文章编号:1673-0062(2013)04-0001-08

RFQ 冷却聚束器中 Mathieu 参数 q 值的选取

朱志超1,宋英明1*,罗 文1,黄文学2

(1. 南华大学 核科学技术学院,湖南 衡阳 421001;2. 中国科学院 近代物理研究所,甘肃 兰州 730000)

摘 要:介绍了 RFQ 冷却聚束器约束和冷却离子的理论,采用国际上比较先进的真实相互作用势力模型进行蒙特卡洛模拟,得出 RFQ 冷却聚束器的 Mathieu 参数 q 值的选取范围.结论是:无论在真空或者充气情况下,当 Mathieu 参数 q 大于0.908 时,离子的运动都是不稳定的;在充气情况下,Mathieu 参数 q 略小于0.908,离子运动已经不稳定.适合约束离子的最佳 Mathieu 参数 q 值的选取范围在0.3~0.5之间.
 关键词:RFQ 冷却聚束器;缓冲气体;Mathieu 参数;蒙特卡洛
 中图分类号:0571.6 文献标识码:B

Choose the Mathieu q Value for RFQ Cooler and Buncher

ZHU Zhi-chao¹, SONG Ying-ming^{1*}, LUO Wen¹, HUANG Wen-xue²

(1. School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China;
2. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou, Gansu 730000, China)

Abstract: The paper introduced the theory for cool and constraint ions in RFQ cooler and buncher, use the international comparative advanced Realistic Interaction Potential model for Monte Carlo simulation with buffer gas filled in RFQ, concluded the Mathieu parameter q value range for RFQ cooler and buncher. The conclusion is that under vacuum or air circumstances, when Mathieu parameter q is greater than 0.908, the movement of ions is unstable; under the condition of air circumstances, when Mathieu parameter q value for constraint ions is 0.3 to 0.5.

key words: RFQ cooler and buncher; buffer gas; Mathieu parameter; Monte Carlo

收稿日期:2013-07-16

基金项目:国家自然科学基金资助项目(10675147;10627504;11075188);国家重点基础研究发展计划基金资助项目 (2007CB815000);湖南省自然科学基金资助项目(13JJ4073);南华大学博士科研启动基金资助项目 (2012XQD06);核技术及应用湖南省重点学科基金资助项目

作者简介:朱志超(1981-),男,湖南湘潭人,南华大学核科学技术学院讲师,博士.主要研究方向:核物理.*通信 作者.

缓冲气体冷却束流被广泛运用于各种核谱仪 设备中,诸如 ISOTRAP^[1], HIPTRAP^[2], JYFL-TRAP^[3], LEBIT^[4], CPT^[5], LPT^[6]等等. 为克服束 流的横向发射度和纵向能量分散都比较大的缺 点,满足高精度测量的需要,国外一些大型实验室 采用在放射性束流线后增加一个旨在降低束流发 射度和能量分散的 RFQ 冷却聚束器 (RadioFrequency Quadrupole Cooler and Buncher),以高效率 地收集和冷却经过充气反冲质量分离器分离后的 次级束流,使其具有非常小的发射度和能量分散, 并把冷却后的高品质束流传输至后续设备,为离 子的进一步操纵、精细的核结构和核衰变研究及 高精度的质量测量提供条件.目前中国以超重核 的合成和衰变性质研究为主的超重核研究谱仪 SHANS(Spectrometer for Heavy Atoms and Nuclear Structure)正在建造中^[7].其中 RFQ 冷却聚束器 RFQ1L 是 SHANS 的一个关键设备.

Mathieu q 值是 RFQ 冷却聚束器中的一个非 常重要的参数,q 值的大小决定束流在 RFQ 冷却 聚束器中能否被冷却和约束.真空条件下,束流离 子在 RFQ 冷却聚束器中的运动可以根据计算解 析得到,而在充满缓冲气体的时候,束流离子在 RFQ 冷却聚束器中的具体运动状态不可能通过 计算解析得到,必须通过模拟.本文拟采用国际上 比较先进的真实相互作用势力模型,采用蒙特卡 洛方法,模拟在有缓冲气体存在的情况下束流离 子在 RFQ 冷却聚束器中的运动,得出适合约束束 流离子的最佳 Mathieu 参数 q 值的选取范围,为 RFQ 冷却聚束器的研制提供参考.

1 RFO 冷却聚束器基本工作原理

为产生约束离子所需的四极电场,采用如下 形式:4 个双曲面电极对称装配,并在相邻电极加 上幅度相同,频率相同,而相位相差 180°的射频正 弦波信号,如图 1a 所示,其中, φ_0 为相邻电极之 间的电位差.其相应电势分布如图 1b 所示.束流 沿 z 轴方向.

RFQ 四极电势和四极电场的具体形式为:

$$\Phi = \frac{U - V_{RF} \cos(w_{RF}t)}{2r_0^2} (x^2 - y^2) \qquad (1)$$

$$E = -\frac{U - V_{RF}\cos(w_{RF}t)}{r_0^2}(xi - yj) \qquad (2)$$

式中:U为施加在双曲面电极直流电压幅度, V_{RF} 为施加在双曲面电极上的射频电压值, ω_{RF} 为射频 电场角频率($\omega_{RF} = 2\pi f, f$ 为射频电场频率), r_0 为 RFQ 特征半径. 质量为 m,电荷为 e 的离子在 x,y 方向上受电场力,而在 z 方向上不受力. 离子在四极电场中的运动方程被称为 Mathieu 微分方程. 标准的 Mathieu 微分方程为:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + [a - 2q\cos(2(\xi - \xi_0))]u = 0 \quad (3)$$



图 1 典型的 RFQ 的电极结构 a 和电势分布 b Fig. 1 Electrode configuration a and electric field distribution b of RFQ

其中, $\xi = \omega_{RF} t/2$,参数 ξ_0 代表的是,离子刚刚 开始受到交变电场作用时的四极电场的相位,也 叫做初始相位. u 代表 x 或 y,离子的速度即为 $du/d\xi$. 其中 Mathieu 参数:

$$a = \frac{4eU}{m\omega_{RF}^2 r_0^2} \tag{4}$$

$$q = \frac{2eV_{RF}}{m\omega_{RF}^2 r_0^2} \tag{5}$$

当 RFQ 收集和冷却所有类型的离子时,则不 在双曲面电极上施加直流电压, *a* =0,从而不对 离子进行选择,形成一离子收集系统.

由于离子在x,y方向上同时做 Mathieu 运动, 要使离子的运动稳定,就必须满足x有稳定解且 同时y有稳定解.图2为 Mathieu 方程的双向稳定 图解,横坐标表示的是 Mathieu 参数q值,纵坐标 表示的是 Mathieu 参数a值.其中黄色表示x稳定 解区域,蓝色表示y稳定解区域,黄色和蓝色重叠 区域就是离子在x和y双向稳定运动区域.图 2a 中有四个x和y双向稳定区域,分别用A、B、C、D表示.区域D的位置(大约为a=0,q=7.5),可以 为质量选择提供比较好的分辨率,但是因为q值 很大,会导致q<0.9的重离子也被同时传输过质 量选择器.区域B和C仅在一些很特殊的设备中 有应用,最常用的是区域A.图 2b 是图 2a 中稳定 区域A的放大.

Mathieu 方程稳定运动的通解为^[8]:

$$u(\xi) = A \sum_{-\infty}^{\infty} C_{2n} \cos[(2n + \beta)\xi] +$$

$$B\sum_{-\infty}^{\infty} C_{2n} \sin[(2n+\beta)\xi]$$
 (6)





其中A,B为常数,取决于离子的初始位置、初始

速度和初始相位. C_{2n} 与 a 和 q 值有关, $n = 0, 1, 2, 3..., \beta$ 表征离子的运动频率. 可以看出,离子的稳定运动其实是一系列正弦和余弦运动的叠加. 当 n = 0 时,即频谱中的第一项,被称为基频,也叫宏运动(macro-motion). 当 n = 1 时的运动称为微运动(micro-motion)或 RF 运动,而更高阶频率的运动常常被忽略.

调节加在双曲面电极上射频功率信号的射频 频率和射频电压幅度,就可产生某一特定 q 值所 对应的射频电场,用以约束离子.研究表明,当q < 0.908 时,离子运动稳定^[89].图 3 显示了 a = 0 时 离子的运动轨迹随 q 值的变化情况,其中浅色线 表示宏运动,深色线表示叠加了微运动的总的离 子运动.当 q 值很小的时候,离子做稳定的合成振 荡;随着 q 值增大,离子微运动的振幅越来越大; 当 q 值超出了稳定点,离子振荡的振幅会越来越 大,最后会因与电极的碰撞而损失.



图 3 真空下,稳定运动图像中 a = 0, q 取不同值时的离子轨迹图 Fig. 3 In vacuum, stable motion images in a = 0, q diagrams for different values of the ion trajectory

真空下,当q值很小的时候,宏运动振幅比微运 动要大的多,可以近似将总的离子运动看做是宏运 动,此时离子周而复始绕 RFQ 冷却器束流轴线做简 谐运动,此即离子的约束;充气下,缓冲气体分子与 离子发生碰撞,离子的动能将逐渐降低,逐渐与缓冲 气体分子达到热力学平衡,此即离子的冷却.这样, 离子最终被冷却且约束在 RFQ 的中心轴线上.

2 充气情况下离子运动轨迹的模拟

离子每与气体分子发生一次碰撞,其相位就 发生变化,动能和运动方向也发生了变化,且离子 与分子下一步在何时发生碰撞是不可精确预知 的,离子的具体运动情况不能通过解析计算得到, 必须通过模拟计算.充气情况下的模拟,本文采用 国际上精准的真实相互作用势力模型(Realistic interaction potential,简称 RIP),结合 IonCool 程序 包^[10-11]和 SIMION 软件进行蒙特卡洛模拟.

RIP 模型基于离子与分子之间的两体相互作用势,此作用势又叫(*n*,6,4)相互作用势,可写为:

$$V(r) = \frac{B}{r^{n}} - \frac{C6}{r^{6}} - \frac{C4}{r^{4}}$$
(7)

其中 r 是离子和气体分子之间的距离, C4/r⁴项和

C6/r⁶项分别是离子电荷与其引起的电二极矩及 电四极矩之间的吸引力作用, *B*/r^{*}是短程的排斥 力作用. RIP 在模型能给出精确的量的预测, 诸如 准确预测散射角、散射截面、冷却离子的分布和平 均动能等^[10-13]. RIP 的迁移率与实验数据比较吻 合^[14-15], 能量适用范围比其他模型广^[16], 在目前 是缓冲气体冷却领域模拟结果最为精准的一种 模型.

图4 是采用 RIP 模型模拟得到的单个⁴⁰Ar⁺离 子在 He 缓冲气体中的典型运动轨迹.(初始能量 为1000 eV,入射沿束流轴线 z 轴正方向;缓冲气 体为气压为 2.5 Pa 的 He 气,气体温度为300 K; Mathieu 参数 q 值为 0.5, RF 电场频率为 500 kHz; 程序运行的时间步长为 0.1 μ s.)可以看到,离子 在 RF 电场的作用下做 Mathieu 运动,由于受缓冲 气体的碰撞,⁴⁰Ar⁺离子的运动幅度逐渐减小,离 子最终被冷却且被约束在束流轴线上.





3 q 值选取范围

离子在与气体分子不断发生碰撞,有可能某次碰撞中从气体分子中获得较高的能量,这样离子有可能飞出电极范围,从而不被约束.故采用一个离子的运动图像不具有代表性.在本文中,采用50个离子形成束流包络来进行统计.

理论上,离子的运动轨迹跟各种参数都有关,只 要改变任何一个参数值,离子的运动轨迹都会发生 改变.如果其他参数不变,仅仅改变 q 值,可以得到 离子的运动随 q 值变化的关系.而从公式 5 中可以 看出,q值与射频电压值 $V_{\rm RF}$,射频电场角频率 $\omega_{\rm RF}$ (或射频电场频率 f)都有关,即 q值一定,可以有不同的 $V_{\rm RF}$,f组合.另外, $V_{\rm RF2}$ /f的比值表征了 RFQ 的约束能力,在离子稳定运动的前提下,约束能力越强,则冷却后的束斑越小^[17].故本论文分别在保持频率 f值不变、保持 $V_{\rm RF2}$ /f⁻不变(则约束能力不变)、保持电压 $V_{\rm RF}$ 不变的三种情况下,改变 q值,得到离子运动情况与 q值的关系.模拟中采用的束流均为 1000 eV的⁴⁰Ar⁺离子,入射沿束流轴线 z 轴正方向,以 3 Pa的 He 气作为缓冲气体,温度为 300 K,RFQ 特征半径 r_0 设为 60 mm.具体参数见表 1. 0.99

1 189.2

Table 1 The corresponding table of parameter Mathieu q, RF voltage, RF frequency and constrain ability									
q	保持约束能力不变			保持 RF 频率不变			保持 RF 电压不变		
	$V_{\rm RF}/{ m V}$	<i>f∕</i> kHz	$V_{\rm RF2}/f^2$	$V_{ m RF}/ m V$	<i>f∕</i> kHz	$V_{\rm RF2}/f^2$	$V_{ m RF}/ m V$	<i>f</i> ∕kHz	$V_{\rm RF2}/f^2$
0.1	11 772.9	2 000.0	34.65	735.8	500	2.17	4 000	1 165.8	11.77
0.3	3 924.3	666.7	34.65	2 207.4	500	19.49	4 000	673.1	35.32
0.5	2 354.6	400	34.65	3 679.0	500	54.14	4 000	521.4	58.86
0.7	1 681.8	285.7	34.65	5 150.6	500	106.11	4 000	440.6	82.41
0.908	1 296.6	220.3	34.65	6 681.1	500	178.55	4 000	386.8	106.88

500

212.25

表 1 Mathieu q 值、RF 电压、RF 频率和约束能力参数对应表

7 284.4

图 5 显示了在保持约束能力不变(参数见表 1)的情况下,采用 RIP 模型模拟的⁴⁰Ar⁺离子在充 有 He 缓冲气体的 RFQ 中的运动轨迹.可以看出: 在保持约束能力不变的情况下,当 Mathieu q 值比

202.0

34.65

较小时,离子能够被很好的约束和冷却.当q值大于0.86以后,离子开始发散,不能被约束在束流轴线上.q值越大,发散越严重.

370.5

116.56

4 000



Fig.5 Keep the same constrain ability, obtained with the RIP model simulation; trajectories of ⁴Ar⁺ ion in He buffer gas filling in RFQ

图 6 显示了在保持 RF 频率不变(参数见表 1)的情况下,用 RIP 模型模拟得到的⁴⁰Ar⁺离子运 动轨迹.可以看出:Mathieu q 值比较小的时候,离 子能够被很好的约束和冷却.在保持 RF 频率不 变的情况下,随着 Mathieu q 值的增加, RF 电压也 成比例增加,则约束能力 V_{RF2}/f^2 相对 RF 电压成 平方倍增加,束斑被压缩得越来越厉害,但并不意 味着 q 值越大,束斑越小. 当 q 值等于 0.88 的时 候,束流开始发散. 当 Mathieu 参数 q 大于 0.9 之 后,束流完全发散.



图 6 保持 RF 频率不变,用 RIP 模型模拟的⁴⁰Ar⁺离子在充有 He 缓冲气体的 RFQ 中的运动轨迹 Fig. 6 Keep the same RF frequency, obtained with the RIP model simulation: trajectories of ⁴⁰Ar⁺ ion in He buffer gas filling in RFQ

图 7 显示了在保持 RF 电压不变(参数见表 1)的情况下,用 RIP 模型模拟得到的⁴⁰Ar⁺离子运 动的轨迹.同样,Mathieu q 值比较小时,离子都能 够被很好的约束和冷却. q 值等于 0.85 的时候, 束流开始发散. 当 Mathieu 参数 q 大于 0.9 之后, 束流完全发散.







从上述模拟可以看出,在有缓冲气体存在的 情况下,无论如何改变 RF 频率f、RF 电压 V_{RF} 、 V_{RF^2}/f 等参数,当 Mathieu 参数 q 值在略小于 0.908 时,离子的运动即开始发散,当 q 值在大于 0.908 后,离子的运动已经发散的很严重了,束流 根本不能被约束.所以,无论在真空或者充气情况 下,当 Mathieu 参数 q 值大于 0.908 时,离子的运 动都是不稳定的.据此,在为 RFQ 冷却聚束器工 作设定 Mathieu 参数 q 值时,首先要保证 q 值至少 不能大于 0.908,否则 RFQ 冷却聚束器根本不能 冷却和约束离子.

另外,在缓冲气体存在的情况下,当q值略小 于0.908的0.83~0.908范围内,束流的运动已 经开始发散.这是因为此时离子的微运动幅度已 经非常大,微运动叠加在宏运动上,使总运动幅度 加剧.加上气体分子与束流离子发生碰撞,束流离 子的运动非常不稳定,导致束流在q值没有达到 0.908时已经发散.所以,在选择 Mathieu 参数 q 值的时候要避免选择在0.8以上的区域.经过长 时间的模拟和实际调试,认为当q值在0.3~0.5 时约束和冷却离子效果最佳.q值太小,需要更大的 RF 电压幅度才能达到同样的约束效果.q值大大,微运动加剧,离子的运动易趋向不稳定.

4 结 论

Mathieu q 值是 RFQ 冷却聚束器中的一个重要 参数,q 值的选取决定束流在 RFQ 冷却聚束器中能 否被冷却和约束.本文采用国际上最先进的 RIP 模型,在 RFQ 冷却聚束器充有缓冲气体的情况下,调 节各种参数,得出 RFQ 冷却聚束器的 Mathieu 参数 q 值的选取范围.结论是:无论在真空或者充气情 况下,当 Mathieu 参数 q 值大于 0.908 时,离子的运 动都是不稳定的;在充气情况下,Mathieu 参数 q 值 略小于 0.908 时,离子运动已经不稳定.选择 Mathieu 参数 q 值的时候要避免选择在 0.8 以上的 区域.经过多次模拟和实验,得出最佳约束束流的 Mathieu q 值在 0.3~0.5 之间.

参考文献:

- [1] Bollen G, Becker S, Kluge H J, et al. ISOLTRAP: a tandem Penning trap system for accurate on-line mass determination of short-lived isotopes [J]. Nucl. Instr. Meth. A, 1996, 368(3):675-697.
- [2] Sikler G, Ackermann D, Attallah F, et al. First on-line test of SHIPTRAP [J]. Nucl. Instrum. Meth. B, 2003, 204:482-486.
- [3] Kolhinen V S, Eronen T, Hakala J, et al. Penning trap for isobaric mass separation at IGISOL[J]. Nucl. Instrum. Meth. B,2003,204:502-506.
- [4] Schwarz S, Bollen G, Lawton D, et al. The low-energybeam and ion-trap facility at NSCL/MSU[J]. Nucl. Instrum. Meth. B,2003,204:507-511.
- [5] Clark J, Barber R C, Boudreau C, et al. Improvements in the injection system of the Canadian Penning trap mass spec-

trometer[J]. Nucl. Instrum. Meth. B,2003,204:487-491.

- [6] Huang W X,Zhu Z C,Tian Y L,et al. Progress on the RFQ1L and LPT[J]. AIP Conf. Proceedings ,2010,1235:139.
- [7] 黄文学,王玥,朱志超,等. 超重核研究谱仪的 RFQ 冷 却聚束器 RFQ1L[J]. 原子核物理评论,2006,23(4): 383-386.
- [8] Dawson P H. Quadrupole mass spectrometry and its application [R]. New York: Elsevier Scientific Publishing Company, 1976.
- [9] 黄文学, 王玥, 徐瑚珊, 等. RFQ 冷却聚束器研究简介 [J]. 原子核物理评论, 2005, 22(3): 254-260.
- [10] Schwarz S. IonCool—A versatile code to characterize gas-filled ion bunchers and coolers (not only) for nuclear physics applications [J]. Nucl. Instr. Meth. A, 2006,566(2):233-243.
- [11] Schwarz S. Simulations for ion Traps-Buffer gas cooling [C]. Lect. Notes Phys. 2008,749:97-118.
- [12] Mason E A, McDaniel E W. Transport Properties of Ions in Gases[R]. New York: John Wiley & Sons, 1988.
- [13] Lunney M D, Moore R B. Cooling of mass-separated beams using a radiofrequency quadrupole ion guide[J]. Int. J. Mass Spectrom, 1999, 190/191:153-160.
- [14] Ellis H W, McDaniel E W, Albritton D L, et al. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. Part II [J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1978, 22 (3):179-217.
- [15] Ellis H W, Thackston M G, McDaniel E W, et al. Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. Part III [J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1984, 31(1):113-151.
- [16] Zhu Z C, Huang W X, Sun Y L, et al. Energy limitation for models to simulate the buffer gas cooling[J]. Int. J. Mass Spectrom, 2012, 309:44-48.
- [17] 朱志超. RFQ 冷却聚束器 RFQ1L 的缓冲气体冷却和 束流传输[D]. 北京:中国科学院研究生院,2011.