

Динамика частиц в ловушке Пеннинга

Введение.

Локализация и хранение сверхмалых количеств атомов и молекул представляют интерес, как для эксперимента, так и для практического их использования. Для этого могут применяться электростатические и магнитостатические поля специальных конфигураций. Хотя наибольшего распространения тут получили ловушки Паули, радиочастотные, а также ловушки Пеннинга. Изучению последних и посвящена данная курсовая работа. Они часто используются при точных измерениях свойств ионов и стабильных частиц, при хранении частиц и анти-античастиц. Подобная ловушка, также, использовалась при реализации квантового компьютера. В работе ставится целью изучить динамику ионов в такой ловушке для многих частиц.

Описание.

В ловушке Пеннинга для удержания частиц в радиальном направлении используется сильное однородное вертикальное магнитное поле, а для удержания частиц в аксиальном направлении квадрупольное электростатическое поле.

В магнитном поле ионы движутся по замкнутым орбитам. В ловушке Пеннинга (из построения) центр орбиты лежит на оси z . Из условия равенства между центростремительной силой Лоренца и противодействующей ей комбинацией центробежной силы и силы кулоновского притяжения

$$\frac{eBv}{c} = \frac{Mv^2}{r} + \frac{M\omega_z^2 r}{2}. \quad (1)$$

В аксиальном направлении потенциал имеет вид параболической ямы, в которой частица массой M совершает гармонические колебания

$$z'' + \omega_z^2 z = 0, \quad (2)$$

где

$$\omega_z^2 = \frac{4eA}{M}. \quad (3)$$

Тогда, уравнения движения можно записать следующим образом

$$\begin{cases} mx'' = qB_0 V_y - \frac{2xqU_0}{r_0^2 + 2z_0^2} \\ my'' = -qb_0 V_x - \frac{2yqU_0}{r_0^2 + 2z_0^2} \\ mz'' = \frac{4zqU_0}{r_0^2 + 2z_0^2} \end{cases} \quad (4)$$

Её решение представляется в виде

$$\begin{cases} r = x + iy \\ r = r_c \exp(-i\omega'_c t) + r_m \exp(-i\omega_m t) \\ z = z_0 \cos \omega_z t \end{cases} \quad (5)$$

с модифицированной циклотронной ω'_c и магнетронной ω_m частотами.

$$\omega'_c = \frac{qB_0}{m} - \frac{-2U_0}{r_0^2 + 2z_0^2}, \quad (6)$$

$$\omega_m = \frac{-2U_0}{r_0^2 + 2z_0^2}. \quad (7)$$

Основное преимущество ловушки Пеннинга заключается в том, что в ней нет переменных полей и сопутствующей им перекачки энергии частицам, движущимся в потенциальной яме. К недостаткам ловушки Пеннинга относятся сложный характер движения частиц, неустойчивый по одной из степеней свободы, и неизбежное искажение спектра, обусловленное эффектом Зеемана.

Уравнения (5) описывают взаимодействие ионов с электромагнитным полем. При анализе движения ионов в ловушке необходимо учитывать также силы взаимодействия между ионами, что делает задачу аналитически нерешаемой.

Описание алгоритма.

Работу программы можно разбить на следующие пункты:

1. Инициализация координат и скоростей частиц.
2. Ход функции вычисления точек траектории (`motion()`).
 - (a) Обмен координатами между частицами.
 - (b) Вычисление приращений скоростей, учитывая кулоновское взаимодействие между частицами и взаимодействие с полем ловушки.
 - (c) Изменение координат, скоростей частицы. Сдвиг по времени. Переход к (a), если не найдено достаточно точек.
3. Вывод траекторий.

В работе используется распараллеливание частиц по процессам. Для этого каждый процесс имеет координаты всех частиц. Для обмена координатами используется функция `MPI_Bcast()`.

Дифференциальные уравнения (4) можно представить в виде

$$\begin{cases} x'' = Ax + By' \\ y'' = By + Cx' \\ z'' = Dz \end{cases} \quad (8)$$

Произведя замены, получим систему

$$\begin{cases} x' = g \\ y' = h \\ z' = p \\ g' = Ax + Bh \\ h' = By + Cg \\ p' = Dz \end{cases} \quad (9)$$

Для интегрирования первой половины уравнений, очевидно, достаточно метода Эйлера. Для расчета второй половины пользуемся методом Рунге-Кутты, что позволит снизить процессорное время (по сравнению с методом Эйлера).

Результаты работы программы.
Пример динамики одного иона в ловушке показан на рисунке 1.

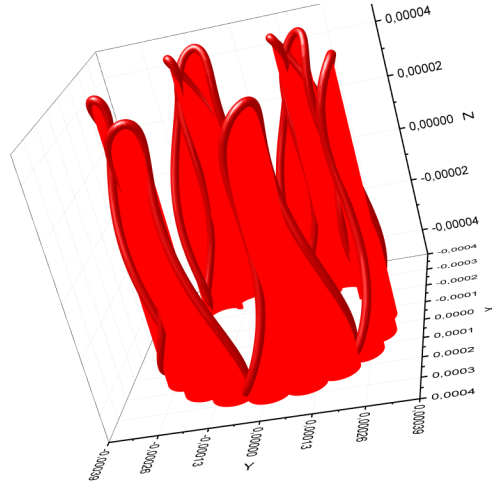


Рис. 1

Видно, что вдоль оси Z частица совершает гармонические колебания (рис. 2)

На рисунке 3 представлена проекция, на плоскость XY.

Движение в плоскости XY представляется суперпозицией двух круговых движений (в соответствии с (5)).

Моделирование производилось с параметрами установки: напряжение на электродах $U_0 = -5B$, напряженность магнитного поля $B_0 = 0,25\text{Тл}$, линейные размеры ловушки $r_0 = 0.002\text{м}$ и $z_0 = 0.002\text{м}$. В результате, для

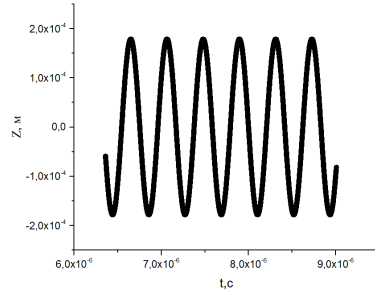


Рис. 2

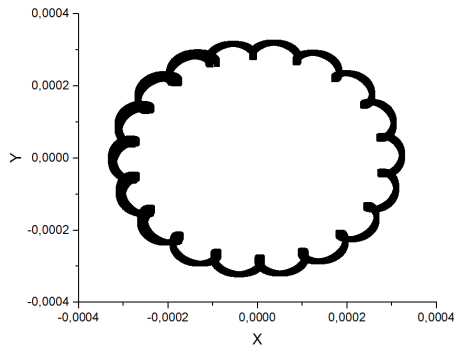


Рис. 3

радиальных колебаний: циклотронная $\omega_c = 0.79$ и магнетронная $\omega_m = 0.08$. Соответствующий фурье анализ представлен на рисунках 5, 6.

Моделирование динамики многих частиц.

Для двух частиц траектории представлены на рис. 4.

Различные частицы имеют разные значения амплитуд колебаний, однако частоты колебаний одинаковы для всех.

Для системы многих частиц наблюдается расхождение с теоретическими (без учета взаимодействия частиц) значениями частот. Однако, это справедливо лишь в том случае, когда кулоновское взаимодействие вносит существенный вклад в движение частиц. На рисунках 5,6 приведены графики зависимости амплитуд гармоник, составляющих движение частицы от частоты (полученные с помощью быстрого преобразования фурье) в случае моделирования динамики одной частицы. Они ни чем не отличаются от схожих результатов для частицы при моделировании системы большего числа (при тех же параметрах ловушки).

В данном случае моделировалась ловушка с достаточно большими ли-

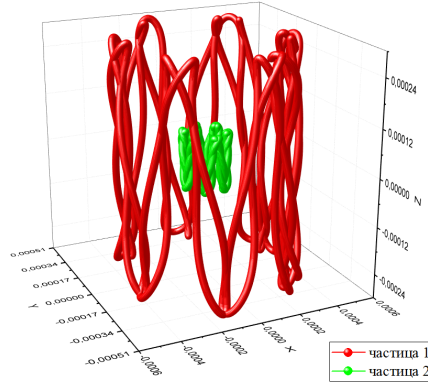


Рис. 4

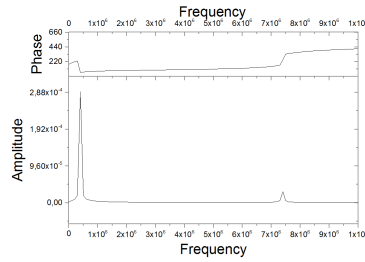


Рис. 5: Плоскость XY

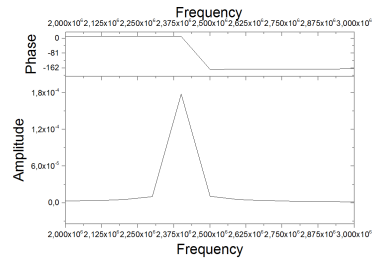


Рис. 6: Вдоль Z

нейными размерами, чтобы $|\frac{F_k}{F_p}| \gg 1$, где F_k - сила кулоновского взаимодействия, а F_p - сила взаимодействия частицы с полем ловушки. Это значит, что кулоновская сила не вносила существенного вклада в динамику частиц.

Далее приведены результаты для $r_0 = 10^{-5}$ м, $B = 100$ (остальные параметры остались прежними) (рис. 6-7).

В данном случае, наблюдается сдвиг частот вращения частиц по сравнению с вращением без учета взаимодействия частиц. Как отмечалось в [1], этот результат объясняется тем, что за счет кулоновского взаимодействия ионы увеличивают свою кинетическую энергию, что приводит к сдвигу частот вращения частиц.

На рисунке 9 представлен график наложения фурье анализа для 1 и для 15 частиц.

Оценка эффективности работы программы.

Так как при учёте взаимодействия между частицами каждая частица должна знать координаты другой (а также скорости, если бы учитывалось ещё и магнитное поле). Таким образом, за одну итерацию, требуется всего

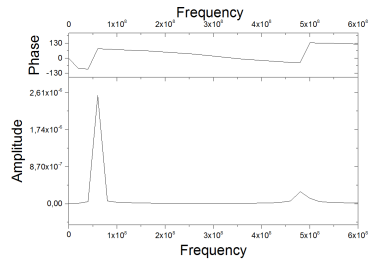


Рис. 7: Для 1 частицы

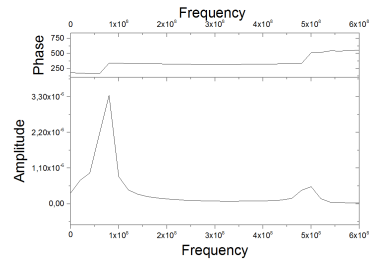


Рис. 8: Для системы из 15 частиц

n^2 операций обмена между процессами. Учет воздействия на частицу со стороны других $n - 1$ будет сводиться к подсчету суммы сил, оказываемых ими - то есть эта операция будет линейна по числу частиц. Считая все остальные операции константами по числу частиц, получаем асимптотику программы $O(n^2)$.

На рисунке 10 приведен график зависимости времени выполнения, от числа частиц (числа процессов). Квадратичная зависимость нарушается для числа процессов больше восьми в виду ограниченности количества процессоров при моделировании. Понятно, что из-за такой постановки задачи (одна частица на один процесс) ускорение работы при подключении новых процессоров не получить.

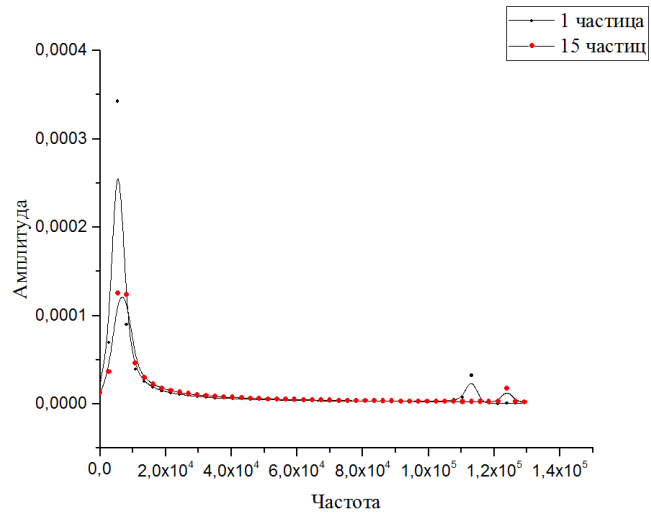


Рис. 9

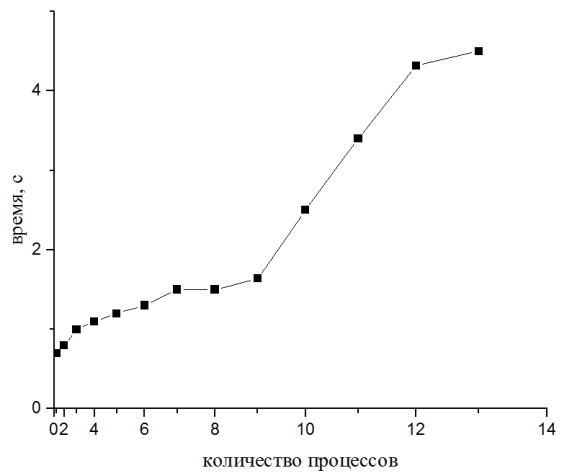


Рис. 10: Зависимость времени работы от числа частиц.