

文章编号: 1007-4627(2015)03-0341-06

兰州彭宁阱核心电极的最优电压幅值计算

孙宇梁¹, 王永生², 田玉林², 王均英², 黄文学²

(1. 湖州师范学院理学院, 浙江 湖州 313000;
2. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

摘要: 彭宁阱是用于直接测量原子核质量的精确设备。为了保证彭宁阱的测量精度, 需在阱中心产生精准的四极静电场, 而四极静电场是通过在彭宁阱的核心电极施加合适的电压产生的。采用公式推导法和最小二乘法两种方法计算得到了 LPT 核心电极需加电压幅值。对于公式推导法, 电压值完全从理论出发, 经公式推导后计算得到; 最小二乘法的出发点是使取样偏差的平方和最小, 且通过仿真模拟考虑了电极的实际几何形状。由这两种方法得到的非四极项系数 C_4 和 C_6 , 可用于估算因偏离理想四极电场所产生的实验误差。虽然这两种方法的出发点不同, 但都可以在阱中心产生需要的四极电场。

关键词: 彭宁阱; 质量测量; 四极电场; 电极电压

中图分类号: O571.6 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.32.03.341

1 引言

质量是原子核的一个基本属性, 它反映了原子核结合能的信息。精确的质量数据与其它信息一起, 为天体物理、核结构、弱相互作用、量子电动力学、标准模型等研究提供了依据^[1-2]。不同层次的物理研究要求不同精度的质量, 而质量测量的精度也决定了可以开展的物理研究的范围, 例如: 若质量测量的相对精度达到 1×10^{-7} , 将为原子核物理研究中的质量公式和核结构模型提供证据; 若要系统地研究原子核的结合能等, 质量测量的相对精度就需要达到 1×10^{-9} 。

彭宁离子阱质量谱是精度最高的原子质量测量方法, 这种测量方法的最高精度可好于 1×10^{-10} ^[3]。为了开展高精度原子质量的实验研究, 中国科学院近代物理研究所 (IMP) 正在建设兰州彭宁离子阱 (LPT)^[4-6]。它的主要研制目的是测量由融合蒸发反应产生的放射性核素的质量, 并在可能的条件下对超重核的质量进行直接的精确测量。文献^[7]对彭宁阱中离子运动的物理图像进行了详细的研究, 在阱中产生四极静电场的基础上, 经过加四极激发、偶极激发和缓冲气体作用的过程, 彭宁阱可精确测得原子的质量。

彭宁阱主要有两种电极结构形式 (图 1): 旋转双曲面结构 (a) 和柱状结构 (b)。这两种结构的彭宁阱都由

一个环电极、两个端盖电极和一些修正电极组成。两种电极结构各有其特点: 对于旋转双曲面电极结构的彭宁阱, 电势线依赖于电极形状, 因此阱内满足约束条件的区域较大, 但开口小, 加工精度要求非常高; 对于柱状电极结构的彭宁阱, 开口大, 易于加工, 但是由于电势的产生依赖于电极上所加的电压, 从而依赖于电源稳定性, 因此满足约束条件的区域相对小一些, 而且会产生高阶项的电场。考虑到国内机械加工水平以及需要在阱内研究精细粒子谱学, LPT 的电极形状选择了柱状。

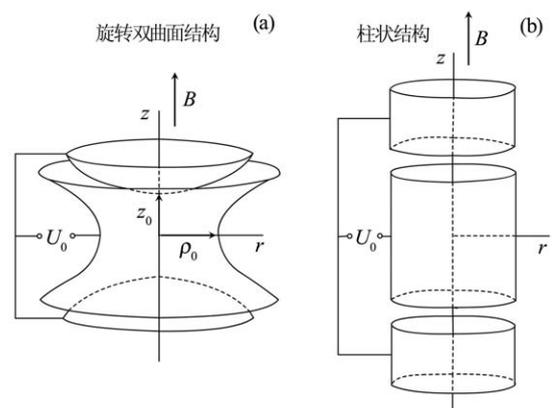


图 1 彭宁阱电极结构

图 2 为 LPT 的电极结构, 它包括一个环电极、两

收稿日期: 2014-09-15; 修改日期: 2014-09-30

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11075188, 11405054, 11405243); 国家重点基础研究发展计划项目(973计划)(2013CB-834400)

作者简介: 孙宇梁(1986-), 男, 福建惠安人, 讲师, 博士, 从事粒子物理与原子核物理研究; E-mail: sunyl@hutczj.cn

通信作者: 黄文学, E-mail: huangwx@impcas.ac.cn.

一个一类修正电极、两个二类修正电极和两个端盖电极。LPT 环电极内径 $\rho_0 = 16 \text{ mm}$ ，考虑到电极间空隙的宽度 (0.5 mm)，各电极长度如表 1 所列。



图 2 LPT 电极截面示意图

表 1 LPT 核心电极长度

电极	长度/mm
环电极	18.5
一类修正电极	12.8
二类修正电极	6.7
端盖电极	64

在阱中心产生精准的四极静电场是进行高精度质量测量的必要保证，因此，各电极需要施加合适的电压。本文采用公式推导法和最小二乘法两种方法来计算各电极需施加的电压值。

2 公式推导法

对于理想彭宁阱，当端盖电极和环电极分别加 $V_0/2$ ， $-V_0/2$ 的电压时，阱中产生的电势为^[8]

$$V(\rho, z) = \frac{1}{2} V_0 C_0 + V_0 C_2 \left(\frac{z^2 - \rho^2/2}{2d^2} \right), \quad (1)$$

其中， d 为彭宁阱的特征参数，

$$d = \frac{\sqrt{2z_0^2 + \rho_0^2}}{2}, \quad (2)$$

z_0 表示势阱中心点到端盖电极的最近距离； ρ_0 表示势阱中心点到环电极的最近距离。

针对 LPT 电极的实际情况 (图 2)，令 V_1, V_2 分别为一类、二类修正电极所加电压， ϕ_0 为环电极加 $-1/2 \text{ V}$ 电压、两个端盖电极加 $1/2 \text{ V}$ 电压时所产生的电势， ϕ_{c1} 、 ϕ_{c2} 分别为两个一类/二类修正电极加 1 V 电压时所产生的电势，则所有电极加电压后产生的总电势为

$$V = V_0 \phi_0 + V_{c1} \phi_{c1} + V_{c2} \phi_{c2}. \quad (3)$$

由于电极是柱状结构，因此所产生总电势 V 是关于 z 轴轴对称的，可以写成在球坐标系中用勒让德多项式展开的形式，且只有偶数项

$$V(\rho, z) = \frac{1}{2} V_0 \sum_{\substack{k=0 \\ \text{even}}}^{\infty} C_k \left(\frac{r}{d} \right)^k P_k(\cos \theta), \quad (4)$$

同理， ϕ_0 ， ϕ_{c1} ， ϕ_{c2} 也可以用勒让德多项式展开

$$\begin{cases} \phi_0 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k=0 \\ \text{even}}}^{\infty} C_k^{(0)} \left(\frac{r}{d} \right)^k P_k(\cos \theta) \\ \phi_{c1} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k=0 \\ \text{even}}}^{\infty} D_{1k} \left(\frac{r}{d} \right)^k P_k(\cos \theta) \\ \phi_{c2} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k=0 \\ \text{even}}}^{\infty} D_{2k} \left(\frac{r}{d} \right)^k P_k(\cos \theta) \end{cases}. \quad (5)$$

由式(3)、(4)和(5)可得到

$$C_k = C_k^{(0)} + D_{1k} \frac{V_1}{V_0} + D_{2k} \frac{V_2}{V_0}. \quad (6)$$

文献[9]给出了 $C_k^{(0)}$ 、 D_{1k} 、 D_{2k} 的求解方法：

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L \phi_0(\rho_0, z) \cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right) dz, \quad (7)$$

$$A_n^{(c)} = \frac{a_n}{J_0(ik_n \rho_0)}, \quad (8)$$

$$C_k^{(0)} = 2 \frac{(-1)^{k/2} \pi^k}{k! 2^k} \left(\frac{d}{L} \right)^k \sum_{n=1}^{\infty} (2n)^k A_n^{(c)}, \quad k = 2, 4, 6, \dots. \quad (9)$$

式(7)中的 $\phi_0(\rho_0, z)$ 为 ϕ_0 在 $\rho = \rho_0$ 处的值，它在端盖电极(Endcap)区域、修正电极(Compensation)区域、环电极(Ring)区域，以及端盖电极和修正电极之间的空隙(Uppergap)区域、环电极和修正电极之间的空隙(Lowergap)区域有不同的值

$$\phi_0(\rho_0, z) = \begin{cases} 0.5 & L - l_3 < z < L \text{ (Endcap)} \\ \sum_{i=0}^4 \eta_i u^i & L - l_3 - s < z < L - l_3 \text{ (Uppergap)} \\ 0 & l_0/2 + s < z < L - l_3 - s \text{ (Compensation)} \\ \sum_{i=0}^4 \lambda_i v^i & l_0/2 < z < l_0/2 + s \text{ (Lowergap)} \\ -0.5 & 0 < z < l_0/2 \text{ (Ring)} \end{cases}. \quad (10)$$

如图 3 所示, 如果两个电极之间加的电压为 V_α 和 V_β , 那么电极之间空隙的电势为^[9]

$$V\left(\frac{\sigma}{s}\right) = \frac{1}{2}(V_\alpha - V_\beta) \left[\frac{V_\alpha + V_\beta}{V_\alpha - V_\beta} - \left(\frac{\sigma}{s}\right)^{2/3} + \left(1 - \frac{\sigma}{s}\right)^{2/3} \right], \quad (11)$$

由于式 (11) 乘以 $\cos(\frac{n\pi}{L}z)$ 之后进行积分计算比较困难, 因此, 我们用四阶多项式的形式

$$V\left(\frac{\sigma}{s}\right) = \sum_{i=0}^4 \lambda_i \left(\frac{\sigma}{s}\right)^i. \quad (12)$$

对式 (11) 在 $(\sigma/s) \in (0, 1)$ 的范围内进行拟合, 对该多项式乘以 $\cos(\frac{n\pi}{L}z)$ 后进行积分计算。

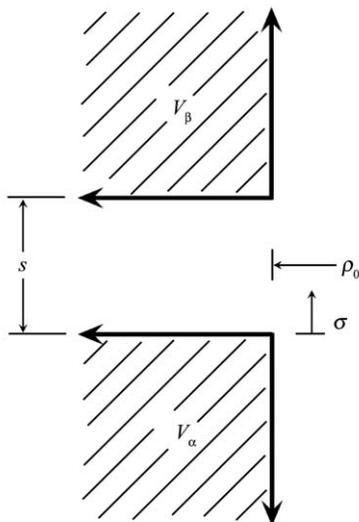


图 3 电极间缝隙

将 $\phi_0(\rho_0, z)$ 换成 $\phi_{c1}(\rho_0, z)$ 、 $\phi_{c2}(\rho_0, z)$ 进行式 (7)、(8)、(9) 这三步计算, 则可得到系数 D_{1k} 、 D_{2k} 。

从式 (1) 可以看出, 对于理想的四极电场, 需要有 $C_2 = 1$ 。为了使所产生电场的四极项系数 C_2 仅由环电极和端盖电极之间电压 V_0 的系数 $C_2^{(0)}$ 决定, 而与修正电极所加电压无关, 即 $C_k = C_k^{(0)}$, 由式 (6) 知需要有^[10]

$$D_{12} \frac{V_1}{V_0} + D_{22} \frac{V_2}{V_0} = 0, \quad (13)$$

所产生电势的非四极项系数 $C_k (k > 2)$ 越大, 电场导致的测量误差越大^[11-12], 因此需使最重要的非四极项系数 $C_4 = 0$, 由式 (6) 知需要有

$$C_4^{(0)} + D_{14} \frac{V_1}{V_0} + D_{24} \frac{V_2}{V_0} = 0, \quad (14)$$

当满足式 (13) 和式 (14) 时, 有 $C_2 = 1.4234$, $C_6 = -0.4206$, 此时离理想的四极电场有较大的偏差。为了得到合适的电压值, 在满足 $C_4 = 0$ 的前提条件下, 用

公式计算 C_2 取不同值时 C_6, C_8, C_{10} 的大小, 所得结果如图 4 所示。可以看出, 在计算选取的范围内, 随着 C_2 的减小, $|C_6|, |C_8|, |C_{10}|$ 的值也在减小。 C_2 的减小意味着离子阱势阱深度的降低, 从而降低了约束离子的能力。因此, 综合考虑势阱深度、电场多级项对测量误差的影响, 选取 $C_2 = 0.78$, $C_4 = 0$, 此时 $C_6 = -0.1948$, $V_1/V_0 = -0.3453$, $V_2/V_0 = 0.1708$, 由此可得到各电极所加电压值, 见表 2。

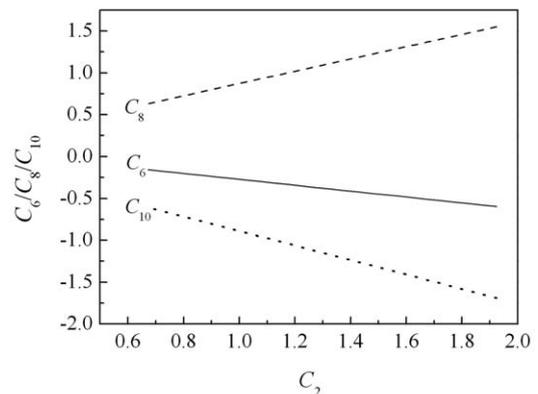


图 4 LPT 电场的多极项系数关系图

表 2 公式推导计算得到的电极电压值

电极	电压/V
环电极	-50
一类修正电极	-34.5
二类修正电极	17.1
端盖电极	50

国际同类彭宁阱设备 ISOLTRAP 的结构和尺寸比例与 LPT 相同, 表 3 给出了 ISOLTRAP 各电极所加电压值^[13], 这些值可以用来与两种方法的计算结果进行比较。由于 ISOLTRAP 和 LPT 都储存正离子, 需在阱中心产生负的电势, 因此综合考虑核心电极的电压要求以及所需电源实现的难易程度, 将表 2 中所有电极电压降低 50 V, 则所加电压值分别为 $-100, -84.5, -32.9, 0$ V, 该计算结果与表 3 电压值相近。

表 3 ISOLTRAP 各电极所加电压值

电极	电压/V
环电极	-100
一类修正电极	-83
二类修正电极	-34
端盖电极	0

在进行缝隙电势计算时，需先多项式拟合再积分，过程较为复杂。为了减轻计算负担，把电极缝隙间电势视为线性变化，即

$$V\left(\frac{\sigma}{s}\right) = (V_\beta - V_\alpha) \frac{\sigma}{s} + V_\alpha, \quad (15)$$

得到的电压比值与之前值相比，仅有 0.009% 的误差。若不考虑电极间缝隙，忽略对 $V(\sigma/s)$ 的积分，则求得的电压比值有 5% 的误差，可见缝隙的影响不可忽略。

3 最小二乘法

根据最小二乘法原理，要使实际产生的电势趋近于理想的电势，就要使在各个取样点上的两者差值的平方和最小(这里的取样点为 z 轴上一系列的点)，也就是使

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{k=1}^7 a_k X_k(x_i) \right)^2 \quad (16)$$

取最小值。其中： $X_k(x_i)$ 是各个电极所加电压为 1 V 时各点的电势； a_k 是各电极所加电压；为要求的值； y_i 为理想情况下各点的电势，括号内的求和是对各个电极，括号外的求和是对 z 轴上一系列的点。

理想彭宁阱内的电势为

$$\Phi(z, \rho) = \frac{U_0}{2d^2} \left(z^2 - \frac{1}{2} \rho^2 \right), \quad (17)$$

U_0, d 取 LPT 的实际参数： $U_0 = 100$ V， $d = 25.84$ mm。对于在 z 轴上点的电势 y_i ， ρ 取 0，即

$$\Phi = \frac{U_0 z^2}{2d^2}, \quad (18)$$

由式 (18) 可算得 y_i 。

在模拟程序 SIMION8.0 上构建出 LPT 电极的几何模型后，可输出各个电极所加电压为 1 V 时在 z 轴一系列点(取样点)上所产生的电势 $X_k(x_i)$ 。取样点的个数由所构建电极模型的精细程度和所取 z 轴上的计算范围决定，例如， z 轴的计算范围取 $-12 \sim +12$ mm(由离子在阱中的运动范围决定)，电极模型的精细程度是 0.125 mm/格，则所取的点数为 $12 \times 2 / 0.125 + 1 = 193$ 。

由极值原理可知， χ^2 取极小值时，它对 a_k 的一阶导应等于 0，即

$$\frac{\partial}{\partial a_k} \chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[y_i - \sum_{j=1}^7 a_j X_j(x_i) \right] X_k(x_i) = 0, \quad (19)$$

构建矩阵 A, b, a ，使 A, b 的矩阵元为

$$A_{ij} = X_j(x_i), \quad b_i = y_i, \quad (20)$$

矩阵 a 为

$$a = (a_1, a_2, a_3, \dots, a_7). \quad (21)$$

则方程 (19) 可写成矩阵形式

$$A^T \cdot b - (A^T \cdot A) \cdot a = 0, \quad (22)$$

由此得到计算电压值的矩阵计算公式

$$a = (A^T \cdot A)^{-1} \cdot (A^T \cdot b), \quad (23)$$

按式 (23) 进行矩阵运算，得到的各电极需加电压值如表 4 第 1 行所列。为降低所需电源的成本，将目标四极静电场整体降低一定的电势，即将式 (18) 改为

$$\Phi = \frac{V_0 z^2}{2d^2} - 90, \quad (24)$$

此时算出的各电极电压值如表 4 第 2 行所列，此时与表 3 所列值相近。

表 4 最小二乘法算得 LPT 彭宁阱各电极电压值

电极	电压/V	
	(1)	(2)
端盖电极	69.6	-3.8
二类修正电极	76.0	-24.3
一类修正电极	5.9	-84.4
环电极	-8.7	-99.7
一类修正电极	6.2	-84.2
二类修正电极	70.0	-28.7
端盖电极	78.0	2.2

经计算， z 轴上各点所形成的电势 $\sum_{k=1}^7 a_k X_k(x_i)$ 与理想电势 y_i 的偏差值在 10^{-4} V 的量级。为了得到电势高阶项系数 C_4 和 C_6 ，对实际所产生电势进行函数拟合，所用拟合函数为

$$\Phi(z) = \frac{V_0}{2} \left(C_0 + \frac{C_2}{d^2} z^2 + \frac{C_4}{d^4} z^4 + \frac{C_6}{d^6} z^6 \right), \quad (25)$$

拟合结果如表 5 所列。

表 5 拟合得到的多极项系数 C_n

系数	拟合初值	拟合结果
V_0/V	100	100.08
d/mm	25.84	25.83
C_0	0	6.27×10^{-7}
C_2	1	1.00
C_4	0	8.44×10^{-4}
C_6	0	-2.87×10^{-3}

4 两种方法比较

在 SIMION8.0 中, 按照两种方法求得的电压值对 LPT 核心电极进行对加电, 可观察到所形成的电势线如图 5 所示。由此说明, 按这两组值进行加电, 都可以在阱中心产生所需要的四极电场。之前分析已经得到, 对于两种方式所产生的电场, 最主要的两个非四极项系数分别为 $C_4=0$, $C_6=-0.1948$ 和 $C_4=8.44\times 10^{-4}$, $C_6=-2.87\times 10^{-3}$ 。由公式 (4) 可以看出, C_6 的影响仅有 C_4 的 $(r/d)^2$ 倍, 考虑到离子在阱中的活动范围取 r 的值为 1 mm, 阱的特征半径 $d=25.84$ mm, 由此可估算出 $C_4+(r/d)^2\times C_6$ 的值, 对于两种方法所产生的电场, 这个值都在 10^{-4} 量级, 即两种方法产生电场的非四极项部分大小相当。因此, 两组电压值都可作为 LPT 的加电方式。此外, 由于公式推导法的计算中包含了更多的参数, 除了电压和电势多极项系数, 还有各电极的尺寸, 因此该方法还适用于彭宁阱电极的设计。

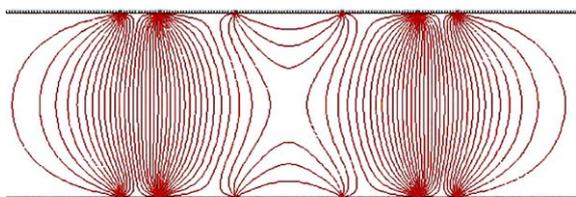


图 5 (在线彩图) LPT 中四极静电势

5 小结

采用两种方法计算得到了 LPT 环电极、端盖电极和修正电极的电压值。这两种计算方法的出发点和突

破点各不相同: 对于公式推导法, 电压值完全从理论出发, 经公式推导后计算得到; 最小二乘法的出发点是使取样偏差的平方和最小, 且通过仿真模拟考虑了电极的实际几何形状。两种方法都可以在阱中心产生所需的四极电场, 且所产生的非四极项部分大小相当。另外, 公式推导法还适用于彭宁阱电极的设计。

参考文献:

- [1] SAVARD G, BARBER R C, BEECHING D, *et al.* Nuclear Physics A, 1997, **626**(1): 353.
- [2] HARDY J C, TOWNER I S, KOSLOWSKY V T, *et al.* Nuclear Physics A, 1990, **509**(3): 429.
- [3] BLAUM K. Physics Reports, 2006, **425**(1): 1.
- [4] HUANG W X, TIAN Y L, WANG J Y, *et al.* Nucl Instr Meth B, 2013, **317**: 528.
- [5] HUANG Wenxue, XIAO Guoqing, WANG Yue, *et al.* Chinese Physics C, 2008, **32**(Suppl. II): 197.
- [6] XU Hushan, HUANG Tianheng, SUN Zhiyu, *et al.* Nuclear Physics Review, 2006, **23**(4): 359. (in Chinese)
(徐珊珊, 黄天衡, 孙志宇, 等. 原子核物理评论, 2006, **23**(4): 359.)
- [7] SUN Yuliang, TIAN Yulin, HUANG Wenxue, *et al.* Nucl Instr Meth A, 2013, **724**: 83.
- [8] GABRIELSE G. Phys Rev A, 1983, **27**: 2277.
- [9] FARRAR K A. Nucl Instr Meth A, 2002, **485**(3): 780.
- [10] FEI X, SNOW W M. Nucl Instr Meth A, 1999, **425**(3): 431.
- [11] BROWN L S, GABRIELSE G. Reviews of Modern Physics, 1986, **58** (1): 233.
- [12] BOLLEN G, MOORE R B, SAVARD G, *et al.* Journal of Applied Physics, 1990, **68** (9): 4355.
- [13] RAIMBAULT-HARTMANN H, BECK D, BOLLEN G, *et al.* Nucl Instr Meth B, 1997, **126**: 378.

Calculation of the Optimal Amplitudes for the Key Electrodes of the Lanzhou Penning Trap

SUN Yuliang¹, WANG Yongsheng², TIAN Yulin², WANG Junying², HUANG Wenxue²

(1. Huzhou Teachers College, College of Science, Huzhou 313000, Zhejiang, China;

2. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China)

Abstract: Penning trap mass spectrometry is one of the direct methods and maybe the most accurate tool for atomic mass measurements. The quadrupole electric field produced in the trap should be very accurate in order to ensure the precision of measurements. The optimal amplitudes for the key electrodes of the Lanzhou Penning Trap(LPT) have been calculated by two methods—formula derivation and least-squares fitting. For formula derivation method, the optimal values are based on the theory and deduced from the formulas. Least-squares fitting method is to minimize the quadratic sum of sampling deviations, where the actual geometry of the electrodes has been considered by the simulation. The obtained C_4 and C_6 values can be used to estimate the experimental error produced by the deviation from the ideal quadrupole electric field. The expected quadrupole electric field could be gotten by both methods.

Key words: Penning trap; mass measurement; quadrupole electric field; electrode voltage

Received date: 15 Sep. 2014; **Revised date:** 30 Sep. 2014

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (11075188, 11405054, 11405243), National Basic Research Program of China(973 Program) (2013CB834400)

Corresponding author: HUANG Wenxue, E-mail: huangwx@impcas.ac.cn.

<http://www.npr.ac.cn>