

**Fakultät für Physik and Astronomie
Universität Heidelberg**

Bachelorarbeit in Physik
eingereicht von

Marc Schuh

geboren in Bergisch Gladbach (Deutschland)

2011

Simulation von elektrostatischen Eigenschaften der THe-Trap Penningfalle

Diese Bachelorarbeit wurde von Marc Schuh angefertigt am
Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg
unter der Betreuung von
Prof. Dr. Klaus Blaum und Dipl.-Phys. Martin Höcker

Zusammenfassung

Die elektrostatischen Eigenschaften der fünfpoligen hyperbolischen Penningfalle THE-Trap wurden mit Hilfe von "Vector Field Opera 13.0 - Tosca" numerisch untersucht. In diesen Untersuchungen wurden die Koeffizienten C_2 und C_4 des Ringpotentials bzw. D_2 und D_4 des Guardpotentials bestimmt. Daraus ergaben sich die Guard-Konstante $c_{guard} = 552.9(1.6)_{stat.}(8.2)_{sys.}$ und der effektive Elektrodenabstand $\kappa = 0.76093(45)_{stat.}(11)_{sys.}$. Des Weiteren wurde die Verschiebung des Fallenzentrums durch asymmetrisch geladene Guards mit $0.1469478(12)_{stat.}(21)_{sys.} \mu\text{m}$ bzw. durch asymmetrische geladene Endkappen mit $8.327882(10)_{stat.}(25)_{sys.} \mu\text{m}$ pro Volt Asymmetrie zwischen den beiden Elektroden berechnet. Die Verschiebung des Fallenzentrums durch typische Oberflächenladungen konnte auf eine Größenordnung von $10^{-3} \mu\text{m}$ abgeschätzt werden. Die numerischen und systematischen Fehler wurden mit Hilfe einer Auflösungs- und Bereichsstudie abgeschätzt.

Abstract

The electrostatic properties of a five-pole hyperbolic Penning trap called THE-Trap were investigated numerically using "Vector Field 13.0 Opera - Tosca". In these studies the coefficients C_2, C_4 of the ring potential and D_2, D_4 of the guard potential were determined. Based on these coefficients, $c_{guard} = 552.9(1.6)_{stat.}(8.2)_{sys.}$ and the effective electrode spacing $\kappa = 0.76093(45)_{stat.}(11)_{sys.}$ were calculated. Furthermore, the shift of the center of the trap caused by asymmetrically charged guards was computed to be $0.1469478(12)_{stat.}(21)_{sys.} \mu\text{m}$ and caused by asymmetrically charged endcaps was computed to be $8.327882(10)_{stat.}(25)_{sys.} \mu\text{m}$ per volt asymmetry between the two electrodes. The shift of the center of the trap by a typical patch potential was found to be on the order of $10^{-3} \mu\text{m}$. The numerical and statistical errors were estimated by means of a resolution and an area study.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Penningfalle	2
2.1	Ideale Penningfalle	2
2.2	Ionenbewegung in der Penningfalle	3
2.3	Messprinzip	4
2.4	THe-Trap Penningfalle	5
2.5	Guard-Konstante	6
2.6	Verschiebung des Fallenzentrums	6
2.7	Treiben von Ionen	7
2.8	Effektiver Elektrodenabstand	7
3	Penningfalle in Tosca	8
3.1	Finite-Elemente Methode	8
3.2	Verwendete Hard- und Software	8
3.3	Fallenmodel	9
3.4	Auflösung	9
4	Simulationen	11
4.1	Auflösungsstudie	11
4.2	Bereichsstudie	14
4.3	Einfluss der Zwischenebenen	15
4.4	Symmetrische Potentiale	18
4.5	Asymmetrische Potentiale	19
4.6	Oberflächenladung	19
4.7	Asymmetrische Guards	20
5	Analyse	21
5.1	Optimale Guardspannung	21
5.2	Guard-Konstante	21
5.3	Effektiver Elektrodenabstand	22
5.4	Verschiebung des Fallenzentrums	22
6	Ausblick	24
	Literatur	27

A	Ergänzende Graphen und Bilder	28
A.1	Simulierte Penningfalle	28
A.2	Auflösungsstudie	29
A.3	Bereichsstudie	33
A.4	C- und D-Koeffizienten	35
B	Tabellarische Übersicht über die simulierten Parameter	36
B.1	C- und D-Koeffizienten	36
B.2	Optimale Guardspannung	36
B.3	Guard-Konstante	37
B.4	Effektiver Elektrodenabstand	37
B.5	Verschiebung des Fallenzentrums	37

1 Einführung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit numerischen Simulationen der elektrostatischen Eigenschaften der Penningfalle THe-Trap (durchgeführt mit Opera Vectorfields 13.0 - Tosca). Das Experiment THe-Trap befindet sich am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg und wird von Prof. Dr. Klaus Blaum seit 2008 betreut. Entworfen und gebaut wurde THe-Trap an der University of Washington, Seattle, in der Gruppe von Prof. Dr. Robert S. Van Dyck, Jr. [1, 2].

Vorangegangene, mit SimIon durchgeführte, Simulationen zu THe-Trap von C. Diehl [3] lieferten einige Ergebnisse und führten zu weiteren Fragen. Diese Fragen werden in dieser Arbeit aufgegriffen und untersucht:

- Wie groß ist die optimale Guardspannung?
- Wie groß ist die theoretische Guardkonstante?
- Welchen Einfluss hat die Größe der Löcher in den Endkappen auf das Potential?
- Wie sehr verschiebt sich das Fallenzentrum bei asymmetrischen Spannungen an den Guards und an den Endkappen?
- Wie groß ist der effektive Elektrodenabstand der Guards und der Endkappen?
- Wie groß ist das elektrische Feld im Fallenzentrum, bei Anregung durch eine einzelne Guard-Elektrode?
- Welchen Einfluss haben Oberflächenladungen auf das elektrostatische Feld im Fallenzentrum?
- Wie groß ist der Einfluss der Skimmer?
- Ist es möglich die Löcher in den Endkappen mit den Skimmern elektrostatisch zu verschließen?

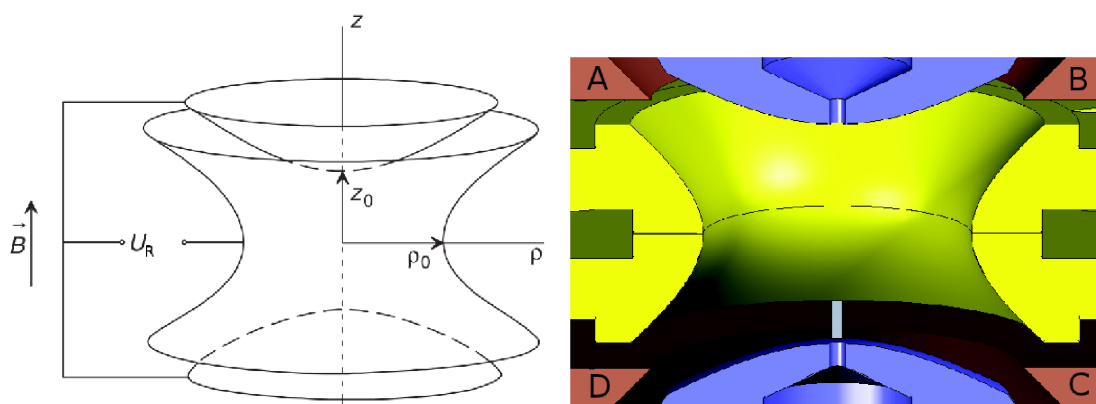
Um diese Fragen belastbar beantworten zu können, müssen zuerst die Grenzen von Tosca ausgelotet werden, um so den numerischen Fehler für die einzelnen zu simulierenden Parameter abzuschätzen.

Im Laufe dieser Arbeit wird zunächst ein allgemeiner Überblick über die Theorie der THe-Trap Penningfallen gegeben. Daraufhin werden die mathematischen Grundlagen von Tosca erklärt. Dann folgt die Studie zur Abschätzung der numerischen Genauigkeit und der Vergleich der numerisch bestimmten Parameter mit den experimentell bekannten Werten. Zum Abschluss erfolgt eine kritische Bewertung der erreichten Ergebnisse und ein Ausblick auf mögliche Verbesserungen.

2 Penningfalle

Eine Penningfalle ist ein experimenteller Aufbau, welcher unter anderem als Massenspektrometer für Ionen verwendet werden kann [4]. Dabei beruht das Prinzip der Speicherung der Ionen auf der Kombination von einem elektrischen Quadrupolfeld mit einem homogenen magnetischen Feld. In der Verwendung als Massenspektrometer erlauben Penningfallen die bislang genauesten Massenmessungen überhaupt [5, 6]. THE-Trap steht für ein Tritium-Helium-Doppelfallen-Experiment. In diesen Fallen werden also hauptsächlich Tritium und Helium gespeichert, um deren Massenverhältnis auf 10^{-11} genau zu bestimmen [3, 7].

2.1 Ideale Penningfalle



(a) Abbildung des Aufbaus einer ideal hyperbolisch geformten Penningfalle [6]. Oben und unten sind die Endkappen und in der Mitte die Ringelektrode zu erkennen. Das elektrische Feld wird durch das Anlegen einer Potentialdifferenz zwischen oberer bzw. unterer Endkappe und dem Ring erzeugt. Zeitgleich durchdringt ein homogenes Magnetfeld in z -Richtung die Penningfalle.

(b) Schnittmodell der Penningfalle von THE-Trap [8]. In blau sind oben und unten die Endkappen, in gelb der Ring und in braun die Korrektorelektroden zu erkennen. Die vier Korrektorelektroden sind einzeln ansteuerbar und mit A bis D benannt. Ebenfalls zu sehen sind die Löcher in den Endkappen, durch welche die Ionen in die Falle gelangen.

Abbildung 2.1: Abbildung einer idealen und einer realen Penningfalle.

Abbildung 2.1a zeigt den Aufbau einer idealen Penningfalle. Die Oberflächen der Elektroden entsprechen einer hyperbolischen Funktion, so dass ein elektrisches Quadrupolpotential erzeugt wird. Das elektrostatische Potential ist gegeben durch [9]:

$$\Phi(z, \rho) = \frac{U_R}{2d^2} \left(z^2 - \frac{1}{2}\rho^2 \right) \quad (2.1)$$

$$\text{mit } d^2 = \frac{1}{2} \left(z_0^2 + \frac{\rho_0^2}{2} \right) . \quad (2.2)$$

Die Bedeutung der entsprechenden Variablen ist in Abbildung 2.1a zu sehen, dabei ist $z_0 = 2.29 \text{ mm}$ und $\rho_0 = 2.27 \text{ mm}$ [1].

Zwar würde ein rein elektrisches Feld die Bewegung in z -Richtung stabil einschränken, jedoch wäre die Beschränkung in der xy -Ebene instabil. Dies wird durch ein homogenes Magnetfeld,

welches die Penningfalle in z -Richtung durchdringt, verhindert.

Die vom elektrischen Feld auf das Ion ausgeübte Kraft verursacht eine Oszillation in z -Richtung und die Kombination von elektrischem und magnetischem Feld bewirkt zwei überlagerte Kreisbewegungen in der xy -Ebene.

2.2 Ionenbewegung in der Penningfalle

Wenn ein Ion mit der Geschwindigkeit \vec{v} durch ein Magnetfeld \vec{B} fliegt, so erfährt es folgende Kraft [10]:

$$\vec{F}_L = q\vec{v} \times \vec{B} \quad . \quad (2.3)$$

Diese Lorentz-Kraft \vec{F}_L zwingt das Ion in einem homogenen Magnetfeld auf eine Kreisbahn mit der Kreisfrequenz

$$\omega_c = \frac{q}{m} B_z \quad , \quad (2.4)$$

wobei q die Ladung und m die Masse des Ions ist. Diese Frequenz gilt jedoch nur für ein reines Magnetfeld. In einer Penningfalle addiert sich zu der Lorentz-Kraft noch die Coulomb-Wechselwirkung mit dem elektrischen Feld.

Die Bewegungsgleichungen eines Ions in Zylinderkoordinaten sehen daher wie folgt aus [10]:

$$m\ddot{z} = qE_z \quad (2.5)$$

$$m\ddot{\vec{r}} = q(\vec{E}_r + \underbrace{\dot{\vec{r}} \times \vec{B}}_{F_L/q}) \quad , \quad (2.6)$$

wobei das elektrische Feld und das magnetische Feld beschrieben werden durch:

$$E_z = -\frac{U_R}{d^2}z; \quad \vec{E}_r = \left(\frac{U_{dc}}{2d^2}\right)\vec{r}; \quad \vec{B} = B_0 \cdot \vec{e}_z \quad . \quad (2.7)$$

Die Lösungen dieser Differenzialgleichungen sind drei voneinander unabhängige Eigenbewegungen mit folgenden Eigenfrequenzen [9]:

$$\omega_z = \frac{qU_R}{md^2} = 2\pi\nu_z \quad (2.8)$$

$$\omega_+ = \frac{\omega_c}{2} + \sqrt{\frac{\omega_c^2}{4} - \frac{\omega_z^2}{2}} = 2\pi\nu_+ \quad (2.9)$$

$$\omega_- = \frac{\omega_c}{2} - \sqrt{\frac{\omega_c^2}{4} - \frac{\omega_z^2}{2}} = 2\pi\nu_- \quad . \quad (2.10)$$

Dabei beschreibt ω_z die Oszillation entlang der z -Achse, ω_- die Magnetronfrequenz und ω_+ die reduzierte Zyklotronfrequenz. Die drei Eigenbewegungen sind jedoch nur für eine ideale Falle voneinander unabhängig. In einer realen Falle koppeln sie über Feldfehler, relativistische

Massenzunahme und andere Effekte aneinander. Somit ist es möglich, über die Variation der Energie in einer Mode die anderen Frequenzen zu beeinflussen und Rückschlüsse über diese Frequenzen zu ziehen. Sind die drei Eigenfrequenzen (siehe Gleichung (2.8) - (2.10)) bekannt, so lässt sich die Zyklotronfrequenz ω_c über das Invarianztheorem berechnen [11, 12]:

$$\omega_c^2 = \omega_+^2 + \omega_-^2 + \omega_z^2 \quad . \quad (2.11)$$

Die Gesamtbewegung des Ions ergibt sich aus der Superposition der drei unabhängigen Eigenbewegungen. Die Massenmessung erfolgt über die Messung der einzelnen Eigenfrequenzen. Sind diese bekannt, so ließe sich mit Hilfe von (2.4) und (2.11) die Masse bestimmen. Da jedoch das Magnetfeld B nicht hinreichend genau gemessen werden kann, werden nur Massenverhältnisse bestimmt:

$$\frac{m_1}{m_2} = \frac{q_1 \cdot \sqrt{\omega_{+2}^2 + \omega_{-2}^2 + \omega_{z2}^2}}{q_2 \cdot \sqrt{\omega_{+1}^2 + \omega_{-1}^2 + \omega_{z1}^2}} \quad . \quad (2.12)$$

Die Genauigkeit der Messung des Massenverhältnisses wird durch die zeitliche Stabilität des Magnetfeldes zwischen zwei Messungen limitiert [2]. Aus diesem Grund befindet sich das Experiment in einem auf 0.2 K stabilisierten Raum, wo es über Schwingungsdämpfer vom Fundament des Gebäudes entkoppelt ist. Des Weiteren wird der Füllstand des flüssigen Heliums auf 0.1 mm und der Druck auf 0.2 Pa konstant gehalten. Mit diesen Methoden können die relativen Schwankungen des magnetischen Feldes auf $17 \cdot 10^{-12} / \text{h}$ reduziert werden [13, 14].

2.3 Messprinzip

Die einzige direkt messbare Frequenz im THE-Trap Experiment ist ν_z . Sie wird über die in den Endkappen induzierte Spiegelladung bestimmt. Die Kopplung von ν_+ an ν_z wird dann genutzt um ν_+ zu bestimmen. Dafür werden von außen Radiofrequenzen, welche im Bereich der Frequenz von ν_+ liegen, auf das Ion eingestrahlt. Wird ν_+ getroffen, so ändert sich die Energie des Ions. Durch die Kopplung von ν_+ an ν_z ändert sich auch ν_z . In einer Rückkopplung wird im Experiment versucht, ν_z auch beim Durchfahren der Radiofrequenzen für die Anregung von ν_+ konstant zu halten. Im Resonanzfall für ν_+ muss dann für ein konstantes ν_z mehr Spannung in der Rückkopplung angelegt werden. Somit kann über die Spannung in der Rückkopplung ν_+ indirekt gemessen werden [15].

Auf die gleiche Weise wird ν_- , allerdings nur einmal am Anfang des Experiments, gemessen. Diese Frequenz ist eine Größenordnung kleiner als ν_z und zwei Größenordnungen kleiner als ν_+ , so dass kleine Schwankungen der Frequenz für die Massenbestimmung nicht relevant sind. Die Messungen werden bei $U_R \approx 89.76 \text{ V}$ und $B \approx 5.258 \text{ T}$ [14] durchgeführt.

2.4 THe-Trap Penningfalle

In Abbildung 2.1b ist eine reale Penningfalle dargestellt. Diese besteht, wie die ideale Penningfalle, aus zwei Endkappen (blau) und einer Ringelektrode (gelb). Zusätzlich hat diese Penningfalle vier Guards (Korrektorelektroden, braun). Diese Guards sind notwendig, da die Penningfalle sich von der idealen Penningfalle durch Abweichungen im elektrischen Quadrupolfeld unterscheidet. Diese Abweichungen werden hauptsächlich durch Oberflächenladungen und durch Abweichungen der Elektroden von der hyperbolischen Form verursacht [12]. Die Abweichungen von der hyperbolischen Form sind u.a. Löcher in den Endkappen, welche den externen Einschuss von Ionen in die Falle ermöglichen, allgemeine Fertigungstoleranzen der hyperbolischen Oberflächen und die begrenzte Größe der Elektroden. So erstrecken sich die hyperbolischen Oberflächen der Elektroden nicht beliebig weit, wie es im mathematischen Sinne der Fall wäre, sondern enden in einer Kante, welche dann die Hauptabweichung darstellt.

Das elektrostatische Potential der Endkappen in THe-Trap entlang der z -Achse kann in einer Taylor-Näherung um Null entwickelt werden [10],

$$\Phi_R(z) = U_R \cdot \sum_{i=0}^{\infty} C_i \cdot z^i \quad , \quad (2.13)$$

wobei U_R die Spannung am Ring beschreibt.

Aufgrund der Symmetrie des Potentials gegenüber einer Spiegelung an der xy -Ebene sind die Koeffizienten C_i mit ungeradem i zu vernachlässigen [12]. Die Symmetrie wird durch Aufbau und Einstellungen des Experiments gewährleistet. Für ein möglichst ideales Potential sollte nur noch C_2 ungleich Null sein. Jedoch treten in der Realität C_4 -Terme und höhere Ordnungen auf.

Das Potential der Guards lässt sich ebenfalls durch eine Taylor-Näherung um $z = 0$ beschreiben:

$$\Phi_G(z) = U_G \cdot \sum_{i=0}^{\infty} D_i \cdot z^i \quad , \quad (2.14)$$

wobei U_G die Spannung an den Guards beschreibt.

Das eigentliche elektrostatische Feld der Penningfalle ergibt sich durch Superposition von Φ_R und Φ_G . Gewünschte Spannungsverhältnisse können durch Skalierung der Potentiale mit den entsprechenden Vorfaktoren U_R und U_G erreicht werden. Für ein möglichst homogenes Feld muss C_4 minimiert werden. Dies erfolgt durch eine geeignete Spannung an den Guards, so dass sich D_4 und C_4 gegenseitig aufheben. Dies wird die optimale Guardspannung genannt.

Die oben genannte Definition der C 's und D 's ist nicht identisch mit der Definition in "Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap" [9]. Für die Umrechnung gilt:

$$\tilde{C}_i = 2 \cdot C_i \cdot d^i \quad (2.15)$$

$$\tilde{D}_i = 2 \cdot D_i \cdot d^i \quad , \quad (2.16)$$

wobei d wie in Gleichung (2.2) definiert ist.

2.5 Guard-Konstante

Die Guard-Konstante c_{guard} beschreibt, um welches ΔU_G die Guards nachgestellt werden müssen, wenn sich die Spannung am Ring um ΔU_R verstellt, so dass die Bewegungsfrequenz ν_z des Ions in der Falle unverändert bleibt. Im Grenzfall einer kleinen Bewegungsamplitude ist die Frequenz nur durch den harmonischen Anteil des Feldes gegeben, so dass gilt:

$$U_R \cdot C_2 + U_G \cdot D_2 \stackrel{!}{=} (U_R + \Delta U_R) \cdot C_2 + (U_G + \Delta U_G) \cdot D_2 \quad (2.17)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta U_G}{\Delta U_R} = -\frac{C_2}{D_2} \equiv c_{guard} \quad . \quad (2.18)$$

2.6 Verschiebung des Fallenzentrums

Eine der Ausgangsfragen ist es, die Verschiebung des Fallenzentrums durch asymmetrische Spannungsverteilungen an den Guards oder den Endkappen zu beschreiben. In diesem Fall werden durch die Asymmetrie auch die ungeraden C_i^a - und D_i^a -Koeffizienten des Potentials (siehe Gleichung (2.13) und (2.14)) relevant. Dabei beschreiben C_1^a und D_1^a die Verschiebung ausreichend genau, da C_2^a , C_3^a und D_2^a , D_3^a bei kleinen Verschiebungen gegenüber C_1^a und D_1^a vernachlässigbar sind (siehe Tabelle 4.5).

Das ungestörte harmonische elektrostatische Potential in THE-Trap sieht wie folgt aus:

$$\Phi(z) = (U_R C_2 + U_G D_2) \cdot z^2 \quad . \quad (2.19)$$

Wird nun die Symmetrie entlang der z -Achse gebrochen, so ändert sich das Potential:

$$\tilde{\Phi}(z) = (U_R C_2 + U_G D_2) \cdot z^2 + U_S \delta \cdot z \quad . \quad (2.20)$$

U_S beschreibt die Spannungsasymmetrie und δ entspricht C_1^a oder D_1^a .

Das neue Fallenzentrum ergibt sich nun aus:

$$\tilde{\Phi}'(z_0) = 2(U_R C_2 + U_G D_2) \cdot z_0 + U_S \delta \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.21)$$

$$\Leftrightarrow z_0 = -\frac{U_S \delta}{2(U_R C_2 + U_G D_2)} \quad . \quad (2.22)$$

Wird die Falle hingegen so gestört, dass keine Rotationssymmetrie mehr besteht, so berechnet sich die Verschiebung des Fallenzentrums wie folgt. Als Grundannahme gilt, dass das störende Feld zu einer so kleinen Verschiebung führt, dass es im Fallenzentrum als konstant angesehen werden kann. Da der Einfluss der Guards auf die Bewegung des Ions im Fallenzentrum vernachlässigbar klein ist, ergibt sich aus Gleichung (2.1) der Feldvektor als

$$\vec{E} = \frac{U_R}{2d^2} \begin{pmatrix} x \\ y \\ -2z \end{pmatrix} . \quad (2.23)$$

Wird das elektrostatische Feld nun mit \vec{E} gestört, so muss für das neue Fallenzentrum bei einer räumlich konstanten Störung gelten:

$$\vec{E} + \vec{E} \stackrel{!}{=} 0 . \quad (2.24)$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ergibt das neue Fallenzentrum:

$$x_0 = \frac{2d^2 \tilde{E}_x}{U_R}; \quad y_0 = \frac{2d^2 \tilde{E}_y}{U_R}; \quad z_0 = -\frac{d^2 \tilde{E}_z}{U_R} . \quad (2.25)$$

2.7 Treiben von Ionen

Um die Bewegung des Ions beeinflussen zu können, müssen, wie in Kapitel 2.3 beschrieben, Radiofrequenzen [16] eingestrahlt werden. Hierfür werden die Guards genutzt, die jeweils oben und unten zweigeteilt und wie in Abbildung 2.1a benannt sind. Durch die Aufteilung der Guards ist es möglich, verschiedene Anregung durch Einkopplung von Dipol- und Quadrupolstrahlung zu erreichen. Im Rahmen dieser Arbeit wird das elektrische Feld im Zentrum für verschiedene Guard-Spannungen simuliert.

2.8 Effektiver Elektrodenabstand

Der effektive Elektrodenabstand beschreibt, welchen Elektrodenabstand \tilde{z}_0 ein Plattenkondensator haben müsste, um dasselbe elektrische Feld E_z zu erzeugen, wie es in der Penningfalle herrscht.

Für einen Plattenkondensator gilt:

$$E_z = \frac{U}{2 \cdot \tilde{z}_0} = C_1 \text{ bzw. } D_1 \quad (2.26)$$

$$\Leftrightarrow \tilde{z}_0 = \frac{U}{2 \cdot C_1} . \quad (2.27)$$

Das Verhältnis von z_0 , dem tatsächlichen Abstand der Endkappen in der Penningfalle, zu \tilde{z}_0 definiert den Fallenparameter κ :

$$\kappa = \frac{z_0}{\tilde{z}_0} . \quad (2.28)$$

3 Penningfalle in Tosca

"Vector Field Opera 13.0 - Tosca" ist ein Programm der Firma Combham. Es dient zur Simulation von elektrostatischen und magnetostatischen Feldern, Wechselspannungsströmen, Bewegung von induzierten Ladungen und noch weiteren elektromagnetischen Anwendungen [17]. Für die Simulation der Eigenschaft der THE-Trap Penningfalle wird nur der elektrostatische Teil des Programms genutzt. Die Felder werden numerisch durch die Finite-Elemente Methode berechnet. Details zur Benutzung von Vector Field Opera 13.0 - Tosca sind im Praktikumsbericht erläutert [18].

3.1 Finite-Elemente Methode

Die Finite-Elemente Methode ist ein numerisches Lösungsverfahren für partielle Differenzialgleichungen [19]. Ein numerisches Lösungsverfahren wird dann notwendig, wenn für die zu berechnende Aufgabe kein exaktes Lösungsverfahren bekannt ist. Dies ist bei THE-Trap der Fall, da Abweichungen von der hyperbolischen Form, wie zum Beispiel die Löcher oder die endliche Ausdehnung der Elektroden, eine analytische Lösung erschweren [20].

Bei der Finite-Elemente-Methode wird ein Gitter über die zu berechnende Aufgabe gespannt, um so das Problem in kleinere Probleme zu zerlegen. Durch dieses Gitter wird aus einer Differentialgleichung viele Differenzengleichungen, die über Randbedingungen mit ihrer Nachbarzelle bzw. dem Ende des Gitters verknüpft sind. Diese Verknüpfung der Differenzengleichung entspricht einem Gleichungssystem, welches als dünnbesetzte Matrix aufgeschrieben werden kann. Dabei hat die Matrix die Dimension $n \times n$, wenn n die Anzahl der Gitterpunkte ist. Dieses Gleichungssystem muss gelöst werden. Dieser sehr rechenaufwendige Schritt wird nur noch näherungsweise durchgeführt, da bereits das Gitter eine Näherung des eigentlichen Problems darstellt. Die Lösung des gesamten Problems wird über die Vereinigung aller Einzellösungen erreicht.

3.2 Verwendete Hard- und Software

Die Simulation wurde mit folgender Desktop-Konfiguration durchgeführt:

Hardware:

- Intel Core i3 CPU 550 @ 3.20 GHz
- 3.49 GB Hauptspeicher
- ATI Radeon HD 3400 Series

Software:

- Windows XP Professional 32 bit
- Opera Vector Field 13.0 - Tosca

Simulationen mit einer besseren Auflösung als $20\ \mu\text{m}$ werden hingegen auf folgendem System durchgeführt:

Hardware:

- Intel Xeon CPU X5450 @ 3.00 GHz
- 31.5 GB Hauptspeicher

Software:

- Ubuntu 8.04 64 bit
- Opera Vector Field 13.0 - Tosca

3.3 Fallenmodell

Da Vector Field Opera 13.0 die Möglichkeit anbietet, das CAD-Format .sat zu importieren, kann eine bereits vorhandene CAD-Zeichnung der Falle (siehe Abbildung A.1) genutzt werden. Dieses Modell enthält jedoch noch Befestigungspunkte und andere Details der THE-Trap Penningfalle, welche für die Simulation nicht von Belang sind. Aus diesem Grund wird das Modell auf die für die Simulation wesentlichen Teile reduziert (siehe Abbildung 3.1). Der Vergleich von Abbildung 3.1 zum CAD-Modell (siehe Abbildung 2.1b) zeigt, dass das zu simulierende Modell dem CAD-Modell der verwendeten Penningfalle ähnlich ist. Auf diesem Modell werden alle folgenden Simulationen basieren. Eine Draufsicht des Modells ist im Anhang (siehe Abbildung A.2) zu finden.

3.4 Auflösung

Um möglichst genaue Simulationsdaten zu erhalten, muss die Größe einer Gitterzelle so klein wie möglich gewählt werden. Wird dies jedoch im gesamten Modell durchgeführt, so wird der benötigte Arbeitsspeicher und die Rechenzeit sehr groß. Aus diesem Grund wird in die Mitte der Falle ein Zylinder mit einem Radius von 4.5 mm und einer Ausdehnung in z-Richtung von $\pm 3.5\ \text{mm}$ eingefügt (siehe Abbildung 3.1). Dieser Innenzylinder bietet die Möglichkeit die Auflösung lokal zu erhöhen, ohne dass gleichzeitig die gesamte Umgebung in dieser hohen Auflösung gerechnet werden muss. In einer Simulationsstudie (siehe Kapitel 4.2) wird nachgewiesen, welche Ausmaße für den Zylinder ausreichen um alle Einflüsse der Geometrie der Falle zu sehen. Der Zylinder im Inneren kann ohne weitere Hilfsmittel bis auf $50\ \mu\text{m}$ genau aufgelöst werden. Wird versucht die Auflösung weiter zu erhöhen, so ergibt sich ein bereits

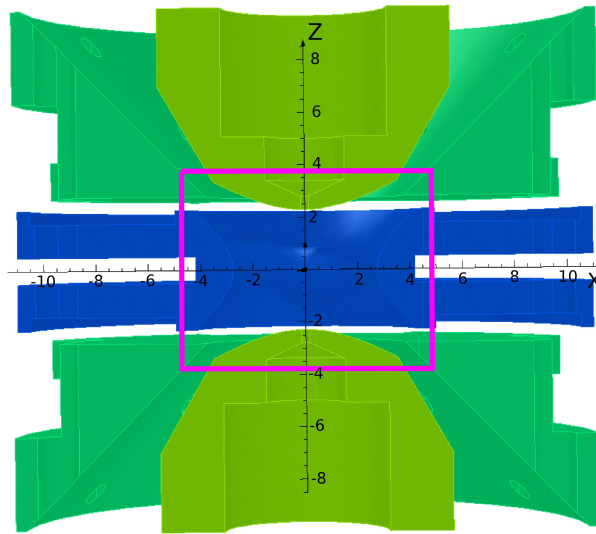


Abbildung 3.1: Vereinfachte Penningfalle: Die Penningfalle ist im Schnitt in der xz -Ebene zu sehen. Die Skala ist in mm angegeben. Der mit lila umrandete Bereich kann in der Simulation höher aufgelöst werden. Er ist so dimensioniert, dass die Löcher und die Kanten der Endkappen, die Kanten der Korrektorelektroden, die hyperbolische Form und ebenfalls die Kanten des Rings abgedeckt sind.

aus dem Praktikum bekanntes Problem [18]. Ab einer bestimmten Auflösung ist es dem Algorithmus von Tosca nicht mehr möglich, das Oberflächen- und Volumengitter anzulegen. Dieses Problem wird, wie auch im Praktikum, mit der Einführung von Zwischenebenen gelöst.

Die Dimensionen des Simulationsmodells der Penningfalle und die Anordnung der Zwischenebenen sind nun:

	z (mm)	r (mm)	Auflösung (μm)
Falle	± 9	11	
Zylinder	± 3.5	4.5	
Scheiben	$0 \pm n \cdot 0.5$	11	bis 20
Zylinder	± 10	$0.5 + m \cdot 0.5$	bis 20
Scheiben	$0 \pm n \cdot 0.25$	11	bis 10
Zylinder	± 10	$0.25 + m \cdot 0.25$	bis 10
Scheiben	$0 \pm n \cdot 0.10$	11	unter 10
Zylinder	± 10	$0.10 + m \cdot 0.10$	unter 10

Tabelle 3.1: In der Tabelle sind die Dimensionen der vereinfachten Falle, des Zylinders und die Dimensionen der verwendeten Zwischenebenen zu sehen. Dabei beschreibt " \pm " die Ausdehnung der Falle bzw. die Position der einzelnen Scheiben entlang der z -Achse. Durch die Verwendung von " \pm " ist die bauartbedingte Symmetrie der Falle gegenüber einer Spiegelung an der xy -Ebene gewährleistet. Die Schreibweise " $0.5 + m \cdot 0.5$ " für den Radius der Zylinder gibt die Wachstumsschritte der Radien an.

4 Simulationen

Im Vorfeld der Simulationen müssen, um die numerischen Fehler und die Einflüsse der verschiedenen Parameter zu charakterisieren, unterschiedliche Tests durchgeführt werden. Dafür wird zuerst die Auflösung im Innenzylinder variiert, um die Auswirkungen auf die Koeffizienten $C_1 - C_4$ und $D_1 - D_4$ zu beobachten. Auf dieser Studie basierend wird die Größe des Innenzylinder getestet, um so nachzuweisen, dass alle für den Versuch wichtigen Bestandteile der Fallengeometrie innerhalb des hochaufgelösten Bereichs liegen. Zusätzlich wird noch ein Einfluss der Zwischenebenen auf die Koeffizienten nachgewiesen.

Um die Koeffizienten aus den Simulationen zu gewinnen, wird das simulierte Potential durch ein Polynom zweiten bzw. vierten Grades (siehe Kapitel 4.1) angefitet. Neben der Wahl des Grades des Fitpolynoms ist auch der Fitbereich entscheidend, da sich verschiedene Einflüsse der Geometrie der Falle erst zum Rand der Falle hin bemerkbar machen.

Aus Zeitgründen ist es nicht möglich, eine ausführliche Studie über den optimalen Fitbereich durchzuführen. Daher werden zwei Fitbereiche mit ± 0.5 mm und ± 1.0 mm entlang der z-Achse um Null gewählt. Da im Fitbereich von ± 0.5 mm das C_4 schlechter zu erkennen ist (siehe Tabelle B.1), wird für alle Studien der Fitbereich von ± 1.0 mm gewählt. Dieser Fitbereich hat zusätzlich den Vorteil, dass die Statistik für den Fit verbessert ist, da doppelt so viele Punkte zur Verfügung stehen. Eine weitere Ausweitung des Fitbereichs würde zwar die Statistik vergrößern und somit die Unsicherheiten bei der Bestimmung von C_4 bzw. D_4 verringern, jedoch würden sich Randeffekte stärker im Fit des Potentials bemerkbar machen. Dies ist unerwünscht, da das Ion im Fallenzentrum diese Effekte auf Grund des Abstandes zum Rand nicht beeinflusst wird.

4.1 Auflösungsstudie

In der Auflösungsstudie wird die Auflösung des Innenzylinders von $5 \mu\text{m}$ bis $100 \mu\text{m}$ variiert. Die Zwischenebenen sind dabei, wie in Tabelle 3.1 beschrieben angeordnet. Für die Simulation der C-Koeffizienten wird der Ring auf ein Potential von $U = +1$ V und alle anderen Fallenteile auf ein Potential von 0 V gesetzt. Das entstehende Potential wird in einem Bereich ± 1.0 mm um das Fallenzentrum entlang der z-Achse mittels eines Polynoms vierten Grades gefittet:

$$\Phi_R(z) = U \cdot \left(C_0 + C_1 \cdot z + C_2 \cdot z^2 + C_3 \cdot z^3 + C_4 \cdot z^4 \right) \quad . \quad (4.1)$$

Die Variation der Auflösung zeigt (siehe Abbildung A.3 und A.4), dass C_2 von der Auflösung in der Falle abhängt. Dabei nähern sich die Werte von C_2 mit höherer Auflösung immer mehr dem Mittelwert an (siehe Abbildung A.3) und ab einer Auflösung von $30 \mu\text{m}$ streuen die C_2 's statistisch um den Mittelwert (siehe Abbildung A.4). Der Mittelwert wurde über die Werte zwischen $5 \mu\text{m}$ - und $30 \mu\text{m}$ -Auflösung gebildet. Dabei ergibt sich keine strikte Konvergenz der C_2 's gegen den Mittelwert, so dass sich hier der Charakter der numerischen Lösung zeigt. Die 1σ -Abweichung des Mittelwerts gibt eine gute Abschätzung für den numerischen Fehler

von C_2 , denn auch signifikant höhere Auflösungen, wie der C_2 -Wert bei $5 \mu\text{m}$, liefern kein stabileres Ergebnis (siehe Abbildung A.4). Es fällt jedoch auf, dass C_2 bei einer Auflösung von $49.5 \mu\text{m}$ innerhalb der Standardabweichung mit dem Mittelwert übereinstimmen. Hingegen tritt bei $50 \mu\text{m}$ ein deutlicher Sprung in den Werten auf. Ein sanfterer Übergang war auch bei weiterer Annäherung von links an $50 \mu\text{m}$ nicht möglich. Eine mögliche Erklärung dafür begründet sich in der Tatsache, dass die verwendeten Zwischenebenen Ankerpunkte für Tosca vorgeben, zwischen denen die einzelnen Gitterzellen gelegt werden müssen. Da die Gitterzellen eine feste Größe haben, ist es nur möglich, bestimmte Vielfache dieser Gitterzellen zwischen die Ebenen zu legen. Wird nun die Größe der einzelnen Gitterzellen minimal variiert, so verändert sich das Gitter solange nicht, bis das nächste Vielfache erreicht ist. Daher ergeben sich bei kleinen Variationen nur minimale bis keine Schwankungen in den Endresultaten. Bei größeren Variationen, wenn das nächste Vielfache erreicht wird, kann dann ein deutlicher Sprung entstehen. Insgesamt spricht jedoch die Stabilität der C_2 's über einen großen Auflösungsbereich ($30 \mu\text{m} - 5 \mu\text{m}$) dafür, dass für noch höhere Auflösungen kein weiterer Sprung zu erwarten ist.

Die C_4 -Koeffizienten (siehe Abbildung A.5 und A.6) verhalten sich sehr ähnlich wie die C_2 -Werte. So ist auch hier eine Annäherung an den Mittelwert ab $30 \mu\text{m}$ Auflösung zu beobachten, genauso wie eine statistische Schwankung und ein charakteristischer Sprung zwischen $49.5 \mu\text{m}$ und $50 \mu\text{m}$, welcher auch bei weiterer Annäherung von links an $50 \mu\text{m}$ nicht genau aufgelöst werden kann. Die C_1 - und C_3 -Koeffizienten waren in allen Fits verträglich mit null.

Für die Simulation der D -Koeffizienten werden die Guards auf ein Potential von $U = +1 \text{V}$ gesetzt und das entstehende Potential in einem Bereich $\pm 1.0 \text{mm}$ um das Fallenzentrum entlang der z -Achse mittels eines Polynoms vierten Grades gefittet:

$$\Phi_G(z) = U \cdot \left(D_0 + D_1 \cdot z + D_2 \cdot z^2 + D_3 \cdot z^3 + D_4 \cdot z^4 \right) \quad . \quad (4.2)$$

Bei D_2 (siehe Abbildung A.7 und A.8) findet wieder eine Annäherung zu einem Mittelwert ab $30 \mu\text{m}$ Auflösungen statt. Ebenfalls gibt es einen Sprung von D_2 von $49 \mu\text{m}$ auf $50 \mu\text{m}$, allerdings ist dieser Sprung (siehe Abbildung A.7 und A.8) kleiner als zuvor. Die D_2 -Werte schwanken deutlich mehr als C_2 (siehe Abbildung A.4). Die relative Standardabweichung bei D_2 beträgt 0.17% und bei C_2 0.014% . Diese größeren Schwankungen können auf die spitze Form der Guards zurückzuführen sein, denn bereits kleine Änderungen des Gitters, welches die Spitze der Guards in den Simulationen wiedergibt, können deutliche Auswirkungen auf das entstehende Feld haben, da die Feldstärke vom Krümmungsradius der Spitze abhängig ist.

Auch bei D_4 (siehe Abbildung A.9 und A.10) ergibt sich das gleiche Bild, wie schon zuvor bei den anderen Parametern. Mit besserer Auflösung nähern sich die Werte einem Mittelwert an, aber auch hier gibt es wieder bei $50 \mu\text{m}$ einen Sprung. Des Weiteren ist die Schwankung um den Mittelwert im Bereich von $5 \mu\text{m} - 30 \mu\text{m}$ größer als bei D_2 . Hierbei liegt der Fehler bei 0.63% .

Die resultierenden Parameter sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst:

	Koeffizient	Rel. Fehler
C_2 (mm^{-2})	$-0.111183(16)$	$1.5 \cdot 10^{-4}$
C_4 (mm^{-4})	$2.97(19) \cdot 10^{-4}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$
D_2 (mm^{-2})	$-2.129(38) \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
D_4 (mm^{-4})	$-4.878(37) \cdot 10^{-4}$	$6.3 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 4.1: Überblick über die Ergebnisse der Auflösungsstudie der Koeffizienten C_2 , C_4 , D_2 und D_4 . Der Fit wird entlang der z -Achse mit einem Polynom vierten Grades durchgeführt. Der Mittelwert ergibt sich aus den Ergebnissen der Simulationen mit der Auflösung zwischen $5 \mu\text{m}$ und $30 \mu\text{m}$. Das σ ist der relative Fehler des Mittelwerts.

Insgesamt zeigt die Auflösungsstudie, dass die Koeffizienten ab einer Auflösung von $25 \mu\text{m}$ um einen Mittelwert statistisch streuen. Dabei wird deutlich, dass besonders C_2 sehr stabil ist und auch die Schwankungen in D_2 und D_4 klein sind. Hingegen ist die Schwankung von C_4 zehn mal so groß wie von D_4 . Dies könnte mit der Geometrie der Falle zusammenhängen, denn die hyperbolische Form führt dazu, dass C_2 drei Größenordnungen größer als C_4 ist, so dass das Potential vom C_2 -Term dominiert wird. Die Residuen eines Fits zweiten Grads verdeutlichen, dass der Einfluss des C_4 -Terms zwar zu erkennen ist (siehe Abbildung 4.1), aber das numerisches Rauschen, verursacht durch die Zwischenebenen (siehe Kapitel 4.3), die genaue Bestimmung erschwert.

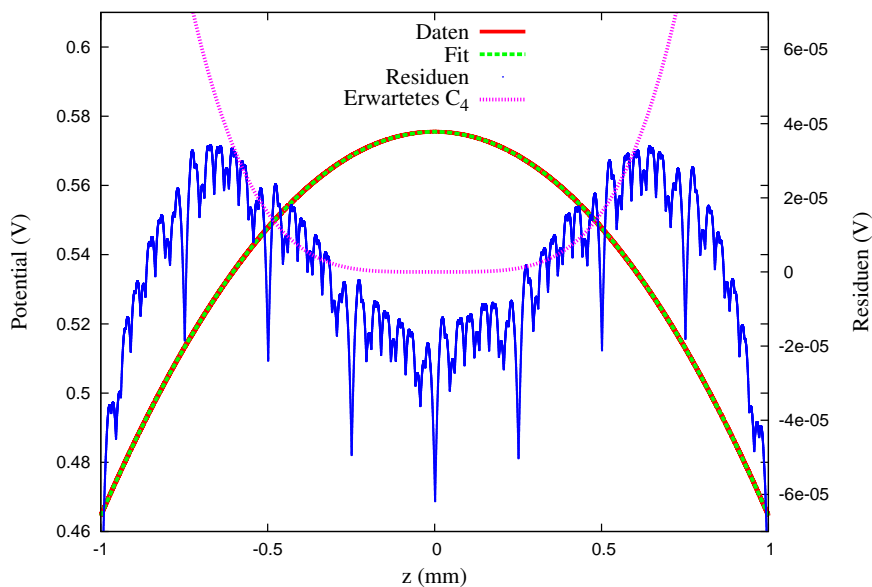


Abbildung 4.1: Diese Abbildung zeigt das Potential (Daten - rot), den Fit (grün) der Daten mittels eines Polynoms zweiten Grades mit der Skala auf der linken y -Achse an. Die Residuen und das vorhergesagte C_4 werden mit der rechten y -Achse skaliert. Die Simulation wurde bei einer Auflösung von $15 \mu\text{m}$ durchgeführt. Das vorhergesagte C_4 ergibt sich aus dem D_4 -Anteil, welcher bei einer Spannung im Experiment von 47.22 V an den Guards und 89.76 V am Ring kompensiert werden muss (siehe Gleichung (5.1)).

4.2 Bereichsstudie

In der Bereichsstudie werden die Ausmaße des Innenzylinders bei konstanter Auflösung variiert, um so nachzuweisen, dass alle wichtigen Bestandteile der Falle hochauflösend erfasst sind. Basierend auf dem Ergebnis der Auflösungsstudie (siehe Kapitel 4.1) wird eine Auflösung von $20\ \mu\text{m}$ und ein Zwischenebenenabstand von $0.50\ \text{mm}$ gewählt. Die ab diesem Kapitel berechneten Werte weichen um bis zu 5% von den Werten aus Kapitel 4.1 ab. Die Abweichungen zum vorherigen Kapitel ergeben sich durch eine nicht markierte Oberfläche auf der Oberseite des Rings im Simulationsmodell. Durch das Fehlen dieser Markierung wird diese Oberfläche mit keiner Randbedingung versehen, so dass in den Simulationen der Guards dort kein Potential von $0\ \text{V}$ angenommen wird. Der Fehler ist reproduzierbar und bereits für diese und alle weiteren Simulationen behoben. Auf das Ergebnis der Auflösungsstudie (Kapitel 4.1) hat dies keinen Einfluss, da in diesem Kapitel nicht die absoluten Werte, sondern das Verhalten und die Konvergenz dieser Werte entscheidend sind.

Für die Variation des Zylinders muss dessen Ausdehnung in z - und r -Richtung verändert werden (siehe Tabelle 4.2).

z (mm)	r (mm)	Bemerkungen
1.50	1.50	
2.00	2.00	
2.25	2.75	Berührung des Rings und der Endkappen
2.50	3.00	
2.75	3.00	
3.00	4.00	Berührung der Guards
3.25	4.00	
3.50	4.50	Einschließung der Kanten von Ring und Endkappen
3.75	4.75	
4.00	5.00	

Tabelle 4.2: Die Tabelle zeigt, wie die z - und r -Ausdehnung des Innenzylinders in der Simulation verändert werden. Zusätzlich geben die Bemerkungen an, welcher Teil der Geometrie der Penningfalle ab dort hochauflösend abgedeckt wird.

Die Simulationen mit diesen verschiedenen Innenzylindern ergeben folgende Ergebnisse: Die C_2 -, C_4 - und D_2 -Koeffizienten zeigen Schwankungen, die eher statistischer Natur sind, als dass ein systematischer Einfluss der Zylindergröße erkennbar wäre (siehe Abbildung A.11, A.12 und A.13). Hingegen ist im D_4 -Koeffizient ein deutlicher Einfluss zu erkennen (siehe Abbildung 4.2):

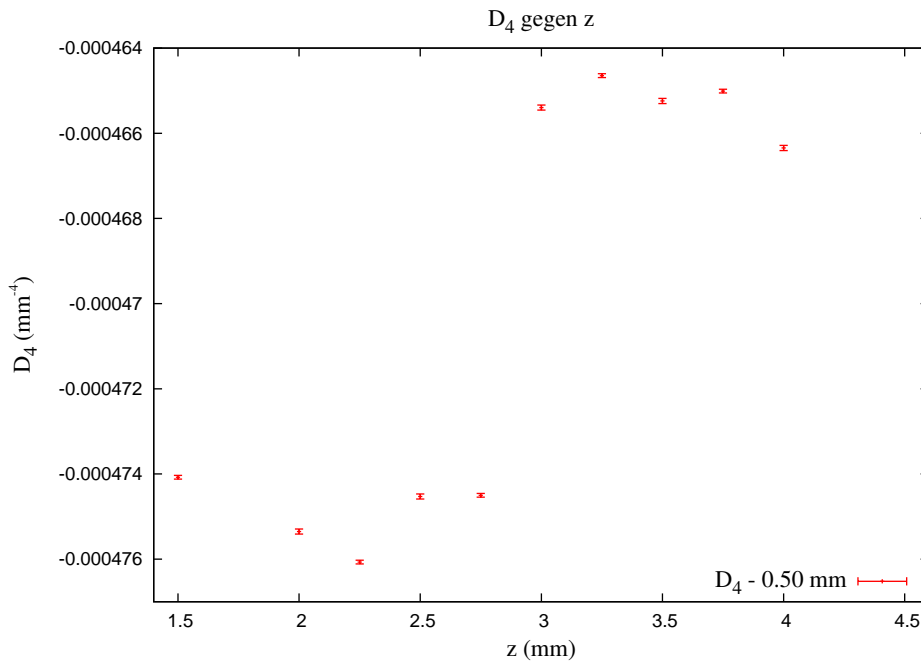


Abbildung 4.2: Die Abbildung zeigt D_4 in Abhängigkeit der Größe des Zylinders, in welchem eine Auflösung von $20\ \mu\text{m}$ gewählt worden ist. Für alle Punkte wird ein Zwischenebenenabstand von $0.50\ \text{mm}$ gewählt.

So gibt es bei $z = 3\ \text{mm}$ einen deutlichen Sprung. Dies ist nach Tabelle 4.2 der Bereich, ab dem die Guards vom Innenzylinder abgedeckt werden. Für eine größere Ausdehnung des Zylinders ergibt sich keine signifikante Verschiebung mehr.

Die Bereichsstudie zeigt also, dass ein Innenzylinder mit einem Radius von $4.5\ \text{mm}$ und einer Ausdehnung entlang der z -Achse von $\pm 3.5\ \text{mm}$ ausreicht, um alle wichtigen Bestandteile der Geometrie der Penningfalle hochauflösend abzudecken.

Jedoch stellte sich während der Simulationen heraus, dass für eine Auflösung unterhalb von $20\ \mu\text{m}$ die Zwischenebenen alle $0.25\ \text{mm}$ gesetzt werden mussten. Da sich beim Ändern der Zwischenebenen die Werte der Koeffizienten verschieben, wird der Einfluss der Zwischenebenen gesondert untersucht.

4.3 Einfluss der Zwischenebenen

Für die Charakterisierung des Einflusses der Zwischenebenen werden die Simulationen aus Kapitel 4.2 mit einem Zwischenebenenabstand von $0.25\ \text{mm}$ anstatt von $0.50\ \text{mm}$ wiederholt. Die statistischen Schwankungen von C_2 sind bei einem Zwischenebenenabstand von $0.25\ \text{mm}$ kleiner (siehe Abbildung A.11 und Tabelle 4.3) als bei $0.50\ \text{mm}$. Der Mittelwert von C_2 verschiebt sich um 0.2% beim Wechsel der Abstände der Zwischenebenen. Dies ist bei einem relativen Fehler des Mittelwerts von $8 \cdot 10^{-6}$ eine Verschiebung um ca. 20σ und damit sehr signifikant. Jedoch ist zu beachten, dass für $0.25\ \text{mm}$ Zwischenebenenabstand nur die Hälfte der Anzahl der Datenpunkte genommen worden ist.

Die für C_2 gemachten Beobachtungen setzen sich bei C_4 fort (siehe Abbildung A.12), jedoch fällt hier die Verschiebung mit 10 %, bei einem Fehler des Mittelwerts von ebenfalls 10 %, im Verhältnis deutlich kleiner aus.

Beim D_2 -Koeffizienten hingegen sind die statistischen Schwankungen für einen Zwischenebenenabstand von 0.50 mm um einen Faktor 10 kleiner als bei 0.25 mm (siehe Abbildung A.13). Der Mittelwert des D_2 -Koeffizienten verschiebt sich um ca. 1-2 % beim Wechsel des Zwischenebenenabstands. Für D_4 fällt das Ergebnis noch deutlicher aus. Während bei einem Zwischenebenenabstand von 0.50 mm der Einfluss der Geometrie sichtbar ist (siehe Abbildung 4.2), ist die Streuung bei 0.25 mm Zwischenebenenabstand so groß, dass kein Einfluss mehr zu erkennen ist (siehe Abbildung 4.3).

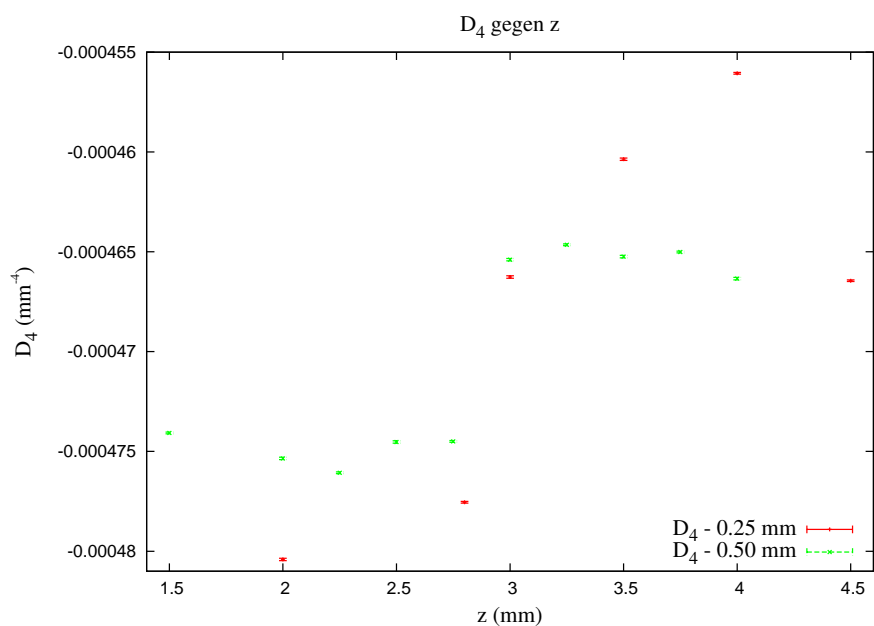


Abbildung 4.3: Die Abbildung zeigt D_4 in Abhängigkeit der Größe des Zylinders, in welchem eine Auflösung von $20 \mu\text{m}$ gewählt worden ist. Dabei sind die Punkte in rot bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.25 mm und die Punkte in grün bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.50 mm berechnet worden.

Koeffizient	0.50 mm Abstand	0.25 mm Abstand	Rel. Fehler	Bemerkung
C_2 (mm ⁻²)	$-1.111985(22) \cdot 10^{-1}$	$-1.1117783(54) \cdot 10^{-1}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$	
C_4 (mm ⁻⁴)	$2.918(53) \cdot 10^{-5}$	$2.633(10) \cdot 10^{-5}$	0.11	
D_2 (mm ⁻²)	$-2.03315(47) \cdot 10^{-4}$	$-2.065(24) \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$	
D_4 (mm ⁻⁴)	$-4.7490(36) \cdot 10^{-4}$			$z < 3$ mm
D_4 (mm ⁻⁴)	$-4.6533(28) \cdot 10^{-4}$		$1.0 \cdot 10^{-3}$	$z \geq 3$ mm
D_4 (mm ⁻⁴)		$-4.678(39) \cdot 10^{-4}$		

Tabelle 4.3: Übersicht der Ergebnisse aus der Variation des Zwischen-ebenenabstands. Der D_4 -Koeffizient bei 0.25 mm Zwischenebenenabstand wurde wieder aus dem gesamten z -Bereich ermittelt.

Die Ergebnisse der Simulation sind in Tabelle 4.3 zusammengefasst. Diese Ergebnisse sind insofern verwunderlich, da die Zwischenebenen keine Dicke und keine physikalische Relevanz haben und somit das Ergebnis nicht beeinflussen sollten. Des Weiteren fällt auf, dass die Koeffizienten der Endkappe bei 0.25 mm, die Koeffizienten der Guards hingegen bei 0.50 mm Zwischenebenenabstand stabiler sind. Zusätzlich weichen die Werte der Koeffizienten signifikant von einander ab, wenn der Zwischenebenenabstand verändert wird. Eine Erklärung oder eine Lösung dieser Probleme ist im Rahmen einer Bachelorarbeit nicht möglich, da der Quellcode von Tosca nicht frei zugänglich ist. Es gibt Vermutungen, dass die Anordnung der Gitterzellen durch die Zwischenebenen negativ beeinflusst wird, aber auch diese Vermutung kann nicht verifiziert werden.

Obwohl der Zwischenebenenabstand von 0.25 mm besonders C_4 signifikant verändert, bleibt dieser Zwischenebenenabstand notwendig, da andernfalls keine Auflösung von $0.15 \mu\text{m}$ erreicht werden kann. Um den durch die Zwischenebenen verursachten Fehler nicht zu vernachlässigen, wird der in Tabelle 4.3 angegebene relative Fehler als systematischer Fehler für die jeweiligen Koeffizienten und darauf basierenden Rechnungen übernommen.

Die Belastbarkeitsstudien wurden durchgeführt, um eine verlässliche Basis für die numerische Simulation des Potentials der Penningfalle von THe-Trap zu schaffen. Darauf aufbauend werden die folgenden Simulationen mit einem Innenzylinder der Dimension $z = \pm 3.5$ mm und $r = 4.5$ mm, in einem Auflösungsbereich von $15 \mu\text{m}$ bis $25 \mu\text{m}$ in $1 \mu\text{m}$ Schritten, durchgeführt. Die Zwischenebenen werden, da Auflösungen bis zu $15 \mu\text{m}$ genutzt werden, alle 0.25 mm gesetzt. Die für die jeweiligen Auflösung berechneten Koeffizienten werden gemittelt und der statistische Fehler für den Mittelwert bestimmt.

4.4 Symmetrische Potentiale

Die C_2 - und C_4 -Koeffizienten werden mit jeweils 1 V Spannung am Ring, und die D_2 - und D_4 -Koeffizienten mit jeweils 1 V Spannung am oberen und unteren Guard simuliert, wobei die Auflösung, wie zuvor beschrieben, variiert wird. Die von Opera Vector Field 13.0 - Tosca simulierten Daten werden mittels eines Polynoms vierten Grades entlang der z -Achse in einem Bereich von $z = \pm 1.0$ mm gefittet. Zur Überprüfung der Fits werden auch Fits zweiten Grades durchgeführt und die jeweiligen Residuen betrachtet.

	Koeffizient	Rel. stat. Fehler	Rel. sys. Fehler
D_4 (mm^{-4})	$-4.6607(35)_{\text{stat.}}(233)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$7.5 \cdot 10^{-4}$	$0.5 \cdot 10^{-2}$
D_2 (mm^{-2})	$-2.0111(59)_{\text{stat.}}(302)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$2.9 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
C_4 (mm^{-4})	$2.836(42)_{\text{stat.}}(312)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$	0.11
C_2 (mm^{-2})	$-1.111945(38)_{\text{stat.}}(71)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-1}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$
\check{D}_4	$-1.4255(11)_{\text{stat.}}(71)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-2}$	$7.5 \cdot 10^{-5}$	$0.5 \cdot 10^{-2}$
\check{D}_2	$-1.5727(46)_{\text{stat.}}(236)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-3}$	$2.9 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
\check{C}_4	$8.68(15)_{\text{stat.}}(95)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$	0.11
\check{C}_2	$-8.696015(29)_{\text{stat.}}(557)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-1}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 4.4: Mittelwerte der Simulationen von D_4 , D_2 , C_4 und C_2 . Der jeweils angegebene statistische Fehler entspricht einer Standardabweichung des Mittelwerts. \check{D}_i und \check{C}_i sind dimensionslose Koeffizienten, wie sie in Gleichung (2.15) bzw. (2.16) definiert werden.

Die Koeffizienten der Guards (siehe Tabelle 4.4) sind mit einem relativen statistischen Fehler von unter 0.3 % belastbar. Desweiteren unterscheiden sich die relativen statistischen Fehler von D_4 und D_2 um etwa einen Faktor 4. Der relative statistische Fehler von C_2 ist zwei Größenordnungen kleiner als der Fehler der D -Koeffizienten und damit der sicherste aller Koeffizienten. Hingegen ist der relative statistische Fehler von C_4 vier Größenordnungen größer als von C_2 . Dies kann durch die Unterscheide zwischen C_2 und C_4 erklärt werden. So ist C_2 drei Größenordnungen größer als C_4 und dadurch wird der C_4 -Term durch den C_2 -Term in den Fits dominiert. Alle anderen Koeffizienten sind jedoch verlässlich. Die C_1 - und C_3 -Koeffizienten sind, wie bereits in der Auflösungsstudie (siehe Kapitel 4.1) verträglich mit Null.

Führt man für das Ringpotential ein Fit zweiten Grades durch, so lässt sich in den Residuen (siehe Abbildung 4.1) eine Struktur einer Funktion vierten Grades im Fallenzentrum erkennen. Das vorhergesagte C_4 hebt sich im Fallenzentrum von den Residuen ab, so dass dort ein Fit mit einem Polynom vierten Grades gerechtfertigt ist. Da besonders der Bereich des Zentrums wichtig für das Experiment ist, wurde für das Ringpotential eine Simulation mit einer Auflösung von $5 \mu\text{m}$ durchgeführt. Diese Simulation dauert insgesamt 2.5 Tage und benötigt über 20 GB Arbeitsspeicher. Bei dieser Auflösung ist das C_4 fast durchgehend größer als die Residuen und die Einbrüche an den Zwischenebenen sind kleiner geworden. Jedoch hat sich bei $z = 0$ eine neue (nicht geklärte) Oszillation ergeben (siehe Abbildung A.14).

4.5 Asymmetrische Potentiale

Die $C_1^a - C_3^a$ werden mit jeweils 1 V Spannung auf der oberen Endkappe bzw. dem oberen Guard für $D_1^a - D_3^a$ simuliert, wobei die Auflösung und die Fits wie im vorherigen Kapitel (siehe Kapitel 4.4) variiert werden. Die relativen systematischen Fehler für die ungeraden C - und D -Koeffizienten wurden in einer Simulationsstudie, wie in Kapitel 4.3, bestimmt.

	Koeffizient	Rel. stat. Fehler	Rel. sys. Fehler
D_3^a (mm ⁻³)	$-5.827(11)_{\text{stat.}}(14)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$
D_2^a (mm ⁻²)	$-1.006(13)_{\text{stat.}}(15)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
D_1^a (mm ⁻¹)	$2.93611(25)_{\text{stat.}}(411)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
C_3^a (mm ⁻³)	$1.041012(49)_{\text{stat.}}(1041)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-2}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
C_2^a (mm ⁻²)	$5.57000(586)_{\text{stat.}}(35)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$
C_1^a (mm ⁻¹)	$1.663963(20)_{\text{stat.}}(50)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$
\tilde{D}_3^a	$-9.0112(17)_{\text{stat.}}(225)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$
\tilde{D}_2^a	$-7.867(51)_{\text{stat.}}(118)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
\tilde{D}_1^a	$1.16119(10)_{\text{stat.}}(163)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-2}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
\tilde{C}_3^a	$1.609891(75)_{\text{stat.}}(1610)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-1}$	$4.7 \cdot 10^{-5}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
\tilde{C}_2^a	$4.35604(435)_{\text{stat.}}(27)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$6.4 \cdot 10^{-5}$
\tilde{C}_1^a	$6.580779(79)_{\text{stat.}}(197)_{\text{sys.}} \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 4.5: Tabellarische Übersicht über $D_3^a - D_1^a$ und $C_3^a - C_1^a$. Der jeweils angegebene statistische Fehler entspricht der Standardabweichung des Mittelwerts. Der Mittelwert und dessen Fehler werden aus den oben angegebenen Studien ermittelt.

Auch bei ungeraden Koeffizienten (siehe Tabelle 4.5) sind die D^a -Koeffizienten mit maximal 0.2 % relativem statistischen Fehler belastbar. Zusätzlich sind hier die relativen statistischen Fehler der C^a -Koeffizienten im Gegensatz zu C_2 und C_4 aus Tabelle 4.4 gleich groß. Da C_3^a und C_1^a sich nun nur noch um eine Größenordnung unterscheiden, unterstützt dies die These, dass der große Fehler des C_4 's auf der Dominanz des C_2 's beruht.

4.6 Oberflächenladung

Da es im Experiment zu elektrostatischer Aufladung an den Endkappen und dem Ring kommen kann, ist eine Aufgabe, den Einfluss dieser Aufladungen auf das Ion zu simulieren.

Aus diesem Grund wird eine elektrostatische Aufladung erstellt, indem auf die Endkappe, mit jeweils 1 mm Versatz in x - und y -Richtung vom Zentrum (1/1/Endkappe), eine Fläche mit 0.1 mm Radius aufgebracht wird. Diese Fläche wird mit einem Potential von 0.1 V versehen und der elektrische Feldvektor im Zentrum berechnet:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} -1.762 \cdot 10^{-5} \\ -1.769 \cdot 10^{-5} \\ -2.830 \cdot 10^{-5} \end{pmatrix} \frac{\text{V}}{\text{mm}} \quad . \quad (4.3)$$

Die gleiche Simulation wurde für eine Oberflächenladung am Ring mit dem Zentrum bei (Ring/0/0) durchgeführt:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} 9.410 \cdot 10^{-5} \\ -1.377 \cdot 10^{-8} \\ 3.462 \cdot 10^{-7} \end{pmatrix} \frac{\text{V}}{\text{mm}} \quad . \quad (4.4)$$

In beiden Fällen läuft die x -Achse des hier gewählten Koordinatensystems durch die Lücke zwischen den beiden Guardhälften.

Da hier nur eine grobe Abschätzung der durch die Oberflächenladungen verursachten Felder gegeben werden sollte, kann der Fehler der Simulation unberücksichtigt bleiben.

4.7 Asymmetrische Guards

Zur Anregung der Ionen (siehe Kapitel 2.7) müssen die Guards unterschiedlich angesteuert werden. Dies wird im folgenden simuliert, wobei die Guards einzeln und in Kombination auf unterschiedliche Spannungen gesetzt werden. Die Benennung der Guards ist in Abbildung 2.1b beschrieben.

Für $A = 1 \text{ V}$ Guardspannung ergibt sich im Zentrum folgender elektrischer Feldvektor:

$$\vec{E}_A = \begin{pmatrix} -1.681 \cdot 10^{-6} \\ -1.293 \cdot 10^{-3} \\ -1.486 \cdot 10^{-3} \end{pmatrix} \frac{\text{V}}{\text{mm}} \quad . \quad (4.5)$$

Für $A, D = 1 \text{ V}$ und $B, C = -1 \text{ V}$ bzw. $A, C = 1 \text{ V}$ und $B, D = -1 \text{ V}$ wird folgender elektrischer Feldvektor im Zentrum berechnet:

$$\vec{E}_{A,D;B,C} = \begin{pmatrix} 3.910 \cdot 10^{-7} \\ -5.197 \cdot 10^{-3} \\ -2.547 \cdot 10^{-7} \end{pmatrix} \frac{\text{V}}{\text{mm}} \quad (4.6)$$

$$\vec{E}_{A,C;B,D} = \begin{pmatrix} -6.804 \cdot 10^{-6} \\ 2.620 \cdot 10^{-5} \\ 4.539 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix} \frac{\text{V}}{\text{mm}} \quad . \quad (4.7)$$

Da auch hier nur eine grobe Abschätzung verlangt war, kann der systematische Fehler vernachlässigt werden.

5 Analyse

Im folgenden Kapitel werden die aus den Simulationen gewonnenen Daten analysiert, um vom Experiment bekannte Werte zu verifizieren oder Abweichungen herauszuarbeiten.

5.1 Optimale Guardspannung

Die optimale Guardspannung ist erreicht, wenn der D_4 -Einfluss der Guards den C_4 -Einfluss der Endkappen aufhebt. Somit muss gelten:

$$0 \stackrel{!}{=} U_R \cdot C_4 + U_G \cdot D_4 \quad . \quad (5.1)$$

Mit den Werten der Tabelle 4.4 ergibt sich:

$$\begin{aligned} \text{Simulation: } U_G &= 0.608(39)_{\text{stat.}}(75)_{\text{sys.}} \cdot U_R \\ \text{Experiment [3]: } U_G &= 0.5266(11) \cdot U_R \quad . \end{aligned}$$

Die sich aus der Simulation ergebene optimale Guardspannung stimmt mit dem experimentellen Wert innerhalb von 2σ überein, wobei die Simulation nach oben abweicht. Der relative Fehler beträgt bis zu 19% und ist damit für das Experiment ungeeignet, da die Genauigkeit deutlich unter 1% liegen müsste. Selbst Simulationen auf dem Cluster mit einer Auflösung von $5\mu\text{m}$, welche bis zu 2.5 Tage in Anspruch nehmen können, liefern noch keine vollständig zufriedenstellenden Ergebnisse (siehe Abbildung A.14).

Dies führt dazu, dass auch die Fragen bezüglich des Einflusses der Lochgröße auf das C_4 nicht geklärt werden können, da etwaige Ergebnisse im numerischen Rauschen verschwinden. Ebenso bleibt die Aufgabe ungelöst, ob es möglich ist mit den Skimmern die Löcher in den Endkappen zu verschließen oder wie groß der Einfluss der Skimmer selbst ist. In Kapitel 6 werden Möglichkeiten erörtert, wie diese offenen Fragen untersucht werden können.

5.2 Guard-Konstante

Auf Gleichung (2.18) und Tabelle 4.4 basierend, ergibt sich folgende Guard-Konstante:

$$c_{\text{guard}} = 552.9(1.6)_{\text{stat.}}(8.2)_{\text{sys.}} \quad .$$

Der relative Fehler der Guard-Konstante ist mit 2% ausreichend genau, da diese Größe im Experiment großen Schwankungen unterworfen ist, bedingt durch äußere Umstände, die in der Simulation nicht erfasst werden können.

5.3 Effektiver Elektrodenabstand

Basierend auf Gleichung (2.27), (2.28) und Tabelle 4.4 ergeben sich folgende effektive Elektrodenabstände:

	\tilde{z}_0 (mm)	κ
Endkappen	$3.004875(181)_{\text{stat.}}(45)_{\text{sys.}}$	$0.76093(45)_{\text{stat.}}(11)_{\text{sys.}}$
Guards	$170.293(7)_{\text{stat.}}(120)_{\text{sys.}}$	$0.01344739(57)_{\text{stat.}}(948)_{\text{sys.}}$

Tabelle 5.1: Tabellarische Übersicht über den effektiven Elektrodenabstand \tilde{z}_0 und dem Faltenparameter κ für die Endkappen und die Guards.

Bei dem effektiven Elektrodenabstand (siehe Tabelle 5.1) zeigt sich, dass der lineare Teil des Fits (C_1 und D_1) besonders stabil und unabhängig von statistischen Einflüssen ist. So ist der relative Fehler des κ 's der Endkappen $7.3 \cdot 10^{-4}$ und des κ 's der Guards $7.5 \cdot 10^{-4}$. Das für das Experiment theoretisch abgeschätzte κ der Endkappen liegt bei ca. 0.8 [9] und kann somit durch die Simulation verifiziert werden. Hier hat sich zum ersten Mal die Möglichkeit gezeigt, theoretische Überlegungen mit einer Simulation zu untermauern, da es vorher nicht möglich war, diese Größe in ein anderen Weise abzuschätzen. Daher liegt die Abweichung von 0.04 im Rahmen der Erwartungen.

5.4 Verschiebung des Fallenzentrums

Bei einer Spannung von $U_R = 89.76$ V und $U_G = 0.5260(11) \cdot U_R$, ergeben sich aus den C_2 bzw. D_2 (siehe Tabelle 4.4) und C_1^a bzw. D_1^a (siehe Tabelle 4.5) nach Gleichung (2.22) folgende Verschiebungen für das Fallenzentrum entlang der z-Achse:

	Verschiebung ($\mu\text{m}/\text{V}$)
Endkappen	$8.327882(10)_{\text{stat.}}(25)_{\text{sys.}}$
Guards	$0.1469478(12)_{\text{stat.}}(21)_{\text{sys.}}$

Tabelle 5.2: Verschiebung des Fallenzentrums durch asymmetrisch geladene Guards bzw. Endkappen. Bei der Simulation sind jeweils die oberen Guards bzw. die obere Endkappe um +1 V verschoben.

Die relativen Fehler sind mit $4.2 \cdot 10^{-6}$ für die Verschiebung durch die Endkappen und mit $2.2 \cdot 10^{-5}$ für die Verschiebung durch die Guards erwartungsgemäß klein, da diese Werte nur auf C_2 , C_1^a bzw. D_2 , D_1^a beruhen. Die Verschiebung bei einer Spannung von 1 V auf einer der Endkappen ist mit $8 \mu\text{m}$ etwa so groß wie der Bewegungsradius des Ions [8]. Die Verschiebung durch zwei Guards, welche auf 1 V liegen, ist mit $0.15 \mu\text{m}$ bereits geringer als die Verschiebung durch die Endkappen und die Verschiebung wird entsprechend kleiner, wenn nur eine Guardhälfte angesteuert oder nur ein kleiner Bereich der Elektroden mit einer Oberflächenladung versehen wird. Damit ist die Annahme, welche für Gleichung (2.22) gemacht wurde, für die einzeln angesteuerten Guards und die Oberflächenladung erfüllt. Aus Gleichung (2.22) ergibt

sich zusammen mit den elektrischen Feldvektoren (siehe Gleichung (4.3) und (4.4)) folgende Verschiebung für die Oberflächenladungen:

Setup	x -Verschiebung (μm)	y -Verschiebung (μm)	z -Verschiebung (μm)
Endkappe	$-1.78 \cdot 10^{-4}$	$-1.79 \cdot 10^{-4}$	$-1.43 \cdot 10^{-4}$
Ring	$9.50 \cdot 10^{-4}$	$-1.39 \cdot 10^{-7}$	$1.75 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 5.3: Verschiebung des Fallenzentrums durch eine Oberflächenladung an der oberen Endkappe (1/1/Endkappe) bzw. dem Ring (-2.25/0/0). Die Oberflächenladung hat einen Durchmesser von 0.1 mm und ein Potential von 0.1 V.

Bei der Endkappe ist die Verschiebung durch die Oberflächenladung um drei Größenordnungen kleiner als wenn das gesamte Potential der Endkappe verschoben ist. Die Verschiebung ist in x - und y -Richtung fast identisch, was sich aus der Position der Oberflächenladung ergibt. Die Abweichung um $1 \cdot 10^{-6} \mu\text{m}$ gibt somit eine Abschätzung für den Fehler dieser Simulation, denn eigentlich müsste die Verschiebung in x - und y -Richtung aus Symmetriegründen gleich sein.

Die Verschiebung durch die Oberflächenladung am Ring ist in x -Richtung deutlich am größten. Dies folgt ebenfalls aus der Position der Oberflächenladung, denn diese befindet sich auf der x -Achse. Daher müsste die Verschiebung in y - und z -Richtung gleich Null sein. Die Verschiebung entlang der z - bzw. y -Achse liegt in der Größenordnung von $10^{-6} \mu\text{m}$ bis $10^{-7} \mu\text{m}$ und was somit innerhalb des angenommenen Fehlers um Null ist.

Insgesamt weisen die Ergebnisse einen relativen Fehler von ca. 1 % auf. Dieser Fehler ist etwa 300 mal größer als bei der Verschiebung durch die Endkappen entlang der z -Achse (siehe Tabelle 5.2) und etwa 200 mal größer als die Verschiebung durch die Guards, jedoch konnte auf Grund der Brechung der Rotationssymmetrie nur eine Auflösung von $100 \mu\text{m}$ erreicht werden. Zusätzlich wurde bei dieser Verschiebung nur eine Simulation bei einer Auflösung durchgeführt. Diese erheblich schlechte Auflösung (normal: $20 \mu\text{m}$) und die geringe Anzahl an Simulationen, erklären den großen Fehler. Da bei dieser Fragestellung nur eine grobe Abschätzung berechnet werden sollte (denn die Position der Oberflächenladung kann im Experiment nie genau bestimmt werden) sind die Ergebnisse ausreichend genau.

(V)	x -Verschiebung (μm)	y -Verschiebung (μm)	z -Verschiebung (μm)
$A = 1$	$-1.70 \cdot 10^{-5}$	$-1.30 \cdot 10^{-2}$	$-7.50 \cdot 10^{-3}$
$A, D = 1; B, C = -1$	$3.95 \cdot 10^{-6}$	$-5.24 \cdot 10^{-2}$	$-1.29 \cdot 10^{-6}$
$A, C = 1; B, D = -1$	$-6.87 \cdot 10^{-5}$	$2.64 \cdot 10^{-4}$	$2.29 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 5.4: Verschiebung des Fallenzentrums durch einzeln angesteuerte Guards. Die x -Achse verläuft zwischen den beiden Guardhälften.

Die durch asymmetrisch geladene Guards hervorgerufene Verschiebung, ist für $A = 1 \text{ V}$ in y -Richtung am größten (siehe Tabelle 5.4). Dies ist durch die Geometrie der Falle (siehe Abbildung 2.1b) erklärbar. Die Verschiebung in x -Richtung muss aus Symmetriegründen Null sein.

Bei einem angenommenen relativen Fehler von 1 % auf den Betrag des Feldvektors liegt der absolute Fehler bei $10^{-4} \mu\text{m}$. Bei diesem Fehler ist nun die Verschiebung in y - und z -Richtung verschieden von Null und die Verschiebung in x -Richtung gleich Null, wie es die Geometrie der Falle auch vermuten lässt.

Ein ähnliches Ergebnis zeigt sich für $A, D = 1 \text{ V}$; $B, C = -1 \text{ V}$. Aus Symmetriegründen muss die Verschiebung in x - und z -Richtung gleich 0 sein, was auch innerhalb des Fehlers erfüllt ist. Zusätzlich ist die Verschiebung in y -Richtung vier mal so groß, wie bei $A = 1 \text{ V}$. Dies lässt sich mit Hilfe der Superposition der Potentiale der einzelnen Guards erklären und ist somit ein gelungener Konsistenztest der Simulation.

Für die letzte Guardkonfiguration ($A, C = 1 \text{ V}$; $B, D = -1 \text{ V}$) darf sich aus Symmetriegründen keine Verschiebung des Fallenzentrums ergeben. Wird der Fehler für die Konfiguration von $A = 1 \text{ V}$ angenommen, so sind die x - und z -Verschiebung direkt verträglich mit Null. Die Verschiebung des Fallenzentrums in y -Richtung liegt innerhalb des doppelten Fehlers um Null. Dadurch liefern alle Guardkonfigurationen bei einem angenommenen Fehler von 1 % nachvollziehbare Ergebnisse.

6 Ausblick

In den Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass es nur mit Einschränkungen möglich ist, die THE-Trap Penningfalle mit Hilfe von Tosca zu simulieren. Für die Simulationen der Koeffizienten muss ein Innenzylinder mit einem Radius von $r = 4.5 \text{ mm}$, einer Ausdehnung in z -Richtung von $\pm 3.5 \text{ mm}$ und einer Mindestauflösung von $25 \mu\text{m}$ in das THE-Trap Fallenmodell eingeführt werden. Dabei werden die Zwischenebenen alle 0.25 mm gesetzt.

Mit diesen Parametern ist es möglich, die Koeffizienten $D_1 - D_4$ und $C_1 - C_3$ der Fits entlang der z -Achse des elektrostatischen Potentials verlässlich zu simulieren, wobei ein systematischer Fehler durch den Einfluss der Zwischenebenen nicht zu verhindern ist. Die darauf basierende Guard-Konstante, der effektive Elektordenabstand und die Verschiebung des Fallenzentrums konnten belastbar bestimmt werden und decken sich mit den aus dem Experiment bekannten Werten. Besonders die theoretische Abschätzung des effektiven Elektrodenabstands aus "Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap" [9] konnte zum ersten Mal für diese Falle bestätigt werden.

Der C_4 -Koeffizient hingegen konnte nicht verlässlich bestimmt werden. Somit bleiben die Fragen über die optimale Guardspannung und den Einfluss der Löcher und der Skimmer unbeantwortet.

Zum einen dürfte hierfür die zu grobe Auflösung von minimal $5 \mu\text{m}$ verantwortlich sein, mit der sich das Fallenzentrum und die Löcher in den Endkappen nicht gut genug auflösen lassen. Für wesentlich bessere Auflösungen müsste das C_4 auch im Fallenzentrum größer als die Residuen eines Fit zweiten Grades sein, doch hierfür eignet sich Tosca kaum. So ist es in Tosca nicht möglich die Rotationssymmetrie des Aufbaus von THE-Trap auszunutzen. Damit steigt die Rechenzeit und der Arbeitsspeicherverbrauch nicht mit dem Quadrat der Auflösung, sondern mit der Auflösung zur dritten Potenz.

Zum anderen ist der systematische Fehler durch die Zwischenebenen in etwa so groß, wie der verbliebene statistische Fehler. Dieser systematische Fehler lässt sich durch eine höhere Auflösung nicht beheben, da für eine höhere Auflösung wieder mehr Zwischenebenen verwendet werden müssen.

Abhilfe könnte schaffen, die Simulation direkt in der Programmiersprache C++ zu schreiben. Dort könnte die Rotationssymmetrie ausgenutzt, die Einführung von Zwischenebenen vermieden und zusätzlich eine Multicorefähigkeit im Programm implementiert werden. Tosca nutzt pro Simulation nur einen Kern, wodurch aktuelle Multicore-Rechner mit bis zu vier Kernen pro Prozessor nicht effizient genutzt werden. Dieses Projekt wäre jedoch mit erheblichem Zeitaufwand verbunden und im Rahmen einer Bachelorarbeit kaum durchführbar.

Eine weitere Studie über den besten Fitbereich würde es erlauben, aus den vorhandenen Daten belastbarere Koeffizienten zu erhalten. Hierfür müssten für verschiedene Auflösungen jeweils die Mittelwerte der Koeffizienten und die Standardabweichungen der Mittelwerte für verschiedene Fitbereiche bestimmt werden. Darauf basierend können Vertrauensintervalle gewählt werden, um den Fitbereich für die verschiedenen Polynome zu berechnen. So wäre zum Beispiel ein Fit vierten Grades gerechtfertigt, sobald C_4 bzw. D_4 nicht mehr innerhalb von 3σ mit Null verträglich sind. Diese Studie könnte im Rahmen einer weiterführenden Arbeit am Institut durchgeführt werden.

Literatur

- [1] David Brian Pinegar. Tools for a Precise Tritium to Helium-3 Mass Comparison. *PhD Thesis*, 2007.
- [2] Robert S. Van Dyck, Jr., David B. Pinegar, Seth Van Liew, and Steven L. Zafonte. The UW-PTMS: Systematic studies, measurement progress, and future improvements. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2006.
- [3] Christoph Diehl. First mass measurements with the MPIK/UW-PTMS. *PhD Thesis*, 2011.
- [4] R. S. Van Dyck and P. B. Schwinberg. Preliminary Proton/Electron Mass Ratio using a Compensated Quadrupole Penning Trap. *Phys. Rev. Lett.*, 47(6), 1981.
- [5] James K. Thompson, Simon Rainville, and David E. Pritchard. Ion Balance Mass Spectrometry. *AIP Conference Proceedings*, 770(1), 2005.
- [6] Klaus Blaum. High-accuracy mass spectrometry with stored ions. *Physics Reports*, 425(1), 2006.
- [7] D. Pinegar, S. Zafonte, and R. Van Dyck. The UW-PTMS. *Hyperfine Interactions*, 174, 2007.
- [8] Martin Höcker. Untersuchungen zum Ionentransfer im UW/MPIK Doppel-Penningfallen-Experiment. *Diploma Thesis*, 2010.
- [9] Lowell S. Brown and Gerald Gabrielse. Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap. *Rev. Mod. Phys.*, 58(1), 1986.
- [10] Wolfgang Nolting and Wolfgang Nolting. Elektrodynamik. In *Grundkurs Theoretische Physik 3*, Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [11] G. Gabrielse. The true cyclotron frequency for particles and ions in a penning trap. *International Journal of Mass Spectrometry*, 279(2-3), 2009.
- [12] Lowell S. Brown and Gerald Gabrielse. Precision spectroscopy of a charged particle in an imperfect Penning trap. *Phys. Rev. A*, 25(4), 1982.
- [13] Sebastian Streubel. Noch nicht veröffentlicht. *PhD Thesis*, 2012.
- [14] Christoph Diehl, Klaus Blaum, Martin Höcker, Jochen Ketter, David Pinegar, Sebastian Streubel, and Robert Van Dyck. Progress with the MPIK/UW-PTMS in Heidelberg. *Hyperfine Interactions*, 2011.
- [15] R.S. Van Dyck, D.L. Farnham, and P.B. Schwinberg. A compensated penning trap mass spectrometer and the 3. *Journal of Modern Optics*, 39(2), 1992.
- [16] E.A. Cornell, R.M. Weisskoff, K.R. Boyce, and D.E. Pritchard. Mode coupling in a Penning trap: π pulses and a classical avoided crossing. *Physical Review A*, 41(1), 1990.

- [17] Cobham manual. <http://www.cobham.com/about-cobham/aerospace-and-security/about-us/antenna-systems/kidlington.aspx>.
- [18] Marc Schuh. Einarbeitung in Vector Fields Opera 13.0. 2011.
- [19] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. Numerical recipes in C (2nd ed.): the art of scientific computing. 1992.
- [20] J. V. Porto. Series solution for the image charge fields in arbitrary cylindrically symmetric Penning traps. *Phys. Rev. A*, 64(2), 2001.

A Ergänzende Graphen und Bilder

A.1 Simulierte Penningfalle

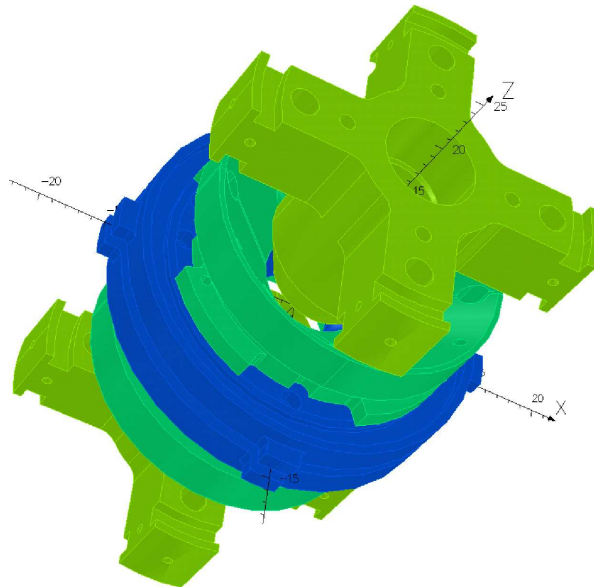


Abbildung A.1: Geometrie der Penningfalle von THE-Trap, die Skala ist in mm. Die Penningfalle ist entlang der z-Achse ausgerichtet und wird schräg von oben gezeigt. Es sind die Endkappen (grün), die Korrektur Elektroden (türkis) und der Ring (blau) zu sehen.

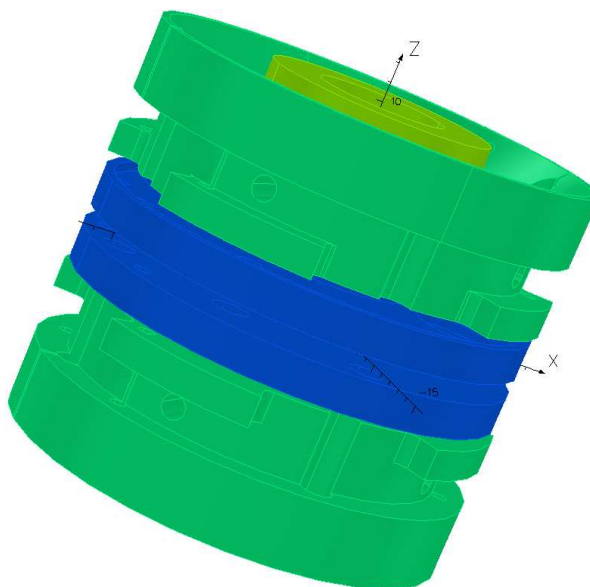


Abbildung A.2: Vereinfachte Penningfalle: Die Penningfalle ist schräg von oben zu sehen. Es wurden sämtliche nur zur Befestigung der Falle dienenden Bereiche entfernt, um die Rechenzeit zu verkürzen. Die Skala ist in mm angegeben.

A.2 Auflösungsstudie

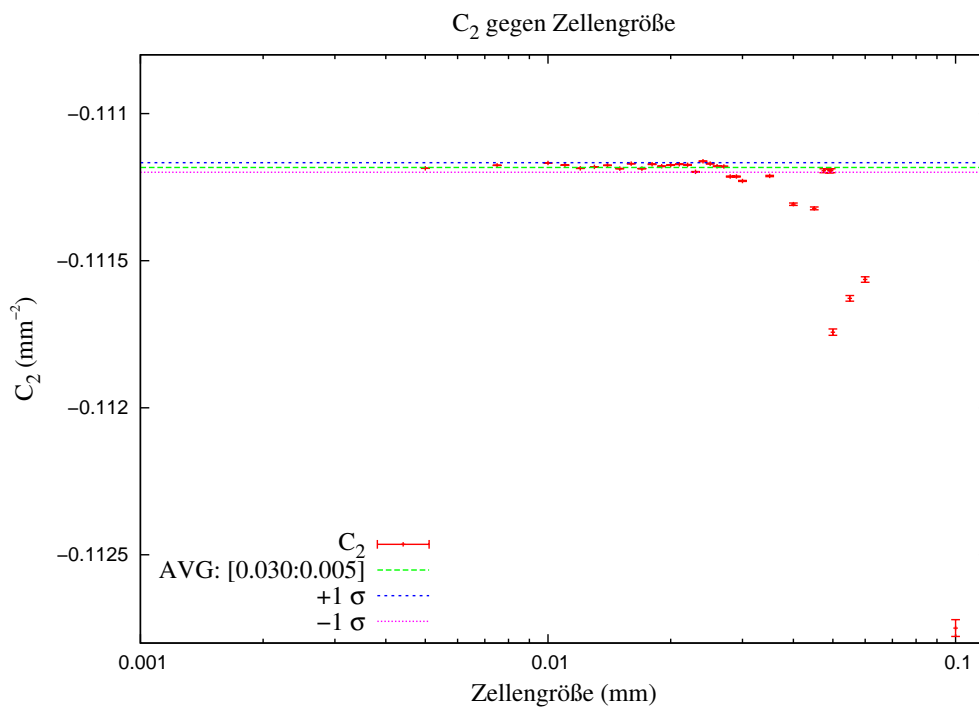


Abbildung A.3: In dieser Abbildung sind die C₂-Koeffizienten in Abhängigkeit der Auflösung im Falleninnenraum dargestellt; C₂ = -0.11183(16). Der Durchschnitt wurde über die C₂-Werte im Auflösungsbereich von 5 – 30 μm gebildet.

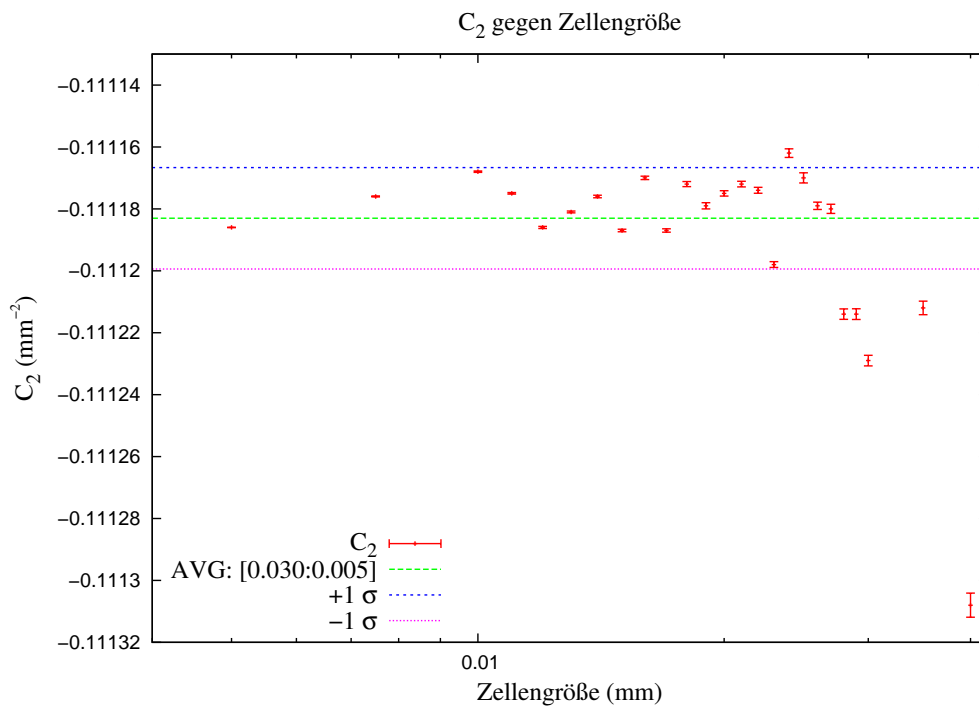


Abbildung A.4: Diese Abbildung zeigt eine Vergrößerung von Abbildung A.3.

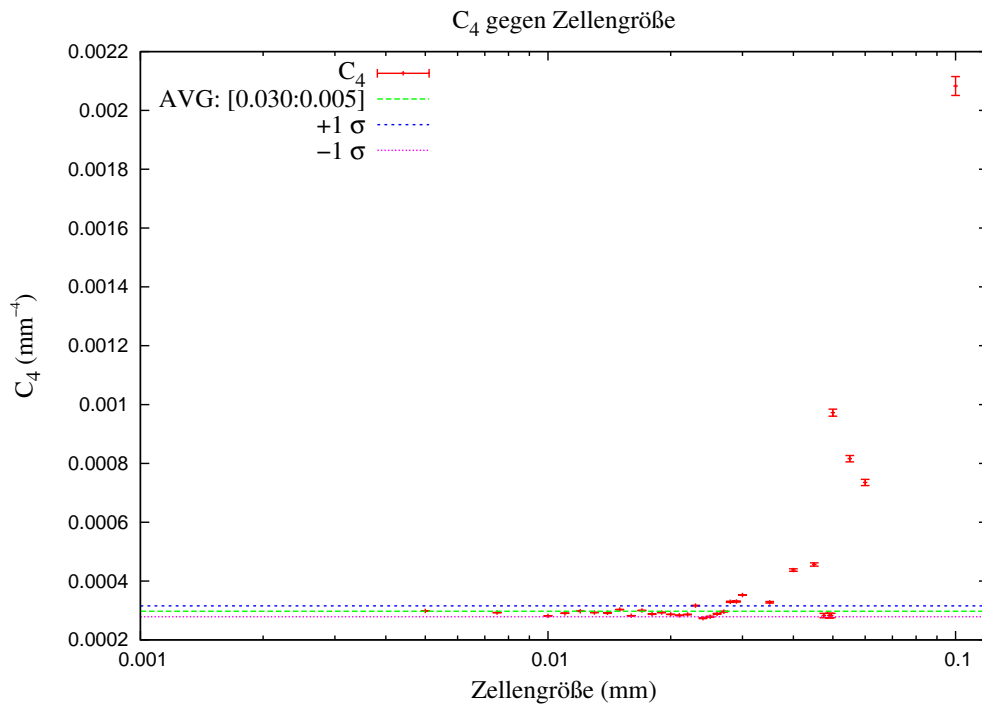


Abbildung A.5: In dieser Abbildung sind die C_4 -Koeffizienten in Abhängigkeit der Auflösung im Falleninnenraum dargestellt; $C_4 = 2.97(19) \cdot 10^{-4}$. Der Durchschnitt wurde über die C_4 -Werte im Auflösungsbereich von $5 - 30 \mu\text{m}$ gebildet.

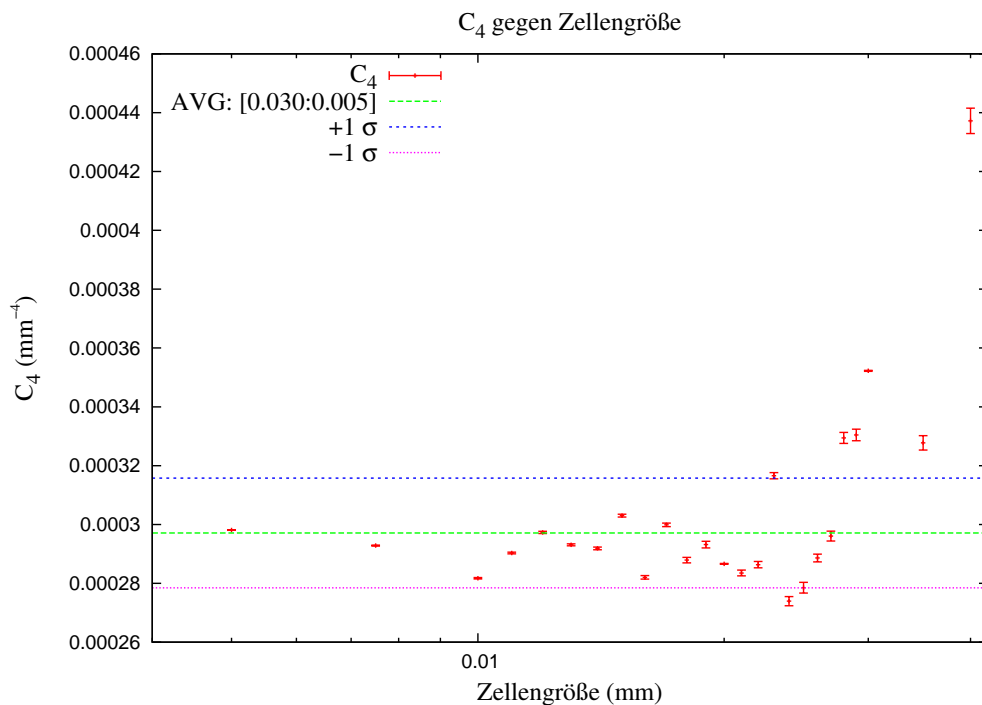


Abbildung A.6: Diese Abbildung zeigt eine Vergrößerung von Abbildung A.5.

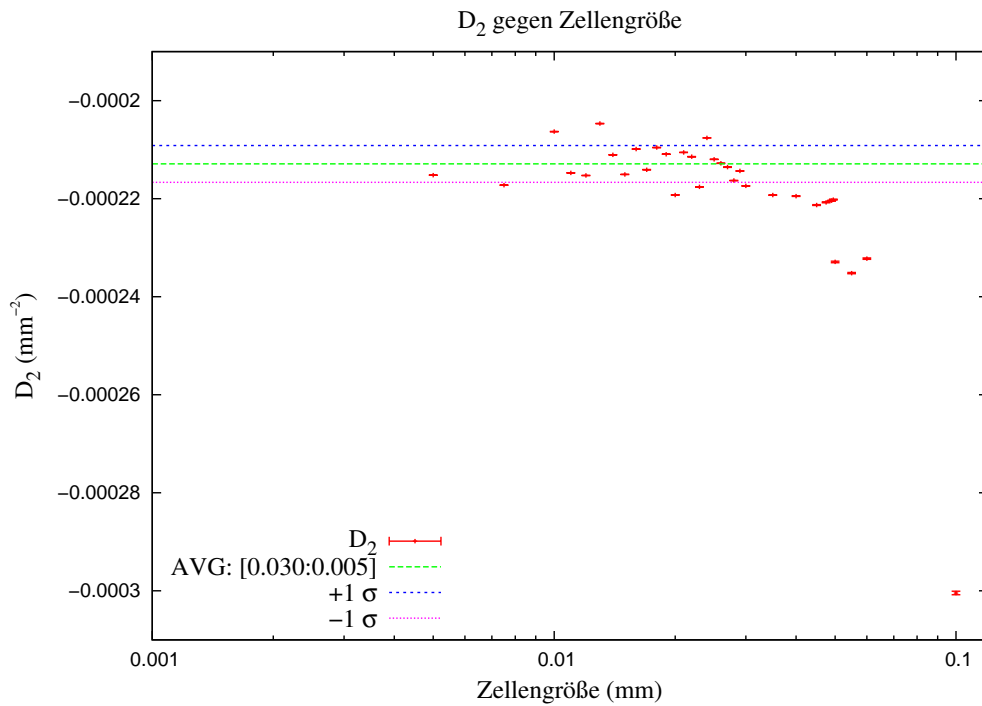


Abbildung A.7: In dieser Abbildung sind die D_2 -Koeffizienten in Abhängigkeit der Auflösung im Falleninnenraum dargestellt; $D_2 = -2.129(38) \cdot 10^{-4}$. Der Durchschnitt wurde über die D_2 -Werte im Auflösungsbereich von $5 - 30 \mu\text{m}$ gebildet.

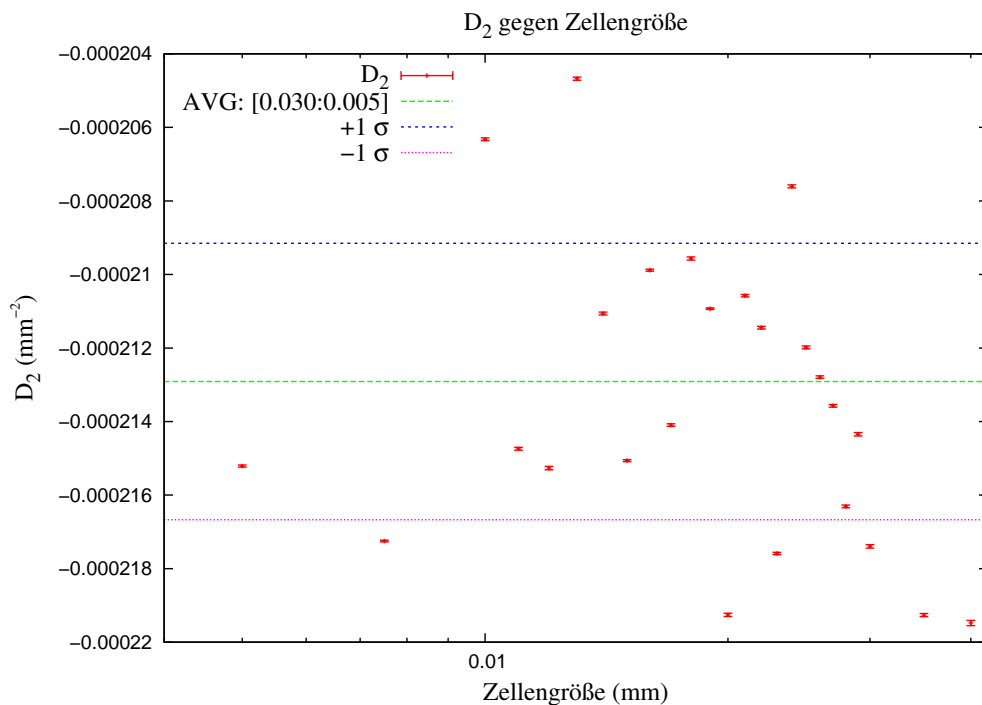


Abbildung A.8: Diese Abbildung zeigt eine Vergrößerung von Abbildung A.7.

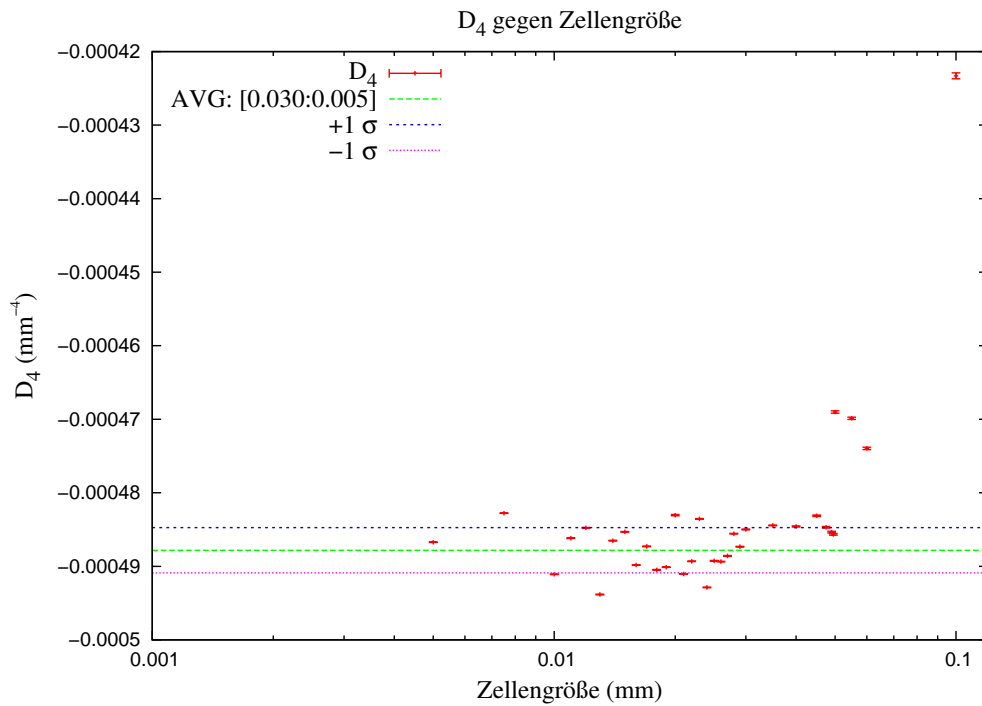


Abbildung A.9: In dieser Abbildung sind die D_4 -Koeffizienten in Abhängigkeit der Auflösung im Falleninnenraum dargestellt; $D_4 = -4.878(37) \cdot 10^{-4}$. Der Durchschnitt wurde über die D_4 -Werte im Auflösungsbereich von 5 – 30 μm gebildet.

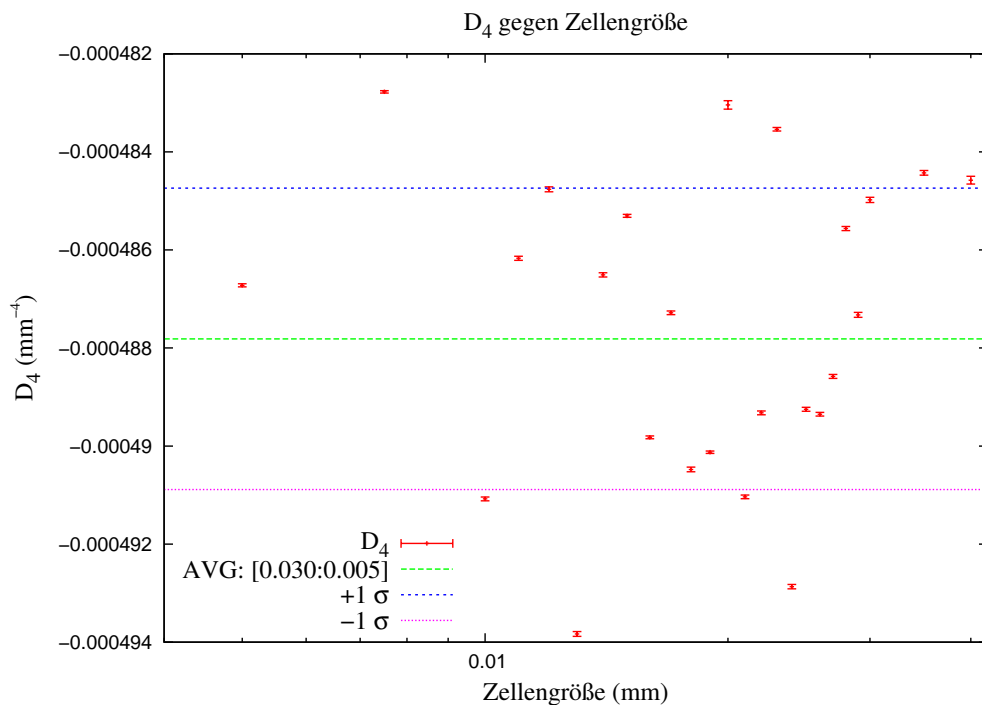


Abbildung A.10: Diese Abbildung zeigt eine Vergrößerung von Abbildung A.9.

A.3 Bereichsstudie

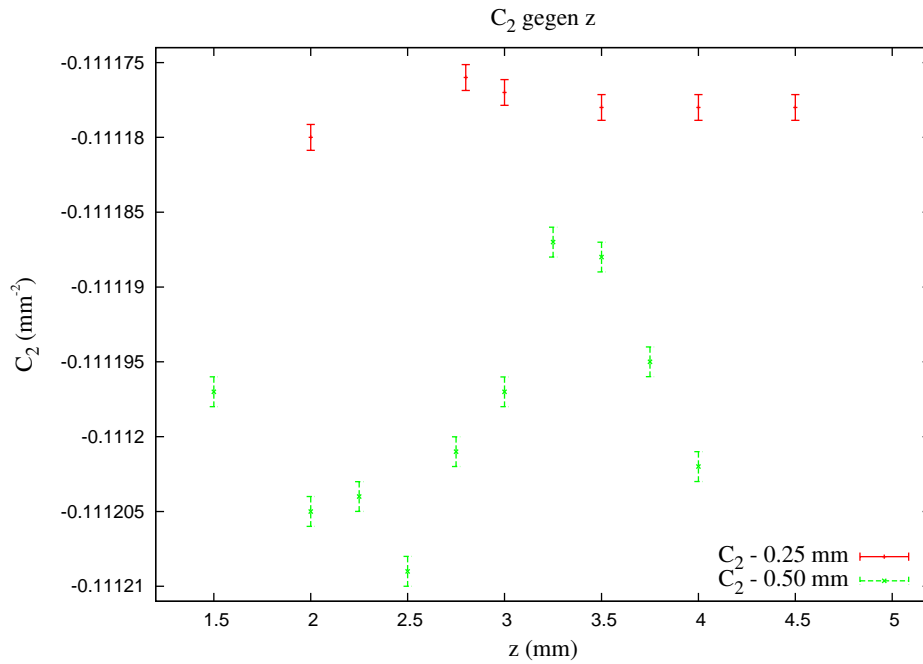


Abbildung A.11: Die Abbildung zeigt C_2 in Abhängigkeit der Größe des Zylinders, in welchem eine Auflösung von $20\ \mu\text{m}$ gewählt worden ist. Dabei sind die Punkte in rot bei einem Abstand der Zwischenebenen von $0.25\ \text{mm}$ und die Punkte in grün bei einem Abstand der Zwischenebenen von $0.50\ \text{mm}$ berechnet worden.

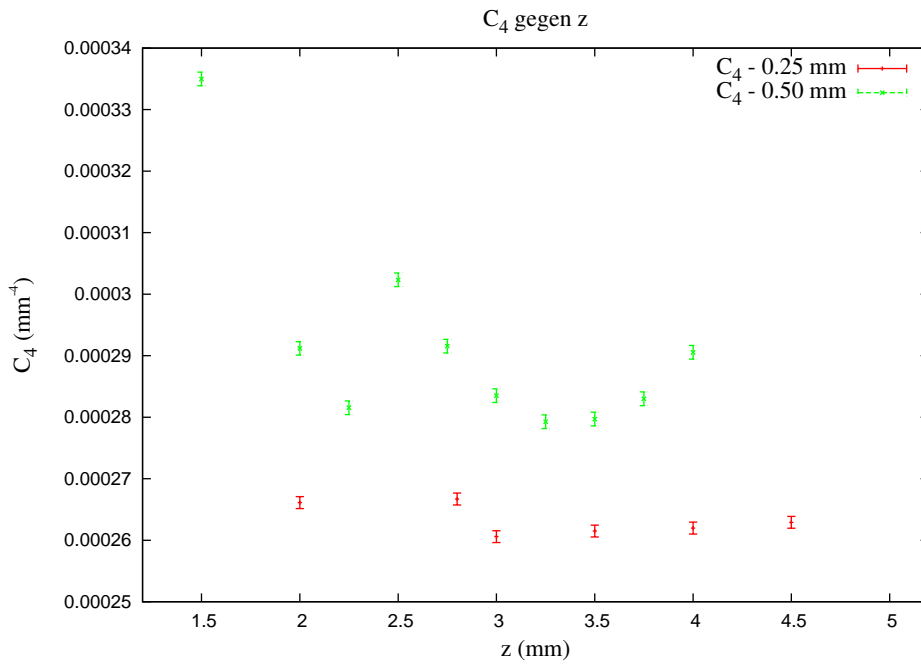


Abbildung A.12: Die Abbildung zeigt C_4 in Abhängigkeit der Größe des Zylinders, in welchem eine Auflösung von $20\ \mu\text{m}$ gewählt worden ist. Dabei sind die Punkte in rot bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.25 mm und die Punkte in grün bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.50 mm berechnet worden.

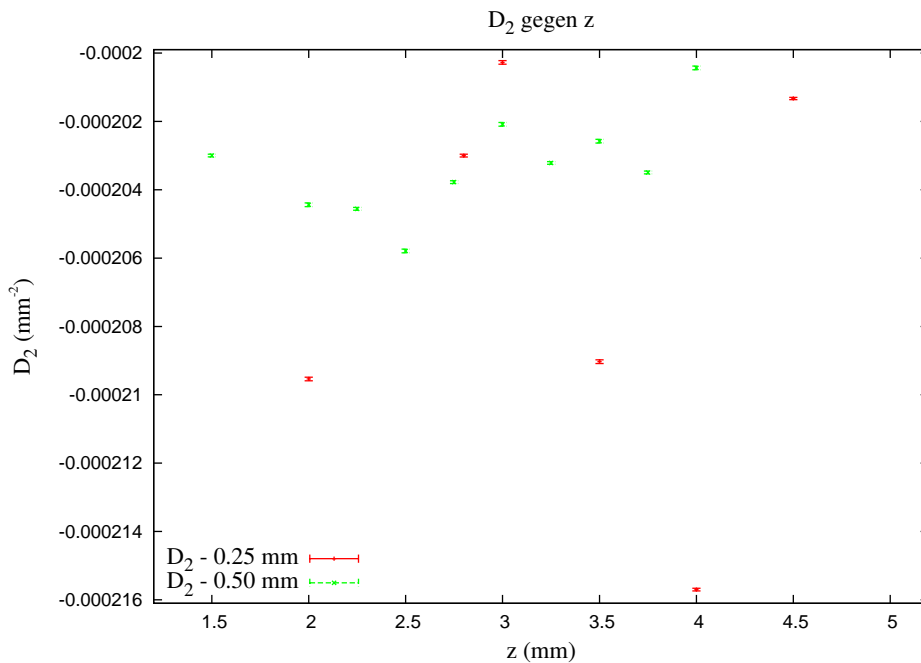


Abbildung A.13: Die Abbildung zeigt D_2 in Abhängigkeit der Größe des Zylinders, in welchem eine Auflösung von $20\ \mu\text{m}$ gewählt worden ist. Dabei sind die Punkte in rot bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.25 mm und die Punkte in grün bei einem Abstand der Zwischenebenen von 0.50 mm berechnet worden.

A.4 C- und D-Koeffizienten

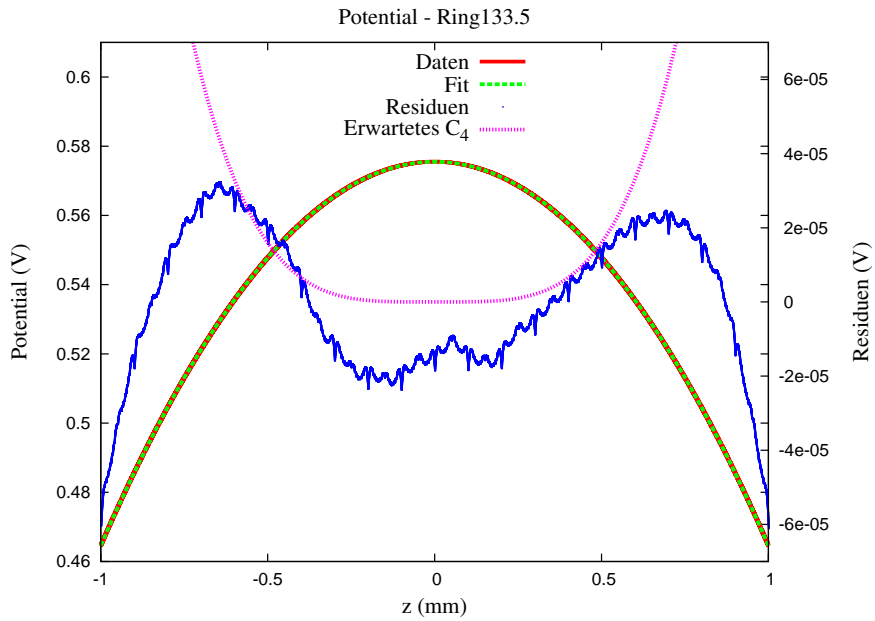


Abbildung A.14: Diese Abbildung zeigt das Potenzial (Daten - rot), den Fit der Daten mittels eines Polynoms 2. Grades über einen Bereich von ± 1.0 mm mit der Skala auf der linken y -Achse an. Die Residuen und das vorhergesagte C_4 werden mit der rechten y -Achse skaliert. Die Simulation wurde bei einer Auflösung von $5 \mu\text{m}$ durchgeführt. Das vorhergesagte C_4 ergibt sich aus dem jeweiligen D_4 , welches bei einer Spannung von 47.22 V an den Guards und 89.76 V am Ring kompensiert werden muss.

B Tabellarische Übersicht über die simulierten Parameter

B.1 C- und D-Koeffizienten

Koeffizient	Fitbereich		Abweichungen in % von $z_{\pm 0.5 \text{ mm}}$ zu $z_{\pm 1 \text{ mm}}$
	$z = \pm 1.0 \text{ mm}$	$z = \pm 0.5 \text{ mm}$	
D_4 (mm^{-4})	$-4.6607(35) \cdot 10^{-4}$	$-4.982(62) \cdot 10^{-4}$	6.8
D_2 (mm^{-2})	$-2.0111(59) \cdot 10^{-4}$	$-1.877(19) \cdot 10^{-4}$	7.1
C_4 (mm^{-4})	$2.836(42) \cdot 10^{-4}$	$6.6(2.6) \cdot 10^{-4}$	132
C_2 (mm^{-2})	$-1.111945(38) \cdot 10^{-1}$	$-1.11280(47) \cdot 10^{-1}$	0.07
\tilde{D}_4	$-1.4255(11) \cdot 10^{-2}$	$-1.523(19) \cdot 10^{-2}$	6.8
\tilde{D}_2	$-1.5727(46) \cdot 10^{-3}$	$-1.468(15) \cdot 10^{-3}$	7.1
\tilde{C}_4	$8.68(15) \cdot 10^{-3}$	$2.02(79) \cdot 10^{-2}$	132
\tilde{C}_2	$8.696015(29) \cdot 10^{-1}$	$8.7027(37) \cdot 10^{-1}$	0.07

Tabelle B.1: Diese Tabelle zeigt die Mittelwerte der Simulationen von D_4 , D_2 , C_4 und C_2 . Der jeweils angegebene Fehler entspricht einer Standardabweichung des Mittelwerts. \tilde{D}_i und \tilde{C}_i sind dimensionslose Koeffizienten, wie sie in "Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap" [9] verwendet werden.

Koeffizient	Fitbereich		Abweichungen in % von $z_{\pm 0.5}$ zu $z_{\pm 1}$
	$z = \pm 1.0 \text{ mm}$	$z = \pm 0.5 \text{ mm}$	
D_3 (mm^{-3})	$-5.827(11) \cdot 10^{-4}$	$-5.6296(70) \cdot 10^{-4}$	3.5
D_1 (mm^{-1})	$2.93611(25) \cdot 10^{-3}$	$2.93115(30) \cdot 10^{-3}$	0.17
C_3 (mm^{-3})	$1.041012(49) \cdot 10^{-2}$	$1.05266(77) \cdot 10^{-2}$	1.1
C_1 (mm^{-1})	$1.663963(20) \cdot 10^{-1}$	$1.663615(27) \cdot 10^{-1}$	0.020
\tilde{D}_3	$-9.0112(17) \cdot 10^{-3}$	$-8.7066(11) \cdot 10^{-3}$	3.5
\tilde{D}_1	$1.16119(10) \cdot 10^{-2}$	$1.15945(12) \cdot 10^{-2}$	0.17
\tilde{C}_3	$1.609891(75) \cdot 10^{-1}$	$1.6279(12) \cdot 10^{-1}$	1.1
\tilde{C}_1	$6.580779(79) \cdot 10^{-1}$	$6.579422(11) \cdot 10^{-1}$	0.020

Tabelle B.2: Diese Tabelle zeigt D_3 , D_1 , C_3 und C_1 . Der jeweils angegebene Fehler entspricht der Standardabweichung des Mittelwerts. Der Mittelwert und dessen Fehler werden aus der oben angegebenen Studie ermittelt.

B.2 Optimale Guardspannung

Fitbereich (mm)	Optimale Guardspannung U_G (V)
± 1.0	52.5(3.5)
± 0.5	120(47)
Experimenteller Wert	47.22(10)

Tabelle B.3: Tabellarische Übersicht über die optimale Guardspannung bei verschiedenen Fitbereichen. Zusätzlich ist der experimentelle Wert eingetragen.

B.3 Guard-Konstante

Fitbereich (mm)	Guard-Konstante
± 1.0	523(9.8)
± 0.5	593(60)

Tabelle B.4: Tabellarische Übersicht über die Guard-Konstante aus verschiedenen Fitbereichen

B.4 Effektiver Elektrodenabstand

	Fitbereich (mm)	\tilde{z}_0 (mm)	κ
Endkappen	± 1.0	3.004880(36)	0.7604297(91)
Endkappen	± 0.5	3.005494(48)	0.760274(12)
Guards	± 1.0	170.29(15)	0.0134183(12)
Guards	± 0.5	170.57(17)	0.0133963(13)

B.5 Verschiebung des Fallenzentrums

	Fitbereich (mm)	Verschiebung ($\mu\text{m}/\text{V}$)
Endkappen	± 1.0	8.32783(30)
Guards	± 1.0	0.146947(14)
Endkappen	± 0.5	8.3203(35)
Guards	± 0.5	0.146599(64)

Tabelle B.5: Verschiebung des Fallenzentrums durch asymmetrisch geladene Guards bzw. Endkappen. Bei der Simulation sind jeweils die oberen Guards bzw. die obere Endkappe um +1 V verschoben.

Danksagung

Die Anfertigung dieser Bachelorarbeit wäre in Kombination mit meinem Hochleistungssport niemals möglich gewesen, wenn nicht Herr Prof. Dr. Klaus Blaum mir erlaubt hätte meine Arbeitszeiten und Arbeitsorte selbstständig und eigenverantwortlich zu gestalten, dafür möchte ich mich sehr bedanken. Nur durch dieses Entgegenkommen konnte ich neben der Bachelorarbeit bis zu neun Mal pro Woche trainieren oder jedes Wochenende ins Ausland zu Wettkämpfen verreisen und so trotzdem noch wissenschaftlich arbeiten.

Auch möchte ich auch meinem Tutor Dipl.-Phys. Martin Höcker sehr herzlich danken, der mir bei Fragen immer einen passenden Rat geben konnte und mir kontinuierlich Rückmeldungen zu meiner Arbeit gegeben hat, so dass es mir nie an guter Betreuung gemangelt hat. Allgemein gilt mein herzlicher Dank der gesamten Gruppe von THE-Trap, denn die sehr freundschaftliche und kollegiale Atmosphäre hat das Arbeiten sehr angenehm gestaltet und alle haben mir bei meinen Problemen stets mit Engagement und Geduld weitergeholfen.

Erklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den 18.08.2011,