

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät Institut für Physik

Paul-Falle

Protokoll zum Fortgeschrittenenpraktikum

vorgelegt von: Raphael Rataj

und Florian Simke

E-Mail: rr154064@uni-greifswald.de

Matrikelnummer: 150618

eingereicht am: 12. November 2015

Versuchsbetreuer: Dr. Gerrit Marx

1 Einleitung

In der modernen Physik sind heutzutage in sehr vielen Gebieten Ionenfallen anzutreffen. Sie werden zur Speicherung von reaktionsfreudigen, geladenen Teilchen wie Antimaterie, zur Massenanalyse von Ionen- bzw. Clusterstrahlen oder zur gezielten Untersuchung einiger Anregungseffekte oder Reaktionen genutzt. Dabei wird von ihrer hohen Speicherzeit und der Möglichkeit sogar einzelne Teilchen zu speichern profitiert.

Aufgrund der vielseitigen Verwendung der Ionenfallen soll durch diesen Versuch ein Einblick in die Grundlegenden technischen Eigenheiten und Funktionsweisen der Fallen am Beispiel der hyperbolischen Paul-Falle ermöglicht werden.

2 Grundlagen

Die Paul-Falle ist eine Ionenfalle die ausschließlich mit elektrischen Feldern arbeitet. Typischerweise wird sie in ihrer hyperbolischen Form mit einer Ringelektrode und zwei Endkappen realisiert, welche die Ionen in einem konstanten elektrischen Feld mit einem aufmodulierten Wechselfeld speichert. Wird die Apparatur im Vakuum betrieben, können Ionen theoretisch für eine beliebig lange Zeit gespeichert werden.

2.1 Speicherpotential

Wird ein harmonischen Speicherpotential für die Ionen angenommen, so kann das Potential allgemein in der Form

$$\Phi(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2 \tag{2.1}$$

geschrieben werden. Diese soll die Laplace-Gleichung erfüllen, weshalb die Koeffizienten die Bedingung

$$a + b + c = 0 \tag{2.2}$$

erfüllen müssen. Diese Gleichung hat beliebig viele Lösungen. Unter anderem ergeben sich zwei häufig genutzte Zusammenhänge

a = b, c = -2a für die hyperbolische Paul-Falle

a = -c, b = 0 für die lineare Paul-Falle

Für diesen Versuch wird im Folgenden nur auf die hyperbolische Form der Paul-Falle eingegangen. Mit $r=\sqrt{x^2+y^2}$ kann die Falle wegen a=b in Polarkoordinaten beschrieben werden. Wird ein Potential Φ_0 an die Elektronen angelegt, wobei der Ring das entgegengesetzte Potential wie die Endkappen besitzt, so folgt für den Parameter a

$$a = \frac{\Phi_0}{2r_0^2} = \frac{\Phi_0}{4z_0^2} \tag{2.3}$$

wobei r_0 der kleinste Abstand der Ringelektrodenoberfläche und z_0 der kleinste Abstand der Endkappenelektroden zum Fallenmittelpunkt ist. Daraus ergibt sich für die Geometrie der Falle:

$$r^2 - 2z^2 = -2z_0^2$$
 für die Endkappen,

$$r^2-2z^2=r_0^2$$
 für die Ringelektrode und

$$r_0^2 = \sqrt{2}z_0^2$$

Für das Fallenpotential ergibt sich damit

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{2d_0}(r^2 - 2z^2) \tag{2.4}$$

mit dem Fallendimensionsparameter $d_0=\frac{r_0^2}{2}+z_0^2$. Nach dem Earnshaw-Theorem lässt sich jedoch durch ein rein elektrostatisches Feld kein dreidimensionales Potential erzeugen, dass im Zentrum ein Potentialminimum besitzt. Deshalb wird zusätzlich zum statischen Potential U_0 ein Wechselpotential $V_0\cos(\Omega t)$ an die Falle gelegt. Damit ergibt sich das Fallenpotential durch

$$\Phi = \frac{U_0 + V_0 \cos(\Omega t)}{2d_0} (r^2 - 2z^2)$$
(2.5)

2.2 Bewegungsgleichung der gespeicherten Ionen

Die Bewegung eines Teilchens mit der Ladung Q in diesem elektrischen Feld ist gegeben durch

$$0 = \frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \frac{Q}{md_0^2} (U_0 + V_0 \cos(\Omega t)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ 2z \end{pmatrix}$$
 (2.6)

mit den dimensionslosen Parametern

$$\tau = \frac{\Omega t}{2} \tag{2.7}$$

$$a_z = -2a_x = -2a_y = -\frac{8QU_0}{md_0^2\Omega^2}$$
 (2.8)

$$q_z = -2q_x = -2q_y = \frac{4QV_0}{md_0^2\Omega^2}$$
 (2.9)

kann die Gleichung 2.6 in die kanonische Form der Mathieuschen Differentialgleichung umgeschrieben werden

$$0 = \frac{d^2\eta}{d\tau^2} + (a_{\eta} - 2q_{\eta}\cos(2\tau))\eta \tag{2.10}$$

mit den Lösungen

$$\eta(\tau) = \gamma_1 e^{\mu \tau} \Phi(\tau) + \gamma_2 e^{-\mu \tau} \Phi(-\tau) \tag{2.11}$$

Stabile Lösungen ergeben sich daher nur für imaginäre $\mu=\alpha+i\beta$ mit $\alpha=0$. Der Stabilitätsparameter β ist nur von den Parametern a_η und q_η abhängig. In Abb. 2.1 sind die zund r-stabilen Bereiche der Lösungen aufgezeichnet. Sie stammen aus einer Arbeit von R. MARCH ET AL. (R. March, J. Todd, Practical Aspects of Mass Spectrometry, 1995). Die verschiedenen Stabilitätsbereiche haben mehrere Schnittpunkte, wobei meist nur der

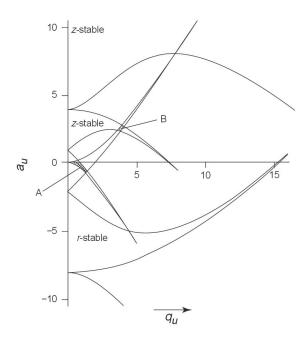


Abbildung 2.1: Darstellung der Stabilitätsbereiche eines Parametersatzes

erste, in der Grafik mit A bezeichnete Bereich von Interesse ist. Die Größe und Lage des Bereich ist, wie aus den Gleichungen 2.7 ersichtlich wird, unter anderem vom Massezu-Ladungs-Verhältnis der Ionen abhängig. Somit kann man über U_0 und V_0 den Massebereich der gespeicherten Ladung einstellen. In den Bereichen können Linien gefunden werden, für die β konstant ist, welche im folgenden Iso- β -Linien genannt werden.

Aus den Lösungen der Differentialgleichung 2.11 kann man erkennen, dass die Teilchen im Stabilitätsbereich schwingen. Die Frequenzen dieser Bewegung sind durch die Position im Stabilitätsdiagramm charakterisiert durch β und durch die Frequenz des Führungsfeld bestimmt. Es ergeben sich die Frequenzen ω_n mit

$$\omega_n = \frac{(2n \pm \beta)\Omega}{2} \tag{2.12}$$

mit $n=-\infty,...,\infty;n\in\mathbb{Z}$. Damit besteht die Möglichkeit, die Teilchen in der Falle mit zusätzlichen Wechselfeldern resonant anzuregen und so die Teilchen aus der Falle zu beschleunigen um sie zu detektieren.

2.3 Weitere Fallentypen

Lineare Paul-Falle

Die lineare Paul-Falle ist eine weitere Ionenfalle die ausschließlich mit elektrischen Feldern arbeitet. Um ihre Geometrie zu berechnen, werden die Parameter zur Bestimmung des Potentials leicht verändert:

$$a = -c, b = 0$$

Aus diesen Parametern ist bereits ersichtlich, dass die Fallengeometrie linear in y-Richtung ist. In der technischen Realisierung dieser Fallenart werden viel Metallstäbe an den Ecken einer quadratischen Grundfläche angeordnet. Diese Falle soll die Teilchen nicht in alle Raumrichtungen speichern, sondern nur in x- und z-Richtung. Sie wird meist als Filter für verschiedene Masse-zu-Ladungs-Verhältnisse genutzt. Dafür wird ein Ionen-Strahl mit einer festen Geschwindigkeit in y-Richtung durch die Falle geleitet. Durch das Potential ergeben sich als Lösung der Mathieuschen Differentialgleichung Schreibenbewegungen der Ionen in Abhängigkeit der Feldstärken und des Masse-zu-Ladungsverhältnisses. Wird die Falle auf den Stabilitätsbereich eines speziellen Verhältnisses eingestellt, so filtert diese Falle alle anderen spezifischen Massen heraus und die Intensität der eingestellten spezifischen Masse kann bestimmt werden. Diese Art der Paul-Falle wird daher für die Quadrupol-Massenspektrometrie genutzt.

Penning-Falle

Der Kern der Penning-Falle ist der hyperbolischen Paul-Falle sehr ähnlich. So erkennt man die selbe Elektrodenanordung und -geometrie. Der Unterschied zwischen den beiden Fallenarten besteht darin, dass bei der Penning-Falle um die Elektrodenanordung in z-Richtung ein homogenes Magnetfeld erzeugt wird. Somit ist für eine Speicherung der Teilchen kein elektrisches Wechselfeld notwendig. Das Teilchen bewegt sich auf Kreisbahnen mit einer modifizierten Zyklotronfrequenz und vollführt auf diesen eine zusätzliche Magnetronbewegung. Die Teilchen induzieren in der Ringelektrode eine Spannung, die von ihrer spezifischen Masse abhängt. Aus diesem Grund kann die Penning-Falle ebenfalls als Massendetektor verwendet werden, wobei hier noch höhere Auflösungen erzielt werden können.

3 Experimenteller Aufbau und Umsetzung

3.1 Versuchsbeschreibung

Der Aufbau des Versuches ist in Abbildung 3.1 gezeigt. Der Aufbau besteht zunächst aus

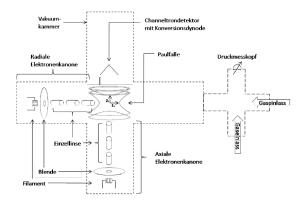


Abbildung 3.1: Praktischer Aufbau des Experimentes

der hyperbolischen Paulfalle mit den beiden Endkappen und der Ringelektrode. Letztere wurde für andere, hier nicht beschriebene Experimente in vier Ringsegmente geteilt, was einen minimalen Zwischenraum zwischen den Segmenten erzeugt. Zum Einstrahlen der Elektronen aus den beiden Elektronenkanonen (axial und radial) sind an den entsprechenden Stellen kleine Löcher in den Elektroden vorhanden. Zur Detektion der Ionen ist ein Channeltron an der oberen Endkappe angebracht, weshalb diese ebenfalls ein Loch aufweist. Alle beschriebenen Geräte liegen in einer Vakuumkammer welche mit einer geringen Menge Stickstoffgas (N_2 - Moleküle) gefüllt ist. Mittels Stoßionisation der Elektronen mit den Gasmolekülen werden die Ionen direkt in der Falle erzeugt. Zum Anregen der axialen Schwingungszustände (Gleichung ??) kann sowohl an der oberen als auch an der unteren Endkappe eine Wechselspannung mit variabler Frequenz angelegt werden. Dies erzeugt ein Wechselfeld welches beim Treffen der Frequenz der gefangen Teilchen diese resonant anregt und sowohl aus der oberen als auch aus der unteren Endkappe hin-

aus schleudert. Nur die Teilchen die aus der oberen Endkappe geschossen werden, können vom Channeltron detektiert werden.

Dieser Versuch sollte vor allem dazu dienen, sich mit den Geräten und dem Experiment vertraut zu machen. Die Aufgabe bestand daher nur darin, die verschiedenen Anregungsfrequenzen der Ionen in der Falle in Abhängigkeit verschiedener Parameter zu messen. Dazu wurde zunächst eine manuelle Aufnahme des Eigenfrequenzspektrums der N_2 - Ionen vorgenommen und dann über Nacht eine sehr genaue automatische Methode genutzt.

Für alle Messungen gelten folgende Einstellungen:

• Füllgas: Stickstoff (N_2)

• Verwendete Elektronenkanone: Axial

• Führungsfeldfrequenz: 1,6 MHz

• Aufsummieren der Detektorsignale über eine Zeitspanne von $200\ ms$

• Druck in Vakuumkammer: $4,55 \cdot 10^{-7} \ mBar$

3.2 Variation des Stabilitätsparameters

Der Stabilitäsparameter β_z ist neben a_z von q_z abhängig. q_z wird in diesem Experiment durch die Variation der Amplitudenspannung des Führungsfeldes V_0 , also des Wechselfeldes der Ringelektrode, verändert (siehe Gleichung ??)). Dies führt zu einer Veränderung von β_z und müsste das gesamte Frequenzspektrum verschieben.

3.2.1 Messung

Der Ablauf der Messung einer Frequenz folgte bei allen drei Experimenten diesem Ablaufplan:

- 1. Ionisation der Stickstoffmoleküle
- 2. kurze Speicherzeit in Paulfalle (wenige Millisekunden)
- 3. Anregung mit der eingestellten Frequenz
- 4. Sofortige Detektion eventueller Ionen über eine Zeit von $200 \ ms$
- 5. N-fache Wiederholung des Vorganges

Insgesamt wurden drei unterschiedliche Führungsfeldfrequenzen eingestellt:

 $V_0 = 120V$ (240V peak to peak)

 $V_0 = 86V$ (173V peak to peak)

 $V_0 = 60V (120V \text{ peak to peak})$

Im ersten Fall wurde über N=25 Durchgänge das Signal gemittelt und den beiden anderen Fällen über N=15 Durchgänge. Untersucht wurde der Frequenzbereich von 30 bis $\approx 300kHz$. In Abbildung ist eine Äæbersicht über alle Messergebnisse zu finden.

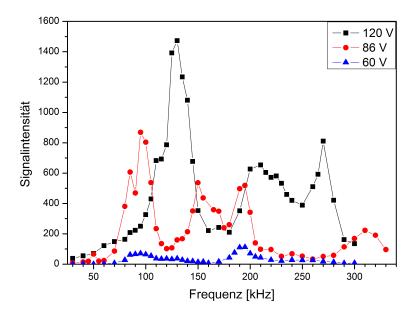


Abbildung 3.2: Messung des Frequenzspektrums der Anregung für verschiedene Führungsfeldamplituden

3.2.2 Auswertung

Die erste Erkenntnis lässt sich direkt aus der Acebersicht in Abbildung 3.2 gewinnen. Je kleiner die Führungsfeldamplitude ist, um so weniger Signalintensität wird gemessen. Dies ist schlichtweg damit zu erklären, dass je kleiner die Amplitude des Führungsfeldes ist, um so geringer sind die stabilisierenden Kräfte auf die Ionen. Die Abweichungen der realen Paulfalle gegenüber der ideal berechneten Paulfalle, sowie die thermischen Energien der Ionen, genügen dann, um immer weniger Ionen in der Falle zu halten.

In Abbildung 3.3 und 3.4 sind die Frequenzen markiert, an denen ein Maxima im Signal auftritt. Insbesondere bei den höheren Stabilitätsparametern sind die primären Peaks (ω_z und $2\omega_z$) gut zu erkennen. In den Spektren können die ersten beiden Ordnungen von ω_Z und ω_r gemäß Gleichung ?? erkannt werden. Zur eindeutigen Identifizierung wurde zusätzlich ein Referenzspektrum aus dem Paper "Buffer-gascoold ion clouds in a classical Paul trap: superimposed stability diagrams and traping capacity investigations"von H. Leuther und g. Werth (Springer Verlag 5.April 2013) verwendet.

In der Nähe der Peaks $2\omega_z-2\omega_r$ und $2\omega_z$ (und insbesondere zwischen) liegen eine Menge von kleineren Peaks, unter anderem auch $\omega_z+\omega_r$ sowie $\omega_z+2\omega_r$. Diese führen dazu, das dieser Frequenzbereich stärker verschmiert ist. Eine genauere Bestimmung dieses Bereiches ist mit dieser Messung nicht möglich.

Die Verschiebung des gesamten Spektrums mit Verringerung der Frührungsfeldamplitude

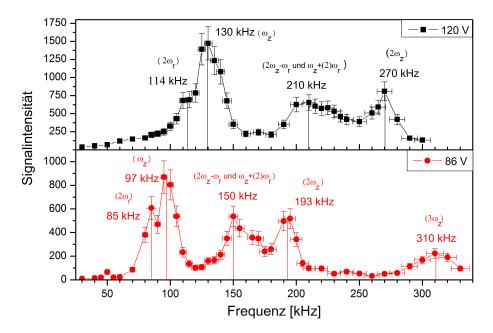


Abbildung 3.3: Identifizierung der Maxima des Frequenzspektrums für 120V und 86V Amplituden (die angezeigten Werte für die Frequenzen entsprechen den tatsächlichen Maximapunkten im Spektrum)

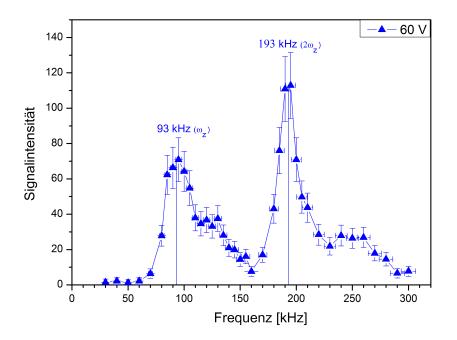


Abbildung 3.4: Bestimmung der Maxima des Frequenzspektrums für die 60V Amplitude (die angezeigten Werte für die Frequenzen entsprechen den tatsächlichen Maximapunkten im Spektrum)

ist auf den "Space charce shift " zurückzuführen. Je weniger Ionen durch die schlechteren Einschlussbedingungen in der Falle bleiben um so geringer ist dieser Effekt. Dies äußert sich in dem beobachteten Verschiebungen, welche die Verhältnisse der Peaks zueinander unverändert lässt.

Bisher ungeklärt bleibt warum in Abbildung 3.4 der $2\omega_z$ - Peak höher ist als der ω_z -Peak. Anzumerken ist jedoch, dass diese Messung einen recht hohen Fehler aufweist, da die Intensitäten vergleichsweise gering sind (mehr dazu in der Fehlerbetrachtung).

3.2.3 Detailierte Messung des Frequenzsspektrums

Da der Arbeits- und Zeitaufwand für die Aufnahme des gesamten Spektrums mittels der manuellen Messmethode zu hoch ist, wurde dazu ein Messprogramm verwendet. Dieses lief über Nacht und nahm das gesamte Spektrum sehr genau auf. Um Schwankungen des Druckes und der Stickstoffquelle zu berücksichtigen, wurde nach jeder Teilmessung eine Referenzmessung durchgeführt

Messung

Die Messung einer speziellen Frequenz folge diesem Ablaufplan:

- 1. Ionisation der Stickstoffmoleküle
- 2. kurze Speicherzeit in Paulfalle (wenige Millisekunden)
- 3. Anregung mit der eingestellten speziellen Frequenz und einer Anregungsamplitude von V_a
- 4. Beendigung der Anregung und kurze Wartezeit
- 5. Zweite Anregung mit einer vorher bestimmten Resonanzfrequenz der Ionen und anschließender Detektion über eine Zeit von $200\ ms$
- 6. Mehrmalige Wiederholung des Vorganges
- 7. Referenzzyklus:
 - a) Ionisation der Stickstoffmoleküle
 - b) kurze Speicherzeit in Paulfalle (wenige Millisekunden)
 - c) Anregung mit einer vorher bestimmten Resonanzfrequenz der Ionen und sofortiger Detektion über eine Zeit von $200\ ms$
 - d) Mehrmalige Wiederholung des Vorganges

Diese Messung liefert ein Signal, wenn keine Ionen vom Detektor detektiert werden. Trifft die eingestellte Frequenz bei der ersten Anregung eine der Resonanzfrequenzen der Ionen, so werden diese aus der Falle geschleudert. Bei der nachfolgenden Anregung mit einer bekannten Resonanzfrequenz sind dann so gut wie keine n_2 -Ionen mehr da, was zu einem sehr geringen Messwert führt.

Leider war die Amplitude der Anregungsfrequenz bei der ersten Messung (über Nacht) nicht hoch genug ($V_a=100\ mV$) was zu einer ungenügenden Anregung in der ersten Anregungphase führte. Somit waren die gegebenen Signale höherer Ordnungen nicht hoch genug um aus dem Rauschen zu führen (siehe Abbildung 3.5). Aus diesem Grund wurde noch eine genaue Messung mit höherer Anregungsamplitude ($V_a=300\ mV$) begonnen, jedoch aus Zeitgründen vorzeitig abgebrochen. Zur Vollständigkeit wird die erste Messung hier mit angegeben, jedoch die Auswertung nur für die zweite Messung gemacht.

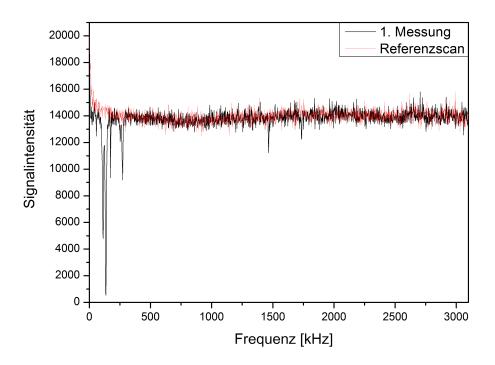


Abbildung 3.5: Ergebnis der Messung über Nacht

Auswertung

Man erkennt einige Sprünge sowohl in der Messkurve als auch in der Referenzmessung (Beispielsweise bei etwa 850 und 950kHz. Dies ist auf Dichteschwankungen zurückzuführen, weshalb für die Auswertung die Messkurve auf die Referenzkurve normiert

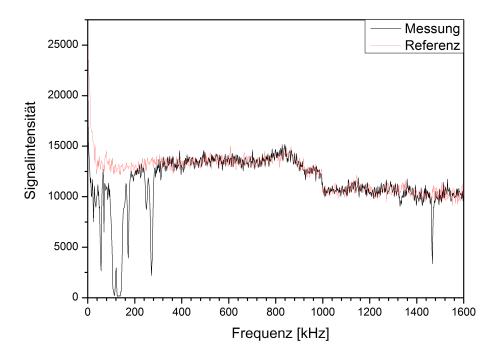


Abbildung 3.6: Kürzere Messung mit höherer Anregungsamplitude

wurde. In Abbildung 3.7 und 3.8 wurden alle gefunden Peaks mit ihren entsprechen Frequenzen markiert.

Wie zu erwarten war, fallen durch die Normierung die Stufen aus dem Frequenzspektrum. Wie im vorherigen Experiment sind die Hauptpeaks:

$$\omega_z = 133 \pm 10 \, kHz$$

 $2\omega_r = 113 \pm 3 \, kHz \quad (114 \, kHz)$

 $2\omega_z = 271 \pm 7 \, kHz \quad (266 \, kHz)$

gut zu erkennen. Die Werte in den Klammern stellen die theoretischen Werte anhand der Position von ω_z und ω_r dar. Zusätzlich konnten jedoch auch weitere Peaks identifiziert werden, dies wären zum Einen die Peaks in Abbildung 3.8

$$\omega_r = 57 \pm 2 \, kHz$$

$$3\omega_r = 173 \pm 5 \, kHz \quad (171 \, kHz)$$

$$\omega_z + 2\omega_r = 248 \pm 7 \, kHz \quad (247 \, kHz)$$

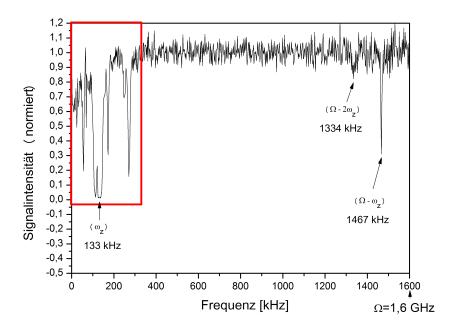


Abbildung 3.7: Identifizierung der Peaks mit höherer Frequenz. Die Daten im roten Rechteck werden zur besseren Auswertung in Abbildung 3.8 vergrößert dargestellt (die angezeigten Werte für die Frequenzen entsprechen den tatsächlichen Maximapunkten im Spektrum)

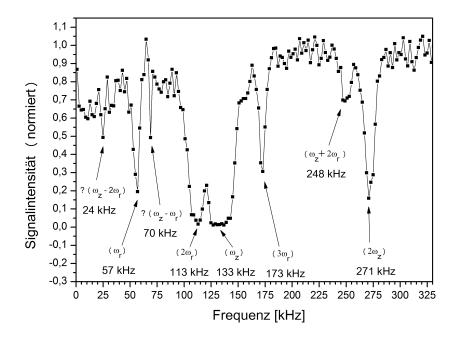


Abbildung 3.8: Identifizierung der Peaks (die angezeigten Werte für die Frequenzen entsprechen den tatsächlichen Maximapunkten im Spektrum)

und zum Anderen die erste und zweite Ordnung der Frequenzen der Makrobewegung

$$\Omega - \omega_z = 1467 \pm 27 \, kHz \quad (1467 \, kHz)$$

$$\Omega - 2\omega_z = 1334 \pm 25 \, kHz \quad (1334 \, kHz)$$

Die beiden Peaks

$$\omega_z - 2\omega_r = 24 \pm 3 \, kHz \quad (19 \, kHz)$$

$$\omega_z - \omega_r = 70 \pm 3 \, kHz \quad (76 \, kHz)$$

liegen allerdings nur in der Nähe der berechneten Werte (Basis: Position von ω_z und ω_r). Dies kann jedoch durch die höhere Unbestimmtheit von des ω_z -Peaks und des Fehlers der Frequenzmessung bedingt sein.

4 Zusammenfassung

4.1 Fehlerdiskussion

Die systematischen und zufälligen Fehler der Messungen können für dieses Experiment nur grob abgeschätzt werden. Dies liegt vor allem daran, dass zu den systematischen Fehlern keinerlei diesbezügliche Daten von den benutzten Geräten vorhanden sind (und/oder notiert wurden). Da das gesamte Experiment ein Verbund aus verschiedensten Geräten ist, können nur sehr weniger Aussagen über konkrete Fehlerquellen gemacht werden. Alle in der Auswertung gekennzeichneten Fehler basieren daher auf einer Abschätzung des systematischen Fehlers der Messgeräte und des zufälligen Fehlers beim Ablesen der Werte (die etwaige Breite der Peaks spielt hierbei die Hautrolle). Letzter kann gerade im Fall von ω_z in Abbildung 3.8 einen großen Teil der Unbestimmtheit der Frequenz ausmachen, da der Peak sehr breit ist. Zur Abschätzung des systematischen Fehlers wurde zum Einen ein fester Frequenzfehler von $\pm 0.5kHz$ angenommen, der als eine Grenze für die Genauigkeit der einstellbaren Frequenz dienen soll. Zum Anderen wurde ein relativer Fehler von $\pm 2,5 \%$ pro Frequenzwert genutzt, welcher als allgemeiner Fehler dienen soll. Dieser soll alle relevanten Fehlerquellen, wie beispielsweise Abweichungen bei der Erzeugung der Hochfrequenz, enthalten. Die Fehlerbalken wurden in Abbildung 3.8 und 3.8 bewusst weggelassen um die Messdaten besser zu erkennen.

4.2 Zusammenfassung

Insgesamt hat das Experiment gut funktioniert. Es gab keine Probleme mit der Funktion der Apparatur und alle Experimente konnten zügig durchgeführt werden. So gut wie alle Peaks konnten anhand des Referenzmaterials in der Auswertung identifiziert werden. Es konnten diverse Effekte wie der Space charge drift und die Auswirkungen der Variation des Stabilitätsparameters (Abbildung 3.3) beobachtet und erklärt werden. Abschließend ist zu sagen, dass wir wertvolle Erfahrungen im Umgang mit Ionenfallen und dem wissenschaftlichen Arbeiten sammeln konnten.