

Modelowanie pola elektrostatycznego pułapki jonowej

Paweł Lipiór

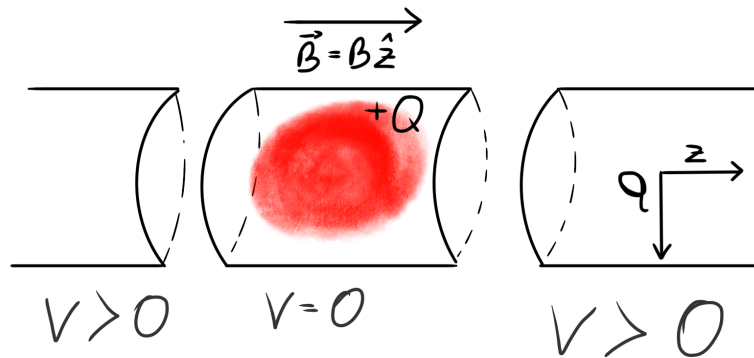
23 maja 2020

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:

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

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:

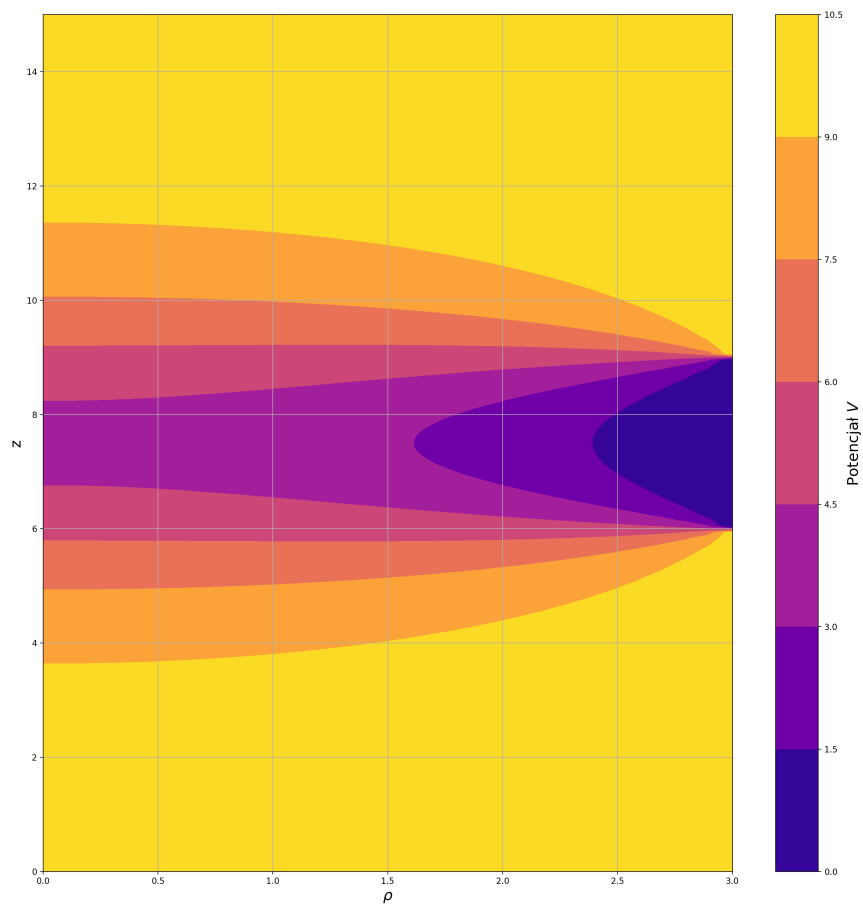
- $n = 30$
- $nm = 150$
- $a = 60$
- $b = 90$
- $\Delta\rho = 0.1$
- $\Delta z = 0.1$
- $V_0 = 1$
- $N = 5000$ - liczba iteracji relaksacyjnych

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

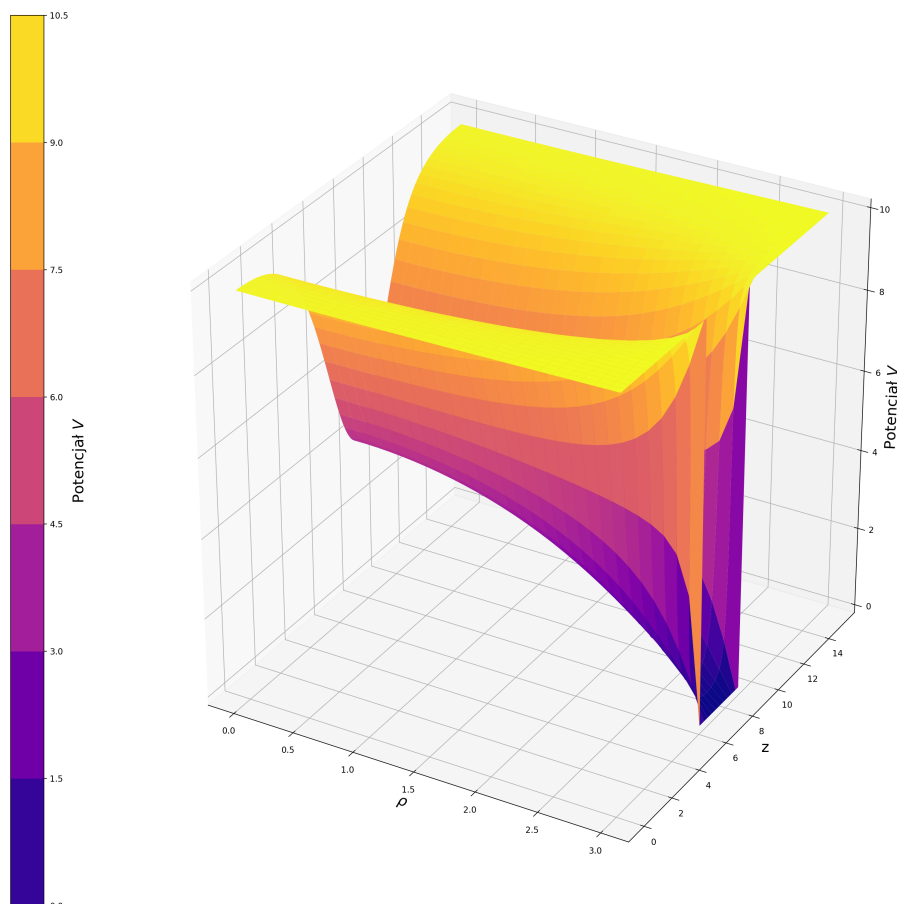
5 Wyniki symulacji

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 $V(\rho, z)$.

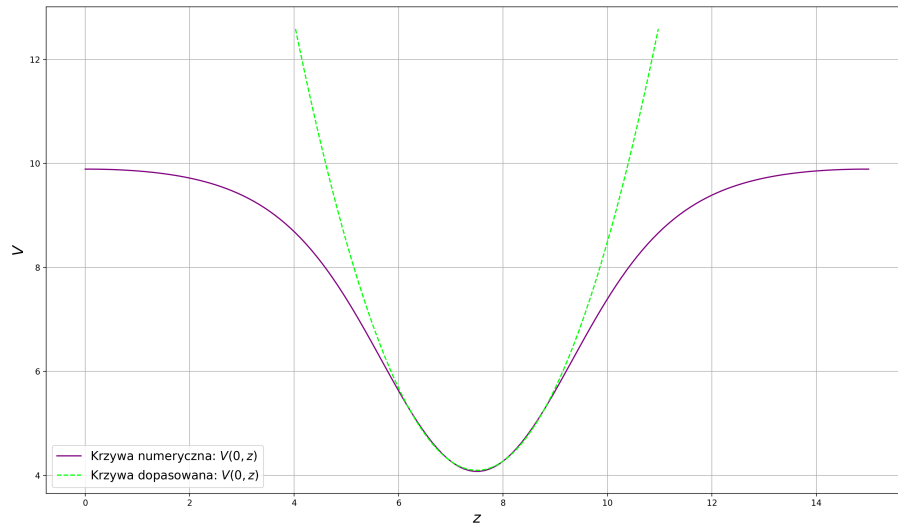


Rysunek 3: Mapa 3D potencjału $V(\rho, z)$.

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.

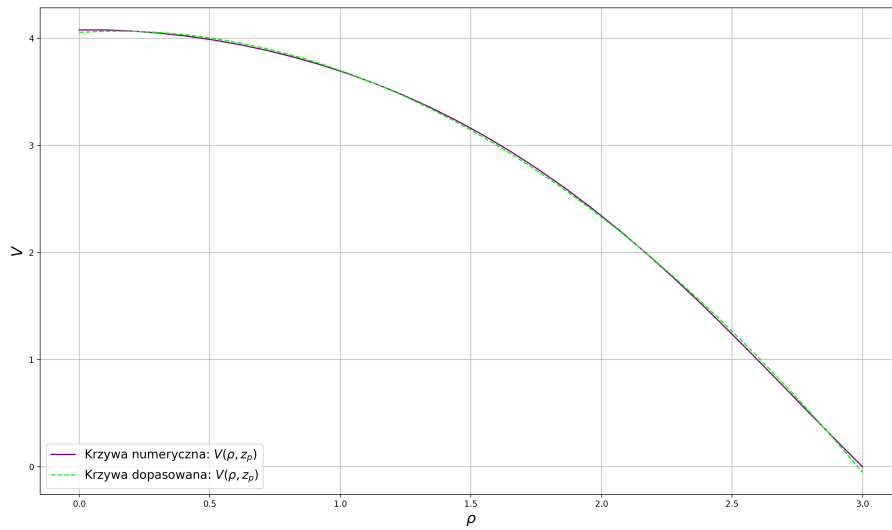
5.2 Przekrój potencjału

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.

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