
**Der Einfluß der Ionisator-Geometrie auf die
Signalkalibrierung eines Massenspektrometers**
– Eine Monte-Carlo Simulation –

Bachelorarbeit

im
Studiengang
„Bachelor of Science“
im Fach Physik



an der Fakultät für Physik und Astronomie
der Ruhr-Universität Bochum

von
Tobias Krähling

aus
Werne a. d. Lippe

Bochum 2008

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
2.	Quantitative Messungen mittels Massenspektrometrie	2
2.1	Massenspektrometrie	2
2.2	Kopplung zwischen Plasma-Reaktor und Massenspektrometer	3
2.3	Bestimmung der Hintergrunddichte	4
3.	Modell	6
4.	Implementierung	7
4.1	Anforderungen	7
4.2	Strategische Entscheidungen	7
4.3	Architektur	8
4.4	Zufallszahlengeneratoren	10
4.4.1	Acceptance-Rejection Methode	11
4.4.2	Kosinus-Verteilung	11
4.4.3	Maxwell-Boltzmann-Verteilung	12
5.	Simulation	14
5.1	Simulationsaufbau	14
5.2	Simulation mit $T = 300\text{ K}$ und $n = 1$	16
5.3	Veränderung des Exponenten der Kosinus-Verteilung	19
5.4	Veränderungen bei Variation der Plasmatemperatur	22
5.5	Reflektionshäufigkeit	24
5.6	Veränderung der Geometrie	25
6.	Fazit	29
	Anhang	I
A.	Literaturverzeichnis	I
B.	Abkürzungsverzeichnis	II

1. Einleitung

In der Physik der reaktiven Plasmen stellt die Massenspektrometrie eine wichtige Diagnostik dar, die Reaktionskinetik zu bestimmen und die beteiligten Komponenten zu identifizieren. Die äußeren Prozeßparameter für das Plasma, wie das Mischungsverhältnis der beteiligten Gase, der Druck sowie die eingekoppelte Leistung, sind bekannt. Unbekannt sind jedoch zunächst die Komponenten, die im Plasma durch Ionisation, Fragmentation und Rekombination entstehen, sowohl in qualitativer wie auch in quantitativer Sicht – diese, teilweise reaktiven Komponenten, tragen entscheidend zu der Reaktionskinetik bei. Zur Erklärung von Vorgängen in einem reaktiven Plasma, z. B. bei der Oberflächenbehandlung eines Wafers, und der Prozeßüberwachung ist die Massenspektrometrie ein probates Mittel – mit ihr können sowohl qualitative Aussagen über die Zusammensetzung des Plasmas als auch, mit entsprechender Kalibrierung, quantitative Aussagen über die Teilchendichten der einzelnen Spezies getroffen werden (im Folgenden wird der Begriff 'Dichte' synonym für die Teilchendichte verwendet).

Bei der Kopplung eines Plasma-Reaktors mit einem Massenspektrometer (MS) wird ein Molekularstrahl aus dem Plasma extrahiert und dem Massenspektrometersystem zugeführt. Dieser trifft auf einen Ionisator, in dem eine teilweise Ionisierung des Molekularstrahls erfolgt. Die gebildeten Ionen werden anschließend mit einem Massenfilter nach ihrem Masse-zu-Ladungsverhältnis getrennt und detektiert. Für die quantitative Bestimmung wird eine Kalibrierung mit einem Kalibriergas bekannter Dichte durchgeführt, um die Signalstärke am Detektor mit der Dichte im Plasma-Reaktor in Beziehung setzen zu können. Die Hintergrunddichte im Ionisator stellt einen systematischen Fehler bei der Dichtebestimmung dar und kann effektiv mit einem Chopper bestimmt und abgezogen werden.

Messungen von Benedikt et al. (2005a,b) an Ar/C₂H₂-Plasmen zeigten eine Diskrepanz zwischen gemessenen und erwarteten Dichten der inreaktiven C₂H₂-Teilchen, wobei die gemessenen Dichten um einen Faktor zwei höher lagen als die erwarteten. Hierdurch wird die Bestimmung der Teilchendichte von reaktiven Teilchen verfälscht und führt zu Teilchendichten, die kleiner als die im Plasma vorhandene Teilchendichten sind. Die Signalkalibrierung mit inreaktiven Teilchen wie Acetylen führt somit zu einem systematischen Fehler in der Dichtebestimmung von reaktiven Teilchen, der noch nicht berücksichtigt und dessen Ursache ungeklärt ist. Reflektionen von inreaktiven Teilchen im Ionisator könnten für eine Erhöhung der Teilchendichte im Ionisator – und somit zu einem höheren Detektorsignal – verantwortlich sein. Insbesondere durch einen relativ geschlossenen Aufbau eines Ionisators mit geringen offenen Flächen zum umgebenden Vakuumsystem wäre eine hohe Anzahl an Reflektionen und eine hierdurch wesentlich erhöhte Teilchendichte im Ionisator möglich, die bei der Signalkalibrierung als zusätzliche Hintergrunddichte Berücksichtigung finden müßte.

Im Rahmen dieser Arbeit soll eruiert werden, in welcher Weise die Ionisatorgeometrie die Dichteverteilung der inreaktiven C₂H₂-Teilchen innerhalb des Ionisators beeinflusst. Hierfür wurde ein Modell über das Teilchenverhalten innerhalb des Ionisators entwickelt und die Dichteverteilung mittels Monte-Carlo-Methoden simuliert. Der nachfolgende Abschnitt gibt zunächst einen Überblick der Kalibrierungsmethode, bevor anschließend das zugrundegelegte Modell für die Simulation sowie wesentliche Implementierungsdetails diskutiert werden. Im Abschnitt 5 werden die konkreten Simulationsparameter dargelegt und die Ergebnisse diskutiert. Abschließend wurde die Simulation bei geänderten Ionisatorgeometrien durchgeführt, um Effekte auf die Dichteverteilung analysieren und Optimierungspotenzial abschätzen zu können.

2. Quantitative Messungen mittels Massenspektrometrie

2.1 Massenspektrometrie

Die Massenspektrometrie bietet eine wichtige Diagnostik, um die Bestandteile von Analyten anhand deren Masse-zu-Ladungsverhältnisses zu detektieren. Hierzu ist es notwendig, das Analyt zunächst in einen gasförmigen Zustand zu überführen – falls es nicht bereits in diesem Zustand vorliegt – und anschließend zu ionisieren. Eine Trennung der Analyt-Ionen erfolgt im Analysator durch elektrische und magnetische Felder, die die Trajektorie der Ionen beeinflussen – das genaue Prinzip hängt dabei von der Art des verwendeten Massenspektrometers ab. Nach der Durchquerung des Analysators können die Ionen z. B. über ein Channeltron, Sekundärelektronenvervielfacher (*SEM, Secondary Electron Multiplier*) oder Farady Cup detektiert werden. Um die Trajektorie der im Ionisator gebildeten Analyt-Ionen nicht durch Stöße zwischen den Ionen bzw. Ionen und Neutralteilchen zu verändern, werden Massenspektrometer unter Vakuum betrieben, so daß die mittlere freie Weglänge λ größer als die Abmessungen des Analysatorsystems ist. Die mittlere freie Weglänge ist in der kinetischen Gastheorie definiert über

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} p \sigma} \quad (1)$$

mit der Boltzmann-Konstanten k_B , der Temperatur T , dem Druck p sowie dem Stoßquerschnitt σ und sollte typischerweise größer als 1 m sein, womit ein Vakuum mit $p < 1$ mPa benötigt wird.

Für die Ionisation der neutralen Analyten können verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen, eine häufig verwendete Methode ist dabei die Elektronenstoßionisation (EI). Bei diesem Ionisator typ (Abbildung 1) werden an heißen Filamenten ($T \sim 1700^\circ\text{C}$) mittels Thermoemission freie Elektronen erzeugt und durch eine Potentialdifferenz beschleunigt. Bei der Kollision der Elektronen mit den neutralen Analyten kann dieser ionisiert werden.

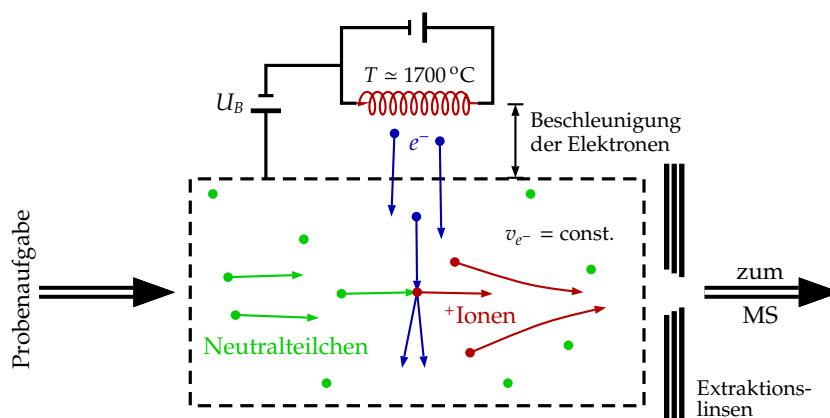


Abbildung 1: Ionisator

Das detektierte Signal für eine Sorte von Analyt-Ionen, den sogenannten Spezies, wird durch den Ionisator beeinflusst. Für die Signalstärke S_i des Detektors (in Anzahl/s) bei einer Spezies i gilt nach Singh et al. (1999) die Beziehung:

$$S_i = n_i^{\text{Ionisator}} \cdot \sigma_i(E) \cdot I_{\text{Emission}} \cdot L_{\text{Ionisator}} \cdot \beta \cdot \mathcal{T}(M_i) \quad (2)$$

mit der Teilchendichte im Ionisator $n_i^{\text{Ionisator}}$, dem Elektronenstoß-Ionisationswirkungsquerschnitt $\sigma_i(E)$, dem Elektronenstrom I_{Emission} , der Länge des Ionisators $L_{\text{Ionisator}}$, der Extraktionseffizienz

der Ionen aus dem Ionisator β und einem Koeffizienten $\mathcal{T}(M_i)$, der die Transmissionsfunktion des Quadrupolmassenfilters sowie die Sensitivität des Detektors in Abhängigkeit der Spezies beschreibt.

Eine Kalibrierung des gemessenen Signals zur quantitativen Bestimmung der Dichte der Spezies kann durch Vergleich der Signalintensitäten mit einem Kalibriergas (z. B. Methan) erfolgen. Weicht der Wert $\mathcal{T}(M_i)$ des Spezies von denjenigen des Kalibriergases nicht stark ab, kann mittels Gleichung (2) die unbekannte Dichte n_i der Spezies bestimmt werden über:

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_{\text{Kal}}^{\text{Ionisator}} \frac{S_i}{S_{\text{Kal}}} \frac{\sigma_{\text{Kal}}(E)}{\sigma_i(E)} \quad (3)$$

2.2 Kopplung zwischen Plasma-Reaktor und Massenspektrometer

Neben der qualitativen ist auch die quantitative Zusammensetzung eines reaktiven Plasmas, d. h. die Bestimmung der Teilchendichten der einzelnen Spezies, wichtig für das Verständnis der Reaktionskinetik und die Prozeßsteuerung. Bei der Kopplung zwischen Plasma-Reaktor und Massenspektrometer für die Analytik der Plasmazusammensetzung besteht das Problem, das der Arbeitsdruck eines Massenspektrometers in der Regel niedriger ist als derjenige im Plasma-Reaktor. Der Abbau des Druckes bei der Kopplung kann über differentielle Pumpstufen erfolgen. In Abbildung 2 ist eine Kopplung mit zwei differentiellen Pumpstufen dargestellt, wobei als MS-Typ häufig ein Quadrupol-Massenspektrometer (QMS) zum Einsatz kommt.

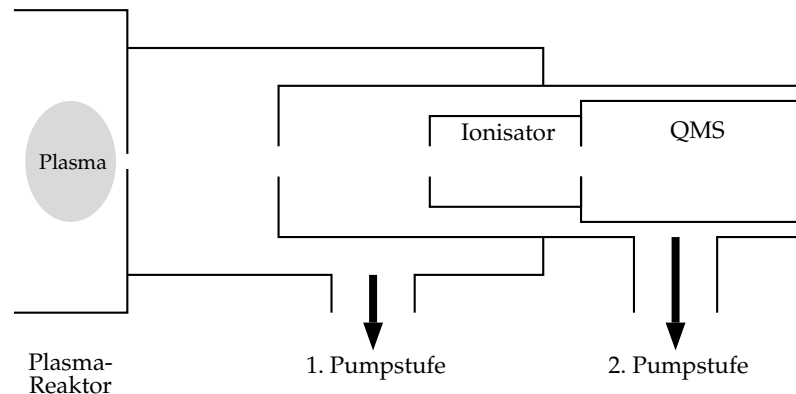


Abbildung 2: Kopplung zwischen Plasma-Reaktor und Massenspektrometer mit zwei differentiellen Pumpstufen

Durch eine Öffnung im Plasma-Reaktor wird ein Teilchenstrahl, der sogenannte Molekularstrahl, extrahiert und zum Ionisator geführt. Die Pumpstufen erniedrigen in jeder Stufe den Druck bis zum Arbeitsdruck des Massenspektrometers. Die Teilchendichte einer Spezies im Molekularstrahl n_i^{Strahl} hängt mit der Teilchendichte im Plasma n_i^{Plasma} zusammen über

$$n_i^{\text{Strahl}} = \frac{1}{4} \left(\frac{r}{x} \right)^2 n_i^{\text{Plasma}} = K_{\text{Geometrie}}(x) \cdot n_i^{\text{Plasma}} \quad (4)$$

wobei r den Radius der Extraktionsöffnung und x den Abstand zur Extraktionsöffnung angibt (Benedikt et al., 2005a), die geometrischen Abhängigkeiten können dabei zu $K_{\text{Geometrie}}(x)$ zusammengefaßt werden und sind für alle Spezies gleich.

Durch den Aufbau wie in Abbildung 2 ist im Ionisator eine zusätzliche Hintergrunddichte vorhanden, die durch den vorhandenen Restdruck im Vakuumsystem hervorgerufen wird. Die Hintergrunddichte ist dabei proportional zum Verhältnis vom Fluß der extrahierten Teilchen aus dem Plasma zur Pumpleistung des Vakuumsystems. Im Ionisator setzt sich folglich die

Teilchendichte additiv aus der Molekularstrahldichte und Hintergrunddichte n_i^{BG} zusammen, Gleichung (5).

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{BG} \quad (5)$$

2.3 Bestimmung der Hintergrunddichte

Für die Kalibrierung mittels den Gleichungen (2), (3) und (4) ist eine Bestimmung der Hintergrunddichte notwendig, so daß mit Gleichung (5) die Dichte im Molekularstrahl bestimmt werden kann. Dies ist durch den Einsatz eines Choppers möglich. Beim Einbringen des Choppers in den Molekularstrahl, so daß dieser vollständig blockiert ist (Abbildung 3a), entspricht das detektierte Signal nur der Hintergrunddichte. Wird der Chopper geöffnet (Abbildung 3b), so wird die Gesamtdichte nach Gleichung (5) gemessen – die Dichte im Molekularstrahl ist dann bestimmbar über die Subtraktion der Dichten bei offenem und geschlossenem Chopper.

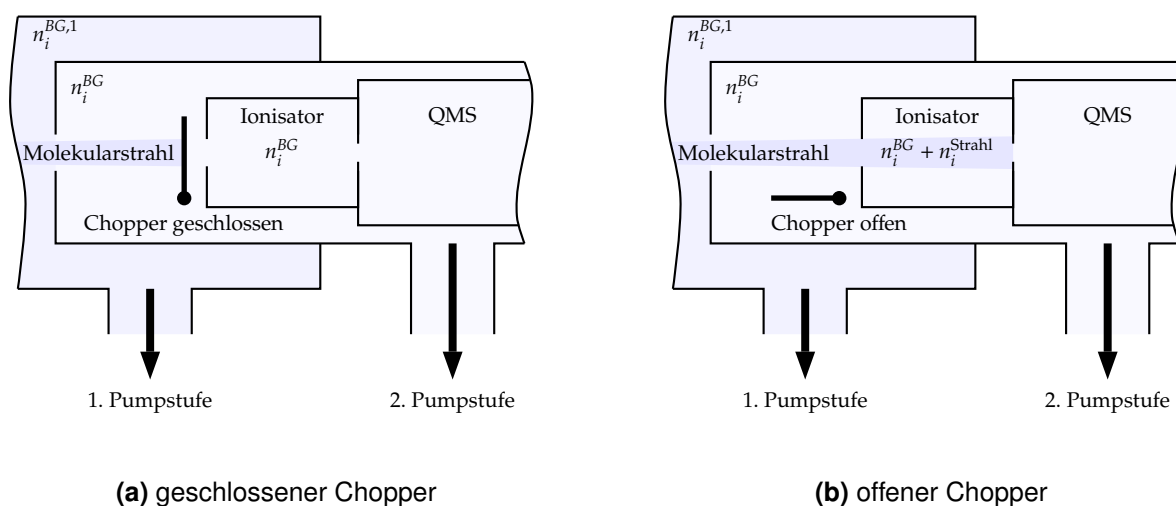


Abbildung 3: Bestimmung der Hintergrunddichte mittels Einsatz eines Choppers

Messungen von Benedikt et al. (2005a,b) zeigten jedoch, daß bei dieser Kalibrierungsmethode weitere systematische Fehler bei der Bestimmung der Teilchendichten von inaktiven Spezies auftreten, die die Teilchendichte erhöhen. Dieser systematische Fehler könnte in der Geometrie des Ionisators begründet liegen. Bei der Kollision mit den Wänden des Systems werden inaktive Spezies reflektiert und erhöhen die Dichte innerhalb des Analysatorsystems. Im Gegensatz hierzu werden reaktive Spezies bei Kollision mit den Wänden adsorbiert und tragen nicht mehr weiter zur Hintergrunddichte bei. Die Hintergrunddichte, die durch Reflektionen außerhalb des Ionisators hervorgerufen wird (system-globale Hintergrunddichte), ist durch die o. g. Chopper-Methode bestimmbar. Je nach Aufbau des Ionisators kann dieser jedoch ein relativ geschlossenes System darstellen – inaktive Spezies, die auf die Wände innerhalb des Ionisators treffen, können dabei viele Reflektionen erfahren, bevor sie den Ionisator verlassen – sei es als neutrales Teilchen oder als Ion. In Gleichung (5) kann die Hintergrunddichte n_i^{BG} für inaktive Spezies durch zwei additive Komponenten, der system-globalen Hintergrunddichte $n_i^{BG,global}$ und der Hintergrunddichte durch Reflektionen innerhalb des Ionisators $n_i^{BG,Ionisator}$, ausgedrückt werden und man erhält

$$n_i^{\text{Ionisator}} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{BG} = n_i^{\text{Strahl}} + n_i^{BG,global} + n_i^{BG,Ionisator}. \quad (6)$$

Insgesamt erhöht sich hierdurch die Dichte der inaktiven Spezies innerhalb des Ionisator und, nach Gleichung (2), folglich das detektierte Signal.

Für quantitative Aussagen über die Teilchendichte von inreaktiven Spezies im Plasma ist die Kenntnis der durch Reflektionen innerhalb des Ionisators erhöhten Hintergrunddichte notwendig. Nach Möglichkeit sollte diese Hintergrunddichte, wie auch die globale Hintergrunddichte, minimiert werden, um ein großes Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte zu erhalten.

Ziel dieser Arbeit ist die Klärung, welchen Einfluß die Ionisatorgeometrie und die durch Reflektionen erhöhte Dichte im Ionisator auf die Signalkalibrierungen besitzt und ob die in Benedikt et al. (2005a,b) beobachtete erhöhte Dichte um Faktor zwei hierdurch erklärt werden kann.

3. Modell

Für die Simulation der Dichteverteilung innerhalb des Ionisators wurde die Modellvorstellung entwickelt, daß sich neutrale Teilchen auf kräftefreien, gradlinigen Bahnen innerhalb des Ionisators bewegen, solange sie nicht mit Elementen des Ionisators kollidieren. Aufgrund der sehr geringen absoluten Gasdichte innerhalb eines Massenspektrometers ($p < 1 \text{ mPa}$) und der daraus resultierenden mittleren freien Weglänge ($\lambda > 1 \text{ m}$) können Stöße oder sonstige Wechselwirkungen zwischen Teilchen vernachlässigt werden.

Der Fluß der Teilchen, die aus dem Plasma-Reaktor in das differentielle Pumpsystem eintreten (vgl. Abbildung 2), sind nach einer Kosinus-Verteilungsfunktion verteilt. Aufgrund der gewöhnlich eingesetzten Geometrie ist der Öffnungswinkel des Molekularstrahls sehr klein, so daß über Kleinwinkelnäherung eine isotrope (uniforme) Verteilung der Teilchen innerhalb des Molekularstrahls angenommen werden kann. Für die Geschwindigkeitsverteilung dieser Teilchen wird eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung angenommen, wobei die Teilchentemperatur derjenigen im Plasma entspricht.

Untersucht werden sollen in der Simulation nur inreaktive, neutrale Teilchenspezies innerhalb des Ionisators – dies führt dazu, daß als Teilchenquelle nur das Plasma angesehen werden kann, als Teilchensenke einzig die Öffnungen des Ionisators zum umgebenden Vakuumsystem. Zusätzliche Teilchendichten durch die Hintergrunddichte innerhalb des gesamten Vakuumsystems werden nicht berücksichtigt, diese können, wie im vorherigen Abschnitt erläutert, über die Verwendung eines Choppers ermittelt werden. Innerhalb des Ionisators wird das idealisierte Bild einer Quell- und Senkenfreiheit angenommen – Verluste durch Ionisation können aufgrund der geringen Ionisationsrate von typischerweise 10^{-6} und der in der Simulation betrachteten Teilchenanzahl (~ 100.000 Teilchen) vernachlässigt werden.

Stöße der Teilchen mit den Ionisatorelementen können aufgrund der Dimensionen und Wechselwirkungen nicht als elastischer Stoß angesehen werden. Vielmehr findet ein Energieaustausch/Thermalisierung und Impulsaustausch zwischen dem auftreffenden Teilchen und den Atomgitter der Ionisatorelemente statt. Aufgrund des Massenverhältnisses zwischen auftreffendem Teilchen und Atomgitter kann für die mittlere Temperatur der reflektierten Teilchen nach dem Stoß diejenige des Ionisators angenommen werden, wobei als Verteilungsfunktion die Maxwell-Boltzmann-Verteilung Anwendung findet. Kurzfristige Adsorption und anschließende Desorption sowie die Rauigkeit der Ionisatoroberflächen im mikroskopischen und atomaren Bereich führt, neben dem o. g. Energieaustausch, dazu, daß aus der Auftreffrichtung des Teilchens nicht mehr direkt auf die Austrittsrichtung geschlossen werden kann. Feres and Yablonsky (2004) zeigten, daß in einem Knudsen-Regime – einem sehr dünnen Gas, in dem Stöße zwischen den Teilchen vernachlässigt werden können – das Knudsen-Kosinus-Gesetz

$$dp = \frac{d\omega}{\pi} \cos^n(\theta) \quad (7)$$

mit der Wahrscheinlichkeit dp , daß ein Teilchen mit einem Winkel θ zur Oberflächennormalen in den Raumwinkel $d\omega$ reflektiert wird, eine gute Näherung für die Verteilungsfunktion bei der Reflektion von neutralen Teilchen an den umgebenden Wänden darstellt. Der Exponent n der Verteilungsfunktion ist dabei eine positiv Zahl, üblicherweise liegt er im Bereich 1-2 (Scharfenort, 2007).

Die Teilchendichte in einem Volumenelement ist direkt proportional zur Verweilzeit eines Teilchenensembels in diesem, solange nur eine Teilchensorte betrachtet wird. Bei der Verfolgung der Trajektorien von vielen Teilchen innerhalb des Ionisators mittels Monte-Carlo-Simulation können die Verhältnisse der verschiedenen Beiträge zur Teilchendichte in einem Volumenelement über die Summation der Verweilzeiten in den einzelnen Volumenelementen ermittelt werden. Aufgrund der geradlinigen Bewegung ist dies, unter Berücksichtigung der Geschwindigkeit, einfach durchzuführen.

4. Implementierung

4.1 Anforderungen

Die zu erstellende Simulation sollte selbstverständlich das zugrundeliegende Modell korrekt implementieren, um Aussagen über den Effekt der Ionisatorgeometrie auf die Signalkalibrierung treffen zu können. Desweiteren wurde Anforderungen formuliert, die mit der konkreten Implementierung zusammenhängen und im Folgenden erörtert werden.

Eine wesentliche Forderung betrifft die Realisierungstechnik für die Simulation. Hier sollte ein möglichst modularer Aufbau implementiert werden, um eine Wiederverwendung großer Teile der Entwicklung zu ermöglichen. Zur Untersuchung von anderen Ionisatorgeometrien als die hier im Rahmen dieser Arbeit untersuchten sollte eine Adaption der Simulation möglich sein, ohne im größeren Umfang Teile der Simulation modifizieren zu müssen. Einzelne veränderliche Systemparameter, wie beispielsweise Plasmatemperatur, Teilchenzahl usw., sollten der Simulation als dynamische Parameter übergeben und nicht statisch in der Simulation implementiert werden.

4.2 Strategische Entscheidungen

Ausgehend von dem Anforderungskatalog wurde ein objektorientiertes Entwicklungsmodell für die Implementierung als adäquate Realisierungstechnik angesehen. Dies war insbesondere dadurch begründet, da eine größere Anzahl an (realen) Objekten der Problemstellung ähnliche oder modifizierte Eigenschaften besitzen, so daß die Paradigmen Abstraktion, Vererbung und Polymorphismus der OOP¹ eine einfache und übersichtliche Implementierung ermöglichen. Durch Kapselung ist eine Wiederverwendung größerer Teile auch für andere Problemstellungen möglich. Weiterhin wurde die Problemstellung in einen allgemeinen und einen problemspezifischen Bereich aufgeteilt und der allgemeine Teil in eine Bibliothek ausgelagert, so daß Modellierungen aus dem allgemeinen Bereich eine einfache Wiederverwendung gewährleisten.

Konkret wurde die Entwicklung in C++ durchgeführt, da diese Programmiersprache auf vielen Plattformen zur Verfügung steht und – im Gegensatz zu Interpretersprachen oder vorkompilierten Sprachen (z. B. Java) – eine schnelle Ausführungsgeschwindigkeit besitzt. Eingesetzt wurden, neben den Standardbibliotheken, zwei externe Bibliotheken, die Zufallszahlengeneratoren, Datenstrukturen und diverse Tools für die Programmsteuerung und Logging bereitstellen. Zum einen ist dies die Boost-Bibliothek² in der Version 1.35, zum zweiten eine Standardbibliothek des Autors (*libsstd*). Beide wurden ausgewählt, da sie, neben der freien Verfügbarkeit, portabel und nach dem OOP-Modell implementiert sind. Die Boost-Bibliothek, als Sammlung einer Reihe von Subbibliotheken, bietet zusätzlich den Vorteil, daß Teile dieser Bibliothek in den nächsten C++-Standard übernommen werden und somit längerfristig zur Verfügung stehen sowie aktiv gepflegt und weiterentwickelt werden.

Die Entwicklung wurde auf einem 64bit Linux-System durchgeführt, wobei als Compilierungsumgebung *CMake* von Kitware³ und als Compiler die *GNU Compiler Collection gcc*⁴ in der Version 4.2 eingesetzt wurden. Dabei wurde bei der Implementierung des in eine Bibliothek ausgelagerten allgemeinen Bereiches auf größtmögliche Plattformunabhängigkeit geachtet und spezifischer Code entsprechend gekapselt – eine Portierung auf andere Plattformen sollte somit einfach möglich sein. Die Dokumentation des Quellcodes erfolgte direkt in den Quellen,

¹OOP: Object-oriented programming

²<http://www.boost.org>

³<http://www.cmake.org>

⁴<http://gcc.gnu.org>

womit Quellcode und Dokumentation eine Einheit bilden – zur Erstellung der Quellcode-Dokumentation wurde dabei das Tool *Doxygen*⁵ verwendet.

Für die Implementierung wurde zum größten Teil der Bottom-Up-Ansatz verwendet, da mittels diesem Programmiermodell die Erstellung von wiederverwendbaren Code vereinfacht wird. Dies bietet auch die Möglichkeit, einzelne Komponenten auf ihre Korrektheit zu prüfen. Für die Funktionsprüfung wurden, nach Möglichkeit, Unit-Tests erstellt – entsprechende Frameworks, eingesetzt wurde hierfür *CPPUnit*⁶, stellen die Grundgerüste und Hilfsmittel für Unit-Tests bereit und bieten die Möglichkeit einer automatisierten Ausführung sowie Aggregation der Ergebnisse. Desweiteren kamen Shell- und Perl-Scripte für Auswertung und Automatisierung zum Einsatz.

4.3 Architektur

Für die Modellierung bestand die Vorstellung, daß eine Simulation eine (konkrete) Instanz eines Experimentes, bestehend aus Experimentkomponenten, ist. Auf dieser Grundlage wurde die in Abbildung 4 dargestellte Architektur implementiert.

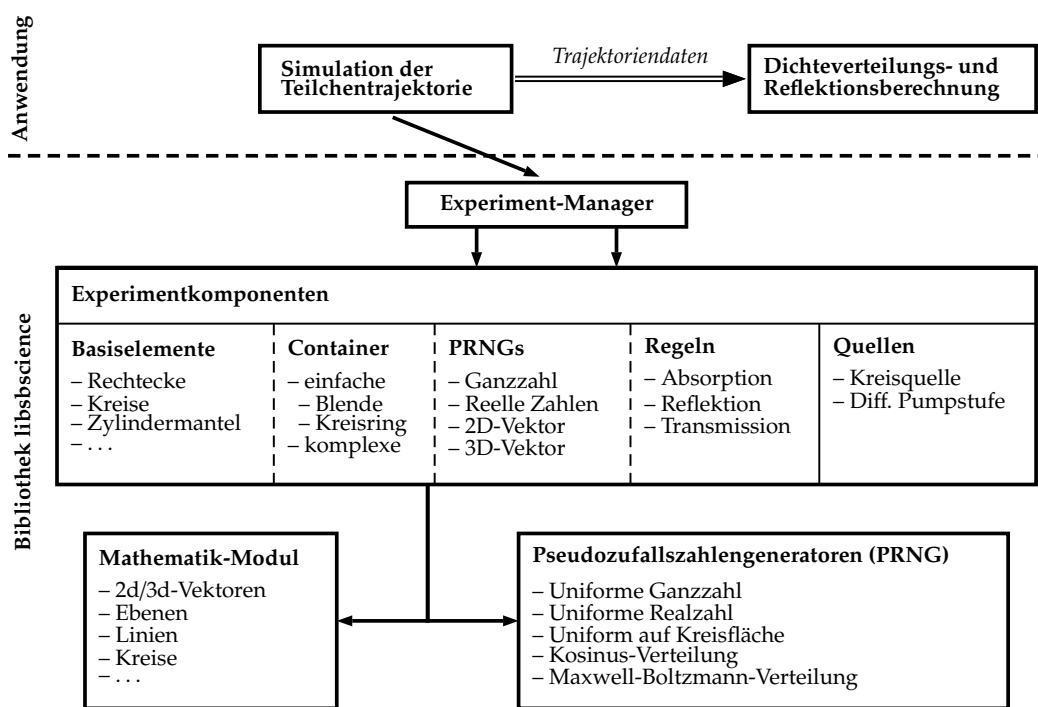


Abbildung 4: Architektur

Die Experimentkomponenten können in mehrere Kategorien aufgeteilt werden. Basiselement sind Implementierungen von Einzelkomponenten des zu simulierenden Gegenstandes, z. B. Rechtecke, Kreise und Zylinder. Zur Modellierung der Interaktion zwischen einem Teilchen und einem Basiselement besitzen die Basiselemente die Attribute Transmittivität t , Reflektivität r und Absorption a sowie Regeln, sogenannte Policies, wie sich die Teilchenflugbahn ändert. Dabei gilt, aus physikalischer Sicht, für ein Teilchen, daß die Wahrscheinlichkeit der drei Interaktionsmöglichkeiten

$$t + r + a = 1 \tag{8}$$

ergeben muß. Somit ist es ausreichend, für zwei der Interaktionsmöglichkeiten die Wahrscheinlichkeit anzugeben. Eine Auswahl der Interaktion beim Auftreffen eines Teilchens auf

⁵<http://www.doxygen.org>

⁶<http://sourceforge.net/projects/cppunit>

ein Basiselement kann einfach über das Ziehen einer uniform verteilten Zufallszahl zwischen 0 und 1 implementiert werden. Dies ermöglicht auch, Gitter zu modellieren, wobei das Verhältnis von Materialoberfläche zur gesamten Oberfläche als Reflektivität ausgedrückt wird, die Differenz der Reflektivität zu eins als Transmittivität (solange keine Absorption auftritt). Die Basiselemente können zu komplexeren Elementen, den Containern, zusammengefaßt werden, um eine Gruppierung der Elemente zu ermöglichen. Einfache Container sind eine fest definierte Kombination aus mehreren Basiselementen mit speziellen Eigenschaften – z. B. besteht der Kreisring aus zwei Basiskreiselementen, wobei der innere Kreis vollständig transparent ist und keine Interaktion mit einem Teilchen hervorruft. Teilchenquellen stellen einen weiteren Typ von Experimentkomponenten dar, wobei davon ausgegangen wurde, daß es in einem Experiment nur eine Teilchenquelle gibt – jedoch besteht die Möglichkeit eine (sekundäre) Teilchenquelle als Container bestehend aus (primärer) Teilchenquelle und weiteren Experimentkomponenten zu modellieren.

Basiselemente, Container und Quelle können zum Experiment beliebig hinzugefügt werden. Der gesamte Aufbau stellt einen Baum dar, mit dem Experiment als Wurzel und den Basiselementen als Blätter. Die räumliche Anordnung der Basiselemente und Container erfolgt dabei relativ zum übergeordneten Element – somit können Container ohne Änderung der Bezugspunkte enthaltenen Komponenten an verschiedenen Orten des Experiments eingesetzt werden.

Das Experiment wird von der Simulation instanziiert und mit Komponenten entsprechend der zu simulierenden Umgebung befüllt. Die Durchführung der Simulation, d. h. die Generierung von Teilchen und Verfolgung der Trajektorien für die gewünschte Anzahl an Iterationen obliegt der Experimentinstanz. Hierdurch konnte eine Trennung zwischen allgemeinen und speziellen Teil der Implementierung erreicht werden. In der Simulation selbst ist keine Modellierung notwendig, wie das Experiment durchzuführen ist, sondern nur, welche Komponenten in dem Experiment vorhanden sind.

Eine weitere Abstraktionsschicht wird durch die Unterbibliotheken Mathematik-Modul und Pseudozufallszahlengenerator (*PRNG*, *Pseudo Random Number Generator*) gebildet. Die Experimentkomponenten stellen zunächst einmal geometrische Objekte mit speziellen (physikalischen) Eigenschaften dar. Die Interaktion zwischen einem Teilchen und einem Basiselement führt zunächst zu dem Problem, den Schnittpunkt zwischen einer Linie und einem geometrischen Objekt zu ermitteln – somit zu einem rein mathematischen Problem. Dies legt eine Abstraktion in der Form nahe, daß die Experimentkomponenten geometrische Objekte enthalten und die Suche nach dem Interaktionspunkt zwischen Teilchen und Experimentkomponente an die geometrischen Objekte delegiert werden. Die Unterbibliothek für die Pseudozufallszahlengeneratoren instanziiert die Template-PRNGs aus der Boost Random-Bibliothek und stellt diese den Experiment-PRNGs bereit – hiermit wurde die Möglichkeit geschaffen, verschiedene PRNG-Typen zur Laufzeit auszuwählen. Zusätzlich sind PRNGs nach speziellen Verteilungsfunktionen, wie die benötigte Maxwell-Boltzmann-Verteilung und Kosinus-Verteilung, in ihr implementiert.

Zwecks Effizienz und Automatisierbarkeit ist auf eine graphische Benutzerführung verzichtet worden. Alle Parameter, die zur Laufzeit verändert werden können, sind über eine Konfigurationsdatei oder Kommandozeilenparameter anzugeben – dabei werden Konfigurationsdateieinstellung durch die Kommandozeile überschrieben. Dies ermöglicht insbesondere, die Simulation mehrfach mit geänderten Parametern automatisch – z. B. über ein Shell-Script – auszuführen. Desweiteren wurden die Aufgaben der Teilchentrajektorienverfolgung und der Berechnung der Dichteverteilung auf zwei Programme aufgeteilt. Die Analyse der Dichteverteilung ist damit unabhängig von der Trajektorienverfolgung und kann mit verschiedenen Parametern durchgeführt werden (z. B. Größe der Volumenelemente).

4.4 Zufallszahlengeneratoren

Neben dem eigentlichen Modell stellen Zufallszahlen und Zufallszahlengeneratoren (RNG, *Random Number Generator*) einen obligaten, essentiellen Bestandteil einer Monte-Carlo-Simulation dar. Die Bereitstellung von echten Zufallszahlen ist ohne zusätzliche externe Zufallszahlenquellen für ein Computersystem nicht möglich. Diese externen Zufallsquellen können dabei sowohl räumlich vom Datenverarbeitungs-System (DV-System) getrennt, wie auch innerhalb des DV-Systems über entsprechende Erweiterungskarten oder Chips auf dem Motherboard implementiert werden und nutzen physikalische Prozesse für die Generierung aus. Hierzu gehören unter anderem das thermische Rauschen von Halbleitern, radioaktiver Zerfall, Rauschgeneratoren oder die Generierung von Zufallszahlen über einen Algorithmus, der verschiedene (zufällige) Ereignisquellen in einem DV-System auswertet. Dies ist bei linuxartigen Betriebssystemen direkt im Kernel implementiert und über ein Interface (Geräte-datei) ansprechbar, wobei unter anderem Fest- und Netzwerkkartenaktivitäten, Interrupts, Tastatur- und Mausaktivitäten. . . für die Generierung herangezogen werden⁷. Nachteil der oben genannten Methoden ist der technische Aufwand, die Sicherstellung der erwarteten Verteilungsfunktion und die Verfügbarkeit, d. h. können genügend echte Zufallszahlen in der geforderten Zeit generiert werden.

Eine andere Möglichkeit sind die Pseudozufallszahlengeneratoren (PRNG, *Pseudo Random Number Generator*), die mittels mathematischer Algorithmen uniform verteilte Zufallszahlen generieren. Dabei wird in Abhängigkeit der Initialisierung (im Allgemeinen ein Startwert, der sogenannte *Seed*) eine Serie von Zahlen generiert – die Zykluslänge gibt dabei an, nach wievielen generierten Zahlen sich die Serie wiederholt. Dieser Typ von RNG liefert keine *echten* Zufallszahlen, da bei identischem Seed die Serie an Zufallszahlen identisch ist, d. h. deterministisch. Die PRNGs lassen sich aufgrund der zugrundeliegenden Algorithmen in verschiedene Klassen einteilen, es existieren auch hybride PRNGs, die verschiedene Algorithmen kombinieren – für eine Beschreibung der PRNGs und der verwendeten Algorithmen sei auf die weiterführende Literatur verwiesen, z. B. Gentle (2003), Knuth (1998), Bratley et al. (1987).

Die Verwendung von PRNGs für Monte-Carlo-Simulationen (MC-Simulation) besitzen neben der einfachen Bereitstellung einen weiteren Vorteil, der zunächst als Nachteil angesehen werden könnte – ihre Determiniertheit. Im wissenschaftlichen Umfeld stellt eine Monte-Carlo-Simulation eine spezielle Form eines Experiments dar – und ein Experiment sollte reproduzierbar sein. Bei Monte Carlo-Simulationen ist diese Anforderung auf eine strikte Reproduzierbarkeit verschärft, was bedeutet, dass bei identischen Eingangsdaten die Simulation identische Ergebnisse liefern sollte. Praktisch bedeutet dies, daß bei gleicher Parametrisierung und externen Daten eine Monte Carlo-Simulation identische Ergebnisse liefern muß, wenn die für die Simulation verwendeten PRNGs mit identischen Seeds initialisiert werden⁸ (Gentle, 2003, S. 230). Diese Forderung der strikten Reproduzierbarkeit bietet eine Möglichkeit, die Korrektheit der Simulationsimplementierung zu prüfen, und erweist sich als außerordentlich nützlich bei der Entwicklung der Simulation.

In der entwickelten MC-Simulation wurden daher PRNGs eingesetzt, wobei einige der in der Boost Random-Library (Maurer, 2008) implementierten PRNGs über ein Wrapper-Interface zugänglich gemacht wurden. Die Möglichkeit der Verwendung von verschiedenen PRNG-Typen wurde implementiert, da zunächst nicht bekannt war, ob die Wahl eines PRNG-Typs einen Einfluß auf das Ergebnis hat. Dies konnte in den Probeläufen nicht bestätigt werden, so daß für die Simulation als PRNG ein *Lagged Fibonacci* Generator mit Parametern $p = 23209$, $q = 13470$ verwendet wurde, da dieser eine sehr große Zykluslänge von $\sim 2^{1200000}$ besitzt und 40% schneller ist als der häufig verwendete Mersenne Twister (Maurer, 2008).

⁷siehe auch `drivers/char/random.c` im Linux Kernel-Tree, z. B. unter <http://git.kernel.org>

⁸Bei der Verwendung von Fließkommazahlenberechnungen für Entscheidungen kann diese strikte Reproduzierbarkeit jedoch nicht garantiert werden.

Die Boost Random-Library stellt zusätzlich verschiedene Zufallszahlendistribution (*RND*, *Random Number Distributions*) bereit, wobei nur die Uniform-Distributionen mittels Wrapper-Interfaces verwendet wurden. Die zusätzlich benötigten Distributionen für Kosinus-Verteilungen, Maxwell-Boltzmann und „Uniform auf einer Kreisfläche“ wurden selbst implementiert, da diese nicht zur Verfügung standen. Um eine Transformation von einer Uniform-RND auf eine andere Verteilungsfunktion durchzuführen, wurde durchgängig die *Acceptance-Rejection Methode* eingesetzt.

4.4.1 Acceptance-Rejection Methode

„Die *Acceptance-Rejection Methode* ist eine mächtige, generelle Technik für die Generierung von Zufallszahlen, deren Verteilungsfunktion $p(x) dx$ (die Wahrscheinlichkeit, einen Wert zwischen x und $x + dx$ anzutreffen) bekannt und berechenbar ist.“ (Press et al., 1992, S. 290). Eine andere einfache Methode für die Überführung einer Verteilungsfunktion in eine andere ist die *Inversionsmethode*; diese setzt jedoch voraus, daß die CDF (Cumulative Distribution Function) – das unbestimmte Integral von $p(x)$ – der Zielverteilung berechenbar ist, was analytisch nicht zwingend gegeben ist. Beispielsweise kann die Normalverteilung mit der Inversionsmethode nur über Näherungsverfahren generiert werden, da das auftretende Fehlerintegral nicht analytisch integrierbar ist, gleiches gilt für die Maxwell-Boltzmann-Verteilung.

Die Idee bei der *Acceptance-Rejection Methode* ist die Kombination von zwei Verteilungen – ist $f(x)$ ist Zielverteilung, deren Verlauf bekannt ist, und $g(x)$ die Verteilungsfunktion des Zufallszahlengenerators (in der Regel uniform), so benötigt man eine Konstante $c > 0$, für die gilt

$$\forall x : f(x) \leq cg(x) \quad (9)$$

Wird nun eine Zufallszahl ξ_1 aus $g(x)$ gezogen, so akzeptiert man diese Zahl mit der Wahrscheinlichkeit $p(\xi_1)$, Gleichung (10a) – die Akzeptierung von ξ_1 kann bestimmt werden, indem eine zweite Zufallszahl ξ_2 aus der uniformen Verteilung $U[0,1]$ gezogen wird und Gleichung (10b) erfüllt ist. Andernfalls werden neue Zufallszahlen gezogen und der Test erneut durchgeführt (Sutmann, 2008).

$$p(\xi_1) = \frac{f(\xi_1)}{cg(\xi_1)} \quad (10a) \qquad \frac{f(\xi_1)}{cg(\xi_1)} \geq \xi_2 \quad (10b)$$

Bei gegebener Verteilungsfunktion $f(x)$ und der Verwendung von uniformen RNGs kann der Algorithmus, in dem eine Zufallszahl $\xi_1 \in [\xi_{1,min}, \xi_{1,max}]$ generiert wird, nach Algorithmus 1 implementiert werden.

Algorithmus 1 Acceptance-Rejection Algorithmus

Require: f_{max} ist das Maximum der Verteilungsfunktion $f(x)$

Require: $U(\xi_{1,min}, \xi_{1,max})$ und $U(0, f_{max})$ sind uniforme RNGs auf dem angegebenen Bereich

- 1: **repeat**
 - 2: $\xi_1 \leftarrow U(\xi_{1,min}, \xi_{1,max})$
 - 3: $\xi_2 \leftarrow U(0, f_{max})$
 - 4: **until** $f(\xi_1) > \xi_2$
-

4.4.2 Kosinus-Verteilung

Bei der Reflektion an den Ionisatorwänden ist der Partikelfluß Φ nach einer Kosinus-Distribution verteilt. Dies bedeutet, in einer Kugel um den Reflektionspunkt mit Radius r soll in einem Oberflächenelement der Fluß

$$d\Phi = \Phi_0 \cdot \cos^n(\theta) d\theta \quad (11)$$

mit der Normierung Φ_0 betragen. Andererseits ist das differentielle Oberflächenelement einer Kugel gegeben über

$$dA = r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi. \quad (12)$$

Das Oberflächenelement wird für steigende θ -Winkel bis $\pi/2$ größer, was bei der Verteilungsfunktion für den θ -Winkel berücksichtigt werden muß. Als Korrekturfaktor erhält man $\sin(\theta)$, so daß die Verteilungsfunktion für den θ -Winkel gegeben ist über:

$$f_{\theta,n} = N_n \cdot \sin(\theta) \cos^n(\theta) \quad (13)$$

mit der Normierung N_n (eine Herleitung für $n = 1$ ist in Greenwood (2002) zu finden). Die Normierung erhält man über die Forderung

$$\int_0^{\pi/2} f_{\theta,n} d\theta \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow -\frac{1}{n+1} N_n \cos^{n+1}(\theta) \Big|_{\theta=0}^{\pi/2} = 1 \Rightarrow N_n = n+1. \quad (14)$$

und den Winkel θ , bei dem die Verteilungsfunktion ihr Maximum erreicht über

$$\theta_{max} = \arctan\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right). \quad (15)$$

Die Zufallswinkel θ werden dann über die „Acceptance-Rejection“-Methode (siehe Algorithmus 1) generiert, wobei die uniformen PRNGs $U(0, \pi/2)$ und $U(0, f_{\theta,n}(\theta_{max}))$ benötigt werden.

4.4.3 Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Die normierte Maxwell-Boltzmann-Verteilung f_{MB} für den Geschwindigkeitsbetrag im 3d-Raum (Abbildung 5) ist gegeben über

$$f(|v|) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{3/2} v^2 \exp\left\{-\frac{\frac{1}{2}mv^2}{k_B T}\right\} \quad (16)$$

mit der Masse der Teilchen m , der Temperatur T und der Boltzmann-Konstante k_B (von Keudell, 2007). Dabei ist die Normierung über Gleichung (17a) und die wahrscheinlichste Geschwindigkeit über Gleichung (17b) gegeben.

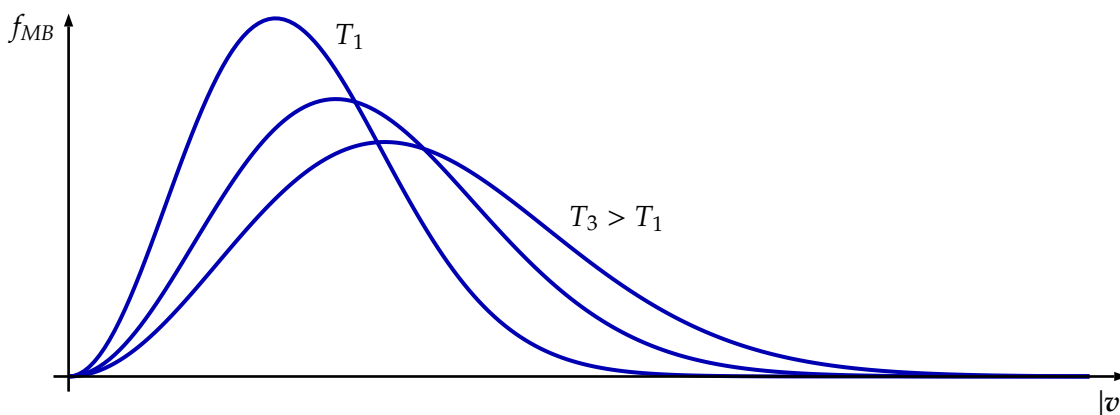


Abbildung 5: Maxwell-Boltzmann-Verteilung f_{MB} für den Geschwindigkeitsbetrag bei verschiedenen Temperaturen

$$N_{MB} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{3/2} \quad (17a)$$

$$\hat{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (17b)$$

Um zufällige Geschwindigkeiten nach der MB-Distribution zu generieren wurde die „Acceptance-Rejection“-Methode verwendet (Alg. 1), wobei für die Geschwindigkeit weitere Annahmen gemacht werden mußten. Zunächst einmal sind alle Geschwindigkeiten im Intervall $v \in [0, \infty[$ nach der MB-Distribution erlaubt, physikalisch sind Geschwindigkeiten $v \geq c$ jedoch verboten, so daß der Geschwindigkeitsbereich eingeschränkt werden kann. Ein weiteres Problem trat durch die informationstechnische Umsetzung auf. Bei Geschwindigkeiten, die sehr unwahrscheinlich sind – im untersuchten Fall sind dies insbesondere diejenigen im höheren Geschwindigkeitsintervall – wird der Wert der Exponentialfunktion sehr klein und ein „Floating Point Underflow“ tritt auf. Dieser wird entsprechend abgefangen und der Funktionswert der MB-Distribution auf 0 gesetzt, so daß diese Geschwindigkeit nicht möglich ist. Da der Bereich im höheren Geschwindigkeitsbereich sehr groß ist, wurde aus Effizienzgründen der erlaubte Geschwindigkeitsbereich weiter eingeschränkt, indem angenommen wurde, daß Geschwindigkeiten mit einer Wahrscheinlichkeit unterhalb einer wählbaren Grenze die Simulation nicht wesentlich beeinflussen und daher vernachlässigt werden können. Die Ermittlung der somit maximalen Geschwindigkeit v_{max} erfolgt iterativ ab einem Vielfachen k_{min} der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit – liegt die Wahrscheinlichkeit bei $v = k_{min}\hat{v}$ überhalb der definierten Wahrscheinlichkeitsgrenze, so wird der Faktor um eine Schrittweite Δk erhöht und die Prüfung wiederholt bis maximal ein oberer Faktor k_{max} erreicht wird (Algorithmus 2).

Algorithmus 2 Algorithmus zur Berechnung der maximalen Geschwindigkeit

Require: $m, T, k_{min}, k_{max}, \Delta k, p_{min}$

- 1: $\hat{v} \leftarrow \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$
 - 2: $k \leftarrow k_{min}$
 - 3: **repeat**
 - 4: $v_{max} \leftarrow \hat{v} \cdot k$
 - 5: $p \leftarrow f_{MB}(v_{max})$
 - 6: $k \leftarrow k + \Delta k$
 - 7: **until** $p < p_{min} \vee k > k_{max}$
 - 8: $v_{max} \leftarrow \text{ceil}(v_{max})$
-

Die Parameter für diesen Algorithmus wurden empirisch für die Simulationsbedingung bestimmt und gesetzt auf: $p_{min} = 10^{-8}$, $k_{min} = 3$, $k_{max} = 5$ und $\Delta k = 0,1$.

5. Simulation

5.1 Simulationsaufbau

Für die Implementierung des geometrischen Aufbaus der Simulation wurde derjenige verwendet, der in Benedikt et al. (2005a,b) zum Einsatz kam, um einen Vergleich der Ergebnisse der Simulation mit den experimentellen Werten bewerkstelligen zu können. Abweichend als in Abbildung 2 dargestellt wurde bei diesem Aufbau ein dreistufiges differentielles Pumpsystem für die Kopplung zwischen Plasma-Reaktor und QMS verwendet. Die geometrischen Abmessungen des Pumpsystems sind in Abbildung 7a wiedergegeben.

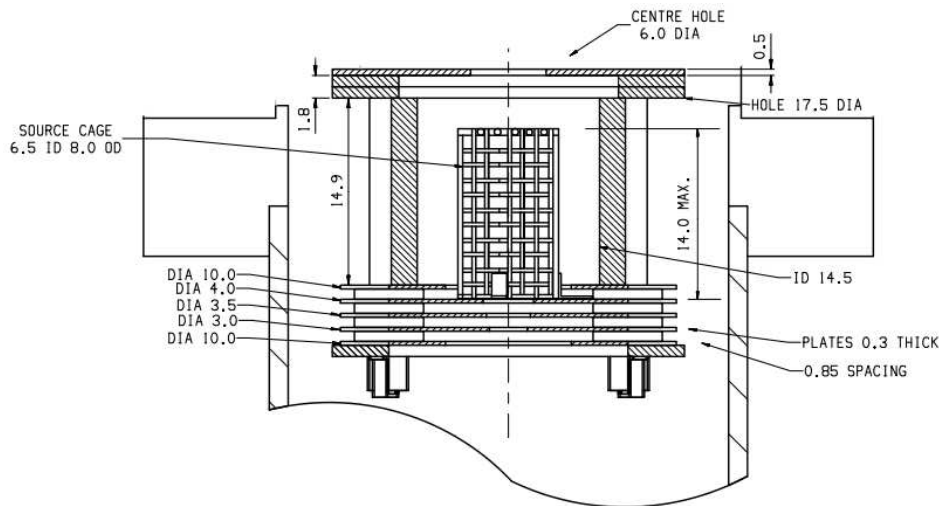
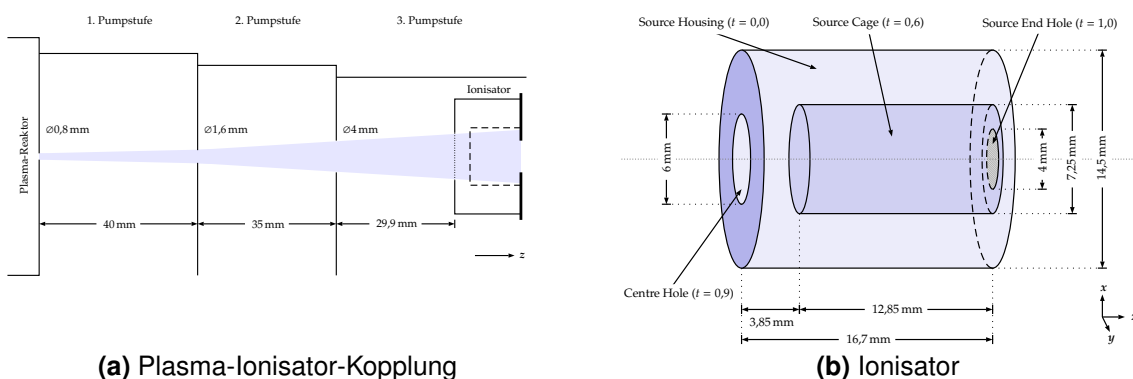


Abbildung 6: HIDDEN Ionisator (HIDDEN Analytical Ltd., 2008)

Eingesetzt wurde ein QMS von HIDDEN Analytical Ltd., das Layout des Ionisators mit den Abmessungen ist in Abbildung 6 dargestellt. Das *Source Cage* und das *Centre Hole* sind Gitter mit 60% respektive 90% Maschenanteil, der Teilchenstrahl vom Plasma tritt über das *Centre Hole* in den Ionisator ein.

Vereinfachungen beim geometrischen Aufbau für die Simulationsumgebung wurden in der Form ausgewählt, daß diese die Umgebung nur marginal ändern und die Auswirkungen auf die Dichteverteilung vernachlässigt werden können, andererseits eine einfachere Implementierung ermöglichen. Die für die Simulation implementierten geometrischen Objekte, die den realen Ionisator abbilden sollen, wurden dabei als unendlich dünn implementiert – für die Anordnung der Objekte wurden für den Durchmesser des *Source Cage* sowie den Abstand



(a) Plasma-Ionisator-Kopplung

(b) Ionisator

Abbildung 7: Geometrischer Aufbau

zwischen *Centre Hole* und *Source Cage* die mittleren Abmessungen verwendet, in allen anderen Fällen die inneren Abmessungen. In Abbildung 7b ist der in der Simulation verwendete geometrische Aufbau wiedergegeben, für die einzelnen Elemente sind ebenfalls die Transmittivitäten angegeben (vgl. Abschnitt 4.3). Das verwendete Koordinatensystem ist so gewählt, daß der Aufbau entlang der z -Achse liegt und rotationssymmetrisch zu dieser ist.

Aus Abbildung 7a ist ersichtlich, daß der Raumwinkel des Teilchenstrahls aus dem Plasma-Reaktor, der den Ionisator erreicht, aufgrund der Geometrie klein ist (der maximale Öffnungswinkel beträgt etwa 0,3 rad). Alle Teilchen, die unter einem größeren Winkel austreten, tragen maximal zur globalen Hintergrunddichte bei und werden daher nicht berücksichtigt. Ebenfalls tragen Teilchen, die direkt am Gitter des *Centre Hole* reflektiert werden, nicht zur Teilchenstrahldichte im Ionisator bei – eine Berücksichtigung der Reflektionen beim eingehenden Strahl am Gitter des *Centre Hole* ist somit nicht erforderlich. Um eine effiziente Generierung der für die Simulation interessanten Teilchen zu bewerkstelligen und damit eine Verkürzung der Simulationszeit zu ermöglichen, wurde die Plasma-Ionisator-Kopplung insgesamt als Teilchenquelle für den Ionisator implementiert. Dies bedeutet, ausgehend von der Geometrie der Kopplung wird dynamisch der maximale Öffnungswinkel für die Teilchen aus dem Plasma-Reaktor bestimmt und die Richtung der Teilchen auf diesen, zuzüglich einem Sicherheitsfaktor aufgrund der Ungenauigkeiten bei der Fließkommazahlenberechnung, beschränkt – hierdurch wird sichergestellt, daß einerseits kein Winkelbereich benachteiligt wird und andererseits Minimierung der Anzahl der verworfenen Teilchen, die den Ionisator nicht erreichen.

Für die Simulation wurde die Temperatur des Ionisators stabil auf 298 K gehalten, die Temperatur T der Teilchen im Plasma sowie der Exponent n der Kosinus-Distribution variabel gestaltet. Als Teilchensorte wurde Acetylen (C_2H_2) mit einer Masse von 26 u untersucht. Jede Simulation erfolgt über 30.000 Teilchen, wobei diese vierfach durchgeführt wurde und eine arithmetische Mittelung erfolgte. Dabei erfolgten jeweils zwei Simulationen auf einem Athlon 64 3500+, die anderen beiden auf einem Intel Core2Duo E8400 Linux-System – jeweils unter Verwendung der entsprechenden Optimierungen für die Fließkommaberechnung 3dNOW! respektive SSE3. Die Simulation bei veränderter Geometrie wurden nur auf dem Athlon 64-System mit vier Läufen á 30.000 Teilchen mit anschließender Mittelung durchgeführt.

Die Teilchen werden nacheinander an der Öffnung des Plasma-Reaktors erzeugt, wobei der Ort in der Ebene der Öffnung, die Geschwindigkeit und Richtung zufällig generiert werden. Kann das Teilchen die Plasma-Ionisator-Kopplung durchqueren und in den Ionisator eintreten (es gibt keine Schnittpunkte zwischen der Flugbahn des Teilchens mit den Elementen der Kopplung), so beginnt die Trajektorienverfolgung, andernfalls wird ein neues Teilchen generiert. Ausgehend vom Eintrittspunkt und -geschwindigkeit wird jeweils der Interaktionspunkt mit einer Ionisatorkomponente bestimmt, dessen Distanz zum aktuellen Ort am kürzesten ist. Nach Bestimmung des Interaktionstyps (Transmission und Reflektion) wird gegebenenfalls die Richtung nach der Kosinus-Verteilung und der Geschwindigkeitsbetrag nach der MB-Verteilung geändert. Für jeden Interaktionspunkt des Teilchens mit dem Ionisator, ausgehend vom Eintrittspunkt, wird jeweils der Punkt sowie der Geschwindigkeitsvektor in einer Liste gespeichert. Die Trajektorienverfolgung für ein Teilchen endet, wenn keine weiteren Interaktionspunkte gefunden werden können, d. h. daß das Teilchen den Ionisator verlassen hat, und der Ablauf beginnt mit einem neu generierten Teilchen.

Zur Bestimmung der Dichteverteilung wurden rechtwinklige Volumenelemente mit Kantenlänge in x - und y -Richtung von jeweils $\Delta x = \Delta y = 0,2$ mm und in z -Richtung mit $\Delta z = 1,0$ mm verwendet – in x - und y -Richtung wurde der Bereich von $-7,1$ mm bis $+7,1$ mm, in z -Richtung der Bereich von $-0,3$ mm bis $16,7$ mm des Ionisators abgedeckt (vgl. Abbildung 7b und 8). Die gespeicherte Liste mit dem gesamten Trajektorienverlauf für alle Teilchen wird für die Bestimmung der Dichteverteilung eingelesen und alle Teilch trajektorien iterativ verarbeitet. Für jede Trajektorie werden iterativ die Schnittpunkte mit den Volumenelementen be-

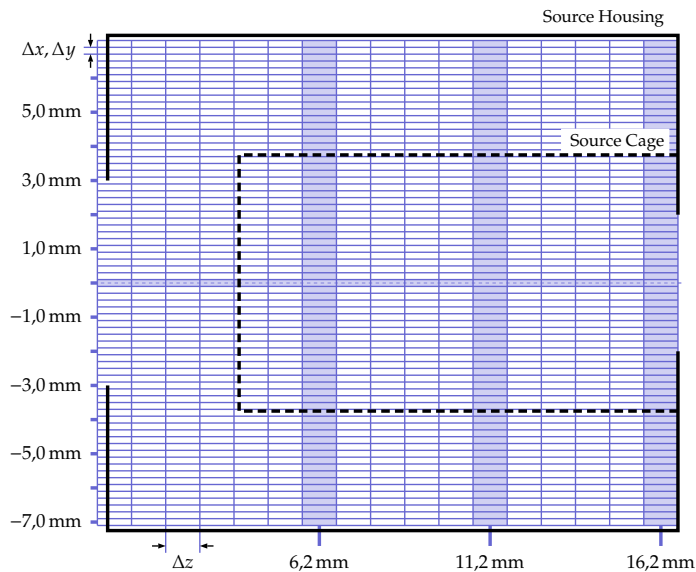


Abbildung 8: Anordnung der Volumenelemente für die Bestimmung der Dichteverteilung. Die mit einer dunkleren Farbe gekennzeichneten Volumenelemente werden für die Auswertung der Dichteverteilung verwendet.

stimmt und aus der Trajektorienstrecke in einem Volumenelement sowie der Geschwindigkeit die Verweilzeit des Teilchens ermittelt. Alle Verweilzeiten der Teilchen in einem Volumenelement werden aufaddiert und als Dichte in diesem Volumenelement interpretiert (siehe Abschnitt 3).

Aufgrund der Rotationssymmetrie um die z -Achse ist im Folgenden bei der Betrachtung der Längsschnitte die y - z -Ebene bei $x = 0$ mm gewählt worden.

5.2 Simulation mit $T = 300$ K und $n = 1$

In Abbildung 9 ist die Dichteverteilung bei einem Längsschnitt durch den Ionisator bei einer Teilchentemperatur im Plasma von 300 K und einem Exponenten der Kosinus-Verteilung von $n = 1$ dargestellt. Abbildung 9a zeigt die Gesamtdichte der Teilchen, das heißt sowohl die Dichte des Eingangsstrahls wie auch die Hintergrunddichte, die durch Reflektionen an den Ionisatorwänden hervorgerufen wird. Zu erkennen ist, daß durch die Reflektionen des Eingangsstrahls am *Source Cage*-Deckel (mit einer Transmittivität von 60%) die Dichte zwischen *Centre Hole* und *Source Cage* am höchsten ist. Innerhalb des *Source Cage* ist die Dichte im Strahlbereich gleichförmig verteilt. Die wesentlich geringere Dichte am Ende des *Source Cage* ist durch den Teilchenverlust am *Source End Hole* begründet, da alle Teilchen, die sich in einem

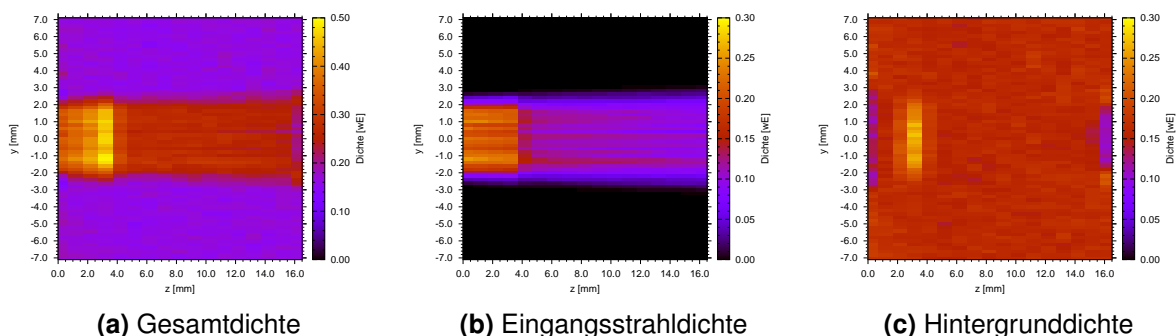


Abbildung 9: Dichteverteilung in der y - z -Ebene bei $x = 0$ mm in willkürlichen Einheiten (wE)

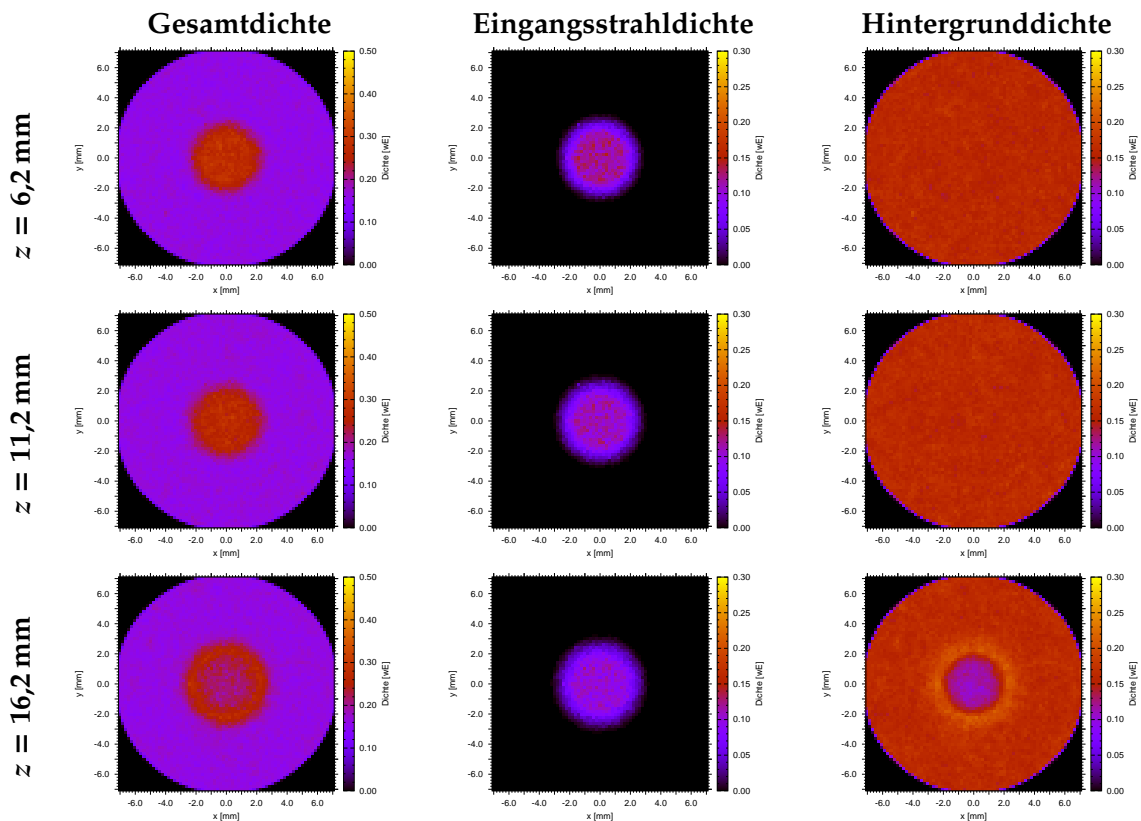


Abbildung 10: Querschnitte der Dichteverteilung in der x - y -Ebene. Beachten Sie die unterschiedliche Skalierung der Dichte-Farbskala

Radius von 2 mm um die Mittelachse am Ende des Ionisators befinden, diesen verlassen können. In Abbildung 9b ist die Dichte dargestellt, die durch den Eingangsstrahl hervorgerufen wird, das heißt die Reflektionen wurden nicht berücksichtigt. Zu erkennen ist deutlich der Öffnungswinkel des Strahls durch die Geometrie des Pumpstufensystems sowie die Abnahme der Teilchendichte innerhalb des *Source Cage*.

Die Streifen, die in Abbildung 9b zu erkennen sind, sind durch statistische Zufälligkeiten zu erklären. Es zeigte sich, daß die verwendeten Zufallszahlengeneratoren in Abhängigkeit vom Seed einen leichten Überhang zum höheren oder niedrigen Bereich des PRNG-Intervalls aufweisen, der sich hier bemerkbar macht. Dies konnte bei allen Typen von PRNGs (Lagged Fibonacci, Mersene Twister, ...) unabhängig beobachtet werden. Zusätzlich wird die Dichte stellenweise stark durch einzelne sehr langsame Teilchen erhöht. Um diese statistischen Effekte zu minimieren wurde daher eine Mittelung über vier unabhängige Simulationen durchgeführt.

Bemerkenswert ist das Ergebnis, wenn man die Teilchendichte, die zusätzlich durch Reflektionen an den Ionisatorwänden hinzukommt, betrachtet. Abbildung 9c zeigt, daß die sich die durch Reflektion zusätzliche Teilchendichte fast gleichförmig über den gesamten Ionisator verteilt. Einzig an den Stellen von Teilchensenken (*Centre Hole* und *Source End Hole*) sind diese wesentlich kleiner, direkt vor dem *Source Cage*-Deckel und in einem Ring um das *Source End Hole* durch die hohe Teilchendichte des Eingangsstrahls erhöht (der Radius des Eingangsstrahls ist am Ionisatorende größer als der Radius des *Source End Hole*). Reflektionen an den Ionisatorwänden führen somit zu einer über weite Bereiche des Ionisators konstante Hintergrunddichte.

Die Querschnitte der Dichteverteilung sind für drei Positionen innerhalb des *Source Cage* in Abbildung 10 abgebildet. Dabei sind, wie auch bei den folgenden Querschnitten, eine Position zu Beginn des *Source Cage*, einer mittig und einer zum Ende gewählt worden (vgl. Abbildung 8).

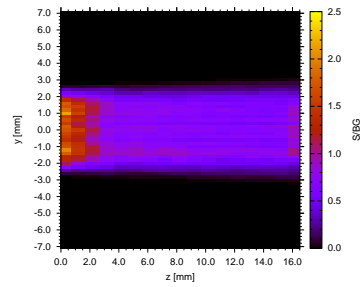


Abbildung 11: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in der y - z -Ebene bei $x = 0$ mm

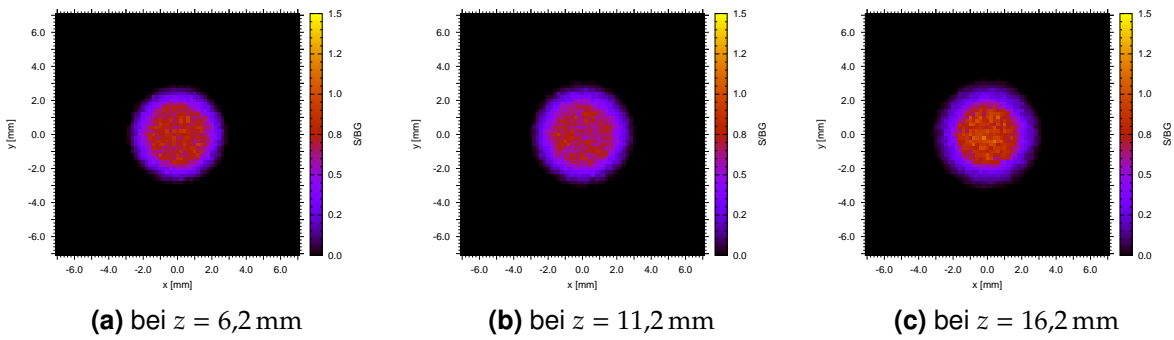


Abbildung 12: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in der x - y -Ebene

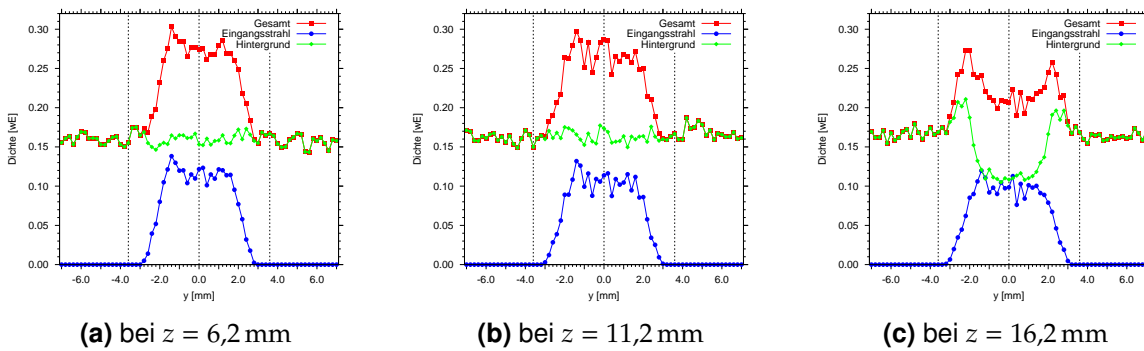


Abbildung 13: Dichteprofile in der y -Ebene bei $x = 0$ mm

Zu erkennen ist, wie bei den Längsschnitten, die homogene Verteilung der Dichten. Insbesondere ist bei der Hintergrunddichte zu erkennen, daß sich diese konstant über das gesamte Ionisatorvolumen erstreckt, ein Einfluß des *Source Cage* auf die Hintergrunddichte ist nicht erkennbar. Bei den Querschnitten vom Ionisatorende ist der Einfluß des *Source End Hole* auf die Teilchendichte deutlich zu erkennen, der Ring mit höherer Dichte ist durch den Eingangsstrahl zu erklären.

Das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte ist in Abbildung 11 für den Längsschnitt, in Abbildung 12 für verschiedene Querschnitte wiedergegeben. Ist mit n_G die Gesamtdichte und mit n_E die Dichte im Eingangsstrahl bezeichnet, so läßt sich das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG bestimmen über

$$\frac{n_G}{n_G - n_E} = \frac{n_E + n_{BG}}{n_E + n_{BG} - n_E} = \frac{n_E}{n_{BG}} + 1 \Rightarrow S/BG = \frac{n_E}{n_{BG}} \quad (18)$$

und gibt an, um wieviel mal größer die Dichte im Eingangsstrahl zur Hintergrunddichte ist.

Zu erkennen ist, daß die Hintergrunddichte einen verhältnismäßig hohen Anteil an der Gesamtdichte über den gesamten Ionisator hinweg beiträgt – innerhalb des *Source Cage*, indem die Ionisation mittels Elektronenstoßionisation stattfindet, ist das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte $\approx 0,7$ und steigt nur am Ende des Ionisators, hervorgerufen durch die Teilchenverluste am *Source End Hole*, leicht auf $\approx 1,0$ an.

Deutlicher ist dies in den Querschnitts-Dichteprofilen in Abbildung 13 zu erkennen. Im Innern des Ionisators, d. h. bei $z = 6,2$ mm beziehungsweise bei $z = 11,2$ mm ist die Hintergrunddichte konstant über den Ionisatorquerschnitt verteilt und höher als die Dichte des Eingangsstrahls. Am Ende des Ionisators bricht die Hintergrunddichte in einem Radius von 2 mm um die Mittelachse ein, wie dies bereits bei den vorherigen Abbildungen zu sehen war. In diesem Bereich ist die Hintergrunddichte etwa gleich groß wie die Dichte des Eingangsstrahls.

Überträgt man die Dichteverteilungen aus der Simulation auf reale Systeme, so führt eine Erhöhung der Neutralteildichte im Ionisator zu einer höheren Anzahl an Ionen und – nach Gleichung 2 – zu einem höheren Detektorsignal. Das elektrische Feld der Extraktionslinsen (siehe Abbildung 1) kann dabei Ionen effizienter extrahieren, die sich nahe der Mittelachse und näher an den Austrittsöffnung, dem *Source End Hole*, befinden. Für das Detektionssignal sind somit die Ionen wichtig, die in diesen Bereichen des Ionisators gebildet werden. Folglich sind die Teilchendichten aus der Simulation in diesen Bereichen explizit diskutiert.

Für das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte kann bestenfalls ein Wert von ≈ 1 (wenn die Ionen-Extraktion in der Nähe der Austrittsöffnung am effektivsten ist), schlechtenfalls ein Wert von $\approx 0,7$ (wenn die meisten Ionen aus der Ionisatormitte extrahiert werden) abgeschätzt werden. Dies bedeutet, daß der Beitrag der durch Reflektionen an den Ionisatorwänden hervorgerufenen Hintergrunddichte zum detektierten Signal am MS mindestens gleich groß ist wie die der Eingangsstrahldichte. Dies führt bei der Kalibrierung zu einer höheren Dichte der inreaktiven Teilchen um mindestens Faktor 2, wie dies bereits experimentell bei Benedikt et al. (2005b) beobachtet wurde.

5.3 Veränderung des Exponenten der Kosinus-Verteilung

Bei der Reflektion der inreaktiven Teilchen an den Wänden erfolgt dies gemäß einer Kosinus-Verteilung, wobei der Exponent für die Reflektion von dem hier betrachteten Acetylen nicht bekannt ist. Um die Auswirkungen des Exponenten auf die Dichteverteilung zu prüfen, wird die Simulation mit Exponenten im Bereich von eins bis fünf durchgeführt und miteinander verglichen.

Eine Erhöhung des Exponenten der Kosinus-Verteilung für die Reflektion läßt erwarten, daß die Hintergrunddichte nahe der Symmetrieachse steigt und bei zunehmenden radialen Abstand abfällt. Erklärt werden kann dies über die Konzentrierung der Reflektionsrichtung des Eingangsstrahls und der ersten Reflektionen entlang der Mittelachse – bei höheren Exponenten werden mehr Reflektionen benötigt, um beliebige Richtungen zur Mittelachse zu erhalten.

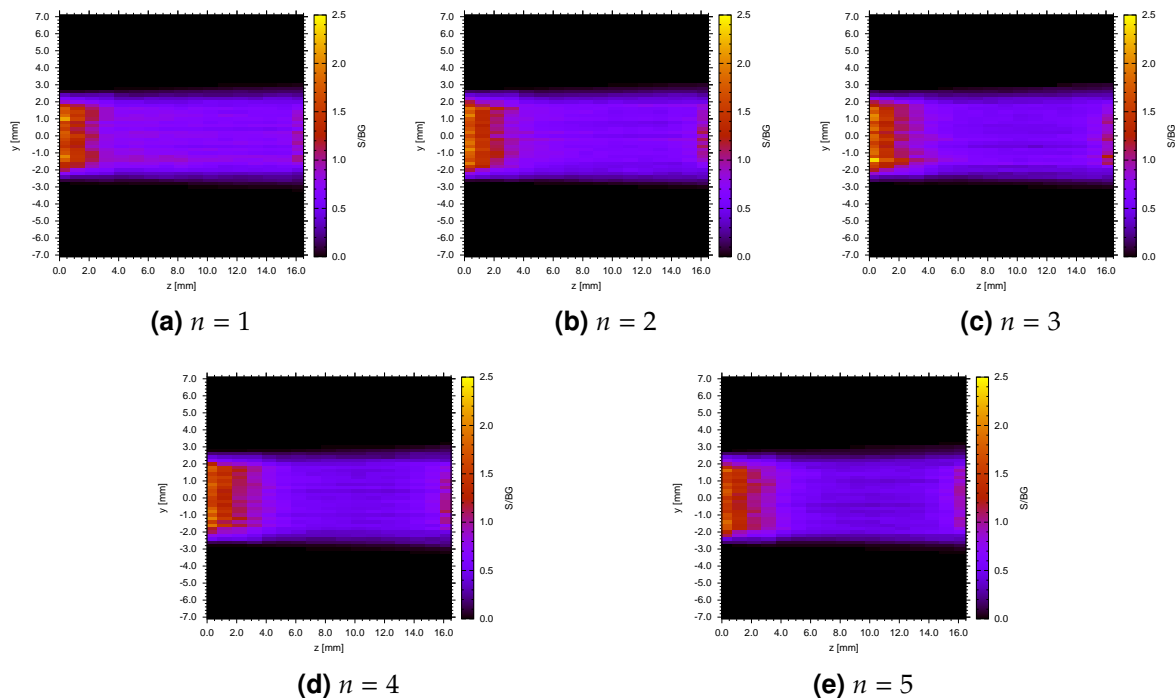


Abbildung 14: Verhältnis von Eingangsstrahl- zu Hintergrunddichte S/BG in der y - z -Ebene bei $x = 0$ mm, $T = 300$ K und veränderlichem Exponenten n der Kosinus-Verteilung

Abbildung 14 zeigt bei zunehmenden Exponenten eine leichte Verschlechterung des S/BG -Verhältnisses innerhalb des *Source Cage*. Die Dichteprofile (Abbildung 15) zeigen die erwartete Abnahme der Dichte bei größerem Abstand zur Mittelachse und Zunahme entlang derselben – auch bei höheren Exponenten ist ein Effekt der Reflektionen am Mantel des *Source Cage* auf die Dichteverteilung nicht in der Form zu beobachten, daß an dieser Grenze ein Dichtesprung auftritt. Bemerkenswert ist, daß der Exponent der Kosinus-Verteilung keinen wesentlichen Einfluß auf das S/BG -Verhältnis am Ende des Ionisators hat (in Bereich des Radius des *Source End Hole*). Innerhalb des Ionisators kann eine leichte Verschlechterung des S/BG -Verhältnisses in Abhängigkeit des Exponenten von $S/BG(n = 1) \approx 0,7$ auf $S/BG(n = 5) \approx 0,6$ abgeschätzt werden.

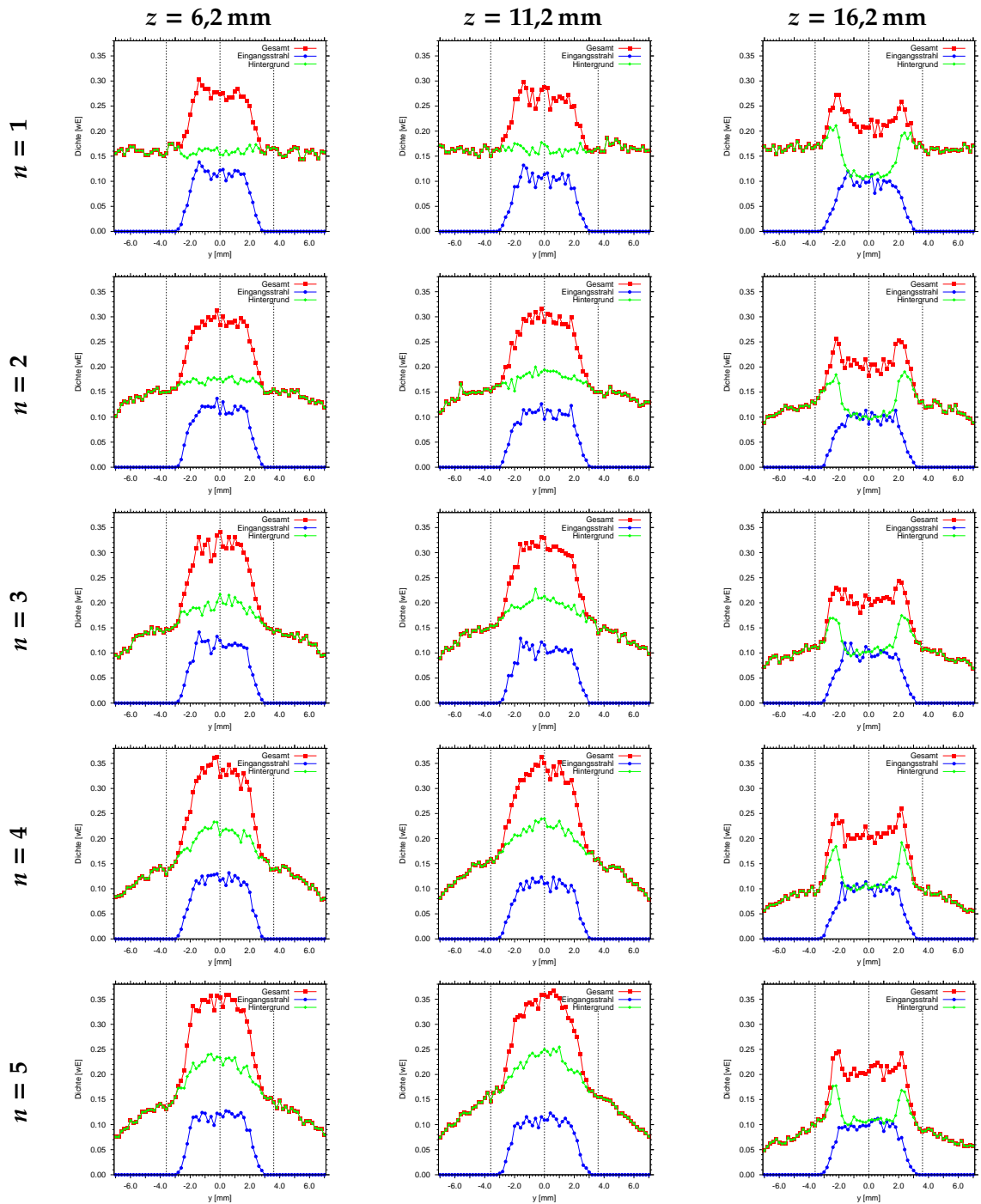


Abbildung 15: Dichteprofile in der y -Ebene bei $x = 0$ mm und $T = 300$ K bei veränderlichem Exponenten der Kosinus-Verteilung

5.4 Veränderungen bei Variation der Plasmatemperatur

Die Variation der Plasmatemperatur beeinflusst einzig die Dichte des Eingangsstrahls, da die mittlere Geschwindigkeit der aus dem Plasma-Reaktor in den Ionisator strömenden Teilchen nach der Maxwell-Boltzmann-Verteilung (vgl. Abschnitt 4.4.3) für höhere Temperaturen ansteigt. Bei der Betrachtung mit einer konstanten Teilchenzahl, folgt eine kürzere Verweilzeit des Teilchenensembels in einem Volumenelement und somit eine geringere Dichte. Da nach Modellvorstellung bei der Reflektion der Teilchen an den Wänden des Ionisators eine Thermalisierung (vgl. Abschnitt 3) stattfindet, trägt eine Veränderung der Plasmatemperatur nicht zur Dichteverteilung der Hintergrunddichte bei. Bei einem Exponenten von $n = 1$ der Kosinus-Verteilung wurde die Simulation für Plasmatemperaturen im Bereich von 300 K bis 500 K durchgeführt.

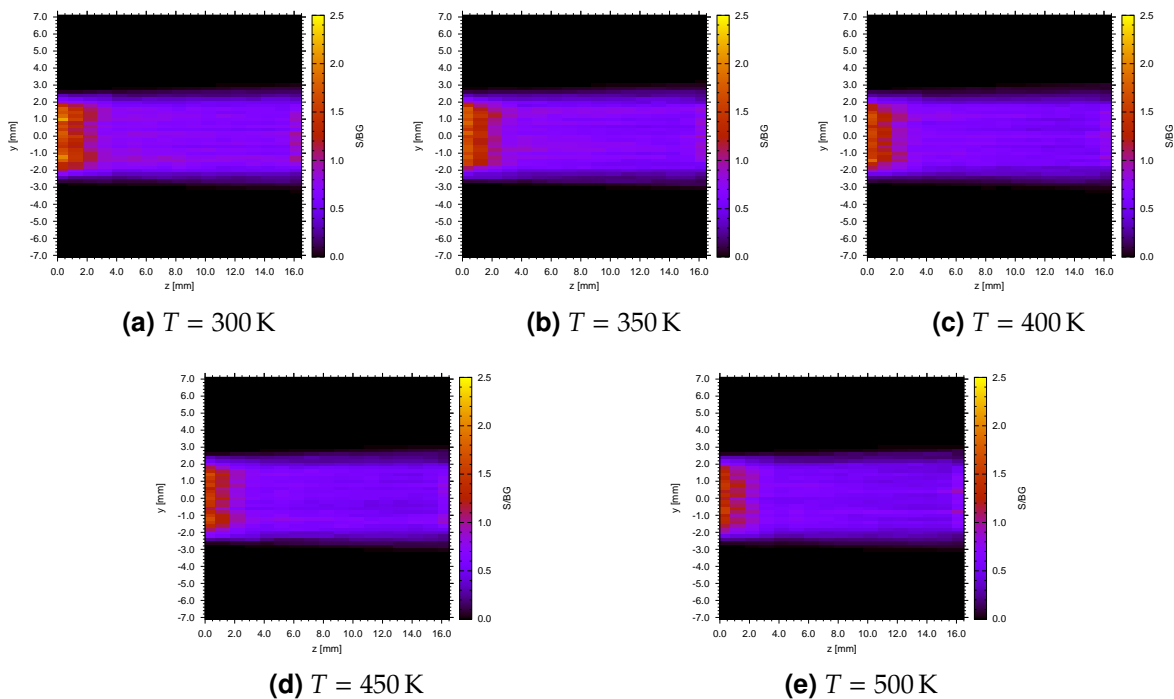


Abbildung 16: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in der y - z -Ebene bei $x = 0$ mm, $n = 1$ und veränderlicher Plasmatemperatur

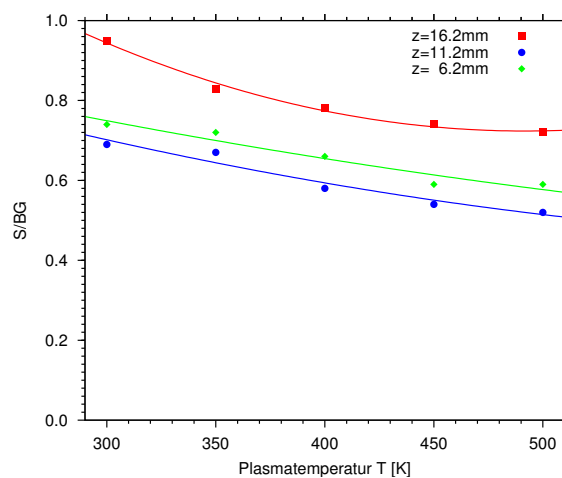


Abbildung 17: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in Abhängigkeit der Plasmatemperatur und der Position im Ionisator

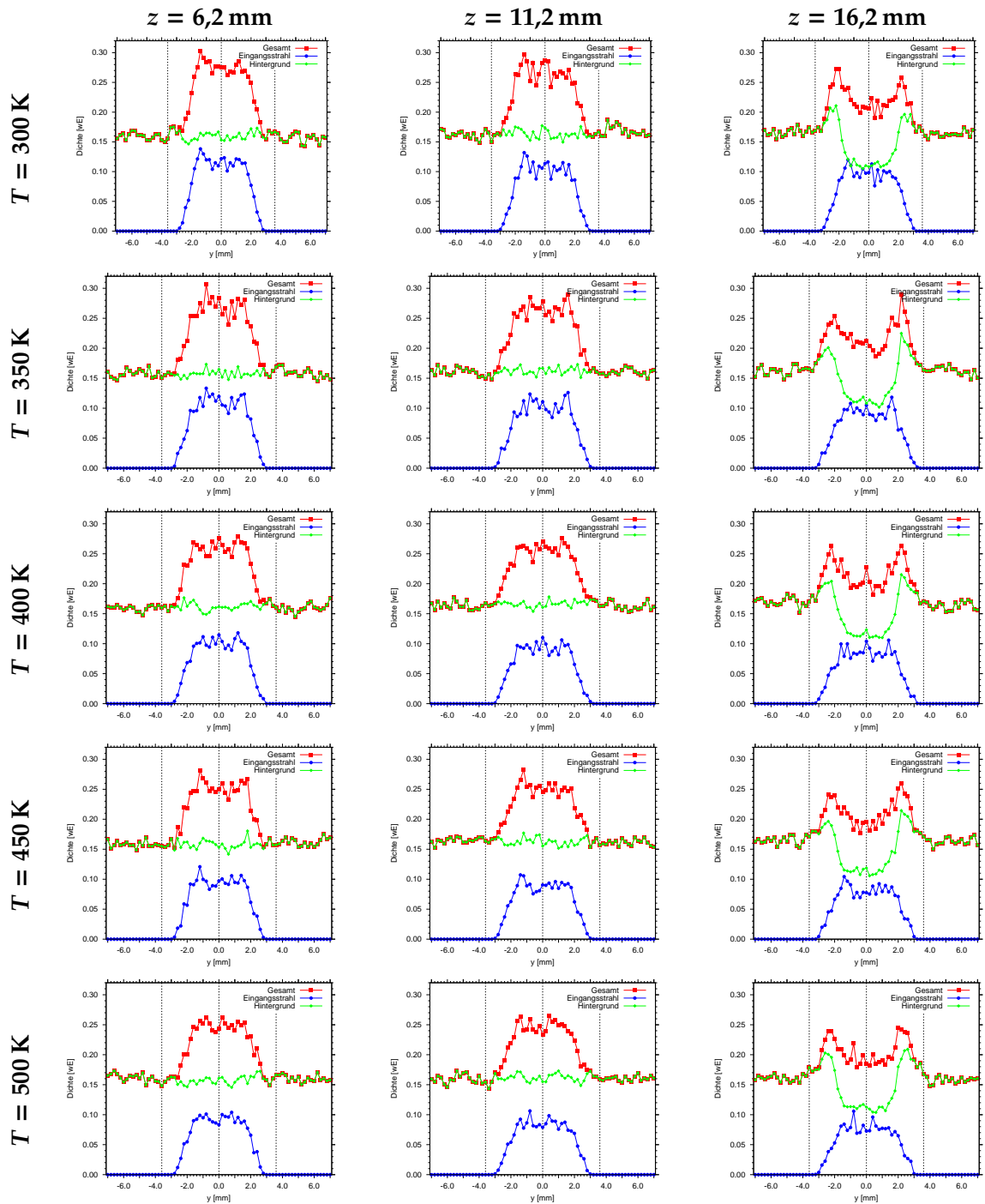


Abbildung 18: Dichteprofile in der y -Ebene bei $x = 0\text{ mm}$, $n = 1$ und veränderlicher Plasmatemperatur

In Abbildung 16 ist das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in der y - z -Ebene bei veränderlicher Plasmatemperatur wiedergegeben, in Abbildung 18 die Dichteprofile in der y -Ebene. Erkennbar ist, wenn man S/BG über der Plasmatemperatur aufträgt (Abbildung 17), daß das S/BG -Verhältnis bei steigender Temperatur sinkt, wobei am Ionisator die Temperatur einen leicht höheren Effekt auf das S/BG -Verhältnis aufweist als im Ionisatorinneren.

5.5 Reflektionshäufigkeit

In den drei vorherigen Abschnitten wurde jeweils die Dichteverteilungen und deren Änderung bei verschiedenen Parametern betrachtet. Direkt mit der Hintergrunddichte sollte die Häufigkeitsverteilung der Reflektionen korrelieren. Eine höhere Anzahl an Reflektionen der Teilchen im Ionisator sollte sich in einer Erhöhung der Hintergrunddichte zeigen. Aus der Diskussion im vorherigen Abschnitt über die Veränderungen bei unterschiedlichen Plasmatemperaturen kann ein Einfluß dieses Parameters auf die Reflektionshäufigkeitsverteilung ausgeschlossen werden, da dieser Parameter nur die Teilchendichte des Eingangsstrahls beeinflusst. Trägt man die Teilchenanzahl gegenüber der Reflektionsanzahl auf, die die Teilchen bei ihrem Weg im Ionisator erfahren haben, so erkennt man einen exponentiellen Abfall. Bei einer Modellierung der Verteilungsfunktion über

$$p_R(N) \sim \exp \{-N/N_0\} \quad (19)$$

kann in den Abbildungen 19 (a)-(e) der Verlauf für Teilchen, die nur eine kleine Anzahl an Reflektionen im Ionisator benötigen um diesen zu verlassen, gut angenähert werden. Hierbei wird die Anzahl der Reflektionen von den Teilchen, die ohne oder nur mit einer Reflektion den Ionisator verlassen, nicht berücksichtigt, da diese von dem Teil der Geometrie des Ionisators dominiert wird, der vom Eingangsstrahl gesehen wird. Charakteristisch für den geometrischen Aufbau und die verwendete Kosinus-Verteilungsfunktion sollte die mittlere Reflektionszahl N_0 sein. Die Abbildungen 19 (a)-(e) zeigen, daß bei steigendem Exponenten der Kosinus-Verteilung die mittlere Reflektionszahl sinkt, und somit auch die Verweilzeit der Teilchen im Ionisator, was zu der beobachteten Verringerung der Hintergrunddichte bei steigendem n führt.

Die mittlere Verweilzeit τ_{res} von Teilchen in einem Vakuumsystem ist proportional zum Verhältnis von Volumen V zur Pumpleistung P , Gleichung (20a), wobei die Pumpleistung über die mittlere Geschwindigkeit $\bar{v}(T)$ der Teilchen und die Flächen der Pumpöffnungen A gegeben ist, Gleichung (20b).

$$\tau_{res} \sim \frac{V}{P} = \frac{4 \cdot V}{\bar{v}(T) \cdot A} \quad (20a) \quad P = \frac{1}{4} \cdot \bar{v}(T) \cdot A \quad (20b) \quad \bar{v}(T) = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (20c)$$

Die Flächen der Pumpöffnungen sind für den Ionisator das *Centre Hole* und *Source End Hole*, unter Berücksichtigung der Transmittivität des *Centre Hole* ($t = 0,9$). Aus der Maxwell-Boltzmann-Verteilung, Gleichung (16), läßt sich die mittlere Geschwindigkeit der Teilchen mittels Gleichung (20c) ermitteln.

Aus der mittleren Verweilzeit und der charakteristischen Länge L^{ch} des Systems, hier der Durchmesser des *Source Housing*, kann die mittlere Reflektionsanzahl mittels Gleichung (21) abgeschätzt werden.

$$\tau_{res} = \frac{N_0 \cdot L^{ch}}{\bar{v}(T)} \Rightarrow N_0 = \tau_{res} \bar{v}(T) \frac{1}{2r_{Ionisator}} = \frac{2V_{Ionisator}}{A \cdot r_{Ionisator}} = \frac{2L_{Ionisator} \cdot r_{Ionisator}}{0,9r_1^2 + r_2^2} = 20 \quad (21)$$

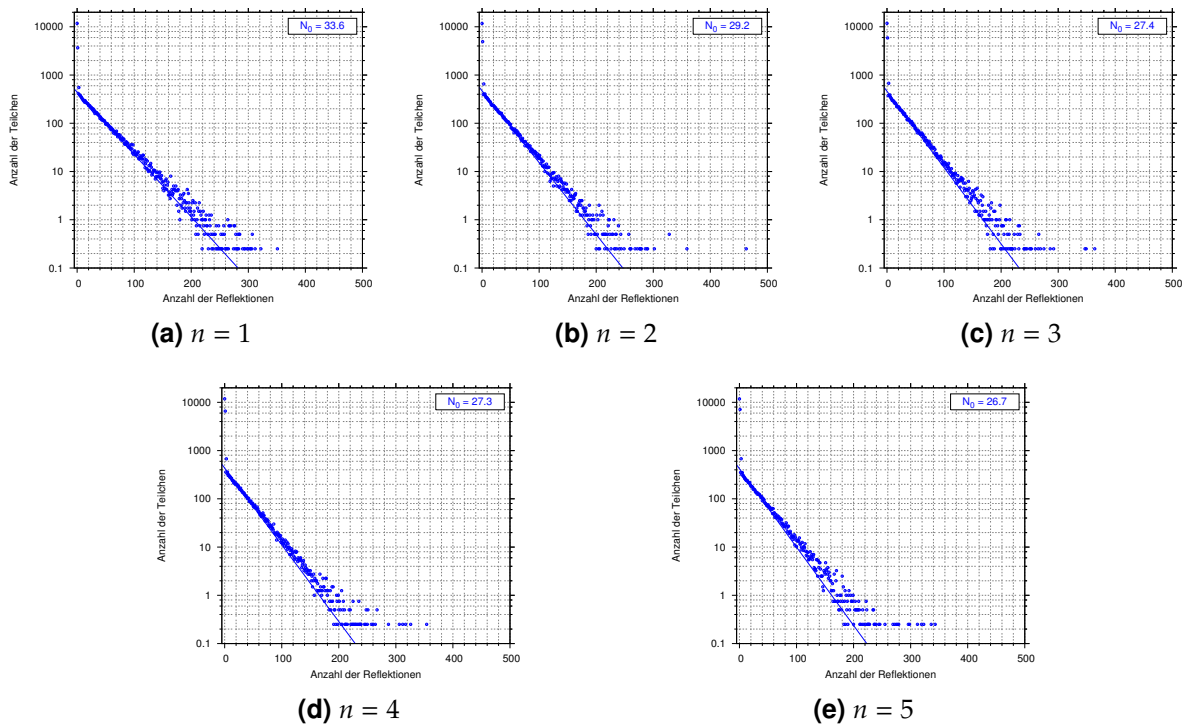


Abbildung 19: Häufigkeitsverteilung der Teilchen, die bei ihrem Weg durch den Ionisator eine bestimmte Anzahl an Reflektionen erfahren, bevor diese den Ionisator verlassen können

Für $n = 1$ liegt die mittlere Reflektionsanzahl etwa 35% niedriger als diejenige aus der Simulation. Dies kann dadurch erklärt werden, da in Gleichung (21) eine idealisierte Geometrie angenommen wurde und diese in dem Simulationsaufbau durch das *Source Cage* komplexer ist. Das verwendete Modell (vgl. Abschnitt 3) kann daher als realistisch angesehen werden.

5.6 Veränderung der Geometrie

Aufgrund der Erkenntnisse aus den vorherigen Abschnitten wurde die Geometrie des Ionisators in der Weise verändert, die für die Verbesserung des Verhältnisses von Eigangsstrahl zur Hintergrunddicke als wesentlicher Einflussfaktor erachtet worden waren. Wie in den Abschnitten 5.2 und 5.3 gezeigt, ist die Hintergrunddicke bei kleinen Exponenten der Kosinus-Verteilung ($n = 1$ oder $n = 2$) über das Ionisatorvolumen größtenteils konstant. Nach (Scharfenort, 2007) ist dieser Exponentenbereich auch der für die Reflektion von Teilchen an Oberflächen am häufigsten anzutreffende Bereich, die nachfolgenden Simulationen wurden daher nur für $n = 1$ durchgeführt.

Um die Reflektionshäufigkeit innerhalb des Ionisators zu reduzieren – und damit die Hintergrunddicke – erscheint eine Erhöhung der Austrittsmöglichkeiten der Teilchen aus dem Ionisator als probates Mittel. Hierbei ist eine Erhöhung des Verhältnisses von Eingangsstrahl zur Hintergrunddicke zu erwarten. Eine Vergrößerung der Durchlässigkeit des *Centre Holes* würde aufgrund der bereits bestehenden Durchlässigkeit (der Transmissionskoeffizient beträgt bereits 0,9) keine wesentliche Verbesserung bringen. Die größte Oberfläche bietet der Mantel des *Source Housing* (vgl. Abbildung 7b), die Ersetzung des festen Mantels durch ein Gitter würde eine Reduzierung der Hintergrunddicke am besten ermöglichen. Im Folgenden werden die Effekte auf die Hintergrunddicke dargestellt, wenn der feste Mantel (Transmissionskoeffizient $t = 0,0$) durch Gitter mit unterschiedlichen Transmissionskoeffizienten ($t = 0,2 \dots 0,8$) ersetzt wird. Alle Simulationen wurden dabei mit einer Plasmatemperatur von $T = 300$ K und $n = 1$ durchgeführt, Temperatur der Ionisatorwände, Teilchenzahl und Anzahl der gemittelten Simulationen wurden zu den vorherigen Simulationen nicht verändert.

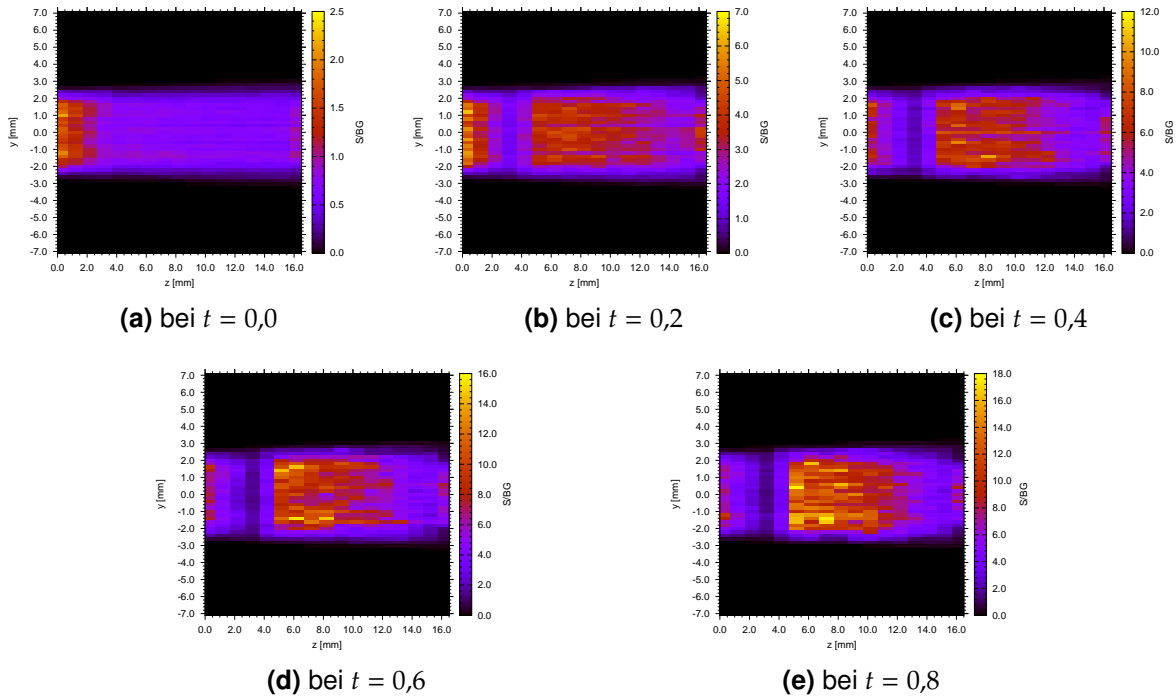


Abbildung 20: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in der y - z -Ebene bei $x = 0$ mm, $T = 300$ K, $n = 1$ und veränderlicher Durchlässigkeit t des *Source Housing*-Mantels. Beachten Sie die unterschiedlichen Skalierungen der S/BG -Farbskala.

Deutlich zu erkennen ist in Abbildung 20 die starke Zunahme des S/BG -Verhältnisses bei Vergrößerung der Transmittivität des *Source Housing*-Mantels. Insbesondere in der Ionisatormitte steigt dieses rapide an – die Steigerung in dem, für die Ionisation aufgrund der Extraktionseffizienz der ionisierten Teilchen, wichtigen Bereich am Ende des Ionisators fällt geringer aus. Dies ist begründbar durch die Teilchen des Eingangsstrahls, die das *Source End Hole* verfehlen und am Ionisatorende reflektiert werden.

Aus den Dichteprofilen (Abbildung 23) wird ersichtlich, daß bei steigender Transmittivität die Hintergrunddichte rapide sinkt und bei hohen Transmittivitäten innerhalb des Ionisators praktisch keinen Einfluß auf die Gesamtdichte ausübt – einzig am Ionisatorende erhöht die Hintergrunddichte die Gesamtdichte noch erkennbar. Wesentliche Verbesserung des Verhältnisses von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte um Faktor 3 am Ionisatorende und Faktor 4,5-6 im Innern des Ionisators sind bereits bei der Ersetzung des festen *Source Housing*-Mantels durch ein Gitter mit 20% Transmittivität zu beobachten, wie Abbildung 21 zeigt – die Verbesserung bei weiteren Erhöhungen der Transmittivität fallen anschließend geringer aus.

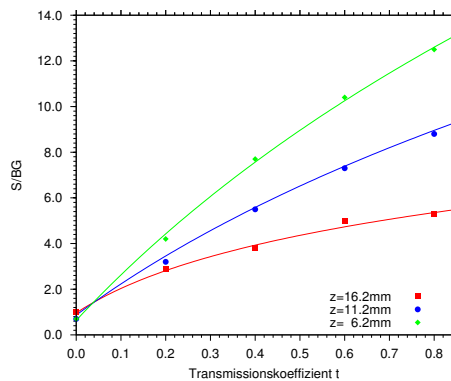


Abbildung 21: Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG in Abhängigkeit der Transmittivität t des *Source Housing*-Mantels und der Position im Ionisator

Die wesentlich höheren Verbesserungen beim S/BG-Verhältnis innerhalb des Ionisators bei Erhöhung der Transmittivität ist durch die immer geringere Anzahl an Reflektionen erklärbar. Dies trifft auf das Ionisatorende nicht in dem selben Ausmaße zu, da die Teilchen aus dem Eingangsstrahl, die das *Source End Hole* verfehlen, am Ionisatorende zwangsläufig reflektiert werden. Die Hintergrunddichte am Ionisatorende wird somit nur durch mehrfach reflektierte Teilchen gesenkt, der Anteil zur Hintergrunddichte von der ersten Reflektion bleibt jedoch unverändert.

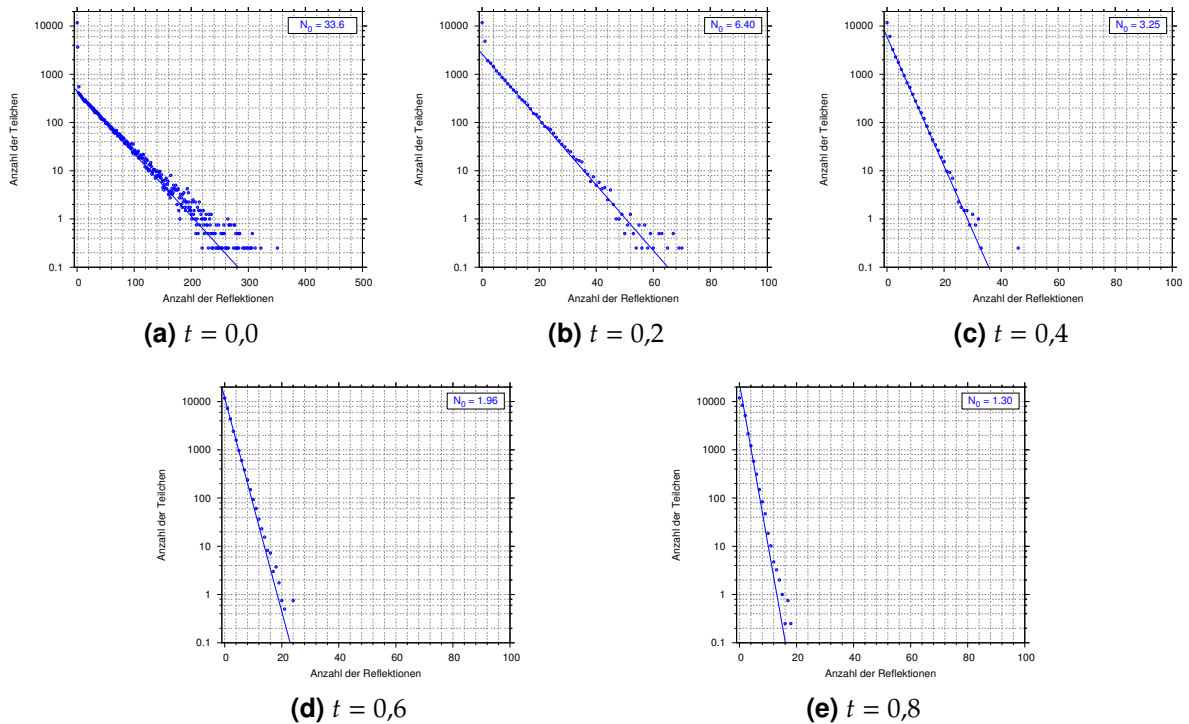


Abbildung 22: Häufigkeitsverteilung der Teilchen, die bei ihrem Weg durch den Ionisator eine bestimmte Reflektionsanzahl erfahren, bei veränderlichen Transmissionskoeffizienten des *Source Housing*-Mantels. Beachten Sie die unterschiedliche Skalierung der Abszisse bei (a) sowie (b)-(e).

Die Veränderungen beim Einsatz eines Gitters statt eines festen *Source Housing*-Mantels zeigt sich auch in der Reflektionsanzahlverteilung, siehe Abbildung 22. Bereits bei einer Transmittivität von $t = 0,2$ sind Teilchen, die über 50 Reflektionen im Ionisator benötigen, um diesen zu verlassen, kaum noch vorhanden – im Gegensatz zu 250 Reflektionen im Aufbau mit festem *Source Housing*-Mantel – und sinkt bei größeren Transmissionskoeffizienten weiter. Daß bereits das Einbringen einer kleinen Transmittivität des *Source Housing*-Mantels den größten Effekt bringt zeigt auch, wenn wie in Abschnitt 5.5 für die Häufigkeitsverteilung eine Exponentialfunktion angesetzt wird und die Änderung der mittleren Reflektionsanzahl N_0 betrachtet wird.

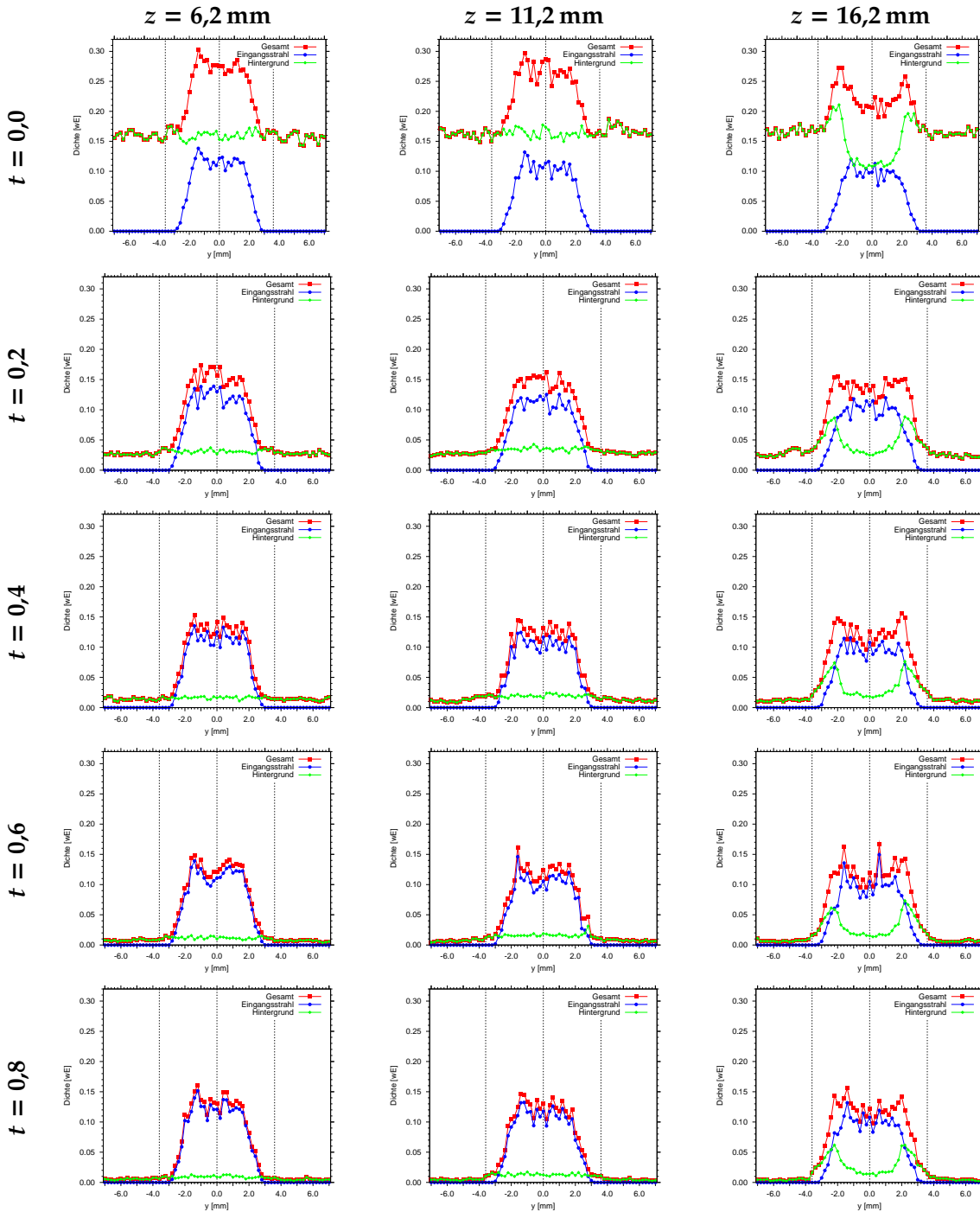


Abbildung 23: Dichteprofile in der y -Ebene bei $x = 0$ mm, $T = 300$ K, $n = 1$ und veränderliche Durchlässigkeit t des *Source Housing*-Mantels.

6. Fazit

Mit der Simulation der Dichteverteilung in einem Ionisator konnte gezeigt werden, daß die Ionisatorgeometrie einen wesentlichen Beitrag zur Hintergrunddichte von inreaktiven Spezies liefert. Abhängig von der Geometrie kann der zusätzliche Beitrag zur Hintergrunddichte, der durch Reflektionen an den Ionisatorwänden herrührt, genauso groß sein wie die Dichte des Eingangsstrahls und ist für die Signalkalibrierung bei quantitativen Messungen nicht vernachlässigbar.

Bei der Annahme eines Exponenten zwischen $n = 1$ und $n = 2$ für die Kosinus-Verteilung, die die Verteilung der Reflektionsrichtung angibt, und nach Scharfenort (2007) in der Regel in diesem Bereich zu finden ist, konnte mittels Simulation eine signifikante Dichteerhöhung im Ionisator bestätigt werden. Wie bei Benedikt et al. (2005b) konnte eine um etwa Faktor zwei erhöhte Dichte bei inreaktiven C_2H_2 -Teilchen beobachtet werden. Benedikt et al. (2005b) vermuteten in ihrer Arbeit bereits, daß die Diskrepanz zwischen gemessenen und erwarteten Dichten der inreaktiven C_2H_2 -Teilchen in Ar/ C_2H_2 -Plasmen durch systematische Fehler bei der Signalkalibrierung hervorgerufen werden. Diese These konnte mit dieser Arbeit bestätigt werden und als hauptsächliche Ursache für den beobachteten Effekt die Reflektion der inreaktiven Teilchen an den Ionisatorwänden identifiziert werden. Weitere zusätzliche Ursachen, wie beispielsweise Unterschiede zwischen den Bedingungen bei an- und ausgeschaltetem Plasma können nicht ausgeschlossen werden, der Einfluß auf die gemessenen Dichten kann jedoch, gegenüber dem hier untersuchten Effekt, als gering angesehen werden.

Änderungen der variablen Parameter Plasmatemperatur und Exponent der Kosinus-Verteilung zeigten, das diese das Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte S/BG nur in geringen Maßen verändern. Der Einfluss der Ionisortemperatur und des Extraktionsliniensystems auf die Dichteverteilung wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt, in welcher Weise die Dichteverteilung hierdurch verändert wird, sollte durch weitere Simulationen noch eruiert werden.

Weiterhin konnte gezeigt werden, daß durch Veränderung der Ionisatorgeometrie eine wesentliche Verbesserung des S/BG -Verhältnisses erreicht werden kann. Durch Ersetzung des festen Ionisormantels durch ein Gitter kann bereits bei kleiner Transmittivität des Mantels eine Verbesserungen des S/BG -Verhältnisses um Faktor 3 am Ionisatorende und um Faktor 6 innerhalb des Ionisators erreicht werden. Die Ionisatorgeometrie stellt somit einen wesentlichen Faktor für die Höhe der Hintergrunddichte von inreaktiven Teilchen dar und bietet weitreichendes Optimierungspotenzial zur Verbesserung des S/BG -Verhältnisses. Ein hohes Potenzial bietet hierbei die Erhöhung der offenen Flächen zum umgebenden Vakuumsystem.

Anhang

A. Literaturverzeichnis

- J. Benedikt, S. Agarwal, D. Eijkman, W. Vandamme, M. Creatore, und M. C. M. van de Sanden. Threshold ionization mass spectrometry of reactive species in remote Ar/C₂H₂ expanding thermal plasma. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 23(5):1400–1412, Sep/Oct 2005a. DOI: 10.1116/1.2006138.
- J. Benedikt, D. C. Schram, und M. C. M. van de Sanden. Detailed TIMS Study of Ar/C₂H₂ Expanding Thermal Plasma: Identification of a-C:H Film Growth Precursors. *Journal of Physical Chemistry A*, 109:10153–10167, 2005b. DOI: 10.1021/jp052623a.
- Paul Bratley, Bennet L. Fox, und Linus E. Schrage. *A Guide to Simulation*. Springer-Verlag, 1987. ISBN 0387964673.
- R. Feres und G. Yablonsky. Knudsen’s cosine law and random billiards. *Chemical Engineering Science*, 59(7):1541–1556, 2004. DOI: 10.1016/j.ces.2004.01.016.
- James E. Gentle. *Random Number Generation and Monte Carlo Methods*. Statistics and Computing. Springer-Verlag New York, Zweite Auflage, 2003. ISBN 0287001786.
- John Greenwood. The correct and incorrect generation of a cosine distribution of scattered particles for Monte-Carlo modelling of vacuum systems. *Vacuum*, 67(2):217–222, 2002.
- HIDEN Analytical Ltd. Persönliche Mitteilung, 28.08. 2008.
- Donald Erwin Knuth. *Seminumerical Algorithms*, Volume 2 of *The Art of Computer Programming*. Addison-Wesley, Dritte Auflage, 1998. ISBN 0201896842.
- Jens Maurer. Boost Random C++ Library, 2008. URL www.boost.org/doc/libs/1_35_0/libs/random. Boost Version 1.35.0, 29.03.2008.
- William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, und Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Zweite Auflage, 1992. ISBN 0521431085.
- Ulrich Scharfenort. *Schwefelsäure-Grenzflächen im Temperaturbereich von 210 bis 240 K. Experimentelle Entwicklung und Anwendung*. Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2007.
- Harmeet Singh, John W. Coburn, und David B. Graves. Mass spectrometric detection of reactive neutral species: Beam-to-background ratio. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 17:2447–2455, 1999.
- Godehard Sutmann. Monte Carlo und stochastische Dynamik: Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Erzeugung von Zufallszahlen. Vorlesungsskript, Research Centre Jülich (FZJ), John von Neumann Institute for Computing (NIC), Central Institute for Applied Mathematics (ZAM), 2008. URL <http://www.fz-juelich.de/jsc/datapool/page/3842/Zufallszahlen.pdf>. Zugriff am 18.11.2008.
- Achim von Keudell. Einführung in die Plasmaphysik. Vorlesungsskript, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Physik und Astronomie, Institut für Experimentalphysik II, AG Reaktive Plasmen, 2007. URL <http://www.ruhr-uni-bochum.de/reaktiveplasmen/german/lehre/vorlesungen/einfuehrungplasma/skriptPP.pdf>. Version vom 19.02.2007.

B. Abkürzungsverzeichnis

3DNow!	Multimediaerweiterung von AMD, Centaur und Cyrix
CDF	Kumulative Verteilungsfunktion (<i>Cumulative Distribution Function</i>)
DV	Datenverarbeitung
EI	Elektronenstoßionisation
MB-Distribution	Maxwell-Boltzmann Distribution
MC-Simulation	Monte-Carlo Simulation
MS	Massenspektrometer
PRNG	Pseudozufallszahlengenerator (<i>Pseudo Random Number Generator</i>)
QMS	Quadrupol-Massenspektrometer
RND	Zufallszahlendistribution (<i>Random Number Distribution</i>)
RNG	Zufallszahlengenerator (<i>Random Number Generator</i>)
S/BG	Verhältnis von Eingangsstrahl- zur Hintergrunddichte
SEM	Secondary Electron Multiplier
SSE3	Streaming Single Instruction, Multiple Data Extensions 3 (Befehlssatzerweiterung von Intel)
wE	willkürliche Einheit

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die an der Fertigstellung dieser Bachelorarbeit beigetragen haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Achim von Keudell für die Vergabe und Betreuung des interessanten Themas. Bei Herrn Dr. Jan Benedikt für die Betreuung, Engagement und ständige Diskussionsbereitschaft während der gesamten Zeit, in dem diese Arbeit entstand. Bei allen Mitgliedern der AG Reaktive Plasmen, insbesondere Tim Baloniak, Dirk Ellerweg und Thomas Kuschel, für die vielen Gespräche, Diskussionen und Hilfestellungen, die zur Bearbeitung der Themenstellung wichtig waren und für das angenehme Arbeitsklima in der Arbeitsgruppe. Bei Rolf Bandur und Dirk Ellerweg für das Korrekturlesen der Bachelorarbeit. Bei meiner Ehefrau Astrid für das Verständnis, die Unterstützung und die vielen Diskussionen, die mir geholfen haben, für Probleme neue Lösungswege zu finden.