

# Hybridmodellierung der Anfangsphase der Zündung einer Gasentladung

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
von der Fakultät für  
Elektrotechnik und Informationstechnik  
der Universität Friderciana Karlsruhe

genehmigte

**Dissertation**

von

**Dipl.-Ing. Khaled Ben Yahia**  
aus Tunis

Referent:	Prof. Dr. H.P. Popp
Korreferent:	Prof. Dr. K. Höllig
Tag der Einreichung:	16.04.2002
Tag der mündlichen Prüfung:	16.05.2002

Karlsruhe 2002



# Inhaltsverzeichnis

Verwendete Abkürzungen und Symbole . . . . .	i
Abbildungsverzeichnis . . . . .	iv
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Zielsetzung . . . . .	2
1.3 Danksagung . . . . .	4
<b>2 Grundlagen der Gasentladung</b>	<b>5</b>
2.1 Die mikroskopischen Vorgänge in einer Gasentladung . . . . .	7
2.1.1 Die Emissionsprozesse, Startelektronen . . . . .	7
2.1.2 Die Gasprozesse . . . . .	9
2.2 Die Durchschlagsmodelle . . . . .	10
2.2.1 Das Townsend Modell . . . . .	10
2.2.2 Das Streamer Modell . . . . .	11
2.3 Das Paschengesetz . . . . .	12
2.3.1 Statistische Analyse der dynamischen Zündspannung . . . . .	14
<b>3 Netzgenerierung</b>	<b>16</b>
3.1 Voronoi-Diagramme . . . . .	17
3.2 Streifenbildung und Triangulation . . . . .	19
3.3 Behandlung der Unregelmäßigkeiten . . . . .	24
3.4 Relaxation und Glättung . . . . .	24
3.5 Nachdiskretisierung . . . . .	27
<b>4 Monte Carlo Simulation</b>	<b>29</b>
4.1 Motivation . . . . .	29
4.2 Modellbeschreibung . . . . .	32
4.3 Kombination mit der Feldberechnung . . . . .	35
4.4 Beispielrechnungen . . . . .	39
4.5 Einfluss der Stochastik auf die Gesamtentladung . . . . .	44

<b>5</b>	<b>Lösungsverfahren</b>	<b>47</b>
5.1	Die Finite Elemente Methode . . . . .	47
5.1.1	Grundlagen . . . . .	47
5.1.2	Einbringung der Randwerte . . . . .	51
5.1.3	Matrixspeicherung . . . . .	53
5.1.4	Lösung der Differentialgleichung . . . . .	54
5.2	Die Finite Volumen Methode . . . . .	57
5.2.1	Grundlagen . . . . .	58
5.2.2	Das duale Netz . . . . .	62
5.2.3	Kombination beider Lösungsverfahren . . . . .	62
5.2.4	Randbedingungen . . . . .	64
5.2.5	Wahl des Zeitschritts . . . . .	65
<b>6</b>	<b>Experimente</b>	<b>67</b>
6.1	Messungen zum Einfluß der Feldemission . . . . .	68
6.1.1	Meßaufbau . . . . .	69
6.1.2	Durchführung der Messungen . . . . .	71
6.1.3	Ergebnisse . . . . .	72
6.2	Aufbau zur Erfassung der Stromvervielfachung . . . . .	76
6.2.1	Aufbau des Meßkreises . . . . .	76
6.2.2	Durchführung der Messungen . . . . .	79
6.2.3	Ergebnisse . . . . .	80
<b>7</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>84</b>
7.1	Beispiel einer fehlgeschlagenen Entladung . . . . .	85
7.2	Beispiel einer erfolgreichen Lawinenentwicklung . . . . .	88
7.3	Beispiel einer Nachfolgelawine . . . . .	90
7.4	Durchschlagskriterium . . . . .	93
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>97</b>
<b>A</b>	<b>Anhang zur Feldemission</b>	<b>101</b>
A.1	Ziele der Untersuchung . . . . .	101
A.2	Rechenmethoden . . . . .	102
A.3	Modellbeschreibung . . . . .	104
A.4	Ergebnisse . . . . .	106
A.5	Zusammenfassung . . . . .	109
<b>B</b>	<b>Anhang zur Netzgenerierung</b>	<b>110</b>
B.1	Triangulation . . . . .	110
B.2	Glättung . . . . .	111
<b>C</b>	<b>Anhang zu FEM und FVM</b>	<b>114</b>

C.1 Mathematische Grundlagen . . . . .	114
Literaturverzeichnis . . . . .	115



# Verwendete Abkürzungen und Symbole

---

Bezeichnung	Bedeutung
A	Atom
A <sup>+</sup>	Kation
<i>d</i>	Abstand
<i>D</i>	Diffusionskonstante
<i>E</i>	Elektrische Feldstärke
e <sup>-</sup>	Elektron
h	Plancksches Wirkungsquantum
<i>i</i>	Stromamplitude
IzfP	Institut für zerstörungsfreie Prüfverfahren (Saarbrücken)
$\vec{j}$	Stromdichte
k	Boltzmannkonstante
m <sub>e</sub>	Elektronenmasse
N <sub>2</sub>	Stickstoff
<i>N</i>	Anzahl
<i>n<sub>e</sub></i>	Elektronendichte
<i>n<sub>p</sub></i>	Dichte der positiven Ionen

---

---

*Fortsetzung*

---

Bezeichnung	Bedeutung
$p$	Druck
$t$	Zeit
$\Delta t$	Zeitschritt
$T$	Temperatur
$U_d$	Durchschlagsspannung
UV	Ultraviolett (Wellenlängen von 380 nm bis 0,1 nm)
$v$	Geschwindigkeit
$W$	Arbeit, Energie
$\Delta W_A$	Austrittsarbeit
$W_e$	Elektronenenergie
$W_{\text{Fermi}}$	Fermienergie
$x$	Ortsvariable

---

---

**griechische Symbole**

---

Bezeichnung	Bedeutung
$\alpha$	(erster Townsendscher) Ionisierungskoeffizient
$\alpha_{\text{eff}}$	effektiver Ionisierungskoeffizient = $\alpha - \eta$
$\gamma$	(zweiter Townsendscher) Ionisierungskoeffizient
$\varepsilon$	Permittivität (Realteil)
$\varepsilon_0$	elektrische Feldkonstante
$\eta$	Rekombinationskoeffizient
$\mu$	Beweglichkeit
$\mu_e$	Elektronenbeweglichkeit
$\nu$	Frequenz einer Strahlung
$\rho$	Dichte
$\tau_e$	Zeitkonstante
$\Delta\Phi$	Potentialdifferenz
$\Omega$	Fläche

---

# Abbildungsverzeichnis

2.1	stationäre Strom-Spannungscharakteristik . . . . .	6
2.2	Potentialbarriere ohne und mit Anlegen eines elektrischen Feldes	8
2.3	Streamer Durchschlag: kathoden- und anodengerichteter Streamer . . . . .	12
2.4	Die Paschenkurve für Luft . . . . .	13
2.5	Häufigkeitsverteilung des Zündbedarfs . . . . .	15
3.1	Abschneiden von Bisektoren . . . . .	18
3.2	Bildung Voronoi-Diagramme . . . . .	19
3.3	Bildung Doppelemente . . . . .	20
3.4	Entfernung von Splintern . . . . .	20
3.5	Streifenbildung . . . . .	21
3.6	Das Delaunay Kriterium . . . . .	22
3.7	Abschneiden einer Ecke . . . . .	23
3.8	Triangulation eines Streifens . . . . .	23
3.9	Behandlung der Randknoten mit dem Grad 3 . . . . .	24
3.10	Behandlung der Randknoten . . . . .	25
3.11	Behandlung der Knoten mit dem Grad 4 . . . . .	25
3.12	Behandlung der Knoten mit dem Grad 3 . . . . .	26
3.13	Vertauschen von Kanten . . . . .	26
3.14	Nachdiskretisierung . . . . .	27
3.15	Ein Netz verschiedener Dichten . . . . .	28
4.1	Alternativen zur Beschreibung der Entladungsentwicklung . .	30
4.2	Stossquerschnitte . . . . .	34
4.3	Stosswahrscheinlichkeit . . . . .	35
4.4	MCS Ablauf . . . . .	36
4.5	Elektronenortungstechnik . . . . .	37
4.6	Entwicklung einer Elektronenlawine . . . . .	40
4.7	Entwicklung einer Elektronenlawine . . . . .	41
4.8	Elektronenzahl, linear und logarithmisch aufgetragen. . . . .	42

---

4.9	Verlauf der mittleren Energie . . . . .	43
4.10	links: Räumliche Teilchenverteilung der Elektronen und Ionen, Mitte: Elektronendichteverteilung, rechts: Dichteverteilung der positiven Ionen. . . . .	44
4.11	Vergleich der geometrischen Verteilung beider Lawinen . . . . .	45
4.12	Vergleich der Elektronenzahl . . . . .	46
5.1	Matrixstruktur . . . . .	52
5.2	Matrixinvertierung . . . . .	56
5.3	Kontrollvolumen und Diskretisierung . . . . .	59
5.4	Bildung des Dualnetzes . . . . .	63
5.5	Kombination von FEM und FVM . . . . .	64
5.6	Der Sekundärstrom . . . . .	66
6.1	Abhängigkeit der Zündfeldstärke vom Abstand . . . . .	68
6.2	Meßaufbau zur Bestimmung der Durchschlagsspannung . . . . .	70
6.3	Die Durchschlagsspannung in Abhängigkeit der Schlagweite für die Drücke $p = 10$ mbar und $p = 1$ bar verglichen mit [Win71] . . . . .	72
6.4	Erläuterung des Paschenminimums . . . . .	74
6.5	Zündfeldstärke in Abhängigkeit der Schlagweite bei Umgebungsdruck . . . . .	75
6.6	Vergleich zwischen den Messungen inner- und außerhalb der Druckkammer . . . . .	76
6.7	Vergleich der Zündspannung im $\mu\text{m}$ -Bereich für zwei Metalle unterschiedlicher Austrittarbeit . . . . .	77
6.8	Meßaufbau zur Erfassung der Stromvervielfachung . . . . .	78
6.9	Elektronik zur Stromverstärkung . . . . .	79
6.10	Stromvervielfachung kurz vor dem Durchschlag . . . . .	81
6.11	Lawinenbildung, die nicht zum Durchschlag führen . . . . .	82
6.12	Lawinenbildung, die zum Durchschlag führen . . . . .	83
7.1	Eingesetztes Netz für die durchgeführten Berechnungen . . . . .	85
7.2	Kontrollvolumen in der Nähe der Anode stark vergrößert . . . . .	86
7.3	Die deterministische Entwicklung der Elektronenlawinen einer fehlgeschlagenen Entladung: räumliche Verteilung der Elektronendichte. . . . .	86
7.4	Entwicklung der räumlichen Verteilung der positiven Ionen . . . . .	87
7.5	Verlauf der Potentiallinien . . . . .	88
7.6	Entwicklung der Elektronenlawine unter dem Einfluss einer Spannung oberhalb der Durchschlagsspannung . . . . .	89
7.7	Verlauf der Potentiallinien . . . . .	90
7.8	Auswirkung einer Nachfolgelawine . . . . .	91
7.9	Vergleich der geometrischen Verteilung beider Lawinen . . . . .	92

---

7.10	Durchschlagshäufigkeit in Abhängigkeit der angelegten Spannung . . . . .	93
7.11	Der typische Stromverlauf einer Townsend-Entladung . . . . .	95
A.1	Schematische Darstellung einer Superzelle . . . . .	104
A.2	Schematischer Verlauf des Potentials und der Valenzladungsdichte an der Oberfläche . . . . .	105
A.3	Einfluss der Vakuumdicke auf den Potentialverlauf . . . . .	106
A.4	Adsorptionsmöglichkeiten . . . . .	107
A.5	Austrittsarbeit in Abhängigkeit der adsorbierten Monolageelemente . . . . .	108
B.1	Illustration des Satzes . . . . .	111
B.2	zum Beweis der Existenz einer einzigen Lösung in der Gleichung B.1 . . . . .	112
B.3	Ellipseneigenschaft . . . . .	113

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Motivation

Die steigenden Anforderungen, bedingt durch den Umweltschutz, erfordern heute wirtschaftlichere Verbrennungsmotoren mit geringerer Schadstoffemission. Durch die hohen Sicherheitsstandards und die komfortable Ausstattung werden die modernen Automobile schwerer, welches einen zusätzlichen Energieverbrauch mit sich bringt. Um den Verbrauch auf der Gegenseite zu senken, muss die Energie besser genutzt werden, indem der Wirkungsgrad der Antriebsaggregate verbessert wird. Um diesen hohen Anforderungen gerecht zu werden, wird der Verbrennungsprozess in einem modernen Motor durch eine Vielzahl von Sensoren überwacht und stetig optimiert.

Die Zündkerze stellt bei dem fremdgezündeten Otto-Motor ein wichtiges Glied in diesem Verbrennungsprozess dar. Für eine optimale Verbrennungseinleitung muss sich zum Zündzeitpunkt ein stöchiometrisches Gemisch am Ort des Zündfunken befinden. Da dieses durch zyklische Schwankungen des Motors und Bauteiltoleranzen nicht immer gewährleistet ist, verspricht eine herkömmliche Zündkerze mit nur ca. einem Millimeter Funkenstrecke keine sichere Entflammung. Es kann zu Zündaussetzern kommen, die einen unrunder Lauf des Motors und erhöhten Schadstoffausstoß zur Folge haben. Eine Vergrößerung der Funkenstrecke zur Erzielung einer besseren Entflammung hat zwangsläufig die Erhöhung des Zündbedarfs zur Folge. Dies ist nicht nur mit bautechnischen Problemen bei der Bereitstellung der Hochspannung in der Zündeinheit (Zündspule) verbunden, sondern auch mit einem erhöhten Isolationsaufwand.

Der Zündspannungswert wird aber auch von einer Reihe von Parametern z.B. Geometrie der Elektroden, Druck und Gaszusammensetzung

bestimmt. Eine Optimierung bzw. eine Herabsetzung des Zündbedarfs setzt ein tiefgehendes Verständnis der physikalischen Prozesse voraus, welche in der Gasentladung stattfinden. Eine entsprechende Dimensionierung der Zündanlage erfordert Kenntnisse über die Korrelation zwischen dem Zündspannungswert und den einschlägigen Zündparametern.

## 1.2 Zielsetzung

Der Zusammenhang zwischen dem Zündspannungswert und den Zündparametern soll in dieser Arbeit untersucht werden, indem mikroskopische Prozesse quantitativ erfasst werden. Es soll im einzelnen untersucht werden, in welcher Form die Zündparameter in diese Prozesse eingehen und in wie weit sie das Zündverhalten beeinflussen.

Der wichtigste Prozess hierbei ist die Ionisation, die zu einer Vermehrung der Ladungsträger im Gas und folglich zu der Erhöhung der Leitfähigkeit führt. Maßgebend für die Plasma bzw. Funkenentstehung sind dementsprechend das Vorhandensein und die Entstehung von Startladungsträgern, sowie deren Vermehrung. Die Funkenbildung kommt der selbständigen Erzeugung und Vermehrung der Ladungsträger gleich. Es soll folglich herausgefunden werden, unter welchen Bedingungen und mit welchen Einstellungen der Zündparameter eine Verselbständigung der Ladungsträgererzeugung ermöglicht wird.

Die Betrachtung der Vermehrung der Ladungsträger während der Entladungsentwicklung kann grundsätzlich auf zwei Ebenen erfolgen, erstens die mikroskopische und zweitens die makroskopische Ebene. Diese unterscheiden sich in der Behandlung der Ladungsträger und Erfassung deren kollektiven Verhaltens. Während auf der mikroskopischen Ebene die Ladungsträger individuell betrachtet werden, bilden diese in der makroskopischen Betrachtung die Elemente eines Kollektives (Kontinuum), welches sich homogen verhält.

In der mikroskopischen Modellvorstellung werden die Bahnen der Ladungsträger und die einzelnen Stöße jeglicher Art (Ionisation, Anregung, elastischer Stoß) nachgebildet. Das Verhalten des kollektiven Systems ist das Ergebnis des Zusammenwirkens einzelner Teilchen. Diese Beschreibung ist aus diesem Grund für eine beliebige Anzahl oder Verteilung der Ladungsträger möglich, da das Kollektiv keine Bedingungen an die einzelnen Teilchen stellt. Der Rechenaufwand wächst jedoch mit der Anzahl der im Modell einbezogenen Spezies und Teilchen.

Soll die Vermehrung der Ladungsträger makroskopisch erfasst werden, so ist dies mit der Modellvorstellung verbunden, dass die Ladungsträger (Systemgröße) das Gesamtsystem beeinflussen können und dass ein infinitesimale

Änderung der Systemgröße eine Änderung des Systems verursacht. Diese Kausalität kann demzufolge über Differentialgleichungen (DGL's) erfasst werden. Da die Ladungsträger der Systemgröße unterstellt sind, müssen diese einer Energieverteilung (z.B. Maxwell-Verteilung) gehorchen, damit sie sich über Dichten (Systemgröße) beschreiben lassen. Der Rechenaufwand ist hierbei unabhängig von der Anzahl der Ladungsträger, dieses Modell scheitert allerdings daran, dass sich die Anfangsphase, während der nur wenige Ladungsträger beteiligt sind, gemäß keiner Energieverteilung beschreiben lässt.

In dieser Arbeit wird ein Hybridmodell vorgestellt, welches die zwei o.g. Modelle vereint. So erfolgt zunächst eine mikroskopische Betrachtung der Entladungsentwicklung und folglich eine individuelle Verfolgung der Ladungsträger. Wachsen diese über eine bestimmte Anzahl hinaus, so dass sie sich mit einer Energieverteilung beschreiben lassen, werden sie danach durch Teilchendichten beschrieben. Die weitere Entwicklung der Entladung wird über Differentialgleichungen makroskopisch erfasst. Aus diesem Grund wird diese Arbeit wie folgt konzipiert:

Im zweiten Kapitel werden die Grundlagen der elektrischen Entladung sowie die darin vorkommenden mikroskopischen Prozesse vorgestellt. Es wird weiterhin auf die bisherigen Entladungsmodelle und Gesetzmäßigkeit eingegangen.

Auf Grund der komplizierten Kopplung der verschiedenen Differentialgleichungen ist eine geschlossene analytische Lösung nicht möglich. Eine numerische Lösung, die eine räumliche Diskretisierung voraussetzt, ist unumgänglich. Im dritten Kapitel wird die Art der Diskretisierung diskutiert und ein neues effizientes Verfahren für die Triangulierung vorgestellt. Ferner werden Techniken zur Verbesserung der Qualität der finiten Elemente (Dreiecke) erläutert.

Im vierten Kapitel erfolgt die mikroskopische Betrachtung sowie die damit verbundenen Rechentechniken. Es wird die Monte-Carlo-Technik vorgestellt und neue Techniken zur Lokalisierung der Ladungsträger sowie der abschließende Übergang zu der Dichtebeschreibung werden darin erörtert.

Sowohl für die erste als auch für die zweite Phase der Entladung müssen die elektrischen Felder ermittelt werden, indem die Potentialgleichung gelöst wird. Es handelt sich hierbei um eine elliptische DGL, die sich vorzugsweise mit der finite Elemente Methode (FEM) lösen lässt. Diese Methode wird im fünften Kapitel hergeleitet und ihre Implementierung vorgestellt.

In der zweiten Phase der Entladung (makroskopische Betrachtung) handelt es sich im wesentlichen um die Lösung von gekoppelten Transportgleichungen. Da die Erhaltungssätze beachtet werden müssen, ist es vorteilhaft, einen konservativen Lösungsansatz heranzuziehen. Diese Vorzüge weist die Finite Volumen Methode (FVM) auf. Diese Methode wird

vorgestellt und es werden bei der Implementierung Parallelen zu der FEM diskutiert.

Die Parameter dieser Transport-Gleichungen sind abhängig von der elektrischen Feldstärke und aus diesem Grund ist die simultane Lösung der Potentialgleichung unerlässlich. Bisherige Arbeiten [Ste89, Geo99, Mor88, Hug79, Hug88] versuchten das Problem mit dem FC-FEM (Flux-corrected-FEM) zu lösen, indem sie die DGL's einheitlich mit der FEM lösten und anschließend, um die Erhaltungssätze zu beachten, eine Korrektur der Flüsse durchführten. Um diesen Fehler zu beheben, werden beide Lösungsverfahren (FEM und FVM) kombiniert. Diese Kombination und die damit verbundenen Rechentechniken werden ebenfalls im fünften Kapitel vorgestellt.

Um die Simulation zu untermauern, wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, die im sechsten Kapitel ausführlich dargestellt werden.

Im siebten Kapitel „Ergebnisse“ werden Rechenbeispiele vorgestellt und ein Durchschlagskriterium wird erarbeitet. Es werden anschließend die Ergebnisse der Simulation mit den Ergebnissen der Experimente verglichen. Im achten Kapitel folgt eine Zusammenfassung mit Ausblick.

### 1.3 Danksagung

Allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich an dieser Stelle herzlich danken.

Ich möchte mich an dieser Stelle bei meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. H.-P. Popp für die Themenstellung und die Unterstützung meiner Arbeit und seine vielen Ideen, mit denen er dieser Arbeit immer wieder neue Wege aufgezeigt hat, bedanken.

Bei Herrn Prof. Dr. K. Höllig möchte ich mich für die bereitwillige Übernahme des Korreferats ebenfalls bedanken.

Dem Priv. Doz. Dr. C. Elsässer von MPI-MF sei für seine große Unterstützung in Fragen der Quantenmechanik hier ausdrücklich gedankt.

Des weiteren bedanke ich mich bei allen Mitarbeitern der Abteilung FV/FLO der Robert Bosch GmbH für ihre fortwährende Unterstützung, insbesondere Herrn Dr. Pfendtner und Herrn Dr. Grau für die angenehme Betreuung, die es mir persönlich ermöglichte, in einem wissenschaftlichen Umfeld aufzublühen. Meinen Kollegen Dipl.-Ing. P. Hartherz und Dipl.-Ing. L. Müller danke ich für die sehr angenehme Zusammenarbeit.

Stuttgart, im April 2002

Khaled Ben Yahia

## Kapitel 2

# Grundlagen der Gasentladung

Eine hochisolierende Gasstrecke kann unter dem Einfluss hoher elektrischer Feldstärken leitfähig werden. Die dazu notwendige Feldstärke korreliert stark mit einer Reihe von Parametern, z.B. Gaszusammensetzung, Druck und Geometrie der Funkenstrecke. Der makroskopische Übergang vom quasi unendlichen Widerstand zum hohen Leitwert läßt sich durch mikroskopische Prozesse erklären, die die Qualität und Schnelligkeit dieses Phasenüberganges weitgehend beeinflussen. Die Abbildung (2.1) zeigt eine typische stationäre Strom-Spannungscharakteristik einer Funkenstrecke mit einem Vorwiderstand. Diese läßt sich in zwei Bereiche unterteilen. Im ersten Bereich verläuft die Entladung unselbständig, wohingegen sie sich im zweiten weitgehend selbstständig. Die Selbständigkeit bezieht sich dabei auf die Erzeugung neuer Ladungsträger, die die Leitfähigkeit in der Gasstrecke aufrechterhalten. Im Bereich der unselbständigen Entladung geschieht dies über äußere Einwirkungen, die im zweiten Bereich eine untergeordnete Rolle spielen, da andere physikalische Prozesse einsetzen, die selbständig verlaufen.

Da dieser Übergang mit einer abrupten Abnahme des Widerstandes der Funkenstrecke verknüpft ist, wird der Spannungseinbruch (Zustandesänderung zwischen den Punkten A und B in der Abb. (2.1)) *elektrische Gasentladung* genannt. Dieser Übergang wird mit der Durchschlags- bzw. Zündspannung ( $U_D$ ) gekennzeichnet. Diese Arbeit beschäftigt sich im wesentlichen mit der unselbständigen Entladung sowie der Abhängigkeit der Durchschlagsspannung von den physikalischen Vorgängen in dieser Phase. Die selbständige Entladung wird zwecks Ausarbeitung von Kriterien angerissen, nach denen die Durchschlagsspannung bestimmt wird.

Der Bereich der unselbständigen Entladung besteht aus drei Phasen:

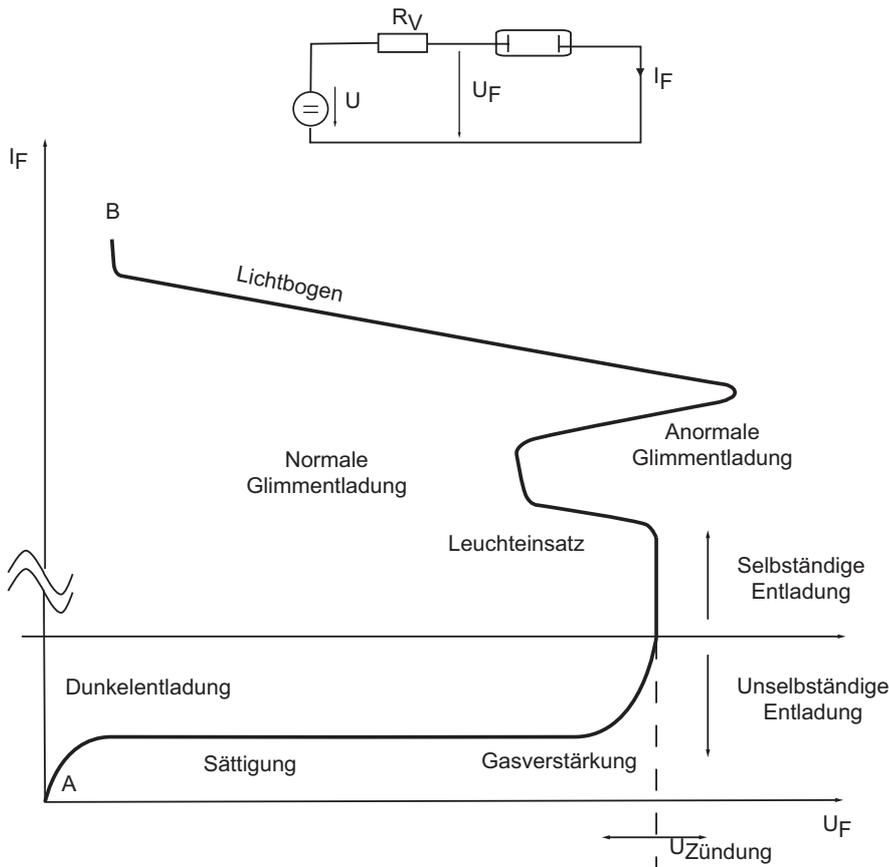


Abbildung 2.1: stationäre Strom-Spannungscharakteristik

**Die ohm'sche Phase** Die vorhandenen, sowie die durch äußere Einwirkungen neu erzeugten Ladungsträgern driften zu den entsprechenden Elektroden hin. Auf Grund der quasi konstanten Elektronendichte macht die Driftgeschwindigkeit den Strom aus. Da die Beweglichkeit der Elektronen bei den schwachen Feldern feldunabhängig ist, ist der Strom folglich proportional zum elektrischen Feld und somit zur Spannung.

**Die Sättigungsphase** Die Erzeugungsrate der Ladungsträgern in der Gasstrecke ist gleich der Rate derer, die auf die entsprechenden Elektroden prallen und neutralisiert werden.

**Die Phase der Gasverstärkung** Die Elektronen entnehmen dem elektrischen Potential soviel Energie, dass sie Gasteilchen ionisieren können. Es kommt hiermit zu einer Vermehrung der Ladungsträger. Es wird in diesem Zusammenhang von Gasverstärkung gesprochen.

Je nachdem mit welcher Anstiegsflanke die Spannung hochgefahren wird und abhängig davon, ob die Funkenstrecke abgeschirmt ist oder nicht, beeinflussen die 3 Phasen mehr oder minder den Wert der Durchschlagsspannung. Eine Entladung kommt zustande, indem sich ein Plasma zwischen beiden Elektroden ausbildet. Die Intensivierung gewisser Vorgänge, die im folgenden einzeln erörtert werden, mündet in einen elektrisch leitfähigen Kanal. In diesem Zusammenhang wurden die folgenden 3 Punkte in dieser Arbeit ausgiebig untersucht:

- Startelektronen
- die Stochastik der Lawinenbildung ausgehend von wenigen Elektronen
- das deterministische Wachstum der Lawine und die Transition zwischen Lawine und Kanal.

## 2.1 Die mikroskopischen Vorgänge in einer Gasentladung

### 2.1.1 Die Emissionsprozesse, Startelektronen

Ein Elektron heißt lawinenwirksam, wenn es die gesamte Strecke zur Verstärkung ausnutzt. Dies geht aus dem Hintergrund des exponentiellen lawinenartigen Wachstums der Ladungsträger hervor. Aus dem Grund werden die wirksamsten Startelektronen vorzugsweise aus der Kathode emittiert. Die wichtigsten Prozesse hierbei sind [Neu97, Yah98]:

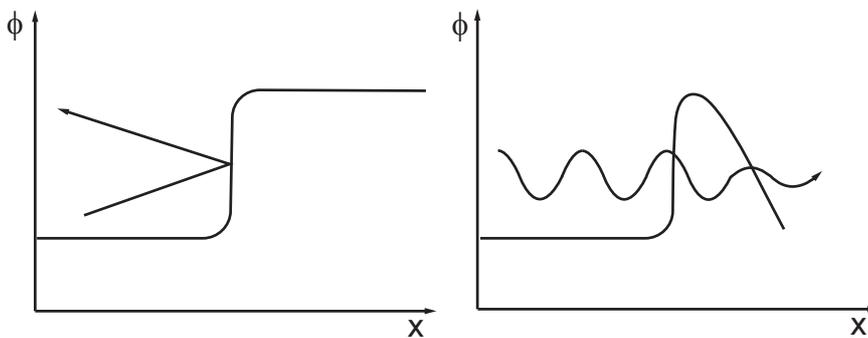
**Photoemission** Trifft ein Photon mit einer Energie  $h\nu$ , die größer als die Austrittsarbeit des Metalls  $\phi$  ist, auf die Kathode, kann es ein Elektron aus der Kathode herauslösen. Da eine typische Austrittsarbeit bei Metallen etwa  $\phi = 5$  eV beträgt, muss das Photon im UV-Bereich oder darüber liegen. An das Zündvolumen im Motor gelangt solche Strahlungen aufgrund der dicken Abschirmung durch die Motorzylinder nicht. Die Photoemission wird deshalb nur wirksam, wenn während der Lawinenbildung angeregte Teilchen sich unter Abgabe hochenergetischer Photonen abregen und diese die Kathode treffen, falls sie nicht vom Gas absorbiert werden. Kurz vor der Zündung herrschen im Motorraum aber hohe Drücke und die Absorptionswahrscheinlichkeit ist

proportional zum Druck. Die Photonenerzeugungsrate ist proportional zur Elektronendichte. Nach dem Prinzip der Lawinenbildung sind hohe Dichten nur kurz vor der Anode vorzufinden. Der weite Weg zur Anode erschwert diesen Prozess, da die Absorbtiionswahrscheinlichkeit  $P_A$  proportional zu  $e^x$ , wobei  $x$  der Abstand vom Erzeugungsort des Photons. Aus diesen Gründen wird dieses Phänomen in dieser Arbeit nicht weiter betrachtet.

**Thermoemission** Bei genügend hoher Temperatur besitzen einige Elektronen aufgrund der Verschmierung der Fermiverteilung im Metall eine kinetische Energie, die größer ist als die Austrittsarbeit. Da die Mittelelektrode der Zündkerze solche Temperaturen nicht erreicht, wird die Thermoemission ebenso nicht weiter betrachtet.

**Feldemission** Die Elektronen an der Grenzschicht (Metall-Gas) können die Potentialbarriere, deren Höhe der Austrittsarbeit entspricht, nicht ohne weiteres überwinden. Durch Anlegen eines äußeren Feldes wird diese Barriere zu einem Potentialberg, der von Elektronen quantenmechanisch durchtunnelt werden kann (Siehe Abbildung 2.3).

Die Feldemission wurde im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem



**Abbildung 2.2:** Potentialbarriere ohne und mit Anlegen eines elektrischen Feldes

MPI-MF in Stuttgart ausgiebig untersucht (Siehe A). Es hat sich herausgestellt, dass die Feldemission für die Startelektronen keinen wesentlichen Beitrag leisten kann.

**Sekundärelektronenemission** Befinden sich positive Ionen in der Nähe der Kathode, gelingt wenigen Elektronen aus den Valenz-Band (stark

gebunden) die Coulomb-Potentialbarriere zu tunneln. Um das System zu relaxieren, fällt ein Elektron aus dem Leitungsband hinunter und die dabei freigesetzte Energie kann im günstigsten Fall auf ein weiteres Elektron übertragen werden. Ist diese übertragene Energie größer als die Austrittsarbeit, wird das Elektron aus der Kathode emittiert. Der Prozess ist folglich abhängig von der Ionisierungsenergie der ionisierten Teilchen, der Austrittsarbeit, der Fähigkeit der Teilchen, Schwingungsenergien aufzunehmen. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron aus dem Valenz- und nicht aus dem Leitungsband zur Neutralisierung des positiven Ions variiert zwischen  $10^{-3}$  und 0.1 und wird über den zweiten Townsend'schen Koeffizienten ausgedrückt ( $\gamma_I$ ).

Diese Quelle der Startelektronen erklärt als einzige die Dynamik der Durchschlagsspannung.

### 2.1.2 Die Gasprozesse

Trifft ein Elektron auf ein neutrales Teilchen, kann es elastisch (ohne Energieverluste) oder inelastisch mit diesem stoßen. Im zweiten Fall kann es abhängig von der Energie des Elektrons zu einem Ionisationsprozess kommen.



Das Elektron kann das Atom auch elektronisch anregen

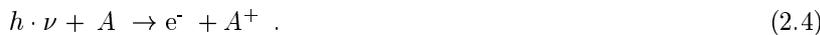


Die Vibrations- und Rotationsanregungen sind für die Gasentladung bis auf die Verluste der kinetischen Energie nicht von Belang. Diese Verluste spiegeln sich dennoch in der Driftgeschwindigkeit und Ionisationseffizienz wieder.

Handelt es sich bei dem Teilchen um ein elektroaffines Atom oder Molekül, kann es zu einer Anlagerung kommen:



Die angeregten Teilchen senden bei der Abregung Photonen, die andere Gaspartikel mit einer niedrigeren Ionisierungsenergie ionisieren können:



Hiermit lassen sich die wichtigsten Prozesse im Gas beschreiben. Im Zusammenspiel zwischen der Stosshäufigkeit und der Menge an Energie,

die ein Elektron zwischen den Stößen dem elektrischen Feld entnimmt, läßt sich eine mittlere Wahrscheinlichkeit der obigen Prozesse ermitteln. So beschreibt der 1. Townsend'sche Koeffizient  $\alpha$  die Anzahl der pro Längeneinheit Flugwegs erzeugten Elektronen-Ionen-Paare. Analog beschreibt  $\eta$  die Anzahl der Anlagerungsstöße entlang des Flugwegs. Diese Größen sind eine Funktion vom Verhältnis  $E/p$ , reduzierte Feldstärke genannt. Für die im weiteren beschriebenen Modelle ist der effektive Ionisierungskoeffizient  $\alpha^{eff} = \alpha - \eta$  von Bedeutung. In diesen Modellen wird die Rekombination zwischen einem Elektron und einem positiven Ion ( $e^- + A^+ \rightarrow A$ ) aufgrund der sehr geringen Stosswahrscheinlichkeit bzw. geringen Dichten vernachlässigt.

## 2.2 Die Durchschlagsmodelle

Es handelt sich hierbei im wesentlichen um zwei Modelle, die sich bei vielen Gasen bewährt haben. Sie veranschaulichen dennoch nur die Physik des Durchschlags im homogenen Feld. Der inhomogenen Fall wird hier nicht betrachtet, da dieser für die Zündkerze nicht relevant ist. Die Homogenität bezieht sich hierbei auf die Verteilung der elektrischen Feldstärke zwischen beiden Elektroden. Die Modelle decken auch quasi homogene Anordnungen ab, verlieren aber ihre Gültigkeit bei Elektrodenkonfigurationen, bei denen eine Ionisation vor der Anode aufgrund des schwachen Feldes ausgeschlossen ist. Die Modelle sind folglich für Konfigurationen gültig, in denen die Ionisation nicht räumlich lokal (Korona) ist.

Beide Modelle gehen von einer lawinenartigen Gasverstärkung (eine lineare differentielle Zunahme angenommen) aus. Dies hat zur Folge, dass die Ladungsträger ein tropfenförmiges Gebilde, Lawine genannt, erzeugen, wobei die Elektronen den Kopf der Lawine bilden, wohingegen die Ionen den Schwanz gestalten. Die Elektronenmultiplikation wird in diesen Modellen der Einfachheit halber über die gesamte Verstärkungsstrecke mit dem o.g. 1. Townsend'schen Koeffizienten erfasst.

### 2.2.1 Das Townsend Modell

Starten  $N_0$  Elektronen an der Kathode ( $x = 0$ ), ionisieren sie auf ihrem Weg Richtung Anode Gasteilchen. Dieser Vermehrungsprozess kann quantitativ festgehalten werden. Es befinden sich im Kopf der Lawine an der Stelle  $x$

$$N(x) = N_0 \exp \int_0^x (\alpha - \eta) dx = N_0 e^{\alpha^{eff} x} \quad (2.5)$$

Elektronen. Die Auflösung des Integrals ist aufgrund der angenommenen Feldhomogenität möglich. Es entstehen hierbei genauso viele Ionen, die Richtung Kathode wandern. Sie lösen mit einer Wahrscheinlichkeit  $\gamma_i$  neue Startelektronen ( $N_{\text{sec}}$ ) aus, die ihrerseits neue Elektronenlawinen starten. Damit diese Kette nicht unterbrochen wird, muss gelten:

$$N_{\text{sec}} \geq N_0. \quad (2.6)$$

Dies ist äquivalent zu der Bedingung:

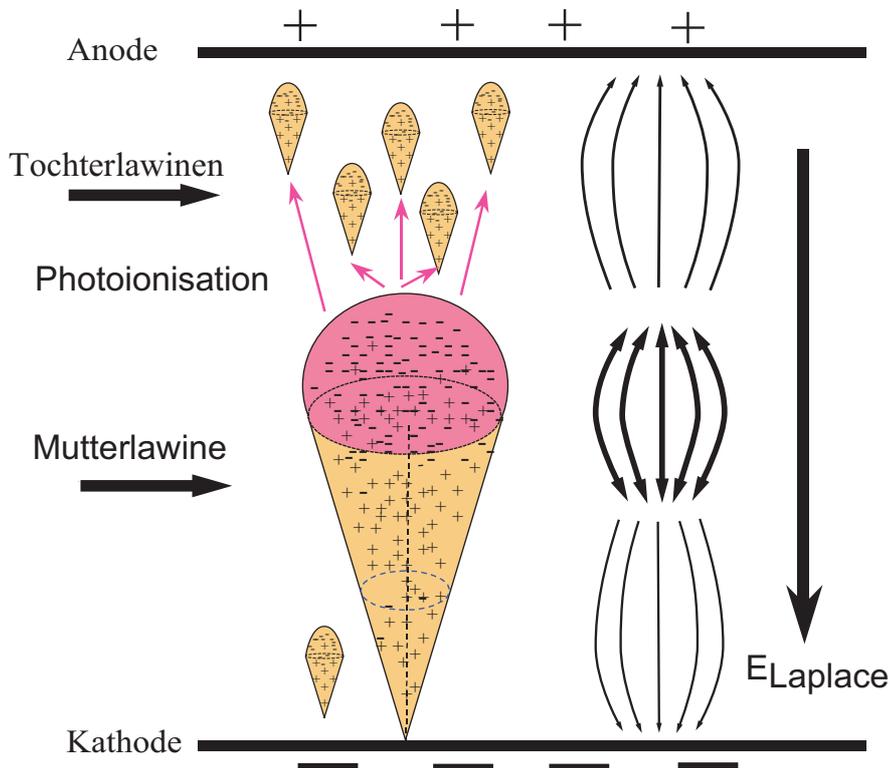
$$e^{\alpha_{\text{eff}} d} = K_G \geq \frac{\alpha_{\text{eff}}}{\alpha \cdot \gamma} + 1. \quad (2.7)$$

In Worten ausgedrückt heißt es, dass jede Elektronenlawine soviel positive Ionen hinterlassen soll, die mindestens ein Nachfolgeelektron (Sekundärelektron) herauslösen müssen, damit diese Ionisationskette nicht unterbrochen wird [Tow10, Bey86, Sal88, Mee40].

### 2.2.2 Das Streamer Modell

Wächst die Elektronenlawine über einen kritischen Wert ( $10^6$  bis  $10^8$  [Rae64, Kuc96, Bey86, Sch23]) hinaus, kommt es zwangsläufig aufgrund der Ladungstrennung zur Bildung eines eigenen elektrischen Raumladungsfeldes. Dieses Feld kann das von außen angelegte Laplace Feld stark verzerren. In diesem Fall wird das Feld hinter dem Kopf der Lawine im selben Maße geschwächt, wie es davor verstärkt wird. Dies führt dazu, dass diese Lawine (Mutterlawine genannt) quasi zum Stehen kommt. Das verstärkte Feld vor dem Kopf begünstigt weitere Ionisationen und vor allem die Aussendung hochenergetischer Photonen, die zur Bildung selbständiger Tochterlawinen im Raum zwischen Mutterlawine und Anode führen. Es handelt sich um einen sogenannten anodengerichteten Streamer. Ebenso kann es über diesen Weg zur Bildung neuer Tochterlawinen zwischen dem Lawinenkopf und Kathode kommen, die von unten Anschluss an die Mutterlawine finden. Es wird von einem kathodengerichteten Streamer gesprochen. Werden diese Aktivitäten (Bildung von Tochterlawinen) intensiviert, kommt es zur Bildung eines leitfähigen Kanals. Dieses Modell setzt aber voraus, dass die Lawinen so weit wachsen können, dass sie von ihrem eigenen Feld gebremst werden. Aus diesem Grund trifft diese Modellvorstellung nur auf größere Abstände (ab  $d = 1.5$  cm, siehe 2.4) zu [Hon65].

Da einer Kanalbildung grundsätzlich ein Streamer vorausgeht, stellt sich die Frage, inwiefern das Townsend Modell tragbar ist. Ob es zur Bildung von Lawinengenerationen kommt, hängt primär vom zu Verfügung stehenden Raum ab. Wenn es der ersten Lawine nicht gelingt, ein starkes Raumladungsfeld zu bilden, so dass das Grundfeld lokal ausgelöscht wird und eine



**Abbildung 2.3:** Streamer Durchschlag: kathoden- und anodengerichteter Streamer

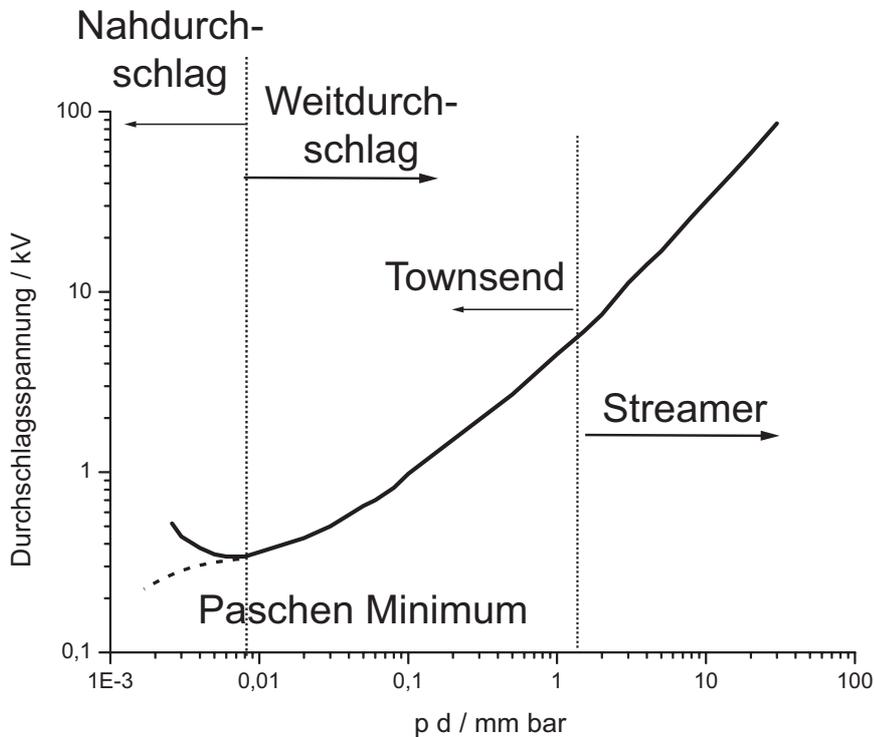
Kanalbildung möglich ist, ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Tochter- bzw. Nachfolgelawinen diesen Prozess einleiten, größer.

### 2.3 Das Paschengesetz

Wird das Townsend Modell herangezogen, läßt sich bei der Annahme eines homogenen Feldes und eines feldunabhängigen  $\gamma_I$  eine Gesetzmäßigkeit herleiten, nach der die Durchschlagsspannung einer Funkenstrecke eine Funktion vom Produkt  $p \cdot \rho$  bzw.  $p \cdot d$  ist. Die Paschenkurve stellt die experimentelle Verifizierung des Paschengesetzes und stellt dieses auf Grund ihrer öfteren Verwendung und leichteren Handhabung in den Hintergrund [Pas89]. Sie wird häufig zur Dimensionierung oder zu einer ersten groben Abschätzung

der Durchschlagsspannung verwendet [Sch23, Win71, Oku97].

Die Paschenkurve wurde experimentell in vielen Arbeiten auf ihre Gültig-



**Abbildung 2.4:** Die Paschenkurve für Luft

keit hin überprüft und für Abstände zwischen einigen 100  $\mu\text{m}$  und einigen 10 cm, sowie für Drücke zwischen  $10^{-3}$  mbar bis zu etwa 20 bar verifiziert [Oku97, Opp74]. In [Win71] sind Meßdaten für Durchschläge in Luft aus verschiedenen Veröffentlichungen zusammengetragen und dargestellt. In Abbildung 2.4 ist diese Kurve für Luft wiedergegeben. Dabei wurden bei allen Messungen relativ große Abstände verwendet. So bewegen sich die verwendeten Abstände für die Paschenkurve in Luft zwischen 0.33 und 400 mm.

Die Paschenkurve wird dennoch von der Gesetzmäßigkeit getragen, nach der eine Ionenlawine (Hinterlassenschaft der Elektronenlawine) mindestens ein Sekundärelektron erzeugen muss. Die Vorgänge der Ionisation nach diesem Modell finden nur im Gas statt. Dies erklärt den linken Ast der Paschenkurve: Um auf einen kürzeren Weg verstärkter ionisieren zu können, müssen die

Elektronen schneller beschleunigt werden. Charakteristisch für die Paschenkurve ist das Minimum, unterhalb dessen kein Durchschlag möglich ist (bei Luft  $U_{min}=300$  V bei  $p \cdot d = 0.008$  mm·bar).

### 2.3.1 Statistische Analyse der dynamischen Zündspannung

Die letzten Betrachtungen gelten für die statistische Zündung (Spannung wird unendlich langsam erhöht, Laufzeit der Ladungsträger sind kürzer als Ruhezeit der Spannung zwischen den Erhöhungen). Bei praktischen Anwendungen (z.B. Zündkerze) muss die Zündung in einer sehr kurzen Zeit erfolgen. Aus dem Grund wird die Spannung mit einer steilen Anstiegsflanke hochgefahren. Dies ist mit einer Verschiebung und einer extremen Verbreiterung der Häufigkeitsverteilung verbunden. In der Abbildung (2.5) ist eine typische Häufigkeitsverteilung (die einhüllende eines Histogramms mit einer Klassenbreite von  $\Delta U = 300$  V) einer klassischen Zündkerze (Stickstoff, Elektrodenabstand  $d = 1$  mm,  $p = 1$  bar,  $A = 3$  kV/ $\mu$ s Anstiegsgeschwindigkeit und  $f = 40$ Hz Wiederholungsfrequenz) zu sehen.

Außer der ausgesprochen breiten Streuung von  $\Delta U = 3$  kV sind die zwei Maxima nicht konform mit der Theorie der dynamischen Durchschlagsspannung, die hier im folgenden kurz vorgestellt wird:

Die von Löb [Löb05] entwickelte Theorie beschreibt die Zündwahrscheinlichkeit  $P$ :

$$P = \begin{cases} 0, & \text{wenn } q \leq 1, \\ 1 - \frac{1}{q}, & \text{ansonsten.} \end{cases} \quad (2.8)$$

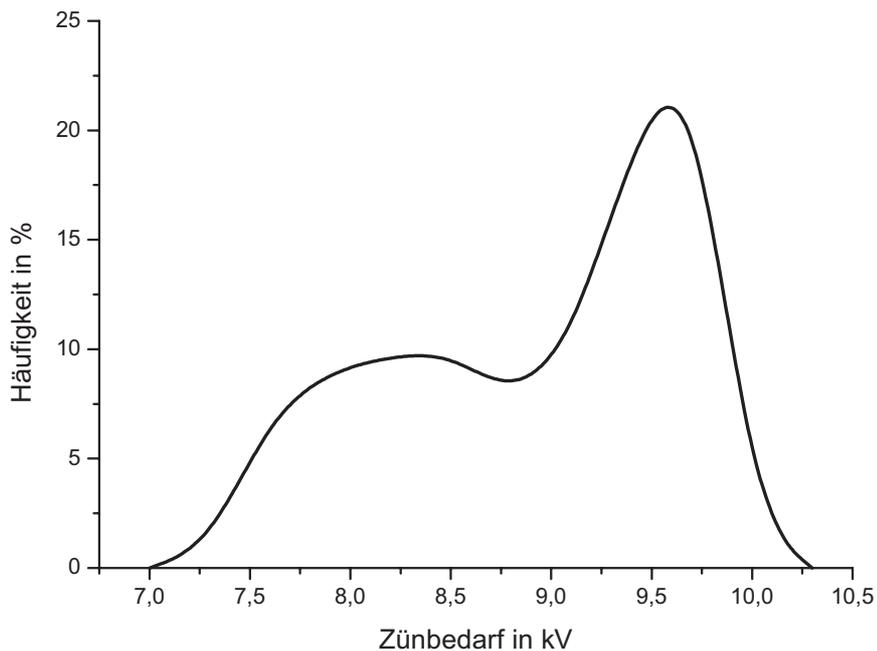
$q$  wird dabei in Anlehnung am Townsend Modell berechnet zu:

$$q = \gamma(\exp(\alpha d) - 1). \quad (2.9)$$

Eine solche Verteilung hat ein einziges Maximum, wobei die Breite tatsächlich proportional zu der Anstiegsgeschwindigkeit bleibt [Rad01].

Mögliche Gründe für diese Abweichungen können sein:

- Fehlen von Startelektronen zum Zeitpunkt des Erreichens der statischen Zündspannung.
- Fluktuation in der Entwicklung der Elektronenlawine, die sich auf die Gesamtentladung ungünstig auswirken können.
- Dynamik des Townsend-Mechanismus: Laufzeit der Ionen ist in der selben Größenordnung wie die Zeitkonstante, mit der die Spannung hochgefahren wird.



**Abbildung 2.5:** Häufigkeitsverteilung des Zündbedarfs

Der erste Punkt kann ausgeschlossen werden, denn es kann durch Messungen nachgewiesen werden, dass Stromaktivitäten (Lawinenbildungen) bereits bei 90% der statistischen Spannung zu verzeichnen sind (siehe Kapitel 7). Daraus folgt, dass genügend Ladungsträger bei Erreichen der statistischen Spannung vorhanden sind. Diese Arbeit legt im theoretischen Teil den Schwerpunkt auf den zweiten Punkt (Fluktuation in der Lawinenbildung), wobei die Dynamik der Townsend-Lawinen nur teilweise erfasst wird. Es wird berechnet, wie sich eine Nachfolgelawine auf die Mutterlawinen auswirkt, ohne dem Punkt nachzugehen, wie die diese Sekundärelektronen herauslöst. Die Laufzeiten der einzelnen Lawinen, die für die oben beschriebene Streuung verantwortlich sind, werden in diesem Modell nicht mit erfasst.

## Kapitel 3

# Netzgenerierung

Um den Aufwand der Feldberechnung zu minimieren, ist ein Netz zu verwenden, das unterschiedliche lokale Dichten der Diskretisierung zuläßt. Solche unstrukturierten Netze haben den Vorteil, dass interessante Gebiete feiner diskretisiert werden, ohne dass sich die lokale hohe Dichte auf weniger interessante Gebiete fortsetzt. Im Laufe des Zündungsvorgangs können aufgrund der Ladungstrennung und starken Elektronenvermehrung innerhalb der Elektronenlawine hohe Raumladungsdichten entstehen. Die Raumladung steht somit nicht nur unter dem Einfluß des Laplace-Feldes sondern auch unter dem des selbst erzeugten Feldes. Aufgrund dieser Feldverzerrung kommt es zu hohen Gradienten, die eine feinere lokale Nachdiskretisierung erfordert. Eine grobe Diskretisierung in Gebieten mit hohen Gradienten kann zu gravierenden Fehlern führen(siehe 5.1.1).

Im Gegensatz dazu besteht die Möglichkeit, geometrisch bedingte Nachverfeinerung zu vermeiden, indem Stellen, an denen hohe Gradienten erwartet werden, von vornherein dichter diskretisiert werden. Die implementierte Diskretisierung zeichnet sich durch eine adäquate Reaktion auf die Geometrie aus, welche eine eventuelle Berücksichtigung von Mikrostrukturen auf der Kathode zuläßt, ohne einen großen Nachdiskretisierungsaufwand.

Ein stetiger Übergang zwischen Gebieten unterschiedlicher Dichte trägt wesentlich dazu bei, numerische Probleme zu vermeiden.

Auf dem Gebiet der Finiten Elemente haben sich Dreiecke aufgrund ihrer leichten Handhabung als einfachste geometrische Gebilde bewährt und werden hier ebenfalls benutzt. Im Wesentlichen haben sich zwei Methoden der Triangulierung durchgesetzt: Die *Delaunay-Triangulation* und die *Fortschreitende-Front* (Advancing front).

Bei der Delaunay Triangulierung werden Knoten sukzessiv in eine bereits bestehende sehr grobe und einfache Triangulation eingefügt. Kriterium für

das Einfügen von Knoten können eine zu geringe Diskretisierungsdichte oder eine zu schlechte Qualität der bestehenden Triangulierung sein. Die eingefügten Knoten werden mit den benachbarten Knoten verbunden, so dass die Gleichwinkeligkeit angestrebt wird (Siehe dazu 3.6). Zur Erstellung des anfänglichen Netzes wird ein großes Dreieck gebildet, das das gesamte Gebiet umschließt. Die ersten Knoten auf dem Rand, deren Verbindung die Diskretisierung des Randes darstellt, werden unter Heranziehen der obigen Kriterien mit den bestehenden Knoten verbunden. Die  $O(N^2)$  Komplexität der Delaunay Triangulation rührt daher, dass die Knotenfreiheit der Umkreise der Dreiecke gewährleistet sein muß.

Die zweite Methode der Triangulierung bildet am Anfang keine Anfangstriangulation, sondern eine sog. Anfangsfront. Sie besteht aus dem diskretisierten Rand. Ausgehend von dieser Front werden ins Gebiet hineinwachsende Dreiecke generiert. Nicht mehr zur Verfügung stehende Randelemente werden aus der Front herausgenommen und neu erstellte Dreieckseiten werden in die Front eingefügt. Diese Art der Diskretisierung wird erschwert durch die aufwendige dynamische Verwaltung der Front.

In dieser Arbeit wird eine neue Methode der Triangulierung vorgestellt, die schneller ist (Ordnung  $O(N)$ ) und große Schwankungen zwischen Elementgrößen unterdrückt [Yah01a]. Die Triangulierung besteht im wesentlichen aus 6 Schritten.

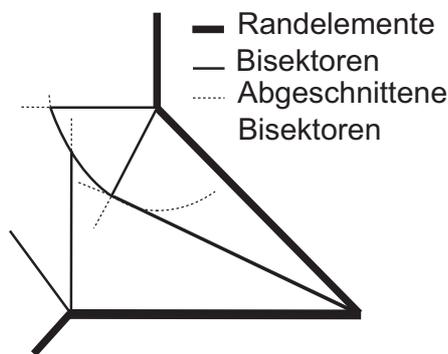
- Bildung polygonaler Voronoi-Diagramme
- Streifenbildung
- Triangulierung
- Behandlung der Unregelmäßigkeiten
- Relaxation
- Glättung

Die aufgeführten Punkte werden im einzelnen behandelt.

## 3.1 Voronoi-Diagramme

Um eine adäquate Reaktion der Netzgenerierung auf die Geometrie zu erzielen, müssen kritische Stellen frühzeitig erkannt werden. Die kritischen Stellen sind in der Regel konvexe Scheitelpunkte oder Rundungen mit einem kleinen Krümmungsradius, da sie eine Reihe konvexer Scheitelpunkte darstellen.

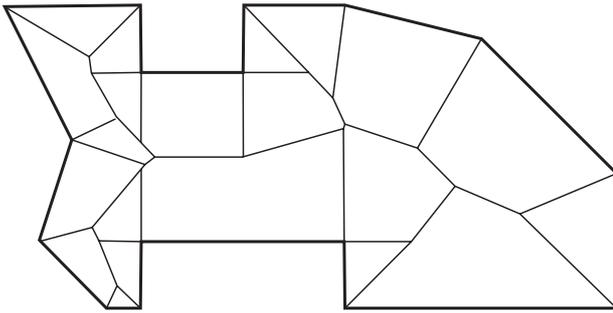
Die Voronoi-Diagramme stellen eine elegante Zerlegung des Gebietes in Subdomänen dar, die einzelnen Elementen auf dem Rand zugeordnet werden können. Ein Subdomäne (hier Voronoi-Gebiet genannt) besteht aus der Menge aller Punkte, die näher zu einem Element liegen, als zu den restlichen Elementen. Ein Element ist dabei entweder ein Stück Gerade oder ein konvexer Scheitelpunkt auf dem Rand. Die einzelnen Gebiete werden folglich entweder von Randelementen oder medialen Achsen begrenzt. Eine mediale Achse ist hierbei die Menge der bestehenden Bisektoren, wobei ein Bisektor die Menge der Punkte ist, die den gleichen Abstand zu zwei Randelementen haben. Je nach Konfiguration kann ein Bisektor ein Stück Gerade, eine Parabel oder eine Kombination von beiden sein. Zur Bildung der Voronoi-Diagramme werden die Bisektoren an den Punkten beendet, an denen sie sich schneiden (siehe Abb. 3.1).



**Abbildung 3.1:** Abschneiden von Bisektoren

An konvexen Punkten werden große Gradienten erwartet und deswegen empfiehlt sich, die Stellen möglichst dicht zu diskretisieren. Da konvexen Punkten gleich eigene Gebiete zugeordnet werden, besteht die Möglichkeit, diese Gebiete sehr dicht zu diskretisieren. Somit werden kritische Stellen bereits in der Vorzerlegung berücksichtigt. Es wird hier nicht auf die mathematischen Hintergründe der Voronoi-Diagramme eingegangen und es sei deswegen auf die Literatur hingewiesen [Ber92],[Cav74], [Che89], [Gür92], [Lee86], [Pre88], [Sri92], [Tit99], [Wip97]. In der Abb. (3.2) ist ein Beispiel solcher Dissektionen zu sehen.

Es entsteht ein Netz, das zum Teil aus Parabelstücken besteht, die als nächstes zu linearisieren sind. Die Subdomänen entstehen, indem die End-



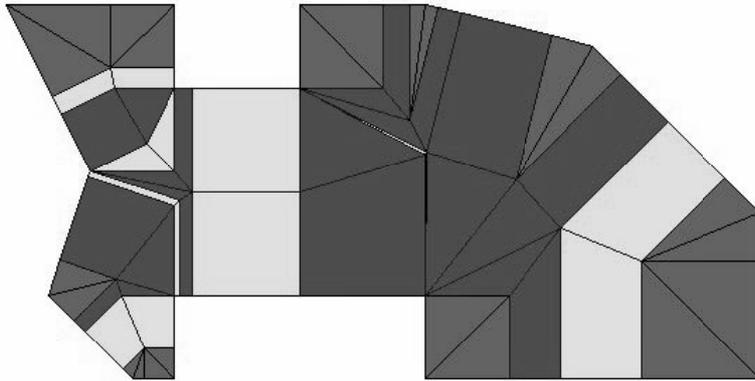
**Abbildung 3.2:** Voronoi-Diagramm eines polygonalen Gebietes

punkte der einzelnen Stück Geraden der medialen Achse, sofern sie nicht auf dem Rand liegen, auf den Rand projiziert werden.

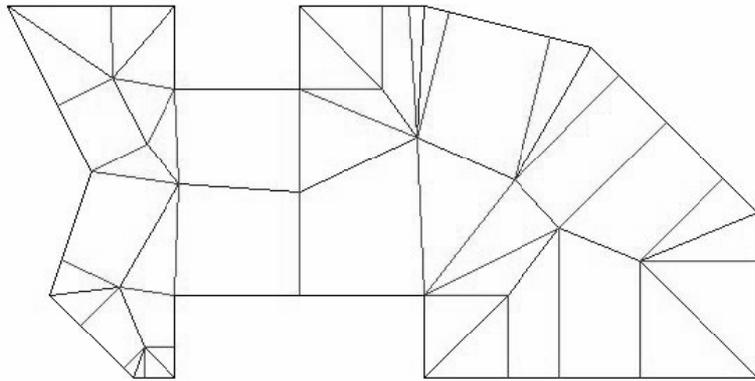
Durch die oben beschriebene Vorgehensweise können unproportionale Subdomänen entstehen, im Besonderen bei unterschiedlichen Größenordnungen der Mikrostrukturen und des Gesamtgebietes. Eine elegante Behandlung solcher unproportionalen Subdomänen (nun Splitter genannt) läßt sich unter Berücksichtigung von benachbarten Subdomänen durchführen [Hal00]. Zu diesem Zweck werden die Elemente zu Doppelementen zusammengefügt. Dies verleiht der Unterteilung mehr Struktur. Über die Gruppierung lassen sich Splitter erkennen und behandeln. Die Behandlung der Splitter ist unterschiedlich und hängt von ihrer Unproportionalität ab [Lee86, Hal00]. Längliche Splitter werden z.B. weiter unterteilt und zu dünne Splitter werden völlig entfernt bzw. mit den benachbarten Subdomänen verschmolzen. In den Abbildungen (3.3) und (3.4) sind Beispiele einer solchen Gruppierung und Splitterbehandlung zu sehen.

## 3.2 Streifenbildung und Triangulation

Die Streifenbildung ist eine neue Methode der Diskretisierung, die wesentlich schneller als die o.g. Methoden ist. Im Gegensatz zu der Triangulierung nach dem Prinzip der *fortschreitenden Front* oder zu der Triangulierung nach dem *Delaunay Kriterium*, hat die Triangulierung eines Streifens nach der hier implementierten Methode die Komplexität  $O(N)$ . Die Idee hinter der Streifenbildung, ist die Verwandlung der Aufgabe der Diskretisierung des Gesamtgebietes in die einfache Diskretisierung einzelner Streifen. Weiterhin hat die Streifenbildung den Vorteil, dass sich die Diskretisierung eines



**Abbildung 3.3:** Bildung Doppелеlemente



**Abbildung 3.4:** Entfernung von Splittern

Streifens unabhängig von den restlichen Streifen durchführen läßt. Das heißt für die Triangulierung, dass nur die Reihenfolge der aufgenommenen Knoten eine Rolle spielt und nicht deren geometrische Position. Dies setzt aber voraus, dass die maximale Breite eines Streifens etwa genau so groß wie das in dem Streifen aufgenommene Dreieck ist (keine weiteren Diskretisierungsschritte innerhalb eines Streifens sind zu vollziehen).

Die Streifenbildung geschieht durch Aufnahme von Zusatzknoten entlang der medialen Achse (Schnittmenge der Subdomänen). Anschließend werden die Knoten jeweils auf das Randelement projiziert. Es entstehen längliche Vierecke und im Falle konvexer Scheitelpunkte Dreiecke, deren Breite in etwa der der gewünschten Finiten Elemente entsprechen.

In der Abbildung 3.5 ist ein Beispiel einer Streifenbildung zu sehen. Die Helligkeit der Knoten entspricht der Reihenfolge ihrer Aufnahme. Es besteht weiterhin die Möglichkeit, die Dichte der Knoten um einen konvexen Scheitelpunkt zu beeinflussen, indem deren Verteilung durch eine logarithmische Funktion vorgegeben wird.

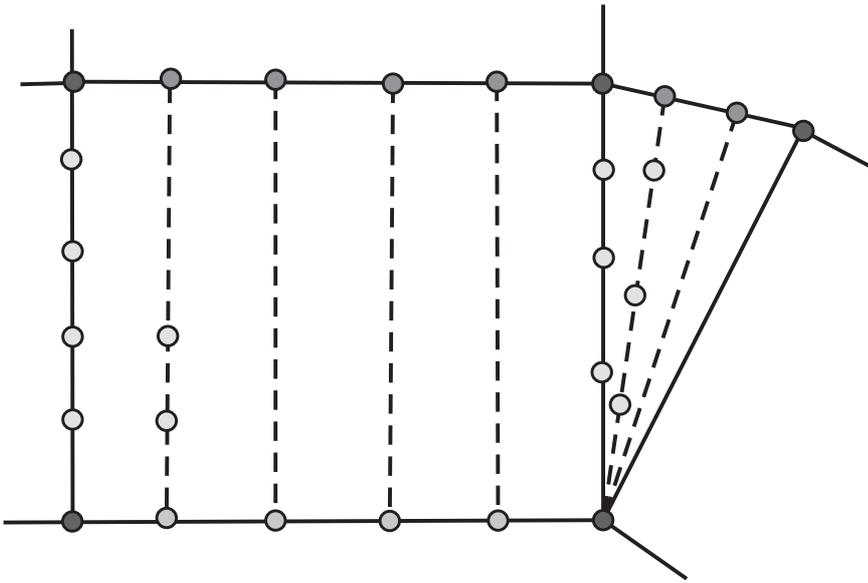


Abbildung 3.5: Streifenbildung

Im folgenden wird die Delaunay-Triangulation kurz vorgestellt.

Definition:

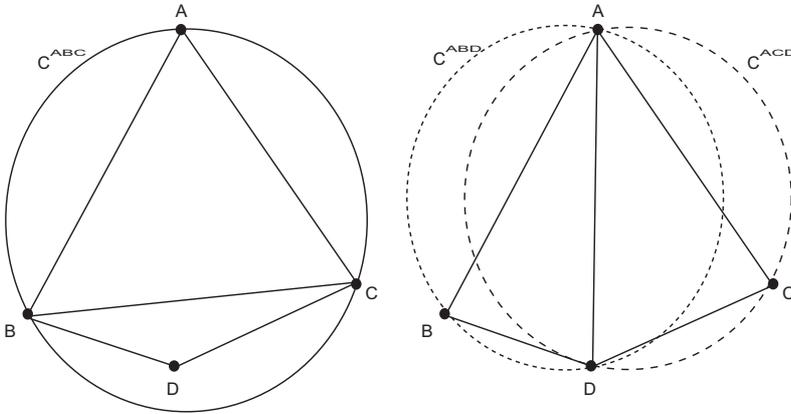
Die Delaunay-Triangulation  $\tau^*$  maximiert unter allen möglichen Triangulationen  $\tau$  einer gegebenen Punktekongfiguration das Maximum  $\Theta(\tau)$  des kleinsten Winkels der Dreiecke  $t \in \tau$ .

Die Delaunay-Triangulation kann als Kriterium verstanden werden.

Kriterium:

Eine Triangulation  $\tau^*$  ist eine Delaunay-Triangulation, wenn sich kein

Knoten anderer Dreiecke im Umkreis der einzelnen Dreiecke befinden.



**Abbildung 3.6:** Das Delaunay Kriterium

Wie bereits oben dargestellt hat die hier beschriebene Triangulation die Komplexität  $O(N)$ , wobei  $N$  die Anzahl der Knoten ist. Das impliziert, dass das Delaunay-Kriterium nicht auf seine Erfüllung überprüft werden muss (siehe 3.8). Das ist realisierbar, da die optimale Triangulation eines Vierecks der Bildung der kürzesten Diagonale entspricht (siehe B).

Das Netz besteht in dieser Phase aus drei- und viereckigen Streifen, die als rechtwinklige Trapeze und gleichschenklige Dreiecke betrachtet werden können (Siehe Abbildung 3.8).

Die Triangulierung geschieht auf folgende Weise: Den Ecken wird der Wert 1 und den neu aufgenommenen Knoten wird der Wert 0 zugewiesen. Es werden die 010 Ecken abgeschnitten und anschließend erhalten die neu entstandenen Ecken mit dem Wert 0 den Wert 1. Die Vorschrift wird eingehalten, bis eine 1001 Kombination auftritt. In diesem Falle wird die kürzere Diagonale gebildet. Die Handhabung mit den natürlichen Zahlen beschleunigt die Triangulierung, da im Gegensatz zur Delaunay Triangulation nicht auf die geometrische Position der Nachbarn geachtet wird. Die einzige komplexere Operation ist die eventuelle Berechnung der Diagonale im Falle einer 1001 Kombination.

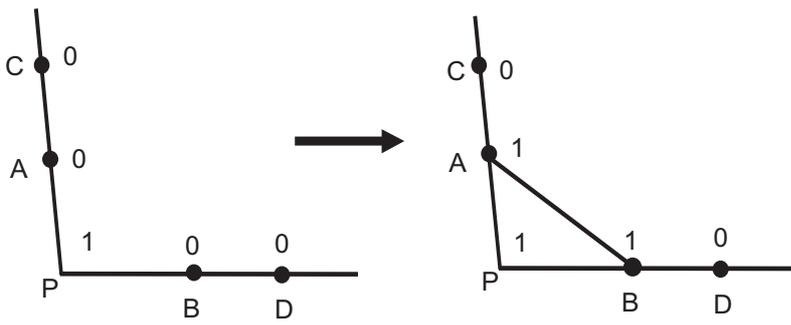


Abbildung 3.7: Abschneiden einer Ecke

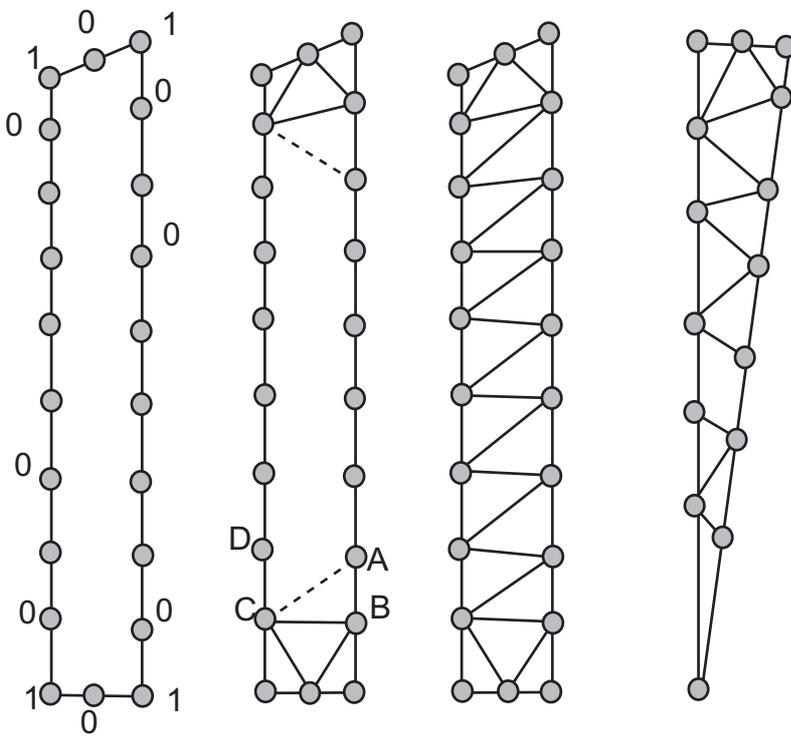


Abbildung 3.8: Triangulation eines Streifens

### 3.3 Behandlung der Unregelmäßigkeiten

Trotz zufriedenstellender Triangulierung treten an manchen Stellen sowohl am Rand als auch im Inneren Unregelmäßigkeiten auf, die behoben werden müssen. Es handelt sich dabei um Knoten mit einem zu kleinen Grad (Anzahl der direkten Nachbarn). Da gleichschenklige Dreiecke angestrebt werden, ist ein Grad von 6 im Inneren bzw. 4 am Rand optimal. Ziel der Behandlung ist, dass jeder Knoten im Inneren bzw. am Rande einen Mindestgrad von 5 bzw. genau 4 hat, Konvexe Scheitelpunkte sind ausgenommen.

#### Behandlung des Randes:

Wenn der Knoten den Grad 3 besitzt, wird er entfernt, wie in der Abbildung 3.9 dargestellt. Im Falle eines Knoten vom Grad 5, wird die Diagonale des Trapezes ausgetauscht, woraufhin der Knoten genau den Grad 4 erhält (siehe 3.10).

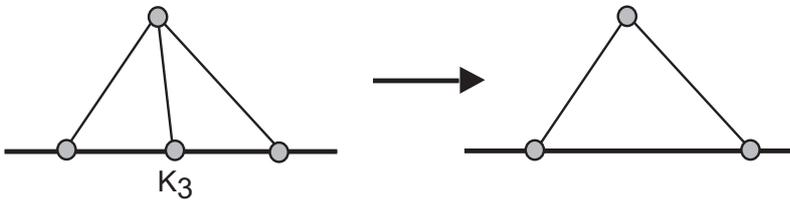


Abbildung 3.9: Behandlung der Randknoten mit dem Grad 3

#### Behandlung der inneren Unregelmäßigkeiten:

Ziel ist es, den Grad der Knoten im Inneren auf ein Minimum von 5 anzuheben. Ein Knoten mit dem Grad 4 wird entfernt und im entstandenen Trapez wird die kürzeste Diagonale gebildet. Besitzt der Knoten den Grad 3, wird er gänzlich entfernt.

Der oben beschriebene Ablauf muss mehrmals durchgeführt werden, da sich die Gesamtkonfiguration nach jedem Schritt ändert.

### 3.4 Relaxation und Glättung

In einem weiteren Schritt wird nun das Gitter relaxiert. Hierbei werden die Kanten so umsortiert, dass die Anzahl der Nachbarn an jedem Knoten in etwa gleich wird [Fre91]. In diesem Schritt wird nicht auf die geometrische

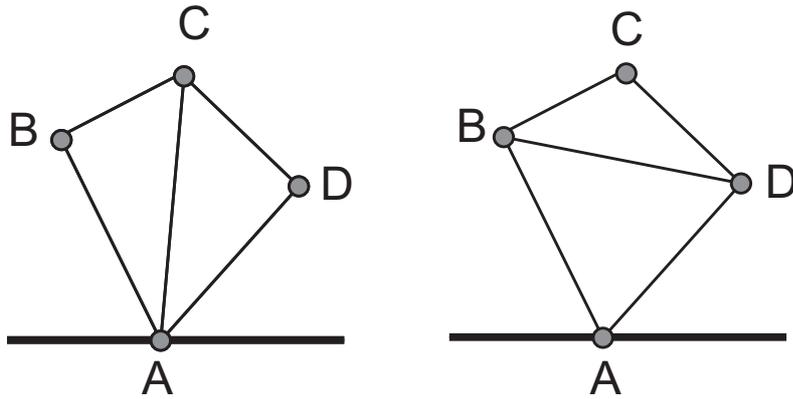


Abbildung 3.10: Behandlung der Randknoten

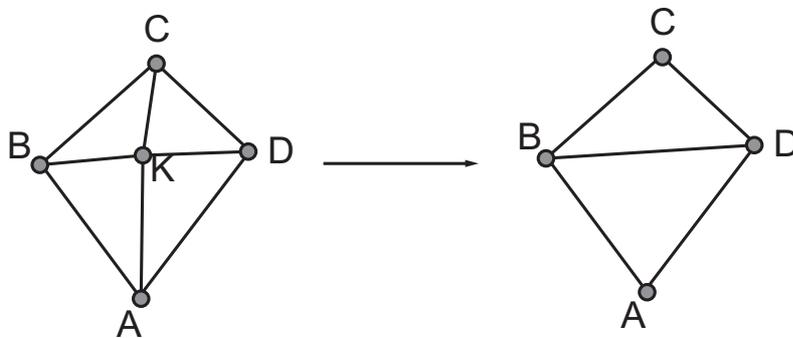


Abbildung 3.11: Behandlung der Knoten mit dem Grad 4

Position der Knoten geachtet, sondern nur die Anzahl der Nachbarn berücksichtigt.

Nach der Relaxation hat jeder Knoten im Mittel den optimalen Grad von 6 bzw. 4.

Bei der Glättung werden die Knoten räumlich derart verschoben, dass möglichst exakte gleichseitige Dreiecke entstehen. Unter allen Dreiecken mit der gleichen Fläche, hat das Gleichseitige den kleinsten Umfang. Daher wird angestrebt, jeden Knoten in den Mittelpunkt seiner direkten Nachbarn zu rücken (Laplace Glättung). Es gilt deswegen den folgenden Ausdruck zu



Abbildung 3.12: Behandlung der Knoten mit dem Grad 3

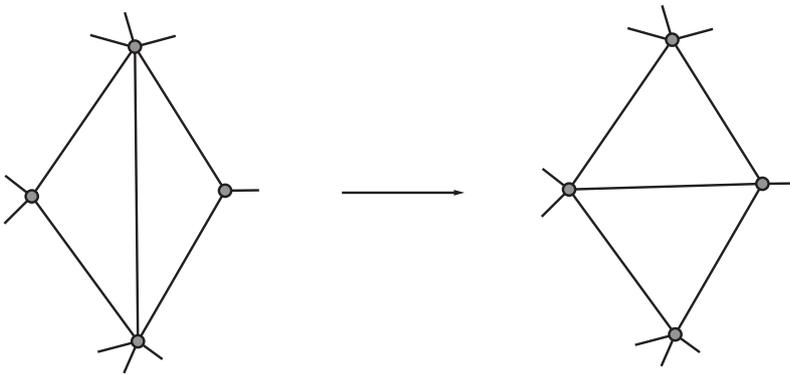


Abbildung 3.13: Vertauschen von Kanten, um den Grad benachbarter Knoten anzugleichen

minimieren (Kräfte minimierung):

$$\sum_{i=0}^n \alpha \cdot |KN_i| \rightarrow \text{Minimum.} \quad (3.1)$$

Hierbei sind  $N_i$  die direkten Nachbarn und  $\alpha$  ist eine Proportionalitätskonstante (Federkonstante). Die Lösung der obigen Gleichung lautet:

$$(x_{neu}, y_{neu}) = \frac{\sum_{i=0}^n (x_i, y_i)}{n} \quad (3.2)$$

Die Randknoten dürfen aber nur entlang des Randes verschoben werden. Daraus ergibt sich eine zusätzliche Nebenbedingung. Es handelt sich somit

um eine Lagrange Aufgabe, deren Lösung sich zwar analytisch herleiten läßt, aber die geometrische Lösung ist eleganter und läßt sich mit einem geringeren Aufwand implementieren (Siehe dazu B.2).

### 3.5 Nachdiskretisierung

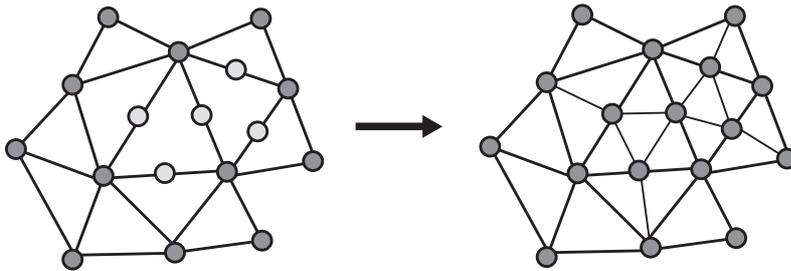
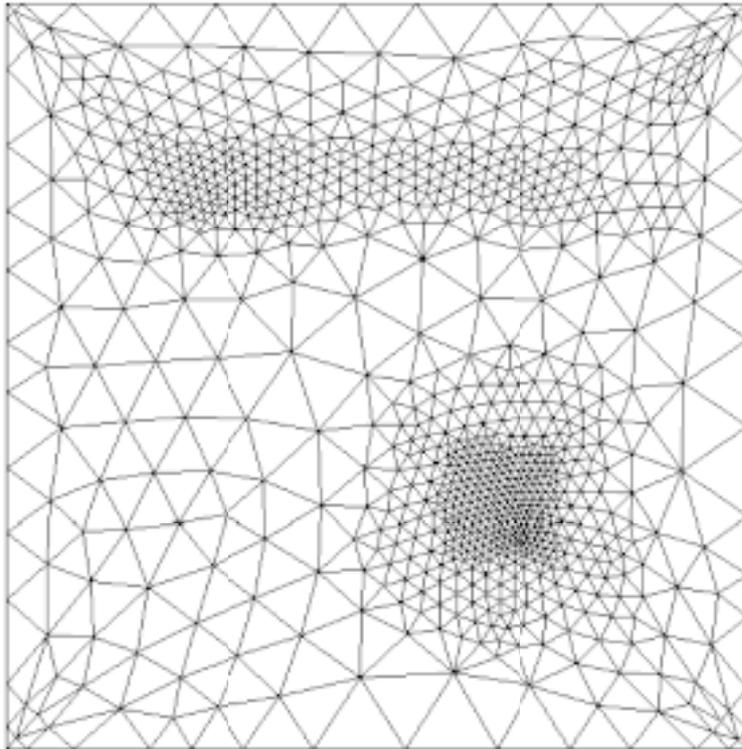


Abbildung 3.14: Nachdiskretisierung

Werden die Gradienten der Lösungsgrößen zu groß, führt dies zu numerischen Ungenauigkeiten. In diesem Fall muss die Diskretisierung lokal verfeinert werden. Für die Nachdiskretisierung gibt es mehrere Vorgehensweisen. Die Erste besteht darin, im Mittelpunkt eines bereits bestehenden Dreiecks einen neuen Knoten zu erzeugen und diesen mit den Knoten des ursprünglichen Dreiecks zu verbinden. Die Anzahl der involvierten Dreiecke verdreifacht sich. Der neu aufgenommene Knoten hat aber einen Grad von 3 und besitzt daher eine ungünstige Topologie (Siehe 3.3). Auch eine Vertauschung der Kanten führt nicht zu einer wesentlichen Verbesserung der Topologie. Die zweite Vorgehensweise, die etwas umständlicher ist, besteht darin, Zusatzknoten auf den Kanten des Dreiecks zu erzeugen. Aus diesem Grund werden die Kanten des zu verfeinernden Dreiecks lokalisiert. Es entstehen dadurch drei Konfigurationen: Dreiecke mit einem, zwei oder drei Zusatzknoten, je nachdem wie die Dreiecke in dem betroffenen Gebiet liegen.

Im ersten Fall wird der Knoten mit dem gegenüberliegenden Knoten verbunden. Im zweiten Fall werden die beiden Zusatzknoten miteinander verbunden und das Trapez nach der Regel der kürzesten Diagonale unterteilt. Im letzten Fall bei drei Zusatzknoten werden diese miteinander verbunden. Es entstehen dadurch vier Dreiecke innerhalb des ursprünglichen Dreiecks. Die Zusatzknoten haben je nach Konfiguration den Grad 5 oder 6. Nur am

Rande des zu verfeinernden Gebietes entstehen unter bestimmten Bedingungen Knoten mit dem Grad 4. Diese werden ähnlich wie im Kapitel 3.3 behandelt. Die Netze werden nach der Nachdiskretisierung nochmals relaxiert und geglättet, um einen homogenen Übergang zwischen den Gebieten unterschiedlicher Dichte zu gewährleisten.



**Abbildung 3.15:** Ein Netz verschiedener Dichten

# Kapitel 4

## Monte Carlo Simulation

### 4.1 Motivation

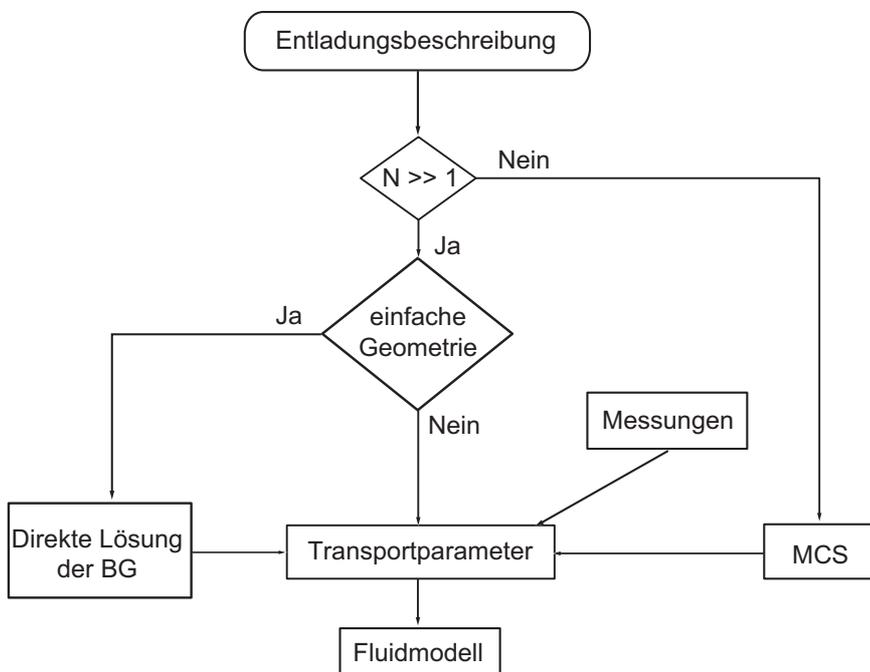
Liegt das übliche Modell der elektrischen Entladung zugrunde, wonach wenige Startelektronen die Entladung herbeiführen, ist dies mit der folgenden Vorstellung verbunden: Die Elektronen werden vom elektrischen Feld beschleunigt und erleiden je nach der dem Feld entnommenen Energie elastische oder inelastische Stöße. Die letzteren können im günstigsten Fall zu Ionisationsprozessen und somit zu einer Vermehrung der Elektronen führen. Diese Vermehrung (Elektronenmultiplikation) verläuft nach einer Anlaufphase lawinenartig und wird, wie folgt, beschrieben:

$$N(x + \Delta x) = N(x) + N(x) \alpha \Delta x. \quad (4.1)$$

Diese Beschreibung trifft allerdings nur auf ein makroskopisches Kollektiv zu, wobei der Ionisierungskoeffizient  $\alpha$  die Anzahl der Elektronen (Bruchteil von  $N$ ), die auf der Strecke  $\Delta x$  neutrale Teilchen ionisieren, wiedergibt. Es handelt sich dabei um einen über das Kollektiv gemittelten Wert, wenn sich eine Geschwindigkeitsverteilung (ähnlich der Maxwell Verteilung) eingestellt hat. Diese Beschreibung auf einzelne Elektronen zu übertragen ist aus dem Grund nicht zulässig. Die Elektronenvermehrung in der ersten Phase (wenige statistisch verteilte Elektronen) ist ein Produkt zufälliger Ereignisse und verhält sich dabei stochastisch-deterministisch. Ein Schwerpunkt dieser Arbeit ist die Untersuchung der Korrelation zwischen dem stochastischen Verhalten der Elektronenlawine in der Anfangsphase der Zündung und der Streuung der Durchschlagsspannung. Um die Zufälligkeit der Ereignisse abzubilden, wird auf die Monte Carlo Technik zurückgegriffen. Dabei werden die einzelnen Wahrscheinlichkeiten mit Zufallszahlen verglichen. Ein Ereignis findet demnach statt, wenn dessen Wahrscheinlichkeit kleiner

als die gewürfelte Zufallszahl ist. Diese einfache Technik wird eingesetzt, um die Bahnen einzelner Elektronen (und sonstiger geladener Teilchen) zu verfolgen und folglich mikroskopisch zu beschreiben.

Erreichen die Ladungsträger eine gewisse Dichte, stellt sich ein Mittelwert sämtlicher Transportparameter ein. Die Ladungsträger bilden ein Kollektiv, dessen makroskopisches Verhalten die mikroskopischen Ereignisse über Mittelung der Stossparameter getreu wiedergibt. Des weiteren ist der Rechenaufwand einer Monte-Carlo-Simulation (MCS) proportional zu der Zahl der Ladungsträger, was die Grenzen solcher Rechenverfahren kennzeichnet. Dadurch dass die MCS nicht nur das stochastische, sondern auch das deterministische Verhalten gut beschreibt, stellt sie eine erprobte aber rechenaufwendige Möglichkeit dar, Stossparameter zu ermitteln.



**Abbildung 4.1:** Alternativen zur Beschreibung der Entladungsentwicklung

Eine schnellere Alternative (siehe 4.1) als die MCS hinsichtlich der Ermittlung der Stoßparameter bietet die Lösung der Boltzmann-Gleichung an.

$$\frac{\delta f}{\delta t} + \mathbf{v} \frac{\delta f}{\delta \mathbf{r}} + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\delta f}{\delta \mathbf{v}} = \left( \frac{\delta f}{\delta t} \right)_{coll}. \quad (4.2)$$

Um das Gas zu beschreiben, muss die Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  im Phasenraum mit den Volumenelementen  $d^3r$  ermittelt werden. Die Anzahl der Teilchen in diesem Raum ergibt sich hierbei zu:

$$dn = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v, \quad (4.3)$$

wobei  $e\mathbf{E}$  für die Kraft des elektrischen Feldes steht. Die linke Seite der Boltzmann-Gleichung (ballistischer Teil) ist das totale Differential der Verteilungsfunktion  $f$  und beschreibt die Entwicklung des Systems, solange keine Kollisionen stattfinden. Auf der rechten Seite werden sämtliche Kollisionen erfaßt. Für die Modellierung der elektrischen Entladung ist eine genaue Kenntnis des Kollisionstermes von entscheidender Bedeutung. Ist die Boltzmann-Gleichung gelöst, lassen sich sämtliche Entladungsparameter bestimmen: Ladungsträgerdichte, Driftgeschwindigkeit, Ionisation- und Anlagerungskoeffizient [Bir91], [Vah94], [Ver94], [Ras99], [Ser99], [Pfe99]. Für den Kollisionsterm auf der rechten Seite der Boltzmann-Gleichung, sowie für die unten beschriebene Monte Carlo Simulation, werden zunächst die Wirkungsquerschnitte des zu untersuchenden Gases benötigt.

Einen angenehmeren Ausweg zur Ermittlung der Stoßparameter stellt die Interpolation experimentell gewonnener Werte dar, sofern sie vorliegen. Diese Werte liegen für die meisten gängigen Gase vor. Handelt es sich dagegen um *exotische* Gase oder vor allem um Gasgemische (wie im Zündraum eines Motors) muss auf die zwei o.g. Alternativen zurückgegriffen. Bei Gasgemischen darf keine Mittelung oder Gewichtung der Gasbestandteile, um das Verhalten des Gases zu beschreiben, vorgenommen werden. Dies führt zu großen Fehlern ([Asc89]).

In dieser Arbeit wurden ausschließlich die Gase Stickstoff und Luft untersucht. Für beide Gase liegen eine Reihe von experimentellen Werten vor ([Bad72]). Aus dem Grund wurde das Monte-Carlo Verfahren nur um das stochastische Verhalten zu erfassen und nicht um die Stoßparameter zu ermitteln verwendet. Für spätere Berechnungen (Fluidmodell) werden experimentelle Werte verwendet.

Es folgt eine Beschreibung der Monte Carlo Simulation und dann ein Beispiel für die Entwicklung einer Lawine aus einem einzigen Elektron. Anschließend wird der Einfluss der Stochastik auf die Lawinenentwicklung untersucht.

## 4.2 Modellbeschreibung

Eine mikroskopische Beobachtung der Lawine besteht in der Verfolgung der Bahnen der Ladungsträger, die Erfassung von deren Stosswahrscheinlichkeit und Abschätzung der möglichen Verhalten nach einem Stoss. Die Kollisionswahrscheinlichkeit eines Elektrons mit einem Gasteilchen in einer dünnen Gasschicht ergibt sich zu:

$$P_{Stoss} = n \sigma(v) dz, \quad (4.4)$$

wobei  $n$  für die Gasdichte und  $\sigma$  für den Wirkungsquerschnitt stehen. Das Elektron und die Gasteilchen werden als Kugeln angesehen und die dünne Gasschicht besteht aus einer Schicht Gasteilchen. Das Elektron der Geschwindigkeit  $v$  benötigt die Zeit  $dt$  um die dünne Schicht ohne Kollision zu durchqueren. So läßt sich (4.4) folgendermaßen schreiben:

$$P_{Stoss} = n\sigma(v)vdt = \omega(v) dt, \quad (4.5)$$

wobei  $\omega$  die Stossfrequenz darstellt. Wird (4.5) als differentielle Zunahme der Anzahl der Elektronen verstanden, läßt sich die Wahrscheinlichkeit eines Zusammenstosses während der Zeit  $t$  herleiten zu:

$$P(t) = e^{-\omega(v)dt}. \quad (4.6)$$

Der totale Querschnitt ist definiert als die Summe der Wirkungsquerschnitte der elastischen, Vibrations-, Anregungs-, Ionisations- und Anlagerungsstöße.

$$\sigma_{ges} = \sigma_{elas} + \sigma_{vibr} + \sigma_{anreg} + \sigma_{ion} + \sigma_{anlag}. \quad (4.7)$$

Die Elektronen in der Gasentladung werden durch das elektrische Feld beschleunigt und ihre Geschwindigkeiten nehmen linear zu. Die Stosshäufigkeit zwischen einem Elektron und einem Gasteilchen hängt bei gegebenem Stossquerschnitt und konstanter Dichte nur von der Elektronenenergie ab. Aus diesem Grund werden die Bahnen einzelner Elektronen simuliert, indem sie in kleine Teilabschnitte zerlegt werden. So lässt sich die Stosswahrscheinlichkeit eines Elektrons der Geschwindigkeit  $v(t)$  zum Zeitpunkt  $t$  im Zeitraum  $t$  bis  $t + \Delta t$  als Gegenwahrscheinlichkeit von (4.5) beschreiben:

$$P(t) = 1 - \exp(-\omega(v) dt) \quad (4.8)$$

Es wird angenommen, dass ein Elektron während der Zeit  $\Delta t$  keine Stöße erfährt und nur den elektrischen Kräften ausgesetzt ist. Nach dieser Flugzeit werden die Koordinaten im Phasenraum für alle Elektronen nach dem folgenden Schema korrigiert.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{neu} &= \mathbf{v}_{alt} + \frac{q}{m} \mathbf{E} \Delta t \\ \mathbf{x}_{neu} &= \mathbf{x}_{alt} + \mathbf{v} \Delta t \end{aligned} \quad (4.9)$$

In der zweiten Gleichung ist der Mittelwert aus der alten und neuen Geschwindigkeit zu nehmen. Dies ergibt sich aus der Lösung der Differentialgleichung:

$$\frac{dx}{dt} = v(t) = v(t_0) + \int_{t_0}^t \frac{q}{m} E dt. \quad (4.10)$$

Anschließend werden die Stoßwahrscheinlichkeiten sämtlicher Elektronen berechnet. Sie werden mit, von einem Zufallsgenerator erzeugten und im Intervall  $0 \dots 1$  gleichmäßig verteilten, Zufallszahlen ([Bro91],[Pro99]) verglichen. Ist die Zufallszahl kleiner als die Stoßwahrscheinlichkeit, findet ein Zusammenstoß statt, ansonsten fliegt das Elektron weiter. Findet ein Zusammenstoß statt, gilt es, die Art der Kollision (elastischer Stoß, Schwingung, Anregung, Anlagerung, Ionisation) zu bestimmen, indem eine Zufallszahl mit den einzelnen Stoßwahrscheinlichkeiten verglichen wird. Die Wahrscheinlichkeit einzelner Stossarten lassen sich wie folgt bestimmen:

$$P(\text{Stossart}_i) = \frac{\sigma_{\text{Stossart}_i}}{\sigma_{ges}}, \quad (4.11)$$

wobei sich  $\sigma_{ges}$  nach (4.7) berechnen läßt. Es gilt  $\sum_i P(\text{Stossart}_i) = 1$ .

Je nachdem was für einen Stoß stattgefunden hat, lassen sich die neuen Geschwindigkeiten nach Tabelle (4.1) berechnen. Das Sekundärelektron eines Ionisationsprozesses besitzt die Geschwindigkeit  $v_{sek}^2 = (1 - \Delta)(v_{vor}^2 - \frac{2}{m} E_{ioni})$ , wobei  $\Delta$  dem Aufteilungsfaktor entspricht, nach dem die zwei Elektronen die verbliebene Energie einer Ionisation aufteilen. Nach diesen Berechnungen müssen für alle Elektronen, die kollidiert haben, neue Richtungen ermittelt werden. Dies geschieht dadurch, dass die Elektronen eine elastische Drehung um einen Winkel  $\varphi$  (Pseudozufallszahl aus dem Intervall  $0 - 2\pi$ ) nach dem folgenden Schema erfahren:

$$\mathbf{v}_{nach} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \mathbf{v}_{vor}. \quad (4.12)$$

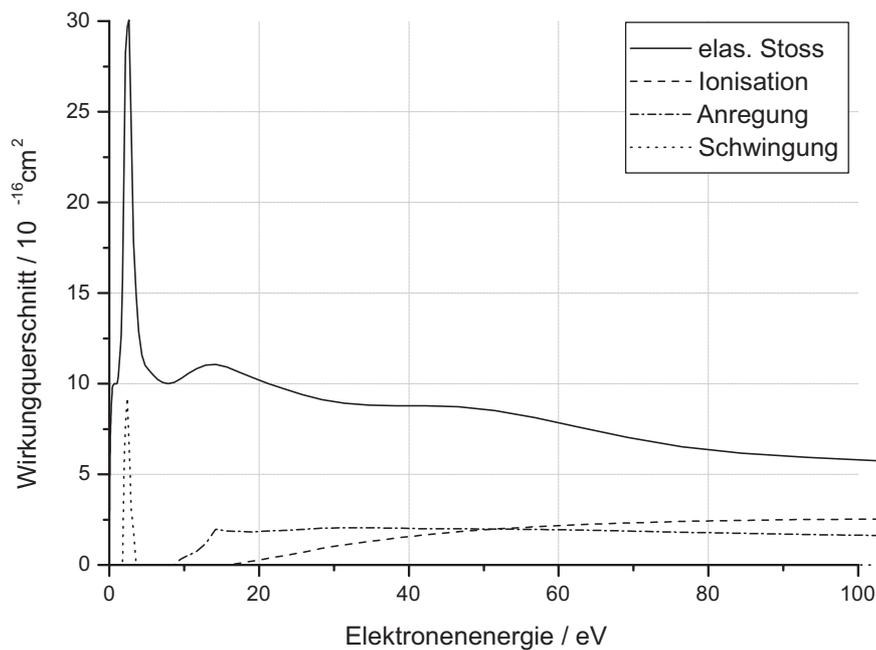
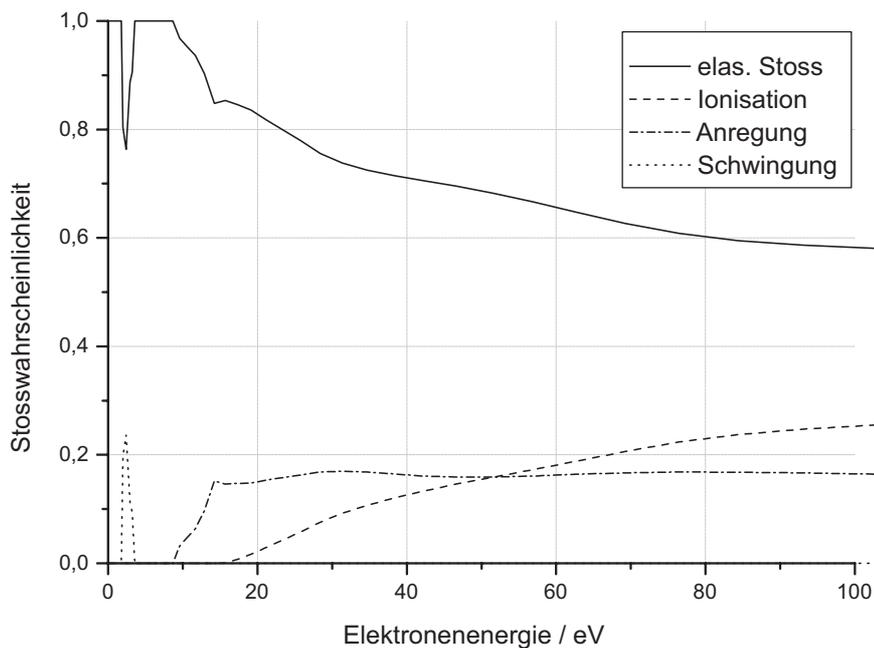


Abbildung 4.2: Wirkungsquerschnitt von  $N_2$

Im Anschluss an die Korrektur wird die Zeit um  $\Delta t$  erhöht und der gesamte Algorithmus wiederholt (siehe 4.4).

Der Rechenaufwand besteht darin, die Stossquerschnitte sämtlicher Stossarten und deren relative Wahrscheinlichkeit zu berechnen und die Korrektur der Koordinaten ( $\mathbf{x}, \mathbf{v}$ ) durchzuführen. Die dynamische Verwaltung der Daten stellt die nächste Schwierigkeit dar. Die Abbildung 4.4 zeigt die eine schematische programmiertechnische Realisierung der MCS. Die Elektronen werden in einem dynamischen Feld verwaltet. Jedes Elektron fliegt in der Zeit  $\Delta T$  frei. Seine Stosswahrscheinlichkeit wird dann mit einer Zufallszahl (Rnd) verglichen. Kommt es zu einem elastischen oder zu gar keinem werden die Koordinaten korrigiert. Sollte es aber zu einem elastischen Stoss kommen, werden neue Teilchen erzeugt und den entsprechenden dynamischen Feldern hinzugefügt.

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, werden die Stossquerschnitte analytisch beschrieben, indem sie in kleinen Intervallen durch Polynome und einfache Funktionen approximiert werden. Sowohl bei der Vibration als auch bei der Anregung werden nur die wahrscheinlichsten Linien berück-



**Abbildung 4.3:** Die einzelnen Stosswahrscheinlichkeiten abgeleitet von der Abb. 4.2.

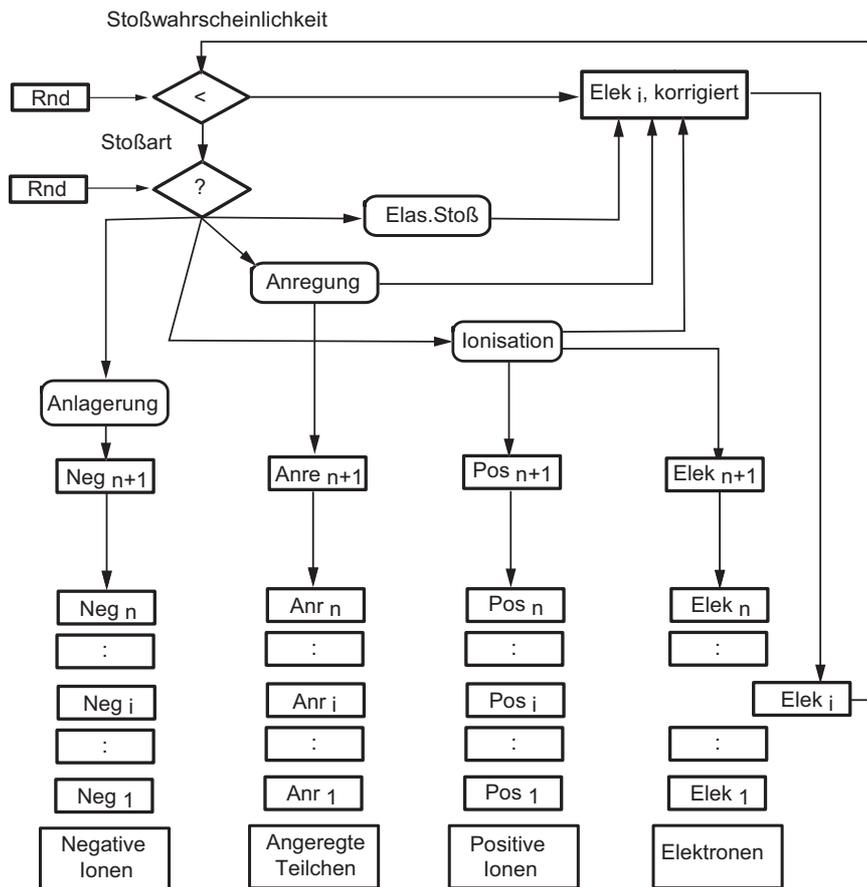
sichtigt. Im unteren Beispiel ( $N_2$ ) sind 7 Schwingungs- und 13 Anregungszustände berücksichtigt worden. Da bei solchen Stößen, die Schwingungs- bzw. die Anregungsenergie subtrahiert wird, führt die Annahme der kleinsten Energieschwelle bei derartigen Stößen zu Erhöhungen der gesamten Systemenergie. In dieser Arbeit wurde eine mittlere Energieschwelle abgezogen, in Abhängigkeit davon, welche Zustände und mit welcher Wahrscheinlichkeit diese involviert sind. Außerdem wurde auf die Verwaltung der angeregten Teilchen verzichtet, da die Photoionisation in diesem Modell nicht betrachtet wird.

### 4.3 Kombination mit der Feldberechnung

Die Monte-Carlo-Simulation wurde in dieser Arbeit nur in der Anfangsphase der Zündung eingesetzt. In dieser Phase ist eine Feldverzerrung aufgrund der schwachen Raumladung (Rückkopplung) ausgeschlossen. Dafür ist die Anzahl der Ladungsträger zu gering und deren räumliche Verteilung ungünstig. Handelt es sich um ein homogenes Feld, ist eine Feldberechnung überflüssig.

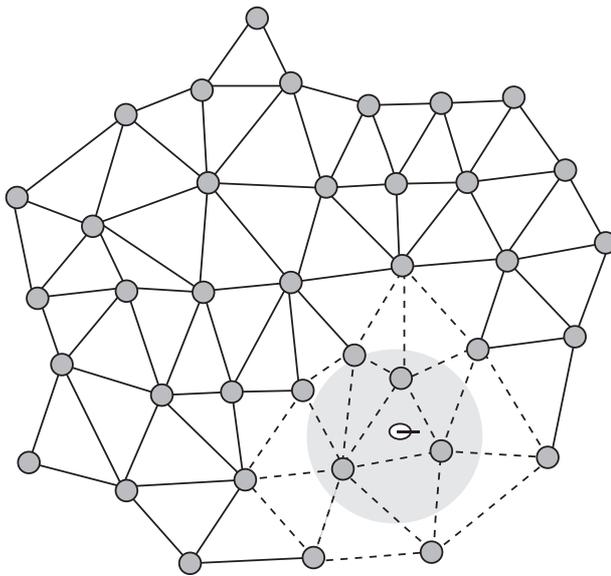
**Tabelle 4.1:** Geschwindigkeit der Elektronen nach einem Stoß

Kollisionsart	$v_{nach} = f(v_{vor})$
Elastischer Stoß	$v_{nach}^2 = v_{vor}^2$
Anregung	$v_{nach}^2 = v_{vor}^2 - \frac{2}{m} E_{anre}$
Ionisation	$v_{nach}^2 = \Delta(v_{vor}^2 - \frac{2}{m} E_{ioni})$
Anlagerung	$v_{nach} = 0$

**Abbildung 4.4:** Ablauf der Monte Carlo Simulation zur Beschreibung einer elektrischen Entladung.

Eine Kombination mit einer Feldberechnung ist allerdings unerlässlich, sobald das Feld Inhomogenitäten aufgrund einer geometrischen Konfiguration aufweist. Die Elektronen sollen dem Feld ausgesetzt werden, das an der Stelle wirkt, an der sie sich befinden.

Dazu gehört eine schnelle und effektive Technik zur Lokalisierung der Ladungsträger. Die Netze, die der räumlichen Diskretisierung der Laplace-Gleichung dienen, bestehen aus Dreiecken. An den Knoten der Dreiecke wird das Potential und in einem zweiten Schritt das elektrische Feld innerhalb der Dreiecke ermittelt. Bei einem linearen Ansatz (siehe 5.1.1) wird von einem konstanten Feld innerhalb eines finiten Elements ausgegangen. Aus diesem Grund ist es ausreichend, das Dreieck zu ermitteln, in dem sich das Elektron befindet. Somit ist das Feld bekannt, das auf das Elektron wirkt. Für eine genauere Berechnung besteht die Möglichkeit das Feld an den Knoten und dann an einem beliebigen Punkt innerhalb des Dreiecks durch lineare Interpolation zu ermitteln. So wird ein homogenerer Feldübergang zwischen den einzelnen Dreiecken gewährleistet. Dieser Aufwand kann entfallen, wenn die Diskretisierung dementsprechend fein genug ist. Zur Lokalisierung der Ladungsträger wurde eine neue Technik entwickelt.



**Abbildung 4.5:** Technik zur Lokalisierung der Ladungsträger: Nur die gestrichelten Dreiecke werden der zusätzlichen Untersuchung unterzogen.

Es wird bereits bei der Netzdiskretisierung die längste Kante im Netz berechnet. Es wird durch die Dreiecke gegangen und die Koordinaten des ersten Knoten des Dreiecks werden ermittelt. Ist der Abstand zwischen dem Elektron und dem Knoten größer als die Länge der längsten Kante, so befindet sich das Dreieck nicht in der Nähe des jeweiligen Dreiecks. Anderenfalls werden die Koordinaten der restlichen Knoten ermittelt. Da die Knoten im positiven Uhrzeigersinn angeordnet sind, so befindet sich das Elektron stets links von den einzelnen Kanten des Dreiecks, sollte das Dreieck das Elektron enthalten. Seien  $A$ ,  $B$  und  $C$  die Knoten des Dreiecks und  $P$  der Aufenthaltsort des Elektrons. Befindet sich  $P$  innerhalb des Dreiecks ( $ABC$ ), so gilt:

$$\overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{AP}, \overrightarrow{BC} \times \overrightarrow{BP}, \overrightarrow{CA} \times \overrightarrow{CP} \geq 0 \quad (4.13)$$

Diese Bedingung kann so verstanden werden, dass die Summe der von  $ABP$ ,  $BCP$  und  $CAP$  aufgespannten Flächen gleich der Fläche  $ABC$  sein muss. Wenn dies nicht der Fall ist, ist mindestens eines der obigen Kreuzprodukte negativ. Es sind aber nur wenige Dreiecke, die dieser zusätzlichen Suche unterzogen werden, da nur solche mit Knoten innerhalb des Kreises  $K(P, \text{längste Kante})$  in Frage kommen (siehe 4.5). Diese Technik zur Lokalisierung wird am Anschluss der MCS eingesetzt, wenn die Verteilung der Ladungsträger über Dichten beschrieben werden soll. Es wird an dieser Stelle so verfahren, dass die Spezies in einem Dreieck aufsummiert und durch die Fläche dividiert werden. Daraus ergibt sich die Dichte innerhalb der Dreiecke. Die Ermittlung der Dichte an den Knoten läuft über die Mittelung der umgebenden Dichten.

$$n(P) = \frac{1}{r} \sum_{i=0, P \in D_i}^r n(D_i), \quad (4.14)$$

wobei  $r$  für die Anzahl der umgebenden Dreiecke, die  $P$  enthalten, steht. Die andere Alternative, den Beitrag der einzelnen Elektronen zu der Dichte an den Knoten zu berechnen, ist mit großem Rechenaufwand verbunden, bringt jedoch keine besonderen Vorteile.

Dieser Schritt darf allerdings erst vollzogen werden, wenn genügend Ladungsträger vorhanden sind (eine glatte Geschwindigkeitsverteilung). Dies garantiert, dass die Ladungsträger in einer Zelle (einem finiten Element) Maxwell verteilt sind, um ein Fluidmodell anwenden zu dürfen.

Dieselbe Technik zur Lokalisierung wurde außerdem genau so erfolgreich eingesetzt, wenn ein Netz dichter diskretisiert werden sollte. Das ursprüngliche und das neue dichtere Netz werden aufeinander gelegt. Die Knoten des neuen

Netzes werden im alten lokalisiert. Durch Interpolation (in der Regel linear) werden die einzelnen Größen (Elektronendichte, Dichte der positiven Ionen, ... ) an den entsprechenden Knoten ermittelt. Da die Ladungserhaltung dabei gewährleistet werden muss, wird im Anschluss notfalls eine Skalierung vorgenommen. Diese Technik stellt damit eine sehr erprobte und effiziente Methode, eine Simulation mit einem dichteren Netz weiterzuführen, ohne großen Aufwand zu betreiben.

## 4.4 Beispielrechnungen

Im folgenden Beispiel wird eine Spannung von  $U=15$  kV an zwei parallel angeordneten Elektroden im Abstand von  $d=3$  mm angelegt. Ein einzelnes Elektron wird mittig in unmittelbarer Nähe der Kathode mit einer verschwindenden Energie aufgebracht (siehe 4.6, das erste Bild). Es handelt sich bei der folgenden Simulation um Stickstoff unter Atmosphärendruck. Ein Zeitschritt von  $\Delta T=10$  fs wurde gewählt, womit gewährleistet wird, dass 10 Schritte der mittleren freien Weglänge eines Elektrons mit einer Energie von 20 eV entsprechen [Wel92].

In den Abbildungen (4.6) und (4.7) stehen die dunklen senkrechten Striche für die Elektronen und die hellen waagrechten für die positiven Ionen. Die Lawinenform ist deutlich zu erkennen. Die Elektronen bilden dabei den schnellen Kopf der Lawine, wobei die Ionen den Schwanz bilden. Ebenso ist die Diffusion bzw. die Verbreitung der Lawine gut zu erkennen. Sie ist nicht auf elektrische Kräfte zurückzuführen, sondern auf die Stöße mit den neutralen Teilchen.

Aus den Daten können folgende Größe extrahiert werden:

- Die Driftgeschwindigkeit:

$$v_d(t_n) = \frac{\bar{x}(t_n) - \bar{x}(t_{n-1})}{\Delta T}, \quad (4.15)$$

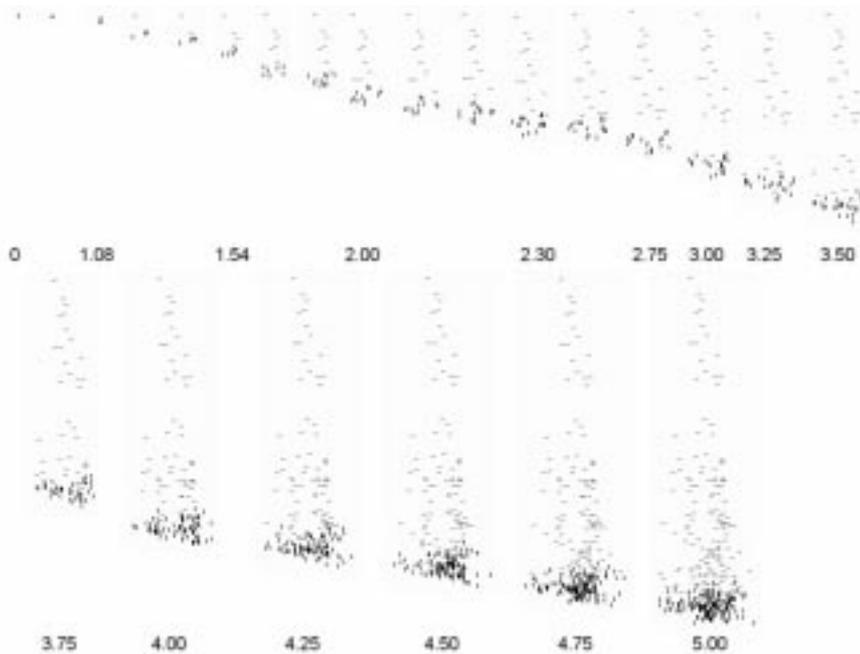
wobei  $\bar{x}$  den Schwerpunkt der Elektronenlawine darstellt. Wird die Gleichung (4.1) umgestellt, lässt sich

- der Ionisierungskoeffizient folgendermaßen beschreiben:

$$\alpha = \frac{N(t_n) - N(t_{n-1})}{\bar{x}(t_n) - \bar{x}(t_{n-1})} \quad (4.16)$$

- Die mittlere Energie folgendermaßen berechnen:

$$E_m = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \frac{1}{2} m_e v_i^2, \quad (4.17)$$



**Abbildung 4.6:** Die stochastische Entwicklung einer Elektronenlawine, Momentaufnahmen im Bereich 0 bis 5.0 ns

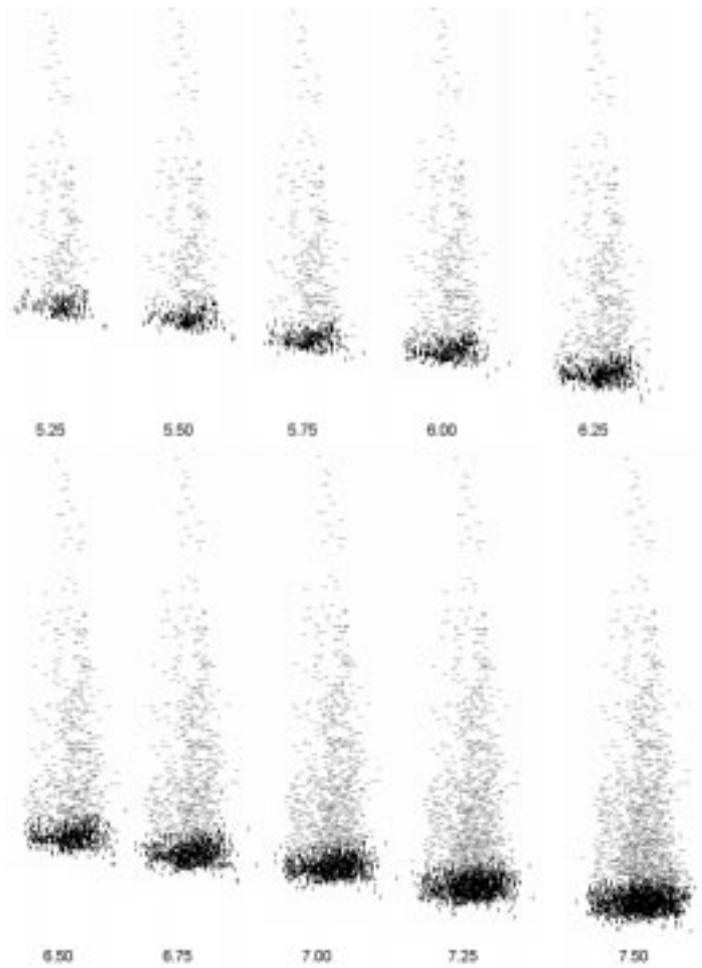
wobei  $v_i$  für den Betrag der Geschwindigkeit des  $i$ -ten Elektrons und  $n$  für die Anzahl der Elektronen steht.

Ähnlich lassen sich die weiteren (hier unwesentlich) Stossparameter bestimmen; z.B. der Anlagerungskoeffizient, die Beweglichkeit, die Diffusion.

In der Abb. 4.8 ist die exponentielle lawinenartige Elektronenvermehrung zu beobachten. Interessant dabei ist die Fluktuationszeit  $t_F$  von etwa 5 ns, die vergeht, bis sich ein homogenes Kollektiv bildet.

Aus der logarithmischen Darstellung und der Ermittlung der Schwerpunkte kann der Ionisierungskoeffizient ermittelt werden. Eine weitere Kenngröße zur Beurteilung der Stabilität des Kollektives stellt die mittlere Energie dar. In der Abbildung (4.9) ist ebenso die Fluktuationszeit von etwa 5 ns zu erkennen.

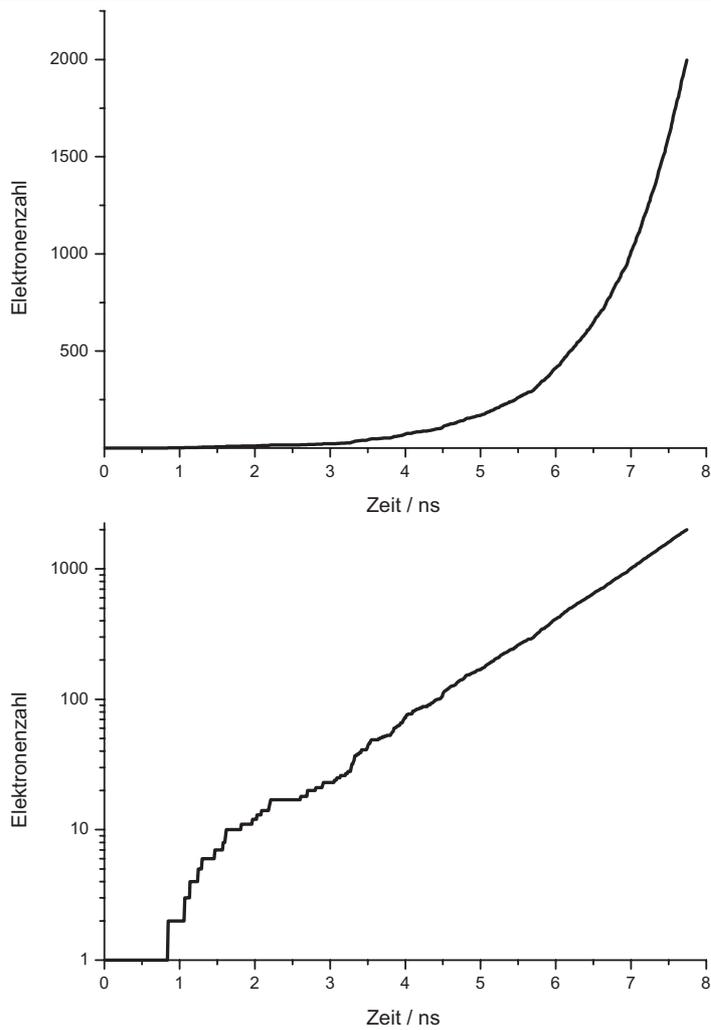
Aus der logarithmischen Darstellung und der Ermittlung der Schwerpunkte kann der Ionisierungskoeffizient ermittelt werden. Eine weitere Kenngröße zur Beurteilung der Stabilität des Kollektives stellt die mittlere Energie



**Abbildung 4.7:** Die deterministische Weiterentwicklung der Elektronenlawine aus 4.6, Momentaufnahmen im Bereich 5.0 bis 7.5 ns

dar. In der Abbildung (4.9) ist ebenso die Fluktuationszeit von etwa 5 ns zu erkennen.

Als nächstes wird ein Beispiel für die Dichteberechnung mittels dem oben beschriebenen Algorithmus zur Lokalisierung der Ladungsträger vorgestellt. Es empfiehlt sich zunächst ein grobes Netz zu verwenden und dieses entlang der Richtung zu verfeinern, in der die Elektronenlawine wächst. Für spätere



**Abbildung 4.8:** Elektronenzahl, linear und logarithmisch aufgetragen.

Anwendungen kann das Netz an anderen Stellen beliebig nachverfeinert werden. Dabei wird die oben erläuterte Interpolationstechnik eingesetzt. In der Abbildung (4.10) ist links die räumliche Teilchenverteilung zu sehen. Die Ausdehnung der Lawine beträgt 0.8 mm und sie ist etwa 0.2 mm breit. In der Mitte ist die zugehörige Elektronendichte und rechts die Ionenverteilung zu sehen, wobei die Teilchendichten logarithmisch zwischen 0 (hell)

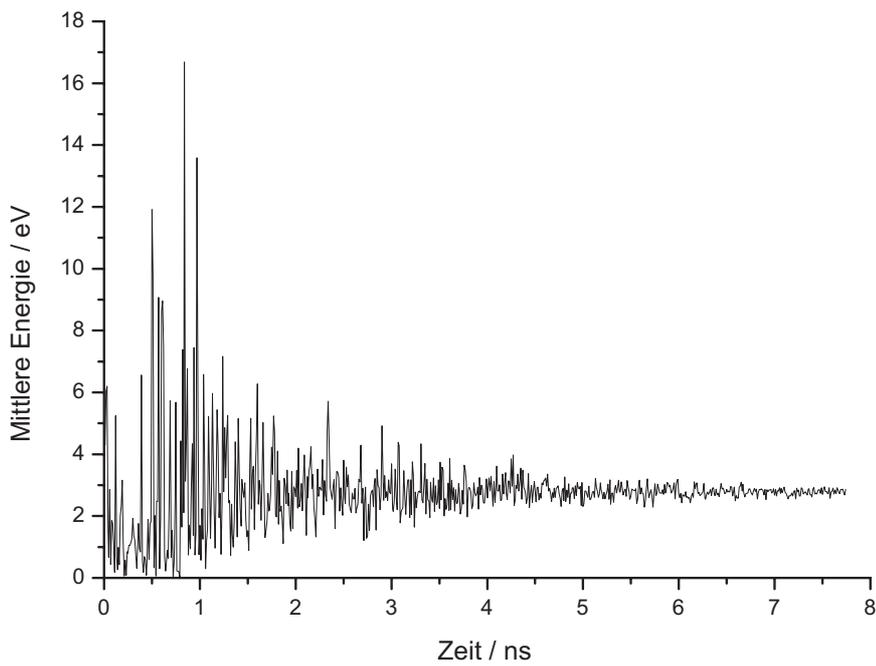
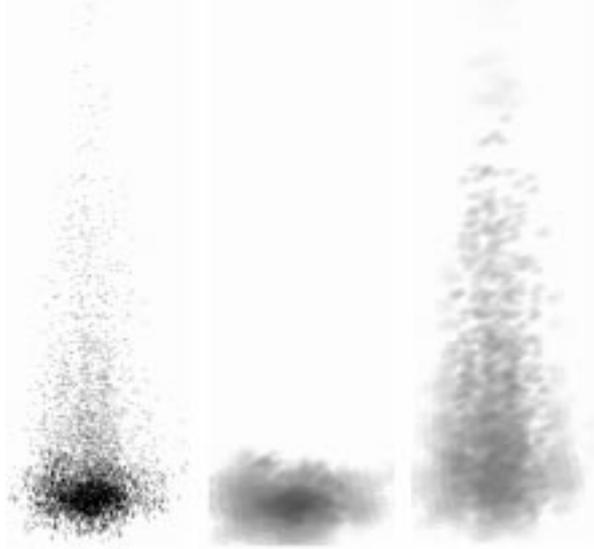


Abbildung 4.9: Verlauf der mittleren Energie

und  $10^4$  Teilchen/mm<sup>2</sup> (dunkel) dargestellt sind. Die Ladungstrennung ist deutlich zu erkennen : Während die Elektronen im Lawinenkopf (dunkel) konzentriert sind, bilden die positiven Ionen den Schwanz der Lawine (heller).

Des weiteren ist die Unsymmetrie der Lawinen zu erkennen. Sie ist einerseits auf die stochastische Entwicklung der Lawine zurückzuführen, andererseits auf die Abbildung der Elektronen auf die Dreiecke (Digitalisierungsfehler). Der zweite Fehler läßt sich minimieren, indem das Netz entsprechend verfeinert wird.



**Abbildung 4.10:** links: Räumliche Teilchenverteilung der Elektronen und Ionen, Mitte: Elektronendichteverteilung, rechts: Dichteverteilung der positiven Ionen.

## 4.5 Einfluss der Stochastik auf die Gesamtentladung

Das folgende Beispiel verdeutlicht den Einfluss der Fluktuation auf die Gesamtentladung. Es werden zwei Elektronenlawinen beobachtet, die unter den gleichen Bedingungen, wie im obigen Beispiel initiiert wurden ( $U=15$  kV,  $d=3$  mm, ein Elektron mittig aufgebracht). Beide Entladungen wurden über einen Zeitraum von  $\Delta T = 10$  ns simuliert.

Zunächst werden die räumlichen Verteilungen beider Lawinen verglichen (siehe Abbildung 4.11).

Die zweite Lawine hat eine Ausdehnung von 0.85 mm und ist um  $\approx 0.07$  mm größer als die erste, obwohl die Anzahl der Ladungsträger viel kleiner ist als bei der ersten Lawine. Dies hängt damit zusammen, dass die Ionisierungsvorgänge nicht effizient waren. Indem die Elektronen weniger ionisieren, behalten sie ihre kinetische Energie und kommen schneller vorwärts.

In der Abbildung (4.12) wurde die Anzahl der Elektronen beider Lawinen logarithmisch aufgetragen. Deutlich zu sehen ist, dass die Äste nach der



**Abbildung 4.11:** Vergleich der geometrischen Verteilung beider Lawinen

jeweiligen Fluktuationszeit parallel verlaufen. Beide Lawinen wachsen exponentiell und zwar mit der gleichen Wachstumsrate (beide Kollektive spüren das identische elektrische Feld und folglich die gleichen elektrischen Kräfte). Der Grund für den Unterschied in der Entwicklung der beiden Äste ist die Fluktuation in den ersten Nanosekunden. Sie führt in diesem Beispiel zu einer um den Faktor 1000 verschiedenen Anzahl der Elektronen.

Dieser Faktor von 1000 kann unter Umständen dafür verantwortlich sein, dass die erste Lawine einen Durchschlag herbeiführt, die zweite aber nicht.

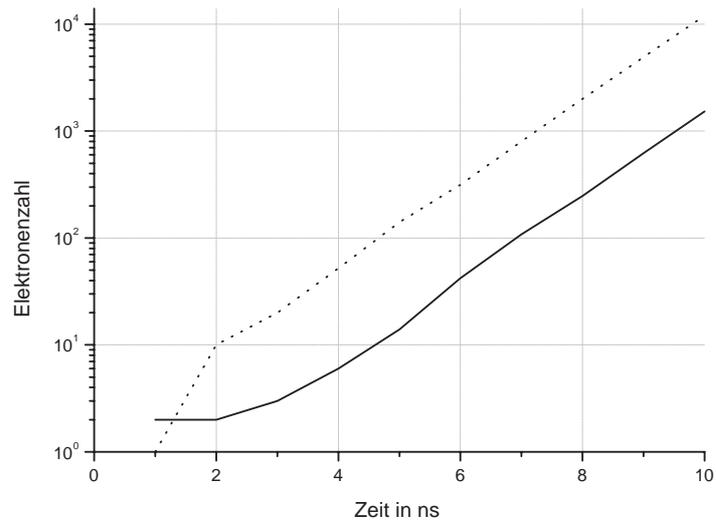


Abbildung 4.12: Vergleich der Elektronenzahl

# Kapitel 5

## Lösungsverfahren

### 5.1 Die Finite Elemente Methode

Die FEM eignet sich besonders gut, um elliptische Differentialgleichungen zu lösen, insbesondere Poisson- und Laplace-Gleichungen [Ric86], [Sch93], [Ste98], [Zie97], [Gro94], [Hac91], [Kna00], [Möl97], [Smi70]. Es folgt zunächst eine allgemeine Herleitung der Lösung der Poisson-Gleichung fürs elektrische Potential, die sich ohne weiteres auf andere Potentiale übertragen läßt.  $u$  steht dabei für das Potential und  $f$  für den Störterm. Im Fall der Laplace Gleichung ist der Störterm Null.

#### 5.1.1 Grundlagen

Def: Klassische Lösung:

sei  $f \in C(\Omega)$  und  $g \in C(\partial\Omega)$ . Eine Funktion  $u$  heißt (klassische) Lösung der Randwertaufgabe:

$$-\sum_{i=0}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \cdot u = f \text{ in } \Omega, \quad (5.1)$$

und

$$u = g \text{ auf } \partial\Omega, \quad (5.2)$$

wenn  $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$  und (5.1) für alle  $x \in \Omega$ , sowie (5.2) für alle  $x \in \partial\Omega$  gilt.

Die obigen Gleichungen (5.1,5.2) lassen sich über die Variationsformulierung lösen. Die klassische Lösung  $u$  soll in  $C^1(\Omega)$  liegen, während die Testfunktion

in  $v \in C_0^\infty(\Omega)$  sein soll. Es gilt:

$$f(x) = -\Delta u(x), \quad (5.3)$$

welches zum folgenden Ausdruck äquivalent ist:

$$f(x) \cdot v(x) = -\Delta u(x) \cdot v(x). \quad (5.4)$$

Durch die Integration beider Seiten, Einführung des Skalarproduktes und Anwendung des Gauss'schen Satzes läßt sich der obige Ausdruck, wie folgt, ausdrücken:

$$\langle f, v \rangle_0 = \int_{\Omega} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) \, dx = a(u, v), \quad (5.5)$$

wobei  $a(u, v)$  eine Bilinearform darstellt (siehe C). So erfüllt eine klassische Lösung der Randwertaufgabe die Identität:

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle_0, \quad \text{für alle } v \in C_0^\infty(\Omega). \quad (5.6)$$

Folglich ist ein  $u \in V$  mit  $a(u, v) = \langle f, v \rangle_0$  für alle  $v \in V$  gesucht.

Die Variationsgleichung ist äquivalent zu einem Minimierungsproblem, das so formuliert werden kann:

Gesucht ist ein  $u \in V$  wobei

$$F(u) = \min\{F(v) | v \in V\} \quad (5.7)$$

und

$$F(v) = \frac{1}{2}a^2(v, v) - b(v) \quad (5.8)$$

ist.

Die Minimierungsaufgabe entspricht physikalisch einer minimalistischer Verteilung der elektrostatischen Energie im Rechengebiet. Durch Nullsetzen der Ableitung von  $F(v)$  geht die Äquivalenz beider Ansätze (Variation und Minimierung) hervor [Sch97a].

Sei  $V_n$  ein Vektorraum mit der Basis  $\{\varphi_1, \dots, \varphi_M\}$ , d.h.  $\dim V_n < \infty$ , dann lautet die Ritz-Galerkin Approximation der Variationsgleichung:

Gesucht  $u_n = \sum_{i=1}^M \xi_i \varphi_i \in V_n$  mit  $a(u_n, v) = \langle f, v \rangle_0$  für alle  $v \in V_n$ .

Dieser Ausdruck läßt sich nach einigen Umformungen folgendermaßen formulieren:

$$\sum_{i=1}^M a(\varphi_i, \varphi_i) \cdot \xi_i = b(\varphi_i) \quad \text{für alle } i = 1 \dots M, \quad (5.9)$$

und in einer Matrixschreibweise:

$$S \cdot \varphi = B \quad (5.10)$$

mit  $S = (a(\varphi_j, \varphi_i))_{i,j} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ ,  $\varphi = (\xi_1, \dots, \xi_M)^T$  und  $B = (b(\varphi_i))_i$ .

Die oben aufgeführte Herleitung ist unabhängig von der Art der Diskretisierung. Für die obige Betrachtung ist die Zahl  $M$  (Anzahl der Stützstellen), die die Dimension des Vektorraums darstellt, von Bedeutung.

In dieser Arbeit wurde aufgrund seiner leichten Handhabung in Verbindung mit der Dreiecksdiskretisierung der lineare Ansatz verwendet. Das Potential wird hierbei innerhalb eines Dreiecks mit einer linearen Funktion approximiert:

$$\varphi = a \cdot x + b \cdot y + c. \quad (5.11)$$

Die Potentiale an den Knoten eines Dreiecks ( $i, j, k$ ) lauten  $\varphi_i$ ,  $\varphi_j$  und  $\varphi_k$ . Das Potential innerhalb eines Dreiecks lässt sich dann als Funktion der Potentiale an den Knoten ausdrücken:

$$\varphi = N_i \cdot \varphi_i + N_j \cdot \varphi_j + N_k \cdot \varphi_k, \quad (5.12)$$

mit

$$N_i = \frac{1}{2F} \cdot [(x_j y_k - x_k y_j) + (y_j - y_k)x + (x_k - x_j)y]. \quad (5.13)$$

$F$  steht hierbei für die Fläche des Dreiecks.  $N_j$  und  $N_k$  lassen sich analog herleiten, indem die Indizes im positiven Uhrzeigersinn getauscht werden. Die  $N_i$ , Formfunktionen genannt, besitzen die Pyramideneigenschaft, welche gewährleistet, dass  $\varphi(x_i, y_i) = \varphi_i$ :

$$N_i(x_j, y_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{ansonsten.} \end{cases} \quad (5.14)$$

Die Steifigkeitsmatrix  $S$  aus (5.10) wird berechnet, indem die Beiträge der einzelnen Dreiecke zusammenaddiert werden.

$$a(\varphi_j, \varphi_i) = - \int_{\Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx = - \int_{\sum K \in \Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx \quad (5.15)$$

$A_{i,j}$  beschreibt die symmetrische Beeinflussung der Knoten  $i$  und  $j$  bzw. den Einfluss der Nachbarknoten auf den  $i$ -ten Knoten, wenn gilt  $i = j$ . Zur Berechnung der Beiträge werden deshalb nur die Dreiecke, die die Knoten  $i$  und  $j$  gleichzeitig enthalten, herangezogen. Da nur wenige Dreiecke zu  $A_{i,j}$

beitragen, ist es sinnvoller die Beiträge der Dreiecke einzeln zu berechnen und in der Steifigkeitsmatrix zu assemblieren (siehe 5.16).

$$a(\varphi_j, \varphi_i) = - \int_{\sum_{i,j \in K} K \in \Omega} \nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i \, dx \quad (5.16)$$

Zur Auswertung der Integrale empfiehlt sich die Einführung der baryzentrischen Koordinaten [Sch97a]. Sie ermöglichen eine geschlossene analytische Lösung der Integrale. So lässt sich der Beitrag von einem Dreieck, welches die Knoten  $i$  und  $j$  enthält, zu der Steifigkeitsmatrix folgendermaßen berechnen:

$$a_{ij} = - \int \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j \, dx = - \int \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) \, dx \, dy \quad (5.17)$$

Wenn die einzelnen Integrale ausgeschrieben und anschließend nach Koordinatentransformation ausgewertet werden, dann trägt das Dreieck  $(i,j,k)$  zur gesamten Steifigkeitsmatrix mit der folgenden  $3 \times 3$  Matrix bei:

$$S^{(l)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} z_2 + z_3 & -z_3 & -z_2 \\ -z_3 & z_1 + z_3 & -z_1 \\ -z_2 & -z_1 & z_1 + z_2 \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

wobei sich  $z_k$ ,  $k = 1, 2, 3$  wie folgt berechnen lässt:

$$z_k = \frac{1}{2F} ((y_j - y_k)(y_k - y_i) + (x_k - x_j)(x_i - x_k)) \quad (5.19)$$

Sollte der Störterm (elektrische Raumladung) mitberücksichtigt, bzw. die Poisson Gleichung gelöst werden, muss das obige GLS (5.10) um einen Term erweitert werden.

$$[S]\{\varphi\} + [T]\{\rho\} + \{B\} = 0 \quad (5.20)$$

Dabei lässt sich der Beitrag eines Dreiecks zur Matrix  $T$  folgendermaßen berechnen:

$$t_{ij} = - \int_K N_j N_i \, dx \, dy \quad (5.21)$$

Hier wird ähnlich wie bei der Berechnung der Beiträge zur Steifigkeitsmatrix verfahren. So liefert das Dreieck  $(i,j,k)$  den folgenden Beitrag:

$$S^{(l)} = \frac{F}{12} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

Bei bekannter Raumladung wird  $[T]\{\rho\}$  ausmultipliziert und zu  $B$  addiert und die Form des GLS (5.10) wird wieder hergestellt.

Die Matrix  $S$  ist, wie es aus (5.18) und der entsprechenden Bilinearform hervorgeht, symmetrisch und positiv definit. Aufgrund der Tatsache, dass jeder Knoten eine begrenzte Anzahl von Nachbarn hat, ist die Matrix schwach besetzt. Bei dieser Art von Matrizen spielt die Bandbreite eine wichtige Rolle bei der Beschleunigung der Konvergenz iterativer Lösungsverfahren. Die Bandbreite entspricht der maximalen Entfernung der Einträge von der Diagonale. Um die Bandbreite zu minimieren empfiehlt sich eine Ummummerierung der Knoten. Der in diese Arbeit eingesetzte Algorithmus von Cuthill und McKee mit der Bildung von Abstandsklassen liefert eine zufriedenstellende Bandbreite. Auf die Algorithmen wird hier aber nicht eingegangen [Sch97a].

### 5.1.2 Einbringung der Randwerte

Als nächstes werden die bekannten Randwerte eingebracht. Wenn z.B. das Potential des  $i$ -ten Knoten bekannt ist, werden jeweils die  $i$ -te Spalte und die  $i$ -te Reihe auf 0 gesetzt, bis auf das Element  $A_{i,i}$ , das auf 1 gesetzt wird. Auf der rechten Seite (RHS) wird  $b_i$  auf das bekannte Potential gesetzt und von den restlichen Einträgen das Produkt  $a_{i,j} * \varphi^*$  abgezogen (siehe 5.23).

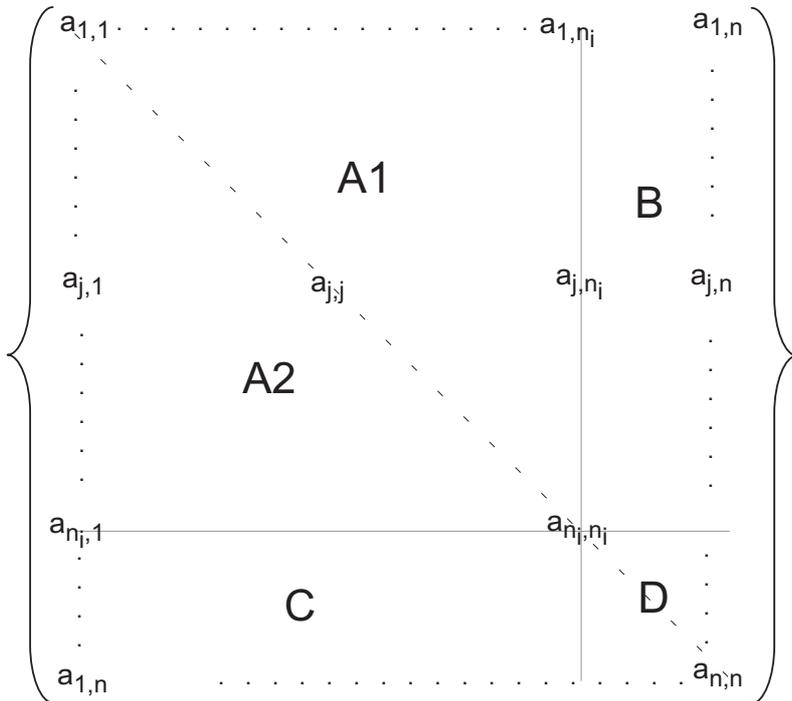
$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & 0 & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \dots \\ \varphi_i \\ \dots \\ \varphi_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 + a_{1,i} * \varphi_i^* \\ \dots \\ \varphi_i^* \\ \dots \\ b_n + a_{n,i} * \varphi_i^* \end{pmatrix} = 0 \quad (5.23)$$

Angesichts der Tatsache, dass  $n_R$  Randwerte bekannt sind, reduziert sich die Aufgabe auf die Lösung eines Gleichungssystems der Größe  $n - n_R = n_i$ , wobei  $n$  die Anzahl der Knoten ist. Zwar reduziert das o.g. Verfahren von Cuthill und McKee die Bandbreite durch eine radikale Ummummerierung der Knoten, es macht aber keine Aussage über die Verteilung der Knoten mit dem bekannten Potential. Die Aufgabe der Einbringung der Randwerte läuft letztendlich über eine Reduzierung der Matrixgröße von  $n$  auf  $n - n_R$  hinaus. Sind die Knoten mit bekanntem Potential in der Matrix verstreut, gibt es zwei Alternativen.

- Die Gesamtmatrix mit  $n$  Knoten wird berechnet. Dies impliziert, dass die Randknoten, obwohl bekannt, neu berechnet werden. Zwar konvergiert das Lösungsverfahren schneller, der Rechenaufwand ist aber insgesamt größer.

- Die Randwerte werden aussortiert. Es entsteht dabei ein Gleichungssystem der Größe  $n_i$ , was an und für sich eine kompakte Darstellung darstellt. Die Sortierung erfordert dennoch zwei zusätzliche Listen: Die erste für die Sortierung und die zweite für die Rücksortierung, damit jedem Knoten wieder das richtige Potential zugewiesen wird.

In dieser Arbeit kommt es bereits bei der Umnummerierung zwecks Reduktion der Bandbreite zu der Versetzung der Knoten mit einem bekannten Potential ans Ende der Knotenliste. Dies kann zu einer Verbesserung der Bandbreite führen, verschlechtert sie aber keineswegs. Es entsteht die Matrixstruktur wie in Abbildung (5.1) beschrieben ist. Die vorgestellte



**Abbildung 5.1:** Matrixstruktur

Struktur vermeidet zugleich die zwei o.g. Nachteile. Eine reduzierte Matrix für einen Lösungsvektor der Größe  $n_i$  wird berechnet, ohne sortieren zu müssen. Da die Matrix symmetrisch ist, wird auf die Berechnung der Teilmatrizen A2 und C verzichtet.

Wenn die Randwerteinbringung nach dem obigen Schema durchgeführt wird, werden nur die Teilmatrizen  $B$  und  $D$  herangezogen. Die Teilmatrix  $B$  wird auf die RHS gebracht, was aufgrund ihrer Kompaktheit systematisch verläuft. Wenn die Einbringung der Randwerte nach dem oben aufgeführten Schema durchgeführt wird, stellt sich heraus, dass die Einträge in der Teilmatrix  $D$  überflüssig sind. Diese Erkenntnis veranlasst eine weitere Reduzierung des Rechenaufwandes. Wenn sich die Randwerte nicht ändern, ist es sinnvoller die Einträge von  $B$  nicht zu speichern, sondern sofort auf die rechte Seite zu bringen. Ist dies nicht der Fall, werden  $B$  und  $A_1$  getrennt gespeichert.

### 5.1.3 Matrixspeicherung

Aufgrund der geometrischen Konfiguration (die einzelnen Knoten sind nur mit wenigen Knoten verbunden), ist die Steifigkeitsmatrix schwach besetzt. Die Tatsache legt die Notwendigkeit einer anderen Art der Speicherung als die klassische Matrixspeicherung ( $n$ -Liste aus  $n$ -großen Spalten) nahe. Die Daten sollen so gespeichert werden, dass der Speicherbedarf so gering wie möglich gehalten wird, ohne die Zugriffsschnelligkeit zu beeinträchtigen. Die CRS (compressed row storage) Methode hat sich in dieser Hinsicht sehr gut bewährt [Höl98], [Sch97b]. Dabei werden nur die von Null verschiedenen Einträge gespeichert. In einer weiteren Liste werden die Indizes der Einträge auf der Diagonale gespeichert. In der dritten Liste werden die zu den Einträgen in der ersten Liste zugehörigen Spaltenindizes gespeichert [Dau01]. Der direkte Zugriff ist mit einer Suche verbunden, die bedingt durch die geringe Anzahl der Einträge in Kauf genommen werden kann. So entspricht  $A_{i,j}$  dem Element in der ersten Liste mit dem entsprechenden Spaltenindex  $j$  in der dritten Liste. Die Zahl in der  $i$ -ten Stelle der zweiten Liste gibt den Index an, ab welchem gesucht wird. Da die Matrix schwach besetzt ist, ist die Anzahl der Quereinträge sehr klein (1 bis 6), so dass die Suche schnell abgeschlossen wird.

Außerdem sind die Suchschleifen selten, denn es wird nicht oft auf die Einträge direkt zugegriffen. Viel häufiger wird berechnet, welchen Beitrag die Einträge in einer Operation leisten.

Bei einer Aufgabe, bei der sich die Dirichlet-Bedingungen ständig ändern (ansteigende Spannung, HF) und bleibender Diskretisierung empfiehlt sich die Matrix in ihrer invertierten Form zu speichern. Die Lösung des LGS bedarf in diesem Falle nur einer Vektor-Matrix-Multiplikation. Die invertierte Matrix ist allerdings voll besetzt. Es muss je nach Aufgabe abgeschätzt werden, ob eine rechenaufwendige sowie eine speicherintensive Invertierung lohnt.

Die Teilmatrix  $D$  soll unabhängig von  $A1$  nach dem RKS-Schema gespeichert werden, um eine schnelle und effiziente Einbringung der Randwerte auf der RHS zu gewährleisten.

### 5.1.4 Lösung der Differentialgleichung

Da die Matrix schwach besetzt, symmetrisch und positiv definit ist, bietet sich das CG-Verfahren (Conjugated Gradient) an. Es handelt sich dabei um ein iteratives Verfahren, das spätestens nach  $n$  Schritten konvergiert [Sch97b],[Sch97a]. Maßgeblich für die Schnelligkeit der Konvergenz ist die spektrale Konditionszahl (das Verhältnis des größten zu dem kleinsten Eigenwert der Matrix). Diese wird hauptsächlich von der Matrixstruktur (Bandbreite) bestimmt. Um eine weitere Beschleunigung der Konvergenz herbeizuführen, empfiehlt sich eine Vorkonditionierung. Die vorkonditionierte Matrix ist "ähnlich" zur Steifigkeitsmatrix, besitzt dennoch eine kleinere Konditionszahl. Dies führt zu besseren Suchvektoren und somit schneller zur Lösung. So wird statt des ursprünglichen Gleichungssystems  $Ax = b$  ein äquivalentes System  $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$  aufgestellt, wobei  $\tilde{A} = M_1^{-1}AM_2^{-1}$ ,  $\tilde{x} = M_2x$  und  $\tilde{b} = M_1^{-1}b$  ist. Die erste Gleichung beschreibt die sogenannte Vorkonditionierung der Matrix  $A$  mit den Vorkonditionierungsmatrizen  $M_1$  und  $M_2$ . Sie besitzen die Eigenschaft, dass sie leicht invertierbar sind und die Matrix  $A$  gut approximieren bzw. zerlegen. Es wird nämlich angestrebt, dass  $A \approx M_1M_2$ . In dieser Arbeit ist die unvollständige Cholesky-Zerlegung IC-CG (Incomplete Cholesky Conjugated Gradient) implementiert worden. Die Vorkonditionierung hat sich als geeignet zur Beschleunigung der Konvergenz herausgestellt, obwohl die Cholesky-Zerlegung an sich einen Zusatzaufwand darstellt.

Bei vielen zu berechnenden Aufgabenstellungen ändert sich das Netz im Laufe der Berechnung nicht. Aus diesem Grund empfiehlt sich, die Matrix in ihrer invertierten Form zu speichern, und zur Lösung des GLS eine Matrix-Vektor-Multiplikation durchzuführen. Dies hat allerdings den Nachteil, dass eine Invertierung die Komplexität  $O(\frac{4}{3}N^3 - \frac{1}{3}n)$  hat. Hinzu kommt, dass die invertierte Matrix vollbesetzt ist.

In dieser Arbeit wurde zu Techniken gegriffen, die die Nachteile der umständlichen und rechenintensiven Invertierung reduzieren. Zunächst wird die Eigenschaft der positiven Definitheit der Matrix ausgenutzt.

Es gilt: Eine symmetrische Matrix  $A = (a_{ik}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ist genau dann positiv definit ist, wenn der Gauß'sche Eliminationsprozess bei Diagonalstrategie mit  $n$  positiven Pivotelementen durchführbar ist [Sch97b]. So können die Diagonalelemente als Pivotelemente dienen. Dies erspart eine Suche nach dem größten Pivotelement in der verbliebenen Matrix, eine Zeilenvertauschung und eine Rückvertauschung der Spalten nach dem Eliminationsschritt. So

läßt sich der vereinfachte Algorithmus folgendermaßen formulieren.

Algorithmus

für  $l = 0, 1, \dots, n$ :

$$pivot = A_{ll}$$

$$A_{ll} = 1/pivot$$

für  $i = l + 1, l + 2, \dots, n$ :

$$A_{i,k} = A_{i,l}A_{l,l}/pivot$$

für  $j = k + 1, k + 2, \dots, j$ :

$$A_{i,j} = A_{i,j} - A_{i,l}A_{l,j}$$

Somit wird der Invertierungsaufwand zunächst auf  $O(N^3)$  herabgesetzt. Des weiteren behält die invertierte Matrix ihre Symmetrie. Im Laufe der Invertierung wird die Matrix allerdings unsymmetrisch und erst im letzten Schritt gewinnt sie wieder ihre Symmetrie. Eine Speicherung der Gesamtmatrix impliziert außer dem doppelten Speicherbedarf den doppelten Rechenaufwand. In dieser Arbeit wurde ein Algorithmus entwickelt, der mit der halben Matrix auskommt. Er beruht auf der kurzzeitigen Wiederherstellung der Symmetrie im Verlauf der Invertierung.

Sei  $A^t$  die Matrix  $A$  nach  $t$  Schritten, wenn  $A_{tt}$  als Pivotelement herangezogen wird. So sieht die teilweise gebrochene Symmetrie der Matrix wie in Abbildung (5.2) dargestellt ist. Es gilt:

$$\begin{aligned} A_{ij}^t &= A_{ji} & \text{falls } i, j \leq t \\ A_{ij}^t &= -A_{ji} & \text{falls } i < t < j \text{ oder } j < t < i \\ A_{ij}^t &= A_{ji} & \text{falls } i, j > t \end{aligned} \quad (5.24)$$

Diese Matrixstruktur entsteht, indem die Elemente in der Teilmatrix  $Z$  noch unberührt sind und die Elemente der Teilmatrix  $X$  zweifach der Operation der Elimination unterzogen wurden. Unter der Beachtung der Dynamik der gebrochenen Symmetrie läßt sich die Symmetrie zur Durchführung der Operation, solange  $A_{tt}$  als Pivotelement gilt, wieder herstellen und zwar nach dem oben genannten Schema. Demnach läßt sich die Invertierung der Matrix dank der Teilsymmetrie mit der Hälfte des Speicherbedarfs durchführen. Der entsprechende Algorithmus sieht dann wie folgt aus.

Algorithmus

für  $l = 0, 1, \dots, n$ :

$$pivot = A_{ll}$$

$$A_{ll} = 1/pivot$$

für  $j = 0, 2, \dots, l - 1$ :

für  $i = 0, 1, \dots, j$ :

$$A_{i,j} = A_{i,j} + \frac{A_{i,l} * A_{j,l}}{pivot}$$

für  $j = l + 1, l + 2, \dots, n$ :

für  $i = 0, 1, \dots, l - 1$ :

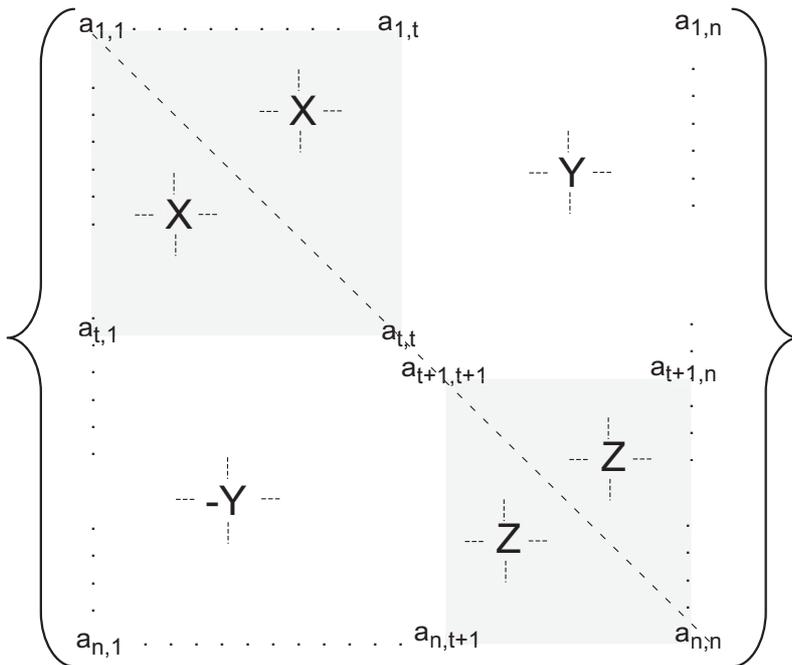


Abbildung 5.2: Matrixstruktur während der Invertierung

$$\begin{aligned}
 A_{i,j} &= A_{i,j} - \frac{A_{i,l} * A_{l,j}}{pivot} \\
 \text{für } i &= l + 1, l + 2, \dots, j: \\
 A_{i,j} &= A_{i,j} - \frac{A_{l,i} * A_{l,j}}{pivot} \\
 \text{für } j &= l + 1, l + 2, \dots, n: \\
 A_{l,j} &= -\frac{A_{l,j}}{pivot} \\
 \text{für } i &= 0, 1, \dots, l - 1: \\
 A_{i,j} &= \frac{A_{i,j}}{pivot}
 \end{aligned}$$

Der Algorithmus hat demnach die Komplexität  $O(\frac{n^3}{2})$ . Zwar besitzt eine Cholesky Zerlegung dieselbe Komplexität und ist unter Umständen schneller, aber das weiterentwickelte Gauss-Jordan Verfahren hat den entscheidenden Vorteil, dass die ursprüngliche Matrix in die invertierte überführt wird. Bei der Cholesky Zerlegung werden die zerlegte Matrix, ihre Inverse und das Produkt der Multiplikation (die invertierte Matrix) separat gespeichert. Für die oben beschriebenen Anwendungen ist während der Invertierung die Speicherung der Steifigkeitsmatrix in ihrer ursprünglichen Form überflüssig. Diese wird zu der invertierten Matrix überführt.

## 5.2 Die Finite Volumen Methode

Zur Lösung der Transportgleichungen eignet sich die Methode der Finiten Volumen (FVM) aufgrund der besseren Erhaltungseigenschaften besser als die Methode der Finiten Elemente (FEM) [Dau01], [Cli88], [Hir91], [Kna00], [Nol93]. Die Gewichtungsfunktion ist in Subdomänen gleich 1 und sonst Null. Durch die Bildung des Residuums wird gewährleistet, dass die Summe der Flüsse in einer solchen Subdomäne gleich Null ist. Diesbezüglich ist die FEM aufgrund der besonderen Gewichtsfunktion (Galerkin Ansatz, Formfunktion) nicht konservativ. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit die Transportgleichung mittels der FVM gelöst.

Die Transportgleichungen, die eine elektrische Entladung (Lawinenbildung) beschreiben, solange der heiße Lichtbogen noch nicht vorhanden ist, haben die folgende Form:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} - \nabla(K_e \nabla n_e - c_e \cdot n_e) + (\alpha - \eta)n_e = f_e \quad , \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla(c_p \cdot n_p) + \alpha n_e = f_p \quad , \quad (5.26)$$

und

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} - \nabla(c_n \cdot n_n) + \eta n_e = f_n \quad . \quad (5.27)$$

Hierbei stehen  $\frac{\partial}{\partial t}$  für die zeitliche Ableitung,  $c$  für die jeweilige Geschwindigkeit der Spezies,  $K_e$  für die Elektronendiffusion,  $f$  für die jeweilige Speziesquelle,  $\alpha$  für den Ionisierungs- und  $\eta$  für den Anlagerungskoeffizienten. Da diese Größen von der elektrischen Feldstärke abhängig sind, muss die Poisson-Gleichung für das elektrische Potential simultan gelöst werden.

$$\Delta \varphi = -(n_e + n_n - n_p) \quad (5.28)$$

Aufgrund der Tatsache, dass die Dichte der Ladungsträger in die Poisson Gleichung eingeht, handelt sich um eine selbstkonsistente Lösung.

Die negativen Ionen werden hier vernachlässigt und die Simulation wird auf die restlichen Spezies beschränkt. Des weiteren wird die Photonenstrahlung im Quellterm außer acht gelassen. Die Stoßionisation ist um 2 Größenordnung stärker als die Photoionisation [Ste99].

Hier erfolgt eine allgemeine Herleitung der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der obigen Transportgleichungen nach der FVM. Zunächst

werden die mathematischen Grundlagen des FV-Ansatzes vorgestellt und die Netzerweiterung (Bildung der Volumina) beschrieben. Anschließend werden die Kombination beider Lösungsverfahren und die Einbringung der Randbedingungen diskutiert.

### 5.2.1 Grundlagen

Zu Lösen sei die folgende Gleichung:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Lu = f, \quad (5.29)$$

wobei

$$Lu = -\nabla(K\nabla u - c \cdot u) + r \cdot u \quad (5.30)$$

Für die geometrische Diskretisierung wird die Zeitableitung zunächst außer acht gelassen. Die folgende Randwertaufgabe wird betrachtet:

$$\begin{aligned} -\nabla(K\nabla u - c \cdot u) + r \cdot u &= f && \text{in } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Es wird ähnlich wie bei der FEM über das Gesamtgebiet integriert, indem die Integrale über Teilgebiete aufsummiert werden. Ein Teilintegral sieht dann wie folgt aus:

$$\int_{\Omega_i} -\nabla(K\nabla u - cu) dx + \int_{\Omega_i} ru dx = \int_{\Omega_i} f dx, \quad i \in \Lambda. \quad (5.32)$$

Der Gauss'sche Satz findet hier Anwendung und es wird entlang der Ränder eines Kontrollvolumens integriert. Es gilt:  $\partial\Omega_i = \bigcup_{\Gamma_j \in \Lambda_i} \Gamma_j$ . Daraus folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} \nabla(K\nabla u - cu) dx &= \int_{\partial\Omega_i} \nu(K\nabla u - cu) d\sigma \\ &= \sum_{j \in \Lambda_i} \int_{\Gamma_j} \nu_{ij}(K\nabla u - cu) d\sigma \end{aligned} \quad (5.33)$$

Die feldabhängigen Größen werden hier durch Mittelwerte approximiert:

$$k|_{\Gamma_{ij}} \approx \mu_{ij} = \text{const} > 0, \quad \nu_{ij} \cdot c|_{\Gamma_{ij}} \approx \gamma_{ij} = \text{const}; \quad (5.34)$$

Des weiteren muss die Strecke  $\Gamma_{ij}$  möglichst realitätsnah beschrieben werden, um das letzte Integral korrekt wiederzugeben.

$$r|_{\Gamma_{ij}} \approx r_{ij}(u(a_i) + (1 - r_{ij})u(a_j)). \quad (5.35)$$

Hieraus folgt:

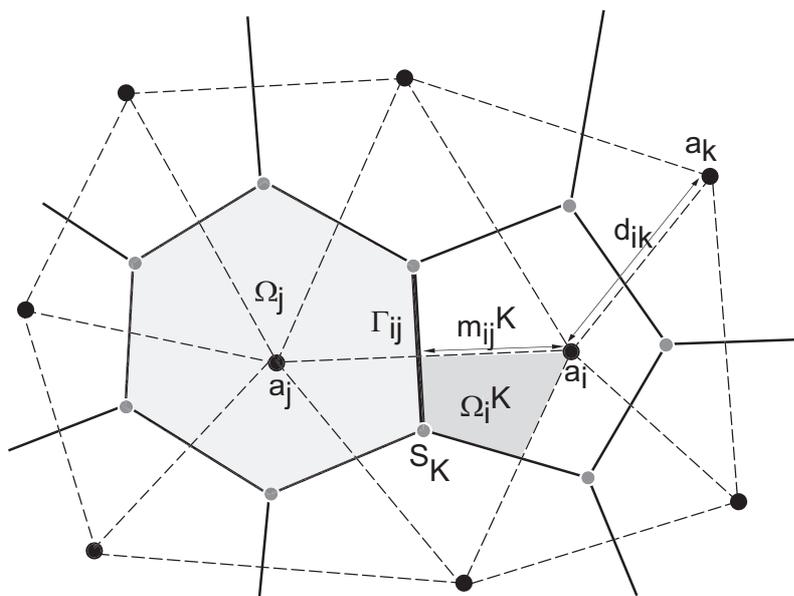


Abbildung 5.3: Kontrollvolumen und Diskretisierung

$$\int_{\Omega_i} \nabla(K \nabla u - cu) dx \approx \sum_{j \in \Lambda_i} \left\{ \mu_{ij} \frac{u(a_i) - u(a_j)}{d_{ij}} - \gamma_{ij} [r_{ij} u(a_i) + (1 - r_{ij}) u(a_j)] \right\} m_{ij} \quad (5.36)$$

Die zwei anderen Terme lassen sich folgendermaßen approximieren:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} ru dx &\approx r(a_i) u(a_i) m_i = r_i u(a_i) m_i \\ \int_{\Omega_i} f dx &\approx f(a_i) m_i = f_i m_i \end{aligned} \quad \text{mit} \quad m_i = |\Omega_i| \quad (5.37)$$

Nach einigen Umformungen und Anwendung der diskreten Variationformulierung kann die Aufgabenstellung folgendermaßen formuliert werden:

Finde ein  $u_h$ , wobei gilt:

$$a_h(u_h, v_h) = \langle f, v_h \rangle_{0,h} \quad \text{für alle} \quad v_h \in V_h. \quad (5.38)$$

Hierbei ist

$$a_h(u_h, v_h) := a_h^0(u_h, v_h) + b_h(u_h, v_h) + d_h(u_h, v_h) \quad (5.39)$$

wobei,

$$a_h^0(u_h, v_h) := \sum_{i \in \Lambda} v_i \sum_{j \in \Lambda_i} \mu_{ij} (u_i - u_j) \frac{m_{ij}}{d_{ij}} \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned}
b_h(u_h, v_h) &:= \sum_{i \in \Lambda} v_i \sum_{j \in \Lambda_i} [r_{ij} u_i + (1 - r_{ij}) u_j] \gamma_{ij} m_{ij} \\
d_h(u_h, v_h) &:= \sum_{i \in \Lambda} v_i \sum_{j \in \Lambda_i} r_i u_i v_i m_i \\
\langle f, v_h \rangle_{0,h} &:= \sum_{i \in \Lambda} v_i \sum_{j \in \Lambda_i} f_i v_i m_i \\
a_h(u_h, v_h) &:= \sum_{i \in \Lambda} v_i \left\{ \sum_{j \neq i: \partial K \ni a_j} \left\{ \mu_{ij} \frac{u_i - u_j}{d_{ij}} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \gamma_{ij} [r_{ij} u_i + (1 - r_{ij}) u_j] \right\} m_{ij}^K + r_i u_i m_i^K \right\}
\end{aligned} \tag{5.41}$$

Die Kontrollvolumina bestehen aus Teildreiecken (siehe 5.3). Zur Aufstellung der Steifigkeitsmatrix wird folglich der Beitrag von jedem Dreieck zum jeweiligen Kontrollvolumen berechnet, weshalb sich eine ähnliche Art der Assemblierung wie bei den FEM anbietet. Sie unterscheiden sich nur hinsichtlich der Symmetrie. Die Steifigkeitsmatrix, wie es aus den Bilinearformen zu entnehmen ist, ist unsymmetrisch. Dennoch sind die Nulleinträge in der Matrix symmetrisch. Die Matrix wird nach einer dem CRS verwandten Technik gespeichert [Dau01]. Ähnlich wie bei den FEM lassen sich die Beiträge zunächst zu einer  $3 \times 3$  Matrix aufstellen, bevor sie zur Gesamtsteifigkeitsmatrix zusammengefasst werden.

$$S^{(l)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ \cdot & a_{22} & \cdot \\ \cdot & \cdot & a_{33} \end{bmatrix} \tag{5.42}$$

hierbei ist:

$$a_{11} = m_{12}^K \left( \frac{\mu_{12}}{d_{12}} + r_{12} \gamma_{12} \right) + m_{13}^K \left( \frac{\mu_{13}}{d_{13}} + r_{13} \gamma_{13} \right) + r_1 m_1^K \tag{5.43}$$

Die Diagonaleinträge lassen sich analog zu  $a_{11}$  berechnen. Die Quereinträge ergeben sich bei Auswertung des obigen Ausdrucks zu:

$$a_{12} = m_{12}^K \left( -\frac{\mu_{12}}{d_{12}} + \gamma_{12} (1 - r_{12}) \right). \tag{5.44}$$

Die Unsymmetrie entsteht dadurch, dass die Knoten unterschiedliche Einflüsse aufeinander ausüben, in Abhängigkeit davon, in welche Richtung die Spezies fließen. Der gerichtete Konvektionsterm wird mit dem Gewichtungsparemeter [Kna00],[Dau01] beschrieben.

Andererseits entfallen, wenn die Diffusion wegfällt, bestimmte Quereinträge. Da die Spezies in eine bestimmte Richtung fließen, übt der Knoten, zu dem die Spezies fließt, keinen Einfluss auf den Knoten, aus dem die Spezies abfließen und somit entstehen Nullbeiträge. Die Beiträge kommen dann entweder oberhalb oder unterhalb der Hauptdiagonale, je nachdem wohin die Spezies fließen. Wenn dies der Fall ist, wird die CRS-Technik zur Speicherung der Matrix herangezogen, jedoch mit dem Unterschied, dass unterschieden werden muss, in welche Richtung die Spezies fließen. Dies geschieht über das Vorzeichen der Beiträge.

Da die Ionen langsamer sind als die Elektronen, ist der Konvektionsbeitrag in der Steifigkeitsmatrix untergeordnet. Es besteht die Möglichkeit, die Konvektionsbeiträge in größeren Zeitabständen zu betrachten. Dies bedeutet, dass nur die Quellterme betrachtet werden, die sich auf die Hauptdiagonale ansiedeln. In diesem Fall wird nur die Hauptdiagonale gespeichert, welches eine beachtliche Beschleunigung der Vektor-Matrix-Multiplikation mit sich bringt.

Für die Zeitdiskretisierung wird die folgende Anfangs-Randwert-Aufgabe im Raum-Zeit-Zylinder  $Q_T = \Omega \times (0, T)$ ,  $T > 0$  betrachtet:

Für gegebene Funktionen  $f : Q_T \rightarrow \mathbb{R}$  und  $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  ist eine Funktion  $u : Q_T \rightarrow \mathbb{R}$  zu bestimmen mit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + Lu &= f & \text{in } Q_T \\ u &= 0 & \text{auf } S_T = \partial\Omega \times (0, T) \\ u &= u_0 & \text{auf } Q_T = \Omega \times \{0\} \end{aligned} \quad (5.45)$$

wobei  $L$  für eine Funktion  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  den Differentialausdruck:  $Lu = -\nabla(K\nabla u - cu) + ru$  bezeichnet.

Die Aufgabe lautet folglich: Finde eine Funktion  $u_h \in L^2((0, T), V_h)$ ,  $u_h(0) = u_{0h}$  und

$$\left\langle \frac{d}{dt} u_h(t), v_h \right\rangle_0 + a(u_h(t), v_h) = \langle f(t), v_h \rangle_0 \quad (5.46)$$

für alle  $v_h \in V_h$ ,  $t \in (0, T)$ .

Sei  $\{\varphi_i\}_{i=1}^M$  eine Basis von  $V_h$ ,  $u_h(t) = \sum_{i=1}^M \zeta_i(t) \varphi_i$ . Für jedes  $t \in (0, T)$  ist dann die diskrete Variationsgleichung äquivalent zu

$$\sum_{j=1}^M \langle \varphi_j, \varphi_i \rangle_0 \frac{d\zeta_j(t)}{dt} + \sum_{j=1}^M a(\varphi_j, \varphi_i) \zeta_j(t) = \langle f(t), \varphi_i \rangle_0 \quad (5.47)$$

für alle  $i \in \{1, \dots, M\}$ .

Mit der Steifigkeitsmatrix  $A = (a(\varphi_j, \varphi_i))_{ij}$ , der Massenmatrix  $B = (\langle \varphi_j, \varphi_i \rangle_0)_{ij}$  und den Vektoren  $\beta = (\langle f(t), \varphi_i \rangle_0)_i$  sowie  $\zeta_0 = (\zeta_{0i})_i$  ergibt sich für  $\zeta = (\zeta_i)_i$  folgendes System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten:

$$\begin{aligned} B \frac{d}{dt} \zeta(t) + A \zeta(t) &= \beta(t), t \in (0, T), \\ \zeta(0) &= \zeta_0 \end{aligned} \quad (5.48)$$

$B$  ist eine Diagonalmatrix aufgrund der Tatsache, dass die Einträge nur auf der Hauptdiagonale vorzufinden sind (Dies geht aus der entsprechenden Bilinearform hervor). Diese Eigenschaft ist insofern vorteilhaft, als dass eine aufwendige Matrixinvertierung entfällt.  $B$  lässt sich direkt invertieren und auf die rechte Seite (RHS) bringen. Die Massenmatrix enthält die Fläche der jeweiligen Kontrollvolumina. Dies entspricht einer Gewichtung

der jeweiligen Flüsse. Die obige Gleichung gewinnt die folgende Form:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\zeta}(t) + B^{-1}A\zeta(t) &= B^{-1}\beta(t), t \in (0, T), \\ \zeta(0) &= \zeta_0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

### 5.2.2 Das duale Netz

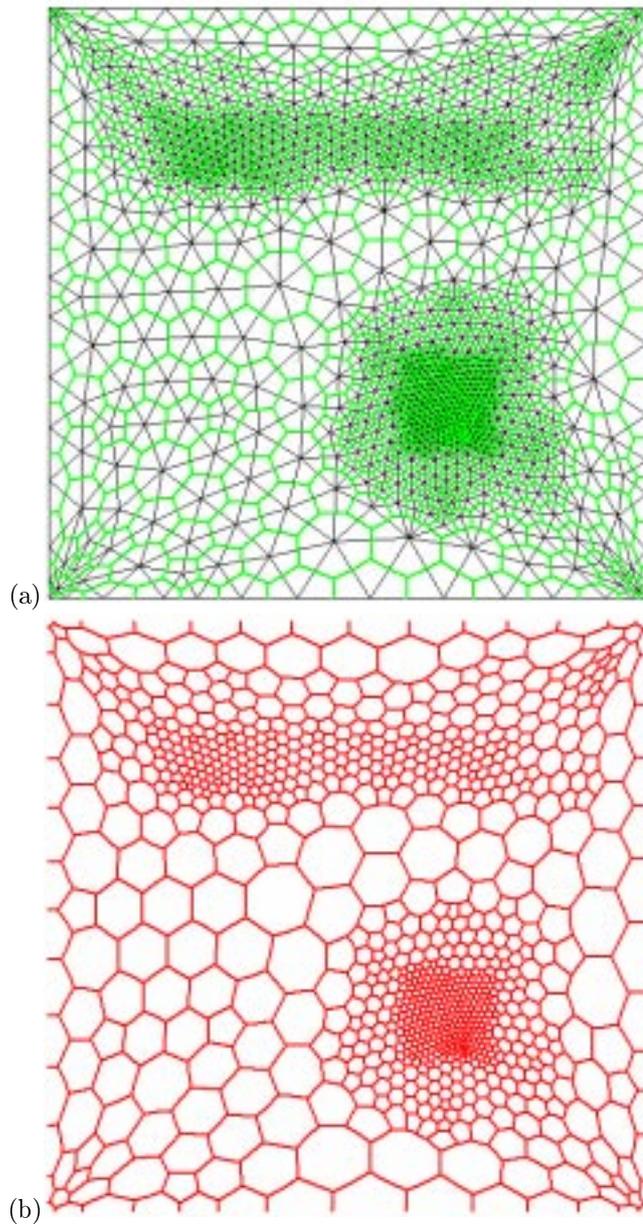
Die Kontrollvolumina werden gewonnen, indem das duale Netz gebildet wird. Das duale Netz ist äquivalent zu den Voronoigeieten einer Delaunay Triangulation und somit bilden sie die Menge der Punkte, die zu einem Knoten näher sind als zu den restlichen Knoten. Dies impliziert, dass zur Bildung des dualen Netzes die Bildung der Mittelsenkrechten der Dreiecksseiten ausreicht. Die Annahme ist zutreffend, wenn das Netz gutartig ist (Grad der Knoten beträgt überall 6 und die Dreiecke sind möglichst gleichseitig). Da dies nicht immer gewährleistet ist, vor allem an Stellen mit hohen Dreiecksdichtegradienten wird von dieser Technik abgewichen. Gerade an solchen Stellen kann es vorkommen, dass sich die Mittelsenkrechten außerhalb des Dreieckes treffen. Dies bringt gravierende Strukturprobleme bei der Aufstellung der Steifigkeitsmatrix mit sich.

Dieser Ansatz wurde modifiziert, indem die Schwerpunkte der Dreiecke verbunden wurden. Dies stellt einen größeren Aufwand bei der Erstellung des dualen Netzes dar und setzt mehr Information (Schnittpunkte der Verbindungen mit den Dreiecken) voraus. Ein gutartiges Netz stellt dies bereit, worin eine systematische Aufstellung der Steifigkeitsmatrix durch Zusammenzählen der Beiträge der Teildreiecke ohne weiteres möglich ist. Wenn die Dreiecke gleichseitig sind, stimmt der Schnittpunkt der Mittelsenkrechten mit dem Schwerpunkt überein. Ein zusätzlicher Aufwand entsteht durch die Integration entlang des Randes eines Volumens. Der Normalenvektor entlang einer Kante muss ermittelt werden, was im Falle einer Mittelsenkrechten der Seite des Dreieckes entspräche. Der Aufwand besteht somit darin, die Schwerpunkte der Dreiecke zu ermitteln, die Schnittpunkte und die dadurch entstehenden Teilvolumen in den einzelnen Dreiecken zu berechnen (siehe 5.3).

Im folgenden ist ein Beispiel für die Erstellung des Dualen Netzes zum Netz (3.15) zu sehen:

### 5.2.3 Kombination beider Lösungsverfahren

Da die Parameter in den Transportgleichungen stark feldabhängig sind, ist eine Ermittlung der elektrischen Feldstärke unumgänglich. Des weiteren kann es durch Zunahme der Dichte der Ladungsträger zu einer Feldverzerrung kommen. Die simultane Lösung der Poisson Gleichung fürs elektrische



**Abbildung 5.4:** (a)Verbindung der Schwerpunkte (b)Bildung des Dualen Netzes

Potential geschieht folgendermaßen:

In einem Zeitschritt wird die Poisson Gleichung gelöst, die als Eingangspa-

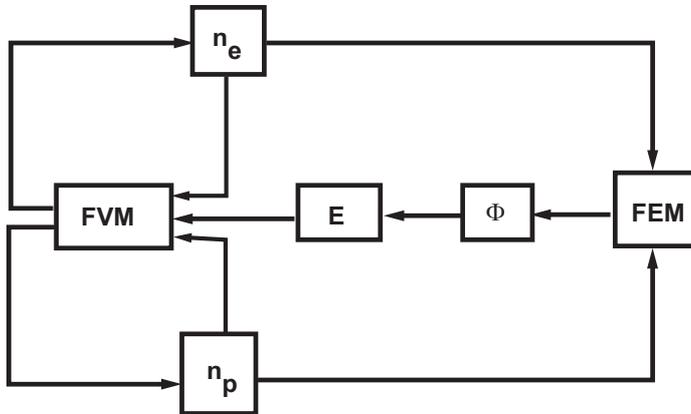


Abbildung 5.5: Kombination von FEM und FVM

parameter die bekannte Elektronen- und die Ionendichte voraussetzt (siehe Abb. 5.5). Das Potential wird diskret gelöst und in einem weiteren Schritt wird die Feldstärke vektoriell ermittelt. Die feldabhängigen Parameter der Transportgleichung werden bestimmt und die Bewegung der Ladungsträgern wird berechnet. Der Vorteil des dualen Netzes ist, dass nach wie vor die Lösung an den Knoten ermittelt wird, obwohl die Lösungsansätze sehr unterschiedlich sind.

### 5.2.4 Randbedingungen

Da die auf den Elektroden gebundene Ladung die freien geladenen Teilchen im Raum nur über das anliegende Potential beeinflusst, wird die Elektronen- und Ionendichte auf dem Rand zu Null gesetzt. Die Tatsache, dass die Elektronen in der Anode aufgesaugt und die positiven Ionen an der Kathode neutralisiert werden, wird folglich durch Einhaltung der Randwerte beschrieben. Dies impliziert, dass, ähnlich wie bei der FEM, die Beiträge zum Rand hin nicht berechnet werden. Dies bedeutet eine Minimierung des Rechenaufwands.

Sollen Feldemissionsströme bzw. Sekundärströme mitberücksichtigt werden, müssen die Knoten in unmittelbarer Nähe zum Rand manipuliert werden. Zur Beschreibung der Feldemission wird so verfahren, dass die Stromdichten (Flüsse) an der Kathode und in derer unmittelbarer Nähe der Kathode

gleich gesetzt werden.

$$j_{FE} := \frac{(n_e(R) + n_e(Rv))}{2} v_e = \frac{n_e(Rv)}{2} v_e, \quad (5.50)$$

wobei  $R$  bzw.  $Rv$  jeweils für einen Knoten auf bzw. unmittelbar vor dem Rand steht. Die Gleichsetzung der Stromdichten findet in der Mitte zwischen den Knoten statt. Dort läßt sich die Feldstärke ermitteln und somit die Elektronengeschwindigkeit. Die hier berechneten Elektronendichten werden zu den Knoten addiert.

Bei der Betrachtung des Sekundärstroms wird allerdings auf andere Weise verfahren: Die Anzahl der herausgelösten Elektronen ist proportional zu den an der Kathoden neutralisierten positiven Ionen. Die Proportionalität wird mit dem zweiten Townsend'schen Koeffizienten  $\gamma_i$  beschrieben. Für die Berechnung werden den Knoten auf dem Rand imaginäre Dichten zugewiesen. Es gilt demnach für einen Knoten auf dem Rand zum Zeitpunkt  $t$ :

$$n_e^t = \gamma_i n_p^t \quad (5.51)$$

Bevor die Ionen neutralisiert werden, wird deren Dichte berechnet: Sie beträgt in einem Zeitschritt:

$$n_p^{t+1}(R) = n_p^t(VR) * F_{VR} * \gamma_p * \Delta * 1/F_R \quad (5.52)$$

Zu diesem Zeitpunkt lösen die Ionen Elektronen heraus:

$$n_e^{t+1}(R) = \gamma_i n_p^t(R). \quad (5.53)$$

Im nächsten Zeitschritt wandern die Elektronen Richtung Anode:

$$n_e^{t+2}(VR) = n_e^{t+1}(R) * F_R * \gamma_e * \Delta * 1/F_{VR}. \quad (5.54)$$

(5.55) in (5.52) eingesetzt, ergibt:

$$n_e^{t+2}(VR) = n_p^t(VR) v_{p\parallel n} v_{e\parallel n} \Delta T^2, \quad (5.55)$$

wobei nur die skalaren Werte der Geschwindigkeiten (in Richtung des Normalvektors) einbezogen werden, da sowohl die Normalvektoren der jeweiligen Kontrollvolumina als auch die Geschwindigkeiten in entgegengesetzten Richtungen zeigen (Siehe 5.6).

### 5.2.5 Wahl des Zeitschritts

Bei der zeitlichen Diskretisierung wurde der Einfachheit halber das explizite Euler-Verfahren vorgezogen. Dabei wird das Differential durch einen Differenzenoperator ersetzt:

$$\zeta^{t+1} = \zeta^t (E - \Delta T B^{-1} A) + \Delta T B^{-1} A \beta(t), \quad (5.56)$$

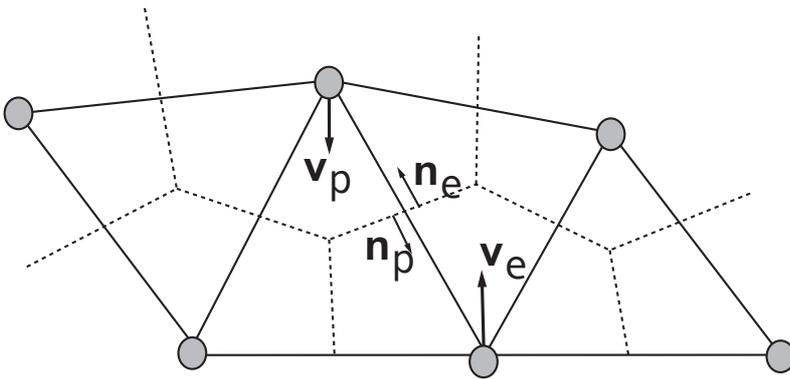


Abbildung 5.6: Der Sekundärstrom

wobei  $E$  die Einheitsmatrix darstellt. Somit steht die erste Bedingung für den Zeitschritt und zwar, dass der Beitrag  $\Delta T B^{-1} A$  auf der Diagonale kleiner als eins ist. Die zweite Bedingung wird der Strömungsmechanik entnommen und lautet:

$$\Delta T \leq \frac{v_{max}}{l_{min}} \quad (5.57)$$

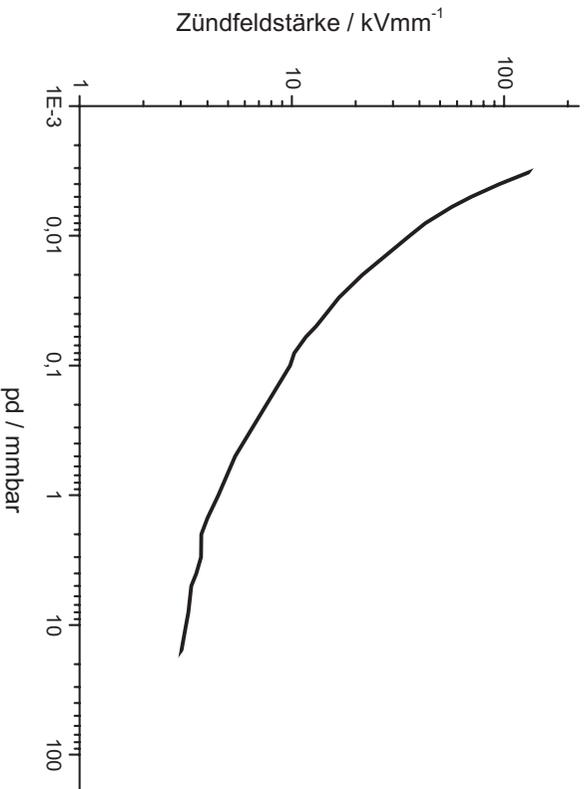
Am Anfang der Simulation kommt es zu keiner Feldverzerrung, welches eine Rückkopplung ausschließt. Sobald es zu einer gegenseitigen Beeinflussung zwischen Ladungsträgerdichten und elektrischer Feldstärke kommt, ist die Wahl des Zeitschrittes von großer Bedeutung. Die Annahme eines adäquaten Zeitschrittes ist mit der Annahme, dass sich das elektrische Feld währenddessen nicht ändert, verbunden. Kurz vor dem Durchschlag und somit der überexponentiellen Zunahme der Ladungsträger kommt es zu starken Feldverzerrungen bzw. zu großen Feldstärken. Eine Herabsetzung des Zeitschrittes ist unumgänglich. Ein zu großer Zeitschritt führt zu viel zu großen Ladungsträgerdichten, die physikalisch nicht mehr sinnvoll sind. Außerdem stellt sich das Problem der um Größenordnung unterschiedlichen Beweglichkeit der Elektronen und Ionen. Während Elektronen sich im mm/ns-Bereich fortbewegen, ist die Geschwindigkeit der Ionen um 2 Größenordnung kleiner. Da die größere Geschwindigkeit für die Bestimmung des Zeitschrittes maßgeblich ist, bewegen sich die positiven Ionen währenddessen nur unwesentlich.

# Kapitel 6

## Experimente

Zur Durchführung der meßtechnischen Untersuchungen von Gasentladungen wurden zwei Meßsysteme aufgebaut. Das erste System dient der Ermittlung der Feldstärken, bei denen sich eine Feldemission einsetzt. Hierbei wird die Abhängigkeit der Durchschlagsspannung von der Schlagweite und dem Druck untersucht und auf ihre Konformität mit der Paschenkurve hin überprüft. Da Paschen die Sekundärelektronen auf den Aufprall von positiven Ionen auf die Kathode zurückführt, dürfte der Einsatz von Feldemission als Zusatzquelle von Startelektronen zu einer Anreicherung von Ladungsträgern in der Gasstrecke und somit zu einer Senkung der Durchschlagsspannung führen. Die Abbildung (6.1) zeigt die notwendige mittlere Feldstärke, um den Durchschlag in Abhängigkeit der Schlagweite der Gasstrecke herbeizuführen. Diese Werte der Feldstärken werden von der Paschenkurve (2.3) abgeleitet. Die Messungen wurden bei sehr niedrigen Drücken durchgeführt, um  $p \cdot d \approx \mu\text{m} \cdot \text{bar}$  Bereiche abzudecken. Die gemessenen Durchschlagsspannungen entsprechen dann nur der reduzierten Feldstärke  $E/p$ . Die Elektronen im Metallverband spüren aber das reale und nicht das reduzierte Feld. Um hohe reale Feldstärken zu erreichen, muss dagegen bei sehr kleinen Schlagweiten und gleichzeitig bei hohem Druck gemessen werden. Ein Einsatz der Feldemission kann an einer Verflachung der Kurve im  $\mu\text{m}$ -Bereich erkannt werden. Außerdem dürfte dieser Einsatz eine starke Materialabhängigkeit (auf Grund der unterschiedlichen Austrittsarbeiten) aufweisen.

Der zweite Meßaufbau [Yah01b] beschäftigt sich mit den Townsend'schen Strommultiplikation (die letzte Phase in der unselbständigen Entladung in der Abb. 2.1), in der Zeit in der die Funkenstrecke noch hochohmig ist. Er wurde primär zur Untersuchung der Fluktuationen in der Stromvervielfachung kurz vor dem Durchschlag konzipiert. Die Idee, die hinter dem Aufbau



**Abbildung 6.1:** Abhängigkeit der Zündfeldstärke vom Abstand

steckt, ist die Feststellung, in welcher Weise die Fluktuation in der Durchschlagsspannung auf die anfängliche Fluktuation in der Elektronenlawinenmultiplikation zurückzuführen ist. Die Entwicklung der Elektronenlawine verläuft stochastisch-deterministisch, so dass am Anschluss an die Fluktuation die Lawinen bei einer festen Feldstärke immer gleich anwachsen müßten. Stimmt die These der obigen Korrelation müßten die Stromkurven nach einer kurzen Fluktuation, die messtechnisch nicht erfassbar ist, parallel verlaufen. Die Fluktuation läßt sich an einer parallelen Verschiebung der Stromkurven erkennen.

## 6.1 Messungen zum Einfluß der Feldemission

Im Rahmen von umfangreichen Untersuchungen verschiedener Phänomene im Zusammenhang mit dem Thema "elektrische Gasentladung" [Har00] wurde der Aufbau auf der Abbildung (6.2) verwendet. In dieser Arbeit wurde er primär dazu verwendet, die Paschenkurve neu zu vermessen

Die Paschenkurve beschreibt die Abhängigkeit der Durchschlagsspannung vom Produkt  $p \cdot d$ , wobei  $p$  für den Druck und  $d$  für die Schlagweite stehen. Nach Paschen unterliegt die Durchschlagsspannung einer Gesetzmäßigkeit

(Paschengesetz, siehe 2.3), wonach sie nur vom Produkt beider Parameter abhängt. Diesem Gesetz liegt ein Modell zugrunde, das nur die Stossionisation im Gas und die Auslösung von Elektronen aus der Kathode berücksichtigt. Dieses Modell und folglich das daraus abgeleitete Gesetz haben sich bewährt [Dak71]. Das Paschenminimum beschreibt hierbei eine Spannung, unterhalb derer kein Durchschlag möglich ist. In gewissen Konfiguration ist es möglich hohe reale Feldstärken zu erreichen, um den Durchschlag herbeizuführen. Bei solchen Feldern kann eine Feldemission nicht mehr ausgeschlossen werden. Die Feldemission reichert die Gastrecke mit Startelektronen an, die die Gasionisation unterstützen können. Dies führt zu einer Senkung der Durchschlagsspannung gegenüber dem vom Paschengesetz vorausgesagten Wert. Mit Gleichspannung bzw. einer sehr langsam ansteigenden Rampe kann die statische Durchschlagsspannung ([Bey86]) hinreichend genau bestimmt werden. Da der Einsatz der Feldemission nur möglich ist, wenn die betroffene Elektrode auf dem negativeren Potential liegt, analog z.B. zur Mittelelektrode einer Zündkerze, wurde bei diesen Untersuchungen eine negative Polarität gewählt.

Insbesondere bei Schlagweiten im Submillimeterbereich stellen die genaue Einstellung des Nullpunktes, ohne Schädigung der Oberfläche, und die sehr feine Justierung der Schlagweite hohe mechanische Anforderungen dar. Dies wurde sowohl bei der Konzeption als auch bei der Durchführung der Versuche berücksichtigt.

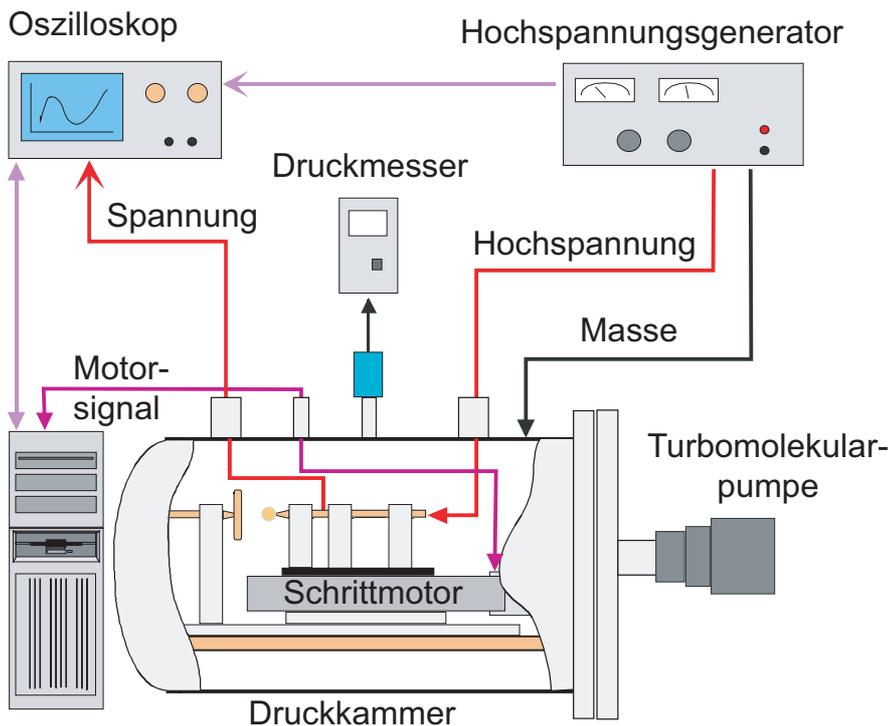
### 6.1.1 Meßaufbau

In Abbildung 6.2 ist der Meßaufbau zur Erfassung der Durchschlagsspannung bei verschiedenen Schlagweiten und Drücken dargestellt.

Die Anordnung besteht im wesentlichen aus einer Funkenstrecke, wobei die Masseelektrode (Plattenelektrode, Messing) fest fixiert ist, während die zweite Elektrode (je nach einzustellender Schlagweite wird eine Kugel oder eine Spitze verwendet) auf einem Lineartisch mit Schrittmotor befestigt ist, der bei einer Schrittweite von  $\Delta d = 1 \mu\text{m}$  einen maximalen Reproduzierbarkeitsfehler bei der Abstandseinstellung von  $\varrho = \pm 0,5 \mu\text{m}$  besitzt. Bei der Wahl der Elektrode muss darauf geachtet werden, dass das Feld stets homogen bleibt, um die Bedingungen der Paschenkurve zu erfüllen.

Die besonderen Anforderungen an die Genauigkeit der Abstandseinstellung führen dazu, dass die Oberfläche der Platten keine Mikrostrukturen aufweisen darf. Durch Polieren der Platten mit Poliermittel der Korngrößen von  $\sigma = 0,25 \mu\text{m}$  weisen die entstehenden Oberflächen eine gemittelte Rauigkeitstiefe  $R_z$  von 180 nm nach. Die Annahme einer glatten Oberfläche ist somit gewährleistet.

Die Spannung wird über einen Vorwiderstand von  $R = 5 \text{ M}\Omega \pm 10\%$  an



**Abbildung 6.2:** Meßaufbau zur Bestimmung der Durchschlagsspannung für Schlagweiten von  $d=1\ \mu\text{m}$  bis 6 mm [Har00].

einen Kondensator von  $C = 50\ \text{pF}$  angelegt, der parallel zur Funkenstrecke liegt. Durch den hohen Vorwiderstand wird die Entladung elektrisch vom Hochspannungsgerät getrennt. Als Hochspannungsquelle dient dabei der Hochspannungsgenerator Heinzinger 30-1000, der bis zu 30 kV Gleichspannung beider Polaritäten liefern kann und der über eine IEC-Schnittstelle [IEC60625] ansteuerbar ist.

Die Auswahl des Kondensators ist bedingt durch die Menge an Ladung, die bei einem Durchschlag auf die Gegenseite fließen, und detektiert werden muss. Gleichzeitig muss ein Spannungszusammenbruch festgestellt werden. So erfüllt der obige Kondensator die Aufgabe für Abstände oberhalb von  $d=10\ \mu\text{m}$ . Unterhalb dieses Abstandes wurde ein kleinerer Kondensator mit  $d=10\ \text{pF}$  verwendet. Das hängt damit zusammen, dass bei Mikrometerabständen die geflossene Ladung in der Regel sehr klein ist, so dass der

Spannungseinbruch am Kondensator kaum messbar ist.

Um die Durchschlagsspannung möglichst genau zu bestimmen, wird ein Oszilloskop eingesetzt, welches eine obere Grenzfrequenz von  $f_{\text{ober}}=1$  GHz und eine Abtastfrequenz von  $f_{\text{abtast}}=4$  GS/s besitzt. Hierbei wird auf den Spannungszusammenbruch getriggert. Zur Messung der Spannung wird ein Hochspannungstastkopf mit einer Abschwächung von  $K=1000$ ,  $C=3$  pF Kapazität und einer Bandbreite von  $f_{\text{band}}=75$  MHz eingesetzt.

Der Hochspannungsgenerator und das Oszilloskop werden von einem PC aus über einen IEC-Bus gesteuert. Der Schrittmotor ist über eine spezielle Verkabelung mit einer Schrittmotorkarte verbunden, die als ISA-Karte im PC steckt. Mit einem Meßprogramm, das unter LabVIEW von National Instruments läuft, können Schlagweite und Spannungsanstiegsgeschwindigkeit vorgegeben werden. Zudem wird durch das Programm automatisch vor jeder Messung der Nullpunkt bestimmt und nach dem Durchschlag werden die Spannungswerte abgespeichert.

### 6.1.2 Durchführung der Messungen

Die Versuche wurden auch bei Umgebungsdruck innerhalb der Druckkammer durchgeführt. Somit wird ausgeschlossen, dass die Startelektronen nicht auf einer Photoemission zurückzuführen sind.

Zur reproduzierbaren Abstandseinstellung wird vor jeder Messung der Null- bzw. Berührungspunkt bestimmt. Dabei kann es, insbesondere bei einer Spitze-Platte-Anordnung, zu einer Beschädigung der Oberflächen kommen, wenn die Elektroden unkontrolliert und fest gegeneinander gepresst werden. Aus diesem Grund wird eine Spannung von 50 V an die Funkenstrecke angelegt und die Elektrode auf dem Lineartisch mit dem Schrittmotor langsam und kontrolliert auf die Gegenelektrode zu bewegt. Nach jedem Schritt wird überprüft, ob die Spannung zusammenbricht. Folglich wird gewährleistet, dass tatsächlich der erste Kontakt der Elektroden detektiert wird und eine Beschädigung der Elektroden kann praktisch ausgeschlossen werden.

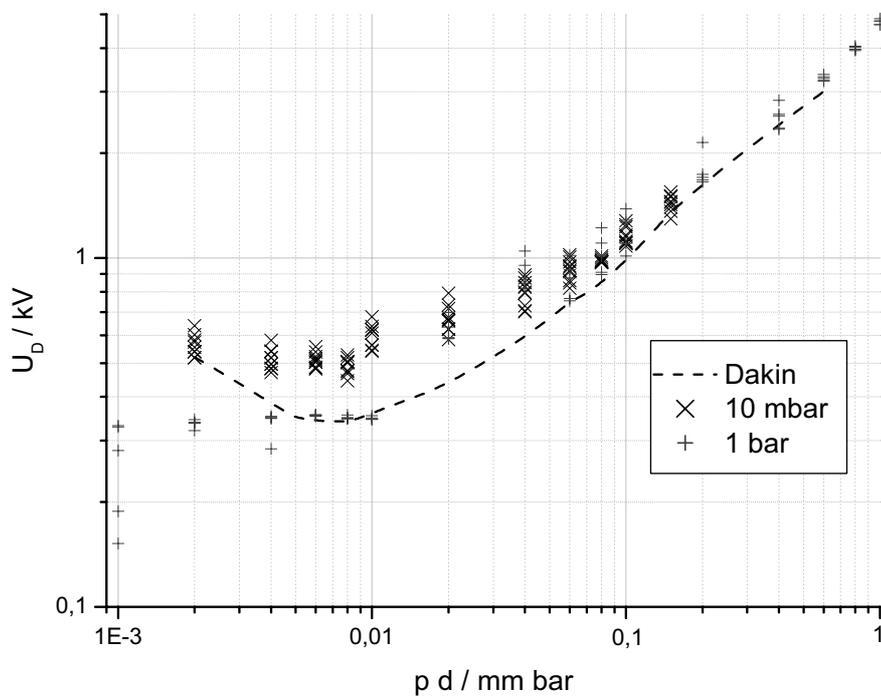
Danach wird die Funkenstrecke mit dem Schrittmotor auf den zu vermessenden Abstand eingestellt. Die Spannung wird dann sehr schnell auf den Wert hoch gefahren, bei dem ein Durchschlag ausgeschlossen ist. Dieser Wert kann von der Paschenkurve abgeleitet werden, z.B. 70% vom Durchschlagsspannungswert. Anschließend wird die Spannung langsam erhöht. Dabei ist es wichtig, dass die Spannungserhöhungen nur einen minimalen Verschiebungsstrom verursachen, dessen Einfluss auf die Entladung unbekannt ist. Die Spannung muss dann nach jeder Erhöhungen über eine Zeit, die mindestens zwei Größenordnungen größer als die Entladungszeiten

ist, konstant gehalten werden.

Im Moment des Durchschlags der Funkenstrecke triggert das Oszilloskop auf die positive Spannungsflanke. Das Spannungssignal wird digitalisiert und zum PC übertragen. Aus der digitalisierten Spannungskurve werden die Werte der letzten 50 ns vor dem Zusammenbruch der Spannung arithmetisch gemittelt, um die tatsächlich anliegende Spannung ohne digitales Rauschen (knapp 2%) bestimmen zu können.

### 6.1.3 Ergebnisse

Der oben beschriebene Aufbau dient der Ermittlung der Durchschlagsspannung in Abhängigkeit der Schlagweite und des Druckes. Diese Abhängigkeit wird vom Paschengesetz (2.3) wiedergegeben, wobei nur das Produkt beider Größen maßgebend ist.



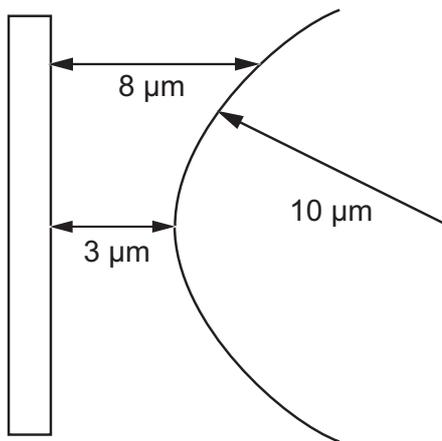
**Abbildung 6.3:** Die Durchschlagsspannung in Abhängigkeit der Schlagweite für die Drücke  $p = 10$  mbar und  $p = 1$  bar verglichen mit [Win71]

In der Abbildung (6.3) wird diese Abhängigkeit vom Produkt ( $p \cdot d$ ) wiedergegeben, wobei nur die Schlagweite variiert und der Druck als Parameter konstant gehalten wurde. Die Durchschlagswerte werden mit aus der Literatur [Win71] entnommenen Werten verglichen. Hieraus gehen folgenden Erkenntnisse hervor:

- Bei niederem Druck ( $p = 10\text{mbar}$ ) ist das Paschenminimum gut zu erkennen.
- Für größere  $p \cdot d$  Werte ( $p \cdot d > 0.2 \text{ mm bar}$ ) stimmen die Messungen mit der Paschenkurve aus [Win71] gut überein. Für diese Werte ist auch zu erkennen, dass nur das Produkt aus Schlagweite und Druck maßgebend ist.
- Sind die  $p \cdot d$  Werte kleiner als  $p \cdot d = 0.2 \text{ mm bar}$ , liegen die Messungswerte tendenziell über die Paschenkurve aus [Win71]. Auf diesen Punkt wird noch ausführlich eingegangen.
- für Umgebungsdruck gibt es kein ausgeprägtes Minimum. Die Spannung steigt unterhalb von einem Wert  $p \cdot d = 8\mu\text{m bar}$  nicht wieder an.

Der letzte Punkt soll im folgenden ausführlich erläutert werden: Der Durchschlag erfolgt an der Stelle, an der die Zündbedingungen am günstigsten sind, bzw. an der Stelle mit dem niedrigsten Zündspannungsbedarf. Stimmt die These, laut der die Durchschlagsspannung im Nahdurchschlagsbereich größer als das Paschenminimum ist, sucht sich der Zündfunke die Stelle entlang der Kathodeoberfläche, die einen Abstand von  $d = 8 \mu\text{m}$  zu Anode hat. Der Durchschlagsspannungswert entspricht folglich dem von  $d = 8 \mu\text{m}$ , selbst wenn die Schlagweite kleiner ist (siehe Abb. 6.4). Bei Umgebungsdruck wäre folglich bedingt durch die Messtechnik ein Plateau zu erwarten. Die Tatsache, dass das Paschenminimum unterschritten wird, ist ein Beleg dafür, dass der Durchschlag an der kürzesten Strecke stattfindet [Ger59, Boy55].

Werden die Durchschlagsspannungen durch die jeweiligen Abstände dividiert können die entsprechenden Zündfeldstärke ermittelt werden. Die Abhängigkeit der Zündfeldstärke von der Schlagweite bei Umgebungsdruck, verglichen mit den von der Paschenkurve abgeleiteten Werte, ist in Abb. (6.5) dargestellt.

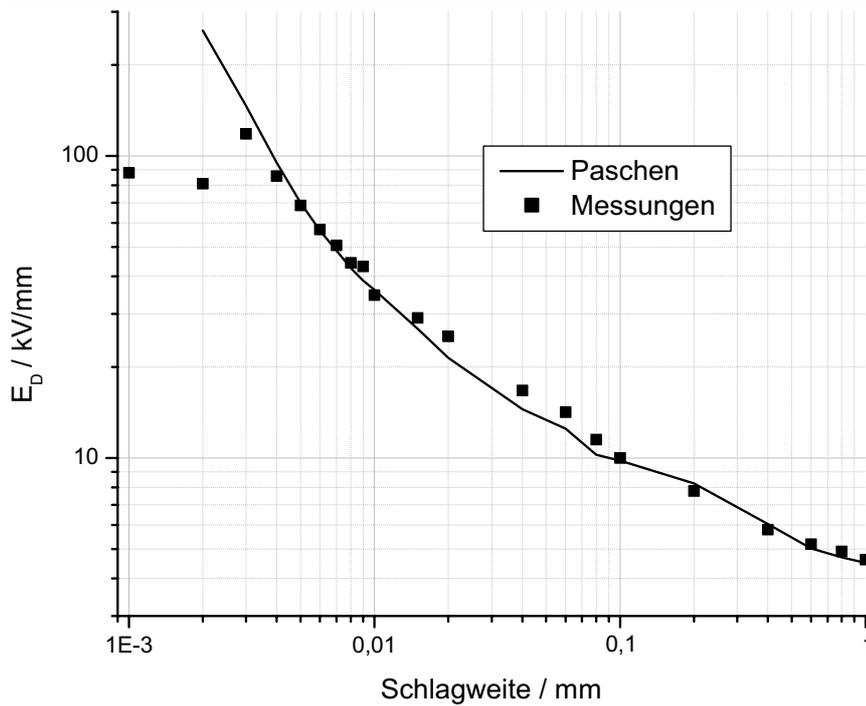


**Abbildung 6.4:** Erläuterung des Paschenminimums

Die Abweichungen von der Paschenkurve ist unterhalb der Schlagweite  $d = 5 \mu\text{m}$  deutlich zu erkennen. Dies entspricht realen Feldstärken von  $E = 50 \text{ kV/mm}$  und höher. Diese Feldstärken tauchen bei einer herkömmlichen Zündkerze aber nicht auf. Eine typische Zündspule liefert eine maximale Spannung von  $U = 30 \text{ kV}$  bei einem Abstand von  $d = 1 \text{ mm}$ . Aus diesem Grund kann die Feldemission zur Bereitstellung von Startelektronen ausgeschlossen werden.

Im folgenden soll die Abweichung der Messungen von der Paschenkurve im Bereich  $p \cdot d = 0.01 - 0.5 \text{ mm bar}$  diskutiert werden. Die Abbildung 6.6 zeigt die Abhängigkeit der Durchschlagsspannung von der Schlagweite bei Umgebungsdruck. Die erste Messung wurde innerhalb der Druckkammer (Stahl, 2 cm dick) durchgeführt, wohingegen die zweite Messung außerhalb der Druckkammer stattfand.

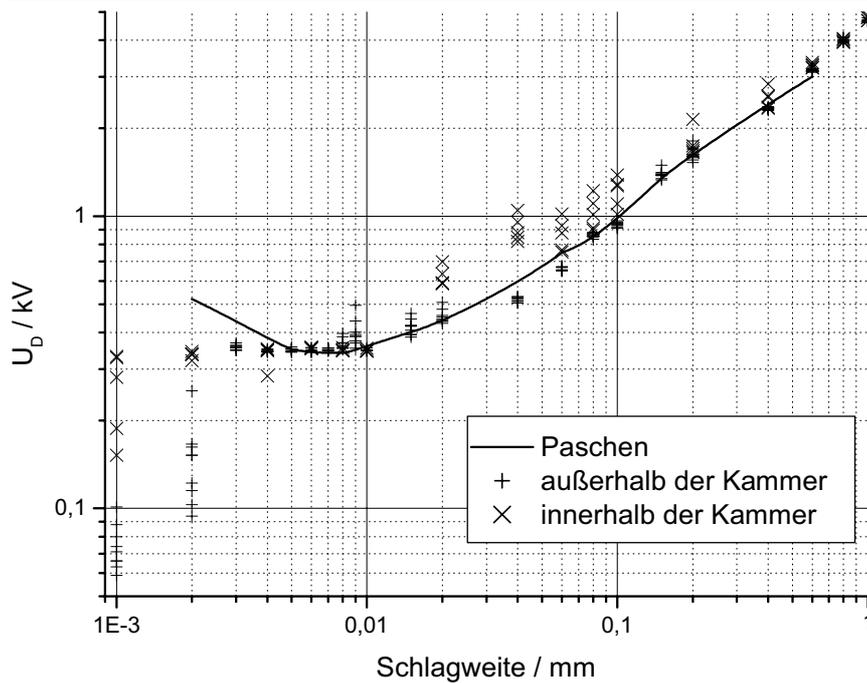
Es ist deutlich erkennbar, dass die Messung außerhalb der Druckkammer einen niedrigeren Zündbedarf aufweist. Dies steht in Zusammenhang mit der Problematik der Startelektronen. Außerhalb der Druckkammer gelangen UV-Strahlungen zur Kathode und lösen über Photoemission zusätzliche Startelektronen aus. Diese Startelektronen sind für die Senkung der Durchschlagsspannung verantwortlich. Die Messung außerhalb der Druckkammer weist eine bessere Übereinstimmung mit der o.g. Paschenkurve auf.



**Abbildung 6.5:** Zündfeldstärke in Abhängigkeit der Schlagweite bei Umgebungsdruck

Dies ist damit zu erklären, dass die Versuche aus [Win71] in einem offenen Raum durchgeführt wurden, bzw. in einer Druckkammer aus Molybdän (UV-durchlässig).

Zur Bestätigung der These, dass die Feldemission bei hohen realen Feldstärken zur Senkung der Durchschlagsspannung führt, wurden die Paschenkurve im Bereich  $d = 5$  bis  $10 \mu\text{m}$  mit zwei verschiedenen Metallen, unterschiedlicher Austrittsarbeit (Aluminium  $W_A=4.28$  eV, Wolfram  $W_A=4.49$  eV), durchgeführt. Aluminium mit seiner kleineren Austrittsarbeit hat einen kleineren Zündbedarf, wie aus Abbildung (6.7) ersichtlich wird.



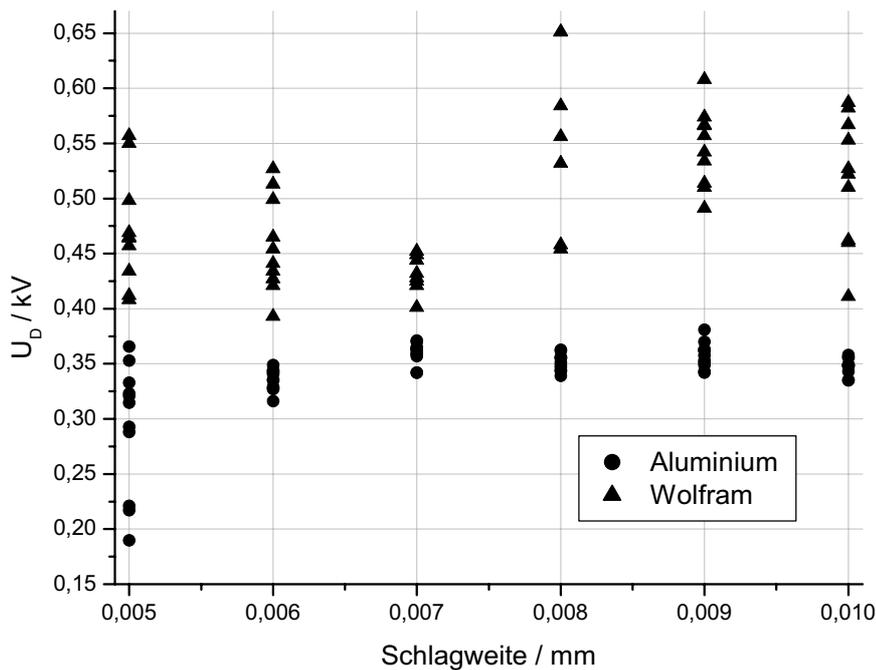
**Abbildung 6.6:** Vergleich zwischen den Messungen inner- und außerhalb der Druckkammer

## 6.2 Aufbau zur Erfassung der Stromvervielfachung

### 6.2.1 Aufbau des Meßkreises

In Abbildung (6.8) ist der Meßaufbau zur Erfassung kleiner und schneller Ströme dargestellt [Yah01b].

Die Anordnung besteht im wesentlichen aus einer Funkenstrecke, wobei die untere Elektrode nicht auf Masse liegt, sondern ein Potential nahe Masse besitzt. Mittels der oben befestigten und isolierten Mikrometerschraube wird der Abstand zwischen den Elektroden eingestellt. Bei diesem Aufbau ist eine exakte Einstellung des Abstandes wie im vorigen Kapitel beschriebenen Aufbau nicht erforderlich, denn es handelt sich um qualitative Messungen. Außerdem werden für diese Untersuchungen nur Abstände größer als  $d = 0.1$  mm eingestellt. Um die Homogenität des Feldes zu gewährleisten, werden Kugeln als Gegenelektroden verwendet. Die Berührungstechnik zur



**Abbildung 6.7:** Vergleich der Zündspannung im  $\mu\text{m}$ -Bereich für zwei Metalle unterschiedlicher Austrittsarbeit

Bestimmung des Nullpunktes ist aus diesem Grund nicht so kritisch wie im Falle einer spitzen Gegenelektrode.

Die Funkenstrecke wird vom Hochspannungsgenerator durch einen hochohmigen Widerstand und eine Koppelkapazität getrennt. Maßgeblich für diese Kapazität ist die zylindrische Anordnung der metallischen Scheibe und der Außenwand unterhalb der Mikrometerschraube. Bei der Konzeption wurde darauf geachtet, dass die Fläche der Scheibe so groß wie möglich ist und dass der Abstand von der Außenwand groß genug bleibt, um elektrische Teil- oder Entladung zwischen der Scheibe und der Außenwand zu verhindern.

Die Funkenstrecke befindet sich in einer Druckkammer, die Unter- bzw. Überdruckmessungen ermöglicht. Des weiteren lassen sich wie im ersten Aufbau äußere Einwirkungen (Höhen-, UV-Strahlung...) ausschließen.

Da die untere Elektrode ein schwebendes Potential besitzt, kann diese ein beliebiges Potential annehmen. Dieses Potential soll aber gegenüber dem Potential der Gegenelektrode auf der Hochspannungsseite vernachlässigbar bleiben. Sollte eine Lawine entstehen, fließt ein schneller aber schwacher Strom. Dieser sucht seinen Weg zur Masse und trifft auf die Elektronik, die

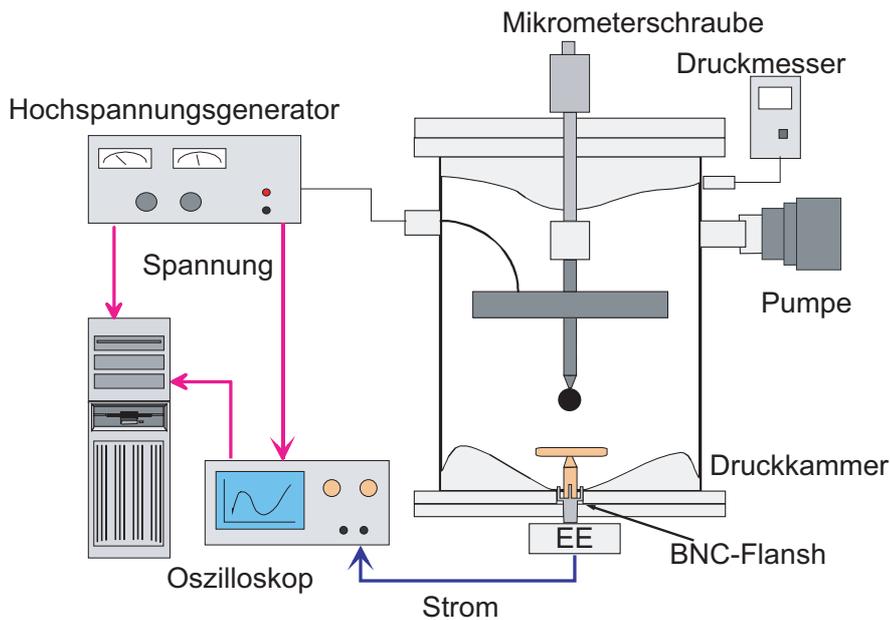


Abbildung 6.8: Meßaufbau zur Erfassung der Stromvervielfachung

in der Abbildung (6.9) dargestellt ist. Der Strom wird zunächst mittels eines Operationsverstärkers (OP) in eine Spannung konvertiert. Dies ist mit einer Invertierung verbunden. Im zweiten Abschnitt wird die Spannung verstärkt. Der  $50\Omega$  Ausgang des OP's wird über BNC zum o.g. Oszilloskop geführt.

Die Variation des Widerstandes an der Konvertierungseinheit ermöglicht die Erweiterung des Messbereiches, allerdings auf Kosten der Empfindlichkeit. Sollte es allerdings zu einem Durchschlag kommen, fließen kurzzeitig hohe Ströme, die zu einer Schädigung der empfindlichen Elektronik führen können. Aus diesem Grund wurde die Elektronikeinheit mit einer Schutzschaltung am Eingang versehen. Diese besteht aus 4 Dioden, die den übrigen Teil der Schaltung kurzschließen, sobald ein Stromschwelle überschritten wird.

Die zu messenden Ströme liegen im  $\mu\text{A}$  – Bereich. Fließt ein Strom von  $100\ \mu\text{A}$  so entsteht zwischen der unteren Elektrode und der Masse eine Spannung von  $100\ \mu\text{A} \cdot 50\ \Omega = 5\ \text{mV}$ . Dieses Potential auf der unteren Elektrode kann als Masse angenommen werden.

Die Spannung wird ähnlich wie bei dem im vorigen Kapitel dargestellten Aufbau über einen Tastkopf gemessen. Es wird ebenfalls der gleiche Hoch-

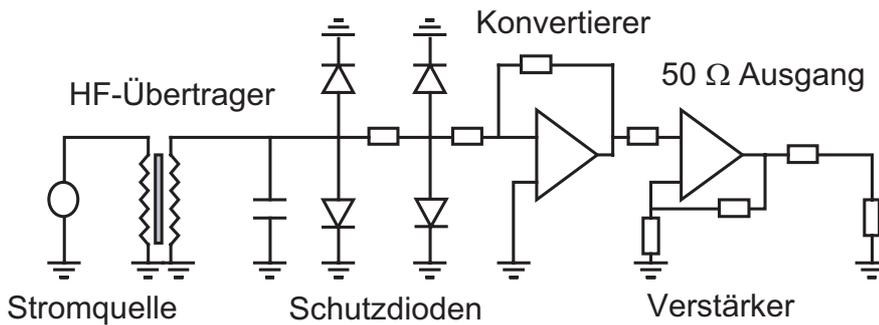


Abbildung 6.9: Elektronik zur Stromverstärkung

spannungsgenerator eingesetzt und auf ähnlicher Weise angesteuert.

### 6.2.2 Durchführung der Messungen

Bei den Versuchen zur Messung der Stromvervielfachung wurden Abstände von 0.1 mm und größer eingestellt. Dies erspart eine aufwendige Justierung wie im vorigen Aufbau. Der Nullpunkt wird über die weiter oben beschriebene Berührungstechnik eingestellt, allerdings manuell. Zu einer Schädigung kommt es in der Regel nicht, da die Hochspannungselektroden Kugeln sind. Anschließend wird der gewünschte Abstand eingestellt.

Da der Aufbau der Messung von schwachen Strömen dient, die bei der Entwicklung der Elektronenlawine entstehen, sollen Verschiebungsströme, die durch plötzliche Spannungserhöhungen induziert werden können, ausgeschlossen werden. Der Übertrager am Eingang der elektronischen Schaltung dämpft langsam veränderliche Ströme (in diesem Fall Verschiebungsströme), hat aber den Nachteil, dass er auch schnell veränderliche Ströme, die es zu messen gilt, mitdämpft. Auf diese Einheit zur Dämpfung langsam veränderlicher Ströme wurde bei diesen Untersuchungen verzichtet. Aus diesem Grund wurde die Spannung noch langsamer erhöht als bei den Versuchen zur Bestimmung der statistischen Durchschlagsspannung. Je nach eingestellter Polarität soll das Oszilloskop im Moment des Durchschlags auf die entsprechende Spannungsflanke getriggert werden. Sowohl das Spannungs- als auch das Stromsignal werden digitalisiert und zum PC übertragen. Das Stromsignal, das in Spannung konvertiert wurde, soll wieder mit Berücksichtigung der jeweiligen Verstärkung in Strom umgerechnet werden. Zwar wurde der Aufbau primär zur Erfassung kleiner Ströme kurz vor dem Durchschlag konzipiert, seine Funktionalität kann aber erweitert werden.

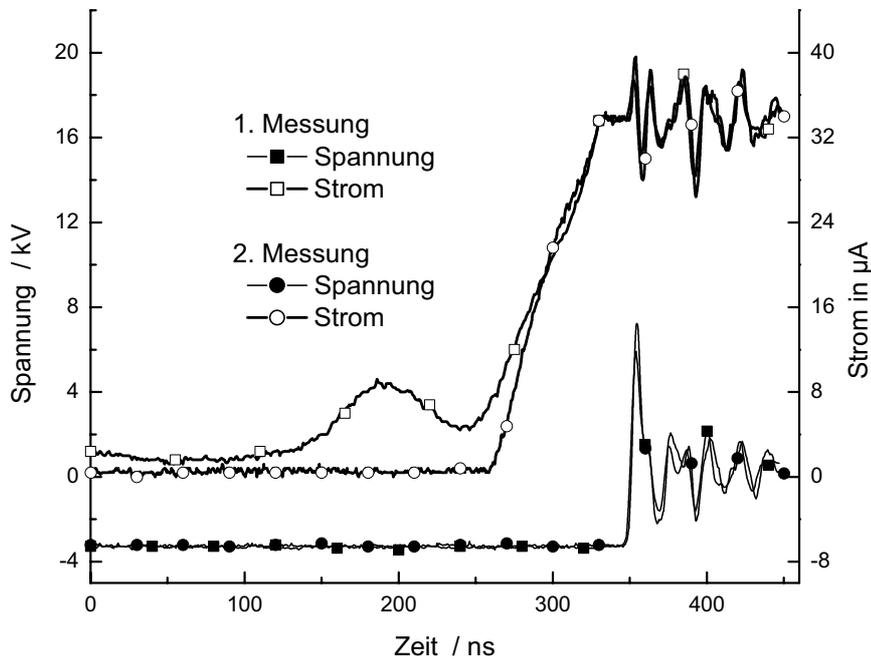
Indem es auf den Strom anstatt der Spannung getriggert wird, kann mit diesem Aufbau festgestellt werden, ob Elektronenlawinen entstehen, die nicht unmittelbar zur Zündung führen.

Diese Art der Messung erlaubt eine Aussage über die Dynamik der Zündung. Eine Elektronenlawine, die nicht zum Durchschlag führt, hinterläßt positive Ladungsträger, die mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit Elektronen aus der Kathode herauslösen, wenn sie sich in derer Nähe befinden. Diese Elektronen können Lawinen bilden, die zum Durchschlag führen oder zumindest den Raum mit Ladungsträgern bereichern. Solche Messungen erlauben zugleich eine Aussage über die Herkunft lawinenwirksamer Startelektronen. Diese Elektronenlawinen induzieren Ströme, die meßbar sind, sobald sie eine Triggerschwelle überschreiten. Diese Art der Messungen ist mit einem EMV-Problem verbunden, da der Aufbau auf sehr kleine Ströme reagiert. Diese Ströme können über Kabeln, die kurzzeitig als Antennen fungieren, eingekoppelt werden. Der Aufwand einer Zusatzschirmung wird umgangen, indem die Triggerschwelle hoch angesetzt wird, mit der Konzession, dass kleine Lawinen nicht mehr erfasst werden können. Die Triggerschwelle muss vor jeder Messung neu ermittelt werden. Ein üblicher Wert für die Schwelle ist  $I_{sch} = 1.5 \mu\text{A}$  (dieser Wert muss je nach Verstärkung in der Elektronik für das Oszilloskop umgerechnet werden). Wichtig bei solchen Messung ist es, darauf zu achten, dass die Spannung nicht zusammenbricht. Es sollte aus diesem Grund folgendermaßen vorgegangen werden: Der Durchschlagsspannungswert wird in einem ersten Versuch ermittelt. Die Spannung wird Auf 70% dieses Wertes eingestellt und es wird auf den Strom getriggert. Sollte kein Strom detektiert werden (die Lawinen sind noch zu klein), wird die Triggerschwelle reduziert oder die Spannung wird langsam erhöht.

### 6.2.3 Ergebnisse

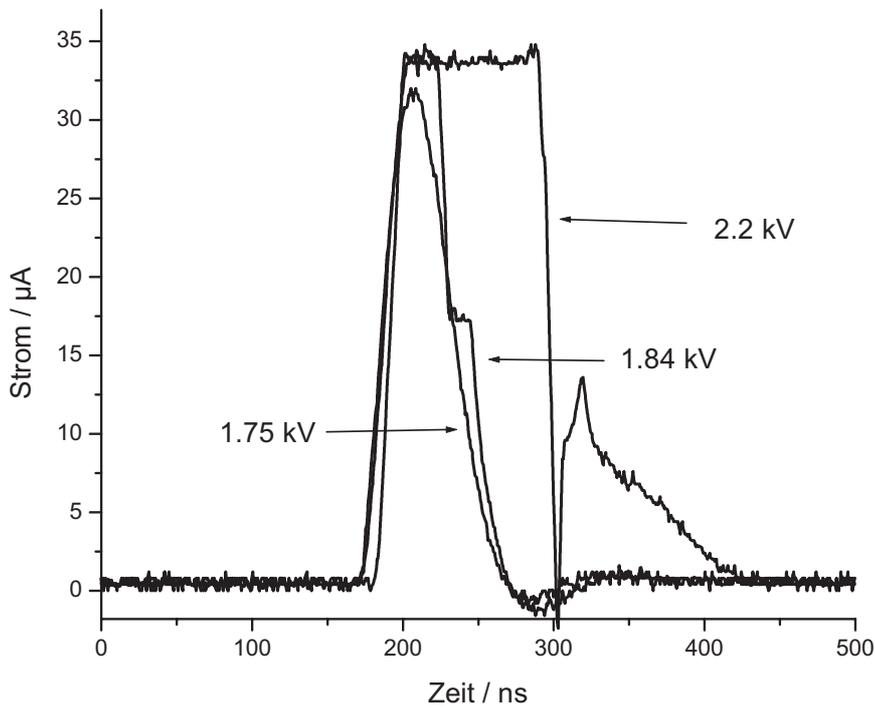
Die Aufzeichnung der Spannung und des Stroms einer Funkenstrecke kurz vor dem Durchschlag ist in Abbildung (6.10) dargestellt. Es handelt sich dabei um zwei Messungen bei Atmosphärendruck mit einer Kugel-Platte-Anordnung bei einem Abstand von  $d = 0.8 \text{ mm}$ . Die Durchschlagsspannung ist in beiden Messungen annähernd gleich. Auffällig ist der unterschiedliche Stromverlauf, obwohl die exponentielle Stromvervielfachung annähernd die gleiche Anstiegsflanke zeigt. Die erste Messung stellt einen „satten“ Durchschlag dar, da der Strom vor der Stromanstiegsflanke auf Null war und dessen Anstieg unvorsehbar ist. Die zweite Messung entspricht wohingegen einen „weichen“ Durchschlag. Der Elektronenlawine, die zum Durchschlag führt, gehen kleinere unwirksame Lawinen voraus (hier Lawinenakti-

vitäten genannt). Diese Lawinenaktivitäten induzieren einen Strom vor der Anstiegsflanke (Strom ungleich Null).



**Abbildung 6.10:** Stromvervielfachung kurz vor dem Durchschlag

Der „weichen“ Durchschlag läßt die Frage offen, wie die o.g. Lawinenaktivitäten vor dem Durchschlag mit dem Zündbedarf zusammenhängen. Indem es bei dem obigen Aufbau auf den Strom getriggert wird, ist es möglich diese Voraktivitäten von dem Durchschlagsprozess zu extrahieren. Bei dieser Betrachtung ist es wichtig, die Spannung bzw. die Feldstärke zu ermitteln, oberhalb welcher diese Aktivitäten spürbar (messbar) sind. Der Verlauf des von Elektronenlawinen induzierten Stromes ist in der Abbildung (6.11) dargestellt. Es handelt sich bei diesen Messungen um eine Kugel-Platte-Anordnung bei einem Abstand von  $d=0.4$  mm unter Atmosphärendruck. Die Anordnung schlägt bei einer Spannung von  $U_D \approx 2.4$  kV durch. Bei den Messungen auf der Abbildung (6.11) blieb die Spannung konstant. Dies impliziert, dass der Ladungsübertrag nicht zu einem Spannungseinbruch führt.

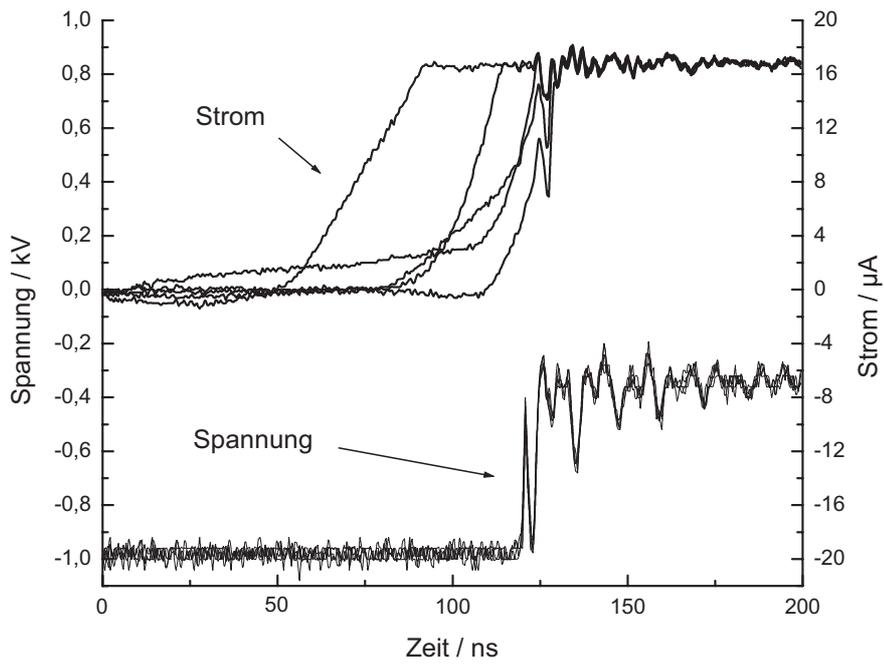


**Abbildung 6.11:** Lawinenbildung, die nicht zum Durchschlag führen

Die Korrelation zwischen der Ladungsmenge (Fläche unter der Stromkurve) und der anliegenden Spannung ist gut zu erkennen. Die Fläche kann nicht direkt als Kriterium herangezogen werden, da der Strom ab einem Maximalwert von  $I = 35 \mu\text{m}$  aufgrund der Sättigung des Verstärkers abgeschnitten wird.

Um die Fluktuationsursachen zu erforschen, wurden 5 Durchschlagsversuche durchgeführt und dabei die Spannung und der Strom aufgenommen (siehe Abb. 6.12). Es handelt sich hier wieder um eine Kugel-Platte-Anordnung bei einem Druck  $p=1 \text{ bar}$  und einer Schlagweite  $d=1 \text{ mm}$ .

Die Lawinenentwicklung verläuft nicht einheitlich, obwohl die Durchschlagsspannung fast identisch ist. Zwar verlaufen alle Stromkurven nach einer gewissen Fluktuationszeit parallel, diese Fluktuation ist aber nicht in der Lawinenentwicklung wieder zu erkennen, sondern in den verschiedenen



**Abbildung 6.12:** Lawinenbildung, die zum Durchschlag führen

Aufbauzeiten (Die Zeit, die zwischen der Entstehung der Lawinen bis zum deterministischen exponentiellen Verlauf vergeht).

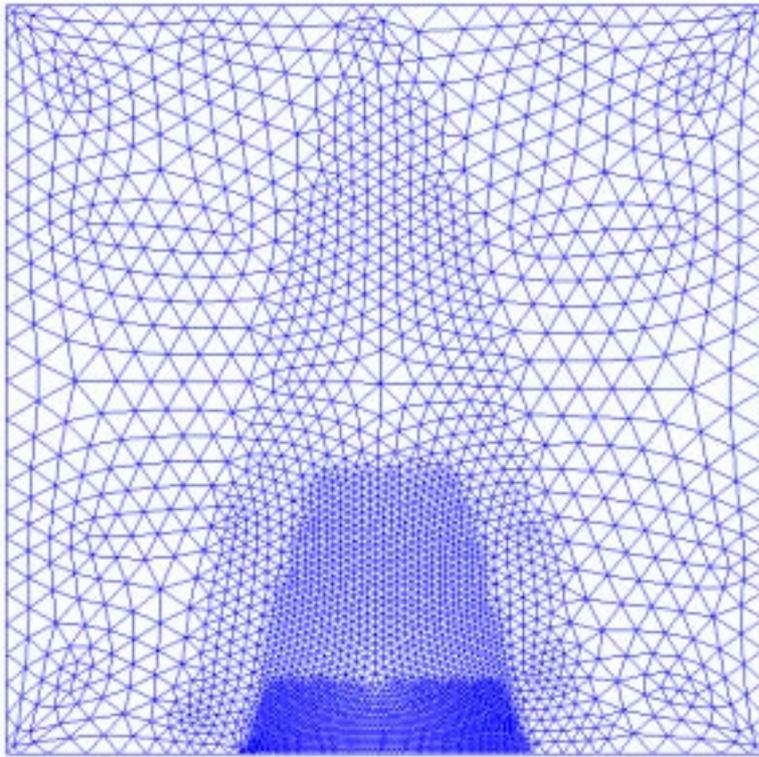
# Kapitel 7

## Ergebnisse

In diesem Kapitel wird die Entladungsentwicklung vorgestellt, angefangen bei der Townsend'schen Gasverstärkung bis hin zu der Kanalbildung. Die erste Phase der Entladung wird mit der Monte-Carlo-Technik erfasst, da eine Dichtebeschreibung bei der geringen Anzahl der Ladungsträger nicht zulässig ist. Die mikroskopische Betrachtung wird durchgeführt, solange keine Rückwirkung auf die Feldverteilung eintritt und sie wird abgebrochen, sobald eine Dichtebeschreibung zulässig ist. Ist dies geschehen, tritt das Fluidmodell in Kraft. Anhand der Kopplung der Transport- mit der Potentialgleichung wird dann gezeigt, wie die Verzerrung des elektrischen Feldes die Entladungsentwicklung begünstigt. Dieses Rechenmodell wird anschließend zur Ausarbeitung eines Durchschlagskriteriums herangezogen. Dieses Kriterium unterscheidet sich von den üblichen (Townsend und Streamer) Kriterien. Dieser Unterschied wird ausgiebig diskutiert. Abschließend findet ein Vergleich der simulierten Durchschlagsspannungen mit der experimentell ermittelten Werten statt und die Abweichung beider Werte wird diskutiert. Für die folgenden Beispiele wurde eine einheitliche Anordnung verwendet: Platte-Platte-Anordnung (unendlich ausgedehnte Elektroden, homogenes Feld) bei einem Abstand  $d = 1 \text{ mm}$  und einem Druck  $p = 1 \text{ bar}$ . Als Gas wurde Stickstoff ausgewählt. Das Geschehen vor der Anode ist entscheidend für die Streamerbildung und deswegen wird dieser Bereich feiner diskrtisiert (siehe Abb. 7.1).

In der Abbildung 7.2 sind die Kontrollvolumen des interessierenden Gebietes nahe der Anode stark vergrößert dargestellt.

Der Zeitschritt in der Monte-Carlo-Simulation wurde auf  $10^{-5} \text{ ns}$  und für die weitere deterministische Entwicklung auf  $10^{-2} \text{ ns}$  festgelegt. In den

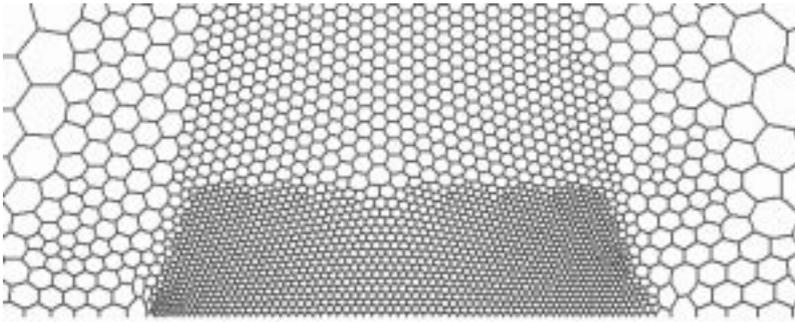


**Abbildung 7.1:** Eingesetztes Netz für die durchgeführten Berechnungen

fortgeschrittenen Phasen der Entladungsentwicklung wurde dieser Zeitschritt weiter auf  $10^{-3}$  ns herabgesetzt. Diese Herabsetzung erweist sich in den Stabilisierungsbereichen als sehr wichtig. In diesen Bereichen stellt sich ein elektrisches Feld, welches eine gewisse Verteilung der Ladungsträgerdichten stabilisiert.

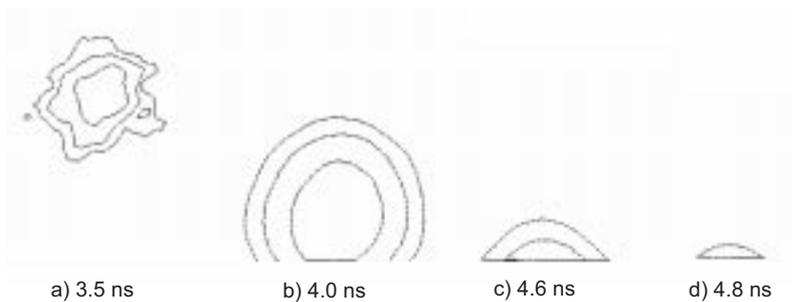
## 7.1 Beispiel einer fehlgeschlagenen Entladung

Das erste Beispiel zeigt die Entwicklung einer Elektronenlawine, die mit einem einzelnen Elektron begonnen wurde. Die Lawinenentwicklung ist unter dem Einfluss von einer Potentialdifferenz unterhalb der Durchschlags-



**Abbildung 7.2:** Kontrollvolumen in der Nähe der Anode stark vergrößert

spannung. Nach der Paschen-Kurve beträgt die Durchschlagsspannung  $U_D = 5$  kV. Da äußere Einwirkungen wie UV-Strahlung ausgeschlossen werden, kann bis 20% Überspannung angenommen werden (siehe 6.6). Infolgedessen wird eine Spannung  $U = 5.9$  kV angelegt. Das erste Elektron wird mittig eingebracht und seine weitere Entwicklung wird zunächst mittels der Monte-Carlo-Technik verfolgt. Nach 3.5 ns läßt sich die Elektronenlawine hinreichend genau über Dichten beschreiben.

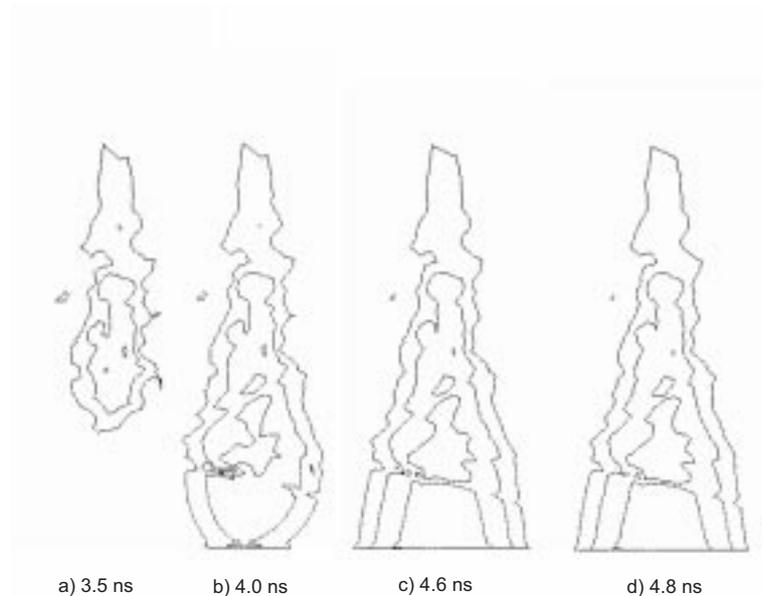


**Abbildung 7.3:** Die deterministische Entwicklung der Elektronenlawinen einer fehlgeschlagenen Entladung: räumliche Verteilung der Elektronendichte.

In der Abbildung (7.3, a) ist die Dichteverteilung der Elektronen nach dieser ersten Phase zu finden, bei der eine Rückkopplung auf Grund der schwachen Raumladung ausgeschlossen wird. Dabei wird die im Kapitel 4 vorgestellte Technik zur Lokalisierung der Ladungsträger herangezogen. Die Dichte wird

hierbei logarithmisch dargestellt, wobei die äußerste geschlossene Linie der Höhenlinie  $10^4$  Teilchen/mm<sup>3</sup> entspricht. Eine Höhenlinie entspricht ferner einer halben Größenordnung.

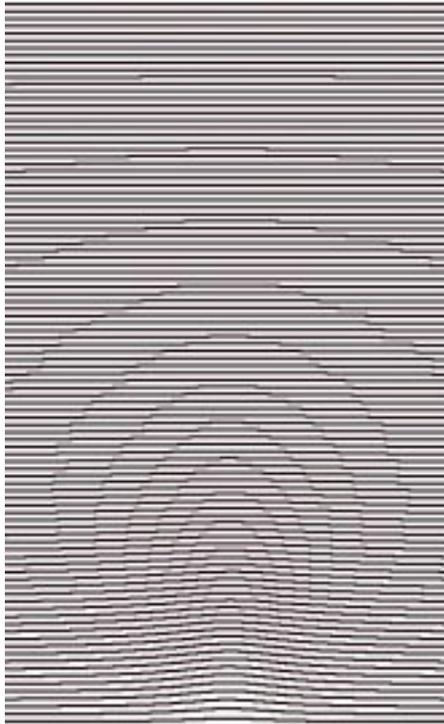
In der Abbildung 7.3 wird die weitere deterministische Entwicklung der Lawinen über weitere 1,3 ns dargestellt. Hierbei wurde wie oben erläutert die Transport- (FVM) in Kombination mit der Poisson-Gleichung (FEM) gelöst.



**Abbildung 7.4:** Entwicklung der räumlichen Verteilung der positiven Ionen

Analog wurden Momentaufnahmen der Dichte der positiven Ionen in der Abbildung 7.4 festgehalten. Im Gegensatz zu der Elektronenverteilung wird die Verteilung der positiven Ionen nicht geglättet, da der konvektive Term in der entsprechenden Gleichung nicht ins Gewicht fällt. Während der gesamten Rechenzeit von fast 5 ns bleiben die Ionen beinahe stehen. Für die spätere Diskussion um die Tauglichkeit der Modelle sei hier erwähnt, dass die Elektronenlawine insgesamt knapp 3000 positive Ionen hinterlassen hat.

Die Spannung ist in diesem Fall unzureichend, um eine Gasverstärkung herbeizuführen, dass eine Feldverzerrung zu Folge hat. Die Elektronenlawine wird von der Anode absorbiert, wie in der Abbildung 7.3 dargestellt ist. Der



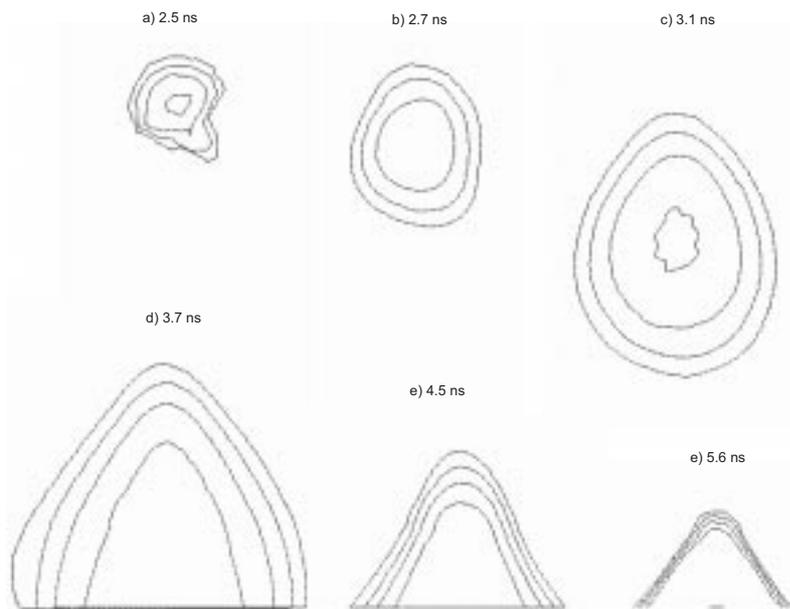
**Abbildung 7.5:** Verlauf der Potentiallinien

Verlauf der Potentiallinien ( $\Delta U \approx 50$  V) in der Abbildung (7.5) 4.8 ns nach Anlauf der Elektronenlawine, sind nahezu parallel und daraus folgt, dass keine Feldverzerrung stattgefunden hat und folglich keine nennenswerte Raumladung entstanden ist.

## 7.2 Beispiel einer erfolgreichen Lawinenentwicklung

Im zweiten Beispiel wird die gleiche Anordnung bei gleicher räumlicher Diskretisierung betrachtet. Die Spannung wird hierbei auf  $U = 6.9$  kV gesetzt.

Um eine eventuelle Rückwirkung der Ladungsträger auf die Verteilung des elektrischen Feldes zu vermeiden, wurde die Monte-Carlo-Simulation nur für

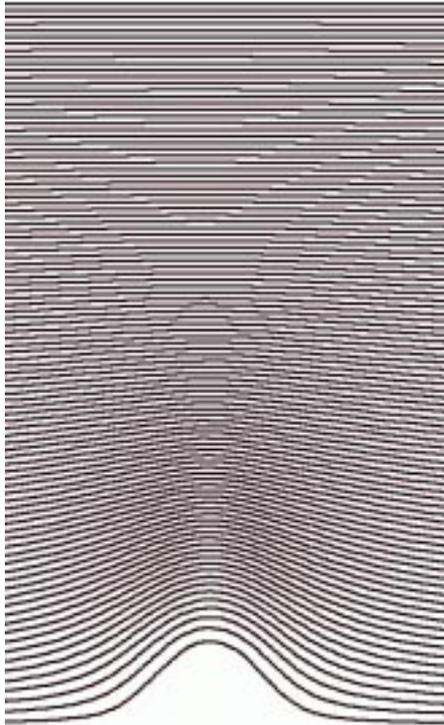


**Abbildung 7.6:** Entwicklung der Elektronenlawine unter dem Einfluss einer Spannung oberhalb der Durchschlagsspannung

die ersten 2.5 ns durchgeführt. Die Ausbeute an Elektronen (siehe 7.6, a) ist zwar größer als im ersten Beispiel, eine Rückwirkung ist dennoch nicht zu vorhanden. In der Abbildung (7.6) ist der weitere Verlauf der Elektronenlawine zu erkennen. Auffällig hierbei ist die *Persistenz* (es erscheint so, als ob die Elektronenlawine Widerstand gegen ihre Absorption leistet) der Lawine nach 5 ns. Es entsteht ein Gleichgewicht zwischen der Rate an Elektronen, die neu erzeugt werden, und deren, die in die Anode verschwinden. Indem immer mehr positive Ionen erzeugt werden, kommt es zu einer merklichen Feldverzerrung, die diese Persistenz begünstigt.

Der in der Abbildung 7.7 dargestellte Verlauf der Potentiallinien 5.6 ns nach dem Anlauf der Lawine hat zwei Merkmale, die für den Durchschlag entscheidend sind:

- An der Stelle, an der die Elektronen in die Anode verschwinden, rücken die positivsten Potentiallinie Richtung Kathode vor. Zwischen der letzten Linie und der Anode ist der Raum quasi feldfrei. Die Elektronen spüren ein sehr schwaches Feld und werden daran gehindert, schnell in



**Abbildung 7.7:** Verlauf der Potentiallinien

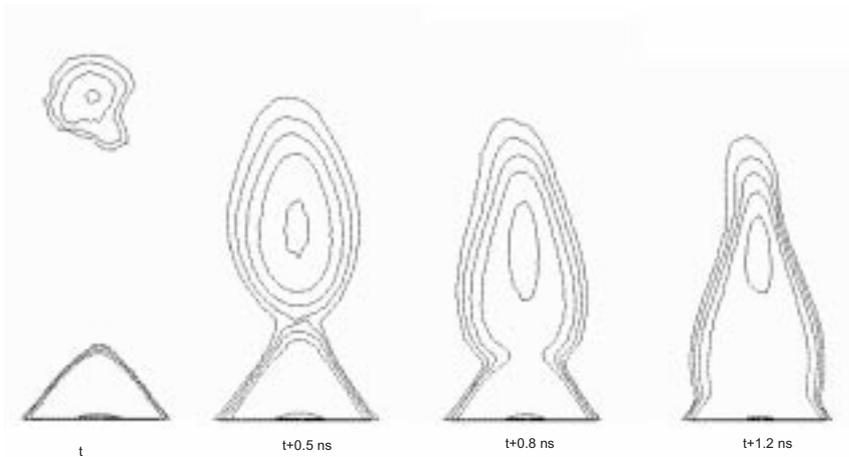
die Anode zu verschwinden. Das Gleichgewicht stabilisiert sich.

- hinter dem Kopf der Lawine ist eine starke Feldverzerrung zu erkennen, welche eine zusätzliche Ionisierung begünstigt. Dies führt zu einer weiteren Stabilisierung des Gleichgewichts zwischen neu erzeugten und in die Anoden verschwindenden Elektronen.

### 7.3 Beispiel einer Nachfolgelawine

Das oben beschriebene Gleichgewicht begünstigt allerdings keine Umkehr der Lawine und folglich die Bildung eines leitfähigen Kanals. Ein Streamer entsteht dadurch, dass eine zweite Lawine anläuft, solange das Gleichgewicht anhält. Die Abbildung (7.8) zeigt eine Nachfolgelawine (Ein Elektron mittig angesetzt und mittels der MCS 2ns verfolgt). Es ähnelt der

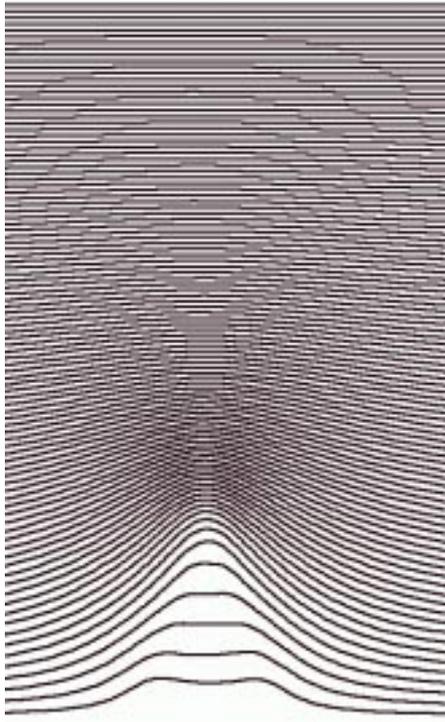
Ausgangsposition der ersten Lawine.



**Abbildung 7.8:** Auswirkung einer Nachfolgelawine

Nach 1 ns findet die Nachfolgelawine Anschluß an die erste Lawine und ein Kanal öffnet sich Richtung Kathode. Im Unterschied zu der Entwicklung der Mutterlawine, wächst die Nachfolgelawine viel schneller, so dass sie dem starken Feld hinter dem Kopf der Mutterlawinen (siehe Abb. 7.7) ausgesetzt ist. Die Feldverzerrung hinter dem Kopf der Mutterlawine, die in der Abbildung 7.9 zu erkennen ist, hält an. Dadurch, dass neue Elektronen zu der Nähe der Anode gelangen, wird das Gleichgewicht für eine kurze Zeit gestört. Die Potentiallinien aus der Abbildung 7.9 direkt vor der Anode verflachen sich und lassen eine weitere Gasverstärkung zu. Kurze Zeit danach stellt sich ein neues Gleichgewicht in dieser Region, allerdings mit höheren Elektronenerzeugungsraten.

Der zuerst gestarteten Elektronenlawine gelingt es nicht, einen kathodengerichteten Streamer zu erzeugen, da die benötigte Zeit bzw. der nötige Raum dazu nicht ausreichend ist, um sich weiter zu einer größeren Raumladung zu vermehren, die eine eigene Bremsung weit weg vor der Anode ermöglicht. Nur unter der Annahme, dass die Elektronen an der Anode erhalten bleiben und nicht in diese verschwinden, ist eine Umkehrung des Feldes denkbar. Wird in diesem Beispiel die Spannung weiter erhöht, werden Dichten erreicht, die eine Feldumkehrung begünstigen. Dieser Fall ist aber für die Zündung bei kleinen Abständen nicht von Belang und wird hier nicht weiter betrachtet, da die entsprechenden Spannungen realitätsfern sind.

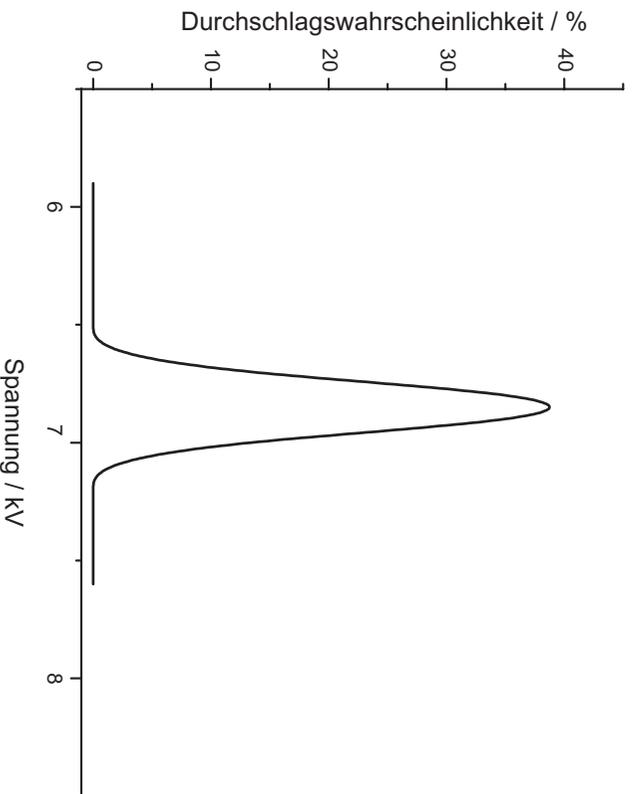


**Abbildung 7.9:** Vergleich der geometrischen Verteilung beider Lawinen

Die zweite Lawinen (Nachfolgelawine genannt) kann mitten im Zündraum, vorzugsweise direkt hinter dem Kopf der Lawine entstehen, da auf Grund des starken Feldes viele Anregungsstöße stattfinden. Diese könnten im günstigsten Fall zu einer Photoionisation führen. Denkbar ist ebenso, dass die Photonen die Kathode treffen und dort Elektronen auslösen. Der erste Fall ist primär bei Gasgemischen interessant, bei denen die Gasbestandteile unterschiedliche Ionisierungsenergien aufweisen (z.B. Luft). Die zwei Fälle wurden in dieser Arbeit nicht untersucht und könnten den Ansatzpunkt weiterer Arbeiten darstellen.

## 7.4 Durchschlagskriterium

Das Durchschlagskriterium kann folglich folgendermaßen formuliert werden: Gelingt es der Lawine, eine so große Vermehrungsrate zu erreichen, dass ein Gleichgewicht zu der an der Anode absorbierten Elektronen entsteht, so gelingt kleineren Nachfolgelawinen der sofortige Durchbruch. Wird dieses Kriterium herangezogen, läßt sich abhängig von der anfänglichen Verteilung der Ladungsträger eine Durchschlagswahrscheinlichkeit ausrechnen. Es läßt sich folglich eine Häufigkeitsverteilung der Durchschlagsspannung aufstellen. Diese ist in der Abbildung (7.10) zu sehen. Hierbei wurde die Spannung jeweils um 100 V erhöht. Pro Spannungswert wurden 50 Simulationen durchgeführt.



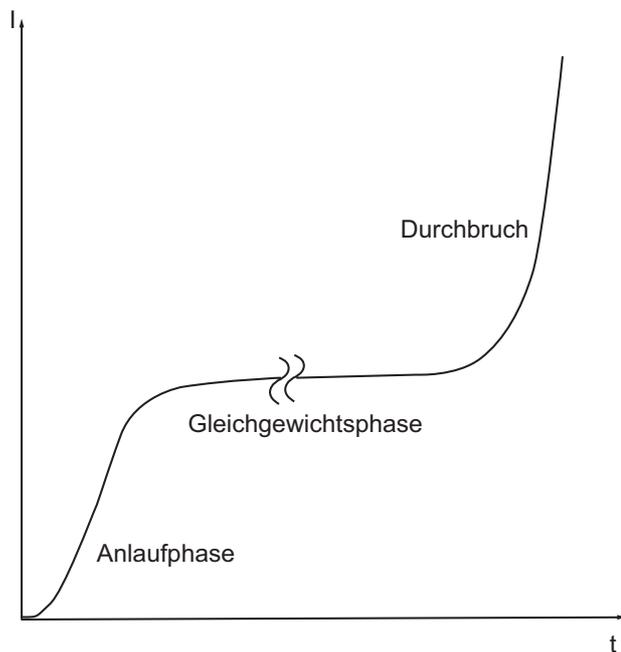
**Abbildung 7.10:** Durchschlagst ufigkeit in Abh angigkeit der angelegten Spannung

Diese Verteilung ist extrem schmal, welche mit experimentellen beobachteten Verteilungen (siehe Kapitel 2) nicht  bereinstimmt. Grund hierf ur sind die getroffenen Annahmen in der Simulation: Ein einziges Elektron als Ausgangssituation f ur eine elektrische Entladung stellt ein Worst-Case Betracht-

tung dar. Die simulierte Durchschlagsspannung ist aus dem Grund oberhalb der von der Paschenkurve vorausgesagte Wert. Der Abstand  $d = 1 \text{ mm}$  ist eine typische Schlagweite für einen Townsend-Durchschlag, nach dem mehrere Generationen an dem Durchschlag beteiligt sind. Dies stimmt mit der Simulation dahingehend überein, dass eine Nachfolgelawine erforderlich ist, um den Durchbruch zu erzielen. Dabei hat die erste Lawine keineswegs die Aufgabe, das Gleichgewicht zu erhalten, bis die Nachfolgelawine den Durchbruch erzielt. Die Mutterlawine sollte vielmehr so viele positive Ionen erzeugen, so dass bei ihrem Aufprall auf die Kathode mindestens ein Elektron herausgelöst wird. Dieses kann wiederum eine neue Lawine starten und die Ionisationskette wird nicht unterbrochen. Wird dieses Kriterium herangezogen, genügt die erste Spannung von  $U = 5.9 \text{ kV}$  zum Durchbruch, da ca. 3000 positive Ionen während der Lawinenentwicklung erzeugt wurden. Selbst mit einem zweiten Townsend'schen Koeffizienten  $\gamma_I$  von  $10^{-3}$  sind mindestens zwei Sekundärelektronen vorhanden. Diese können neue Generationen von Elektronenlawinen starten und die Kette der Ionisation aufrechterhalten. In diesem Beispiel ist die Fluktuation in der Anfangsphase der Zündung, in der wenige Elektronen beteiligt sind (Monte-Carlo-Phase), zweitrangig. Dies hängt damit zusammen, dass die Zündfeldstärke extrem hoch ist und somit der Elektronenlawinen sehr früh ein deterministisches Verhalten aufgezwungen wird, indem die Elektronen einer gerichteten Bewegung folgen. Wird dagegen das Townsend'sche Durchschlagskriterium herangezogen, nach dem ein Elektron bei einem  $\gamma_I$  von  $10^{-3}$  mindestens 1000 weitere Elektronen und folglich genau so viele positive Ionen generieren soll, damit die Ionisationskette ununterbrochen bleibt, reicht eine viel kleinere Feldstärke ( $\approx 5 \text{ kV/mm}$ ) aus. Die Fluktuation in der Auslösung der Sekundärelektronen, die in dieser Arbeit nicht mit erfasst wird, ist viel größer. Dies ist auf den sehr kleinen Wert des 2. Townsend'schen Koeffizienten zurückzuführen. Dieser Wert gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein positives Ion ein Elektron aus der Kathode bei dessen Neutralisierung herauslöst. In Anbetracht der Tatsache, dass die Ionen einige  $\mu\text{s}$  brauchen, bis die Kathode erreichen, ist diese zeitliche Fluktuation größer als die der Lawinenentwicklung.

Diese Betrachtung zeigt eine weitere Schwäche des Paschengesetzes. Die Form des Durchschlags (Townsend oder direkter Streamer) hängt einzig vom Abstand und nicht wie bisher angenommen vom Produkt aus Abstand und Druck ab. Der Druck beeinflusst lediglich die Stosswahrscheinlichkeit und die Ionisationseffizienz, nicht aber die räumliche Verteilung der Lawine bis auf die zweitrangige Druckverbreitung. Daraus folgt, dass sogar ein höherer Druck beim selben Abstand dieselbe Entladungsform aufweist: Das Gleichgewicht hält solange an, bis eine Nachfolgelawine den Durchbruch herbeiführt. Dieser Verlauf ist in der Abbildung 7.11 zu erkennen. Die Entladungskurve kann in 3 Bereichen unterteilt werden:

- Anlaufphase: eine wirksame Lawine wächst exponentiell in Richtung Anode.
- Gleichgewichtsphase: Die Lawine erreicht ein Gleichgewicht. Der leichte Anstieg in der Stromkurve ist damit zu erklären, dass die Dichte der positiven Ionen kontinuierlich wächst, wobei die Dichte der Elektronen konstant bleibt. Die Feldverzerrung ist um so größer, je länger diese Phase anhält, da die Zahl der positiven Ionen weiter zunimmt und die Differenz der Dichten (Poisson-Gleichung) ebenfalls.
- Durchbruchphase, worin eine Nachfolgelawine den Anschluß an die Mutterlawine findet.



**Abbildung 7.11:** Der typische Stromverlauf einer Townsend-Entladung

Je nach dem wie das Feld vorverzerrt ist, wird der Durchbruch mehr und minder leicht erzielt. Dies spiegelt sich in der Anzahl der Nachfolgelawinen wieder, die den Durchbruch herbeiführen. Wenn dieser Strom mit der im Kapitel 6.2.1 beschriebenen Elektronikeinheit aufgenommen werden sollte, wird

nur die letzte Phase aufgezeichnet. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass die Elektronikeinheit zur Messung schneller (exponentiell ansteigende) Ströme konzipiert ist. Die verschiedenen Steilheiten in den Stromkurven aus 6.10 sind auf die unterschiedliche Dauer der zweiten Phase, denn es werden nur Elektronenlawinen aufgenommen, die die Kanalbildung herbeiführen und nicht die, die der Stabilisierung der Gleichgewichtszone dienen. Die Vorverzerrung durch persistente Elektronenlawinen oder sogar durch hohe Dichte von positiven Ionen im Falle völlig absorbiertes Elektronenlawine ergeben unterschiedliche elektrische Felder. Die Anstiegsgeschwindigkeit des Stroms richtet sich nach diesen Feldern.

Das Simulationstool eignet sich sehr gut, die Transportphänomene in Zusammenhang mit der Vermehrung der Ladungsträger zu beschreiben, kann aber die Selbständigkeit der Entladung bei kleinen Abständen (1 - 10 mm) nicht wiedergeben. Dies hängt im wesentlichen mit der Physik der Entladung an sich zusammen. Es sind mehrere Generationen an der Entladung beteiligt, deren räumliche Verteilung entscheidend ist. Es lässt sich sehr gut veranschaulichen, wie eine Nachfolgelawine einer persistenten Mutterlawine dazu verhilft, den Kanal zu bilden. Das Berechnungsprogramm kann aber in seiner jetzigen Ausführung keine Aussage darüber machen, wie die Mutterlawinen in irgendeiner Form ihre Nachfolgerin verantworten kann.

## Kapitel 8

# Zusammenfassung und Ausblick

Eine elektrische Entladung beginnend mit wenigen Ladungsträger bis hin zu einem hoch leitfähigen Plasma läßt sich keineswegs einheitlich beschreiben oder modellieren. In der vorliegenden Arbeit ist es gelungen, ein Hybridmodell für die elektrische Entladung zu erstellen, das die Entladungsentwicklung sowohl auf mikroskopischer als auch makroskopischer Ebene beschreibt. Die Schwierigkeit einer Dichtebeschreibung in der Anfangsphase einer elektrischen Entladung, in der nur wenige Ladungsträger beteiligt sind, wird über die mikroskopische individuelle Betrachtung der Ladungsträger umgangen. Wächst die Zahl der Ladungsträger über eine Grenze hinweg, die eine Dichtebeschreibung zulässt, kann die weitere Entladungsentwicklung mit einem Fluidmodell erfasst werden. Dabei musste eine Reihe von gekoppelten Differentialgleichungen gelöst werden.

Da eine geschlossene analytische Lösung nicht existiert, war eine numerische Lösung, die eine räumliche Diskretisierung voraussetzt, unumgänglich. Die Wahl fiel hierbei auf Grund ihrer Flexibilität und der Möglichkeit der lokalen Nachverfeinerung auf unstrukturierte Gitter. Es wurde ein Netzgenerierungsverfahren entwickelt, das sich weitgehend an der Methode der Bildung von Voronoi-Subdomänen anlehnt. Die Triangulierung als solche wurde allerdings mit einem neu entwickelten Verfahren durchgeführt (siehe Kapitel 3), welches auf die Triangulierung von Streifen in den Subdomänen basiert. Da eine solche Triangulierung die Komplexität  $O(n)$  besitzt, handelt sich hierbei um eine deutliche Verbesserung gegenüber der klassischen Delaunay-Triangulation ( $O(n^2)$ ).

Bei der mikroskopischen Betrachtung wurde die Monte-Carlo-Technik erfolgreich angewandt. Sämtliche Stoßparameter wurden in Übereinstimmung

mit experimentellen Daten reproduziert. Es ist gelungen mit dieser Technik, die exponentielle Entwicklung der Elektronenlawine wiederzugeben und die Fluktuation in der Phase vor dem deterministischen Kollektivverhalten quantitativ zu erfassen.

Bei reduzierten Feldstärken zwischen 3 und 5 kV/mm·bar lässt sich gut zeigen, dass die Fluktuation in der Lawinenentwicklung unter Umständen entscheidend ist, ob die heranwachsende Elektronenlawine den Durchschlag herbeiführen kann oder nicht (siehe Kapitel 4).

Um die Feldstärke zu ermitteln, der die geladenen Teilchen ausgesetzt sind, müssen diese zunächst lokalisiert werden. Eine neue und effiziente Lokalisierungstechnik wurde in dieser Arbeit entwickelt und erfolgreich eingesetzt. Das elektrische Feld wurde hierbei aus dem entsprechenden Potential abgeleitet, dass durch die Lösung der Poisson-Gleichung gewonnen wurde. Da es sich hierbei um eine elliptische Differentialgleichung handelt, wurde diese mit der Finite Elemente Methode gelöst. Die Aufstellung der Steifigkeitsmatrix geschieht nach einer Vorsortierung der Dirichlet-Werte, die den Rechenaufwand reduziert. In der ersten Phase wird eine Rückwirkung der Raumladung auf die Feldverteilung ausgeschlossen, weshalb die Feldberechnung nur einmal durchgeführt wird. Das Gleichungssystem wurde zu diesem Zweck mit dem ICCG-Verfahren iterativ gelöst.

Die weitere deterministische Entwicklung der Lawine wird über Transportgleichungen erfasst, in die feldabhängige Größen eingehen. Zur Lösung der Transportgleichungen wird die Finite Volumen Methode verwendet, da sie als einzige konservativ ist. Um die Feldabhängigkeit zu erfassen, wird die Poisson Gleichung simultan gelöst.

Die Entladungsentwicklung, die sich weitgehend bei mm-Abständen vom klassischen Streamer-Durchschlag unterscheidet, wurde anhand der Simulationen veranschaulicht. Ein neues Durchschlagskriterium hierfür wurde aufgestellt und seine Druckunabhängigkeit diskutiert. Eine ausführliche Diskussion zu diesem Punkt ist in Kapitel 7 zu finden.

Um die Simulationen zu untermauern, wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt. Der experimentelle Teil befasste sich einerseits mit der Problematik der Startelektronen, andererseits mit der Messung von Entladungströmen. In diesem Zusammenhang wurde anhand der Druckverzweigung der Paschenkurve im  $\mu\text{m}$ -Bereich die Feldstärke ermittelt, die eine Feldemission begünstigt (siehe hierzu 6). In einem weiteren Schritt und mittels einer neuartigen Messmethode von Entladungströmen (siehe 6.2) wurde nachgewiesen, dass es zu Lawinenaktivitäten im Vorfeld der Entladung kommt, ohne dass ein Durchbruch erreicht wird. Dies weist darauf hin, dass zum Zeitpunkt des Erreichens der statischen Durchschlagsspannung genügend Ladungsträger im Zündvolumen vorhanden sind. Mit dem selben Aufbau wurde festgestellt, dass der Entladungsstrom unterschiedlich

schnell wächst, obwohl die selben Randbedingungen herrschen. Dies steht in Einklang mit der aus der Simulation gewonnenen Erkenntnis, dass eine Mutterlawine das elektrische Feld unterschiedlich vorverzerren kann, bis die Nachfolgelawine Anschluss findet.

Das bestehende Simulationswerkzeug, welches im Rahmen dieser Arbeit entwickelt worden ist, läßt sich ohne großen Aufwand erweitern, um andere Entladungseffekte zu erfassen.

## Ausblick

Die Simulationen wurden ausschließlich für Stickstoff durchgeführt. Eine Einbeziehung vom Sauerstoff, und folglich der Elektronenanlagerung im Gas, könnte eine interessante Erweiterung der bestehenden Monte-Carlo und Fluidmodelle darstellen. Eine experimentelle Untersuchung der dynamischen Durchschlagsspannung und vor allem der Entladungsströme im dynamischen Fall könnten weiterhin die Abweichung von der Löb-Theorie erklären. Des Weiteren stellt eine physikalische Untersuchung des zweiten Townsend'schen Koeffizienten und dessen Einbeziehen in einem kombinierten räumlich getrennten Monte-Carlo-Fluid Modell eine sinnvolle Erweiterung der bestehenden Modelle dar.

Als Abschluss dieser Arbeit erfolgt eine synergetische Betrachtung des elektrischen Durchschlags, die den Schwerpunkt für weitere Arbeiten darstellen könnte.

Die Synergie (die Lehre des Zusammenwirkens) als neuer Wissenschaftszweig beschreibt, in welchem Maße mikroskopische Vorgänge makroskopische Erscheinungen beeinflussen [Ach99, Hak92, Hak97, Hak90]. Synergetische Effekte treten in Erscheinung, sobald ein Phasenübergang vollzogen wird, wobei die neue Phase makroskopisch völlig neue Eigenschaften besitzt. Das beste Beispiel, wie das Zusammenwirken von Untersystemen einen Phasenübergang herbeiführt, stellt der Laser dar. Mit Erhöhung des Stroms versklaven langlebige Prozesse Kurzlebige. Es wird dabei von Ordnern gesprochen. Ab einer Verstärkungsschwelle gewinnen die Induktionsordner die Oberhand über die Ordner der spontanen Emission. Ein Gasdurchschlag erfolgt ebenso nach Zusammenwirken von mikroskopischen Untersystemen. Im folgenden sind die synergetischen Eckpunkte des Gasdurchschlags aufgelistet:

- Das System befindet sich außerhalb des thermodynamischen Gleichgewichts: Der Spannungsgenerator liefert die nötige Energie stets nach.
- Ein Phasenübergang wird vollzogen: vom nicht leitenden Gaszustand zum hoch leitenden Plasma.

- Der Phasenübergang erfolgt bei der Überschreitung eines Synergieparameters: elektrische Feldstärke.
- Kurz vorm Durchschlag finden Fluktuationserscheinungen statt. Elektronenlawinen entstehen, führen aber nicht zwangsläufig zum Durchschlag.
- Kleine Elektronenlawinen werden zum Verschwinden verurteilt, wohingegen größere, deren eigenes Feld das Laplace Feld kompensiert, begünstigen ein Überleben der Ionisationskette. Die Entladung organisiert sich selbst, indem sie sich verselbständigt.
- Beim Gasdurchschlag wird ebenso von Verstärkung im Zusammenhang mit der Entstehung der Elektronenlawine gesprochen.

# Anhang A

## Anhang zur Feldemission

### A.1 Ziele der Untersuchung

Im Rahmen der Untersuchungen auf dem Gebiet der Zündung wurde eine starke Korrelation zwischen dem Zündbedarf und dem Material der Innenelektrode beobachtet. Die Zündung wird nach der üblichen Vorstellung von wenigen Elektronen eingeleitet, die sich durch sukzessive Stöße mit den Luftteilchen lawinenartig vermehren, bis sie einen leitfähigen Kanal bilden. Die o.g. Korrelation legte die Vermutung nahe, dass die Feldemission für die Bereitstellung der Startelektronen verantwortlich ist. Kurz vor der Zündung herrschen sehr hohe Feldstärken (10..20kV/mm), die aufgrund der Unebenheit der Kathode (Mikrostrukturen) um den Faktor 2 bis 3 lokal verstärkt werden. Des Weiteren spielt die Austrittsarbeit des Metalls eine maßgebliche Rolle beim Tunneleffekt. Die Tunnelwahrscheinlichkeit lautet [Che93]:

$$T \propto \exp\left(\frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} \frac{\phi^{3/2}}{E}\right), \quad (\text{A.1})$$

wobei  $m$  für die Elektronenmasse,  $e$  für die Elementarladung,  $\hbar$  für das Wirkungsquantum,  $E$  für das herrschende Feld in unmittelbarer Nähe zur Kathode und  $\phi$  für die Austrittsarbeit stehen. Aus dem obigen Ausdruck ist zu entnehmen, dass die Herabsetzung der Austrittsarbeit bei gleicher Tunnelwahrscheinlichkeit eine effiziente Reduktion der Feldstärke bzw. des Zündbedarfs bedeutet.

Ziel der folgenden Untersuchung war folglich:

- Theoretische Abschätzung der Austrittsarbeit von Platinoberflächen
- Veränderung der Austrittsarbeit in Abhängigkeit von der Feldstärke
- Einfluss von Fremdatomen-Adsorbaten

Im folgenden werden zuerst die Rechenmethoden und anschließend die erstellten Strukturmodelle kurz vorgestellt. Die Ergebnisse werden dann diskutiert und im Anschluss wird die Gesamtarbeit zusammengefasst.

## A.2 Rechenmethoden

Aus heutiger Sicht ist die Quantenmechanik die Grundlage für die quantitative Beschreibung der Wechselwirkung von Elektronen und Atomkernen und somit die Behandlung von Festkörpern auf mikroskopischer Ebene. Das quantenmechanische Vielteilchensystem eines Festkörpers kann nicht exakt gelöst werden. Deswegen ist es notwendig, Modellannahmen zu entwickeln und Näherungen durchzuführen. Ein für theoretische Festkörperuntersuchungen geeignetes und sehr erfolgreiches Verfahren ist die lokale Dichtefunktionaltheorie. Zu näheren Angaben sei auf [Mey98] verwiesen.

Der vollständige Hamilton-Operator  $\hat{H}$  für ein System aus  $N_K$  Atomkernen und  $N_e$  Elektronen lautet:

$$\hat{H} = \hat{T}_K + \hat{T}_e + \hat{V}_{K-K} + \hat{V}_{K-e} + \hat{V}_{e-e} \quad (\text{A.2})$$

$\hat{T}_K$  und  $\hat{T}_e$  bezeichnen die Operatoren der kinetischen Energie der Atomkerne und der Elektronen. Die übrigen Operatoren beschreiben die Coulomb-Wechselwirkung der Teilchen untereinander. Eine exakte Behandlung eines gegebenen Vielteilchensystems erfordert die Lösung der allgemeinen Vielteilchen-Schrödingergleichung (SG):

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (\text{A.3})$$

wobei  $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_{N_e}, \mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_{N_K})$ .  $\mathbf{r}_i$  und  $\mathbf{R}_j$  bezeichnen dabei die Ortskoordinaten des  $i$ -ten Elektrones und  $j$ -ten Ions.

Aufgrund der stark unterschiedlichen Massen der Teilchen lassen sich nach Born und Oppenheimer die Kern- und Elektronensysteme entkoppeln. Danach können die Ortskoordinaten der Atomkerne in die Elektronen-SG als Parameter eingesetzt werden. Durch deren Variation kann die günstigste Kernkonfiguration mit minimaler Gesamtenergie ermittelt werden. Diese statische Relaxation läßt sich durch Kräfteberechnung beschleunigen.

Zur Berechnung der Gesamtenergie wird der Satz von Hohenberg und Kohn herangezogen, wonach gilt:

$$E_0^{el}(\mathbf{R}_\alpha) = E^{el}[n_0] \quad (\text{A.4})$$

Hierbei steht  $\mathbf{R}_\alpha$  für die Konfiguration der Atomkerne. In Worten ausgedrückt heißt dies, dass die Grundzustandsenergie  $E_0^{el}$  durch die Grundzustandsdichte  $n_0$  der Elektronen eindeutig festgelegt wird.

Zur Bestimmung der Grundzustandesdichte und der Grundzustandsenergie der Elektronen werden die folgenden Gleichungen iterativ bis zur Selbstkonsistenz gelöst:

$$\begin{aligned} \left\{ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta + v_{eff}(\mathbf{r}) \right\} \varphi_i(r) &= \varepsilon_i \varphi_i(r) \\ v_{eff}(\mathbf{r}) &= v_{ext}(\mathbf{r}) + v_H[n] + v_{xc}[n] \\ n(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^{N_e} |\varphi_i(r)|^2 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

wobei das externe Potential  $v_{ext}$  für den Einfluss der Ionen auf die Elektronen, das Hartree Potential  $v_H$  für die elektrostatische Wechselwirkung der Elektronen untereinander und  $v_{xc}$  für die Austausch-Korrelationswechselwirkung stehen. Sie fasst alle nicht durch die klassische Elektrostatik berücksichtigten quantenmechanische Vielteicheneffekte zusammen. Die obige Selbstkonsistenzschleife sieht dann folgendermaßen aus:

$$n^0 \rightarrow v_{eff}^1 \rightarrow \varphi_i^1 \rightarrow n^1 \rightarrow v_{eff}^2 \dots \quad (\text{A.6})$$

Bei der lokalen Dichtenäherung (LDA), wird das Austausch- und Korrelationsfunktional  $E_{xc}[n]$  durch einen lokalen Ansatz angenähert, was heißt, dass das entsprechende Potential am Ort  $\mathbf{r}$  nur von der Elektronendichte am Ort  $\mathbf{r}$  abhängt. Das Funktional kann für ein homogenes Elektronengas mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Verfahren mit hoher Genauigkeit berechnet werden und für ein inhomogenes Elektronengas in parametrisierter Form dargestellt werden.

Für die Berechnung eines kristallinen Festkörpers werden des weiteren das Bloch'sche Theorem herangezogen, das die Periodizität des Kristalls berücksichtigt. Die Berechnungen werden deshalb innerhalb der 1. Brillouin-Zone durchgeführt. Außerdem lassen sich mittels der Kristall-Raumgruppen die Symmetrieeigenschaften innerhalb einer solchen Zone ausnutzen, um den Rechenaufwand zu verringern.

Eine weitere sinnvolle Näherung besteht darin, die Rumpfelektronen als eingefroren zu betrachten. Es werden Pseudopotentiale gebildet, die den Einfluss der Atomkerne und der Rumpfelektronen auf die Valenzelektronen als Einheit wiedergeben.

Um die Valenzelektronen zu beschreiben, verwendet das Rechenverfahren am MPI-MF [Mey98] nicht nur ebene Wellen sondern auch noch stark lokalisierte Funktionen (mixed basis). Das ist sehr vorteilhaft, da die p- Valenzwellenfunktionen der Hauptgruppenelemente B, C, N und O bzw. d-Valenzwellenfunktionen des Übergangsmetalls Pt relativ stark am Kernort lokalisiert sind.

### A.3 Modellbeschreibung

Eine Oberfläche, derer Orientierung mit Hilfe der Miller'schen Indizes beschrieben wird, reduziert die Symmetrie eines Kristalls in einer Richtung. Das Rechenverfahren am MPI-MF behandelt aber nur periodische Systeme. Aus dem Grund wird Die Oberfläche modelliert, indem periodisch fortgesetzte Superzellen aus Kristallschichten (siehe Abbildung A.1) gebildet werden. Das Vakuum zwischen den Schichten ist ebenfalls im Superzellenvolumen enthalten. Diese Schichtanordnung gilt ebenso für Adsorbate, die sich eventuell auf der Oberfläche niederlassen. So verliert das Bloch'sche Theorem nicht seine Gültigkeit. Diese Erweiterung bringt den Nachteil mit sich, dass sich die einzelnen Kristallfilme bei zu geringer Vakuumschichtdicke gegenseitig stören könnten. Es soll ein Kompromiss zwischen minimaler gegenseitigen Störung der Filme und notwendigem Rechenaufwand gefunden werden.

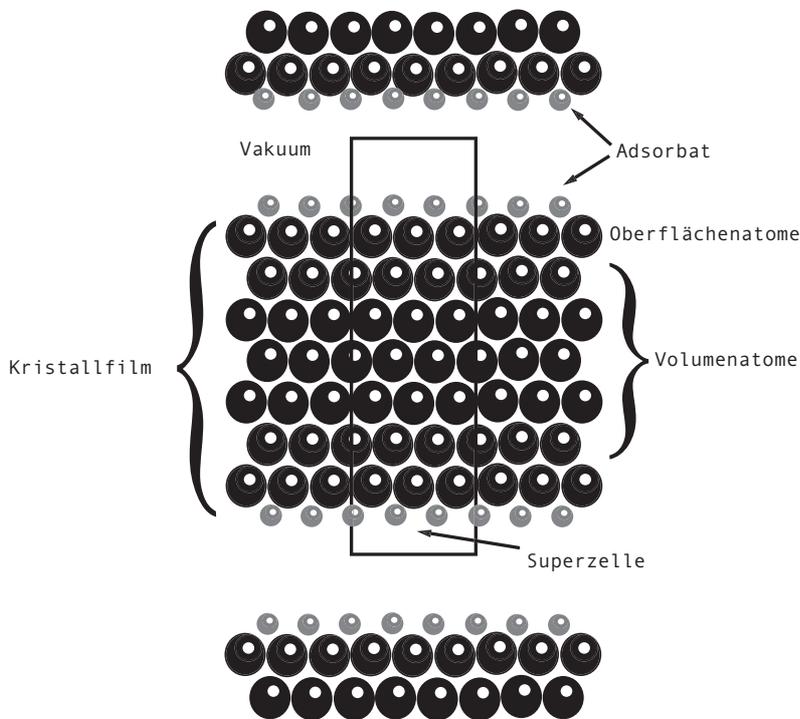


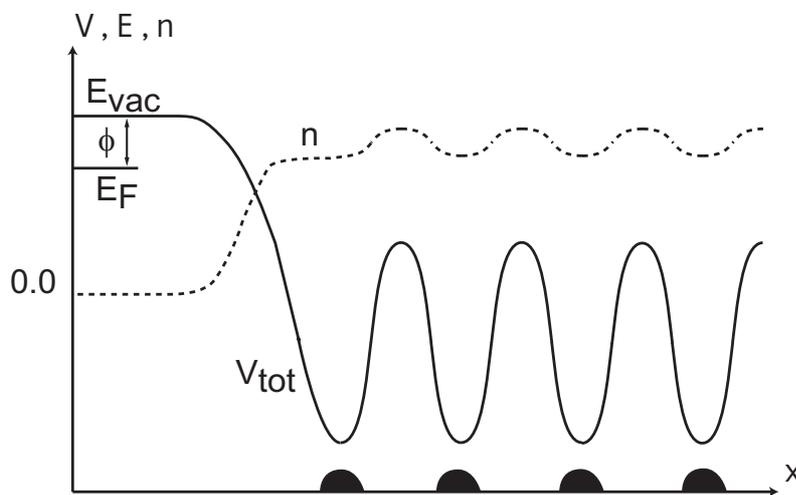
Abbildung A.1: Schematische Darstellung einer Superzelle

Die Tatsache, dass die Oberflächenatome die Periodizität in einer Richtung nicht zu spüren bekommen, bewegt sie dazu, ihre elektronische Konfiguration zu ändern. Ein Kristallfilm muss deswegen so groß sein, dass die Kristallatome in der Mitte des Films und an der Oberfläche richtig wiedergegeben werden. Der Rechenaufwand ist proportional zu der dritten Potenz der Anzahl der Teilchen in der Superzelle.

Die Energie und die Elektronendichte werden durch das Selbstkonsistenzverfahren berechnet und daraus die Kräfte auf die Atomkerne ermittelt. Die Kernorte werden in Richtung der Kräfte solange bewegt, bis die Kräfte eine Schranke unterschreiten. Der Kristall gilt dann als relaxiert und seine Gesamtenergie ist minimal.

Die Vakuumenergie entspricht dem Wert des elektrostatischen Potential in der Mitte des Vakuumbereiches. Die Fermienergie wird aus den Besetzungszahlen der Energiezustände ermittelt. Die Differenz der beiden Werte ergibt die Austrittsarbeit (Siehe Abbildung A.2).

Die Addition der Adsorbate ist mit dem Nachteil verbunden, dass diese auf-



**Abbildung A.2:** Schematischer Verlauf des Potentials und der Valenzladungsdichte an der Oberfläche. Die schwarzen Kugeln stehen für die Ionenrümpfe (vgl. [Wür97]).

grund der Periodizität nicht einzeln lokal, sondern als flächenhafte Monolage modelliert werden muss.

Das Einbeziehen der externen Feldstärke erfolgt mittels eines zusätzlichen elektrostatischen Potentials, das in der SG mitberücksichtigt wird [Ben98].

Das Elektronengas nahe der Oberfläche reagiert mit einer Zusatzabschirmung auf dieses externe Potential, was eine "spürbare" Senkung der Austrittsarbeit entgegenwirkt.

## A.4 Ergebnisse

### Reine Pt-Oberfläche:

Dazu wurden die (001) und die (111) Oberflächen simuliert. Die zwei Oberflächen unterscheiden sich in der Anordnung der Atome. Der Vakuumbereich wurde solange ausgedehnt, bis keine spürbare Änderung der Austrittsarbeit zu vermerken war.

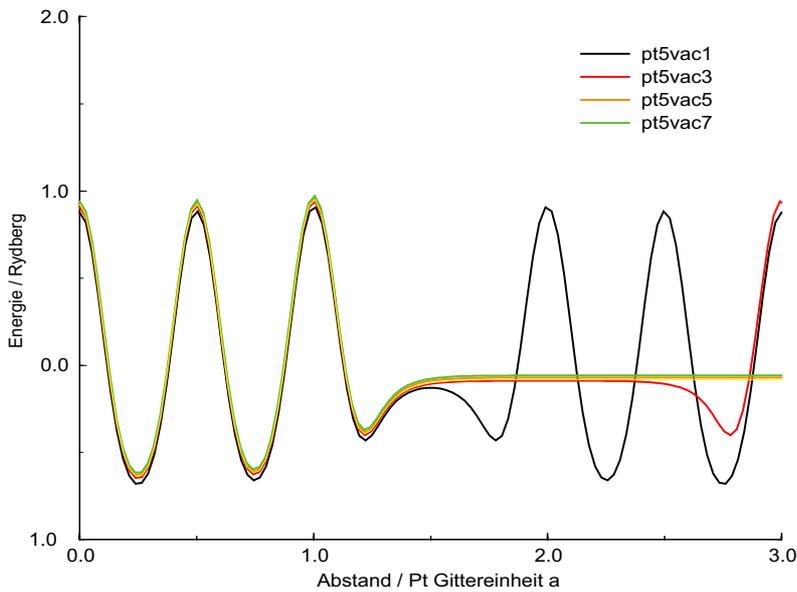


Abbildung A.3: Einfluss der Vakuumdicke auf den Potentialverlauf

Oberfläche	$\phi$ in eV	Oberflächenenergiedichte in Ryd/Bohr <sup>2</sup>
(001)	5.96	$2.691 \cdot 10^{-3}$
(111)	5.97	$2.266 \cdot 10^{-3}$

Aus der obigen Tabelle geht hervor, dass die (111)-Oberfläche energetisch günstiger ist. In der Literatur ([Fom75], [Van91], [Wac95], [Skr91],

[Skr92],[Met91]) liegen die experimentellen Werte im Bereich 5.32 bis 6.22 eV. Die Simulationen ergeben Werte, die tendenziell höher sind. Die berechneten Werte sprechen für die Zuverlässigkeit der Berechnungen am MPI-MF.

#### Einfluss der externen Feldstärke:

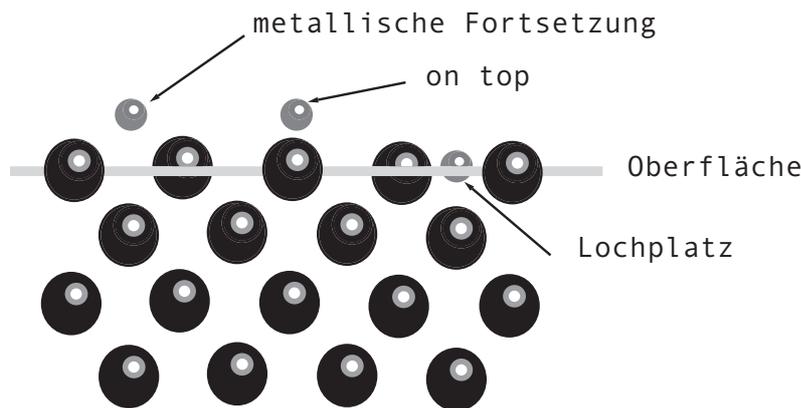
In einem weiteren Schritt wurde eine Spannung zwischen den Kristallfilmen angelegt, die so dimensioniert wurde, dass sie der Feldstärke in unmittelbarer Nähe der Kathode entspricht. Die Berechnung wurde stellvertretend für eine (001) Oberfläche durchgeführt. Die erste Feldstärke ist eine typische Zündfeldstärke.

Feldstärke in kV/mm	$\Delta\phi$ in eV
14	0.022
140	0.069

Die Abhängigkeit der Austrittsarbeit von der Feldstärke ist folglich nicht signifikant. Die Feldstärke 140 kV/mm, die nur bei elektrischen Durchschlägen im  $\mu\text{m}$ -Bereich vorkommt, stellt eine physikalische Obergrenze dar.

#### Adsorbate:

Der dritte Teil der Berechnungen stellt die Untersuchung von Relaxations-



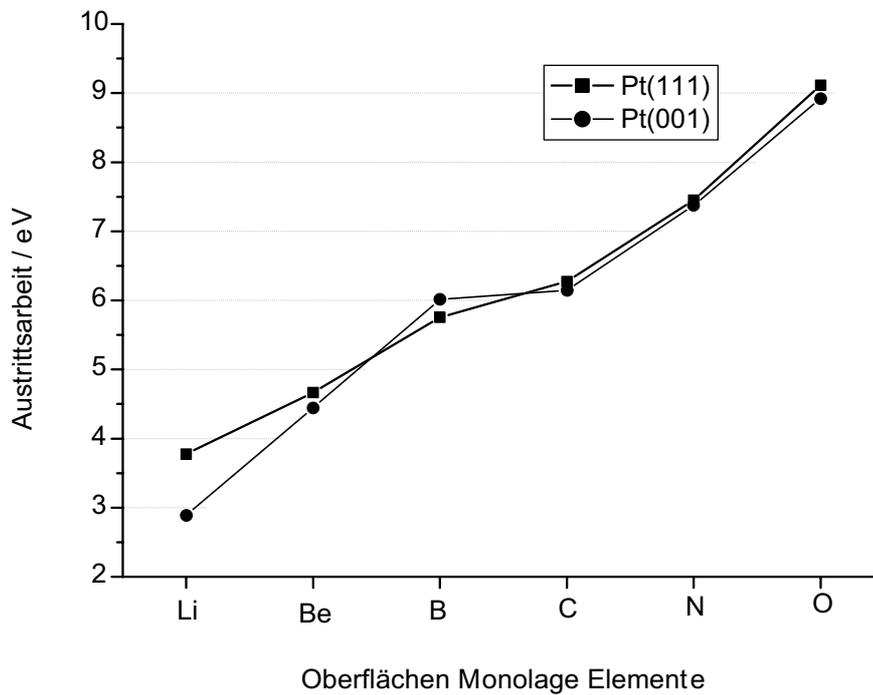
**Abbildung A.4:** Adsorbationsmöglichkeiten, reine metallische Fortsetzung, Lochplatz, on top.

effekten bei Adsorbaten an der Oberfläche dar. Stellvertretend wurde das Element *C* ausgewählt. Zu diesem Zweck wurde die (001)-Oberfläche mit den folgenden Adsorbationsmöglichkeiten untersucht: Eine reine Fortsetzung der Metallatomposition, Adsorbat im Loch (hollow), Adsorbat direkt auf

dem Oberflächenatom (on top)(siehe Abbildung A.4).

Adsorbatstelle	$\phi$ in eV	Adsorptionsenergie $\sigma$ in Ryd	$\sigma$ in eV
bulk	6.24	-0.5099	-6.9346
hollow	6.29	-0.5077	-6.9047
on top	6.41	-0.4627	-6.2927

Aus der Rechnung geht hervor, dass die Adsorption in Fortsetzung der Metallatompositionen energetisch günstiger ist als die zwei anderen Konfigurationen. Dies stimmt mit experimentellen Beobachtungen überein. In der



**Abbildung A.5:** Austrittsarbeit in Abhängigkeit der adsorbierten Monolageelemente

Abbildung (A.5) ist der Einfluss der Adsorbate Li, Be, B, C, N und O auf die Austrittsarbeit zu sehen.

---

## A.5 Zusammenfassung

Das Berechnungsprogramm am MPI-MF [Mey98] ist in der Lage, Oberflächeneffekte sehr gut nachzubilden. Die Austrittsarbeit einer reinen Pt-Oberfläche wurde hinreichend genau abgeschätzt. Der Einfluss externer Feldstärken wurde untersucht und als nicht signifikant für die Zündung festgestellt. Weiterhin wurde der Einfluss von Adsorbat-Monolagen von Elementen der zweiten Reihe im Periodensystem untersucht. Eine eventuelle Beimengung von Bor scheint eine Reduzierung der Austrittsarbeit mit sich zu bringen, der Beitrag bleibt aber minimal. Adsorbate aus Li und Be haben deutlich stärkere Effekte (vgl. [Man98]), sind jedoch für die Zündkerze ohne praktische Relevanz.

# Anhang B

## Anhang zur Netzgenerierung

### B.1 Triangulation

Der Triangulation der Streifen liegt der folgende Satz zugrunde:

Satz: Die Menge der Knoten  $A, B, C$  und  $D$  bilden ein Trapez. Die Delaunay Triangulation entspricht der Bildung der kürzesten Diagonale.

Beweis: Das Trapez sei nicht gleichschenkelig und  $AC$  sei die kürzere Diagonale.  $\alpha = \langle DAC \rangle$ ,  $\beta = \langle DBC \rangle$ ,  $\gamma = \langle ADC \rangle$  und  $\delta = \langle BCD \rangle$ ,  $d1 = AC$ ,  $d2 = BD$ . So  $d1 < d2$  und  $\delta < \gamma$ .

zu zeigen:  $\alpha < \beta$ .

$$\frac{d}{\sin \alpha} = \frac{d1}{\sin \delta} \text{ res. } \frac{d}{\sin \beta} = \frac{d2}{\sin \gamma} \implies \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{d2 \sin \delta}{d1 \sin \gamma} > 1 \implies$$

$$\implies \sin \alpha > \sin \beta \implies \alpha > \beta$$

Dies geht aus der Tatsache hervor, dass  $\alpha$  und  $\beta$  spitze Winkeln sind,  $\gamma$  und  $\delta$  dagegen stumpfen Winkeln. Wenn  $\alpha$  und  $\beta$  stumpfe Winkeln sind, so ist der Satz trivial.

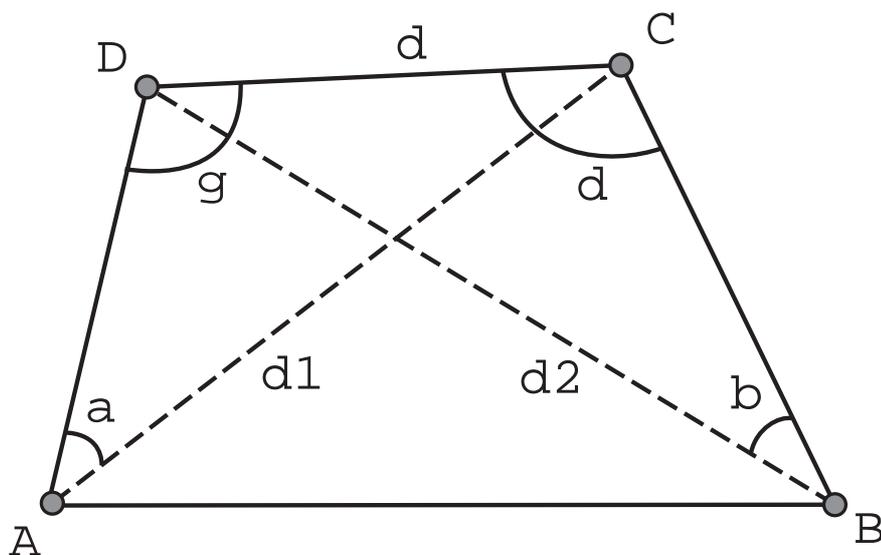


Abbildung B.1: Illustration des Satzes

## B.2 Glättung

Die Aufgabe der Glättung besteht darin, den folgenden Term zu minimieren:

$S = |KR_1| + |KR_2| + |KN_1| + |KN_2|$ , (Siehe B.2).

Da  $|KR_1| + |KR_2| = |R_1R_2| = \text{const}$ , reduziert sich die Aufgabe zu der Minimierung des folgenden Ausdrucks:

$$S' = |KN_1| + |KN_2| \quad (\text{B.1})$$

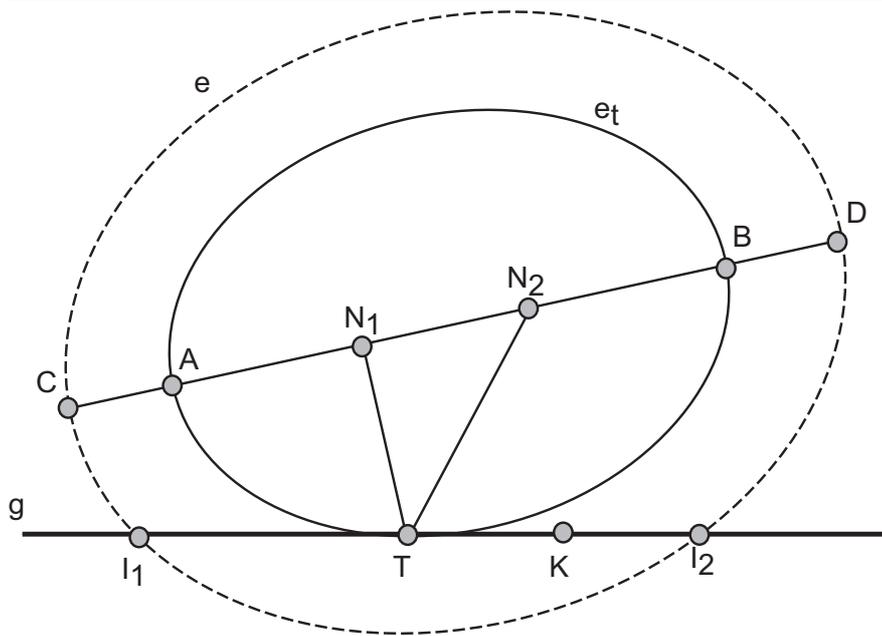
Es wird die Ellipse betrachtet, mit den zwei Brennpunkten  $N_1$  und  $N_2$ , die die Gerade  $g$  in  $T$  berührt. Eine wichtige Eigenschaft der Ellipse lautet:

$$|TN_1| + |TN_2| = 2 \cdot a_t, \quad (\text{B.2})$$

hierbei ist  $a_t$  die Länge der Halbachse  $E_T$ . Wenn die Ellipse vergrößert wird, entsteht eine Ellipsenschar mit zwei Schnittpunkten der folgenden Eigenschaften:

$$|I_i N_1| + |I_i N_2| = 2a_t, \quad i = 1, 2. \quad (\text{B.3})$$

Wird die Ellipse infinitesimal vergrößert, beschreiben  $I_i$  die Gerade  $g$ . Das Minimum der Parabel befindet sich dann genau in  $T$ .



**Abbildung B.2:** zum Beweis der Existenz einer einzigen Lösung in der Gleichung B.1

Eine weitere Eigenschaft der Ellipse ist, dass die Senkrechte auf der Tangente in  $T$  den Winkel  $\angle N_1TN_2$  in zwei gleich große Winkeln teilt. (Siehe B.3)

Da

$$\frac{b}{c} = \frac{a}{d} \quad (\text{B.4})$$

und außerdem

$$b + a = \text{const} \quad (\text{B.5})$$

folgt

$$a = \text{const} \cdot \frac{d}{c + d}, \quad (\text{B.6})$$

was sich mit vertretbarem Aufwand implementieren läßt.

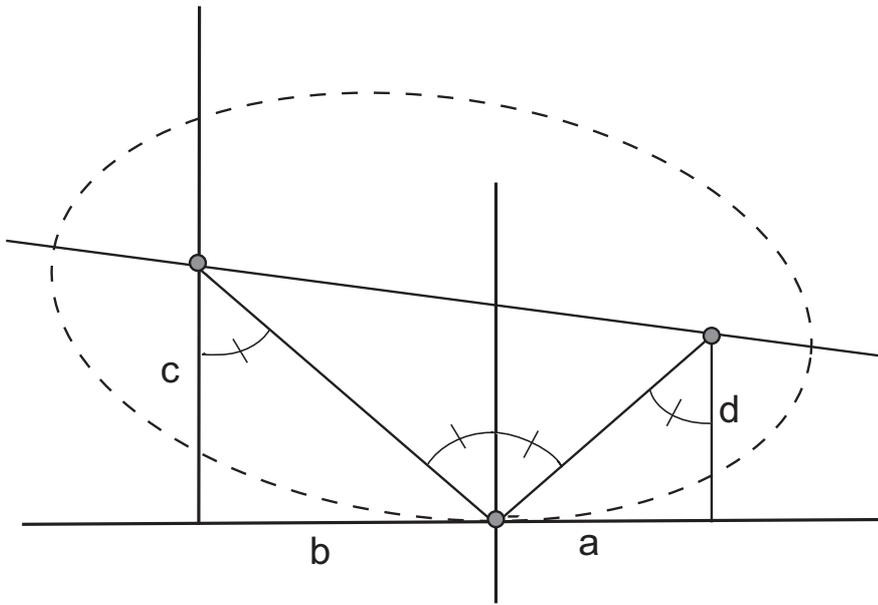


Abbildung B.3: Ellipseeigenschaft

# Anhang C

## Anhang zu FEM und FVM

### C.1 Mathematische Grundlagen

Definition: Bilinearform

Sei  $V$  ein Vektorraum,  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist eine Bilinearform  $\iff$   
 $\langle u, v_1 + v_2 \rangle = \langle u, v_1 \rangle + \langle u, v_2 \rangle$  für alle  $u, v_1, v_2 \in V$  und  
 $\langle u, \alpha v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle$  für alle  $u, v \in V, \alpha \in \mathbb{R}$

Definition: Skalarprodukt

Sei  $V$  ein Vektorraum,  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist ein Skalarprodukt  $\iff$

- $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist eine Bilinearform,
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist symmetrisch, d.h.  $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$  für alle  $u, v \in V$ ,
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist positiv, d.h.  $\langle u, u \rangle \geq 0$  für alle  $u \in V$  und
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist definit, d.h.  $\langle u, u \rangle = 0 \iff u = 0$  für alle  $u \in V$ .

Das Skalarprodukt wird mit dem folgenden Ausdruck bezeichnet  $\langle \cdot, \cdot \rangle_0$ .

# Literaturverzeichnis

- [Ach99] D. Acheson. *Vom Calculus zum Chaos*. Oldenburg München-Wien (1999).
- [Asc89] T. Aschwanden. *Die Ermittlung physikalischer Entladungparameter in Isolierten Gasen und Isoliertgasgemischen mit einer verbesserten Swarm-Methode*. Dissertation ETH Zürich (7931) (1989).
- [Bad72] S. Badaloni und I. Gallimberti. Basic data of air Discharges. *UPee – 72/05* (1972).
- [Ben98] L. Bengtson. Dipole correction for surface supercell calculations. *Physical Review B* **59** [19], 12301 (1998).
- [Ber92] M. Bern und D. Eppstein. Mesh generation and optimal triangulation in Computing in Euclidean Geometry. *Eds World Scientific* (1992).
- [Bey86] M. Beyer, W. Boeck, K. Möller und W. Zaengl. *Hochspannungstechnik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1986).
- [Bir91] C.K. Birdsall. Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations, plus Monte Carlo Collisions with Neutral Atoms, PIC-MCC. *IEEE Transactions On Plasma Science* **19** [2] (1991).
- [Boy55] W.S. Boyle und P. Kisiluk. Departure from Paschen's Law of Breakdown of Gases. *The Physical Review* **97** [2], 255 – 259 (1955).
- [Bro91] I.N. Bronstein und K.A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart Leipzig 25 Auflage (1991).
- [Cav74] J. C. Cavendish. Automatic triangulation of arbitrary planar domains for the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **8**, 679 – 696 (1974).

- [Che89] L. P. Chew. Constrained Delaunay triangulations. *Algorithmica* **4** [1], 97 – 108 (1989).
- [Che93] C. Julian Chen. *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*. Oxford University Press (1993).
- [Cli88] D. Clive und A. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1988).
- [Dak71] T.W. Dakin, G. Luxa et al. Breakdown of Gases in uniform Fields - Paschen curves for Nitrogen, Air and Sulfur Hexafluoride. *Electra* **32**, 61 – 82 (1971).
- [Dau01] M. Dauenhauer. Lösung der Transportgleichung für die Simulation des Zündvorgangs. Diplomarbeit Universität Stuttgart (2001).
- [Fom75] V.S. Fomenko und I.A. Podchernyaeva. *Emission and Adsorption Properties of Materials*. Atomzdat, Moscow (1975).
- [Fre91] W. H. Frey und D. A. Field. Mesh relaxation: A new technique for improving triangulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **31**, 1121–1133 (1991).
- [Geo99] G.E. Georghiou, R. Morrow und A.C. Metaxas. An improved Finite-Element Flux-corrected Transport Algorithm. *Journal of computational physics* **148**, 605 – 620 (1999).
- [Ger59] L. H. Germer. Electrical Breakdown between Close Electrodes in Air. *Journal of Applied Physics* **30** [1], 46 – 51 (1959).
- [Gür92] H. N. Gürsoy und N. M. Patrikalakis. An automatic Coarse and Fine Surface Mesh Generation Scheme Based on Medial Axis Transform. *Engineering with Computers* **8**, 121 – 137 (1992).
- [Gro94] Ch. Großmann und H.-G. Roos. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart (1994).
- [Hac91] W. Hackbusch. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart (1991).
- [Hak90] H. Haken. *Synergetik : eine Einführung, Nichtgleichgewichts-Phasenübergänge und Selbstorganisation in Physik, Chemie und Biologie*. Springer Heidelberg (1990).
- [Hak92] H. Haken und M. Haken-Krell. *Erfolgsgeheimnisse der Wahrnehmung*. Dt. Verl.-Anst. Stuttgart (1992).

- [Hak97] H. Haken und M. Haken-Krell. *Gehirn und Verhalten*. Dt. Verl.-Anst. Stuttgart (1997).
- [Hal00] A. Halmosi. Eine vollautomatisierte Netzgenerierung für die Finite Elemente Methode. Diplomarbeit Universität Stuttgart (2000).
- [Har00] P. Hartherz, K. Ben Yahia, C. Subert, L. Müller, R. Pfendtner, W. Hiller und W. Pfeiffer. Breakdown voltage in micrometer gaps – Deviations from Paschen’s law. In S.J. MacGregor, Hrsg., *Proceedings: XIII International Conference on Gas Discharges and their Applications* Seiten 493 – 496 Glasgow, UK 03. – 08. September 2000.
- [Hir91] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. John Wiley and Sons Chichester New York Brisbane Toronto Singapore (1991).
- [Höl98] K. Höllig. *Grundlagen der Numerik*. MathText, Zavelstein (1998).
- [Hon65] K. Honda. Streamer Breakdown Criterion For A Uniform Air Gap. *Tokyo Electrical Engineering Collge* **85**, 43 – 50 (1965).
- [Hug79] T.J. Hughes und A. Brooks. A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. *Division of Engineering and applied Science, California institut of technology, Pasadena, California* (1979).
- [Hug88] T.J. Hughes. A simple scheme for developing upwind finite Elements. *Mathematical modelling and numerical analysis* **22** [4], 625 – 653 (1988).
- [IEC60625] Programmable measuring instruments – Interface system (byte serial, bit parallel) Part 1 und 2. IEC Standard Publication 60625. (1993).
- [Küc96] A. Küchler. *Hochspannungstechnik*. VDI-Verlag (1996).
- [Kna00] P. Knabner und L. Angermann. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2000).
- [Löb05] L. Löb und G. Jäger. *Kinetic theory of gases*. Winkelmanns Handbuch der Physik Leipzig (1905).

- [Lee86] D. T. Lee und A. K. Lin. Generalized Delaunay triangulation for planar graphs. *Discrete and Computational Geometry* **1**, 201 – 217 (1986).
- [Man98] W. Mannstadt und A.J. Freeman. LDA theory of the coverage dependence of the local density of states: Li adsorbed on Ru(001). *Physical Review B* **20** [57], 13289 (1998).
- [Mee40] J.M. Meek. A theory of spark discharge. *Physical Review* **57**, 722 – 728 (1940).
- [Met91] M. Methfessel, D. Hennig und M. Scheffler. Trends of the surface relaxations, surface energies and work functions of 4d transition metals. *Physical Review B* **46** [8], 4816 (1991).
- [Mey98] B. Meyer. *Entwicklung eines neuen ab-initio "mixed-basis"-Pseudopotentialprogrammes und Untersuchung atomarer Fehlstellen in Molybdän und intermetallischen Verbindungen*. Dissertation Universität Stuttgart (1998).
- [Möl97] H. Möller. *Algorithmische Lineare Algebra*. Vieweg (1997).
- [Mor88] K.W. Morton, A. Priestley und E. Süli. Stability of the Lagrange-Galerkin Method with non-exact integration. *Mathematical modelling and numerical analysis* **22** [4], 625 – 653 (1988).
- [Neu97] D. Neundorff, R. Pfendtner und H.P. Popp. *Elektrophysik*. Springer (1997).
- [Nol93] B. Noll. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag Heidelberg (1993).
- [Oku97] H. Okubo, S. Yuasa, K. Ota, N. Hayakawa und M. Hikita. Discharge Characteristics under Non-uniform Electric Field in He, Ar and Air at Low Pressures. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* **4** [4], 450 – 455 (1997).
- [Opp74] G. Oppermann. *Über die Gültigkeit des Paschen-Gesetzes für Schwefelhexafluorid bei Gleich-, Wechsel- und Stoss-Spannungen*. Dissertation Technische Universität Berlin (D 83) (1974).
- [Pas89] F. Paschen. Ueber die zum Funkenübergang in Luft, Wasserstoff und Kohlensäure bei verschiedenen Drucken erforderliche Potentialdifferenz. *Annalen der Physik* **37**, 69 – 96 (1889).

- [Pfe99] W. Pfeiffer, D. Schön und L.Z. Tong. Simulation of predischarge processes in SF<sub>6</sub>/N<sub>2</sub> mixtures stressed by very fast transient voltages. *IEEE Conf. on electrical insulation and dielectric phenomena* **1**, 391 – 394 (1999).
- [Pre88] F. P. Preparata und M. I. Shamos. *Computational Geometry*. Springer-Verlag, 2. Auflage (1988).
- [Pro99] A. Proykova. How to improve a random number generator. *Computer Physics Communications* **124** (1999).
- [Rad01] M. K. Radovic und C. A. Maluckov. Statistical analysis of the dynamic voltage electrical breakdown in nitrogen. *IEEE transactions on plasma science* **29** [5], 832 – 836 (2001).
- [Rae64] H. Raether. *Electron Avalanches and Breakdown in Gases*. Butterworth & Co. Ltd. London (1964).
- [Ras99] M. Z. Raspopovic, S. Sakadzic, Svetlan A. Bzenic und Z. LJ. Petrovic. Benchmark Calculations for Monte Carlo Simulations of Electron transport. *IEEE Transactions on plasma science* **27** [5] (1999).
- [Ric86] W. Richter. *Numerische Lösung partieller Differentialgleichungen mit der Methode der Finiten Elemente*. Vieweg & Sohn (1986).
- [Sal88] M. Abdel Salam und E. K. Stanek. On the Calculation of Breakdown Voltages for Uniform Electric Fields in Compressed Air and SF<sub>6</sub>. *ieecia* **24** [6], 1025 – 1030 (1988).
- [Sch23] W.O. Schumann. Über das Minimum der Durchbruchfeldstärke bei Kugelelektroden. *Archiv der Elektrotechnik* **12**, 593 ff (1923).
- [Sch93] A. Schwab. *Begriffswelt der Feldtheorie*. Springer-Verlag (1993).
- [Sch97a] Dr. B. Schaub und A. Meroth. *Numerische Berechnung von Potentialfeldern*. ABB Heidelberg, IEH Karlsruhe (1997).
- [Sch97b] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner Stuttgart (1997).
- [Ser99] V. Serikov, S. Kawamoto und Kenichi Nanbu. Particle-in-Cell plus direct Simulation Monte Carlo (PIC-DSMC) Approach for self-consistent Plasma-Gas simulations. *IEEE Transactions on plasma science* **25** [5] (1999).

- [Skr91] H.L. Skriver und N.M. Rosengaard. Ab initio work function of elemental metals. *Physical Review B* **45** [16], 9410 (1991).
- [Skr92] H.L. Skriver und N.M. Rosengaard. Surface energy and work function of elemental metals. *Physical Review B* **46** [11], 7157 (1992).
- [Smi70] G. D. Smith. *Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen*. Vieweg Braunschweig (1970).
- [Sri92] V. Srinivasan, L. R. Nackman, J. Tang und S. Meshkat. Automatic Mesh Generation Using the Symmetric Axis Transformation of Polygonal Domains. *IBM Research Division, IEEE* **80** [9], 1485 – 1501 (1992).
- [Ste89] P. Steinle und R. Morrow. An Implicit Flux-Corrected Transport Algorithm. *Journal of computational physics* **80**, 61 – 71 (1989).
- [Ste98] R. Steinbruch. *Finite Elemente - Einstieg*. Springer-Verlag (1998).
- [Ste99] G. Steinle. Modellierung der Koronaentladung zur Physikalischen Vorbehandlung von Polymeroberflächen. Diplomarbeit Universität Stuttgart (1999).
- [Tit99] S. Titze. Voronoi-Diagramme polygonaler Gebiete. Diplomarbeit Universität Stuttgart (1999).
- [Tow10] J.S. Townsend. *The Theory of Ionization of Gases by Collision*. Constable & Co. Ltd. London (1910).
- [Vah94] V. Vahedi und M. Surenda. A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges. *Computer Physics Communications* **87** (1994).
- [Van91] R. Vanselow und X.Q.D. Li. The work function of kinked areas on clean, thermally rounded Pt and Rh crystallites: its dependence on the structure of terraces and edges. *Surface Science Letters* [264], 200 (1991).
- [Ver94] J.P. Verboncoeur, A.B. Langdom und N.T. Gladd. An objekt-oriented electromagnetic PIC code. *Computer Physics Communications* **87** (1994).
- [Wac95] A. Wachter, K.P. Bohnen und K.M. Ho. Structure and dynamics at the Pt(100)-surface. *Annalen der Physik* **5**, 215 (1995).

- [Wel92] H. Welke. *Modellierung der Entladungsentwicklung in komprimierten Isolierten bei Impulsbeanspruchungen*. Dissertation Technische Hochschule Darmstadt (1992).
- [Win71] G. Wind. Paschen curve for Air. In *Electra* [Dak71] Seiten 64 – 70.
- [Wip97] J. Wipper. Mediale Achsen und Voronoi-Diagramme in der euklidischen Ebene. Diplomarbeit Universität Stuttgart (1997).
- [Wür97] K. Würde. *Ab-initio Studien elektronischer und struktureller Eigenschaften von Metallen, Halbleitern, ihren Oberflächen und Metall-Halbleiter-Adsorbatsystemen*. Dissertation Universität Münster (1997).
- [Yah98] K. Ben Yahia. Experimentelle und theoretische Untersuchungen zu Durchschlagspannungen. Diplomarbeit Universität Karlsruhe (TH) (1998).
- [Yah01a] K. Ben Yahia, A. Halmosi und R. Pfendtner. Automatic Grid Generation using the symmetric axial transformation. *Annual GAMM-Seminar Leipzig on Construction of Grid Generation Algorithms* (2001).
- [Yah01b] K. Ben Yahia, R. Pfendtner und H.P. Popp. Experimental investigations of the currentmultiplication before the electrical breakdown. In *Proceedings: The 9th international symposium on the science and technology of Light Sources* Seiten 117 – 118 Ithaca, NY, USA 12. – 16. August 2001.
- [Zie97] O. C. Zienkiewicz. *The Finite Element Method*. McGraw-Hill Book Company (1997).