

SERKAN AVCI, 2015



T.C.
Niğde Üniversitesi
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİKANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

PAUL İYON TUZAĞINDA İYON DİNAMİKLERİNİN İNCELENMESİ

SERKAN AVCI

Aralık 2015

Niğde Üniversitesi
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

T.C.
NİĞDE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

PAUL İYON TUZAĞINDA İYON DİNAMİKLERİNİN İNCELENMESİ

SERKAN AVCI

Yüksek Lisans Tezi

Danışman
Doç. Dr. Hüsnü AKSAKAL

Aralık 2015

Serkan AVCI tarafından **Doç. Dr Hüsnu AKSAKAL** danışmanlığında hazırlanan “**Pauli İyon Tuzağında İyon Dinamiklerinin İncelenmesi**” adlı bu çalışma jürimiz tarafından Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Fizik** Ana Bilim Dalı’nda Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : (Yrd. Doç. Dr Avni AKSOY) (Ankara Üniversitesi Hızlandırıcı Teknolojileri Enstitüsü)



Üye : (Doç. Dr. Hüsnu AKSAKAL) (Niğde Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü)



Üye : (Yrd. Doç. Dr Zafer NERGİZ) (Niğde Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü)



ONAY:

Bu tez, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunca belirlenmiş olan yukarıdaki jüri üyeleri tarafından .../.../20... tarihinde uygun görülmüş ve Enstitü Yönetim Kurulu'nun .../.../20... tarih ve sayılı kararıyla kabul edilmiştir.

...../...../20...

Doç. Dr. Murat BARUT
MÜDÜR

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Serkan AVCI

ÖZET

PAUL İYON TUZAĞINDA İYON DİNAMİKLERİNİN İNCELENMESİ

AVCI Serkan

Niğde Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman

:Doç. Dr. Hüsnü AKSAKAL

Aralık 2015, 68 sayfa

Bu yüksek lisans tez çalışmasında, iyonları elektrostatik tuzaklamaya dayalı Paul tuzağı içindeki iyon dinamikleri incelenmiştir. Paul tuzağı DC ve AC gerilim kombinasyonu ile elektrotların beslenmesi temeline dayanmaktadır. İyonların tuzaklanmaları için Mathieu diferansiyel denkleminin kararlılık sınırları içinde kalan boyutsuz Mathieu parametreleri kullanılmalıdır. Tek iyonun üç boyutta hareketi kuadrupol tuzak içinde simulasyon programı yardımıyla incelenmiştir. Ayrıca heksapol katkıların tuzak içerisinde iyon salınımlarını nasıl değiştireceği incelenmiştir. Ayrıca birden fazla iyon durumu için Coulomb etkileşmesi dahil edilmiş ve iyonların kütle merkezinin yörüngesi ve salınımları incelenmiştir.

Anahtar Sözcükler: Elektrostatik iyon tuzak, iyon dinamikleri.

SUMMARY

INVESTIGATION OF ION DYNAMICS IN PAUL ION TRAP

AVCI, Serkan

Nigde University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor : Assoc. Professor Dr. Hüsnü AKSAKAL

December 2015, 68 pages

In this Master thesis, ion dynamics in a Paul trap which is based on an electrostatic trap has been investigated. Paul trap is based on feeding electrodes with combination of DC and AC voltage. Dimensionless Mathieu stability parameters are used which must inside the stability criteria of Mathieu differential equation to achieve trap of the ions. Three dimensional motions inside quadruple trap of single ion has been examined. Furthermore how ion oscillation is changed by hexapole contribution is investigated. Moreover in the case of more than one ion, Coulomb interaction taken into account and ions center of mass trajectory and oscillations have been investigated.

Keywords: Electrostatic ion trap, ion dynamics.

ÖN SÖZ

Bu tezin hazırlanmasında hiçbir fedakârlıktan kaçınmayan elinden gelen bütün bilgi ve becerilerini sunan danışmanım Sayın Doç. Dr. Hüsnü AKSAKAL hocama içtenlikle teşekkürü borç bilir, saygılarımı sunarım. Yine bu konudaki çalışmalarında bana maddi manevi her türlü desteği veren sevgili eşim Kadriye AVCI'ya teşekkür ederim. Yine bu eserin hazırlanmasında yardımlarını esirgemeyen Dr. Ertan ARIKAN hocama da en samimi teşekkürü bir borç bilirim. Fakültemin değerli hocalarına bilgi ve becerilerime vermiş oldukları katkılardan ve gösterdikleri sabırdan dolayı teşekkürü bir borç bilerek saygılarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

TEZ BİLDİRİMİ.....	iv
ÖZET	v
SUMMARY.....	vi
ÖN SÖZ.....	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
SİMGELER LİSTESİ	xiii
BÖLÜM I GİRİŞ	1
BÖLÜM II TUZAKLAMA ÇEŞİTLERİ	4
2.1 İyon tuzağının çalışma prensibi	6
2.2 Paul tuzaklama.....	8
2.3 Tuzak içindeki iyonların hareket dinamiği	9
2.4. Hareket denkleminde üst mertebeden katkılar.....	15
BÖLÜM III İYON ENJEKSİYONU SOĞUTULMASI VE DEDEKTASYONU	16
3.1 İyon enjeksiyonu.....	16
3.1.1 İyonların tuzak içinde oluşturulması	16
3.1.2 Dışarıdan iyon enjeksiyonu.....	16
3.1.3 İyonların hız ve konum dağılımı	17
3.2 Tuzaklanmış Yüklü Parçacıkların Soğutulması.....	19
3.2.1 İyon tuzağında sıcaklık	19
3.2.2 İyon sıcaklık ölçümü	20
3.2.3 Işımalı soğutma	21
3.3 Tuzaklanmış parçacık detektörleri.....	22
3.3.1 Elektronik detektör.....	22
3.3. 2 Optik detektör	23
3.3.3 Paul tuzak tahribatlı detektör	23
BÖLÜM IV MATERYAL VE METHOD	24
BÖLÜM V BULGULAR VE TARTIŞMA.....	25

5.1 Tek iyon dinamikleri ve hekzapol katkısı.....	25
5.2 Çoklu iyon dinamikleri ve hekzapol katkısı	33
BÖLÜM VI SONUÇ	43
KAYNAKLAR	44
EKLER.....	46
EK- A Mathieu diferansiyel denkleminin Floquet çözümü	46
EK-B Mathieu diferansiyel denklemi kararlılık bölgeleri	50
EK-C Runge Kutta Metodu	51
EK-D Simülasyon Programı Karşılaştırması.....	52
ÖZ GEÇMİŞ	53
TEZ ÇALIŞMASINDAN ÜRETİLEN ESERLER	54

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 1 Tuzak parametreleri ve iyonun başlangıç bilgileri	25
Çizelge 2 PyDIT İle Forbes vd. karşılaştırılması (Aksakal ve Avcı 2015).	52

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Silindirik paul tuzak mekanizması	6
Şekil 2.2. Lineer paul tuzak şekli ve elektrotların bağlantısı, 12 elektrotlu sistem	8
Şekil 2.3. Dört elektrot ve iki halkadan oluşan sistem.....	8
Şekil 2.4 Silindirik paul tuzak içerisindeki elektrik alan çizgileri, bir rf devri öncesi (a) ve bir rf devri sonrası (b)	9
Şekil 2.5. Bir paul tuzakta bir parçacığın izlediği örnek bir yörünge	12
Şekil 2.6. Paul tuzakta eş potansiyel eyer biçimli yüzeyint periyodu ile salınımı.....	13
Şekil 2.7. İndirgenmiş paul potansiyeli kontur eğrileri Φ/V_0 için $U_0 = 0, x \leq 2d$,.....	13
Şekil 2.8. Mathieu diferansiyel denklemi birinci bölge kararlılık diyagramı	14
Şekil 3.1 Elektronik algılama ilkesi (major vd., 2005).....	22
Şekil 5.1 Tek mg^{+1} iyonu, x-y salınımı (a) ve z-x salınımı (b).....	26
Şekil 5.2 Tuzaklanmış parçacığın konumunun zamana göre salınımı, x (a), z (b).....	27
Şekil 5.3 Parçacığın zaman içerisindeki kinetik enerji değişimi	28
Şekil 5.4 Parçacığın x (a) ve z (b) faz uzayı grafikleri	29
Şekil 5.5 Parçacığın zamana göre x (a) ve z konumlarının (b) salınımları.....	30
Şekil 5.6 Kuadropol tuzakta $f_3= 0.25$ iken parçacığın izlediği yörünge	31
Şekil 5.7 $a_z=0.00, q_z=0.33$ için iyonun zamana göre x (a) ve z konumlarının (b) salınımları	32
Şekil 5.8 İyon topluluğunun, hız (a) ve konum dağılımı (b)	33
Şekil 5.8- devamı, iyon topluluğunun, hız (a) ve konum dağılımı (b)	34
Şekil 5.9 İyon demetinin x konumunun zamana göre değişimi coulomb etkisi (20 iyon) ..	35
Şekil 5.10 İyon demeti kütle merkezinin ve bir iyonun z eksenindeki zamanla değişimi....	36
Şekil 5.11 İyon demeti kütle merkezi x konumu zamana göre değişimi (hekzapol ve kuadropol).....	37
Şekil 5.12 x,y ve z boyutunda bir iyon ile km konumlarının farkının zamana göre değişimi, kuadropol (a), hekzapol ($f_3=0.25$) (b).....	38
Şekil 5.13 Kütle merkezinin üç boyutlu yörüngesi ($f_3=0.25$).....	39

Şekil 5.14 Hekzapol katkılı tuzakta iyon demeti kütle merkezinin xz düzlemi yörüngesi ($f_3=0.25$).....	40
Şekil 5.15 Hekzapol katkılı tuzakta iyon demeti kütle merkezinin xy düzlemi yörüngesi ($f_3=0.25$).....	40
Şekil 5.16 İyon demeti kütle merkezinin x yönündeki hız konum grafiği ($f_3=0.25$).....	41
Şekil 5.17 İyon demeti kütle merkezinin z yönündeki faz uzayı grafiği ($f_3=0.25$)	42
Şekil 0.1 Mathieu çözümüne göre, faz uzayı analizi, w'nin eliptik faz uzayı gösterimi	49
Şekil 0.2 Lineer rf paul tuzak istikrar şeması, istikrarlı bölgeler iki kararlılık diyagramlarının kesiştiği yerlerdir.(Major, vd., 2005).	50
Şekil 0.3 İdeal paul tuzak için kararlılık diyagramı, a ve b koyu gri bölgeler kararlı olan bölgeler b) a bölgesinin yakın plan görünümü (Major, vd., 2005).	50
Şekil 0.4 PyDIT kodu ile forbes ve arkadaşlarının z-ekseni iyon salınımlarının kıyaslaması (Aksakal, 2015).....	52

SİMGELER LİSTESİ

$\vec{\nabla}$	Del (üç boyutta türev)operatörü $\left(\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \hat{i} + \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \hat{j} + \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} \hat{k}\right)$
U_0	DC Potansiyel
$V_0 \cos \Omega t$	Uygulanan AC Potansiyel
m	İyon Kütlesi
q	Elektriksel yük
Ω	Açısal frekans
t	Zaman
v	Hız
ω_0	Serbest parçacık siklotron frekansı
ω_z	Ayrıştırma frekansı
$\langle n \rangle$	Ortalama değer
T	Sıcaklık
E_{Kin}	Kinetik enerji
\hbar	İndirgenmiş Planck Sabiti($h/2\pi$)
F	Kuvvet
Φ	Potansiyel
MD	Moleküler Dinamik
eV	Elektron volt

BÖLÜM I

GİRİŞ

Parçacıkların tuzaklanmasının başlangıcı Penning tuzakla anılmaya başlanmıştır. Bu tuzak ilk olarak yüksek vakumlu “soğuk katod” un icadı ile başlar bu Penning iyonizasyon ölçüm aleti olarak adlandırılır. Burada bir eksensel manyetik alan elektron difüzyonunu yavaşlatmak için kullanılır. Deşarj ateşlendikten sonra, manyetik alanın üzerinden kendi difüzyon hızını yavaşlatır. Böylece manyetik alan çizgileri etrafında elektronlar siklotron hareketine sahip olur (Major vd., 2005).

Elektrotların hiperbolik geometriye sahip olarak alınması ve kuadrupol (dört-kutup) elektrik alanı uygulanarak oluşturulan tuzak eksensel manyetik alan ile beraber kullanılarak JR Pierce tarafından 1949 yılında önerildi. Tasarım Penning–Pierce tuzak adı ile anılmaktadır (Major vd., 2005).

Bu süre içerisinde W. Paul ve arkadaşları çok-kutuplu elektrik ve manyetik alanlarda elektrik veya manyetik dipol momentine sahip nötr parçacıkların demetlerini odaklamak için araştırma yapmış ve molekül spektroskopisi için kullanmışlardır. Bu araştırmanın ürünü olarak hidrojen mazer gelişimi için kritik öneme sahip odaklayıcı altı-kutup (heksapole) mıknatısı tanımlanmıştır. Ayrıca çok kutuplu elektrik alanda bir iyon demetinin z- ekseninde hareket eden iyonların aynı zamanda enine (x ve y ekseninde) odaklanmış olarak hareket edebileceği belirlenmiştir. (Major vd., 2005).

Bu bulgulardan sonra araştırmalarda yüksek enerjili parçacık demetleri optik ile birlikte anılmaya başlamış ve hızlandırıcılar için güçlü odaklama prensibi olarak adlandırılmıştır. Parçacık demetleri yakınsak ve ıraksak elektrik ve manyetik merceklerden geçirilerek odaklama yapılarak ve hızlandırılabilir. (Major vd., 2005).

Paul ve arkadaşları iyonları tuzaklamak için, zamanla salınım yapan elektrik alan kullanarak hareketli iyonların uzaysal bir nokta etrafında salınım hareketi yapacağını bulmuşlardır. Böylece hangi kütle için hangi iyonun ait olduğunu belirleyen, manyetik kütle ayırım metodundan farklı, Paul iyon kütle filtresi ortaya çıkmıştır. Bu konuda yaptıkları

çalışmalar neticesinde W. Paul ve H. Dehmelt 1989 Nobel Fizik Ödülünü kazanmışlardır (Paul, 1990; Url-1).

Paul, üç boyutlu uygulanan potansiyelin genel ifadesini aşağıdaki gibi yazmıştır;

$$\Phi = \Phi_0(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) \quad (1.1)$$

Denklem (1.1) ile verilen potansiyelin Laplace denklemini ($\nabla^2\Phi = 0$) sağlaması için $\alpha + \beta + \gamma = 0$ olmalıdır. Kullanılan tuzak geometrisi ya iyon tuzağı ya da kütle spektrometresi olarak kullanılabilir. Aradaki fark, tuzak iyonları üç boyutta tuzaklarken kütle spektrometresi iki boyutta tuzaklama yapmaktadır. Eğer kuadrupol sistemi kütle spektrometresi olarak kullanılacak ise iyonlar iki boyutta (x,y) tuzaklanır ve $\alpha = -\beta$, $\gamma = 0$ tercih edilir. İyonları üç boyutta tuzaklamak için $\alpha = \beta = 1, \gamma = -2$ seçilir. Eğer $\alpha = \beta$ ve $\gamma = 2\beta$ ise “Lonenk afig” denilen üç boyutlu eksensel bir tuzak elde edilir.

Paul iyon tuzağının geliştirmesindeki amaç ilk başta kütle spektrometresi alanında idi. Paul iyon tuzağı, iyon algılamada olağanüstü hassasiyet sağladığı için, artık gaz analizörü (residual gas analyzer) ve vakum kaçak tespiti konularında da kullanılmaktadır. Serbest iyonların spektroskopisinde Paul tuzağın ilk uygulaması 1962 yılında yapılmıştır. Bu uygulamada, $^4\text{He}^+$ iyonları, spin polarize Cs atomları ile etkileşir ve spin değiş-tokuş çarpışması ile He iyonları spin polarize haline gelir. Bu etkinleştirilmiş manyetik rezonans serbest He iyonları üzerinde gözlemlenmiş ve taban durumu g-faktörü belirlenmiştir.

Serbest elektronların g-faktörünü ölçmek için Penning tuzak uygulaması ilk kez 1968 yılında yapılmıştır. Polarize Na atomları tuzaklanmış elektronlar üzerine gönderilmiş ve atomun elektronları ile inelastik çarpışma yapması sağlanarak tuzaklanmış elektronları polarize etmek için kullanılmıştır. Elektronların manyetik geçişlerini ölçmek için spin bağımlı inelastik çarpışmadan faydalanılmıştır. Paul tuzak kullanılarak iyonların spektrumu, taban durumu, aşırı ince yapısı, alt enerji düzeylerine pompalama, optik frekans vb. konularda bilgiler elde edilir.

1973 yılında Penning tuzakla elektronların algılanması, soğutma yöntemleri ile önemli bir deneysel sonuç elde ederek bireysel elektronları gözlemlemiştir.

Stern-Gerlach 1976 yılında serbest elektronların manyetik momentlerini başarıyla ölçmüştür.

Paul tuzakla Na^+ iyonları üzerine 1977 yılında iyonların bir rezonansa bir lazer kullanarak girişim oluşturduğunu floresans etkisiyle göstermiştir (Major vd., 2005).

1975 yılında atom parçacıklarının Lazerle soğutma yöntemi üzerine Hansch ve Schawlow araştırmalar yapmışlar ve özellikle Wineland ve Horeche bir tuzakta salınan iyonların bu yöntemle soğutulabileceği önerisini sunmuşlar. Bu çalışma daha sonra 2012 Nobel fizik ödülü ile onurlandırılmıştır (Url-2).

1978'de optik soğutma ve tek bir iyonun optik gözlemine Toschek ve arkadaşları göstermiştir. Dehmelt, tuzak içerisindeki iyon topluluklarının lazer soğutma ile soğutulduklarında, iyonun kinetik enerjilerinin ortalama Coulomp enerjileri ve rastgele ayırık salınım hareketlerinin azaldığını 1988 yılında göstermiştir ve bireysel iyonların düzenli bir kristal yapıya ulaştırılabilirliğini sağlamıştır. Bir deneysel gelişimde 1988 yılında anti-protonları ölçülebilir bir sayıda yakalama ve depolama alanında sağlandı. CERN'de 2001 yılında bu konuda, dikey 6T'lık bir manyetik alanı ile eş eksenli 32 halkalı Penning tuzak geliştirilmiştir (Major vd., 2005).

Bu yüksek lisans tez çalışmasında Paul iyon tuzağının parametreleri belirlenmiş ve tek ve çoklu iyon dinamikleri kuadrupol ve hekzapol alanları için incelenmiştir.

BÖLÜM II

TUZAKLAMA ÇEŞİTLERİ

Bir iyonun elektrik ve manyetik alan kullanılarak belli bir bölge içerisinde tutulmasına tuzaklama denir. Günümüzde bilinen birçok tuzaklama çeşidi vardır. Bunlardan bazıları; yüklü parçacıkları tuzaklamak için kullanılan Paul ve Penning tuzak ve nötr parçacıkları tuzaklamak için kullanılan optik cımbızdır. İlk iyon tuzağını, 1936'da F.M. Penning tasarlamıştır. Federal Almanyalı bilim adamı Wolfgang Paul ise, 1950'li yıllarda, ikinci tür bir iyon tuzağı bulmuştur. Günümüzde kullanılanlar da, hala bu öncülerin geliştirdiği ilkelere dayanmaktadır, ilk deneyler, çok sayıda iyonla yapıyordu; bu yüzden iyonlar hakkında tüm fiziksel özellikler belirlenemiyordu. Yıllar geçtikçe, araştırmacılar, tuzaklanan iyon sayısını birkaçına indirmeyi amaçladılar. 1978'de Federal Almanyalı P.Toschek ile ABD'li Hans Dehmelt ve arkadaşları, bir tuzak içinde, birkaç baryum iyonundan oluşan bir iyon topluluğu elde etmeyi başardılar. Böylece bu iyonlardan saçılan ışığın, kaç iyondan geldiğini belirlenebiliyordu. Tuzak içerisinde az sayıda iyon bulunması halinde, atomların foton yayılması ya da soğurması gibi tümüyle kuantum mekaniksel olaylar, deney sonuçları ile doğrulanıyordu. Tuzak içindeki iyonu uzun süre gözlemleyebilmek için iyonun hızının azaltılması gerekir, bu hızdaki azaltma olayına soğutma ismi verilir. Soğutma sonunda, birkaç iyondan oluşan düzensiz bir iyon topluluğundan yayınlanması beklenen ışığın davranışının tümüyle değiştiği gözlemlendi; tuzağın içinin çekilen fotoğrafları, iyonların, kristallere benzeyen düzenli yapılar verecek biçimde dizildiklerini gösterdi. Bilim adamları, tuzağın sınır şartları değiştirilince, iyon kristallerin nasıl oluştuğunu; açıklamaya çalışmışlardır. Gözlemlere göre, bu olay, bir katı fazdan (kristal) bir gaz fazına (bulut); başka deyişle, düzenden karmaşaya (kaosa) geçiş olarak düşünülebilir. İyonların davranışını yöneten işleyişi anlayabilmek için, öncelikle, tuzağın kendi çalışmasını incelemek gerekir (Bilim ve teknoloji İyonları tuzaklama, Url-1).

İyonu, tuzağın içine yerleştirmenin en basit yolu iyonu tuzağın içinde oluşturmaktır. Örneğin, tuzağın içinden geçen bir atom demeti, hızlı elektronlarla bombardıman edilebilir. Elektronların çarpması ile genel olarak, atomlar birer elektron yitirirler ve artı iyonlar

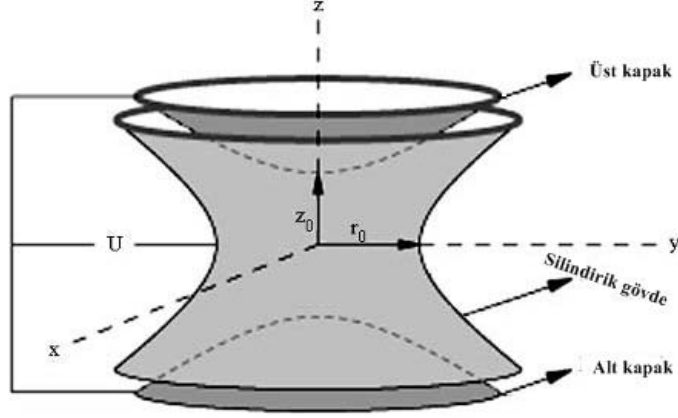
oluştururlar. Tuzaklanmış bile olsalar, bu iyonların kutuya girerken taşıdıkları yüksek hızları fazla değişmez; böylece tuzağın içindeki doğrusal hareketleri de hızlı olur. Başka deyişle, iyonların büyük bir kinetik enerjisi vardır; dolayısıyla, sıcaklıkları da yüksektir; çünkü bir atomlar topluluğu için, sıcaklık, kinetik enerji ile doğru orantılıdır. İyonların hızlı ve denetlenmesi zor hareketi, onların gerçek içyapı özelliklerini gizler ya da değiştirir. Öyleyse, iyonları kinetik enerjilerinden kurtarmak, yani onları soğutmak gerekir.

İşte bu nedenle, soğutucu olarak, bir lazer kullanılır. Lazerin yayınladığı fotonlar, iyonlara bir “ışınım basıncı” uygular bu da, iyonların hareketini değiştirir. Lazerin frekansı iyi ayarlanabilirse, hareketli bir iyon, kendine çarpan bir fotonu soğurabilir ve kendi de frenlenmiş olur; çünkü momentumu, fotonun momentumu kadar azalır. Ancak bu yavaşlama, çok azdır; çünkü fotonun taşıdığı momentum çok küçüktür. Dolayısıyla, iyonu yavaşlatmak için çok sayıda çarpışma gerekir. İyon, her çarpışmada bir foton soğurarak, taban durumundan uyarılmış bir duruma geçer; biraz sonra, soğurduğu fotona benzeyen bir foton yayınlayarak, yeniden taban durumuna döner. Böylece, lazerin yayınladığı çok sayıda fotonu soğurabilir (Url-1).

İyonları soğutmanın ikinci yolu ise tuzak içerisinde hafif kütleli nötr bir gaz demeti bulundurulur. Tuzaklanan iyonların bu tampon nötr gaz ile çarpışmaları iyonların kinetik enerjisini azaltacağından iyonlar soğutulmuş olur. Bu tez çalışmasında iyonların soğutulması hesaba katılmamıştır.

2.1 İyon tuzağının çalışma prensibi

İyon tuzağının temel bölümü, elektrik alanların etki ettiği metal bölümdür. Bu bölüm altta ve üstte kapak şeklinde bakır çukurlar tarafından kapatılır ve kendisi de bakırdan içi boş bir silindir gibidir. Aşağıda verilen Şekil 2.1 de görüldüğü gibidir.



Şekil 2.1 Silindirik Paul Tuzak Mekanizması

Kapaklar ve halka tam birbirine temas etmeyecek şekilde yerleştirilmişlerdir. Böylece kapaklar ve halka farklı gerilimlerde tutulabilirler. Tuzakta belirtilen iki farklı bölümden halkaya (+) gerilimi, kapaklara ise (-) gerilimi uygulayalım, bu durumda tuzak içerisine (+) yüklü bir iyon yerleştirelim ve nasıl tuzaklanacağını araştıralım. Halka iyonu merkeze doğru iterek merkezde kalmasını sağlayacak, kapaklar ise kendine doğru çekerek iyonun orta bölümde merkezde kalmasını sağlayacaktır. Kapaklardan birine çok az bir miktarda yaklaşmış olsa, iyon o yöndeki çekim kuvvetinden daha fazla etkilenecek o yönde pozitif ivme ile hızlanan harekete başlayacak ve iyon tuzaklanamayacak. Bu problemi aşmak için kapaklara da artı yük ile yükleme yapılarak Faraday kafesine benzetilmek istenmiştir. Bu durumun Faraday kafesinden tek farkı, Faraday kafesinin her yerinde eşit gerilim var iken tuzakta kapaklar ile silindir bölgenin gerilimleri farklı tutulmuştur. Halkaya ve kapaklara uygulanan gerilimlerin işaretleri de kendi aralarında değiş tokuş edilebilir. Bu durumda ise, iyonun hareketi düşey doğrultuda kısıtlanmış olur; yatay düzlemdeki hareketi ise, kararsızdır. İyon tuzağında kararlı bir hareket elde edebilmek için, Penning'in 1936'da ve Paul'ün 1958'de önerdikleri iki tür değişiklik yapılabilir.

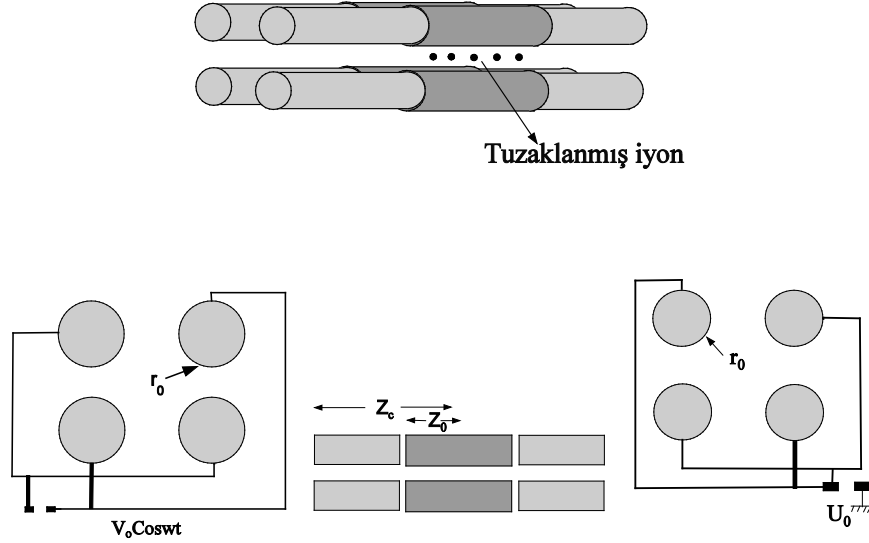
Penning Tuzak: Penning'in önerisi, bir manyetik alandan yararlanmaktır. Tuzak düzeneğini, bir mıknatısın oluşturduğu düşey bir manyetik alana yerleştirelim; kapaklara artı, halkaya ise, eksi birer elektrik gerilimi uygulayalım. Manyetik alanın varlığı, iyonun yatay düzlemde kalmasını sağlar; çünkü iyonun, manyetik alanca belirlenen eksen etrafında daire biçiminde yörüngeler izlemesine neden olur. Bu da, elektrik kuvvetlerinden gelen kararsızlığı dengeler. Böylece, Penning tuzağı, iyonu, uzayın üç doğrultusunda da tuzaklama amacımızı gerçekleştirmiş olur (Blümel, 1989).

Paul Tuzak: Paul'ün önerisinde ise, yalnızca elektrik alanları kullanılır; yalnız bu kez, elektrik alanları, zamana bağlı olarak hızla değişirler. Bu durumda, iyonun hareketi, sabit elektrik alanları durumundakine benzer olarak incelenecektir: Önce, halka artı gerilimdeyken, kapaklar eksi gerilimde olsun. Gerilimler, zamanın fonksiyonu olduğundan, başlangıçta merkezde bulunan iyon, merkezden uzaklaşmaya başlayacaktır; bir süre sonra da, halka ve kapak gerilimlerinin işaretleri değiş tokuş olunca, halka eksi ve kapaklar artı gerilime geçeceklerinden, iyon, kapakların itme etkisi ile merkeze gelerek, yatay doğrultuda uzaklaşmaya başlayacaktır. Yine gerilimlerin işareti değişecek, hareket düşey doğrultuya geçecek ve böyle sürüp gidecektir. Böylece iyon, kutunun içindeki küçük bir bölgede hareket etmeye zorlanmış ya da tuzaklanmış olacaktır (Blümel, 1989).

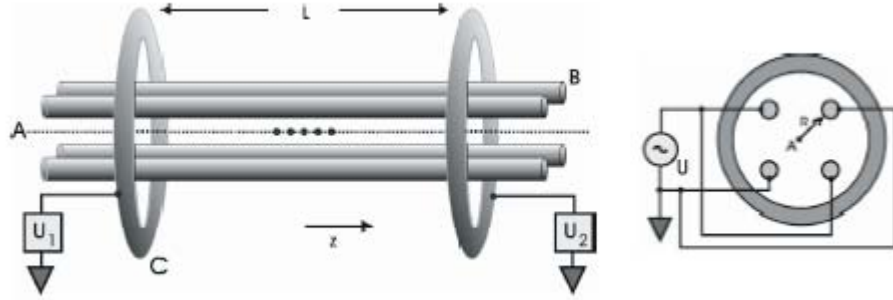
Paul'ün yöntemi, Penning'in yönteminden daha uygundur; çünkü tuzaklanmış iyonların durdurulmasına da izin verir. Oysa Penning'in yöntemindeki daire biçimindeki hareket durdurulamaz. İyon tuzağı düzeneğinde yapılan bir deney, ardışık birçok işlemde oluşur. Nötr magnezyum atomlarından oluşan ince bir atom demetinin, tuzağın halka ve kapağı arasındaki dar aralıktan gönderilmesiyle başlanır. Atomlar, kutunun merkezine ulaştınca, alt kapakta açılmış bir delikten geçen bir elektron demetiyle bombardıman edildiklerinden, iyonlaşırlar. Tuzakta, birkaç iyon tutulduktan sonra, atom demeti de, elektron demeti de durdurulur. Sonra da, içerideki iyonlar, tuzağın halka ve kapakları arasındaki başka bir açıklıktan geçirilen bir lazer demeti ile aydınlatılır. Üst kapakta açılmış bir delikten de çok geliştirilmiş bir görüntüleme tekniği ile iyonların fotoğraf ya da filmi çekilebilir. Yalnız, bu düzeneğin, vakumlu ortamda (havası iyice boşaltılmış) bulunması gereklidir (Major vd., 2005).

2.2 Paul tuzaklama

Literatürde çeşitli Paul tuzak teknikleri mevcuttur. Şekil 1’de görülen silindirik tuzak iken Şekil 2.2 ve Şekil 2.3 ise lineer Paul tuzağını göstermektedir.



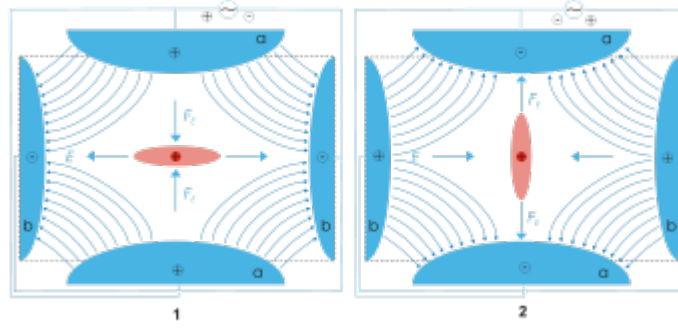
Şekil 2.2. Lineer Paul Tuzak şekli ve elektrotların bağlantısı, 12 elektrotlu sistem



Şekil 2.3. Dört elektrot ve iki halkadan oluşan sistem

Şekil 2.1’de anlatılan silindirik halkanın yerini Şekil 2.2’de 4 lineer elektrot almış kapakların yerini ise Şekil 2.2 uç elektrotlar alırken Şekil 2.3’de ise halka elektrotlar almıştır. Silindirik tuzakta iyonlar sadece merkezde bir noktada tuzaklanırken lineer Paul

tuzakında bir eksen (z) üzerinde tuzaklanabilirler. Her bir tuzakın içerisinde meydana gelen elektrik alanlar benzer olup uygulanan RF potansiyel neticesinde tuzak içerisinde Şekil2.4'te verildiği gibidir (Nagerl, 2000).



Şekil 2.4 Silindirik Paul tuzak içerisindeki elektrik alan çizgileri, bir rf devri öncesi (a) ve bir rf devri sonrası (b)

Silindirik elektrotlarla yapılan bir iyon tuzakında doğrusal bir radyo frekansı ile kararlılık özellikleri incelendiğinde (ideal bir tuzakta), kararlılık bölgesi içinde bir dizi deneysel olarak üç boyutlu görüntülerde kararsızlıklar gözlenmiştir. Bu kararsızlıklar, ideal kuadropol potansiyele yüksek mertebeden katkılar neticesinde ortaya çıkar. Eksenel tuzak bölgesinde statik potansiyel ile radyal iyon salınım frekansları değişimi sırasında ek kararsızlıklara yol açar (Nagerl, 2000).

2.3 Tuzak içindeki iyonların hareket dinamiği

Bir ϕ potansiyeli altında hareket eden parçacığa etki eden kuvvet denklem (2.1) da verildiği gibi potansiyelin gradyenti alınarak hesaplanır.

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.1)$$

Burada uygulanan potansiyel birinci bölümden elde edilmiş ve ifadesi aşağıda verildiği gibidir. Burada ϕ uygulanan potansiyel olup denklem 2.2 'de verildiği gibidir.

$$\phi = \frac{U_{dc} + V_{ac} \cos(\Omega t)}{(r_0^2 + 2z_0^2)} (x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (2.2)$$

Burada U_{dc} uygulanan DC potansiyeli, V_{ac} ise AC uygulanan gerilimin sıfır-pik değeri ve Ω ise bu gerilimin frekansını göstermektedir, r_0 ve z_0 ise geometri ile ilgili parametre olup radyal yönde elektrotlar arası mesafe ve dış kapaklar arası mesafenin yarısıdır (Şekil 2.1 ve Şekil 2.2'den görüldüğü gibi).

İyonlar üzerine etkiyen kuvvet bu potansiyelin gradyenti neticesinde şu forma dönüşür.

$$\vec{F} = q\vec{E} = q(-\vec{\nabla}\phi) = -q\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial\phi}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial\phi}{\partial z}\hat{k}\right) \quad (2.3)$$

$$\vec{F} = -q\left(\frac{U_{dc} + V_{ac}\cos(\Omega t)}{r_0^2 + 2z_0^2}\right)[(2x\hat{i}) + (2y\hat{j}) + (2z\hat{k})]$$

Newtonun 2. yasası gereği iyonun konumunu $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$ göstermek üzere

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d^2x}{dt^2}\hat{i} + \frac{d^2y}{dt^2}\hat{j} + \frac{d^2z}{dt^2}\hat{k} = -\frac{q}{m}\left(\frac{U_{dc} + V_{ac}\cos(\Omega t)}{r_0^2 + 2z_0^2}\right)(2x\hat{i} + 2y\hat{j} + 2z\hat{k})$$

Bu denklem birbirinden bağımsız 3 diferansiyel denklem formunda aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\left(\frac{2qU_{dc}}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} + \frac{2qV_{ac}\cos(\Omega t)}{m(r_0^2 + 2z_0^2)}\right) \cdot x \quad (2.4)$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -\left(\frac{2qU_{dc}}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} + \frac{2qV_{ac}\cos(\Omega t)}{m(r_0^2 + 2z_0^2)}\right) \cdot y \quad (2.5)$$

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\left(\frac{-4qU_{dc}}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} - \frac{4qV_{ac}\cos(\Omega t)}{m(r_0^2 + 2z_0^2)}\right) \cdot z \quad (2.6)$$

Bu denklemlere $\Omega t = 2\xi$ değişken değiştirmesi yapacak olursak $\frac{d\xi}{dt} = \frac{\Omega}{2}$ ve $\frac{d^2\xi}{dt^2} = \frac{\Omega^2}{4}$ olur.

Bu durumda tek boyutta hareket denklemi aşağıdaki hali alır.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d^2x}{d\xi^2} \frac{d^2\xi}{dt^2} = \frac{d^2x}{dt^2} \frac{\Omega^2}{4} = -\left(\frac{2qU_{dc}}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} + \frac{2qV_{ac}\cos(2\xi)}{m(r_0^2 + 2z_0^2)}\right)x$$

Üç boyutta denklemler aşağıdaki formu alırlar

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} = -\left(\frac{8qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} + \frac{8qV_{ac}\cos(2\xi)}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2}\right)x \quad (2.7)$$

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} = -\left(\frac{8qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} + \frac{8qV_{ac}\cos(2\xi)}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2}\right)y \quad (2.8)$$

$$\frac{d^2z}{d\xi^2} = -\left(\frac{-16qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} - \frac{16qV_{ac}\cos(2\xi)}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2}\right)z \quad (2.9)$$

Bu ifadeler Mathieu diferansiyel denklemine benzemektedir (Mathieu diferansiyel denkleminin analitik çözümü Ek-A da verilmiştir) (March ve Todd 1995).

$$\ddot{u} + [a_u - 2q_u\cos(2\xi)]u = 0 \quad (2.10)$$

Burada u, x, y ve z koordinatlarından birini göstermektedir. Denklem üç boyutta aşağıdaki gibidir.

$$\ddot{x} + [a_x - 2q_x\cos(2\xi)]x = 0 \quad (2.11)$$

$$\ddot{y} + [a_y - 2q_y\cos(2\xi)]y = 0 \quad (2.12)$$

$$\ddot{z} + [a_z - 2q_z\cos(2\xi)]z = 0 \quad (2.13)$$

Burada a_x , a_y , a_z , q_x , q_y , q_z boyutsuz Mathieu parametreleri olup aşağıda verildiği gibidir.

$$a_x = \frac{8qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad q_x = -\frac{4qV_{ac}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad (2.14)$$

$$a_y = \frac{8qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad q_y = -\frac{4qV_{ac}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad (2.15)$$

$$a_z = \frac{-16qU_{dc}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad q_z = \frac{8qV_{ac}}{m(r_0^2+2z_0^2)\Omega^2} \quad (2.16)$$

Ayrıca

$$a_z = -2a_x = -2a_y, \quad q_z = -2q_x = -2q_y \quad (2.17)$$

olduğuna dikkat edilmelidir. Yukarıda anlatılan hareket denklemleri tek iyon için geçerlidir.

Birden fazla iyon olması durumunda Coulomb etkileşim terimi ilave edilir. İlave edilen

Coulomb terimi

$$\vec{F} = k \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.18)$$

olup bileşenleri cinsinden aşağıdaki gibi yazılır.

$$\vec{F}_x = k \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} (x_i - x_j) \hat{i} \quad (2.19)$$

$$\vec{F}_y = k \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} (y_i - y_j) \hat{j} \quad (2.20)$$

$$\vec{F}_z = k \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} (z_i - z_j) \hat{k} \quad (2.21)$$

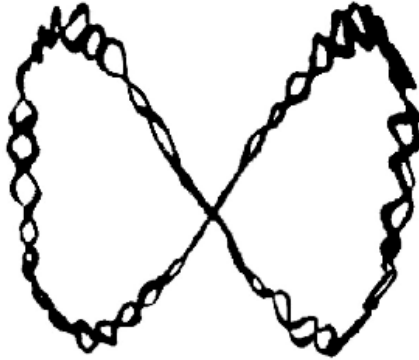
Coulomb terimi, denklem (2.3) ekleyecek olursak ve değişken değiştirmesi yapılmış üç boyuttaki hareket denklemleri olan (2.11), (2.12), (2.13) aşağıdaki formlarını alırlar.

$$\ddot{x} + [a_x - 2q_x \cos(2\xi)]x - \frac{4}{m\Omega^2} F_x = 0 \quad (2.22)$$

$$\ddot{y} + [a_y - 2q_y \cos(2\xi)]y - \frac{4}{m\Omega^2} F_y = 0 \quad (2.23)$$

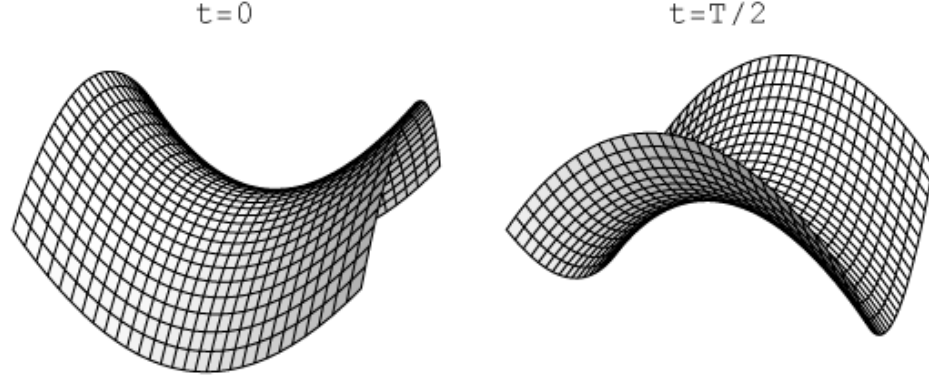
$$\ddot{z} + [a_z - 2q_z \cos(2\xi)]z - \frac{4}{m\Omega^2} F_z = 0 \quad (2.24)$$

Mathieu denkleminin çözümünün olabilmesi için kararlılık kriterlerinin yani boyutsuz Mathieu parametrelerinin aralığının bilinmesi gerekmektedir. Bu kararlılık kriterleri EK-1 de verildiği gibidir. Kararlılık kriterlerine uygun parametreler kullanılırsa Paul tuzakta bir parçacığın izlediği yörünge aşağıdaki gibidir. Verilen her boyutsuz Mathieu parametreleri için bu eğri biraz farklılık gösterebilir (March ve Todd 1997).

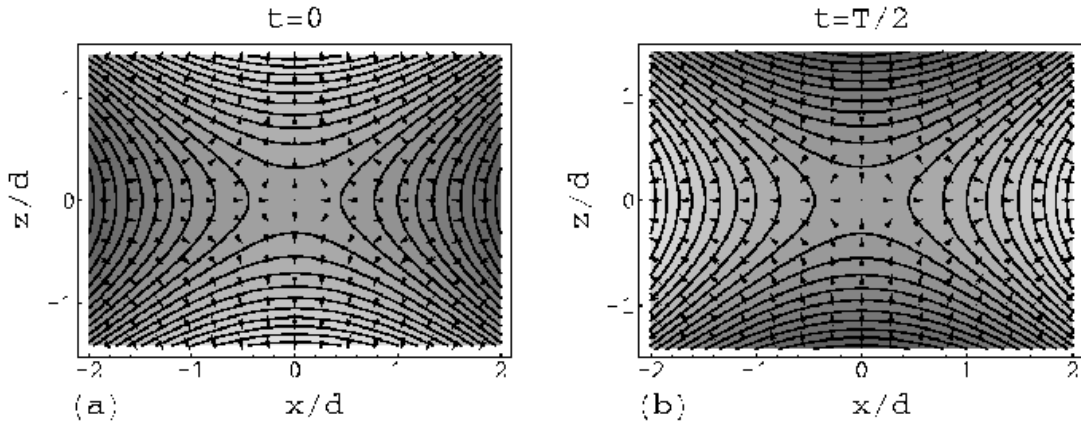


Şekil 2.5. Bir Paul tuzakta bir parçacığın izlediği örnek bir yörünge

Tuzak içindeki potansiyelin değişimi Şekil 2.6, enine potansiyel ve elektrik alanlar ise Şekil 2.7 de verildiği gibidir.



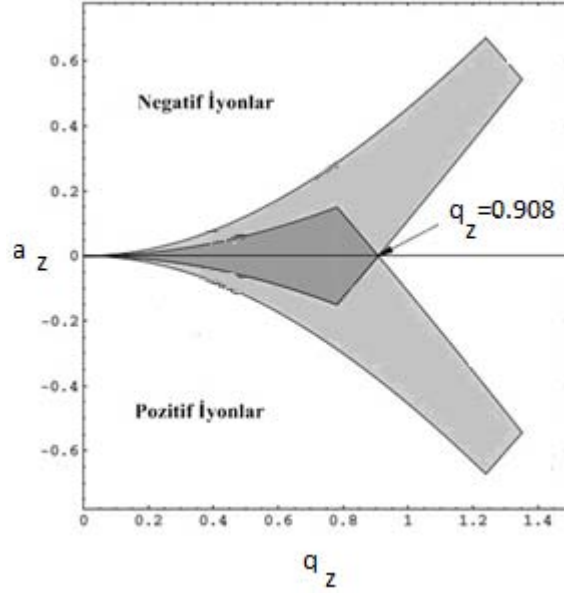
Şekil 2.6. Paul tuzakta eş potansiyel eyer biçimli yüzeyin T periyodu ile salınımı



Şekil 2.7. İndirgenmiş Paul potansiyeli kontur eğrileri Φ/V_0 için $U_0 = 0$, $|x| \leq 2d$,

$$|z| \leq d/\sqrt{2} \text{ (a) } t=0, \text{ (b) } t=T/2=\pi/\Omega \text{ burada } d = (1/2 r_0^2 + z_0^2)^{1/2}$$

Denklem (2.11-2.13) sadece belirli aralıkta olan a_u ve q_u parametre seti için kararlı çözümler üretir. Bu aralık a_z - q_z seti için iki bölgeden oluşur. Bu bölgelerden birincisi Şekil 2.8 de verilen kararlılık diyagramında görüldüğü gibidir.



Şekil 2.8. Mathieu diferansiyel denklemi birinci bölge kararlılık diyagramı

ξ parametresinden reel zamana geçiş yaparsak $\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d^2x}{d\xi^2} \frac{d^2\xi}{dt^2} = \frac{d^2x}{d\xi^2} \frac{\Omega^2}{4}$

Denklem (2.10) aşağıdaki forma dönüşür:

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_u - 2q_u \cos(\Omega t)] u = 0 \quad (2.25)$$

Burada a_u ve q_u yukarıda verildiği gibidir. Böylelikle iyonların hareketini istersek ξ boyutsuz parametresi, istersek tuzaklama zamanına (denklem 2.25) göre inceleyebiliriz (Blümel, R., 1989, March, 2009, Aksakal ve Avcı 2015).

Denklem 2.2' de uygulanan potansiyel cosinüs formdan herhangi bir periyodik potansiyele değiştirilebilir. Bu potansiyele örnek kare, testere dişli dalga veya üçgen dalga formu olabilir. Kare dalga formu “dijital iyon tuzağı” olarak ta adlandırılır (Bandelow 2013, Aksakal 2015).

2.4. Hareket denklemine üst mertebeden katkılar

Eğer iyon tuzağı 4 ten fazla elektrottan oluşuyorsa veya kuadrupol tuzağın imalatı sırasında elektrotlar yerleştirilirken ufak bir kayma mevcut ise potansiyele üst mertebeden katkıların (hekzapol, decapolvb) eklenmesi gerekmektedir. Bu durumda denklem 2.10 bu üst mertebeden katkıları içermelidir. Örneğin hekzapol katkısı ile potansiyel aşağıdaki gibi olur.

$$\phi = (U_{dc} + V_{ac}\cos\Omega t) \left(\frac{x^2+y^2-2z^2}{d^2} + f_3 \frac{3(x^2+y^2)-6z^2}{d^2} \right) \quad (2.26)$$

Burada f_3 hekzapol katkısını göstermektedir. Bu durumda hareket denklemleri, hem hekzapol katkısı hem de Coulomb etkileşmesi dahil edilip, reel zamana göre incelenir ise

$$\frac{d^2i}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_i - 2q_i\cos(\Omega t)] \left(1 + f_3 \frac{3z}{d} \right) i + \frac{1}{m} F_i = 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{d^2z}{dt^2} + \frac{\Omega^2}{4} [a_z - 2q_z\cos(\Omega t)] \left(z - f_3 \frac{(3(x^2+y^2)-6z^2)}{4d} \right) z + \frac{1}{m} F_z = 0 \quad (2.28)$$

olur. Burada $i \rightarrow x, y$ koordinatını göstermekte olup enine (x, y eksenleri) ve boyuna (z eksenini) hareket denklemleri elde edilir [4,5]. Bu çalışmada hem Coulomb etkisi hesaba katılmış hem de hekzapol etkisinin iyon salınmlarını nasıl değiştireceği incelenmiştir. Denklem (2.27 ve 2.28) lineer olmayan diferansiyel denklemler olduğundan sayısal yöntemler ile çözülmelidirler.

BÖLÜM III

İYON ENJEKSİYONU SOĞUTULMASI VE DEDEKTASYONU

3.1 İyon enjeksiyonu

3.1.1 İyonların tuzak içinde oluşturulması

Tuzak içerisine iyonları yüklemenin en kolay yolu, tuzak bölgesinde atomik demetin veya ortamdaki nötr arka plan gazın elektro-iyonizasyon veya foto-iyonizasyon yolu ile oluşturulmasıdır. Oda sıcaklığında iyonların enerjisi tuzak potansiyel derinliğinden önemli ölçüde küçüktür ve bütün iyonlar hapsedilmiştir. Alternatif olarak iyonlar tuzak bölgesinin köşesine yerleştirilmiş flemandan yüzey iyonizasyonu ile de oluşturulabilir. İlgilenilen atomlar fleman yüzeyde depolanabilir veya materyal içerisine iyon olarak enjekte edilebilir. Flemanların ısıtılmasıyla yüzeyden iyonlar açığa çıkar. Çıkan iyonların verimi, fleman materyalin iş fonksiyonuna ve incelenen atomun iyonizasyon potansiyeline bağlıdır. Platin (Pt), Tungsten(W) ve Renyum (Rh) gibi elementler yüksek verimli elementlerdir (Major 2005).

3.1.2 Dışarıdan iyon enjeksiyonu

Paul tuzakta potansiyelin frekansı MHz türünden bir mikro saniyeden daha kısa sürede sıfırdan tam genliğe açılmıyorsa enjekte edilen iyonları yakalamak zordur. Ancak, iyonların boyuna kinetik enerjisi, homojen olmayan tuzaklama elektrik alanı tarafından enine kinetik enerjisine transfer edilebilir ise bu durumda bazı iyonlar sınırlı bir süre için tuzaklanabilir. Schuessler ve Chun-Sing belli bir süre tuzaklanmış iyonların simülasyonunu ile AC yakalama alanında, düşük enerjili, sıfır genlikli faz değerlendirmelerini yaptılar. İyonların tuzağa geçme zamanı, onların sürtünme çeşidine göre farklılıklar gösterir. Bu sürtünme hafif bir tampon (ara, soğutma gazı) gazı ile çarpışmaları neticesinde elde edilir. Tuzak boyutu içerisinde tampon gaz yoğunluğunun en az iyonların çarpışmalar arasındaki ortalama serbest yolu kadar olması gerekir. Coutandin ve Werth, 1 cm'lik Paul tuzakta

yaklaşık 10^{-3} Pa'lık basınç altında iyonları enjekte ettiler ve tuzak ekseni boyunca birkaç keV'luk kinetik enerji ile kısa bir sürede tuzağın maksimum kapasiteye çıktığını göstermişlerdir. Aynı metot rutin olarak bir çok deneyde kullanılır ki bu deneylerde yüksek enerjili iyon demeti hızlandırıcılardan elde edilir. Tuzağa getirilen iyonlar orada soğutma gazı ile çarpıştırılarak soğutulur ve daha sonra düşük enerjide ve düşük enerji yayılımında diğer deneyler için gönderilir (Major vd, 2005).

3.1.3 İyonların hız ve konum dağılımı

Kinetik gaz teorisinde, bir gazın hız dağılımı Maxwell- Boltzmann istatistiği ile başlar. Tuzağa enjekte edilen iyonlar da Maxwell Boltzman (MB) hız dağılım istatistiğine uymaktadır. MB dağılımını elde etmek için bağımsız, ayırt edilebilir taneciklerin kinetik enerji hız dağılım fonksiyonu ile başlanır.

Maxwell-Boltzmann Hız Dağılımı:

Serbest tek bir tanecik için enerji dağılımı kinetik enerji ile orantılıdır. Bu nedenle hıza bağlı olasılık yoğunluğu :

$$F(\vec{v}) \propto e^{-\frac{mv^2}{2kT}} = e^{-\frac{m}{2kT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} \quad (3.1)$$

formülü ile ifade edilir. Burada k Boltzmann sabiti, T Kelvin cinsinden sıcaklık, m iyonun kütlesi, v_x, v_y, v_z ise üç boyutta hızlarıdır $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$.

Üç hız bileşeninin değerleri birbirleri ile ilişkili değildir ve her bir hız bileşeni $-\infty$ ile $+\infty$ arasında değerler alır. $F(\vec{v})$ bir gaz molekülünün hızının \vec{v} ile $\vec{v} + d\vec{v}$ arasında bulunma olasılık yoğunluğu olup buradadır $d\vec{v} = dv_x dv_y dv_z$ dir. Bu olasılık dağılımı, uygun şekilde normalize edilmelidir. C, normalizasyon sabiti olmak üzere normalizasyon için aşağıdaki işlemler yapılır.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\vec{v}) d\vec{v} = 1$$

$$= C \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}} dv_x \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_y^2}{2kT}} dv_y \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}} dv_z \right) \quad (3.2)$$

Denklem 3.2 içerisinde 3 tane Gausyen integral içerir: $\int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

Ara işlemler neticesinde normalizasyon sabitini $C = \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{\frac{3}{2}}$ olarak buluruz. Moleküler hızlar için normalize edilmiş üç boyutta Maxwell Boltzmann dağılımı,

$$F(\vec{v})d\vec{v} = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv_x dv_y dv_z \quad (3.3)$$

Bu, üç boyutlu olasılık yoğunluğudur. Gaz dinamiği izotropik olduğundan, bu üç boyutlu dağılımın, üç kartezyen yönünde bağımsız olasılık dağılımlarının çarpımı olmasını bekleriz.

$$F(\vec{v})d\vec{v} = f(v_x)dv_x f(v_y)dv_y f(v_z)dv_z$$

normalize edilmiş bir boyutlu dağılımlar aşağıdaki denklemde verildiği gibidir.

$$f(u) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mu^2}{2kT}} \quad (3.4)$$

İyon konumlarının Gaussian Dağılımı;

Matematikte Gauss bir fonksiyon biçimidir ve Normal dağılım için, sürekli olasılık yoğunluk fonksiyonu tek boyutta aşağıda verildiği gibidir.

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}}$$

Burada σ_x standart sapma, x_0 ise başlangıç konumudur. Üç boyutta ise bu fonksiyonda x yerine y ve z yazılarak üç defa çarpımı gerekmektedir (Url-3).

Bu tez çalışmasında Birden fazla iyon olması durumunda iyonların başlangıç hız dağılımı Maxwel- Boltzman, konum dağılımları ise Gaussian dağılıma uygun olarak alınmıştır.

3.2 Tuzaklanmış Yüklü Parçacıkların Soğutulması

Tuzak içinde hareket eden iyonların enerjisinin birkaç mili elektron Volt (meV) seviyesine azaltılmasına iyon soğutması denilir. İyonları soğutma yollarının geliştirilmeden önce, tuzaklanmış iyonlardan foton saçılmasını gözlemlemek hemen hemen imkansızdı. İyon tuzakları, kütle spektrometresi, artık gaz analizörleri ve vakum kaçak detektörleri için uygun bir cihazdır. Ancak içeri enjekte edilen gazın soğutulması gerekmektedir.

“Soğutma” terimi, termal denge durumuna uygulanan bir kavramdır. Kinetik enerjiyi düşürücü anlamında kullanılır. Paul ve Penning iyon tuzaklarında böyle bir termal dengeden bahsedebiliriz. Birinci olarak, ölçümde iyonların gözlem süresini uzatır. İkincisi, konsantreleri sıfıra doğru, faz uzayında iyon dağılımını düzenler.

Çeşitli soğutma teknikleri bugüne kadar uygulanmıştır. Bunlardan Bazıları; LC devresi ile geri beslemeli voltaj uygulanması, Lazer kullanılarak soğutma (RF veya Doppler soğutması), tuzak içerisinde nötr atomlarla doldurulup (kütlece hafif tampon gazı) tuzaklanan iyonların bunlar ile çarpışması neticesinde soğutma bunlardan bazılarıdır (Major vd., 2005).

3.2.1 İyon tuzağında sıcaklık

Hareketi farklı rast gele modların başlangıç kinetik enerji dağılımları, iyonların tuzakta bir bulut halinde termal dengeye gelmesi ve tuzaklanmış iyonların rf-faz başlangıç pozisyonları Paul tuzak için belli şartları oluşturur. Tuzaktaki çarpışmalar, bu modların ortalama potansiyel derinliği ile kinetik enerji üst limitinin bir denge oluşturması ile Maxwell dağılımı yaklaşımı ile hesaplanır. Böyle bir denge dağılımı net yüksek hızda belli bir limite kesilmesi gerekir ve bu bindirmeler kaçak iyonların oluşum sayısı yavaş yavaş azaltılır (Major vd., 2005).

Lazer ışını altında, ultra yüksek vakum ortamda her bir iyon geçişi için kütle merkezi hareketi olduğu gibi dahili elektronik kuvvetler de olacaktır. Dinamik hareket içeren dinamik işgal sayısı n . dereceden harmonik potansiyeli değiştirebilir. Gereken lazer alanı

özellikleri aynı kuantum istatistik durumu sonuçlarına bağlıdır. Statik bir tuzakta parçacıkların lazer soğutma ile belli bir dengeye ulaşması Javanainen ve arkadaşları tarafından ayrıntılı bir çalışma ile incelenmiştir. Bunlar titreşim durumları üzerinde toplulukların nihai ısı dağılım dengesi olduğunu göstermişlerdir. Bu siyah cisim ışıması kuramında Planck'ın osilatör benzerliğiyle ortalama işgal numarası $\langle n \rangle$ T sıcaklığında, tek tuzak iyonları, sıcaklık kavramının uygulamalarını sağlar.

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \quad (3.5)$$

Burada $h\nu$ gönderilen lazer fotonunun enerjisidir. Sıcaklığın kinetik enerjiyle klasik açıdan ilişkisi $T = E_k/k_B$ ile verilir. Burada E_k Kinetik Enerji $\left(\frac{1}{2}mV^2\right)$, T Kelvin cinsinden sıcaklık, k_B Boltzmann sabitidir (Major vd., 2005).

3.2.2 İyon sıcaklık ölçümü

İyon sıcaklığını ölçmek için, iyonların kuantum düzeylerinde hazırlanması veya iyonları soğutmak için kullanılan lazerlerin aynısı olmalıdır. Uygun bir optik geçişten gelen rezonans floresans spektrumu, Doppler etkisi ile modifiye edilmiş olarak, iyonlar arasındaki hız dağılımını belirlemek için kullanılabilir. Doppler etkisinin basit türetimin de, parçacık hareket ederken yönünü değiştirmeden önce lazer alanının birçok dalga boyundan geçeceği varsayımı yapılır.

İyon soğutma durumunda bu olay “Doppler bölgesi” olarak adlandırılır ki bu bölgede beklenen spektrumun çizgi şekli Gaussiyen ile klasik Lorentz profilinin evrişim eğrisidir (Maxweliyen hız dağılımına sahip parçacıklar için). Soğutma işlemi süresince iyon sıcaklığı yüksek ise uyarmak için kullanılan lazer dalga boyu, iyonun hareket genliğinden çok çok küçük olması ($a \gg \lambda$) şartı geçerlidir. İyonlar yeteri miktarda soğutulur ise $a < \lambda$ olur. Böylece gözlenen spektrumda bazı farklılıklar olur. Bu Lamb-Dicke rejimi olarak adlandırılır (Major vd., 2005).

İyon sıcaklıklarının ölçümü ve Lamb- Dicke rejimi bu tez çalışmasında incelenmeyecektir.

3.2.3 Işımalı soğutma

Elektrik yüklerinin hızlandırılmasıyla radyasyon yayılımı sürekli mevcutsa, rölativistik enerjilerde ve genellikle parçacık hızlandırıcılarda bu enerji kaybı olarak sorun teşkil eder. Ancak, en düşük enerjiler için klasik yaklaşım yeterlidir. q yükü taşıyan bir parçacığın enerji yayma oranı, kütlesi m ve ivmesi α ise Larmor Formülü ile verilir.

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \alpha^2 \quad (3.6)$$

Parçacık için toplam enerji E , harmonik salınım frekansı ω ise, enerji kaybı ortalama oranı ve bu diferansiyel denklemin çözümü yazılırsa,

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle = -\gamma_r E$$

$$E = E_0 e^{-\gamma_r t} \quad (3.7)$$

olur. Burada $\gamma_r = \frac{1}{6} \frac{Q^2 \omega^2}{\pi \epsilon_0 M c^3}$ olarak verilir. Kuantum açıklama olarak kendiliğinden foton yayma oranı, dipol geçiş yaklaşımı ile verilir.

$$\frac{dE}{dt} = -2\gamma_0 M |\langle n' | r | n \rangle|^2 \quad (3.8)$$

Harmonik osilatör için elemanter matrisler sıfırdan farklı olduğu için $n > n'$ olur.

$$\langle n-1 | z | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \frac{n}{2}$$

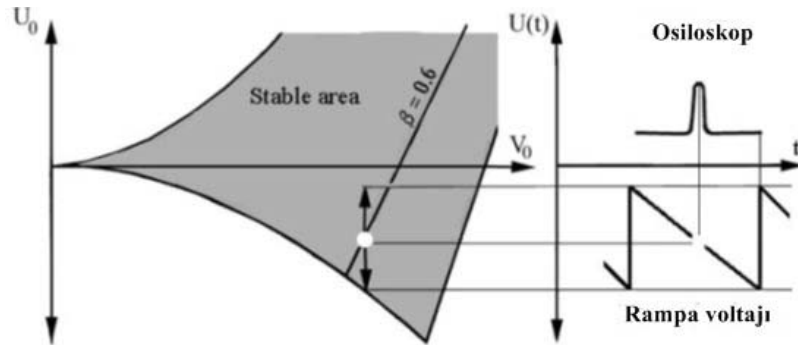
Yazılır. $n \gg 1$ alınırsa klasik yaklaşımla çözüme gidilir. Hareket lineer osilatör hareket olarak adlandırılabilir (Major vd., 2005).

3.3 Tuzaklanmış parçacık detektörleri

Tuzaklanmış parçacık detektörleri tahribatlı ve tahribatsız olmak üzere iki kısma ayrılır. Tahribatsız detektör olarak Fourier dönüşümlü, elektronik ve optik detektörler olarak incelenebilir. Tahribatlı detektörler ise Rezonansta olmayan enjeksiyon ve Rezonans enjeksiyon olmak üzere ikiye ayrılır. Aşağıdaki alt bölümlerde bu detektörlerden bazıları tanıtılmıştır.

3.3.1 Elektronik detektör

Tuzak içindeki iyonların kütleyle bağımlı salınım frekansları iyon kaybı olmadan iyonların tespiti için kullanılabilir. İndüktansı L ve kapasitansı C olan bir rezonans devresi tuzağa bağlanır ve devrenin rezonans frekansı (ω_{LC}) de zayıf bir şekilde uyarılır. İyonun eksensel salınım frekansı ω_z , elektrik tuzaklama alanı değiştirilerek LC devresi ile rezonans aracılığıyla taranır. Rezonans noktasındaki devreden iyona enerji transfer edilir, devrede sönüme yol açar ve devre üzerinde voltaj düşer. Metodun hassasiyeti rezonans devresinin Q kalite faktörüne bağlıdır. Tuzak voltajının modülasyonu rezonans olduğundaki çalıştırma noktasında (Şekil 3.1 de görüldüğü gibi) ve devre boyunca voltajın deteksiyonu tekrarlanan voltaj düşmesine yol açar. Voltaj düşümünün genliği tuzaklanmış iyon sayısı ile orantılıdır. Farklı iyonların belirli zamanlarda, gerilimleri farkından dolayı sinyal modülleri de farklı olur (Major vd., 2005).



Şekil 3.1 Elektronik algılama ilkesi (Major vd., 2005)

3.3. 2 Optik detektör

Tuzak içindeki iyonların varlığını tespit etmenin en etkili yolu onların lazer indüklenmiş floresans ışınımalarını görüntülemektir. Bu yöntem uygulanan lazer tarafından uyarılmalara izin verilen enerji düzeylerine sahip iyonlarla kısıtlanmıştır. Bu metodun uyarılmış iyonik enerji seviyelerinin ömrü, elektrik dipol radyasyonu tarafından bozduğunda 10^{-7} s mertebesinde olması gerçeğine dayanır. Doyum şiddetinde bir lazer tarafından aynı iyonun ardışık uyarılması saniyede 10^7 fotonun floresans ışınması yapmasına yol açar. Bu tekniğin ön koşulu tuzaklanmış iyonun lazer demeti içerisinde kalıcı olarak hareket etmesidir.

Bu metot, alkali yapılarda iyonu elektronik taban durumuna uyarmada, büyük bir geçiş olasılığı göz önüne alındığında en etkili olanıdır. Bu uyarılmış durum özellikle doğrudan taban haline geri düştüğünde anlaşılır hale gelir. Örneğin iki aşamalı Be^+ ve Mg^+ gibi iyonlar tercih edilir. İyonun uyarılmış durumdan, taban durumuna hızla geri dönüşünü engelleyen uzun ömürlü bir alçak yarı-kararlı (meta-stable) durumu olması halinde (Ca^+ , Sr^+ ve Ba^+ gibi alkali benzeri yapılar) bu yöntem daha karmaşık hale gelir. Yarı-kararlı durum olması halinde ek bir lazer, yarı-kararlı bir durumdaki iyonu tekrar uyarmak için gereklidir (Major vd., 2005).

3.3.3 Paul tuzak tahribathlı detektör

Rezonansta olmayan injeksiyon; Paul tuzak'ta iyonların tuzaktan ayrılması bir kapaktaki elektrot potansiyelini düşürmek veya kapaktaki bir elektrota yüksek genlikli gerilim uygulayarak yapılabilir. Tuzaktan ayrılan iyonlar iyon çoğaltıcı tüpler veya kanal plaka detektörleri ile sayılabilir. Detektörlere farklı varış zamanlarına göre, iyonların kütle/yük oranları belirlenir. Prensipte iyonların varış zamanı tuzaklanmış iyon enerjileri hakkında bilgi içerir.

Rezonans İnjeksiyon; Birkaç iyon türü aynı anda tuzaklandığı durumda spesifik q/m oranında bir iyon seçici olarak tuzaktan çıkartılabilir ve detektör tarafından sayılabilir. Tuzaktan çıkartma ilgilenilen iyon türünün eksensel salınım frekansı ile rezonansta zayıf bir rf alanı kullanılarak yapılır (Major vd., 2005).

BÖLÜM IV

MATERYAL VE METHOD

Bu tez çalışmasında Dijital iyon tuzağı için Python (PyDIT) isimli bir simülasyon programı yazılmıştır (Aksakal 2015). Program Python (Url-4) dilinde bir Moleküler Dinamik (MD) simülasyon kodudur. Program ile iyon demetinin Paul iyon tuzağındaki dinamikleri incelenmiştir. Program iyonların hareket denklemini üç boyutta 4. mertebeden Runge-Kutta metoduna göre çözmektedir. Runge –Kutta metodunun ayrıntıları Ek-B de verildiği gibidir.

PyDIT simülasyon programının literatür kıyaslaması Ek-C’ de verildiği gibidir. Program literatür ile uyumlu sonuçlar üretmektedir.

İyon tuzağı için boyutsuz önemli parametreler olan a_x , a_y , a_z , q_x , q_y , q_z değerleri simülasyon programına girilerek tuzak içindeki iyonların yörüngeleri belirlenmiştir. Bu parametreler yardımı ile tuzak boyutları da belirlenebilir.

BÖLÜM V

BULGULAR VE TARTIŞMA

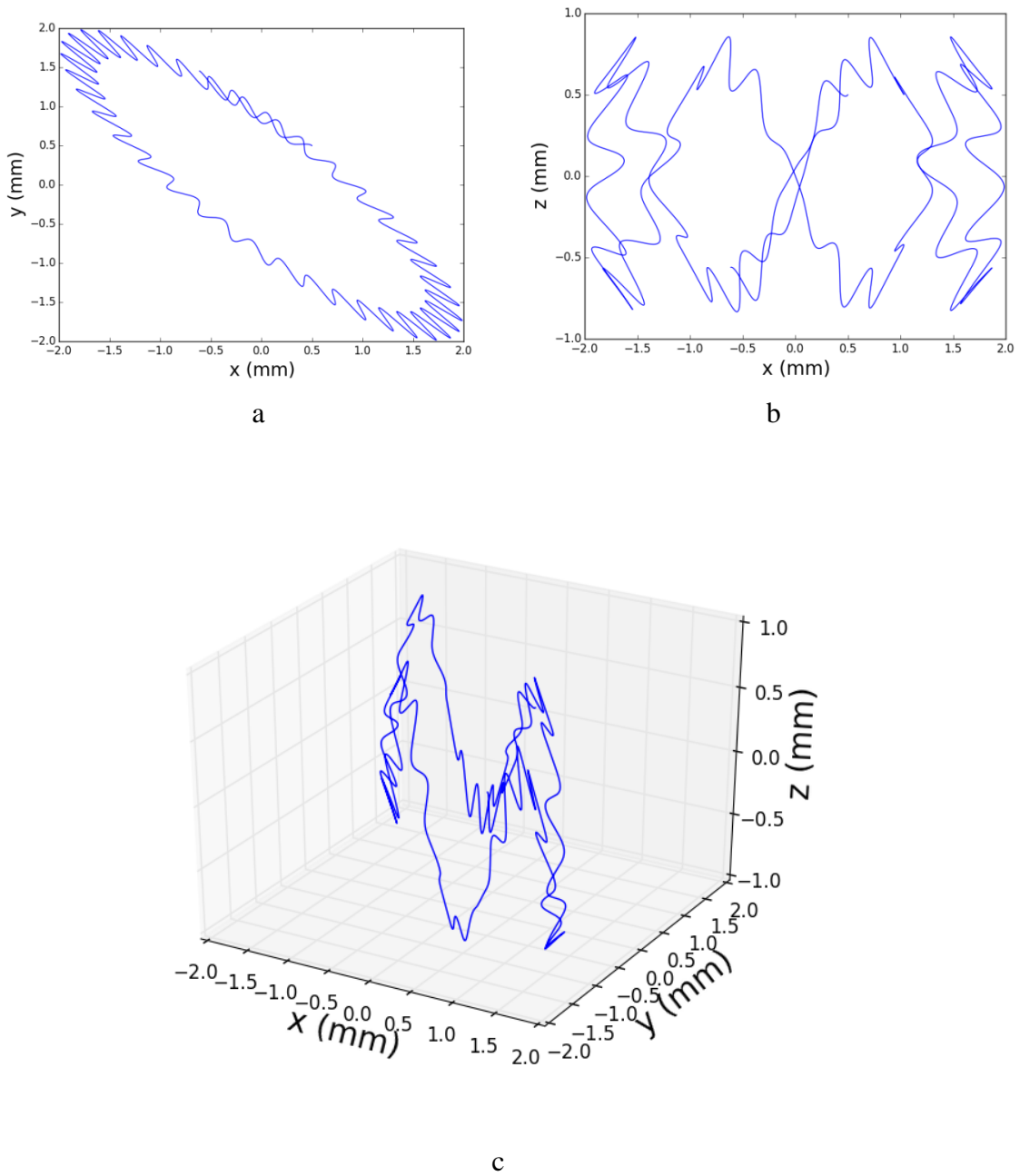
Bu çalışmada Mg iyonu (24.305 akb), kuadrupol tuzak için kullanılmıştır. Kullanılan tuzak parametreleri Şekil 2.8 den a_z ve q_z seçilerek belirlenir. Bu parametreler Çizelge.1 de verildiği gibidir. Çizelge.1 deki parametrelerin aynısı hekzapol katkısı varlığı durumu içinde kullanılmıştır.

Çizelge 1 Tuzak parametreleri ve iyonun başlangıç bilgileri

Parametre	Kuadrupol veHekzapol
$a_z, q_z / a_{x,y}, q_{x,y}$	-0.034, 0.4/-0.015,0.20
U_{dc}, V_{ac}	2.694, 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 (meV)	9
r_0 / z_0 (mm)	8.5 / 6

5.1 Tek iyon dinamikleri ve hekzapol katkısı

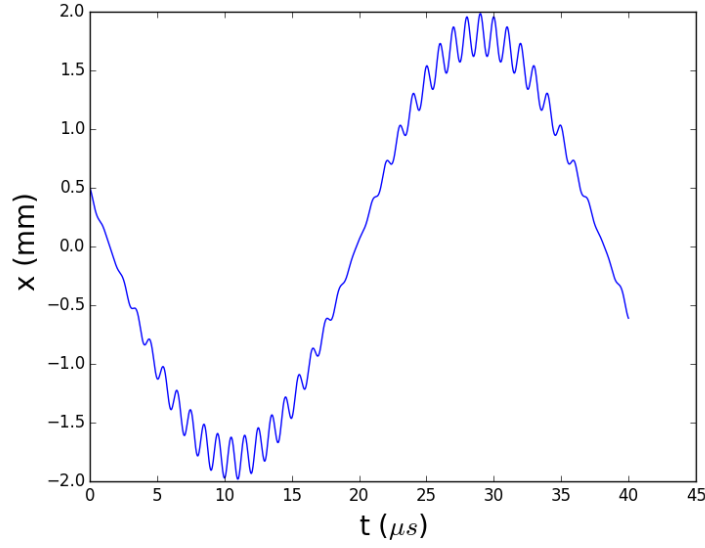
Şekil 5.1 tek iyonun tuzak içerisindeki yörüngesini tek ve üç boyutta göstermektedir. Şekil 5.1.(a) iyonun xy düzleminde bir çiçek şeklinde yörüngeye sahip olduğunu, Şekil 5.1. (b) xz düzleminde kapalı bir yörüngeye sahip ve Şekil 5.1 (c) ise üç boyutta izlediği yörüngeyi göstermektedir. İyonun kapalı bir yörüngede hareketi ve bu hareketin genliğinin tuzak boyutları içerisinde olması iyonun tuzaklandığını göstermektedir. Bu bize iyonun tuzaklandığını ve ne kadar süre tuzak içerisinde kalabileceğini bilgisini verir. Bizim için iyonun tuzak içerisinde ne kadar süre kaldığının yanısıra tuzak içerisinde nasıl bir yörüngeye sahip olduğu, hangi noktalarda hangi hızlarla hareket ettiği, hangi enerjiye sahip olduğu da ilgilendirmektedir. xy, xz ve xyz düzlemlerinde hareket yörüngeleri farklı farklı elde edilmiştir.



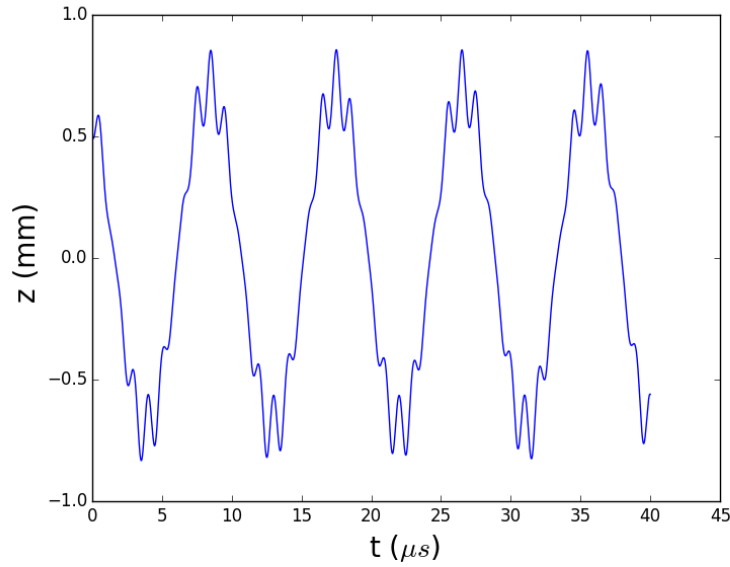
Şekil 5.1 Tek Mg^{+1} iyonu, x-y salınımı (a) ve z-x salınımı (b)
x-y-z salınımı (c)

Şekil 5.2, tuzaklanan iyonun x ve z deki salınımlarının zamana göre değişimini göstermektedir. İyonun salınımının periyodik olduğu şekilden görülmektedir. Ayrıca periyod genişliği tuzak büyüklüğü içinde olduğundan iyonların tuzak içinde hareket ettiği

görülmektedir. İyonların periyodik hareketi makro salınım, bir periyod içindeki salınımları ise mikro salınım olarak adlandırılır. 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 5.2 ten bu salınımlar açıkça görülmektedir.



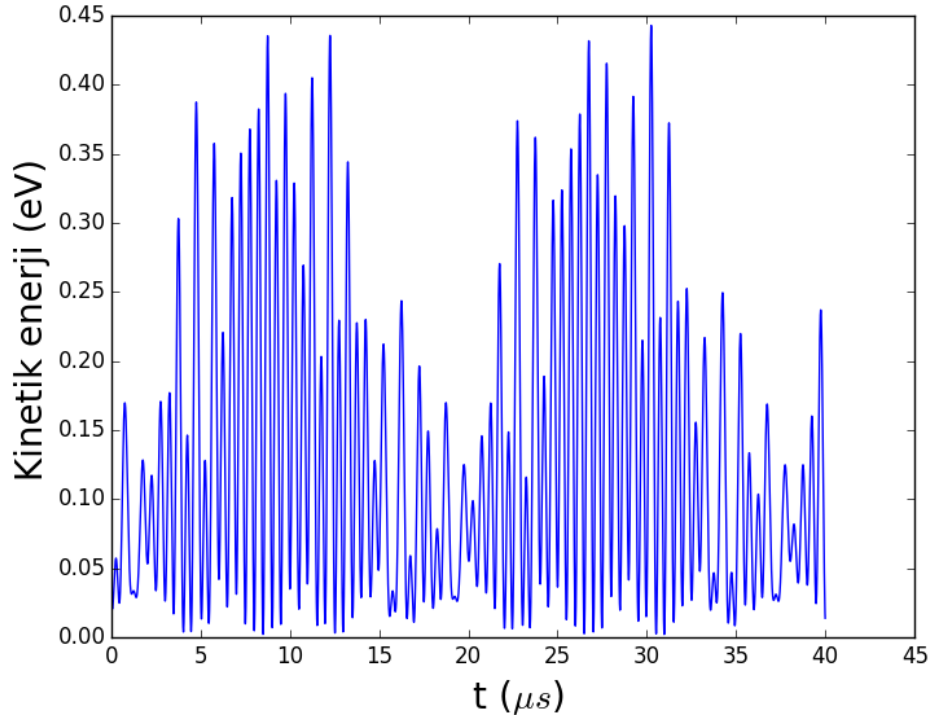
a



b

Şekil 5.2 Tuzaklanmış parçacığın konumunun zamana göre salınımı, x (a), z (b)

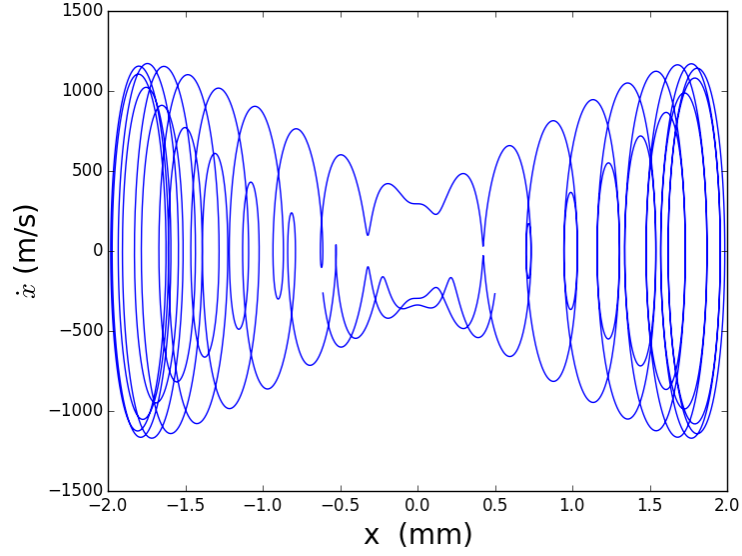
Tuzaklanmış parçacığın enerjisi görelî (rölativistik) olmadığından $\frac{1}{2}mv^2$ den kolayca hesaplanabilir bu durumda iyonun kinetik enerjisinin zamana bağılı değişimi Şekil 5.3 de verildiği gibidir. İyonun elektrik alan içerisinde büyük salınımlar enerjisinin maksimum değerini, küçük salınımlar ise enerjisinin minimum değerini 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.



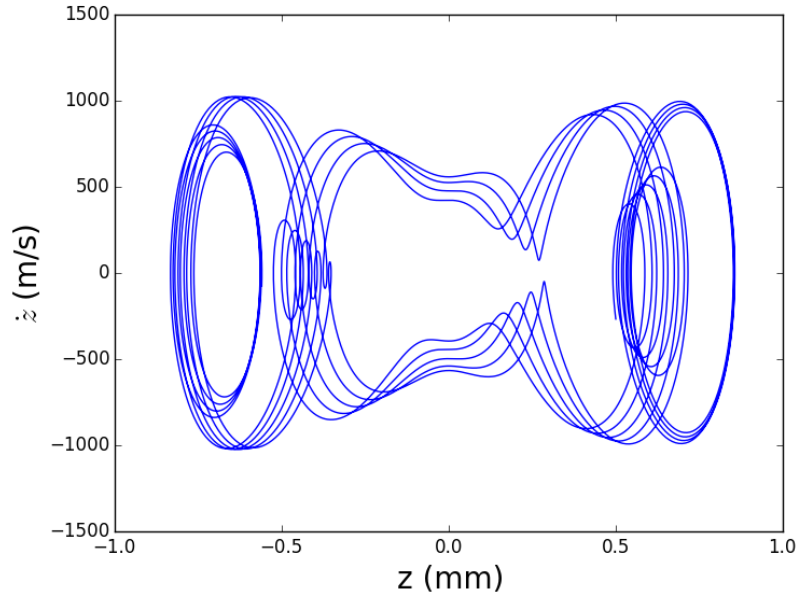
Şekil 5.3 Parçacığın zaman içerisindeki kinetik enerji değişimi

Tuzaklanmış iyonun x ve z koordinatındaki faz uzayı grafikleri Şekil 5.4 den görüldüğü gibidir. y koordinatı x koordinatının benzeri olması beklenmektedir (y koordinatı başlangıç hızı negatif olduğundan sadece salınım yönü x koordinatının tersi olacaktır fakat konumun

genlik büyüklüğü ve hızın genlik büyüklüğü x koordinatı ile aynı olacaktır bu yüzden y eksenini konum zaman ve y eksenini faz uzayı grafikleri sunulmamıştır). Tuzaklanmış iyonun faz uzayında kapalı yörüngeler çizdiğini Şekil 6 dan görmekteyiz. Ayrıca tuzak içerisinde x ekseninde maksimum hızın ~ 900 m/s ve z ekseninde ise ~ 1000 m/s olduğu görülmektedir.



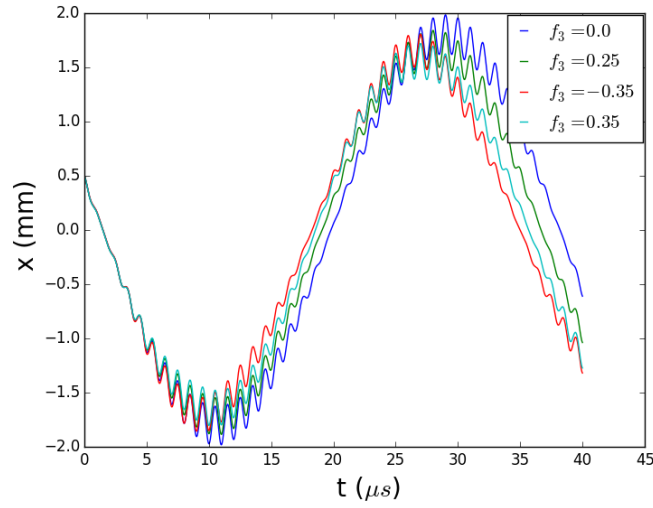
a



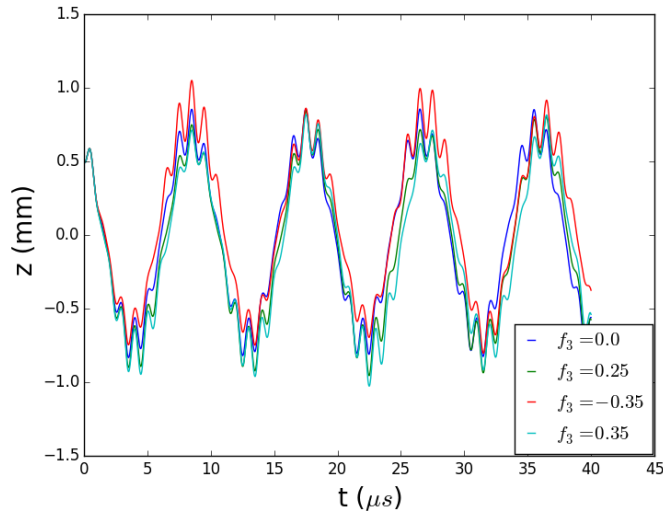
b

Şekil 5.4 Parçacığın x (a) ve z (b) faz uzayı grafikleri

Şekil 5.5 hekzapol katkısının varlığı durumunda iyonun x ve z koordinatındaki salınımlarında kayma olduğunu göstermektedir. Hekzapol 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.



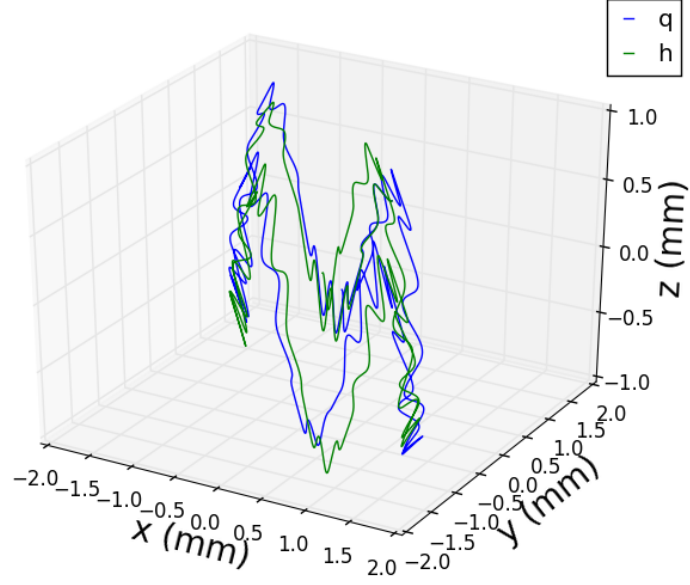
a



b

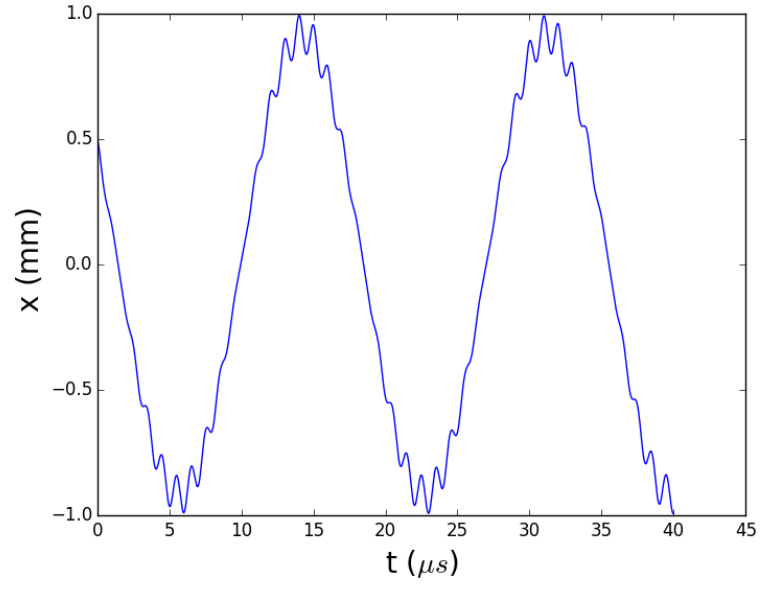
Şekil 5.5 Parçacığın zamana göre x (a) ve z konumlarının (b) salınımları

Şekil 5.6 hegzapol katkısı durumunda iyonun üç boyutlu yörüngesini kuadropol durumu ile birlikte göstermektedir.

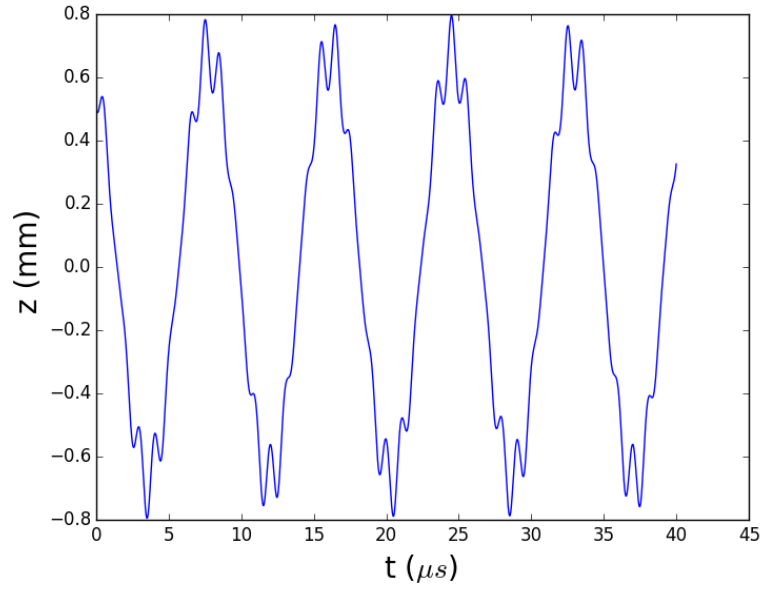


Şekil 5.6 Kuadropol tuzakta $f_3=0.25$ iken parçacığın izlediği yörünge

İyonların tuzak içerisindeki salınımları boyutsuz Mathieu parametrelerine çok bağlıdır. Bu parametreler tuzağın büyüklüğü, uygulanan voltaj, tuzaklanan iyonun kütlesi ve AC gerilimin frekansı ile belirlenir. Örneğin yukarıda verilenden farklı a_z ve q_z değeri kuadropol iyon tuzağı için için x ve z eksenlerindeki salınım Çizelge 5.1 deki tuzak parametreleri kullanılarak Şekil 5.6 da görüldüğü gibidir. Şekilden görüldüğü gibi x eksen salınım periyodu değişmiştir.



a

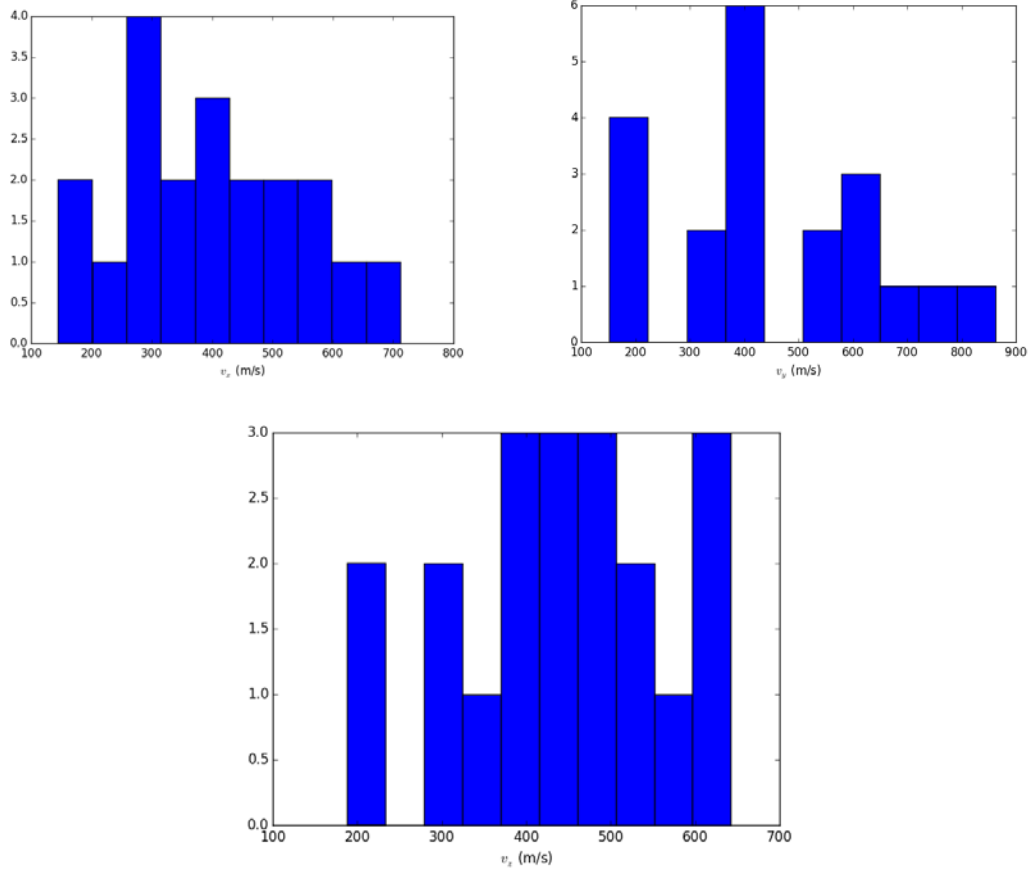


b

Şekil 5.7 $a_z=0.00$, $q_z=0.33$ için iyonun zamana göre x (a) ve z konumlarının (b) salınımları

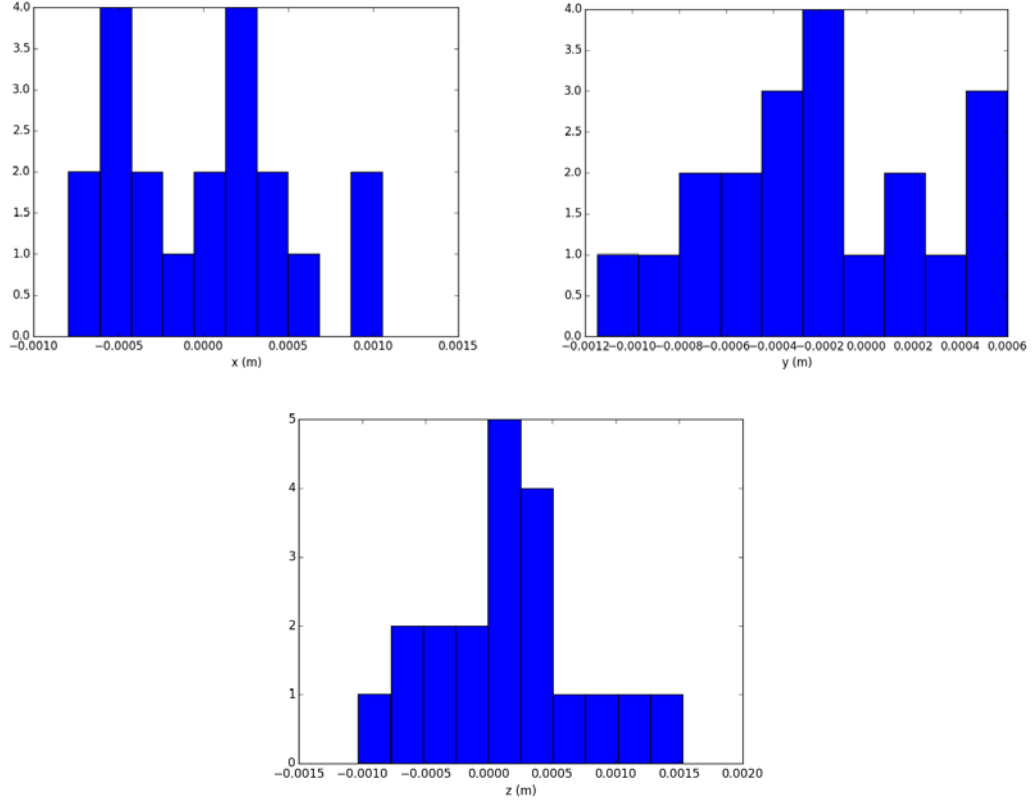
5.2 Çoklu iyon dinamikleri ve hekzapol katkısı

Tuzak parametreleri olarak Çizelge 5 1'deki değerler kullanılarak, 20 adet iyon, konumları Gaussiyen, hızları ise Maxwell-Boltzman dağılımına uygun olarak tuzak içerisinde üretilirler. Şekil 5.8 de tuzaklanmış iyonlara ait hız ve konum histogram grafikleri verilmiştir. Bu grafiklerdeki verilen iyonların başlangıç konum ve hız değerleri 20 adet Mg iyonu için kullanılmıştır. Tuzak içerisinde birden fazla iyon olması halinde Coulomb etkileşmesinin hesaba katılması gerekmektedir. Bu bölümde Coulomb etkileşmesi dahil edilerek iyon paketinden bir iyon ile iyon paketinin kütle merkezi hareketi tuzak içerisinde incelenecektir. Ayrıca tüm hekzapol katkıları için $f_3=0.25$ kullanılmıştır.



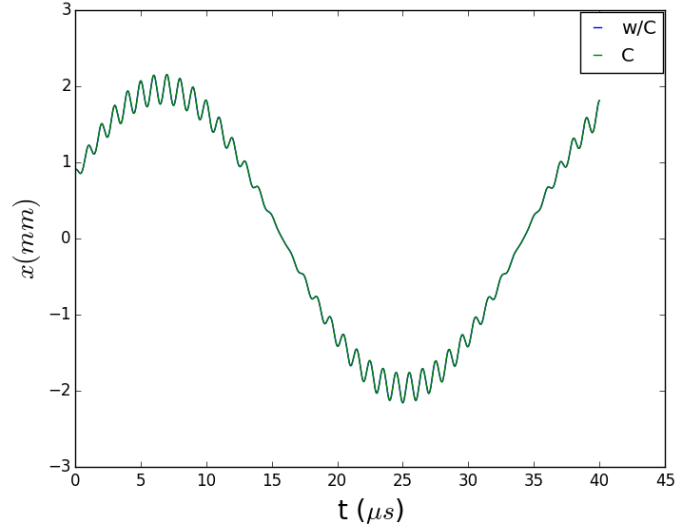
a

Şekil 5.8 İyon topluluğunun, Hız (a) ve konum dağılımı (b)



Şekil 5.9- devamı, İyon topluluğunun, Hız (a) ve konum dağılımı (b)

Şekil 5.9 da iyon topluluğundan (20 iyon) bir iyonun Coulmb etkileşmesi dahil edildiği (C) ve dahil edilmediği (w/C) durum karşılaştırması görülmektedir. Grafikten görüldüğü gibi iyon zamanla periyodik değişim hareketi yapmaktadır. Grafikte iki farklı renk mevcuttur. Bu renklerden mavi olan Coulomb etkileşiminin olmadığı durumu, yeşil olan ise Coulomb etkileşiminin olduğunu göstermektedir.. Bu bize Coulomb etkileşiminin etkisinin az olduğunu gösterir, yani mevcut şartlarda Coulomb etkileşimi ihmal edilebilecek kadar az olur.



Şekil 5.10 İyon demetinin x konumunun zamana göre değişimi Coulomb etkisi (20 iyon)

Kütle merkezi (KM) hareketleri incelenirken Coulomb etkisi dahil edilmiştir. KM aşağıdaki formül ile belirlenir

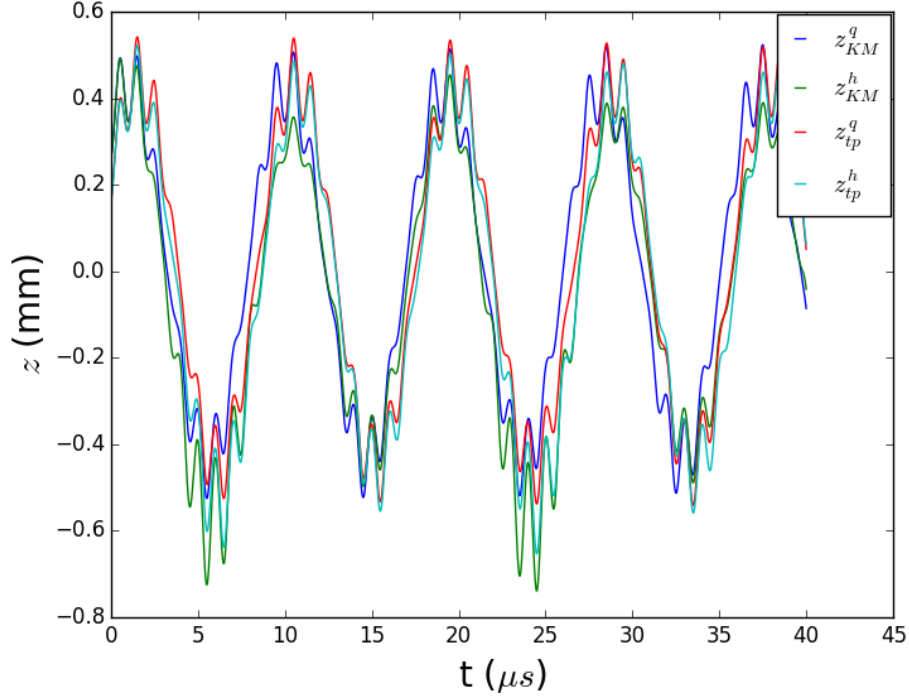
$$X_{KM} = \frac{1}{nm} \sum_{i=1}^{n=20} m_i x_i$$

Şekil 5.10 da iyon topluluğunun kütle merkezinin ve bu topluluktan bir iyonun (test parçacığı-tp) z eksenini boyunca hareketinin zamana göre değişimini vermektedir.

Bir iyonun kütle merkezine göre z eksenini boyunca değişimi periyodik bir hareket oluşturmuştur. Burada mavi ve yeşil renkle belirtilen çizgiler hekzapol katkısının olmadığı (kuadropol) ve olduğu durumları gösterir. Bu katkılarda grafikte gözle görülür bir ayrışmanın olduğu görülmektedir. Ayrışmalar görünür durumda da olsa yine paralel hareket mevcuttur. Bu iyon grubunun tuzak içinde kaldığını göstermektedir. Sadece kuadropol ve hekzapol katkılarında küçük koordinat farkları oluşmaktadır. Her iki durumda da iyon grubu sıfır noktası etrafında hareket etmektedir. Ortalama sıfır noktasından 2 mm pozitif yönde 2 mm negatif yönde hareketleri periyodik olarak devam etmektedir.

Şekil 5.10 hekzapol katkısının varlığı durumunda iyon grubunun z koordinatındaki salınım hareketinde kayma olduğu görülmektedir. Hekzapol katkısı f_3 negatif iken salınım periyodunu (makro salınım) azaltmakta iken, katkı pozitif iken makro salınım da kayma

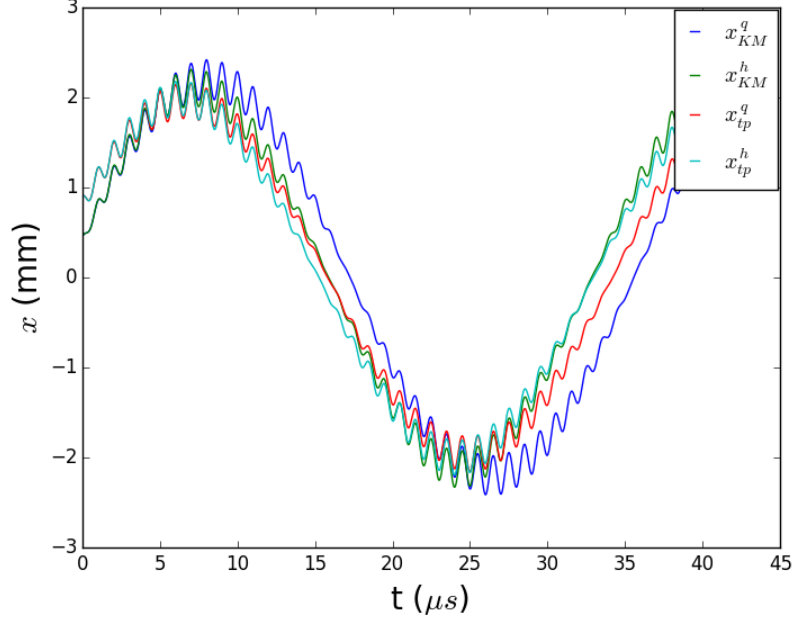
sağa doğru olup salınım periyodunu artırmaktadır. Ayrıca farklı f_3 değerleri farklı miktarda kaymalara neden olmaktadır. Kaymanın miktarı z ekseninde olduğundan daha küçük etkiye sahiptir. Kayma miktarı artar ise iyonun tuzak içinden çıkacağı için bu etkinin kontrol altında olması gerekmektedir.



Şekil 5.11 İyon demeti kütle merkezinin ve bir iyonun z eksenindeki zamanla değişimi

Şekil 5.11 hekzapol katkısının varlığı durumunda iyon grubunun x koordinatındaki salınım hareketinde kayma olduğu görülmektedir. Hekzapol katkısı f_3 negatif iken salınım periyodunu (makro salınım) azaltmakta iken, katkı pozitif iken makro salınım da kayma sağa doğru olup salınım periyodunu artırmaktadır. Ayrıca farklı f_3 değerleri farklı miktarda kaymalara neden olmaktadır. Kaymanın miktarı x ekseninde olduğundan daha küçük etkiye sahiptir. Eğer salınım genliği miktarı artar ise (tuzak boyutlarını aşar ise) iyon tuzak içinden çıkacağı için bu etkinin kontrol altında olması gerekmektedir. Şekil 5. 11 kütle

merkezinin kuadropol tuzakta ve $f_3=0.25$ olan durumda x salınımlarının karşılaştırmasını göstermektedir

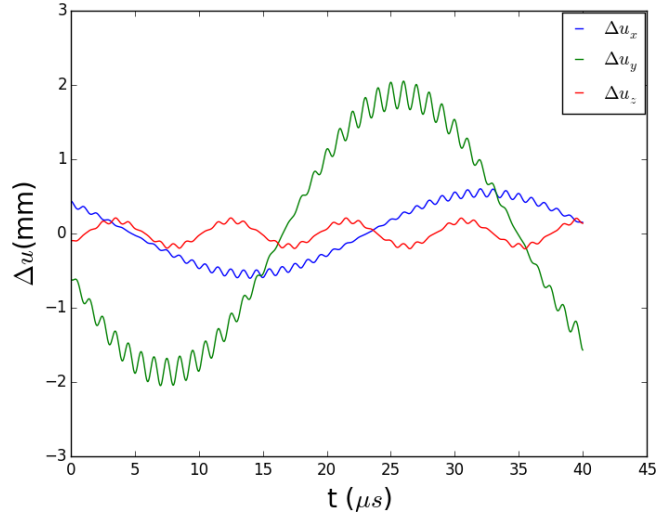


Şekil 5.12 İyon demeti kütle merkezi x konumu zamana göre değişimi (hekzapol ve kuadropol)

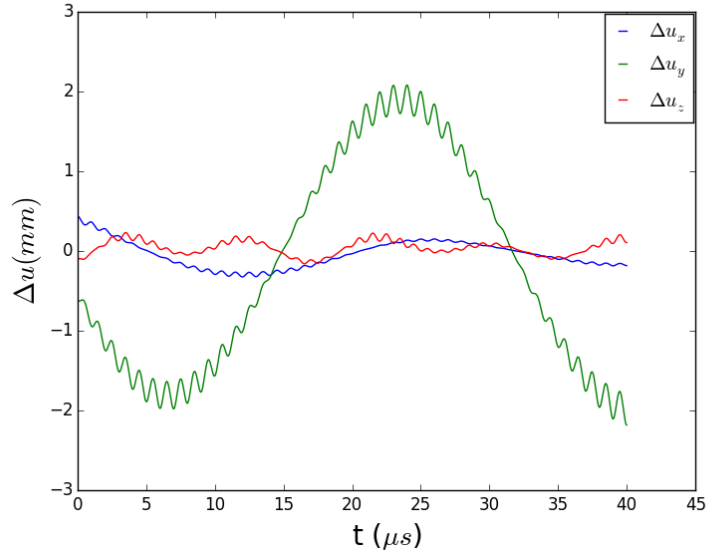
Şekil 5.13 de Δu (x , y ve z) nun zamana göre değişimi verilmiştir. Burada Δu bir iyonun konumu ile kütle merkezinin konumu arasındaki farkı göstermektedir

$$\Delta u_x = x - X_{KM}$$

Burada x koordinatını için yazılan denklemde x yerine y ve z yazılarak y ve z koordinatları için Δu_y ve Δu_z belirlenir. Kütle merkezi ile bir iyonun konumu arasındaki farkın x, y ve z de periyodik hareket yapıldığı görülmektedir. En küçük salınım z ekseninde meydana gelmişken en büyük salınımlar ise x ekseninde meydana gelmiştir. Salınım hareketleri en fazla 2, -2 mm aralığında meydana gelmektedir.



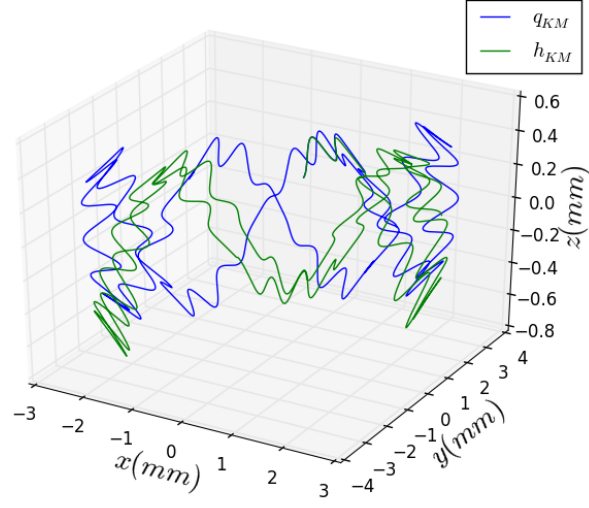
a



b

Şekil 5.13 x, y ve z boyutunda bir iyon ile KM konumlarını farkının zamana göre değişimi, Kuadropol (a), Hekzapol ($f_3=0.25$) (b)

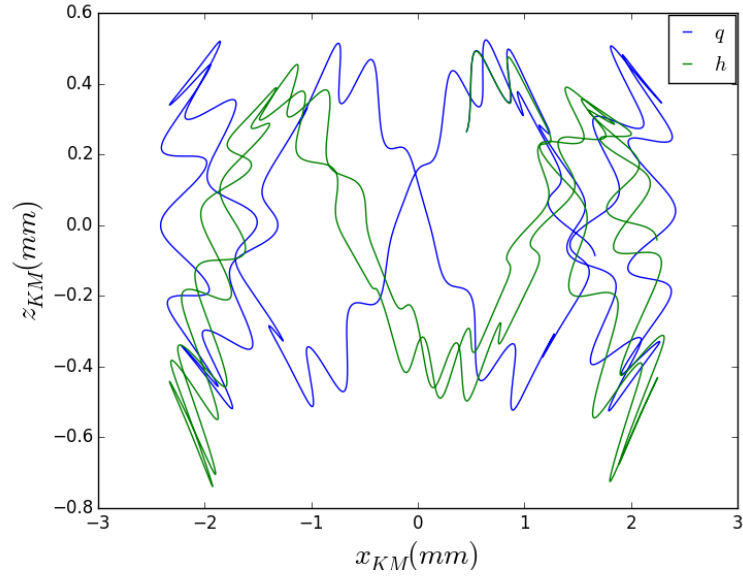
Şekil 5.13 de iyon grubunun kütle merkezinin üç boyutta yörüngesi görülmektedir. Burada hareketin yine tuzak sınırları içinde olduğu görülmektedir.



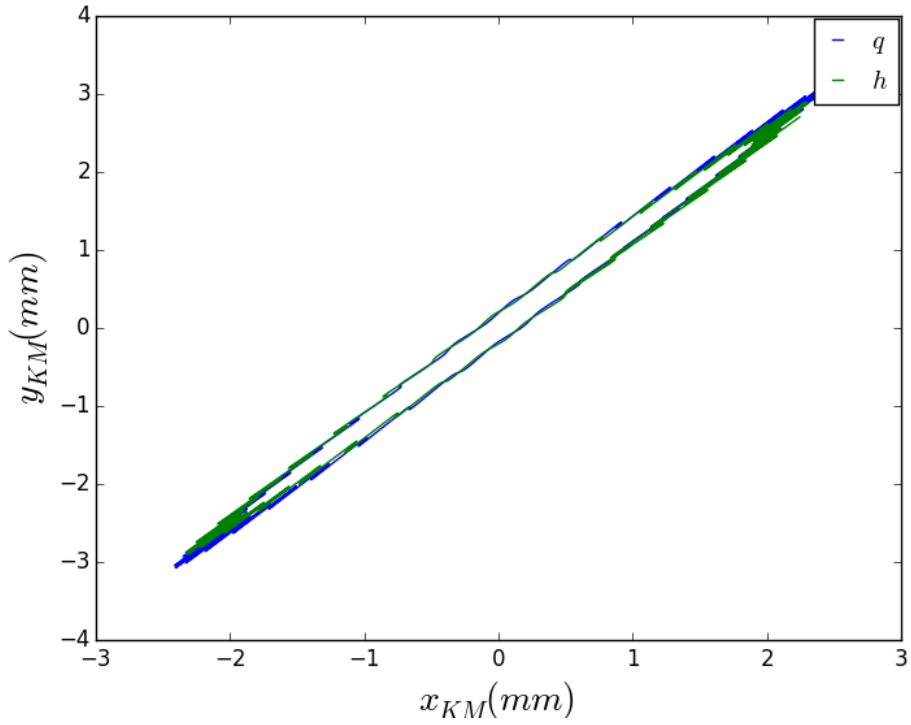
Şekil 5.14 Kütle merkezinin üç boyutlu yörüngesi ($f_3=0.25$).

Kütle merkezinin xz düzlemindeki yörüngesi Şekil 5.14 den görüldüğü gibidir. Şekilden görüldüğü gibi heksapol katkısı yörüngede bazı kaymalara sebep olmuştur.

Kütle merkezinin xy düzlemindeki yörüngesi Şekil 5.15’den görüldüğü gibidir. Şekilden görüldüğü gibi heksapol katkısı xy düzlemindeki yörüngede bazı kaymalara sebep olmuştur.

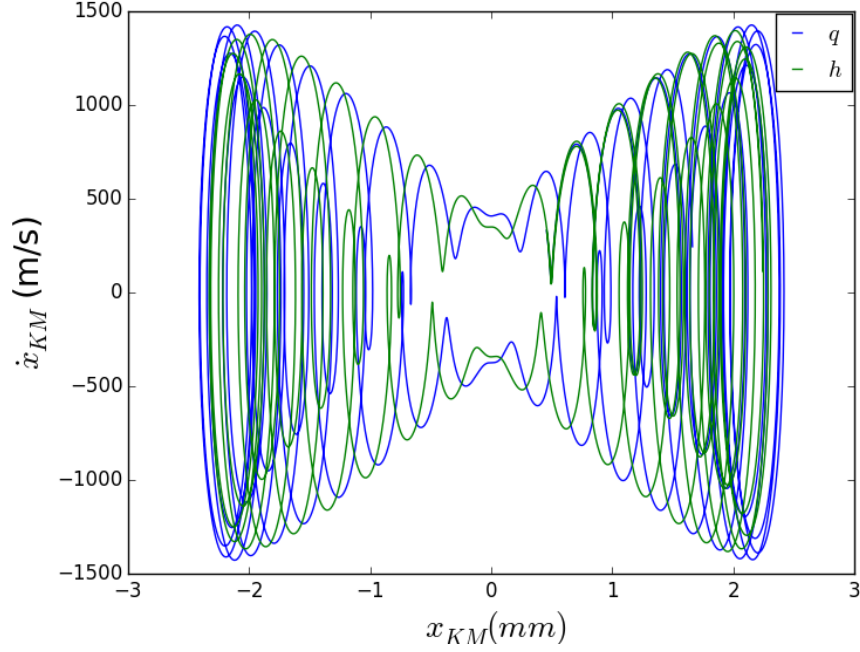


Şekil 5.15 Hekzapol katkılı tuzakta iyon demeti kütle merkezinin xz düzlemi yörüngesi ($f_3=0.25$).



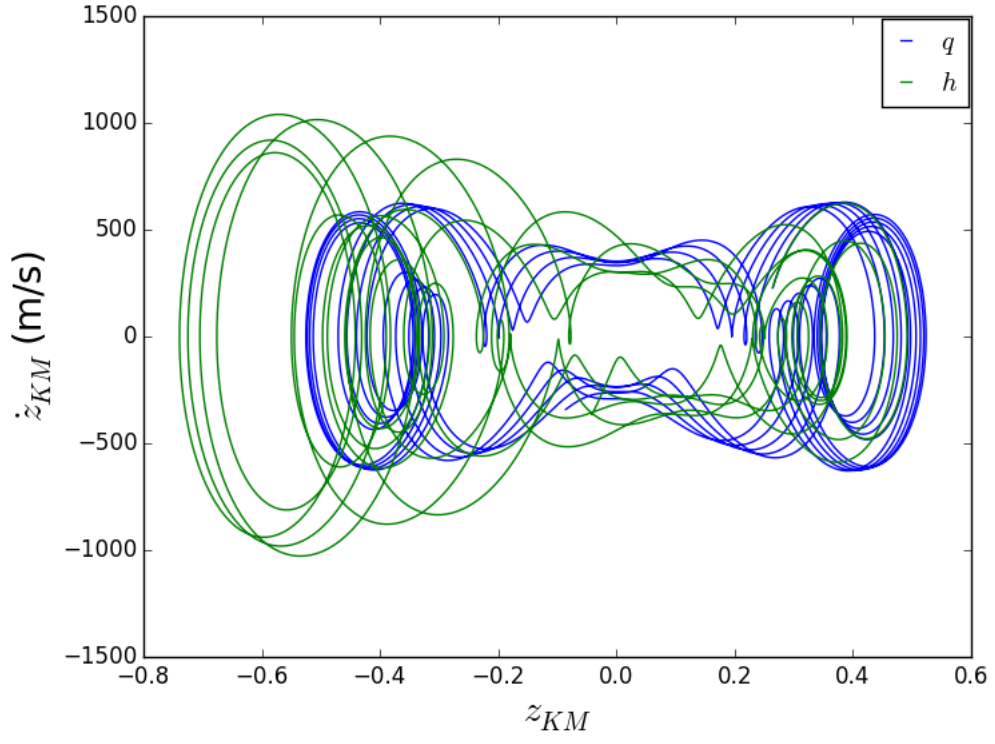
Şekil 5.16 Hekzapol katkılı tuzakta iyon demeti kütle merkezinin xy düzlemi yörüngesi ($f_3=0.25$).

Şekil 5 16 de iyon demetinin kütle merkezinin x deki konumu ve hızı verilmiştir. Kapalı bir yörünge oluşturan grafik iyon grubunun tuzaklandığı anlamını taşır. İyon grubunun x deki faz uzayını vermiştir.



Şekil 5.17 İyon demeti kütle merkezinin x yönündeki hız konum grafiği ($f_3=0.25$).

Şekil 5 17 da iyon grubunun kütle merkezinin z deki konumu ve hızı verilmiştir. Kapalı bir yörünge oluşturan grafik iyon grubunun tuzaklandığı anlamını taşır. İyon grubunun z deki faz uzayını vermiştir



Şekil 5.18 İyon demeti kütle merkezinin z yönündeki faz uzayı grafiği ($f_3=0.25$)

BÖLÜM VI

SONUÇ

Bu tez çalışmasında elektrostatik bir iyon tuzağı olan Paul iyon tuzağında Mg iyonunun hareket dinamikleri incelenmiştir. Bu kapsamda yazılan bir simülasyon programı yardımı ile tuzak parametreleri belirlenmiş ve iyonların tuzak içindeki hareketleri incelenmiştir.

Bu çalışmada Mg iyonu (24.305 akb), kuadrupol tuzak için kullanılmıştır. Kullanılan tuzak parametreleri Şekil 2.8 den a_z ve q_z seçilerek belirlenir. Bu parametreler aşağıda verilen tabloda verildiği gibidir. Çizelge 1 deki parametreler çeşitli hekzapol katkısı (f_3) varlığı durumu içinde kullanılmış ve tuzak içerisindeki iyon salınımlarına katkısı incelenmiştir. Kullanılan f_3 değerleri sırasıyla 0.25, -0.35 ve 0.35 değerlerine sahiptir.

Bu tez çalışmasının bir kısmı ulusal yayına dönüştürülmüş olup yayın bilgileri Ek-D'den görülmektedir.

KAYNAKLAR

Aksakal, H., “İon dynamics in a Paul Trap driven by various radio frequency waveforms” *International Journal of Mass Spectrometry*. 394, 22-28, 2016

Aksakal, H. ve Avcı, S., “Paul iyon tuzağında Tek iyon dinamiği”, *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Dergisi* 10(2), 2015.

Bandelow, S., Marx, G. and Schweikhard, L., “The stability diagram of the digital ion trap” *International Journal of Mass Spectrometry*. 336 47-52, 2013.

Blümel, R., Kappler, C. Quint, W. and Walther, H., “Chaos and order of laser –cooled ions in a Paul Trap” *Physical Review A* 40-2-808, 824, 1989

Forbes, M. W., Shari, M., Croley, T., Lausevic Z. and March, R. E., “Simulation of ion Trajectories in a Quadrupole Ion Trap: a Comparison of Three Simulation Programs” *Journal of Mass Spectrometry* 34 :1219-1239 1999.

Major, F.G, Gheorghe, V. N. and Werth, G. “Charged Particle Traps: Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement”. *Springer-Verlag*, 2005

March, E. R., Todd F. And John, J., “Practical aspects of ion trap mass spectrometry Volume I: Fundamentals of Ion Trap Mass Spectrometry” *CRC Press LLC*, 1995

March, R. E. “An Introduction to Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry” *Journal of Mass Spectrometry*, 32, 351-369, 1997

March, R. E. “Quadrupole Ion Traps” *Mass Spectrometry Reviews*, , 28, 961– 989, 2009

Nagerl, H. C., Roos C. H., Rohde H., Leibfried D., Eschner J. Schmidh F., Kaler and Blatt R. “ Addressing and Cooling of Single Ions In Paul Trap” *Fortschr. Phys.* 48 5-7, 623-636, 2000

Paul, W., Elektromagnetic traps for charged and neutral particles *Rev. Mod. Phys* (Nobel Lecture) 62, 531, 1990

March, R. E. and John F. J., “Quadrupole Ion Trap Mass Spectrometry” *John Wiley & Sons* 2nd ed. 2005.

March, R. E. and John F. J., “Practical aspects of trapped ion mass spectrometry Volume IV, Theory and instrumentation” *CRC Press* 273-291 2010.

Url-1 <http://www.bilimveteknoloji.info/iyonlari-tuzaklamak>, 26 Ekim 2014

Url-2 https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2012/ 26 Ekim 2014

Url-3 http://tr.wikipedia.org/wiki/Gauss_fonksiyonu, 26 Ekim 2014

Url-4 www.python.org, 15 Mayıs 2013.

Url-5 Jones T., <http://www.physics.drexel.edu/~tim/open/mat/mat.pdf> 26 Eylül 2014

Url-6 https://tr.wikipedia.org/wiki/Runge-Kutta_Yöntemleri, 12 Ekim 2014

EKLER

EK- A Mathieu diferansiyel denkleminin Floquet çözümü

Kuadrupol Paul iyon tuzağı içinde bir iyonun tuzak içinde sınırlı bir bölgede mathieu denklemleri ile açıklanan hareketi üç boyutlu parametrik osilatör olarak kabul edilebilir.

$$\ddot{u} + (a - 2q\cos(2\tau))u = 0$$

Bu denklem değişken katsayılı lineer diferansiyel denklem sınıfında olduğundan

$$L[y] = \ddot{y} + p(t)\dot{y} + q(t)y = 0$$

Bu denklemin iki temel çözümü, $y_1(t)$, $y_2(t)$ sınır değer denklemlerini karşılayacaktır.

$$\left. \begin{array}{l} c_1 y_1(t_0) + c_2 y_2(t_0) = y_0 \\ c_1 \dot{y}_1(t_0) + c_2 \dot{y}_2(t_0) = \dot{y}_0 \end{array} \right\} Yc = y$$

Belirleyici olarak Y 'yi sifıra eşit almadan işlemlere devam edeceğiz. Bunun için yukarıdaki denklem sisteminin Wronskianının (Y nin determinantının) herhangi bir t_0 değeri için sıfırdan farklı olması gerekmektedir.

$$W(Y) = \det(Y) = \begin{vmatrix} y_1(t_0) & y_2(t_0) \\ \dot{y}_1(t_0) & \dot{y}_2(t_0) \end{vmatrix} \neq 0$$

Bu durumda tek ve çift çözümler serisi aşağıdaki gibi olur.

$$\left. \begin{array}{l} y_1: y(t_0) = 1, \quad \dot{y}(t_0) = 0 \\ y_2: y(t_0) = 0, \quad \dot{y}(t_0) = 1 \end{array} \right\} W(Y) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

Böyle çözümlerin temel serileri vardır. Mathieu denklemine, Floquet teoremi uygulanırsa:

$y(z): (y(z + \pi) = \sigma y(z))$ Floquet's Teoremi (Url-4)

Bunun ispatı şu şekilde özetlenmiştir.

Mathieu's denklemlerinin çözüm çifti olarak $w_1(\eta)$ ve $w_2(\eta)$ fonksiyonlarını tanımlayabiliriz.

$$\begin{aligned} w_1(u + \pi) &= \alpha w_1(u) + \beta w_2(u) \rightarrow \dot{w}_1(u + \pi) = \alpha \dot{w}_1(u) + \beta \dot{w}_2(u) \\ w_1(0) = \dot{w}_2(0) &= 1, \dot{w}_1(0) = w_2(0) = 0 \Rightarrow w_1(\pi) = \alpha, \dot{w}_1(\pi) = \beta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} w_1(u + \pi) &= w_1(\pi)w_1(u) + \dot{w}_1(\pi)w_2(u) \\ w_2(u + \pi) &= w_2(\pi)w_1(u) + \dot{w}_2(\pi)w_2(u) \end{aligned}$$

$$A = \begin{pmatrix} w_1(\pi) & \dot{w}_1(\pi) \\ w_2(\pi) & \dot{w}_2(\pi) \end{pmatrix}, \quad w(u) = \begin{pmatrix} w_1(u) \\ w_2(u) \end{pmatrix} \ni Aw(u) = w(u + \pi)$$

Floquet's teoremine göre,

$$|A - \sigma I| = 0$$

bir öz değer denklemi elde edilebilir. σ 'nın Mathieu denkleminin bir çözümü olduğunu düşünürüz. Çözüm şu forma sahiptir : $e^{\mu u} \phi(u)$ (Url-5, Major vd, 2005, March ve Todd 2005)

$$\sigma = e^{\mu \pi},$$

$$\phi(u) = e^{-\mu u} y(u) \ni \phi(u + \pi) = e^{-\mu(u+\pi)} y(u + \pi) = e^{-\mu u} y(u) = \phi(u)$$

Floquet's teoremi ile G.W. Hill metodu kullanılarak çözüm

Floquet metodu ile bulunan çözüm önerisi Mathieu diferansiyel denklemi için Hill metodu kullanılarak bir seri çözüm aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$u(\tau) = e^{\mu \eta} \phi(u) = A_1 e^{\mu \tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{2ni\tau} + A_2 e^{-\mu \tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{-2ni\tau} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{(\mu+2ni)\tau}$$

Bu denklemi Mathieu denkleminde yerine koyduğumuzda,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} \left((\mu + 2ni)^2 + a - 2q \left(\frac{e^{2iu} + e^{-2iu}}{2} \right) \right) e^{(\mu+2ni)u} = 0$$

n 'ye göre çözüm yaparsak,

$$\gamma_n(\mu)c_{2n-2} + c_{2n} + \gamma_n(\mu)c_{2n+2} = 0$$

$\gamma_n(\mu) = \frac{q}{(2r-i\mu)^2-a}$ Karakteristik özelliğe göre μ 'nün determinanı, $\Delta(\mu) = 0$ olur.

$$\cosh(\pi\mu) = 1 - 2\Delta(0)\sin^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{a}\right)$$

eşitliği yazılırsa, aşağıdaki tekrarlılama bağıntısı bulunur.

$$\frac{c_{2n}}{c_{2n\pm 2}} = -\frac{-q(2n-i\mu)^{-2}}{1-a(2n-i\mu)^{-2}+q(2n-i\mu)^{-2}\frac{c_{2n\pm 2}}{c_{2n}}}$$

Bu tekrarlılama bağıntısı kullanılarak çözüm olan $u_1(\tau)$ ve $u_2(\tau)$ aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\begin{aligned}\frac{c_{2n}}{c_{2n\pm 2}} &= R_n^\pm(\mu) \\ R_0^-(\mu)R_1^+(\mu) &= 1 \\ c_{\pm 2n} &= c_0R_1^\pm(\mu)R_2^\pm(\mu) \dots R_n^\pm(\mu) \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^2 c_{2n}}{c_{2n\pm 2}} &= -\frac{q}{4} \\ u(\tau) &= Au_1(\tau) + Bu_2(\tau) \\ u_1(\tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} \cos(2n + \beta)\tau \\ u_2(\tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} \sin(2n + \beta)\tau\end{aligned}$$

$u_1(\tau)$, $u_2(\tau)$ 'yi τ 'ya göre çözersek, A ve B katsayıları aşağıdaki gibi bulunur.

$$A = \frac{1}{W} [\dot{u}_2(\tau)u(\tau) - u_2(\tau)\dot{u}(\tau)]$$

$$B = \frac{1}{W} [u_1(\tau)\dot{u}_2(\tau) - \dot{u}_1(\tau)u_2(\tau)]$$

$$W = u_1(\tau)\dot{u}_2(\tau) - \dot{u}_1(\tau)u_2(\tau)$$

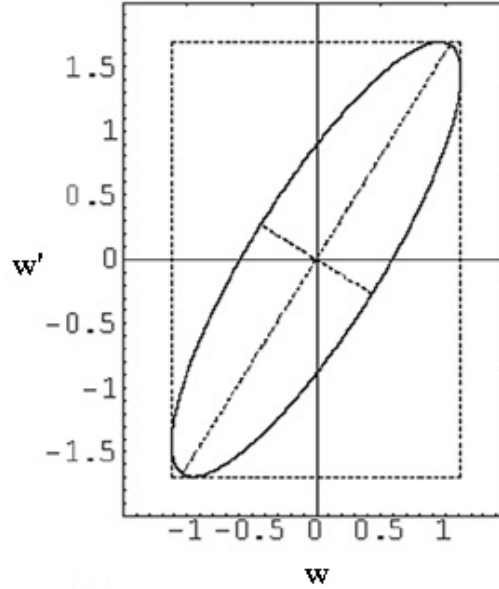
$\tau = 0$ alınırsa, Wronskian,

$$W = \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} (2n + \beta)c_{2m}c_{2n}$$

Sadece τ için $|u(\tau)| \leq u_m$ alınırsa,

$$u_m = \sqrt{A^2 + B^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_{2n}|$$

Çözümüne ulaşılmış olur. Mathieu çözümüne göre, faz uzayı analizi, W'nin eliptik faz uzayı gösterimi aşağıdaki gibi elde edilmiş olur (Major vd, 2005, March ve Todd 2010).

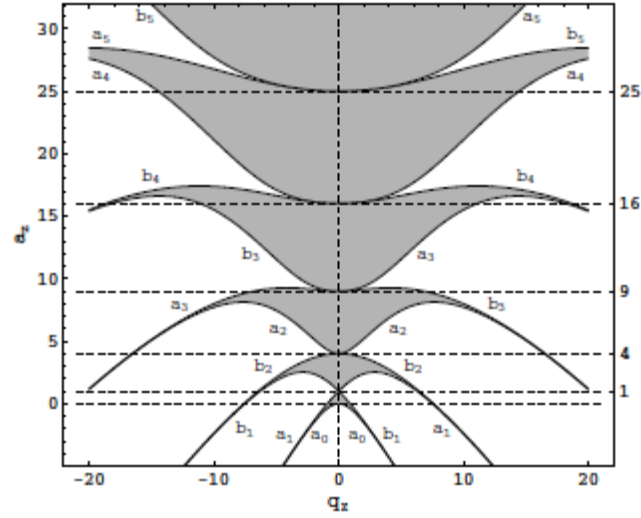


Şekil 0.1 Mathieu çözümüne göre, faz uzayı analizi, W'nin eliptik faz uzayı gösterimi

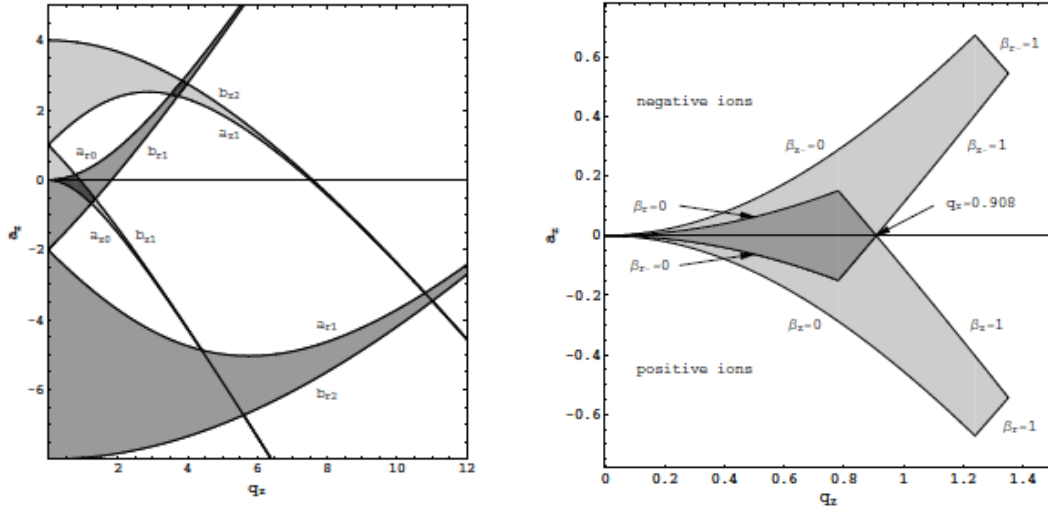
$\Delta(0) = \lim_{i \rightarrow \infty} \Delta_i$ yaklaşımı yapılırsa doğru çözüm elde edilmiş olur (Major vd, 2005).

EK-B Mathieu diferansiyel denklemleri kararlılık bölgeleri

Kuadrapol rf Lineer Paul Tuzak için kararlılık diyagramını x-ekseni etrafında simetrik olarak vardır Bu durum Şekil 0.2 den görülmektedir. Şekil 0.3 ise z ekseni kararlılık diyagramıdır..



Şekil 0.2 Linear rf Paul Tuzak istikrar şeması, istikrarlı bölgeler iki kararlılık diyagramlarının kesiştiği yerlerdir.(Major vd, 2005).



Şekil 0.3 İdeal Paul Tuzak için kararlılık diyagramı, a ve b koyu gri bölgeler kararlı olan bölgeler b) A bölgesinin yakın plan görünümü (Major vd, 2005).

EK-C Runge Kutta Metodu

Runge-Kutta yöntemi, adi diferansiyel denklemlerin çözüm yaklaşımları için kapalı ve açık yinelemeli yöntemler ailesinin bir tipidir. Bu yöntem 1900' lü yıllarda C. Runge ve M.W. Kutta adlı matematikçiler tarafından geliştirilmiştir.

Dördüncü dereceden klasik Runge-Kutta Yöntemi: "RK4" veya "Runge-Kutta yöntemi" olarak adlandırılır. Aşağıdaki gibi tanımlanan bir başlangıç değer problemini ele alalım.

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f(t, y) \\ y(t_0) &= y_0 \end{aligned}$$

Bu problem için RK4 yöntemi aşağıdaki denklemlerle ifade edilir.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Burada ; k_1, k_2, k_3 ve k_4 aşağıda verildiği gibidir.

$$\begin{aligned} k_1 &= h \cdot f(t_n, y_n) \\ k_2 &= h \cdot f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= h \cdot f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= h \cdot f(t_n + h, y_n + k_3) \end{aligned}$$

Böylece bir sonraki y_{n+1} değeri o anki y_n değerine h aralığının büyüklüğüyle tahmini eğimin çarpımının eklenmesi ile elde edilir. Bu eğimlerin ağırlıklı ortalamasıdır.

k_1 aralığın başlangıçtaki eğimidir.

k_2 aralığın orta noktasındaki eğimidir. Bu k_2 eğimi, euler yöntemi kullanılarak y 'nin $t_n + \frac{h}{2}$ noktasındaki değerinden elde edilir.

k_3 orta noktadaki eğimidir. Ama busefer y değeri k_2 eğiminden elde edilir.

k_4 aralığın sonundaki eğimidir. y değeri k_3 eğimi kullanılarak bulunur (Url-6).

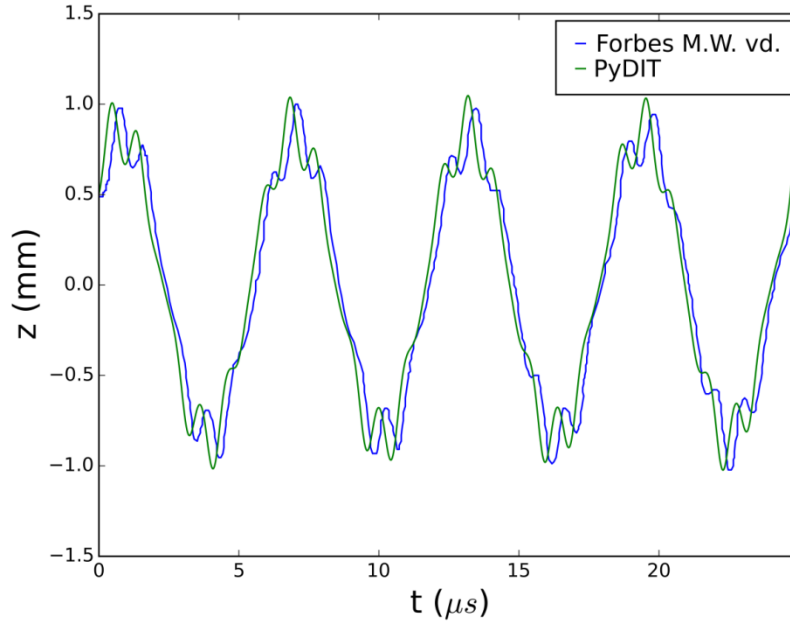
EK-D Simülasyon Programı Karşılaştırması

Tezde kullanılan PyDIT kodu ile literatür (Forbes vd. 1999)kiyaslaması aşağıda verildiği gibidir. Forbes ve arkadaşları (1999) nın kullandıkları parametreler kullanılarak iyonun tuzak içinde yörüngesinin minimum ve maksimum değerleri tabloda verildiği gibidir. Ayrıca PyDIT kodu ile Forbes ve arkadaşlarının z-eksenindeki iyon salınımının grafiğinin kıyaslaması Şekil 0.4' de verildiği gibidir (Aksakal 2015).

Çizelge 2 PyDIT ile Forbes vd. Karşılaştırılması (Aksakal ve Avcı 2015).

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
r_{\min} (mm)	0.1791	0.1786	0.1740	0.1787
r_{\max} (mm)	1.1477	1.1475	1.1390	1.1445

* Forbes ve arkadaşlarının kullandıkları simülasyon programları



Şekil 0.4 PyDIT kodu ile Forbes ve arkadaşlarının z-ekseni iyon salınımlarının kıyaslaması (Aksakal 2015)

ÖZ GEÇMİŞ

Serkan AVCI 10 Kasım 1981 yılında Ordunun Gököy ilçesinde dünyaya geldi. İlk, orta ve lise öğrenimini Ordu'da tamamladı. Erzurum Atatürk Üniversitesi Fizik Bölümünü 2000 yılında kazandı ve 2004 yılında Fizik Lisans öğrenimini tamamladı. 2004-2010 yılları arasında eğitim işiyle uğraştı. 2010 yılında Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisansa başladı. Evli ve üç çocuk babasıdır. Özel bir şirkette İş güvenliği uzmanı olarak çalışmaya devam etmektedir.

TEZ ÇALIŞMASINDAN ÜRETİLEN ESERLER

Bu tez çalışmasından, 1 (bir) adet ulusal makale üretilmiştir. Bu üretilen çalışma aşağıda sunulmuştur.

Aksakal, H. ve Avcı, S., “Paul iyon tuzunda Tek iyon dinamiği”, *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Dergisi* , 10(2), 2015.