

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	4
2.1	Die Gasphasensynthese nanofeiner Partikeln	4
2.2	Die Populationsbilanzgleichung	5
2.3	Methoden zur Lösung der Populationsbilanzgleichung	7
2.4	Implementierung des Populationsbilanzmodells	10
2.5	Basismodell zur Beschreibung der Gasphasensynthese	11
2.5.1	Reaktionsmodell	12
2.5.2	Keimbildung durch chemische Reaktion	12
2.5.3	Homogene Keimbildung im übersättigten Produktdampf	13
2.5.4	Wachstum durch chemische Reaktionen	16
2.5.5	Wachstum durch Kondensation	17
2.5.6	Agglomeration	18
2.6	Modellvalidierung	21
3	Untersuchungen zum Einfluss der Partikelstruktur auf die Agglomerationskinetik	24
3.1	Berechnung des Kollisionsdurchmessers	24
3.2	Modellerweiterungen im Zuge der Berechnung des Kollisionsdurchmessers	24
3.2.1	Primärpartikelgröße und Volumen	25
3.2.2	Koordinationszahl	27
3.3	Modellvalidierung	28
3.4	Einfluss der fraktalen Dimension auf die zeitliche Entwicklung von Partikeleigenschaften	33
3.5	Empirischer Modellansatz zur Beschreibung der fraktalen Dimension in Abhängigkeit von Prozessparametern	36
3.6	Entwicklung von Partikeleigenschaften bei prozessabhängiger fraktaler Dimension	39
3.7	Sensitivitätsanalyse	42
4	Strukturbildung durch Koagulation und Sintern	44
4.1	Simulationsalgorithmus	45
4.1.1	Koagulation	45

4.1.2	Sintern	47
4.2	Validierung des abstandsbezogenen Sintergesetzes	52
4.3	Stationäre Strukturen	53
4.4	Verlauf der Funktion $D_f(\tau)$	54
4.5	Einfluss des Verlaufs von $D_f(\tau)$ auf die Entwicklung von Partikeleigenschaften	57
5	Zur Bedeutung der frei zugänglichen Partikeloberfläche in Wachstumsprozessen	60
5.1	Modellerweiterungen zur Berechnung der frei zugänglichen Aggregatoberfläche	60
5.1.1	Frei zugängliche Aggregatoberfläche	60
5.1.2	Wachstumsraten bei Kondensation und chemischer Reaktion an der Partikeloberfläche	63
5.1.3	Primärpartikelgröße	65
5.2	Simulationsparameter	66
5.2.1	Reaktionsmodell	66
5.2.2	Prozessparameter und physikalische Größen	67
5.3	Simulationsergebnisse	69
6	Untersuchungen zum Einfluss der Oberflächenenergie auf Partikelentstehung und Wachstum	76
6.1	Simulationsparameter	77
6.2	Simulationsergebnisse	77
6.3	Bedeutung der Kondensation bei Partikelentstehung und Wachstum	82
6.4	Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur	85
7	Untersuchungen zum Agglomerationsverhalten nanofeiner Partikeln bei hohen Ladungsdichten	88
7.1	Entwicklung eines 2D Simulationsmodells	88
7.1.1	Die 2D Populationsbilanzgleichung	88
7.1.2	Die Ionenbilanzen	90
7.1.3	Koagulation geladener Partikeln	91
7.1.4	Zusammenstöße von Ionen und Partikeln	93
7.2	Simulationsparameter	99

7.3	Simulationsergebnisse	101
7.3.1	Ladungsabbau durch Rekombination	101
7.3.2	Ladungsabbau durch Partikelauflauf- und Entladung	102
7.3.3	Einfluss der Dispersion auf den Ladungsabbau	105
7.3.4	Einfluss der Agglomeration auf den Ladungsabbau	105
7.3.5	Einfluss der Prozesstemperatur auf den Ladungsabbau	106
7.3.6	Ladungsabbau bei hohen Elektronendichten	108
7.4	Grenzen des Ladungseinflusses	109
8	Partikelsynthese in gepulsten Plasmen	113
8.1	Aufbau und Inbetriebnahme eines gepulsten Plasmareaktors zur Partikelsynthese	114
8.1.1	Gaseinspritzung	115
8.1.2	Plasmaquelle	117
8.2	Methoden der Charakterisierung des Plasmas	118
8.2.1	Untersuchung des elektrischen Verhaltens	119
8.2.2	Untersuchung des Expansionsverhaltens	121
8.2.3	Kurzzeitfotografie	122
8.2.4	Optische Emissionsspektroskopie	122
8.3	Methoden der Partikelcharakterisierung	124
8.3.1	Klassierung der Partikeln gemäß ihrer elektrischen Mobilität	124
8.3.2	Laserinduzierte Glühtechnik	125
8.4	Einstellen der Prozessvariablen	126
8.5	Ablationsproblematik	128
8.6	Plasmaeigenschaften in Abhängigkeit der Prozessvariablen	130
8.6.1	Energieeinkopplung	130
8.6.2	Expansionsverhalten	135
8.6.3	Staudruckverlauf	138
8.6.4	Plasmadichte und Temperatur	139
8.7	Partikeleigenschaften in Abhängigkeit der Prozessvariablen	141
8.7.1	Einfluss der Energieeinkopplung	142
8.7.2	Einfluss des Expansionskammerdrucks	146
8.7.3	Einfluss des Precursor-Injektionsdrucks	147
9	Zusammenfassung und Ausblick	148

10	Nomenklatur	153
11	Referenzen	159
12	Anhang	170
12.1	Konstruktionsskizzen verschiedener Anlagenkomponenten	170
12.1.1	Entladungskammer (Plasmaquelle)	170
12.1.2	Expansionskammer	170
12.1.3	Drucktanks	171
12.2	Abschätzung des Ohmschen Widerstands der Plasmaquelle	171
12.3	Abschätzung der Induktivität der Plasmaquelle	173