

P 9: Theory and Modelling I

Time: Tuesday 14:30–16:40

Location: b305

Invited Talk

P 9.1 Tue 14:30 b305

Computer simulations of correlated fermions—from quantum plasmas to ultracold atoms and plasma-surface interaction — ●MICHAEL BONITZ — ITAP, CAU Kiel

Correlated quantum particles with half-integer spin are of growing interest in many fields, including condensed matter, dense plasmas and ultracold atoms. From a theory point of view these systems are very challenging as they require to simultaneously treat correlation, quantum diffraction and exchange effects. I will present two examples of recent breakthroughs with first-principle computer simulations: 1. Ab initio quantum Monte Carlo results for electrons in Warm Dense Matter in thermodynamic equilibrium. It is possible to avoid the notorious fermion sign problem, without using fixed nodes, for a large range of parameters [1]. 2. Nonequilibrium Green functions results with T-matrix selfenergies for the ultrafast expansion dynamics of strongly correlated fermions on a lattice. We achieve, for the first time, excellent agreement with ultracold atom experiments [2]. Finally, I outline ideas how to accurately treat plasmas in contact with surfaces. Here the new challenge is to interface classical and quantum behavior of electrons.

1. T. Schoof, S. Groth, J. Vorberger, and M. Bonitz, Phys. Rev. Lett. 115, 130402 (2015); 2. N. Schlünzen, S. Hermanns, M. Bonitz, and C. Verdozzi, arXiv:1508.02957

Fachvortrag

P 9.2 Tue 15:00 b305

Kinetische Simulation des Neutralteilchen- und Ionentransports in Sputterprozessen — ●JAN TRIESCHMANN, FREDERIK SCHMIDT, RALF PETER BRINKMANN und THOMAS MUSSENBRÖCK — Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik, Universitätsstraße 150, 44801 Bochum, Deutschland

Mit Hilfe von Sputterprozessen abgeschiedene Schichten finden vielfältige technische Anwendungen im Bereich der Oberflächenveredlung. Ein detailliertes theoretisches Verständnis der darin ablaufenden Prozesse ist in vielen Fällen allerdings nur durch simulative, kinetische Ansätze möglich. In diesem Beitrag wird ein kinetisches Simulationsmodell auf Basis der Test Multi-Particle Methode (TMPM) vorgestellt. Das Modell beschreibt den Teilchentransport gesputterten Aluminiums als Spurenelement innerhalb einer beliebigen dreidimensionalen Reaktorkonfiguration. Es beinhaltet sowohl den Neutralteilchentransport auf Basis des M1-Stoßmodells (eine spezielle Variable-harte-Kugel Variante), als auch den Ionentransport unter dem Einfluss einer Langevin-Wechselwirkung. Etwaige Ionisationsprozesse werden auf Basis begründeter Annahmen an das Schwerteilchenmodell gekoppelt. Es werden Ergebnisse für den Neutralteilchentransport innerhalb einer kapazitiven Sputterquelle sowie für den gemeinsamen Schwerteilchentransport (Neutrale und Ionen) innerhalb einer Magnetron-Sputterquelle vorgestellt.

(Diese Arbeit wird im Rahmen des SFB/Transregio 87 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft gefördert.)

P 9.3 Tue 15:25 b305

Globales Modell für die Charakterisierung von mikrowellengetriebenen ICP-Quellen — ●HORIA-EUGEN PORTEANU — Ferdinand-Braun-Institut, Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik, 12489 Berlin, Germany

Induktiv gekoppelte Plasmastrahlquellen bis 2.45 GHz versprechen eine effiziente Generation von monoatomaren Sauerstoffatomen, wie sie z. B. für die "Plasma-Enhanced Atomic Layer Deposition" interessant sind. Eine derartige Quelle wurde als Doppel-ICP-Resonator realisiert. Das Sauerstoff-Plasma wird induktiv mit Mikrowellen in einem Quarzrohr geheizt. Das Plasma ändert die Schwingungsmoden und die Resonanzfrequenzen der Quelle. Deshalb wurde eine grundlegende Analyse durchgeführt, um die optimale Anregung zu finden. Mit Hilfe eines "pump-probe" Experiments lassen sich die elektrischen Plasmaeigenschaften messen. Ein Mikrowellensignal mit fester Frequenz und große Leistung (20 – 40 W) prägt einen gewissen Zustand im Plasma ein. Ein zweites Mikrowellensignal mit kleinerer Leistung (< 1 mW) durchfährt einen Frequenzbereich und tastet die komplexen Reflexionskoeffizienten am Eingang des Resonators ab. Die gemessenen, sogenannten "hot-S-Parameter", interpretiert im Rahmen eines globalen Modells, lassen auf die Plasmaparameter: Elektronendichte n_e und Streufrequenz ν schließen. Ein 3D Modell der Quelle, betrachtet das Plasma als ho-

mogenes Medium, definiert durch die Drude-Leitfähigkeit. Das Modell berechnet die Resonanzkurven für verschiedene Plasmaparameter. Aus dem Vergleich mit den gemessenen Kurven für Ar und O₂ findet man Elektronendichten um 10^{19} m^{-3} und Streufrequenzen um 1 GHz.

P 9.4 Tue 15:40 b305

Classical dynamics of energetic spin one half particle in strong electromagnetic fields — ●MENG WEN, HEIKO BAUKE, and CHRISTOPH H. KEITEL — Max-Planck-Institut für Kernphysik, Saupfercheckweg 1, 69117 Heidelberg, Germany

The development of the ultra intense lasers facilitates the study of the dynamics of energetic electrons in strong fields. The electron dynamics include the precession of spin as well as the electron's orbital motion, which is determined the Lorentz force and a spin-dependent Stern-Gerlach force. Theoretical models, however, often neglect the electron's spin degree of freedom, not only due to the smallness of spin effects, but also because of the lack of a definite classical description of it. Although many classical models to include the spin have been proposed, the validity of these were seldom investigated. Under this motivation, we investigate the reliability of different models by applying them to electrons in specific strong-field setups [1]. Discrepancies in different classical models result mainly due to different relativistic generalizations of the Stern-Gerlach force, which leads to conflicting spin effects in electron trajectories. Numerical comparisons of these classical models to the Dirac theory are performed and an experimental evaluation is proposed. Finally, a reliable classical model is suggested for future descriptions of relativistic laser-driven electrons.

[1] M. Wen, H. Bauke, C. H. Keitel, "Differentiating among conflicting classical models of spin-induced dynamics", arXiv:1510.09145

P 9.5 Tue 15:55 b305

What is the correct Bohm criterion? — ●TSANKO VASKOV TSANKOV and UWE CZARNETZKI — Institute for Plasma and Atomic Physics, Ruhr-University Bochum, 44780 Germany

The Bohm criterion is a fundamental concept in plasma physics that relates the ion and the electron characteristics at the sheath edge. Since its introduction, the concept has seen various extensions to account for arbitrary distributions of the particles, for negative ions or multiple positive ion species. However, the classical kinetic version of this criterion inevitably suffers from mathematical difficulties if at the sheath edge ions with zero velocities are present. This is the typical case when, e.g., charge exchange collisions are present.

Here, using the Boltzmann equation for the ions it will be shown, that these difficulties do not exist. Furthermore, the correct treatment leads to additional terms that account for collisionality and geometrical expansion. More importantly, the whole concept of a Bohm criterion as a defining condition for the position of the sheath edge is questioned.

P 9.6 Tue 16:10 b305

Kinetische Dämpfung im Spektrum der sphärischen Impedanzsonde — ●JENS OBERRATH¹ und RALF PETER BRINKMANN² — ¹Institut für Produkt- und Prozessinnovation, Leuphana Universität Lüneburg, Lüneburg, Deutschland — ²Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Deutschland

Aktive Plasmaresonanzspektroskopie ist eine weitverbreitete Diagnostikmethode, die in verschiedenen Bauformen realisiert wurde. Eine mögliche Bauform ist die sogenannte Impedanzsonde. Ihr Resonanzverhalten und insbesondere die durch kinetische Effekte hervorgerufene Resonanzverbreiterung kann mit einem allgemeinen kinetischen Modell beschrieben werden [1].

In diesem Beitrag liegt der Fokus auf der sphärischen Impedanzsonde. Ausgehend vom allgemeinen Modell wird mit funktionalanalytischen Methoden ein Ausdruck für die Admittanz des Sonde-Plasma-Systems vorgestellt, der eine approximative Berechnung zugehöriger Spektren erlaubt. Die resultierenden Spektren zeigen einen Resonanzpeak, dessen Halbwertsbreite deutlich größer ist als bei einem fluidynamisch berechneten Spektrum.

[1] J. Oberrath und R.P. Brinkmann, Plasma Sources Sci. Technol. **23**, 045006 (2014)

P 9.7 Tue 16:25 b305

Transformer Ratio saturation in a beam-driven wakefield accelerator — ●JOHN FARMER, ROBERTO MARTORELLI, and ALEXAN-

DER PUKHOV — Heinerich-Heine-Universität Düsseldorf, 40225 Düsseldorf

We show that for beam-driven wakefield acceleration, the linearly-ramped, equally-spaced train of bunches typically considered to optimise the transformer ratio only works for flat-top bunches. Through

theory and simulation, we explain this behaviour is due to the unique properties of the plasma response to a flat-top density profile. Calculations of the optimal scaling for a train of Gaussian bunches show diminishing returns with increasing bunch number, tending towards saturation. For a periodic bunch train, a transformer ratio of 23 was achieved for 50 bunches, rising to 40 for a fully optimised beam.