

## Paul İyon Tuzağında Tek İyon Dinamiği

Hüsnü Aksakal<sup>1,\*</sup>, Serkan Avcı<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Niğde Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 51240, Niğde, Türkiye  
<sup>\*</sup>yazışılan yazar e-posta: haksakal@nigde.edu.tr

Alınış: 14 Ekim 2015, Kabul: 02 Kasım 2015

**Özet:** Bu çalışmada, iyonları elektrostatik tuzaklamaya dayalı Paul tuzağı içindeki iyon dinamikleri incelenmiştir. Paul tuzağı DC ve AC gerilim kombinasyonu ile kuadropol elektrotların beslenmesi temeline dayanmaktadır. İyonların tuzaklanmaları için Mathieu diferansiyel denkleminin kararlılık sınırları içinde kalan boyutsuz Mathieu parametreleri kullanılması gerekir. Tek iyonun üç boyutta hareketi kuadropol tuzak içinde simülasyon programı yardımıyla incelenmiştir. Ayrıca hexapol katkıların tuzak içerisinde iyon salınımlarını nasıl değiştireceği incelenmiştir.

**Anahtar kelimeler:** Elektrostatik iyon tuzağı, iyon dinamikleri

### Single Ion Dynamics in Paul Ion Trap

**Abstract:** In this study, ion dynamics in a Paul trap which is based on an electrostatic trap has been investigated. Paul trap is based on feeding of quadrupole electrodes with combination of DC and AC voltage. To achieve trap the ion, Mathieu stability parameters that are inside the stability criteria of Mathieu differential equation is used. Three dimensional motions inside the quadruple trap of single ion have been examined by a simulation code. Furthermore how ion oscillation is changed by hexapole contribution is investigated.

**Key words:** Electrostatic ion trap, ion dynamics

#### 1. Giriş

W. Paul ve arkadaşları çok-kutuplu elektrik ve manyetik alanlarda elektrik veya manyetik dipol momentine sahip nötr parçacık demetlerini odaklamak için araştırma yapmış ve molekül spektroskopisi için kullanmışlardır [1,2]. Bu araştırmanın ürünü olarak hidrojen maser gelişimi için kritik öneme sahip odaklayıcı altı-kutup (hekzapol) mıknatısı tanımlanmıştır. Ayrıca çok kutuplu elektrik alanında bir iyon demetinin, z-ekseninde hareket eden iyonların aynı zamanda enine (x ve y -ekseninde) odaklanmış olarak hareket edebileceği belirlenmiştir [1]. Bu bulgulardan sonra araştırmalarda, yüksek enerjili parçacık demetleri optik ile birlikte anılmaya başlamıştır ve hızlandırıcılar için güçlü odaklama prensibi olarak adlandırılmıştır. Hızlandırıcılar ile parçacık demetleri odaklayıcı ve dağıtıcı elektrik ve manyetik alandan geçirilerek hızlandırılır.

Paul ve arkadaşları iyonları tuzaklamak için zamanla salınım hareketi yapan elektrik alan kullanılarak hareketli iyonların uzaysal bir nokta etrafında salınım hareketi yapacağını bulmuşlardır. Böylece hangi kütlenin hangi iyonla ait olduğunu belirleyen, manyetik kütle ayırım metodundan farklı, Paul iyon kütle filtresi yöntemi ortaya çıkmıştır [1]. Bu konuda yaptıkları çalışmalar neticesinde W. Paul ve H. Dehmelt 1989 Nobel Fizik ödülünü kazanmışlardır [2].

Paul tuzağı kullanılarak iyonların spektrumu, taban durumu, aşırı ince yapısı, alt enerji düzeylerine pompalama, optik frekans vb. konularda bilgiler elde edilir [3].

Tuzaklanmış tek iyon dinamiğini çalışmanın faydası iyon harici bir lazer ile soğutulduğu zaman kuantum etkilerinin incelenmesine kolaylık sağlamasıdır. Ayrıca bu yöntem kuantum

bilgisayarların temelini oluşturmaktadır [3]. Klasik mekaniksel olarak iyonların kaos ve düzenli hareketleri de tuzaklanmış iyonlar ile çalışılabilmektedir [4]. Bu çalışmada, dört-kutup (kuadrupol) iyon tuzağında tek iyon dinamikleri çalışılmıştır. Ayrıca, alt-kutup katkısının iyon dinamiği üzerine etkisi incelenmiştir.

## 2. Teori

Paul, kartezyen kuadrupol bir aygıt içinde herhangi bir noktadaki üç boyutlu dört-kutup (kuadrupol) potansiyelin genel ifadesini aşağıdaki gibi yazmış olup;

$$\Phi = \Phi_0(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) \quad (1)$$

burada  $\Phi_0$  konumdan bağımsız olupelektrotlara (ya sadece AC ya da AC, DC kombinasyonunu içeren) uygulanan potansiyeli gösterir. Bu potansiyel alanı iyonları tuzaklamak veya kütle spektrumuna bakmak için elektrotlara uygulanır. Uygulanan potansiyel tuzak içerisinde her bir koordinata bağlı olarak kuadratik değişmektedir ve çapraz  $xy$ ,  $yz$ ,  $xy$  gibi terimler içermemektedir. Buda bizim her bir koordinatta iyon hareketini diğer koordinatlardan bağımsız düşünmemizi sağlar. Elektrotlar arası bölgenin potansiyel alanı Laplace koşulu ( $\nabla^2 \Phi = 0$  şartı ile  $\alpha + \beta + \gamma = 0$  bulunur) ile hesaplanır. Eğer kuadrupol aygıt kütle spektrometresi olarak kullanılmak isteniyorsa iyonları iki boyutta ( $x$  ve  $y$ ) tuzaklarız. Bu durumda  $\alpha = -\beta$ ,  $\gamma = 0$  olur. Eğer iyonları üç boyutlu tuzaklamak (silindirik simetrik kuadrupol iyon tuzak) istiyorsak  $\alpha = \beta = 1$ ,  $\gamma = -2$  olur [5,6]. Tuzak durumunda elektrotlara uygulanan kuadrupol potansiyel ifadesi denklem (2) ile verilir [6,7].

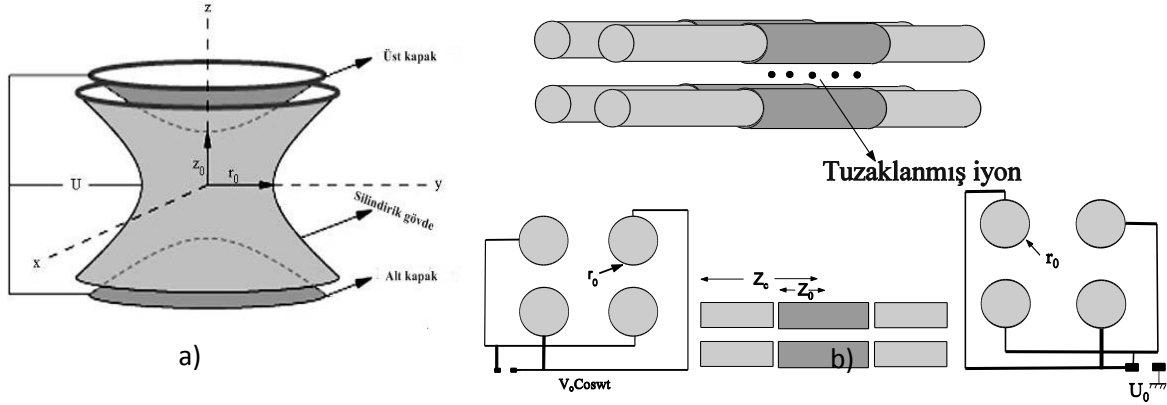
$$\Phi = \frac{(U_{dc} + V_{ac} \cos \Omega t)}{r_0^2 + 2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (2)$$

Burada  $r_0$  ve  $z_0$  Şekil 1 de farklı tuzak geometrilerinde görüldüğü gibi tuzak geometrisine bağlı elektrotlar arası mesafedir.  $U_{dc}$  ve  $V_{ac}$  uygulanan DC gerilimi ve zamana bağlı AC gerilimin sıfır-pik genliğini göstermektedir.  $\Omega = 2\pi f$  AC gerilimin açısal frekansını göstermektedir.

Tuzak içinde iyonlara etki eden kuvvet ise  $\vec{F} = q\vec{E} = q(-\vec{\nabla}\Phi)$  den bulunur. Bu durumda tuzaklanan iyonun hareket denklemi

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\frac{q}{m} \left( \frac{U_{dc} + V_{ac} \cos(\Omega t)}{d^2} \right) (2x\hat{i} + 2y\hat{j} - 4z\hat{k}) \quad (3)$$

olup;  $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$  iyonun konum vektörünü,  $m$  kütlelerini,  $q$  yükünü göstermektedir. Denklem (3)'te  $\Omega t = 2\xi$  değişken değiştirmesi yapar ve denklemi üç boyut için ayrı ayrı yazacak olursak, her bir boyut için Mathieu Diferansiyel Denklemine ulaşırız. Mathieu diferansiyel denklemi  $u \rightarrow x, y, z$  koordinatlarını göstermek üzere Denklem 4'de verilmiştir.



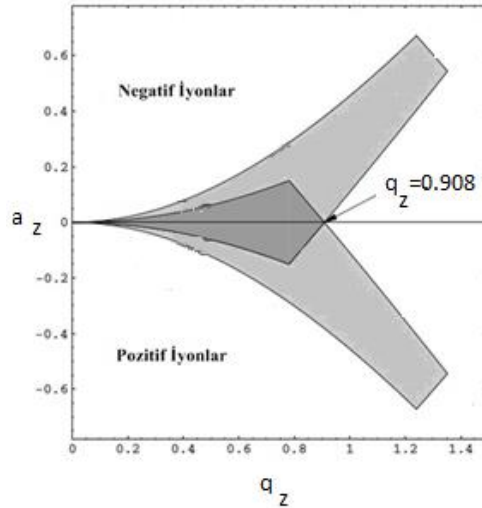
Şekil 1. Farklı tuzak geometrileri a) Hiperbolik tuzak, b) Lineer tuzak

$$\ddot{u} + [a_u - 2q_u \cos(2\xi)]u = 0 \quad (4)$$

Burada  $\ddot{u} = \frac{d^2u}{d\xi^2}$  türevini,  $a_u$  ve  $q_u$  boyutsuz Mathieu parametrelerini göstermektedir. Boyutsuz Mathieu parametreleri ilgili koordinatlar için

$$\begin{aligned} a_z &= -2a_x = -2a_y = -\frac{16qU_{dc}}{md^2\Omega^2} \\ q_z &= -2q_x = -2q_y = \frac{8qV_{ac}}{md^2\Omega^2} \end{aligned} \quad (5)$$

değerlerini alırlar. Denklem 4, sadece belirli aralıkta olan  $a_u$  ve  $q_u$  parametre seti için kararlı (sınırlı değere sahip) çözümler üretir. Bu aralık Şekil 2 de verilen kararlılık diyagramından elde edilir [7]



Şekil 2. Mathieu diferansiyel denklemini kararlılık diyagramı

$\xi$  parametresinden reel zamana geçişi  $\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d^2x}{d\xi^2} \frac{d^2\xi}{dt^2} = \frac{d^2x}{dt^2} \frac{\Omega^2}{4}$  ile yaparsak, Denklem 4 aşağıdaki forma dönüşür.

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_u - 2q_u \cos(\Omega t)]u = 0 \quad (6)$$

Burada,  $a_u$  ve  $q_u$  Denklem 5’de verildiği gibidir. Böylelikle, iyonların hareketini  $\xi$  boyutsuz parametresi (Denklem4) veya tuzaklama zamanına (Denklem 6) göre inceleyebiliriz[6,7,8].

### 2.1. Lineer olmayan etkiler

Tuzak içerisinde birden fazla iyon olması halinde iyonlar arası Coulomb etkileşme teriminin hareket denkleminde eklenmesi gerekmektedir.

Ayrıca iyon tuzağı 4 ten fazla elektrottan oluşuyorsa veya kuadrupol tuzağın imalatı sırasında elektrotlar yerleştirilirken ufak bir kayma mevcut ise potansiyele üst mertebeden katkıların (altı-kutup heksapol, sekiz-kutup oktopol, vb) eklenmesi gerekmektedir. Bu durumda denklem 2 bu üst mertebeden katkıları içermelidir. Bu durum Laplace koşulunun silindirik koordinatlarda üst mertebeden katkıları dahil edilerek tekrar çözülmesi ile elde edilir. Örneğin hexapol katkısı ile potansiyel aşağıdaki gibi olur[7].

$$\Phi = (U_{dc} + V_{ac}\cos\Omega t) \left( \frac{x^2+y^2-2z^2}{d^2} + f_3 \frac{3(x^2+y^2)-6z^2}{d^2} \right) \quad (7)$$

Burada  $f_3$  heksapol katkısını göstermektedir. Bu durumda hareket denklemleri ise

$$\begin{aligned} \frac{d^2i}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_i - 2q_i \cos(\Omega t)] \left( 1 + f_3 \frac{3z}{d} \right) i &= 0 \\ \frac{d^2z}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_z - 2q_z \cos(\Omega t)] \left( z - f_3 \frac{3(x^2+y^2)-6z^2}{4d} \right) z &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

olur. Burada;  $i \rightarrow x, y$  koordinatını göstermekte olup enine ( $x, y$  eksen) ve boyuna ( $z$  eksen) hareket denklemleri bulunur[7]. Bu çalışmada, tek iyon incelendiğinden Coulomb etkisi hesaba katılmamış fakat heksapol etkisinin iyon salınımlarını nasıl değiştireceği incelenmiştir.

### 3. Materyal ve Metot

Dijital iyon tuzağı için Python[9] (Python for Digital Ion Trap-PyDIT) kodu iyonların tuzaklanmasını inlemek amacı için yazılmıştır. Program hesaplamalar için numpy, grafik çizimleri için Matplotlib[10] paketlerine ihtiyaç duymaktadır. İyon tuzağı içerisindeki iyonların üç boyutta dinamiği, bu kod ile hesaplanmıştır. PyDIT dördüncü mertebeden Runge-Kutta yöntemine göre integral alan bir Moleküler Dinamik (MD) simülasyon kodudur. Kod ile farklı periyodik RF dalga formları kullanılabilir. Koda iyonları soğutma işlemi eklenebilir.

### 4. Bulgular

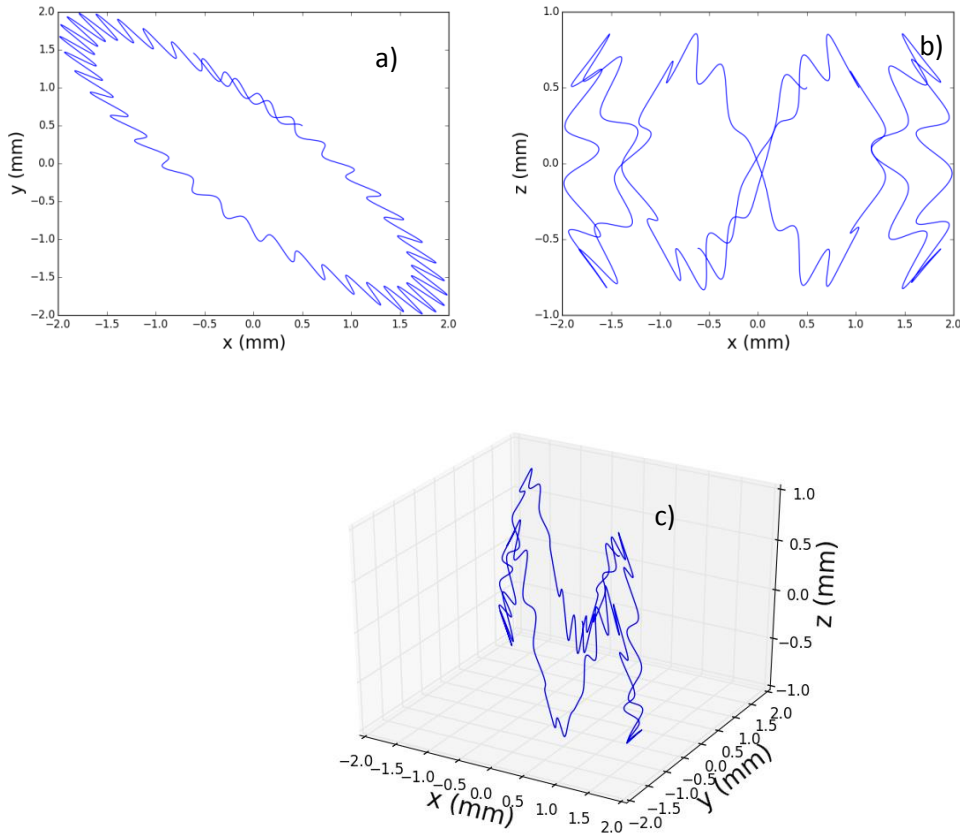
Bu çalışmada  $Mg^+$  iyonu (24.305 akb), kuadrupol tuzak için kullanılmıştır. Kullanılan tuzak parametreleri Şekil 2 den  $a_z$  ve  $q_z$  seçilerek belirlenir. Bu parametreler Tablo 1 de verildiği gibidir. Tablo 1 deki parametrelerin aynısı hexapol katkısı varlığı durumu içinde kullanılmıştır.

Şekil 3 tek iyonun tuzak içerisindeki yörüngesini tek ve üç boyutta göstermektedir. Şekil 3a) iyonun  $xy$  düzleminde bir çiçek şeklinde yörüngeye sahip olduğunu, Şekil3b)  $xz$  düzleminde kapalı bir yörüngeye sahip ve Şekil 3c ise üç boyutta izlediği yörüngeyi göstermektedir. İyonun kapalı bir yörüngede hareketi ve bu hareketin genliğinin tuzak boyutları içerisinde

olması iyonun tuzaklandığını göstermektedir. Bu bize iyonun tuzaklandığını bilgisini verir.  $xy$ ,  $xz$  düzlemlerinde ve üç boyutta hareket yörüngeleri Şekilden görüldüğü gibi elde edilmiştir.

**Tablo 1.** Tuzak parametreleri ve iyonun başlangıç bilgileri

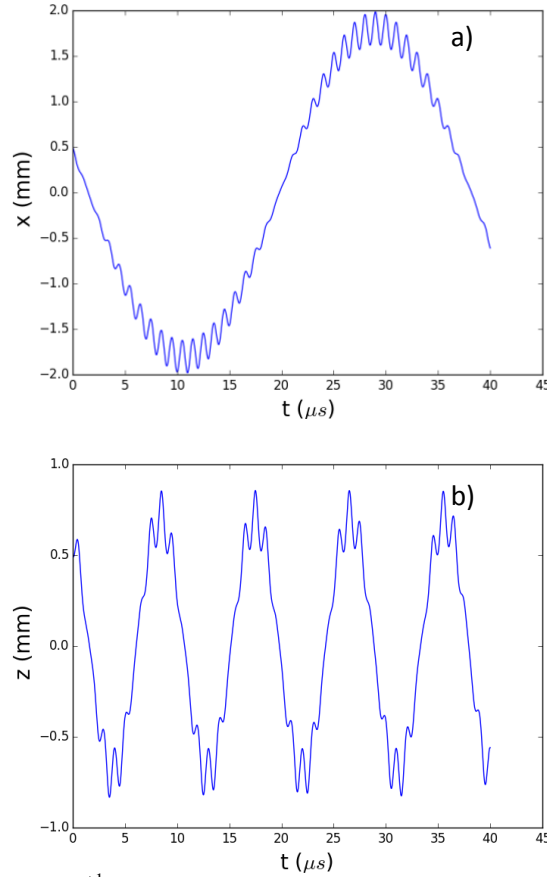
Parametre	Kuadrupol
$a_z, q_z/a_{x,y}, q_{x,y}$	-0.034, 0.4/-0.017, 0.20
$U_{dc}, V_{ac}$	3.0, 71.850
$f$ (MHz)	1.0
İyonun başlangıç konumu $x, y, z$ (mm)	0.5, 0.5, 0.5
İyonun başlangıç hızı $V_x, V_y, V_z$ (m/s)	-267, 267, -267
İyonun başlangıç enerjisi (eV)	9
$r_0/z_0$ (mm)	8.5 / 6



**Şekil 3.** Tek  $Mg^{+1}$  iyonunun a)  $xy$  düzlemi b)  $xz$  düzlemic) Üç boyutta yörüngesi

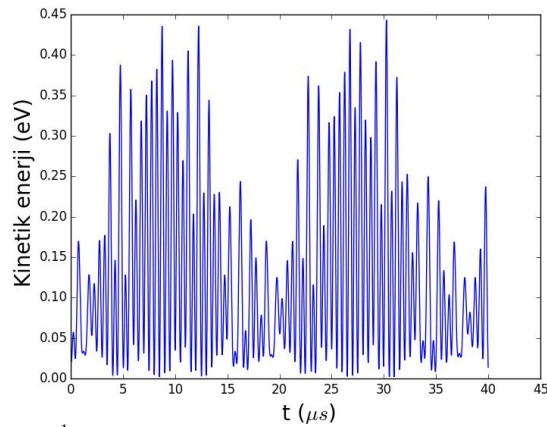
Şekil 4, tuzaklanan iyonun  $x$  ve  $z$  deki salınımlarının zamana göre değişimini göstermektedir. İyonun salınımlarının periyodik olduğu şekilden görülmektedir. Ayrıca periyodun genliği incelenen süre boyunca tuzak büyüklüğü ( $r_0$  ve  $z_0$  'a kıyasla) içinde olduğundan iyonların tuzak içinde hareket ettiği görülmektedir. İyonların periyodik hareketi makro salınım, bir periyod içindeki salınımları ise mikro salınım olarak adlandırılır. Bizim için iyonun tuzak içerisinde ne kadar süre kaldığının yanı sıra tuzak içerisinde nasıl bir yörüngeye sahip olduğu, hangi noktalarda hangi hızlarla hareket ettiği, hangi enerjiye sahip olduğu da ilgilendirmektedir. Tuzak içerisindeki AC alan  $f$  frekansı ile salınım yaparken elektrik alanlarda aynı frekansta salınım yapmaktadır. Tuzağın tam orta noktasında (0,0,0)' da ideal bir tuzakta potansiyel ve elektrik alan sıfırdır. Bu noktadan uzaklaşan iyonlar elektrik alan

etkisiyle bu noktaya tekrar yaklaştırılacak ve iyon bu nokta etrafında salınım hareketi yapacaktır. Şekil 4 ten bu salınımlar açıkça görülmektedir.



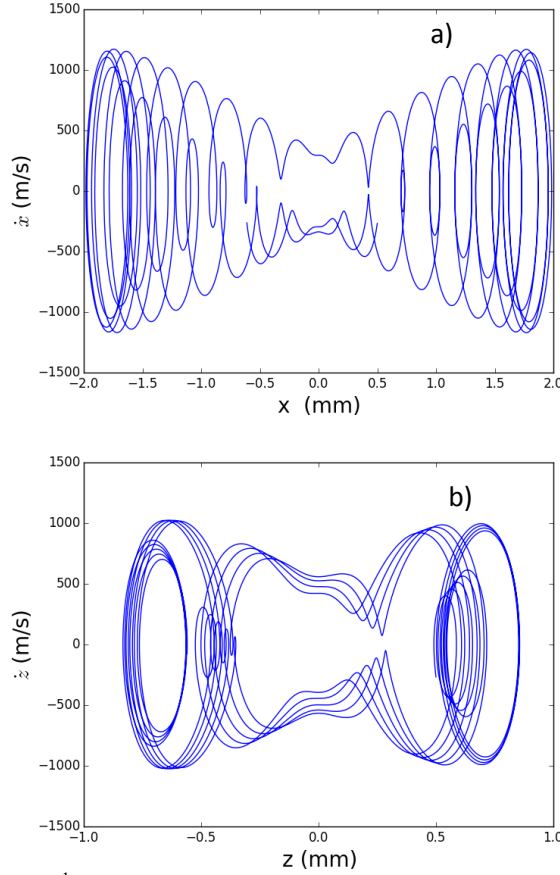
Şekil 4. Tuzaklanmış tek  $Mg^{+1}$  iyonunun a) x konumunun b) z konumunun zamana göre salınımı

Tuzaklanmış parçacığın enerjisi, göreceli (rölativistik) olmadığından  $\frac{1}{2}mv^2$  den kolayca hesaplanabilir. Bu durumda iyonun kinetik enerjisinin zamana bağlı değişimi Şekil 5 de verildiği gibidir. Şekilde görülen büyük salınımlar iyonun elektrik alan içinde hareketi esnasında enerjisinin maksimum değerini  $\sim 0.4$  eV, küçük salınımlar ise enerjisinin minimum değerini  $\sim 0.05$  eV olarak vermektedir. Şekil 5 de görüldüğü gibi başlangıç durumundan yaklaşık 40 mikro saniyelik zaman aralığında iyonun enerji diyagramı periyodiktir. Yani elektrik alan yönünde enerji artarken, elektrik alana zıt yönde enerji azalmaktadır.



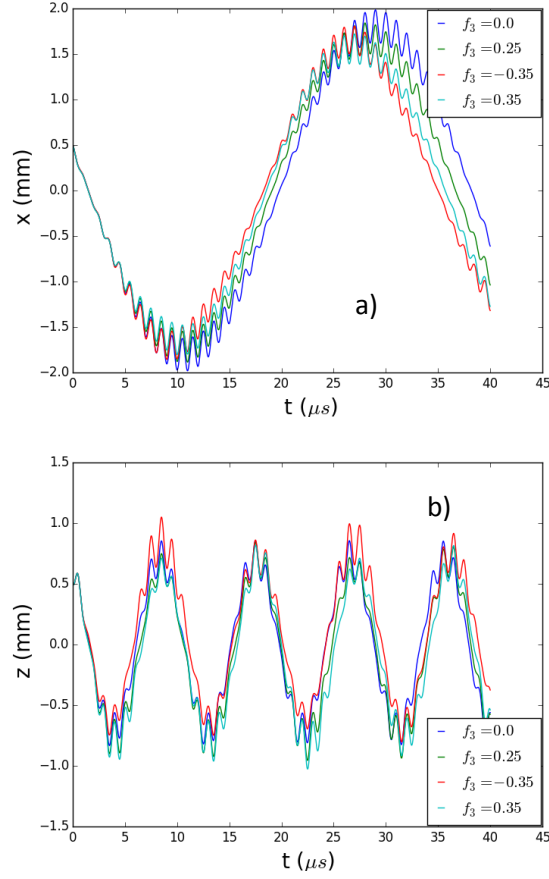
Şekil 5. Tek  $Mg^{+1}$  iyonunun zaman içerisindeki kinetik enerji değişimi

Tuzaklanmış iyonun x ve z koordinatındaki faz uzayı grafikleri Şekil 6'da görüldüğü gibidir. Başlangıç hızı y-koordinatında pozitif olduğundan sadece salınım yönü x-koordinatının tersi olacaktır fakat konumun genlik büyüklüğü ve hızın genlik büyüklüğü x koordinatı ile aynı olacaktır bu yüzden y-ekseni konum zaman ve y eksenini faz uzayı grafikleri sunulmamıştır. Tuzaklanmış iyonun faz uzayında çizdiği yörünge ve tuzak içerisinde x ekseninde maksimum hızın  $\sim 1100$  m/s ve z ekseninde ise  $\sim 1000$  m/s olduğu Şekil 6'dan görülmektedir.



Şekil 6. Tek  $Mg^{+1}$  iyonunun a) x-ekseni ve b) z-ekseni faz uzayı grafikleri

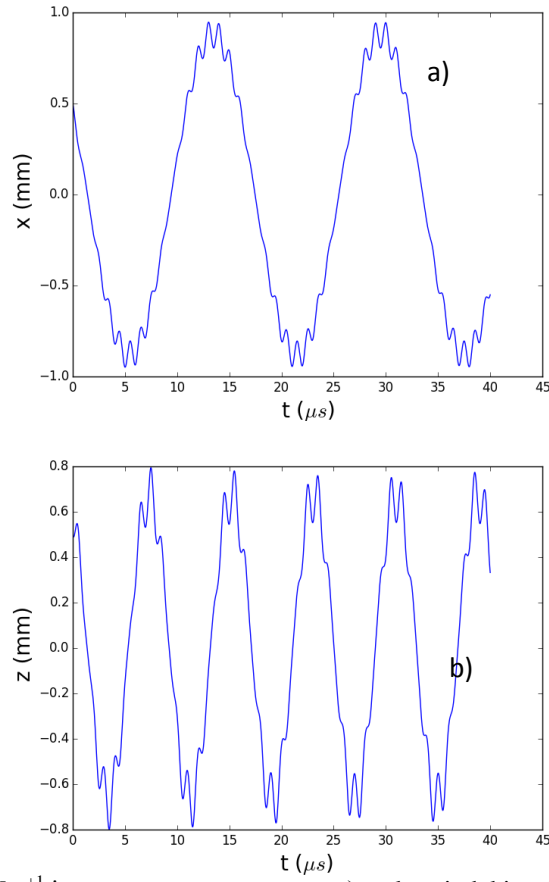
Şekil 7 farklı hexapol katkılarının varlığı durumunda iyonun x ve z koordinatındaki salınımlarında kayma olduğunu göstermektedir. Hexapol katkısı  $f_3$  negatif iken salınım periyodunu (makro salınım) azaltmakta iken, katkı pozitif iken makro salınımda kayma sağa doğru olup salınım periyodunu artırmaktadır. Ayrıca farklı  $f_3$  değerleri farklı miktarda kaymalara neden olmaktadır. Kaymanın miktarı x (y) ekseninde z ekseninde olduğundan daha küçük etkiye sahiptir. Kayma miktarı artar ise iyonun tuzak içinden çıkacağı için bu etkinin kontrol altında olması gerekmektedir.



Şekil 7. Farklı Hekzapol katkılarının varlığında tek  $Mg^{+1}$  iyonunun t zamanına göre a) x ve b) z-eksenlerindeki salınımları

İyonların tuzak içerisindeki salınımları Boyutsuz Mathieu parametrelerine bağlıdır. Bu parametreler tuzakın büyüklüğü, uygulanan voltaj, tuzaklanan iyonun kütlesi ve AC gerilimin frekansı ile belirlenir. Yukarıda verileden farklı  $a_z$  ve  $q_z$  değeri kuadrupol iyon tuzakı için x ve z eksenlerindeki salınım Tablo 1 deki  $r_0$  ve  $z_0$  kullanılarak Şekil 8’de gösterilmiştir gibidir. Şekilden görüldüğü gibi x-ekseni ve z-ekseni salınım periyodu ile periyod genliği değişmiştir.





Şekil 8.  $a_z=0$ ,  $q_z=0.35$  için tek  $Mg^{+1}$  iyonunun t zamanına göre a) x eksenindeki ve b) z-eksenindeki salınımları

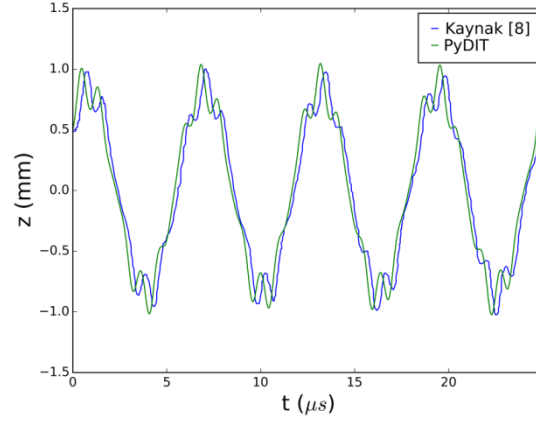
#### 4.1. PyDIT kodu ile literatür kıyaslaması

PyDIT kodu ile Kaynak [8] in bazı bulguları ile kıyaslanmış ve aşağıda verilen Tablo 2'deki sonuçlar elde edilmiştir. Burada kullanılan tuzak parametreleri ile iyonun başlangıç bilgileri Kaynak [8] den alınmıştır. Tablo 2'den görüldüğü gibi sonuçlar Kaynak [8] ile uyum içerisindedir. Ayrıca Kaynak [8] Şekil 11'den alınan z eksen salınım verileri ile PyDIT kodu ile elde edilen z eksen salınım grafiği Şekil 9'da görüldüğü gibidir. Burada z eksen hızı olarak 697.54 m/s kullanılmıştır.

Tablo 2. PyDIT bulguları ile literatür kıyaslaması

Parametreler	SIMION*	ITSIM*	ISIS*	PyDIT
$z_{min}(mm)$	-1.0631	-1.0206	-1.0100	-1.04745
$z_{max}(mm)$	1.0421	1.0264	1.00	1.04743

\* kaynak[8]'den alınan değerler



Şekil 9. Kaynak [8] ile PyDIT kodunun z eksenli salınımlarının kıyaslaması

## 5. Sonuç ve Tartışma

Bu çalışmada, elektrostatik bir iyon tuzağı olan Paul iyon tuzağında  $Mg^+$  iyonunun hareket dinamikleri incelenmiştir. Belirlenen tuzak parametreleri bu kapsamda yazılan bir simülasyon programına girilmiş ve iyonların tuzak içindeki hareketleri incelenmiştir. PyDIT simülasyon kodunun literatür ile kıyaslaması yapılmış ve uygun sonuçlar verdiği görülmüştür. Hexapol katkısının varlığında iyon salınım periyodunda kayma olduğu ve bu kaymanın salınım periyodunu; negatif katkı için artırdığı, pozitif katkı için azalttığı bulunmuştur. İleriki safha olarak iyonların soğutulmasının PyDIT koduna dahil edilmesi planlanmaktadır.

## Kaynaklar

- [1] Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G., 2005. Charged particle traps: Physics and techniques of charged particle field confinement. *Springer*, p. 240.
- [2] Wolfgang P., 1990. Electromagnetic traps for charged and neutral particles. *Review of Modern Physics*, 62(3): 531-540.
- [3] Nägerl, H.C., Roos, Ch., Rohde, H., Leibfried, D., Eschner, J., Schmidt-Kaler, F., Blatt, R., 2000. Addressing and cooling of single ions in Paul traps. *Fortschritte der Physik*, 48 (5-7): 623-636.
- [4] Blümel, R., Kappler, C., Quint, W., Walther, H., 1989. Chaos and order of laser-cooled ions in a Paul trap. *Physical Review A*, 40(2): 808-823.
- [5] March R.E., 2009. Quadrupole ion traps. *Mass Spectrometry Reviews*, 28 (6): 961– 989
- [6] March R.E., 1997. An introduction to quadrupole ion trap mass spectrometry. *Journal of Mass Spectrometry*, 32 (4): 351-369.
- [7] March, R.E., Todd, J.F., 2005. Quadrupole ion trap mass spectrometry. *Wiley*, 2<sup>nd</sup> Ed., p. 74.
- [8] Forbes M.W., Shari, M., Croley, T., Lausevic, Z., March, R.E., 1999. Simulation of ion trajectories in a quadrupole ion trap: a comparison of three simulation programs. *Journal of Mass Spectrometry* 34: 1219-1239.
- [9] www.python.org (Erişim Tarihi: 10.10.2015)
- [10] Hunter J.D., 2007. Matplotlib: A 2D graphics environment, *Computing in Science & Engineering*, 9 (3): 90-95.

Serkan Avcı e-posta: avciserkan52@gmail.com