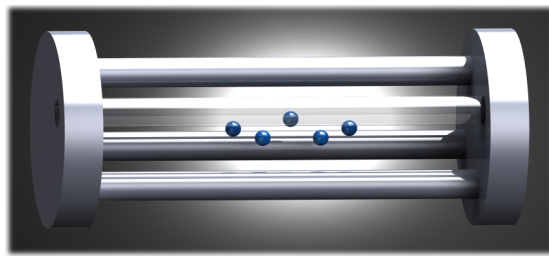


Universität Mainz  
Institut für Physik

---

**Diplomarbeit**

# **Experimentelle und theoretische Untersuchung von Zickzack-Ionenkristallen**



vorgelegt von

**Henning Kaufmann**

zur Erlangung des akademischen Grades

**Diplom-Physiker**

11. April 2012

Erstprüfer: Prof. Dr. Ferdinand Schmidt-Kaler

Zweitprüfer: Prof. Dr. Werner Heil



# Abstract

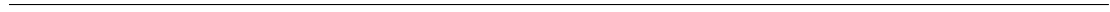
Planar zigzag ion crystals represent a simple controllable system and are highly suitable for many investigations of effects in the area of condensed matter physics and also for applications in quantum simulations, for example as high capacity quantum storages. In this work many properties of zigzag crystals, which originate from linear ion configurations, are investigated. Three different ion traps and various experimental techniques were used for the measurements of the  $^{40}\text{Ca}^+$ -ion crystals. Theoretical predictions were verified with high precision (up to  $4 \cdot 10^{-5}$ ), thus the corresponding characteristics of zigzag ion crystals are thoroughly understood.

Specifically the equilibrium positions of the ions in planar crystals were determined with high precision using a CCD-camera, self-written analysis routines and averaging over up to 150 camera images. This results in a minimal mean deviation from the calculated positions of 49 nm which is only 2/100 of one camera pixel. None of the 5- to 17-ion crystals showed significant discrepancy from theory.

Furthermore contributions to the comprehension of zigzag transition dynamics were accomplished. Four relevant anisotropy parameters were studied in detail and verified experimentally using both a three ion and a four ion zigzag crystal. The ion position determination of the 17-ion crystal constitutes a successful measurement in the anisotropy regime beyond the highest of these parameters.

The vibrational modes of zigzag ion crystals were also examined intensively. Calculated mode spectra of the crystals show, that all four anisotropy parameters can be identified in the spectra. For the first time, the models of non-trivial zigzag eigenmodes were experimentally verified in ion crystals using sideband spectroscopy.

This comprehensive treatment of the structure and dynamics of zigzag ion crystals leads to a multitude of possibilities for further research. Current research includes, for example, mixed crystals, zigzag transitions in Rydberg ion crystals, spin-spin interactions in zigzag crystals and quantum simulations in frustrated systems.





# Kurzfassung

Planare Zickzack-Ionenkristalle stellen ein einfach kontrollierbares Modellsystem dar und eignen sich daher hervorragend für vielfältige Untersuchungen von Effekten auf dem Gebiet der kondensierten Materie sowie für Anwendungen in der Quanteninformatik, beispielsweise als Quantenspeicher hoher Kapazität.

In dieser Arbeit werden viele wichtige Eigenschaften der Zickzack-Kristalle, welche aus linearen Ionenkonfigurationen hervorgehen, theoretisch und experimentell untersucht. Die dazu unternommenen Messungen wurden in drei verschiedenen Ionenfallen unter Einsatz vielfältiger experimenteller Techniken an  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen durchgeführt. Theoretische Vorhersagen konnten mit hoher Genauigkeit (bis zu  $4 \cdot 10^{-5}$ ) verifiziert werden, womit sämtliche Eigenschaften von Zickzack-Kristallen vollständig verstanden sind.

Im Detail konnten die Gleichgewichtspositionen der Ionen in den planaren Kristallen mit Hilfe einer CCD-Kamera, eigener Auswertungsroutinen und Mittelungen über bis zu 150 Kamerabilder mit hoher Präzision ermittelt werden. Hierbei ergibt sich eine minimale mittlere Abweichung von den berechneten Positionen, die mit 49 nm nur etwa 2/100 eines Pixels der Kamera beträgt. Für keinen der vermessenen 5- bis 17-Ionenkristalle wurden signifikante Abweichungen von der Theorie festgestellt.

Weiterhin konnten Beiträge zum Verständnis der Dynamik von Zickzack-Übergängen geleistet werden. Es gelang, vier relevante Anisotropieparameter eingehend theoretisch zu untersuchen und an einem Drei- und Vier-Ionenkristall auch in hohen Anisotropiebereichen experimentell zu bestätigen. Mit der Ionen-Positionsermittlung an einem 17-Ionen-Zickzack-Kristall wurde mitunter eine Messung in einem Anisotropiebereich jenseits des höchsten dieser ermittelten Parameter erfolgreich durchgeführt.

Auch die Vibrationsmoden von Zickzack-Kristallen konnten in dieser Arbeit eingehend untersucht werden. Berechnete Modenspektren der Kristalle zeigen, dass sich alle vier Anisotropieparameter auch in den Spektren identifizieren lassen. Erstmals konnten nicht-triviale Zickzack-Eigenmoden in Ionenkristallen mittels Seitenband-Spektroskopie verifiziert werden.

Nachdem die Struktur und Dynamik von Zickzack-Ionenkristallen nun vollständig bearbeitet ist, eröffnen sich vielfältige Möglichkeiten für weitere aktuelle Forschung, beispielsweise die Untersuchung gemischter Kristalle, Zickzack-Übergänge in Rydberg-Ionenkristallen, Spin-Spin-Wechselwirkung in Zickzack-Kristallen sowie Quantensimulationen in frustrierten Systemen.

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1. Die Paulfalle, vom dynamischen Speichern zum Pseudopotential . . . . .	5
2.1.1. Die lineare Paulfalle . . . . .	6
2.2. Zickzack-Ionenkristalle . . . . .	10
2.2.1. Berechnung der Gleichgewichts-Ionenpositionen in einem Ionenkristall . . . . .	10
2.2.2. Berechnung der Eigenmoden von Ionenkristallen . . . . .	11
2.2.3. Übergang vom linearen Kristall in den Zickzack-Kristall . . . . .	13
<b>3. Essentielle experimentelle Techniken</b>	<b>17</b>
3.1. Die Stabfalle . . . . .	17
3.2. Die Mikrofalle . . . . .	19
3.3. Die Implantationsfalle . . . . .	20
3.4. Lasersysteme . . . . .	21
3.5. Spektroskopie an Ionenkristallen . . . . .	23
3.5.1. Detektionsverfahren . . . . .	24
3.5.2. Spektroskopie der Schwingungsmoden . . . . .	24
3.6. Beobachtungssysteme . . . . .	27
3.7. Anregung von Schwingungsmoden . . . . .	28
<b>4. Ionenpositionen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment</b>	<b>31</b>
4.1. Numerische Berechnung von Ionenkristallen . . . . .	32
4.1.1. Ionenpositionen und Kristallmaße in Abhängigkeit der Anisotropie	34
4.1.2. Symmetrien in Zickzack-Ionenkristallen . . . . .	36
4.2. Zickzack-Kristalle in der Stabfalle . . . . .	42
4.3. Experimentelle Ermittlung der Ionenpositionen . . . . .	44
4.3.1. Geometrische Transformationen zur Vergleichbarkeit von Experiment und Theorie . . . . .	45
4.4. Zickzack-Ionenkristalle verschiedener Ionenzahl . . . . .	48
4.5. Variation des axialen Einschlusses . . . . .	53

4.6. Variation des radialen Einschlusses . . . . .	56
4.7. Gemeinsame Darstellung der Ergebnisse . . . . .	58
4.8. Fehlerdiskussion der Positionsmessungen . . . . .	63
<b>5. Konfigurationsänderungen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment</b>	<b>67</b>
5.1. Berechnung der kritischen Parameter . . . . .	67
5.2. Gemessene Konfigurationsänderungen . . . . .	71
<b>6. Ionenschwingungsmoden: Theorie im Vergleich mit dem Experiment</b>	<b>75</b>
6.1. Berechnung der Moden . . . . .	75
6.2. Modenspektren in Abhängigkeit der Ionenzahl . . . . .	78
6.3. Modenspektren in Abhängigkeit der Anisotropie . . . . .	80
6.4. Analyse der gemessenen Spektren eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls . .	83
<b>7. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>97</b>
A.1. Messdatenverzeichnis . . . . .	97
A. Messdaten: Zickzack-Kristalle verschiedener Ionenzahl . . . . .	97
B. Messdaten: Variation des axialen Einschlusses . . . . .	98
C. Messdaten: Variation des radialen Einschlusses . . . . .	99
D. Messdaten: Konfigurationsübergänge . . . . .	100
E. Messdaten: Spektren . . . . .	101
A.2. Berechnete Anisotropieparameter . . . . .	108
A.3. Mathematica Quelltext . . . . .	109
A. Positionsberechnung . . . . .	109
B. Schwingungsmodenberechnung . . . . .	112
<b>B. Literaturverzeichnis</b>	<b>115</b>
Literaturverzeichnis . . . . .	121

# Abbildungsverzeichnis

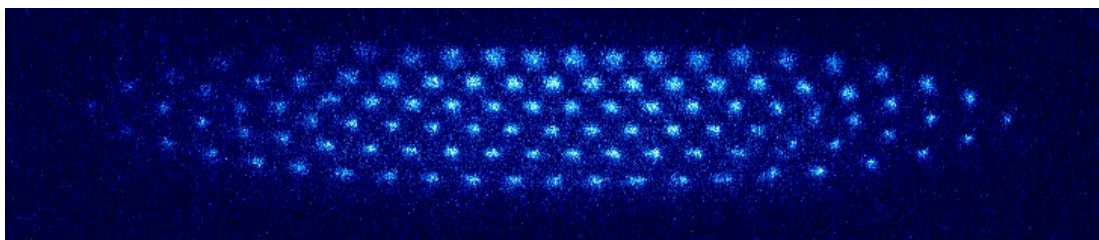
1.1. Großer Zickzack-Kristall . . . . .	1
1.2. Zickzack-Übergang in Rydberg-Ionenkristall . . . . .	2
1.3. Defekte in einem Zickzack-Kristall . . . . .	3
1.4. Spin-Frustrationseffekte in Zickzack-Leitern . . . . .	4
2.1. Lineare Paulfalle . . . . .	7
2.2. Sattelpotential . . . . .	7
2.3. Stabilitätsdiagramm Paulfalle . . . . .	8
2.4. Äquipotentialflächen Mikrofalle . . . . .	9
2.5. Phasenübergang in den Zickzack-Ionenkristall . . . . .	14
3.1. Skizze der Stabfalle . . . . .	18
3.2. Foto des Experimentaufbaus der Stabfalle . . . . .	19
3.3. Skizze der Mikrofalle . . . . .	20
3.4. Foto der Implantationsfalle . . . . .	21
3.5. Termschema $^{40}\text{Ca}^+$ . . . . .	22
3.6. Histogramm Schwellwertbestimmung . . . . .	25
3.7. Kopplung von Ionen- und Schwingungszuständen . . . . .	25
3.8. Spektrum eines Ions . . . . .	26
3.9. Pulssequenz . . . . .	27
3.10. Resonanzkurve . . . . .	29
4.1. Berechneter linearer 45-Ionenkristall . . . . .	33
4.2. Berechneter 45-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	33
4.3. Kristallmaße in Abhängigkeit der Anisotropie . . . . .	34
4.4. Ionenpositionen in Abhängigkeit der Anisotropie . . . . .	35
4.5. Schematischer Zickzack-Übergang . . . . .	37
4.6. Berechneter Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	38
4.7. Berechneter Sechs-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	39
4.8. Berechneter vertikaler Sechs-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	40
4.9. Sehr symmetrische Kristalle gerader Ionenzahl . . . . .	41
4.10. Aufhebung der Entartung der radialen Fallenfrequenzen . . . . .	42
4.11. Lage eines Zickzack-Kristalls in der Stabfalle . . . . .	43

4.12. CCD-Bild Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	44
4.13. Einzelergebnisse zweidimensionaler Gauß-Fits . . . . .	45
4.14. Gemessene und berechnete Ionenpositionen . . . . .	47
4.15. Zickzack-Kristalle verschiedener Ionenzahlen im gleichen Potential . . . . .	49
4.16. Gemessener Zehn-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	51
4.17. Gemessener 17-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	51
4.18. Gemessener Fünf-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	52
4.19. Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen $\omega_z$ . . . . .	54
4.20. Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen $\omega_y$ . . . . .	57
4.21. Gemessene Ionenpositionen in Abhängigkeit der Anisotropie . . . . .	59
4.22. Gemessene und berechnete Kristallhöhe . . . . .	60
4.23. Gemessene und berechnete Inter-Ionen-Distanz . . . . .	61
4.24. Kristallhöhe unter Veränderung der Ionenzahl . . . . .	62
5.1. Konfigurationsübergänge Sechs-Ionenkristall . . . . .	68
5.2. Berechnete Symmetrieparameter von Kristallen gerader Ionenzahl . . . . .	69
5.3. Sämtliche berechneten Anisotropieparameter . . . . .	71
5.4. Gemessene Konfigurationsübergänge . . . . .	73
6.1. Schwingungsmoden linearer Kristalle . . . . .	76
6.2. Skizze der Zickzack-Moden eines Drei-Ionenkristalls . . . . .	77
6.3. Schwingungsmoden 17-Ionen-Zickzack-Kristall . . . . .	78
6.4. Modenspektren von Kristallen verschiedener Ionenzahl . . . . .	79
6.5. Berechnetes Modenspektrum Drei-Ionenkristall . . . . .	81
6.6. Berechnetes Modenspektrum Sechs-Ionenkristall . . . . .	82
6.7. Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -9.9V$ . . . . .	86
6.8. Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -10.0V$ . . . . .	88
6.9. Übersicht der gemessenen Zickzack-Moden . . . . .	90
A.1. Spektrum einzelnes Ion bei $U_m = -10V$ . . . . .	102
A.2. Spektrum einzelnes Ion bei $U_m = -9V$ . . . . .	103
A.3. Erstes Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -9.9V$ . . . . .	104
A.4. Zweites Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -9.9V$ . . . . .	105
A.5. Erstes Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -10.0V$ . . . . .	106
A.6. Zweites Spektrum Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei $U_m = -10.0V$ . . . . .	107

# 1

## Einleitung

Das Studium grundlegender physikalischer Mechanismen quantenartiger Natur in möglichst gut kontrollierbaren Systemen liegt seit Jahrzehnten im Zentrum des aktuellen Forschungsinteresses. Nicht nur die Physik der kondensierten Materie umfasst Forschungsfelder dieser Art, auch auf dem Gebiet der Quanteninformation, welchem diese Arbeit entstammt, liegt eine Vielzahl interessanter Anwendungen von Effekten derartiger Natur vor. Die Kontrollierbarkeit der jeweiligen Systeme unterliegt jedoch in vielen Fällen einer strengen Limitierung, beispielsweise durch hohe Teilchenfluktuationen oder schwer zugängliche Parameterbereiche. Mit Hilfe von Quantensimulationen [Feynman (1982)] ist es möglich, einige dieser Limitierungen zu umgehen und eine große Bandbreite von Effekten auf dem Gebiet der kondensierten Materie zu untersuchen, welche auch mit modernsten Hochleistungsrechnern nicht analysiert werden können. Die in dieser Arbeit eingehend untersuchten Zickzack-Ionenkristalle bieten eine hervorragende Plattform für eine Fülle an Quantensimulationen und Untersuchungen quantenmechanischer Effekte. Ein solcher Kristall, der in diesem Fall aus einer großen Anzahl Ionen besteht, ist in Abbildung 1.1 abgebildet.



**Abbildung 1.1.:** Großer Zickzack-Ionenkristall, welcher aus etwa 100 einzelnen  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen besteht. Das CCD-Bild entstammt einer in dieser Arbeit verwendeten Ionenfalle [Naber (2012)].

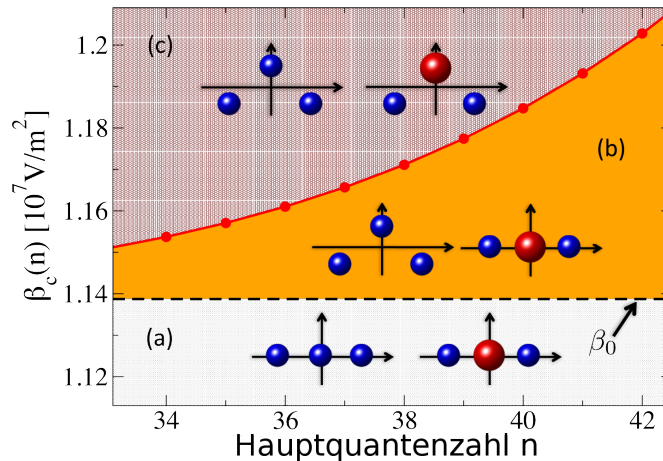
Lineare Ionenkristalle gehen für bestimmte Ionenzahlen und Fallenpotentiale in eine Zickzack-Konfiguration über. Ausführliche experimentelle [Enzer u. a. (2000)] und theo-

## 1. Einleitung

retische [Schiffer (1993), Fishman u. a. (2008)] Untersuchungen dieses Phasenübergangs zeigen gute Übereinstimmung rein klassischer Rechnungen und Messergebnisse. Überlegungen auf Grundlage des Ising-Modells führen zu dem Ergebnis, dass es einen quantenkritischen Punkt gibt, der messbare Abweichungen vom klassisch errechneten Phasenübergang zeigt [Shimshoni u. a. (2010)]. Diese Abweichungen konnten bisher allerdings nicht experimentell verifiziert werden.

Zur Struktur großer Anordnungen geladener Teilchen und deren Eigenmoden liegen zahlreiche Arbeiten aus dem Gebiet der statistischen Physik vor [Schweigert u. Peeters (1995), Ferreira u. a. (2005), W. P. Ferreira u. Peeters (2010)]. In [Munarin u. a. (2007), Ferreira u. a. (2008)] werden beispielsweise auch Phasenübergänge höherer Ordnung für verschieden geladene Teilchen untersucht.

Für Ionenkristalle, in denen sich *Rydberg-Ionen* [Schmidt-Kaler u. a. (2011)] befinden, werden abweichende Fallenfrequenzen und somit andere Anisotropien vorhergesagt [Li u. Lesanovsky (2011)]. Es ergibt sich eine von der Hauptquantenzahl  $n$  abhängige kritische Feldstärke  $\beta_c(n)$  für den Übergang von der linearen zur Zickzack-Struktur. Abbildung 1.2 zeigt ein Phasendiagramm derartiger Übergänge.



**Abbildung 1.2.:** Konfigurationsübergänge eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls in Abhängigkeit der statischen Feldstärke  $\beta$ . Der rechte der beiden Kristalle ist elektronisch angeregt, das rote Ion symbolisiert ein Ion, welches sich in einem Rydberg-Zustand befindet. Der kritische Parameter  $\beta_0$  korrespondiert zu  $\alpha_{\text{krit}_1}$ . In (a) und (c) liegen identische Konfigurationen vor, in (b) hingegen liegt der elektronisch angeregte Kristall noch unterhalb seines Phasenübergangs  $\beta_c(n)$ , welcher durch die rote Kurve dargestellt ist [Li u. Lesanovsky (2011)].

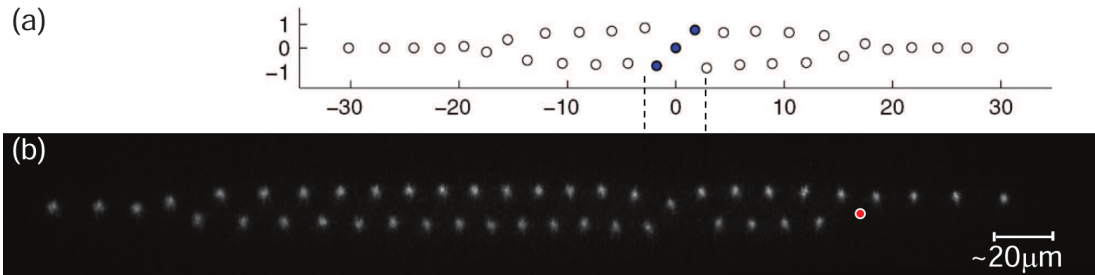
Die experimentelle Verifizierung dieser Übergänge ist durchaus in naher Zukunft realisierbar, doch die Schwierigkeit besteht darin, dass ein VUV-Laser bei  $\approx 122$  nm [Kolbe



---

u. a. (2011)] benötigt wird um Ionen in Rydberg-Zustände anregen zu können.

Nicht-adiabatische Veränderungen des Fallenpotentials können Defekte (engl. kinks) in Zickzack-Ionenkristallen hervorrufen, wie sie in Abbildung 1.3 zu sehen sind.

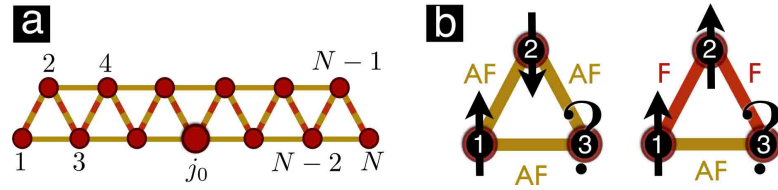


**Abbildung 1.3.:** Topologische Defekte in einem Zickzack-Kristall. (a) Numerische Simulation für 33 Ionen, bei den blau markierten Ionen wird ein struktureller Defekt vorhergesagt. (b) CCD-Bild 45 laser-gekühlter  $\text{Mg}^+$ -Ionen, welche einen Defekt in ihrer Kristallstruktur enthalten [Schneider u. a. (2011)].

Der für diese Defekte verantwortliche *Kibble-Zurek-Mechanismus* [Kibble (1976), Zurek (1985)] ist Gegenstand aktueller Forschung [Del Campo u. a. (2010)] und wurde in einer Vielzahl von Systemen bereits experimentell untersucht [Bowick u. a. (1994), Hendry u. a. (1994), Ruutu u. a. (1996), Bäuerle u. a. (1996)]. Ziel zukünftiger Messungen ist beispielsweise die Ermittlung der Häufigkeit von Defekten in Abhängigkeit der Potentialvariationsgeschwindigkeit.

Zickzack-Ionenkristalle bieten außerdem eine hervorragende Möglichkeit zur Realisierung frustrierter Quanten-Ising-Leitern [Bermudez], anhand derer das für verschiedene exotische Materiezustände essentielle Zusammenspiel von Frustrationseffekten, Quanten-Fluktuationen und niedriger Dimensionalität untersucht werden kann. Die niedrige Dimensionalität kann auf einfache Weise über die Fallenfrequenzen eingestellt werden. Frustrationseffekte finden sich unter anderem zwischen den Spins benachbarter Ionen in den Kristallen, wie es Abbildung 1.4 zeigt.

Es entstehen ganze Frustrationsnetzwerke, an denen beispielsweise Quantenmagnetismus untersucht werden kann [Friedenauer u. a. (2008)]. Das sehr gut kontrollierbare System gefangener Ionen stellt somit eine vielversprechende Basis für Untersuchungen dieser Art dar. Frustrierte Ising-Spins wurden an gefangenen Ionen bereits untersucht in [Kim u. a. (2010)]. Erfolgreiche Quantensimulationen mit gefangenen Ionen konnten in einer Vielzahl von Experimenten kürzlich durchgeführt werden [Gerritsma u. a. (2010), Lanyon u. a. (2011), Barreiro u. a. (2011)].



**Abbildung 1.4.:** Spin-Frustrationseffekte in Zickzack-Leitern. (a) Schema der Ising-Wechselwirkungen zwischen benachbarten Ionen in einer Zickzack-Leiter. Rote Verbindungen stehen für ferromagnetische Wechselwirkungen, gelb-rote Verbindungen können sowohl antiferromagnetischer als auch ferromagnetischer Natur sein. (b) Frustration in einem Dreiecks-Segment der Leiter. Für alle Spin-Konfigurationen besteht immer ein Konflikt für eine der Verbindungen [Bermudez].

Verschiedenste Geometrien in Zickzack-Ionenkristallen wurden bereits experimentell beobachtet [Block u. a. (2000)]. In dieser Arbeit wurden unter anderem die Gleichgewichtspositionen einzelner Ionen mit hoher Präzision vermessen. Auch die Eigenmoden verschiedenster Kristallstrukturen sind von Interesse und wurden bereits theoretisch untersucht [Fishman u. a. (2008), Baltrusch u. a. (2011)], während experimentelle Untersuchungen mit Hilfe der Analyse Brown'scher Bewegung stattfanden [Melzer (2003)]. Erstmals konnte in dieser Arbeit eine Verifizierung nicht-trivialer Eigenmoden an einem Zickzack-Ionenkristall mittels Seitenband-Spektroskopie durchgeführt werden. Vergleichbare Resultate liegen bisher nur für lineare Ionenkonfigurationen und geringere Ionenzahlen vor [Rohde u. a. (2001)].

Kapitel 2 legt die theoretischen Grundlagen dar, welche zum Verständnis der hier verwendeten Paulfallen nötig sind. Weiterhin wird dort die klassische Berechnung der Gleichgewichtspositionen in Ionenkristallen sowie deren Eigenmoden analog zu [James (1998), Enzer u. a. (2000)] erläutert. Die drei in dieser Arbeit verwendeten Ionenfallen sowie weitere wichtige experimentelle Techniken werden in Kapitel 3 vorgestellt. Kapitel 4 zeigt die numerische Berechnung der Gleichgewichtspositionen und die Positionsmessungen an einzelnen Ionenkristallen. Die Konfigurationsübergänge, welche Ionenkristalle in Abhängigkeit äußerer Potentiale durchlaufen, sind Inhalt des Kapitels 5. Kapitel 6 stellt numerisch berechnete und spektroskopisch gemessene Modenspektren planarer Zickzack-Ionenkristalle dar.

# 2

## Theoretische Grundlagen

Sämtliche Messungen dieser Arbeit wurden an *Paulfallen* durchgeführt, daher wird das Funktionsprinzip dieses Fallentyps in diesem Kapitel erläutert. Da das Ziel dieser Arbeit der Vergleich zwischen experimentellen Daten und theoretischen Berechnungen zu Zickzack-Ionenkristallen ist, werden hier die Grundlagen zur Berechnung dieser Ionenkristalle dargestellt.

In Abschnitt 2.1 wird die Funktionsweise einer Paulfalle erläutert, Abschnitt 2.2.1 stellt die theoretischen Überlegungen vor, nach denen die Gleichgewichtspositionen in Ionenkristallen mehrerer Dimensionen berechnet werden. Der folgende Abschnitt 2.2.2 zeigt, wie die Schwingungsmoden von Zickzack-Ionenkristallen berechnet werden können. Die Betrachtung von Kopplungsmatrizen in diesem Abschnitt führt auf den in Abschnitt 2.2.3 dargestellten Phasenübergang von linearen Ionenkristallen in planare Zickzack-Kristalle.

### 2.1. Die Paulfalle, vom dynamischen Speichern zum Pseudopotential

Um ein geladenes Teilchen in einem kleinen Raumbereich zu fangen, ist es nötig eine rücktreibende Kraft in jede Raumrichtung auf das Teilchen wirken zu lassen. Damit der Einschluss des Ions harmonisch ist, sollte in direkter Nähe des Ions folgendes Coulombpotential vorliegen:

$$\Phi(x, y, z) \propto \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2 . \quad (2.1)$$

Wegen der Laplace-Gleichung  $\Delta\Phi = 0$  muss für die Geometriefaktoren gelten

$$\alpha + \beta + \gamma = 0 . \quad (2.2)$$

Es liegt also immer ein Anteil in einer Raumrichtung vor, der nicht einschließend ist. W. Paul und H. Steinwedel fanden für dieses Problem 1953 eine Lösung, indem sie zeitlich veränderliche Felder verwendeten. Das ursprüngliche Experiment war der Paul'sche Massenfilter, der mit Hilfe eines elektrischen Wechselfeldes in der Lage war, Ionen ihrer Masse nach zu trennen. Die angelegten Wechselspannungen liegen für Ionen im Radiofrequenz-Bereich und werden daher als RF bezeichnet. Je nachdem wie die Ionenfalle aufgebaut ist, werden in zwei oder drei Raumrichtungen Wechselspannungen an die Elektroden der Falle angelegt. Um auch in der letzten verbleibenden Raumrichtung einen Einschluss zu gewährleisten, kann in diese Richtung ein statisches Feld angelegt werden. Die Potentiale in der Nähe des Fallenzentrums können daher durch eine quadratische Näherung, bestehend aus einem statischem und einem dynamischen Anteil, beschrieben werden.

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z, t) = & \frac{U_{\text{RF}}}{r_0} \cos(\Omega_{\text{RF}} t) (\alpha_{\text{RF}} x^2 + \beta_{\text{RF}} y^2 + \gamma_{\text{RF}} z^2) \\ & + \frac{U_0}{2r_0} (\alpha_{\text{DC}} x^2 + \beta_{\text{DC}} y^2 + \gamma_{\text{DC}} z^2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet  $U_{\text{RF}}$  die Amplitude der RF-Spannung,  $\Omega_{\text{RF}}$  die Frequenz der RF-Spannung,  $r_0$  den Abstand vom Fallenzentrum zur Oberfläche der Elektroden und  $U_0$  das Potential der Gleichspannung (DC<sup>1</sup>).

### 2.1.1. Die lineare Paulfalle

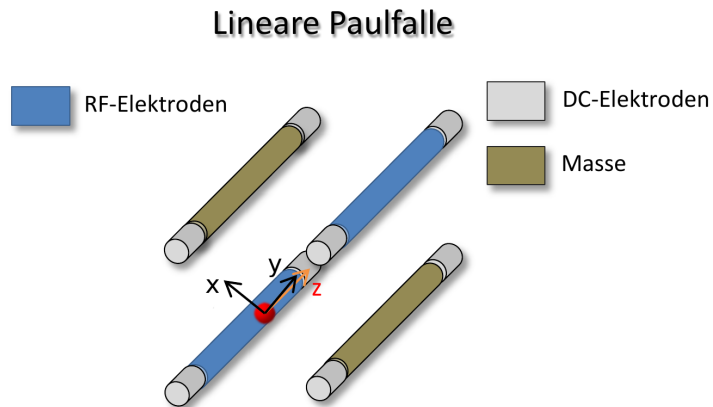
Die Abbildung 2.1 zeigt die besonders einfache Geometrie einer linearen Paulfalle, welche die Gleichung 2.3 näherungsweise in Ihrem Fallenmittelpunkt erfüllt. Da es sich bei den in dieser Arbeit verwendeten Ionenfallen um lineare Paulfallen handelt, beschränkt sich die Betrachtung der Potentiale im Folgenden auf diesen Fallentyp.

Die dargestellte Geometrie führt, da Gleichung 2.3 die Laplace-Gleichung erfüllen muss, auf folgenden Zusammenhang für die Koeffizienten.

$$\alpha_{\text{DC}} = \beta_{\text{DC}} = -\frac{\gamma_{\text{DC}}}{2} . \quad (2.4)$$

---

<sup>1</sup>DC steht für den englischen Begriff direct current.

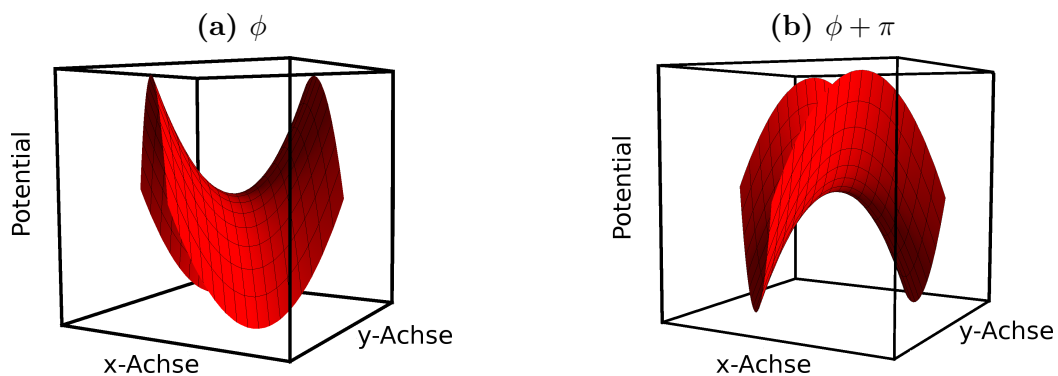


**Abbildung 2.1.:** Lineare Paulfalle. In der Fallenmitte ist rot ein Ion dargestellt. Die beiden schwarzen Pfeile stellen die radialen Fallenachsen dar, der orange Pfeil zeigt die axiale Fallenachse an [Kehlberger (2011)].

Der radiale Einschluss hat in diesem Fall nur sehr kleine axiale Komponenten, daher ist  $\gamma_{\text{RF}} \ll 1$  und somit vernachlässigbar. Es gilt folglich:

$$\alpha_{\text{RF}} = -\beta_{\text{RF}} . \quad (2.5)$$

Abbildung 2.2 zeigt das Potential, welches den radialen Einschluss gewährleistet, in der  $x$ - $y$ -Ebene zu unterschiedlichen Phasen. Gefangene Ionen befinden sich zu allen Zeiten in der Mitte des Potentialsattels.



**Abbildung 2.2.:** Skizze des Sattelpotentials, welches durch die RF-Elektroden erzeugt wird. Zwischen dem linken und dem rechten Bild besteht ein Phasenunterschied in der Radiofrequenz von  $\pi$ .

Die Bewegung eines Ions der Masse  $M$  und der Ladung  $Q = N \cdot |e|$  in der  $x$ - $y$ -Ebene

## 2. Theoretische Grundlagen

---

wird nun beschrieben durch die Mathieu Differentialgleichung eines Paul'schen Massenfilters.

$$\frac{d^2x}{d\varepsilon^2} + [a_x - 2q_x \cos(2\varepsilon)]x = 0 \quad (2.6)$$

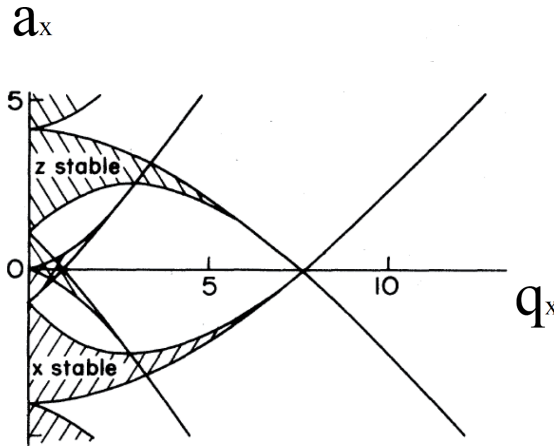
$$\frac{d^2y}{d\varepsilon^2} + [a_y + 2q_y \cos(2\varepsilon)]y = 0 \quad (2.7)$$

Hierbei wurden folgende dimensionslose Parameter verwendet:

$$\varepsilon = \frac{\Omega_{\text{RF}} t}{2}, \quad a_i = \frac{4QU_0\Theta_{\text{RF}}}{M\Omega_{\text{RF}}^2 r_0^2}, \quad q_i = \frac{4QU_{\text{RF}}\Theta_{\text{DC}}}{M\Omega_{\text{RF}}^2 r_0^2} \quad (2.8)$$

wobei  $\Theta = \{\alpha, \beta\}$ ,  $i \in \{x, y\}$ .

Für die Mathieu-Gleichungen existieren stabile und instabile Lösungen. Die instabilen Lösungen erlauben kein Fangen eines Ions, da die Amplitude der Bewegung exponentiell ansteigt. Bei den stabilen Lösungen hingegen schwingt das Teilchen in der radialen Ebene mit begrenzter Amplitude. Über die Stabilität einer Fallenkonfiguration entscheiden bei gegebener Geometrie nur die Parameter  $a_i$  und  $q_i$ . Abbildung 2.3 zeigt die stabilen und instabilen Bereiche der Mathieu-Gleichung.



**Abbildung 2.3.:** Stabilitätsdiagramm der linearen Paulfalle [Ghosh (1995)].

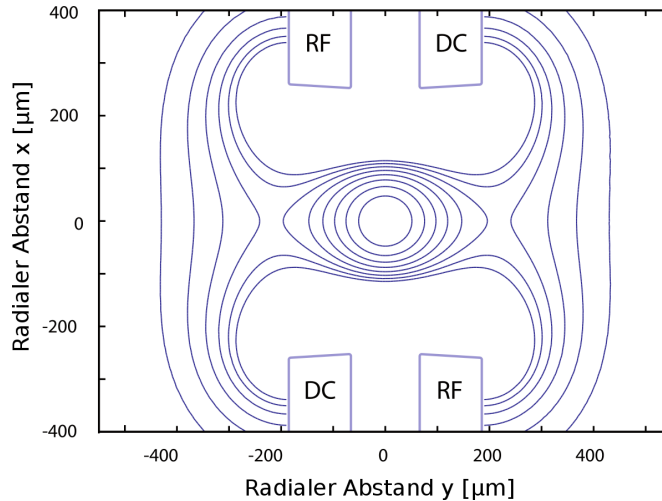
Eine Näherungslösung der Bewegungsgleichung 2.6 erster Ordnung für den Fall ( $|a_x|, q_x^2 \ll 1$ ) ist gegeben durch:

$$x(t) \approx x_0 \cos(\omega_x t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega_{\text{RF}} t)\right), \quad \text{mit} \quad \omega_x = \sqrt{a_x + \frac{q_x^2}{2}} \cdot \frac{\Omega_{\text{RF}}}{2}. \quad (2.9)$$

Hierbei wird die Konstante  $x_0$  durch die Anfangsbedingungen festgelegt. Somit kann die Schwingung des Ions in der radialen Ebene in zwei Teile zerlegt werden. Der erste Term beschreibt die langsamere *Säkularbewegung* deren Schwingungsfrequenz gegeben ist durch  $\omega_x$ . Eine schnellere Bewegung führt der zweite Term mit der Schwingungsfrequenz  $\Omega_{\text{RF}}$  aus. Eine genauere Darstellung dieser *Mikrobewegung* findet sich in [Ziesel (2008)]. Die Amplitude der Mikrobewegung ist im Zentrum des Quadrupolfeldes gleich Null. Die Säkularbewegung kann auf diese Art als Bewegung des Teilchens in einem harmonischen Potential interpretiert werden:

$$\Psi = \frac{M}{2}(\omega_x^2 x + \omega_y^2 y) \quad (2.10)$$

Exemplarisch sind Äquipotentialflächen dieses auch als *Pseudopotential* bezeichneten effektiven Potentials in Abbildung 2.4 dargestellt. Sie entstammen einer numerischen Simulation für eine lineare segmentierte Paulfalle, an welcher auch Messungen in dieser Arbeit vorgenommen wurden.



**Abbildung 2.4.:** Äquipotentialflächen des Pseudopotentials in einer Mikrofall [Ziesel (2008)].

Der axiale Einschluss der Ionen wird beispielsweise in der in Abbildung 2.1 dargestellten linearen Paulfalle mit Hilfe von Gleichspannung auf den acht DC-Elektroden an den Abschlüssen der Falle gewährleistet. Es bildet sich ein harmonisches Potential entlang der Fallenachse  $z$  aus, in dem die Bewegung des Ions mit der Frequenz

$$\omega_z = \sqrt{QU_0\gamma_{\text{DC}}/M}. \quad (2.11)$$

erfolgt. Im Fallenzentrum sind alle Potentiale in Richtung der jeweiligen Fallennachse symmetrisch, diese wichtige Eigenschaft wirkt sich auf die Symmetrien der Zickzack-Ionenkristalle aus (siehe Abschnitt 4.1.2).

## 2.2. Zickzack-Ionenkristalle

Im Folgenden wird die theoretische Berechnung von Ionenkristallen und im Speziellen von Zickzack-Ionenkristallen erläutert. Die Berechnung dieser Kristalle und die damit verbundene Notation erfolgt analog zu [James (1998), Enzer u. a. (2000), Marquet u. a. (2003), Welzl (2011)].

### 2.2.1. Berechnung der Gleichgewichts-Ionenpositionen in einem Ionenkristall

Nach Kapitel 2.1 kann, bei geeigneter Wahl der Fallenparameter, die Ionenbewegung in der Paulfalle als Bewegung in einem harmonischen Potential in allen drei Raumrichtungen angesehen werden. Befinden sich mehrere Ionen in der Falle, mit Temperaturen bei denen die Coulombabstoßung dominiert, bildet sich aufgrund dieser ein stabiles Gefüge, *Ionenkristall* genannt. Aufgrund der gleichen Ladung der Ionen besteht zwischen ihnen die Coulomb-Abstoßung. Bezeichne nun  $(x_{n,x}, x_{n,y}, x_{n,z})$  die Position des  $n$ -ten von insgesamt  $N$  gleich schweren Ionen, so befinden sich diese im effektiven Potential

$$V = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{i=x,y,z} \omega_i^2 x_{n,i}^2 + \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{n,m=1 \\ m \neq n}}^N \left[ \sum_{i=x,y,z} (x_{n,i} - x_{m,i})^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.12)$$

Dabei bezeichnet  $M$  die Masse jedes einzelnen Ions,  $e$  die Ladung des Elektrons,  $Z$  den Ionisationsgrad des Ions,  $\epsilon_0$  die Permittivität im Vakuum und  $\omega_i$  die Frequenz des harmonischen Potentials in der jeweiligen Raumrichtung, im Folgenden als *Fallenfrequenz* bezeichnet. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird im Weiteren stets angenommen, dass  $\omega_z < \omega_x, \omega_y$ . Unter der Annahme, dass die Ionen hinreichend kalt sind, führen sie nur kleine Bewegungen um ihre Ruheposition  $\bar{x}_{m,i}$  aus. Daher kann die Position des  $m$ -ten Ions mit Hilfe von

$$x_{m,i} \approx \bar{x}_{m,i} + q_{m,i}(t) \quad (2.13)$$



genähert werden. Hierbei beschreibt  $q_m(t)$  eine kleine Auslenkung aus der Ruheposition. Die Ruhepositionen oder auch Gleichgewichtspositionen sind festgelegt durch

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x_{n,i}} \right|_{x_{n,i}=\bar{x}_{n,i}} = 0, \quad (n = 1, \dots, N), \quad (i = x, y, z). \quad (2.14)$$

Um universelle, von einer bestimmten Falle unabhängige, dimensionslose Positionen zu erhalten, hat es sich als nützlich erwiesen, einen Längenparameter  $l$  einzuführen:

$$l = \left( \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 M \omega_z^2} \right)^{1/3}. \quad (2.15)$$

Die dimensionslosen Gleichgewichtspositionen sind somit gegeben durch  $u_{n,i} = \bar{x}_{n,i}/l$ . Mit dieser Ersetzung lässt sich Gleichung 2.14 umschreiben in

$$\left( \frac{\omega_i}{\omega_z} \right)^2 u_{n,i} + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \frac{u_{m,i} - u_{n,i}}{\left[ \sum_{i=1}^3 (u_{n,i} - u_{m,i})^2 \right]^{3/2}} = 0. \quad (2.16)$$

Unter der Annahme, dass eine beliebige Fallenfrequenz sehr viel kleiner ist als die beiden anderen, reduziert sich das Problem auf eine Dimension, da der Einschluss in Richtung der kleinsten Frequenz sehr viel schwächer ist als jener in den beiden anderen Richtungen. Wie in [James (1998)] dargestellt, lässt sich Gleichung 2.16 für  $N = 2$  und  $N = 3$  in einer Dimension analytisch lösen, für größere Ionenkristalle hingegen benötigt man numerische Methoden.

### 2.2.2. Berechnung der Eigenmoden von Ionenkristallen

Um die Schwingungsmoden eines Ionenkristalls zu erhalten, bedient man sich des Hamilton Formalismus. Die Hamiltonfunktion eines oben besprochenen Systems ist gegeben durch:

$$H = \frac{l^2}{2} \sum_{i=x,y,z} \sum_{n=1}^N M \dot{u}_{n,i}^2 + M \omega_z^2 l^2 \times \left( \sum_{i=x,y,z} \sum_{n=1}^N \frac{u_{n,i}^2}{2} \left( \frac{\omega_i}{\omega_z} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m=1 \\ n \neq m}}^N \frac{1}{|\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_m|} \right). \quad (2.17)$$

## 2. Theoretische Grundlagen

---

Durch eine Entwicklung des Potentialterms (Gleichung 2.12) um die Gleichgewichtspositionen bis zur zweiten Ordnung und unter Vernachlässigung des konstanten Terms ergibt sich:

$$V \approx \frac{1}{2l^2} \sum_{s,t}^{3N} q'_s q'_t D_{s,t} . \quad (2.18)$$

Wobei  $D$  die  $3N \times 3N$  große Hessematrix von  $V$  ist und  $q'_{iN+n} = q_{n,i}$  die Auslenkungen aus der Ruheposition sind. Gleichung 2.18 hat nun die Form eines harmonischen Oszillators, dessen Eigenfrequenzen  $\omega_r$  gegeben sind durch:

$$\omega_r = \omega_z \sqrt{\mu_r} \quad \text{mit} \quad r = (1, \dots, 3N) . \quad (2.19)$$

Hierbei sind  $\mu_r$  die Eigenwerte der Hessematrix  $D$ . Die zu den  $\mu_r$  gehörigen normierten Eigenvektoren  $\mathbf{b}_r$  entsprechen den Eigenmoden des harmonischen Oszillators. Führt man nun die Normalmoden  $Q_r := \sum_{k=1}^{3N} b_{r,k} \cdot q_k$  ein, sowie die dazu kanonischen Impulse  $P_r = M\dot{Q}_r$ , dann kann die Hamiltonfunktion kompakter geschrieben werden als:

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{r=1}^{3N} P_r^2 + \frac{M}{2} \sum_{r=1}^{3N} \omega_r^2 Q_r^2 . \quad (2.20)$$

In der Hessematrix  $D$  gibt  $jN + o$ , mit  $j = x, y, z$  und  $o = 1 \dots N$ , die Reihenfolge der Einträge an. Es ergibt sich folgender Ausdruck:

$$D_{jN+o, kN+p} = M\omega_i^2 \left( \delta_{jk} \delta_{op} + \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{n \neq m} (\delta_{on} - \delta_{om})(\delta_{np} - \delta_{mp}) \right. \\ \left. \times \frac{1}{l^3} \left[ \frac{3(u_{n,k} - u_{m,k})(u_{n,j} - u_{m,j})}{|\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_m|^5} - \frac{\delta_{kj}}{|\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_m|^3} \right]_{\bar{\mathbf{u}}_n, \bar{\mathbf{x}}_m} \right) . \quad (2.21)$$

Unter der Annahme, dass  $\omega_z \ll \omega_x, \omega_y$  reihen sich die Ionen nach Lösen von Gleichung 2.16 entlang der  $z$ -Achse auf. Für eine solche lineare Ionenkonfiguration verschwinden viele Einträge der Matrix und  $D$  reduziert sich zu einer Diagonalen Blockmatrix [Enzer u. a. (2000)] der Form

$$D \rightarrow (B^x, B^y, A) . \quad (2.22)$$

In Abschnitt 2.2.3 wird die Matrix  $B$  besprochen. Die reelle, symmetrische und positiv definite Kopplungsmatrix  $A$  ist der Block, der die Schwingung der Ionen entlang der  $z$ -Achse bestimmt:

$$A_{n,m} = \begin{cases} 1 + 2 \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq m}}^N \frac{1}{|z_m - z_p|^3} & \text{für } n = m \\ \frac{-2}{|z_m - z_n|^3} & \text{für } n \neq m \end{cases} \quad (2.23)$$

Wobei hier  $z_p$  den auf eine Dimension beschränkten universellen Koordinaten  $u_{p,j}$  entsprechen. Die normierten Eigenvektoren von  $A$  sind gegeben durch die Gleichung  $A\mathbf{b}_r = \mu_r \mathbf{b}_r$ , die sich aber nur für zwei und drei Ionen analytisch lösen lässt, wie bereits oben erwähnt. Für zwei Ionen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1), & \mu_1 &= 1 \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1), & \mu_2 &= 3 \end{aligned} \quad (2.24)$$

Die zu  $\mathbf{b}_1$  gehörige Eigenmode wird Schwerpunktsmode genannt, da die beiden Eigenvektoren der Ionen in die gleiche Richtung zeigen, sie schwingen also in Phase entlang der  $z$ -Achse. Es zeigt sich [James (1998)], dass für lineare Konfigurationen stets der Eigenvektor mit dem niedrigsten Eigenwert eine Schwingung mit der Frequenz  $\omega_z$  bewirkt. Die nächst höhere Mode  $\mathbf{b}_2$  hat für beliebig große Ionenzahlen stets den Eigenwert 3, dies entspricht nach Gleichung 2.19 der Kreisfrequenz  $\sqrt{3}\omega_z$  für die Schwingung. Das negative Vorzeichen des Eigenvektors in der Komponente des einen Ions bewirkt, dass die Ionen sich gegenphasig bewegen. Sie bewegen sich aufeinander zu und anschließend wieder voneinander weg, daher wird diese Mode auch als *Atmungsmode* bezeichnet.

### 2.2.3. Übergang vom linearen Kristall in den Zickzack-Kristall

Der oben dargestellten eindimensionalen Betrachtung liegt die Annahme zu Grunde, dass eine der Fallenfrequenzen wesentlich kleiner ist als die beiden anderen Fallenfrequenzen ( $\omega_z \ll \omega_x, \omega_y$ ). Um die für Zickzack-Ionenkristalle essentielle Situation zu analysieren, dass diese Annahme nicht mehr trägt, ist es sinnvoll die Matrizen  $B^i$  aus Gleichung 2.22 zu betrachten. Diese Kopplungsmatrizen für die radialen Oszillationen haben folgende Form:

$$B_{n,m}^i = \left[ \left( \frac{\omega_i}{\omega_z} \right)^2 + \frac{1}{2} \right] \delta_{n,m} - \frac{1}{2} A_{n,m} . \quad (2.25)$$

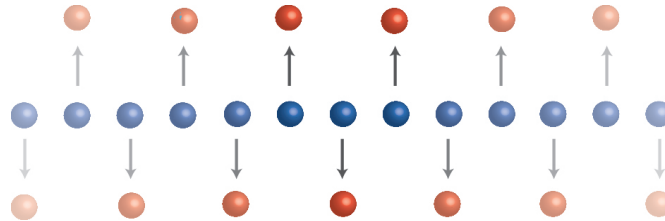
Sie unterscheiden sich nur durch eine Konstante multipliziert mit der Einheitsmatrix von  $A$  und müssen demnach die gleichen Eigenvektoren besitzen. Allerdings unterscheiden sich die zugehörigen Eigenwerte:

$$\mu_r(B^i) = \left( \frac{\omega_i}{\omega_z} \right)^2 + \frac{1}{2} - \frac{\mu_r(A)}{2} \quad (2.26)$$

Das Inverse des Verhältnisses  $\left( \frac{\omega_i}{\omega_z} \right)^2$  wird auch Anisotropie der Falle genannt und geschrieben als

$$\alpha_i = \left( \frac{\omega_z}{\omega_i} \right)^2 . \quad (2.27)$$

Dieser Anisotropieparameter spielt eine zentrale Rolle in dieser Arbeit, da die Gleichgewichts-Ionenpositionen in planaren Kristallen ausschließlich von ihm abhängen. Es ist anhand von Gleichung 2.26 einsichtig, dass sich für ein genügend großes  $\alpha_i$  negative Eigenwerte von  $B^i$  ergeben. Schwingungen in radialer Richtung, und somit auch die lineare Konfiguration, werden instabil und es findet ein Phasenübergang zweiter Ordnung [Schiffer (1993)] in eine Zickzackstruktur statt. Abbildung 2.5 veranschaulicht die Auslenkung der Ionen aus der linearen Konfiguration.



**Abbildung 2.5.:** Phasenübergang in den Zickzack-Ionenkristall, rote Kugeln stellen die Ionen im Zickzack-Kristall dar. Hier liegt eine sehr lange lineare Ionenkonfiguration zu Grunde, aus welcher die Auslenkung erfolgt.

Kristalle die in einer solchen Struktur vorliegen werden als Zickzack-Ionenkristalle bezeichnet. Sei nun  $\mu_N$  der höchste Eigenwert der Matrix  $A$ , dann ist dieser kritische Wert für  $\alpha$  exakt gegeben durch:

$$\alpha_{\text{krit}_1} = 2/(\mu_N - 1) . \quad (2.28)$$

Der Index 1 deutet an, dass es mehrere Konfigurationsübergänge bei höheren Anisotropien gibt, welche in Kapitel 5 untersucht werden. Durch numerische Diagonalisierung von  $A$  lässt sich der Wert für  $\mu_N$  bestimmen, dies ist allerdings aufwendig für große  $N$ . Eine Näherungslösung nach [Schiffer (1993)] ist gegeben durch:

$$\alpha_{\text{krit}_1} = 2.53N^{-1.73} . \quad (2.29)$$

Ein Vergleich mit dieser Lösung findet sich in dieser Arbeit (siehe Kapitel 5), sowie in [Enzer u. a. (2000)].



# 3

## Essentielle experimentelle Techniken

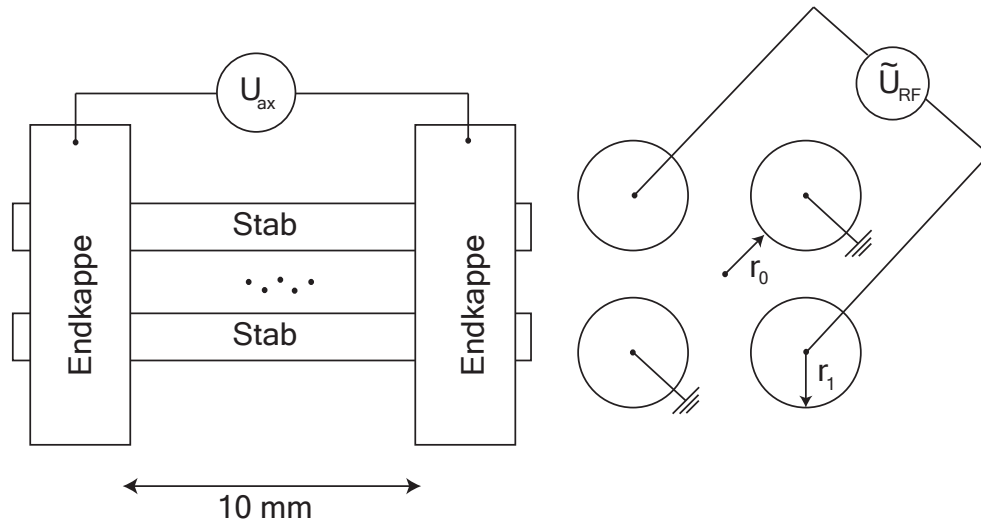
In diesem Kapitel werden in knapper Form die verwendeten linearen Paulfallen und wichtige Teile der Versuchsaufbauten sowie experimentelle Verfahren vorgestellt. Aufgrund der verschiedenen untersuchten Eigenschaften der Zickzack-Ionenkristalle wurden drei verschiedene Ionenfallen verwendet. Unter ihnen gibt es Gemeinsamkeiten, sie befinden sich beispielsweise in eigenen Vakuumkammern, welche im unteren  $10^{-10}$  mBar-Bereich betrieben werden. Die Antriebsfrequenzen liegen bei etwa 15 MHz und sämtliche Messungen wurden ausschließlich an gefangenen  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen durchgeführt.

Die Abschnitte 3.1 bis 3.3 behandeln die Ionenfallen, denen die Messungen dieser Arbeit entstammen. In Abschnitt 3.4 werden die Lasersysteme vorgestellt, die zur Kühlung der Ionen, Ionisation von atomarem Kalzium und zur Spektroskopie verwendet wurden. Abschnitt 3.6 zeigt das Beobachtungssystem, mit dem die Ionen betrachtet werden können. In Abschnitt 3.7 wird beschrieben, wie die Eigenmoden von Ionen zum Schwingen angeregt werden können.

### 3.1. Die Stabfalle

Die Positionsmessungen an Zickzack-Ionenkristallen wurden in einer makroskopischen, linearen Paulfalle durchgeführt, welche im Folgenden als *Stabfalle* bezeichnet wird. Die Falle wurde mit dem Zweck konstruiert, verlässlich große Ionenkristalle fangen zu können und an diesen Experimente zu Rydberg-Anregungen durchzuführen [Singer u. a. (2004), Saffman u. a. (2010), Schmidt-Kaler u. a. (2011), Naber (2012)]. Die Konstruktion der Falle ist dabei wesentlich einfacher gehalten, als die der in Abschnitt 3.2 und 3.3 vorgestellten segmentierten Paulfallen. Abbildung 3.1 zeigt den Aufbau dieser Falle, welcher dem der in Kapitel 2 vorgestellten linearen Paulfalle sehr ähnlich ist.

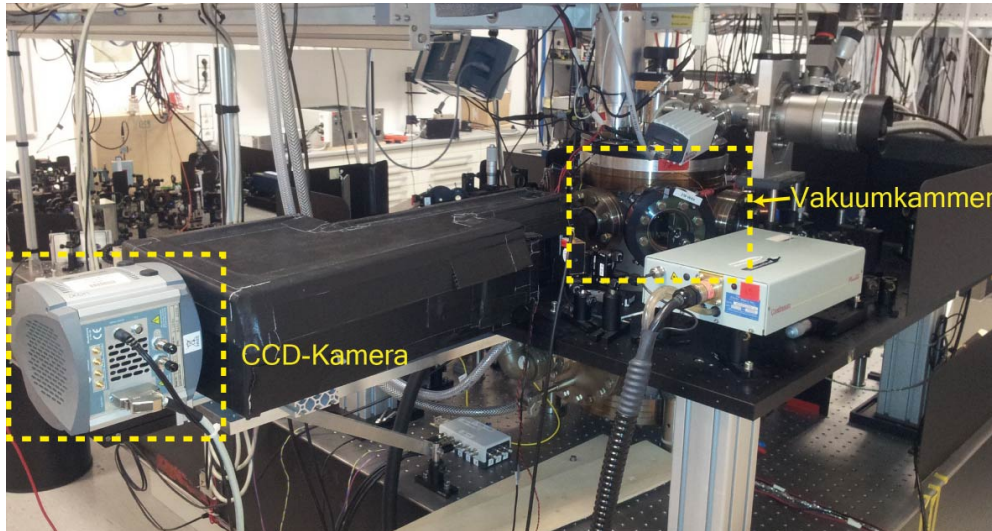
Der axiale Einschluss wird in dieser Falle über eine Gleichspannung  $U_{\text{ax}}$  gewährleistet,



**Abbildung 3.1.:** Skizze der Stabfalle. Links: Seitenansicht der Falle mit skizziertem nichtmaßstabgetreuem Zickzack-Ionenkristall. Rechts: Querschnitt der Falle aus axialer Sicht. Zwei der Stabelektroden werden mit der gleichen RF-Spannung gespeist, die anderen beiden Elektroden liegen auf Massepotential, beziehungsweise werden mit zusätzlichen Gleichspannungen beschaltet. Die eingetragenen Maße betragen:  $r_0 = 1.1$  mm,  $r_1 = 1.25$  mm.

welche im 100 bis 450 V-Bereich liegt. An den DC-Stabelektroden können zusätzliche Gleichspannungen im unteren Volt-Bereich angelegt werden. Liegt an beiden Stäben die gleiche Spannung an, so wird diese Offset-Spannung im Folgenden mit  $U_{off}$  bezeichnet. Um eventuelle Streufelder oder mechanische Abweichungen ausgleichen zu können, ist es möglich die Ionen mittels einer Kompensationsspannung  $U_{komp}$  auf den DC-Stabelektroden in das Minimum des radialen Fallenpotentials zu bewegen. Dabei liegt an einer Elektrode jeweils  $-U_{komp}/2$  und an der anderen  $+U_{komp}/2$  an. Die Gleichspannungen  $U_{ax}$ ,  $U_{off}$  und  $U_{komp}$  werden im Folgenden unter *Fallenspannungen* zusammengefasst. Die Fehler dieser Spannungen sind vernachlässigbar gering, da sie von sehr exakten Spannungsquellen erzeugt werden. Die Fallenfrequenzen liegen in dieser Falle im mittleren Kilohertz-Bereich. Abbildung 3.2 zeigt den Experimentaufbau der Stabfalle. Eine ausführliche Beschreibung zur Vakuumkammer und diversen anderen Teilen des Versuchsaufbaus findet sich in [Eble].

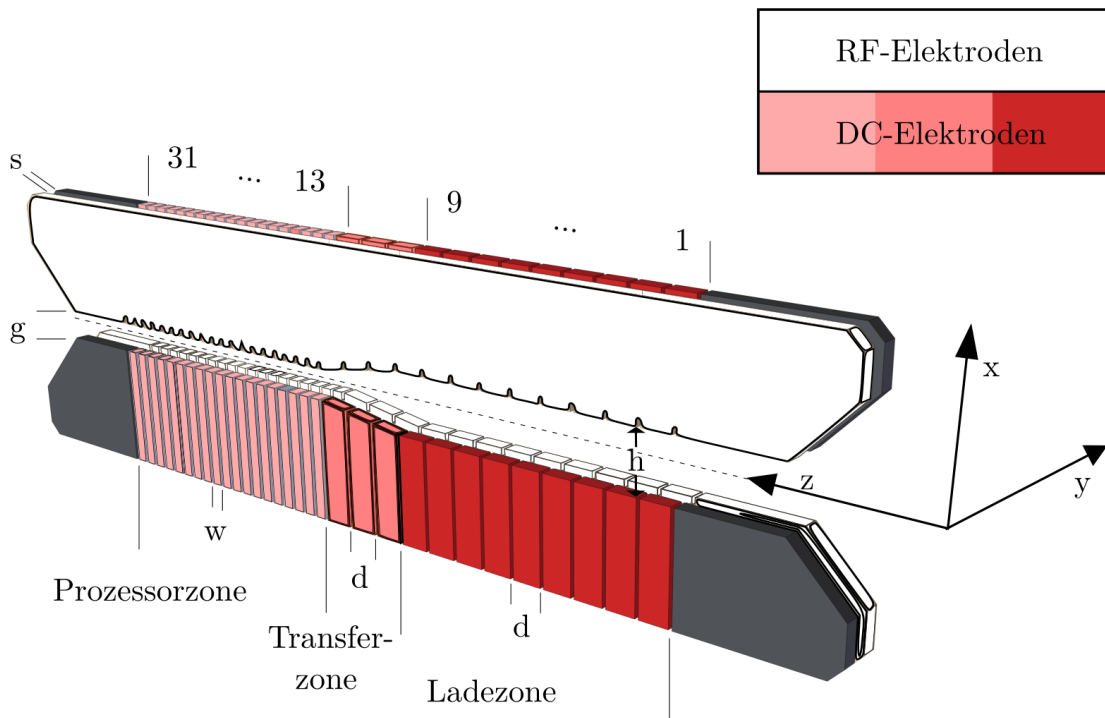




**Abbildung 3.2.:** Experimentaufbau der Stabfalle. In der Mitte des Bildes ist die Vakuulkammer abgebildet, in der die Stabfalle eingebaut ist. Links im Bild befindet sich eine CCD-Kamera, mit welcher die Ionen in der Falle beobachtet werden können, der schwarze Kasten dient dabei zur Abschirmung von Streulicht. Ein Teil der Aufbauten für die Laser ist links auf dem optischen Tisch zu sehen.

### 3.2. Die Mikrofalle

Die spektroskopischen Messungen der Schwingungsmoden von Zickzack-Kristallen wurden in einer segmentierten, linearen Mikrochip-Falle vorgenommen, welche im Folgenden als *Mikrofalle* bezeichnet wird. Diese Ionenfalle wurde mit dem Ziel entwickelt, den Ansatz eines skalierbaren Quantencomputers verfolgen zu können. Der radiale Einschluss wird genau so gewährleistet, wie in Abschnitt 2.1 für die lineare Paulfalle beschrieben. Der axiale Einschluss hingegen wird mittels negativer Gleichspannungen an den einzelnen Segmentelektroden erzeugt. Abbildung 3.3 skizziert den Aufbau dieser Falle. Die Bezeichnung Segment bezieht sich auf den Bereich zweier gegenüberliegender Segmentelektroden. Die Fallenfrequenzen dieser Falle liegen im unteren Megahertz-Bereich. Detaillierte Informationen zu dieser Falle und dem umgebenden experimentellen Aufbau finden sich in [Schulz (2009), Poschinger (2010)].

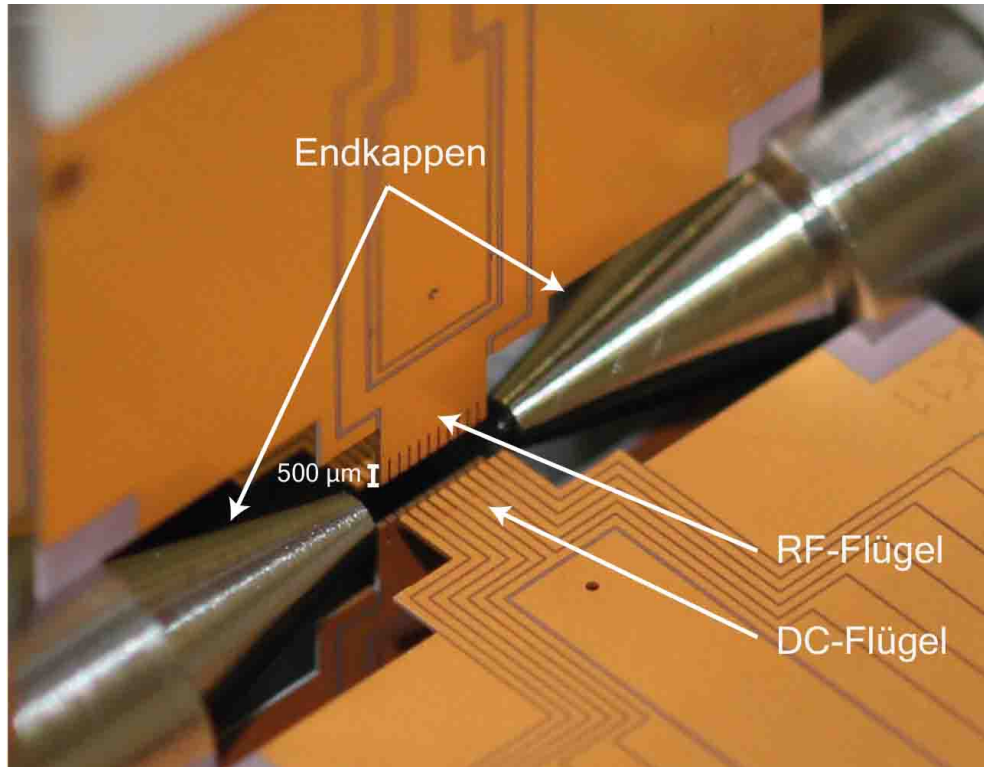


**Abbildung 3.3.:** Skizze einer segmentierten, linearen Mikrochip-Falle. Für die in dieser Arbeit durchgeführten spektroskopischen Messungen wurden ausschließlich Ionen in der Mitte der Ladezone gefangen. Dazu lagen an den DC-Elektroden der Segmente vier, fünf und sechs jeweils negative Gleichspannungen an. Alle anderen Segmentelektroden wurden auf Massepotential gelegt. Die eingetragenen Maße betragen:  $d = 250 \mu\text{m}$ ,  $h = 500 \mu\text{m}$ ,  $s = 125 \mu\text{m}$ ,  $w = 125 \mu\text{m}$  und  $g = 250 \mu\text{m}$ . Zwischen zwei benachbarten Segmentelektroden befindet sich eine Lücke von  $30 \mu\text{m}$  [Schulz (2009)].

### 3.3. Die Implantationsfalle

Auch bei der im Folgenden als *Implantationsfalle* bezeichneten Ionenfalle handelt es sich um eine segmentierte, lineare Paulfalle. Diese Falle wurde entwickelt, um mit hoher Präzision einzelne kalte Ionen in Festkörpern implantieren zu können [Meijer u. a. (2008), Schnitzler u. a. (2010), Jacob (2010), Ulm (2010), Kehlberger (2011)]. Die Messungen zu den Konfigurationsübergängen in Kapitel 5 wurden unter anderem an dieser Falle durchgeführt, da die Ionenkristalle in dieser Falle bei hohen Anisotropien wesentlich stabiler waren. Die *Flügel* der Falle sind im Gegensatz zur Mikrofalle in Kreuzgeometrie angeordnet, radialer und axialer Einschluss werden aber in gleicher Weise gewährleistet. Eine detaillierte Beschreibung dieser Falle sowie die Simulationen, die zur Konstruktion dieser Falle nötig waren, finden sich in [Kehlberger (2011)]. Abbildung 3.4

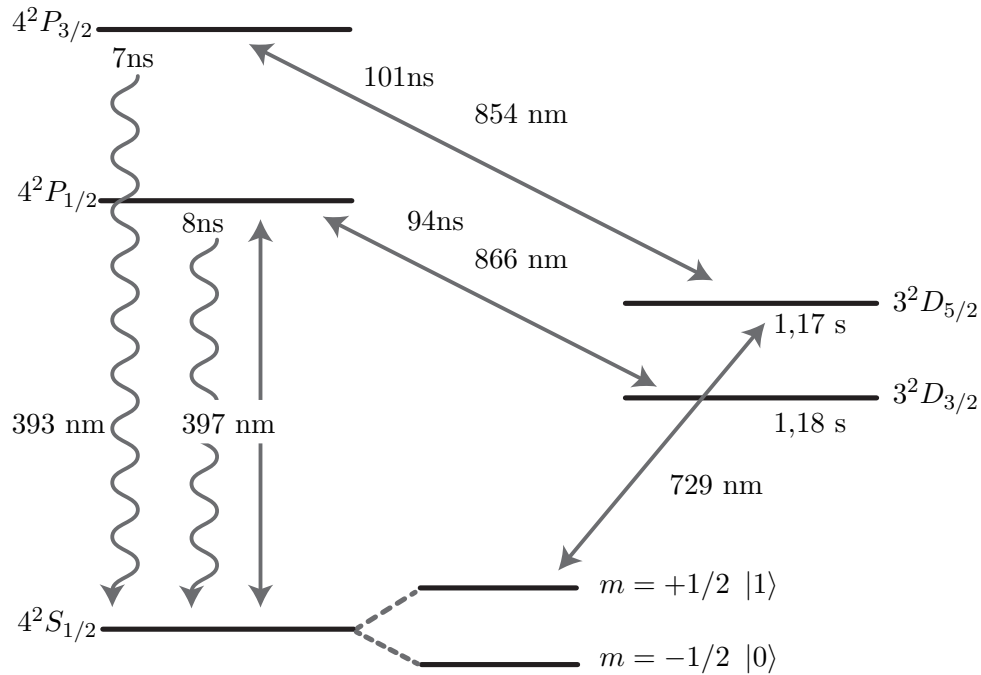
zeigt ein Foto dieser Falle. Die Fallenfrequenzen liegen im oberen Kilohertz-bis unteren Megahertz-Bereich.



**Abbildung 3.4.:** Die Implantationsfalle. Es ist jeweils nur ein DC- und RF-Flügel beschriftet, die jeweils gegenüberliegenden Flügel liegen auf dem gleichen Potential. Zur Extraktion von Ionen wird innerhalb eines kurzen Zeitintervalls Hochspannung an die Endkappen angelegt. Diese weisen in ihrer Mitte jeweils eine Bohrung auf, durch welche die Ionen gezielt aus der Falle gelangen können. In den hier durchgeführten Messungen wurden die Endkappen jedoch auf Massepotential gelegt und der axiale Einschluss allein mit den Segmenten der DC-Flügel erzeugt. Dazu wurde an eine Segmentelektrode in der Mitte der Falle eine negative Gleichspannung angelegt und an die zehn anderen Elektroden eine positive Gleichspannung. Die Segmentelektroden sind  $500\ \mu\text{m}$  lang,  $200\ \mu\text{m}$  breit und zwischen ihnen befindet sich jeweils eine Lücke von  $30\ \mu\text{m}$ .

### 3.4. Lasersysteme

In diesem Abschnitt werden kurz die verwendeten Lasersysteme vorgestellt. Das Term-schema in Abbildung 3.5 zeigt die Übergänge, welche von den Lasern in allen oben vorgestellten Fallen bei  $397\ \text{nm}$ ,  $854\ \text{nm}$  und  $866\ \text{nm}$  getrieben werden.



**Abbildung 3.5.:** Termschema des  $^{40}\text{Ca}^+$  Ions mit allen für das Experiment relevanten Zuständen, deren jeweiliger Lebensdauer sowie die verwendeten Übergänge.

Der Laser bei 729 nm dient der Spektroskopie und wurde ausschließlich für die Messungen in der Mikrofalle verwendet. Die Aufspaltung des  $4^1S_{1/2}$ -Niveau wird durch ein Magnetfeld realisiert und liegt ausschließlich in der Mikrofalle vor. Die Zustände  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  bezeichnen *Spin-Qubit-Zustände*. Experimente an diesen Zuständen wurden unter anderem durchgeführt in [Poschinger (2010), Ott (2012)].

- **Laser bei 397 nm: Dopplerkühlung, Ionendetektion und optisches Pumpen**

Dieser Laser dient primär zur Dopplerkühlung und treibt dazu den Übergang  $4^2S_{1/2} \leftrightarrow 4^2P_{1/2}$ . Optische Kühlverfahren werden erläutert in [Cohen-Tannoudji (1990)]. Der Laser kann auch noch einen kleinen Anteil von Licht bei 393 nm enthalten, daher kann sich das Ion auch im  $4^2P_{3/2}$ -Niveau befinden. Die Ionendetektion erfolgt anhand des beim Zerfall des kurzlebigen Zustands  $4^2P_{1/2}$  ausgesandten Fluoreszenzlichts. Für die Spektroskopie ist es nötig einen Teil des Strahls durch eine zusätzliche  $\lambda/4$ -Platte zu führen um  $\sigma^+$ -polarisiertes Licht zu erzeugen.

Durch optisches Pumpen kann mit diesem Licht ein ausgewähltes Zeemanniveau besetzt werden.

- **Laser bei 854 nm: Leeren des  $D_{5/2}$ -Niveaus**

Wie gerade erwähnt, kann mit geringer Wahrscheinlichkeit auch das  $4^2P_{3/2}$ -Niveau besetzt werden und von dort ein Übergang in das metastabile  $3^2D_{5/2}$ -Niveau stattfinden. Aus diesem Zustand pumpt ein Laser bei 854 nm das Ion zurück in den  $4^2P_{3/2}$ -Zustand von dem aus dann wieder Fluoreszenzlicht ausgesandt werden kann.

Wichtiger ist aber die Anwendung dieses Lasers in der Spektroskopie, da dort das  $3^2D_{5/2}$ -Niveau von dem Laser bei 729 nm besetzt wird. Der Zustand hat eine lange Lebensdauer von 1.17 s, diese lässt sich mit dem Laser bei 854 nm verkürzen und somit das Ion schneller wieder dem Auslesezyklus zuführen.

- **Laser bei 866 nm: Leeren des  $D_{3/2}$ -Niveaus**

Der Zustand  $4^2P_{1/2}$  kann, wie in Abbildung 3.5 erkennbar ist, auch in den metastabilen Zustand  $3^2D_{3/2}$  zerfallen, dessen Lebensdauer 1.18 s beträgt. Genau wie der Laser bei 854 nm dient dieser Laser dazu das Ion wieder in einen kurzlebigen Zustand zu transferieren, bei dessen Zerfall Fluoreszenzlicht ausgesandt wird. In diesem Fall handelt es sich dabei um den  $4^2P_{1/2}$ -Zustand.

- **Laser bei 729 nm: Treiben des Quadrupolübergangs**

Dieser Laser wird für die, in Abschnitt 3.5 beschriebene, Spektroskopie an Ionenkristallen verwendet. Er treibt den Quadrupolübergang  $4^2S_{1/2} \leftrightarrow 3^2D_{5/2}$ . Der Laser hat eine geringe Linienbreite von nur wenigen Kilohertz und ist somit in der Lage die Bewegungsseitenbänder der Ionen-Schwingungsmoden aufzulösen.

- **Laser bei 374 nm und 423 nm: Zweistufige Photoionisation von  $^{40}\text{Ca}$**

Durch elektrisches Erwärmen in einer Edeldstahlröhre verdampfen geringe Mengen Kalzium und gelangen in die Mitte der Ionenfalle. Der Laser bei 423 nm regt die Atome erst aus dem Grundzustand  $4^1S_0$  in das  $4^1P_1$ -Niveau an, anschließend werden sie von einem Laser bei 374 nm ionisiert [Gulde u. a. (2001)].

### 3.5. Spektroskopie an Ionenkristallen

Im Folgenden wird das Spektroskopieverfahren vorgestellt, mit dem die Messung der Schwingungsmoden an einem Drei-Ionen-Zickzack-Kristall vorgenommen wurde.

Eine detaillierte Beschreibung des Verfahrens findet sich in [Ziesel (2008), Poschinger (2010)].

#### 3.5.1. Detektionsverfahren

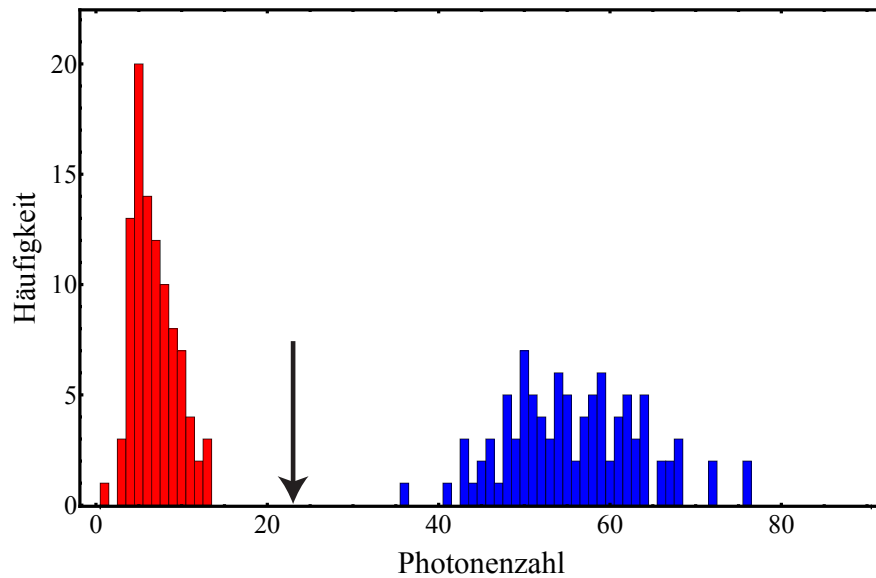
Das zustandsselektive Detektionsverfahren, welches hier angewandt wird, bezeichnet man als *electron shelving*. Für dieses Verfahren werden zwei Übergänge mit möglichst unterschiedlicher Streurrate benötigt. Im hier beschriebenen Fall sind das die Übergänge  $4^2S_{1/2} \leftrightarrow 4^2P_{1/2}$  (397 nm) und  $4^2S_{1/2} \leftrightarrow 3^2D_{5/2}$  (729 nm). Ersterer Übergang hat aufgrund seiner geringen Lebensdauer eine sehr hohe Streurrate. Daher lässt sich wie oben beschrieben das ausgesandte Fluoreszenzlicht mit einer CCD-Kamera detektieren. Befindet sich das Ion in einem der metastabilen  $3^2D$ -Zustände, beispielsweise nach einer Anregung durch den Laser bei 729 nm, so kann für die Lebensdauer dieser Zustände kein Photon gestreut werden und das Ion erscheint auf dem Kamerabild dunkel. Für die Spektroskopie ist es nun entscheidend zu wissen, wann das Ion in das  $3^2D$ -Niveau angeregt wurde, es bedarf also eines Schwellwerts der registrierten Photonen auf dem CCD-Bild, anhand dessen zwischen hell und dunkel entschieden werden kann. In einem ersten Schritt zur Bestimmung dieses Wertes wird dabei für einige Millisekunden die Fluoreszenz bei angeschalteten Lasern (397 nm, 854 nm und 866 nm) gemessen. Anschließend werden die *Rückpumpelaser* bei 854 nm und 866 nm ausgeschaltet und die Fluoreszenz registriert. Abbildung 3.6 zeigt ein aus dieser Vorgehensweise entstandenes Histogramm.

Die Diskriminierungsschwelle liegt dabei zwischen den beiden Verteilungen. Es ist noch anzumerken, dass nicht die Fluoreszenz auf dem kompletten Kamerabild registriert wird, sondern nur in einem Bereich in dem sich das Ion befindet.

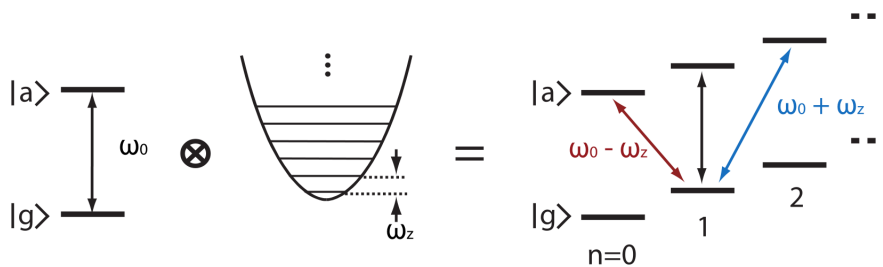
#### 3.5.2. Spektroskopie der Schwingungsmoden

Im Folgenden wird erläutert, wie mittels Frequenzverstimmung des Lasers bei 729 nm die Schwingungsmoden eines Ions bestimmt werden können. Abbildung 3.7 zeigt den Zusammenhang zwischen den Ionenzuständen und den Grundzuständen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators. Die *Fock-Zustände* dieses Oszillators korrespondieren zu Phononen der Ionen-Schwingungsmoden [Ziesel (2008)].

Ist die Frequenz des Lasers  $\omega_L$  so verstimmt, dass gilt  $\omega_L = \omega_0 - \omega_z$ , dann kann das Ion in den  $3^2D_{5/2}$ -Zustand angeregt werden. Dabei entspricht die Anregung der Vernichtung



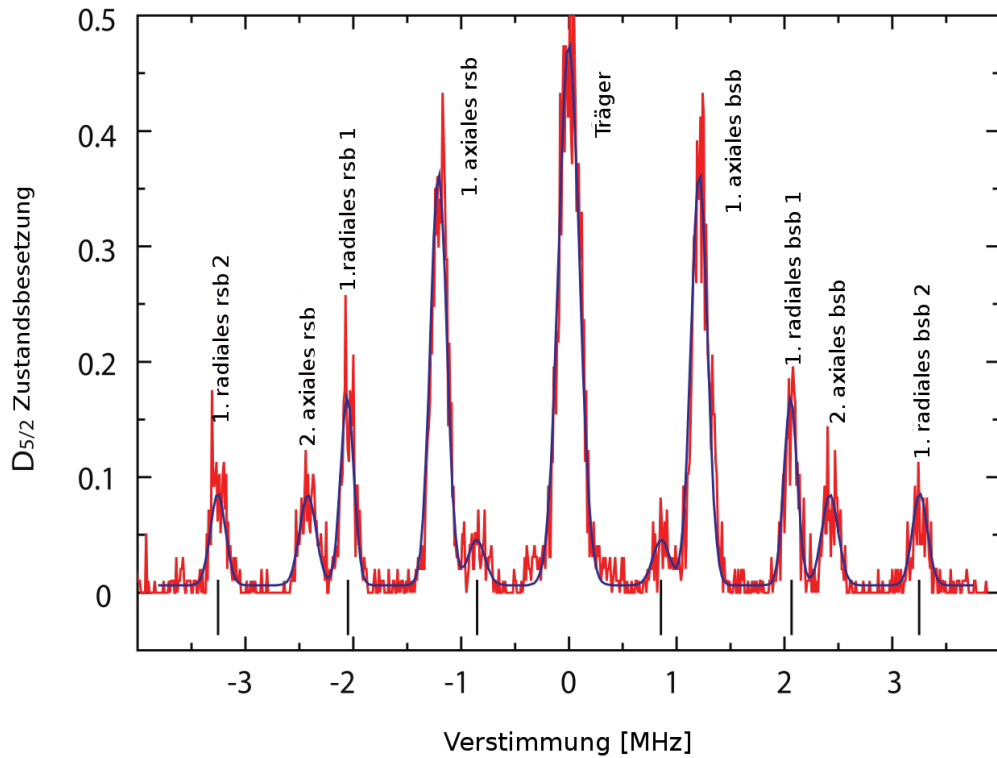
**Abbildung 3.6.:** Typisches Histogramm mit gezählten Photonen zur Schwellwertbestimmung. Die rote Verteilung steht für „Ion dunkel“, die blaue Verteilung dagegen für „Ion hell“, die Diskriminierungsschwelle ist schwarz eingezeichnet.



**Abbildung 3.7.:** Die Kombination aus atomaren Energieniveaus mit einem Übergang bei  $\omega_0$  und Zuständen des harmonischen Oszillators mit der Frequenz  $\omega_z$  ergibt eine Leiterstruktur. Diese ermöglicht eine Kopplung des Ionen- und des Schwingungszustandes über ein Laserfeld.  $|a\rangle$  und  $|g\rangle$  stehen hier für den angeregten Zustand und den Grundzustand [Ziesel (2008)].

eines Phonons der korrespondierenden Ionenschwingungsmode. Um diesen Übergang vom Grundzustand in den angeregten Zustand zu vollziehen, wird also die Energie eines Schwingungsquants zusätzlich zur Laserenergie verwendet. Anregungen dieser Art werden als rote Seitenbänder bezeichnet. Die Auslese der Zustandsbesetzung des  $3^2D_{5/2}$  Zustands erfolgt mit dem oben beschriebenen electron-shelving Verfahren. Für ein einzelnes Ion ergeben sich Spektren der Art wie in Abbildung 3.8.

Links und rechts vom *Träger* ergeben sich in gleichen Abständen Seitenbänder, die den



**Abbildung 3.8.:** Spektrum eines einzelnen Ions auf dem Quadrupolübergang. Die Abkürzung rsb/bsb steht dabei für rotes/blauges Seitenband [Poschinger (2010)].

jeweiligen Schwingungsmoden zugeordnet werden können.

In diesem Spektrum sind alle drei Fallenfrequenzen  $\omega_x$  (2. radiales Seitenband),  $\omega_y$  (1. radiales Seitenband) und  $\omega_z$  (1. axiales Seitenband) gut zu erkennen. Ebenfalls sind auch die Vielfachen der Schwingungsmoden im Spektrum sichtbar. Die Auflösung in den in dieser Arbeit aufgenommenen Spektren beträgt etwa 1 kHz, bedingt durch die geringe Linienbreite des Lasers bei 729 nm.

Abbildung 3.9 zeigt eine typische Pulssequenz, wie sie zur Spektroskopie verwendet wird.

Zu Beginn der Sequenz wird durch ausreichend langes Dopplerkühlen sichergestellt, dass das Ion sich in einem thermischen Zustand im Grundzustand  $4^2S_{1/2}$  befindet. Nach dieser Phase wird mittels eines  $\sigma^+$ -Pulses mit zirkular polarisiertem Licht bei 397 nm ein ausgewähltes Zeemanniveau besetzt. Darauf folgt die Spektroskopiesequenz, während der mit Hilfe des Lasers bei 729 nm das  $3^2D_{5/2}$ -Niveau besetzt werden kann. Die Länge dieses Pulses ist variabel und wurde auch während der Messungen in dieser Arbeit zur Optimierung der Spektren angepasst. Mittels electron-shelving erfolgt nach



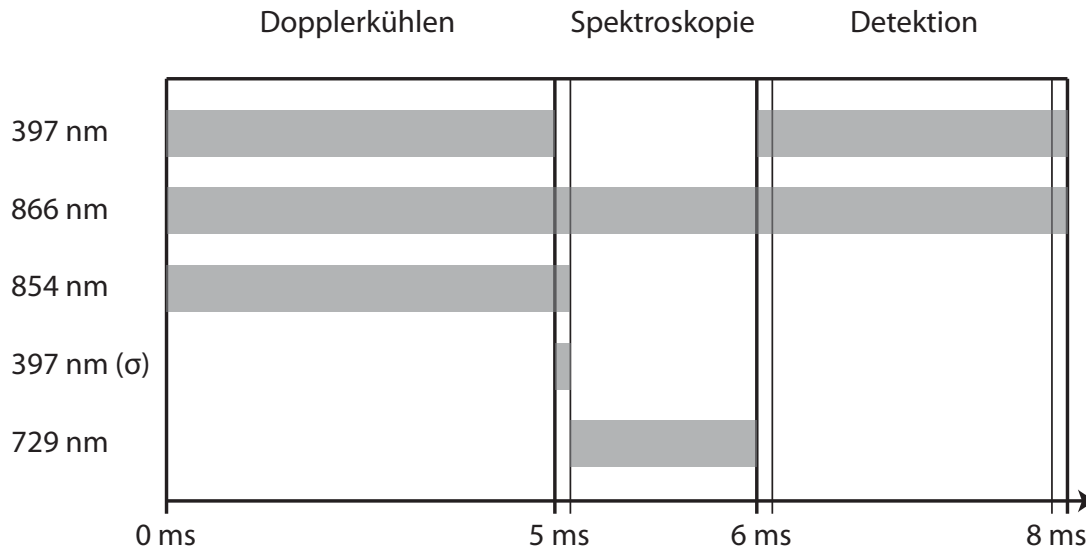


Abbildung 3.9.: Typische Pulssequenz der Spektroskopie.

der Spektroskopiesequenz die zustandsselektive Auslese. Um zu verhindern, dass das  $3^2D_{5/2}$ -Niveau frühzeitig geleert wird, muss während der Detektionsphase der Laser bei 854 nm ausgeschaltet bleiben.

### 3.6. Beobachtungssysteme

In allen drei Ionenfallen dienen CCD-Kameras zur Beobachtung der Ionen. Im Folgenden wird nur das Beobachtungssystem der Stabfalle gesondert behandelt, da dieses wegen der Ionenpositionsmessungen von besonderer Bedeutung ist und die Systeme der anderen beiden Fallen fast identisch sind. Die hier verwendete CCD-Kamera der Firma Andor<sup>1</sup> besteht aus einem CCD-Chip mit  $128 \times 128$  jeweils  $24 \mu\text{m}^2$  großen Pixeln. Mittels eines Peltier-Elements wird der Chip auf circa  $-70^\circ\text{C}$  abgekühlt, um thermisch erzeugtes Hintergrundrauschen möglichst klein zu halten. Die Belichtungszeit der Kamera wurde während der Messungen, abhängig vom ausgesandten Fluoreszenzlicht der Ionen, angepasst und lag stets bei etwa 20 bis 30 ms. Die Verwendung des Experimentsteuerungsprogramm erlaubt eine kontinuierliche Aufnahme und anschließende Speicherung von Rohdaten der Kamera. Vor der Kamera befindet sich ein Bandpass<sup>2</sup>, der

<sup>1</sup>Andor Technology, iXon3 DU-860E-CS0-UVB

<sup>2</sup>Semrock, single-band bandpass filter, FF01-395/11-25

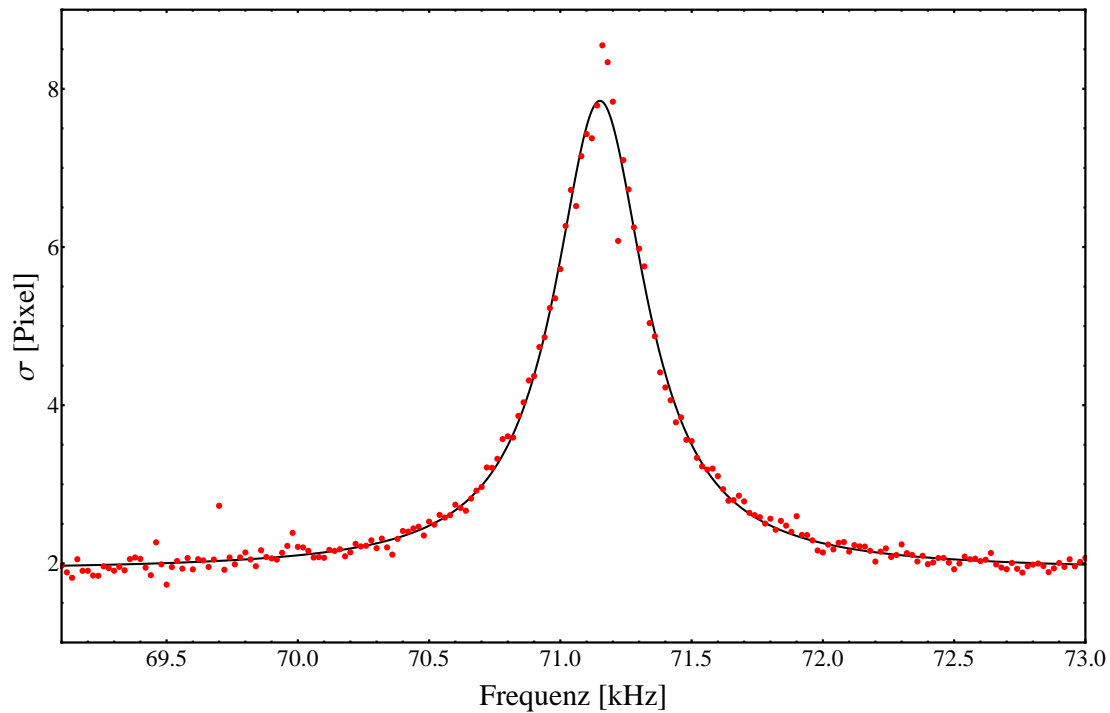
eine hohe Transmission im Wellenlängenbereich des Ionen-Fluoreszenzlichts aufweist, hingegen andere Wellenlängenbereiche reflektiert oder absorbiert. Dies verbessert das Signal-Rausch-Verhältnis deutlich, da sonst auch andere Laser und diverse Lichtquellen im Labor von der Kamera registriert werden.

Zur Vergrößerung der Ionen befindet sich vor der Kamera ein aus fünf Linsen bestehendes Objektiv mit einer Brennweite von  $f = 66.8$  mm und einer numerischen Apertur von 0.26. Eine genauere Beschreibung des Linsensystems findet sich in [Schnitzler (2010)]. Experimentell wurde in dieser Arbeit ermittelt, dass ein  $24 \mu\text{m}^2$  großes Pixel des CCD-Chips durch das Linsensystem auf  $\approx 2.02 \mu\text{m}^2$  abgebildet wird (siehe Kapitel 4), was einer Vergrößerung um den Faktor zwölf entspricht.

## 3.7. Anregung von Schwingungsmoden

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie in der Stabfalle und der Implantationsfalle die Fallenfrequenzen  $\omega_i$  bestimmt werden konnten. Die Messung beruht hierbei auf der Messung der Resonanzfrequenz der Schwerpunktsmode (siehe Abschnitt 2.2.2). Auch andere Schwingungsmoden, wie zum Beispiel die Atmungsmode, können mit der in diesem Abschnitt beschriebenen Vorgehensweise angeregt werden. In der Stabfalle wurde zur Anregung der Moden mit Hilfe eines Frequenzgenerators eine Wechselspannung auf einen der DC-Stäbe gelegt, in der Implantationsfalle hingegen auf eine der Endkappen. Die Amplitude der Wechselspannung liegt dabei im Millivolt-bis Volt-Bereich. Trifft die Frequenz dieser Wechselspannung beispielsweise die Resonanzfrequenz der axialen Schwerpunktsmode, so schwingt das Ion in axialer Richtung mit der Anregungsfrequenz. Da die Bewegung während dieser Schwingung zu schnell ist, um von der Belichtungszeit der Kamera aufgelöst werden zu können, erscheint das Ion in axialer Richtung verbreitert auf dem Kamerabild. Im Rahmen dieser Arbeit wurde unter anderem ein Algorithmus für das Experimentsteuerungsprogramm entwickelt, der in Echtzeit Resonanzkurven aufnehmen kann, wie sie in Abbildung 3.10 abgebildet ist.

Da es sich bei der Ionenbewegung um eine Oszillation in einem annähernd harmonischen Potential handelt, nimmt die Resonanzkurve einen Lorentz-förmigen Verlauf an. Zur Erstellung dieser Kurve wird zu jeder Frequenz mit Hilfe eines eindimensionalen Gauß-Fits die Breite des oszillierenden Ions aus der Projektion des Kamerabildes gewonnen. Die Standardabweichung  $\sigma$  der Gauß-Fits ist in der Abbildung an der Ordinate aufgetragen. Dieser Vorgang wird nach jeder Frequenziteration etwa 20 mal durchgeführt um eine



**Abbildung 3.10.:** Resonanzkurve der Schwerpunktsmode eines Ionenkristalls. Die schwarze Linie stellt einen Lorentz-Fit der Messwerte dar.

bessere Statistik zu erhalten. Eine Kurve aus etwa 200 Frequenziterationen kann somit in ungefähr drei Minuten erstellt werden. Die in dieser Arbeit gemessenen Frequenzen wurden jedoch größtenteils manuell gemessen, da Veränderungen in den Fallenspannungen mitunter eine schleichende Veränderung der Frequenzen über die Zeit verursachen und somit die Genauigkeit der Frequenzmessung limitieren. Der vorgestellte Algorithmus stellt allerdings eine gute Möglichkeit zur exakten Frequenzmessung bei gemischten Ionenkristallen dar [Ulm (2010)], zu welcher er aktuell mitunter verwendet wird.

### 3. *Essentielle experimentelle Techniken*

---

# 4

## Ionenpositionen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

Inhalt dieses Kapitels ist die Darstellung der numerischen Ionenpositionsrechnung sowie der Vergleich mit experimentell ermittelten Gleichgewichtspositionen. Außerdem werden grundlegende geometrische Charakteristika von Zickzack-Ionenkristallen analysiert. Die Messungen, die in diesem Kapitel präsentiert werden, wurden ausschließlich in der in Abschnitt 3.1 beschriebenen Ionenfalle durchgeführt und zeigen sehr gute Übereinstimmung mit der Theorie. Das in Abschnitt 3.6 dargestellte Beobachtungssystem diente hierbei zur Bestimmung der Ionenpositionen.

Abschnitt 4.1 stellt den Algorithmus dar, der benutzt wurde um die theoretischen Ionenpositionen zu ermitteln. Außerdem werden geometrische Maße zur Charakterisierung der Kristalle eingeführt, sowie eine Untersuchung der Symmetrien in planaren Zickzack-Ionenkristallen vorgenommen. Abschnitt 4.3 stellt die experimentelle Vorgehensweise zur sub-pixelgenauen Ermittlung der Ionenpositionen vor. In Abschnitt 4.4 werden die ersten Messergebnisse der Positionsmessungen an Zickzack-Kristallen verschiedener Ionenzahl präsentiert. Die Abschnitte 4.5 und 4.6 zeigen Messreihen an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall, während derer die Anisotropie der Ionenfalle systematisch durch annähernd isolierte Variation des axialen beziehungsweise radialen Einschlusses verändert wurde. Die gemeinsame Darstellung der Ergebnisse dieser beiden Messreihen findet sich in Abschnitt 4.7. Abschließend befindet sich eine Fehlerdiskussion der möglichen Fehlerquellen und deren Auswirkung auf die Positionsmessungen in Abschnitt 4.8.

## 4.1. Numerische Berechnung von Ionenkristallen

Die Berechnungen der Ionenpositionen vereinfacht sich durch die in Abschnitt 4.2 dargestellte Aufspaltung der radialen Fallenfrequenzen. Der Kristall liegt somit in einer Ebene und das dreidimensionale Problem reduziert sich auf ein Zweidimensionales. Daher entscheiden ausschließlich  $\omega_x$  oder  $\omega_y$  und  $\omega_z$ , die experimentell bestimmt werden, über die Position der Ionen im Kristall. Im Folgenden sei nun  $\omega_y$  stets die niedrigere der beiden radialen Fallenfrequenzen, der Kristall liegt also in der  $y$ - $z$ -Ebene.

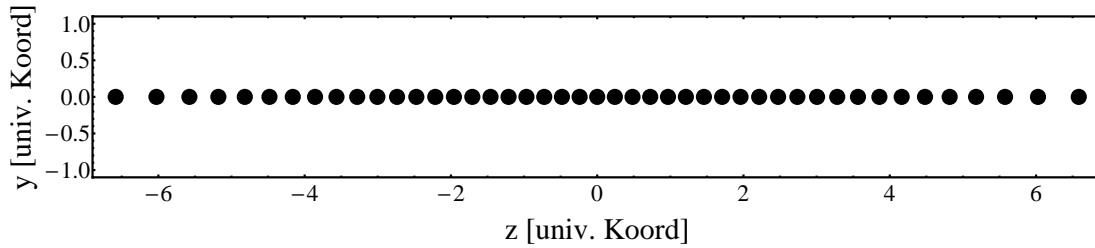
Wie bereits in Abschnitt 2.2.1 erwähnt, ist die analytische Berechnung der Gleichgewichts-Ionenpositionen für mehrere Dimensionen und größere Ionenzahlen als  $N = 3$  nicht möglich, da sich Gleichung 2.16 in diesen Parameterbereichen nur numerisch lösen lässt. Der im Folgenden vorgestellte Algorithmus löst jeweils, für verschiedene Initialparameter, in mehreren Schleifendurchläufen die Gleichung numerisch und ermittelt aus allen Lösungen das kleinste Potential (siehe Gleichung 2.12), um so das globale Potentialminimum zu finden.

Die Lösung der Gleichung wurde mittels der Mathematica<sup>1</sup> Routine *FindRoot* ermöglicht, welche das Nullstellenproblem mit Hilfe des Newton-Verfahrens numerisch löst. Diese Routine benötigt als Initialparameter vermutete Ionenpositionen  $u_{init}$  um gegen die Lösung konvergieren zu können. Die nötige Iterationstiefe zum Erreichen der Konvergenz sinkt mit der Nähe der Initialpositionen  $u_{init}$  zu den energetisch günstigsten Gleichgewichtspositionen. Da die Gleichung wegen lokaler Potentialminima nicht immer in einem Schritt zufriedenstellend gelöst werden kann, wird der Befehl in einer Schleife etwa 100 mal ausgeführt. Die Anzahl der nötigen Durchläufe wird dabei maßgeblich durch die Ionenzahl bestimmt. Für die meisten Berechnungen reicht es aus, die Initialpositionen  $u_{init}$  entlang der  $z$ -Achse äquidistant aufzureihen und in der  $y$ -Richtung bei jedem Schleifendurchlauf in einem kleinen Intervall von Zufallszahlen auszulenken. Diese zufällige Auslenkung ist nötig, da bei gleichen Startparametern  $u_{init}$  sonst immer die gleiche, möglicherweise falsche, Lösung ausgegeben wird. In jedem Schleifendurchlauf wird das zu der dort ermittelten Lösung gehörige Potential gespeichert. Nachdem alle Schleifendurchläufe beendet sind, werden die Ionenpositionen ausgegeben, für die sich das kleinste Potential ergeben hat.

Der vollständige Quelltext, mit dem die Positionsberechnungen erfolgten, ist in Anhang A.3(A) abgebildet. Ein Ergebnis einer solchen Rechnung für 45 Ionen ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

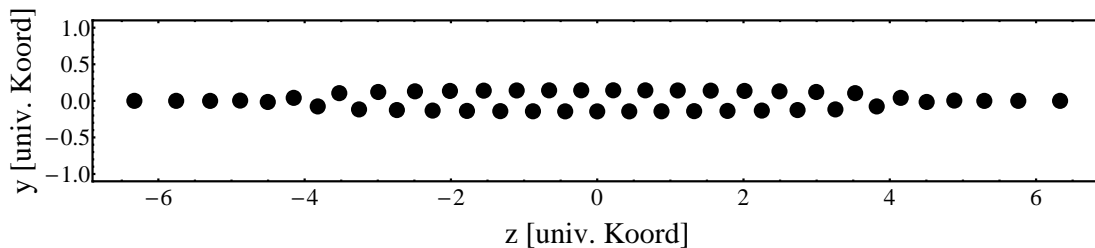
---

<sup>1</sup>Kommerzielles Algebra Programm (<http://www.wolfram.com>)



**Abbildung 4.1.:** Berechneter linearer 45-Ionenkristall in universellen, dimensionslosen Koordinaten  $u_{n,i}$  mit  $i \in \{y, z\}$ .

Die Ionen liegen hier wegen einer sehr kleinen Anisotropie von  $\alpha = 10^{-6}$  in einer linearen Konfiguration vor. An den Rändern des Kristalls sind die Abstände zwischen den Ionen größer, da die äußeren Ionen nur Coulombabstoßungen nach außen unterliegen, die inneren Ionen aber Abstoßung aus beiden Richtungen erfahren. Erhöht man nun die Anisotropie auf  $\alpha = 10^{-2}$ , so findet ein Übergang in die Zickzack-Struktur statt, wie sie Abbildung 4.2 zeigt.

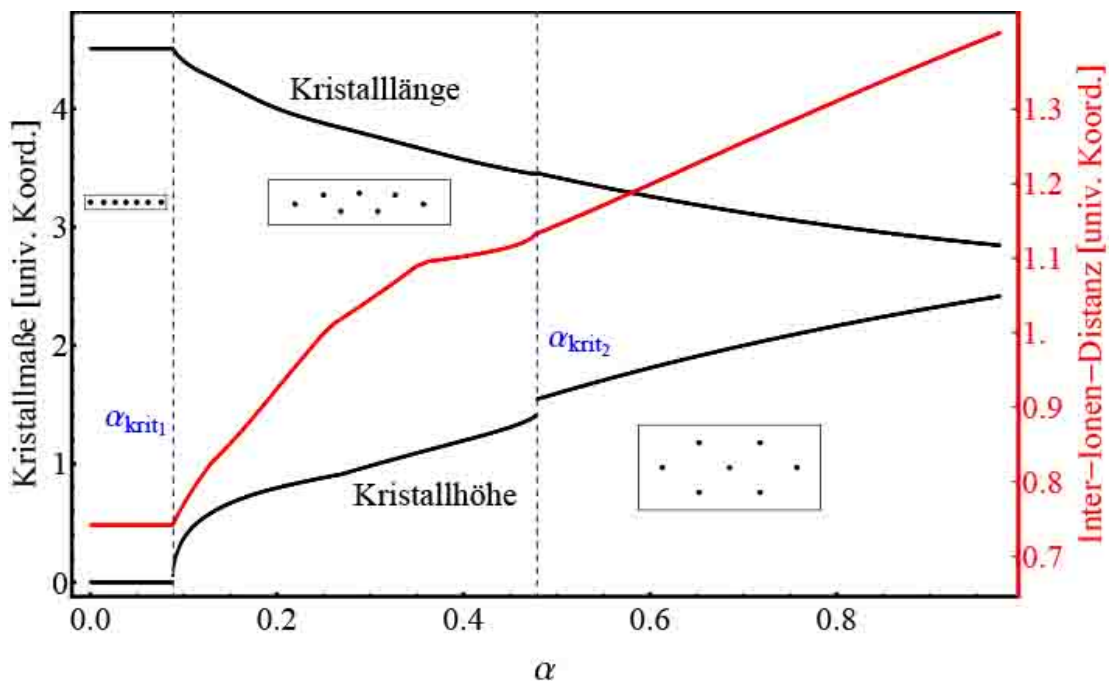


**Abbildung 4.2.:** Berechneter 45-Ionen-Zickzack-Kristall.

Die Ausdehnung des Kristalls in  $z$ -Richtung hat abgenommen, die in  $y$ -Richtung hingegen zugenommen. In der Mitte besteht der Kristall aus zwei Ebenen, an den Rändern liegt nahezu eine lineare Konfiguration vor. Für größere Anisotropien oder größere Ionenzahlen bilden sich mehr Ebenen aus, dies ist aber für diesen Kristall nicht dargestellt, da es sehr aufwendig zu berechnen ist. In Abschnitt 4.4 allerdings findet sich ein gemessener 17-Ionen-Zickzack-Kristall, der aus drei Ebenen besteht. Bei einer festen Ionenzahl steigt mit der Anisotropie der Aufwand für die Berechnung der Positionen stark an, da sich in diesen komplexen Kristallgeometrien die Anzahl der lokalen Potentialminima erhöht.

#### 4.1.1. Ionenpositionen und Kristallmaße in Abhängigkeit der Anisotropie

Für Zickzack-Kristalle gibt es im Wesentlichen drei interessante geometrische Maße. Zum einen die Ausdehnung des Kristalls in  $y$ - und  $z$ -Richtung, im Folgenden als Kristallhöhe und Kristalllänge bezeichnet, zum anderen die mittlere Inter-Ionen-Distanz. Diese errechnet sich aus dem Mittelwert des Abstands eines jeden Ions zu seinem nächsten Nachbarn. Für drei Ionen finden sich Berechnungen, unter anderem zu den Kristallausdehnungen, in [Fishman u. a. (2008)]. Da in dieser Arbeit die meisten Messungen an Sieben-Ionen-Zickzack-Kristallen durchgeführt wurden, zeigt Abbildung 4.3 den Verlauf der gerade benannten Kristallmaße als Funktion der Anisotropie  $\alpha$ .



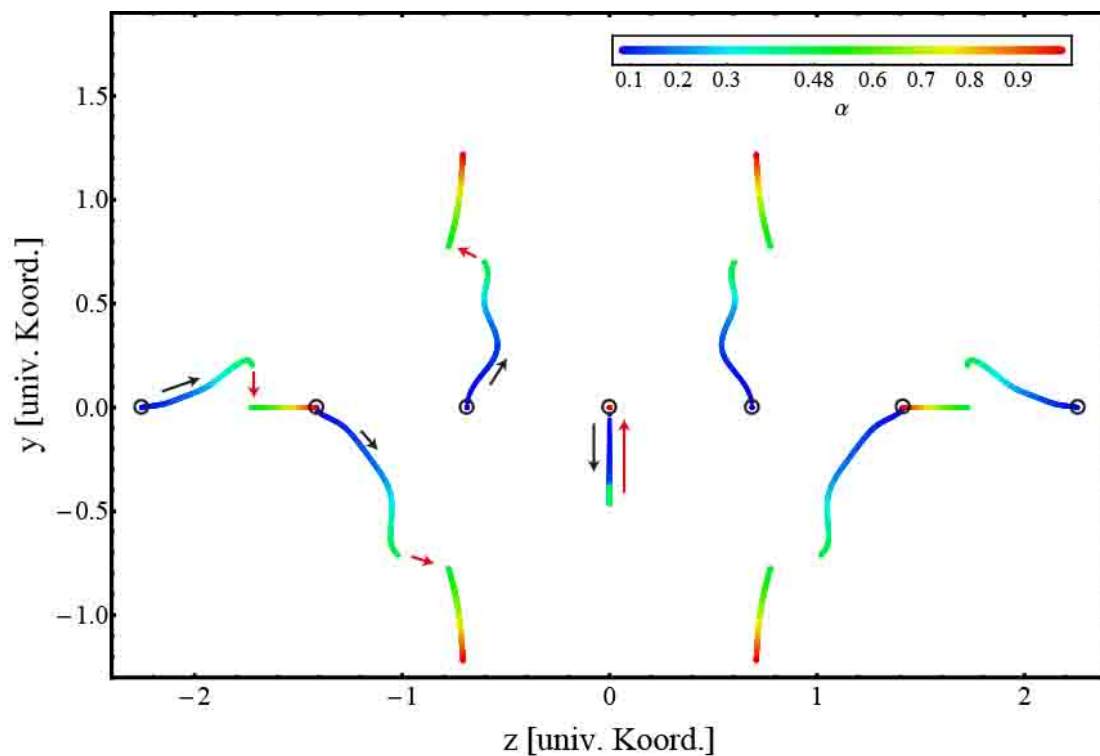
**Abbildung 4.3.:** Berechnete Kristallmaße eines Sieben-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$ . In schwarzen Kästen sind die in den jeweiligen Anisotropiebereichen vorliegenden Kristallgeometrien eingezeichnet. Die gestrichelte Linie bei  $\alpha_{\text{krit}_1} = 0.09$  zeigt den Phasenübergang von der linearen in die Zickzack-Konfiguration an, die gestrichelte Linie bei  $\alpha_{\text{krit}_2} = 0.48$  stellt einen weiteren abrupten Konfigurationswechsel dar.

Der Verlauf der Kurven ist relativ gleichmäßig und folgt im Wesentlichen der Intuition: Die Länge des Kristalls nimmt im Zickzack-Bereich mit steigender Anisotropie ab, die Höhe zu. Kurz nach dem Übergang in die Zickzack-Struktur ändern sich die Kristallmaße am stärksten. Betrachtet man die in den Kästen dargestellten Kristallstrukturen,



so ist auch einsichtig, warum die Inter-Ionen-Distanz mit der Anisotropie steigt. Im Bereich  $\alpha = 0 \dots 1$  finden zwei abrupte Konfigurationsänderungen im Sieben-Ionen-Kristall statt, die erste ist der Phasenübergang in die Zickzack-Konfiguration bei  $\alpha_{\text{krit}_1} = 0.09$ . Dieser Übergang ist in allen drei Kurven sehr deutlich erkennbar. Eine zweite Strukturänderung findet bei  $\alpha_{\text{krit}_2} = 0.48$  statt, hier bildet sich eine dritte Kristallebene aus. In der Kurve der Kristallhöhe ist dieser Übergang deutlich erkennbar, in der Kurve der Kristalllänge dagegen findet sich nur ein kleiner Sprung und die Inter-Ionen-Distanz zeigt unmittelbar vor und nach dem Übergang einen deutlich anderen Verlauf.

Ein besseres Verständnis der Veränderung der Kristallmaße erhält man durch die Betrachtung der Ionenpositionen bei verschiedenen Anisotropien, wie es Abbildung 4.4 zeigt.



**Abbildung 4.4.:** Berechnete Ionenpositionen eines Sieben-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$ . Zur Erstellung des Graphen wurden 2000 Positionsrechnungen durchgeführt und mit farbig kodierten Punkten dargestellt. Die Leserichtung ist so zu verstehen, dass der Verlauf der Ionen von niedriger zu hoher Anisotropie betrachtet wird, wie es die Pfeile auf der linken Seite des Kristalls anzeigen. Schwarze Kreise markieren die Position der Ionen in der linearen Konfiguration.

Auffällig ist hier, dass die Ionenpositionen oft keinen geraden, sondern alternierend ge-

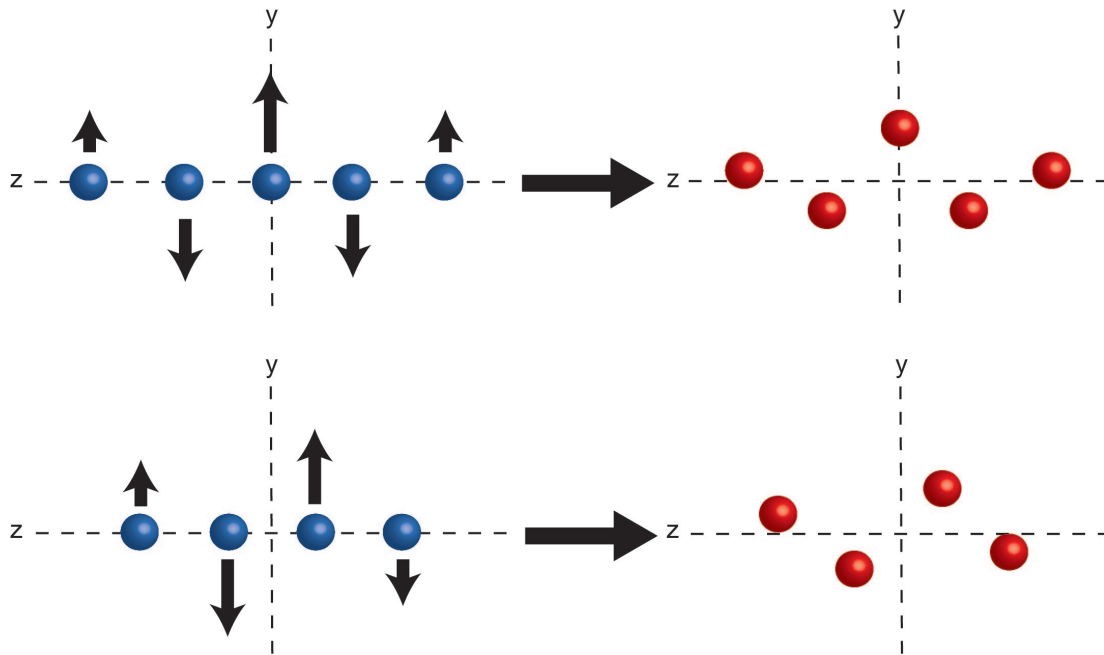
krümmten Bahnen folgen. Dies ändert sich nach dem abrupten Konfigurationswechsel bei  $\alpha_{\text{krit}_2} = 0.48$ , der mit roten Pfeilen markiert ist. Eine besondere Rolle nimmt hier das mittlere Ion im Kristall ein, dessen Position zuerst nach unten wandert, um anschließend bei  $\alpha_{\text{krit}_2}$  wieder exakt an die Ausgangsposition zu springen. Interessant ist auch, dass die beiden äußersten Ionen für  $\alpha \approx 1$  dort sitzen, wo die beiden inneren Nachbarn bei  $\alpha \approx 0$  saßen. Nach diesem sprunghaften Übergang verlaufen alle Ionenpositionen regelmäßiger als vorher. Dies liefert eine Erklärung dafür, weshalb nach dem Übergang die Inter-Ionen-Distanz wesentlich gleichmäßiger verläuft (siehe Abbildung 4.4). Der Anisotropiebereich jenseits von  $\alpha_{\text{krit}_2}$  ist somit im Sieben-Ionenkristall besser zum Einstellen einer gewünschten Inter-Ionen-Distanz geeignet. Der Kristall gewinnt bei dieser abrupten Strukturänderung stark an Höhe, genau wie es im vorigen Graph zu erkennen ist.

#### 4.1.2. Symmetrien in Zickzack-Ionenkristallen

Aufgrund der im Fallenzentrum bezüglich aller Fallachsen annähernd symmetrischen Potentiale in der Paulfalle bilden sich für Zickzack-Ionenkristalle gewisse Symmetrien aus, die in diesem Abschnitt erläutert werden. Die im Folgenden erläuterten Symmetrien gelten für die Anisotropiebereiche  $\alpha_{\text{krit}_1} \leq \alpha < \alpha_{\text{krit}_2}$ . Für  $\alpha \geq \alpha_{\text{krit}_2}$  bilden sich für viele Kristalle komplexe Strukturen aus, welche in dieser Arbeit nicht näher untersucht werden. Für jeden in der  $y$ - $z$ -Ebene liegenden Ionenkristall existieren vier energetisch äquivalente Konfigurationen, die Spiegelungen der Kristalle an den  $y$ - und  $z$ -Achsen entsprechen. Von diesen vier Konfigurationen sind aber sowohl für gerade als auch für ungerade Ionenzahlen in den Kristallen aufgrund von Spiegelsymmetrien jeweils nur zwei Konfigurationen unterscheidbar. Die hier dargestellten Symmetrien wurden für alle in dieser Arbeit vermessenen und berechneten Kristalle beobachtet und sind mit hoher Wahrscheinlichkeit für alle zweidimensionalen Ionenkristalle gültig.

Für Zickzack-Kristalle lässt sich im hier untersuchten Anisotropiebereich feststellen, dass Kristalle ungerader Ionenzahl spiegelsymmetrisch bezüglich der zur größten Fallenfrequenz korrespondierenden Fallachse sind. Kristalle gerader Ionenzahl jedoch sind punktsymmetrisch bezüglich des Koordinatenursprungs beziehungsweise des Fallenzentrums. Eine anschauliche Erklärung für diese unterschiedlichen Symmetrieeigenschaften liefert die Betrachtung der Auslenkung aus der linearen Konfiguration für Kristalle gerader und ungerader Ionenzahl. Abbildung 4.5 zeigt dies schematisch für fünf beziehungsweise vier Ionen, die zur niedrigsten Fallenfrequenz korrespondierende Fallachse

ist hierbei die  $z$ -Achse.



**Abbildung 4.5.:** Skizzierte Darstellung des Übergangs von der linearen in die Zickzack-Konfiguration für einen Vier- und Fünf-Ionenkristall.

Der entscheidende Unterschied ist, dass sich das mittlere Ion in Kristallen ungerader Ionenanzahl jeweils exakt im Fallenzentrum befindet. Bei geraden Ionenanzahlen hingegen liegt das Fallenzentrum stets genau zwischen zwei Ionen. Daraus resultieren unmittelbar die Symmetrien der Auslenkungen in radialer Richtung. Die Skizze stellt außerdem dar, dass die Stärke der radialen Auslenkung symmetrisch von innen nach außen in  $\pm z$ -Richtung abnimmt. Die Ursache dafür ist, dass die Stärke des Pseudopotentials in radialer Richtung mit zunehmendem axialem Abstand zum Fallenzentrum zunimmt.

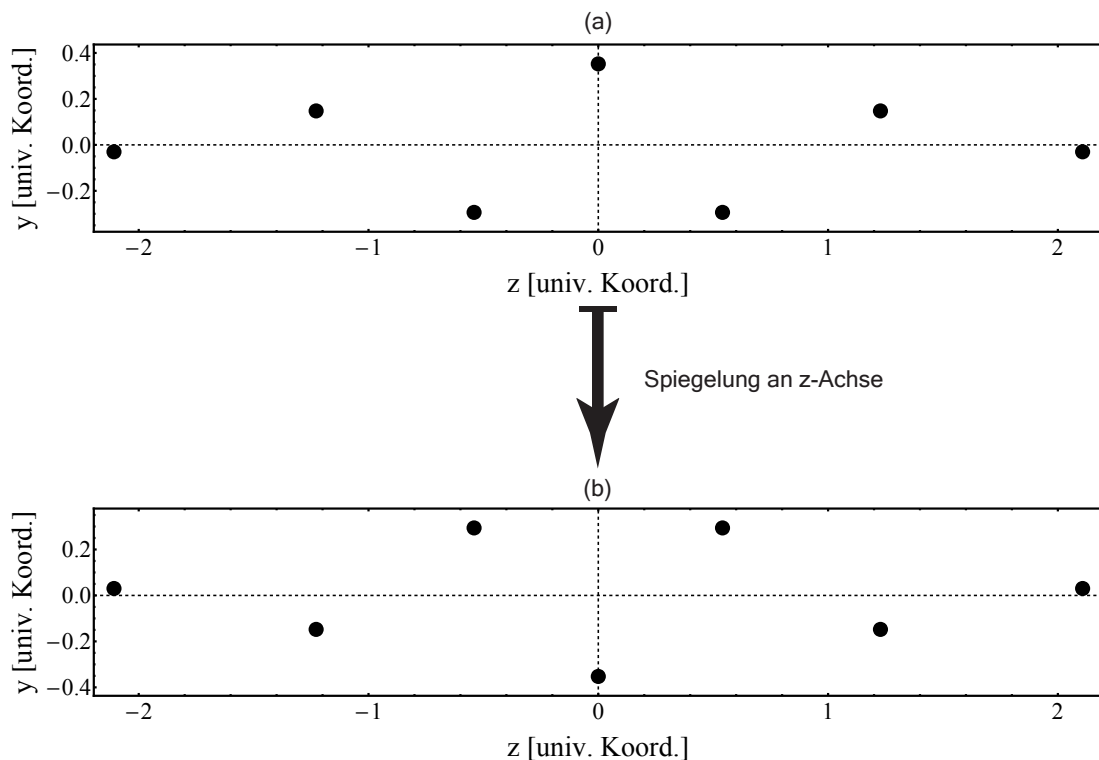
Für den im Folgenden dargestellten Ionenkristall wurden die Frequenzen  $\omega_y/2\pi = 313.6 \text{ kHz}$  und  $\omega_z/2\pi = 119.3 \text{ kHz}$  experimentell ermittelt. Es ergibt sich somit  $\alpha = 0.144$ . Die Tabelle 4.1 zeigt die für diese Anisotropie berechneten Ionenpositionen in universellen dimensionslosen Koordinaten. Dabei werden die Ionen, wie in der gesamten Arbeit, nach ansteigenden  $z$ -Werten nummeriert.

Anhand der ermittelten Positionen  $u_{n,i}$  ist ersichtlich, dass der Zickzack-Kristall, wie oben erläutert, spiegelsymmetrisch bezüglich der  $y$ -Achse ist. Abbildung 4.6 zeigt den berechneten Kristall sowie die zweite energetisch äquivalente unterscheidbare Konfiguration.

#### 4. Ionenpositionen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

$n$	1	2	3	4	5	6	7
$u_{n,y}$	-0.03	0.15	-0.29	0.35	-0.29	0.15	-0.03
$u_{n,z}$	-2.11	-1.22	-0.54	0.00	0.54	1.22	2.11

**Tabelle 4.1.:** Berechnete Gleichgewichtspositionen eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls für  $\alpha = 0.144$ . Es bezeichnet  $u_{n,y}$  die universelle, dimensionslose  $y$ -Koordinate des  $n$ -ten Ions.



**Abbildung 4.6.:** (a) Berechneter Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall. (b) Zu (a) energetisch äquivalente Konfiguration, entstanden durch Spiegelung an der  $z$ -Achse.

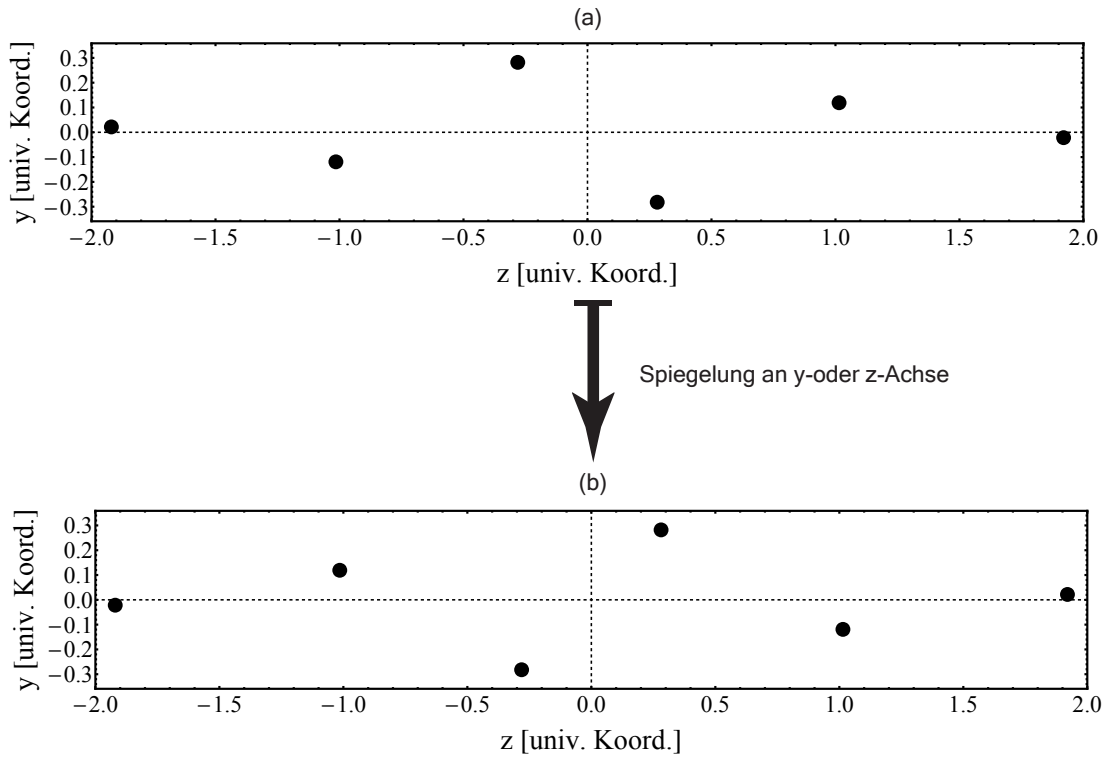
Welche dieser beiden Konfigurationen vom oben beschriebenen Algorithmus ausgegeben wird, ist dabei dem Zufall überlassen, da sie zu einem identischen Potential gehören und der Algorithmus die Lösung mit dem kleinsten Potential sucht.

Für Kristalle gerader Ionenzahl hingegen liegt, wie oben erläutert, keine Symmetrie bezüglich der Spiegelung an nur einer Achse vor, sondern eine Punktsymmetrie bezüglich des Koordinatenursprungs. Tabelle 4.2 zeigt die numerisch bestimmten Positionen für einen Sechs-Ionenkristall, zur Berechnung dienten die gleichen Frequenzen wie oben.

$n$	1	2	3	4	5	6
$u_{n,y}$	0.02	-0.12	0.28	-0.28	0.12	-0.02
$u_{n,z}$	-1.92	-1.01	-0.28	0.28	1.01	1.92

**Tabelle 4.2.:** Berechnete Gleichgewichtspositionen eines Sechs-Ionen-Zickzack-Kristalls für  $\alpha = 0.144$ .

Anhand der ermittelten Werte ist ersichtlich, dass es sich hierbei um eine punktsymmetrische Struktur handelt. Eine Spiegelung an der  $y$ -oder  $z$ -Achse hingegen führt hier auf eine andere unterscheidbare Konfiguration wie sie in Abbildung 4.7 dargestellt ist.

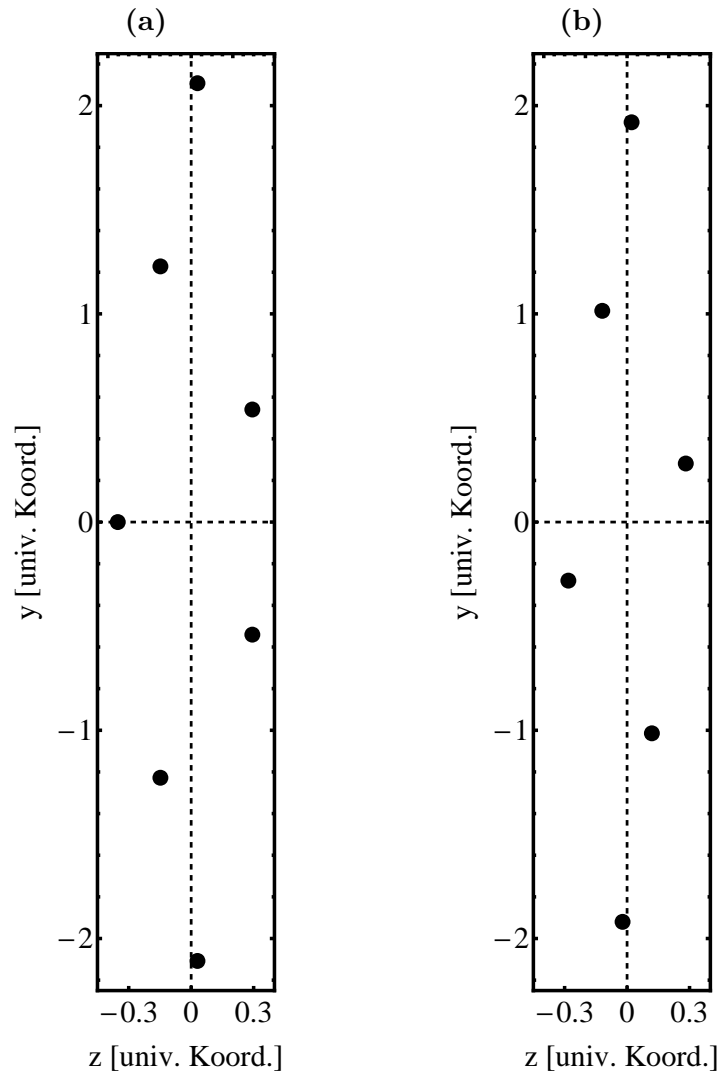


**Abbildung 4.7.:** (a) Berechneter Sechs-Ionen-Zickzack-Kristall. (b) Zu (a) energetisch äquivalenter Kristall, entstanden durch Spiegelung an der  $z$ -Achse.

Im Experiment ist sowohl für Kristalle gerader Ionenzahl als auch ungerader Ionenzahl ein häufiger Konfigurationswechsel der Kristalle von einer in die andere energetisch äquivalente Konfiguration beobachtbar.

Sobald die  $y$ -Achse zur Fallenachse der kleinsten Fallenfrequenz wird, sind Kristalle ungerader Ionenzahl spiegelsymmetrisch bezüglich der  $z$ -Achse, wie es in Abbildung 4.8a

zu sehen ist.



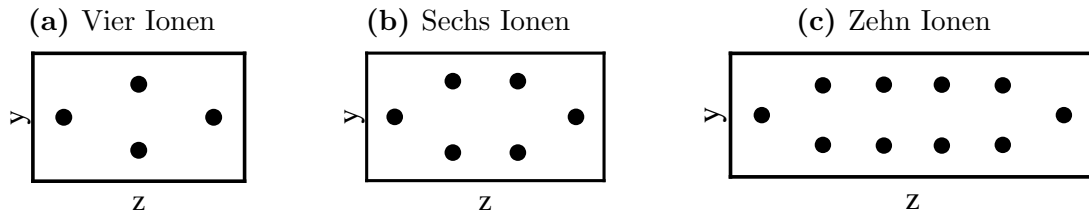
**Abbildung 4.8.:** (a) Berechneter vertikaler, bezüglich der  $z$ -Achse spiegelsymmetrischer, Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall. (b) Berechneter vertikaler Sechs-Ionen-Zickzack-Kristall. Der Kristall ist, wie auch in der horizontalen Ausrichtung, punktsymmetrisch bezüglich des Koordinatenursprungs.

Die Kristalle wurden hier mit der inversen Anisotropie  $\alpha = 1/0.144 = 6.944$  im Vergleich zu vorher berechnet, was einer Drehung aller Potentiale in der  $y$ - $z$ -Ebene um  $90^\circ$  entspricht. Folglich drehen sich auch die Kristalle um  $90^\circ$ .

Zusätzliche Symmetrien treten für Kristalle gerader Ionenzahl im Anisotropiebereich  $\alpha_{\text{sym}_1} \leq \alpha < \alpha_{\text{sym}_2}$  auf. Dabei gilt für die hier untersuchten Ionenzahlen

$$\alpha_{\text{krit}_1} < \alpha_{\text{sym}_1} < \alpha_{\text{sym}_2} < \alpha_{\text{krit}_2}. \quad (4.1)$$

Im gerade angeführtem Anisotropiebereich  $\alpha$  sind die Kristalle symmetrisch bezüglich Spiegelungen an allen Achsen. Für vier, sechs und zehn Ionen ist dies schematisch dargestellt in Abbildung 4.9.



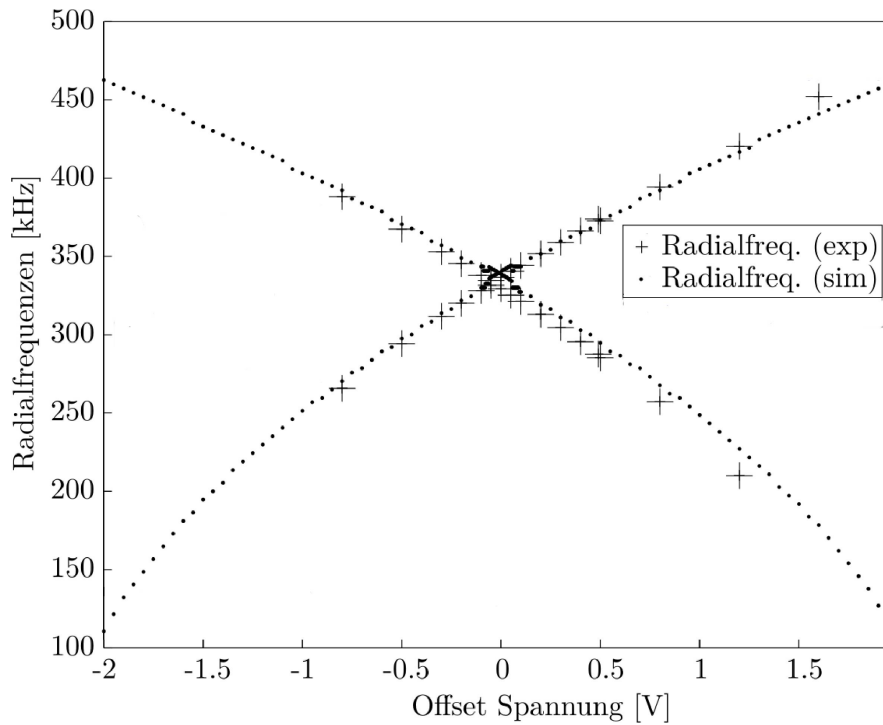
**Abbildung 4.9.:** Berechnete sehr symmetrische Kristalle gerader Ionenzahl. (a) Vier-Ionen-Kristall bei  $\alpha = 0.4$ . (b) Sechs-Ionen-Kristall bei  $\alpha = 0.5$ . (c) Zehn-Ionen-Kristall bei  $\alpha = 0.24$ .

Diese Symmetrien sind experimentell von Bedeutung, da in solchen Konfigurationen alle vier energetisch äquivalenten Konfigurationen identisch sind und folglich kein schneller Konfigurationswechsel stattfindet. Die Kristalle sind somit sehr ruhig und die Ionen gut einzeln adressierbar.

Für  $\alpha < \alpha_{\text{sym}_1}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2} \leq \alpha < \alpha_{\text{krit}_2}$  weisen Kristalle gerader Ionenzahl, wie oben dargestellt, Punktsymmetrie auf. Kristalle ungerader Ionenzahl erhalten dagegen keine zusätzlichen Symmetrien im Bereich  $\alpha_{\text{krit}_1} \leq \alpha < \alpha_{\text{krit}_2}$ . Es ist zu bemerken, dass in allen hier durchgeführten Berechnungen sprunghafte Konfigurationsänderungen bei  $\alpha_{\text{krit}_2}$  nur für Ionenzahlen über fünf gefunden werden konnten. Experimentelle und theoretische Untersuchungen zu den Konfigurationsübergängen finden sich in Kapitel 5. Der Anisotropiebereich  $\alpha \geq \alpha_{\text{krit}_2}$  zeigt für größere Kristalle viele sprunghafte Konfigurations- und Symmetrieänderungen. Es ließ sich bisher keine eindeutige Systematik der Symmetrien in diesem Bereich finden. Jedoch treten hier auch für Ionenkristalle ungerader Ionenzahl Kristalle auf, die sehr symmetrisch sind. Ein solcher Kristall wurde in dieser Arbeit vermessen, es handelt sich dabei um den 17-Ionen-Kristall in Abschnitt 4.4.

## 4.2. Zickzack-Kristalle in der Stabfalle

Um in der Stabfalle planare Zickzack-Kristalle zu erhalten, muss die Entartung der radialen Fallenfrequenzen aufgehoben werden, wobei das Verhältnis zwischen der axialen und unteren radialen Fallenfrequenz den Wert  $\sqrt{\alpha_{\text{krit}1}}$  überschreiten muss. Dies geschieht mittels der bereits beschriebenen Offset-Spannung. Dem radialen Pseudopotential wird so ein zeitlich konstantes Quadrupol-Potential überlagert. Abbildung 4.10 zeigt die Fallenfrequenzen in Abhängigkeit der angelegten Offset-Spannung.

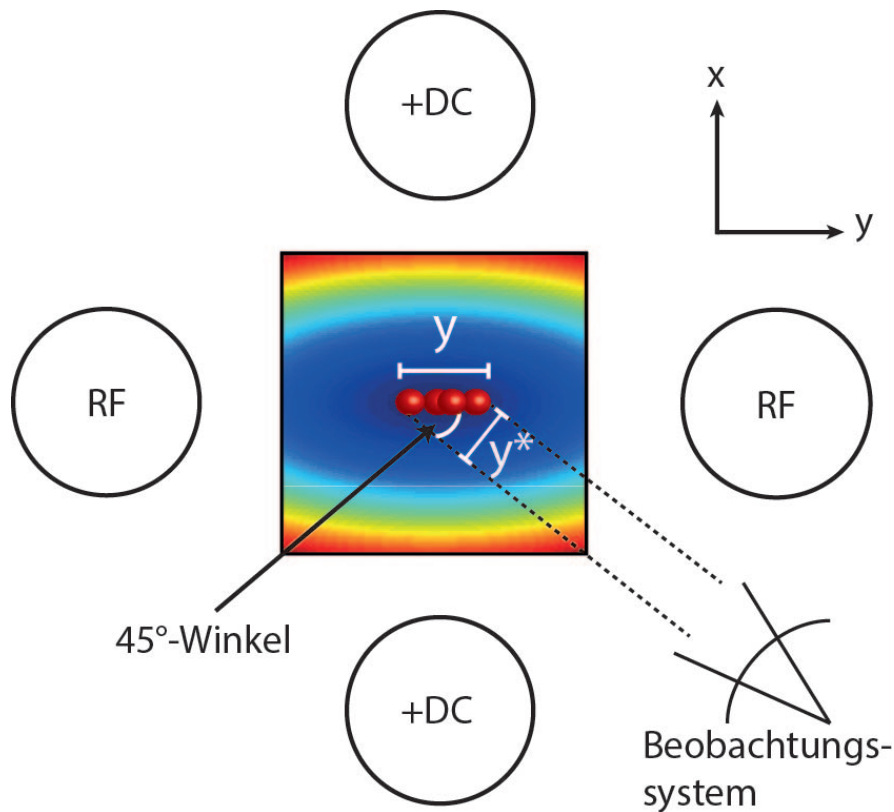


**Abbildung 4.10.:** Gemessene und simulierte Aufhebung der Entartung der radialen Fallenfrequenzen in der Stabfalle [Ott (2012)].

Die Messungen und Simulationen entstammen [Ott (2012)], wobei Erstere mit Hilfe der in Abschnitt 3.7 beschriebenen Schwingungsanregung über ein Wechselspannungsfeld durchgeführt wurden.

Für die korrekte Positionsbestimmung der Ionen in Zickzack-Kristallen ist es essentiell zu wissen, wie die Kristalle in der Stabfalle liegen und unter welchem Winkel sie beobachtet werden. In Abbildung 4.11 ist zu erkennen, dass der Zickzack-Kristall unter einem Winkel von  $45^\circ$  betrachtet wird.





**Abbildung 4.11.:** Blick aus axialer Richtung auf die Lage eines Zickzack-Ionenkristalls (rote Kugeln) im Zentrum der Stabfalle. Die schwarzen Kreise stellen die Stabelektroden dar. Eine positive Offset-Spannung auf den DC-Elektroden verändert das radiale Pseudopotential. Die Simulation dieses Potentials wurde bei einer Gleichspannung von 1.55 V auf den DC-Elektroden durchgeführt und entstammt [Ott (2012)]. Die Stärke des Potentials nimmt von blau über türkis bis hin zu rot, zu. Die Größenverhältnisse in der Skizze sind nicht maßstabsgetreu.

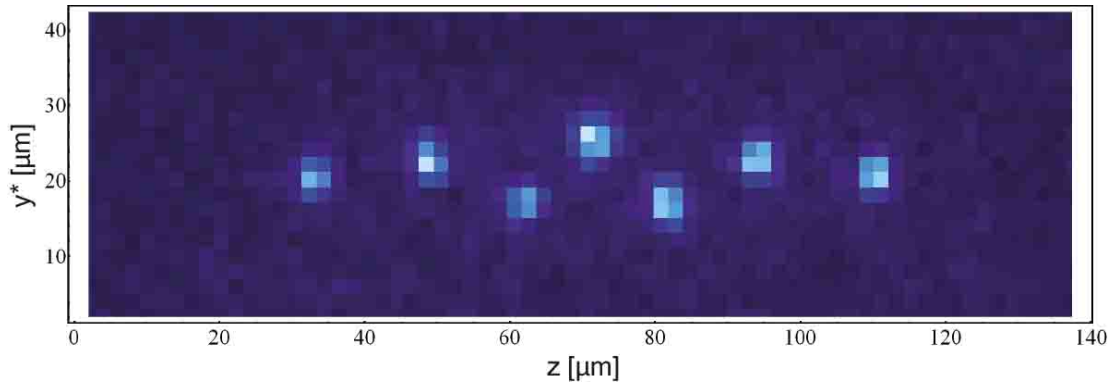
Bei positiver Offset-Spannung liegt der Kristall in der  $y$ - $z$ -Ebene, bei negativer Offset-Spannung hingegen in der  $x$ - $z$ -Ebene. Für die in der Bildebene beobachtbare Ausdehnung des Kristalls in  $y$ -Richtung  $y^*$  ergibt sich:

$$y^* = y \sin(45^\circ) = y/\sqrt{2}. \quad (4.2)$$

Liegt der Kristall in der  $x$ - $z$ -Ebene, so dreht sich nur das Vorzeichen des Winkels um, der Faktor  $1/\sqrt{2}$  hingegen bleibt bestehen.

### 4.3. Experimentelle Ermittlung der Ionenpositionen

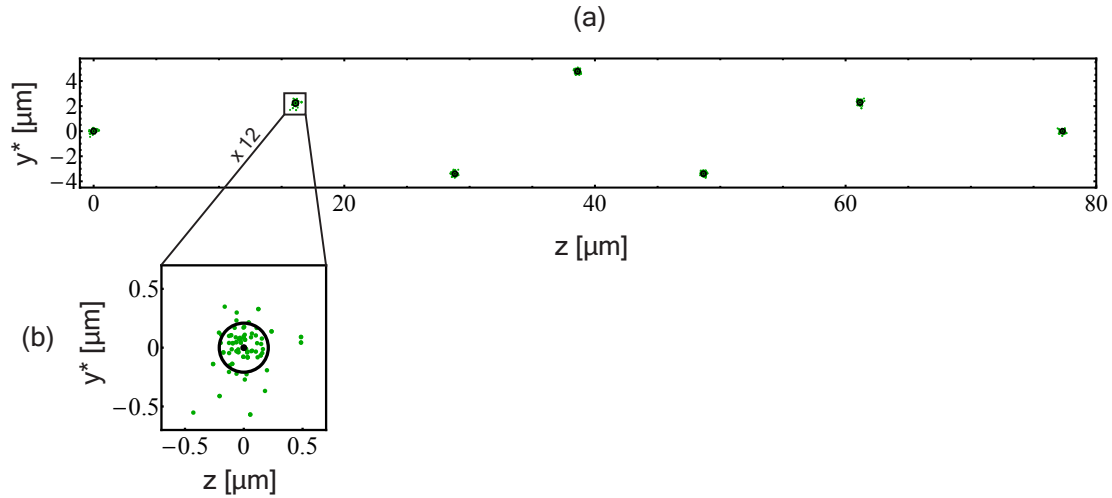
Wie in Abschnitt 3.6 erläutert wurde, dient eine CCD-Kamera zur Beobachtung der Ionen. Das Kamerabild eines solchen aus sieben Ionen bestehenden Zickzack-Kristalls ist in Abbildung 4.12 dargestellt.



**Abbildung 4.12.:** CCD-Bild der Fluoreszenz eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls.

Hierbei handelt es sich um den bereits in Abschnitt 4.1.2 berechneten Kristall bei  $\omega_y/2\pi = 313.6(3.0)$  kHz und  $\omega_z/2\pi = 119.3(4)$  kHz. Aus den Unsicherheiten in den ermittelten Fallenfrequenzen ergibt sich eine Unsicherheit in der Anisotropie, welche mittels Gauß'scher Fehlerfortpflanzung berechnet wird. Er ergibt sich hier somit  $\alpha = 0.144(3)$ . Da das Bild der Kamera in Pixelkoordinaten vorliegt, erfolgte eine Umrechnung in Mikrometer-Skalierung, welche im folgenden Abschnitt beschrieben wird. Die Kristalle in diesem Kapitel werden, zwecks besserer Übersichtlichkeit, immer als in der  $y$ - $z$ -Ebene liegend angenommen. Anhand des Vorzeichens der DC-Offset-Spannung ist aber jeweils leicht erkennbar, ob der Kristall in der  $x$ - $z$ -Ebene oder der  $y$ - $z$ -Ebene liegt (siehe Abschnitt 4.2). Um die Positionen der Ionen auf den CCD-Bildern zu ermitteln, wird auf jede im CCD-Bild erkennbare Ionenposition ein zweidimensionaler Gauß-Fit angewandt. Jeweils etwa 100 Einzelbilder wurden für jeden Kristall aufgenommen um eine höhere Statistik zu erhalten. Abbildung 4.13 zeigt die Ergebnisse der Gauß-Fits von 92 Einzelbildern des Kristalls.

Die Standardabweichung, welche anhand der Streuung der Einzelergebnisse um den Mittelwert berechnet wurde, liegt hier durchschnittlich bei  $0.20 \mu\text{m}$  pro Ion. In dem vergrößert dargestellten Bereich liegt die Standardabweichung bei  $0.23 \mu\text{m}$ . Dieser Wert repräsentiert in dieser Einzelmessung die größte Streuung um den Mittelwert.



**Abbildung 4.13.:** (a) Einzelergebnisse von 92 zweidimensionalen Gauß-Fits pro Ion an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall. Ein grüner Punkt steht jeweils für ein Einzelergebnis eines Gauß-Fits, schwarze Punkte sind die aus den Einzelergebnissen gewonnenen Mittelwerte. Der Radius der schwarzen Kreise repräsentiert die Standardabweichung. (b) Vergrößerung des Positionsbereichs eines Ions mit verhältnismäßig hoher Streuung.

#### 4.3.1. Geometrische Transformationen zur Vergleichbarkeit von Experiment und Theorie

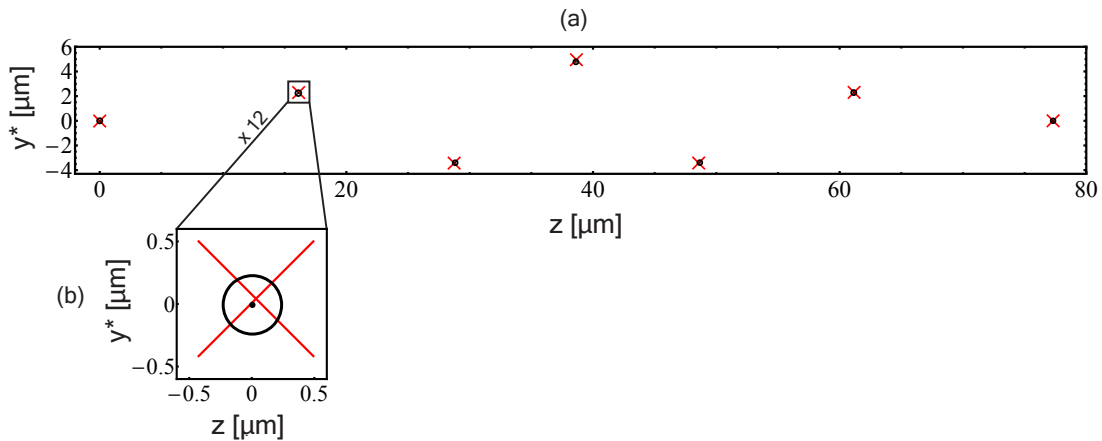
Will man nun die Mittelwerte dieser experimentell ermittelten Ionenpositionen vergleichbar mit den in Abschnitt 4.1 berechneten Positionen machen, so sind geometrische Transformationen zwischen den gemessenen Positionen und den berechneten Positionen nötig. Dies liegt daran, dass die Mittelwerte der Positionsmessungen in Pixelkoordinaten vorliegen, die berechneten Positionen jedoch in den universellen, dimensionslosen  $u$ -Koordinaten (siehe Kapitel 2). Es gibt mehrere mögliche Transformationen, die zielführend sind. Hier wird aber nur eine Vorgehensweise vorgestellt, die sich als sinnvoll erwiesen hat. Da man an der Darstellung der Positionen in Mikrometer-Skalierung interessiert ist, ist es hilfreich, dass mittels Gleichung 2.15 eine direkte Umrechnungsmöglichkeit zwischen  $u$ -Koordinaten und Mikrometer-Skalierung besteht. Dazu ist allerdings die genaue Kenntnis der axialen Fallenfrequenz  $\omega_z$  nötig, welche, wie in Abschnitt 3.7 beschrieben, gemessen wurde. Somit ist es zielführend, eine zentrische Streckung von Pixelkoordinaten auf die universellen Koordinaten vorzunehmen um anschließend von diesen Koordinaten auf Mikrometer-Skalierung umzurechnen. Alternativ ist es möglich, in einer Eichmessung an einem linearen Kristall die Vergrößerung des Beobachtungssystems zu bestimmen und somit eine direkte Umrechnung von Pixelkoordinaten in

Mikrometer-Skalierung zu erhalten. Diese Vorgehensweise setzt aber voraus, dass vor jeder Einzelmessung eine solche Eichmessung durchgeführt wird, da kleine Potentialänderungen und nötige Fokus-Justagen zu einer anderen Position des Kristalls in der Falle und somit zu einer abweichenden Vergrößerung führen. Die eingangs beschriebene Umrechnung über die axiale Fallenfrequenz hat sich als pragmatischer und exakter erwiesen, in Abschnitt 4.8 findet sich eine quantitative Analyse dieser Problematik.

Die im Weiteren erläuterten Transformationen führen, ohne Veränderung der Größenverhältnisse in den Kristallen, auf einen Überlapp des linken und rechten Ions von *Theorie-* und *Messwertkristall*. Diese Überlagerung der Kristalle resultiert in einer besonders geringen Gesamtabweichung zwischen berechneten und gemessenen Positionen. In einem ersten Schritt werden, zwecks eines gemeinsamen Koordinatenursprungs, sowohl Messwertkristall als auch Theoriekristall so verschoben, dass das am weitesten links liegende Ion in  $y$ - und  $z$ -Koordinate auf Null liegt. Anschließend wird der Streckfaktor  $k = L_{\text{Theo.}}/L_{\text{Mess.}}$  berechnet, wobei  $L$  jeweils die Distanz zwischen dem linken und rechten Ende des Kristalls bezeichnet. Die Multiplikation der Koordinaten des Messwertkristalls mit  $k$  liefert nun oben genannte zentrische Streckung, welche alle Größenverhältnisse im Kristall unverändert lässt. Nach dieser Transformation besitzen die Kristalle zwar die gleiche Gesamtlänge, jedoch müssen die am weitesten rechts liegenden Ionen noch nicht zwingend aufeinander liegen. Die Ursache dafür sind kleine geometrische Unvollkommenheiten im Beobachtungssystem sowie der Falle, welche bewirken, dass der Kristall nicht perfekt waagrecht im CCD-Bild liegt. Eine Drehung des Messwertkristalls um den Koordinatenursprung, sprich das äußerste linke Ion, liefert nun perfekten Überlapp zwischen linkem und rechtem Ende der Kristalle.

Die  $y$ -Koordinaten der mittleren Ionen im Messwertkristall hingegen sind, nach Ausführung aller eben genannten Transformationen, wesentlich kleiner als die der mittleren Ionen im Theoriekristall. Der in Kapitel 4.2 beschriebene  $45^\circ$ -Winkel ist hierfür die Ursache. Um nun eine möglichst unverfälschte bildliche Darstellung des hier angewandten Verfahrens zur Positionsbestimmung zu erreichen, werden die  $y$ -Koordinaten aller Ionen im Theoriekristall mit dem Faktor  $1/\sqrt{2}$  multipliziert. Somit sind sämtliche auf Mikrometer skalierten gemeinsamen Darstellungen von Messwerten und Berechnungen in diesem Kapitel um diesen Faktor in  $y$ -Richtung gestaucht. Bei den Berechnungen der Abstände in den Kristallen allerdings werden die Ergebnisse um den Faktor bereinigt. Daher wird beispielsweise als Unsicherheit in  $z$ -Richtung die mittlere Standardabweichung festgelegt und als Unsicherheit in  $y$ -Richtung die mittlere Standardabweichung, multipliziert mit  $\sqrt{2}$ .

Anschließend erfolgt mit Hilfe des Längenparameters  $l$  die Umrechnung in Mikrometer-Skalierung. Nach der letzten Transformation liegt ein sehr guter Gesamtüberlapp zwischen Messwertkristall und Theoriekristall vor. Um diesen Überlapp weiter zu verbessern, wird in einem letzten Schritt ein Algorithmus angewandt, der die Gesamtabweichung von Messwerten und Berechnungen verringert. Der Algorithmus verschiebt dabei den Theoriekristall zuerst in kleinen Schritten in  $z$ -Richtung zu einer Position, an der die Gesamtabweichung minimal wird. Diese Position wird nun an den Teil weitergegeben, der in gleicher Weise in  $y$ -Richtung verfährt. Eine anschließende inkrementelle Drehung verringert zusätzlich die Abweichung. Dieses Verfahren wiederholt sich etwa 200 mal und liefert für einige Kristalle eine gute Verbesserung des Überlapps. Das Ergebnis all dieser geometrischen Operationen ist in Abbildung 4.14 dargestellt, es handelt sich dabei um den Kristall aus Abbildung 4.13.



**Abbildung 4.14.:** (a) Gemessene und berechnete Ionenpositionen nach Durchführung aller geometrischen Transformationen. Rote Kreuze markieren die berechneten Positionen, schwarze Punkte die gemessenen Positionen und schwarze Kreise stellen die Standardabweichung der Positionsermittlung dar. (b) Vergrößerung des Positionsereichs eines Ions. Die gemessene Position liegt sehr nah bei der Berechneten.

Die experimentell ermittelte Position weicht hier bei dem vergrößert dargestellten Ion um nur 75 nm von der berechneten Position ab. Für den gesamten Kristall beträgt die mittlere Abweichung 84 nm pro Ion. Es wird bewusst auf eine getrennte Betrachtung von  $y$ - und  $z$ -Abweichung verzichtet, da das oben beschriebene Verfahren zur Herstellung eines Überlapps willkürlich ist. Es wäre genau so gut möglich einen perfekten Überlapp für die äußersten radialen, statt die äußersten axialen Ionen herzustellen, was zu größeren axialen Abweichungen führen würde. In dem hier gewählten Verfahren sind tendenziell die radialen Abweichungen höher als die axialen.

Die gemessene Kristallhöhe betrug hier  $11.57(58) \mu\text{m}$  und weicht somit um  $-2.49\%$  von der berechneten Höhe von  $11.86 \mu\text{m}$  ab. Da es sich bei der Ermittlung der Kristallhöhe um eine Einzelmessung zwischen zwei Ionen in  $y$ -Richtung handelt, wurde der Fehler aus der doppelten mittleren Standardabweichung in  $y$ -Richtung von  $0.29 \mu\text{m}$  berechnet und ist somit relativ groß. Die Unsicherheit in der Anisotropie  $\alpha$  wird hier in allen Fehlerbetrachtungen vernachlässigt und erst in Abschnitt 4.7 miteinbezogen.

Für die mittlere Inter-Ionen-Distanz findet sich der Messwert  $15.40(12) \mu\text{m}$ , was nur einer  $-0.50\%$ igen Abweichung, vom berechneten Wert von  $15.47 \mu\text{m}$ , entspricht. Die Berechnung des Fehlers erfolgt hierbei mittels Bestimmung des absoluten Größtfehlers, da sich eine Positionsabweichung eines einzelnen Ions auf mindestens zwei ermittelte Ionenabstände auswirkt. Die Länge des Kristalls entsprach hier, wie auch bei sämtlichen anderen Messungen, exakt dem berechneten Wert von  $77.31 \mu\text{m}$ , da auf diese Weise der Überlapp hergestellt wurde.

### 4.4. Zickzack-Ionenkristalle verschiedener Ionenzahl

Im Folgenden werden eine Reihe von Positionsmessungen an Zickzack-Ionenkristallen verschiedener Ionenzahlen bei systematisch variierten Anisotropien präsentiert. Allen diesen Messungen ist die Amplitude der Antriebsfrequenz mit  $U_{\text{RF}} = 300(15) V_{\text{pp}}$ <sup>1</sup> gemein. In diesem Abschnitt wird eine Messreihe an Zickzack-Kristallen verschiedener Ionenzahl vorgestellt, die sich im annähernd gleichen Potential befinden. Dabei handelt es sich um aus fünf bis elf sowie 17 Ionen bestehende Kristalle.

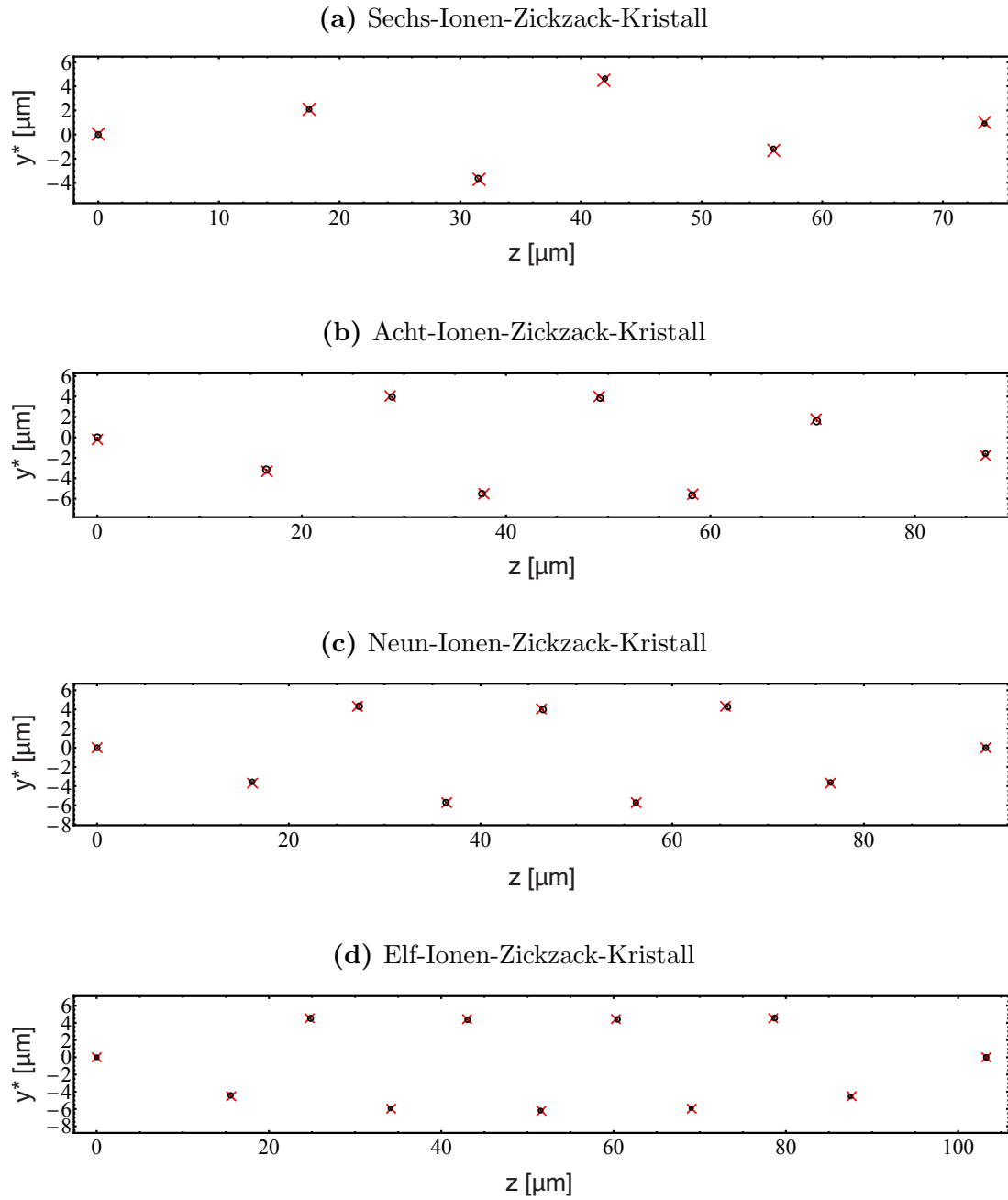
Zuerst werden in Abbildung 4.15 die Kristalle vorgestellt, die sich im exakt gleichen Potential befinden. Die DC-Fallenspannungen betragen hierbei  $U_{\text{ax}} = 350 \text{ V}$ ,  $U_{\text{off}} = 0.6 \text{ V}$  und  $U_{\text{komp}} = -0.16 \text{ V}$ . Dazu wurden die Fallenfrequenzen  $\omega_y/2\pi = 287.4(3.0) \text{ kHz}$  und  $\omega_z/2\pi = 111.1(4) \text{ kHz}$  bestimmt, was eine Anisotropie von  $\alpha = 0.149(3)$  bedeutet.

Alle dargestellten Kristalle zeigen einen guten Überlapp von Berechnung und Experiment. Die in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Kristallsymmetrien für gerade und ungerade Ionenzahlen lassen sich hier gut erkennen, allerdings sind die Kristalle für sechs und acht Ionen wegen des Verfahrens zur Überlappverbesserung hier leicht gedreht dargestellt. Augenscheinlich nehmen mit der Ionenzahl die Ausdehnungen der Kristalle in  $y$ - und  $z$ -Richtung zu, die exakten Werte sind Tabelle 4.3 zu entnehmen.

Die Messung am Elf-Ionenkristall zeigt mit  $+0.004\%$  Abweichung in der Kristallhöhe

---

<sup>1</sup>Das pp in  $V_{\text{pp}}$  steht abgekürzt für den englischen Begriff peak-to-peak.



**Abbildung 4.15.:** Vier gemessene und berechnete Zickzack-Kristalle verschiedener Ionenanzahlen im gleichen Potential.

die geringste prozentuale Abweichung aller in dieser Arbeit vorgenommenen Messungen von der Theorie. Für die mittlere Inter-Ionen-Distanz lässt sich hier keine Gesetzmä-

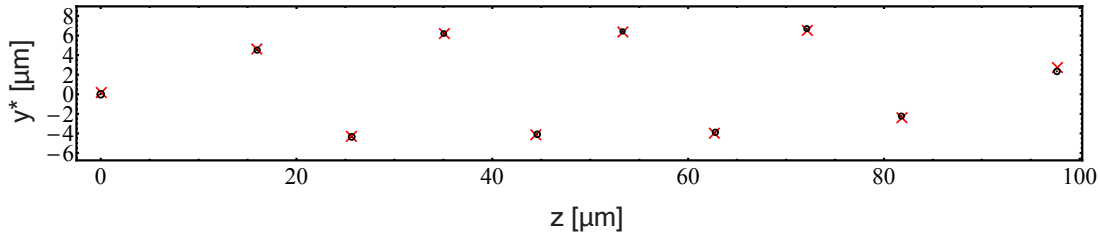
#### 4. Ionenpositionen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

Anzahl der Ionen	6	8	9	11
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	73.45	86.91	92.71	103.26
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	11.70(58)	13.61(85)	14.20(78)	15.20(75)
Inter-Ionen-Distanz [ $\mu\text{m}$ ]	16.55(13)	16.27(18)	16.32(16)	16.49(14)
Abweichung/Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.12	0.24	0.12	0.11
StdAbw/Ion ( $z$ -Richt.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.20	0.30	0.28	0.26
Abweichung IntIonDist [%]	0.202	-0.609	-0.839	-0.611
Abweichung Kristallhöhe [%]	0.895	0.139	-0.071	0.004

**Tabelle 4.3.:** Daten von vier verschiedenen Zickzack-Kristallen bei einer identischen Anisotropie von  $\alpha = 0.149(3)$ . StdAbw/Ion steht für die Standardabweichung pro Ion in  $z$ -Richtung, um die Standardabweichung in  $y$ -Richtung zu erhalten, muss dieser Wert mit  $\sqrt{2}$  multipliziert werden. Die Inter-Ionen-Distanz, die Abweichung/Ion und StdAbw/Ion sind Mittelwerte über alle Ionenpositionen. Abweichung IntIonDist bezeichnet die Abweichung, der gemessenen, von der berechneten Inter-Ionen-Distanz. Eine gemeinsame Darstellung der Ergebnisse findet sich in 4.7.

Bigkeit finden, da sie von sechs zu acht Ionen abnimmt, und von acht zu neun und elf Ionen zunimmt. Der in Abschnitt 4.1.1 gezeigte mitunter sprunghafte Verlauf der Ionenpositionen lässt erahnen, dass hier möglicherweise komplexere Gesetzmäßigkeiten für verschiedene Ionenzahlen vorliegen. Wie schon die Darstellung der gemessenen Positionen in Abbildung 4.15 vermuten lässt, sind die Positionsabweichungen von der Theorie sehr gering und betragen höchstens  $0.24 \mu\text{m}$ . Die mittlere Abweichung von der Theorie pro Ion liegt somit für alle Kristalle innerhalb der Standardabweichung in  $z$ -Richtung, und daher auch innerhalb der Standardabweichung in  $y$ -Richtung. Die prozentualen Abweichungen in der Inter-Ionen-Distanz, sowie der Kristallhöhe unterliegen hier keiner Regelmäßigkeit, es liegt hier also kein Hinweis auf einen systematischen Fehler vor. Abbildung 4.16 zeigt einen Zehn-Ionenkristall welcher in einem annähernd identischen Potential von  $\omega_y/2\pi = 282.3(3.0)$  kHz und  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz gemessen wurde. Dieser Kristall wurde bei einer zu obigen Messungen genau entgegengesetzten Offset-Spannung von  $U_{\text{off}} = -0.6$  V gemessen, er liegt also in der  $x$ - $z$ -Ebene vor. Auch dieser Kristall ist punktsymmetrisch bezüglich der Kristallmitte, er ist jedoch leicht gedreht abgebildet. Das Ion am rechten Ende des Kristalls zeigt eine etwas höhere Positions-

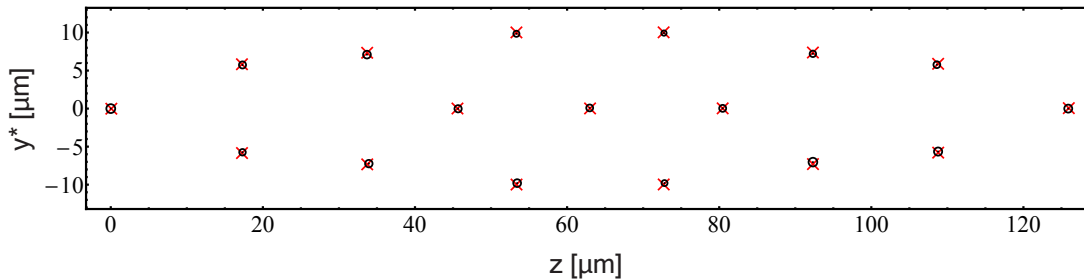




**Abbildung 4.16.:** Gemessener Zehn-Ionen-Zickzack-Kristall bei einer Anisotropie von  $\alpha = 0.155(4)$ .

abweichung als die übrigen Ionen, die wiederum sehr gut mit den berechneten Positionen überlappen. Diese höhere Abweichung resultiert aus dem Translations-Rotations-Algorithmus, der nach allen geometrischen Transformationen angewandt wird um die Gesamtabweichung weiter zu minimieren.

Neben den gerade gezeigten Kristallen im annähernd identischen Potential wurden noch zwei weitere Kristalle verschiedener Ionenanzahl bei höherer Anisotropie vermessen. Abbildung 4.17 zeigt den größten, in dieser Arbeit vermessenen, Kristall, welcher aus 17 Ionen aufgebaut ist.



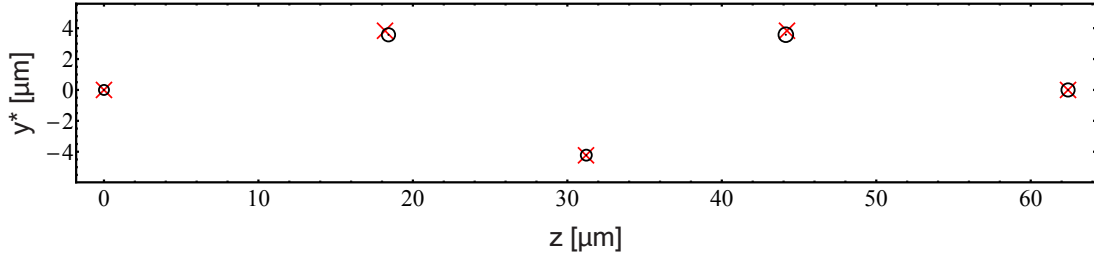
**Abbildung 4.17.:** Gemessener 17-Ionen-Zickzack-Kristall bei einer Anisotropie von  $\alpha = 0.183(4)$ .

Der Kristall besteht in der Mitte aus drei Ebenen und ist spiegelsymmetrisch bezüglich aller Fallachsen. Symmetrien dieser Art treten in Kristallen ungerader Ionenanzahl erst für  $\alpha \geq \alpha_{\text{krit}_2}$  auf. Auch für diesen großen Kristall stimmen die Berechneten sehr gut mit den gemessenen Ionenpositionen überein, die Abweichung pro Ion beträgt  $0.19 \mu\text{m}$  bei einer Standardabweichung in  $z$ -Richtung von  $0.47 \mu\text{m}$ . Für Ionenkristalle, die nur aus wenigen Ionen bestehen, benötigt man hohe Anisotropien um eine Zickzack-Struktur zu erreichen (siehe Kapitel 5). Bei hohen Anisotropien werden die Kristalle mit geringerer Effizienz gekühlt, die Ionen sind also schlechter lokalisiert und erscheinen daher stark verbreitert auf dem Kamerabild. Der kleinste Kristall, an dem in dieser Arbeit Positi-

#### 4. Ionenpositionen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

---

onsmessungen durchgeführt wurden, besteht daher aus fünf Ionen und ist in Abbildung 4.18 dargestellt.



**Abbildung 4.18.:** Gemessener Fünf-Ionen-Zickzack-Kristall bei einer Anisotropie von  $\alpha = 0.205(4)$ .

Auch hier findet sich aufgrund der hohen Anisotropie eine relativ große Standardabweichung von  $0.40 \mu\text{m}$ . Für die oberen beiden Ionen liegen die berechneten Positionen noch knapp innerhalb der Standardabweichung, sie liegen allerdings beide höher als die gemessenen Positionen. Die Abweichung von der berechneten Kristallhöhe beträgt hier  $-3.47\%$ . Eine Ursache für die verhältnismäßig schlechte Übereinstimmung kann auch die hier verwendete Kompensationsspannung von  $U_{\text{komp}} = -0.28 \text{ V}$  sein. Für die drei zuletzt gezeigten Kristalle ergeben sich die Daten in Tabelle 4.4.

Wie auch in den obigen Messungen nehmen hier Kristallhöhe und Länge mit der Ionenanzahl zu. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass für jeden Kristall eine zwar ähnliche aber dennoch verschiedene Anisotropie vorliegt. Die Abweichungen pro Ion sind auch hier wieder sehr gering und liegen bei allen Kristallen innerhalb der Standardabweichung in  $z$ -Richtung. Für die prozentualen Abweichungen lässt sich feststellen, dass diese tendenziell eher negativ sind, aber auch hier ist keine eindeutige Systematik erkennbar. Bei der Messung am Zehn-Ionenkristall liegt in der mittleren Inter-Ionen-Distanz lediglich eine Abweichung von  $-0.004\%$  vor. Die durchschnittliche prozentuale Abweichung in den 13 hier durchgeführten Positionsmessungen ergibt sich zu  $-0.59\%$  in der Inter-Ionen-Distanz und zu  $+0.13\%$  in der Kristallhöhe. Bemerkenswert ist, dass die Abweichung der Ionenpositionen hier in den meisten Messungen bei etwa  $1/20$  eines Pixels der CCD-Kamera lag, welches eine Größe von  $\approx 2.02 \mu\text{m}^2$  hat.

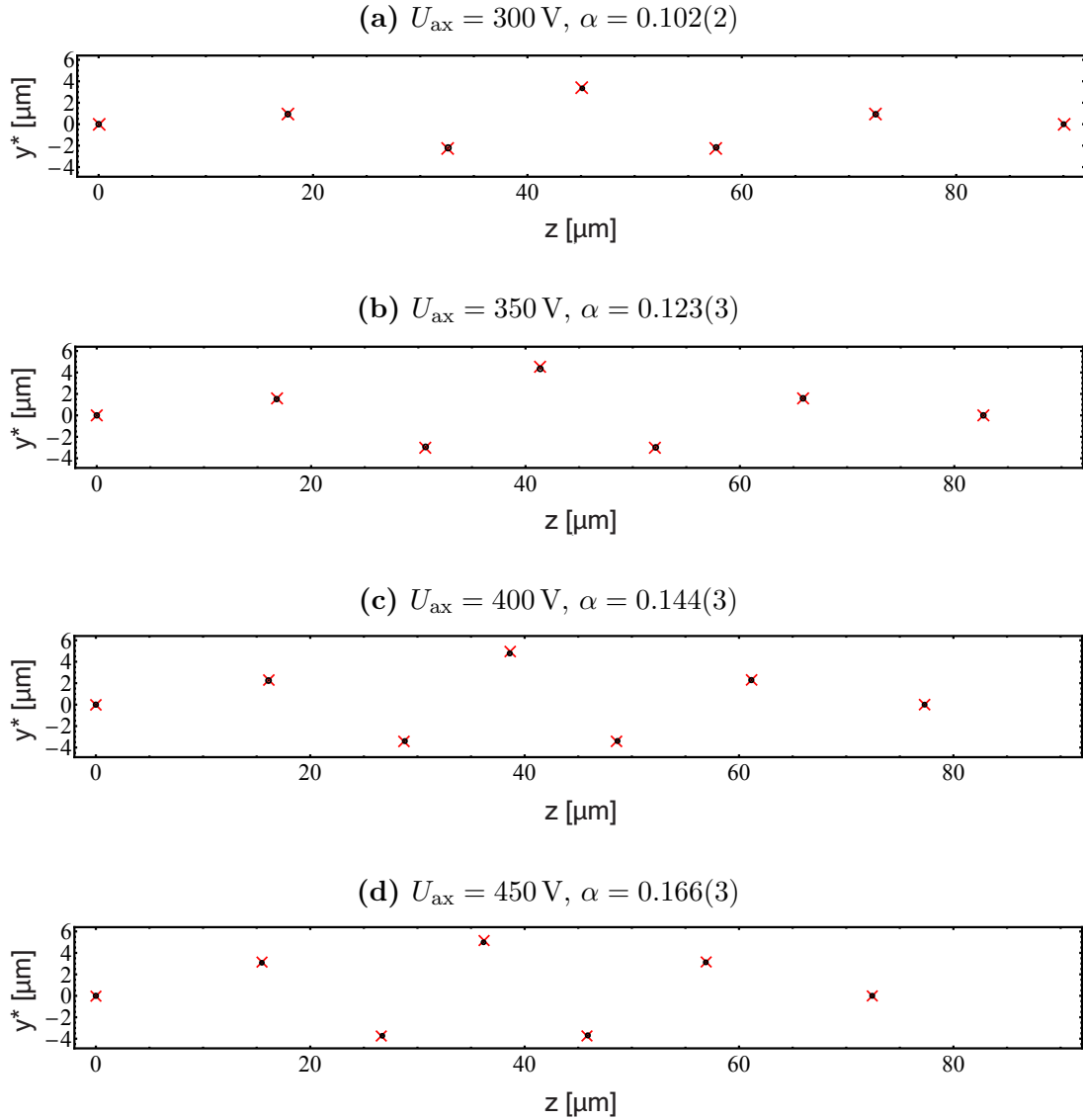
Für jeden Kristall wurde hier jeweils nur eine mögliche Konfiguration aufgeführt, es wurden aber jeweils beide energetisch äquivalenten Konfigurationen gemessen. Die Daten zu diesen Kristallen finden sich in Anhang A.1(A).

Anzahl der Ionen	5	10	17
$U_{\text{off}}$ [V]	1.0	-0.6	-0.8
$U_{\text{komp}}$ [V]	-0.28	-0.16	-0.16
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	245.5(3.0)	282.3(3.0)	259.8(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.205(5)	0.155(4)	0.183(4)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	62.42	97.67	125.89
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	11.03(1.14)	15.64(80)	27.90(1.33)
Inter-Ionen-Distanz [ $\mu\text{m}$ ]	17.77(29)	16.71(16)	16.27(21)
Abweichung/Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.17	0.21	0.19
StdAbw/Ion ( $z$ -Richt.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.40	0.28	0.47
Abweichung IntIonDist [%]	-1.184	-0.004	-1.37
Abweichung Kristallhöhe [%]	-3.468	3.070	-1.39

**Tabelle 4.4.:** Daten der Messungen am 5-, 10- und 17-Ionen-Zickzack-Kristall. Der axiale Einschluss betrug hier  $U_{\text{ax}} = 350$  V, dafür ergab sich  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz.

## 4.5. Variation des axialen Einschlusses

Eine Möglichkeit, die Anisotropie der Falle zu verändern, ist eine Variation der axialen Fallenfrequenz  $\omega_z$ . Dies ist in der hier verwendeten Falle leicht durch ein Anlegen verschiedener axialer Gleichspannungen möglich. Alle in diesem Abschnitt vorgestellten Messungen fanden an einem Sieben-Ionenkristall statt. Die axiale Fallenspannung  $U_{\text{ax}}$  wurde dabei in 50 V-Schritten von 300 V bis 450 V variiert. Eine dieser Messreihen fand bei einer radialen Offset-Spannung von  $U_{\text{off}} = 0.6$  V, die zweite bei  $U_{\text{off}} = -0.6$  V statt um die radialen Fallenfrequenzen möglichst konstant zu halten. Letztere zeigt etwas geringere Abweichungen und wird im Folgenden vorgestellt, die zweite Messreihe findet sich in Anhang A.1(B). Beide Messreihen wurden bei einer Kompensationsspannung von  $U_{\text{komp}} = -0.16$  V durchgeführt. Abbildung 4.19 zeigt die Messserie bei  $U_{\text{off}} = -0.6$  V. Bei steigender axialer Fallenspannung steigt auch die axiale Fallenfrequenz  $\omega_z$  und somit die Anisotropie. Gut sichtbar ist hier, dass die Länge des Kristalls mit steigender Anisotropie deutlich abnimmt, die Höhe dagegen nimmt zu. Die erste Messung bei  $\alpha = 0.102(2)$  liegt nur knapp über dem Zickzack-Phasenübergang bei  $\alpha_{\text{krit}_1} = 0.088$ ,



**Abbildung 4.19.:** Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen axialen Fallenfrequenzen  $\omega_z$  und annähernd gleichen radialen Fallenfrequenzen  $\omega_y$ . Die Anisotropie  $\alpha$  nimmt von oben nach unten zu.

daher ist die Höhenzunahme hier im Verlauf der Messserie besonders stark, wie es in Abschnitt 4.1.1 vorhergesagt wurde. Die exakten Werte für den Kristall können Tabelle 4.5 entnommen werden.

Zusätzlich zu der Angabe in Mikrometer-Skalierung wurde hier die Inter-Ionen-Distanz auch in universellen Koordinaten angegeben, da die Angaben in Mikrometer-Skalierung

$U_{\text{ax}}$ [V]	300	350	400	450
$\omega_z/2\pi$ [kHz]	101.0(4)	110.8(4)	119.3(4)	127.5(4)
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	316.5(3.0)	315.6(3.0)	314.6(3.0)	313.3(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.102(2)	0.123(3)	0.144(3)	0.166(3)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	90.02	82.71	77.31	72.42
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	7.85(62)	10.37(64)	11.57(58)	12.33(54)
Inter-Ionen-Distanz [ $\mu\text{m}$ ]	15.80(13)	15.57(14)	15.40(12)	15.23(12)
Inter-Ionen-Distanz [univ. K.]	0.771(6)	0.808(7)	0.840(7)	0.868(7)
Abweichung/Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.07	0.08	0.08	0.09
StdAbw/Ion ( $z$ -Richt.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.22	0.23	0.20	0.19
Abweichung IntIonDist [%]	-0.38	-0.81	-0.50	-0.60
Abweichung Kristallhöhe [%]	-2.18	-3.00	-2.49	-2.11

**Tabelle 4.5.:** Daten eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls bei verschiedenen axialen Fallenfrequenzen und  $U_{\text{off}} = -0.6$  V. Eine gemeinsame Darstellung aller Messreihen am Sieben-Ionen-Kristall findet sich in Abschnitt 4.7.

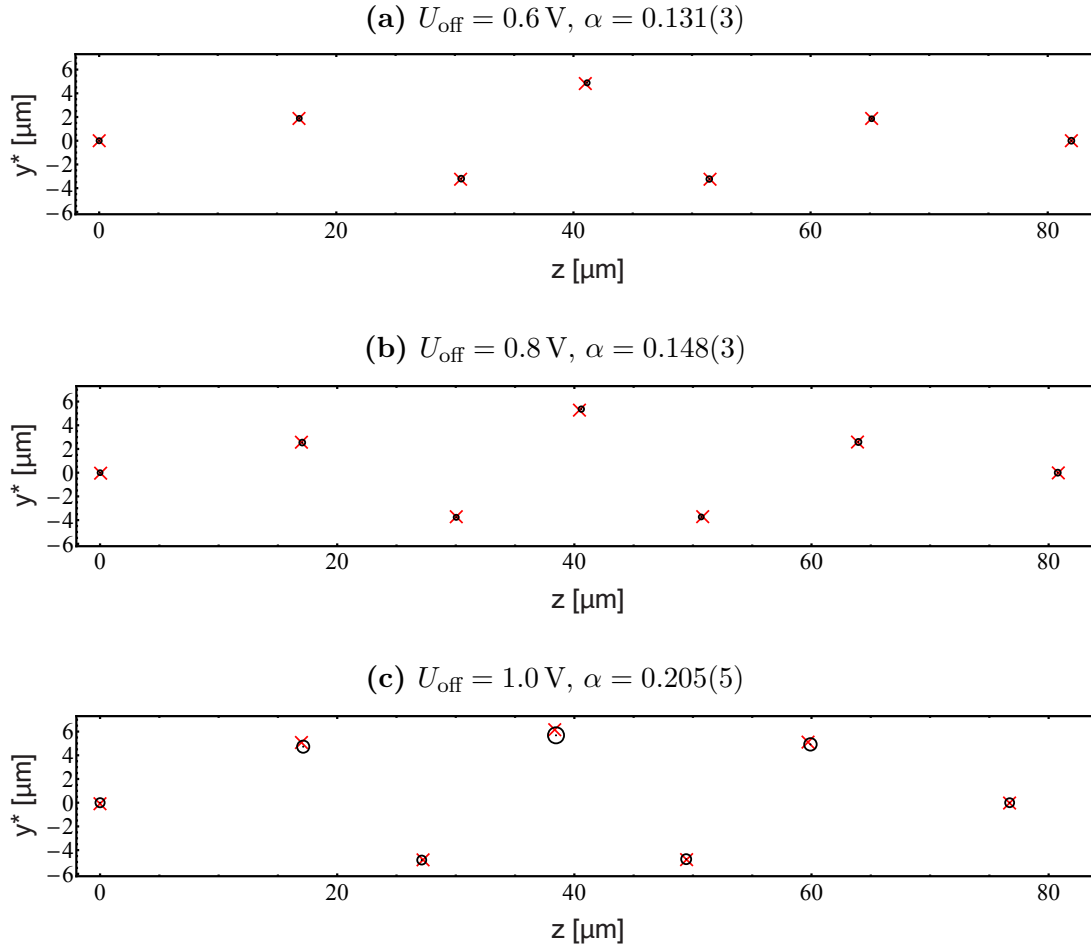
mit zunehmender Anisotropie einen abnehmenden Abstand der Ionen zeigen. Dies wird durch die steigende axiale Fallenfrequenz  $\omega_z$  verursacht, da für jede Frequenz somit ein verschiedener Längenparameter  $l$  vorliegt. Eine Umrechnung in die universellen Koordinaten zeigt wiederum eine Zunahme der Inter-Ionen-Distanz bei steigender Anisotropie, wie sie bereits in Abschnitt 4.1.1 berechnet wurde. Für die Kristalllänge und Höhe ist der Einfluss des jeweils anderen Längenparameters geringer und beide Größen zeigen auch in Mikrometer-Skalierung das erwartete Verhalten. Für beide Messserien bei positiver und negativer Offset-Spannung liegen die Positionsabweichungen pro Ion jeweils innerhalb der Standardabweichung, nur für die Messung bei  $U_{\text{ax}} = 450$  V und  $U_{\text{off}} = 0.6$  V wird mit einer Abweichung von  $0.20 \mu\text{m}$  die Standardabweichung von  $0.19 \mu\text{m}$  leicht überschritten. Im Gegensatz zu den Messungen an verschieden großen Ionenkristallen sind hier alle prozentualen Abweichungen negativ. Die mittlere prozentuale Abweichung der vier hier gezeigten Messungen ergibt sich zu  $-0.57\%$  in der Inter-Ionen-Distanz und zu  $-2.45\%$  in der Kristallhöhe.

## 4.6. Variation des radialen Einschusses

Eine zweite Möglichkeit zur Veränderung der Anisotropie bietet die Variation der radialen Fallenfrequenz  $\omega_y$ . In der hier verwendeten Falle wird dies durch Veränderung der radialen Gleichspannung  $U_{\text{off}}$  realisiert (siehe Abschnitt 4.2). Wie schon im vorigen Abschnitt wurden alle Messungen an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall durchgeführt. Es wurden auch hier wieder Messungen bei positiver und negativer Offset-Spannung durchgeführt, dabei variierte die radiale Offset-Spannung in 0.2 V-Schritten. Es fanden Messungen statt bei  $U_{\text{off}} = -0.6, -0.8, +0.6, +0.8, +1.0$  V. Für die Messung bei  $U_{\text{off}} = 1.0$  V war eine andere Kompensationsspannung von  $U_{\text{komp}} = -0.28$  V nötig. Die axiale Fallenspannung wurde während aller Messungen nicht verändert und lag bei  $U_{\text{ax}} = 350$  V, was in einer axialen Fallenfrequenz von  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz resultierte. Im Folgenden wird die Messreihe bei positiver Offset-Spannung präsentiert, da es möglich war, dort bei drei verschiedenen Spannungen zu messen. Der Kristall liegt also in der  $y$ - $z$ -Ebene. Anhang A.1(C) können die Werte für die Serie mit negativer Spannung entnommen werden, sowie die Daten zu den energetisch äquivalenten Konfigurationen der Serie mit positiver Spannung. Für die drei verschiedenen radialen Fallenfrequenzen ist der Kristall in Abbildung 4.20 dargestellt.

Es sind hier die gleichen Auswirkungen der Anisotropie-Erhöhung zu sehen wie im vorigen Abschnitt: Der Kristall dehnt sich in  $y$ -Richtung aus und zieht sich in  $z$ -Richtung zusammen. Für den Kristall bei  $U_{\text{off}} = 1.0$  V liegt eine hohe Standardabweichung vor, da die Anisotropie bei diesem Wert relativ hoch ist und auch eine andere Kompensationsspannung verwendet werden musste. Obwohl hier über einen ähnlich großen Anisotropiebereich Werte aufgenommen wurden, fallen die Änderungen in den Kristalldimensionen weniger drastisch aus als im vorigen Abschnitt. Dies rührt daher, dass im vorigen Abschnitt fast unmittelbar nach dem Zickzack-Phasenübergang gemessen wurde, dort ändern sich die Kristallmaße schneller als im etwas höheren Anisotropiebereich. Die genauen Daten für diese Messreihe sind Tabelle 4.6 zu entnehmen.

Da hier alle Messungen bei gleicher axialer Fallenfrequenz durchgeführt wurden, ergibt sich jeweils der gleiche Längenparameter. Somit sind die in Mikrometer skalierten Angaben untereinander direkt vergleichbar. Mit zunehmender Anisotropie nehmen die Kristallhöhe sowie die Inter-Ionen-Distanz zu und die Kristalllänge ab. Sämtliche hier und im Anhang A.1(C) aufgeführten Messungen zeigen geringe mittlere Positionsabweichungen pro Ion, die außerdem alle innerhalb der jeweiligen Standardabweichung liegen. Im Gegensatz zur Messung bei fester radialer Fallenfrequenz im vorherigen Ab-



**Abbildung 4.20.:** Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen axialen Fallenfrequenzen  $\omega_y$  und gleicher axialer Fallenfrequenz  $\omega_z$ . Die Anisotropie  $\alpha$  nimmt von oben nach unten zu.

schnitt ist hier keine Systematik in den prozentualen Abweichungen zu erkennen. Für die prozentuale Abweichung der Inter-Ionen-Distanz ergibt sich für die Messung bei  $\omega_y$ -Variation in drei von vier Messungen ein positives Vorzeichen, im vorherigen Abschnitt waren diese alle negativ. Es lässt sich somit keine sichere Aussage über eine Systematik für die prozentualen Abweichungen treffen.

Es ist hervorzuheben, dass bei beiden Vorgehensweisen der Anisotropievariation eine Messung bei identischen Parametern  $U_{\text{ax}} = 350 \text{ V}$  und  $U_{\text{off}} = \pm 0.6 \text{ V}$  durchgeführt wurde. Für beide Vorgehensweisen ergibt sich ein negatives Vorzeichen in der prozentualen Abweichung der Inter-Ionen-Distanz, jedoch sind die prozentualen Abweichungen in diesem Abschnitt insgesamt kleiner als im Vorherigen. In der Kristallhöhe ergibt sich für

$U_{\text{off}}$ [V]	0.6	0.8	1.0
$U_{\text{komp}}$ [V]	-0.16	-0.16	-0.28
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	306.8(3.0)	289.0(3.0)	245.5(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.131(3)	0.148(3)	0.205(5)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	81.99	80.77	76.71
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	11.48(64)	12.91(65)	14.88(133)
Inter-Ionen-Distanz [ $\mu\text{m}$ ]	15.90(14)	16.35(14)	17.58(31)
Abweichung/Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.06	0.10	0.27
StdAbw/Ion ( $z$ -Richt.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.23	0.23	0.47
Abweichung IntIonDist [%]	-0.06	0.17	-1.94
Abweichung Kristallhöhe [%]	0.54	1.51	-4.34

**Tabelle 4.6.:** Daten eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls bei verschiedenen radialen Fallenfrequenzen und positiven Offset-Spannungen. Die axiale Fallenfrequenz ergab sich für alle Messungen zu  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz. Eine gemeinsame Darstellung aller Messreihen am Sieben-Ionen-Kristall findet sich in Abschnitt 4.7.

besagte Messung in diesem Abschnitt mitunter eine positive prozentuale Abweichung, im vorherigen Abschnitt war diese stets negativ.

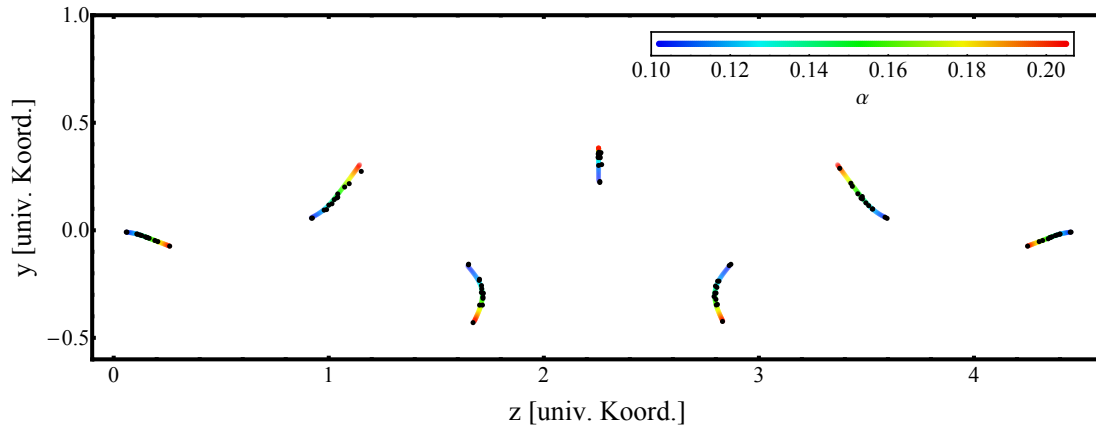
Gemittelt über alle drei hier gezeigten Messungen liegt die Abweichung in der Kristallhöhe bei  $-0.76\%$  und in der Inter-Ionen-Distanz bei  $-0.61\%$ . Hervorzuheben ist die mit 49 nm geringste Positionsabweichung aller durchgeführten Messungen. Dies entspricht etwa 2/100 der Größe eines Pixels.

## 4.7. Gemeinsame Darstellung der Ergebnisse

In den beiden vorigen Abschnitten wurden an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall systematisch Positionsmessungen bei verschiedenen Anisotropien durchgeführt. Mit Hilfe des Längenparameters  $l$  lassen sich alle gemessenen Positionen in die gleichen universellen und dimensionslosen Koordinaten transformieren und gemeinsam darstellen. Die in Abschnitt 4.1.1 gezeigten Abbildungen werden in diesem Abschnitt mit den experimentell gewonnenen Daten verglichen. Einen eher anschaulichen Vergleich von Theorie



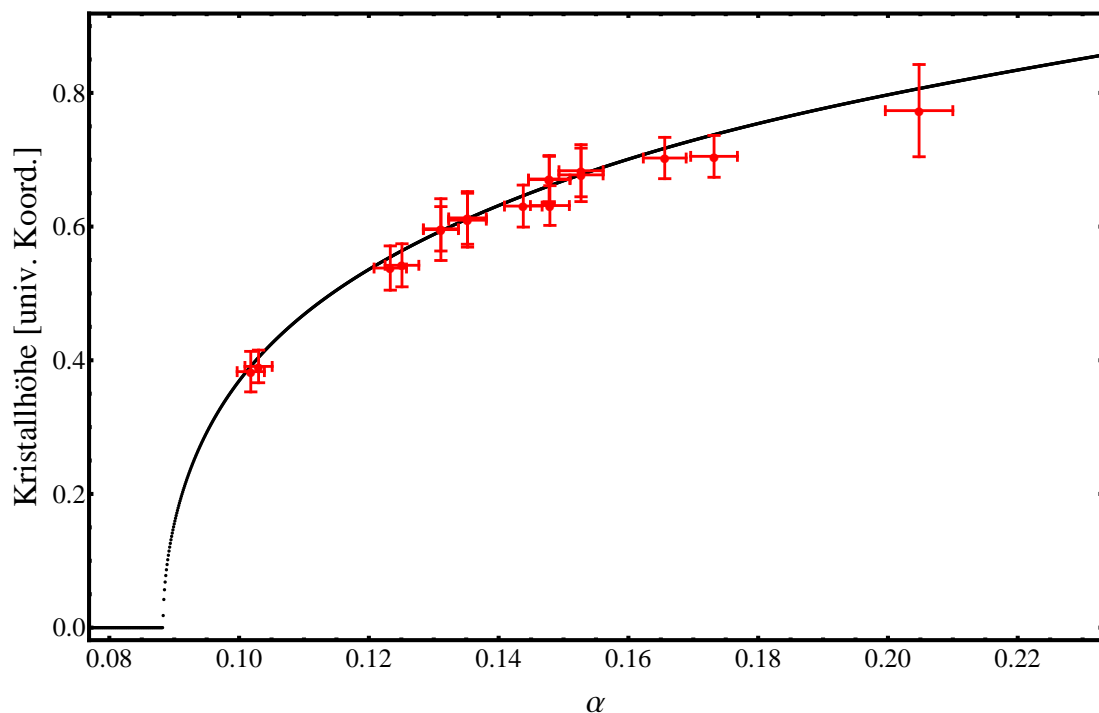
und Experiment stellt der Verlauf der Ionenpositionen in Abhängigkeit der Anisotropie in Abbildung 4.21 dar.



**Abbildung 4.21.:** Berechnete und gemessene Ionenpositionen eines Sieben-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$  für den, in dieser Arbeit vermessenen, Anisotropiebereich  $0.1018 \leq \alpha \leq 0.2050$ . Schwarze Punkte stellen die experimentell ermittelten Positionen dar und farbige Punkte zeigen die berechneten Positionen bei der jeweiligen Anisotropie an.

Zur Erstellung dieser Grafik wurde der in Abbildung 4.4 gezeigte Verlauf der Ionenpositionen auf den Anisotropiebereich beschränkt in dem Messungen vorgenommen wurden. Der Koordinatenursprung liegt auf dem äußersten linken Ion bei  $\alpha = 0.1018$ . Für die höheren Anisotropien wurde wieder jeweils für das äußerste linke Ion ein Überlapp zwischen Experiment und Theorie hergestellt. Durch dieses Vorgehen ergibt sich auch für das äußerste rechte Ion ein perfekter Überlapp, da die Kristalle hier schon die in Abschnitt 4.3.1 erläuterten geometrischen Transformationen durchlaufen haben. Mittels dieser Darstellung kann man gut erkennen, dass für die mittleren fünf Ionenpositionen keine großen Abweichungen vorliegen. Nur bei der hohen Anisotropie von  $\alpha = 0.2050$  weichen die Ionen geringfügig von dem roten Bereich ab in dem sie bei diesem Wert sitzen sollten. Anhand dieser Grafik ist allerdings nicht erkennbar, ob die gemessenen Ionenpositionen an der richtigen Stelle auf dem Verlauf der Berechnung sitzen, da zu den schwarzen Punkten nicht angegeben ist, bei welcher Anisotropie sie gemessen wurden. Transversale Abweichungen vom Verlauf der Positionen würden in dieser Darstellung dagegen stark auffallen. In dieser Grafik wurden nur alle Messungen gezeigt, die in dieser Ionenkonfiguration aufgenommen wurden. Es liegen noch mehr Daten zu den jeweils energetisch äquivalenten Konfigurationen vor, die in den folgenden Abbildungen eingebracht werden.

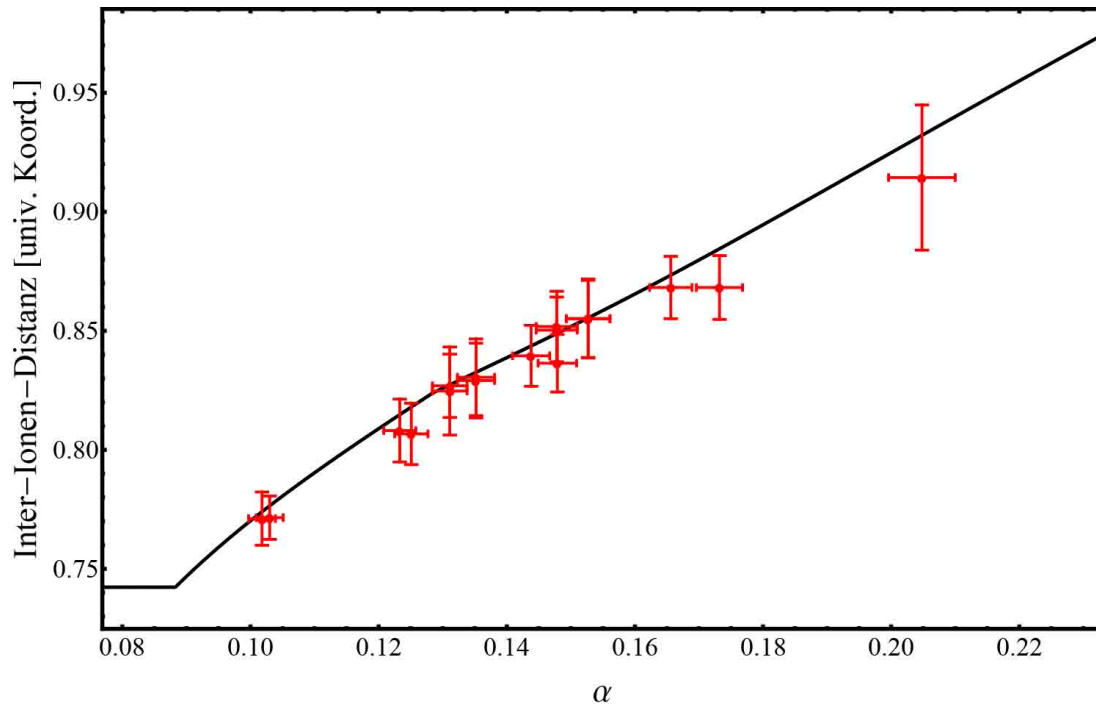
Die Verläufe der Kristallmaße in Abhängigkeit der Anisotropie wurden bereits in Abschnitt 4.1.1 berechnet. Eine gemeinsame Darstellung von gemessener und berechneter Kristalllänge wäre nicht sinnvoll, da durch die geometrischen Transformationen die jeweils äußersten Ionenpositionen perfekt aufeinander gelegt werden. Abbildung 4.22 zeigt nun die berechnete und gemessene Kristallhöhe in Abhängigkeit der Anisotropie. Bei den gezeigten Messwerten handelt es sich um alle in den Abschnitten 4.5 und 4.6 aufgeführten Daten zu den Messungen am Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen Anisotropien.



**Abbildung 4.22.:** Gemessene und berechnete Kristallhöhe eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls bei verschiedenen Anisotropien  $\alpha$ . Die schwarze Kurve wurde anhand von 2000 einzelnen Positionsberechnungen erstellt.

Die Messwerte zeigen hier gute Übereinstimmung mit der berechneten Kristallhöhe. Bis auf einen Messwert bei  $\alpha = 0.1732(4)$  liegt der berechnete Verlauf für alle Messwerte im Fehlerbereich der Kristallhöhe, welcher durch die Standardabweichung verursacht wird. Wie bereits in Abschnitt 4.3.1 erwähnt, wird der Fehler in der Kristallhöhe aus der doppelten Standardabweichung in  $y$ -Richtung berechnet. Gerade erwähnter Messwert entstammt der  $\omega_z$ -Variationsserie in Abschnitt 4.5 und trat bei positiver Offset-Spannung auf. Diese Serie zeigte allerdings ohnehin die größten Abweichungen aller Messungen.

Bezieht man aber die Unsicherheit in der Anisotropie mit ein, so liegt die berechnete Höhe im Fehlerbereich des Messwerts. Tendenziell liegen die gemessenen Höhen, vor allem für hohe Anisotropien, aber eher unter den berechneten Werten. Gemittelt über alle der 17 aufgeführten Messungen liegt die Abweichung in der Kristallhöhe bei  $-1.55\%$ . Neben der Kristallhöhe lassen sich auch die gemessenen mittleren Inter-Ionen-Distanzen vergleichen, wie es Abbildung 4.23 zeigt.

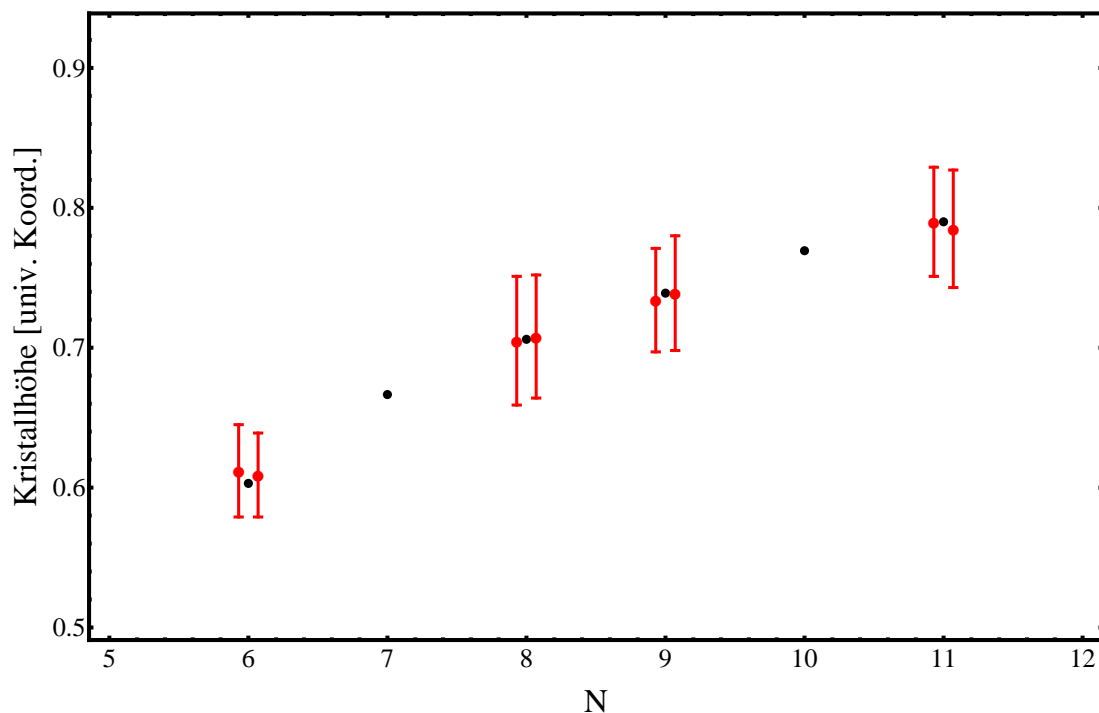


**Abbildung 4.23.:** Gemessene und berechnete mittlere Inter-Ionen-Distanzen in einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen Anisotropien  $\alpha$ . Die schwarze Kurve wurde anhand von 2000 einzelnen Positionsberechnungen erstellt.

Auch hier liegen die gemessenen Distanzen wieder nahe bei den berechneten Werten. Bezieht man die Fehler in  $\alpha$  und in der Inter-Ionen-Distanz mit ein, so liegen alle berechneten Werte innerhalb des Fehlerbereichs der Messwerte. Wie bereits in Abschnitt 4.3.1 erwähnt, wird der Fehler in der Inter-Ionen-Distanz mit Hilfe des absoluten Größtfehlers berechnet, da sich eine Positionsabweichung eines Ions auf mindestens zwei gemessene Ionenabstände auswirkt. Die gesamte prozentuale Abweichung aller 17 Messungen ist mit  $-0.60\%$  geringer als die mittlere prozentuale Abweichung der Kristallhöhe von  $-1.55\%$ . Insgesamt lässt sich für die Positionen des Sieben-Ionen-Kristalls, besonders für niedrige Anisotropien, sehr gute Übereinstimmung mit der Theorie feststellen.

Der höhere Anisotropiebereich, in dem ein zweiter sprunghafter Übergang stattfindet, wie er in Abschnitt 4.1.1 dargestellt ist, war aber für einen Sieben-Ionenkristall experimentell kaum realisierbar.

In Abschnitt 4.4 wurden Positionsmessungen an Zickzack-Ionenkristallen verschiedener Ionenzahl durchgeführt. Für sechs, acht, neun und elf Ionen konnten Messungen in einem identischen Potential realisiert werden. Abbildung 4.24 zeigt die gemessenen Höhen dieser Kristalle in Abhängigkeit der Ionenzahl  $N$ .



**Abbildung 4.24.:** Kristallhöhe der in einem identischen Potential gemessenen Kristalle unter Veränderung der Ionenzahl. Schwarze Punkte zeigen die berechnete Kristallhöhe, rote Punkte hingegen die gemessene Höhe. Die Messwerte wurden zur besseren Einsicht neben den Berechnungen platziert, korrespondieren aber jeweils zur ganzzahligen Ionenzahl  $N$ .

Zu den berechneten Positionen ergeben sich nur geringe Abweichungen, die jeweils mit den Fehlern vereinbar sind. Diese sind relativ groß, da es sich wie bereits erwähnt um eine einzelne Abstandsmessung zweier Ionen handelt. Die exakten Messwerte sind den Tabellen 4.3 und A (Anhang A.1) zu entnehmen.

## 4.8. Fehlerdiskussion der Positionsmessungen

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über die Fehler in den Ionenpositionen, die sich aus den Unsicherheiten im Experiment ergeben. Für die axiale Fallenfrequenz  $\omega_z$  wurde die Unsicherheit auf 0.4 kHz geschätzt, da sich diese relativ exakt messen ließ und über längere Zeiträume keinen erkennbaren Schwankungen unterlag. Die niedrigere der beiden radialen Fallenfrequenzen ist mit einer höheren Unsicherheit behaftet, welche auf 3.0 kHz geschätzt wurde. Der Grund dafür ist eine Drift in der Amplitude der Antriebsfrequenz der Falle, die bei allen Messungen  $U_{\text{RF}} = 300(15) V_{\text{pp}}$  betrug. Die radiale Fallenfrequenz wurde daher immer unmittelbar nach der Aufnahme der CCD-Bilder gemessen, um diesen Effekt möglichst klein zu halten. In allen hier dargestellten gemeinsamen Abbildungen von gemessenen und berechneten Kristallen finden sich, dargestellt durch schwarze Kreise, nur die Unsicherheiten, die durch die Streuung der ermittelten Ionenpositionen entstanden. Erst in der gemeinsamen Darstellung im vorherigen Abschnitt finden sich auch die durch die Unsicherheiten in den Fallenfrequenzen verursachten Fehler in der Anisotropie  $\alpha$ .

Zu den Streuungen in den Positionsmessungen ist zu bemerken, dass auf dem CCD-Bild ein Hintergrundrauschen liegt. Das Signal-Rausch-Verhältnis betrug in den meisten Messungen etwa sechs zu eins. Bei stark anisotropischen Potentialen und großen Ionenzahlen werden die Ionen weniger effektiv gekühlt und das Signal-Rausch-Verhältnis nimmt ab. Folglich wird auch die Qualität der zweidimensionalen Gauß-Fits schlechter. Dennoch ist es in dieser Arbeit gelungen, die Ionenpositionen sub-pixelgenau zu bestimmen, da ein Pixel einer Fläche von  $2.02 \mu\text{m}^2$  entspricht. Dieser Wert wurde anhand einer Positionsmessung in einem linearen Zwei-Ionen-Kristall ermittelt, es ergibt sich somit anhand der  $24 \mu\text{m}^2$  großen Pixel der Kamera eine Vergrößerung von 11.88. Bei jeder Einzelmessung wurde die Vergrößerung der Kamera zusätzlich anhand der Inter-Ionen-Distanz separat ermittelt. Es zeigt sich, dass die Abweichungen von dieser Vergrößerung höchstens 3% betragen. Die geringen Abweichungen entstehen durch spannungsabhängige Verrückungen der Kristalle im Potential, sowie notwendige Fokus-Justagen während der Messungen. Die ermittelte Vergrößerung wurde daher nicht benutzt, um von Pixelkoordinaten auf Mikrometer-Skalierung umzurechnen. Die in Abschnitt 4.3.1 vorgestellte Umrechnung über die axiale Fallenfrequenz ist pragmatischer und präziser. Die höhere Genauigkeit ist dadurch begründet, dass auch für eine jeweils separat vorgenommene Eichmessung die axiale Fallenfrequenz bestimmt werden müsste, die sich bis zur Aufnahme des eigentlichen Kristalls leicht geändert haben könnte. Weiterhin

würde auch eine Eichmessung auf der Mittelung über mehrere Einzelbilder der Kamera und einer einmaligen Messung der axialen Fallenfrequenz beruhen, woraus sich ein Fehler ergibt. Die direkte Umrechnung von universellen Koordinaten über die axiale Fallenfrequenz hingegen kann auch sonst unbemerkten Veränderungen der Fallenfrequenz gerecht werden.

Hervorzuheben ist, dass in den meisten Messungen die Standardabweichung der Positionsmessung pro Ion nur etwa ein Zehntel der Größe eines Pixels betrug und die Abweichung von der Theorie etwa  $1/20$ .

Eine weitere Fehlerquelle ist der Winkel, unter dem der Kristall betrachtet wird, der hier immer zu  $\pm 45^\circ$  angenommen wird. Tauscht man das Vorzeichen der Offset-Spannung, so wechselt auch das Vorzeichen des Winkels, da der Kristall dann in der  $x$ - $z$ -beziehungsweise der  $y$ - $z$ -Ebene liegt. Bereits eine Abweichung von  $\pm 0.5^\circ$  im Winkel bewirkt eine Abweichung in der Kristallhöhe von

$$\frac{\cos(45^\circ)}{\cos(45^\circ \pm 0.5^\circ)} = \pm 0.86\%. \quad (4.3)$$

Nach dieser Argumentation müsste also zwischen den ermittelten Kristallhöhen eine Differenz von  $2 \cdot 0.86\% = 1.72\%$  vorliegen. In der Messserie, bei der nur der axiale Einschluss verändert wurde, liegt zwischen den Messungen bei positiver und negativer Offset-Spannung eine Differenz in den prozentualen Abweichungen in dieser Größenordnung vor, die allerdings zwischen  $1.00\%$  und  $2.48\%$  variiert. Es lässt sich mit dieser Argumentation auch nicht begründen, weshalb alle Kristalle in dieser Serie eine negative prozentuale Abweichung in der Kristallhöhe zeigen, denn nach Gleichung 4.8 müssten bei alternierendem Vorzeichen der Offset-Spannung auch die Vorzeichen der prozentualen Abweichung tauschen. Betrachtet man die Messserie, bei der nur der radiale Einschluss variiert wurde, so stellt man fest, dass dort auch positive prozentuale Abweichungen in der Kristallhöhe auftreten. Auch dort gehorchen die Ergebnisse nicht streng der gerade dargelegten Winkelargumentation. Daher folgt hier keine weitere systematische Untersuchung des Winkels, unter dem der Kristall beobachtet wird.

Insgesamt lässt sich keine sichere Aussage treffen, ob eine positive oder negative Offset-Spannung zu geringeren Positionsabweichungen führt. Es kann nur festgehalten werden, dass die Kristalle bei hohen Offset-Spannungen sehr unruhig wurden und dort höhere Positionsabweichungen zeigen. Zwischen den Vorzeichen in den prozentualen Abweichungen der Inter-Ionen-Distanz und der Kristallhöhe besteht zwar eine Korrelation

aber keine Kausalität, es lässt sich also auch hier keine eindeutige Systematik feststellen.

Auch die Kompensationsspannung  $U_{\text{komp}}$  kann eine Ursache für Positionsabweichungen sein, diese ist nötig, um den Kristall im Potential zu stabilisieren. Allerdings verschiebt sie ihn dabei aus der Mitte des Pseudopotentials, der Kristall sieht also ein weniger harmonisches Potential. Ein Hinweis darauf, dass sich eine größere Kompensationsspannung negativ auf die Positionsabweichungen auswirkt geben die Messungen bei  $U_{\text{komp}} = -0.28 \text{ V}$ , denn dort finden sich die größten Abweichungen von den berechneten Positionen.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Ionenpositionen sub-pixelgenau bestimmt werden konnten und nur sehr geringe Abweichungen von den berechneten Positionen zeigen. Die minimale durchschnittliche Positionsabweichung von der Theorie beträgt 49nm, was etwa 2/100 der Größe eines Pixels entspricht. Ein eindeutiger systematischer Fehler konnte nicht identifiziert werden und die berechneten Werte liegen im Fehlerbereich der Messwerte.





# 5

## Konfigurationsänderungen: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

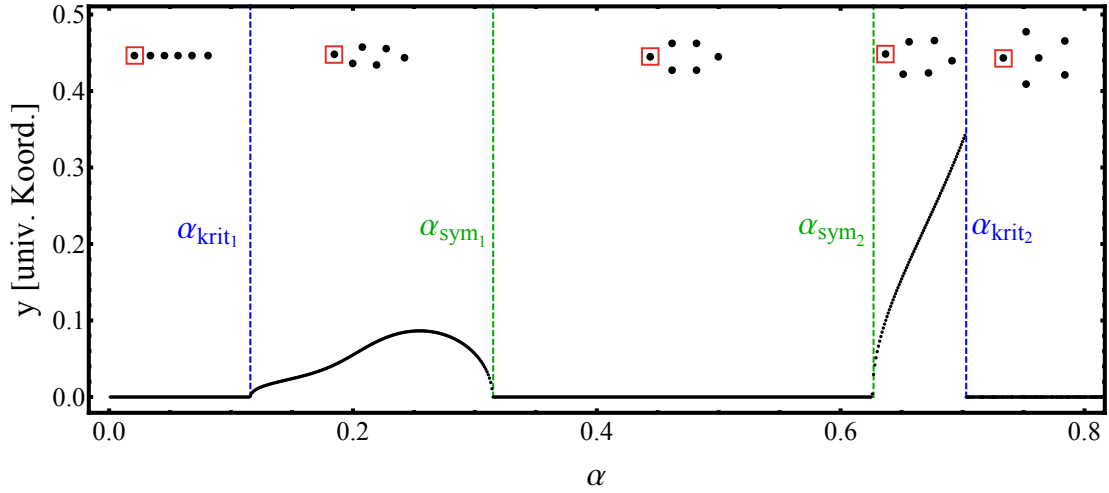
Dieses Kapitel ist der theoretischen und experimentellen Analyse der vier bereits in Kapitel 4 eingeführten Anisotropieparameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ ,  $\alpha_{\text{krit}_2}$ ,  $\alpha_{\text{sym}_1}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2}$  gewidmet. In Abschnitt 5.1 wird die numerische Berechnung dieser Parameter vorgestellt. Abschnitt 5.2 stellt Messungen zur Verifizierung der Parameter in verschiedenen Anisotropiebereichen an einem Drei- und Vier-Ionenkristall vor.

### 5.1. Berechnung der kritischen Parameter

Bereits in Abschnitt 4.1.2 wurden vier Anisotropieparameter eingeführt, bei denen sich Konfigurationsänderungen in Ionenkristallen ergeben. Zum einen die kritischen Parameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$  und  $\alpha_{\text{krit}_2}$ . Ersterer bestimmt den Übergang in die Zickzack-Konfiguration und Letzterer definiert einen Übergang aus der Zickzack-Konfiguration in eine Konfiguration, welche sich durch eine höhere Ebenenanzahl auszeichnet. Dieser Übergang ist für die meisten der hier untersuchten Ionenzahlen sprunghaft. Auch oberhalb von  $\alpha_{\text{krit}_2}$  finden sprunghafte Übergänge in andere Konfigurationen statt, eine genauere Untersuchung dieses Anisotropiebereichs ist aber nicht Teil dieser Arbeit.

Desweiteren sind die Symmetrieparameter  $\alpha_{\text{sym}_1}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2}$  für Ionenkristalle gerader Ionenzahl von experimenteller Bedeutung, wie in Abschnitt 4.1.2 erläutert. Abbildung 5.1 zeigt, welche Struktur ein Kristall gerader Ionenzahl in den jeweiligen Parameterbereichen einnimmt.

Der Übergang in die Zickzack-Konfiguration bei  $\alpha_{\text{krit}_1}$  ist in der  $y$ -Auslenkung des äußeren Ions weniger deutlich erkennbar als in den Kristallmaßen (siehe Abbildung 4.3), da die mittleren Ionen wesentlich stärker ausgelenkt werden. Kaum erkennbar sind in



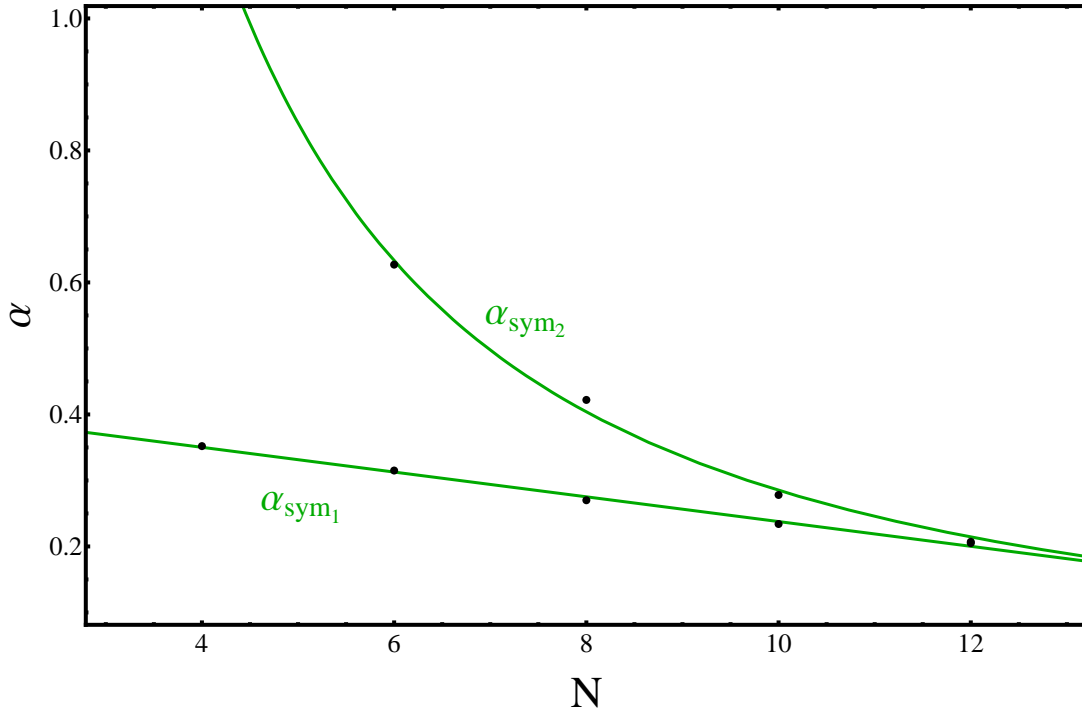
**Abbildung 5.1.:** Konfigurationsübergänge eines Sechs-Ionenkristalls. Hier ist ausschließlich die berechnete  $y$ -Auslenkung des äußersten linken Ions gegen die Anisotropie  $\alpha$  aufgetragen. Etwa 1000 Positionsberechnungen dienten zur Erstellung der Grafik.

den Kristallmaßen hingegen die beiden Symmetrieparameter, welche bei ausschließlicher Betrachtung des äußeren Ions leicht identifizierbar werden. Anhand dieser Darstellung konnten für Ionenkristalle gerader Ionenzahl die in Tabelle 5.1 aufgeführten Symmetrieparameter ermittelt werden. Die Parameter wurden hier auf drei Dezimalstellen genau ermittelt, höhere Präzision lässt sich durch kleinere Schrittweiten der Anisotropie-Iteration erzielen.

Ionenzahl $N$	4	6	8	10	12
$\alpha_{\text{sym}_1}$	0.352	0.315	0.270	0.234	0.205
$\alpha_{\text{sym}_2}$	-	0.627	0.422	0.278	0.207

**Tabelle 5.1.:** Berechnete Symmetrieparameter von Kristallen gerader Ionenzahl.

Für vier Ionen existiert kein zweiter Konfigurationsübergang  $\alpha_{\text{sym}_2}$ , bei dem sich eine weniger symmetrische Struktur einstellt. Der Abstand der beiden Parameter sinkt mit steigendem  $N$  und für  $N > 12$  konnte keine sehr symmetrische Konfiguration gefunden werden. Für  $\alpha_{\text{sym}_1}$  ergibt sich ein eher linearer Zusammenhang,  $\alpha_{\text{sym}_2}$  nimmt hingegen eher mit einer Potenz von  $N$  ab. Abbildung 5.2 zeigt einen Fit an beide Parameter. Die Fits für  $\alpha_{\text{sym}_1} = aN + b$  und  $\alpha_{\text{sym}_2} = pN^q$  zeigen, dass das Verhalten der berechneten Parameter relativ gut durch den unterstellten funktionalen Zusammenhang beschrieben



**Abbildung 5.2.:** Fit an die berechneten Symmetrieparameter gerader Ionenzahl. Für  $N = 12$  ist der Abstand zwischen beiden Parametern sehr gering, siehe Tabelle 5.1.

werden kann, allerdings ist die Anzahl der in diesen Fit einfließenden Werte sehr gering. Als Fitparameter ergeben sich für  $\alpha_{\text{sym}_1}$ :  $a = -0.0188(7)$  und  $b = 0.425(7)$ . Für  $\alpha_{\text{sym}_2}$  ergibt sich:  $p = 10.4(16)$  und  $q = -1.56(8)$ . Die Parameter des zweiten Fits sind stärker fehlerbehaftet als die des Ersten. Dies bestätigt den Eindruck, der sich bereits aus dem größeren Abstand der berechneten Werte zur Fitfunktion aus der Grafik ergibt.

Die Berechnung des kritischen Parameters  $\alpha_{\text{krit}_1}$  kann mit Hilfe von Gleichung 2.28 vorgenommen werden. Dazu muss der höchste Eigenwert der Matrix  $A$  (Gleichung 2.23) bestimmt werden, dies ist für höhere Ionenzahlen nur durch numerische Diagonalisierung möglich. Die auf diese Weise berechneten kritischen Parameter für  $N = 3 - 25$  finden sich in Anhang A.2. Es zeigt sich, dass Kristalle höherer Ionenzahlen bereits bei geringen Anisotropien in die Zickzack-Konfiguration übergehen. Ein Fit der Form  $\alpha_{\text{krit}_1} = cN^\beta$  an die errechneten Werte liefert folgende Parameter:  $c = 3.05(4)$  und  $\beta = -1.820(9)$ . Für höhere Ionenzahlen wurden diese Rechnungen mittels Moleküldynamik durchgeführt [Schiffer (1993)], experimentelle Ergebnisse finden sich in [Enzer u. a. (2000)]. Die Tabelle 5.2 zeigt einen Vergleich mit den in diesen Arbeiten gefunde-

nen Parametern.

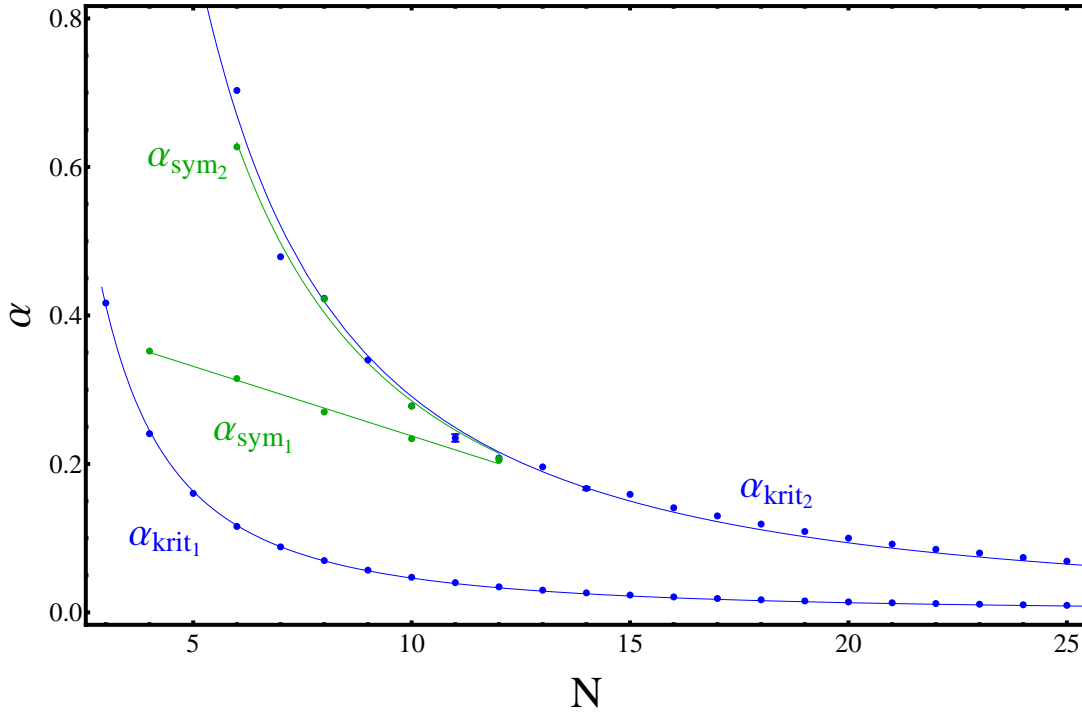
Quelle	$c$	$\beta$
Diese Arbeit $N = 3 - 25$ (theo.)	3.05(4)	-1.820(9)
Schiffer $N = 10, 25, 70, 180, 500$ (theo.)	2.53	-1.73
Enzer $N = 3 - 10$ (exp.)	$3.23^{+0.06}_{-0.2}$	-1.83(4)
Enzer $N = 3 - 10$ (theo.)	2.94(7)	-1.80(1)
Enzer $N = 3 - 100$ (theo.)	2.88(3)	-1.773(3)

**Tabelle 5.2.:** In verschiedenen Publikationen ermittelter kritischer Anisotropieparameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ . Für die Parameter aus [Schiffer (1993)] liegt keine Angabe der Fehler vor.

Die geringen Abweichungen in den Konstanten  $c$  und  $\beta$  entstehen dadurch, dass in den angeführten Publikationen kleine Ionenzahlen für den Fit weniger stark gewichtet wurden als Große. Der hier angewandte Fit wichtet jedoch alle Ionenzahlen gleichermaßen.

Die Berechnung des kritischen Parameters  $\alpha_{\text{krit}_2}$  erfolgte an Hand von Sprüngen in den Kristallmaßen, wie sie in Abbildung 4.3 zu sehen sind. Erst für  $N \geq 6$  können solche Sprünge beobachtet werden. Die ermittelten Werte für  $N = 6 - 25$  finden sich in Anhang A.2. Bei elf und 14 Ionen war der Übergang nicht sprunghafter Natur, wie sonst bei allen anderen hier untersuchten Ionenzahlen, daher werden diese Parameter mit einem Fehlerbereich versehen. Der kritische Parameter zeigt ein ähnliches Verhalten wie  $\alpha_{\text{krit}_1}$ , die Kristalle gehen für hohe Ionenzahlen bereits bei niedrigen Anisotropien in Strukturen über, die aus mehr als zwei Ebenen bestehen. Ein Fit der Form  $\alpha_{\text{krit}_2} = gN^h$  liefert folgende Parameter:  $g = 12.49(97)$  und  $h = -1.633(36)$ . Aus den relativ geringen Fehlern und dem Verlauf der Kurve in Abbildung 5.3 lässt sich schließen, dass der unterstellte funktionale Zusammenhang das Verhalten der errechneten Werte relativ gut beschreibt. Ähnliche Rechnungen für verschieden geladene Teilchen finden sich in [Ferreira u. a. (2008), W. P. Ferreira u. Peeters (2010)] und für eine dreidimensionale Betrachtung in [Dubin (1993)].

Es ist gut erkennbar, dass der Abstand zwischen  $\alpha_{\text{sym}_2}$  und  $\alpha_{\text{krit}_2}$  für größere Ionenzahlen abfällt. Dieser Verlauf und die mit steigendem  $N$  abnehmende Differenz zwischen  $\alpha_{\text{sym}_1}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2}$  sind die Ursachen dafür, dass im Bereich  $N > 12$  kein Symmetrieparameter  $\alpha_{\text{sym}_1}$  mehr auftritt. Auch der Abstand zwischen  $\alpha_{\text{krit}_1}$  und  $\alpha_{\text{krit}_2}$  wird mit zunehmenden  $N$  immer geringer.



**Abbildung 5.3.:** Sämtliche berechneten Anisotropieparameter. Für  $N = 8, 10, 12$  ist der Abstand zwischen  $\alpha_{\text{sym}_2}$  und  $\alpha_{\text{krit}_2}$  sehr gering, es gilt für  $6 \leq N \leq 12$  aber jeweils  $\alpha_{\text{sym}_2} < \alpha_{\text{krit}_2}$ .

Evaluert man den Fit für  $\alpha_{\text{krit}_2} = 12.49N^{-1.633}$  für  $N = 4$ , so ergibt sich ein Wert von 0.902. Eine eingehende Untersuchung konnte jedoch in diesem Anisotropiebereich keinen Übergang der Art feststellen, wie er für höhere Ionenzahlen stattfindet. Die Evaluation der Fits für  $\alpha_{\text{krit}_2}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2}$  bei  $N = 4$  beziehungsweise  $N = 3$  liefert Werte über 1. Anisotropien von  $\alpha > 1$  bedeuten jedoch lediglich, dass statt  $\omega_z$  in diesem Bereich  $\omega_y$  die niedrigste Fallenfrequenz ist, die Kristalle drehen sich also in der Ebene um  $90^\circ$  und es treten die gleichen Übergänge auf wie im niedrigen Anisotropiebereich.

## 5.2. Gemessene Konfigurationsänderungen

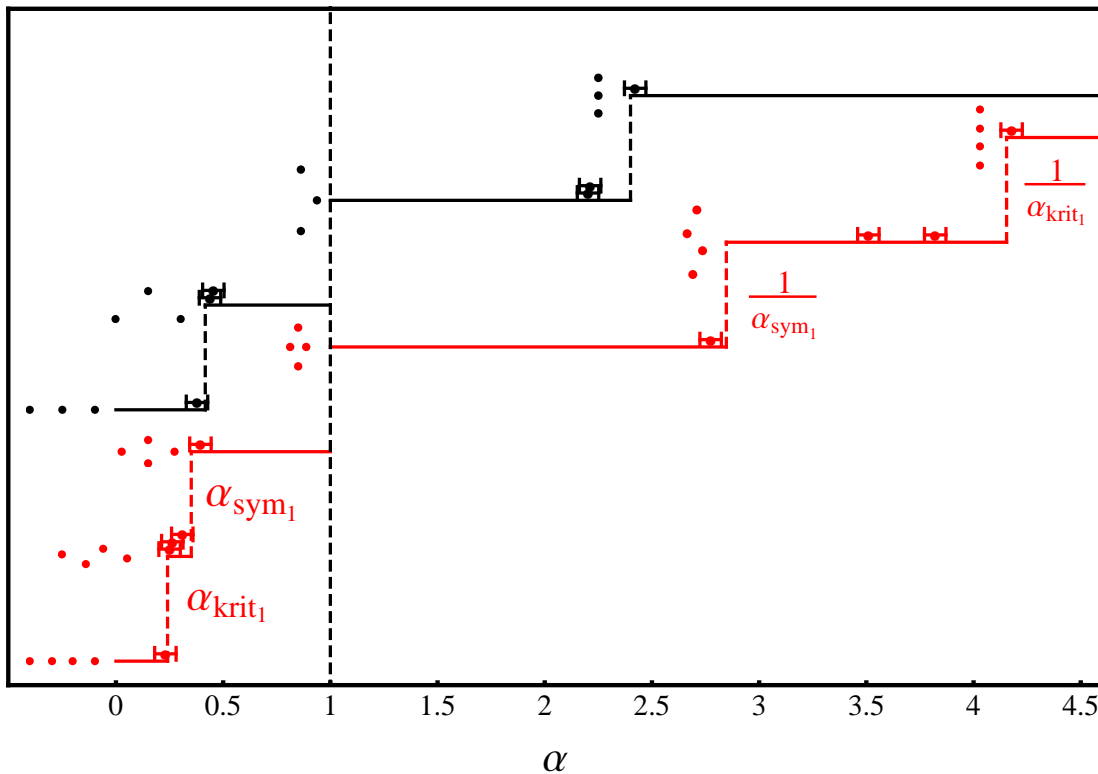
Um die oben berechneten Parameter experimentell zu bestätigen, wurden Messungen an einem Drei- und Vier-Ionenkristall sowohl in der Stabfalle, als auch in der Implantationsfalle vorgenommen. Die segmentierte Implantationsfalle wurde verwendet, weil Ionenkristalle in dieser Falle auch bei hohen Anisotropien von  $\alpha > 1$  stabil waren. Die

Messungen für  $\alpha < 1$  konnten hingegen an der Stabfalle durchgeführt werden und fanden bei Fallenspannungen von  $U_{ax} = 400V$  und  $U_{komp} = -0.183$ , sowie einer Amplitude der Antriebsfrequenz von  $U_{RF} = 300(15)V_{pp}$  statt. Zur Veränderung der Anisotropie, variierte ausschließlich die Offset-Spannung  $U_{off}$ . Die Konfigurationsübergänge wurden anhand der Ionenpositionen auf dem CCD-Bild beobachtet, daher ist der Fehler in den jeweiligen Anisotropieparametern mit  $\Delta\alpha = 0.05$  relativ hoch geschätzt. Zur Messung der Fallenfrequenzen diente wieder die Schwingungsanregung der Ionen über ein elektrisches Wechselfeld.

Um auch Konfigurationsübergänge im hohen Anisotropiebereich zu untersuchen, wurden die Konfigurationsänderungen in der Implantationsfalle auf gleiche Weise beobachtet. Zur Erstellung eines geeigneten Potentials lag an allen Segmenten, außer an Segment sechs, eine positive Gleichspannung von 2.0 V an. Die Spannung  $U_6$  an Segment sechs hingegen variierte im negativen Gleichspannungsbereich um verschiedene Anisotropien zu erreichen. Wie auch in der Stabfalle lag die Amplitude der Antriebsfrequenz bei  $300(15)V_{pp}$ . Eine zusätzliche geringe Gleichspannung  $U_{komp} = 0.026V$  diente dazu die Ionen in das Minimum des radialen Fallenpotentials zu bewegen. Diese Spannung liegt zu  $+U_{komp}/2$  und  $-U_{komp}/2$  jeweils auf allen Segmenten eines DC-Flügelpaars an. Auf den Endkappen der Falle wurde eine Wechselfeldspannung im Millivolt-bis Volt-Bereich angelegt, um die Schwerpunktsmoden der Ionen anzuregen und so die Fallenfrequenzen zu messen.

Die an beiden Fallen gemessenen Frequenzen und beobachteten Konfigurationsübergänge sind in Anhang A.1(D) aufgeführt. Abbildung 5.4 stellt sämtliche gemessenen Konfigurationsübergänge dar.

Bei einer Anisotropie von  $\alpha > 1$  ist  $\omega_y$  die niedrigste Fallenfrequenz, daher finden die kritischen Übergänge in diesem Bereich bei den Inversen der für den kleinen Anisotropiebereich berechneten Werte statt. Es lag bei keiner Messung eine Abweichung in eine falsche Stufe beziehungsweise Konfiguration vor, allerdings ist der Fehler in der Anisotropie relativ hoch, da die Übergänge in den Kristallkonfigurationen lediglich visuell ermittelt wurden. Bei sehr hohen Anisotropien war es in der Implantationsfalle schwierig, eine bestimmte Anisotropie einzustellen, da das Potential empfindlich auf kleine Spannungsänderungen reagiert. Daher liegen die Werte etwas weiter entfernt von den jeweiligen Übergängen als im geringeren Anisotropiebereich. Wie bereits in Abschnitt 5.1 erläutert, existiert für den Drei-Ionenkristall nur  $\alpha_{krit1}$  und für den Vier-Ionenkristall ausschließlich  $\alpha_{krit1}$  und  $\alpha_{sym1}$ . Der in Abbildung 4.17 dargestellte gemessene 17-Ionen-Zickzack-Kristall liegt bei einer Anisotropie jenseits von  $\alpha_{krit2}$  und zeigt die berechnete



**Abbildung 5.4.:** Gemessene und berechnete Konfigurationsübergänge eines Drei- und Vier-Ionenkristalls. Die Leserichtung der Grafik ist von niedriger zu hoher Anisotropie  $\alpha$  zu verstehen. Jede neue Konfiguration ist am Beginn einer neuen Stufe dargestellt. Die experimentell beobachteten Konfigurationen befinden sich jeweils auf der zugehörigen Stufe. Für den Drei-Ionenkristall finden sich lediglich Übergänge bei  $\alpha_{\text{krit}_1}$  und  $1/\alpha_{\text{krit}_1}$ .

Struktur. Daher kann in gewissem Rahmen von einer experimentellen Verifizierung auch dieses Parameters ausgegangen werden. Es ist also gelungen verschiedene Kristallkonfigurationen und Übergänge sowohl im niedrigen, als auch im hohen Anisotropiebereich experimentell zu verifizieren.





# 6

## Ionenschwingungsmoden: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

Inhalt dieses Kapitels ist die experimentelle und theoretische Untersuchung der Schwingungsmoden von Zickzack-Ionenkristallen. Abschnitt 6.1 stellt die Berechnung der miteinander komplexen *Zickzack-Schwingungsmoden* vor. Die Abschnitte 6.2 und 6.3 zeigen die berechneten Modenfrequenzen der Zickzack-Kristalle in Abhängigkeit der Ionenzahl und der Anisotropie. Über die Konfigurationsänderungen offenbart sich hierbei eine Verbindung zu Kapitel 5. Im Rahmen dieser Arbeit ist es erstmals gelungen, Zickzack-Moden eines Drei-Ionen-Kristalls durch spektroskopische Messungen zu ermitteln. Abschnitt 6.4 zeigt die aufgenommenen Spektren und ermittelten Frequenzen der Moden.

### 6.1. Berechnung der Moden

Die Berechnung der Eigenmoden mehrdimensionaler Ionenkristalle erfolgt mittels der Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der Hessematrix  $D$  (siehe Gleichung 2.21). Dafür sind zunächst die Gleichgewichtspositionen der Ionen nötig, deren Berechnung in Kapitel 4 erläutert wurde. Die berechneten axialen Schwingungsmoden linearer Ionenkristalle finden sich für bis zu zehn Ionen in [James (1998)]. Axiale und radiale Eigenmoden für lineare Kristalle sind in Abbildung 6.1 dargestellt.

Die axiale Mode bei  $\sqrt{3}\omega_z$  ist die bereits erwähnte Atmungsmode und die Mode bei  $\sqrt{29/5}\omega_z$  wird auch *ägyptische Mode* genannt. Als *Schermode* wird die Mode bei  $\sqrt{\omega_r^2 - \omega_z^2}$  bezeichnet. Da sich für Zickzack-Kristalle die Hessematrix  $D$  nicht mehr auf eine einfache Blockdiagonalform reduziert, wie in Abschnitt 2.2.2 dargestellt, müssen die Eigenwerte und Eigenvektoren numerisch bestimmt werden. Dies wurde mit der

6. Ionenschwingungsmoden: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

Ionenanzahl	Schwingungsmoden					
	axial			radial		
1	$\omega_z$ 			$\omega_r$ 		
2	$\omega_z$ 	$\sqrt{3}\omega_z$ 		$\omega_r$ 	$\sqrt{\omega_r^2 - \omega_z^2}$ 	
3	$\omega_z$ 	$\sqrt{3}\omega_z$ 	$\sqrt{\frac{29}{5}}\omega_z$ 	$\omega_r$ 	$\sqrt{\omega_r^2 - \omega_z^2}$ 	

**Abbildung 6.1.:** Schwingungsmoden linearer Ionenkristalle. Die radialen Fallenfrequenzen werden hier mit  $\omega_r$  bezeichnet.

Mathematica Routine *Eigensystem* ermöglicht und erforderte im Vergleich zur Berechnung der Gleichgewichtspositionen kaum Rechenaufwand. Der Quelltext zur Ermittlung der Eigenmoden und Eigenvektoren ist in Anhang A.3(B) abgebildet und nimmt auch eine dreidimensionale Berechnung für Schwingungen vor, die in  $x$ -Richtung stattfinden, wenn  $\omega_x$  die höhere der beiden radialen Fallenfrequenzen ist.

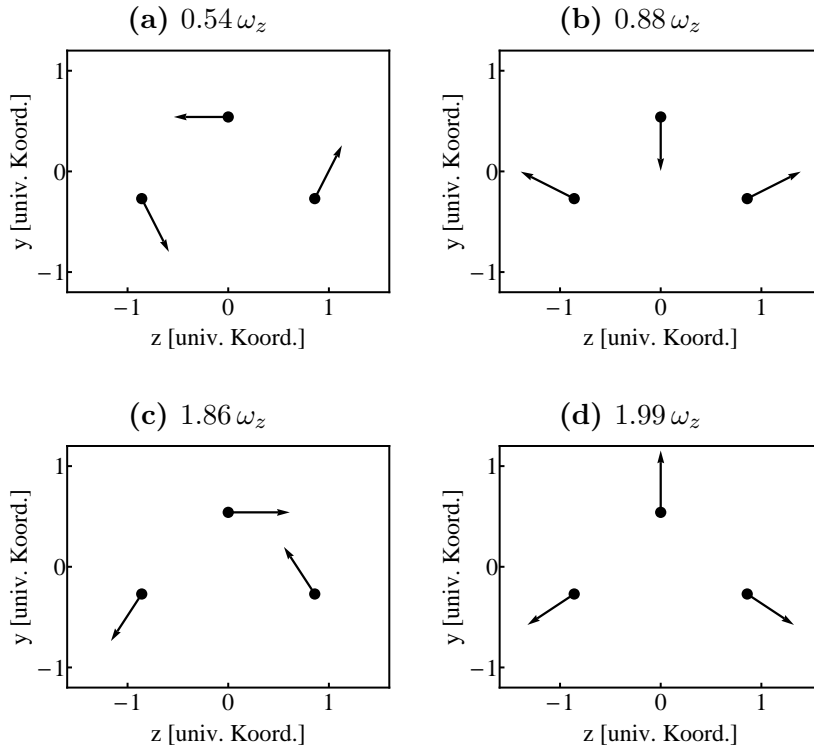
Für einen Drei-Ionen-Zickzack-Kristall ergeben sich bei einer Anisotropie von  $\alpha = 0.55$  die in Tabelle 6.1 angegebenen Eigenvektoren und Eigenwerte.

Gut sind die jeweiligen Schwerpunktsmoden bei  $\omega_x, \omega_y$  und  $\omega_z$  erkennbar. Da es sich um einen planaren Zickzack-Kristall handelt und die obere radiale Fallenfrequenz  $\omega_x$  wesentlich höher ist als die beiden anderen Fallenfrequenzen ergeben sich zwei Frequenzbänder. Im unteren Band, welches sich von  $0.54\omega_z$  bis  $1.99\omega_z$  erstreckt und aus  $2 \cdot N$  Moden besteht, schwingen die Ionen in der Zickzack-Ebene ( $y$ - $z$ ). Im oberen Band, welches  $N$  Moden enthält und von  $3.77\omega_z$  bis  $4.00\omega_z$  beziehungsweise  $\omega_x$  verläuft, schwingen sie ausschließlich in  $x$ -Richtung. In Abbildung 6.2 werden die planaren Zickzack-Moden skizziert, die in der Tabelle angegeben sind. Zur Erstellung der Skizzen wurden die normierten Eigenvektoren aus Tabelle 6.1 ohne zusätzliche Skalierung verwendet.

Bereits aus den Werten in der Tabelle sind gewisse Ähnlichkeiten unter den Moden erkennbar, allerdings werden diese auch durch Rundungsfehler verursacht, perfekte Symmetrien liegen hier nicht vor. Aus der Grafik ist nun erkennbar, dass die Moden in

$x_1$	-0.58	0.71	0.41	0	0	0	0	0	0
$x_2$	-0.58	0	-0.82	0	0	0	0	0	0
$x_3$	-0.58	-0.71	0.41	0	0	0	0	0	0
$y_1$	0	0	0	-0.31	-0.47	0.58	0	0.26	-0.53
$y_2$	0	0	0	0.61	0	0.58	0	-0.53	0
$y_3$	0	0	0	-0.31	0.47	0.58	0	0.26	0.53
$z_1$	0	0	0	-0.47	-0.31	0	-0.58	-0.53	0.27
$z_2$	0	0	0	0	0.61	0	-0.58	0	-0.54
$z_3$	0	0	0	0.47	-0.31	0	-0.58	0.53	0.27
$\omega_{Mode}$	$\omega_x$	$3.87 \omega_z$	$3.77 \omega_z$	$1.99 \omega_z$	$1.86 \omega_z$	$\omega_y$	$\omega_z$	$0.88 \omega_z$	$0.54 \omega_z$

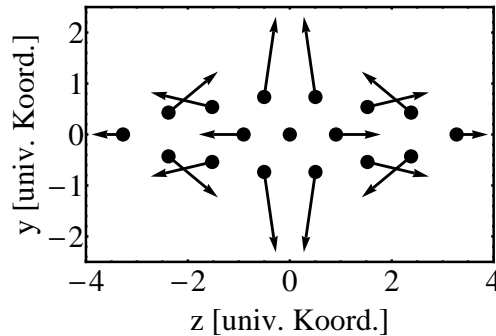
**Tabelle 6.1.:** Berechnete Eigenmoden eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls. Die Einträge  $x_n$  geben jeweils den Anteil des Eigenvektor des  $n$ -ten Ions in  $x$ -Richtung an. Multipliziert mit  $\omega_z$  stellen die Eigenwerte der Matrix die Frequenzen der Moden  $\omega_{Mode}$  dar. Die radialen Fallenfrequenzen wurden gewählt zu  $\omega_x = 4\omega_z$  und  $\omega_y = \omega_z/\sqrt{0.55} = 1.35\omega_z$ .



**Abbildung 6.2.:** Berechnete planare Zickzack-Moden eines Drei-Ionenkristalls. Die Pfeile stellen jeweils die Eigenvektoren der zugehörigen Eigenmode dar und zeigen die Richtung an, in der die Ionen bei dieser Mode oszillieren.

Abbildung 6.2a und 6.2c sowie in 6.2b und 6.2d Gemeinsamkeiten aufweisen. Bei Letzteren schwingen die äußeren Ionen in  $z$ -Richtung jeweils gegeneinander, und das mittlere Ion schwingt nur in  $y$ -Richtung. Die Mode in Abbildung 6.2d hat gewisse Ähnlichkeiten mit der Atmungsmode, da auch hier alle Ionen zusammen in die Kristallmitte schwingen und anschließend wieder nach außen.

Abbildung 6.3 zeigt wie komplex die verschiedenen Moden in großen Ionenkristallen werden können.



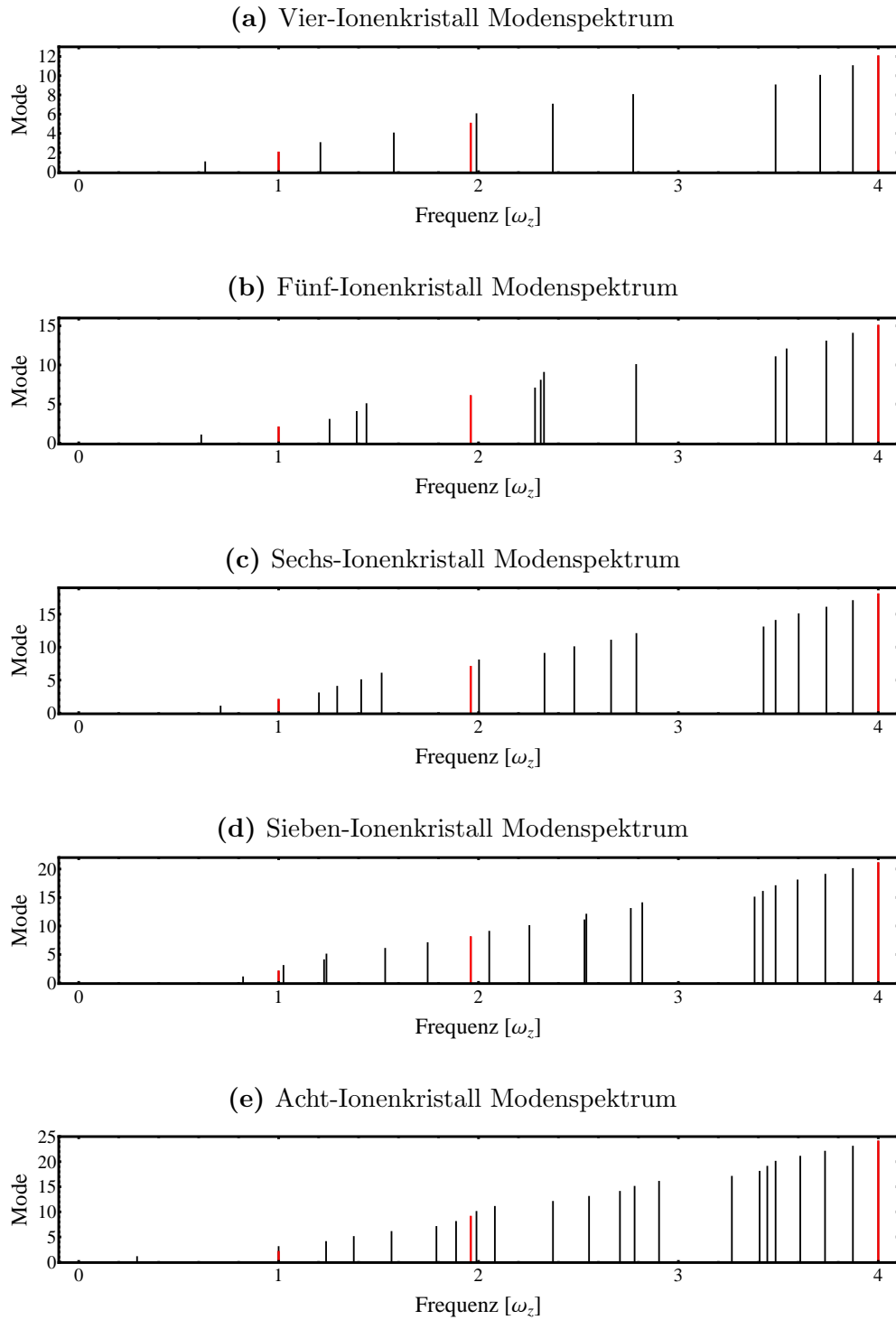
**Abbildung 6.3.:** Schwingungsmode eines 17-Ionen-Zickzack-Kristalls. Die eingezeichneten Vektoren sind nicht normiert, sondern wurden zwecks besserer Darstellung skaliert.

Die Frequenz der gezeigten Mode liegt bei  $3.46\omega_z$  und die Gleichgewichtspositionen sind die, des in dieser Arbeit vermessenen 17-Ionenkristalls (siehe Abbildung 4.17). Deutlich ist bei dieser Mode eine Spiegelsymmetrie bezüglich der  $y$ -Achse erkennbar.

## 6.2. Modenspektren in Abhängigkeit der Ionenzahl

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie sich die Spektren der Schwingungsmoden bei Veränderung der Ionenzahl unter konstanter Anisotropie verhalten. Dazu werden die Eigenmoden von Zickzack-Ionenkristallen, bestehend aus vier bis acht Ionen, betrachtet. Die Ionenzahlen wurden so gewählt, weil sich für diese Kristalle eine gemeinsame Anisotropie  $\alpha = 0.26$  finden lässt, für die gilt:  $\alpha_{\text{krit}_1} < \alpha < \alpha_{\text{krit}_2}$ . Abbildung 6.4 zeigt, die berechneten Modenspektren.

Gut ist zu erkennen, dass die Lücke zwischen dem unteren und dem oberen Frequenzband mit steigender Ionenzahl abnimmt, da jeweils die höchste Mode im unteren Band in ihrer Frequenz steigt und die niedrigste Mode im oberen Band in ihrer Frequenz abfällt. Die obersten drei Moden im oberen Frequenzband verändern sich nur marginal bei steigender Ionenzahl.



**Abbildung 6.4.:** Berechnete Modenspektren verschieden großer Zickzack-Ionenkristalle. Rote Balken stehen für die Fallenfrequenzen. Die Moden sind jeweils nach aufsteigender Frequenz nummeriert. Für die Fallenfrequenzen gilt:  $\omega_x = 4 \omega_z$ ,  $\omega_y = 1.96 \omega_z$  und  $\omega_z = 1$ .

Bei allen Kristallen liegt mindestens eine Mode unter der axialen Fallenfrequenz, im Fall von acht Ionen sind es zwei. Bemerkenswert ist, dass in allen Spektren im unteren Frequenzband jeweils  $N - 1$  Zickzack-Moden über der unteren radialen Fallenfrequenz liegen. Für hohe Anisotropien verschwindet diese Anordnung allerdings.

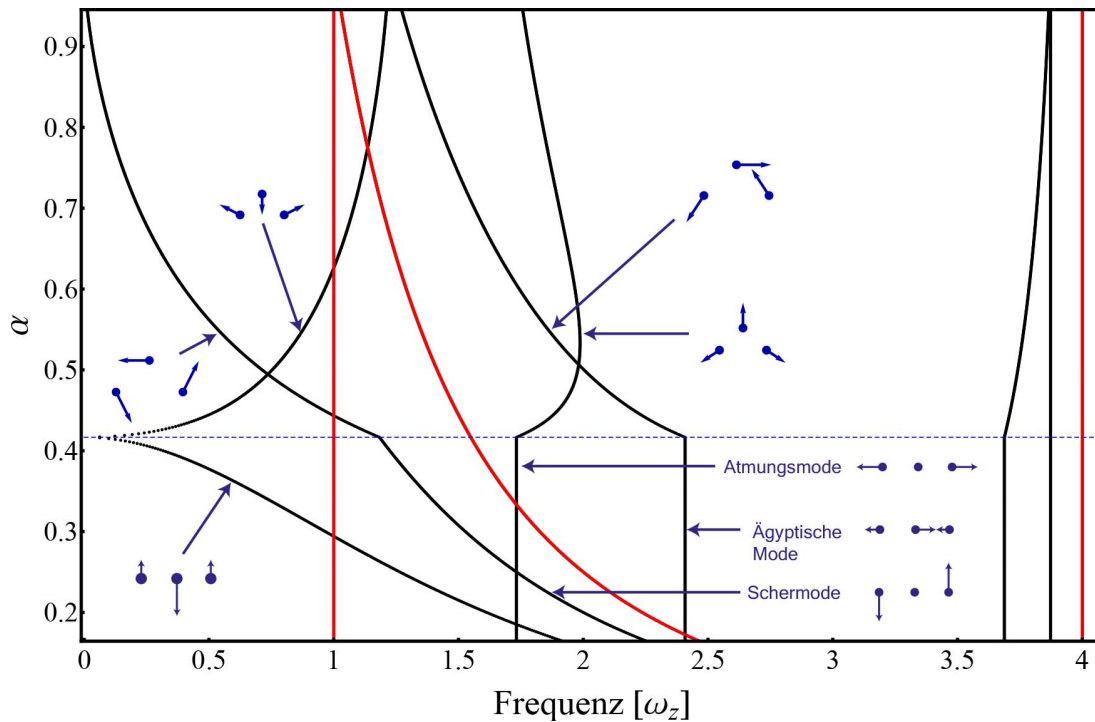
### 6.3. Modenspektren in Abhängigkeit der Anisotropie

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie sich Schwingungsmoden von Ionenkristallen unter Anisotropievariationen verhalten. Dazu werden unter anderem die Eigenmoden des Drei-Ionenkristalls analysiert, die für fest bestimmte Fallenfrequenzen bereits in Abschnitt 6.1 berechnet wurden. Abbildung 6.5 zeigt das Modenspektrum eines Drei-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$ . Hierbei wurde die obere radiale und die axiale Fallenfrequenz konstant gehalten.

Im linearen Anisotropiebereich für  $\alpha < 0.417$  verhalten sich die Moden proportional zu den jeweiligen Fallenfrequenzen. Da hier nur die untere radiale Fallenfrequenz variiert wird, nehmen bei deren Abnahme auch die zugehörigen Frequenzen der *Radialmoden* ab. Die axiale und die obere radiale Fallenfrequenz sind konstant und somit ändern sich im linearen Bereich auch die zugehörigen Moden nicht.

Nach dem Zickzack-Übergang findet sich in jedem der berechneten Modenverläufe im unteren Frequenzband ein Knick, der auf die abrupte Positionsänderung der Ionen zurückzuführen ist. Im oberen Frequenzband zeigt sich für die Schermode keine Veränderung bei zunehmender Anisotropie. Die niedrigste Mode im oberen Frequenzband hingegen zeigt eine Veränderung beim Eintreten der Zickzack-Struktur, ihre Frequenz nimmt zu und sie nähert sich asymptotisch der Schermode an.

Auffällig ist, dass die bereits oben erwähnte Zickzack-Mode, welche eine Ähnlichkeit mit der Atmungsmode aufweist, auch aus dieser hervorgeht. Bei  $\alpha = 0.55$  sind hier wieder die Skizzen der Moden aus Abbildung 6.2 eingetragen. Trotz Überschneidungen der Modenverläufe bleiben die Eigenvektoren entlang eines Verlaufs weitgehend identisch. Aus der Schermode geht eine ähnliche Mode hervor, in der die beiden äußeren Ionen in  $y$ -Richtung gegenphasig schwingen. Die unbenannte tiefere Radialmode verschwindet bei  $\alpha = \alpha_{\text{krit}_1}$ . Anschließend geht aus ihr eine Mode hervor, in der die Vektorkomponenten in  $y$ -Richtung das gleiche Verhalten zeigen. Die ägyptische Mode geht in eine Schwingungsform über, in der das Verhalten in axialer Richtung mit dem der linearen Mode übereinstimmt.

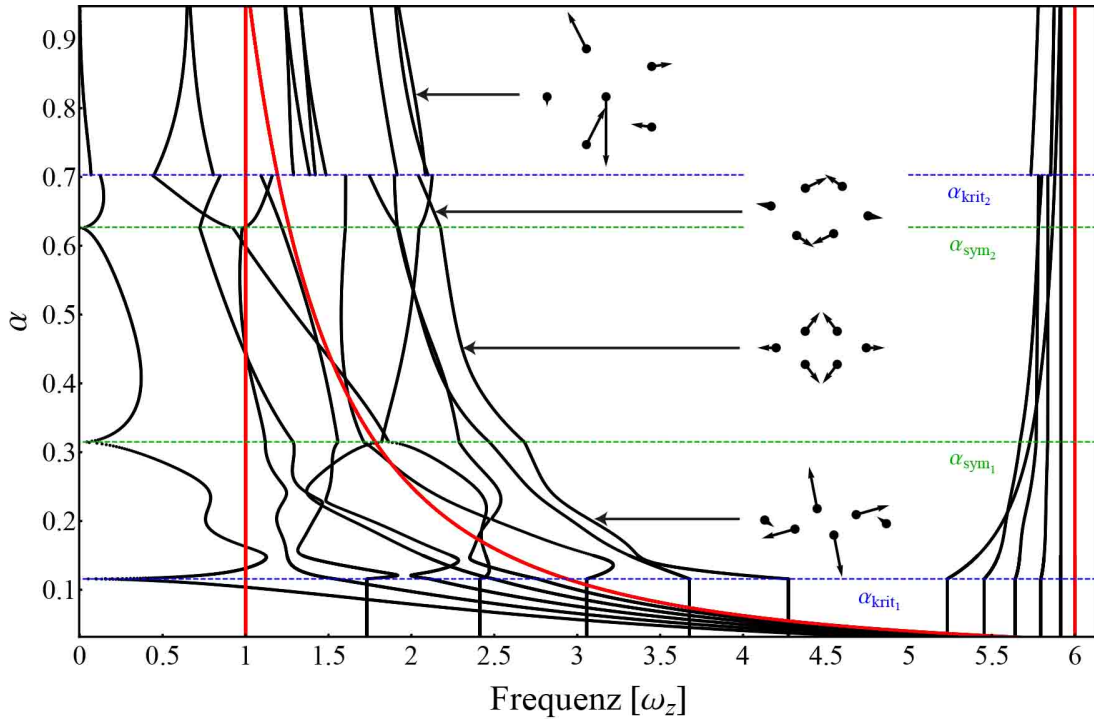


**Abbildung 6.5.:** Berechnetes Modenspektrum eines Drei-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$ . Rote Linien sind die vorgegebenen Schwerpunktsmoden, schwarze Linien die berechneten Moden. An verschiedenen Stellen sind die Eigenvektoren der planaren Moden skizziert. Die gestrichelte Linie markiert den Übergang in die Zickzack-Konfiguration. Zur Berechnung des Spektrums wurden etwa 1000 einzelne Berechnungen durchgeführt. Für die Fallenfrequenzen gilt ähnlich wie oben:  $\omega_x = 4\omega_z$ ,  $\omega_y = \omega_z/\sqrt{\alpha}$  und  $\omega_z = 1$ .

Die hier ermittelten Modenverläufe decken sich mit Berechnungen in [Fishman u. a. (2008), Baltrusch u. a. (2011)]. Nimmt man zur Ermittlung der Modenverläufe eine konstante untere radiale Fallenfrequenz an und variiert die axiale Fallenfrequenz, so ergeben sich qualitativ identische Modenverläufe im Zickzack-Bereich. Variiert man zusätzlich noch die obere radiale Fallenfrequenz so stellt man fest, dass diese erst einen Einfluss auf die Moden im unteren Frequenzband hat, sobald sich der Kristall auch in  $x$ -Richtung ausdehnt.

In Kapitel 5 wurden die Konfigurationsänderungsparameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ ,  $\alpha_{\text{sym}_1}$ ,  $\alpha_{\text{sym}_2}$  und  $\alpha_{\text{krit}_2}$  ermittelt. Bereits im Modenspektrum für drei Ionen kann man den niedrigsten dieser Parameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$  deutlich anhand der Modenverläufe identifizieren. Um zu untersuchen, ob auch die anderen Parameter im Spektrum sichtbar sind, empfiehlt es sich wegen der geringeren Modenanzahl das Spektrum eines möglichst kleinen Kristalls zu

berechnen. Der kleinste Kristall, für den alle vier Parameter relevant sind, ist der Sechsen-Ionen-Kristall. Abbildung 6.6 zeigt das berechnete Spektrum dieses Kristalls bei fester axialer und oberer radialer Fallenfrequenz.



**Abbildung 6.6.:** Berechnetes Modenspektrum eines Sechsen-Ionenkristalls in Abhängigkeit der Anisotropie  $\alpha$ . Rote Linien sind die vorgegebenen Schwerpunktsmoden, schwarze Linien die berechneten Moden. In jedem Anisotropiebereich ist die oberste Mode aus dem unteren Frequenzband für eine willkürlich gewählte Anisotropie skizziert. Die gestrichelten Linien markieren Konfigurationsübergänge. Für die Fallenfrequenzen gilt:  $\omega_x = 6\omega_z$ ,  $\omega_y = \omega_z/\sqrt{\alpha}$  und  $\omega_z = 1$ .

Deutlich ist auch in diesem Spektrum der Übergang vom linearen Kristall in den Zickzack-Kristall anhand der blauen gestrichelten Linie bei  $\alpha_{\text{krit}_1} = 0.116$  zu erkennen. Die grüne gestrichelte Linie bei  $\alpha_{\text{sym}_1} = 0.315$  markiert den Übergang in eine sehr symmetrische Struktur. Anhand der niedrigsten aller Moden ist dieser Übergang im Spektrum erkennbar und auch andere Modenverläufe im unteren Frequenzband erfahren hier einen Knick. Die skizzierte Mode in diesem Bereich weist hohe Symmetrie auf. Der Übergang aus der besonders symmetrischen Struktur in eine punktsymmetrische Struktur bei  $\alpha_{\text{sym}_2} = 0.627$  ist durch eine weitere grüne gestrichelte Linie gekennzeichnet. Wiederum ist der Übergang an der niedrigste Mode besonders gut identifizierbar. Bei  $\alpha_{\text{krit}_2} = 0.703$  findet ein sprunghafter Konfigurationsübergang statt, welcher deut-



lich anhand von einigen unstetigen Modenverläufen, unter anderem auch im oberen Frequenzband, erkennbar ist.

Dieses Spektrum ist wesentlich komplexer als das eines Drei-Ionenkristalls, beispielsweise wechseln die Eigenvektoren der einzelnen Moden während Erhöhungen der Anisotropie häufig die Richtung. Für höhere Ionenzahlen finden sich weitere Modenspektren in [Schweigert u. Peeters (1995), Ferreira u. a. (2003)] und für nicht-planare Kristalle in [Apolinario u. a. (2008)].

## 6.4. Analyse der gemessenen Spektren eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls

Die Schwerpunktsmoden von Zickzack-Ionenkristallen lassen sich mit Hilfe der in Abschnitt 3.7 beschriebenen Anregung über ein elektrisches Wechselfeld ermitteln. In den Zickzack-Moden bewegen sich die Ionen hingegen in sehr unterschiedliche Richtungen, daher ließen sich diese Moden nicht auf diese Weise anregen. Eine weitere Möglichkeit, die Schwingungsmoden von Ionenkristallen zu ermitteln, ist die in Abschnitt 3.5 beschriebene Spektroskopie mit einem Laser bei 729 nm. Die im Folgenden präsentierten Messungen entstammen spektroskopischen Messungen an der Mikrofalle (Abschnitt 3.2). Mittels negativer Gleichspannungen an drei Segmenten im mittleren Bereich der Ladezone wurde ein Potential erzeugt, in welchem sich mehrere Ionen fangen ließen. Für drei Ionen ergab sich unter den eingestellten Spannungen eine Zickzack-Konfiguration. An den Segmenten wurden die folgenden Spannungen eingestellt: Segment vier:  $-6.592\text{ V}$ , Segment fünf:  $-10.000\text{ V}$  und Segment sechs:  $-7.414\text{ V}$ , alle anderen Segmente lagen auf Massepotential. Während sämtlicher Messungen wurde ausschließlich die Spannung des mittleren fünften Segments, welche im Weiteren als  $U_m$  bezeichnet wird, variiert. Weiterhin betrug die Amplitude der Antriebsfrequenz stets  $U_{\text{RF}} = 420(10)V_{\text{pp}}$ .

Da die Komplexität der Spektren mit der Ionenzahl zunimmt, ist es sinnvoll zunächst die Fallenfrequenzen mittels Spektroskopie eines einzelnen gefangenen Ions zu bestimmen. Im Weiteren wird mit  $\omega_y$  die tiefere radiale Fallenfrequenz bezeichnet. Es ergeben sich die in Tabelle 6.2 aufgeführten Frequenzen.

Das Spektrum, aus dem die Fallenfrequenzen ermittelt wurden, findet sich in Anhang A.1(E). Die Schrittweite, mit der die Verstimmung der Laserfrequenz durchgeführt wurde und welche die Genauigkeit der Messungen limitiert, betrug in allen Messun-

$\omega_x/2\pi$	$\omega_y/2\pi$	$\omega_z/2\pi$
2.934(7) MHz	1.678(7) MHz	1.258(7) MHz

**Tabelle 6.2.:** Fallenfrequenzen eines einzelnen Ions bei  $U_m = -10$  V.

gen 4 kHz. Zusätzlich trägt zum Fehler die Aufnahmedauer eines Spektrums von etwa 40 min bei, während der Aufnahmen ließ sich beispielsweise eine leichte Drift in der Amplitude der Antriebsfrequenz der Falle beobachten. Die Fehler in den Frequenzen werden daher auf 10 kHz geschätzt, wobei sich der Fehler jeweils durch Mittelwertbildung der Frequenzen des roten und blauen Seitenbandes auf  $10/\sqrt{2}$  kHz = 7 kHz reduziert. Bei jeder Frequenz-Iteration wurden 100 Einzelmessungen zur Ermittlung der Besetzung des  $D_{5/2}$ -Zustands durchgeführt.

Eine Vergleichsmessung in einem veränderten Potential bei  $U_m = -9$  V diente zur Verifizierung der Zuordnung einzelner Peaks zu den jeweiligen Schwingungsmoden. Da sich der axiale Einschluss bei einer geringeren Spannung auf dem mittleren Segment vermindert, erwartet man ein Absinken der axialen Fallenfrequenz. Für die radialen Frequenzen geht man hingegen nach der Paulfallentheorie von einem Anstieg aus. Aus dem in Anhang A.1(E) einsehbares Spektrum ergeben sich die in Tabelle 6.3 aufgeführten Frequenzen.

$\omega_x/2\pi$	$\omega_y/2\pi$	$\omega_z/2\pi$
2.984(7) MHz	1.860(7) MHz	1.126(7) MHz

**Tabelle 6.3.:** Fallenfrequenzen eines einzelnen Ions bei  $U_m = -9$  V.

Da die axiale Fallenfrequenz abnimmt und die beiden radialen Fallenfrequenzen ansteigen, kann von einer sicheren Zuordnung der Peaks zu den jeweiligen Schwingungsmoden ausgegangen werden.

Um das Signal-Rausch-Verhältnis in den komplexen Drei-Ionen-Spektren zu verbessern, wurden drei Parameter zwischen den einzelnen Aufnahmen der Spektren verändert.

- **Laserleistung des Spektroskopielasers  $P_L$**

Diese wird hier einheitenlos angegeben und ist nur relativ zu verstehen. Sie wurde in einem Bereich von 0.20 bis 0.35 variiert und bewegt sich im unteren Milliwatt-Bereich. Für die Drei-Ionen-Spektren wurde eine höhere Leistung gewählt um die

Zickzack-Moden anregen zu können. Zu hohe Leistungen führen zu einem sehr hohen Rauschen im Spektrum.

- **Dauer des Spektroskopieimpulses  $T_{\text{spec}}$**

Während dieses Zeitintervalls ist der Spektroskopielaser in einer Pulssequenz angeschaltet. Sie bewegte sich im Bereich von 100–800  $\mu\text{s}$ , wobei zu hohe Pulsdauern zu mehr Rauschen im Spektrum führten. Bei zu kurzen Pulsdauern hingegen fand kaum eine Anregung in den  $D_{5/2}$ -Zustand statt.

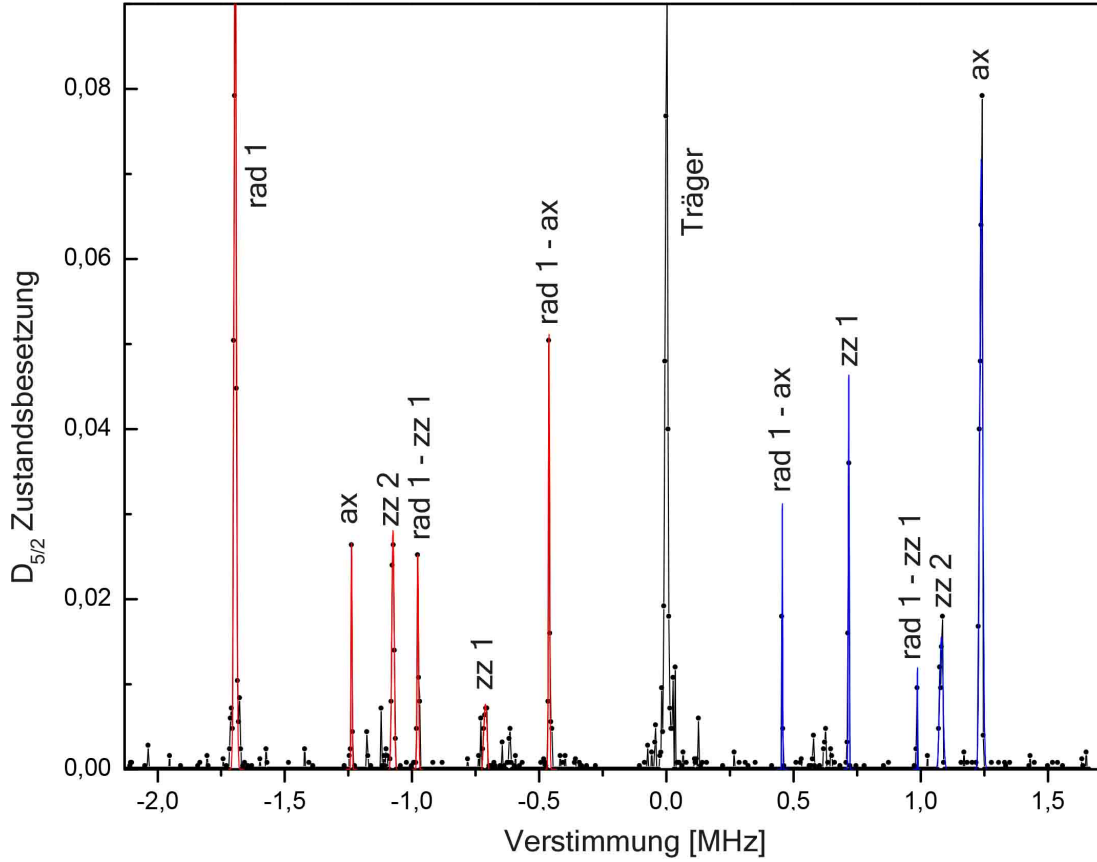
- **Dauer des Dopplerkühlens  $T_{\text{k}}$**

Mittels längerem Dopplerkühlen konnten die Ionen zwischen den einzelnen Anregungssequenzen durch den Spektroskopielaser zuverlässig in den  $4^2S_{1/2}$ -Zustand gekühlt werden. Eine größere Kühlzeit hat sich während der Messungen nicht als nachteilig erwiesen, sie verlängert jedoch die Aufnahme eines Spektrums. Oberhalb einer Kühlzeit von  $T_{\text{k}} \approx 8 \text{ ms}$  konnte keine signifikante Verbesserung der Spektren festgestellt werden.

Bei der Aufnahme sämtlicher Spektren wurde das Fluoreszenzsignal aller drei Ionen im Kristall zur Auslese verwendet, da die so entstandenen Spektren ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis hatten und mehr Anregungen einzelner Moden enthielten, als Messungen in denen nur eines der Ionen im Kristall zur Fluoreszenzdetektion diente. Abbildung 6.7 zeigt ein Spektrum, welches aus zwei einzelnen Spektren von Drei-Ionen-Zickzack-Kristallen gewonnen wurde. Beide Spektren entstammen dem gleichen Potential bei  $U_{\text{m}} = -9.9\text{V}$ . Anschließend wurden die Spektren so exakt wie möglich übereinander gelegt und die Werte der  $D_{5/2}$ -Zustandsbesetzung beider Spektren miteinander multipliziert. Das resultierende Spektrum ist im Vergleich zu den einzelnen Spektren, die Anhang A.1(E, Abbildung A.3 und A.4) entnommen werden können, daher sehr rauscharm.

Alle Peaks, für die sich sowohl ein rotes als auch ein blaues Seitenband ablesen lässt, sind farblich markiert. Der Datenbereich des Spektrums ist asymmetrisch, da eines der beiden Spektren im positiven Frequenzverstimmungsbereich vor dem Ende der Messung abgebrochen werden musste. Die untere radiale Fallenfrequenz ließ sich dennoch anhand des zweiten vollständigen Spektrums identifizieren und ist hier im roten Seitenband markiert. Tabelle 6.4 zeigt die Frequenzen, die sich aus den Gauß-Fits der einzelnen Peaks ergeben.

Die Anregungen im blauen Seitenband liegen tendenziell höher als die im roten Seitenband, daher liegt das Zentrum des Spektrums vermutlich etwas weiter im positiven



**Abbildung 6.7.:** Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei  $U_m = -9.9V$ . Das Spektrum wurde aus der Multiplikation zweier einzelner Spektren gewonnen. Rote Gauß-Fits an den einzelnen Peaks deuten an, dass es sich um die roten Seitenbänder (RSB) handelt. Die Abkürzungen in der Grafik stehen für folgende Schwingungsmoden: ax  $\rightarrow$  axiale Schwerpunktsmode ( $\omega_z/2\pi$ ), rad 1  $\rightarrow$  radiale Schwerpunktsmode ( $\omega_y/2\pi$ ), zz 1  $\rightarrow$  unterste Zickzack-Mode ( $\omega_{zz\ 1}/2\pi$ ).

Mode	rad 1 - ax	zz 1	rad 1 - zz 1	zz 2	ax	rad 1
Verstimmung RSB [MHz]	-0.462	-0.711	-0.977	-1.075	-1.237	-1.695
Verstimmung BSB [MHz]	0.456	0.717	0.985	1.081	1.238	-

**Tabelle 6.4.:** Ermittelte Frequenzen der Anregungen aus dem Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls bei  $U_m = -9.9V$ .

Verstimmungsbereich als angegeben. Die mit *rad 1 - ax* bezeichnete Anregung, deren Verstimmung aus der Subtraktion der ersten radialen von der axialen Fallenfrequenz

resultiert, konnte als solche identifiziert werden, da sie auch in Spektren einzelner Ionen auftrat. Anregungen dieser Art entstehen lediglich durch Linearkombinationen einzelner Schwingungsmoden, beziehungsweise der zu ihnen korrespondierenden Phononen-Energien. Auch die Anregung bei *rad 1 - zz 1* ist von dieser Natur, bedingt durch die starke Ausprägung der radialen Seitenbänder treten hier zwei Moden auf welche aus Linearkombinationen dieser Bänder entstehen.

Bildet man aus den beiden axialen Fallenfrequenzen einen Mittelwert, so ergibt sich  $\omega_z/2\pi = 1.2375(71)$  MHz. Für die untere Radialmode wurde der Wert  $\omega_y/2\pi = 1.695(10)$  MHz ermittelt, es ergibt sich eine Anisotropie von  $\alpha = 0.533$ . Tabelle 6.5 zeigt die aus diesen Frequenzen errechneten Zickzack-Moden.

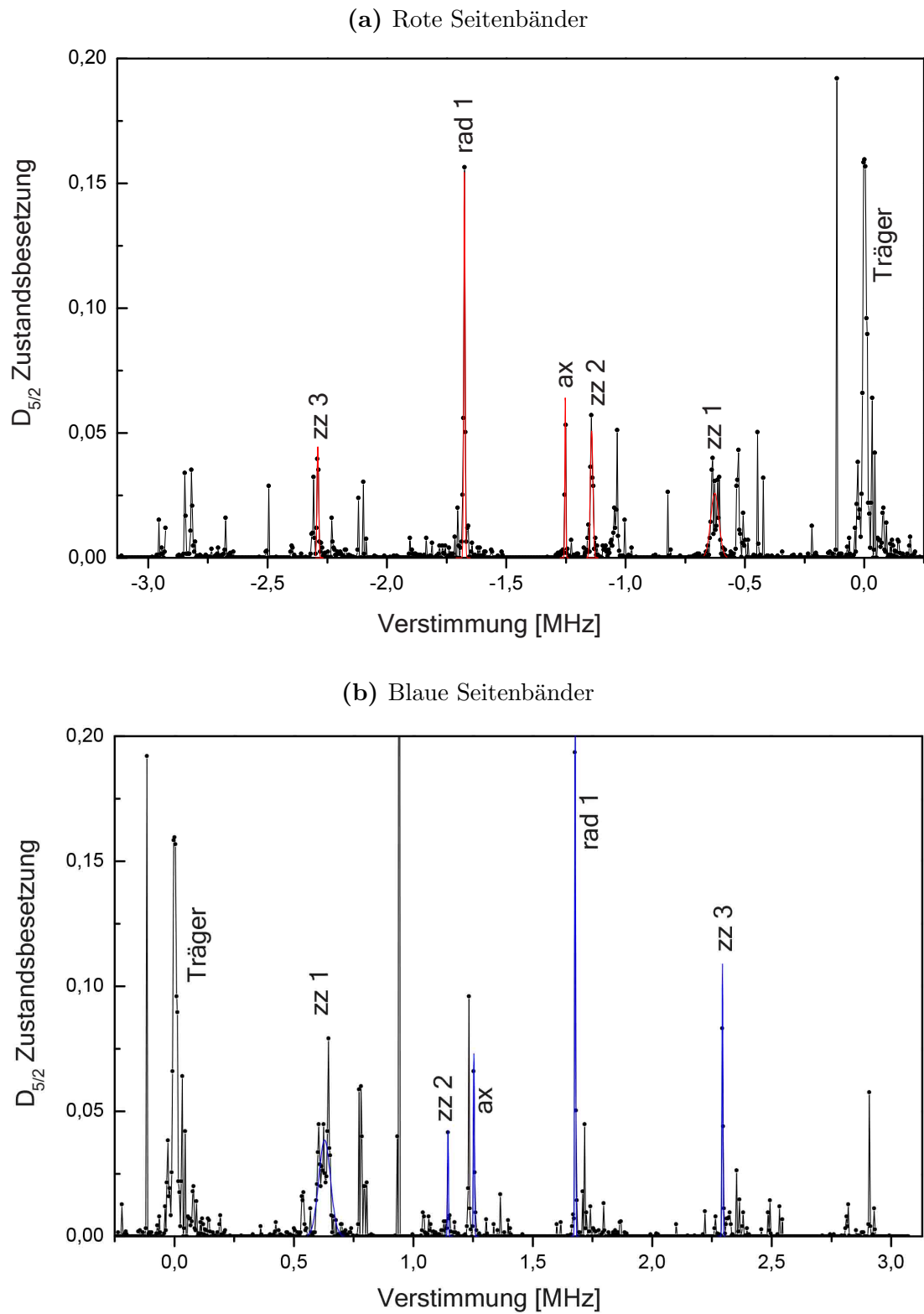
Mode	Frequenz [MHz]	Unsicherheitsbereich [MHz]
$\omega_{zz\ 1}/2\pi$	0.730	0.683-0.778
$\omega_{zz\ 2}/2\pi$	1.041	0.998-1.081

**Tabelle 6.5.:** Aus den gemessenen Fallenfrequenzen berechnete Zickzack-Moden bei  $U_m = -9.9$  V.

Der Unsicherheitsbereich dieser berechneten Frequenzen wurde anhand der Unsicherheiten in den Fallenfrequenzen ermittelt. Dazu wurde für jede mögliche Kombination fehlerbehafteter Fallenfrequenzen eine Positions- und Modenberechnung durchgeführt. Die planaren Zickzack-Moden drei und vier liegen in einem Frequenzbereich, der nicht mehr vom Spektrum erfasst wurde und werden daher nicht aufgeführt.

Bildet man jeweils den Mittelwert aus den experimentell ermittelten Frequenzen, so ergibt sich für die unterste Zickzack-Mode:  $\omega_{zz\ 1, \text{exp}}/2\pi = 0.714$  MHz. Dieser Wert weicht um  $-16$  kHz vom berechneten Wert ab, liegt aber in dessen Unsicherheitsbereich. Für die zweite Zickzack-Mode ergibt sich:  $\omega_{zz\ 2, \text{exp}}/2\pi = 1.078$  MHz. Dies bedeutet eine Abweichung von  $+37$  kHz vom berechneten Wert, dessen Unsicherheitsbereich mit dem experimentell ermittelten Wert vereinbar ist.

Um die Messergebnisse in diesem Potential zu verifizieren, wurde eine Vergleichsmessung bei  $U_m = -10.0$  V durchgeführt. Bei dieser Messung wurden wiederum zwei separate Spektren aufgenommen und deren Werte für die  $D_{5/2}$ -Zustandsbesetzung miteinander multipliziert. Das resultierende Spektrum ist in Abbildung 6.8 dargestellt und erstreckt sich über einen größeren Bereich als die oben gezeigte Messung. Die beiden einzelnen Spektren finden sich in Anhang A.1(E), Abbildung A.5 und A.6).



**Abbildung 6.8.:** Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei  $U_m = -10.0V$ . Das Spektrum wurde aus der Multiplikation zweier einzelner Spektren gewonnen.

Es ergibt sich für dieses Spektrum ein etwas schlechteres Signal-Rausch-Verhältnis als für die in Abbildung 6.7 gezeigte Messung, da hier mit einer etwas höheren Dauer des Spektroskopiepulses gearbeitet wurde. Bei einer Verstimmung von etwa +0.9 MHz musste die Messung in einem der beiden Spektren pausiert werden, da die Ionen die Falle verlassen hatten und somit die fehlende Fluoreszenz vom Detektionsalgorithmus als Anregung interpretiert wurde. Tabelle 6.6 zeigt die Frequenzen, welche sich für die farblich markierten Seitenbänder ergeben.

Mode	zz 1	zz 2	ax	rad 1	zz 3
Verstimmung RSB [MHz]	-0.627	-1.143	-1.253	-1.676	-2.290
Verstimmung BSB [MHz]	0.629	1.145	1.254	1.677	2.294

**Tabelle 6.6.:** Ermittelte Frequenzen der Anregungen aus dem Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls bei  $U_m = -10V$ .

Für die Fallenfrequenzen ergibt sich durch Mittelwertbildung:  $\omega_y/2\pi = 1.6765(71)$  MHz und  $\omega_z/2\pi = 1.2535(71)$  MHz. Die Anisotropie ist somit höher als in der vorherigen Messung und beträgt  $\alpha = 0.559$ . Es ergeben sich die in Tabelle 6.7 aufgeführten Frequenzen für die Zickzack-Moden.

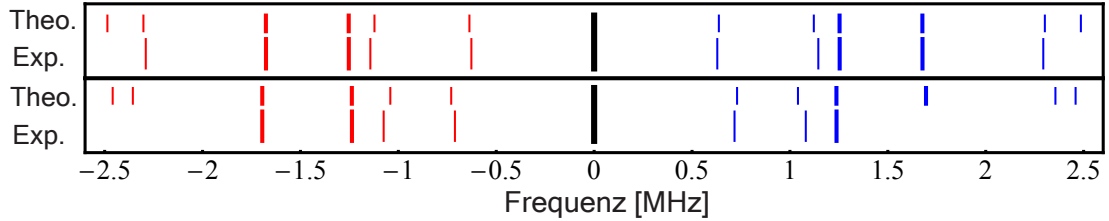
Mode	Frequenz [MHz]	Unsicherheitsbereich [MHz]
$\omega_{zz\ 1}/2\pi$	0.637	0.601-0.674
$\omega_{zz\ 2}/2\pi$	1.122	1.089 -1.155
$\omega_{zz\ 3}/2\pi$	2.302	2.281-2.322
$\omega_{zz\ 4}/2\pi$	2.486	2.473 -2.500

**Tabelle 6.7.:** Aus gemessenen Fallenfrequenzen berechnete Zickzack-Moden ( $U_m = -10V$ ).

Für die unterste Zickzack-Mode ergibt sich der experimentelle Wert von  $\omega_{zz\ 1, \text{exp}}/2\pi = 0.628$  MHz, welcher um  $-9$  kHz vom berechneten Wert abweicht. Die zweite Zickzack-Mode ergibt sich zu  $\omega_{zz\ 2, \text{exp}}/2\pi = 1.144$  MHz. Dies bedeutet eine Abweichung um  $+22$  kHz von der berechneten Frequenz. Eine Abweichung von  $-10$  kHz liegt für die dritte gemessene Zickzack-Mode vor, deren Frequenz sich zu  $\omega_{zz\ 3, \text{exp}}/2\pi = 2.292$  MHz ergibt. Sämtliche experimentell ermittelten Zickzack-Moden liegen hier im Unsicherheitsbereich der berechneten Werte.

## 6. Ionenschwingungsmoden: Theorie im Vergleich mit dem Experiment

Die vierte Zickzack-Mode konnte nicht ermittelt werden, eventuell sind höhere Laserleistungen nötig, um auch diese anregen zu können. Abbildung 6.9 gibt eine Übersicht über alle aus den beiden oben gezeigten Spektren ermittelten Zickzack-Moden.



**Abbildung 6.9.:** Gemessene und berechnete planare Zickzack-Moden eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls. Oberer Kasten: Messung bei  $U_m = -10$  V, unterer Kasten: Messung bei  $U_m = -9.9$  V. Dicke Balken stehen für die axiale und die untere radiale Fallenfrequenz, sowie den Träger. Dünne Balken stellen die gemessenen beziehungsweise berechneten planaren Zickzack-Moden dar.

Gut ist hier zu erkennen, dass bereits kleine Anisotropieänderungen einen großen Einfluss auf die Frequenzen der Zickzack-Moden haben. Der Vergleich zwischen beiden Spektren zeigt, dass sich die unteren zwei gemessenen Zickzack-Moden bei Änderungen der Anisotropie qualitativ so wie die berechneten Moden verschieben. Für die dritte gemessene Zickzack-Mode lässt sich diesbezüglich keine Aussage treffen, da das Spektrum bei  $U_m = -9.9$  V diesen Frequenzbereich nicht umfasst. Die erste Zickzack-Mode zeigt in beiden Spektren relativ kleine Abweichungen, genau wie die dritte Mode im Spektrum bei  $U_m = -10.0$  V. Die zweite Zickzack-Mode zeigt allerdings in beiden Spektren positive Frequenzabweichungen, die zwar jeweils noch im Unsicherheitsbereich liegen, aber dennoch auf einen systematischen Fehler hindeuten könnten. Dies weiter zu untersuchen bedürfte allerdings der Aufnahme weiterer Spektren.

Abschließend lässt sich festhalten, dass drei der vier planaren Zickzack-Moden mit hoher Sicherheit in den Spektren identifiziert werden konnten. Da in keinem der Drei-Ionen-Spektren die obere radiale Fallenfrequenz ermittelt werden konnte, war es nicht möglich die beiden nicht-planaren Zickzack-Moden zu errechnen. Die Frequenz konnte zwar an einem Spektrum eines einzelnen Ions gefunden werden, jedoch sind die zeitlichen Abstände zwischen den Aufnahmen der Spektren zu groß um eine sichere Zuordnung zu gewährleisten.

Vergleichbare Resultate liegen bisher nur für lineare Kristalle vor, beispielsweise in [Rohde u. a. (2001)]. Erstmals konnten somit Zickzack-Eigenmoden in Ionenkristallen mit Hilfe spektroskopischer Messungen verifiziert werden.

Andere Experimente [Melzer (2003)] lieferten bisher nur Resultate geringerer Präzision



für derartige Moden. Dort finden sich auch gemessene Modenspektren für höhere Ionennummern, die verwendete Methode zur Bestimmung der Frequenzen unterscheidet sich allerdings grundlegend von der hier angewandten Vorgehensweise, da die Beobachtung Brown'scher Bewegung von *Mikrosphären* zur Bestimmung der Eigenmoden diente.



# 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen zahlreiche Eigenschaften planarer  $^{40}\text{Ca}^+$ -Zickzack-Ionenkristalle theoretisch zu untersuchen und in drei verschiedenen Ionenfallen experimentell zu verifizieren. Mittels einer eigens erstellten Software Routine und einer CCD-Kamera konnten die Gleichgewichtspositionen in den Kristallen mit hoher Präzision errechnet und experimentell verifiziert werden. Die minimale mittlere Abweichung von den berechneten Positionen beträgt mit 49 nm nur etwa 2/100 eines Pixels der Kamera und die kleinste prozentuale Abweichung betrug 0.004% in der Kristallhöhe. An keinem der beobachteten Kristalle der Ionenzahlen fünf bis 17 konnten signifikante Positionsabweichungen von der Theorie festgestellt werden, Messreihen bei variabler Anisotropie des Fallenpotentials zeigten jeweils das theoretisch vorhergesagte Verhalten. Hohe Anisotropien und Ionenzahlen limitierten die Messungen, da die Kristalle unter diesen Bedingungen schlechter gekühlt werden.

Durch die Untersuchung der Symmetrien in Zickzack-Ionenkristallen ist es gelungen zwei Symmetrieparameter  $\alpha_{\text{sym}_1}$  und  $\alpha_{\text{sym}_2}$  zu finden. Diese sind von experimenteller Bedeutung, da Ionenkristalle gerader Ionenzahl im Anisotropiebereich  $\alpha_{\text{sym}_1} \leq \alpha < \alpha_{\text{sym}_2}$  keine schnellen Konfigurationswechsel zeigen und einzelne Ionen in den Kristallen somit gut einzeln adressierbar sind. Mit Hilfe einer großen Zahl einzelner Positionsberechnungen konnte außerdem der kritische Anisotropieparameter  $\alpha_{\text{krit}_2}$  für bis zu 25 Ionen ermittelt werden, welcher ein ähnliches Verhalten zeigt wie der erste kritische Parameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ . Messungen an einem Drei- und Vier-Ionenkristall dienten dazu die Parameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ ,  $\alpha_{\text{sym}_1}$  und deren Inverse für  $\alpha > 1$  zu verifizieren. Mit dem 17-Ionenkristall konnten Positionsmessungen an einem Kristall vorgenommen werden, der sich in einem Potential jenseits von  $\alpha_{\text{krit}_2}$  befindet und die dort erwartete Struktur aufweist.

Die eigens erstellte Routine zur Berechnung der Gleichgewichtspositionen ist auch in der Lage, die Eigenmoden der Kristalle zu ermitteln. Im berechneten Modenspektrum eines Sechs-Ionenkristalls konnten sämtliche Anisotropieparameter identifiziert werden,

welche anhand von Konfigurationsänderungen in den Gleichgewichtspositionen ermittelt wurden. Da es nicht möglich war, Zickzack-Moden über elektrische Wechselfelder anzuregen, diente Seitenband Spektroskopie mit einem Laser bei 729 nm zur experimentellen Verifizierung. Erstmals konnten drei von vier planaren Zickzack-Eigenmoden in Ionenkristallen mit Hilfe spektroskopischer Messungen verifiziert werden. Experimente an *Mikrosphären* [Melzer (2003)] lieferten bisher nur Resultate geringerer Präzision für derartige Moden.

Die vierte planare Zickzack-Mode konnte vermutlich wegen zu geringer Leistung des Spektroskopielasers nicht angeregt werden. Messreihen mit höherer Leistung könnten dieses Problem beheben, wegen des schlechteren Signal-Rausch-Verhältnisses müssten allerdings eine große Zahl von Spektren aufgenommen werden.

Auch die Ermittlung des kritischen Anisotropieparameters  $\alpha_{\text{krit}_2}$  und die Beobachtung der Kristallkonfigurationen in diesem Bereich liegt im Rahmen der experimentellen Möglichkeiten. Messungen dieser Art wären in der Implantationsfalle leichter durchführbar, da hohe Anisotropiebereiche dort einfacher zugänglich sind. Interessant wären auch Berechnungen des Parameters  $\alpha_{\text{krit}_2}$  für große Ionenzahlen, welche allerdings eines hohen Rechenaufwands bedürfen.

Rasche Veränderung des Fallenpotentials können Defekte (engl. kinks) in Zickzack-Kristallen hervorrufen. Dieser *Kibble-Zurek-Mechanismus* [Del Campo u. a. (2010)] ist Gegenstand aktueller Forschung und Ziel ist es in naher Zukunft, mit Hilfe der erstellten Auswertungsroutine für Bilder der CCD-Kamera, eine hohe Statistik von Fehlstellen in Zickzack-Ionenkristallen zu erhalten.

Durch leichte Modifikationen der Routinen zur Berechnung der Gleichgewichtspositionen wäre es möglich, auch für Kristalle, welche aus Ionen verschiedener Massen sowie Ladungen bestehen, zuverlässige Vorhersagen zu erhalten. Da in den vorgestellten Ionenfallen nicht nur  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen gefangen werden können, wären experimentelle Untersuchungen an derartigen Kristallen durchaus denkbar.

Die Untersuchung der Eigenschaften von *Rydberg-Ionenkristallen* ist ein weiteres mögliches Anwendungsgebiet der hier vorgestellten Methoden. Da ein Rydberg-Ion eine andere Fallenfrequenz hat als ein Ion im Grundzustand, verändert sich für eine lineare Ionenkonfiguration, in welcher sich ein Ion in einem Rydberg-Zustand befindet, die Anisotropie [Li u. Lesanovsky (2011)]. In einer Stabfalle wird aktuell versucht, mit einem Laser bei  $\approx 122$  nm Ionen in Rydberg-Zustände anzuregen [Schmidt-Kaler u. a. (2011), Naber (2012)], daher sind Experimente dieser Art in naher Zukunft möglicherweise realisierbar.

---

Mit Hilfe einer neuen Falle, welche der Stabfalle sehr ähnlich ist und sich gerade in Entwicklung befindet, kann eine hohe Aufspaltung zwischen den beiden radialen Fallenfrequenzen erzielt werden. Dies wird erreicht über einen vergrößerten Abstand zwischen den einzelnen Stabpaaren, der Stababstand innerhalb der Paare bleibt hingegen ähnlich dem in der Stabfalle. Aus der großen Aufspaltung der Fallenfrequenzen resultiert ein großer Abstand der zu den Kristallmoden gehörigen Frequenzbänder. Dieser Abstand ist nötig um die planaren von den nicht-planaren Moden zu entkoppeln und wird es ermöglichen, Quantenmagnetismuseffekte in frustrierten Quanten-Ising-Leiterstrukturen zu untersuchen [Bermudez].





# Anhang

## A.1. Messdatenverzeichnis

### A. Messdaten: Zickzack-Kristalle verschiedener Ionenzahl

In Abschnitt 4.4 wurde jeweils nur eine der beiden energetisch äquivalenten Kristallkonfigurationen vorgestellt. Die Tabelle A zeigt die Messergebnisse der jeweils anderen energetisch äquivalenten Konfiguration.

Anzahl der Ionen	5	6	8	9	10	11
$U_{\text{off}}$ [V]	1.0	0.6	0.6	0.6	-0.6	0.6
$U_{\text{komp}}$ [V]	-0.28	-0.16	-0.16	-0.16	-0.16	-0.16
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	245.5(3.0)	287.4(3.0)	287.4(3.0)	287.4(3.0)	282.3(3.0)	287.4(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.205(5)	0.149(3)	0.149(3)	0.149(3)	0.155(4)	0.149(3)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	62.42	73.45	86.91	92.71	97.67	103.26
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	11.46(1.13)	11.77(63)	13.55(89)	14.11(72)	15.52(81)	15.10(80)
IntIonDist [ $\mu\text{m}$ ]	17.93(29)	16.53(15)	16.14(18)	16.33(15)	16.66(16)	16.49(15)
Abw./Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.11	0.14	0.20	0.09	0.20	0.09
$\frac{\text{StdAbw}}{\text{Ion}}$ ( $z$ -R.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.40	0.22	0.31	0.25	0.29	0.28
Abw. IntIonDist [%]	-0.29	0.07	-1.41	-0.73	-0.32	-0.64
Abw. Kristallhöhe [%]	0.41	1.42	-0.26	-0.72	2.32	-0.66

**Tabelle A.:** Daten der energetisch äquivalenten Konfigurationen des Fünf-, Sechs-, Acht-, Neun- und Elf-Ionen-Zickzack-Kristalls aus Abschnitt 4.4. Der axiale Einschluss betrug hier  $U_{\text{ax}} = 350$  V und somit  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz.

Auch für diese Kristalle liegen alle mittleren Positionsabweichungen innerhalb der Standardabweichung in  $z$ -Richtung. Wie schon in Abschnitt 4.4 lässt sich keine eindeutige Systematik in den prozentualen Abweichungen erkennen.

## B. Messdaten: Variation des axialen Einschlusses

Die Messungen an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall bei verschiedenen axialen Fallenspannungen wurden in Abschnitt 4.5 für  $U_{\text{off}} = -0.6 \text{ V}$  durchgeführt. Tabelle B führt nun die Daten für  $U_{\text{off}} = 0.6 \text{ V}$  auf.

$U_{\text{ax}}$ [V]	300	350	400	450
$\omega_z/2\pi$ [kHz]	100.7(4)	110.3(4)	119.3(4)	127.3(4)
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	313.8(3.0)	311.9(3.0)	310.2(3.0)	305.9(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.103(2)	0.125(3)	0.148(3)	0.173(4)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	90.06	82.83	77.01	71.97
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	8.03(50)	10.48(62)	11.58(54)	12.38(55)
Inter-Ionen-Distanz [ $\mu\text{m}$ ]	15.84(10)	15.59(13)	15.34(12)	15.25(12)
Inter-Ionen-Distanz [univ. K.]	0.772(5)	0.807(7)	0.836(6)	0.868(7)
Abweichung/Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.09	0.16	0.17	0.20
$\frac{\text{StdAbw}}{\text{Ion}}$ ( $z$ -R.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.17	0.22	0.19	0.19
Abweichung IntIonDist [%]	-0.64	-1.38	-1.51	-1.87
Abweichung Kristallhöhe [%]	-3.39	-4.00	-4.71	-4.59

**Tabelle B.:** Daten eines Sieben-Ionen-Zickzack-Kristalls bei verschiedenen axialen Fallenfrequenzen und  $U_{\text{off}} = 0.6 \text{ V}$ .

Die Messung bei positiver Offset-Spannung zeigt größere prozentuale Abweichungen als die Messung bei negativer Offset-Spannung. Bei positiver Offset-Spannung nehmen die prozentualen Abweichungen mit der Anisotropie leicht zu, bei negativer Offset-Spannung hingegen sind sie eher zufällig verteilt. Für beide Messreihen nimmt hingegen die Positionsabweichung pro Ion zu, sowohl in universellen Koordinaten, als auch in Mikrometer-Skalierung. Auch hier fallen alle prozentualen Abweichungen negativ aus.



Gemittelt über alle acht durchgeführten Messungen beträgt die prozentuale Abweichung in der Kristallhöhe  $-3.31\%$  und in der Inter-Ionen-Distanz  $-0.96\%$ .

### C. Messdaten: Variation des radialen Einschlusses

In Abschnitt 4.6 wurden an einem Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall Messungen bei fester axialer Fallenfrequenz  $\omega_z$  und variabler radialer Fallenfrequenz  $\omega_y$  durchgeführt. Die Tabelle C zeigt die Daten der in diesem Abschnitt nicht gezeigten Messungen.

$U_{\text{off}}$ [V]	0.6*	-0.6	-0.6*	0.8	-0.8	-0.8*
$\omega_y/2\pi$ [kHz]	306.8(3.0)	302.2(3.0)	302.2(3.0)	289.0(3.0)	284.3(3.0)	284.3(3.0)
Anisotropie $\alpha$	0.131(3)	0.135(3)	0.135(3)	0.148(3)	0.153(3)	0.153(3)
Kristalllänge [ $\mu\text{m}$ ]	81.99	81.70	81.70	80.77	80.39	80.39
Kristallhöhe [ $\mu\text{m}$ ]	11.45(89)	11.79(76)	11.72(78)	12.89(69)	13.15(75)	13.03(77)
IntIonDist [ $\mu\text{m}$ ]	15.86(19)	15.95(16)	15.97(16)	16.38(15)	16.44(16)	16.45(17)
Abw./Ion [ $\mu\text{m}$ ]	0.09	0.06	0.05	0.08	0.06	0.06
$\frac{\text{StdAbw}}{\text{Ion}}$ ( $z$ -R.) [ $\mu\text{m}$ ]	0.31	0.27	0.27	0.24	0.27	0.27
Abw. IntIonDist [%]	-0.32	-0.41	-0.24	0.34	-0.05	-0.02
Abw. Kristallhöhe [%]	0.33	0.26	-0.31	1.41	0.85	-0.05

**Tabelle C.:** Daten der Messung am Sieben-Ionen-Zickzack-Kristall mit festem  $\omega_z/2\pi = 111.1(4)$  kHz und variablem  $\omega_y$ . Ein Stern in der Zeile der Offset-Spannung deutet an, dass es sich hierbei um die energetisch äquivalente Konfiguration des Kristalls handelt. Die Kompensationsspannung betrug bei allen, in dieser Tabelle dargestellten, Ergebnissen  $U_{\text{komp}} = -0.16$  V.

Im Gegensatz zur Messreihe, während der der axiale Einschluss variiert wurde, lässt sich hier keine Systematik in den prozentualen Abweichungen erkennen. Gemittelt über alle neun durchgeführten Messungen beträgt die prozentuale Abweichung in der Kristallhöhe  $+0.02\%$  und in der Inter-Ionen-Distanz  $-0.28\%$ .

### D. Messdaten: Konfigurationsübergänge

Im Folgenden finden sich die in der Stabfalle beobachteten Kristallkonfigurationen aus Kapitel 5.

Konfiguration	$U_{\text{off}}$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
Linear	-1,54	199.4(3.0)	0.378(50)
Zickzack	-1.64	185.1(3.0)	0.439(50)
Zickzack	-1.66	181.9(3.0)	0.454(50)

**Tabelle D.:** Beobachtete Kristallkonfigurationen eines Drei-Ionen-Kristalls in der Stabfalle. Die axiale Fallenfrequenz betrug jeweils  $\omega_z = 122.6(4)$  kHz.

Konfiguration	$U_{\text{off}}$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
Linear	-1.06	255.3(3.0)	0.231(50)
Zickzack	-1.17	245.1(3.0)	0.250(50)
Zickzack	-1.21	239.1(3.0)	0.263(50)
Zickzack	-1.37	220.4(3.0)	0.309(50)
Kreuzgeometrie	-1.56	195.3(3.0)	0.394(50)

**Tabelle E.:** Beobachtete Kristallkonfigurationen eines Vier-Ionen-Kristalls in der Stabfalle. Die axiale Fallenfrequenz betrug jeweils  $\omega_z/2\pi = 122.6(4)$  kHz.

Im Weiteren finden sich die in der Implantationsfalle beobachteten Kristallkonfigurationen.

Konfiguration	$U_6$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\omega_z/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
Senkrecht Zickzack	-1.07	420.8(3.0)	624.4(4)	2.202(50)
Senkrecht Zickzack	-1.07	420.8(3.0)	625.8(4)	2.212(50)
Senkrecht linear	-1.10	405.6(3.0)	631.2(4)	2.422(50)

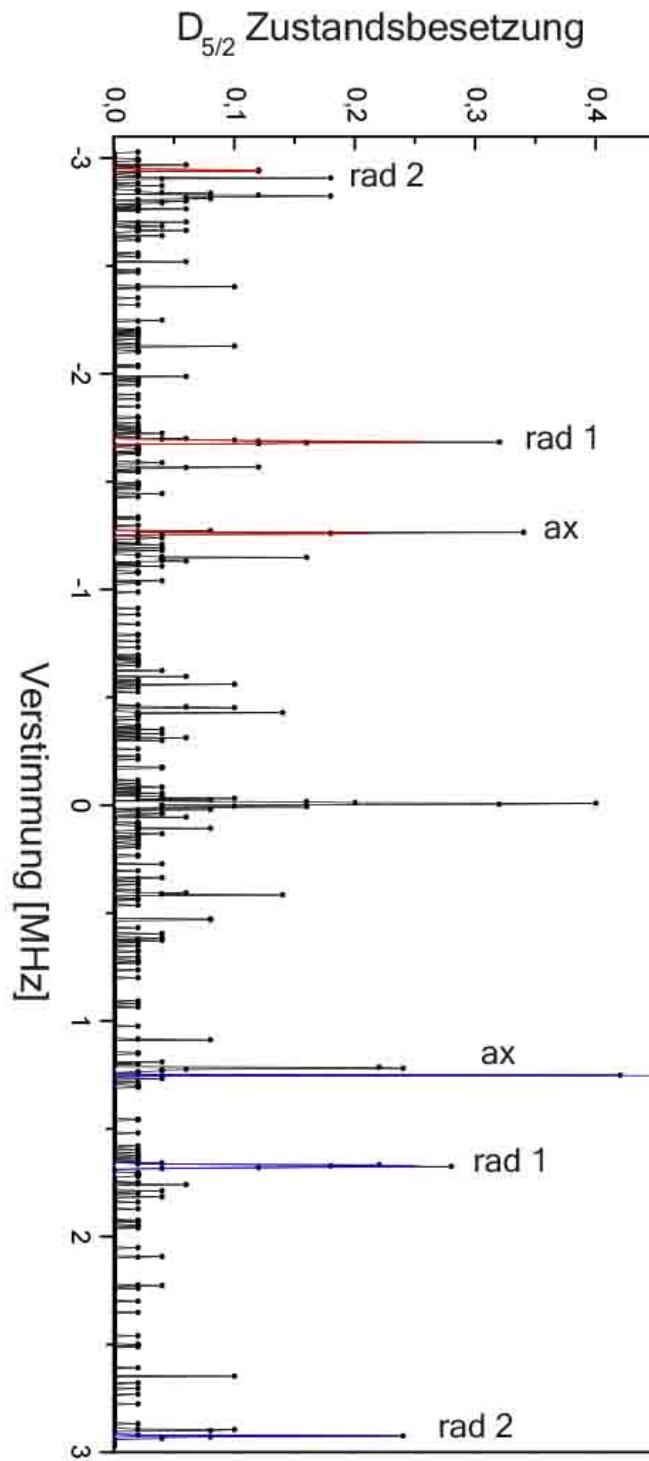
**Tabelle F.:** Beobachtete Kristallkonfigurationen eines Drei-Ionen-Kristalls in der Implantationsfalle.

Konfiguration	$U_6$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\omega_z/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
Senkrecht Kreuzgeometrie	-1.14	383.5(3.0)	638.7(4)	2.774(50)
Senkrecht Zickzack	-1.20	346.6(3.0)	649.3(4)	3.509(50)
Senkrecht Zickzack	-1.22	334.0(3.0)	652.9(4)	3.821(50)
Senkrecht linear	-1.24	321.3(3.0)	656.7(4)	4.177(50)

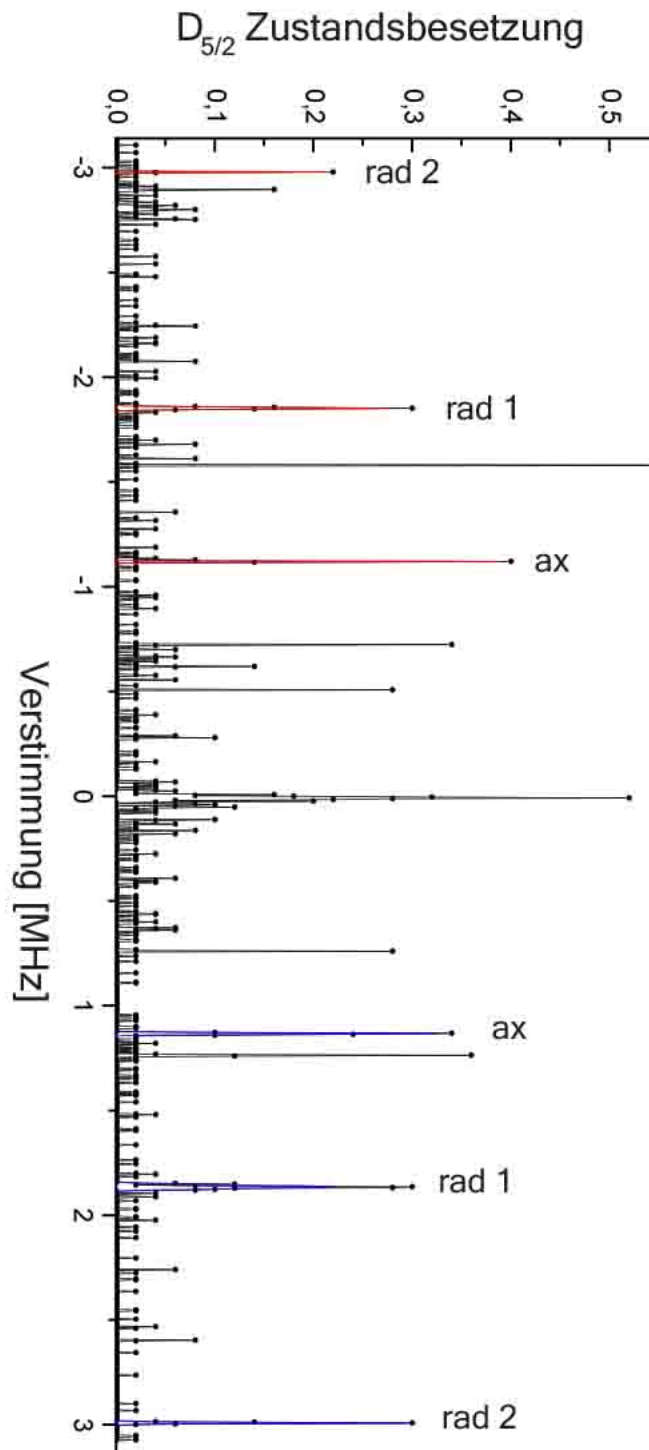
**Tabelle G.:** Beobachtete Kristallkonfigurationen eines Vier-Ionen-Kristalls in der Implantationsfalle.

## E. Messdaten: Spektren

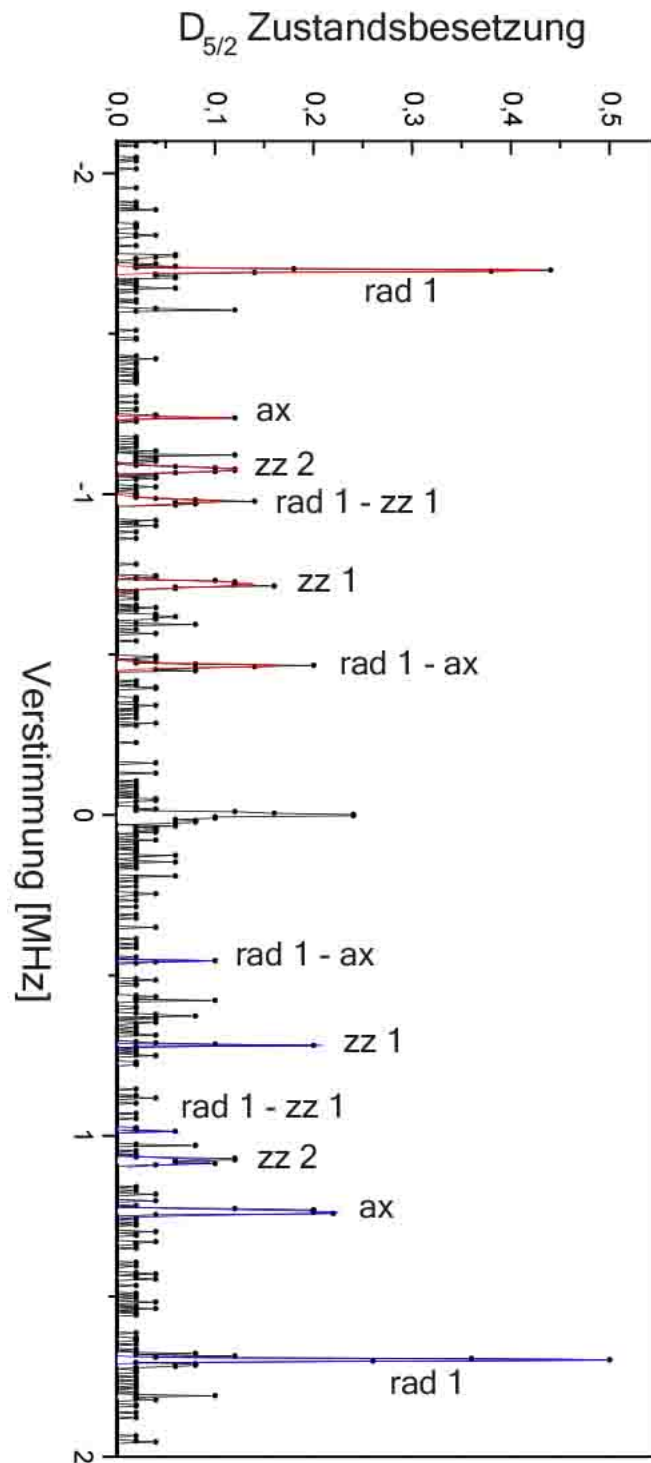
Im Folgenden befinden sich Spektren aus Messungen an einem Ion und an einem Drei-Ionen-Zickzack-Kristall, die in Abschnitt 6.4 nicht aufgeführt wurden.



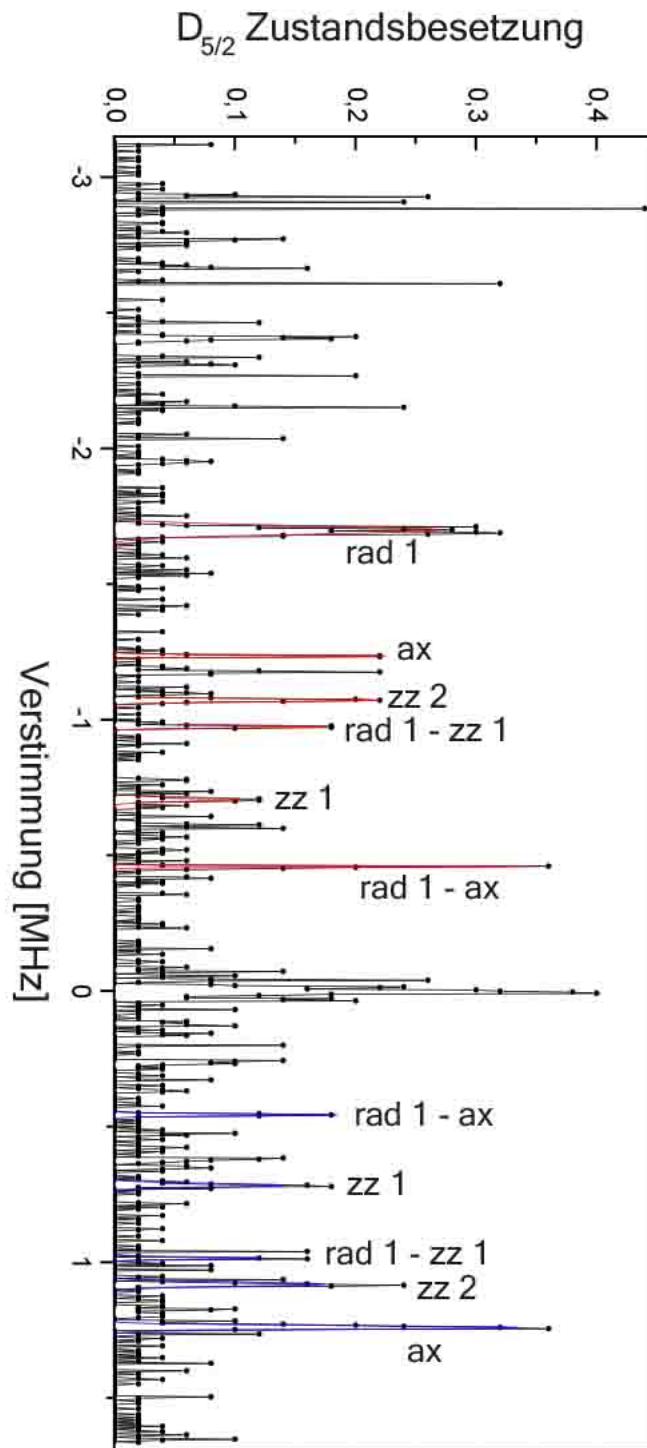
**Abbildung A.1.:** Spektrum eines einzelnen Ions bei  $U_m = -10.0\text{ V}$ . Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.20$ ,  $T_{\text{spec}} = 200\ \mu\text{s}$  und  $T_k = 6\ \text{ms}$ .



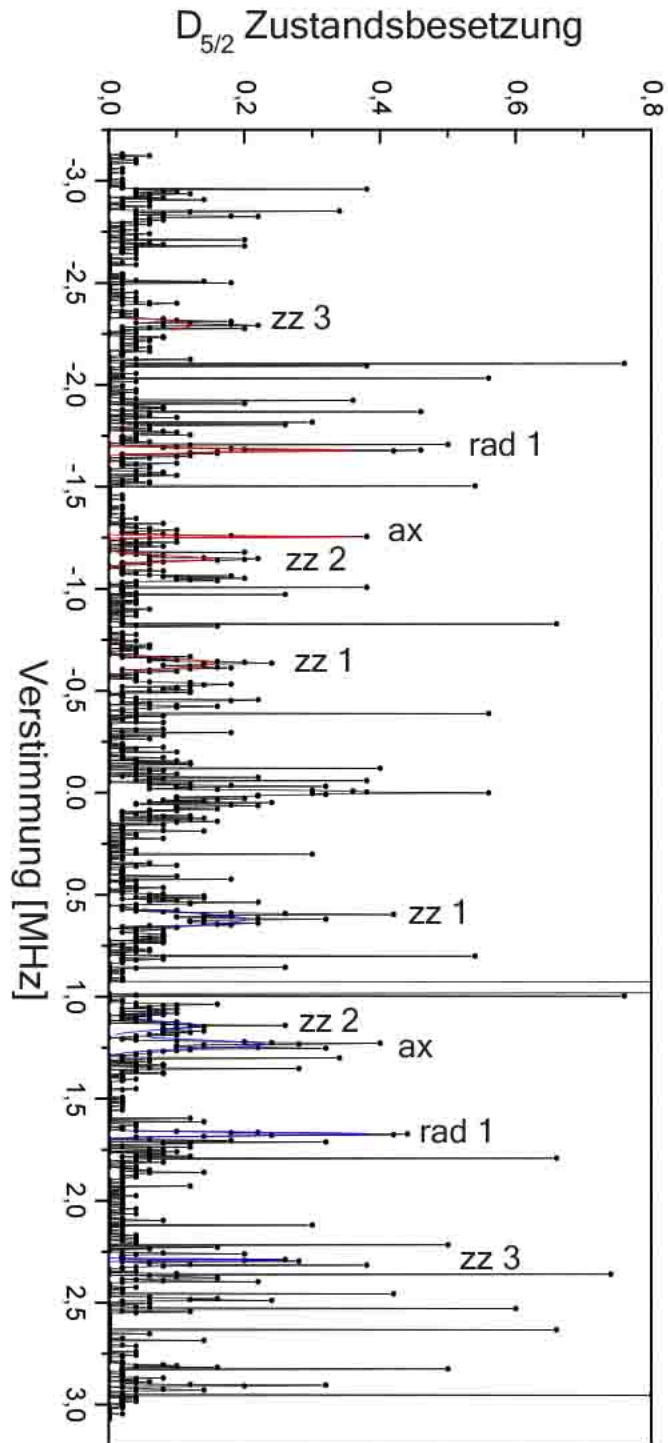
**Abbildung A.2.:** Spektrum eines einzelnen Ions bei  $U_m = -9.0$  V. Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.20$ ,  $T_{\text{spec}} = 200 \mu\text{s}$  und  $T_k = 6$  ms.



**Abbildung A.3.:** Erstes Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls bei  $U_m = -9.9$  V. Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.30$ ,  $T_{\text{spec}} = 100 \mu\text{s}$  und  $T_k = 8$  ms.

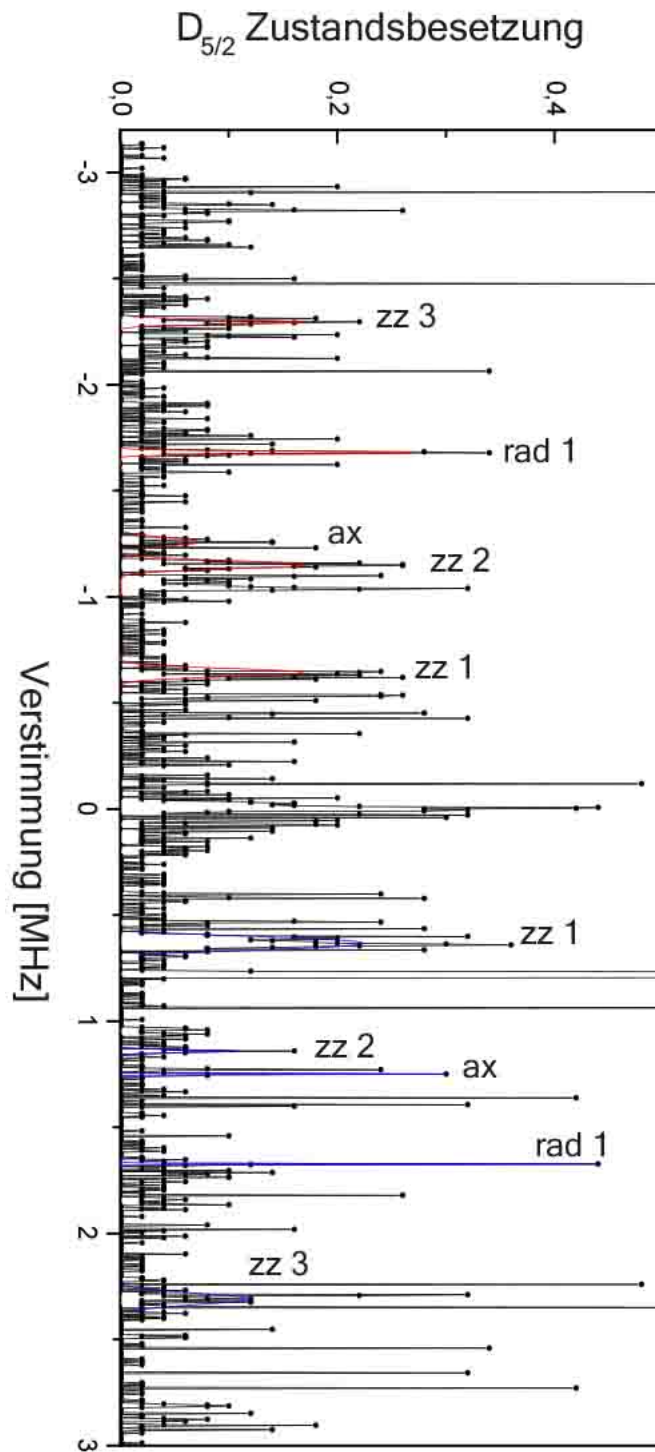


**Abbildung A.4.:** Zweites Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristall bei  $U_m = -9.9\text{ V}$ .  
Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.35$ ,  $T_{\text{spec}} = 200\ \mu\text{s}$  und  $T_k = 10\ \text{ms}$ .



**Abbildung A.5.:** Erstes Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls bei  $U_m = -10.0$  V. Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.35$ ,  $T_{\text{spec}} = 400 \mu\text{s}$  und  $T_k = 6$  ms.





**Abbildung A.6.:** Zweites Spektrum eines Drei-Ionen-Zickzack-Kristalls bei  $U_m = -10.0$  V. Die Spektroskopieparameter betragen hier:  $P_L = 0.25$ ,  $T_{\text{spec}} = 800 \mu\text{s}$  und  $T_k = 8$  ms.

## A.2. Berechnete Anisotropieparameter

Im Folgenden finden sich die berechneten Anisotropieparameter aus Kapitel 5.

$N$	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\alpha_{\text{krit}_1}$	0.4167	0.2407	0.1603	0.1158	0.0883	0.0699	0.0569	0.0473	0.0401
$N$	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$\alpha_{\text{krit}_1}$	0.0345	0.0300	0.0264	0.0234	0.0209	0.0188	0.0170	0.0155	0.0142
$N$	21	22	23	24	25				
$\alpha_{\text{krit}_1}$	0.0130	0.0120	0.0111	0.0103	0.0096				

**Tabelle H.:** Berechneter kritischer Anisotropieparameter  $\alpha_{\text{krit}_1}$ .

$N$	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$\alpha_{\text{krit}_2}$	0.703	0.479	0.423	0.340	0.278	0.235(5)	0.208	0.196	0.167(2)
$N$	15	16	17	18	19	20	21	22	23
$\alpha_{\text{krit}_2}$	0.159	0.141	0.130	0.119	0.109	0.100	0.092	0.085	0.080
$N$	24	25							
$\alpha_{\text{krit}_2}$	0.074	0.069							

**Tabelle I.:** Berechneter kritischer Anisotropieparameter  $\alpha_{\text{krit}_2}$ .

## **A.3. Mathematica Quelltext**

### **A. Positionsberechnung**

Folgender Quelltext wurde erstellt um die theoretischen Ionenpositionen in universellen Koordinaten zu berechnen.

```

(*Ionenanzahl*)
nion = 6;
omegaY = 1;

(*alpha wird hier als  $\sqrt{\text{alpha}}$  vorgegeben*)
omegaZ = omegaY * Sqrt[0.3];
const = {q -> 1.6 * 10^-19, e0 -> 8.85 * 10^-12, muohr -> 9.27400915 * 10^(-24),
  h -> 1.054571628 * 10^(-34), M -> 40 * 1.6605 * 10^-27, wy -> omegaY, wz -> omegaZ};

omega = {omegaY, omegaZ};
dim = 2;

V = Sum[Sum[1/2 * M omega[[i]]^2 x_m,i^2 + Sum[n=1 to nion] Sum[m=1 to nion] If[n != m, q^2 / (8 pi e0 * Sqrt[Sum[j=1 to dim] (x_n,j - x_m,j)^2]), 0],
  {m, 1, nion}], {i, 1, dim}];

EV = V /. Flatten[Table[x_m,i -> u_m,i * l_i, {m, 1, nion}, {i, 1, dim}]] /.

  Table[l_i -> (q^2 / (4 pi e0 M omega[[2]]^2))^1/3, {i, 1, dim}];

DEV = Flatten[Table[D_u_m,i EV == 0, {m, 1, nion}, {i, 1, dim}]];

steps = 100;
uall = {};
P = {};
DEV = DEV /. const;
EV = EV /. const;
cutOff = 10^-15;
resV = Table[1000000, {steps}];

For[p = 1, p <= steps, p++,

  (*Hier werden die vermuteten Ionenpositionen vorgegeben*)
  uInit = Flatten[Table[{u_m,i, If[i == 2, m - (nion + 1) / 2, RandomReal[{-0.5, 0.5}]}],
    {m, 1, nion}, {i, 1, dim}], 1];

  (* Numerische Lösung des Nullstellenproblems*)
  Res = FindRoot[DEV, uInit, AccuracyGoal -> Automatic, MaxIterations -> 100];
  ures = Table[Table[Res[[i+k]][[2]], {k, 0, dim-1}], {i, 1, dim*nion, dim}];
  resV[[p]] = EV /. Flatten[Table[u_m,i -> ures[[m]][[i]], {m, 1, nion}, {i, 1, dim}]];

  (*gerundete Positionen zum Zeichnen*)
  ures2 = Table[Table
    [If[Abs[Res[[i+k]][[2]]] > cutOff, Res[[i+k]][[2]], 0], {k, 0, dim-1}],
    {i, 1, dim*nion, dim}];

  (*Die zum kleinsten Potential gehörige Lösung wird ausgegeben*)
  P = If[resV[[p]] <= Min[resV], ures2, P];
  minInd = If[resV[[p]] <= Min[resV], p, minInd];
  minRes = If[resV[[p]] <= Min[resV], Res, minRes];
  uall = Append[uall, ures];

] (*Ende For-Schleife*)

```

```
(*zeigt alle ermittelten Lösungen*)
Pdraw = Table[{P[[i]][[2]], P[[i]][[1]]}, {i, 1, nion}];
ualldraw = Table[{uall[[i]][[k]][[2]], uall[[i]][[k]][[1]]}
  , {i, 1, steps}, {k, 1, nion}];

Graphics[Table[{PointSize[Large], Hue[ind / steps], Point[ualldraw[[ind]]]}
  , {ind, 1, steps}], Axes → True, ImageSize → 250,
  AxesLabel → {Style[z, Large, Bold, Red], Style[y, Large, Bold, Red]}]

(*zeigt die Lösung an, die zum kleinsten Potential gehört*)
Graphics[{PointSize[Large],
  Point[Pdraw]
}, Axes → True, ImageSize → 250,
  AxesLabel → {Style[z, Large, Bold, Red], Style[y, Large, Bold, Red]}]

(*die ermittelten Gleichgewichtspositionen in universellen Koordinaten*)
expectedPos = Table[{P[[i, 2]], P[[i, 1]]}, {i, 1, nion}];
expectedPos = Sort[expectedPos, #1[[1]] < #2[[1]] &]
```

## **B. Schwingungsmodenberechnung**

Folgender Quelltext wurde benutzt um die Schwingungsmoden der Ionenkristalle zu berechnen. Es werden die Gleichgewichtspositionen benötigt, die mit dem Quelltext in Anhang A berechnet wurden.

```
(*Die Werte für omegaX, omegaY,
omegaZ werden im Positionsberechnungsteil gesetzt*)
const = {q -> 1.6 * 10^-19, e0 -> 8.85 * 10^-12,
  mu0 -> 9.27400915 * 10^-24, h -> 1.054571628 * 10^-34,
  M -> 40 * 1.6605 * 10^-27, omegaY -> omegaY, omegaZ -> omegaZ, omegaX -> omegaX};
dim = 3;
omega = {omegaX, omegaY, omegaZ};
l =  $\left( \frac{q^2}{4 \pi e_0 M \omega[[3]]^2} \right)^{\frac{1}{3}}$ ;
(*Jetzt 3 Dimensionen ->
für x-Koordinate eine Null vorne an das Array dranhängen*)
expectedPos = Table[{0, P[[i, 1]], P[[i, 2]]}, {i, 1, nion}];
(*Die P-Koordinaten stammen aus der Berechnung der Gleichgewichtspositionen*)

V =  $\sum_{m=1}^{nion} \sum_{i=1}^{dim} \frac{1}{2} M \omega[[i]]^2 x_{m,i}^2 + \sum_{n=1}^{nion} \sum_{m=1}^{nion} \text{If}[n \neq m, \frac{q^2}{8 \pi e_0} * \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=1}^{dim} (x_{n,j} - x_{m,j})^2}}, 0]$ ;

EV2 = V;
(*Berechnung der Hessematrix*)
f[i_, j_, m_, n_] := D[x_{m,i}, D[x_{n,j}, EV2]

a = Array[f, {dim, dim, nion, nion}];
MatrixForm[Flatten[a /. const, 2]];
a2 = a /. Flatten[Table[x_{m,i} -> expectedPos[[m]][[i]] * l, {m, 1, nion}, {i, 1, dim}]];
a3 = a2 / (M * omega[[3]]^2) /. const;
MatrixForm[a3 /. const];
a4 = ArrayFlatten[a3];
MatrixForm[a4];
(*Eigenvektoren der Matrix*)
b1 = TableForm[Round[Eigensystem[a4], 1. * 10^-12]]
freq = Sqrt[b1[[1]][[1]]]
(*erwartete Modenfrequenzen in Kilohertz*)
ExpectedFreqInkHHz = freq * omegaZ / (10^3 * 2 * Pi)
```





# B

## Literaturverzeichnis

[Apolinario u. a. 2008]

APOLINARIO, S. W. S. ; PARTOENS, B. ; PEETERS, F. M.: Multiple rings in a 3D anisotropic Wigner crystal: Structural and dynamical properties. In: *Phys. Rev. B* 77 (2008), Jan, S. 035321

[Baltrusch u. a. 2011]

BALTRUSCH, J.D. ; CORMICK, C. ; DE CHIARA, G. ; CALARCO, T. ; MORIGI, G.: Quantum superpositions of crystalline structures. In: *Physical Review A* 84 (2011), Nr. 6, S. 063821

[Barreiro u. a. 2011]

BARREIRO, J.T. ; MÜLLER, M. ; SCHINDLER, P. ; NIGG, D. ; MONZ, T. ; CHWALLA, M. ; HENNRICH, M. ; ROOS, C.F. ; ZOLLER, P. ; BLATT, R.: An open-system quantum simulator with trapped ions. In: *Nature* 470 (2011), Nr. 7335, S. 486–491

[Bäuerle u. a. 1996]

BÄUERLE, C. ; BUNKOV, Y.M. ; FISHER, SN ; GODFRIN, H. ; PICKETT, GR: Laboratory simulation of cosmic string formation in the early Universe using superfluid  $^3\text{He}$ . In: *Nature* 382 (1996), Nr. 6589, S. 332–334

[Bermudez ]

BERMUDEZ, A.: Quantum Magnetism of Spin-Ladder Compounds with Trapped-Ion Crystals. In: *in Bearbeitung*

[Block u. a. 2000]

BLOCK, M. ; DRAKLOUDIS, A. ; LEUTHNER, H. ; SEIBERT, P. ; WERTH, G.: Crystalline ion structures in a Paul trap. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 33 (2000), S. L375

[Bowick u. a. 1994]

BOWICK, M.J. ; CHANDAR, L. ; SCHIFF, E.A. ; SRIVASTAVA, A.M.: The cosmological Kibble mechanism in the laboratory: String formation in liquid crystals. In: *Science* 263 (1994), Nr. 5149, S. 943–945

[Cohen-Tannoudji 1990]

COHEN-TANNOUJDI, C.: Atomic motion in Laser light. In: *Fundamental systems in quantum optics, Les Houches Session LIII* (1990)

[Del Campo u. a. 2010]

DEL CAMPO, A. ; DE CHIARA, G. ; MORIGI, G. ; PLENIO, MB ; RETZKER, A.: Structural defects in ion chains by quenching the external potential: the inhomogeneous Kibble-Zurek mechanism. In: *Physical review letters* 105 (2010), Nr. 7, S. 75701

[Dubin 1993]

DUBIN, D.H.E.: Theory of structural phase transitions in a trapped Coulomb crystal. In: *Physical review letters* 71 (1993), Nr. 17, S. 2753–2756

[Eble ]

EBLE, Johannes F.: Versatile operations with calcium and multi-species ion crystals. In: *Dissertation, Universität Ulm, in Bearbeitung*

[Enzer u. a. 2000]

ENZER, DG ; SCHAUER, MM ; GOMEZ, JJ ; GULLEY, MS ; HOLZSCHEITER, MH ; KWIAT, PG ; LAMOREAUX, SK ; PETERSON, CG ; SANDBERG, VD ; TUPA, D. u. a.: Observation of power-law scaling for phase transitions in linear trapped ion crystals. In: *Physical review letters* 85 (2000), Nr. 12, S. 2466–2469

[Ferreira u. a. 2005]

FERREIRA, W. P. ; MUNARIN, F. F. ; NELISSEN, K. ; COSTA FILHO, R. N. ; PEETERS, F. M. ; FARIAS, G. A.: Structure, normal mode spectra, and mixing of a binary system of charged particles confined in a parabolic trap. In: *Phys. Rev. E* 72 (2005), Aug, S. 021406

[Ferreira u. a. 2003]

FERREIRA, W. P. ; PEETERS, F. M. ; FARIAS, G. A.: Normal mode spectra of two-dimensional classical atoms confined by a Coulomb potential. In: *Phys. Rev. E* 68 (2003), Dec, S. 066405

[Ferreira u. a. 2008]

FERREIRA, WP ; CARVALHO, JCN ; OLIVEIRA, PWS ; FARIAS, GA ; PEETERS, FM: Structural and dynamical properties of a quasi-one-dimensional classical binary system. In: *Physical Review B* 77 (2008), Nr. 1, S. 014112

[Feynman 1982]

FEYNMAN, R.P.: Simulating physics with computers. In: *International journal of theoretical physics* 21 (1982), Nr. 6, S. 467–488

[Fishman u. a. 2008]

FISHMAN, S. ; DE CHIARA, G. ; CALARCO, T. ; MORIGI, G.: Structural phase transitions in low-dimensional ion crystals. In: *Physical Review B* 77 (2008), Nr. 6, S. 064111

[Friedenauer u. a. 2008]

FRIEDENAUER, A. ; SCHMITZ, H. ; GLÜCKERT, J.T. ; PORRAS, D. ; SCHÄTZ, T.: Simulating a quantum magnet with trapped ions. In: *Nature Physics* 4 (2008), Nr. 10, S. 757–761

[Gerritsma u. a. 2010]

GERRITSMAN, R. ; KIRCHMAIR, G. ; ZÄHRINGER, F. ; SOLANO, E. ; BLATT, R. ; ROOS, CF: Quantum simulation of the Dirac equation. In: *Nature* 463 (2010), Nr. 7277, S. 68–71

[Ghosh 1995]

GHOSH, P.K.: *Ion traps*. Clarendon press, 1995

[Gulde u. a. 2001]

GULDE, S. ; ROTTER, D. ; BARTON, P. ; SCHMIDT-KALER, F. ; BLATT, R. ; HOGGERVORST, W.: Simple and efficient photo-ionization loading of ions for precision ion-trapping experiments. In: *Applied Physics B: Lasers and Optics* 73 (2001), Nr. 8, S. 861–863

[Hendry u. a. 1994]

HENDRY, PC ; LAWSON, NS ; LEE, RAM ; MCCCLINTOCK, P.V.E. ; WILLIAMS, CDH: Generation of defects in superfluid 4He as an analogue of the formation of cosmic strings. In: *Nature* 368 (1994), Nr. 6469, S. 315–317

[Jacob 2010]

JACOB, Georg: Fokussierung einzelner kalter Ionen zur nm genauen Dotierung von Festkörpern. In: *Diplomarbeit, Universität Ulm* (2010)

[James 1998]

JAMES, D.F.V.: Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation. In: *Applied Physics B: Lasers and Optics* 66 (1998), Nr. 2, S. 181–190

[Kehlberger 2011]

KEHLBERGER, Andreas: Entwicklung und Aufbau einer neuartigen Ionenfalle. In: *Diplomarbeit, Universität Mainz* (2011)

[Kibble 1976]

KIBBLE, T.W.B.: Topology of cosmic domains and strings. In: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 9 (1976), S. 1387

[Kim u. a. 2010]

KIM, K. ; CHANG, M.S. ; KORENBLIT, S. ; ISLAM, R. ; EDWARDS, EE ; FREERICKS, JK ; LIN, G.D. ; DUAN, L.M. ; MONROE, C.: Quantum simulation of frustrated Ising spins with trapped ions. In: *Nature* 465 (2010), Nr. 7298, S. 590–593

[Kolbe u. a. 2011]

KOLBE, D. ; BECZKOWIAK, A. ; DIEHL, T. ; KOGLBAUER, A. ; SATTLER, M. ; STAPPEL, M. ; STEINBORN, R. ; WALZ, J.: A reliable cw Lyman- $\alpha$  laser source for future cooling of antihydrogen. In: *Hyperfine Interactions* (2011), S. 1–8

[Lanyon u. a. 2011]

LANYON, BP ; HEMPEL, C. ; NIGG, D. ; MÜLLER, M. ; GERRITSMA, R. ; ZÄHRINGER, F. ; SCHINDLER, P. ; BARREIRO, JT ; RAMBACH, M. ; KIRCHMAIR, G. u. a.: Universal digital quantum simulation with trapped ions. In: *Science* 334 (2011), Nr. 6052, S. 57–61

[Li u. Lesanovsky 2011]

LI, W. ; LESANOVSKY, I.: Electronically excited cold ion crystals. In: *Arxiv preprint arXiv:1108.3591* (2011)

[Marquet u. a. 2003]

MARQUET, C. ; SCHMIDT-KALER, F. ; JAMES, D.F.V.: Phonon–phonon interactions due to non-linear effects in a linear ion trap. In: *Applied Physics B: Lasers and Optics* 76 (2003), Nr. 3, S. 199–208

[Meijer u. a. 2008]

MEIJER, J. ; PEZZAGNA, S. ; VOGEL, T. ; BURCHARD, B. ; BUKOW, HH ; RANGELOW, IW ; SAROV, Y. ; WIGGERS, H. ; PLÜMEL, I. ; JELEZKO, F. u. a.: Towards the implanting of ions and positioning of nanoparticles with nm spatial resolution. In: *Applied Physics A: Materials Science & Processing* 91 (2008), Nr. 4, S. 567–571

[Melzer 2003]

MELZER, A.: Mode spectra of thermally excited two-dimensional dust Coulomb clusters. In: *Phys. Rev. E* 67 (2003), Jan, S. 016411

[Munarin u. a. 2007]

MUNARIN, FF ; FERREIRA, WP ; FARIAS, GA ; PEETERS, FM: Molecular states of two vertically coupled systems of classical charged particles confined by a Coulomb potential. In: *Physical Review B* 76 (2007), Nr. 3, S. 035336

[Naber 2012]

NABER, Julian: Aufbau und Betrieb einer Paulfalle zur Rydberganregung von Ionen. In: *Diplomarbeit, Universität Mainz* (2012)

[Ott 2012]

OTT, Konstantin: Realisierung eines Zwei-Ionen-Quantengatters. In: *Diplomarbeit, Universität Mainz* (2012)

[Poschinger 2010]

POSCHINGER, Ulrich G.: Quantum Optics Experiments in a Microstructured Ion Trap. In: *Dissertation, Universität Ulm* (2010)

[Rohde u. a. 2001]

ROHDE, H. ; GULDE, ST ; ROOS, CF ; BARTON, PA ; LEIBFRIED, D. ; ESCHNER, J. ; SCHMIDT-KALER, F. ; BLATT, R.: Sympathetic ground-state cooling and coherent manipulation with two-ion crystals. In: *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* 3 (2001), S. S34

[Ruutu u. a. 1996]

RUUTU, VMH ; ELTSOV, VB ; GILL, AJ ; KIBBLE, TWB ; KRUSIUS, M. ; MAKHLIN, Y.G. ; PLACAIS, B. ; VOLOVIK, GE ; XU, W.: Vortex formation in neutron-irradiated superfluid  $^3\text{He}$  as an analogue of cosmological defect formation. (1996)

[Saffman u. a. 2010]

SAFFMAN, M. ; WALKER, T. G. ; MØLMER, K.: Quantum information with Rydberg atoms. In: *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010), Aug, S. 2313–2363

[Schiffer 1993]

SCHIFFER, JP: Phase transitions in anisotropically confined ionic crystals. In: *Physical review letters* 70 (1993), Nr. 6, S. 818–821

[Schmidt-Kaler u. a. 2011]

SCHMIDT-KALER, F. ; FELDKER, T. ; KOLBE, D. ; WALZ, J. ; MÜLLER, M. ; ZOLLER, P. ; LI, W. ; LESANOVSKY, I.: Rydberg excitation of trapped cold ions: A detailed case study. In: *New Journal of Physics* 13 (2011), S. 075014

[Schneider u. a. 2011]

SCHNEIDER, C. ; PORRAS, D. ; SCHAETZ, T.: Many-Body Physics with Trapped Ions. In: *Arxiv preprint arXiv:1106.2597* (2011)

[Schnitzler u. a. 2010]

SCHNITZLER, W. ; JACOB, G. ; FICKLER, R. ; SCHMIDT-KALER, F. ; SINGER, K.: Focusing a deterministic single-ion beam. In: *New Journal of Physics* 12 (2010), S. 065023

[Schnitzler 2010]

SCHNITZLER, Wolfgang: Deterministic ultracold ion source targeting the Heisenberg limit. In: *Dissertation, Universität Ulm* (2010)

[Schulz 2009]

SCHULZ, Stephan A.: Scalable Microchip Ion Traps for Quantum Computation. In: *Dissertation, Universität Ulm* (2009)

[Schweigert u. Peeters 1995]

SCHWEIGERT, Vitaly A. ; PEETERS, François M.: Spectral properties of classical two-dimensional clusters. In: *Phys. Rev. B* 51 (1995), Mar, S. 7700–7713

[Shimshoni u. a. 2010]

SHIMSHONI, E. ; MORIGI, G. ; FISHMAN, S.: Quantum zigzag transition in ion chains. In: *Arxiv preprint arXiv:1008.2326* (2010)

[Singer u. a. 2004]

SINGER, Kilian ; REETZ-LAMOUR, Markus ; AMTHOR, Thomas ; MARCASSA, Luis G.

; WEIDEMÜLLER, Matthias: Suppression of Excitation and Spectral Broadening Induced by Interactions in a Cold Gas of Rydberg Atoms. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004), Oct, S. 163001

[Ulm 2010]

ULM, Stefan: Spektroskopie gemischter Ionenkristalle. In: *Diplomarbeit, Universität Ulm* (2010)

[W. P. Ferreira u. Peeters 2010]

W. P. FERREIRA, G. A. F. ; PEETERS, F. M.: Two-component mixture of charged particles confined in a channel: melting. In: *arXiv:1006.1810v1 [cond-mat.soft]* (2010)

[Welzl 2011]

WELZL, Jens: Planare Spin-Spin Simulatoren. In: *Diplomarbeit, Universität Ulm* (2011)

[Ziesel 2008]

ZIESEL, Frank: Spektroskopie und Transport von Ionen in einer Mikrofalle. In: *Diplomarbeit, Universität Ulm* (2008)

[Zurek 1985]

ZUREK, WH: Cosmological experiments in superfluid helium? In: *Nature* 317 (1985), Nr. 6037, S. 505–508





# Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich meine Diplomarbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen oder anderen Quellen entnommen sind, sind als solche eindeutig kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form noch nicht veröffentlicht und noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt worden.

Mainz, den 11. April 2012

Henning Kaufmann