

# Protokoll: Versuch

Alexander Jankowski, Philipp Hacker

5. Dezember 2015

Betreuer:

Versuchsdatum:

Note:

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Speicherung, Stabilität und Dynamik . . . . .	3
2.2	Arten von Ionenfallen . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Durchführung</b>	<b>8</b>
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>9</b>
4.1	Variation der Speicherzeit . . . . .	9
4.2	Frequenzvariation der primären Anregung . . . . .	9
4.3	Untersuchung der Eigenfrequenzen von ionisiertem Stickstoff . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Anhang</b>	<b>12</b>

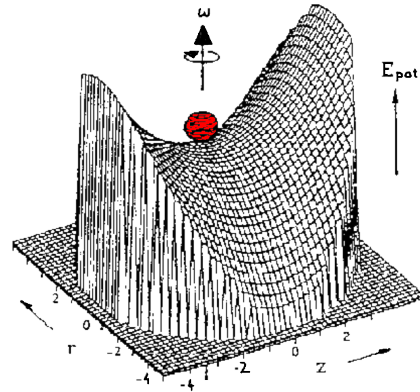
## **1 Motivation**

## 2 Physikalische Grundlagen

Bei einer sogenannten *Paul-Falle* handelt es sich um eine zylindersymmetrische Ionenfalle, welche über komplexe elektrische Wechselfelder in ihrem Inneren den Einfang und die Speicherung von geladenen Partikeln, e.g. Ionen ermöglicht. Die physikalischen Grundlagen und Beispiele folgen in diesem Abschnitt.

### 2.1 Speicherung, Stabilität und Dynamik

Ein Teilchen ist in einem elektrostatischen Potential genau dann gefangen, wenn eine rücktreibende Kraft  $\vec{F} \propto -\vec{r}$  auf diese aus allen Richtungen wirkt. Mit der *Laplace-Gleichung* für ein radial-symmetrisches Problem entlang einer 'Zylinderachse'  $\vec{e}_z$  folgt das harmonische Speicherpotential  $\Phi(x, y, z)$  in Gleichung 1, welches der Form in Abbildung 1 im Allgemeinen entspricht. Man gestaltet den Aufbau günstiger Weise so, dass Oberflächen innerhalb der Falle den Äquipotentialflächen von  $\Phi(x, y, z)$  entsprechen, weswegen für die Endkappen (**links**) und die Ringelektrode selbst (**rechts**) die Geometriegleichungen in Gleichung 2 gelten. Einen schematischen, verallgemeinerten Aufbau zeigt Abbildung 2.



**Abb. 1:** Mit der Frequenz  $\omega$  durch ein hamonisches, elektrostatisches Einfangpotential gyrierendes, geladenes Teilchen. [1]

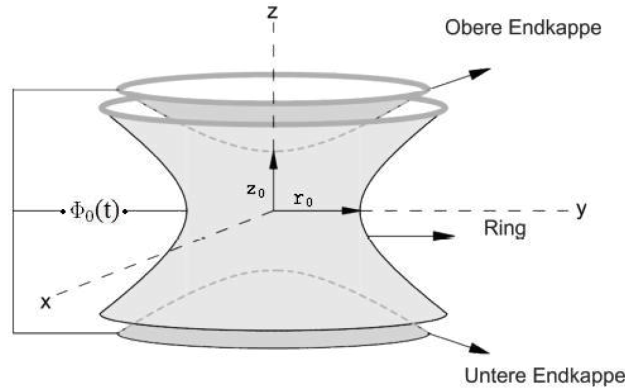
$$\Phi(x, y, z) = \frac{\Phi_0}{\gamma}(x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (1)$$

$$x^2 + y^2 - 2z^2 = -2z_0^2 \quad \text{und} \quad x^2 + y^2 - 2z^2 = r_0^2 \quad (2)$$

Hierbei wird der charakteristische *Fallendimensionsparameter*  $d_0 = \sqrt{\gamma/2} = \sqrt{r_0^2 + 2z_0^2}$  definiert. Um in  $\Phi(x, y, z)$  ein ideales Quadrupolfeld zu erreichen, wählt man  $r_0 = \sqrt{2}z_0$ . Als Konsequenz des Earnshaw-Theorems benötigt es eine Überlagerung von elektrostatischen und wechselnden Feldern in der Paul-Falle, um eine Speicherung im Zentrum zu erreichen [3] [4]. Nimmt man die Gleichspannung  $U_0$  und überlagert sie mit einer Wechselspannung der Amplitude  $V_0$  und Frequenz  $\Omega/2\pi$ , so erhält man das neue Speicherpotential Gleichung 3. Man spricht bei  $V(t)$  auch vom sogenannten Führungsfeld, da dieses maßgeblich die Teilchenbewegungen in der Falle beeinflusst.

$$\Phi(x, y, z) = \frac{U_0 + V_0 \cos(\Omega t)}{2d_0^2}(x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (3)$$

Über die *newtonsche Bewegungsgleichung*  $m\ddot{\vec{x}} = -q\vec{\nabla}\Phi$  und den dimensionslosen Variablen  $\tau$ ,  $a_i$  und  $q_i$  aus Gleichung 4 ergeben sich die *Mathieuschen Differentialgleichungen* für die Bewegung eines mit  $q$  geladenen Teilchens in kanonischer Form in Gleichung 5.



**Abb. 2:** Schematischer Aufbau einer Paul-Falle mit radialsymmetrischer Geometrie. Hyperbolische Formen als Äquipotentialflächen. [2]

$$\tau = \frac{\Omega t}{2} \quad \text{und} \quad q_z = \frac{4qV_0}{md_0^2\Omega^2} = -2q_x = -2q_y \quad (4)$$

$$a_z = -\frac{8qU_0}{md_0^2\Omega^2} = -2a_x = -2a_y$$

$$0 = \frac{d^2 x_i}{d\tau^2} + (a_i - 2q_i \cos(2\tau)) x_i \quad (5)$$

Diese nichtlinearen Differentialgleichung 2. Ordnung haben die Lösungen  $x_i(\tau)$ , welche sich über die Parameter der Anfangsbedingungen  $\gamma_{1,2}$ , eine komplexe Konstante  $\mu_i$  und eine  $\pi$ -periodische Funktion  $\phi$  als Linearkombinationen zweier anderer Lösungen schreiben lassen (Gleichung 6).

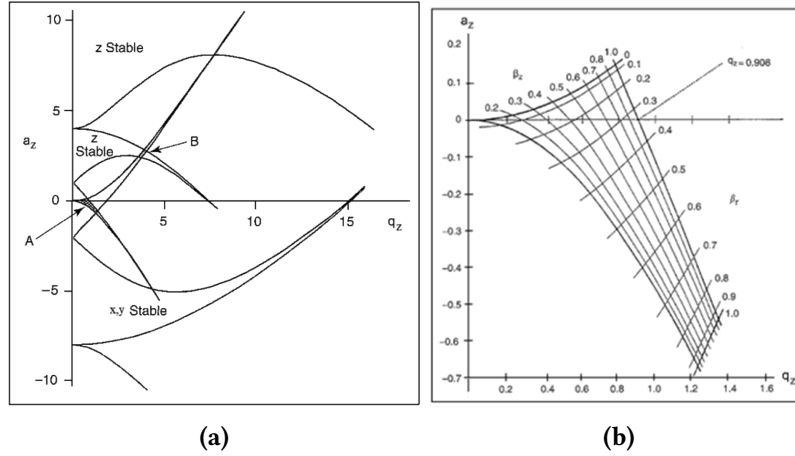
Schreibt man  $\mu_i = i\beta_i$  um, so kann man einen Kettenbruch nach [5] und [6] wie in Gleichung 7 annähern.

$$x_i(\tau) = \gamma_1 \exp(\mu_i \tau) \phi(\tau) + \gamma_2 \exp(-\mu_i \tau) \phi(-\tau) \quad (6)$$

$$\beta_i = a_i - \frac{(a_i - 1)q_i^2}{2(a_i - 1)^2 - q_i^2} - \frac{(5a_i + 7)q_i^4}{32(a_i - 1)^3(a_i - 4)} - \frac{(9a_i^2 + 58a_i + 29)q_i^6}{64(a_i - 1)^5(a_i - 4)(a_i - 9)} \quad (7)$$

Kombinationen von  $a_i$  und  $q_i$  sind genau dann eine stabile Speicherung eines Teilchens, wenn sie die DGL's Gleichung 5 und die Näherung Gleichung 7 erfüllen. Zu beachten ist dabei, dass in die benutzten Parameter Masse, Ladung sowie die verschiedenen Größen und Dimensionen der Paul-Falle eingehen. Daher ist es von besonderer Bedeutung, die Stabilitätsbereiche, wie sie in Abbildung 3 für  $a_z, q_z$  gezeigt werden, für die Probesubstanz zu kennen.

**Bewegungresonanzen** Mit der Fourier-Reihenentwicklung in Gleichung 8 der ursprünglichen Gleichung 6 erhält man das Eigenfrequenzspektrum der Teilchenbewegungen in einer Paul-Falle. Die Koeffizienten  $A = \gamma_1 + \gamma_2$ ,  $B = i(\gamma_1 - \gamma_2)$  und die



**Abb. 3:** (a):  $a_z$  gegen  $q_z$ . Überlappungen der Graphen sind Gebiete dreidimensionaler Speicherung. (b): Vergrößerung des Bereiches A aus (a). Eingezeichnet sind die Linien gleichen  $\beta_z$  und  $\beta_r$ .

der Reihen für Sinus und Cosinus  $C_{2n,i}$  hängen von unseren Parametern ( $a_i, q_i$ ) ab und konvergieren für große  $n$  schnell gegen 0, weswegen argumentiert werden kann, dass höhere Eigenfrequenzen weniger stark in das Spektrum einfließen. Beachtet man nur  $n = 0, \pm 1$  so erhält man die Bewegung eines geladenen Partikels in der Paul-Falle in Gleichung 9.

$$x_i(\tau) = A \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n,i} \cos[(2n \pm \beta_i)\tau] + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n,i} \sin[(2n \pm \beta_i)\tau] \quad (8)$$

$$x_i(\tau) = \sqrt{A^2 + B^2} C_{0,i} \left[ 1 - \frac{q_i}{2} \cos(\Omega t) \right] \cos \left[ \frac{\beta_i}{2} \Omega t - \arctan \left( \frac{B}{A} \right) \right] \quad (9)$$

Die erste [...] entspricht der sogenannten *Makrobewegung* mit der Frequenz  $\omega_i = 1/2\beta_i\Omega$ , die zweite [...] der *Mikrobewegung* mit  $\omega = \Omega$ . Die Amplitude letzterer wird dabei maßgeblich durch die der Makrobewegung, also des Führungsfeldes beeinflusst.

Geht man wieder auf die ursprüngliche, vollständige Fourier-Reihe der Bewegung mit dieser Kenntnis ein, so kann man das vollständige Eigenfrequenz-Spektrum der Makroschwingungen eines Teilchens in einer Paul-Falle mit Gleichung 10 beschreiben. Aus dieser Herleitung ergeben sich wichtige experimentelle Möglichkeiten: die resonante Anregung von gespeicherten Teilchen durch Energieaufnahme aus einem, in geeigneter Weise gerichteten, frequentierten zusätzlichen Feldes. Auf diese Weise erhöht sich der Bahnradius der Gyration und ein Teilchen kann austreten bzw. auf die Fallen-Elektroden treffen.

$$\omega_{n,i} = \frac{(2n \pm \beta_i)\Omega}{2} \quad (10)$$

## 2.2 Arten von Ionenfallen

Ionenfallen werden im Allgemeinen nach ihrer Methodik und dem Ziel der Untersuchungen, welche damit durchgeführt werden, kategorisiert. Im folgenden sollen kurz einige (wichtige) Typen vorgestellt werden.

**Quadrupol-Ionenfallen** Bei Quadrupol-Fallen handelt es sich im allgemeinen um Paul-Fallen: die Überlagerung des Potentials von Gleich- und Wechselspannungsanteilen von 4 unterschiedlich angeordneten Elektroden ermöglicht den Einschluss einer ausgewählten  $m/q$ -Spezies innerhalb des Aufbaus. Zusätzlich benutzt man Endkappen, welche der Abstoßung dienen und einen axialen Einschluss sichern.

Eine **planare** 2D-Quadrupol-Falle hat ein zusätzliches Randfeld, um die Ionen einzufangen. Die ebene Anordnung hat eine erhöhte Speicherkapazität im Vergleich zu dem Aufbau dieses Versuch.

Die **lineare** Falle erweitert den vorherigen Fall um eine Dimension entlang der Symmetrie-Achse. Wiederum sorgen Endkappen wieder für den axialen Einfang. Sie wird oft als selektiver Massenfiter benutzt.

Eine **hyperbolische** Paul-Falle liegt in diesem Experiment vor. Den Aufbau sieht man in Abbildung 4. Unter anderem werden solche Geräte als Miniatur-Massenspektrometer und in medizinischen Anwendungen benutzt.

Generell sind die Vorteile dieser Methode die hohe Empfindlichkeit, die kompakte Form und vergleichsweise hohe speicherbare Massen. Nachteilig sind die auftretenden Raum-Ladungs-Effekte bei hohen Strömen in und aus der Falle heraus sowie die nichtlinearen Resonanzen

**Penning-Falle** In der Penning-Falle werden die geladenen Teilchen in einem homogenen Magnetfeld auf Kreisbahnen gezwungen. Das zusätzliche elektrische Quadrupol-Feld verhindert, dass sich die Teilchen entlang der Magnetfeldlinien aus der Falle bewegen. Auf der Fallen-Achse verhindern statisch geladenen Endkappen durch Abstoßung das Austreten der Probesubstanz.

Im Allgemeinen besteht eine Penning-Falle aus einer Ringelektrode und zwei Endkappen, wobei diese das gleiche Potential tragen. Sie ähnelt stark der Paul-Falle.

Ein Vorteil gegenüber dieser ist, dass die Penning-Falle nur statische elektrische und magnetische Felder. Daher gibt es keine Mikrobewegung und damit verbundene Aufheizung durch die dynamischen Felder. Des Weiteren sie bei gleicher Stärke des Einfangs größer gebaut werden. Die damit abnehmende Aufheizung durch Wechselwirkung mit Bildströmen in den Elektroden macht Messungen einfacher.

**Orbitraps** In einer Orbitrap werden Ionen durch die Balancierung von Zentrifugal- und elektrischen Kräften auf Bahnen um eine innere Elektrode gefangen. Diese Trajektorien sind i.A. elliptisch. Zusätzlich pendeln die Teilchen auf der Elektroden-Achse hin und her, weswegen letztendlich ein Helix von einem Partikel beschrieben wird. Die Bewegung in dieser Richtung ist harmonisch und demnach invariant unter der Gyration um die Elektrode. Insbesondere wird diese nur von dem Masse-zu-Ladungsverhältnis

und den Anfangsbedingungen beeinflusst .

Die Signal besteht letztendlich aus dem Bildladungsstrom der eingefangenen Ionen, welcher aufgenommen und in ein Massenspektrum durch die Fourier-Transformation überführt wird.

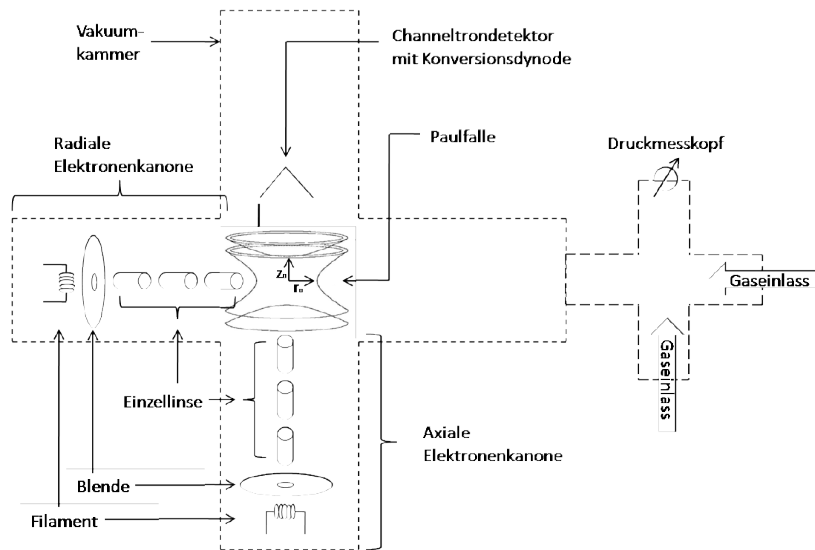


Abb. 4: Schematischer Aufbau des Versuchs. [2]

### 3 Durchführung

Den verwendeten Versuchsaufbau zeigt Abbildung 4. Druckmessköpfe und Nadelventile ermöglichen die Justierung des internen Fallen-Drucks im Bereich von  $10^{-7}$  bar. Zwei Elektronenkanonen ionisieren das einströmende  $N_2$ -Molekül, welches in der Falle gespeichert wird. Dafür sind geeignete Parameter gewählt worden. Der Channeltron-Detektor liefert ein signifikantes Signal selbst bei kleinen Ionenintensitäten.

Das Hauptelement dieses Versuches ist jedoch die Paul-Falle selbst. Sie besteht üblicher Weise aus einer hyperbolischen Falle aus zwei Endkappen und einer Ringelektrode. Hierbei ist die Geometrie dahingehend abgeändert, als dass sich die Ringelektrode aus vier symmetrischen Segmenten zusammensetzt. Die Segmentierung ermöglicht eine Anregung nach dem, in den Grundlagen besprochenen Vorbild der Resonanz mit Dipol- bzw. Quadrupol-Moden. Jedoch sorgt diese Abweichung von der angenommenen totalen Symmetrie für Störungen.

Alle 6 Kupferelektroden sind nach innen gerichtet hyperbolisch geformt und die Abstände zwischen den Segmenten betragen  $\lesssim 1$  mm. Der kleinste Abstand vom Fallenzentrum bis zu den Ringsegmenten beträgt 7 mm, der kleinste Abstand vom Fallenzentrum bis zu den Endkappen 4,8 mm. Die Ringsegmente besitzen zentrale Bohrungen mit einem Durchmesser von 3,3 mm durch welche Manipulationssignale und/oder Strahlen eingelassen werden können.

Die Elektronenkanone wurde mit 0,474 A, einer Blendenspannung von 111,6 V und einem *floating*-Potential von  $-95$  V betrieben. Die Spannung der Ionenoptik betrug 86 V. Der Detektor lag auf  $-2,4$  kV und das Führungsfeld hat bei einer Frequenz von 1,29 MHz ein Peak-to-Peak-Spannung von 203 mV (nach dem Verstärker 240 V). Die Manipulation ist auf 350 kHz voreingestellt.



## 4 Auswertung

### 4.1 Variation der Speicherzeit

Nachdem man sich mit dem Aufbau und der dazugehörigen Steuerung vertraut gemacht hatte, wurde ein Scan für die Speicherzeit in der Falle durchgeführt. Das heißt, dass die Zeit zwischen Ionisation (Elektronenkanone an) und Auswurf-Anregung durch den ersten Manipulationsgenerator variiert wurde. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5 zu sehen. Zu erwarten ist ein exponentieller Zusammenhang nach *Lamber-Beer*, da die kollektive Ionenbewegung und die Lebensdauerverteilung statistisch sind. Eine logarithmische Auftragung liefert die Bestätigung mit Abbildung 6. Die 'Lebensdauer' bzw. die mittlere Verweildauer in der Falle bestimmte sich zu 5,1408 ms.

Eine Einzelmessung bestand jeweils aus 10 'inneren' Iterationen, d.h. Messzyklen, welche in ihrer Intensität aufsummiert wurden. 50 äußere Iteration wiederholen den gesamten Vorgang von einer Wartezeit 0 bis 500  $\mu\text{s}$  in chronologischer Reihenfolge, um eventuelle Zeitabhängige Fehler in der Messung zu eliminieren.

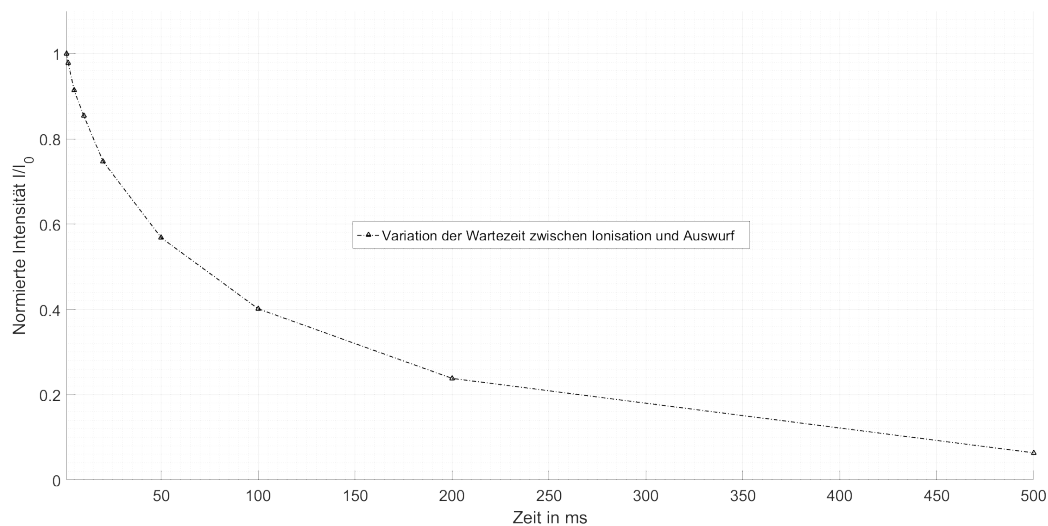


Abb. 5: text

### 4.2 Frequenzvariation der primären Anregung

In dieser Messung wurde die Frequenz der primären Anregung zum Auswurf aus der Falle auf den Detektor verändert. Es wurde das gleiche Mess- und Datenaufnahmeprinzip wie zuvor verwendet. Die Messparameter sind insbesondere die selben. In 10 kHz-Schritten wurde ein Bereich von  $10^5$  Hz bis  $5 \cdot 10^5$  Hz abgerastert. Das Ergebnis zeigt Abbildung 7. Damit sind des weiteren die bereits verwendeten Einstellungen der Manipulation bestätigt, da sich ein deutliches, unter anderem auch globales Maximum der Intensität des Ionenstromes auf den Detektor bei 350 kHz findet. Außerdem sind Nebenmaxima - bei ca. 110 kHz, 140 kHz und 210 kHz - zu sehen, wie sie von den Vorbetrach-

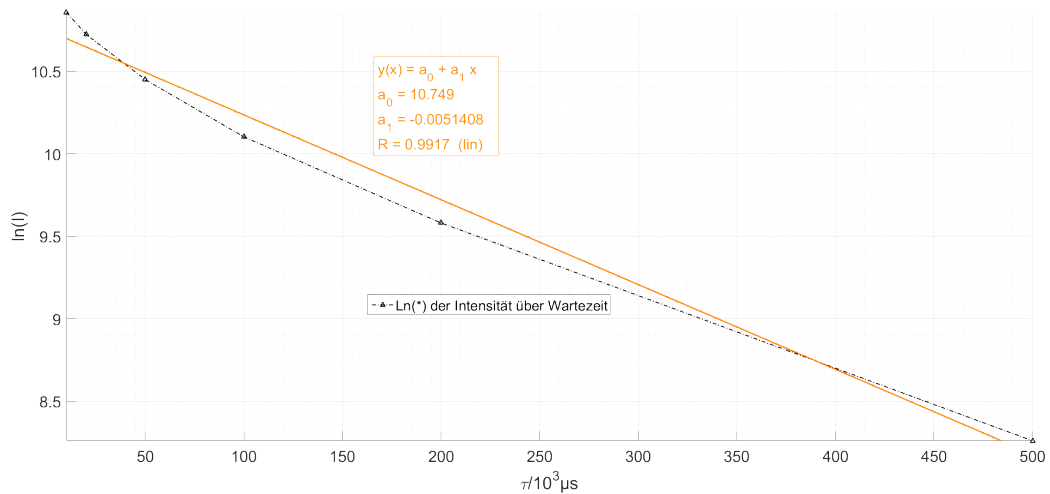


Abb. 6: text

tungen vorhergesagt wurden. Auf die Untersuchung dieser zielt die nächste Messung ab (siehe Unterabschnitt 4.3).

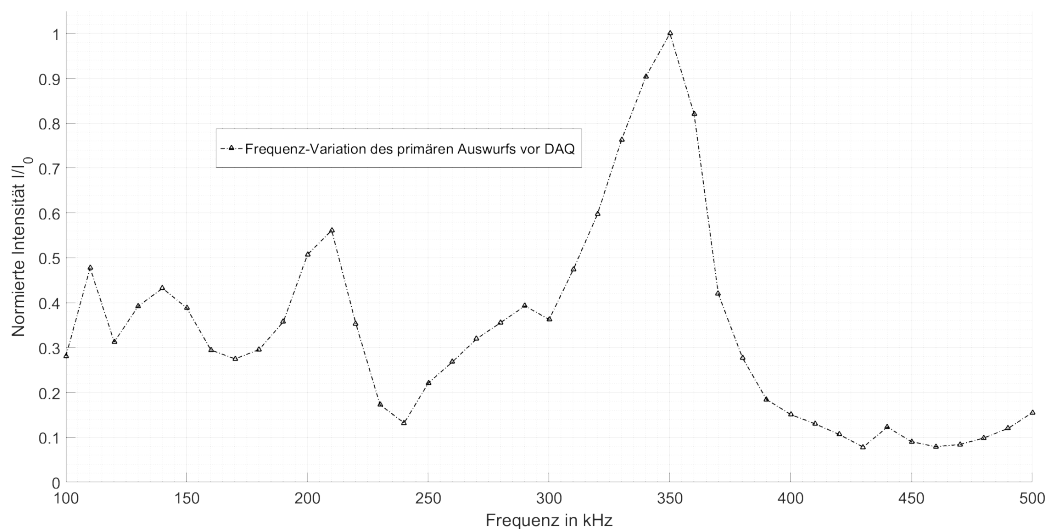


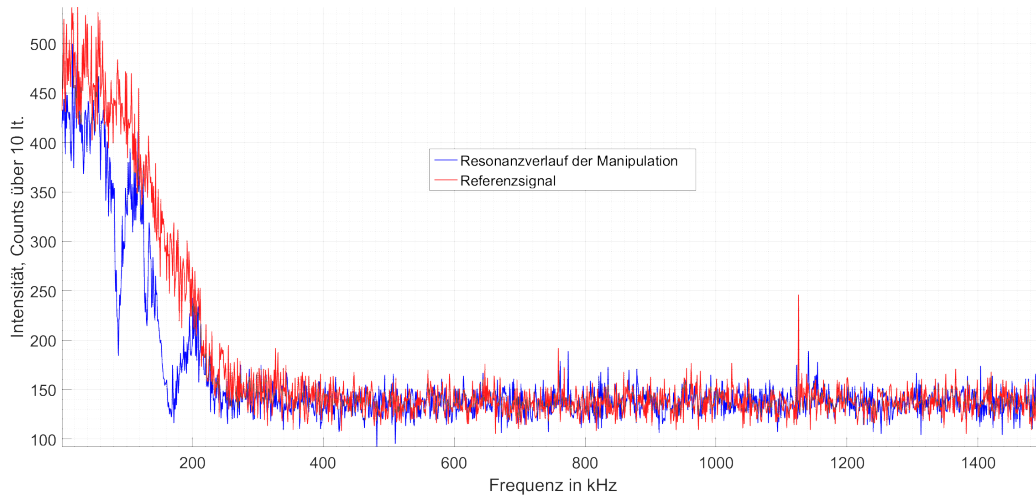
Abb. 7: text

### 4.3 Untersuchung der Eigenfrequenzen von ionisiertem Stickstoff

Bei dieser Messung ist es wichtig, das vollständige Spektrum der Anregung zu betrachten, da viele Frequenzen und deren lineare Kombinationen darin eingehen. Deswegen wurde ein Intervall von 0 bis 1,5 MHz gewählt, da bei der Führungsfeldfrequenz und in dessen Umgebung eine verstärkte Dynamik zu erwarten ist.

Ein einzelner Zyklus startet mit der Elektronenkanone für  $10000 \mu s$ , worauf eine sekun-

däre Manipulation mit dem Frequenzschritt  $f_n$  für  $1000\mu\text{s}$  folgt. Danach 'ruht' die Messung für weitere  $10000\mu\text{s}$ , wobei die Ionen einfach in der Falle verweilen. Schließlich läuft für  $2000\mu\text{s}$  die Datenaufnahme des Detektors zusammen mit der primären Anregung mit  $350\text{ kHz}$ . Für jeweils einen solchen Zyklus gibt es einen Referenzverlauf, welcher im Anschluss dazu jedoch ohne die sekundäre Anregung erfolgt. Dieser dient der Eichung und Fehlerminderung. Das Ergebnis für 10 innere und 50 äußere Iterationen zeigt Abbildung 8.



**Abb. 8:** text

## 5 Anhang

### Literatur

- [1] Die paulfalle - eine kurze einführung. *Universität Mainz, Institut für Physik*. Zu finden unter: [http://www.physik.uni-mainz.de/werth/calcium/ca\\_ptrap.html](http://www.physik.uni-mainz.de/werth/calcium/ca_ptrap.html), 15.11.2015. 3
- [2] Praktikumsanleitung Praktikum für Fortgeschrittene. Versuch 06 : Paul-falle. *Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Physik*. 4, 8
- [3] S. Earnshaw. On the nature of the molecular forces which regulate the constitution of the luminiferous ether. *Trans. Camb. Phil. Soc*, 7:97-112, 1842. 3
- [4] W. Paul. Ein ionenkäfig, forschungsberichte des wirtschafts- und verkehrsministeriums. *Nordrhein-Westfalen*, (451), 1958. 3
- [5] J. Todd R. March. 4
- [6] F. Roßbach. 4