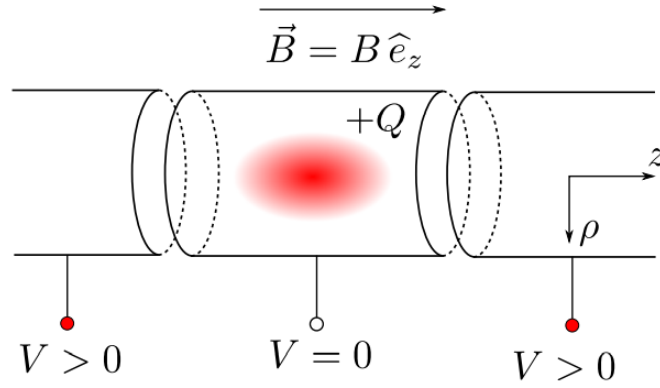


Wydział, kierunek: WFiIS, FT	Imię i nazwisko: Marcin Mikołajczyk	Rok: 3	Grupa: 2
Data wykonania: 23 czerwca 2025	Data oddania: 23 czerwca 2025	OCENA:	

## Projekt 5: modelowanie pola elektrostatycznego pułapki jonowej

### 1 Wstęp

Celem niniejszego laboratorium jest wyznaczenie potencjału elektrostatycznego w obszarze geometrycznym modelującym pułapkę jonową. Schemat poglądowy takiego układu przedstawia Rys. 1. Pułapka ma postać wnętrza wydrążonego walca, w którym środkowa część elektrody utrzymywana jest na potencjale zerowym ( $V = 0$ ), natomiast końcowe części walca posiadają dodatni potencjał  $V_0 > 0$ . W takiej konfiguracji jony dodatnie zostają uwięzione w centralnym obszarze pułapki na skutek działania sił elektrostatycznych.



Rysunek 1: Schemat pułapki dla jonów o dodatnim ładunku. Jony uwięzione są w środkowej części, gdzie  $V = 0$ . Ruch w kierunku radialnym ogranicza silne pole magnetyczne skierowane wzdłuż osi  $z$ . [1]

Ograniczenie ruchu jonów w kierunku radialnym ( $\rho$ ) uzyskuje się przez zastosowanie zewnętrznego pola magnetycznego skierowanego wzdłuż osi symetrii układu ( $z$ ). Takie pole zakrzywia trajektorie naładowanych cząstek, zmuszając je do poruszania się po spirali i utrzymując je wewnątrz pułapki.

W celu numerycznego wyznaczenia potencjału elektrostatycznego w omawianym układzie rozwiązujemy równanie Laplace'a:

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

przy założeniu, że w obszarze pułapki nie występują swobodne ładunki (czyli gęstość ładunku  $\rho = 0$ ). Ze względu na symetrię walcową układu, wygodniej jest posługiwać się współrzędnymi cylindrycznymi  $(\rho, \phi, z)$ , w których równanie Laplace'a ma postać:

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

Ze względu na symetrię obrotową pułapki, rozwiązanie nie zależy od kąta  $\phi$ , co upraszcza problem do dwóch wymiarów  $(\rho, z)$ .

### a) Dyskretyzacja równania Laplace'a

Równanie Laplace'a rozwiązujemy metodą relaksacji na prostokątnej siatce w przestrzeni  $(\rho, z)$ . Wprowadzamy dyskretyzację:

$$\rho_i = i \cdot \Delta\rho, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (3)$$

$$z_j = j \cdot \Delta z, \quad j = 0, 1, \dots, m, \quad (4)$$

$$V(\rho_i, z_j) = V_{i,j}. \quad (5)$$

W celu dyskretyzacji operatora Laplace'a stosujemy ilorazy różnicowe:

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

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

$$\frac{\partial^2 V_{i,j}}{\partial z^2} \approx \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2}. \quad (8)$$

Wstawiając powyższe przybliżenia do równania Laplace'a, otrzymujemy:

$$\frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_i} \cdot \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} = 0. \quad (9)$$

Z powyższego równania można wyznaczyć iteracyjne wyrażenie dla potencjału  $V_{i,j}$ :

$$V_{i,j} = \frac{1}{2/\Delta\rho^2 + 2/\Delta z^2} \left( \frac{V_{i+1,j} + V_{i-1,j}}{\Delta\rho^2} + \frac{1}{\rho_i} \cdot \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta\rho} + \frac{V_{i,j+1} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right). \quad (10)$$

### b) Warunki brzegowe

Na rys. 2 przedstawiono rozmieszczenie węzłów siatki oraz odpowiadające im warunki brzegowe. Wyróżniono następujące obszary:

- Obszar 1 (lewy cylinder):  $V_{n,j} = V_0$ , dla  $j = 0, 1, \dots, j_1$ ,
- Obszar 2 (środkowy cylinder):  $V_{n,j} = 0$ , dla  $j = j_1 + 1, \dots, j_2$ ,
- Obszar 3 (prawy cylinder):  $V_{n,j} = V_0$ , dla  $j = j_2 + 1, \dots, m$ ,
- Obszar 4 (górna krawędź siatki): warunek von Neumanna:

$$V_{i,m} = V_{i,m-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (11)$$

- Obszar 5 (dolna krawędź siatki): warunek von Neumanna:

$$V_{i,0} = V_{i,1}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (12)$$

- Obszar 6 (oś symetrii  $\rho = 0$ ): warunek von Neumanna:

$$V_{0,j} = V_{1,j}, \quad j = 1, 2, \dots, m-1. \quad (13)$$

## Warunki brzegowe i komentarz do instrukcji

Na rys. 2 przedstawiono rozmieszczenie węzłów siatki oraz odpowiadające im warunki brzegowe. Aby pozbyć się pików z narożników wykresu 3d wprowadzono zmiany do warunków brzegowych względem tych z instrukcji:

- **Obszary 1, 2, 3 (elektrody przy  $\rho = \rho_{\max}$ )**

Warunki Dirichleta są nadane w kolumnach  $i = N - 2, N - 1, N$ , co odpowiada poboczniczy walca (z małym rozszerzeniem dla stabilności). Dla:

- $0 \leq j \leq J1$  — lewa elektroda:  $V = V_0$ ,
- $J1 + 1 \leq j \leq J2$  — środkowa elektroda:  $V = 0$ ,
- $J2 + 1 \leq j \leq M$  — prawa elektroda:  $V = V_0$ .

**Komentarz:** Instrukcja mówi o nadaniu wartości w punkcie  $i = n$  (ostatnia kolumna), natomiast kod nadaje je także dla  $i = N - 2$  i  $i = N - 1$ .

- **Obszar 4 (górną granicą  $z = z_{\max}$ )**

Warunek von Neumanna: pochodna w kierunku  $z$  równa zero

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0 \Rightarrow V_{i,M} = V_{i,M-1}.$$

- **Obszar 5 (dolną granicą  $z = 0$ )**

Podobnie jak w obszarze 4, warunek von Neumanna:

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0 \Rightarrow V_{i,0} = V_{i,1}.$$

- **Obszar 6 (oś symetrii  $\rho = 0$ )**

Warunek wynikający z symetrii układu:

$$\frac{\partial V}{\partial \rho} = 0 \Rightarrow V_{0,j} = V_{1,j}.$$

## Uwagi do instrukcji

- W instrukcji zakłada się, że elektrody przy  $\rho = \rho_{\max}$  mają wartości przypisane tylko dla  $i = n$ . W praktyce wartość ta jest nadawana również w poprzednich kolumnach (np.  $i = N - 2, N - 1$ ), co poprawia stabilność i odwzorowuje grubość elektrody.

## 2 Zadanie do wykonania

W ramach ćwiczenia wykonano następujące kroki:

1. Zaprogramowano metodę relaksacji do rozwiązania równania Laplace'a w przestrzeni  $(\rho, z)$ .
2. Rozwiązano równanie Laplace'a dla parametrów:  $n = 30$ ,  $m = 150$ ,  $j_1 = 60$ ,  $j_2 = 90$ ,  $\Delta\rho = \Delta z = 0.1$ ,  $V_0 = 10$ ,  $ITMAX = 5000$ .
3. Wygenerowano następujące wykresy potencjału:
  - mapę 2D potencjału  $V(\rho, z)$ ,
  - mapę 3D (rzut izometryczny) potencjału  $V(\rho, z)$ ,
  - wykres przekroju potencjału na osi symetrii  $V(0, z)$  z krzywą aproksymacyjną (parabola),

- wykres przekroju potencjału  $V(\rho, z_p)$  dla  $z_p = (j_1 + j_2)\Delta z/2$  z krzywą aproksymacyjną.
4. Dokonano analizy uzyskanego rozkładu potencjału i jego zgodności z oczekiwanym rozkładem elektrostatycznym dla tego typu pułapki.

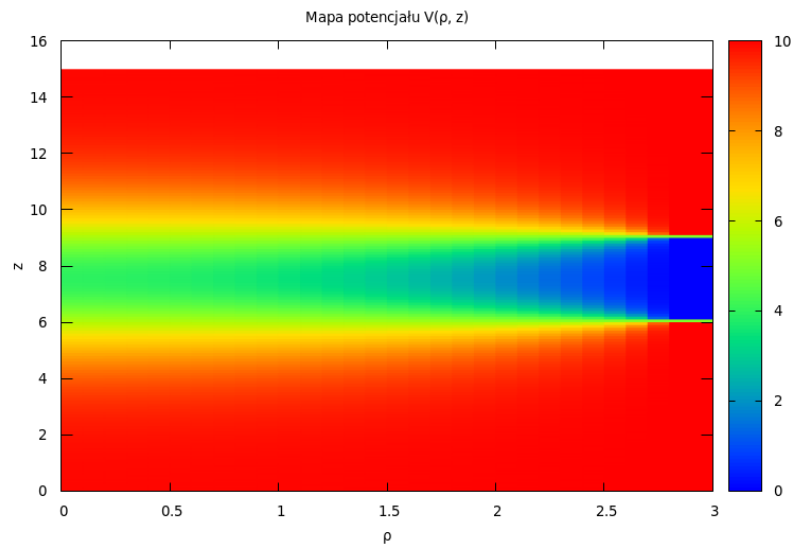
### a) Opis problemu

Zakładamy symetrię osiową, co pozwala pominąć zależność od kąta  $\phi$ . Wykorzystujemy dyskretną siatkę dwuwymiarową obejmującą współrzędne  $\rho$  i  $z$ , a potencjał obliczamy metodą relaksacyjną z użyciem iteracyjnego schematu różnic skończonych.

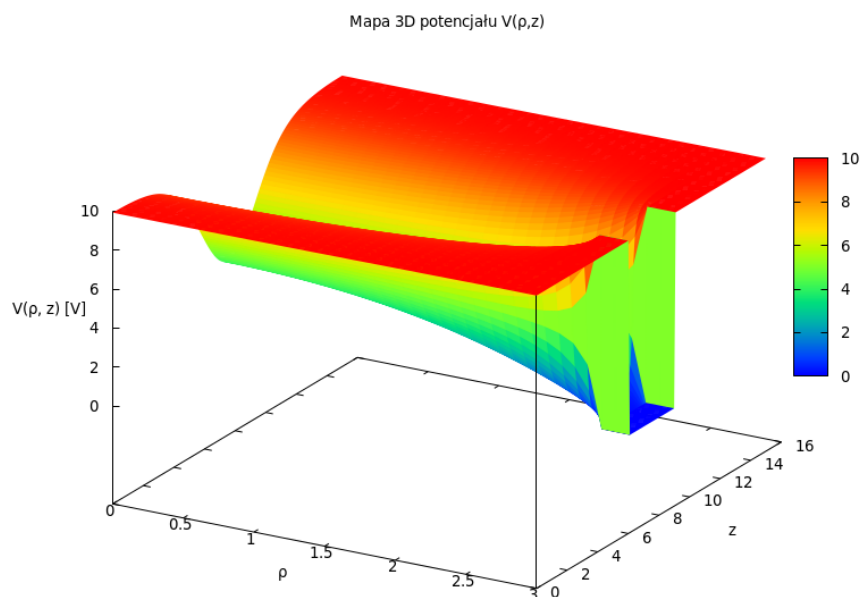
Przyjęto warunki brzegowe zgodne z geometrią układu fizycznego. Potencjał początkowy został zainicjalizowany zgodnie z przyjętym schematem: dla wybranych elektrod przypisano wartości stałe, a pozostałe punkty inicjalizowano zerem. W każdym kroku iteracyjnym wartości siatki były aktualizowane na podstawie średniej ważonej sąsiadów z uwzględnieniem poprawki wynikającej z metryki cylindrycznej (współczynnik  $1/\rho$ ).

Obliczenia przeprowadzono dla siatki o wymiarach  $N \times M$ , z krokiem  $\Delta\rho$  i  $\Delta z$ . Iteracje wykonywano aż do momentu, gdy maksymalna zmiana potencjału w siatce między kolejnymi krokami była mniejsza od przyjętego progu dokładności  $\varepsilon$ .

## 3 Wyniki



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

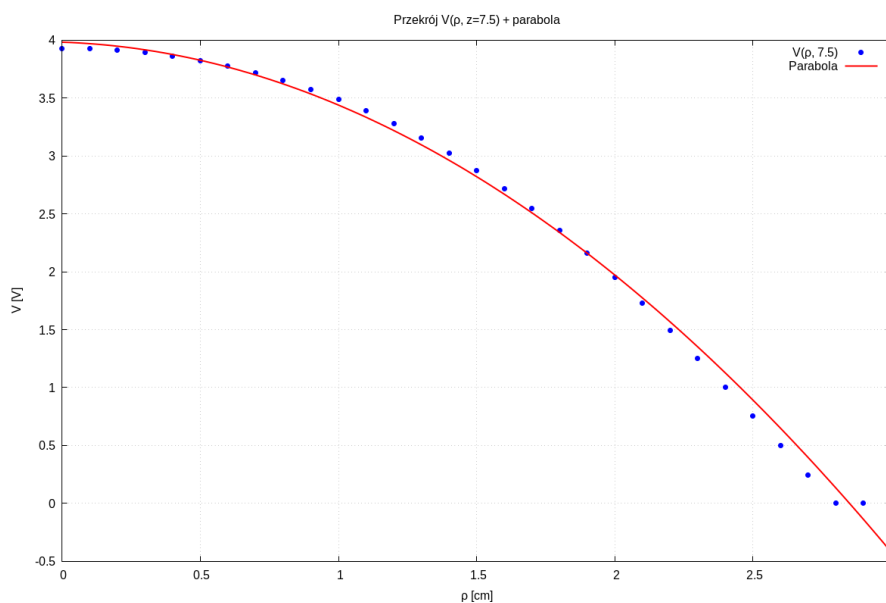


Rysunek 3: Mapa 3D potencjału  $V(\rho, z)$  uzyskana metodą relaksacyjną.

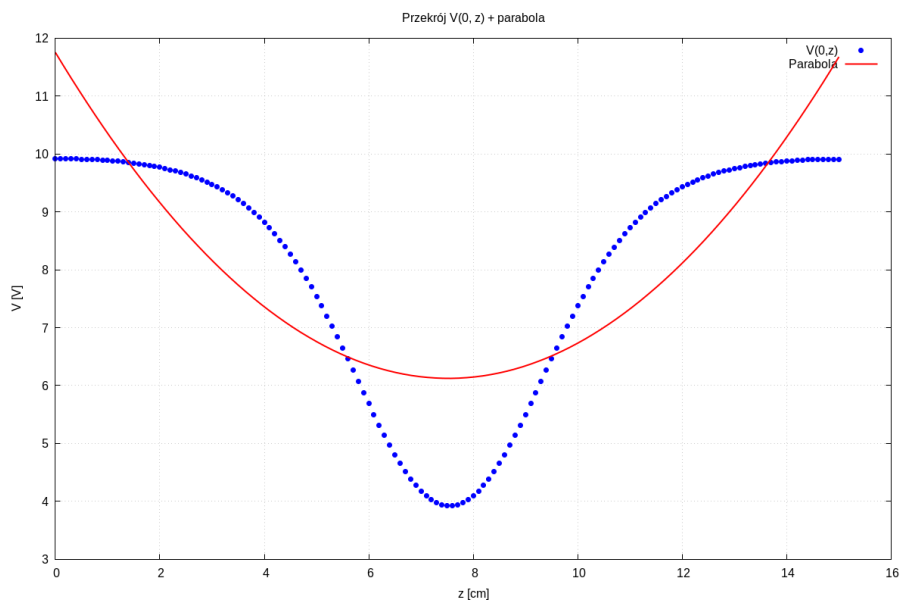
Z wykresu widać, że wartości potencjału rosną w kierunku środka układu, co jest zgodne z oczekiwanym rozkładem w pułapce elektrostatycznej. Linie stałego potencjału układają się koncentrycznie wokół obszaru wyższego napięcia, co odzwierciedla geometrię i warunki brzegowe zadane w symulacji.

## Przekroje potencjału

W celu lepszego zrozumienia rozkładu potencjału elektrostatycznego w pułapce jonowej wykonano wykresy przekrojów potencjału  $V(\rho, z)$ :



Rysunek 4: Przekrój wzdłuż osi  $\rho$  (dla stałego  $z$ ) –  $z = z_{max}/2$ .



Rysunek 5: Przekrój wzdłuż osi  $z$  (dla stałego  $\rho$ ) –  $\rho = 0$ .

Wykres tego przekroju wykazuje ciągłość i płynne zmiany potencjału wzdłuż osi  $z$ , co potwierdza poprawność implementacji warunku Neumanna (zerowa pochodna) dla  $\rho = 0$ . Zauważyć można, że potencjał  $V_0$  występuje przy końcach układu ( $z < z_1$  oraz  $z > z_2$ ). Dopasowana parabola odbiega od rzeczywistego profilu potencjału, zwłaszcza w pobliżu elektrod. Może to wynikać z faktu, że rzeczywisty rozkład potencjału, wynikający z układu warunków brzegowych, nie jest idealnie symetryczny i nie przypomina dokładnie funkcji kwadratowej – gradient potencjału zmienia się nieliniowo, szczególnie w rejonach przejściowych pomiędzy różnymi wartościami przyłożonego napięcia.

Kształt wykresu przypomina typowy rozkład potencjału pułapki jonowej Pauliego – widoczna jest dolina potencjałowa w środku oraz wyższe wartości na końcach, co sprzyja uwięzieniu cząstek w centrum układu.

### Zgodność z oczekiwaniami

Uzyskane rozkłady potencjału są zgodne z przewidywaniami teoretycznymi:

- Została zachowana symetria cylindryczna układu,
- Widoczna jest separacja obszarów o różnych wartościach potencjału zgodna z układem elektrod,
- Potencjał w centralnym regionie jest niższy, co odpowiada oczekiwanemu minimum pułapki.

Wyniki potwierdzają poprawne działanie algorytmu relaksacyjnego oraz właściwe nałożenie warunków brzegowych. Uzyskane wykresy mogą być traktowane jako wizualna weryfikacja poprawności obliczeń numerycznych.

## 4 Wnioski

W ramach ćwiczenia z powodzeniem zaimplementowano metodę relaksacyjną do rozwiązywania równania Laplace'a w układzie współrzędnych cylindrycznych. Otrzymany rozkład potencjału

jest zgodny z intuicją fizyczną oraz przyjętymi warunkami brzegowymi. Kluczowe okazało się poprawne sformatowanie danych wyjściowych w celu wizualizacji oraz uwzględnienie metryki układu cylindrycznego w obliczeniach. Metoda relaksacyjna, mimo swojej prostoty, okazała się skutecznym narzędziem do rozwiązywania zagadnień elektrostatycznych w nieregularnych geometriach.

Dla lepszej wizualizacji rozkładu potencjału wykonano dwa przekroje:

- Przekrój wzdłuż osi układu  $\rho = 0$ : wykres  $V(0, z)$  przedstawia zmianę potencjału wzdłuż osi symetrii, od dolnej do górnej granicy obszaru symulacji.
- Przekrój promieniowy dla ustalonej wysokości  $z = z_{max}/2$  wykres  $V(\rho, z_p)$  obrazuje rozkład potencjału w kierunku radialnym w płaszczyźnie poziomej, przechodzącej przez środek geometryczny układu.

W obu przypadkach dokonano próby dopasowania funkcji kwadratowej (paraboli) do danych. Dla przekroju wzdłuż osi ( $\rho = 0$ ), potencjał wykazuje ogólną wypukłość, lecz dopasowanie parabolą nie jest idealne, szczególnie w pobliżu elektrod. Dla przekroju radialnego ( $\rho$  przy  $z = z_p$ ), rozkład również odbiega od kształtu parabolicznego, co wskazuje na bardziej złożony charakter pola elektrostatycznego, wynikający z warunków brzegowych i geometrii układu.

Dopasowanie parabolą można więc uznać za jakościowe – dobrze oddaje trend rozkładu, ale nie zapewnia ściślejszej zgodności ilościowej.

## Literatura

- [1] *Instrukcja do ćwiczenia UPEL*