

Simulation des Testaufbaus für eine Getter-Vakuumpumpe

Simulation of the test setup for a getter vacuum pump

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (B. Sc.)

von

Marcel Krause

an der Fakultät für Physik
am Institut für Experimentelle Kernphysik (IEKP)

Erstgutachter: Prof. Dr. Guido Drexlin

Zweitgutachter: Dr. Joachim Wolf

Betreuender Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Stefan Görhardt

Datum der Abgabe: 12. Juli 2013

Ich versichere wahrheitsgemäß, die Arbeit selbstständig angefertigt, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen entnommen wurde.

Karlsruhe, den 12.07.13

.....

(Marcel Krause)

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Das KATRIN-Experiment und die kryogene Pumpstrecke (CPS)	3
2.1. Das KATRIN-Experiment	3
2.1.1. Der β^- -Zerfall des Tritiums	3
2.1.2. Aufbau des KATRIN-Experiments	4
2.2. Die kryogene Pumpstrecke (CPS)	6
2.2.1. CPS1-F: Kryopumpen	6
2.2.2. CPS2-F: Getterpumpen	7
2.3. Der CPS-Testaufbau	7
3. Programme zur Vakuumsimulation im molekularen Strömungsbereich	11
3.1. Theorie der Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich	11
3.2. Molflow+	13
3.3. ProVac3D	15
3.4. Vergleich zwischen ProVac3D und Molflow+	15
4. Quellanalysen mit ProVac3D	17
4.1. Abstrahlung einer kreisrunden Quelle	17
4.1.1. Studie mit dem Testzylinder	18
4.1.2. Studie mit dem Testdom	19
4.2. Abstrahlung diverser Gaseinlassrohre	21
4.3. Optimierung des realitätsnahen Gaseinlasses	24
5. Simulationen zum CPS-Testaufbau	27
5.1. Erstellung des CPS-Testaufbaus	27
5.1.1. Turbomolekularpumpe	28
5.1.2. Getterstreifen	29
5.2. Simulationsreihe ohne Getterkorb	30
5.3. Simulationsreihe mit variierendem Sticking-Koeffizienten	31
6. Auswertung der Ergebnisse	33
6.1. Ergebnisse der Simulationsreihe ohne Getterkorb	33
6.2. Ergebnisse der Simulationsreihe mit variierendem Sticking-Koeffizienten	36
7. Zusammenfassung und Ausblick	41

Literaturverzeichnis	43
Anhang	45
A. Verteilungsstudie	46
B. Simulierter CPS-Testaufbau	47
C. Datenblatt für Wasserstoff	48
D. Datenblatt der Leybold Turbovac SL 300	49
E. Kurzanleitung zu ProVac3D	50
E.1. Allgemeines zur Benutzung	50
E.2. Aufbau der Input-Datei	50
E.2.1. Header	51
E.2.2. Body	51
E.2.3. Footer	54
E.3. Parameter ausgewählter Geometrielemente	54
E.3.1. Flächenelemente	54
E.3.2. Volumenelemente	55
E.4. Aufbau der Output-Datei	56
Danksagungen	59

1. Einleitung

Experimentelle Beobachtungen am β -Zerfall zu Beginn des letzten Jahrhunderts führten erstmals zu der Annahme, die bis dato universell gültigen Energie-Impuls- sowie Spinerhaltungssätze würden verletzt werden. Aus diesem Grund postulierte der Physiker und spätere Nobelpreisträger Wolfgang Pauli im Jahre 1930 eine neue Art von Teilchen, das Neutrino, mit entweder sehr geringer oder nicht vorhandener Masse. Nach Vorhersage sollte es nebst Elektronen und Protonen als Endprodukt des β^- -Zerfalls von Neutronen entstehen und so die Erhaltungssätze der Physik sichern [Pau77]. Nachdem die Existenz der Neutrinos experimentell mehrfach bestätigt wurde, galt die größte Aufmerksamkeit der Untersuchung der kleinen Masse dieser Teilchen.

Als masselos angenommen, treten Neutrinos im heutigen Standardmodell in drei unterschiedlichen *Flavours* auf. Jede Art von Lepton (Elektron, Myon oder Tauon) besitzt ein eigenes Neutrino als Partnerteilchen. Experimentelle Befunde weisen jedoch auf die Existenz von Neutrinooszillationen zwischen den verschiedenen *Flavours* hin [A⁺01], wodurch impliziert wird, dass die Teilchen zwingend eine Masse größer Null besitzen müssen [MNS62]. In zahlreichen Experimenten ist es seitdem gelungen, den möglichen Bereich dieser Masse immer weiter einzuschränken. Zur direkten Bestimmung beispielsweise der Elektron-Neutrino-Masse wird häufig das β -Zerfallsspektrum geeigneter Quellen untersucht. Durch eine Funktionsanalyse im Endpunkt des Spektrums erhält man dann die Neutrinomasse als Parameter [KAT05].

Im **K**arlsruher **T**ritium **N**eutrino Experiment (KATRIN) wird dieses Prinzip anhand des β^- -Zerfalls des Tritiums genutzt. Das Experiment stellt dabei einen Meilenstein in der Neutrinoforschung dar, da es den möglichen Massenbereich mit bisher unerreichter Präzision festlegen soll. Um eine solch hohe Messempfindlichkeit erreichen zu können, ist die verwendete Tritiumquelle fensterlos konzipiert, sodass keine trennenden Flächen zwischen dem Elektronen emittierenden Tritiumgas und dem Detektor bestehen. Anhand eines komplexen Pump- und Transportsystems wird es ermöglicht, die Elektronen adiabatisch, also ohne Energieveränderungen, bis zum Detektor zu führen und gleichzeitig das Tritiumgas abzupumpen. Nur so kann in dem etwa 23 Meter langen und 1,2 Millionen Liter fassenden Tank des Hauptspektrometers ein stabiles Ultrahochvakuum erreicht werden, wodurch eine hohe Energieauflösung garantiert wird [KAT05].

Die kryogene Pumpstrecke (CPS) stellt den letzten Teil von KATRINs Pumpsystem dar und ist direkt vor den Spektrometern platziert. Als ein Teil der CPS dienen Non Evaporable

Getter (NEG) als Notfallpumpen, falls andere Bestandteile der Pumpstrecke ausfallen. Damit diese NEG ihre Pumpwirkung entfalten können, müssen sie zuvor thermisch aktiviert und in regelmäßigen Abständen reaktiviert werden. Da beinahe das gesamte KATRIN-Experiment aus Edelstahlkomponenten besteht, wäre es naheliegend, das notwendige Ausheizen des Aufbaus bei $350\text{ }^{\circ}\text{C}$ mit der Aktivierung der Getter zu verbinden [KAT05]. Allerdings ist die CPS zum Schutz des Eindiffundierens von Tritium in den Edelstahl im Inneren teilweise vergoldet und es existieren Hinweise, dass die Goldschicht bei diesen Temperaturen zerstört wird [Röt13]. Es muss daher festgestellt werden, ob die Aktivierung der NEG-Pumpen bereits bei niedrigeren Temperaturen erfolgen kann.

Um untersuchen zu können, wie sich das Gettermaterial nach unterschiedlichen Ausheiztemperaturen und -zeiten verhält, wurde der CPS-Testaufbau errichtet, welcher einem kleinen Ausschnitt der geplanten CPS nachempfunden ist. An diesem können verschiedene Ausheizphasen getestet und anschließend durch Einlassen von Wasserstoff Druckverteilungen aufgenommen werden [Bac12]. Um anhand der experimentellen Daten auf den Stickingkoeffizienten der NEG, also der Pumpwahrscheinlichkeit, rückschließen zu können, sind zusätzlich Computersimulationen notwendig. Dazu wurde im Zuge dieser Bachelorarbeit der gesamte CPS-Testaufbau als Computermodell erstellt und mit einem bewährten Programm Simulationen im Hochvakuumbereich durchgeführt. Durch Variation des Stickingkoeffizienten der simulierten NEG-Pumpen und einem Vergleich der sich einstellenden Druckverläufe in Simulation und Experiment lässt sich so herausfinden, bis zu welchem Grad das Gettermaterial nach der jeweiligen Ausheizphase aktiviert wurde.

Das nachfolgende Kapitel 2 soll zunächst einen allgemeinen Überblick über das KATRIN-Experiment, die CPS und den errichteten CPS-Testaufbau geben. In Kapitel 3 wird anschließend die Theorie der Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich erläutert und zwei Simulationsprogramme vorgestellt. Das in der Bachelorarbeit primär verwendete Programm wird dann in Kapitel 4 näher auf seine Eigenschaften, insbesondere auf das Emissionsverhalten der Teilchenquellen, untersucht, bevor in Kapitel 5 die eigentliche Implementierung des CPS-Testaufbaus als Computermodell vorgestellt wird. Die aus der Simulation hervorgehenden Ergebnisse werden anschließend in Kapitel 6 ausgewertet und mit experimentell verfügbaren Daten verglichen, um Rückschlüsse auf den Stickingkoeffizienten der NEG zu ziehen.

2. Das KATRIN-Experiment und die kryogene Pumpstrecke (CPS)

Zu Beginn soll ein kurzer Überblick über das wissenschaftliche Umfeld der Bachelorarbeit gegeben werden. Dazu wird zunächst das KATRIN-Experiment sowie die kryogene Pumpstrecke (CPS) mit den Getterpumpen als eines der Hauptbestandteile vorgestellt und anschließend näher auf den CPS-Testaufbau eingegangen.

2.1. Das KATRIN-Experiment

Mit Hilfe des **K**arlsruher **T**ritium **N**eutrino **E**xperiments (KATRIN) soll es ermöglicht werden, die Masse des Neutrinos mit einer Messempfindlichkeit von $0,2 \text{ eV}/c^2$ (90% C.L.) zu bestimmen. Dadurch ergibt sich im Vergleich zu bisherigen Experimenten zur direkten Bestimmung der Neutrinomasse eine Verbesserung um eine ganze Größenordnung [KAT05]. KATRIN macht sich zur Bestimmung der Neutrinomasse den β^- -Zerfall des Tritiums zunutze. Im Folgenden soll kurz auf diesen eingegangen werden, bevor das eigentliche Experiment beschrieben wird.

2.1.1. Der β^- -Zerfall des Tritiums

Tritium ${}^3\text{H}$ ist ein radioaktives Isotop des Wasserstoffs mit einer Halbwertszeit von 12,3 Jahren, welches in dem β^- -Prozess



in den Tochterkern ${}^3\text{He}^+$, ein Elektron e^- und ein Elektron-Antineutrino $\bar{\nu}_e$ zerfällt [KAT05]. Die bei dem Prozess freiwerdende Energie verteilt sich nach einer gewissen Wahrscheinlichkeitsverteilung im Wesentlichen auf letztere beiden Komponenten, wodurch sich das in Abbildung 2.1 dargestellte Zerfallsspektrum des Elektrons ergibt [Fer34] [Per00].

Aufgrund der geringen Halbwertszeit und der niedrigen Endpunktenergie von etwa 18,6 keV eignet sich Tritium in besonderem Maße zur direkten Neutrinomassebestimmung. Nimmt man aufgrund von Neutrinooszillationen an, dass Neutrinos eine von Null verschiedene, geringe Masse haben, so verschiebt sich der Endpunkt des Spektrums 2.1 im Vergleich zu dem Fall, dass die Teilchen masselos wären. Durch eine genaue Analyse dieses Endbereichs lässt sich somit die Neutrinomasse als Fitparameter bestimmen [KAT05].

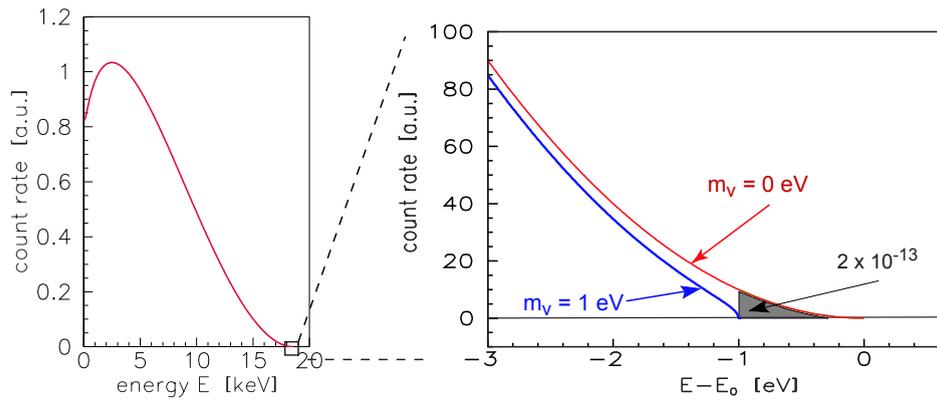


Abbildung 2.1.: **Energiespektrum der Elektronen beim Tritium- β^- -Zerfall** [KAT05]. Abgebildet ist links das vollständige Spektrum, rechts nur der Bereich um die Endpunktenergie. Für masselose Neutrinos oder solche mit nichtverschwindender Masse (in der Abbildung mit $m_\nu = 1 \text{ eV}/c^2$) weichen die Endpunkte voneinander ab.

2.1.2. Aufbau des KATRIN-Experiments

Das KATRIN-Experiment lässt sich nach Abbildung 2.2 in vier Abschnitte aufteilen: Tritiumquelle, Transport- und Pumpsystem, Vor- und Hauptspektrometer sowie Detektor. Auf die einzelnen Komponenten wird im Folgenden kurz eingegangen. Zusammen bilden sie einen Aufbau mit einer Gesamtlänge von etwa 70 m [KAT05].

Tritiumquelle

KATRIN verwendet gasförmiges, molekulares Tritium hoher isotopischer Reinheit. Die Quelle ist eine sogenannte Windowless Gaseous Tritium Source (WGTS), was bedeutet, dass man im Experiment keinerlei abschirmende Fenster zwischen einzelnen Komponenten vorliegen hat. Dadurch erfahren die im Prozess (2.1) freiwerdenden Elektronen keinen Energieverlust durch Stöße, sodass man im Detektor Aussagen über die tatsächlichen Endpunktenergien treffen kann. Die Konzeption als WGTS hat aber den Nachteil, dass Tritium in die Spektrometer strömen könnte. Die zweite Komponente dient daher dem Ausfiltern von Tritium aus dem System [KAT05].

Transport- und Pumpstrecke

In der Transport- und Pumpstrecke werden die Elektronen adiabatisch zum Vorspektrometer geführt, wohingegen das Tritium bis dorthin möglichst vollständig abgepumpt werden muss. Zunächst wird in der differentiellen Pumpstrecke (DPS), bestehend aus mehreren Turbomolekularpumpen, der Tritiumanteil um einen Faktor 10^7 verringert. In der kryogenen Pumpstrecke (CPS) wird das verbliebene Tritium dann durch Kryosorption an einer 3 K kalten Schneesicht aus Argon gebunden oder durch eine Getterpumpe adsorbiert. Beide Pumpstrecken sind als gewinkelte Rohre realisiert, damit das Gas häufig an den Wänden stößt und besser abgepumpt wird. Die Elektronen hingegen werden durch Magnetfelder adiabatisch durch die Rohre geführt, damit sie keine Stöße mit den Wänden erfahren [KAT05].

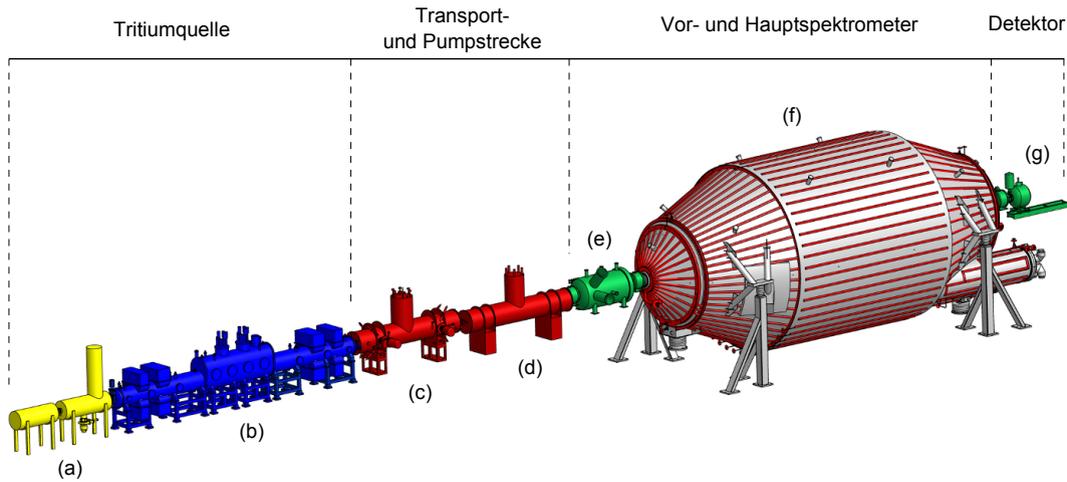


Abbildung 2.2.: **Aufbau des KATRIN-Experiments** [Leu07]. Der Aufbau lässt sich in vier Abschnitte gliedern. Die einzelnen Bestandteile sind dabei: **(a)** Calibration and Monitoring System (CMS), **(b)** Windowless Gaseous Tritium Source (WGTS), **(c)** Differentielle Pumpstrecke (DPS), **(d)** Kryogene Pumpstrecke (CPS), **(e)** Vorspektrometer, **(f)** Hauptspektrometer, **(g)** Detektor.

Vor- und Hauptspektrometer

Durch die vorgeschalteten Pumpstrecken und die großen, integrierten Getterpumpen liegt im Vor- sowie Hauptspektrometer ein Ultrahochvakuum unter 10^{-11} mbar vor, sodass weitere Ionisationen durch die eintretenden Elektronen minimiert werden. Beide Spektrometer arbeiten als sogenannte MAC-E-Filter, welche bereits bei Experimenten in Mainz und Troizk erfolgreich zum Einsatz kamen [P⁺92] [L⁺85a] [L⁺85b]. Dabei wird mit Hilfe von zwei supraleitenden Solenoiden ein Magnetfeld erzeugt, dessen Feldlinien der Form des Spektrometers folgen. Durch im Innern befestigte Elektroden liegt zusätzlich ein radialsymmetrisches elektrisches Feld an, welches das Magnetfeld einhüllt. Orthogonal zur Strahlrichtung findet sich in der zentralen Ebene des Spektrometers das größte elektrische Potential und gleichzeitig das schwächste Magnetfeld vor [KAT05].

Die Elektronen werden auf Schraubenbahnen entlang der Magnetfeldlinien durch das Spektrometer geführt. Eine Abschwächung des Magnetfelds zum Zentrum hin bewirkt aufgrund der Erhaltung des magnetischen Moments eine Umwandlung der transversalen Impulsanteile in einen vollständig longitudinalen Anteil. Durch die Regulierung des elektrischen Potentials im Zentrum wirkt das Spektrometer wie ein Hochpassfilter. Mit dem Vorspektrometer lassen sich niederenergetische Elektronen herausfiltern und im größer dimensionierten Hauptspektrometer werden die verbliebenen Elektronen nahe der Endpunktenergie mit noch viel höherer Empfindlichkeit aufgelöst [KAT05].

Detektor

Der Detektor bildet den hintersten Teil des Experiments. An ihm werden die einfallenden höchstenergetischen β^- -Zerfallselektronen mit Hilfe eines *Arrays* von 148 Silizium-PIN¹-Dioden registriert [Gör10].

¹Positive Intrinsic Negative

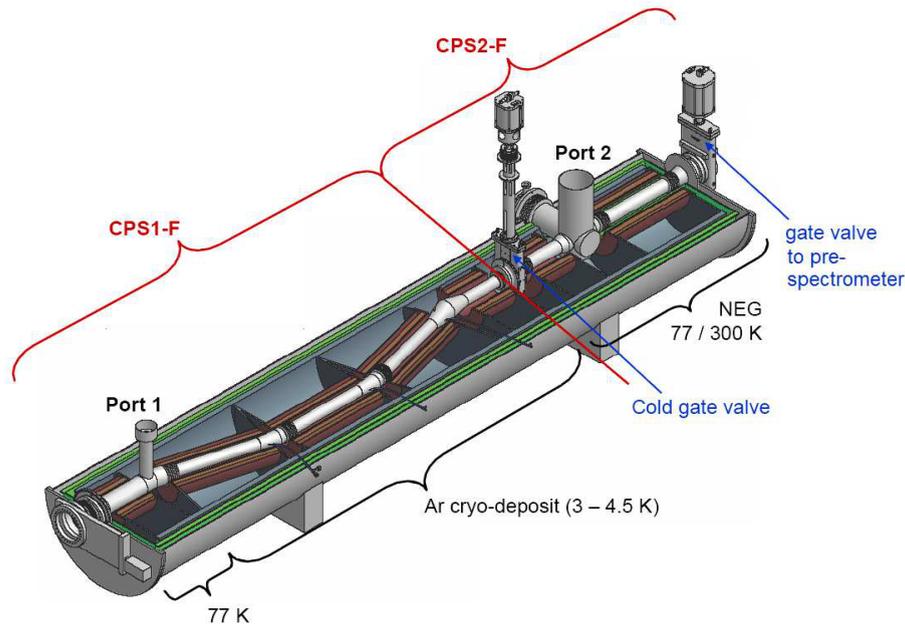


Abbildung 2.3.: **Aufbau der kryogenen Pumpstrecke (CPS) [KAT08]**. Die CPS besteht aus einem Abschnitt CPS1-F mit Kryopumpen, in welchen Tritium auf einer 3 K kalten Schicht aus Argonschnee adsorbiert wird, sowie einem Abschnitt CPS2-F mit Getterpumpen, welche durch ihre guten Adsorptionseigenschaften ebenfalls Tritium aus dem Rohr pumpen können.

2.2. Die kryogene Pumpstrecke (CPS)

Die kryogene Pumpstrecke (CPS) ist Teil der Transport- und Pumpstrecke. Zusammen mit der differentiellen Pumpstrecke (DPS) reduziert sie den Druck derart, dass in dem nachfolgenden Spektrometerbereich ein Ultrahochvakuum in Druckbereichen weit unter 10^{-11} mbar vorliegt. Die CPS und die DPS sind relativ baugleich, sie bestehen beide aus gewinkelten Rohren, an denen die neutralen Tritiummoleküle möglichst häufig stoßen sollen, damit sie besser adsorbiert werden können. Die Elektronen hingegen werden mit Hilfe von starken Magnetfeldern adiabatisch durch die Windungen der Pumpstrecke geführt. Abbildung 2.3 zeigt den gesamten Aufbau der CPS, welche wiederum aus zwei einzelnen Pumpabschnitten besteht, auf die nachfolgend eingegangen wird [KAT05].

2.2.1. CPS1-F: Kryopumpen

Der erste, größere Teil der CPS besteht aus einem System von Kryopumpen. Die Rohre der CPS1-F werden mit Hilfe von flüssigem Helium auf einer Temperatur von 4,5 K gehalten, wodurch Argon als eine Art Schneesicht auf der Innenseite kondensieren kann. Tritiummoleküle werden dann bei 3 K durch van-der-Waals-Kräfte auf der Schneesicht gebunden. Da die Argonschicht kontinuierlich mit Tritium überzogen wird, nimmt im Laufe der Zeit die Pumpleistung der Kryopumpe stark ab [Jou08]. Ungefähr alle 60 Tage wird deshalb die Argonschicht erneuert, indem die CPS ausgeheizt wird [KAT05].

2.2.2. CPS2-F: Getterpumpen

Der kleinere Teil der CPS, die CPS2-F, besteht im Wesentlichen nur aus einem Rohr mit darin installierten Getterpumpen. Sie bildet den letzten Teil der Pumpstrecke vor den Spektrometern und dient bis zum Schließen des Ventils am Vorspektrometer als Notfallpumpe, falls andere Teile der Pumpstrecke oder die Kühlung der CPS1-F ausfallen. So wird verhindert, dass die Spektrometer versehentlich mit Tritium geflutet werden [KAT05].

Das Hauptrohr der CPS2-F ist innenseitig mit Gold beschichtet, um eine Diffusion von Tritium in den Edelstahl zu verhindern [Stu07]. Die eigentliche Saugleistung wird in diesem Abschnitt durch sogenannte Getterpumpen erbracht. Dabei handelt es sich um Sorptionspumpen, welche Tritium hauptsächlich durch Chemisorption an ihre Oberfläche binden. Das gebundene Gas folgt dann dem Konzentrationsgradienten und diffundiert durch das gesamte Gettervolumen, wodurch die Oberfläche nur langsam gesättigt wird. Getterpumpen besitzen idealerweise große Oberflächen bei kompakter Bauweise, damit eine hohe Anzahl an Gasmolekülen gebunden werden kann [Jou08].

In der CPS2-F finden NEG²-Pumpen vom Typ St 707 des Herstellers SAES Getters Anwendung [KAT05]. Diese bestehen aus Metallpulver-Gemischen, welche auf flexible Streifen gepresst werden, und zeichnen sich durch hohe Porositäten aus. Dadurch steht eine große Oberfläche für chemische Reaktionen mit Tritium zur Verfügung, sodass es mit Saugleistungen von bis zu 1 000 $l/s\cdot m$ im Getter gebunden wird [BC95].

Im Betrieb nimmt die Tritiumkonzentration im Getter zu, bis es gesättigt ist. Außerdem sorgen irreversible Reaktionen von schwereren Restgasmolekülen mit dem Getter zur Ausbildung von Verbindungen, die bei Raumtemperatur kaum in das Volumen diffundieren können, weshalb die Oberfläche passiviert wird. Aus diesen Gründen müssen Getterpumpen durch Ausheizen regelmäßig reaktiviert werden. Die irreversiblen Bindungen diffundieren bei großer Hitze in das Volumen und im Getter gebundenes Tritium gast aus, sodass es beispielsweise durch eine Turbomolekularpumpe abgesaugt werden kann [Jou08]. Der Ausheizprozess erfolgt nach Herstellerangaben [SAE94] für 45 min bei 450 °C, es wurde allerdings gezeigt, dass auch ein Ausheizen bei 350 °C für 24 h zur vollständigen Reaktivierung der St 707 führt [BC95].

Der Stickingkoeffizient α wird für NEG-Pumpen analog wie für jede andere Oberfläche als Quotient aus adsorbierten zu auftreffenden Gasteilchen definiert. Weit unterhalb der Sättigungsgrenze des Getters ist er für Tritium im laufenden Betrieb praktisch zeitlich konstant, jedoch stark abhängig von der Aktivierungstemperatur und -dauer beim Ausheizen [Jou08]. Für die St 707 wurde der Stickingkoeffizient nach einer Ausheizphase bei 350 °C für 24 h bereits bestimmt [Day07].

2.3. Der CPS-Testaufbau

Die Aktivierung von Getterpumpen erfolgt erst bei vergleichsweise hohen Temperaturen über 300 °C. Die CPS2-F ist jedoch von innen vergoldet, weshalb diese hohen Temperaturen aufgrund der Zerstörung der Goldschicht vermieden werden sollten. Mit Hilfe des

²Non Evaporable Getter

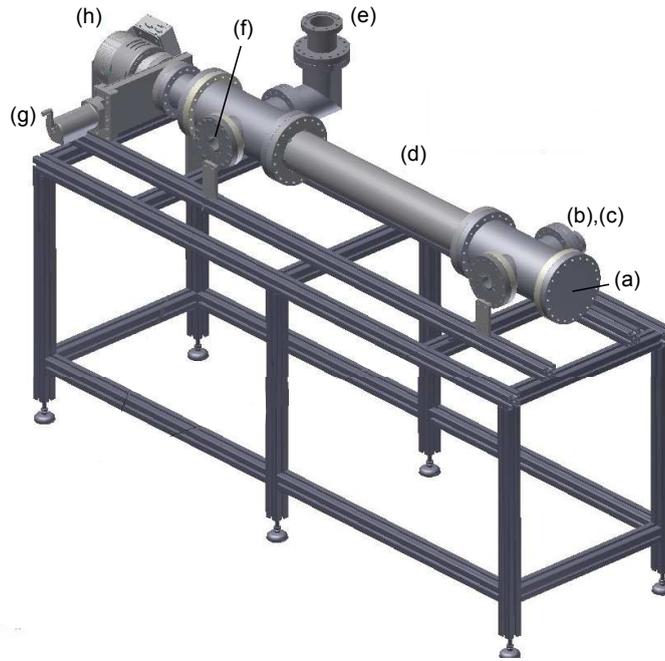


Abbildung 2.4.: **CAD-Modell des CPS-Testaufbaus [Bac12]**. Die Apparatur ist in der Realität beinahe vollständig mit einer wärmeisolierenden Schicht verkleidet, um energiesparendes Aufheizen zu ermöglichen. Der Aufbau besteht aus verschiedenen Komponenten: (a) Verbindung zum Gaseinlasssystem, (b) Druckmessröhren PI und (c) PII, (d) Goldbeschichtetes Rohr mit Halterungsschiene und Getterkörben, (e) Massenspektrometer, (f) Druckmessröhre PIII, (g) Handventil, (h) Turbomolekularpumpe.

auf dem Gelände des Campus Nord errichteten CPS-Testaufbaus lässt sich untersuchen, welche Ausheiztemperaturen und -dauern notwendig sind, um die Getterpumpen möglichst vollständig zu aktivieren, ohne dabei die Goldbeschichtung zu beschädigen [Bac12]. Nachfolgend soll daher ein Überblick über die Hauptbestandteile des Aufbaus gegeben werden.

Bestandteile des CPS-Testaufbaus

Der in Abbildung 2.4 als CAD-Modell dargestellte CPS-Testaufbau besteht aus einem 755 mm langen, goldbeschichteten Edelstahlrohr mit 112 mm Innendurchmesser, welches der Pumpstrecke CPS2-F nachempfunden ist. Auf der Innenseite befinden sich Schienen, um bis zu vier zylinderförmige, mit NEG-Streifen bestückte Körbe aufnehmen zu können. Beidseitig ist das Rohr an Vakuum-Viererkreuzen aus Edelstahl angeschlossen, welche jeweils zwei seitlich liegende Flansche zum Anschluss von Messgeräten besitzen. Ein dünnes, zu einem Gaseinlasssystem führendes Rohr bildet das eine Ende des Testaufbaus, ein durch ein Ventil verschließbarer Zugang zu einer Turbomolekularpumpe das andere [Bac12].

Da aus sicherheitstechnischen Gründen im CPS-Testaufbau kein Tritium eingesetzt werden darf, findet stattdessen Wasserstoff in den Experimenten Verwendung. Die beiden Isotope verhalten sich chemisch weitestgehend identisch, sodass sich gleiche Adsorptionseigenschaften in NEG-Pumpen ergeben. Experimentelle Resultate für Wasserstoff im Tes-

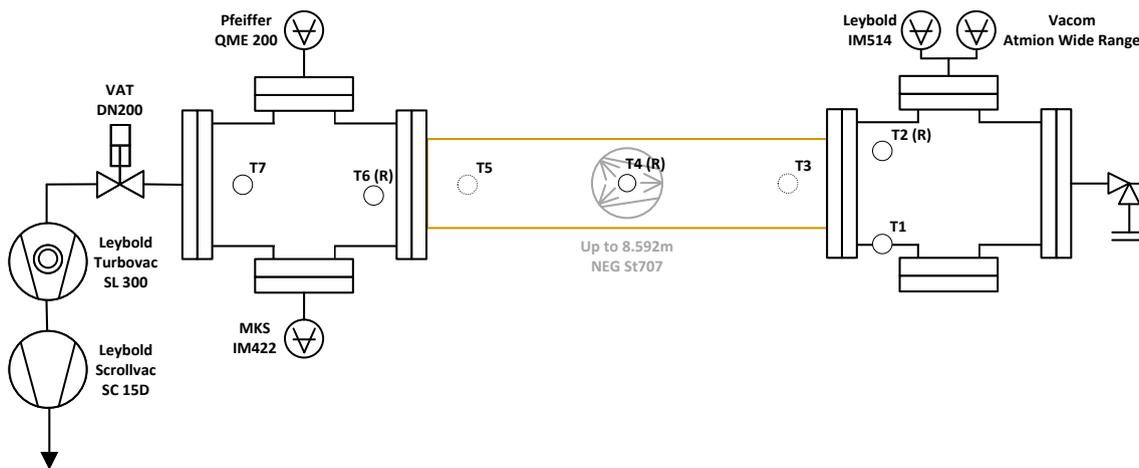


Abbildung 2.5.: **Flussdiagramm des CPS-Testaufbaus [KR13]**. Der eigentliche CPS-Testaufbau besteht aus dem goldbeschichteten Rohr mit den Getterpumpen und den zwei angrenzenden Viererkreuzen. Zu erkennen sind die Druckmessröhren IM514 (PI), Atmion (PII) und IM422 (PIII) sowie das Messenspektrometer QME. Die mit T1, T2, etc. durchnummerierten Punkte kennzeichnen die Positionen der Thermowiderstände, welche die Temperatur des Aufbaus messen. Die Temperaturregelung der Heizbänder erfolgt durch die mit (R) markierten Widerstände. Der Gaseinlass auf der rechten Seite ist nur angedeutet, auf der linken Seite befinden sich die Vorpumpe sowie Turbomolekularpumpe und das Handventil.

taufbau können auf Tritium in der CPS übertragen werden. Dies gilt insbesondere für die Aktivierungstemperatur und Saugleistung des Gettermaterials³. Wasserstoff wird über ein Gaseinlasssystem in den Testaufbau geleitet, mit welchem sich der Gasfluss präzise regeln lässt. Nähere Informationen dazu finden sich in der parallel laufenden Bachelorarbeit [Röt13].

Abbildung 2.5 zeigt das Flussdiagramm des CPS-Testaufbaus, worin die einzelnen technischen Bestandteile erkennbar sind. Mit der Vorpumpe Scrollvac SC 15D der Firma Oerlikon Leybold Vacuum GmbH wird zunächst ein Vorvakuum von 0,016 mbar erreicht und anschließend mit der Turbomolekularpumpe (TMP) Turbovac SL 300 derselben Firma der Druck auf unter 10^{-5} mbar reduziert [Bac12]. Dadurch findet man im Testaufbau ein Hochvakuum vor, wie es bedingt durch die Saugleistung der DPS auch in der CPS vorherrscht [KAT05].

Über den gesamten Testaufbau sind diverse Thermowiderstände verteilt, welche die Temperatur der Edelstahlkomponenten überwachen. Drei dieser Widerstände sind außerdem für die Temperaturregelung der an der Außenseite befestigten Heizbänder verantwortlich, mit deren Hilfe sich der Aufbau erwärmen lässt. Auf diese Weise ist es möglich, nach dem Fluten der Anlage durch Öffnen eines der Flansche den Edelstahl auszuheizen, sodass schwere Moleküle ausgasen und mit der TMP abgepumpt werden können. Wasserstoff ist dann das dominierende Restgas innerhalb des Testaufbaus. Gleichzeitig lassen sich damit indirekt die verwendeten Getterstreifen des Typs St 707 vom Hersteller SAES Getters re-

³Persönliches Gespräch mit Dipl.-Phys. Stefan Görhardt

Nummer	Druckmessröhre	Bauart
PI	Leybold IM514	Heißkathode
PII	Vacom Atmion Wide Range	Heißkathode und Pirani
PIII	MKS IM422	Kaltkathode

Tabelle 2.1.: **Im CPS-Testaufbau eingesetzte Druckmessröhren [Bac12]**. Die Nummer bezieht sich dabei auf die in Abbildung 2.4 vergebenen Bezeichnungen. Bedingt durch die verschiedenen Bauarten sind die drei Messröhren für unterschiedliche Druckbereiche geeignet.

aktivieren [Bac12]. Der Wärmeübertrag zwischen den aufgeheizten Edelstahlkomponenten und den NEG-Pumpen erfolgt dabei vornehmlich durch Wärmestrahlung.

Um vor jeder Messung sicherstellen zu können, dass die Anlage von Wasserstoff dominiert ist, wurde das Massenspektrometer QME 200 der Firma Pfeiffer installiert, wie es in Abbildung 2.5 zu erkennen ist. Die Druckmessung schließlich erfolgt mit den drei Messröhren, die in Tabelle 2.1 aufgelistet sind [Bac12]. Ihre Positionen wurden bei der Erstellung der Simulationsgeometrie in Kapitel 5.1 übernommen.

3. Programme zur Vakuumsimulation im molekularen Strömungsbereich

Ziel dieser Bachelorarbeit ist es, Simulationen zum CPS-Testaufbau durchzuführen, um im Vergleich mit experimentell vorliegenden Daten auf den Stickingkoeffizienten der Getterpumpen in Abhängigkeit von deren Ausheiztemperatur zu schließen. In diesem Kapitel wird zunächst ein Überblick über die Theorie der Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich geschaffen. Anschließend werden zwei bewährte Simulationsprogramme vorgestellt und auf deren Brauchbarkeit für die Testaufbau-Simulationen hin verglichen.

3.1. Theorie der Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich

Vakuumsimulationen arbeiten je nach zu simulierendem Druckbereich mit unterschiedlichen Methoden, um möglichst realistische Ergebnisse zu erzielen. Zur Charakterisierung der Bereiche lässt sich die mittlere freie Weglänge

$$\lambda = \frac{\pi \langle v \rangle \eta}{4p} \tag{3.1}$$

eingeführen [Jou08]. Dabei bezeichnet η die Viskosität und $\langle v \rangle$ die mittlere thermische Geschwindigkeit der Moleküle. Letztere berechnet sich nach [Jou08] für Wasserstoff bei Raumtemperatur $T = 293.15 \text{ K}$ mit der molaren Masse $M \approx 2.016 \text{ g/mol}$ (siehe C.3 im Anhang) und der universellen Gaskonstanten $R \approx 8,3145 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ [NIS] zu

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \approx 1\,754,63 \frac{\text{m}}{\text{s}} . \tag{3.2}$$

Im Hoch- sowie Ultrahochvakuumbereich bei Drücken von $10^{-12} \text{ mbar} \leq p \leq 10^{-3} \text{ mbar}$ [Nat] erhält man mit einer aus C.3 entnommenen Viskosität von $\eta = 8,92 \cdot 10^{-6} \text{ N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ somit eine mittlere freie Weglänge für Wasserstoff im Bereich von ungefähr

$$12,3 \text{ cm} \leq \lambda \leq 1,23 \cdot 10^5 \text{ km} . \tag{3.3}$$

Insbesondere übersteigt unterhalb von Drücken von etwa 10^{-5} mbar die mittlere freie Weglänge typische Dimensionen von Vakuumaufbauten. Die Wahrscheinlichkeit, dass Wasserstoffmoleküle beim Durchqueren des Aufbaus miteinander kollidieren, ist also gering. Die

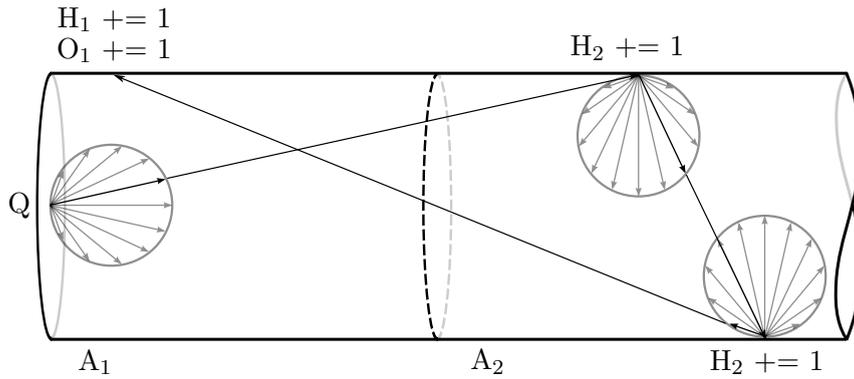


Abbildung 3.1.: **Trajektorie eines Teilchens in der Simulation.** Von der Quelle Q ausgehend wird ein Teilchen in den Raum emittiert. Die Flächenabschnitte A_i des Rohrs besitzen gewisse Stickingkoeffizienten. Das Teilchen wird zufällig an der Fläche A_2 zweimal reflektiert und schließlich in A_1 adsorbiert, wobei sich bei jeder Reflexion die Trefferzahl H_i und bei einer Adsorption zusätzlich die Adsorptionszahl O_i der Fläche i um Eins erhöht. Die Verteilung ist vereinfachend nur in einer Ebene dargestellt und folgt hier, als hellgraue Kreise dargestellt, dem Lambert'schen Cosinusetz.

Hauptkollisionen, die betrachtet werden müssen, sind die des Gases mit der Oberfläche des Aufbaus.

Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich verwenden aus diesem Grund die Testpartikel-Monte-Carlo-Methode (TPMC). In den Simulationsprogrammen wird die Geometrie des Vakuumaufbaus mitsamt den Stickingkoeffizienten α der Oberflächen sowie Gasquellen und -adsorber definiert. In der Simulation wird, ausgehend von einer solchen Quelle, ein Teilchen anhand einer stochastischen Verteilung in den Raum emittiert. Durch Kenntnis der Geometrie des Aufbaus und der Richtung der Emission wird dann der Auftreffpunkt errechnet, wo das Teilchen mit einer dem Stickingkoeffizienten entsprechenden Wahrscheinlichkeit adsorbiert und aus der Simulation entfernt wird. Ist dies nicht der Fall, wird das Teilchen an diesem Punkt erneut nach der gewählten Wahrscheinlichkeitsverteilung in den Raum emittiert [Jou08].

Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch die Trajektorie eines Testpartikels durch einen Aufbau. Diese wird in der Simulation so lange verfolgt, bis eine Adsorption an einer Oberfläche stattfindet. Anschließend wird in der Quelle ein neues Teilchen emittiert, dessen Bahn erneut verfolgt wird. Es ist auch möglich, parallel eine Vielzahl verschiedener Teilchen zu emittieren und zu verfolgen, unter der Voraussetzung, dass sich die Trajektorien ungestört kreuzen. Man erhält so Aussagen über die Trefferzahl und die Anzahl adsorbierter Teilchen auf den Oberflächenelementen sowie je nach Simulationsprogramm auch eine graphische Darstellung der Trajektorien und damit des Gasflusses [Jou08].

Die TPMC-Methode liefert durch die Anzahl H der Treffer auf eine Oberfläche A zunächst rein statistische Ergebnisse. Eine elementare Überlegung der kinetischen Gastheorie führt auf die Proportionalität

$$p \propto \frac{H}{A} =: I \quad (3.4)$$

zwischen den flächennormierten Trefferzahlen I und dem Druck auf die Oberfläche [Jou08]. Bestimmt man experimentell an einer Messstelle den Druck, so erhält man die Proportionalitätskonstante, wodurch sich alle durch die Simulation erhaltenen Druckwerte auf diesen Referenzwert eichen lassen. Auf diese Weise erhält man eine Verbindung zwischen Simulation und Experiment. Andererseits ist es genauso gut möglich, a priori nur mit relativen Druckwerten zu arbeiten. Nach obiger Formel und nach [Day07] folgt selbst für zwei Messrespektive Simulationsstellen i und j , zwischen denen kein isotroper Gasfluss herrscht:

$$\frac{I_i}{I_j} \approx \frac{p_i}{p_j}. \quad (3.5)$$

Um einen Vergleich zwischen den Simulationen zum CPS-Testaufbau und experimentell verfügbaren Daten herzustellen, wird dieses Verfahren in Kapitel 6 angewandt.

Nachdem die Theorie der Vakuumsimulationen im molekularen Strömungsbereich geklärt wurde, sollen in den nachfolgenden Unterkapiteln zwei bewährte Programme vorgestellt werden, welche sich auf Simulationen in diesem Druckbereich spezialisiert haben. Der Fokus liegt dabei auf einer kurzen Präsentation der Leistungsmerkmale der Programme und weniger auf einer Einführung in deren Bedienung.

3.2. Molflow+

Molflow+ ist ein vom CERN entwickeltes Simulationspaket, welches Monte-Carlo-Simulationen im molekularen Strömungsbereich durchführt. Das Paket ist als eigenständiges Programm unter Windows lauffähig und kann kostenlos von der Entwicklerhomepage bezogen werden [CER]. Hauptmerkmale sind dabei eine vollständig grafische Benutzeroberfläche sowie die Nutzung von Multi-Core-Prozessoren.

Es existieren zwei Möglichkeiten, um in Molflow+ eine neue Geometrie einzupflegen. Zum einen können mit Hilfe eines internen Editors neue Vertizes und Flächenelemente angelegt werden, aus welchen sich dann beliebig komplizierte Aufbauten realisieren lassen. Zum anderen lassen sich direkt CAD-Dateien der zu simulierenden Geometrien importieren, die dann von Molflow+ verwendet werden können. Jede Fläche erhält im Programm charakterisierende Eigenschaften wie beispielsweise Stickingkoeffizienten oder die Art von Strahlungsgesetz, nach welchem Teilchen von den Flächen emittiert werden.

Ist die Geometrie vollständig in Molflow+ implementiert, lässt sich die Monte-Carlo-Simulation starten. Dabei stellt neben der Benutzeroberfläche die grafische Ausgabe der Simulationen eines der stärksten Leistungsmerkmale des Programms dar. In Abbildung 3.2 ist dies exemplarisch für eine Teströhre (weiße Linien) mit dem Verhältnis $l/r = 2,42$ aus Länge l und Radius r dargestellt. Das hintere Ende dient dabei als idealer Adsorber und das vordere Ende zusätzlich als Teilchenquelle. Die Seitenflächen des Rohrs reflektieren Teilchen vollständig.

Molflow+ stellt mit grünen Linien die Trajektorien aller Teilchen dar, welche in einem Programmzyklus generiert und verfolgt wurden. Die Interaktion der Teilchen mit Flächen lässt sich anhand der Farbe erkennen. An blauen Punkten werden sie von der Quelle emittiert,

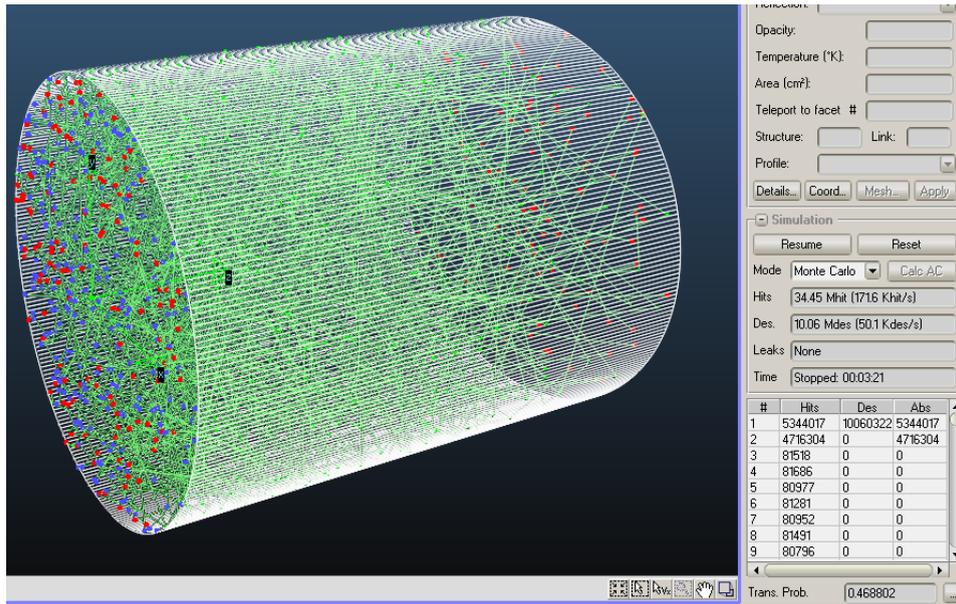


Abbildung 3.2.: **Simulation einer Röhre in Molflow+.** Die Röhre (weiße Linien) hat das Längen-zu-Radius-Verhältnis $l/r = 2,42$. Die rechte Kreisfläche ist ein idealer Adsorber, die linke zusätzlich eine Teilchenquelle. Die rechteckigen Röhrenelemente wurden als ideale Reflektoren eingestellt. Teilchen werden an den blauen Punkten von der Quelle emittiert und laufen auf den grünen Pfaden durch die Geometrie. An den grünen Punkten werden sie an den Wänden reflektiert und an den roten Punkten schließlich adsorbiert.

an grünen reflektiert und an roten adsorbiert, wodurch sie aus der Simulation entfernt werden. Die Adsorptions- und Trefferzahlen werden für jede Oberfläche automatisch registriert (im Bild rechts unten). Des Weiteren lassen sich durch Hilfsflächen automatisch Druckverläufe aufzeichnen oder über Texturen grafisch darstellen, wie es in Abbildung 3.3 dargestellt ist. Dadurch kann man ohne zusätzlichen Aufwand Aussagen über die Druckverteilung im gesamten System treffen.

In Abbildung 3.2 ist gut zu erkennen, dass Molflow+ einen hohen Grad an Parallelisierung aufweist, denn je nach Komplexität des Aufbaus werden Tausende nicht miteinander wechselwirkender Teilchen gleichzeitig von der Quelle emittiert und verfolgt. Erreicht wird dies durch Ausnutzen der vollen Rechenleistung des Computers, da das Programm für Multi-Core-Prozessoren optimiert ist. Dadurch ergibt sich trotz der aufwendigen grafischen Oberfläche eine gute Leistung mit niedrigen Simulationszeiten.

Zu den Nachteilen von Molflow+ gehört neben Programminstabilitäten bei komplexeren Aufbauten vor allem die Tatsache, dass sämtliche Oberflächen vom Programm polygonisiert werden müssen. Der Zylinder in Abbildung 3.2 ist ein vergleichsweise einfacher Aufbau, er lässt sich durch einen Radius und eine Höhe vollständig charakterisieren. Molflow+ jedoch kennt als Grafikelemente nur Polygone, sodass man den Zylinder durch Rechteckflächen annähern muss. Je weniger Flächenelemente zur Polygonisierung eingesetzt werden, desto schneller läuft die Simulation, aber desto ungenauer werden die Ergebnisse, da die Geometrie verändert wird. Hier muss für jeden Aufbau ein guter Grad zwischen Rechenleistung und gewünschter Genauigkeit gefunden werden.

Programm	N_0	t in s	H_R	O_e	O_a
Molflow+	10 060 321	201	$\sim 24\,391\,600$	5 344 017	4 716 304
ProVac3D	10 000 000	163	24 231 271	5 309 778	4 690 222

Tabelle 3.1.: **Vergleich zwischen Molflow+ und ProVac3D.** Für ungefähr gleiche Teilchenzahlen N_0 ergeben sich deutlich unterschiedliche Simulationszeiten t . Der Vergleich zwischen den Trefferzahlen H_R auf die Rohrwand und den Adsorptionszahlen $O_{e,a}$ am Ein- und Auslass zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Programmen.

3.3. ProVac3D

ProVac3D ist eine eigenständige Software zur Simulation von Teilchen im Ultrahochvakuumbereich in beliebigen Aufbauten mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode. Das Programm wurde von Dr. Xueli Luo in Fortran geschrieben und ist unter Windows lauffähig. Hauptmerkmale sind eine Vielzahl implementierbarer Grafikelemente sowie kurze Simulationsdauern selbst bei komplexeren Aufbauten. In Kapitel E im Anhang findet sich eine Kurzanleitung zur Bedienung vor. Alle nachfolgenden Angaben beziehen sich auf die zur Entstehungszeit der Bachelorarbeit vorliegende Version [Luo10].

Die Steuerung des Programms erfolgt durch Einlesen einer Input-Datei, welche alle für die Simulation relevanten Daten enthalten muss. Neue Aufbauten können durch Verwendung der zahlreichen verfügbaren Geometrielemente realisiert werden. Dabei wird jedes Element nach einem gewissen Schema mit Parametern wie den Reflektionseigenschaften oder dem Stickingkoeffizienten versehen und in die Input-Datei geschrieben. Listing E.1 zeigt die Input-Datei eines Rohres mit dem Verhältnis $l/r = 2,42$ aus Länge zu Radius, mit welcher ProVac3D eine Simulation durchführen kann, die anschaulich der in Abbildung 3.2 in Molflow+ entspricht.

Wurde die Geometrie vollständig als Input-Datei realisiert, lässt sich die Monte-Carlo-Simulation starten. Nach Beendigung der Berechnung wird eine Output-Datei ausgegeben, welche für jede Fläche Treffer- sowie Adsorptionszahlen enthält. Das Programm bietet keinerlei grafische Oberflächen und beschränkt sich auf eine quantitative Auswertung der Vakuumsimulation. Die vorliegende Version arbeitet außerdem weder parallelisiert noch nutzt sie mehr als einen Prozessorkern, in neueren Versionen wurden diese Funktionen jedoch nachgeliefert [Luo11]. ProVac3D zeichnet sich trotz dieser Nachteile durch gute Performance und geringe Simulationsdauern aus. Anhand eines Beispiels soll dies im nächsten Unterkapitel im Vergleich mit Molflow+ aufgezeigt werden.

3.4. Vergleich zwischen ProVac3D und Molflow+

Um einen Vergleich zwischen den beiden Programmen anstellen zu können, wurden wieder die Röhren aus den vorigen Unterkapiteln verwendet. In Molflow+ erfolgte die Polygonisierung durch 300 Rechtecke, wodurch das Rohr noch näherungsweise zylinderförmig blieb. In ProVac3D fand wieder Listing E.1 zur Erstellung der Geometrie Verwendung.

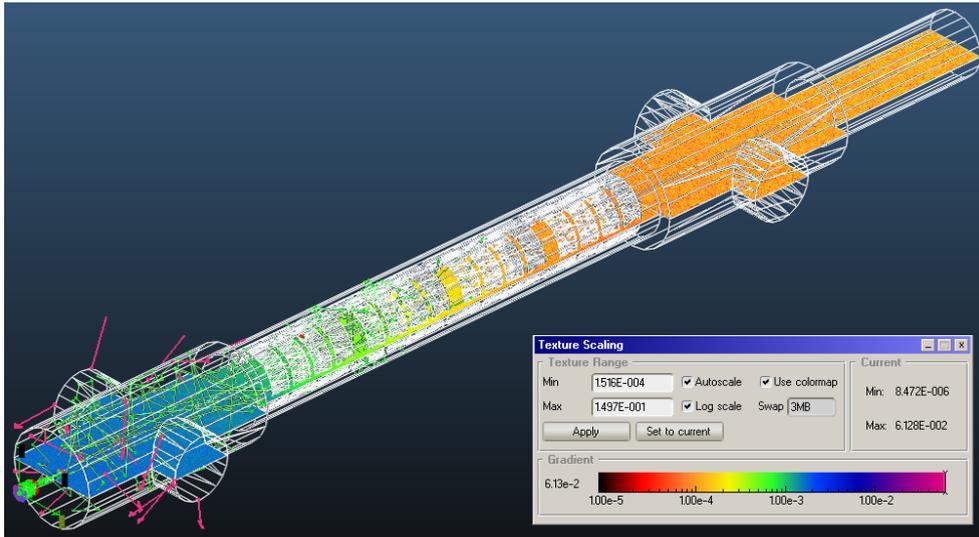


Abbildung 3.3.: **Simulation des CPS-Testaufbaus in Molflow+.** Mit virtuellen Flächen wurde eine logarithmisch skalierte Textur eingefügt, welche die relativen Drücke im Aufbau darstellt. Die magentafarbenen Pfeile zeigen Leckstellen auf, wo Teilchen unerwartet die Simulation verlassen haben.

Die Ergebnisse der Simulationen finden sich als Screenshot in Abbildung 3.2 für Molflow+ sowie als Listing E.3 im Anhang für ProVac3D wieder. Es wurde festgelegt, dass für die Simulationen des CPS-Testaufbaus eine grafische Ausgabe gegenüber einer großen Simulationsgeschwindigkeit nur zweitrangig war. In Tabelle 3.1 wurde daher als wesentliche Kenngröße für den Vergleich nur die Simulationsdauer t eingetragen. Es lässt sich gut erkennen, dass ProVac3D gegenüber Molflow+ bereits für diesen einfachen Aufbau bei gleichen Teilchenzahlen N_0 eine bessere Performance aufweist. Weitere Untersuchungen haben aufgezeigt, dass der Geschwindigkeitsvorteil von ProVac3D bei komplexer werdenden Anlagen weiter zunahm. Der Versuch, den CPS-Testaufbau mit Hilfe von CAD-Zeichnungen in Molflow+ einzupflegen, gelang erst nach einer erheblichen Vereinfachung der Geometrie. Die Polygonisierung sowohl an den Rohren des Testaufbaus als auch an den Getterkörben verfälschte deren Form erheblich, doch selbst dadurch war Molflow+ gegenüber ProVac3D bei gleichen Teilchenzahlen in der Geschwindigkeit etwa um einen Faktor vier unterlegen.

Um die Performance zu verbessern, wäre eine noch stärkere Polygonisierung notwendig gewesen. Es hat sich jedoch herausgestellt, dass diese Vereinfachung Defekte in die Geometrie einbringt, durch welche Teilchen die Simulation unerwartet verlassen und dadurch den statistischen Fehler erhöhen. Solche Lecks sind als magentafarbene Pfeile in einem Ausschnitt aus der Simulation zum CPS-Testaufbau in Abbildung 3.3 zu sehen.

Über die zuvor genannten Probleme hinaus hat sich Molflow+ während den Simulationen auch als wenig stabil herausgestellt. Nach Simulationsdauern von über drei Stunden, welche für den geforderten geringen statistischen Fehler üblich waren, kam es vereinzelt zu Programmabstürzen. Aufgrund dieser Nachteile wurde im Rahmen der Bachelorarbeit ProVac3D als Simulationsprogramm ausgewählt. Im Vordergrund dieser Entscheidung stand hauptsächlich die gute Performance und die einfache Einpflegung des CPS-Testaufbaus mit Hilfe der unterstützten Geometrielemente.

4. Quellanalysen mit ProVac3D

Da ProVac3D nur als ausführbare Datei mit minimaler Dokumentation vorlag, war es zunächst das Ziel, genauer zu verstehen, wie das Programm arbeitet. Von besonderem Interesse war die Analyse der statistischen Gesetzmäßigkeiten, nach denen in der Monte-Carlo-Simulation Teilchen in den Raum verteilt werden. Der Fokus dieses Kapitels liegt somit in einer genauen Quellanalyse. Zunächst wurde der einfache Fall einer kreisrunden Quelle und später kompliziertere Aufbauten in Form von Gaseinlassrohren mit unterschiedlichen Längen- zu Radius-Verhältnissen untersucht.

4.1. Abstrahlung einer kreisrunden Quelle

Für die Analyse der räumlichen Verteilung wurden geeignete Testaufbauten untersucht, die aufgrund der Beschränkung von ProVac3D auf gewisse Geometrielemente stark vereinfacht werden mussten. Im Folgenden ist die Analyse der kreisrunden Quelle mit zwei Testaufbauten dargestellt. Es handelte sich dabei um einen Testzylinder und eine Halbsphäre, im Folgenden Testdom genannt.

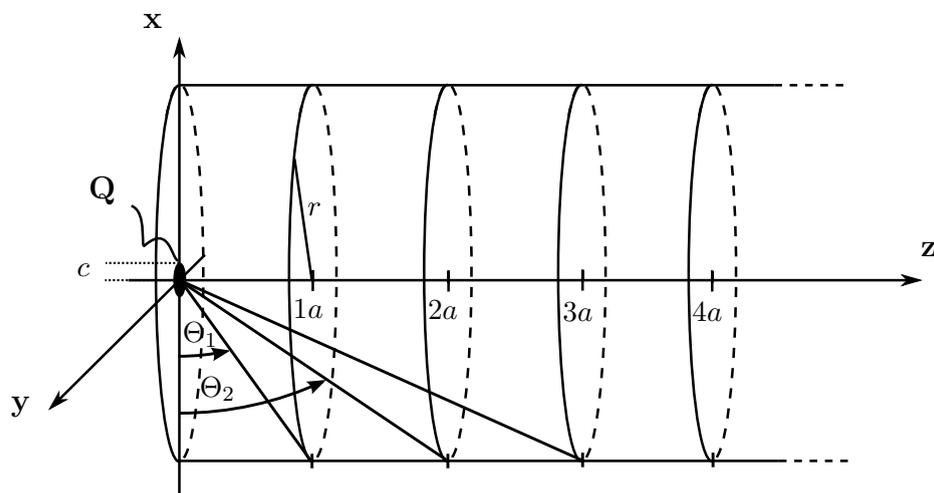


Abbildung 4.1.: Zylinder als Testaufbau für die Quellstudie. Der Zylinder wird über der Quelle Q (Quellradius c) platziert und ist aus 20 Unterzylindern der Höhen a und Radien r aufgebaut. Durch Kenntnis der Höhe na und des Radius r des n -ten Teilzylinders lässt sich der Winkel Θ_n gewinnen.

4.1.1. Studie mit dem Testzylinder

Als erster Versuch eines Testaufbaus diente ein Zylinder mit Radius r , welcher in 20 Unterzylinder derselben Höhe a aufgeteilt wurde, wie es in Abbildung 4.1 dargestellt ist. Um Aussagen über die theoretische Verteilung machen zu können, nehmen wir zunächst an, die Teilchenemission einer Quelle folge dem Lambert'schen Cosinusetz¹ und überprüfen, ob sich dies mit den Ergebnissen der Simulation deckt. Das Gesetz beschreibt dabei ideal diffuse Oberflächen und besagt, dass für einen Beobachter die Emissionswahrscheinlichkeit der Teilchen aus allen Richtungen konstant erscheint. Die Anzahl der tatsächlich emittierten Teilchen in ein Raumwinkelement ist hingegen proportional zur sichtbaren Fläche der Quellöffnung, also zu $\sin \Theta$ [Smi07].

Mit der in Abbildung 4.1 gegebenen Definition des Azimutalwinkels $\Theta \in [0, \pi/2]$ und der Begrenzung der Emission auf einen kleinen Radius $c \ll r$ gilt für die Teilchenzahldichte pro Raumwinkelement²

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{N_0}{\pi} \sin \Theta , \quad (4.1)$$

wobei N_0 die Gesamtzahl der emittierten Teilchen darstellt. Eine Integration in Kugelkoordinaten über $d\Omega = \cos \Theta d\Theta d\varphi = d(\sin \Theta) d\varphi$ liefert die Teilchenzahl in einem beliebigen Raumwinkel Ω :

$$\Delta N_\Omega = \int_\Omega d\Omega \frac{dN}{d\Omega} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\sin \Theta_1}^{\sin \Theta_2} d(\sin \Theta) \frac{N_0}{\pi} \sin \Theta = N_0 \sin^2 \Theta \Big|_{\Theta=\Theta_1}^{\Theta_2} . \quad (4.2)$$

Damit ergibt sich für die relative Teilchenzahl im Raumwinkel zwischen zwei beliebigen Winkeln Θ_n und Θ_{n-1} mit $n \in \mathbb{N}$:

$$\frac{\Delta N_n}{N_0} = \sin^2 \Theta_n - \sin^2 \Theta_{n-1} . \quad (4.3)$$

Die Winkel ergeben sich über eine geometrische Beziehung, die sich aus Abbildung 4.1 herleiten lässt:

$$\Theta_n = \arctan \left(\frac{na}{r} \right) . \quad (4.4)$$

Mit der Gesamtzahl N_0 der in der Simulation gestarteten Teilchen erwartet man damit im n -ten Zylindersegment die Gesamtzahl ΔN_n an Treffern:

$$\Delta N_n = N_0 \left[\sin^2 \left(\arctan \left(\frac{na}{r} \right) \right) - \sin^2 \left(\arctan \left(\frac{(n-1)a}{r} \right) \right) \right] . \quad (4.5)$$

Um die Richtigkeit dieser Überlegungen zu prüfen, wurde der zylinderförmige Testaufbau in ProVac3D mit der Höhe $a = 0,1$ und dem Radius $r = 1,0$ erstellt, der Emissionsradius zu $c = 0,001$ festgelegt und eine Simulation mit einer Gesamtteilchenzahl von $N_0 = 1\,000\,000$ durchgeführt. Aufgrund des kleinen Emissionsradius entspricht die Simulation in guter

¹Der im Folgenden verwendete Winkel Θ bezieht sich auf den Winkel zwischen Emissionsrichtung des Teilchens und Emissionsfläche, während sich der Winkel Θ_L im Lambert'schen Cosinusetz auf die Flächennormale bezieht. Damit gilt $\sin \Theta = \cos \Theta_L$, woher sich der Name Cosinusetz ableitet.

²Die Proportionalitätskonstante zwischen $dN/d\Omega$ und $\sin \Theta = \cos \Theta_L$ ist durch eine Normierung dergestalt gegeben, dass die Gesamtteilchenzahl in einer Halbsphäre N_0 entsprechen soll.

n	ΔN	n	ΔN
1	9 920	11	47 414
2	28 550	12	43 075
3	44 070	13	37 912
4	55 096	14	33 946
5	62 283	15	30 241
6	64 720	16	26 835
7	64 361	17	23 894
8	61 210	18	21 108
9	57 204	19	18 809
10	52 795	20	17 070

Tabelle 4.1.: **Simulationsergebnisse der punktförmigen Quellstudie.** ProVac3D liefert für jedes Zylindersegment n die Anzahl der adsorbierten Teilchen ΔN , welche aufgrund des gewählten Stickingkoeffizienten $\alpha = 1$ identisch mit der Trefferzahl ist. Die Gesamtteilchenzahl lag bei $N_0 = 1\,000\,000$ und die Summe aller Adsorptionen der 20 Zylinder beträgt 800 513. Die restlichen Teilchen wurden von der Deckelfläche des Testzylinders adsorbiert.

Näherung einer punktförmigen Quelle. Jede Fläche wurde als idealer Adsorber eingestellt, da mehrfache Streuung der Teilchen die Untersuchung verfälscht hätte. Die Ergebnisse der Simulation sind in Tabelle 4.1 hinterlegt. Die Adsorptionszahl der Deckelfläche des Zylinders wurde dabei nicht mit aufgeführt, da sie für die Emissionsanalyse uninteressant ist.

In Abbildung 4.2 sind zum einen die Messergebnisse als Punkte über der diskreten Zylinderzahl n und zum anderen Gleichung (4.5) als Funktion einer kontinuierlichen Variablen n aufgetragen. Wie man sieht, stimmt die theoretische Vorhersage mit den Ergebnissen der Simulation bis auf kleine statistische Fluktuationen gut überein. Es wurde somit bestätigt, dass die Teilchen in ProVac3D bei der Emission dem Lambert'schen Cosinusetz folgen.

4.1.2. Studie mit dem Testdom

Um kompliziertere Quellaufbauten zu untersuchen, erschien der Testzylinder aufgrund seiner Geometrie als ungeeignet. Der zweite Versuch eines geeigneten Testaufbaus wurde in Form einer Halbsphäre unternommen, wie sie in Abbildung 4.3 dargestellt ist. Da ProVac3D keine Kugelringe als Geometrielemente unterstützt, wurde die Halbsphäre durch Kegelstümpfe approximiert.

Damit die Trefferzahl auf jedem Kegelstumpf tatsächlich ein unverfälschtes Bild über die räumliche Verteilung der Teilchen abgibt, war es notwendig, dass jeder der insgesamt M Kegelstümpfe exakt denselben Raumwinkel $\Delta\Omega$ abdeckte. Da eine Halbsphäre gerade einen Raumwinkel von 2π aufweist, ergibt sich der Raumwinkel eines jeden Kegelstumpfs zu

$$\Delta\Omega = \frac{2\pi}{M} . \quad (4.6)$$

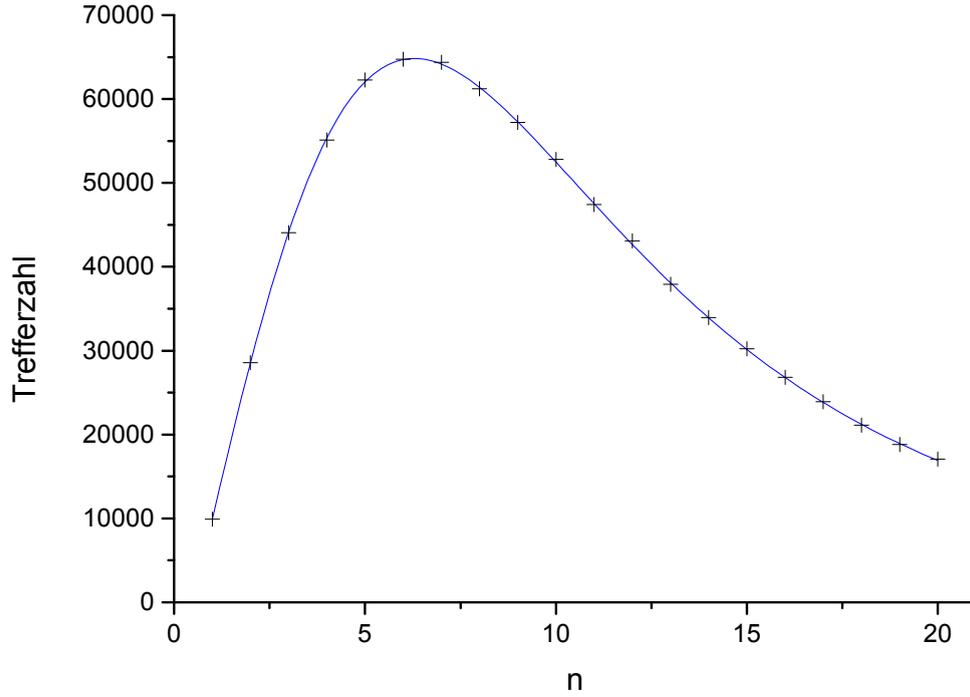


Abbildung 4.2.: **Ergebnisse der punktförmigen Quellstudie mit ProVac3D.** Die Kreuze repräsentieren die Simulationsergebnisse für diskrete Zylindersegmente n , die durchgezogene Linie ist der durch Gleichung (4.5) berechnete Erwartungswert für kontinuierliche n .

Auf der anderen Seite ergibt sich dieser Raumwinkel durch Integration für $n \in \mathbb{N}$ zwischen den beiden zunächst unbekanntem Winkeln Θ_n und Θ_{n-1}

$$\Delta\Omega = \int_{\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\Theta_{n-1}}^{\Theta_n} d\Theta \cos \Theta = 2\pi (\sin \Theta_n - \sin \Theta_{n-1}) \quad (4.7)$$

woraus mit Gleichung (4.6) folgt:

$$\Theta_n = \arcsin \left(\frac{1}{M} + \sin \Theta_{n-1} \right) . \quad (4.8)$$

Mit $\Theta_0 = 0$ erhält man mittels vollständiger Induktion

$$\Theta_n = \arcsin \left(\frac{n}{M} \right) . \quad (4.9)$$

Für eine Halbsphäre mit dem Radius R erhalten wir nach Abbildung 4.3 die Höhen z_n und z_{n-1} sowie die Radien r_n und r_{n-1} für jeden Kegelstumpf über

$$\begin{aligned} z_n &= R \sin \Theta_n = R \frac{n}{M} \\ r_n &= R \cos \Theta_n = R \sqrt{1 - \left(\frac{n}{M} \right)^2} . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Mit Hilfe dieser Überlegungen wurde in Mathematica ein Skript geschrieben, welches automatisch eine ProVac3D-Input-Datei für einen Testdom mit dem Radius $R = 10$ für

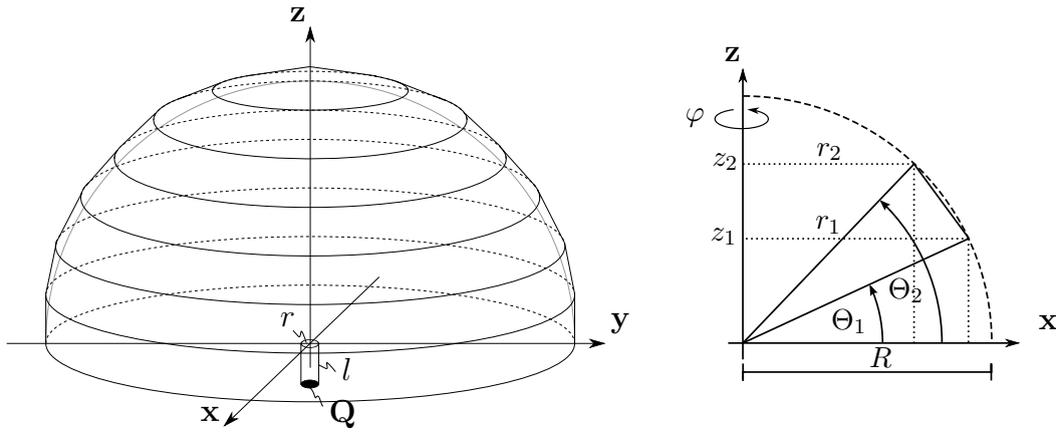


Abbildung 4.3.: **Testdom mit verschiedenen Gaseinlassrohren.** Links: Eine Halbsphäre, approximiert durch M Kegelstumpfe, wird über einem Gaseinlassrohr mit Länge l und Radius r platziert. Am anderen Ende des Rohrs befindet sich die Quelle Q . Für verschwindendes l und kleines r ergibt sich eine punktförmige Quelle. Rechts: Durch Kenntnis des Winkels Θ_n und des Radius R der Halbsphäre lässt sich die Höhe z_n und der Radius r_n im Raumwinkelausschnitt eines Kegelstumpfs bestimmen.

$M = 50$ Kegelstumpfe erstellt, die in allen nachfolgenden Quellanalysen verwendet wurde.

Um zu überprüfen, ob mit dem Testdom die Ergebnisse bestätigt werden können, die wir in Abschnitt 4.1.1 mit dem Testzylinder erhalten haben, wurde für eine punktförmige Quelle eine Simulation mit einer Gesamtteilchenzahl von $N_0 = 1\,000\,000$ durchgeführt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 4.2 wieder. Zur besseren Interpretation wurde unter Ausnutzung der sphärischen Symmetrie des Doms für diese sowie für alle nachfolgenden Simulationen zu den verschiedenen Gaseinlassrohren eine Abstrahlcharakteristik erstellt. Dazu wurde jedem Kegelstumpsegment n eine Polarkoordinate $(\Delta N_n, \Theta_n)$ zugeteilt. Der Radius ΔN_n der Koordinate ist die Gesamtzahl der adsorbierten Teilchen in diesem Segment und der Winkel Θ_n ist gerade identisch mit dem aus Gleichung (4.9).

Das in Abbildung 4.4 dargestellte Polardiagramm zeigt die Abstrahlcharakteristik für die Punktquelle, welche sich im Schnittpunkt der beiden Achsen befindet. Sie stellt qualitativ die Emissionswahrscheinlichkeit der Teilchen je nach Raumrichtung Θ_n dar. Wie man sieht, ergibt sich wieder eine Abstrahlung gemäß dem Lambert'schen Cosinusetz, wie es zu erwarten war. Der Testdom erschien als geeignet, um daran weitere Quellstudien mit verschiedenen Gaseinlassrohren durchzuführen.

4.2. Abstrahlung diverser Gaseinlassrohre

Der Gaseinlass im CPS-Testaufbau weicht erheblich von der Näherung einer punktförmigen Quelle ab, weshalb zunächst der Einfluss diverser Geometrien der Gaseinlassrohre auf die Abstrahlcharakteristik von Interesse war. Die Rohre wurden als zylinderförmig mit einem definierten Radius r und der Länge l angesehen und wie in Abbildung 4.3 dargestellt positioniert.

In einer Simulationsreihe wurden verschiedene Verhältnisse $l/r \in [1, 0; 100, 00]$ als Input-Dateien mit ProVac3D untersucht. Die Simulationen wurden jeweils mit einer Gesamt-

n	Θ_n	ΔN									
1	0,020	427	14	0,284	10 705	27	0,570	21 336	40	0,927	31 462
2	0,040	1 261	15	0,305	11 573	28	0,594	22 012	41	0,961	32 124
3	0,060	2 051	16	0,326	12 114	29	0,619	22 776	42	0,997	33 054
4	0,080	2 778	17	0,345	12 966	30	0,644	23 677	43	1,035	34 209
5	0,100	3 618	18	0,368	14 058	31	0,669	24 342	44	1,076	34 737
6	0,120	4 368	19	0,390	14 681	32	0,695	25 125	45	1,120	35 797
7	0,141	5 282	20	0,412	15 599	33	0,721	26 040	46	1,168	36 207
8	0,161	5 916	21	0,434	16 437	34	0,748	27 057	47	1,223	37 170
9	0,181	6 831	22	0,456	17 437	35	0,775	27 503	48	1,287	38 164
10	0,201	7 545	23	0,478	18 026	36	0,804	28 538	49	1,371	38 630
11	0,222	8 481	24	0,501	18 592	37	0,833	28 982	50	1,571	39 513
12	0,242	9 330	25	0,524	19 813	38	0,863	29 846			
13	0,263	10 211	26	0,547	20 400	39	0,895	31 199			

Tabelle 4.2.: **Simulationsergebnisse der Punktquelle im Testdom.** Bei einer Gesamtteilchenzahl von $N_0 = 1\,000\,000$ lieferte ProVac3D für jedes Zylindersegment n die Anzahl der adsorbierten Teilchen ΔN , welche identisch mit der Trefferzahl ist. Die im Bogenmaß angegebenen Winkel Θ_n werden mittels Gleichung (4.9) berechnet.

teilchenzahl von $N_0 = 100\,000$ durchgeführt und analog zu Abschnitt 4.1.2 als Polardigramm ausgewertet. Die Ergebnisse der Verteilungsstudie sind im Anhang in Abbildung A.1 dargestellt. Zusätzlich findet sich dort als Vergleich erneut der Grenzfall $l/r \rightarrow 0$ für $N_0 = 1\,000\,000$ Teilchen, welcher eine punktförmige Quelle beschreibt.

Man sieht, wie die Geometrie des Gaseinlasses die Abstrahlcharakteristik beeinflusst. Je länger das Gaseinlassrohr ist, desto mehr Teilchen stoßen, von der Quelle Q ausgehend, an die Wände des Rohres, von wo aus sie erneut nach dem Lambert'schen Gesetz emittiert werden. Mit einem länger werdenden Rohr ergibt sich ein zunehmend schmaleres und spitzeres Abstrahlprofil. Dies ist eine wichtige Erkenntnis für die spätere Hauptsimulation. Je nach implementiertem Gaseinlassrohr ist die Emissionswahrscheinlichkeit in einen bestimmten Winkel erheblich abweichend vom Lambert'schen Cosinusetz. Es ergibt sich die Notwendigkeit, im CPS-Testaufbau einen realitätsnahen Gaseinlass einzubauen, anstatt eine einfache Punktquelle zu verwenden, da der Gasfluss im System sonst nicht realistisch simuliert werden kann.

Die Geometrie des Gaseinlasses hat darüber hinaus weitere Einflüsse auf einige Simulationsparameter, auf die im Folgenden kurz eingegangen werden sollen. Mit zunehmender Rohrlänge l und steigendem Verhältnis l/r nimmt die Anzahl der Stöße im Gaseinlass zu, wodurch sich die Rechenzeit t vergrößert, da ein einzelnes Teilchen mehr Stöße durchlaufen muss, bis es adsorbiert wird. Aufgrund der Tatsache, dass die Quelle in ProVac3D auch immer vollständig adsorbiert, hat man mit steigender Rohrlänge zunehmend mehr Teilchen, die den Testdom nicht erreichen, da diese im Gaseinlassrohr zurück zur Quelle gestreut und adsorbiert werden. In Tabelle 4.3 ist der Einfluss auf die verschiedenen

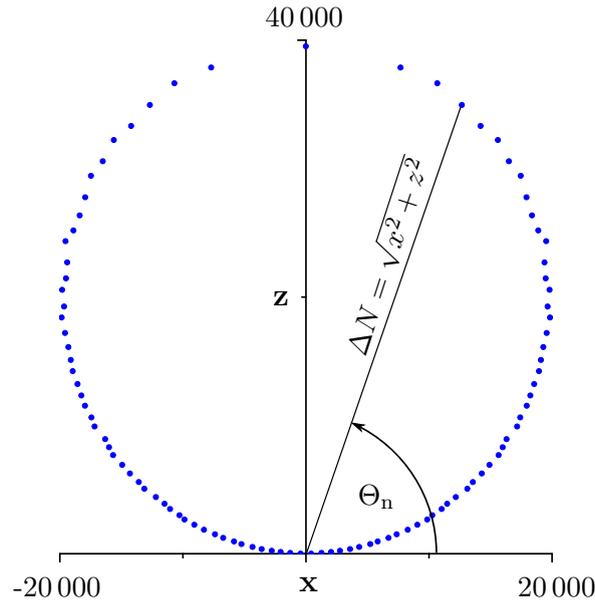


Abbildung 4.4.: **Polardiagramm zur Auswertung der Emission einer Punktquelle.** Die Simulationsergebnisse aus Tabelle 4.2 sind in der Form $(\Delta N, \Theta_n)$ im ersten Quadranten aufgetragen. Die Emission weist eine azimutale Symmetrie um $x = 0$ auf, weshalb alle Punkte zur besseren Anschaulichkeit an der z -Achse gespiegelt wurden. Die Verteilung der Teilchen von der im Achsenschnittpunkt sitzenden Quelle folgt dem Lambert'schen Cosinusetz.

Parameter dargestellt. Mit $\Delta N_{Q,D}$ ist die Anzahl der von der Quelle Q respektive dem gesamten Testdom D adsorbierten Teilchen bezeichnet. Die Gesamtteilchenzahl lag analog wie zuvor bei $N_0 = 100\,000$. Die effektive Simulationszeit wurde dabei durch Normierung auf die jeweilige Ausbeute im Testdom errechnet:

$$t_{\text{eff}} = \frac{N_0}{\Delta N_D} \cdot t \quad (4.11)$$

Sie gibt die Simulationsdauer an, wenn für jedes Verhältnis l/r im Testdom $N_0 = 100\,000$ Teilchen ankommen sollen. Zur besseren Veranschaulichung sind die Einflüsse in Abbildung 4.5 doppelt logarithmisch aufgetragen. Man erkennt, dass die effektive Rechenzeit

r/l	t in s	$\Delta N_{Q,D}/N_0$ in %	$\Delta N_D/N_0$ in %	$t_{\text{eff}} = t \cdot N_0 / \Delta N_D$ in s
1,00	7,69	32,832	67,168	11,449
1,33	8,97	39,063	60,397	14,852
2,00	11,43	48,609	51,391	22,241
4,00	18,96	64,430	35,570	53,303
10,00	42,09	81,167	18,833	223,491
20,00	79,64	89,083	10,917	729,504
100,00	379,63	97,459	2,541	14 940,181

Tabelle 4.3.: **Einfluss der Gaseinlass-Geometrie l/r auf Simulationsparameter.** t : Simulationszeit, $\Delta N_{Q,D}$: von der Quelle (Q) respektive dem Dom (D) adsorbierte Teilchen, N_0 : Gesamtteilchenzahl, t_{eff} : effektive Simulationszeit

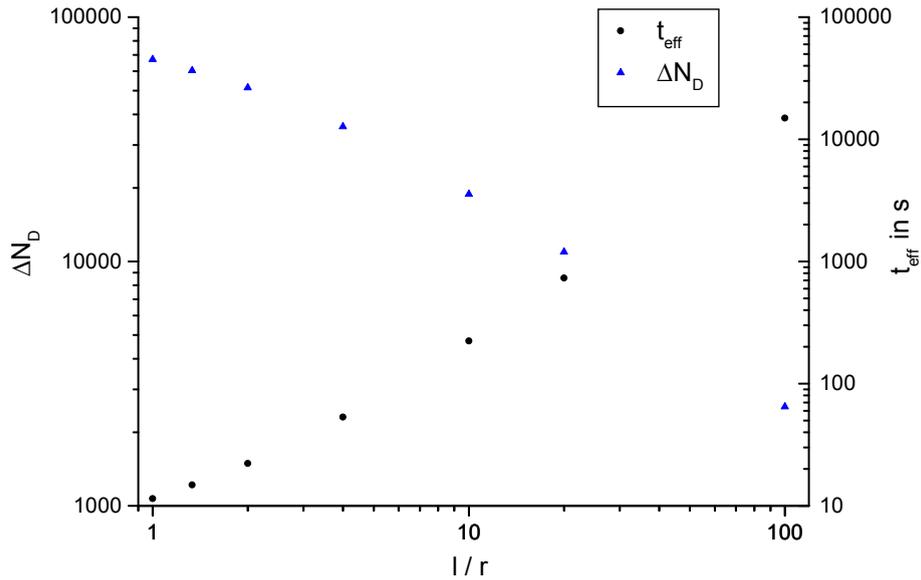


Abbildung 4.5.: **Einfluss der Gaseinlass-Geometrie auf Teilchenausbeute und Rechenzeit.** Die doppelt logarithmische Auftragung zeigt die effektive Simulationszeit t_{eff} sowie die Teilchenausbeute ΔN_D im Testdom über dem Geometrieverhältnis l/r . Beide Simulationsparameter sind stark von der Rechenzeit abhängig.

mit zunehmendem l/r -Verhältnis enorm anwächst, wohingegen die Teilchenausbeute ΔN_D im Testdom, dem interessierenden Bereich, überproportional absinkt. Die Implementierung eines realistischen Gaseinlasses hat den Preis einer deutlichen Erhöhung der benötigten Simulationszeit. Trotz dieses schwerwiegenden Nachteils wurde entschieden, einen zylinderförmigen Gaseinlass in den CPS-Testaufbau zu übernehmen, da man nur auf diese Weise realistische Ergebnisse erhalten kann.

4.3. Optimierung des realitätsnahen Gaseinlasses

Für die Simulation des realitätsnahen Gaseinlasses wurde die Geometrie im CPS-Testaufbau auf $r = 2,75$ mm und $l = 60$ mm festgelegt³, wodurch sich ein Wert $l/r = 21,8$ ergab. Für diese Kenngrößen wurde eine Simulation mit einer Gesamtteilchenzahl von $N_0 = 1\,000\,000$ durchgeführt und anschließend eine Abstrahlcharakteristik erstellt, welche sich in Abbildung 4.6 wiederfindet. Es ist gut erkennbar, dass die Emissionsverteilung stark vom Lambert'schen Cosinusetz abweicht.

Durch die vielfache Streuung der Teilchen im Gaseinlassrohr lässt sich die Anzahl ΔN_D der Teilchen, welche die Quelle tatsächlich verlassen, schwer abschätzen. Darum wurde eine einseitig transparente Kreisfläche unmittelbar hinter der Quellfläche Q platziert, welche auf der anderen Seite als idealer Reflektor fungierte. Auf diese Weise sollte verhindert werden, dass die Quelle Teilchen adsorbieren kann, sodass die Teilchenausbeute ΔN_D identisch mit der Gesamtteilchenzahl N_0 sein sollte. Da somit die Anzahl der Stöße im Rohr erheblich zunimmt, sollte in einer weiteren Studie mit zwei Simulationen herausgearbeitet

³Persönliches Gespräch mit Dipl.-Phys. Stefan Görhardt

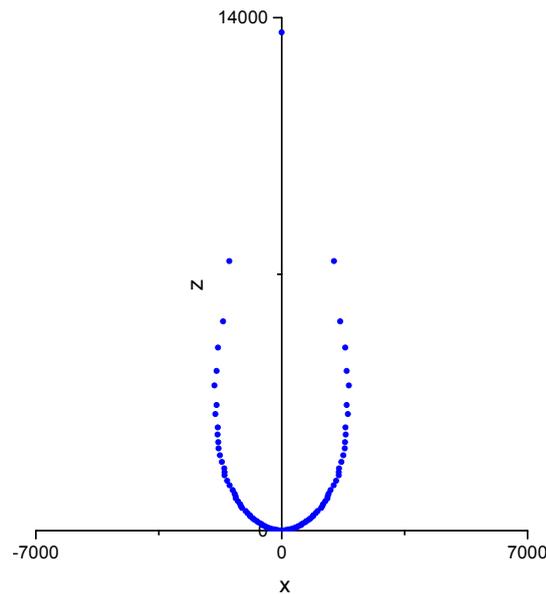


Abbildung 4.6.: **Polardiagramm zur Auswertung des realen Gaseinlasses.** Für ein Verhältnis $l/r = 21,8$ erkennt man gut, dass die Emissionsverteilung deutlich vom Lambert'schen Cosinusgesetz in Abbildung 4.4 abweicht.

Trennfläche	N_0	t in s	$\Delta n_{Q/N_0}$ in %	$\Delta N_D/N_0$ in %
ohne	1 000 000	871,74	89,8168	10,1832
mit	100 000	859,23	0,003	99,997

Tabelle 4.4.: **Einfluss einer Trennfläche auf die Teilchenausbeute im Dom und auf die Simulationsdauer.** N_0 : Gesamtteilchenzahl, t : Simulationszeit, $\Delta N_{Q,D}$: von der Quelle (Q) respektive dem Dom (D) adsorbierte Teilchen. Hinsichtlich der Simulationszeit sind bei einer gewünschten Ausbeute von $\Delta N_D \approx 100\,000$ beide Fälle annähernd identisch.

werden, inwiefern die Optimierung hinsichtlich der Teilchenausbeute die Simulationsdauer beeinflusst.

Ziel beider Simulationen war es, im Testdom eine Teilchenausbeute von $\Delta N_D \approx 100\,000$ Teilchen zu erhalten. In der ersten Simulation wurde auf die halbtransparente Fläche verzichtet. Nach Tabelle 4.3 ist bekannt, dass man für den realitätsnahen Wert von l/r eine Ausbeute von etwa 10% der Gesamtteilchenzahl zu erwarten hat, weshalb die Simulation mit $N_0 = 1\,000\,000$ Teilchen durchgeführt wurde. In der zweiten Simulation wurde eine halbtransparente Fläche in einem Abstand von 10^{-4} mm hinter der Quellfläche platziert. Da zu erwarten war, dass jedes emittierte Teilchen den Testdom erreicht, wurde hier die Gesamtteilchenzahl auf $N_0 = 100\,000$ festgelegt. Die Ergebnisse beider Simulationen sind in Tabelle 4.4 dargestellt.

Man erkennt anhand der Simulationsergebnisse deutlich, dass das Einbringen der halbtransparenten Fläche keine wesentliche Veränderung der Rechenzeit mit sich bringt, wenn man sich für die Zahl der Teilchen ΔN_D interessiert, die das Rohr verlassen. Da man mit Hilfe der Trennfläche diese Zahl aber exakt kontrollieren kann, wurde sie in die Quelle der Simulationsreihen im nächsten Kapitel eingebaut. Die Tatsache, dass in der Simulation

mit halbtransparenter Trennfläche drei Teilchen von der Quelle adsorbiert wurden, liegt darin begründet, dass der Abstand zwischen Trennfläche und Quelle noch zu groß war. In den nachfolgenden Simulationen wurde der Abstand auf 10^{-12} mm reduziert. Wäre ein noch kleinerer Abstand gewählt worden, so hätte man die Grenze der in ProVac3D verwendeten double-Variablen überschritten [Böh96]. Wie sich in den Simulationsreihen im nächsten Kapitel gezeigt hat, ist der gewählte Abstand jedoch hinreichend gering.

5. Simulationen zum CPS-Testaufbau

Nachdem die Quellstudien abgeschlossen und die Funktionsweise von ProVac3D erarbeitet wurde, war das nächste Ziel die eigentlichen Simulationen zum CPS-Testaufbau. Dazu wurde zunächst der Testaufbau als Input-Datei für ProVac3D erstellt und anschließend verschiedene Simulationsreihen durchgeführt.

5.1. Erstellung des CPS-Testaufbaus

Zunächst wurde der CPS-Testaufbau als Input-Datei für ProVac3D mit Hilfe der Konstruktionszeichnungen umgesetzt. Es wurde bei der Erstellung der Geometrie auf alle Elemente verzichtet, die nicht maßgeblich für den Ablauf der Simulation waren. Dazu zählten insbesondere die Außenseiten der diversen Flansche, welche das goldbeschichtete Rohr mit den Viererkreuzen verbinden. Die Verbindungsflansche zum Massenspektrometer und zu den Druckmessröhren wurden vernachlässigt und als kreisrunde Flächen der Durchmesser $d = 100$ mm genähert. Der Gaseinlass, welcher im realen Aufbau einem komplizierteren Rohrsystem entspricht, wurde in der Simulation als Zylinder mit Radius $r = 2,75$ mm und Länge $l = 60$ mm umgesetzt, wie es in Kapitel 4.3 beschrieben wurde. Eine Übersicht über den CPS-Testaufbau zusammen mit den implementierten Flächen- und Volumenelementen findet sich im Anhang in Abbildung B.2 wieder. Dabei ist zu beachten, dass sowohl in Simulation als auch Experiment nur ein einziger Getterkorb im Rohr platziert wurde. Die zur späteren Auswertung besonders wichtigen Flächen CI 5 und CI 8 können mit Hilfe von Tabelle 5.1 den Druckmessgeräten im experimentellen CPS-Testaufbau zugeordnet werden.

Nummer	Druckmessröhre	Bezeichnung in ProVac3D
PI	Leybold IM514	CI 5
PII	Vacom Atmion Wide Range	CI 5
PIII	MKS IM422	CI 8

Tabelle 5.1.: **Eingesetzte Druckmessröhren in Experiment und Simulation.** Nummer und Typ der Druckmessröhren basieren auf Tabelle 2.1. Die Zuordnung zwischen den Flächen in der Simulation und den Druckmessröhren im Experiment ist mit Hilfe der letzten Spalte möglich.

Sämtliche Edelstahlkomponenten erhielten in der Simulation einen Reflexionskoeffizienten von $R = 1$, da in erster Näherung davon ausgegangen werden kann, dass der Edelstahl keine Teilchen adsorbiert. Die wesentlichen aktiven Elemente in der Simulation sind die Turbomolekularpumpe (TMP) sowie die Getterstreifen, deren Umsetzung nachfolgend kurz beschrieben werden soll.

5.1.1. Turbomolekularpumpe

Die Turbomolekularpumpe (TMP) wurde in ProVac3D als kreisrunde, einseitig teilreflektierende Fläche mit einem Reflexionskoeffizienten R_{TMP} simuliert, welcher nachfolgend hergeleitet wird. Der Zusammenhang mit dem Sticking-Koeffizienten α_{TMP} der Pumpe wird definiert durch

$$R_{\text{TMP}} = 1 - \alpha_{\text{TMP}} . \quad (5.1)$$

Das Saugvermögen S_{TMP} einer TMP lässt sich über die Formel

$$S_{\text{TMP}} = \frac{1}{4} \langle v \rangle A \alpha_{\text{TMP}} \quad (5.2)$$

berechnen, mit der mittleren thermischen Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ des Gases und der Querschnittsfläche A des Ansaugflansches der Pumpe mit dem Radius $r = 50 \text{ mm}$ [Jou08]. Das dominierende Gas im Testaufbau in Experiment und Simulation ist Wasserstoff. Dessen mittlere thermische Geschwindigkeit berechnet sich bei Raumtemperatur nach Gleichung (3.2) zu

$$\langle v \rangle \approx 1754,63 \frac{\text{m}}{\text{s}} . \quad (5.3)$$

Als TMP im CPS-Testaufbau wurde nach Kapitel 2.3 eine Leybold Turbovac SL 300 verwendet, deren Saugvermögen für Wasserstoff laut Datenblatt des Herstellers $S_{\text{TMP}} = 190 \text{ l/s}$ beträgt [Oer]. Dieser Wert wurde unabhängig von den Herstellerangaben mit Hilfe eines Nomogramms und den bekannten Dimensionen des CPS-Testaufbaus sowie vorhandenen Messwerten mit hinreichender Genauigkeit bestätigt [Röt13]. Umstellen von Gleichung (5.2) und Einsetzen in Gleichung (5.1) liefert

$$R_{\text{TMP}} = 1 - \frac{4S_{\text{TMP}}}{\langle v \rangle A} \approx 0,945 \quad (5.4)$$

als Reflexionskoeffizient der TMP. Dieser Wert wurde für die Simulationsreihe mit variierendem Getter-Stickingkoeffizienten α_{sim} in Kapitel 5.3 für die Fälle übernommen, in denen die Verbindung zwischen der Pumpe und dem restlichen Aufbau offen war.

Um den Effekt eines Fehlers auf das Saugvermögen zu untersuchen, wurde es zusätzlich um $\pm 20\%$ variiert¹. Für die resultierenden Saugvermögen $S_{\text{TMP}} = (190 \pm 38) \text{ l/s}$ erhält man als Grenzfälle dann die Reflexionskoeffizienten

$$\begin{aligned} R_{\text{TMP}-20\%} &\approx 0,956 \\ R_{\text{TMP}+20\%} &\approx 0,934 . \end{aligned} \quad (5.5)$$

¹Persönliches Gespräch mit Dr. Joachim Wolf

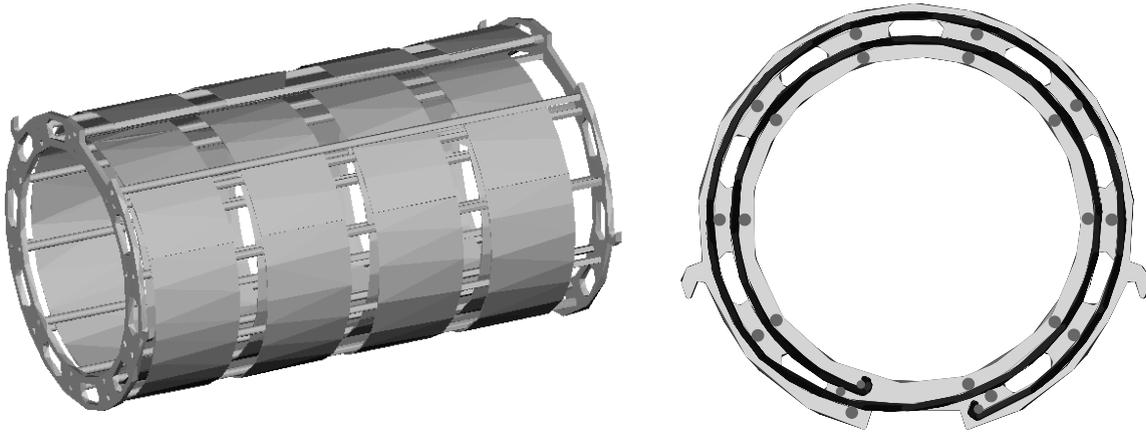


Abbildung 5.1.: CAD-Modell des Edelstahlkorbs mit vier aufgewickelten Getterstreifen. Jeder Streifen ist etwa 537 mm lang und 30 mm breit, wobei die aktive Fläche nur eine Breite von 27 mm aufweist. Der Getterkorb befindet sich in der seitlichen Darstellung (links) auf dem Kopf. Im Querschnitt (rechts) ist die Aufwicklung eines Getterstreifens zu erkennen.

Zwischen Turbomolekularpumpe und Vakuumkammer (Viererkreuz) befindet sich im Testaufbau ein Ventil, mit welchem die Kammer von der Pumpe getrennt werden kann. Bei Simulationen mit geschlossenem Ventil wurde

$$R_{\text{TMP}} = 1 \quad (5.6)$$

als Reflexionskoeffizient gesetzt.

5.1.2. Getterstreifen

Die Geometrie des Gettermaterials, welche ebenfalls den Konstruktionszeichnungen entnommen wurde, war zu kompliziert, als dass sie mit ProVac3D hätte simuliert werden können. Im experimentellen Aufbau verwendet man Getterstreifen der Länge $l = 537$ mm, Breite $b = 30$ mm und Dicke $d = 0,35$ mm, von denen jeweils vier pro Getterkorb spiralförmig auf den Edelstahlstangen aufgewickelt wurden, wie es in Abbildung 5.1 dargestellt ist. ProVac3D unterstützt nur simple Grafikelemente, sodass eine starke Vereinfachung notwendig war.

Jeder Getterstreifen wurde durch zwei separate Zylinder mit unterschiedlichen Radien $r_1 = 47,00$ mm und $r_2 = 42,50$ mm approximiert, welche leicht gegeneinander versetzt angeordnet waren. Auf diese Weise erhält man in der Simulation pro Getterkorb acht aktive Zylinder, welche die vier Getterstreifen im Experiment abbilden. Zur weiteren Vereinfachung wurde auf den Edelstahlkorb verzichtet. Die sich ergebenden Geometrieelemente sind zusammen mit eingebauten virtuellen Flächen, die zur genaueren Analyse der Teilchenverteilung dienen, in Abbildung 5.2 dargestellt.

Durch diese Vereinfachung der Geometrie ergibt sich eine vom Experiment abweichende aktive Fläche der Getterstreifen. Es ist zu beachten, dass die Beschichtung nur eine Breite von 27 mm auf den 30 mm breiten Streifen aufweist. Die aktive Fläche des beidseitig beschichteten Gettermaterials für einen Korb mit vier Streifen im Experiment respektive in

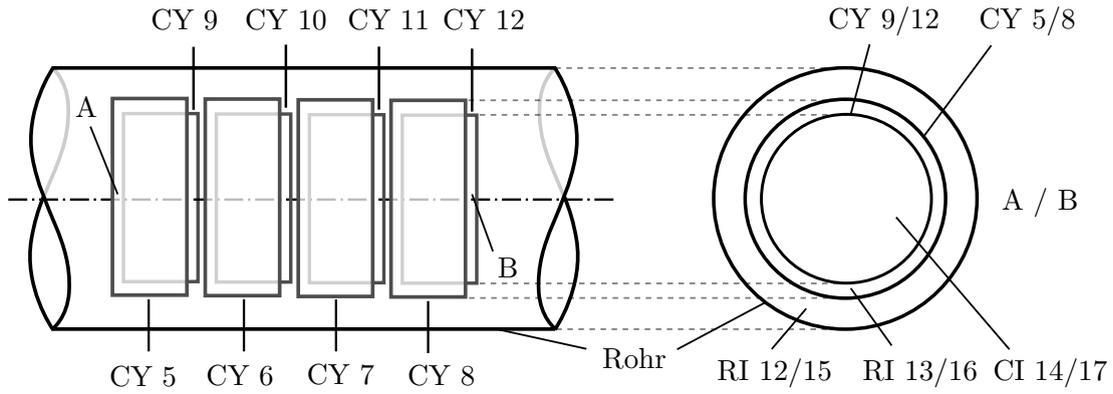


Abbildung 5.2.: **Geometrieelemente des Getterkorbs.** Dargestellt sind die Geometrieelemente aller verwendeten Getterstreifen (links, in Seitenansicht) sowie virtuelle Messflächen am Anfang (A) und Ende (B) des Korbs (rechts, in Frontalansicht).

der Simulation berechnet sich zu

$$\begin{aligned}
 A_{\text{exp}} &= 2 \cdot 4 \cdot 27 \text{ mm} \cdot 537 \text{ mm} \\
 &\approx 1160 \text{ cm}^2 \\
 A_{\text{sim}} &= 2 \cdot 4 \cdot (2\pi \cdot 42,5 \text{ mm} \cdot 30 \text{ mm} + 2\pi \cdot 47 \text{ mm} \cdot 30 \text{ mm}) \\
 &\approx 1350 \text{ cm}^2 .
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Wir überschätzen die aktive Fläche somit um etwa 16,4% im Vergleich zum Experiment. Es wäre möglich gewesen, die Höhe der Zylinder dergestalt zu variieren, dass sich die aktive Fläche in der Simulation der des Experiments angepasst hätte. Allerdings wäre die Geometrie des Getterkorbs stärker verändert worden, wodurch die Simulation den CPS-Testaufbau noch schlechter hätte abbilden können. Die Erhöhung der aktiven Fläche wird also zugunsten einer möglichst realistischen Abbildung des Gettermaterials in Kauf genommen. Bei der Interpretation der Simulationsergebnisse war zu beachten, dass ein systematischer Fehler in der Erhöhung der Fläche zu finden ist. Der Stickingkoeffizient wurde darum in der Analyse entsprechend korrigiert:

$$\alpha_{\text{korr}} \approx 1,164 \cdot \alpha_{\text{sim}} . \tag{5.8}$$

5.2. Simulationsreihe ohne Getterkorb

In der ersten Simulationsreihe sollte geprüft werden, wie sich das Druckverhältnis zwischen den Messstellen CI 5 und CI 8 einstellt, wenn bei offener Turbomolekularpumpe kein Gettermaterial im CPS-Testaufbau vorhanden ist. Druckunterschiede stellen sich dann alleine durch die Geometrie des Testaufbaus ein. Dazu wurden die Volumenelemente CY 5 bis CY 12, welche das Gettermaterial darstellen, vollständig aus der Simulation entfernt.

Bei der Einstellung der Gesamtteilchenzahl N_0 wurde darauf geachtet, dass der statistische Fehler an den relevanten Messstellen gering gehalten werden sollte. Aufgrund der fehlenden Adsorption durch das Gettermaterial und der dadurch bedingten erhöhten Trefferzahl auf

den Messstellen hat sich eine Teilchenzahl von $N_0 = 50\,000$ als hinreichend herausgestellt.

Um eine Varianz von $\pm 20\%$ auf das vom Hersteller angegebene Saugvermögen zu berücksichtigen, wurde jeweils getrennt eine Simulation mit den TMP-Stickingkoeffizienten in (5.4) und (5.5) durchgeführt, wodurch sich eine Simulationsdauer von insgesamt etwa drei Stunden ergab. Die relevanten Ergebnisse finden sich zusammen mit deren Auswertung in Kapitel 6.1 wieder.

5.3. Simulationsreihe mit variierendem Sticking-Koeffizienten

Die zweite Simulationsreihe diente der Untersuchung, inwiefern der Stickingkoeffizient α_{sim} des Gettermaterials die Druckverhältnisse zwischen den beiden relevanten Messstellen CI 5 und CI 8 (siehe Abbildung B.2 im Anhang) beeinflusst. In ProVac3D wurden dazu die Volumenelemente CY 5 bis CY 12, die das Gettermaterial simulieren, wieder in die Input-Datei eingebracht. In separaten Simulationen wurde an diese Elemente Stickingkoeffizienten im Bereich

$$1,0\% \leq \alpha_{\text{sim}} \leq 3,0\% \quad (5.9)$$

mit der Schrittweite $\Delta\alpha_{\text{sim}} = 0,2\%$ vergeben. Dabei wurde jeweils der Fall einer offenen Turbomolekularpumpe mit Stickingkoeffizient (5.4) sowie der einer geschlossenen mit (5.6) simuliert.

Um einen hinreichend geringen statistischen Fehler zu erreichen, wurde die Gesamtteilchenzahl N_0 in jeder Simulation so angepasst, dass für den Fall der offenen TMP die Anzahl ihrer Adsorptionen über 10 000 lag, wodurch sich geometriebedingt eine noch weit größere Trefferzahl auf den Messflächen einstellte. Für die geschlossene Pumpe konnte dieselbe Gesamtteilchenzahl übernommen werden, da diese Trefferzahl durch die fehlende Adsorption der TMP noch anstieg, sodass sich der statistische Fehler weiter verringerte.

Die Simulationsreihe wurde je nach gewähltem Stickingkoeffizienten mit Gesamtteilchenzahlen im Bereich

$$100\,000 \leq N_0 \leq 270\,000 \quad (5.10)$$

in einer Gesamtsimulationsdauer von 13 Stunden und 15 Minuten durchgeführt. Auch für diese Simulationsreihe erfolgt die Angabe und Auswertung der relevanten Simulationsdaten im nachfolgenden Kapitel.

6. Auswertung der Ergebnisse

Im vorigen Kapitel wurde die Implementierung des CPS-Testaufbaus in ProVac3D sowie die einzelnen durchzuführenden Simulationsreihen näher beschrieben. Nachfolgend sollen diese Simulationen nun ausgewertet und mit experimentell verfügbaren Daten verglichen werden, um Aussagen über den Stickingkoeffizienten des im CPS-Testaufbau verwendeten Gettermaterials treffen zu können.

6.1. Ergebnisse der Simulationsreihe ohne Getterkorb

Anhand der Simulation des Testaufbaus ohne Getterkorb sollte zunächst überprüft werden, wie realistisch die Simulation im Vergleich zu den experimentell ermittelten Daten ist [Röt13]. Eine Auswertung zur Ermittlung des Sticking-Koeffizienten in Kapitel 6.2 ist nur dann sinnvoll, wenn sich die Ergebnisse zwischen Experiment und Simulation decken.

Um die Simulationsdaten in eine vergleichbare Form zu bringen ist es notwendig, das Verhältnis R_{sim} zwischen den flächennormierten Trefferzahlen I_8 und I_5 an den Messstellen CI 8 und CI 5 zu bilden:

$$R_{\text{sim}} = \frac{I_8}{I_5} \equiv \frac{H_8}{H_5} . \quad (6.1)$$

Die Gleichheit der Verhältnisse zwischen den Trefferzahlen $H_{5,8}$ und den auf die Oberflächen normierten $I_{5,8}$ folgt aus der Tatsache, dass die kreisrunden Flächen der Messstellen CI 5 und CI 8 in Experiment und Simulation gleich groß sind. Auf diese Weise erhält man

S in l/s	H_5	H_8	R_{sim}
152	1 515 205	1 256 090	$0,829 \pm 0,001$
190	1 286 754	1 024 697	$0,796 \pm 0,001$
228	1 145 831	881 444	$0,769 \pm 0,001$

Tabelle 6.1.: **Ergebnisse der Simulation ohne Getterkorb.** Für eine Gesamtteilchenzahl $N_0 = 50\,000$ und drei verschiedene Saugvermögen S ergaben sich die Trefferzahlen $H_{5,8}$ an den Messstellen CI 5 respektive CI 8. Das Verhältnis $R_{\text{sim}} = H_8/H_5$ ist nach Gleichung (3.5) direkt proportional zu experimentell ermittelten Druckverhältnissen. Zum Vergleich liefert der Mittelwert aller experimentell aufgenommenen Verhältnisse aus Abbildung 6.2 einen Wert von $R_{\text{exp}} = p_8/p_5 = 0,792 \pm 0,017$.

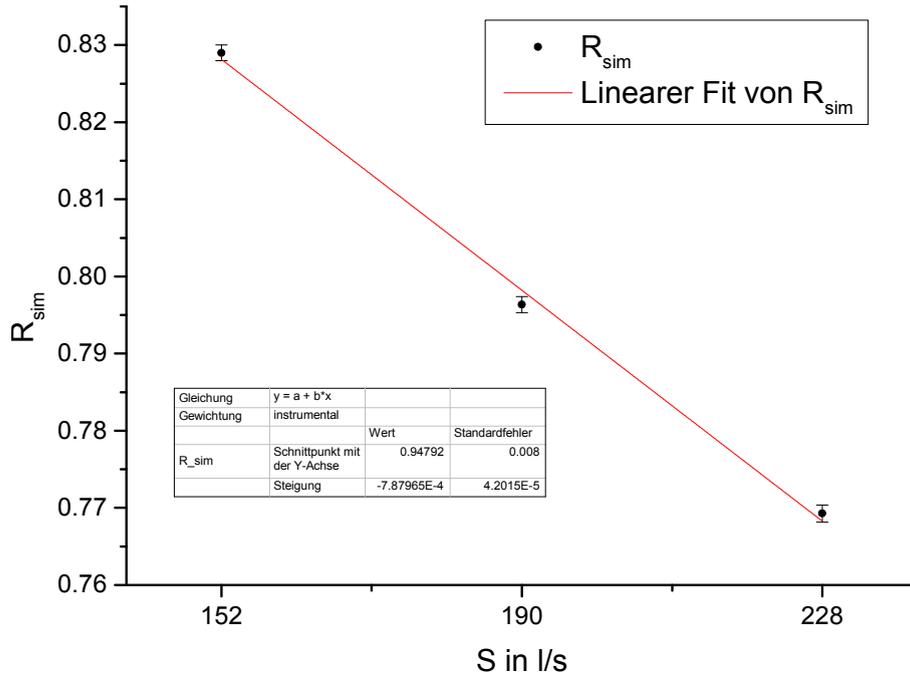


Abbildung 6.1.: **Ergebnisse der Simulation ohne Getterkorb bei variierendem Saugvermögen.** Das Verhältnis R_{sim} zwischen den Druckmessstellen aus Tabelle 6.1 ist über dem Saugvermögen S aufgetragen, welches hinsichtlich der Herstellerangabe $S = 190 \text{ l/s}$ um $\pm 20\%$ variiert wurde. Man erkennt eine hinreichend lineare Veränderung, sodass das Druckverhältnis in diesem Bereich interpoliert werden kann.

nach Gleichung (3.5) direkt ein Druckverhältnis, welches im Idealfall mit dem Verhältnis

$$R_{\text{exp}} = \frac{p_8}{p_5} \quad (6.2)$$

aus experimentell gewonnenen Daten übereinstimmt.

Die Simulationen mit den drei verschiedenen Saugvermögen aus (5.4) und (5.5) und Gesamtteilchenzahlen von jeweils $N_0 = 50\,000$ lieferten die zur Auswertung wesentlichen Ergebnisse in Tabelle 6.1. Dort findet sich auch direkt das berechnete Verhältnis (6.1) zusammen mit dem statistischen Fehler $\sigma_{R_{\text{sim}}}$ vor. Um diesen zu berechnen, benötigt man zunächst den statistischen Fehler auf die Trefferzahl H_i an der Messstelle i mit¹

$$\sigma_i = \sqrt{H_i} . \quad (6.3)$$

Fehler auf Adsorptionszahlen O_i lassen sich analog angeben. Mit Hilfe der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung

$$\begin{aligned} \sigma_{R_{\text{sim}}} &= \sqrt{\left(\frac{\partial R_{\text{sim}}}{\partial H_5} \sigma_5\right)^2 + \left(\frac{\partial R_{\text{sim}}}{\partial H_8} \sigma_8\right)^2} = |R_{\text{sim}}| \sqrt{\left(\frac{\sigma_5}{H_5}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_8}{H_8}\right)^2} \\ &= |R_{\text{sim}}| \sqrt{\frac{1}{H_5} + \frac{1}{H_8}} \end{aligned} \quad (6.4)$$

¹Persönliches Gespräch mit Dr. Joachim Wolf

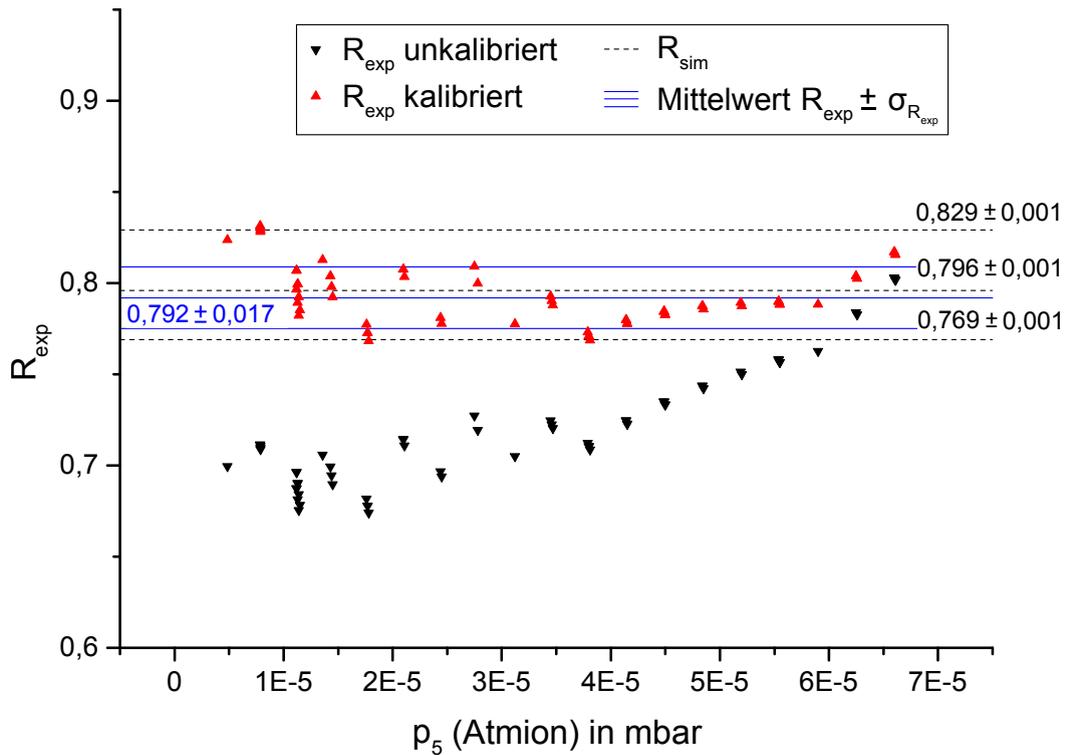


Abbildung 6.2.: **Ergebnisse der Messung und Simulation ohne Getterkorb [Röt13]**. Das Verhältnis $R_{\text{exp}} = p_8/p_5$ zwischen den Druckmessstellen ist über dem Druck p_5 (Atmion) aufgetragen. Die unkalibrierten Messergebnisse wurden mit Hilfe einer Kalibrationsmessung korrigiert. Man sieht, dass der als durchgezogene Linie dargestellte Mittelwert der kalibrierten Verhältnisse zusammen mit dessen Standardabweichung im Bereich der simulierten Verhältnisse (gestrichelte Linien) aus Tabelle 6.1 liegt, wodurch die Messung die Richtigkeit der Simulation bestätigt. Während der Messzeit von 635 s stiegen sowohl Druck als auch Gasfluss stets an.

lässt sich dann der Fehler auf das Verhältnis R_{sim} bestimmen. Die Druckverhältnisse aus Tabelle 6.1 sind zusätzlich in Abbildung 6.1 über dem Saugvermögen S aufgetragen. Es ist eine hinreichend lineare Abhängigkeit zwischen R_{sim} und S erkennbar, sodass eine lineare Interpolation für den $\pm 20\%$ -Bereich möglich ist.

Zur Überprüfung der Simulation wurde eine Messreihe mit ausgeheiztem CPS-Testaufbau ohne vorhandenes Gettermaterial durchgeführt. Dazu wurde der Gasfluss in einem Zeitraum von 635 s permanent erhöht und die Drücke an den Messstellen CI 5 und CI 8 (nach Kapitel 5.1 entsprechend die vom Atmion respektive MKS angezeigten Drücke) notiert sowie deren Verhältnisse gebildet. Durch zwei separate Messreihen wurden die Druckmessgeräte außerdem gegeneinander kalibriert und die Verhältnisse um diesen Faktor korrigiert. Sowohl die ursprünglichen als auch die kalibrierten Verhältnisse wurden in Abbildung 6.2 über dem Druck p_5 des Atmion-Messgeräts aufgetragen [Röt13]. Die durchgezogene Linie ist der Mittelwert über alle Messwerte im betrachteten Zeitraum zusammen mit dessen Standardabweichung und die gestrichelten Horizontalen stellen die sich aus der Simulation ergebenden Verhältnisse aus Tabelle 6.1 dar.

Es lässt sich erkennen, dass das simulierte Ergebnis für ein Saugvermögen von $S = 190 \text{ l/s}$

α_{sim}	α_{korrr}	N_0	O_{ges}	O_{ges}/N_0	H_8	H_5	R_{sim}
1,0%	1,16%	100 000	79 526	(79, 526 \pm 0, 128)%	417 724	758 714	0,5506 \pm 0,0011
1,2%	1,40%	105 000	86 617	(82, 492 \pm 0, 117)%	377 843	734 966	0,5141 \pm 0,0010
1,4%	1,63%	115 000	96 796	(84, 170 \pm 0, 108)%	367 823	742 034	0,4957 \pm 0,0010
1,6%	1,86%	170 000	145 953	(85, 855 \pm 0, 085)%	483 176	1 029 660	0,4693 \pm 0,0008
1,8%	2,10%	170 000	148 433	(87, 314 \pm 0, 081)%	436 066	979 974	0,4450 \pm 0,0008
2,0%	2,33%	180 000	158 903	(88, 279 \pm 0, 076)%	420 436	993 996	0,4230 \pm 0,0008
2,2%	2,56%	200 000	178 463	(89, 232 \pm 0, 069)%	432 401	1 057 575	0,4089 \pm 0,0007
2,4%	2,79%	220 000	197 906	(89, 957 \pm 0, 064)%	443 904	1 128 220	0,3935 \pm 0,0007
2,6%	3,03%	250 000	226 569	(90, 628 \pm 0, 058)%	468 668	1 240 689	0,3778 \pm 0,0006
2,8%	3,26%	260 000	237 372	(91, 297 \pm 0, 055)%	455 281	1 255 934	0,3625 \pm 0,0006
3,0%	3,49%	270 000	247 575	(91, 694 \pm 0, 053)%	448 996	1 272 055	0,3530 \pm 0,0006

Tabelle 6.2.: **Ergebnisse der Simulationsreihe mit variierendem Stickingkoeffizienten (offene TMP)**. α_{sim} : in der Simulation verwendeter Stickingkoeffizient, α_{korrr} : nach Gleichung (5.8) korrigierter Stickingkoeffizient, N_0 : Gesamtteilchenzahl, O_{ges} : adsorbierte Teilchenzahl aller Getterstreifen, $H_{5,8}$: Trefferzahlen auf den Oberflächen CI 5 und CI 8. Die Fehler auf O_{ges}/N_0 ergaben sich über die Binomialverteilung und die auf R_{sim} über die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung.

innerhalb der Standardabweichung des experimentellen Mittelwerts liegt. Insbesondere wurde gezeigt, dass die experimentellen Resultate unter Berücksichtigung aller systematischen Fehler der Einzelmessungen innerhalb der Ergebnisse des 20%-Bereichs des Saugvermögens der TMP in Tabelle 6.1 liegen. Somit wurde bestätigt, dass ProVac3D für die Simulation des CPS-Testaufbaus geeignet ist und realistische Ergebnisse liefert.

6.2. Ergebnisse der Simulationsreihe mit variierendem Stickingkoeffizienten

Die zweite Simulationsreihe sollte es ermöglichen, Rückschlüsse auf den Stickingkoeffizienten des Gettermaterials zu ziehen, wenn experimentelle Daten nach unterschiedlichen Ausheizphasen des Gettermaterials vorliegen. Dazu wurde nach Kapitel 5.3 dem Gettermaterial verschiedene Stickingkoeffizienten zugewiesen und jeweils der Fall einer offenen TMP mit Stickingkoeffizient (5.4) sowie der einer geschlossenen mit (5.6) betrachtet. In den Tabellen 6.2 und 6.3 finden sich die zur Auswertung relevanten Simulationsergebnisse wieder. Mit O_{ges} ist dabei die Gesamtheit aller in den Getterstreifen adsorbierten Teilchen bezeichnet. Der korrigierte Stickingkoeffizient ergibt sich aufgrund der Differenz der Getterflächen zwischen Simulation und realer Geometrie über Gleichung (5.8).

Die statistischen Fehler ergaben sich für R_{sim} erneut aus der Gaußschen Fehlerfortpflanzung in Gleichung (6.4). Die Fehler auf das Verhältnis O_{ges}/N_0 hingegen wurden über die Binomialverteilung berechnet. Sei $\rho = O_{\text{ges}}/N_0$ das Verhältnis, so ergibt sich der Fehler auf diesen Wert über

$$\sigma_\rho = \frac{\sigma_{\text{binom}}}{N_0} = \frac{\sqrt{N_0\rho(1-\rho)}}{N_0} = \sqrt{\frac{\rho(1-\rho)}{N_0}}. \quad (6.5)$$

α_{sim}	α_{korr}	N_0	O_{ges}	O_{ges}/N_0	H_8	H_5	R_{sim}
1,0%	1,16%	100 000	100 000	100,000%	593 616	879 549	0,6749 \pm 0,0011
1,2%	1,40%	105 000	105 000	100,000%	524 923	821 097	0,6393 \pm 0,0011
1,4%	1,63%	115 000	115 000	100,000%	535 144	887 163	0,6032 \pm 0,0010
1,6%	1,86%	170 000	170 000	100,000%	639 878	1 123 301	0,5696 \pm 0,0009
1,8%	2,10%	170 000	170 000	100,000%	579 535	1 053 145	0,5503 \pm 0,0009
2,0%	2,33%	180 000	180 000	100,000%	548 229	1 053 724	0,5203 \pm 0,0009
2,2%	2,56%	200 000	200 000	100,000%	558 728	1 121 733	0,4981 \pm 0,0008
2,4%	2,79%	220 000	220 000	100,000%	561 081	1 180 879	0,4751 \pm 0,0008
2,6%	3,03%	250 000	250 000	100,000%	595 672	1 294 959	0,4600 \pm 0,0007
2,8%	3,26%	260 000	260 000	100,000%	576 270	1 298 574	0,4438 \pm 0,0007
3,0%	3,49%	270 000	270 000	100,000%	558 400	1 317 811	0,4237 \pm 0,0007

Tabelle 6.3.: **Ergebnisse der Simulationsreihe mit variierendem Stickingkoeffizienten (geschlossene TMP).** α_{sim} : in der Simulation verwendeter Stickingkoeffizient, α_{korr} : nach Gleichung (5.8) korrigierter Stickingkoeffizient, N_0 : Gesamtteilchenzahl, O_{ges} : adsorbierte Teilchenzahl aller Getterstreifen, $H_{5,8}$: Trefferzahlen auf den Oberflächen CI 5 und CI 8. Der Fehler auf R_{sim} ergab sich über die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung.

TMP	z_0	a	c
offen	0,243 \pm 0,015	0,512 \pm 0,006	-2,263 \pm 0,190
geschlossen	0,271 \pm 0,020	0,652 \pm 0,008	-2,427 \pm 0,199

Tabelle 6.4.: **Parameter der exponentiellen Regressionen.** Für den Fall der offenen und geschlossenen TMP ergeben sich Regressionsparameter z_0 , a und c , wenn ein exponentieller Verlauf gemäß Gleichung (6.6) an die Daten angepasst wird.

Zur weiteren Analyse wurden die Simulationsergebnisse in Schaubild 6.3 übertragen, wo das Verhältnis R_{sim} der Trefferzahlen H_8 und H_5 über dem Stickingkoeffizienten α_{korr} dargestellt ist. Es lässt sich sowohl im Fall der offenen als auch geschlossenen TMP ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen Stickingkoeffizient des Getters und Druckverhältnis feststellen, woraus sich schließen lässt, dass der Teilchenfluss zwischen dem Gettermaterial, der TMP und den beiden Vierer-Kreuzen bei steigendem Stickingkoeffizienten einem Gleichgewicht entgegen strebt. Zur empirischen Funktionsanpassung wurde ein exponentieller Zusammenhang der Form

$$R_{\text{sim}} = a \cdot \exp\left(\frac{\alpha_{\text{korr}}}{c}\right) + z_0 \quad (6.6)$$

an die Datenpunkte der Simulation in Abbildung 6.3 angepasst. Die Regressionsparameter finden sich in Tabelle 6.4 wieder. Ein Umstellen dieser Gleichung führt auf:

$$\alpha_{\text{korr}} = c \cdot \ln\left(\frac{R_{\text{sim}} - z_0}{a}\right) . \quad (6.7)$$

Liegen experimentelle Daten hinsichtlich des Druckverhältnisses $R_{\text{exp}} = p_8/p_5$ zwischen

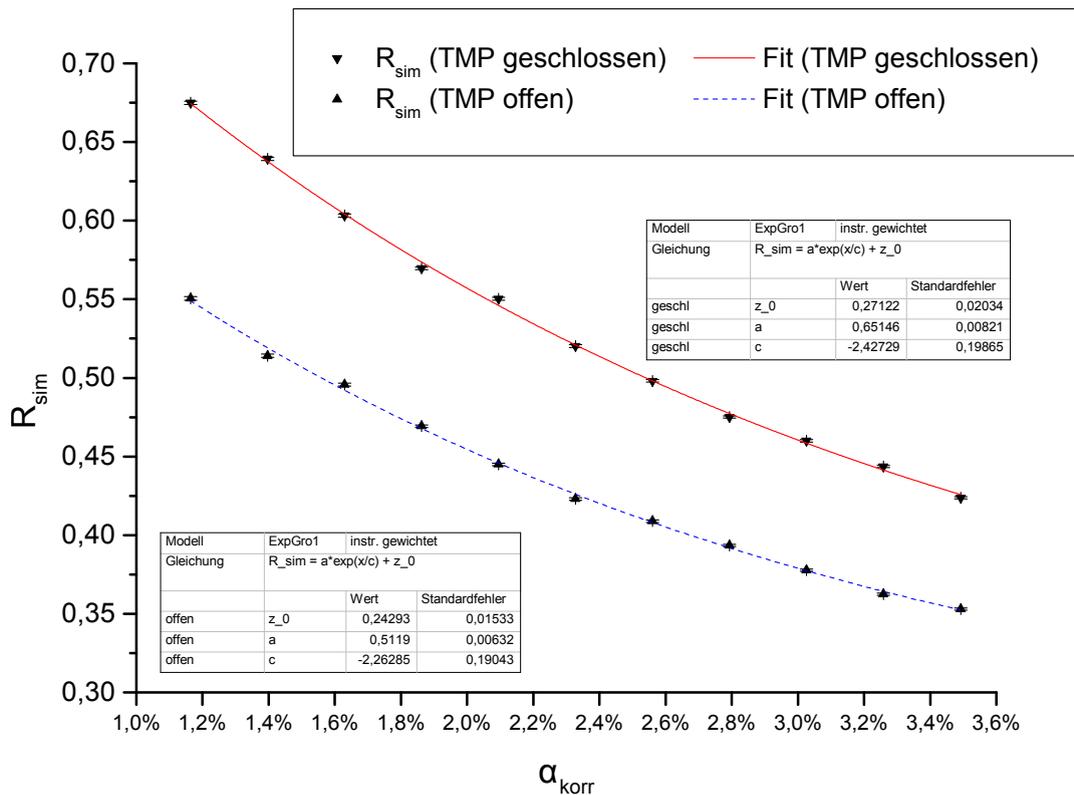


Abbildung 6.3.: **Auswertung der Simulationsreihe mit variierenden Getter-Stickingkoeffizienten.** Aufgetragen ist das Verhältnis $R_{\text{sim}} = H_8/H_5$ über dem korrigierten Getter-Stickingkoeffizienten sowohl für den Fall der geschlossenen als auch offenen TMP. Die Funktionsanpassungen erfolgten durch exponentielle Fits.

den Messstellen CI 8 und CI 5 (und damit nach Tabelle 5.1 zwischen MKS und Atmion) vor, so entspricht dieses nach Gleichung (3.5) näherungsweise dem Verhältnis R_{sim} der beiden Trefferzahlen der Messstellen. Mit Gleichung (6.7) kann man dann direkt für jedes Messergebnis den experimentellen Stickingkoeffizienten $\alpha_{\text{NEG}} \equiv \alpha_{\text{korr}}$ der Getterstreifen bestimmen.

Zur Entstehungszeit der Bachelorarbeit lagen aus einer Messreihe experimentelle Daten vor, die für eine weitere Auswertung geeignet erschienen. Dabei wurden die experimentellen Rahmenbedingungen aus [Day07] reproduziert, indem der CPS-Testaufbau für 24 Stunden auf 350 °C aufgeheizt wurde, wobei das Gettermaterial vollständig hätte aktiviert werden müssen. Es wurde dann Wasserstoff mit unterschiedlichen Flüssen in den CPS-Testaufbau eingelassen, wobei die TMP in den wesentlichen Messzeiten des Experiments geschlossen wurde. Nähere Informationen zu dieser Messreihe finden sich in [Röt13].

In Abbildung 6.4 sind die für die Auswertung geeigneten Druckverhältnisse R_{exp} über dem Druck p_5 des Atmion-Messgeräts aufgetragen. Die relativ breite Streuung der Messergebnisse liegt zum einen an der begrenzten Genauigkeit der Messgeräte in diesen Druckbereichen und zum anderen an den Flussänderungen des Wasserstoffs während der Messung. Mit Hilfe von Gleichung (6.6) errechnet man, dass sich für einen minimalen Stickingkoeffizienten $\alpha_{\text{korr}} = 0\%$ das extrapolierte Verhältnis $R_{\text{sim}} = 0,923$ ergibt. In Abbildung 6.4

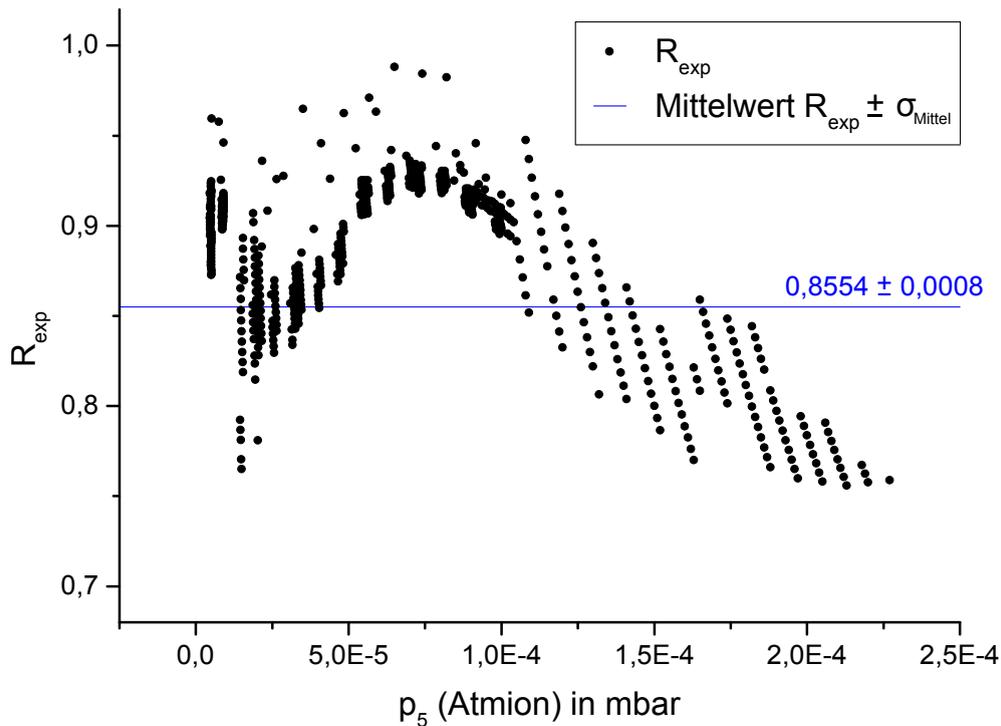


Abbildung 6.4.: **Messreihe nach Ausheizen des Getters bei 350°C für 24 Stunden [Röt13]**. Gemessen wurden die Drücke p_8 (MKS) sowie p_5 (Atmion), deren Verhältnis R_{exp} als Punkte über der Zeit aufgetragen wurde. Zusätzlich ist als durchgängige Linie der Mittelwert über alle Verhältnisse dargestellt und mit σ_{Mittel} der Standardfehler auf den Mittelwert angegeben. Die TMP war während dem Versuch die meiste Zeit über geschlossen. Unterbrechungen im Verlauf der Messreihe resultierten aus Änderungen im Wasserstofffluss.

ist jedoch zu erkennen, dass sich im Experiment teils größere Druckverhältnisse eingestellt haben. Die Extrapolation der Simulation ist für diese Bereiche nicht geeignet, weshalb die Umrechnung einzelner Messwerte in Stickingkoeffizienten α_{NEG} keine genauen Ergebnisse liefern kann. Es wurde stattdessen der Mittelwert über alle experimentellen Verhältnisse R_{exp} gebildet, welcher sich zu

$$R_{\text{exp}} = 0,8554 \pm 0,0008 \quad (6.8)$$

ergab, wobei der angegebene Fehler der Standardfehler des Mittelwerts darstellt. Dieser Mittelwert wurde mit Hilfe von Gleichung (6.7) in einen Stickingkoeffizienten umgerechnet:

$$\alpha_{\text{NEG}} = (0,266 \pm 0,003 \pm 0,092) \% . \quad (6.9)$$

Sowohl statistischer als auch systematischer Fehler (in der Gleichung in dieser Reihenfolge) ergaben sich über die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung. Für den statistischen Fehler wurde dabei die Standardabweichung in Gleichung (6.9) fortgepflanzt und der systematische Fehler ergab sich über die Standardabweichungen der Regressionsparameter in Tabelle 6.4.

Es ist zu beachten, dass der in Gleichung (6.9) angegebene Mittelwert nur als grober

Richtwert zu verstehen ist, da die durch die Messung gelieferten Druckverhältnisse stark gestreut waren und zudem außerhalb des simulierten Bereichs in Abbildung 6.3 lagen. Um diesen Bereich mit größerer Genauigkeit abzudecken, wären weitere Simulationen mit niedrigeren Stickingkoeffizienten notwendig.

Der in Gleichung (6.9) erhaltene Stickingkoeffizient des Gettermaterials weicht erheblich von dem in [Day07] angegebenen Wert von etwa 2,9% ab, obwohl die Ausheizphasen in beiden Fällen gleich waren. Es hat sich nach der Durchführung der Messreihe jedoch herausgestellt, dass das Gettermaterial beim Ausheizen vermutlich mit Metall aus der galvanisch aufgetragenen Goldschicht verunreinigt wurde. Eine genauere Analyse der Oberfläche hat aufgezeigt, dass sich Thallium unbekanntes Ursprungs auf dem Getter gesammelt hat. Außerdem wird vermutet, dass sich Teile der Goldschicht abgelöst und auf dem Getter festgesetzt haben, wofür bislang allerdings kein gesicherter Nachweis besteht [Röt13]. In beiden Fällen reduzierten die angelagerten Fremdmetalle das Saugvermögen des Gettermaterials erheblich. Anhand der Auswertung in Abbildung 6.4 sowie Gleichung (6.9) ist zwar erkennbar, dass die Getterstreifen aktiviert wurden, allerdings wurde bei Weitem nicht der Stickingkoeffizient erreicht, der sich nach einer Ausheizphase für 24 Stunden bei 350 °C hätte einstellen müssen.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Diese Bachelorarbeit wurde im Rahmen des KATRIN-Experiments am Campus Nord durchgeführt. Ein wesentlicher Bestandteil von KATRIN sind die Pumpstrecken, die den Tritiumfluss in den Spektrometerbereichen um 14 Größenordnungen reduzieren müssen. Der letzte Teil der Pumpstrecke besteht aus einer Non-Evaporable-Getterpumpe (NEG), die in der kryogenen Pumpstrecke (CPS) integriert ist. Die Pumpwirkung der NEG basiert dabei auf einer chemischen Reaktion zwischen Tritium und Oberfläche des Getters, wodurch das Gas gebunden wird. Dazu müssen die verwendeten NEG-Streifen vom Typ St 707 des Herstellers SAES Getters thermisch aktiviert werden, was üblicherweise bei 350 °C für 24 Stunden erfolgt. Die innere Oberfläche der CPS wird jedoch zum Schutz des Eindiffundierens von Tritium in den Edelstahl mit Gold beschichtet. Aufgrund der thermischen Empfindlichkeit dieser Schicht stellte sich die Frage, welche Stickingkoeffizienten erreicht werden können, falls die NEG bei niedrigeren Temperaturen ausgeheizt werden.

Um die Auswirkungen der Ausheizprozesse auf die CPS zu untersuchen, wurde der CPS-Testaufbau errichtet. Dieser besteht neben einem Pump- und Gaseinlasssystem für Wasserstoff aus einem goldbeschichteten Rohr, in das Getterstreifen eingebracht werden können. Der gesamte CPS-Testaufbau lässt sich gezielt bei verschiedenen Temperaturen bis 350 °C ausheizen. Mit Hilfe von Druckmessgeräten an den beiden Enden des Rohres lässt sich außerdem die Druckverteilung des Wasserstoffs in der Anlage überwachen.

Bei den Testmessungen soll der Stickingkoeffizient des Gettermaterials in Abhängigkeit von der Ausheiztemperatur bestimmt werden. Zur Bestimmung des Stickingkoeffizienten ist eine Computersimulation notwendig, um die Messwerte interpretieren zu können. Im Rahmen dieser Bachelorarbeit wurden dafür zunächst die bewährten Monte-Carlo-Simulationsprogramme ProVac3D und Molflow+ verglichen, wobei sich ersteres aufgrund seiner hohen Simulationsgeschwindigkeit und einfachen Handhabung durchsetzen konnte. Um dessen genaue Arbeitsweise besser zu verstehen, wurde in mehreren Quellstudien überprüft, dass die Teilchenemission von Oberflächen dem Lambert'schen Cosinusetz folgt. Überdies wurde gezeigt, wie wichtig eine detailgetreue Modellierung des Gaseinlasses für die Simulation ist.

Nach den Quellenanalysen wurde der eigentliche CPS-Testaufbau als Computermodell in ProVac3D erstellt, wobei in Übereinstimmung mit dem Experiment ein Getterkorb im goldbeschichteten Rohr platziert wurde. Die aktiven Flächen in der Simulation waren die Getterstreifen sowie die Turbomolekularpumpe mit jeweils eigenen Stickingkoeffizienten.

In einer ersten Simulationsreihe wurde zunächst der Fall betrachtet, dass sich kein Gettermaterial im Testaufbau befand. Dabei wurde das vom Hersteller angegebene Saugvermögen der TMP angenommen. ProVac3D lieferte mit der Anzahl der Treffer von Testteilchen auf alle Oberflächen zunächst rein statistische Daten, die jedoch durch Bildung des Verhältnisses von Trefferzahlen verschiedener Oberflächen den Druckverhältnissen dieser Flächen entsprechen. Die Simulation lieferte damit das Druckverhältnis zwischen den zwei relevanten Druckmessgeräten (MKS/Atmion) der Anlage. Durch einen Vergleich mit experimentell verfügbaren Daten wurde die Richtigkeit der Simulation des CPS-Testaufbaus bestätigt.

Anschließend wurde in einer zweiten Simulationsreihe der Getterkorb mit variierenden Stickingkoeffizienten simuliert. Dabei wurde jeweils der Fall einer offenen und geschlossenen TMP betrachtet. Es konnten für beide Fälle die Zusammenhänge zwischen Stickingkoeffizienten des NEG-Materials und der sich einstellenden Druckverhältnisse gewonnen werden, wodurch es nun möglich ist, aus den experimentellen Messergebnissen auf den Stickingkoeffizienten zu schließen. Am CPS-Testaufbau wurde dafür das Gettermaterial für 24 Stunden bei 350 °C ausgeheizt und nach Abkühlen auf Raumtemperatur die Druckverhältnisse bei geschlossener TMP aufgenommen. Es stellte sich dabei heraus, dass die NEG-Streifen zwar aktiviert wurden, jedoch einen Stickingkoeffizienten von nur etwa 0,3% erreicht haben, was weit unterhalb des erwarteten Werts von 2,9% lag. Als Hauptgrund dieser Abweichung wurde das Aufdampfen fremder Metalle auf das Gettermaterial während der Ausheizphase angenommen.

Aufgrund der bisher ungeklärten Beschichtung des Gettermaterials konnte nur eine Messreihe für 350 °C analysiert werden. Zukünftig wäre es möglich, weitere Messreihen bei niedrigeren Temperaturen aufzunehmen, um über den Stickingkoeffizienten des NEG-Materials auf den Grad der Aktivierung zu schließen. Sollte sich dabei weiterhin eine Beschichtung des Gettermaterials ergeben, so wäre es außerdem notwendig, die Simulationen um niedrigere Stickingkoeffizienten zu ergänzen, da die Druckverhältnisse nur für Koeffizienten zwischen 1% und 3% simuliert wurden. Nicht zuletzt sollte geklärt werden, woher die beim Ausheizen auftretenden Fremdatome stammen und ob deren Emission reproduzierbar ist, da dies Konsequenzen für die Goldbeschichtung der in KATRIN eingesetzten CPS nach sich ziehen könnte.

Literaturverzeichnis

- [A⁺01] A. Aguilar *et al.*: *Evidence for Neutrino Oscillations from the Observation of Electron Anti-neutrinos in a Muon Anti-Neutrino Beam*. Phys.Rev.D64:112007,2001, 2001. <http://arxiv.org/abs/hep-ex/0104049>.
- [AIR] AIR LIQUIDE Deutschland GmbH: *Datenblatt Wasserstoff*. <http://www.airliquide.de/inc/dokument.php/standard/423/Wasserstoff.pdf>, Stand: 20. Juni 2013.
- [Bac12] F. Bachmann: *Aufbau und Inbetriebnahme des CPS-Testaufbaus*. Bachelorarbeit, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Dezember 2012.
- [BC95] C. Benvenuti und P. Chiggiato: *Pumping characteristics of the St707 non-evaporable getter (Zr 70-V 24.6-Fe 5.4 wt%)*. Journal of Vacuum Science and Technology A, 14:3278–3282, 1995.
- [Böh96] P. Böhme: *Programmiersprache C/C++*, 1996. <http://www2.informatik.uni-halle.de/lehre/c/>, Stand: 05. April 2013.
- [CER] CERN: *Molflow+. A Monte-Carlo simulator package developed at CERN*. <http://test-molflow.web.cern.ch/>, Stand: 26. Juni 2013.
- [Day07] C. Day: *Determination of the sticking probability of a Zr–V–Fe nonevaporable getter strip*. Journal of Vacuum Science and Technology A, 25(4), 2007.
- [Fer34] E. Fermi: *Versuch einer Theorie der β -Strahlen. I*. Zeitschrift für Physik, 88(3-4):161–177, 1934, ISSN 0044-3328. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01351864>.
- [Gör10] S. Görhardt: *Reduktion der durch Radon induzierten Untergrundprozesse in den KATRIN Spektrometern*. Diplomarbeit, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Oktober 2010.
- [Jou08] K. Jousten (Herausgeber): *Handbook of Vacuum Technology*. Wiley-VCH, 1. Auflage, 2008, ISBN 9783527407231.
- [KAT05] KATRIN Collaboration: *KATRIN Design Report 2004*. Wissenschaftliche Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, Februar 2005. <http://bibliothek.fzk.de/zb/berichte/FZKA7090.pdf>.
- [KAT08] KATRIN Collaboration: *Technical Specification Cryogenic Pumping Section (CPS)*. Annex TA 10-DPS-4210-1, 2008.
- [KR13] M. Krause und C. Röttle: *Flussdiagramm des CPS-Testaufbaus*, Juni 2013.
- [L⁺85a] V.M. Lobashev *et al.*: *A method for measuring the electron antineutrino rest mass*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 240(2):305 – 310, 1985, ISSN 0168-9002. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900285906400>.

- [L⁺85b] V.M. Lobashev *et al.*: *Numerical simulation of a low-energy electron electrostatic integral spectrometer with adiabatic magnetic collimation*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 238(2-3):496 – 499, 1985, ISSN 0168-9002. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168900285904917>.
- [Leu07] nach J. Leunig: *Schematic drawings of KATRIN*. 2007.
- [LG10] X. Luo und S. Görhardt: *Short documentation for ProVac3D (GUI)*. August 2010.
- [Luo10] X. Luo: *3D density Profile of the Vacuum system (ProVac3D)*, September 2010.
- [Luo11] X. Luo: *ProVac3D – a TPMC program for complex vacuum systems*, Mai 2011. http://www.itep.kit.edu/downloads/34_Luo.pdf.
- [MNS62] Z. Maki, M. Nakagawa und S. Sakata: *Remarks on the Unified Model of Elementary Particles*. Progress of Theoretical Physics, 28:870–880, November 1962. <http://adsabs.harvard.edu/abs/1962PThPh..28..870M>.
- [Nat] National Physical Laboratory: *Pressure ranges corresponding to the degree of vacuum*. [http://www.npl.co.uk/reference/faqs/what-do-high-vacuum-and-low-vacuum-mean-\(faq-pressure\)](http://www.npl.co.uk/reference/faqs/what-do-high-vacuum-and-low-vacuum-mean-(faq-pressure)), Stand: 04. Mai 2013.
- [NIS] NIST National Institute of Standards and Technology: *The NIST Reference on Constants, Units and Uncertainty*. <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>, Stand: 28. Juni 2013.
- [Oer] Oerlikon Leybold Vacuum GmbH: *Turbovac SL 300*. https://leyboldproducts.oerlikon.com/products/pics/FileResources/Orig/TD_Technische%20Daten/TD_800170V3006_EN.pdf, Stand: 07. April 2013.
- [P⁺92] A. Picard *et al.*: *A solenoid retarding spectrometer with high resolution and transmission for keV electrons*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 63(3):345 – 358, 1992, ISSN 0168-583X. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X9295119C>.
- [Pau77] W. Pauli: *Fünf Arbeiten zum Ausschließungsprinzip und zum Neutrino*. Texte zur Forschung, 27, 1977.
- [Per00] D. H. Perkins: *Introduction to High Energy Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 4. Aufl. Auflage, 2000, ISBN 978-0-521-62196-0.
- [Röt13] C. Röttele: *Optimierung der Aktivierungstemperatur der CPS Getterpumpe im KATRIN Experiment*. Bachelorarbeit in Vorbereitung, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, 2013.
- [SAE94] SAES Getters: *Technical Specification: St 707 / CTAM / 30 D Strip*. Mai 1994. Doc. Nr. M.F140.0021.21, SAES Code 4F0345.
- [Smi07] W. Smith: *Modern Optical Engineering, 4th Ed.* McGraw Hill professional. 2007.
- [Stu07] M. Sturm: *Bestimmung der Tritiumflussreduktion einer Tritium-Argon-Frostpumpe für das Neutrinomassenexperiment KATRIN*. Diplomarbeit, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Januar 2007.

Anhang

A. Verteilungsstudie

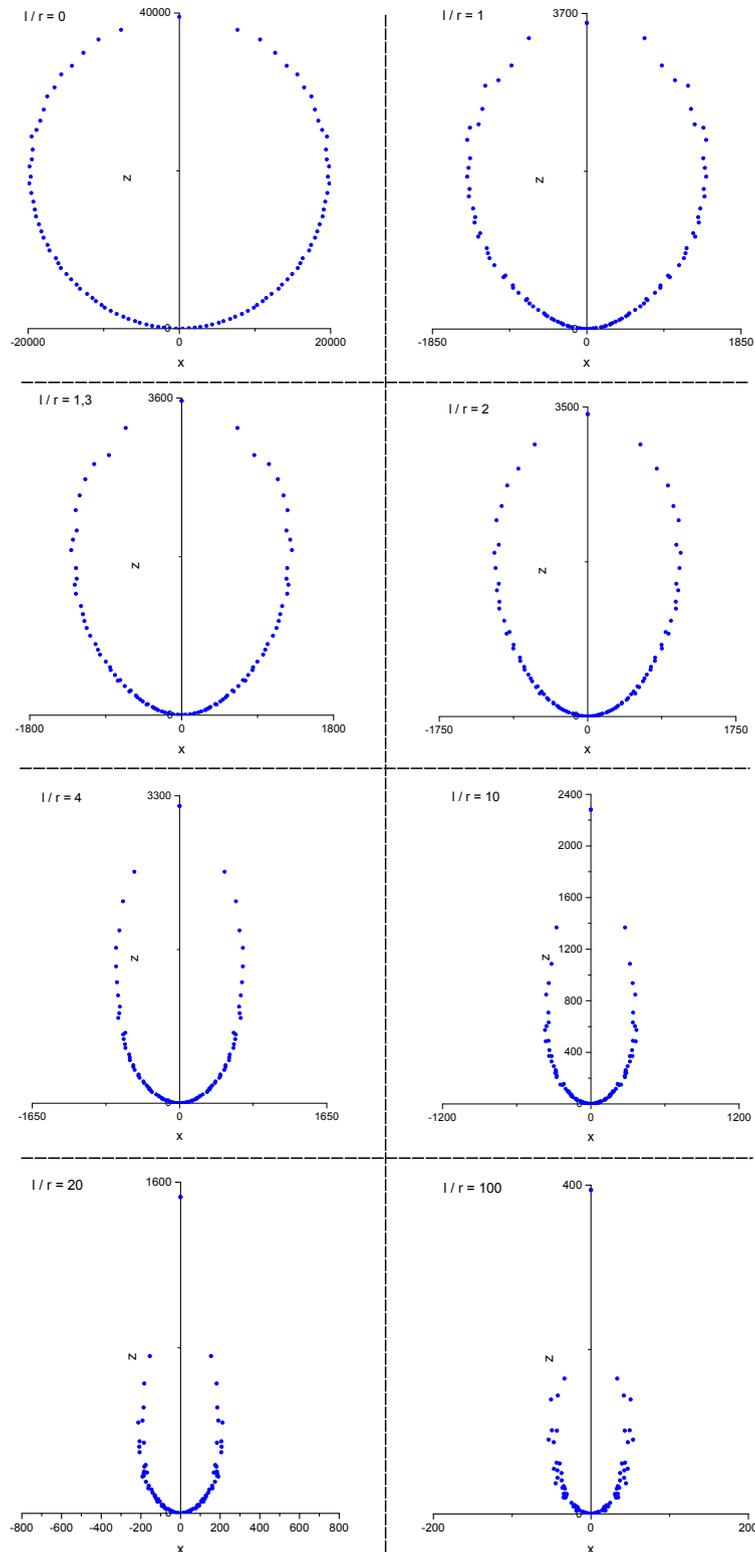


Abbildung A.1.: **Abstrahlcharakteristik je nach Verhältnis l/r .** Die Simulationsergebnisse sind in der Form $(\Delta N, \Theta_n)$ aufgetragen, wobei ΔN die Anzahl adsorbierter Teilchen und Θ_n der Winkel zum n -ten Kegelstumpf des Testdoms ist.

B. Simulierter CPS-Testaufbau

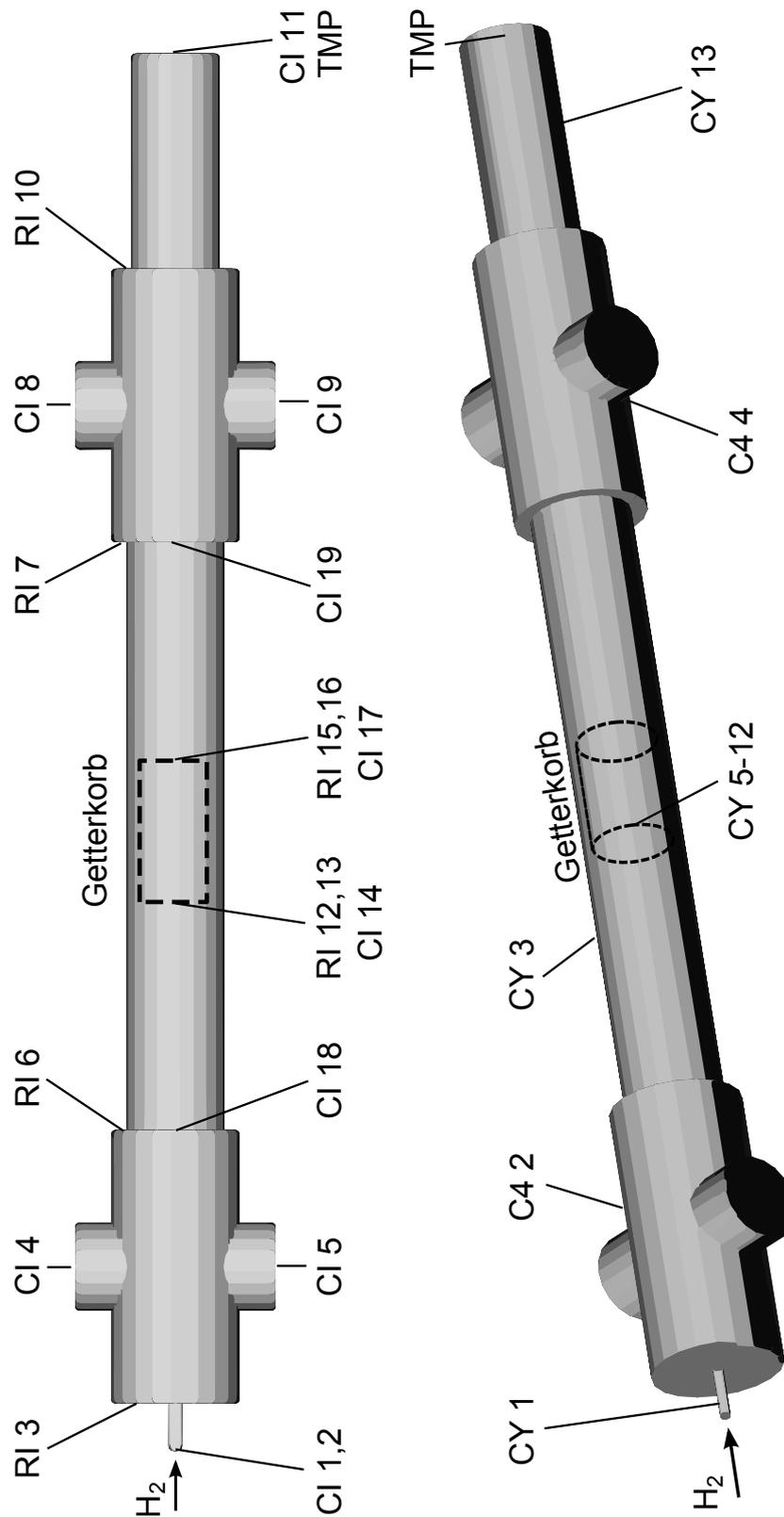


Abbildung B.2.: Überblick über den simulierten CPS-Testaufbau. Dargestellt sind sämtliche Flächen- (links) sowie Volumenelementen (rechts). Die ausgezeichnete z -Achse zeigt vom Gaseinlass (H_2) zur Turbomolekularpumpe (TMP).

C. Datenblatt für Wasserstoff

Kapitel 7.2

Wasserstoff

 H_2

Synonyma: -

Allgemeines

Wesentliche Eigenschaften

Nachweis

Kennzeichnung der Flaschen

Ventilanschluss nach DIN 477

Werkstoffe DIN EN ISO 11114

brennbar, sehr viel leichter als Luft

Detektor für brennbare Gase, Prüfröhrchen

rote Schulter, Aufkleber mit Produktbezeichnung

Nr. 1: W 21,80 x 1/4" LH / 300 bar: Teil 5: M 30 x 1,5 mm LH Nr. 57

Flaschen u. Ventile: alle üblichen Werkstoffe

Normalisierte/vergütete Stähle nur unter Beachtung der geforderten

max. Festigkeitswerte; Gefahr von Wasserstoffversprödung

Dichtungen: PCTFE, PVDF, PA, PE, IIR, NBR, CR, FKM, EPDM

Klasse 2 UN Nr. 1049

ADR Klasse und UN Nr.

Sicherheitstechnische Kenngrößen

Zündbereich: 4,0 - 77 Vol.%

Zündtemperatur: 560 °C

MAK-Wert:

Langzeitschädigung:

Umweltschädigung:

Beschreibung und chemische Einordnung

Farbloses, brennbares, geruchloses Gas. Sehr viel leichter als Luft. Bildet mit Sauerstoff oder Chlor sehr brisant explodierende Gemische (Knallgas!). Bei hohen Ausströmgeschwindigkeiten besteht die Gefahr der Selbstentzündung. Die dabei entstehende Flamme ist kaum sichtbar.

Physikalische Eigenschaften als n-Wasserstoff

Molare Masse:		2,0158 kg/kmol	[137]
Kritischer Punkt:	Temperatur	33,19 K	[110]
	Druck	13,15 bar	[110]
	Dichte	0,03012 kg/l	[110]
Tripelpunkt:	Temperatur	13,957 K	[110]
	Druck	0,072 bar	[110]
Siedepunkt bei 1,013 bar	Temperatur	20,39 K	[110]
	Flüssigdichte	0,07079 kg/l	[110]
	Verdampfungswärme	445,6 kJ/kg	[110]
Dampfdruck bei 20 °C:			
Gasdichte bei 0 °C u. 1,013 bar:		0,0899 kg/m ³	[140]
Dichteverhältnis zur Luft: 0 °C u. 1,013 bar		0,0695	[140]
Gasdichte bei 15 °C u. 1 bar:		0,08409 kg/m ³	[110]
2. Virialkoeffizient:	Bn bei 0 °C	0,6*10 ⁻³ bar ⁻¹	[140]
	B30 bei 30 °C	0,58*10 ⁻³ bar ⁻¹	[140]
Gaszustand bei 25 °C u. 1 bar:	Spez. Wärmekapazität c _p	14,3 kJ/kg K	[110]
	Wärmeleitfähigkeit	0,1861 W/m K	[110]
	Dynam. Viskosität	8,92*10 ⁻⁶ Ns/m ²	[69]

408

Abbildung C.3.: **Datenblatt für Wasserstoff.** Ein Datenblatt für Wasserstoff mit allen relevanten Kenndaten des Gases der Firma AIR LIQUIDE Deutschland GmbH [AIR]. Zur Berechnung der mittleren freien Weglänge in Kapitel 3.1 ist die dynamische Viskosität von Bedeutung.

D. Datenblatt der Leybold Turbovac SL 300

Technical Data

Product: TURBOVAC SL 300
Part No.: 800170V3006

Inlet connection:	DN 100 CF	
Outlet connection:	DN 16 ISO-KF	
Pumping speed		
N ₂ - Nitrogen:	270 l/s	
Ar - Argon:	260 l/s	
He - Helium:	255 l/s	
H ₂ - Hydrogen:	190 l/s	
Gas throughput		
N ₂ - Nitrogen:	2.9 mbar x l/s	
Ar - Argon:	2.0 mbar x l/s	
He - Helium:	1.9 mbar x l/s	
H ₂ - Hydrogen:	0.9 mbar x l/s	
Compression ratio		
N ₂ - Nitrogen:	> 1.0 x 10 ¹¹	
Ar - Argon:	> 1.0 x 10 ¹¹	
He - Helium:	1.0 x 10 ⁷	
H ₂ - Hydrogen:	2.0 x 10 ⁵	
Ultimate pressure:	< 1.0 x 10 ⁻¹⁰ mbar	< 7.5 x 10 ⁻¹¹ Torr
Max. foreline pressure for N ₂ :	8.0 mbar	6.0 Torr
Nominal rotation speed:	60000 min ⁻¹	60000 rpm
Run -up time:	≈ 4.0 min	
Max. power consumption:	115 W	
Power consumption at ultimate pressure:	18 W	
Protection rating:	IP 20	
Admissible ambient temperature:	15 - 45°C	59 - 113°F
Cooling standard:	Convection	
Cooling optional:	Air / Water	
Cooling water connection:	G 1/8", Inside thread / 8 mm hose nozzle	
Cooling water consumption:	30 - 60 l/h	
Permissible cooling water pressure:	3 - 7 bar	
Permissible cooling water temperature:	15 - 35°C	59 - 95°F
Dimensions:	see dimension sheet	
Weight:	≈ 7.4 kg	≈ 16.3 lbs

Technical data are subject to change

Copyright © Oerlikon Leybold Vacuum GmbH

Abbildung D.4.: **Datenblatt der Turbovac SL 300.** Das Datenblatt der Turbomolekularpumpe Turbovac SL 300 des Herstellers Oerlikon Leybold Vacuum GmbH [Oer]. Zur Berechnung des Stickingkoeffizienten in Kapitel 5.1 lässt sich das Saugvermögen der Pumpe für Wasserstoff entnehmen.

E. Kurzanleitung zu ProVac3D

ProVac3D ist eine Stand-Alone-Software für Monte-Carlo-Simulationen im Ultrahochvakuum. Im folgenden Kapitel wird kurz auf die Benutzung im Allgemeinen sowie auf die einzelnen vorhandenen Geometrieelemente im Detail eingegangen. Das unter Windows lauffähige Programm wurde von Dr. Xueli Luo in Fortran geschrieben und seit der Erstveröffentlichung kontinuierlich verbessert. Die Grundlage dieser Kurzanleitung ist neben [LG10] ein ausgiebiger Trial-and-Error-Prozess gewesen, sie kann daher nur einen unvollständigen Überblick über alle Programmfunktionen und -eigenheiten liefern.

E.1. Allgemeines zur Benutzung

ProVac3D besteht neben einer einzelnen, ausführbaren Datei („provac3d.exe“) aus einer Input-Datei („provac3d_input.txt“), die in einem beliebigen Text-Editor bearbeitet werden kann und sämtliche Informationen enthält, die zur Simulation benötigt werden. Damit die Simulation korrekt funktioniert, müssen beiden Dateien in das Hauptverzeichnis C:\ kopiert und die ausführbare Datei als Administrator gestartet werden. Näheres zum Aufbau der Input-Datei findet sich in den nachfolgenden Abschnitten.

Nach einer erfolgreichen Programmausführung wird im Hauptverzeichnis eine Output-Datei („provac3d_output.txt“) generiert, die die Ergebnisse der Simulation erhält. Auf die in der Output-Datei ausgegebenen Informationen wird ebenfalls in den folgenden Abschnitten eingegangen.

E.2. Aufbau der Input-Datei

Der Aufbau der Input-Dateien von ProVac3D erfolgt einem gewissen Schema, welches nachfolgend erörtert wird. Als einfaches Beispiel dient Listing E.1, welches einen Zylinder beschreibt. Jede Input-Datei kann in verschiedene Blöcke eingeteilt werden, wobei je nach gewünschtem Aufbau manche Blöcke optional und manche obligatorisch sind. Damit ProVac3D die Input-Datei richtig einlesen kann, müssen Zeilenumbrüche zwischen jedem Block gesetzt werden, wie es im Listing gezeigt ist. Jede Input-Datei lässt sich in drei Hauptblöcke unterteilen: Header (Zeilen 1 bis 4), Body (im Beispiel die Zeilen 6 bis 20) und Footer (die letzte nichtleere Zeile).

1	n_ap=	6		
2	n_rp=	3		
3	n_plane=	2		
4	n_rotator=	1		
5				
6	AP	1	0	-1
7	AP	2	8.25E-01	-1
8	AP	3	0	8.25E-01
9	AP	4	0	1
10	AP	5	8.25E-01	1
11	AP	6	0	8.25E-01
12				
13	RP	1	8.25E-01	-1
14	RP	2	8.25E-01	1

15	RP	3	0	0				
16								
17	CI	1	1	2	3	1	0	0
18	CI	2	4	5	6	-1	1	0
19								
20	CY	1	1	2	3	1	1	1
21								
22	n_mc=	10000000						

Listing E.1: **Einfaches Beispiel einer Input-Datei.** Die Datei erzeugt die Simulation eines einfachen Zylinders mit Länge 2 und Radius 0,825 für 10 000 000 Teilchen.

E.2.1. Header

Der Header enthält Informationen über die Anzahl der Absolut- („n_ap“) und Relativpunkte („n_rp“) sowie über die Anzahl aller in der Simulation vorkommenden Flächen- („n_plane“) sowie Volumenelemente („n_rotator“) in exakt dieser Reihenfolge. Die genauere Bedeutung dieser vier Begriffe wird in den nachfolgenden Abschnitten geklärt. Es muss darauf geachtet werden, dass die Anzahl aller Punkte und Elemente mit den vorhandenen Elementen im Body übereinstimmt, da es sonst zu Fehlern kommt.

E.2.2. Body

Im Body finden sich zwei Hauptblöcke an Informationen wieder. Im ersten Block (im Beispiel die Zeilen 6 bis 15) werden alle Punkte aufgeführt, die von Geometrieelementen benötigt werden. Diese wiederum werden im zweiten Block (Zeilen 17 bis 20) definiert.

Definition von Punkten

[...]				
AP	6	0	8.25E-01	1
RP	1	8.25E-01	-1	
[...]				

Listing E.2: **Definition eines Absolut- sowie Relativpunktes.** Die notwendigen Parameter für absolute (AP) und relative (RP) Punkte sind die ID sowie die Koordinaten der Punkte nach Abbildung E.5.

ProVac3D unterscheidet zwischen sogenannten Absolutpunkten (AP) und Relativpunkten (RP). Erstere werden von zweidimensionalen Flächenelementen verwendet, letztere zur Erstellung dreidimensionaler Volumenelemente. Die Definition der Punkte erfolgt durch das zweistellige Kennwort (AP oder RP) gefolgt von vier (für AP) respektive drei (für RP) Parametern, wie es in Listing E.2 gezeigt ist. Der erste Parameter ist für beide Arten von Punkten derselbe: es ist die ID, mit welcher der Punkt angesprochen wird. Diese ist für jede Art von Punkt einmalig und lückenlos aufsteigend zu vergeben.

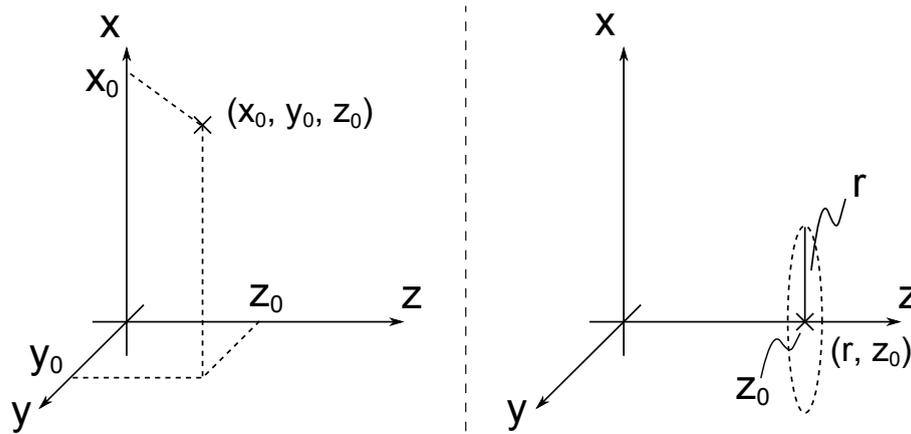


Abbildung E.5.: **Parameter von Absolut- und Relativpunkten.** Darstellung der Koordinaten für Absolut- (links) und Relativpunkte (rechts), mit welchen Flächen- und Volumenelemente erstellt werden können.

Element	Kürzel	ID	AP 1	AP 2	AP 3	Richt.	Eigenschaft	Ref.
Dreieck	TR	$n \in \mathbb{N}$	a	b	c	± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$
Kreis	CI	$n \in \mathbb{N}$	a	b	c	± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$
Lochblende	S.H	$n \in \mathbb{N}$	a	b	c	± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$

Tabelle E.1.: **Verwendete Flächenelemente und deren Parameter.** Die Tabelle zeigt nur eine kleine Auswahl der in ProVac3D vorhandenen Flächenelemente sowie deren obligatorischen Parameter.

Die Bedeutung der restlichen Parameter wird in Abbildung E.5 verdeutlicht. Für Absolutpunkte sind diese Parameter gerade das Koordinatentripel (x_0, y_0, z_0) des dreidimensionalen Raums. Für Relativpunkte reicht die Angabe (r, z_0) eines Radius in der xy -Ebene und eines Abstands von deren Ursprung, wodurch für diese Punkte eine azimuthale Symmetrie bezüglich der ausgezeichneten z -Achse impliziert wird. Beachtet man die Tatsache, dass ProVac3D die Simulation von Bauteilen mit einer solchen Symmetrie unterstützt, wird die Bedeutung der Relativpunkte für die Volumenelemente deutlich.

Die Angabe der Koordinaten erfolgt nach Belieben als ganze Zahl, einfache Kommazahl oder Gleitkommazahl, wobei in Listing E.5 ersteres und letzteres verwendet wurde. ProVac3D speichert die eingegebenen Koordinaten automatisch als double-Variablen, wodurch sich auf üblichen 32-Bit-Systemen eine Genauigkeit von 15 bis 16 Stellen ergibt [Böh96].

Definition von Geometrieelementen

Die Definition von Geometrieelementen schließt sich direkt an die Definition der Punkte an. ProVac3D unterstützt einen großen Satz an Grafikprimitiven, deren Parameterzahlen sich nach Komplexität des Elements unterscheiden. Die Tabellen E.1 und E.2 geben eine kurze Übersicht über diejenigen Elemente, die im Rahmen der Bachelorarbeit verwendet wurden.

Auf die Bedeutung der jeweiligen Absolut- und Relativpunkte wird in Abschnitt E.3 näher eingegangen. Allen Elementen gemein sind neben der ID noch die Richtung, Eigenschaft und Reflexion. Die Bedeutung dieser Parameter soll im Folgenden kurz erläutert werden.

Element	Kürzel	ID	RP 1	RP 2	RP 3	RP 4	Richt.	Eigenschaft	Ref.
Zylinder	CY	$n \in \mathbb{N}$	a	b	c		± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$
Kegelstumpf	CO	$n \in \mathbb{N}$	a	b			± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$
Viererkreuz	C4	$n \in \mathbb{N}$	a	b	c	d	± 1	$[0, 9] \in \mathbb{N}_0$	$[0, 1]$

Tabelle E.2.: **Verwendete Volumenelemente und deren Parameter.** Die Tabelle zeigt nur eine kleine Auswahl der in ProVac3D vorhandenen Volumenelemente sowie deren obligatorischen Parameter.

- **ID:**

Wie bei der Definition der Punkte erfolgt die Vergabe der IDs der Geometrieelemente beginnend bei Eins einmalig und lückenlos aufsteigend.

- **Richtung:**

Jedes Geometrieelement besitzt bei Erstellung einen Normalenvektor, welcher die Richtung der aktiven Fläche (je nach gewählter Eigenschaft) angibt. Die Richtung des Normalenvektors ist für die Volumenelemente in Tabelle E.2 einfach anzugeben: für den Wert $+1$ zeigt er in das Volumenelement nach innen hinein, für -1 zeigt er nach außen hinaus. Für die gegebene Auswahl der Flächenelemente ergibt sich der Normalenvektor mit Hilfe der Rechte-Hand-Regel. Dies ist in Abbildung E.6 in Abschnitt E.3 genauer dargestellt.

- **Eigenschaft**

Der Eigenschaft-Parameter erlaubt eine Regelung des Verhaltens der Geometrieelemente, sobald Teilchen mit ihnen in Kontakt treten. Die Festlegung einer Quelle darf nur für ein einziges Element je Input-Datei erfolgen. Bei Eigenschaften, die als einseitig deklariert sind, gilt, dass sie nur in die Richtung wirken, die über den obigen Parameter festgelegt wurde. Dies gilt ebenfalls für die Quelle, welche die Teilchen einseitig in diese Richtung emittieren kann. Tabelle E.3 gibt einen Überblick über alle vorhandenen Eigenschaften. Im Rahmen der Bachelorarbeit fanden die Eigenschaften 0 bis 2 sowie 9 Anwendung. Die genaue Bedeutung der anderen Eigenschaften bedarf weiterer Untersuchung.

- **Reflexion**

Der letzte Parameter erlaubt die Angabe des Reflexionskoeffizienten R der Geometrieelemente. Über den Sticking-Koeffizienten α hängen die beiden Werte über

$$R = 1 - \alpha \tag{E.1}$$

zusammen. Die Angabe des Parameters ist obligatorisch, ergibt aber nur in Verbindung mit den Eigenschaften 1 und 2 Sinn. Für die Quelle ist der Reflexionskoeffizient nach genaueren Untersuchungen 0. Dies muss bei der Durchführung und Auswertung der Simulation berücksichtigt werden.

Eigenschaft	Bedeutung
0	Quelle (einseitig)
1	Reflektor / Absorber (einseitig)
2	Reflektor / Absorber (zweiseitig)
3	Spiegel (einseitig)
4	Spiegel (zweiseitig)
5	Virtuelle Fläche (einseitig)
6	Virtuelle Fläche (zweiseitig)
7	Kontrollfläche (einseitig)
8	Kontrollfläche (zweiseitig)
9	Transparente Fläche (zweiseitig)

Tabelle E.3.: **Eigenschaften von Geometrieelementen [LG10]**. Über den Eigenschaft-Parameter lassen sich Grafikelemente in ProVac3D vielseitig einsetzen. Die Bedeutung jeder einzelnen Eigenschaft wurde im Rahmen der Bachelorarbeit allerdings nicht geklärt.

E.2.3. Footer

Der Footer besteht aus der letzten, nichtleeren Zeile in der Input-Datei. Der ganzzahlige Wert „n_mc“ gibt die Anzahl der Teilchen an, die mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation von einer Quelle emittiert werden. ProVac3D führt Simulationen im Hochvakuumbereich durch, wodurch sich in den Simulationsaufbauten einzig molekulare Strömung einstellt. Da somit keine Wechselwirkungen zwischen den Teilchen betrachtet werden muss, ist bei einem festen, gegebenen Aufbau die Laufzeit t der Simulation direkt proportional zur Teilchenzahl:

$$t \propto \text{n_mc} . \quad (\text{E.2})$$

E.3. Parameter ausgewählter Geometrieelemente

Im Folgenden soll kurz auf die Absolut- und Relativpunkte eingegangen werden, die zur Definition der in den Tabellen E.1 und E.2 dargestellten Geometrieelemente notwendig sind. Die restlichen Parameter sind in den vorangegangene Abschnitten näher erläutert worden.

E.3.1. Flächenelemente

In Abbildung E.6 sind die notwendigen Punkte zur Definition der drei Flächenelemente dargestellt, die in Tabelle E.1 aufgelistet sind. Der Normalenvektor zeigt in die Richtung der jeweiligen Flächenelemente, falls als Parameter +1 gewählt wird, ansonsten in die entgegengesetzte Richtung.

Dreieck

Ein Dreieck ist charakterisiert durch dessen drei Eckpunkte. Die Punkte dürfen aus offensichtlichen Gründen nicht in einer Linie liegen.

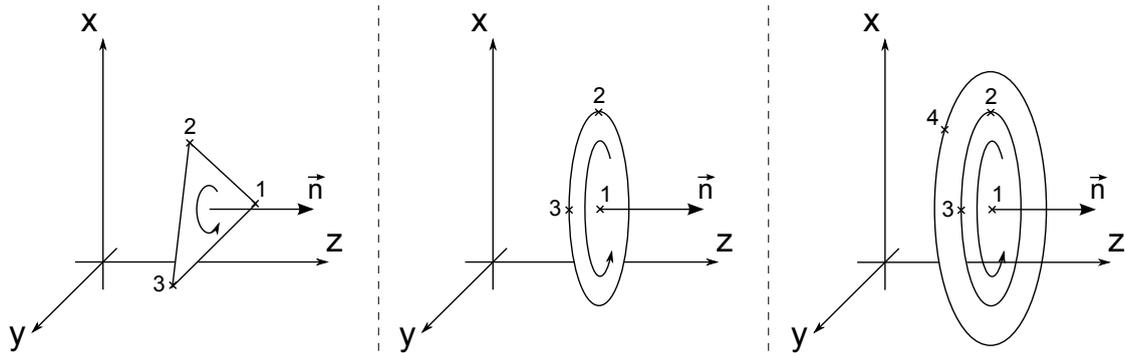


Abbildung E.6.: **Geometrien dreier Flächenelemente.** Dargestellt sind die Absolutelemente und Normalenvektoren eines Dreiecks (links), Kreises (Mitte) und einer Lochblende (rechts).

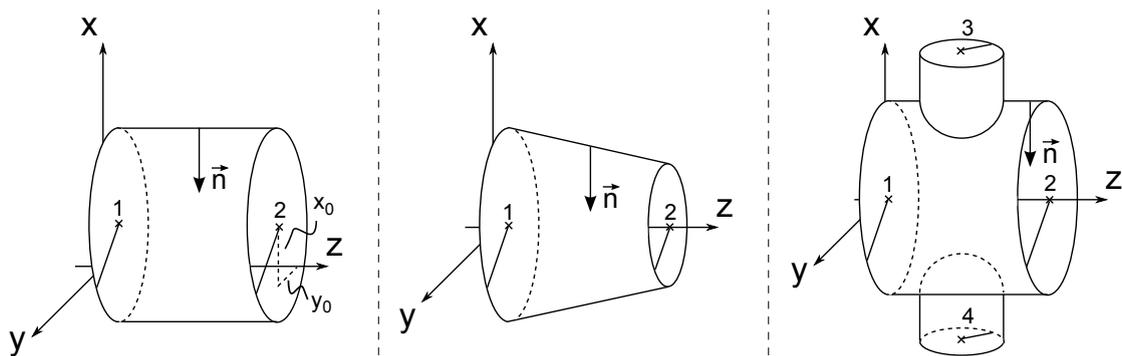


Abbildung E.7.: **Geometrien dreier Volumenelemente.** Dargestellt sind die Relativelemente und Normalenvektoren eines Zylinders (links), Kegelstumpfes (Mitte) und eines Viererkreuzes (rechts).

Kreis

Für einen Kreis gibt der erste Absolutelement den Mittelpunkt an. Der zweite Punkt legt den Radius des Kreises fest, da er auf dem äußeren Rand liegt. Beim dritten Punkt ist zu beachten, dass dieser exakt rechtwinklig zum zweiten hinsichtlich der Kreisebene angeordnet sein muss. Durch die Freiheit der Rotation auf zwei möglichen Wegen wird nach der Rechte-Hand-Regel die Richtung des Normalenvektors bestimmt.

Lochblende

Der innere Ring der Lochblende, das eigentliche Loch, wird analog zum Kreis beschrieben. Der dritte Punkt, welcher rechtwinklig zum zweiten steht, gibt die Richtung des Elements an. Der vierte Punkt liegt beliebig auf dem Rand der Lochblende und legt somit deren äußeren Radius fest.

E.3.2. Volumenelemente

Die drei Volumenelemente aus Tabelle E.2 sind in Abbildung E.7 dargestellt. Auch hier zeigt der Normalenvektor in die dargestellte Richtung (in das Innere der Volumina), wenn als Parameter +1 gewählt wird, ansonsten ist er exakt entgegengesetzt.

Eine Besonderheit der Volumenelemente ist, dass sie in die z -Richtung zeigen müssen

und alle (mit Ausnahme des Zylinders) eine Symmetrie um eben Achse aufweisen. Es ist zu beachten, dass die Volumenelemente als Mantelflächen zu verstehen sind. Eventuelle „Abschlussflächen“, wie die Deckel- und Bodenfläche beim Zylinder, müssen als Flächenelemente zusätzlich integriert werden.

Zylinder

Ein Zylinder benötigt zwei Relativpunkte mit demselben Radius und unterschiedlichen z -Werten, um aufgespannt zu werden. Der dritte Relativpunkt wird über die Angabe $RP3 = (x_0, y_0)$ als Offset von der z -Achse uminterpretiert. Der Zylinder kann somit als einziges Volumenelement derart im Raum platziert werden, dass die Symmetrie um die z -Achse gestört wird.

Kegelstumpf

Um den Kegelstumpf zu beschreiben, sind zwei Relativpunkte nötig, die sich in den z -Werten unterscheiden müssen und in den Radien unterscheiden können. Wählt man die beiden Radien identisch, erhält man als Grenzfall den Zylinder (ohne die Möglichkeit, einen Offset von der z -Achse einzubauen). Für den Fall eines verschwindenden Radius ergibt sich anstatt eines Kegelstumpfs ein echter Kegel.

Viererkreuz

Für die Definition des Viererkreuzes sind vier Relativpunkte erforderlich. Die ersten beiden Punkte beschreiben das Hauptrohr, welches in z -Richtung gelegen ist, analog zum Zylinder. Die anderen beiden Relativpunkte werden gemäß $RP = (r, x)$ auf die x -Achse uminterpretiert, sodass das Nebenrohr, welches durch diese Punkte dargestellt wird, in x -Richtung liegen muss. Es ist möglich, für die Relativpunkte drei und vier unterschiedliche Radien zu wählen. In diesem Fall werden zwei separate, konzentrische Zylinder aufgespannt. Die gemeinsame Achse, auf welcher diese beiden Nebenrohr-Zylinder liegen, schneidet die Achse des Hauptrohres in deren Mittelpunkt.

E.4. Aufbau der Output-Datei

Nachdem mit ProVac3D unter Berücksichtigung der in Abschnitt E.2 erwähnten Vorgehensweise eine Simulation durchgeführt wurde, wird im Hauptverzeichnis des Systems eine Output-Datei („provac3d_output.txt“) generiert. Das Listing E.3 zeigt exemplarisch eine Output-Datei, die für $n_mc=10\,000\,000$ Teilchen mit dem Aufbau aus Listing E.1 erstellt wurde.

```

1
2 n_mc=                10000000    seed=      91330050
3 plane                1 :   hit=      5309778    ,   out=      5309778
4 plane                2 :   hit=      4690222    ,   out=      4690222
5
6 rotator_result=
7 rotator              1 :   hit=      24231271    out=          0
8
9 n_error=              0

```

```
10 |  
11 | calculation time(s)= 162.572000026703
```

Listing E.3: **Einfaches Beispiel einer Output-Datei.** Die Output-Datei liefert die Simulationsergebnisse für Listing E.1 und zeigt die Treffer- (hit) sowie Adsorptionsszahlen (out) der verwendeten Grafikelemente.

Die erste, nichtleere Zeile enthält neben der Anzahl der in der Simulation verwendeten Teilchen den Seed, welcher zur Initialisierung des Zufallsgenerators der Monte-Carlo-Methode verwendet wurde. Der Seed wird aus dem aktuellen Zeitstempel zum Zeitpunkt des Programmaufrufs generiert¹.

Direkt anschließend folgt eine Auflistung über alle Flächenelemente im ersten Block und alle Volumenelemente im zweiten Block, geordnet anhand ihrer IDs, wie sie bei der Erstellung der Input-Datei zugewiesen wurden. Für jede Fläche sieht man direkt, wie oft sie von Teilchen getroffen wurde („hit“) und wie oft Teilchen bei Auftreffen auf diese Fläche die Simulation verlassen haben („out“). Letzteres ist stark abhängig vom Reflexionskoeffizienten der jeweiligen Flächen. Wählt man als Eigenschaft einer Fläche, dass sie zweiseitig wirken soll, werden beide Seiten in der Output-Datei separat unter derselben ID aufgeführt.

Abschließend wird mit `n_error=0` noch angegeben, dass alle Teilchen, die in der Quelle ausgesandt wurden, von einer der definierten Flächen absorbiert wurden (andernfalls würde ProVac3D schon zur Laufzeit einen Fehler ausgeben). In der letzten nichtleeren Zeile findet sich die Laufzeit der Simulation.

¹Persönliches Gespräch mit Dipl.-Phys. Stefan Görhardt

Danksagungen

Die Entstehung und Durchführung dieser Bachelorarbeit wäre ohne die Mitarbeit und Unterstützung zahlreicher Personen nicht möglich gewesen. Für die gute Zusammenarbeit und schöne Zeit möchte ich mich bei allen beteiligten Personen herzlich bedanken.

Ich danke Herrn Professor Dr. Guido Drexlin für das Ermöglichen dieser interessanten Bachelorarbeit und für die freundliche Begrüßung und Integration am IEKP.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Joachim Wolf für die exzellente Betreuung meiner Arbeit, für sein großes Engagement und für das stets offene Ohr zu allen Fragestellungen rund um Theorie und Praxis.

Weiterhin danke ich meinem Betreuer, Dipl.-Phys. Stefan Görhardt, für die großartige Unterstützung in der Einarbeitungsphase der Arbeit, durch die sich innerhalb kürzester Zeit gute Resultate erzielen ließen, sowie für die anhaltenden Tipps und Hinweise. Ein weiterer Dank gilt ihm für die kurzfristige Mini-Führung am KATRIN-Experiment.

Das Kennenlernen aller Feinheiten des CPS-Testaufbaus in der Realität wäre im Rahmen meiner Arbeit nicht möglich gewesen. Ein Dank gilt daher Herrn Carsten Röttele, durch dessen parallel laufende Bachelorarbeit ich einen erweiterten Zugang zur experimentellen Seite des Aufbaus erhielt.

Herrn Uwe Krämer danke ich für einen Einblick in seine interessante Bachelorarbeit sowie produktive Diskussionen im Bachelorzimmer.

Ich danke Herrn Daniel Hilke sowie allen weiteren Teilnehmern des BaMaDiDo-Seminars für die Möglichkeit, einen eigenständigen Vortrag gestalten und halten zu dürfen.

Ein weiterer Dank gilt Herrn Thomas Csabo für die tolle technische Unterstützung über meine gesamte Arbeitszeit am IEKP hinweg.

Ich bedanke mich bei allen weiteren Mitarbeitern des KATRIN-Experiments, welche die Zeit am Institut bereichert und die Bachelorarbeit zu einer einzigartigen Erfahrung gemacht haben.

Nicht zuletzt gilt ein besonderer Dank meiner Familie, die mich stets über alle Maße hinweg in meinen Vorhaben unterstützt. Ohne sie wäre das Gelingen dieser Arbeit nicht möglich gewesen.