

Modelowanie pola elektrostatycznego pułapki jonowej

Paweł Lipiór

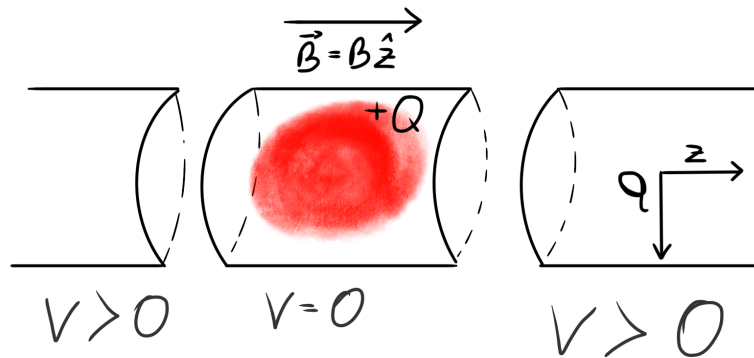
24 maja 2020

1 Wstęp

Tematem odbytych zajęć laboratoryjnych było zastosowanie komputerowych metod obliczeniowych do zamodelowania pola elektrycznego pułapki jonowej. W tym celu wykorzystano numeryczne rozwiązanie równania Laplace'a, którego rozwiązanie uzyskano metodą relaksacji równania. Następnie sporządzono wykresy obrazujące rozwiązanie zadanego równania. Kolejno dokonano ich analizy i wyciągnięto wnioski.

2 Wstęp teoretyczny

Podczas trwania zajęć laboratoryjnych wykorzystano metodę relaksacji równania Laplace'a do wyznaczenia potencjału elektrostatycznego w obszarze stanowiącym pułapkę jonową. Schemat poglądowy takiej pułapki przedstawia rysunek 1



Rysunek 1: Schemat pułapki jonowej dla dodatnich ładunków jonowych. Z powodu wysokiego potencjału po lewej i prawej stronie ($V \neq 0$) jony zostają uwięzione w części środkowej o zerowym potencjale. Ruch jonów w kierunku radialnym ogranicza silne pole magnetyczne skierowane zgodnie ze składową z układu.

Pułapkę stanowi obszar wydrążonego wewnątrz walca do którego końców przyłożono wysoki potencjał. Potencjał na powierzchni środkowej części walca jest zerowy. W układzie tym ruch ładunków w kierunku osi \mathbf{z} ograniczony jest przez pole elektryczne. Ruch w kierunku radialnym ograniczany jest przez silne pole magnetyczne styczne do kierunku osi \mathbf{z} .

Problem wyznaczenia potencjału pola elektrostatycznego można rozwiązać za pomocą równania Laplace'a (zakładamy brak ładunku wewnątrz układu):

$$\nabla^2 V(\vec{r}) = 0 \quad (1)$$

Ze względu na symetrię układu łatwiej to równanie będzie rozwiązać we współrzędnych cylindrycznych: (ρ, ϕ, z) . Równanie Laplace'a we współrzędnych cylindrycznych przyjmuje postać:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) V(\rho, \phi, z) = 0 \quad (2)$$

3 Metoda obliczeń numerycznych

3.1 Dyskretyzacja równania Laplace'a

Równanie 1 możemy rozwiązać metodą relaksacji na siatce. Warto zauważyć iż układ jest symetryczny więc rozwiązanie nie będzie zależeć od zmiennej kątowej ϕ . Wprowadzamy siatkę węzłów w płaszczyźnie $\rho - z$:

$$\begin{aligned} \rho &\rightarrow \rho_i, \quad i = 0, 1, \dots, n \\ z &\rightarrow z_j, \quad j = 0, 1, \dots, m \\ V(\rho, z) &\rightarrow V(\rho_i, z_j) \rightarrow V_{i,j} \end{aligned}$$

Następnie zapisujemy kolejne elementy równania Laplace'a jako ilorazy różnicowe:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_{i,j}}{\partial \rho} &= \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} \\ \frac{\partial^2 V_{i,j}}{\partial \rho^2} &= \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} \\ \frac{\partial^2 V_{i,j}}{\partial z^2} &= \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \end{aligned}$$

Zapisane za pomocą tych składników równanie Laplace'a przyjmuje postać:

$$\frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} = 0$$

Po przekształceniu:

$$V_{i,j} = \frac{1}{\frac{2}{\Delta\rho^2} + \frac{2}{\Delta z^2}} \left(\frac{V_{i+1,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right)$$

3.2 Warunki brzegowe

W celu rozwiązania równania należało ustalić warunki brzegowe siatki. Wprowadzono następujące warunki brzegowe:

$$\begin{aligned}V_{n,j} &= V_0, & j &= 1, 2, \dots, a \\V_{n,j} &= 0, & j &= a + 1, a + 2, \dots, b \\V_{n,j} &= V_0, & j &= b + 1, b + 2, \dots, m \\V_{i,m} &= V_{i,m-1}, & i &= 1, 2, \dots, n - 1 \\V_{i,0} &= V_{i,1}, & i &= 1, 2, \dots, n - 1 \\V_{0,j} &= V_{1,j}, & j &= 1, 2, \dots, m - 1\end{aligned}$$

4 Przeprowadzenie obliczeń

Do przeprowadzenia symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów wykorzystano własny program obliczeniowy wykorzystujący opisaną powyżej metodę dyskretyzacji równania Laplace'a. W obliczeniach przyjęto następujące warunki:

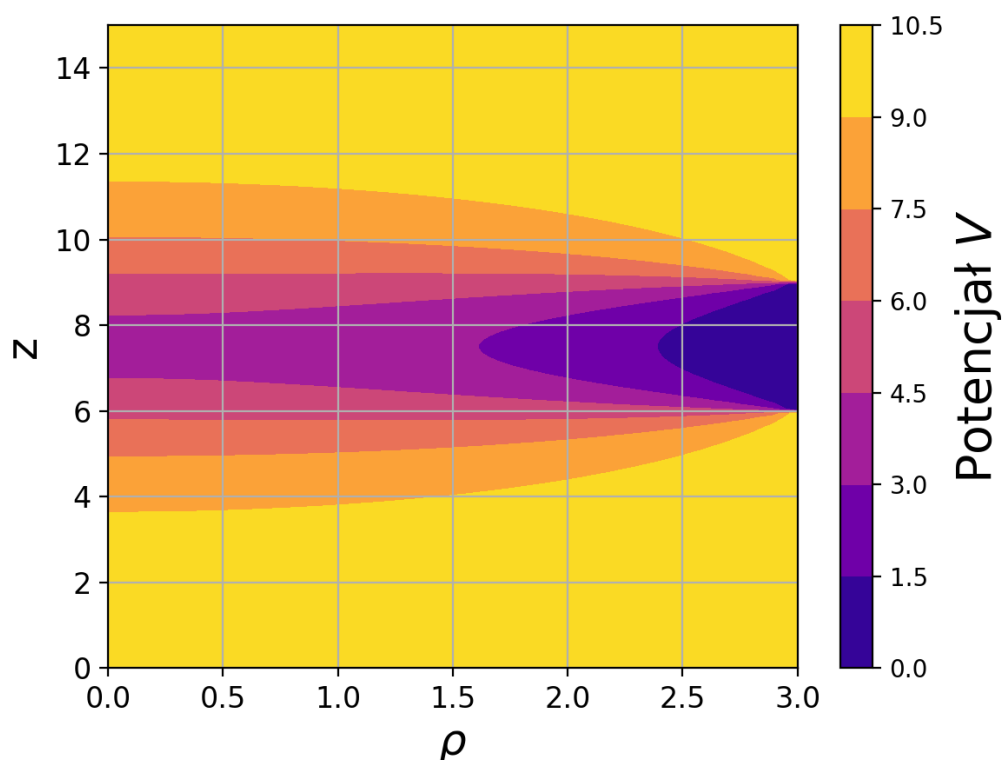
- $n = 30$
- $nm = 150$
- $a = 60$
- $b = 90$
- $\Delta\rho = 0.1$
- $\Delta z = 0.1$
- $V_0 = 1$
- $N = 5000$ - liczba iteracji relaksacyjnych

Jako warunek początkowy potencjału na siatce przyjęto wartość $V_{i,j} = 0$.

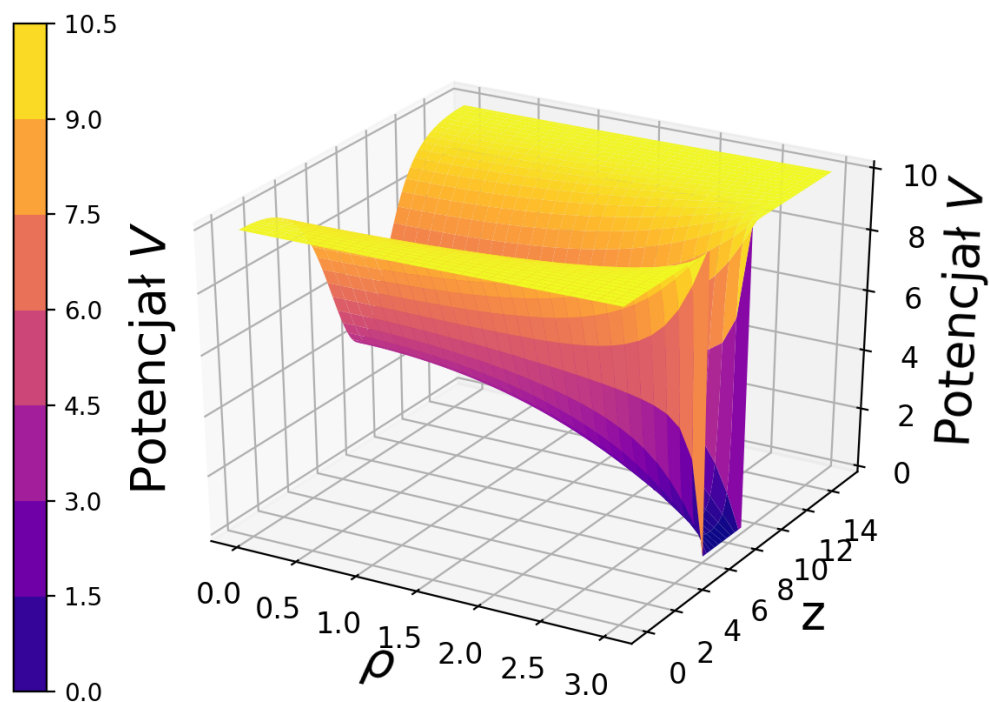
5 Wyniki symulacji

5.1 Rozwiązanie równania

Za pomocą własnego programu komputerowego dokonano modelowania potencjału pułapki jonowej. Wyniki w postaci mapy rozkładu potencjału 2D i jego rzutu izometrycznego 3D przedstawiono na rysunkach: 2 oraz 3.



Rysunek 2: Mapa 2D potencjału $V(\rho, z)$.

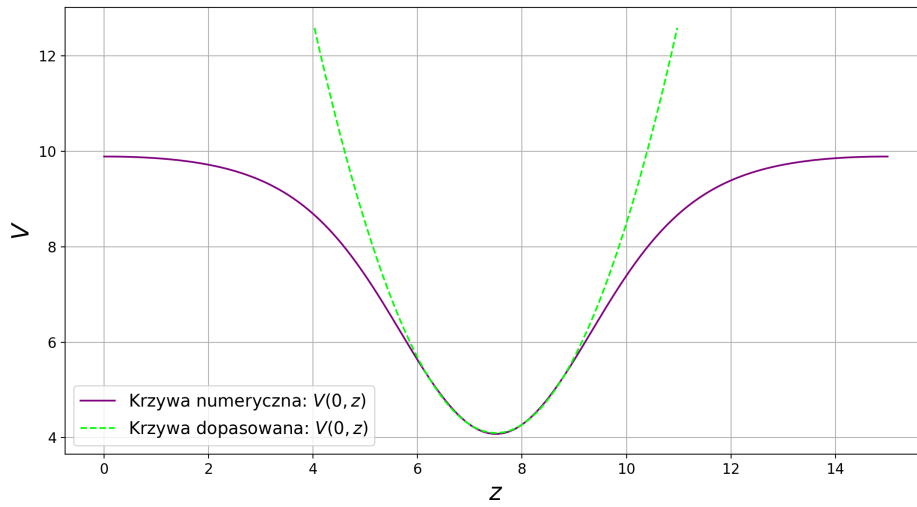


Rysunek 3: Mapa 3D potencjału $V(\rho, z)$.

Dokonując analizy wykresów przedstawionych na rysunkach 2 oraz 3 można stwierdzić iż przyjęty model wydrążonego walca sprawdzi się jako pułapka jonowa. Zarówno z lewej jak i z prawej strony krawędzi walca wartość potencjału spada aż osiąga wartość minimalną. Zgodnie z założeniem w środku pułapki jonowej na powierzchni walca istnieje zerowy potencjał, który rośnie tym mocniej im bliżej osi symetrii walca. Dochodzimy do wniosku iż dołączenie silnego pola magnetycznego skierowanego stycznie do osi symetrii walca wydaje się być konieczne, gdyż w innym przypadku zgromadzone ładunki przemieszczą się na powierzchnię walca.

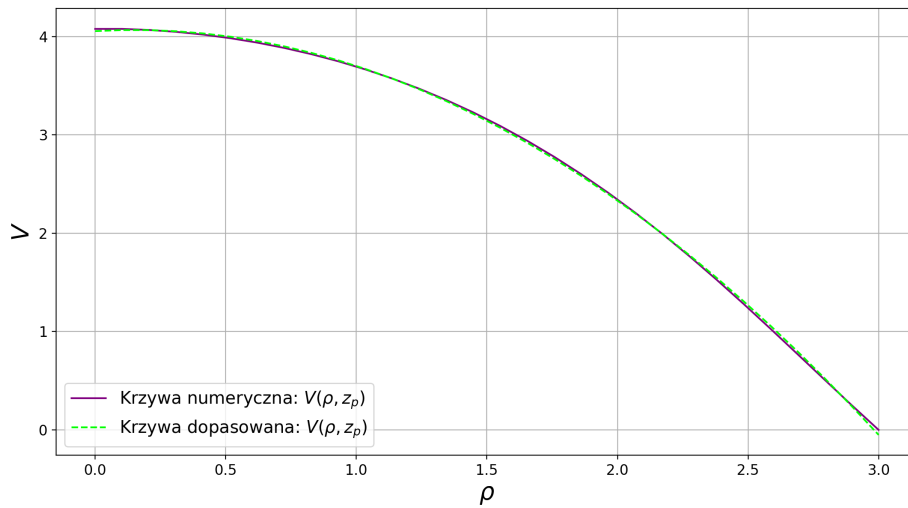
5.2 Przekrój potencjału

W kolejnym kroku sporządzono wykres przekroju obliczonego potencjału na oś symetrii. Dodatkowo na wykresie zamieszczono krzywą dopasowania w postaci paraboli. Wyniki zamieszczono na rysunku 5.



Rysunek 4: Przekrój potencjału: rzut na oś symetrii $V(0, z)$ wraz z krzywą dopasowania.

W kolejnym kroku sporządzono wykres przekroju obliczonego potencjału na płaszczyznę $\rho - z_p$, gdzie jako z_p przyjęto $z_p = \frac{(a+b)\Delta z}{2}$. Dodatkowo na wykresie zamieszczono krzywą dopasowania w postaci paraboli. Wyniki zamieszczono na rysunku 4.



Rysunek 5: Przekrój potencjału: na płaszczyznę $\rho - z_p$ wraz z krzywą dopasowania.

Dokonując analizy wykresów 4 oraz 5 dochodzimy do wniosku iż otrzymane rozwiązanie na rozkład potencjału może opisywać pułapkę jonową.

Rysunek 4 pokazuje iż dla środka długości walca rzut funkcji potencjału na oś symetrii walca

osiąga wartość minimalną i co do pewnego sąsiedniego obszaru jest zgodna z funkcją paraboliczną. Ładunek jest więc uwięziony w studni potencjału.

Rysunek 5 pokazuje iż wraz z oddalaniem się od osi symetrii walca potencjał spada, aż na powierzchni walca osiąga wartość zerową. Ponownie stwierdzamy iż zastosowanie silnego pola magnetycznego jest wymagane aby ładunki pozostały w środku pułapki. W przypadku braku odpowiednio skierowanego pola magnetycznego ładunki przepłyną na powierzchnię walca.

6 Podsumowanie

W trakcie sporządzania projektu zapoznano się z metodą dyskretyzacji równania Laplace’a. Zapoznano się z metodą relaksacji równania Laplace’a.

Na siatce węzłów zdefiniowano warunki brzegowe i początkowe równania.

Dokonano implementacji metody dyskretyzacji i relaksacji równania Laplace’a w programie komputerowym. Dokonano symulacji za pomocą własnego programu komputerowego.

Wygenerowano mapy rozkładu potencjału w postaci 2D i rzutu izometrycznego 3D. Dokonano analizy wyników.

Wygenerowano wykresy obrazujące rzuty obliczonego potencjału na oś symetrii walca oraz powierzchnię $\rho-z_p$. Dołączono krzywe dopasowania do rzutów w postaci paraboli. Dokonano analizy wyników.

Reasumując, wykonano wszystkie zapisane w instrukcji zadania i zdobyto umiejętności pozwalające na ich wykonanie.

7 Źródła

1. Instrukcja do zajęć laboratoryjnych "Projekt 5: dmodelowanie pola elektrostatycznego pułapki jonowej" dr hab inż. Tomasz Chwiej