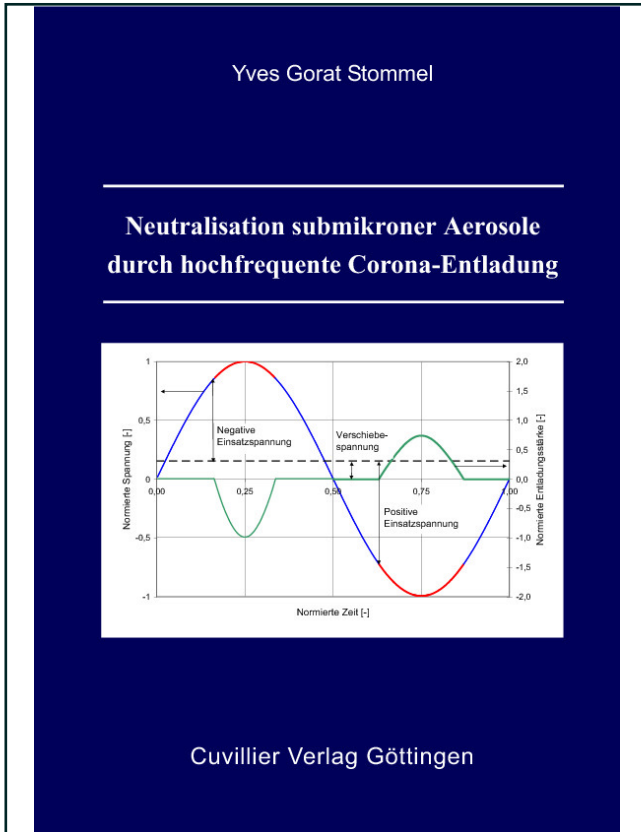




Yves Gorat Stommel (Autor)
**Neutralisation submikroner Aerosole durch
hochfrequente Corona-Entladung**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2192>

Copyright:
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

1 EINLEITUNG

In der Aerosolwissenschaft und -technologie spielt die elektrische Ladung der Partikel eine wichtige Rolle: Fast alle gasgetragenen Partikel verfügen über eine oder mehrere elektrische Ladung(en) /112/. Die Aufladung erfolgt dabei entweder während der Produktion des Aerosols oder nach dem Entstehungsprozess durch Reibung, freie Ionen oder ionisierende Strahlung.

Hohe Partikelladungen sind bei der Gasreinigung in Elektroabscheidern notwendig und in speziellen Filtrationsverfahren erwünscht /165/. Hintergrund kann sowohl die Reinigung von in die Umwelt emittierten Gasströmen, als auch die (Rück-) Gewinnung von Wertstoffen sein /74/. Auch die Minimierung der Partikelabscheidung in der Halbleiterproduktion (Verschmutzung) ist ein wichtiges Anwendungsgebiet, bei dem die Partikelladung gezielt genutzt werden kann /195/.

Nachteilig wirkt sich eine Partikelladung unter anderem bei der Aerosolprobenahme und dem Aerosoltransport (Abscheidung in Rohrleitungen) aus. Außerdem stellen unerwünschte Ablagerungen von Partikeln in Atemwegen sowie Staubexplosionen ein Gesundheitsrisiko für den Menschen dar.

Auch bei der Produktion von Materialien aus Aerosolen kann die Partikelladung eine Rolle spielen /195/; ebenso bei der Produktion des Aerosols selber. So wird beim Elektrospray-Verfahren die Ladung einer Flüssigkeit zur Generation von Aerosol ausgenutzt. Anschließend muss die hohe Ladung reduziert (neutralisiert) werden, um einer raschen Abscheidung oder Desintegration des Tropfens bei Verdampfung (Erreichen des Rayleigh-Limits) entgegenzuwirken /38/.

Grundsätzlich kann eine Ladungsreduzierung in einem Aerosol durch die gezielte Produktion und Einbringung von freien Ionen entgegengesetzter Polarität umgesetzt werden. Doch eine Partikelladung Null wird spätestens dann unmöglich, wenn eine Partikelgrößenverteilung vorliegt. Unterschiedliche Ladegeschwindigkeiten großer und kleiner Partikel bewirken, dass große Partikel bereits über eine Ladung Null hinweg unipolar aufgeladen werden, während kleine noch nicht vollständig neutralisiert worden sind /38/.

Eine Reduzierung der Partikelladung erfolgt daher in der Regel über den Prozess der Neutralisation. Freie Ionen beider Polaritäten werden in hoher Konzentration im Aerosol generiert oder diesem mit Hilfe von elektrischen Feldern oder zusätzlichen Volumenströmen zugeführt. Findet die bipolare Aufladung des Aerosols ausschließlich über den Mechanismus der Diffusion statt und ist die Ionenkonzentration deutlich höher als die Partikelkonzentration, so stellt sich ein definierter Ladungszustand ein. Eine vollständige Entladung eines Aerosols ist technisch nicht oder nur sehr schwer umsetzbar, die Neutralisation ermöglicht jedoch die Herstellung eines schwach geladenen Aerosolzustandes mit bekannter bipolarer Ladungsverteilung.

Die genaue Kenntnis der sich aus dem Neutralisationsprozess ergebenden Ladungsverteilung ist bei dem alleinigen Ziel einer Ladungsreduzierung (zum Beispiel zur Erhö-

hung der Partikelpenetration in Rohren und bei der Probenahme /62/) nicht notwendig. Dagegen ist vor allem in der Forschung der genaue Ladungszustand eine wichtige Kenngröße (zum Beispiel in der Filterprüfung /112/). Das wichtigste Einsatzgebiet findet sich in der Messung von submikronen Aerosolen: In dem sogenannten „Elektrischen Mobilitätsanalysator“ wird in Abhängigkeit der Größe und der Ladung der Partikel eine Klassierung vorgenommen, bevor die Partikel durch Kondensation vergrößert und auf diese Art und Weise optisch sichtbar gemacht werden. Eine genaue Kenntnis der Ladungsverteilung ist Voraussetzung, um von der elektrischen Mobilität der Partikel auf deren Größe und Konzentration schließen zu können.

Atmosphärische Aerosole werden durch die von ionisierender Strahlung (Hintergrundstrahlung, natürliche Radioaktivität) generierten Ionen neutralisiert. Um das Ladungsgleichgewicht zu erreichen, vergehen jedoch mehrere Stunden – in der Forschung, Industrie und Messtechnik ein zu langer Zeitraum. Chen et al. waren die ersten, die zur Beschleunigung des Vorganges eine radioaktive Quelle (^{210}Po) einsetzten /36/. Seitdem werden in aller Regel radioaktive Quellen zur Neutralisation von Aerosolen verwendet.

Über die Jahre hinweg zeigte eine Vielzahl an Untersuchungen die Anwendungsgrenzen der radioaktiven Quellen auf. So führt eine Aerosolauf- oder -umladung in radioaktiven Quellen bei vertretbarem Aufwand nur für begrenzte Aerosolvolumenströme, Partikelkonzentrationen und Aerosolanfangsladungen zu dem gewünschten Ergebnis. Außerdem schränken die sicherheitstechnischen Anforderungen vieler Länder den Einsatzbereich der Präparate stark ein. Die radioaktiven Quellen dürfen ohne weitergehende Genehmigung nicht mobil eingesetzt werden, das Personal muss speziell geschult sein.

Andere Ansätze zur Generation der freien Ladungsträger im Hinblick auf eine alternative Umsetzung des Neutralisationsprozesses wurden entwickelt. Ein vielversprechender Weg ist die Verwendung einer elektrischen Corona-Entladung, mit der – je nach Spannungspolarität – sowohl positive als auch negative Ionen produziert werden können. Wesentliche Nachteile sind die sich aus dem benötigten elektrischen Feld ergebende Partikelabscheidung und eine überlagerte Partikelaufladung durch den Mechanismus der Feldaufladung, welche in aller Regel verhindert, dass sich die gewünschte Ladungsverteilung einstellt. Werden Ladungsgeneration und Partikelaufladung räumlich getrennt, ergeben sich – neben der Verdünnung des Aerosols mit dem Trägergasstrom der Ionen – Probleme unter anderem im Hinblick auf die Ozonbelastung.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird untersucht, ob die als Neutralisation bezeichnete bipolare Diffusionsaufladung in einem Corona-Entladungsraum nachgebildet werden kann. Die üblicherweise zu diesem Zweck eingesetzte radioaktive Quelle wird dabei durch eine im Aerosolraum stattfindende elektrische Entladung ersetzt. Primäres Ziel ist das genaue Verständnis der Vorgänge, wie sie im theoretischen Teil

der Arbeit dargelegt werden. Auf Basis der formulierten Erkenntnisse wird die als „Elektrischer Neutralisator“ (EN) bezeichnete Apparatur entwickelt. Neben dem Ziel der Neutralisation des Aerosols wird besonderer Wert auf die Minimierung der den Prozess begleitenden Partikelabscheidung, Partikelgeneration und Ozongeneration gelegt. Die genannten Größen spielen unter anderem bei der Auslegung der Elektrodengeometrie und dem Volumen des elektrischen Neutralisators eine wichtige Rolle.

Experimentell untersucht werden der Einfluss der Geometrie und der elektrischen Parameter des elektrischen Neutralisators, der Aerosolart und -konzentration, des Aerosolladungszustandes und des Aerosolvolumenstroms. Kriterien für die erfolgreiche Neutralisation werden aus den Daten hergeleitet.

Aus der Verwendung einer Corona-Entladung ergibt sich der Nachteil, dass die positiven und negativen Ionenkonzentrationen gezielt eingestellt werden müssen. Die experimentellen Ergebnisse und theoretischen Überlegungen zeigen, dass die Regelung der Entladungsstärke eine der Hauptaufgaben auf dem Weg zu einer funktionierenden Apparatur darstellt. So erweist es sich als schwierig, den leicht asymmetrischen Ladungszustand, wie er aus der Neutralisation in radioaktiven Quellen in aller Regel resultiert, nachzubilden. Eine symmetrische Ladungsverteilung mit einer makroskopischen Aerosolladung Null wird anvisiert. Verschiedene Strategien mit unterschiedlicher Allgemeingültigkeit werden ausgearbeitet und umgesetzt.

Neben der experimentellen Verifikation des elektrischen Neutralisators wird auf Basis von numerischen Simulationen die Ladungsverteilung des Aerosols als Funktion der Anfangsladung, der Frequenz, der Ionenkonzentration, der Feldstärke und der Verweilzeit im elektrischen Neutralisator bestimmt. Aussagen zu den Einsatzgrenzen und dem Optimierungspotential der Apparatur und der Technik werden aus den Ergebnissen abgeleitet.

2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN DER PARTIKELAUFLADUNG

Im Hinblick auf die Vorgänge im elektrischen Neutralisator wird zuerst ein kurzer Überblick über die Mechanismen der Partikelaufladung gegeben. Anschließend werden die relevanten Prozesse vertiefend erläutert.

Die elektrische Partikelaufladung kann nach folgenden Mechanismen erfolgen:

- Photoemission,
- Thermoionisation,
- Triboelektrifikation,
- Kollision mit freien Ladungsträgern (Ionen, Elektronen).

Die Photoemission bezeichnet die direkte Elektronenfreisetzung aus dem Partikel durch Photonen. Bei diesem Vorgang werden primär positiv geladene Partikel und freie Elektronen erzeugt; negativ geladene Partikel können durch Anlagerung negativer Ladungen (freie Elektronen oder durch Elektronenanlagerung erzeugte negative Gasionen) entstehen. Der Vorgang der Photoemission ist auf Materialien beschränkt, die eine kleinere Austrittsarbeit als die Energie der Lichtquanten aufweisen /238/.

Auch bei der Thermoionisation erfolgt die primäre Partikelaufladung durch Elektronenemission. Durch die Erhöhung der Temperatur wird ein Elektronenaustritt begünstigt, die Partikel bleiben einfach positiv geladen zurück, während die freien Elektronen sich an Gasmoleküle oder Partikel binden können /198, 199/.

Die Triboelektrifikation resultiert aus dem Kontakt zweier Materialien unterschiedlicher Elektronenaustrittsarbeit /73/. Allerdings kann auch bei nur aus einem Material bestehenden Schüttgütern eine Aufladung (Ladungstrennung) beobachtet werden /243/. Die kleinen Partikel werden dabei bevorzugt negativ aufgeladen, die größeren positiv. Außerdem hat eine höhere Feuchte eine stärkere Ladungstrennung zur Folge.

Die Partikelaufladung durch freie Ladungsträger ist der im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kommende Mechanismus. Gasionen (teilweise auch Elektronen) lagern sich an die Partikel an und übertragen dabei ihre Ladung.

Es wird nach den zwei Mechanismen der Feld- und der Diffusionsaufladung unterschieden. Beide Aufladungsmechanismen funktionieren für positive sowie negative Gasionen nach dem gleichen Prinzip (die Aufladung durch freie Elektronen wird an den relevanten Stellen besprochen).

Da neben der erwünschten Diffusionsaufladung eine begrenzte Feldaufladung im elektrischen Neutralisator wahrscheinlich ist (siehe Kapitel 7.3), werden beide Mechanismen erläutert. Der Schwerpunkt liegt jedoch beim Vorgang der bipolaren Diffusionsaufladung, welche oft als Neutralisation bezeichnet wird.

Für sämtliche in Kapitel 2 dargestellte Theorien gilt die Annahme, dass Interaktionen zwischen den Partikeln ausgeschlossen werden können /18/.

2.1 Feldaufladung

Es muss zwischen einer Aufladung in einer unipolaren Ionenatmosphäre (nur eine Ionenpolarität liegt vor) und der Aufladung in einer bipolaren Ionenatmosphäre (positive und negative Ionen liegen gleichzeitig vor) unterschieden werden.

2.1.1 Unipolare Feldaufladung

Die Feldaufladung resultiert aus der gerichteten Bewegung der Ionen entlang den Feldlinien des elektrischen Feldes. In Abhängigkeit der relativen Dielektrizitätskonstanten ε_p und der Ladung q_p des Partikels wird das äußere elektrische Feld verformt. Aus dem verzerrten elektrischen Feld ergibt sich die Menge der auf das Partikel führenden Feldlinien. Das Teilchen wird durch hinzuströmende Ionen so lange aufgeladen, bis das aus dem Ladungszustand des Partikels entstandene elektrische Feld einer weiteren Ionenanlagerung entgegenwirkt (Abbildung 2.1).

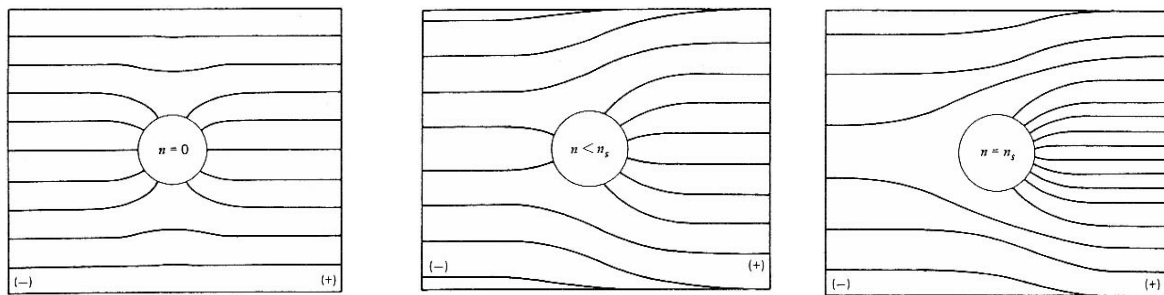


Abbildung 2.1: Unipolare negative Feldaufladung, von links: ungeladenes Partikel; teilweise geladenes Partikel; maximal geladenes Partikel /79/

Die elektrische Feldstärke \vec{E} an der Partikeloberfläche ergibt sich aus der Überlagerung des äußeren Feldes \vec{E}_a (im Medium der Dielektrizität ε_a) und des aus der Partikelladung q_p resultierenden Feldes /73/ (siehe auch Abbildung 2.2):

$$\vec{E} = \vec{E}_a \cos\theta \left(1 + \frac{2(\varepsilon_p - \varepsilon_a)}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_a} \right) - \frac{q_p}{\pi\varepsilon_0 x^2} \quad (2.1)$$

Der Einfluss der Dielektrizitätskonstanten ε_p (Gleichung 2.1) wurde zuerst von Pauthenier erkannt /205/: Die Aufladegeschwindigkeit steigt mit der Polarisierbarkeit der Partikel /108/. Die maximale Aufladung $q_{p,\infty}$ (Gleichung 2.2, /73, 126, 140, 152, 200/) nach unendlicher Zeit ist dann erreicht, wenn die effektive elektrische Feldstärke für $\theta = 0$ gleich Null ist (siehe Abbildung 2.2) und folglich keine Feldlinien mehr auf dem Partikel enden:

$$q_{P,\infty} = \pi\epsilon_0 x^2 \vec{E}_a \left(1 + \frac{2(\epsilon_P - \epsilon_a)}{\epsilon_P + 2\epsilon_a} \right) \approx 3\pi\epsilon_0 x^2 \vec{E}_a \frac{\epsilon_P}{\epsilon_P + 2} \quad (2.2)$$

Bei sehr hoher Partikelaufladung muss zusätzlich beachtet werden, dass die Einsatzfeldstärke \vec{E}_0 des umgebenden Gases nicht erreicht wird, da bei Überschreitung dieses Wertes eine Entladung stattfindet (siehe Kapitel 3.1 und 3.2) und das Partikel sich selbstständig (teilweise) entlädt. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, dass ein Partikel in der Nähe einer unipolaren Ionenquelle nur wenig Ladung aufnehmen kann, obwohl (beziehungsweise gerade weil) die Feldstärke sehr hoch ist und viele Ionen vorhanden sind /73/.

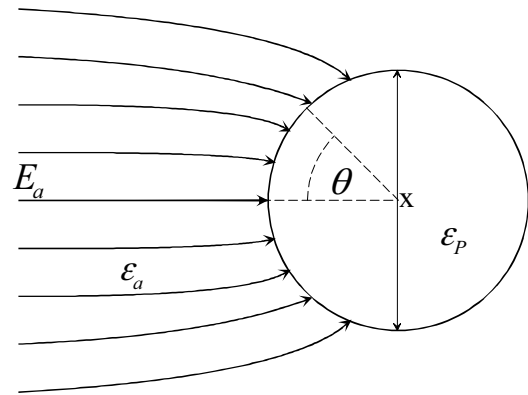


Abbildung 2.2: Felddaufladung im homogenen elektrischen Feld \vec{E}_a

Dies beobachteten unter anderem Evans et al. bei ihren experimentellen Untersuchungen (in /73/).

Die Berücksichtigung der Einsatzfeldstärke \vec{E}_0 erfolgt folgendermaßen /73/:

$$q_{P,\infty} = \pi\epsilon_0 x^2 \left(\vec{E}_0 - \vec{E}_a \left(1 + \frac{2(\epsilon_P - \epsilon_a)}{\epsilon_P + 2\epsilon_a} \right) \right) \quad (2.3)$$

In den Gleichungen 2.2 und 2.3 ist die Partikelladung q_P eine Funktion des Partikeldurchmessers x zum Quadrat und somit proportional zur Partikeloberfläche. Auch bei anderen Aufladungsmechanismen (zum Beispiel bei der Thermoionisation) kann eine Abhängigkeit der Aufladung von der Partikeloberfläche beobachtet werden /198/.

Die Partikelaufladung als Funktion der Zeit lässt sich nach Gleichung 2.4 beschreiben (/152/, die differentielle Form findet sich in /10/ und /96/):

$$q_P(t) = q_{P,\infty} \frac{t}{t + \tau_Q} \quad (2.4)$$

mit der Zeitkonstanten: $\tau_Q = \frac{4\epsilon_0}{\rho_I Z_I} \quad (2.5)$

Die Aufladegeschwindigkeit ist demnach stark von der elektrischen Beweglichkeit der Ionen Z_I und deren Raumladungsdichte ρ_I abhängig; erstere ist eine Funktion der Temperatur und des Druckes (siehe Anhang A.1.4). Unter Standardbedingungen (p_0 , T_0) erreichen die Partikel bei Felddaufladung bereits nach 0,1 Sekunden zirka 80 % ih-

rer maximale Ladung $q_{P,\infty}$ /79, 140/.

Nach Hewitt /77/ verteilen sich die eingefangenen Ladungen bei schlechter Leitfähigkeit des Partikels nicht über die gesamte Partikeloberfläche. Die hohe Ladung auf der durch Ionen angeströmten Seite des Partikels („Vorderseite“) wirkt einer weiteren Partikelaufladung entgegen, obwohl der Rest des Partikels ungeladen ist. Besitzt das Partikel eine hohe Leitfähigkeit, so verteilen sich die eingefangenen Ladungen auf der Oberfläche und ermöglichen eine weitere Ladungsanlagerung bis $q_{P,\infty}$ erreicht ist /77, 152, 153/.

Die Herleitung der Gleichungen 2.2 und 2.5 erfolgt auf Basis der Verzerrung des äußeren Feldes durch ein isolierendes Partikel, während Pautheniers zweite Annahme eine Gleichverteilung der Ladungen (entspricht einem leitfähigen Partikel: $\epsilon_p \rightarrow \infty$) auf der Partikeloberfläche vorsieht. Diese Anforderungen können gleichzeitig nur von einem rotierenden Partikel verschwindend geringer Leitfähigkeit erfüllt werden /154/.

Obwohl ein Einfluss der Leitfähigkeit sicherlich vorhanden ist, sollte dieser nicht überbewertet werden, wie die gute Übereinstimmung der Theorie nach Pauthenier mit experimentellen Ergebnissen zeigt. Unterliegt das Partikel nicht bereits einer Rotation, so bewirkt die Partikelladung durch elektrische Wechselwirkungen mit dem äußeren Feld eine Neuausrichtung des Partikels. Außerdem beeinflusst die Diffusion die Lage eines Partikels. Eine hohe Viskosität des umgebenden Mediums kann die Rotation/Neuausrichtung allerdings erschweren /152/.

Dagegen kann bei längerer Verweilzeit der Transport von leitfähigen Molekülen an die Partikeloberfläche die Aufladung trotz isolierenden Partikelmateriale bis zur Maximalladung eines dielektrischen Partikels ermöglichen. Diesen Vorgang bezeichnet Lawless als dielektrische Relaxation /126/.

Experimentelle Untersuchungen mit sehr hohen Partikelwiderständen eines im elektrischen Feld fixierten Partikels ergeben deutlich geringere als nach Pauthenier berechnete Partikelladungsgeschwindigkeiten /154, 169/, zurückzuführen auf die Unterbindung einer Rotation und somit Neuausrichtung des Partikels. Bidirektionale Aufladung (Richtungsänderung des Feldes und wechselnde Ionenquelle) verringert den negativen Einfluss des Partikelwiderstandes erheblich. Sowohl die einseitige als auch die beidseitige Aufladung eines fixierten Partikels können mit Hilfe theoretischer Betrachtungen verifiziert werden /154/.

Im Falle eines gepulsten elektrischen Feldes muss mit einer deutlich geringeren Aufladung gerechnet werden, als sich nach Berechnung für die maximale Puls-Feldstärke ergeben würde /118/. Partikel mit einer bereits vorhandenen Ladung stoßen in den Zwischenphasen der Pulse die Ionen stark ab: Es entsteht eine von Ionen freie Zone um das Partikel. Während des nachfolgenden Pulses müssen die Ionen den ionenfreien Raum durchqueren, bevor eine Anlagerung stattfinden kann. Die maximale Partikelaufladung ist somit begrenzt durch den Durchmesser der ionenfreien Zone: Genügt die

Dauer des Pulses nicht für die Durchquerung dieser Zone, so findet keine weitere Partikelaufladung statt.

Eine Zunahme der Partikelladung bei Pulsbetrieb kann erreicht werden, indem die Pulsspannung mit einer Grundspannung gleicher Polarität überlagert wird. Das resultierende Feld um das Partikel wird damit auf der für die Aufladung relevanten Seite abgeschwächt /169/.

Eine theoretische Beschreibung der unipolaren Feldaufladung im Wechselfeld erfolgte durch Jaworek et al. /96, 121/.

Penney et al. /205/ beobachteten bei hohen Feldstärken trotz identischer Ionenkonzentrationen eine deutlich höhere Aufladung der Partikel bei negativer als bei positiver Corona. Sie führen dies auf die Aufladung der Partikel durch freie Elektronen zurück. Auch Marquard /150/ und Schmid /200/ beobachteten im Fall negativer Corona eine höhere Aufladung, wobei letzterer gleichzeitig auf eine Verbreiterung der Ladungsverteilung im Vergleich zur positiven Corona hinweist.

2.1.2 Bipolare Feldaufladung

Aufgrund fehlender praktischer Relevanz zur Beschreibung technischer Vorgänge wurden bisher kaum detaillierte Untersuchungen zur bipolaren Feldaufladung durchgeführt. Allerdings tritt gerade dieser Fall beim sogenannten Rücksprühen (siehe Kapitel 3.6) in Elektroabscheidern auf.

2.2 Diffusionsaufladung

Bei der Diffusionsaufladung treffen die Ionen infolge ihrer thermischen Bewegung auf die Partikel. Die thermische Energie (kT) ermöglicht dabei die Überwindung der abstoßenden Kräfte zwischen geladenen Teilchen und gleichartig geladenen Ladungsträgern. Infolge der Polarisationskraft (Berechnungsgrundlagen zum Beispiel in /110/), welche bei kleinen Abständen sehr stark werden kann, lagern sich die Ionen an die Teilchen an.

Auch hier erfolgt eine Unterscheidung in die unipolare und die bipolare Aufladung.

2.2.1 Unipolare Diffusionsaufladung

Für eine unipolare Aufladung nimmt die Aufladegeschwindigkeit mit zunehmender Partikelladung ab: Das aus der Partikelladung resultierende Feld wirkt einer weiteren Ionenanlagerung immer stärker entgegen /69, 87, 233/.

Aufgrund der Geschwindigkeitsverteilung der Ionen (Boltzmann) ist die exakte Anga-

be einer Obergrenze für die durch den Diffusionsmechanismus erreichbare Partikelladung nicht möglich (außer es wird eine mittlere Ionengeschwindigkeit definiert /107/), die Aufladegeschwindigkeit fällt jedoch mit steigender Partikelladung rapide ab /18, 107, 169/.

Die Art der Wechselwirkung zwischen Ion und Partikel ist eine Funktion der Partikelgröße. Diesem Aspekt wird durch die Einteilung in den Kontinuum-, Übergangs- und freimolekularen Bereich Rechnung getragen. Die Unterscheidung erfolgt anhand der Knudsenzahl Kn_I , gebildet mit der mittleren freien Weglänge der Ionen λ_I /110, 189/:

$$Kn_I = \frac{2\lambda_I}{x} \quad (2.6)$$

Die Berechnung der freien Ionen-Weglänge λ_I erfolgt gemäß Anhang A.1.3.

Große Partikel mit $Kn_I < 0,1$ liegen im Kontinuumbereich, Partikel mit $Kn_I > 10$ werden dem freimolekularen Bereich zugeordnet. Mittelgroße Knudsenzahlen ($0,1 < Kn_I < 10$) stellen den Übergangsbereich dar /110/, wobei die Untergrenze nicht genau definiert ist. Oft werden bereits Partikel mit $Kn_I < 0,2$ dem Kontinuumbereich zugesprochen /126, 131, 134, 203/.

Die meisten Berechnungsmodelle zur Diffusionsaufladung sind nur in einem der Partikelgrößenbereiche anwendbar. So können für große Partikel ($x > 100$ nm) die Polarisationskräfte vernachlässigt werden /61, 132, 133/: Die Berechnung der Partikel-Ion-Kombinationswahrscheinlichkeit erfolgt direkt über die Diffusionsgleichung der Ionen im elektrischen Feld des Partikels (die in Kapitel 2.2.1.2 definierte Grenzkugel verliert für große Partikel an Bedeutung).

Für Partikel ab zirka 50 nm kann die 1926 von Arendt et al. aufgestellte, und von White verallgemeinerte Gleichung 2.7 zur Berechnung der Partikelladungszahl p_k (kontinuierlich definiert) verwendet werden /79/:

$$p_k(t) = \frac{xkT}{2el^2} \ln \left(1 + \frac{x\pi\bar{c}_I n_I e l^2 t}{2kT} \right) \quad (2.7)$$

Die Berechnung der mittleren thermischen Geschwindigkeit der Ionen \bar{c}_I erfolgt im Anhang A.1.1.

Hinds /79/ weist darauf hin, dass die Gleichung 2.7 nur begrenzt genau ist (Fehlerfaktor zwei für $n_I \tau > 10^{12}$ s/m³).

Gleichung 2.7 betrachtet die Aufladung als thermisch getriebene Kollisionen zwischen Ionen und der Oberfläche des Partikels in Abhängigkeit der Ionenanzahlkonzentration n_I um das Partikel /45, 46, 205/. White (in /133/ und Keefe gehen einen Schritt weiter und verwenden zur Charakterisierung der Ionenbewegung das Boltzmann-Gesetz.