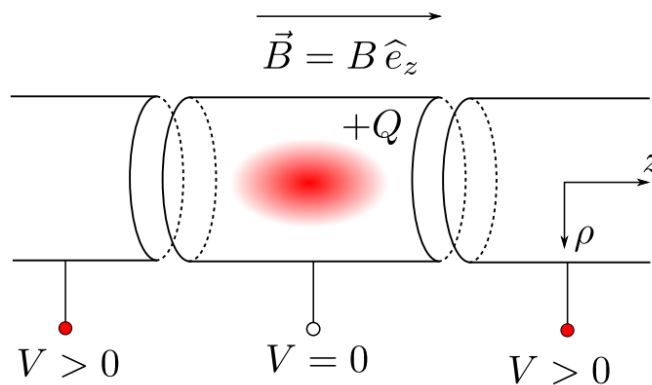
 AGH	Akademia Górniczo-Hutnicza Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Fizyka Techniczna Podstawy fizyki teoretycznej	Zrealizował: Ryś Przemysław
Rok akademicki: 2022/2023	Semestr VI	Grupa laboratoryjna nr 2
Temat projektu: Projekt 5: Modelowanie pola elektrostatycznego pułapki jonowej		
Data wykonania projektu 13.06.2023	Data oddania sprawozdania 17.06.2023	Ocena

1 Wstęp teoretyczny

Pułapki jonowe są wykorzystywane do wychwytywania i przechowywania naładowanych cząstek, zwanych jonami, w systemach odizolowanych od otoczenia. Mają one szerokie zastosowanie w fizyce i chemii, umożliwiając precyzyjne badanie właściwości atomów i cząsteczek oraz wykonywanie zaawansowanych obliczeń kwantowych. Pułapki jonowe składają się z kombinacji pól elektrycznych i/lub magnetycznych, które tworzą potencjały pułapkujące dla jonów. Tradycyjne pole elektrostatyczne samo w sobie nie jest w stanie zamknąć naładowanego jonu ze względu na twierdzenie Earnshawa. Jednak naukowcy opracowali różne metody obejścia tego ograniczenia poprzez zastosowanie kombinacji pól elektrycznych i magnetycznych. Pułapki jonowe, takie jak pułapka Penninga i pułapka Paula, wykorzystują te kombinacje pól w celu skutecznego wychwytywania i przechowywania jonów. Poprzez odpowiednie zastosowanie kombinacji pól elektrycznych i magnetycznych lub oscylujących pól elektrycznych, możliwe jest przetrzymywanie i manipulowanie jonami w pułapkach jonowych, pomimo ograniczeń wynikających z twierdzenia Earnshawa.

Naszym zadaniem jest zamodelować pole elektrostatyczne przy pomocy obliczeń numerycznych dla równania Laplace'a w obszarze stanowiącym pułapkę dla jonów 1.



Rys. 1: Schemat pułapki dla dodatnio naładowanych jonów.

Pułapkę jonową można przedstawić jako wewnątrz wydrążonego walca, gdzie na końcach walca przyłożony jest wysoki potencjał elektryczny, podczas gdy w części środkowej potencjał ten jest niższy ($V = 0$). W takim układzie ruch jonów wzdłuż osi z jest kontrolowany przez pole elektrostatyczne generowane przez cylindryczne elektrody. Aby zapobiec ucieczce jonów w kierunku radialnym, zazwyczaj na środkową część walca nakładana jest cewka, generująca pole magnetyczne skierowane wzdłuż osi symetrii układu. Pole to zakrzywia trajektorię jonów, kierując je w stronę środka pułapki.

W celu dokładnego opisanie pola elektrostatycznego w pułapce jonowej, będziemy rozwiązywać numerycznie równanie Laplace'a, przy założeniu braku gęstości ładunku w układzie. Równanie Laplace'a opisuje rozmieszczenie potencjału elektrycznego w przestrzeni i we współrzędnych cylindrycznych (symetria układu) ma postać:

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

2 Metoda obliczeniowa

Metodą użytą w celu wykonania projektu był proces relaksacji równania Laplace'a z dyskretyzacją. Uwzględniając symetrię obrotową przechodzimy ze zmiennych ciągłych ρ oraz z do zmiennych dyskretnych odpowiadających węzłom na siatce różnicowej, tj.:

$$\rho \rightarrow \rho_i = i \cdot \Delta\rho, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (2)$$

$$z \rightarrow z_j = j \cdot \Delta z, \quad j = 0, 1, \dots, m \quad (3)$$

$$V(\rho, z) \rightarrow V(\rho_i, z_j) \rightarrow V_{i,j} \quad (4)$$

Dyskretyzacji ulegają również pochodne, szczególnie te występujące w laplasjanie we współrzędnych cylindrycznych, które ze względu na minimalizację błędów numerycznych przybierają postać centralnych ilorazów różnicowych:

$$\frac{\partial V_{i,j}}{\partial \rho} = \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 V_{i,j}}{\partial \rho^2} = \frac{V_{i+1,j} + V_{i-1,j} - 2V_{i,j}}{\Delta\rho^2} \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 V_{i,j}}{\partial z^2} = \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j-1} - 2V_{i,j}}{\Delta z^2} \quad (7)$$

Korzystając z powyższych możemy zapisać zdyskretyzowane równanie Laplace'a 1:

$$\frac{V_{i+1,j} + V_{i-1,j} - 2V_{i,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_i} \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j-1} - 2V_{i,j}}{\Delta z^2} = 0. \quad (8)$$

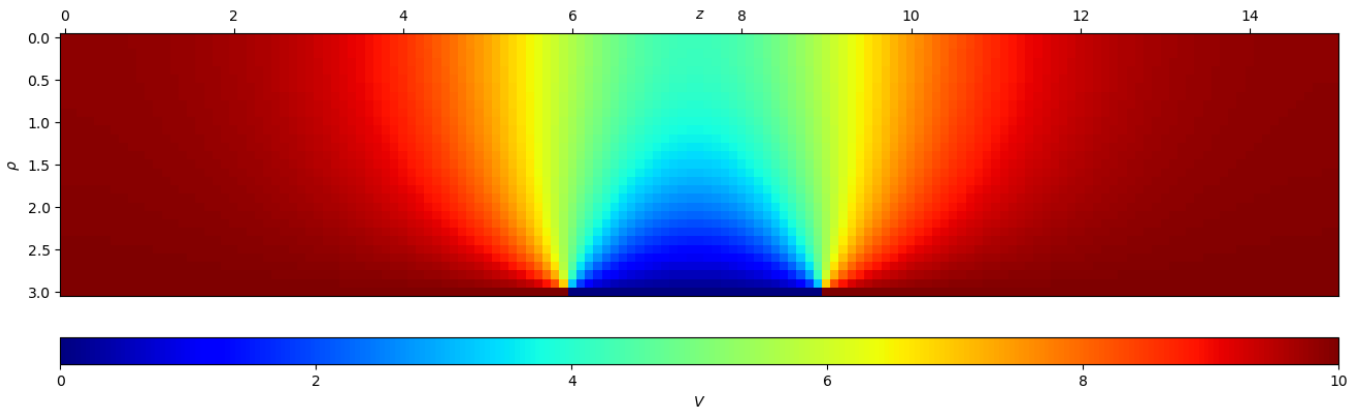
Następnie po elementarnych przekształceniach wyprowadzamy wzór na potencjał w węźle (i,j), który to wyraża się przy pomocy sąsiadów tj. wartościami potencjału w sąsiednich węzłach:

$$V_{i,j} = \frac{1}{\frac{2}{\Delta\rho^2} + \frac{2}{\Delta z^2}} \left(\frac{V_{i+1,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_i} \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right) \quad (9)$$

3 Wyniki symulacji

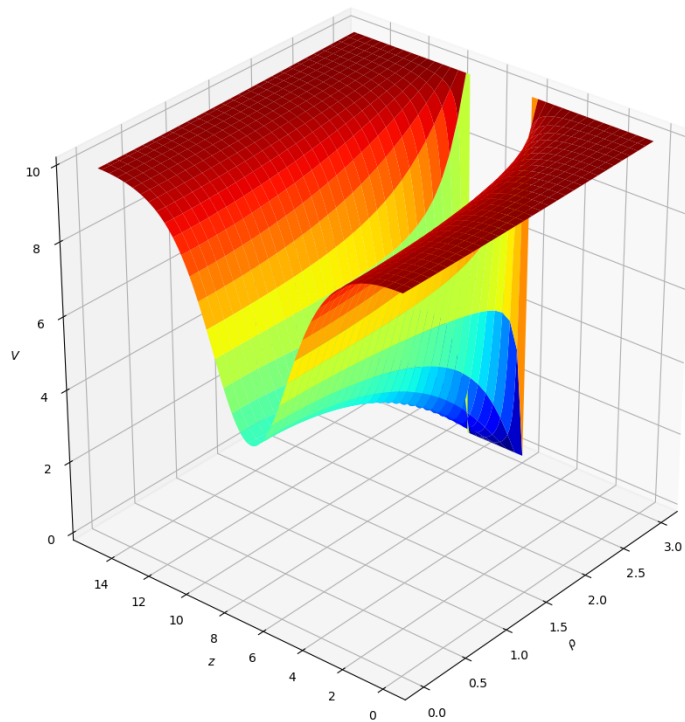
Parametry wykorzystane do przeprowadzenia symulacji:

- $\Delta z = \Delta\rho = 0.1$ - wymiar odległości dla skoku między węzłami
- $n = 31$ - ilość węzłów dla wymiaru ρ (wliczając węzeł o indeksie 0)
- $m = 151$ - ilość węzłów dla wymiaru z (wliczając węzeł o indeksie 0)
- $ITMAX = 5000$ - ilość iteracji metody
- $j_1 = 60$ - numer węzła końca lewej elektrody
- $j_2 = 90$ - numer węzła początku prawej elektrody
- $V_0 = 10$ - wartość potencjału na elektrodach



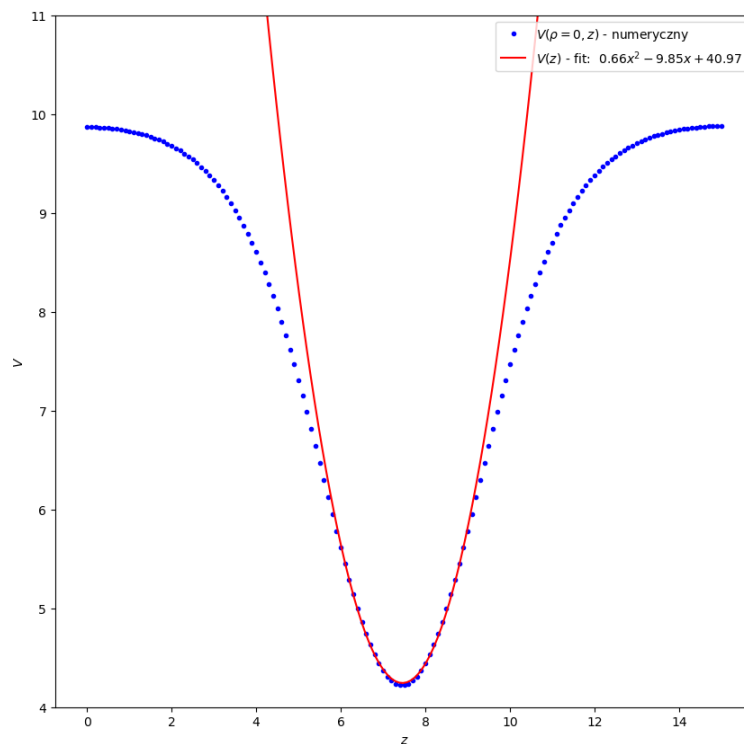
Rys. 2: Mapa 2D potencjału $V(\rho, z)$

Na rysunku 2 przedstawiony został rozkład potencjału w płaszczyźnie ρz . Zarówno w wysokich jak i niskich z przyjmuje on maksymalne wartości, ponieważ jest to obszar bliski elektrodom. Minimum leży natomiast pośrodku, zmniejszając się wraz ze wzrostem odległości radialnej.



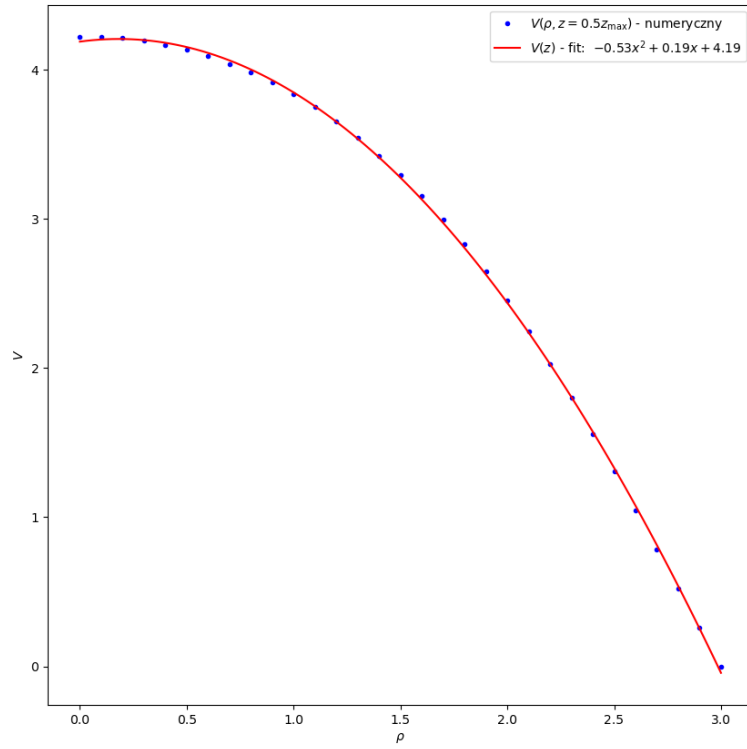
Rys. 3: Rozkład 3D potencjału $V(\rho, z)$

Na rysunku 3 przedstawiony został rozkład potencjału w postaci rzutu izometrycznego. Trzecią oś ortogonalnego układu stanowi wartość funkcji potencjału. Jest to rozszerzenie spojrzenia na wykres 2.



Rys. 4: Wykres funkcji potencjału $V(z)$ dla ustalonego $\rho = 0$ wraz z dopasowaniem będącym dwumianem kwadratowym dla z z przedziału $[6.2, 9.2]$

Na rysunku 4 przedstawiony został wykres funkcji potencjału w postaci cięcia na płaszczyznę $\rho = 0$. Powierzchnia przyjmuje wówczas postać krzywej, która to przyjmuje dosyć specyficzną postać, przypominającą w pewnym zakresie parabolę. Zastosowanie metody najmniejszych kwadratów dla dopasowania dwumianu kwadratowego do danych z zakresu $[6.2, 9.2]$, prowadzi do funkcji postaci: $0.66x^2 - 9.85x + 40.97$.



Rys. 5: Wykres funkcji potencjału $V(\rho)$ dla ustalonego $z = 0.5z_{max}$ wraz z dopasowaniem będącym dwumianem kwadratowym

Na rysunku 5 przedstawiony został wykres funkcji potencjału w postaci cięcia na płaszczyznę $z = 0.5z_{max}$. Powierzchnia przyjmuje wówczas postać krzywej, której wszystkie dane układają się na kształt dwumianu kwadratowego. Zastosowanie metody najmniejszych kwadratów dla dopasowania dwumianu kwadratowego do danych prowadzi do funkcji: $-0.53x^2 + 0.19x + 4.19$, która w pełni odzwierciedla dane z zadanego cięcia.

4 Wnioski

Analizując wyniki symulacji modelowania pola elektrostatycznego metodą relaksacji równania Laplace'a, zauważamy, zarówno na podstawie wykresu 2D (rysunek 2) jak i 3D (rysunek 3), że rozkład potencjału w obszarze pułapki przyjmuje wartość minimalną dokładnie dla współrzędnych z obejmujących wewnętrzną, nienaładowaną elektrodę. Nie ma tam zerowej wartości potencjału, ponieważ elektrody lewa oraz prawa są naładowane co efektywnie wpływa na rozkład potencjału w przestrzeni wokół nich. Im bliżej nich jest cząstka, tym jest on wyższy. Dodatni potencjał sąsiednich elektrod dla dodatnio naładowanych jonów stanowi barierę, która spycha je do środka. Niemniej potencjał ten zmienia się również dla współrzędnej radialnej ρ , ponieważ oddziaływanie elektrostatyczne z jonami maleje w miarę zwiększania odległości od środka pułapki. Widać zatem, że bez pola magnetycznego wytwarzanego przez cewkę otaczającą wewnętrzną powierzchnię podtrzymanie jonów nie byłoby możliwe, gdyż opuściły by one obszar pułapki.

W przypadku przekrojów funkcji potencjału na $\rho = 0$ (rysunek 4) oraz $z = 0.5z_{max}$ (rysunek 5) otrzymujemy punktowe przekrojowe charakterystyki rozwiązania numerycznego, które zostały odpowiednio dopasowane metodą najmniejszych kwadratów do dwumianu kwadratowego. Dla rysunku 4 dopasowanie zostało wykonane dla punktów z przedziału $[6.2, 9.2]$ w celu lepszego dopasowania krzywej do danych minimum potencjału. Z dokładnością do tego zakresu możemy zatem aproksymować rozwiązanie parabolą: $0.66x^2 - 9.85x + 40.97$. W przypadku rysunku 5 dopasowanie dotyczy wszystkich punktów przekroju. W tym przypadku aproksymacja parabolą: $-0.53x^2 + 0.19x + 4.19$ jest bardziej wskazana.