

# 铷离子-铷原子混合阱飞行时间谱的 拟合和仿真模拟\*

梁玮宸<sup>1)</sup> 王昱寒<sup>1)</sup> 张熙<sup>1)</sup> 王飞<sup>2)</sup> 贾凤东<sup>1)</sup> 薛平<sup>2)†</sup> 钟志萍<sup>1)‡</sup>

1) (中国科学院大学物理科学学院, 北京 100049)

2) (清华大学物理系, 低维量子物理国家重点实验室, 北京 100084)

(2022 年 11 月 29 日收到; 2023 年 2 月 3 日收到修改稿)

离子-原子混合阱是研究带电粒子-中性粒子低温反应的理想平台, 直接甄别反应产物最准确的方法是带电粒子飞行时间谱, 飞行时间谱峰的强度、位置 (飞行时间) 和宽度给出了相应带电粒子的强度和动能 (温度) 等信息. 本文通过分析和模拟铷离子-原子混合阱中的飞行时间谱, 获得了不同荷质比的离子绝对强度和温度等信息. 具体说, 首先使用 Gumbel 型极值分布函数飞行时间谱的谱峰, 获得谱峰强度、位置和宽度等信息. 然后对实验建模得到耦合的原子数和总带点离子的速率方程, 用这些速率方程拟合实验数据, 并结合实验测量到的绝对原子数, 获得绝对的离子数强度. 由此提供了一种标定探测器 (本文使用的是微通道板) 的方法. 改变电离激光的波长和强度得到的标定因子是一致的, 表明了这种方法的可靠性. 此外, 利用 COMSOL Multiphysics 模拟实验的飞行时间谱, 仿真模拟结果表明离子动能大, 谱峰宽度窄. 本文对飞行时间谱的强度和宽度分析为冷原子光电离过程的离子-原子反应碰撞和带电粒子温度弛豫奠定了基础.

**关键词:** 离子-原子混合阱, 离子-原子低温化学, 飞行时间质谱, 微通道板的标定因子

**PACS:** 34.50.Lf, 33.15.Ta, 34.50.Cx, 34.80.Dp

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222273

## 1 引言

原子的光电离是辐射与物质相互作用中最基本的过程之一, 在不同的研究领域发挥着重要作用. 特别是激发态的光电离, 在恒星大气、受控热核研究等离子体、辐射防护、激光设计和辐射复合中有许多应用. 光电离激光冷却的原子, 由于电子与离子质量差异巨大, 能量守恒和动量守恒决定了剩余能量, 即激发光的能量与电离阈值的差值, 绝大部分转化为电子初始动能, 而初始离子动能近乎为激光冷却的原子的动能, 约 mK 量级, 这是超冷

离子. 光电离过程产生的电子-离子-原子混合物, 考虑到碰撞截面和磁光阱的原子云的尺寸, 一般无需考虑电子-原子碰撞<sup>[1]</sup>, 以往人们主要研究电子-离子碰撞<sup>[2]</sup>, 但是离子-原子碰撞截面并不小, 应该考虑. 离子-原子混合阱集成了激光冷却和俘获原子技术以及离子囚禁技术, 可以同时囚禁原子和离子. 空间囚禁起来的原子和离子具有空间定域、可长时间存储以及和环境分离的特性. 这些特性可以提高离子-原子长相互作用时间, 是探测和调控带电粒子-中性粒子之间的碰撞反应的理想平台<sup>[3,4]</sup>. 但目前混合阱中离子-原子反应碰撞的 11 个实验研究中<sup>[5-15]</sup>, 还没有冷原子光电离过程离子-原子

\* 北京市自然科学基金 (批准号: 1212014)、中央高校基本科研业务费专项资金、中国科学院重点研究计划 (批准号 XDPB08-3)、中国科学院近地空间环境重点实验室开放课题 (批准号: GE2020-01)、国家重点研发计划 (批准号: 2017YFA0304900, 2017YFA0402300) 和国家自然科学基金 (批准号: 61975091, 61575108) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xuep@tsinghua.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zpzhang@ucas.ac.cn

反应碰撞研究.

本文在铷离子-铷原子混合阱中, 用连续光电离冷原子, 利用飞行时间谱研究冷铷原子光电离过程的离子-原子反应碰撞. 测量的典型飞行时间谱如图 1 所示, 可以明显看出一个强而窄的谱峰和一个弱而宽的谱峰, 这两个谱峰分别代表铷原子离子和离子-原子反应碰撞产物铷分子离子. 原子离子谱峰和分子离子谱峰有重叠, 而且谱型是非对称的, 需要解谱获得各谱峰强度、位置和宽度等信息. 谱峰宽度不仅是由于带电粒子有速度分布, 也与质谱仪的几何结构有关. 谱峰不对称源于离子速度是不对称的麦克斯韦分布. 本文将对飞行时间谱进行分析和模拟, 以获得反应产物的强度和温度信息, 由此深入认识和理解分子碰撞和化学反应机理, 有助于促进对低温下化学反应的研究.

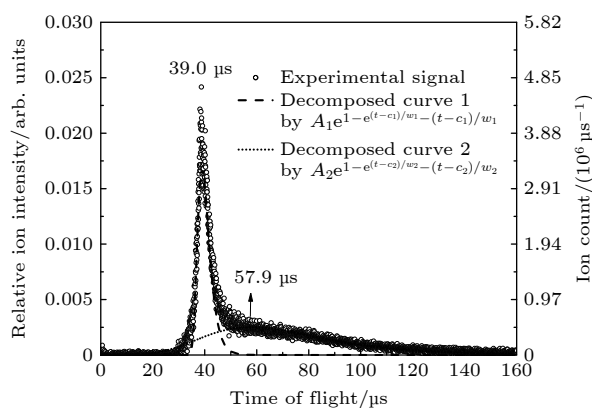


图 1 典型飞行时间谱及其拟合曲线. 空心圆点代表实验获得的离子飞行时间谱. 虚线、点划线分别表示对离子飞行时间谱主峰、伴峰的拟合. 左 Y 轴代表微通道板 (MCP) 测量得到的离子信号强度, 右 Y 轴代表对 MCP 标定以后, 左 Y 轴的同一点对应的每时刻离子计数, 标定因子为  $C_{MCP} = 1.94 \times 10^{14}$ . 图中时间零点对应关闭离子阱、引导离子进入 MCP 的时刻

Fig. 1. Typical time-of-flight (TOF) spectra and the fitted curve. Hollow circle stands for the ion signal measured experimentally. Dashed line and dotted line are the fitted curve of first peak and second peak, respectively. Left Y-axis represents the ion signal measured by multichannel plate (MCP). Right Y-axis corresponds the calibrated ion count by the calibration factor  $C_{MCP} = 1.94 \times 10^{14}$ . The time zero is set to the moment when the ion trap was switched off and ions were guided to the MCP.

## 2 实验和仿真的方法

### 2.1 实验装置和实验方法

本文使用的离子-原子混合阱实验装置的详细描述可以参见文献 [16]. 简单来说, 离子-原子混合

阱包括一个标准的铷原子磁光阱 (MOT) 和一个离子阱, 磁光阱和离子阱的几何中心重合, 安装在多面体扁平金属腔体中. MOT 用于冷却和囚禁铷原子. 离子阱是线性保罗阱 (LPT), 对离子囚禁的实现采用射频场和静电场结合的方式, 利用高频交变电场对电荷的作用力让带电离子在发散和束缚两种运动状态间进行快速切换, 以达到囚禁离子的目的 [16]. 光电离冷原子具体实现如下: 采用两步激发共振光电离技术, 两步光均为连续光. 第一步光将原子从基态激发到中间态  $5P_{3/2}$ ,  $F = 3$ , 光源就是冷却光. 第二步光称为电离光, 将中间态原子电离, 由另一台半导体激光器提供. 本实验采用微通道板 (microchannel plate, MCP) 测量离子飞行时间质谱. 离子飞行时间质谱的获取流程如下: 关闭离子阱中靠近微通道板端电极上的电压, 使得离子阱内产生电势差, 推动带电粒子向探测器运动, 同时保持离子阱中射频电极杆持续工作, 保证离子不会径向扩散. 带电粒子经过飞行到达微通道板上, 经过电子倍增效应放大产生电信号, 电信号被示波器收集, 示波器上显示电信号随时间的变化. 不同荷质比的离子, 在飞行时间质谱中呈现出飞行时间分立的不同的谱峰, 通过离子飞行时间质谱信号中不同信号峰的飞行时间, 就可以区分不同的离子. 采集飞行时间谱信号的示波器分辨率为 40 ns.

MOT 中的冷原子数和冷原子云的尺寸用吸收成像法测量 [17], 得到冷原子数和冷原子云的  $1/e^2$  半径分别约为  $5 \times 10^7$ , 0.5 mm. 冷原子的温度用飞行时间法测量 [18], 得到  $T_{\text{atom}} \approx 0.2$  mK. 离子阱中的离子云是椭球形, 沿离子阱径向的  $x, y$  方向半径和沿轴向的  $z$  方向半径分别为 2.3, 2.3 和 20.2 mm [16,19]. 离子阱的阱深约为 0.7 eV, 对应囚禁离子的最高温度约为  $10^4$  K. 根据动量守恒和能量守恒, 光电离产生的  $\text{Rb}^+$  的初始动能大约比冷原子的动能大两个数量级, 即约 20 mK, 因此最小碰撞能量约为 10 mK—K 量级.

实验流程如下: 开始时, MOT 首先装载冷原子至稳定, 然后保持 MOT 开启, 同时打开电离光和离子阱, 从而产生和囚禁带电粒子. 持续光电离冷原子一段时间后, 同时关闭 MOT、电离光和离子阱, 测量原子吸收成像和带电粒子飞行时间谱. 每个实验周期中改变电离光照射到原子云的时间, 就可以得到原子与带电粒子的数量、温度等信息随光电离持续时间的变化.

实验中的误差来源如下: 冷原子的温度和数量波动产生 10%—15% 的系统误差; 数据处理过程中, 反卷积程序会产生统计误差; 电离光强度存在不确定性, 产生 1%—5% 的系统误差; 以及由于电离光存在约 1 MHz 线宽带来的不确定性.

## 2.2 飞行时间谱模拟和计算仿真

利用可以考虑多物理场耦合求解的有限元分析软件可以仿真飞行时间谱. 仿真的一般流程是: 首先针对求解的问题选择合适的物理场模块, 其次建构几何模型设置模型参数, 然后设置物理场的边界条件和初始条件, 进行网格剖分, 最后进行计算求解.

本文采用 COMSOL Multiphysics 仿真离子阱功能, 利用其带电粒子追踪模块模拟得到飞行时间谱. COMSOL Multiphysics 是一款具有高级数值仿真功能的有限元分析软件, 以多物理场耦合求解、计算性能高以及可实现高精度数值仿真等优势著称. 同时, COMSOL 内嵌丰富的 CAD 建模工具, 可以很方便地绘制模型, 减少建模时间; 建模过程中可以根据需要选择对应材料, 使得仿真模拟更加接近于实际情况.

我们在 COMSOL Multiphysics 软件中构建了与本文使用的离子-原子混合阱相符的离子阱模型. 所有的电极尺寸都与实验装置中的相同. 射频和直流电压的参数也和实验条件一样, 即射频频率为 550 kHz, 幅度 140 V, 两个端盖电极所加的电压为 90 V 直流电压. 因为离子是光电离 MOT 的冷原子产生, 而冷原子云是半径约为 0.5 mm 的球, 因此, 在 COMSOL 仿真软件中, 离子产生于模型的几何中心, 半径为 0.5 mm 的小球. 这个小球内随机位置释放出离子, 释放的初始速度分布 (温度) 和释放的时间均可以设置. 飞行时间谱的模拟如下: 设置在一个端电极之后, 离子的加速区和自由漂移区长度均为 50 mm, 离子探测器的半径为 24 mm, 与实验条件一致.

## 3 结果与讨论

### 3.1 混合阱飞行时间谱的分析

图 1 给出了混合阱连续光电离实验获得的一个典型的飞行时间谱. 可以看到, 实验测量的飞行时间谱、原子离子和反应产物分子离子谱峰是重叠

的, 且谱峰非对称, 需要解谱获得各自的强度和半宽度等信息. 这两个谱峰是荷质比不同的带电粒子造成的, 根据本文的实验条件, 只能是铷原子离子  $^{87}\text{Rb}^+$  和铷分子离子  $^{87}\text{Rb}_2^+$ . 峰位靠前的谱峰对应铷原子离子  $^{87}\text{Rb}^+$ , 峰位靠后的谱峰对应铷分子离子  $^{87}\text{Rb}_2^+$ , 因为铷分子离子的质量更大. 注意到, 典型飞行时间谱的谱峰非对称, 谱峰不对称的原因是热平衡时离子速度分布是非对称的麦克斯韦分布, 而飞行时间是飞行距离除以速度, 因此离子速度麦克斯韦分布的非对称性造成飞行时间谱峰的非对称. 从图 1 可以看到, 两个谱峰存在叠加, 不能完全分离, 这与飞行时间谱装置的几何条件有关. 为了得到谱峰位置、宽度和强度信息, 需要对谱峰进行拟合解谱. 本文采用 Gumbel 型极值分布函数来拟合飞行时间谱. 极值分布函数描述的是根据概率论中极值的概率分布, 从多个彼此独立的值中获得的各个极大值应当服从的概率密度分布函数, 它的谱形是非对称的, 应该可以描述本文的飞行时间谱. 它的表达形式为<sup>[20]</sup>

$$f(t) = Ae^{1-e^{(t-c)/w}-(t-c)/w}, \quad (1)$$

其中,  $c$  代表谱峰位置;  $A, w$  分别是与谱峰幅度、宽度相关的参量. 具体来说,

$$\text{谱峰强度 (面积)} = Aw(e - e^{1-c/w}), \quad (2)$$

$$\text{谱峰半高全宽 (FWHM)} = w \ln \frac{3 + \sqrt{5}}{3 - \sqrt{5}}. \quad (3)$$

图 1 给出了使用极值分布函数对飞行时间谱谱峰的拟合. 拟合效果很好. 这样就得到了原子离子和分子离子谱峰强度和半宽度的信息. 下面介绍如何得到带电粒子的绝对强度, 以及通过仿真得到谱峰半宽度与带电粒子动能的关系.

### 3.2 连续光电离过程中总离子数的演化和 MCP 的标定

实验中采用微通道板测量离子信号, 得到飞行时间谱. 一般微通道板没有给出标定因子, 测量只得到带电粒子的相对强度. 这里提供一种获得微通道板标定因子, 得到绝对离子数的方法. 通过对实验建模, 给出耦合的总带电粒子的速率方程如下:

$$\frac{dN_{\text{total}}}{dt} = \gamma_{\text{PI}} N_{\text{atom}} - \Gamma_{\text{trap,eff}} N_{\text{total}}, \quad (4)$$

其中,



$$N_{\text{total}} = C_{\text{MCP}} \times N_{\text{total}}^{\text{MCP}}. \quad (5)$$

方程 (4) 右边第一项为总带电离子的增益项, 来自原子的光电离,  $\gamma_{\text{PI}}$  为电离速率,  $N_{\text{atom}}$  表示冷原子数. 总带电粒子的消耗项正比于总粒子数  $N_{\text{total}}$ , 比例系数为阱中有效的损失速率  $\Gamma_{\text{trap,eff}}$ .  $\Gamma_{\text{trap,eff}}$  包含了两个部分: 离子阱的有限囚禁寿命导致的离子损失和离子-电子复合消耗的离子, 这里将  $\Gamma_{\text{trap,eff}}$  近似考虑为一个常数, 从而简化求解过程. 方程 (5) 引入微通道板的标定因子  $C_{\text{MCP}}$ , 将实验测量到的相对离子强度  $N_{\text{total}}^{\text{MCP}}$  与绝对离子数  $N_{\text{total}}$  联系起来.

冷原子数  $N_{\text{atom}}$  通过吸收成像方法绝对测量得到. 混合阱中光电离过程的原子数随时间的变化满足下列关系 [21]:

$$\frac{dN_{\text{atom}}}{dt} = L - \gamma_x N_{\text{atom}}, \quad (6)$$

该方程的解析表达式为

$$N_{\text{atom}}(t) = \left(N_0 - \frac{L}{\gamma_x}\right)e^{-\gamma_x t} + \frac{L}{\gamma_x}, \quad (7)$$

其中,  $N_0$  为初始时刻 (电离光开启时间) 的原子数,  $L$  为磁光阱开启时从环境中装载冷原子的速率,  $\gamma_x = \gamma_L + \gamma_{\text{PI}} + \gamma_{\text{ia}}$  代表冷原子的总损失速率, 其中  $\gamma_L$ ,  $\gamma_{\text{PI}}$  和  $\gamma_{\text{ia}}$  分别代表原子-原子碰撞过程中的冷原子损失速率、光电离造成的原子数损失速率和离子-原子碰撞导致的原子数损失速率. 方程 (7) 可以很好地拟合光电离过程混合阱中原子数的变化, 如图 2 所示, 由此可以得到  $\gamma_x$ .

由方程 (4)、方程 (5) 和方程 (7) 可以解析得到实验测量的总离子数的解析表达式为

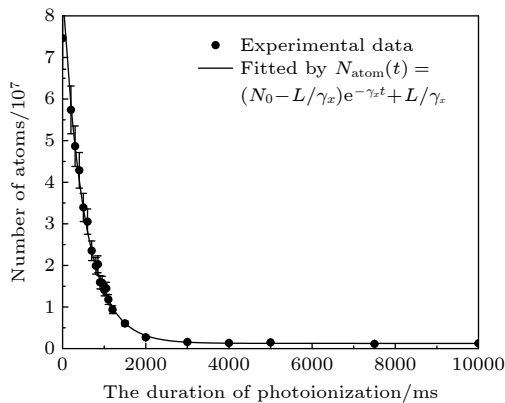


图 2 连续光电离过程中冷原子数随光电离持续时间的变化及拟合曲线

Fig. 2. Number of remaining atoms as a function of the duration of cw-laser photoionization and the fitted curve.

$$N_{\text{total}}^{\text{MCP}} = \frac{\gamma_{\text{PI}}(e^{-\gamma_x t} - e^{-\Gamma_{\text{trap,eff}} t})}{(\Gamma_{\text{trap,eff}} - \gamma_x)C_{\text{MCP}}} \left(N_0 - \frac{L}{\gamma_x}\right) + \frac{\gamma_{\text{PI}}L(1 - e^{-\Gamma_{\text{trap,eff}} t})}{\gamma_x \Gamma_{\text{trap,eff}} C_{\text{MCP}}}, \quad (8)$$

这个解析表达式只有两个待定的参数: 微通道板的标定因子  $C_{\text{MCP}}$  和阱中平均损失速率  $\Gamma_{\text{trap,eff}}$ . 它们可以通过拟合实验数据得到. 图 3 为混合阱中冷原子光电离过程中总离子数随着电离光作用时间的变化, 以及根据 (8) 式得到的拟合曲线, 右边 Y 轴给出了绝对离子数. 这个实验测量的条件是电离光波长为 478.8 nm,  $\gamma_x = (1.90 \pm 0.05) \text{ s}^{-1}$ . (8) 式中其他参数的值为  $N_0 = 8.52 \times 10^7$ ,  $\gamma_{\text{PI}} = 1.73 \text{ s}^{-1}$ ,  $L = 2356.0/\text{ms}$ . 为了检验这种标定方法的可靠性, 改变电离光波长和光强, 按照前序方法得到的微通道板的标定因子  $C_{\text{MCP}}$  见图 4. 显然, 在实验误差范围内, 微通道板的标定因子  $C_{\text{MCP}}$  保持不变. 注意到, 在光电离时间比较短 (0—500 ms 范围内) 时, 拟合曲线与实验值有较大偏离. 这是因为光电离时间比较短时, 冷原子密度基本不变, 但总离子数剧烈变化, 因此离子-电子复合变化也十分剧烈, 此时的离子损失速率  $\Gamma_{\text{trap,eff}}$  与时间较长时差异较大.

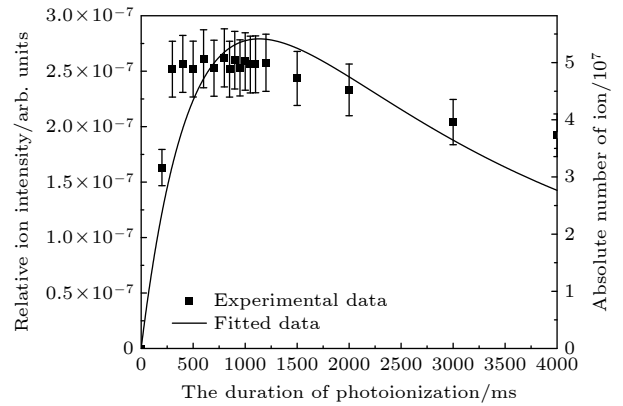


图 3 实验测量的总离子数随光电离作用时间的变化及拟合曲线. 左 Y 轴对应实验测量得到的总离子相对强度, 右 Y 轴是对 MCP 标定以后, 左 Y 轴的同一点对应的绝对总离子数, 标定因子为  $C_{\text{MCP}} = 1.94 \times 10^{14}$

Fig. 3. Measured total number of ions as a function of the duration of photoionization and the fitted curve. Left Y-axis represents the relative ion intensity measured in experiments. Right Y-axis corresponds to the calibrated absolute number of ions by the calibration factor of  $C_{\text{MCP}} = 1.94 \times 10^{14}$ .

### 3.3 离子阱飞行时间谱的仿真

使用 COMSOL Multiphysics 仿真软件建立离子阱模型, 模拟囚禁原子离子和分子离子, 然后

得到仿真的飞行时间谱. 带电粒子的初始温度设置为 20 mK, 这是因为如前所述, 光电离冷原子产生的离子初始温度与冷原子近乎一致, 而离子阱的离子云远大于磁光阱原子云, 并且离子阱的离子温度可达几千 K 到上万 K, 因此不必考虑离子阱的离子与磁光阱的原子产生反应碰撞. 但是脉冲光电离冷原子产生超冷等离子体实验表明, 电子离子空间关联导致的无序诱导加热离子, 使得离子温度在 1  $\mu$ s 上升到 K<sup>[2]</sup>, 随后扩散过程温度会下降. 这里是连续光电离, 没有产生等离子体, 电子-离子关联没有建立, 无序诱导加热效应比较小. 对于脉冲电离产生的超冷等离子体, 由于电子压力导致离子扩散, 扩散过程离子温度会绝热下降, 超冷等离子体的寿命为 100  $\mu$ s<sup>[2]</sup>. 这里连续光电离时电离光照射冷原子, 使得时间远大于 100  $\mu$ s, 选择介于初始离子温度与无序诱导加热离子温度的一个中间值. 除此之外, 在仿真模型中只考虑了离子阱有限囚禁能力带来的离子数损失, 假定原子离子和分子离子在离子阱中的寿命相同. 其合理性是关闭电离光后, 实验上测量到的总粒子数的衰减可以用单指数衰减函数拟合<sup>[22]</sup>, 没有考虑分子离子解离过程对原子离子、分子离子数的影响. 飞行时间谱的模拟如下: 让原子离子和分子离子在离子阱中自由演化 500 ms. 然后, 将靠近微通道板的端电压关闭, 引导离子飞向探测器 (微通道板), 获得仿真的飞行时间谱.

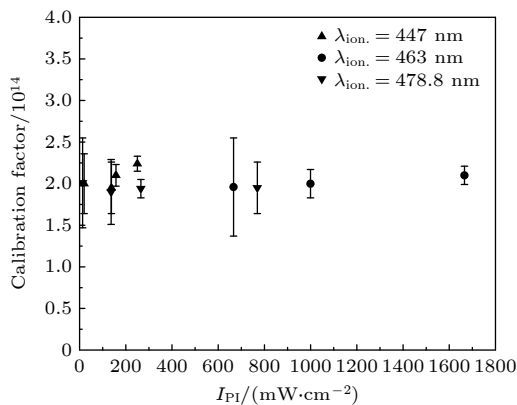


图 4 拟合得到微通道板的标定因子与电离光强度关系. 电离光波长分别为 447, 463 和 478.8 nm

Fig. 4. Fitted calibration factor for our microchannel plate (MCP) detector as the function of the intensity of ionizing laser. The wavelength of the ionizing laser are 447, 463 and 478.8 nm, respectively.

计算中, 鉴于计算能力的限制, COMSOL 粒子追踪模块能够模拟的最多离子数约为  $10^5$  个 (离

子阱装载的离子数达到  $10^7$  个, 见 3.2 节). 因此, 为了检验仿真的有效性, 分别在离子阱模型中添加 10000, 20000, 50000, 100000 个铷原子离子和相同数量的铷分子离子, 获得仿真的飞行时间谱, 结果如图 5 所示, 使用 10000—100000 个原子离子和分子离子得到的飞行时间谱差异很小. 这一结果表明, 随着模型中添加的离子数增多, 仿真结果已经基本收敛. 考虑到仿真模型中可模拟的最大带电粒子数仍明显小于离子阱实际装载的离子数, 我们选择  $10^5$  个铷原子离子和  $10^5$  个铷分子离子进行模拟. 图 6 给出了仿真的飞行时间谱和实验谱的比较. 注意实验谱带电粒子在阱中囚禁时间和仿真谱一样, 均为 500 ms. 从结果来看, 仿真谱很好地模拟了实验, 仿真得到谱峰的谱型也是非对称的, 与实验一致. 仿真模拟得到囚禁 500 ms 以后, 原子离子的温度约为 1100 K, 分子离子约为 600 K, 均显著高于初始温度, 并且原子离子的温度高于分子离子. 离子的温度高于初始温度是由于离子阱中, 高频射频电场的快速振荡会引起离子的快速微运动, 由于存在离子间的库仑排斥势等因素, 导致微运动与宏运动相互耦合, 将射频能量传递到宏运动中, 从而加热离子<sup>[23]</sup>, 离子被加热以后仍可以囚禁 (离子阱的阱深 0.7 eV, 对应囚禁离子的最高温度约  $10^4$  K). 而对原子离子的温度高于分子离子的解释是: 原子离子和分子离子电荷相等时, 它们受到的射频加热效应是一样的. 当共同囚禁时, 分子离子与原子离子相互耦合, 根据动量和能量守恒, 质量小的原子离子动能大, 温度会高于质量大的分子离子.

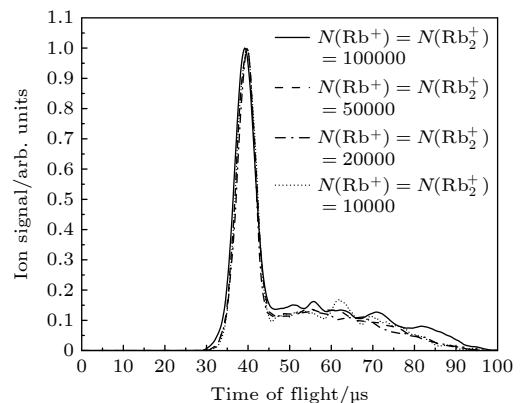


图 5 使用 COMSOL Multiphysics 分别仿真离子阱囚禁 10000, 20000, 50000, 100000 个原子离子和分子离子时得到的飞行时间谱

Fig. 5. Time-of-flight spectra of 10000, 20000, 50000 and 100000  $\text{Rb}^+$  and  $\text{Rb}_2^+$  simulated by COMSOL Multiphysics.

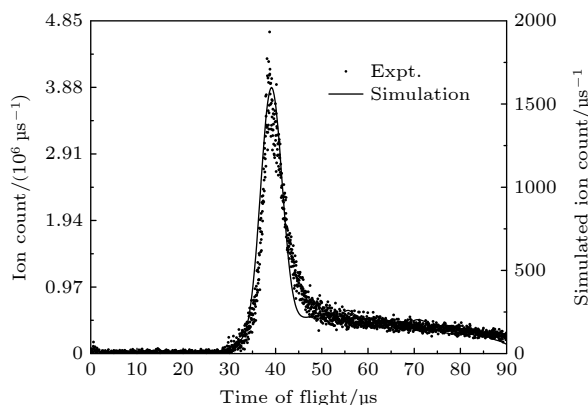


图6 实验测量的飞行时间谱及COMSOL Multiphysics仿真的飞行时间谱的比较. 实验谱在铷离子-铷原子混合阱的光电离过程测量得到, 电离光波长为478.8 nm, 强度为265.3 mW/cm<sup>2</sup>, 电离光作用在冷原子云的持续时间为500 ms. 仿真计算中, 考虑了10<sup>5</sup>个铷原子离子和10<sup>5</sup>个铷分子离子, 带电粒子的初始温度的设置为20 mK

Fig. 6. Comparison between experimental and simulated TOF spectra by COMSOL Multiphysics. Experimental TOF spectra were measured in the photoionization process of our ion-atom hybrid trap. The wavelength and the intensity of the ionizing laser were 478.8 nm and 265.3 mW/cm<sup>2</sup>, respectively. The duration of photoionization was 500 ms. In the simulation, 10<sup>5</sup> Rb<sup>+</sup> and 10<sup>5</sup> Rb<sub>2</sub><sup>+</sup> were added with an initial temperature of 20 mK.

## 4 结 论

本文研究混合阱中冷原子光电离过程的飞行时间谱, 对其的分析和仿真可获得离子-原子反应碰撞反应产物的绝对强度和温度信息. 飞行时间谱中有两个非对称的谱峰, 且两个谱峰有重叠. 我们采用Gumbel型极值分布函数拟合谱峰, 很好地拟合了实验谱(见图1), 由此获得了铷原子离子和离子-原子反应产物分子离子的强度、峰位置和半高宽信息. 接下来, 通过对实验建模, 给出总带电粒子的速率方程, 由此提供了一种获得微通道板标定因子, 得到绝对离子数的方法. 改变电离光的波长和强度得到的标定因子是一致的, 表明了这种方法的可靠性. 接下来, 利用COMSOL Multiphysics软件仿真了实验的飞行时间谱, 在不同的离子动能下得到仿真飞行时间谱(见图6), 表明了飞行时间谱峰半宽度反比于粒子的温度. 本文对飞行时间谱的分析和模拟促进了离子-原子混合阱中对带电和中

性物质之间低温反应的研究, 为精确测量反应速率系数、理解带电粒子和中性粒子的温度弛豫过程等奠定了基础.

## 参考文献

- [1] Killian T C, Kulin S, Bergeson S D, Orozco L A, Orzel C, Rolston S L 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4776
- [2] Killian T, Pattard T, Pohl T 2007 *Phys. Rep.* **449** 77
- [3] Tomza M, Jachymski K, Gerritsma R, Negretti A, Calarco T, Idziaszek Z, Julienne P S 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 035001
- [4] Zhang D D, Tong X 2020 *Physics* **49** 241 (in Chinese) [张栋栋, 童昕 2020 物理 **49** 241]
- [5] Dieterle T, Berngruber M, Hölzl C, Löw R, Jachymski K, Pfau T, Meinert F 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 033401
- [6] Rellergert W G, Sullivan S T, Kotochigova S, Petrov A, Chen K, Schowalter S J, Hudson E R 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 243201
- [7] Hall F H J, Aymar M, Bouloufa-Maafa N, Dulieu O, Willitsch S 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 243202
- [8] Hall F H J, Eberle P, Hegi G, Raoult M, Aymar M, Dulieu O, Willitsch S 2013 *Mol. Phys.* **111** 2020
- [9] Hall F H, Aymar M, Raoult M, Dulieu O, Willitsch S 2013 *Mol. Phys.* **111** 1683
- [10] Sullivan S T, Rellergert W G, Kotochigova S, Hudson E R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 223002
- [11] Härter A, Krürow A, Brunner A, Schnitzler W, Schmid S, Denschlag J H 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 123201
- [12] Krürow A, Mohammadi A, Härter A, Denschlag J H, Pérez-Ríos J, Greene C H 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 193201
- [13] Krürow A, Mohammadi A, Härter A, Hecker Denschlag J 2016 *Phys. Rev. A* **94** 030701
- [14] Dieterle T, Berngruber M, Hölzl C, Löw R, Jachymski K, Pfau T, Meinert F 2020 *Phys. Rev. A* **102** 041301
- [15] Mohammadi A, Krürow A, Mahdian A, Deiß M, Pérez-Ríos J, da Silva H, Raoult M, Dulieu O, Hecker Denschlag J 2021 *Phys. Rev. Research* **3** 013196
- [16] Lv S F, Jia F D, Liu J Y, Xu X Y, Xue P, Zhong Z P 2017 *Chin. Phys. Lett.* **34** 013401
- [17] Sesko D W, Walker T G, Wieman C E 1991 *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 946
- [18] Paul W 1990 *Rev. Mod. Phys.* **62** 531
- [19] Li X K, Zhang D C, Lv S F, Liu J Y, Jia F D, Wu Y, Lin X H, Li R, Xu X Y, Xue P, Liu X J, Zhong Z P 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 219501
- [20] Haan L D, Ferreira A 2006 *Extreme Value Theory: an Introduction* (New York; London: Springer) pp6–10
- [21] Lee S, Ravi K, Rangwala S A 2013 *Phys. Rev. A* **87** 052701
- [22] Liang W C, Jia F D, Wang F, Zhang X, Zhou J Y, Wang Y H, Qian J Y, Wang J G, Wu Y, Xue P, Zhong Z P 2022 *arXiv: 2303.10360 [physics.atom-ph]*
- [23] Du L J 2014 *Ph.D. Dissertation* (Wuhan: Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [杜丽军 2014 博士学位论文 (武汉: 中国科学院武汉物理与数学研究所)]

# Analysis and simulation of time-of-flight spectrum in $\text{Rb}^+\text{-Rb}$ hybrid trap<sup>\*</sup>

Liang Wei-Chen<sup>1)</sup> Wang Yu-Han<sup>1)</sup> Zhang Xi<sup>1)</sup> Wang Fei<sup>2)</sup>

Jia Feng-Dong<sup>1)</sup> Xue Ping<sup>2)†</sup> Zhong Zhi-Ping<sup>1)‡</sup>

1) (*School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

2) (*State Key Laboratory of Low-dimensional Quantum Physics, Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

( Received 29 November 2022; revised manuscript received 3 February 2023 )

## Abstract

The time-of-flight mass spectrum of charged particles, which are created through two-step cw-laser photoionization of laser-cooled  $^{87}\text{Rb}$  atoms in an ion-neutral hybrid trap, is quantitatively investigated to further facilitate the study of  $\text{Rb}^+\text{-Rb}$  reactive collisions. A microchannel plate (MCP) is used to detect charged particles, and two spectral peaks corresponding to the  $^{87}\text{Rb}^+$  ions and the product  $^{87}\text{Rb}_2^+$  of the  $\text{Rb}^+\text{-Rb}$  reaction were observed in the time-of-flight spectrum, respectively. The two peaks overlapped with each other and both showed an asymmetric profile. The information about the intensity, position, and half-width of the peak for a specific ion species was derived by fitting the time-of-flight spectrum with the probability density function of the Gumbel distribution. Then the relative ion intensity was converted into absolute ion number through the following steps. The rate equation of the total number of ions, which includes the number of atoms, the calibration factor of MCP, and the effective decay rate of ions in the ion trap, was established by modeling the photoionization of atoms. Combined with the absolute number of atoms measured by absorption imaging, the calibration factor in converting the ion intensity into the ion number was derived and the relative ion intensity was converted into the absolute number of ions. This provides a method of calibrating the MCP. The reliability of our calibration method was proved by the fact that the calibration factor in converting the intensity measured by MCP into particle number is independent of the duration of photoionization, the intensity and wavelength of the ionizing laser. Moreover, in order to explain the relationship between the peak width and temperature of the corresponding ion species, the time-of-flight spectra of the ions trapped in the ion trap were simulated by using COMSOL Multiphysics. The simulation results demonstrated that the large ion kinetic energy results in a narrow spectral peak. In sum, we quantitatively analyze and simulate the time-of-flight spectrum of the photoionization of cold atoms in the  $\text{Rb}^+\text{-Rb}$  hybrid trap. The absolute number of ions is obtained by the intensity of the spectral peak, and the width of the spectral peak is related to the temperature of the ions. These results lay a foundation for the in-depth analysis of the ion-atom reaction collision and charged particle temperature relaxation in the photoionization of cold atoms, and thus further elucidating the subsequent collisional dynamics of ultracold plasmas.

**Keywords:** ion-atom hybrid trap, low energy ion-atom reaction, time-of-flight spectrum, calibration factor

**PACS:** 34.50.Lf, 33.15.Ta, 34.50.Cx, 34.80.Dp

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222273

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. 1212014), the Fundamental Research Fund for the Central Universities, the Key Research Program of the Chinese Academy of Sciences, China (Grant No. XDPB08-3), the Specialized Research Fund for CAS Key Laboratory of Geospace Environment, China (Grant No. GE2020-01), the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2017YFA0304900, 2017YFA0402300), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61975091, 61575108).

† Corresponding author. E-mail: [xuep@tsinghua.edu.cn](mailto:xuep@tsinghua.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [zpzhang@ucas.ac.cn](mailto:zpzhang@ucas.ac.cn)

## 铷离子-铷原子混合阱飞行时间谱的拟合和仿真模拟

梁玮宸 王昱寒 张熙 王飞 贾凤东 薛平 钟志萍

### Analysis and simulation of time-of-flight spectrum in $\text{Rb}^+$ -Rb hybrid trap

Liang Wei-Chen Wang Yu-Han Zhang Xi Wang Fei Jia Feng-Dong Xue Ping Zhong Zhi-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 093401 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222273

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222273>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 多气隙电阻板室飞行时间谱仪技术

Time of flight technology based on multi-gap resistive plate chamber

物理学报. 2019, 68(10): 102901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182192>

#### 利用速度成像技术研究碘乙烷多光子电离解离动力学

Multiphoton ionization dissociation dynamics of iodoethane studied with velocity map imaging technique

物理学报. 2018, 67(20): 203301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181468>

#### 铷原子簇自发磁矩的实验观测及理论分析

Experimental observation and theoretical analysis of spontaneous magnetic moment of Rb atom clusters

物理学报. 2021, 70(12): 122101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210031>

#### 电子束离子阱光谱标定和 $\text{Ar}^{13+}$ 离子M1跃迁波长精密测量

Spectral calibration for electron beam ion trap and precision measurement of M1 transition wavelength in  $\text{Ar}^{13+}$

物理学报. 2022, 71(3): 033201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211663>

#### 量子计算与量子模拟中离子阱结构研究进展

Advances in the study of ion trap structures in quantum computation and simulation

物理学报. 2022, 71(13): 133701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220224>

#### 激光诱导铝等离子体中原子和离子组分膨胀特性

Expansion characteristics of atom and ion component in laser-induced aluminum plasma

物理学报. 2018, 67(18): 185201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180595>