials*, 415(1, Supplement):S2 – S9, 2011. Proceedings of the 19th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion.
- [61] V. Philipps, R. Neu, J. Rapp, U. Samm, M. Tokar, T. Tanabe, and M. Rubel. Comparison of tokamak behaviour with tungsten and low-Z plasma facing materials, doi:10.1088/0741-3335/42/12B/322. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 42(12B):B293, 2000.
- [62] M.S. Pindzola and D.C. Griffin. Electron-impact ionization of the tungsten atom, 10.1103/PhysRevA.46.2486. *Phys. Rev. A*, 46:2486–2488, Sep 1992.
- [63] G. Pintsuk. 4.17 - Tungsten as a Plasma-Facing Material , <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-08-056033-5.00118-X>. In Rudy J.M. Konings, editor, *Comprehensive Nuclear Materials*, pages 551 – 581. Elsevier, Oxford, 2012.
- [64] Atomic Physics For Hot Plasmas. *V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein*. Institute of Physics Publishing, 1993.
- [65] A. Pospieszczyk. Spectroscopy. Noch unveröffentlicht.
- [66] A. Pospieszczyk. Spectroscopic Diagnostics of Tokamak Edge Plasmas, <http://stacks.iop.org/1402-4896/2005/i=T119/a=013>. *Physica Scripta*, 2005(T119):71, 2005.
- [67] A. Pospieszczyk, H.L. Bay, P. Bogen, H. Hartwig, E. Hintz, L. Konen, G.G. Ross, D. Rusbuldt, U. Samm, and B. Schweer. Impurity sources in TEXTOR, [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115\(87\)90402-8](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115(87)90402-8). *Journal of Nuclear Materials*, 145:574 – 579, 1987.
- [68] A. Pospieszczyk, D. Borodin, S. Brezinsek, A. Huber, A. Kirschner, Ph. Mertens, G. Sergienko, B. Schweer, I.L. Beigman, and L. Vainshtein. Determination of rate coefficients for fusion-relevant atoms and molecules by modelling and measurement in the boundary layer of TEXTOR, doi:10.1088/0953-4075/43/14/144017. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 43(14):144017, 2010.
- [69] E. Rebhan. *Heißer als das Sonnenfeuer*. Piper, 1992.

-
- [70] J. Riesch. *Entwicklung und Charakterisierung eines wolframfaserverstärkten Wolfram-Verbundwerkstoffs*. PhD thesis, Technische Universität München, 2012.
- [71] J. Roth, E. Tsitrone, A. Loarte, Th. Loarer, G. Counsell, R. Neu, V. Philipps, S. Brezinsek, M. Lehnen, P. Coad, et al. Recent analysis of key plasma wall interactions issues for ITER, doi:10.1016/j.jnucmat.2009.01.037. *Journal of Nuclear Materials*, 390:1–9, 2009.
- [72] M. Rubel, V. Philipps, A. Huber, and T. Tanabe. Formation of Carbon Containing Layers on Tungsten Test Limiters, <http://stacks.iop.org/1402-4896/1999/i=T81/a=011>. *Physica Scripta*, 1999(T81):61, 1999.
- [73] U. Samm. Textor: A pioneering device for new concepts in plasma-wall interaction, exhaust, and confinement. *Fusion Science and Technology*, 47:73–75, 2005.
- [74] D.H. Sampson and H.L. Zhang. Use of the van regemorter formula for collision strengths or cross sections, 10.1103/PhysRevA.45.1556. *Phys. Rev. A*, 45:1556–1561, Feb 1992.
- [75] A.K. Sanyasi. Deposition And Qualification of Tungsten Coatings on Graphite Produced by Plasma Deposition in WF6. Master’s thesis, Erasmus Mundus Joint European Masters in Nuclear Fusion Science and Engineering Physics (FUSION-EP), 2010.
- [76] O. Schmitz, I.L. Beigman, L.A. Vainshtein, B. Schweer, M. Kantor, A. Pospieszczyk, Y. Xu, M. Krychowiak, M. Lehnen, U. Samm, B. Unterberg, and the TEXTOR team. Status of electron temperature and density measurement with beam emission spectroscopy on thermal helium at TEXTOR. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 50(11):115004, 2008.
- [77] Ch. Schueller. Overview of TEXTOR-94 Results with ECRH an High Resolution Diagnostics. In *28th EPS Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics - Madeira*, 2001.
- [78] B. Schweer. Limiter lock systems at TEXTOR: Flexible tools for plasma-wall investigation. *Fusion Science and Technology*, 47:138–145, 2005.
- [79] P.C. Stangeby. *The Plassma Boundary of Magnetic Fusion Devices*. IoP.
- [80] Derek Stork, Pietro Agostini, Jean-Louis Boutard, Derek Buckthorpe, Eberhard Diegele, Sergei L. Dudarev, Colin English, Gianfranco Federici, Mark R. Gilbert, Sehila Gonzalez, Angel Ibarra, Christian Linsmeier, Antonella Li Puma, Gabriel Marbach, Lee W. Packer, Baldev Raj, Michael Rieth, Min Quang Tran, David J. Ward, and Steven J. Zinkle. Materials R&D for a timely DEMO: Key findings and recommendations of the EU Roadmap Materials Assessment Group, doi:10.1016/j.fusengdes.2013.11.007. *Fusion Engineering and Design*, 89:1586

- 1594, 2014. Proceedings of the 11th International Symposium on Fusion Nuclear Technology-11 (ISFNT-11) Barcelona, Spain, 15-20 September, 2013.
- [81] Y. Suetsuga. *Vac Sci Technol A*, 14:245–250, 1996.
- [82] H.P. Summers. The ADAS User Manual (version 2.6), <http://www.adas.ac.uk/>, September 2014.
- [83] H.P. Summers, W.J. Dickson, M.G. O’Mullane, N.R. Badnell, A.D. Whiteford, D.H. Brooks, J. Lang, S.D. Loch, and D.C. Griffin. Ionization state, excited populations and emission of impurities in dynamic finite density plasmas: I. The generalized collisional-radiative model for light elements, doi:10.1088/0741-3335/48/2/007. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 48(2):263, 2006.
- [84] TEXTOR Team, the ICRH Team, D.M. Goebel, R.W. Conn, W.J. Corbett, K.H. Dippel, K.H. Finken, W.B. Gauster, A. Hardtke, J.A. Koski, W. Kohlhaas, R.T. McGrath, M.E. Malinowski, A. Miyahara, R. Moyer, A. Sagara, J.G. Watkins, and G. Wolf. ALT-II toroidal belt pump limiter performance in TEXTOR, [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115\(89\)90262-6](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115(89)90262-6). *Journal of Nuclear Materials*, 162-164:115–127, 1989.
- [85] P.R. Thomas, P. Andrew, B. Balet, D. Bartlett, J. Bull, B. de Esch, A. Gibson, C. Gowers, H. Guo, G. Huysmans, T. Jones, M. Keilhacker, R. Koenig, M. Lennholm, P. Lomas, A. Maas, F. Marcus, F. Nave, V. Parail, F. Rimini, J. Strachan, K-D. Zastrow, and N. Zornig. Observation of Alpha Heating in JET DT Plasmas, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.5548>. *Phys. Rev. Lett.*, 80:5548–5551, Jun 1998.
- [86] V. S. Udintsev, M. J. van de Pol, A. J. H. Donn, J. W. Oosterbeek, and A. Krämer-Flecken. New ECE diagnostics for the TEXTOR-94 tokamak, <http://dx.doi.org/10.1063/1.1309001>. *Review of Scientific Instruments*, 72(1):359–362, 2001.
- [87] R. Uhlemann and J. Ongena. Variation of injected neutral beam power at constant particle energy by changing the beam aperture of the TEXTOR neutral beam injector. *Fusion Technol.*, 32:42, 1999.
- [88] J. Steinbrink und G. Fußmann. Spektroskopische Untersuchungen von zerstäubtem Wolfram in einer linearen Plasmaanlage. Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Humboldt Universität zu Berlin I und Max-Planck Institut für Plasma-physik, Bereich Plasmadiagnostik, Diplomarbeit, 1997.
- [89] L. Vainshtein, I. Beigman, Ph. Mertens, S. Brezinsek, A. Pospieszczyk, and D. Borodin. Ionization of W atoms and W⁺ ions by electrons, doi:10.1088/0953-4075/44/12/125201. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(12):125201, 2011.

- [90] H. van Regemorter. Rate of collisional excitation in stellar atmospheres. *American Astronomical Society*, 136, 1962.
- [91] WolframAlpha. WF6, Oktober 2012.
- [92] A.F. Zinn. *The chemistry of metal CVD*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1994.

Danksagung

Mein herzliches Dankeschön an alle, die mich beim Erstellen dieser Arbeit unterstützt haben:

Prof. Dr. U. Samm für die Übernahme der Betreuung und die lange Begleitung dieser Arbeit sowie die Möglichkeit, in diesem faszinierenden und zukunftsweisenden Bereich der Physik gearbeitet zu haben.

Prof. Dr. G. Pretzler für die freundliche Übernahme des Korreferats.

Dr. S. Brezinsek für die Konzeption der Arbeit, die Hilfe bei der Planung und Durchführung der Experimente sowie den kritischen Blick auf Resultate und Interpretationen.

Dr. J.W. Coenen für ein allzeit offenes Ohr, die viele praktische Hilfe während der Experimente und das Durchdiskutieren der Ergebnisse. Besonders aber dafür, immer an den Abschluss der Arbeit geglaubt zu haben.

Dr. A. Pospieszczyk für das unermüdliche Interesse an meiner Arbeit, Deine Geduld und die unzähligen Stunden des Diskutierens und Korrekturlesens. Ohne Dich, Dein wertvolles Wissen und Deine freundschaftliche Ermutigung wäre diese Arbeit nicht beendet worden. Ich danke Dir.

Prof. Dr. L. Vainshtein und Prof. Dr. I. Beigman für ihre zur Verfügung gestellten Ionisations- und Photoemissionsratenkoeffizienten, sowie Dr. D. Kondratyev für die vielen Rechnungen und Erläuterungen bzgl. dieser Daten.

Dr. A. Kirscher für seinen erheiternden Sarkasmus und viel Zeit und Geduld während fruchtbarer Diskussionen und die vielen Erläuterungen zur Simulation von PWW-Prozessen.

Dr. O. Marchuk für viele Stunden der Diskussion, der Kritik, wichtige Beiträge zu meinem Verständnis von atomaren Anregungs- und Ionisationsprozessen und der Interpretation der Messergebnisse.

Prof. Dr. B. Unterberg für die Diskussionen bzgl. der PSI-2-Experimente und entscheidende Ideen zur Interpretation der TEXTOR-Ergebnisse.

Dr. G. Sergienko für die Diskussionen zur Durchführung von Absolutkalibrationen und Dr. D. Borodin für die Erläuterungen zur Umsetzung von Monte-Carlo-Simulationen.

Meine Mit-Doktoranden M. Zlobinski und Dr. N. Gierse für lange gemeinsame Stunden während demütigender Absolutkalibrationen und Dr. M. Reinhart für seine Unterstützung während der Experimente an PSI-2. N. Baumgarten, Dr. M. Matveeva und Dr. M. Hell-

wig für viele freundschaftliche Diskussionen und Dr. D. Matveev insbesondere für die Einführung in die Geheimnisse der 3D-Simulationen.

Die Techniker und Ingenieure des TEXTOR- und PSI-2-Teams, insbesondere K. Klören, H. Reimer, K.v. Bovert, W. Miller und A. Terra für ihre immer zuverlässige und rechtzeitige Arbeit, sowie Dr. B. Schweer für die Hilfe bei der Planung der PSI-2-Experimente.

Die PC-Gruppe, insbesondere Th. Gürth, S. Kirtz und H.T. Lambertz für ihre in vielen Notfällen und sogar am Wochenende schnelle Hilfe und Betreuung auch über meine Zeit im Forschungszentrum hinaus.

Unsere Freunden für aufmunternde Abende, sowie insbesondere der Familie Koof für nicht weniger aufmunternde Abende, aber auch den unterstützenden Zuspruch und die unbezahlbare Kinderbelustigung!

Meine Schwiegereltern für ihre erfrischende Art und Aufheiterung in vielen Situationen – und die kostbaren Getränke.

Meine Eltern für ihre Unterstützung auf vielfältigste Art in all der Zeit. Ihr habt einen großen Anteil an dieser Arbeit und sicherlich den entscheidenden Anteil an meiner Fähigkeit, beharrlich zu sein und das Ziel auf lange Sicht nicht aus den Augen zu verlieren. Dafür danke ich Euch aufs Herzlichste. Danke, dass Ihr da wart. Das hier ist auch Euer Verdienst.

Unsere belgische Rettungshündin Mera, die mich geschätzte drei Jahre meines Lebens gekostet, mir dafür aber zwei gegeben hat ...

Mein größtes Dankeschön geht an Dich, Ruth, die Du all die Zeit mit mir durchgestanden, mich begleitet und vor allem unterstützt hast. Mich ermutigt und mir in einer schweren Zeit mit bewundernswerter Stärke vieles abgenommen und mir immer wieder deutlich gemacht hast, was das wirklich Wichtige ist. Das seid Ihr. Unser Sonnenschein (und Gewitterwölkchen) Sora, unser Freuden-Troll Loki – vielleicht lest Ihr das hier irgendwann einmal und erfahrt, dass in jene Zeit, während derer diese Arbeit entstand, durch Euer Sein einige der schönsten und wichtigsten Momente meines Lebens gefallen sind. Und Du – der großartige Mensch, auf den ich bauen, an dessen Seite ich gehen und mit dem ich verheiratet sein darf.

Erklärung

Die hier vorgelegte Dissertation habe ich eingehändig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt. Die Dissertation wurde in der vorgelegten oder ähnlichen Form noch bei keiner anderen Institution eingereicht.

Ich habe bisher keine erfolglosen Promotionsversuche unternommen.

Marko Laengner, Düsseldorf, den