Kapitel 1

Einleitung

Einführung

Die Erforschung kernphysikalischer Vorgänge ist elementar abhängig von der Bereitstellung und Weiterentwicklung immer leistungsfähigerer Teilchenbeschleuniger. Über dieses klassische Anwendungsgebiet hinaus finden Teilchenbeschleuniger mittlerweile auch in anderen Bereichen wie z. B. bei der Tumortherapie oder bei der Mikroskopie von Halbleiterbauelementen (Ion Beam Induced Charge Microscopy) ihre Anwendung. Für die auf hohe Energien beschleunigten Teilchen kommen je nach Verwendungszweck Elektronen, Positronen, Protonen oder Ionen zum Einsatz. Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf den Ionenbeschleunigern, deren Teilchen eine Endgeschwindigkeit signifikant kleiner als Lichtgeschwindigkeit aufweisen. Ein solcher Ionenbeschleuniger findet sich z. B. an der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI).

Bei der Synthese und Analyse der Bauelemente eines Beschleunigers muss immer mehr auf numerische Methoden zurückgegriffen werden, da analytische Hilfsmittel meist an ihre Grenzen stoßen bzw. nur noch grobe Näherungen darstellen und ein Prototypenbau zu zeit- und kostenintensiv wäre. Für Teilchenstrahlen, die nahezu Lichtgeschwindigkeit besitzen, bestehen bereits einige effiziente Simulationsmöglichkeiten, z. B. mit Hilfe der Methode der Finiten Differenzen oder der Methode der Finiten Integration. Für die Simulation *starrer Teilchenstrahlen* geringerer Geschwindigkeit müssen diese Methoden jedoch erweitert werden. Als *starr* kann ein Teilchenstrahl angesehen werden unter der Annahme, dass die bewegten geladenen Teilchen ihre Eigenschaften – wie z. B. Geschwindigkeit und transversale Position – über die zu simulierende Struktur hinweg nicht ändern.

Das Besondere für Teilchen, die sich mit einer Geschwindigkeit kleiner als Lichtgeschwindigkeit fortbewegen, ist, dass sie in longitudinaler Richtung ein unendlich ausgedehntes Eigenfeld aufweisen. Dies bedeutet, dass in einem beliebigen Volumen bereits ein von einem Test-Teilchen hervorgerufenes elektromagnetisches Feld existiert noch bevor das Teilchen in dieses Volumen eintritt. Im Gegensatz dazu ist das elektromagnetische Feld eines Teilchens mit Lichtgeschwindigkeit in der Transversalebene des Teilchens konzentriert. Somit ruft ein solches Teilchen im betrachteten Volumen erst bei seinem Eintritt ein elektromagnetisches Feld hervor. Dieser Unterschied ist der Grund für den oben erwähnten Mangel an Simulationsmöglichkeiten für Teilchenstrahlen niedriger Geschwindigkeit. Ziel dieser Arbeit ist es daher, ein numerisches Hilfsmittel für die Lösung solcher Problemstellungen zu entwickeln.

Die Grundlage für die numerische Simulation bildet die von WEILAND 1977 [47] eingeführte Methode der Finiten Integration. Dabei werden die analytischen Maxwellgleichungen in ein diskretes Analogon, die Gitter-Maxwellgleichungen, überführt. Ebenso wie die analytischen Maxwellgleichungen die Basis für die kontinuierliche Elektrodynamik bilden, können prinzipiell mit den Gitter-Maxwellgleichungen nahezu alle elektrodynamischen Vorgänge im Diskreten beschrieben werden. Seit der Einführung der Methode (1977) sind immer mehr Details und Sonderfälle eingearbeitet worden. Außerdem ist beachtenswert, dass die Methode wichtige Erhaltungssätze – wie Energie- und Ladungserhaltung – im diskreten Raum bewahrt.

In dieser Arbeit wird die Erweiterung der Methode der Finiten Integration für starre Teilchenstrahlen beliebiger Geschwindigkeiten vorgestellt. Dabei müssen einerseits die im Rechengebiet befindlichen Teilchen modelliert werden, andererseits muss aber auch das Feld der sich auf das Rechengebiet zubewegenden Teilchen geeignet berücksichtigt werden. Das auf dieser Basis entwickelte Verfahren wird sowohl im Zeitbereich als auch im Frequenzbereich vorgestellt. Anschließend werden mit Hilfe des neuen Verfahrens Beschleunigerelemente der GSI simuliert.

Übersicht

Im nachfolgenden Kapitel werden zunächst kurz die Grundlagen der Methode der Finiten Integration erläutert. Die Gewichtung der Erklärung ist vor allem davon abhängig, welche Aspekte der Methode der Finiten Integration für das in der Arbeit entwickelte Verfahren notwendig sind.

Das Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Lorentz-Transformation, die durch die ganze Arbeit hinweg eine zentrale Rolle spielt, weil aufgrund der hohen Geschwindigkeit eine zwingende Notwendigkeit besteht, relativistisch zu rechnen. Damit die Eigenschaften der Methode der Finiten Integration erhalten bleiben, muss ebenso die Lorentz-Transformation auf den diskreten Raum übertragen werden.

Im darauf folgenden Kapitel wird auf die Erweiterung der Methode für starre Teilchenstrahlen eingegangen. Dabei wird zunächst die Modellierung der Teilchen im Rechengebiet beschrieben. Anschließend werden die am Rand durchzuführenden Modifikationen erläutert. Durch diese Modifikationen werden gleichzeitig die noch nicht im Rechengebiet befindlichen Teilchen berücksichtigt sowie die Teilchen divergenzerhaltend in das Rechengebiet eingebracht und aus diesem absorbiert. Die dafür benötigten elektromagnetischen Felder müssen mit einem geeigneten Verfahren gewonnen werden. Ein solches Verfahren wird zunächst im Zeitbereich und anschließend im Frequenzbereich vorgestellt.

In Kapitel 5 wird das in der Arbeit entwickelte Verfahren validiert und auf verschiedene Strukturen der Beschleunigerphysik angewandt. Dabei werden zunächst verschiedene Elektrodenstrukturen, einfache Kavitäten und schließlich ein CH-Resonator simuliert. Die Geschwindigkeit der Teilchen variiert in den verschiedenen Anwendungsbeispielen von $v = 0.1c$ bis zu $v = 0.99c$.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick.

Kapitel 2

Methode der Finiten Integration

2.1 Analytische Feldbeschreibung

2.1.1 Maxwellsche Gleichungen

Die Basis der klassischen Feldtheorie bilden die 1864 von James Clerk Maxwell [1] veröffentlichten *Maxwellschen Gleichungen*. Diese beschreiben elektrodynamische Vorgänge im Makroskopischen. Die Gleichungen haben zwar axiomatischen Charakter sind jedoch durch vielfache Experimente und Anwendungen hinreichend manifestiert.

Die Vektorfelder der elektrischen Feldstärke $\vec{E}$[1], der elektrischen Flussdichte $\vec{D}$, der magnetischen Feldstärke $\vec{H}$, der magnetischen Flussdichte $\vec{B}$ und der elektrischen Stromdichte $\vec{J}$ sind miteinander und mit der Skalarfunktion der Raumladungsdichte ρ wie folgt verknüpft:

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{s} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{A} \vec{B}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} \qquad \forall\, A \subset \mathrm{I\!R}^3, t \in \mathrm{I\!R}, \tag{2.1.1a}$$

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{s} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{A} \vec{D}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} + \int_{A} \vec{J}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} \qquad \forall\, A \subset \mathrm{I\!R}^3, t \in \mathrm{I\!R}, \tag{2.1.1b}$$

$$\oint_{\partial V} \vec{D}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} = \int_{V} \rho(\vec{r},t)\, dV \qquad \forall\, V \subseteq \mathrm{I\!R}^3, t \in \mathrm{I\!R}, \tag{2.1.1c}$$

$$\oint_{\partial V} \vec{B}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} = 0 \qquad \forall\, V \subseteq \mathrm{I\!R}^3, t \in \mathrm{I\!R}. \tag{2.1.1d}$$

Gleichung (2.1.1a) stellt das Induktionsgesetz dar, und Gleichung (2.1.1b) beschreibt das verallgemeinerte Durchflutungsgesetz. Die in Gleichung (2.1.1d) ausgedrückte

[1] Die in der Arbeit verwendeten Formelzeichen und Symbole sind im Anhang aufgelistet.

Nichtexistenz magnetischer Ladungen ist bisher nicht bewiesen, aber allgemein anerkannt. Allerdings lässt sich zeigen, dass unter der Voraussetzung eines für *alle* Teilchen gleichen Verhältnisses von elektrischer zu magnetischer Ladung die Existenz magnetischer Ladungen nicht den Maxwellschen Gleichungen (2.1.1) widerspricht [2].

Beachtenswert ist der Fall bewegter Integrationsflächen[2] A. Die in den Gleichungen (2.1.1a) und (2.1.1b) auf der linken Seite auftretenden Größen befinden sich dann nämlich im zur Integrationsfläche mitbewegten System, wohingegen die auf der rechten Seite auftretenden Größen im Ruhesystem der anregenden Felder existieren. Geht man zunächst von einer Geschwindigkeit v aus, die klein gegen die Lichtgeschwindigkeit c ist, und löst die totale Zeitableitung auf, so ergibt sich für diesen Fall Gleichung (2.1.1a) zu

$$\oint\limits_{\partial A} \left(\vec{E}' - (\vec{v} \times \vec{B})\right) \cdot \mathrm{d}\vec{s} = -\int\limits_{A} \frac{\partial}{\partial t}\vec{B} \cdot \mathrm{d}\vec{A}, \tag{2.1.2}$$

wobei $\vec{E}'$ das elektrische Feld im zur Integrationsfläche mitbewegten System und $\vec{B}$ die magnetische Flussdichte im Ruhesystem der Anregung ist [2]. Die analoge Behandlung von Gleichung (2.1.1b) – unter der Annahme $\vec{J} = 0$ – führt auf:

$$\oint\limits_{\partial A} \left(\vec{H}' + (\vec{v} \times \vec{D})\right) \cdot \mathrm{d}\vec{s} = \int\limits_{A} \frac{\partial}{\partial t}\vec{D} \cdot \mathrm{d}\vec{A} + \int\limits_{A} \rho\, \vec{v} \cdot \mathrm{d}\vec{A}, \tag{2.1.3}$$

wobei sich ebenfalls die gestrichenen Größen im mitbewegten System der Integrationsfläche befinden und die ungestrichenen im Ruhesystem der anregenden Felder. Gleichzeitig hat man damit Transformationsvorschriften für die elektromagnetischen Größen gefunden, nämlich

$$\vec{E}' = \vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B}) \quad \text{und} \tag{2.1.4a}$$

$$\vec{B}' = \vec{B} - \frac{1}{c^2}(\vec{v} \times \vec{E})\,, \tag{2.1.4b}$$

wobei in (2.1.4b) eine homogene, isotrope Materialverteilung angenommen wurde. Die Gleichungen (2.1.4) beschreiben eine Galilei-Transformation der Felder. Für eine relativistische Betrachtung müssen die Felder entsprechend Kapitel 3.1 mit Hilfe der Lorentz-Transformation behandelt werden (vgl. hierzu [2, 4]). Die Galilei-Transformation geht aus der Lorentz-Transformation über die Näherung $\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2} \rightarrow 1$ hervor.

Aus den Gleichungen (2.1.2), (2.1.3) und (2.1.4) kann man erkennen, dass die Maxwellgleichungen für den Fall, dass alle Größen im selben System definiert sind, wie

[2]Der Fall bewegter Integrationsflächen wird in der Literatur oft nur für das Induktionsgesetz diskutiert [2, 3]. Die Überlegungen sind aber analog gültig für das Durchflutungsgesetz. Es fehlt hier lediglich ein praxisrelevantes Beispiel, was bei der Anwendung des Induktionsgesetzes durch eine in eine bewegte Leiterschleife induzierte Spannung gegeben ist.

folgt geschrieben werden:

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{s} \quad = \quad -\int_A \frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{A} \tag{2.1.5}$$

$$\oint_{\partial A} \vec{H}(\vec{r},t) \cdot \mathrm{d}\vec{s} \quad = \quad \int_A \left(\frac{\partial}{\partial t}\vec{D}(\vec{r},t) + \vec{J}\right) \cdot \mathrm{d}\vec{A} \tag{2.1.6}$$

Die Gleichungen (2.1.5) und (2.1.6) gelten somit erst recht für ruhende Integrationsflächen, da dort eine Definition unterschiedlicher Bezugssysteme nicht vonnöten ist. Für den üblichen Fall ruhender Medien, sind die Gleichungen (2.1.5) und (2.1.6) ebenso gültig, wenn keine Notwendigkeit besteht, die elektromagnetischen Felder transformieren zu müssen. Eine solche Notwendigkeit besteht z. B. im in der Arbeit vorliegenden Fall bewegter Teilchen im elektromagnetischen Feld.

Die im Durchflutungsgesetz (2.1.1b) auftretende elektrische Stromdichte setzt sich aus der Leitungsstromdichte $\vec{J}_L(\vec{r},t)$, der Konvektionsstromdichte $\vec{J}_K(\vec{r},t)$ und der eingeprägten Stromdichte $\vec{J}_E(\vec{r},t)$ zusammen

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \vec{J}_L(\vec{r},t) + \vec{J}_K(\vec{r},t) + \vec{J}_E(\vec{r},t)\,. \tag{2.1.7}$$

Die Konvektionsstromdichte beschreibt freie, bewegte geladene Teilchen, die durch die Lorentzkraft beschleunigt werden können. Es gilt:

$$\vec{J}_K(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)\ \vec{v}(\vec{r},t)\,. \tag{2.1.8}$$

Mit Hilfe der Sätze von Gauß und Stokes lassen sich die Gleichungen (2.1.5), (2.1.6), (2.1.1c) und (2.1.1d) in differentieller Form herleiten:

$$\mathrm{rot}\,\vec{E}(\vec{r},t) \;=\; -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(\vec{r},t), \tag{2.1.9a}$$

$$\mathrm{rot}\,\vec{H}(\vec{r},t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t}\vec{D}(\vec{r},t) + \vec{J}(\vec{r},t), \tag{2.1.9b}$$

$$\mathrm{div}\,\vec{D}(\vec{r},t) \;=\; \rho(\vec{r},t), \tag{2.1.9c}$$

$$\mathrm{div}\,\vec{B}(\vec{r},t) \;=\; 0. \tag{2.1.9d}$$

Die Maxwellschen Gleichungen können außerdem in einer symmetrischen Form geschrieben werden:

$$\mathrm{rot}\,\vec{E}(\vec{r},t) \;=\; -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(\vec{r},t) - \vec{M}_V(\vec{r},t), \tag{2.1.10a}$$

$$\mathrm{rot}\,\vec{H}(\vec{r},t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t}\vec{D}(\vec{r},t) + \vec{J}(\vec{r},t), \tag{2.1.10b}$$

$$\mathrm{div}\,\vec{D}(\vec{r},t) \;=\; \rho(\vec{r},t), \tag{2.1.10c}$$

$$\mathrm{div}\,\vec{B}(\vec{r},t) \;=\; \rho_m(\vec{r},t). \tag{2.1.10d}$$

Die magnetische Volumenstromdichte $\vec{M}_V(\vec{r},t)$ und die magnetische Raumladungsdichte $\rho_m(\vec{r},t)$ existieren zwar nicht, aber ihre formale Einführung kann z. B. Antennenberechnungen oder Randbehandlungen vereinfachen.

2.1.2 Materialgleichungen

Zusätzlich zu den Maxwellschen Gleichungen, die allgemein gültig sind, besteht über die Materialrelationen eine Verknüpfung der Feldgrößen. Diese sind wie folgt gegeben:

$$
\begin{aligned}
\vec{D}(\vec{r},t) &= \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r},t) + \vec{P}(\vec{E}(\vec{r},t))\,, && (2.1.11)\\
\vec{B}(\vec{r},t) &= \mu_0 \left(\vec{H}(\vec{r},t) + \vec{M}(\vec{H}(\vec{r},t))\right)\,, && (2.1.12)\\
\vec{J}_L(\vec{r},t) &= \vec{J}_L(\vec{E}(\vec{r},t))\,. && (2.1.13)
\end{aligned}
$$

Im Allgemeinen weisen die Polarisation $\vec{P}$, die Magnetisierung $\vec{M}$ und die Leitungsstromdichte $\vec{J}_L$ einen nichtlinearen Zusammenhang von der jeweiligen Feldstärke auf. Durch die Magnetisierung $\vec{M}$ werden unter anderem Permanentmagnete in der Feldbetrachtung berücksichtigt. In diesem Falle ist die Magnetisierung auch annähernd konstant und damit unabhängig von der magnetischen Feldstärke. Das elektrische Analogon zu Permanentmagneten sind Elektrete, welche durch die Polarisation $\vec{P}$ repräsentiert werden.

Für lineare, frequenzunabhängige Materialien vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$
\begin{aligned}
\vec{D}(\vec{r},t) &= \overleftrightarrow{\varepsilon}(\vec{r})\vec{E}(\vec{r},t)\,, && (2.1.14)\\
\vec{B}(\vec{r},t) &= \overleftrightarrow{\mu}(\vec{r})\vec{H}(\vec{r},t)\,, && (2.1.15)\\
\vec{J}_L(\vec{r},t) &= \overleftrightarrow{\kappa}(\vec{r})\vec{E}(\vec{r},t)\,. && (2.1.16)
\end{aligned}
$$

Im Falle isotroper Medien können die Tensoren durch skalare Größen ersetzt werden.

2.1.3 Abgeleitete Gleichungen

Aus den Maxwellschen Gleichungen kann man weitere Gleichungen für unterschiedliche Anwendungen ableiten. Die für die vorliegende Arbeit wichtigsten abgeleiteten Gleichungen sollen hier kurz erwähnt werden.

Zunächst erhält man durch die Anwendung des Divergenzoperators auf Gleichung (2.1.9b):

$$\underbrace{\operatorname{div}\operatorname{rot}\vec{H}}_{=0} = \operatorname{div}\frac{\partial}{\partial t}\vec{D} + \operatorname{div}\vec{J}\,. \qquad (2.1.17)$$

Mit $\operatorname{div}\vec{D} = \rho$ folgt daraus:

$$\operatorname{div}\vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}\,. \qquad (2.1.18)$$

Gleichung (2.1.18) ist die Kontinuitätsgleichung, welche eine Verallgemeinerung der Kirchhoffschen Knotenregel, die für den Fall $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ gilt, darstellt. Für den Fall, dass die Summe der einem betrachteten Volumen zu- und abfließenden Ströme ungleich Null ist, wird anhand der Gleichung offensichtlich, dass sich im Volumen Ladungen anhäufen.

Eine zweite Gleichung, der in der Arbeit besondere Bedeutung zukommt, ist die Poissongleichung der Elektrostatik. Diese ergibt sich aus dem Ansatz $\vec{E} = -\operatorname{grad}\varphi$, der Gleichung (2.1.1a) im statischen Fall

$$\operatorname{rot}\vec{E} = -\underbrace{\operatorname{rot}\operatorname{grad}}_{=0}\varphi = 0 \tag{2.1.19}$$

automatisch erfüllt. Setzt man dies in (2.1.1c) ein, so ergibt sich für konstante ε

$$\triangle\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon}\,, \tag{2.1.20}$$

aus deren Lösung man zunächst das elektrostatische Potential φ und anschließend das elektrostatische Feld erhält.

2.2 Diskrete Feldbeschreibung

Die Methode der Finiten Integration (engl.:*Finite Integration Technique*, FIT) nach Weiland [47, 59] ist ein konsistentes Verfahren zur Lösung elektrodynamischer Probleme im diskreten Raum. Das Verfahren findet vielfache Anwendung in der Elektrotechnik und der Beschleunigerphysik, da man bei der Analyse oder dem Design von Strukturen immer mehr auf die Hilfe numerischer Simulationen angewiesen ist. Wichtige physikalische Erhaltungssätze – wie z. B. Energie- und Ladungserhaltung – werden in der FIT bewahrt. Das vorliegende Kapitel beschreibt kurz die Grundlagen der Methode der Finiten Integration. Ausführlichere Darstellungen des Themas finden sich in [60, 63, 65, 69].

2.2.1 Gitter-Maxwell-Gleichungen

Die Methode der Finiten Integration überführt die im Kontinuierlichen geltenden Maxwell-Gleichungen in die dazu äquivalenten Gitter-Maxwell-Gleichungen des diskreten Raumes. Hierzu muss zunächst ein zu betrachtendes Volumen diskretisiert werden. Dies geschieht dadurch, dass das Volumen in endlich viele Teilvolumina zerlegt wird. In der vorliegenden Arbeit sind die Teilvolumina quaderförmig entsprechend Abbildung 2.1. Grundsätzlich ist die Methode der Finiten Integration jedoch nicht auf die hier beschriebenen kartesischen Gittersysteme beschränkt. Das Verfahren lässt sich auf eine Vielzahl weiterer Gittersysteme übertragen, wie z. B. kreiszylindrische [58], kugelsymmetrische und auch nicht-orthogonale Gitter [63].

Jedes Teilvolumen wird einem Punkt zugeordnet, der analog zur kontinuierlichen Ortsbeschreibung mittels x, y, z durch drei diskrete Indizes i, j, k bestimmt ist. Diese drei Indizes können mit Hilfe einer kanonischen Indizierung

$$n = 1 + (i-1)\cdot M_x + (j-1)\cdot M_y + (k-1)\cdot M_z \tag{2.2.1}$$

einem Index eindeutig zugewiesen werden. Hierbei gilt $M_x = 1$, $M_y = N_x$ und $M_z = N_x \cdot N_y$, wobei N_x bzw. N_y die Gesamtzahlen der Gitterpunkte in x bzw. y-Richtung sind. Zu jedem Punkt $P(n) = P(i, j, k)$ gehören wiederum drei Facetten