Institut für Quanteninformationsverarbeitung

Diplomarbeit

Kalte einzelne lonen für die Implantation in Festkörper mit nm Auflösung

vorgelegt von: Robert Fickler

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom

14. April 2009

Hauptberichter: Prof. Dr. Ferdinand Schmidt-Kaler

> Berichter: Prof. Dr. Paul Ziemann



ulm university universität

Abstract

With ongoing miniaturization of semiconductor devices, the implantation techniques are faced with novel challenges. Statistical fluctuations in the spatial arrangement as well as in the amount of doping atoms significantly affect the proper function of the devices. In the area of solid state quantum computing, wich is considered to be a possible way of realizing computers of the next generation, it is indispensable to have a well defined number of dopants in an array of nanometer scale.

After a brief overview of the aforementioned applications and the implantation techniques that are currently developed or already available, this thesis reports about a novel deterministic ion source on the basis of a linear Paul-trap. The specifically designed trap enables the well defined extraction of a wide range of different ion species along the trap axis. The generated ion beam was analyzed for possible improvements and characterized by numerical simulations and experimental results. The extracted single ions showed a mean velocity of 19,47 km/s with an absolute velocity fluctuation of less than 6,3 m/s. The beam divergence was determined to be around 600 μ rad by using a 300 μ m aperture at a distance of 28,7 cm from the trap.

These results were then utilized as a starting point for the development of custom made ion optics. The characterization of the optical properties was done by numerical simulations. The predicted resolution of the developed einzel-lens lies within the range of only a few nanometers . Additional methods for aberration corrections of the lens or postacceleration of the ions even improve the simulated results down to less than one nanometer. Therefore, the utilization of a Paul-trap as an ion source equipped with custom made ion optics presents a universal, deterministic implantation tool, which is able to position ions independent of the substrate with nanometer resolution.

Vorwort

Mit fortschreitender Miniaturisierung von Halbleiterelementen werden herkömmliche Implantationsverfahren vor äußerst große Herausforderungen gestellt. Statistische Fluktuationen in der räumlichen Anordnung sowie der Anzahl der Dotieratome beeinflussen signifikant die Funktionsweise der Bauteile. Im Bereich des Festkörperquantencomputing, einem potentiellen Kandidaten für Computer der nächsten Generation, ist eine exakt definierte Anzahl von einzelnen, nanometergenau platzierten Atomen sogar die Grundlage jeglicher Funktion.

Nach einem kurzen Überblick über die eben genannten Anwendungsmöglichkeiten und die bereits verfügbaren bzw. sich in der Entwicklung befindenden nanometergenauen Implanatationsverfahren, wird in dieser Arbeit von einer neuartigen deterministischen Ionenquelle berichtet, welche auf einer linearen Paul-Falle basiert. Mit dieser speziell designten Ionenfalle ist es möglich, eine Vielzahl von verschiedene Ionenspezies entlang der Fallenachse definiert zu extrahieren. Anhand experimenteller Ergebnisse sowie numerischer Simulationen wurde der dabei entstehende Ionenstrahl charakterisiert und auf Optimierungsmöglichkeiten hin untersucht. Für einzelne extrahierte Ionen wurde experimentell eine absolute Geschwindigkeitsfluktuation von unter 6,3 m/s bei einer mittleren Geschwindigkeit von 19,47 km/s gemessen. Die Strahldivergenz wurde mit einer 28,7 cm entfernten 300 μ m-Apertur auf etwa 600 μ rad bestimmt.

Diese Werte wurden als Ausgangspunkt verwendet, um eine an den Strahl angepasste Ionenoptik zu entwickeln und diese mittels weiterer Simulationen zu charakterisieren. Die hierbei prognostizierte Auflösung liegt im Bereich weniger Nanometer. Durch Verfahren zur Korrektur von Aberrationsfehlern bzw. einer Nachbeschleunigung der Ionen, welche ebenfalls anhand numerischer Simulationen entwickelt wurden, kann die Auflösung sogar auf unter einen Nanometer verbessert werden. Somit stellt die Paul-Falle in Verbindung mit der entwickelten Ionenoptik ein universelles, deterministisches Verfahren zur nanometerpräzisen Implantation von Ionen dar, welches zudem vom Substrat unabhängig ist.

Liste der wissenschaftlichen Publikation

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden die erzielten wissenschaftlichen Ergebnisse in zwei Fachzeitschriften publiziert (siehe Anhang C):

Physical Review Letters

Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit W. Schnitzler, N. M. Linke, R. Fickler, J. Meijer, F. Schmidt-Kaler, Kilian Singer. Veröffentlicht am 19 February 2009 (Physical Review Letters / Ausgabe: 102 / Seite: 070501 / Jahrgang: 2009)

Journal of Modern Optics

Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution

R. Fickler, W. Schnitzler, F. Schmidt-Kaler, Kilian Singer.Eingereicht am 11. März 2009(arXiv / arXiv:0903.3425v1 [quant-ph])

Inhaltsverzeichnis

| 1 | Einleitung | | | 1 |
|---|--------------------------------|----------------------------|---|----|
| 2 | 2 Implantation einzelner Ionen | | 5 | |
| | 2.1 | Anwei | ndungsmöglichkeiten | 5 |
| | | 2.1.1 | Dotierung von Halbleiterbauelementen | 6 |
| | | 2.1.2 | Festkörperquantencomputer | 8 |
| | 2.2 | Impla | ntationsverfahren einzelner Ionen | 14 |
| | | 2.2.1 | Bottom-Up-Verfahren | 14 |
| | | 2.2.2 | Top-Down-Verfahren | 16 |
| | | 2.2.3 | Implantation mit Fallen als Ionenquelle | 19 |
| 3 | Die | lineare | Ionenfalle als Ionenquelle | 25 |
| | 3.1 | Physil | k der segmentierten, linearen Paul-Falle | 26 |
| | 3.2 | Die lii | neare Ionenfalle als Ionenquelle | 29 |
| | | 3.2.1 | Spezialdesign der entwickelten Ionenfalle | 30 |
| | | 3.2.2 | Experimenteller Aufbau | 32 |
| | 3.3 | 3.3 Betrieb der Ionenfalle | | 37 |
| | | 3.3.1 | Erzeugung von einzelnen Ionen | 37 |
| | | 3.3.2 | Beobachtung der Ionen und laserbasierte Kühlverfahren | 39 |
| | | 3.3.3 | Kompensation der Mikrobewegung | 46 |
| | | 3.3.4 | Kühlung und Identifikation dunkler Ionen | 48 |
| | 3.4 | Extra | ktion der Ionen | 49 |
| | | 3.4.1 | Extraktionsmechanismus | 50 |
| | | 3.4.2 | Experimentelle Umsetzung | 51 |

| 4 | Cha | rakteris | sierung der neuartigen Ionenquelle | 55 | |
|--|--|--|---|-----|--|
| | 4.1 | Simulation der Ionenquelle | | | |
| | | 4.1.1 | Erzeugung des Ionenstrahls | 58 | |
| | | 4.1.2 | Abhängigkeit von der Ionentemperatur in der Falle | 61 | |
| | | 4.1.3 | Abhängigkeit von der RF-Phase zum Extraktionszeitpunkt $\ .$ | 64 | |
| | | 4.1.4 | Abhängigkeit von der Extraktionsposition | 66 | |
| | | 4.1.5 | Simulierte Extraktionen unterschiedlicher chemischer Elemente $\ . \ .$ | 68 | |
| | 4.2 | .2 Experimentelle Charakterisierung 69 | | | |
| | | 4.2.1 | Detektion und Vermessung des erzeugten Ionenstrahls | 70 | |
| | | 4.2.2 | Einfluss vom Druck in der Kammer und der Extraktionsphase | 73 | |
| | | 4.2.3 | Bestimmung der Geschwindigkeitsfluktuation | 74 | |
| | | 4.2.4 | Bestimmung der Strahldivergenz | 76 | |
| | | 4.2.5 | Drift des Ionenstrahls | 78 | |
| | | 4.2.6 | Extraktion von Ionenkristallen | 80 | |
| | 4.3 | Vergle | ich der Simulation mit dem experimentellen Ergebnis | 82 | |
| 5 | lone | enoptik | zur Fokussierung des Ionenstrahls | 85 | |
| | 5.1 | Physil | der Ionenoptik | 86 | |
| | 5.2 Vergleich verschiedener Einzellinsen | | | 92 | |
| 5.3 Charakterisierung der entwickelten Ionenlinse \ldots | | kterisierung der entwickelten Ionenlinse | 96 | | |
| | | 5.3.1 | Abhängigkeit von der Ionentemperatur | 99 | |
| | | 5.3.2 | Abhängigkeit von der Linsenspannung | 100 | |
| | | 5.3.3 | Abhängigkeit von einem Strahlversatz | 101 | |
| | 5.4 | Korrel | ktur der sphärischen Abberation | 103 | |
| | 5.5 Einzellinse als Flugzeit-Ionenfilter | | 106 | | |
| | 5.6 | Nachb | eschleunigung der Ionen | 107 | |
| | 5.7 | Exper | imentelle Realisierung | 108 | |
| 6 | Zus | ammen | fassung und Ausblick | 111 | |
| Α | Sch | altplan | des Delay-Phasentriggers | 115 | |
| в | Sim | ulation | sprogramm | 117 | |

In halts verz eichnis

| С | C Wissenschaftliche Publikationen | | |
|---------------------------|-----------------------------------|--------------------------|-----|
| | C.1 | Physical Review Letters | 123 |
| | C.2 | Journal of Modern Optics | 129 |
| Lit | eratı | ırverzeichnis | 147 |
| Eidesstattliche Erklärung | | | 155 |

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

| 2.1 | Dotierprofil eines pMOS-Nanotransistors | 6 |
|------|--|-----|
| 2.2 | Einfluss der Dotierungsanordnung bei Halbleiterbauteilen | 7 |
| 2.3 | Silizium-Phosphor-Quantencomputer nach Kane | 9 |
| 2.4 | Ladungs-Qubit und deren Netzwerk-Skalierung nach Hollenberg | 11 |
| 2.5 | Termschema, Kristallstruktur und mögliche Netzwerkstruktur von $\rm NV^{-}\textsc{-}$ | |
| | Zentren in Diamant | 12 |
| 2.6 | Implantation von P in Si mit Hilfe passivierter Oberflächen und STM-Spitze | 15 |
| 2.7 | Einzelion enimplantation mittels Detektion von Sekundärelektron en $\ .\ .\ .$ | 16 |
| 2.8 | Einzelion enimplantation mittels Detektion von Elektron-Loch-Paaren | 18 |
| 2.9 | Magneto-Optische Falle zur parallelen Einzelatom deposition | 20 |
| 2.10 | Magneto-Optische Falle als Ionenquelle | 22 |
| 2.11 | Implantationsschema mit Ionenfalle als Einzelionenquelle | 23 |
| | | ~ ~ |
| 3.1 | Schematische Darstellung einer Extraktion eines Ions | 25 |
| 3.2 | Prinzipieller Aufbau einer linearen segmentierten Paul-Falle | 26 |
| 3.3 | Stabilitätsdiagramm einer linearen Paul-Falle | 28 |
| 3.4 | Simulierte Trajektorie eines Ions in der Falle | 29 |
| 3.5 | Konstruktionszeichnung inkl. Mikroskopaufnahme eines Fallenflügels $\ .\ .\ .$ | 30 |
| 3.6 | Schematische Darstellung der speziell designten Ionenfalle | 31 |
| 3.7 | Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus | 32 |
| 3.8 | Die Fallenkammer mit den verschiedenen optischen Zugängen | 34 |
| 3.9 | Foto des Versuchsaufbaus inkl. Zoom der Falle | 35 |
| 3.10 | Termschema zur Ionisation von 40 Ca und 52 Cr $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$ | 38 |
| 3.11 | Übergänge im $^{40}\mathrm{Ca^{+}}$ und Lebensdauer der Zustände $\ .$ | 40 |
| 3.12 | Energieprofile der Dopplerkühlung | 41 |

| 3.13 | Fotogalerie verschiedener ${}^{40}Ca^+$ -Anordnungen in der Falle | 42 |
|------|---|----|
| 3.14 | Schema der Seitenbandkühlung | 43 |
| 3.15 | Spektrale Betrachtung der Seitenbandkühlung | 44 |
| 3.16 | Drei-Niveau-System in Lamdba-Konfiguration | 45 |
| 3.17 | Absorptionsprofil der EIT-Kühlung | 45 |
| 3.18 | Bias-T-Schaltung zur Mikrobewegungskompensation | 47 |
| 3.19 | Potential und Spannungsbelegung der Ionenfalle vor der Extraktion | 50 |
| 3.20 | Potential und Spannungsbelegung der Ionenfalle während der Extraktion . | 51 |
| 3.21 | Schematische Zeichnung des Extraktions- und Detektionsaufbaus | 52 |
| 3.22 | Oszilloskop-Bild des zur RF-Spannung verzögerte TTL-Signals | 53 |
| 4.1 | Computermodell der Falle | 56 |
| 4.2 | Simulierte Bewegung in radialer Richtung | 57 |
| 4.3 | Simulierte Bewegung in axialer Richtung | 58 |
| 4.4 | Dreidimensionale Darstellung von Ionentrajektorien während der Extraktion | 59 |
| 4.5 | Extraktion der Ionen und resultierendes Spot-Diagramm | 60 |
| 4.6 | Extraktionsbahnen und Spot-Diagramm bei Verwendung der Ablenkelek- | |
| | troden | 61 |
| 4.7 | Spotgrößen in Abhängigkeit von der Ionentemperatur | 62 |
| 4.8 | Geschwindigkeitsfluktuation in Abhängigkeit von der Ionentemperatur $\ . \ .$ | 63 |
| 4.9 | Mittlere Geschwindigkeit und Spotgröße in Abhängigkeit von der RF-Phase | 64 |
| 4.10 | Spots unter Verwendung der Ablenkelektroden in Abhängigkeit von der | |
| | RF-Phase | 65 |
| 4.11 | Mittlere Geschwindigkeit und Spotgröße in Abhängigkeit von der Extrakti- | |
| | onsposition | 66 |
| 4.12 | Spots in Abhängigkeit von der Extraktionsposition mit Verwendung der | |
| | Ablenkelektroden | 67 |
| 4.13 | Foto und Konstruktionszeichung des Detektor | 70 |
| 4.14 | Erzeugte Detektorsignale und die dazugehörigen Bildschirmaufnahmen | 71 |
| 4.15 | Foto der Blendenplatte und der Halterung | 72 |
| 4.16 | Abhängigkeit der Detektionsrate vom Fallenvakuum und der RF-Triggerphase | 73 |
| 4.17 | Flugzeitspektrum einzelner Ionen extraktionen | 75 |
| 4.18 | Zielscan über die 5 mm Apertur | 76 |
| 4.19 | Zielscan über die 1 mm Lochblende | 77 |

| 4.20 | Abnahme der Detektionsrate bei der 300 μ m Apertur | 79 |
|------|---|-----|
| 4.21 | Korrektur des Drifts mit Hilfe der Ablenkspannungen | 80 |
| 4.22 | Vergleich von der Simulation mit dem Experiment mit Hilfe der 300 $\mu\mathrm{m}\textsc{-}$ | |
| | Apertur | 83 |
| 5.1 | Veranschaulichung von sphärischer und chromatischer Aberration | 88 |
| 5.2 | Die beiden Betriebsmodi einer Einzellinse und die resultierenden Trajektorien | 91 |
| 5.3 | Vergleich verschiedener Linsengeometrien | 94 |
| 5.4 | Potentialverlauf der entwickelten Linse bei 65 V | 97 |
| 5.5 | 3D-Darstellung des Linsenpotentials bei 65 V | 98 |
| 5.6 | Fokussierte Trajektorien und resultierendes Spot-Diagramm | 99 |
| 5.7 | Simulierte 1 σ -Spotradien in Abhängigkeit von der Ionentemperatur 1 | .00 |
| 5.8 | Simulierte 1 σ -Spotradien in Abhängigkeit von der Linsenspannung 1 | .01 |
| 5.9 | Spotdiagramme in der Fokusebene für aus der Mitte versetzte Ionenstrahlen 1 | .02 |
| 5.10 | Potentialverlauf für die Korrektur der sphärischen Aberration | .04 |
| 5.11 | Vergleich der Trajektorien von sphärisch korrigierten und unkorrigierten | |
| | Linsen | .05 |
| 5.12 | Potentialverteilung und Reflektierte Trajektorien | .06 |
| 5.13 | Bilder der Realisierung der Einzellinse | .08 |
| 5.14 | 3D-Konstruktionszeichnung der entwickelten Einzellinse | .09 |
| 6.1 | Apparatur zur Ausrichtung der Detektorkammer | .11 |
| 6.2 | Nano-Apparatur zur Bestimmung der fokussierten Spotgröße | 12 |
| 6.3 | STM-Messung zur Bestimmung der erzielten Auflösung | 13 |

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

"... it is fair to state that we are not *experimenting* with single particles, any more than we can raise Ichthyosauria in the zoo." [1]

Erwin Schrödinger, 1952

Die Natur ist seit jeher im Stande, enorm kleine Strukturen zu schaffen, welche sich auf Grund ihrer geringen Größe lange unserem direkten Zugang entzogen. Sind hierbei die wenigen hundert Nanometer großen, spachtelförmigen Gecko-Haare an dessen Füßen noch äußerst große Beispiele dafür [2], so gelangt man beispielsweise bei einem ihrer elementarsten Bausteine – der DNA – direkt in atomare Größenordnungen [3]. In der DNA sitzen einzelne Atome in einer kristallförmigen Helix-Struktur in einem Abstand von nur wenigen Nanometern auseinander. Trotzdem sind sämtliche Erbinformationen, kodiert in Anordnung und Reihenfolge der Atome, darin gespeichert. Diese Größenskalen waren allerdings dem Menschen vor etwas mehr als 50 Jahren experimentell gänzlich unzugänglich und somit eher ein theoretisches Konstrukt, wie Schrödinger in dem oben erwähnten Zitat bildhaft darlegt.

Über die Jahre ist es jedoch dem Menschen mit Hilfe der Forschung und dem damit verbundenen enormen technischen Fortschritt gelungen, was früher noch undenkbar schi-

1 Einleitung

en: Auf atomarer Ebene Strukturen zu betrachten, selbst zu manipulieren und sinnvoll auszunützen. Gerade im Bereich der Informationsverarbeitung lässt sich dieser Fortschritt eindrucksvoll aufzeigen. Streng dem im Jahr 1965 von Moore vorhergesagten Gesetz folgend, dass sich etwa alle 2 Jahre die Menge der elektronischen Halbleiterbauelemente auf einem Computerchip verdoppelt [4], stieg die Anzahl solcher Transistoren seit den siebziger Jahren von wenigen Tausend auf weit über eine Milliarde. Im selben Maße mussten natürlich die Strukturen der Bauteile enorm schrumpfen, so dass diese heutzutage längst den Bereich von wenigen Nanometern, also die atomare Ebene erreicht haben [5]. Exakt platzierte Atome in eindeutig definierten Mengen wirken sich dadurch stark auf die Funktionalität von den Halbleiterbauelementen aus.

Mit weiterem Voranschreiten der Miniaturisierung bis hin zu Strukturgrößen, welche nur noch wenige Atome enthalten, rücken zusätzlich Erscheinungen, welche die Quantenmechanik beschreibt, in den Mittelpunkt. Diese bringen von der klassischen Sichtweise aus betrachtet zwar ungewollte Effekte mit sich, jedoch eröffnen sich durch sinnvolle Anwendungen quantentheoretischer Effekte ebenso vollkommen neuartige Möglichkeiten. Wird beispielsweise ein Quantensystem selbst als ein Art Computer betrachtet, was bereits 1980 Yuri Manin erstmals [6] und darauffolgend Richard Feynman immer wieder thematisierte [7], so lassen sich damit die für klassische Computer kompliziert zu berechnenden Quantensysteme wesentlich effizienter simulieren. Quantentheoretische Gesetze und deren Auswirkungen müssen somit nicht mehr indirekt mittels klassischen Computerstrukturen beschrieben werden, sondern nutzen das System selbst zur effizienten Vorhersage.

Mit Aufkommen neuer Algorithmen, welche für explizite Fragestellungen um Größenordnungen bessere Effizienz versprachen, geriet die Quanteninformationsverarbeitung (QIV) weiter in den Blickpunkt. Hier wären zum Beispiel die Algorithmen zur Faktorisierung großer Zahlen von Peter Shor [8], der Suchalgorithmus von Lov Grover [9] oder der Deutsch-Josza-Algorithmus [10] zu nennen. Allen ist gemein, dass die Information ähnlich dem klassischen Computer, in dichotomen Zuständen von 0 und 1 verarbeitet werden, welche in Anlehnung an die Bits der klassischen Informatik als Qubits bezeichnet werden. Allerdings werden in der QIV die zusätzlichen Möglichkeiten quantenmechanischer Systeme, wie zum Beispiel Superpositions-, Interferenz- und Verschränkungseigenschaften, vorteilhaft eingesetzt. Shors Algorithmus erlaubt es zum Beispiel, eine Zahl in exponentiell kürzerer Zeit zu faktorisieren, als dies ein klassischer Computer zu Stande bringen könnte.

Von diesen theoretischen Aussichten der Quanteninformatik beflügelt, entbrannte auf experimenteller Ebene ein Wettstreit um die geeignetste experimentelle Umsetzung. Die benötigten zweiwertigen Qubits lassen sich beispielsweise als Polarisationszustände der Photonen, Energieniveaus der Atome und Ionen oder etwa Kernspins erzeugen, um nur ein paar wenige zu nennen. Zumeist stellt sich jedoch die Skalierbarkeit als das Hauptproblem sämtlicher Systeme dar, da bereits die Erzeugung weniger Qubits immense experimentelle Anforderungen stellt. Der fulminante Fortschritt im Bereich des Festkörperquantencomputing scheint nun jedoch eine mögliche Lösung anzubieten. Innerhalb einer kleinen Festkörperstruktur lassen sich nicht nur eine hohe Anzahl von Qubits fixieren, sondern diese auch kohärent (isoliert von Umgebungseinflüssen, die die quantemechanischen Effekte zerstören würden) manipulieren und miteinander in Wechselwirkung bringen und somit zu einem größeren Netzwerk skalieren. Ein sehr populärer Vorschlag hierfür, wurde 1998 von Bruce Kane gemacht, in welchem er Kernspins von Phosphorionen, die sich in Silizum knapp unter der Oberfläche befinden, als Qubits verwendet (siehe für eine ausführlichere Diskussion Kapitel 2.1.2).

Eine der wichtigsten Techniken bei der Umsetzung von Festkörperquantencomputern stellt die exakte Platzierung der für die Qubits verantwortlichen Atome dar. Es ist diesbezüglich nicht nur extrem wichtig, die Auflösung der lateralen Positionierung zu maximieren, sondern auch die Tiefe, in der die Atome eingebracht werden, auf einer Skala von wenigen Nanometern zu kontrollieren. Vor allem sollte bei einem geeigneten Verfahren eine eindeutige Vorhersage der Anzahl der implantierten Atome bzw. Ionen, also eine deterministische Implantation, unbedingt gewährleistet sein. Ein hierfür geeignetes System, bestehend aus einer segmentierten, linearen Paul-Falle und der dazu passenden Ionenoptik, wird in dieser Arbeit vorgestellt.

Bevor auf das eigentliche Thema dieser Arbeit – die Paul-Falle als Einzelionenquelle und eine an den Strahl angepasste Ionenoptik – eingegangen wird, soll in Kapitel 2 diese Diplomarbeit zunächst anhand von verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten motiviert werden (Kap. 2.1). Zusätzlich wird ein Abgrenzung zu anderen verfügbaren bzw. gerade entwickelten deterministischen Implantationsverfahren gegeben (Kap. 2.2), um einen Überblick über das Gebiet der Einzelionenimplantation zu erhalten. In Kapitel 3 wird das Herzstück unseres Verfahrens – die segmentierte, lineare Paul-Falle – sowie deren spezielles Design und der Versuchsaufbau vorgestellt.

Die Ergebnisse, welche während dieser Arbeit erzielt wurden, werden in den beiden darauffolgenden Kapiteln 4 und 5 vorgestellt. Im Kapitel 4 wird einerseits mit Hilfe

1 Einleitung

von numerischen Simulationen der Extraktionsprozess genauer untersucht, wodurch negative Einflüsse auf die Strahlcharakteristiken besser verstanden (Kap. 4.1) und somit Möglichkeiten zur Verbesserung des Verfahrens entwickelt werden können. Andererseits wird der erzeugte Einzelionenstrahl im Bezug auf Energiefluktuation und räumliche Ausdehnung experimentell vermessen und somit in den beiden entscheidenden Merkmalen charakterisiert (Kap. 4.2). Im Rahmen der Diplomarbeit ist es dabei gelungen mit Hilfe neuer Elektronik (Phasen-Delaytrigger) die Geschwindigkeitsfluktuation der extrahierten Ionen um den Faktor 6 zu verbessern. Darüber hinaus konnte die räumliche Vermessung erstmalig mit Hilfe mehrerer Blenden unterschiedlichen Durchmessers bestimmt werden. Mit Hilfe der erzielten Ergebnisse und des numerischen Simulationsprogrammes wurde zudem eine spezielle Ionenoptik entwickelt, welche im darauffolgenden Kapitel 5 vorgestellt und charakterisiert wird. Zusätzlich konnte im Laufe dieser Diplomarbeit anhand von Simulationen gezeigt werden, dass eine Korrektur der sphärischen Aberration der Linse (Kap. 5.4) sowie eine Nachbeschleunigung der Ionen (Kap. 5.6) weitere Verbesserung der Auflösung mit sich bringen wird.

Im Kapitel 6 wird zum Abschluss der Arbeit, nach einer knappen Zusammenfassung, ein Ausblick auf den nächsten Schritt zu einer deterministischen Einzelionenquelle basierend auf einer linearen Paul-Falle gegeben: die exakte Bestimmung der durch die Fokussierung der Linse ermöglichten Auflösung.



Implantation einzelner lonen

Unter Implantation von Ionen wird das Einbringen von geladenen Atomen in bzw. unter die Oberfläche eines Festkörpers verstanden. Übliche Implantationstechniken von Ionen basieren dabei zumeist auf einem Ionenstrahl mit einer sehr hohen Dosis von ungefähr 10^{12} bis 10^{18} Ionen pro cm² und Energien von einigen keV bis hin zu vielen MeV. Solche Ionenstrahlen finden ihren Einsatz zumeist bei der Materialforschung und bei der industriellen Dotierung von Halbleitern. Für Quellen, welche einzelne Ionen zur Implantation bereitstellen, stehen hingegen erst seit kurzer Zeit geeignete Techniken zur Verfügung, obwohl schon heute mehrere Anwendungsmöglichkeiten vorhanden sind. Die verschiedenen Anwendungen sollen in diesem Kapitel vorgestellt, die verfügbaren Einzelionenquellen erläutert und deren Vor- und Nachteile angesprochen werden.

2.1 Anwendungsmöglichkeiten

Mit der im einleitenden Kapitel erwähnten fortschreitenden Miniaturisierung der Halbleiterbausteine und dem Aufkommen eines Festkörperquantencomputers werden neue Ansprüche an die Ionenquelle bzw. den für die Implantation notwendigen Strahl gestellt.

2 Implantation einzelner Ionen

Einerseits sind hohe Dosen und Energien nicht mehr erforderlich, da bei atomaren Bauteilen kleinere Mengen an Ionen und Energien ausreichen, um die gewünschte Implantationshäufigkeit und -tiefe zu erzielen. Andererseits wird die exakte Kontrolle des Implanationsvorgangs in der räumlichen Auflösung sowie der Anzahl der implantierten Ionen (zumeist sehr wenige) immer entscheidender.

2.1.1 Dotierung von Halbleiterbauelementen

Neueste Halbleiterbauelemente [5] schrumpfen auf Größenordnungen, welche bereits selbst im atomaren Bereich liegen (siehe Abb. 2.1) und aufgrund dessen nur noch wenige Dotieratome beinhalten können. Bereits in den nächsten fünf Jahren werden somit weni-



Abb. 2.1: Zweidimensionales Dotierprofil eines pMOS-Nanotransistors, aufgenommen mit einem Raster-Kapazitäts-Mikroskop. Bereiche mit p-Dotierungen werde in pink dargestellt, wohingegen blau die n-Dotierung verdeutlichen soll. [11]

ger als 100 Dotieratome pro Bauelement benötigt [12], was wiederum zu Problemen mit herkömmlichen statistischen Implantierverfahren und der damit einhergehenden Clusterbildung der Dotieratome führen wird [13]. Zusätzlich beträgt die unvermeidliche natürliche Poissonsche Fluktuation bei einer solch geringen Anzahl von statistisch implantierten Dotierungen bereits mehr als 10 % und wird mit weiterer Verringerung der Anzahl der Dotieratome weiter anwachsen. Außerdem ist ersichtlich, dass bei Bauteilen mit nur gering größeren Ausmaßen als deren Bausteine, die räumliche Anordnung der Bausteine starke Auswirkungen auf die Funktion des Bauelements haben kann. Die bis dato gültige Annahme einer gleichmäßigen, homogenen Dotierung kann somit nicht länger aufrecht erhalten werden. Die Dichte der Dotieratome muss an den Implantationspunkten vielmehr als eine Art δ -Funktion behandelt werden, wobei das elektrostatische Potential als Coulomb-Potential mit Singularitäten am Punkt der lokalisierten Dotieratome betrachtet werden kann [14]. Der Einfluss einer statistisch ungleichmäßig angeordneten Dotierung im Vergleich zu einer deterministischen Dotierung mit einer regelmäßigen Anordnung auf die elektrischen Eigenschaften eines Halbleiterbauteils wurde beispielsweise von der Gruppe um Takahiro Shinada in Japan untersucht [15]. Dabei wurde festgestellt, dass bei Halb-



Abb. 2.2: Histogramme der Schwellenspannungsdifferenzen ΔV_{th} vor und nach der Implantation weniger Ionen für 10 Halbleiter. (a) Histogramm bei einer geordneten Dotieratom-Verteilung und (b) die dazugehörige Konturkarte des Coulomb Potentials. (c) Histogramm bei einer zufälligen Verteilung der Dotierung und (d) die dazugehörige Konturkarte. Gaussfits ergeben eine Standardabweichung für (a) von 0,1 V und für (c) von 0,3 V. [15]

leitern mit einer geringen Anzahl von Dotieratomen, die Anordnung dieser Dotierungen Auswirkungen auf die Schwellenspannung des Halbleiters sowie deren Fluktuation hat. Mit einer Dotierung, die in einem regelmäßigen Gitter von ca. 100 nm angeordnet ist, verringert sich die durchschnittliche Schwellenspannungsdifferenz¹ zwischen undotiertem und dotiertem Halbleiter auf den Wert von $\Delta V_{th} = -0.4$ V bei einer Fluktuation der Messung mehrerer Proben von ± 0.1 V. Mit einer zufälligen Verteilung der Dotieratome ergibt sich hingegen eine Schwellenspannungsdifferenz von $\Delta V_{th} = -0.2$ V, außerdem verdreifacht sich die Fluktuation (siehe Abb. 2.2). Mit geringerer Fluktuation aufgrund regelmäßiger Anordnung der Dotieratome wird somit eine bessere Reproduzierbarkeit der Halbleiterbauteileigenschaften gewährleistet. Eine Reduzierung der Schwellenspannungs-

¹Die Schwellspannung ist die Spannung, die an einen Feldeffekttransistor bzw. dessen Gate-Kontakt angelegt werden muss, damit zwischen dem Source- und Drain-Kontakt ein Strom fließen kann. Die hier angegeben Differenz bezieht sich auch auf den Unterschied der Schwellspannungen vor und nach einer Einzelionendotierung [15].

2 Implantation einzelner Ionen

differenz bringt außerdem den Vorteil, dass mit geringeren Spannungen gearbeitet und eine Leistungsverringerung bzw. Energieersparnis ermöglicht werden kann.

Insgesamt zeigt sich dadurch deutlich, dass das gezielte, deterministische Platzieren von Dotieratomen in der heutigen Halbleiterindustrie ein wichtiges, unumgängliches Ziel ist. Fluktuationen in der Anzahl und des Ortes der Dotierungen wirken sich mit kleiner werdenden Bauelementen immer deutlicher aus und verursachen negative Effekte bei der exakten Herstellung und Funktion der Halbleiterbauelemente.

2.1.2 Festkörperquantencomputer

Wesentlich kritischer ist jedoch die auf wenige Nanometer genaue Platzierung von Atomen im Bereich des Festkörperquantencomputing. Der vielleicht größte und entscheidendste Vorteil von Quantencomputern, die mit Hilfe eines Festkörpers umgesetzt werden gegenüber anderen Realisierungsmöglichkeiten, ist die potentiell mögliche Skalierbarkeit. Wird beispielsweise eines der größten Gebiete der Quanteninformationsverarbeitung (QIV) betrachtet, die Ionenfallen, so liegt hier der bisherige Rekord an verschränkten Qubits bei maximal 8 Ionen [16, 17]. Ohne Zweifel ist dies eine enorme Leistung, jedoch wird mit einer weiteren Skalierung des Systems eine Netzwerkstruktur unumgänglich, wie etwa die Integration von Ionenfallen in Halbleiterchipstrukturen [18]. Festkörperquantencomputer können zwar bislang noch nicht mit den experimentellen Ergebnissen anderer Gebiete – wie etwa denen der QIV mit Ionenfallen – mithalten, dafür stellen sie im Bezug auf eine mögliche Skalierbarkeit vielversprechende Systeme dar. Im Anschluss werden folgende Realisierungsmöglichkeiten knapp vorgestellt:

| Substrat | Ionensorte | Qubit |
|----------|--------------------------|--------------------|
| Silizium | Phosphor | Kernspin |
| Silizium | Phosphor | Elektronenposition |
| Diamant | NV ⁻ -Zentrum | Elektronspin |

Kernspin von Phosphor in Silizium:

Die vermutlich populärste und inspirierendste Umsetzung basiert auf einer Idee von Bruce Kane aus dem Jahr 1998 [19]. Basierend auf dem aus der Halbleiterindustrie bestens bekannten Silizium werden bei dem Vorschlag von Kane die Kernspins von dotierten Phosphoratomen als Qubits verwendet (siehe Abb. 2.3). Die einzelnen positiv geladenen Phos-

2.1 Anwendungsmöglichkeiten



Abb. 2.3: Schematische Darstellung eines Silizium-Phosphor-Quantencomputers nach der Idee von Kane. Die illustrierten J-Gates dienen zur Wechselwirkungskontrolle zwischen den P-Donatoren, wohingegen die A-Gates die Wechselwirkung der P-Kernspins mit einem äußeren Magnetfeld B_{ac} steuern. [19]

phorionen befinden sich in einem Abstand von ca. 20 nm voneinander im Silizium und etwa 10 nm unter der Oberfläche. Auf dem Siliziumsubstrat ist eine isolierende Barriere aufgebracht, beispielsweise eine SiO_2 -Schicht, welche die darauf angebrachten elektrischen Kontakte (Gates) elektrisch vom Silizium trennt. Mit Hilfe der Kontakte direkt oberhalb der Phosphorionen (A-Gates) kann die Resonanzfrequenz der Kernspin-Qubits eingestellt werden. Dies geschieht durch Anlegen einer Spannung, durch welche die Elektronen-Wellenfunktion vom Dotieratom hin zur Barriere verschoben wird (siehe Abb. 2.3 die beiden linken Phosphordonatoren). Dies wiederum reduziert die Stärke der Hyperfein-Wechselwirkung zwischen den im Silizium befindlichen Elektronen und den Kernspins der Phosphoratome und somit die Resonanzfrequenz. Mittels eines global angelegten magnetischen Wechselfeldes $B_{ac}\,\cong\,10^{-3}$ T lassen sich anschließend gezielt die resonanten Kernspins drehen, welche sonst durch ein statisches Magnetfeld $B_0 \ge 2$ T ausgerichtet sind. Zusätzlich befinden sich zwischen den A-Gates weitere Kontakte (J-Gates), welche zur Kontrolle der Wechselwirkung zwischen den Kernspins verwendet werden. Durch Anlegen einer Spannung verstärken oder vermindern die J-Gates das elektrostatische Potential zwischen den Phosphoratomen proportional zum Überlapp der Elektronen-Wellenfunktion (siehe Abb. 2.3 die beiden rechten Phosphorionen). Liegt an diesen keine Spannung an, können sich die Wellenfunktionen der Elektronen bis zu 10 nm ausbreiten und sorgen

2 Implantation einzelner Ionen

somit für die notwendige Kopplung an weitere Phosphor-Donatoren.

Das Auslesen der Kernspineinstellung wird ebenfalls über diese J-Gates ermöglicht. Zunächst werden durch adiabatische Erhöhung der Spannung über einen kritischen Grenzwert $U_J = \mu B/2$ die Elektronen für jeweils unterschiedliche Zustände der Kernspins in verschiedenartige Zustände befördert. Diese können anschließend mit Hilfe einer sensiblen Strommessung an den A-Gates, welche an unterschiedlicher Spannung liegen, gemessen werden. Hier zeigt sich auch der große Vorteil des Kaneschen Quantencomputers: die Qubits werden rein elektrisch ausgelesen und die dabei erzeugten Signale können mit Hilfe herkömmlicher Elektronik verstärkt und direkt weiter verarbeitet werden. Wird der Festkörperquantencomputer noch auf wenige hundert Kelvin gekühlt, so lassen sich nach den Berechnungen von Kane Dekohärenzzeiten² von bis zu 10⁶ s erreichen, wodurch theoretisch zwischen 10⁵ und 10¹⁰ logische Operationen ausgeführt werden könnten.

Eine direkte Umsetzung des Kaneschen Festkörperquantencomputers stellte sich bisher jedoch als äußerst schwer heraus. Dennoch wurden in der Nachfolgezeit zahlreiche vielversprechende Experimente und Vorschläge zur Erweiterung und Verbesserung der Idee gebracht. Beispielsweise ist es Martin Brandt und seinen Kollegen gelungen, Rabi-Oszillationen zu messen, welche durch Ensembles von Phosphoratomen im Silizium erzeugt wurden [20]. Hierbei wurde das Verfahren der sogenannten gepulsten elektrisch detektierten Magnetresonanz (EDMR) in Verbindung mit einer Spin-Echo-Tomographie gewählt, mit welchem anhand der Gleichstrom-Leitfähigkeit des Halbleiters nach einem Mikrowellenpuls die Spinstellung der Donatorkerne wie Phosphor gemessen werden kann. Außerdem konnte bereits gezeigt werden, dass dieses Verfahren auf Ensembles von weniger als 100 Phosphoratomen anwendbar ist und somit eine vielversprechende Möglichkeit darstellt, einzelne Donatorenspins in Halbleitern zu studieren [21]. Desweiteren konnte mit Hilfe eines kombinierten Mikrowellen- und Radiofrequenzpulses ein kohärenter Transfer eines Superpositionszustandes von einem Ensemble an Elektronenspins auf Kernspins der P-Donatoren demonstriert werden [22]. Dies kann als eine Art Quantenspeicher betrachtet werden, in dem die Information im Kernspin der dotierten Phosphoratome bis zu einer Sekunde gespeichert und nach einem weiteren Transfer zurück auf die Elektronenspins mit einer Genauigkeit von ungefähr 90 % wieder ausgelesen werden kann.

²Die Dekohärenzzeit entspricht der Zeit, nach der die quantenmechanischen Effekte, wie Überlagerungszustände oder Verschränkungen, verloren gegangen sind. Die ausgelesenen Ergebnisse sind folglich falsch.

Elektronenposition von Phosphor in Silizium:

Ebenso auf der Idee von Kane aufbauend, gibt es beispielsweise einen weiteren interessanten Vorschlag für einen skalierbaren Festkörperquantencomputer von Lloyd Hollenberg [23]. Hier besteht das Qubit aus zwei Phosphoratomen in einem Halbleiterkristall,



Abb. 2.4: (a) Schematische Darstellung der Realisierung eines Ladungs-Qubits nach der Idee von Hollenberg durch zwei implantierte Phosphordonatoren und einem Elektron. Die dargestellten S-Gates sowie B-Gates dienen zur Kontrolle des induzierten Potentials für das Elektron. Der SET hingegen wird zur Initialisierung und zum Auslesen der Qubit-Zustände verwendet. (b) Skalierte Architektur basierend auf einer aufgereihten CPHASE-Anordnung der einzelnen Ladungs-Qubits. [23]

von welchen nur eines der beiden ionisiert ist (siehe Abb. 2.4 (a)). Die zwei Qubit-Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ werden durch die Position des Elektrons - entweder beim linken oder rechten Phosphoratom - festgelegt. Außerdem lassen sich die Tiefe, der Offset und die Symmetrie des Potentials an den implantierten Atomen mittels Spannungen an den Barriere- (B) und Symmetrie-Gates (S) extern kontrollieren. Ähnlich dem Kaneschen Vorschlag sind diese Kontakte auf einer isolierenden Schicht auf dem Halbleiter angebracht. Zum Initialisieren und Auslesen der sogenannten Ladungs-Qubits wird ein Hochfrequenz-Einzelelektronentransistor (SET) eingesetzt, welcher mit einer berechneten Einzelmesszeit von ca. 50 ps wesentlich schneller als die erwartete Dekohärenzzeit von einigen μ s ist. Außerdem lässt sich diese Variante für die Controlled-Phase-Anordnung (CPHASE) einfach zu einem größeren Netzwerk skalieren (siehe Abb. 2.4 (b)). Aufgrund der langreichweitigen Coulomb Kopplung, auf welcher dieser Vorschlag basiert, und der Möglichkeit, mit Hilfe

2 Implantation einzelner Ionen

einer Spannung am B-Gate das Elektron effektiv zu isolieren, ergeben sich weniger strenge Anforderungen für die Abstände zwischen den einzelnen Phosphordonatoren im Vergleich zu Schemata, die auf Kernspins basieren. Mittlerweile wurden ebenso vielversprechende Experimente durchgeführt, bei welchen einzelne Donatoren bzw. deren Hybridisierungsgrad mit Hilfe des Gates eines Silizum-FinFETs kontrolliert wurden [24]. Außerdem wurden Vorschläge gemacht, wie anhand von Ladungs-Qubits beispielsweise ein CNOT-Gatter umgesetzt werden kann [25].

Das entscheidende Kriterium beider vorgestellter Realisierungvorschläge stellt die Implantation der Donatoratome dar, welche zum einen deterministisch sein und zum anderen ein nanometer-genaues Platzieren beinhalten muss.

Farbzentren in Diamant:



Abb. 2.5: (a) Termschema der elektronischen Anregungsniveaus inklusive der Spinlevel des Grundzustandes bei NV⁻-Zentren im Diamant. (b) Schematische Darstellung der Kristallstruktur des Farbzentrums (Stickstoff grün) sowie der Verteilung der Elektronenwolken (lila). (c) Hochauflösendes, konfokales Mikroskopiebild eines NV⁻-Zentrums. Das Verhältnis von Signal zum Hintergund beträgt mehr als 50:1. (d) Schematische Darstellung eines Photon-Moduls, welches aus Farbzentren (rot) in einer photonischen Hohlraum-Struktur (gelb) besteht. Mit Hilfe der Kontroll-Kontakte (grau) kann jedes Farbzentrum auf die Hohlraumresonanz gebracht werden. [27,29]

Der momentan vermutlich aussichtsreichste Kandidat für einen zukünftigen skalierbaren Festkörperquantencomputer stellt jedoch der Diamant und die darin erzeugbaren Farbzentren dar [26,27]. Farbzentren sind optisch aktive Stellen, die von Fehlstellen, Verunreinigungen, Defekten oder Komplexen herrühren können. Die hierbei räumlich gebundenen Elektronen erzeugen in der Bandlücke des Diamanten elektronische Energieniveaus, welche aufgrund unterschiedlicher Spinzustandsenergien noch weiter aufgespalten sein können. Eines im Bereich des Quantencomputing am intensivsten untersuchten Farbzentrum stellt hierbei das Stickstoff-Fehlstellen-Zentrum dar (NV⁻-Zentrum vom engl. Ausdruck Nitrogen-Vacancy-Center) (siehe Abb. 2.5 (b)).

Erzeugt werden können die Farbzentren durch Implantation von Stickstoff, bei der zumeist gleichzeitig Fehlstellen entstehen. Nachdem diese allerdings nur selten an exakt der nächsten Gitterstelle zu finden sind, bedarf es eines Tricks, um aus dem implantierten Ion ein Farbzentrum zu generieren. Durch Erwärmen beginnen die Fehlstellen in einer Art 'Random Walk' durch den Kristall zu wandern, bis sie auf ein Stickstoffatom treffen und mit diesem ein stabiles NV⁻-Zentrum bilden. Im Vergleich zu den ebenso möglichen NV⁰-Zentren haben diese ein zusätzliches Elektron, welches beispielsweise von einem Kohlenstoffatom herrühren kann. Im Grundzustand können die insgesamt sechs zur Fehlstelle gehörenden Elektronen drei spinabhängige Unterzustände annehmen, sie bilden also einen Triplet-Zustand $m_s = 0$ und $m_s = \pm 1$, wobei die beiden letzteren energetisch sehr nahe beieinander liegen (siehe Abb. 2.5 (a)). Der Übergang zwischen den Niveaus $m_s = 0$ und $m_s = \pm 1$ wiederum kann mittels einer Mikrowellenfrequenz von ca. 2,88 GHz [28] angesprochen werden. In diesen Unterzuständen können somit relativ einfach die benötigten Qubits kodiert werden, welche bei einem nahezu einkristallinen Diamanten selbst bei Raumtemperatur Kohärenzzeiten von bis zu 0,35 ms aufweisen können [29]. Das Polarisieren sowie das Auslesen der jeweiligen Zustände erfolgt über einen zusätzlichen Laser, welcher den optischen Übergang von 637 nm treibt (siehe Abb. 2.5 (a)). Bei diesem Vorgang werden die jeweiligen Unterzustände spinabhängig angeregt, wobei durch Symmetriebetrachtungen das $m_s = 0$ Niveau bevorzugt wird. Somit können durch eine Beobachtung der Fluoreszenz mit Hilfe eines konfokalen Mikroskops die Qubit-Zustände determiniert werden (siehe Abb. 2.5 (c) für eine typische Mikroskopaufnahme).

Von diesem Startpunkt aus konnten beispielsweise in der Gruppe von Jörg Wrachtrup – neben Rabi-Oszillationen – auch eine Zwei-Qubit-Operation demonstriert werden: das CROT-Gatter, bei dem das Target-Qubit nicht vollständig geflippt wird, sondern eine kontrollierte Rotation vollzieht [30]. Vor kurzem konnten sogar Mehrteilchen-Verschränkungen zwischen den Spins des Farbzentrums und den angrenzenden Stickstoff-Atomen nachgewiesen werden [31, 32]. Außerdem konnte beispielsweise in der Gruppe von Mikhail Lukin ebenfalls mit Hilfe der umliegenden Stickstoffatome ein Quantenregister realisiert werden [33]. Aber auch reine Stickstoffatome, welche sich neben dem NV⁻-Farbzentrum be-

finden, können an dieses gekoppelt und mit ihm in Wechselwirkung gebracht werden. Dadurch kann mit Hilfe des Farbzentrums der Spin des Stickstoffatoms ausgelesen werden [29,34,35].

Die NV⁻-Spinzustände im Diamant bilden somit einen praktikablen Ausgangspunkt für einen Festkörperquantencomputer, da ein einfacher externer Auslesevorgang und lange Kohärenzzeiten gegeben sind. Folglich gibt es immer wieder neue Ideen, wie die einzeln gut handhabbaren Farbzentren zu einem großen Netzwerk skaliert werden könnten. Die Ideen reichen von Stickstoffatom-Ketten im Diamant zur Verknüpfung zweier NV⁻-Zentren [34], bis hin zur Implementierung der Farbzentren in eine photonische Hohlraumstruktur (siehe Abb. 2.5 (d)) inklusive Kontroll-Kontakte für die resonante Kopplung der Systeme [36]. Zusätzlich werden immer neue Anwendungen für Farbzentren im Diamant erschlossen, wie etwa als Einzel-Photonen-Quelle [37] oder als hochsensibles Magnetometer [38, 39]. Bei der Herstellung sämtlicher eben genannter Bauteile ist jedoch die exakte Platzierung der Stickstoffdotierungen ein ausschlaggebender Faktor für einen Erfolg. Welche Verfahren zur Implantation einzelner Ionen zur Verfügung stehen, soll im nachfolgenden Kapitel näher beleuchtet werden.

2.2 Implantationsverfahren einzelner Ionen

Aufgrund der eben beschriebenen vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten bzw. einer größer werdenden Notwendigkeit einer Einzelionenimplantation, verfolgen mehrere Forschergruppen weltweit unterschiedliche Ansätze zur Realisierung einer solchen Quelle. Die aktuellen Fortschritte der Umsetzungen, sowie deren Vor- und Nachteile werden nachfolgend knapp aufgezeigt.

2.2.1 Bottom-Up-Verfahren

Zunächst wäre ein von der Gruppe um Michelle Simmons entwickeltes Verfahren zu nennen, welches sich durch eine enorme Präzision der Platzierung auszeichnet [40,41]. Dieses Verfahren, welches sich als Bottom-Up-Verfahren bezeichnen lässt, nutzt die atomare Genauigkeit eines Raster-Tunnel-Mikroskops (STM vom englischen Ausdruck Scanning Tunneling Microscopy), um in Silizium, welches mit einer Monolage Wasserstoff überzogen wurde, einzelne Phosphoratome einzubetten.

Hierzu wird zunächst das hochreine Siliziumsubstrat in ein Ultra-Hochvakuum-STM gebracht und mit einer Monolage Wasserstoff passiviert (siehe Abb. 2.6 (a)). Anschließend



Abb. 2.6: Schematische Darstellung des Dotierungsprozesses einzelner Phosphoratome in Silizium in der Gruppe um Simmons. (a) Hochreines (001)-Silizium passiviert mit einer Monolage Wasserstoff. (b) Desorbtion einzelner H-Atome mit Hilfe einer STM-Spitze. (c) Anlagerung der P-Atome unter Hinzugabe eines PH₃-Gases. (d) Überwachsen einiger Monolagen Silizium über die platzierten P-Atome. [40]

werden gezielt mit der STM-Spitze an den benötigten Stellen einzelne Wasserstoff-Atome herausgelöst (siehe Abb. 2.6 (b)). Die dadurch entstandene Struktur bzw. Maske lässt folglich nur an den freiliegenden Stellen eine Reaktion des Silizium mit der Umgebung zu. Anschließend wird ein Phosphingas (PH_3) in die Kammer eingeleitet, welches an den entstandenen Fehlstellen der Wasserstoffschicht mit dem Siliziumsubstrat reagiert (siehe Abb. 2.6 (c)). Durch darauffolgendes sanftes Erwärmen können die Phosphor-Atome aus den Molekülen gelöst und in das Siliziumsubstrat eingebettet werden. Eine Diffusion der P-Atome kann hierbei durch eine minimal notwendige Erwärmung verhindert werden. Außerdem kann die Wasserstoffschicht durch optisches Anregen oder Elektronenbeschuss abgetragen und somit eine laterale Auflösung der Positionierung von ca. 1 nm erreicht werden [41]. Auch eine dreidimensionale Platzierung der Phosphor-Atome im Silizium, also eine exakte Positionierung des Phosphoratoms nicht nur auf sondern auch in einer entsprechenden Tiefe unter der Oberfläche, konnte in der Gruppe von Simmons realisiert werden. Bei diesem Schritt werden mittels Molekularstrahlepitaxie über die auf der Oberfläche befindlichen Phosphor-Atome, ebenfalls ohne eine signifikante Diffusion, weitere Silizium-Lagen gewachsen (siehe Abb. 2.6 (d)).

Insgesamt konnten mit diesem Verfahren nicht nur dotierte Arrays mit Abständen von wenigen Nanometern [42], sondern auch Nanodrähte [43] oder ganze Nanobauteile, wie etwa ein Einzelelektronentransistor [44], erzeugt werden. Trotz der enormen Präzision des Verfahrens weist es einen entscheidenden Nachteil auf: die Funktionsweise ist nur für den Wirtskristall Silizium gegeben, da nur dort die Wasserstoffpassivierung erfolgreich mit anschließendem Anfügen der Dotieratome vollzogen werden kann. Eine universelle Implantationsmethode einzelner Atome liegt hiermit also nicht vor.

2.2.2 Top-Down-Verfahren

Die so genannten Top-Down-Verfahren sind hingegen unabhängig von den Substraten, in welche implantiert werden soll. Bei diesen wird das Dotieratom nicht auf die Oberfläche gebracht und anschließend mit Atomschichten des Substratelements überwachsen, sondern das ionisierte Atom wird beschleunigt und gelangt aufgrund dieser kinetischen Energie unter die Oberfläche. Herkömmliche Ionenquellen erzeugen jedoch einen Ionenstrahl mit Hilfe eines Plasmas. Sie weisen daher eine Strahldichte auf, welche weit über der für die Einzel-Ionen-Implantation benötigten Dichte liegt. Um diese zu reduzieren und dennoch ein genaues Zielen zu ermöglichen, ist ein großer Aufwand an Blenden und Fokussierungsoptik notwendig. Dieser erzeugte, ausgedünnte Strahl besitzt aber weiterhin ein probabilistisches Moment, d.h. eine deterministische Implantation einzelner Teilchen ist ohne anschließende Detektion des Implantationsereignisses unmöglich. Wird jede Einzelimplantation detektiert, so kann der Strahl unterbrochen und ein deterministisches Einbringen der Ionen ermöglicht werden. Im Nachfolgenden werden mehrere unterschiedliche Ansätze solcher Top-Down-Verfahren erläutert.

Implantationsdetektion mit Hilfe erzeugter Sekundärelektronen:

Ein Möglichkeit zur Detektion des Implantationsereignisses stellt die Messung der beim



Abb. 2.7: Prinzipieller Aufbau zur Einzel-Ionen-Implantation nach Shinada. Mit Hilfe der Chopping-Elektroden wird der Strahl ausgedünnt bzw. nach einer Detektion der Implantation unterbrochen. [46]

Auftreffen der Ionen auf das Zielsubstrat erzeugten Sekundärelektronen (SE) dar. Da es experimentell nicht möglich ist, 100 % der SE zu detektieren, muss sichergestellt werden, dass ausreichend viele SE bei der Ionenimplantation freigesetzt werden. Pionierarbeit auf diesem Gebiet leistete die Gruppe um Takahiro Shinada, welche zweifach geladene Ionen aus Silizium Si^{2+} bzw. Phosphor P^{2+} mit einer Energie von 60 keV in CR-39 (Kunstoffglas) bzw. Siliziumdioxid implantierten [45, 46]. Ein fokusierter Ionenstrahl mit einem Strom von 1 pA wird dabei durch eine Chopper-Elektrode ausgedünnt, indem der Chopper den Strahl für gerade 1 ns geöffnet lässt. Dies führt zu einer geschätzten Wahrscheinlichkeit von 0,01 Ionen pro Chopperöffnung (siehe Abb. 2.7). Die beim Auftreffen der Ionen auf dem Substrat (CR-39 bzw. SiO_2) freiwerdenden SE werden mit Hilfe diverser Photomultiplier detektiert – somit wird eine Implantation einzelner Ionen gewährleistet. Hierbei konnte eine maximale Auflösung von 60 nm mit über 90 % Wahrscheinlichkeit gewährleistet werden [47]. Aufgrund der benötigten hohen Energie der Ionen entstehen jedoch beim Auftreffen auf der Oberfläche Schäden an der Kristallstruktur. Außerdem unterliegt die Eindringtiefe und die laterale Position, aufgrund statistischer Prozesse beim Abbremsen der Ionen im Material, immer einer hohen Variation, dem so genannten "Straggling".

Um dieses Straggling zu minimieren wird beispielsweise in der Gruppe von Thomas Schenkel mit niederenergetischen Ionen implaniert. Diese müssen hingegen, um effizient detektiert werden zu können, über eine wesentlich höhere Ladung verfügen. Bisher konnten bei einer Energie von weniger als 10 keV Implantationen von P¹³⁺, Te⁸⁴⁺ sowie Xe⁴⁰⁺ mit einer Effizienz von 85 %, 95 % und 100 % nachgewiesen werden. Der Aufbau ähnelt dem der Gruppe um Shinada (siehe Abb. 2.7) mit einem zusätzlichen Rasterkraftmikroskop im Strahlengang, durch dessen Cantilever-Spitze ein Loch als Kollimationsapertur verwendet wird [48]. Mit Hilfe eines fokussierten Ionenstrahls (FIB vom engl. Ausdruck: Focused Ion Beam) lassen sich Aperturen mit Durchmessern von unter 5 nm erzeugen, mit welchen es wiederum theoretisch möglich sein sollte, einzelne Ionen in einer Tiefe von ungefähr 20 nm bis auf ca. 5-10 nm genau zu platzieren [49]. Die limitierenden Faktoren einer erreichbaren Auflösung stellen hierbei zum einen das weiterhin vorhandene Straggling dar, zum anderen werden Erwärmungsprozesse nach der Implantation notwendig, um entstandene Kristallschäden zu "heilen", welche wiederum durch Diffusionen der Teilchen zur Verschlechterung des Ergebnisses führen.

Außerdem konnte inzwischen mit dieser Methode eine Detektion hochgeladener Xe⁴⁴⁺ Ionen in Diamant ermöglicht werden, wobei jedoch Energien von über 300 keV nötig waren und Defektkrater von 25 bis 40 nm Größe an der Oberfläche entdeckt wurden [50]. Somit

2 Implantation einzelner Ionen

kann zwar die Ionenimplantation durch SE-Detektion deterministisch gemacht und auf einzelne Dotierionen reduziert werden, jedoch ist die Methode nicht universell einsetzbar. Entweder ergeben sich aufgrund hoher Energien zu große Schäden am Wirtskristall oder es lassen sich nicht aus jedem Element vielfach geladene Ionen erzeugen. Zudem kann die Methode nicht durch Hinzufügen von Masken präziser gemacht werden, da diese durch eindringende Ionen fälschlicherweise ebenso SE erzeugen würden.

Implantationsdetektion mit Hilfe erzeugter Elektron-Loch-Paare:



Abb. 2.8: Schematische Darstellung der Detektion von Elektron-Loch-Paaren bzw. des dadurch hervorgerufenen Strompulses, der durch Implantation eines einzelnen Phosphorions erzeugt wird. Die räumliche Auflösung wird durch eine PMMA-Maske (Acrylglas) realisiert. [52]

Eine Methode, die auf die SE verzichtet und somit das Implantieren durch Masken ermöglicht und dennoch das Implantationsereignis nachweist, wurde von der Gruppe um Jamieson entwickelt [51]. In diesem Verfahren werden anstelle der Sekundärelektronen Elektron-Loch-Paare gemessen, welche durch das Eindringen der Dotieratome in das Substrat erzeugt werden (siehe Abb. 2.8). Mit einem auf 250 μ m kollimierten Ionenstrahl aus 14 keV schnellen Phosphorionen (³¹P), sind bei einem Stromfluss von wenigen pA nur wenige Implantationensereignisse pro Minute durch die gegebenen Masken bzw. Aperturen möglich. Beim Eindringen erzeugen diese Elektron-Loch-Paare, die wiederum mit Hilfe von P-I-N-Detektoren (Akzeptor(P)-intrisisches Halbleitersubstrat(I)-Donator(N)) nachgewiesen werden können. Die PMMA-Maske, durch welche die Ionen in das Substrat gelangen, kann so klein (15 nm Apertur) gewählt werden, dass trotz des unvermeidlichen Stragglings eine Zielgenauigkeit von 20 nm erreicht werden kann [52, 53]. Nachdem jedoch die minimalen Strukturgrößen solcher Masken eine klare Schranke für die erzielbare räumliche Präzision darstellt, ist eine Verbesserung nur schwer zu verwirklichen. Außerdem begrenzt das Straggling aufgrund der hohen Implantationsenergien weiterhin eine Verbesserung der Auflösung.

Zusammenfassend kann somit festgestellt werden, dass sich die bisher genannten Ansätze durch enorme Präzession auszeichnen – dabei jedoch auf spezielle Elemente beschränkt sind (Bottom-Up-Verfahren). Sind sie hingegen universeller einsetzbar, so ergeben sich unvermeidliche Auflösunggrenzen aufgrund einer notwendigen Implantationsdetektion (Top-Down-Verfahren).

2.2.3 Implantation mit Fallen als Ionenquelle

Einen gänzlich anderen Weg beschreiten hingegen die Implantationverfahren, welche nicht auf herkömmliche Ionenquellen zurückgreifen. Die im Nachfolgenden beschriebenen Methoden, von welchen die Letztere in unserer Gruppe etabliert und im Verlauf der Diplomarbeit weiterentwickelt wurde, nutzen hingegen gefangene, einzeln kontrollierte Atome. Allen Verfahren ist gemein, dass zunächst Atome bzw. Ionen gefangen und gekühlt werden und anschließend durch Extraktion einen ultrakalten Ionenstrahl erzeugen. Dieser weist vielversprechende Eigenschaften für die gezielte Implantation einzelner Atome auf.

Magneto-Optische Falle zur parallelen Einzelatomdeposition:

Zunächst wäre eine in der Gruppe von Tilman Pfau entwickelte Methode zu nennen, welche mit Hilfe einer magneto-optischen Falle (MOT vom engl. Ausdruck: Magneto-Optical Trap) Atomwolken aus Chrom fängt und diese in ein Bose-Einstein-Kondensat (BEC vom engl. Ausdruck: Bose Einstein Condensate) kühlt. Anschließend wird anhand eines dreidimensionalen, optischen Gitters ein Mott-Isolator Zustand erzeugt, bei dem genau ein Atom in jedem Potentialtopf sitzt. Dieses Gitter aus einzelnen Atomen soll daraufhin definiert auf eine Substrat deponiert werden (siehe Abb. 2.9 (a)) [54].

Eine MOT besteht prinzipiell aus drei Paaren von entgegengesetzten, orthogonalen Laserstrahlen, welche sich am Mittelpunkt eines magnetischen Quadrupol-Feldes schneiden. Die Wellenlänge des Lasers ist bezüglich eines resonanten Übergangs der zu fangenden Atome leicht verstimmt, was wiederum zu einer geschwindigkeitsabhängigen Kraft und



Abb. 2.9: (a) Schematische Darstellung des Vorgangs zur Einzelatomdeposition. Mit Hilfe einer Transportwelle (grau) werden Atome aus einem BEC in die N\u00e4he eines durchsichtigen Substrats gebracht. Vor dem Substrat erzeugt die Transportwelle mit zwei weitere orthogonale Strahlen (blau) ein dreidimensionales Gitter, in welchem der Mott-Isolator-Übergang stattfindet. Das so erzeugte Atomgitter kann dann mit Hilfe der Transportwelle auf das Substrat deponiert werden. (b) Experimentelle Aufbau zur parallelen Einzelatomdeposition mit Hilfe einer MM-MOT. [54]

somit zur Kühlung führt. Das Magnetfeld erzeugt hingegen eine ortsabhängige Kraft, wodurch der Einschluss der Atome erfolgt³. Um die gefangenen Teilchen zu einem Atomstrahl zu formen, wurde bei diesem Experiment eine MOT für bewegliche Melassen (MM-MOT vom engl. Ausdruck: Moving Molasses MOT) eingesetzt (siehe Abb. 2.9 (b)). Die Laserstrahlen der MOT sind hierfür paarweise verstimmt, was zu einer Kraft führt, welche die Atome in ein bewegtes Bezugssystem kühlt. Es besteht also eine dreidimensionale Kühlung mit einem zweidimensionalen Einschluss, aufgrund dessen die Atome von der MM-MOT aus in einen Magnetleiter beschleunigt werden. Über eine Kompressionszone und einer erneuten Laserkühlung zur Erhöhung der Phasenraumdichte, gelangen die Atome in eine optische Dipolfalle. Dort entsteht mit Hilfe der Verdampfungskühlung und einem optischen dreidimensionalen Gitter ein Bose-Einstein-Kondensat. Ist die Wechselwirkung der Atome repulsiv, d.h. es ist energetisch günstiger wenn sich in jeder Potentialmulde des

³Aus Platzgründen wird für eine genauere Beschreibung der Funktionsweise einer MOT auf [56] verwiesen.
Gitters die gleiche Anzahl von Atomen befindet, und wird die Anfangsdichte der Atomwolke geeignet gewählt, so lässt sich eine Situation erzeugen, bei der jeder Gitterplatz mit genau einem Atom besetzt ist. Durch Erhöhung der Potentialtiefe kann darauffolgend die Tunnelwahrscheinlichkeit unterdrückt werden, wodurch die Mott-Isolator-Phase entsteht. Dieses aus einzelnen Atomen bestehenden Gitter kann mit Hilfe eines Laser der Dipolfalle, der eine Transportwelle erzeugt, auf eine durchsichtiges Substrat deponiert werden.

Bisher konnten in der Gruppe von Pfau kontinuierlich ultrakalte Chrom-Atome geladen und durch den Magnetleiter transportiert werden [55]. Die Geschwindigkeiten der Teilchen konnten dabei zwischen 0 m/s und 3 m/s variiert werden, wobei der Atomfluss $2 \cdot 10^7$ Atome/s betrug. Die praktische Umsetzung einer BEC der Chrom-Atome und der anschließende Mott-Isolator-Übergang stehen also noch aus. Der große Vorteil der Methode ist der hohe Durchsatz der Atome, welche alle in einem wohlgeordneten Gitter platziert werden können. Nachteilig ist jedoch die Beschränkung jeder MOT auf Atomsorten mit einem zur Laserkühlung geeigneten Termschema. Zwar wurden magneto-optische Fallen bereits für eine Reihe von Elementen (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr, Mg, Ca, Sr, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Al, Ag, Cr, Er, Yb) realisiert, jedoch fehlen für technologisch relevante Elemente, wie Phosphor oder Stickstoff, die jeweiligen Lasersysteme. Außerdem muss ein Substrat verwendet werden, welches für die Transportwelle durchsichtig ist. So können zwar viele gleichmäßig angeordnete Atome parallel auf das Substrat deponiert werden, jedoch stellt dieses Verfahren kein universell einsetzbares dar.

Magneto-Optische Falle als Einzelnionenquelle:

In der Gruppe um Jabez McClelland und seinen Kollegen wird eine Methode entwickelt, welche ebenso auf einer magneto-optischen Falle basiert. Im Gegensatz zum eben erläuterten Ansatz, werden die neutralen Atome hierfür jedoch deterministisch einzeln gefangen und gekühlt. Anschließend werden die gefangenen Teilchen mittels eines Lasers ionisiert und extrahiert [57].

Der Aufbau dieser speziell entwickelten magneto-optischen Falle als Ionenquelle (MO-TIS vom engl. Ausdruck: Magneto-Optical Trap Ion Source) besteht neben den üblichen Spulen und Laserstrahlen aus zwei zusätzlichen Extraktionselektroden (siehe Abb. 2.10), in deren Mitte die MOT generiert wird. Eine der beiden weist eine Spiegeloberfläche sowie eine Öffnung zur Extraktion der Teilchen auf. Die andere Elektrode ist hingegen aus Quarzglas gefertigt, auf welches eine transparente, leitende Schicht aufgebracht wurde. Zusätzlich befindet sich im Aufbau noch ein Ionisationslaser, welcher die gefangenen Neu-

2 Implantation einzelner Ionen



Abb. 2.10: Schema einer Einzelionenquelle; realisiert mit Hilfe einer magneto-optischen Falle (MOT). Das Fallenpotential der MOT befindet sich zwischen zwei Elektroden (transparente Elektrode = weiß, reflektierende Elektrode = grau). Vier der sechs für die MOT benötigten Laserstrahlen passieren die transparente Elektrode und werden an der reflektierenden zurückgeworfen (lila). Die beiden weiteren Laserstrahlen sind senkrecht zur Seitenebene gerichtet (in Abb. nicht dargestellt). Das Magnetfeld der MOT wird über Spulen (rot) und die Ionisation mit Hilfe eines weiteren Lasers (pink) erzeugt. [59]

tralatome ionisiert, damit diese anschließend mit Hilfe des von den Elektroden erzeugten Feldes extrahiert werden können.

Bisher konnte von der Gruppe um McClelland für Chrom-Atome gezeigt werden, dass mit Hilfe eines Photomultipliers und einer speziellen Rückkopplung das probabilistische Moment des Ladevorgangs einer MOT verhindert und einzelne Atome mit einer Genauigkeit von bis zu 98,7 % gefangen werden können [57]. Zusätzlich wurde festgestellt, dass die Lade- und Extraktionrate von momentan 10 Hz auf mehrere kHz gesteigert werden kann. Zwar wurden bisher keine einzelnen Ionen erzeugt und extrahiert, dafür hingegen mit Hilfe des oben erwähnten Ionisationslasers ganze Atomwolken [59]. Der erzeugte Ionenstrahl weist eine Energiefluktuation von ungefähr 0,3 eV sowie eine Srahldivergenz im μ rad Bereich auf. Computersimulationen dieser Gruppe sagen hierfür, unter Hinzunahme geeigneter Ionenoptik, einen fokussierten Spot von ungefähr 7 nm voraus [58]. Durch eine weitere Verbesserung der Leistung der MOTIS, beispielsweise durch zusätzliche Kühlmethoden oder vorkollimierte Strahlführung, kann diese Auflösung auf unter 1 nm verringert werden. Ähnlich dem Ansatz aus der Gruppe von Tilman Pfau, dient auch hier eine MOT als Grundlage des Verfahrens, wodurch die bereits erwähnten Einschränkungen im Bezug auf mögliche Atomsorten entstehen. Somit weist die MOTIS aus der Gruppe um McClelland zwar ein deterministisches Laden und Extrahieren sowie eine gute Auflösung und Unabhängigkeit des Wirtssubstrats auf, allerdings lässt sich eine Beschränkung auf die o.g. Elemente nicht vermeiden.

Segmentierte, lineare Paulfalle als Einzelionenquelle:

Ein universellerer Ansatz zur Implantation von einzelnen Ionen in ein gewähltes Substrat, ist die Verwendung einer linearen Paul-Falle als Ionenquelle [60]. In Abb. 2.11 wird das



Abb. 2.11: Implantationsschema mit einer segmentierten, linearen Paul-Falle als Einzelionenquelle. Im Strahlengang befindet sich zur Fokussierung eine elektrostatische Einzellinse. Das Substrat befindet sich auf einem x-y-z-Positionierer mit Nanometer-Genauigkeit.

Konzept dieses Implantationsverfahrens schematisch dargestellt. Mit Hilfe einer Paulfalle ist es im Prinzip möglich, Isotope und Ionen jedes chemischen Elementes zu fangen und mittels Laserkühlung zu kühlen. Zwar existiert auch hier das Problem, dass für viele Spezies und deren Termschema keine geeigneten Kühllaser zur Verfügung stehen, jedoch ist es aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Teilchen dennoch möglich diese zu fangen. Zur Kühlung werden zwar weiterhin die Ionen benötigt, auf die das Lasersystem angepasst wurde, jedoch besteht zusätzlich die Möglichkeit, mit Hilfe des sogenannten sympathetischen Kühlens, andere Ionenspezies zu laden [61] und diese zu extrahieren. Darüber hinaus ist es durch unterschiedliche Kühlverfahren möglich, den gesamten eingeschlossenen Ionenkristall in den Grundzustand zu kühlen. Ist dieser erreicht, so weist das Teilchen eine minimale Orts- und Impulsunschärfe auf, welche die Heisenbergsche Unschärfebedingung der Quantentheorie vorgegeben wird. Die Paul-Falle

2 Implantation einzelner Ionen

als Quelle von grundzustandsgekühlten Ionen stellt somit eine perfekte Punktquelle am Heisenbergschen Limit dar.

Diese exakt definierten Anfangsbedingungen bilden einen hervorragenden Ausgangspunkt für eine zielgerichtete Extraktion, wofür das spezielle Design der Falle in unserem Experiment entwickelt und optimiert wurde. Der dabei erzeugte Ionenstrahl weist eine geringe räumliche Divergenz und eine kleine Energiefluktuation aus. Aufgrund dessen ist es möglich, mit Hilfe einer einfachen Ionenoptik den Strahl auf Spotgrößen von wenigen Nanometern zu fokussieren. Sphärische und chromatische Abberation der Linse kommen somit nur wenig zum Tragen. Außerdem ist der Extraktionszeitpunkt sowie die Geschwindigkeit und damit die Position der Ionen nach der Extraktion exakt definiert, was eine Abberationskorrektur anhand zeitlich geschalteter Linsen ermöglicht. Neben der somit erreichbaren, hohen lateralen Auflösung ist ebenso eine exakte Eindringtiefe in das Substrat zu erwarten, da die Implantationsenergien dieses Verfahrens nur wenige eV betragen. Das oben erwähnte "Straggling" der Ionen im Substrat, welches die Genauigkeit der Implantationstiefe und -position verschlechtert, wird somit gering gehalten. Zusätzlich zum in Abb. 2.11 dargestellten Aufbau ist denkbar, die Linse auf einer Raster-Kraft-Mikroskop-Spitze (AFM vom engl. Ausdruck: Atomic Force Microscopy) zu befestigen, womit eine Determinierung der Implantationsposition bezüglich möglicher Oberflächenstrukturen ermöglicht werden könnte [62].

Ionenfallen stellen darüber hinaus eine absolut deterministische Einzelionenquelle dar, da jedes gefangene Teilchen vor der Extraktion mit Hilfe einer Vergrößerungsoptik und einer EMCCD-Kamera abgebildet und beobachtet werden kann. Segmentierte Fallen erlauben es außerdem, die gefangenen Kristalle zu trennen, zu verschieben [63] oder durch Schwingungsanregung zu wiegen [61, 64]. Letzteres ermöglicht eine exakte Bestimmung der sympathetisch mitgekühlten, dem Laserlicht aber unzugänglichen Ionen. Infolgedessen kann bei diesem Verfahren auf eine Detektion des Implantationsereignisses gänzlich verzichtet werden.

Eine solche, für die Implantation äußerst geeignete lineare Paulfalle wurde in unserer Gruppe in den letzten Jahren als deterministische, ultrakalte Einzelionenquelle entwickelt und etabliert [65]. Im Laufe der hier vorgestellten Diplomarbeit wurden die Charakteristiken des erzeugten Ionenstrahls gemessen und verbessert, sowie eine eigens auf die Einzelionenquelle optimierte Ionenoptik entworfen und mit Hilfe eines Simulationsprogramms optimiert [66].





Abb. 3.1: Illustration einer Extraktion eines einzelnen Ions aus der linearen, segmentierten Paul-Falle.

In diesem Kapitel wird zunächst das allgemeine Prinzip der segmentierten, linearen Paul-Falle erläutert. Anschließend findet eine genauere Erklärung des speziellen Designs unserer Falle und dem experimentellen Aufbau statt. Abschließend werden der Betrieb sowie der Extraktionsmechanismus näher besprochen.

3.1 Physik der segmentierten, linearen Paul-Falle

Die Paul-Falle¹ ist ein Instrument, welches zur Speicherung von geladenen, einzelnen Teilchen dient. Im Vergleich zu anderen Fallenvarianten, wie beispielsweise der Penning-Falle bei der zusätzliche magnetische Felder den Einschluss sichern, wird in der Ionenfalle nach Wolfgang Paul der Einschluss nur anhand von elektrischen Feldern realisiert. Hierbei können zwei Einschlussrichtungen unterschieden werden: Zum einen der radiale Einschluss (Abb. 3.2 x-y-Richtung), erzeugt durch ein hochfrequentes elektrisches Wechselfeld. Zum anderen der Einschluss in der axialen Richtung (Abb. 3.2 z-Richtung), welcher durch ein statisches Feld gewährleistet wird. Ein rein statischer Einschluss ist im ladungsfreien Raum hingegen nicht möglich, da die Laplace-Gleichung $\Delta \Phi = 0$ (eine der Grundgleichungen der Elektrostatik) die Möglichkeit eines solchen Potentials ausschließt.



Abb. 3.2: Prinzipieller Aufbau einer linearen, segmentierten Paul-Falle mit einem gefangenen Ion (blau). (Links) Schnitt durch die radiale Ebene. (Rechts) Perspektivische Ansicht.

Dynamischer radialer Einschluss:

Das für den radialen Einschluss notwendige, schnell alternierende elektrische Feld wird mit Hilfe einer Wechselspannung erzeugt, die im Radiofrequenzbereich (ω_{RF}) liegt. Diese Spannung (Amplitude V) wird bei einer linearen Falle an zwei Elektroden angelegt, welche entlang der gesamten Fallenachse vorhanden sind (siehe Abb. 3.2 die grauen Elektroden). Im Inneren der Falle wird dadurch ein um die Fallenachse oszillierendes Quadrupol-Potential gebildet, welches die geladenen Teilchen abwechselnd anzieht und wieder abstößt. Aufgrund der hohen Frequenz und der den Teilchen innewohnenden Trägheit ergibt sich ein sogenanntes Pseudopotential, welches die Ionen radial einschließt. Bei einer rein linearen

¹Wolfgang Paul (1913-1993) erhielt für diese Entwicklung 1989 den Physik-Nobelpreis

Falle kann zudem angenommen werden, dass das Potential Φ_{RF} entlang der Fallenachse konstant ist und somit unabhängig von z.

Statischer axialer Einschluss:

Der Einschluss in axialer Richtung wird hingegen durch Hinzunahme eines statischen Potentials Φ_{stat} bewirkt. Dieses wird bei segmentierten Fallen durch Anlegen einer Gleichspannung U an unterschiedliche Elektroden erzeugt. Werden beispielsweise, wie in Abb. 3.2 zu sehen ist, die mittleren Segmente an Masse gelegt und die beiden äußeren an eine positive Gleichspannung, so entsteht für ein positiv geladenes Teilchen eine Potentialgrube. Es kann außerdem für kleine Energien bzw. niedrige Temperaturen in axialer Richtung als harmonisch betrachtet werden.

Mathematische Beschreibung des Fallenpotentials:

Insgesamt ergibt sich somit für das Potential, in welchem die Ionen gefangen sind, folgende Gleichung:

$$\Phi(x, y, z, t) = \Phi_{stat} + \Phi_{RF} = \frac{U}{2r_0^2} \left(\alpha_x x^2 + \alpha_y y^2 - \alpha_z z^2 \right) + \frac{V}{2r_0^2} \cos(\omega_{RF} t) (\alpha'_x x^2 + \alpha'_y y^2) \quad (3.1)$$

Hierbei ist r_0 der Abstand des Fallenzentrums zur Oberfläche der Elektroden, wohingegen α_i bzw. α'_i Geometriefaktoren sind. Letztere können nur durch numerische Simulationen abgeschätzt oder im Betrieb durch gemessene Fallenfrequenzen bestimmt werden.

Aufgrund der Laplace-Gleichung und den Bedingungen, die sich aus den eben genannten Einschlussrichtungen ergeben, muss für die Geometriefaktoren außerdem gelten:

$$\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z = 0 \qquad \Rightarrow \qquad -(\alpha_x + \alpha_y) = \alpha_z > 0, \tag{3.2}$$

$$\alpha'_x + \alpha'_y = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha'_x = -\alpha'_y. \tag{3.3}$$

Für die Bewegungsgleichung von einem solchen Potential gilt:

$$\ddot{\vec{x}} = -\frac{Z|e|}{m}\nabla\Phi.$$
(3.4)

Hierfür können nun folgende dimensionslose Substitutionen herangezogen werden:

$$\xi = \frac{\omega_{RF}t}{2}, \qquad a_i = \frac{4Z|e|U\alpha_i}{m\omega_{RF}^2 r_0^2}, \qquad q_i = \frac{2Z|e|V\alpha'_i}{m\omega_{RF}^2 r_0^2}, \qquad i = x, y, z.$$
(3.5)

und man erhält folglich für die Ortskoordinaten die Form einer Mathieuschen Differentialgleichung:

$$\frac{d^2 x_i}{d\xi^2} + [a_i - 2q_i \cos(2\xi)] x_i = 0, \qquad i = x, y, z$$
(3.6)

Die Mathieuschen Differentialgleichungen besitzen stabile und instabile Lösungen. Zwei-



Abb. 3.3: (a) Stabilitätsdiagramm für eine lineare Paul-Falle. (b) Der erste Stabilitätsbereich mit Frequenzen der Säkularbewegung ω_x und ω_y in Einheiten von $\frac{\omega_{RF}}{2}$.

tere führen zu einem exponentiellen Anwachsen der Bewegungsamplitude des Ions und somit zum Verlust des eingeschlossenen Teilchens. Bei einer stabilen Bewegung hingegen schwingt das Ion mit begrenzter Amplitude und bleibt dauerhaft gefangen. Um dies zu erreichen, müssen die Parameter a_i und q_i geeignete Werte aufweisen, was aus dem Stabilitätsdiagramm in Abbildung 3.3 (a) ersichtlich wird. Der wichtigste Bereich hieraus ist der für kleine $a_i \ge 0$ und $q_i < 1$, welcher als erster Stabilitätsbereich bezeichnet wird (siehe Abb. 3.3 (b)). Die Gleichungen (3.5) zeigen auf, dass a_i und q_i von den Geometriefaktoren α_i bzw. α'_i , sowie den Betriebsparametern ω_{RF} , U und V abhängen.

Die Näherungslösung erster Ordnung der Differentialgleichung ist die klassische Teilchentrajektorie in einer Paul-Falle und lautet für den Fall $(|a_x|, q_y^2) \ll 1$,

$$x(t) \approx A\cos\left(\beta_x \frac{\omega_{RF}t}{2}\right) \left[1 - \frac{q_x}{2}\cos(\omega_{RF}t)\right], \qquad \beta_x \approx \sqrt{a_x + \frac{q_x^2}{2}}$$
 (3.7)

wobe
iAeine Konstante darstellt, welche durch die Anfangsbedingungen fest
gelegt wird. Die gleiche Lösung gilt natürlich aufgrund symmetrischer Bedingungen
ebenso für die y-Richtung.

Die Bewegung des Teilchens im radialen Pseudopotential kann somit in zwei Schwingungsmoden unterteilt werden. Einerseits in die etwas langsamere, harmonische Säkularbewegung mit der Frequenz

$$\omega_i = \beta_i \frac{\omega_{RF}}{2} \ll \omega_{RF}, \qquad i = x, y.$$
(3.8)

Andererseits in die viel schnellere Mikrobewegung mit der Frequenz ω_{RF} , welche der Säkularbewegung überlagert ist.

Für den axialen Einschluss ergibt sich hingegen aus der Mathieuschen-Differentialgleichung aufgrund von $q_z = 0$ eine reine Säkularbewegung. Das entstehende axiale Potential ist in der Fallenmitte in sehr guter Näherung harmonisch und weist eine Schwingungsfrequenz von

$$\omega_z = \sqrt{\frac{Z|e|U\alpha_z}{mr_0^2}} \tag{3.9}$$

entlang der z-Achse auf.

In Abbildung 5.14 ist eine sich somit ergebende Trajektorie eines Ions in einer Paul-Falle dargestellt. Hierfür wurde unser spezielles Fallendesign mit sämtlichen experimentell typischen Einstellungen herangezogen und die sich ergebende Trajektorie numerisch simuliert. Als Element wurde – der Realität entsprechend – Kalzium



Abb. 3.4: Simulierte Trajektorie eines Ions in der Falle.

⁴⁰Ca angenommen. Man erkennt deutlich die Säkularbewegung in axialer und radialer Richtung, sowie die hinzukommende radiale Mikrobewegung. Welches Design einer linearen Paul-Falle hier zu Grunde gelegt wurde und warum es damit möglich ist, gezielt Ionen aus der Falle zu extrahieren, soll in den nachfolgenden Kapiteln dargelegt werden.

3.2 Die lineare lonenfalle als lonenquelle

Bei der für diese Arbeit relevanten Falle handelt es sich, wie bereits mehrfach erwähnt, um eine lineare Paul-Falle mit segmentierten Fallenchips. Sie weist ein speziell für die Extraktion von Ionen entwickeltes Design auf, ohne welches ein gezieltes Herausschießen nicht möglich wäre.

3.2.1 Spezialdesign der entwickelten Ionenfalle

Die Falle besteht aus vier Microchips bzw. Fallenflügeln, welche in einer x-förmigen Struktur angeordnet sind. Jeder dieser Flügel wurde mit dem aus der Leiterplattenproduktion bekannten PCB-Verfahren hergestellt (PCB vom engl. Ausdruck Printed Circuit Board) und besteht aus Polyimid mit einer Dicke von 410 μ m. Auf diesem Polyimid-Chip ist beidseitig eine 20 μ m dicke Kupferschicht aufgebracht, welche mit Hilfe herkömmlicher Ätztechniken segmentiert wurde. Bei einer klassischen segmentierten Paul-Fallen – wie sie oben beschrieben und in Abb. 3.2 dargestellt wurde – werden zwei dieser Chips ausschließlich mit den RF-Spannungen versorgt und weisen dementsprechend keine Segmente auf. Die beiden anderen Fallenflügel hingegen sorgen für den axialen Einschluss und sind folglich mit mehreren Elektroden versehen. Im Gegensatz dazu sind bei der von uns



Abb. 3.5: Konstruktionszeichnung inkl. Mikroskopaufnahme von einem der vier identischen Fallenflügel. Die für die RF-Spannung vorgesehene Rail ist ca. 22 μ m dick und entlang der gesamten Flügelkante angebracht. Im Experiment wurden die Ionen vor der Extraktion bei Elektrode 10 gefangen.

zur Extraktion entwickelten Falle alle Chips identisch (siehe Abb. 3.5): Jeder Chip ist 65 mm lang und mit 15 verschiedenen Segmenten für die DC-Spannungen, sowie einer Verjüngung (Taper), welche die Ladezone von der Experimentierzone trennt, versehen. Die DC-Segmente der Ladezone haben eine Breite von 2,4 mm, die der Experimentierzone sind 0,7 mm schmal. Um den radialen Einschluss zu realisieren, ist entlang der gesamten zum Fallenzentrum gerichteten Kante jedes Flügels eine weitere Elektrode angebracht, die im Folgenden als "Rail" bezeichnet wird. Außerdem ist in Ionenflugrichtung die letzte Elektrode (Nr. 15) axial verlängert, um beim Extraktionsprozess ein leichtes Ablenken durch gezieltes Anlegen geringer Spannungen zu ermöglichen.



Abb. 3.6: Schematische Darstellung der speziell designten Ionenfalle. (a) Perspektivische Ansicht der x-förmigen Chipanordnung. (b) Vorderansicht der Falle (Ausschnitt) mit den um die Ecke weitergeführten Rails (hellgrau) sowie den Ablenkelektroden (dunkelgrau). Die Isolierung ist hierbei schwarz dargestellt.

Die vier Fallenchips sind insgesamt in einer x-förmigen Anordung angebracht (siehe Abb. 3.6 (a)), wobei sich ein Abstand zwischen den Innenkanten von 2 mm im Experimentierbereich (Elektroden Nr. 6-13) und 4 mm im Ladebereich (Elektroden Nr. 1-4) ergibt. Bei zwei gegenüberliegenden Chips wird an die jeweilige Rail die für den Radialeinschluss benötigte RF-Spannung angelegt. Bei den beiden orthogonal dazu stehenden Flügeln wird die Rail geerdet, wodurch das o.g. Quadrupolpotential des Radialeinschlusses entsteht. Da diese Rails entlang der gesamten Fallenachse und zudem um die Ecken des Flügelendes verlaufen (siehe Abb. 3.6 (b)), wird der radiale Einschluss während des gesamten Extraktionsprozesses aufrecht erhalten und ein gezieltes Schießen ermöglicht. Die DC-Elektroden mit identischer Nummerierung werden auf allen vier Flügeln zusammengeschaltet, so dass ein harmonisches Durchgreifen der gleichmäßig verteilten Gleichspannungen möglich und somit ein sehr guter axialer Einschluss vorhanden ist. Das Herausschießen der Ionen wird dadurch realisiert, dass die Spannung an zwei Elektroden innerhalb sehr kurzer Zeit (wenige ns) auf mehrere Hundert Volt erhöht wird (siehe Kapitel 3.4). Des weiteren kann die Flugrichtung durch die Ablenkelektroden leicht beeinflusst werden. Diese Elektroden am Ende des Fallenflügels sind – im Gegensatz zu den restlichen DC-Elektroden – nicht miteinander verbunden sondern einzeln adressierbar. Da die Falle über keine zusätzlichen Kompensationselektroden verfügt, wird die Kompensation über Offset-Spannungen an den jeweiligen Rails realisiert, welche mit Hilfe einer sogenannten Bias-T-Schaltung addiert werden (siehe Kapitel 3.3.3).

3.2.2 Experimenteller Aufbau

Der gesamte Aufbau unseres Experiments ist in Abbildung 3.7 schematisch dargestellt. Das Setup befindet sich in einem klimatisierten Labor und ist auf einem luftgefederten optischen Tisch montiert. Die konstante Raumtemperatur minimiert thermische Längenänderungen; die Luftfederung des Tisches unterdrückt die Übertragung von Gebäudeschwingungen auf das Experiment.



Abb. 3.7: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus

Das Lasersystem:

Sämtliche Laser, welche für die Erzeugung und Kühlung der Kalzium-Ionen benötigt werden, sind anhand von Referenz-Cavities mittels des Pound-Drever-Hall-Verfahrens frequenzstabilisiert [69]. Zwei der fünf benötigten Laser befinden sich direkt auf unserem Tisch, die weiteren drei gelangen aus dem Nachbarlabor über optische Fasern zum Experiment. Die beiden auf dem Tisch stehenden Kühl- und Rückpumplaser der Wellenlänge 397 nm bzw. 866 nm sind einfache, gitterstabilisierte Diodenlaser, ebenso wie der zweite Rückpumplaser mit 854 nm und ein Photoionisationslaser mit 374 nm. Der zweite zur Ionisation genutzte Laser ist zudem mit Hilfe einer Frequenzverdoppelungs-Cavity versehen und liefert dadurch eine Wellenlänge von 423 nm. Die drei Kühl- und Rückpumplaser werden mit Hilfe von polarisierenden Strahlteilern (PBS vom engl. Ausdruck Polarizing Beam Splitter) überlagert, anschließend in eine photonische Faser eingekoppelt und zur Kammer geführt. Die Photoionisationslaser gelangen hingegen bereits überlagert in einer Multimode-Faser auf unseren optischen Tisch und werden direkt über mehrere Spiegel zur Kammer geleitet. Vor den PBS sind zusätzlich $\lambda/2$ -Plättchen angebracht um die Intensität zu regulieren (in Abb. 3.7 aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet). Darüber hinaus steht ein gepulster Laser mit der Wellenlänge von 355 nm zur Verfügung, mit dem weitere Atomsorten (z.B. N, Ni, P, Cr usw.) über Mehrphotonenprozesse ionisiert werden können. Eine genauere Beschreibung der Einsatzbereiche der jeweiligen Laser wird in Kapitel 3.3.1 und 3.3.2 besprochen.

Pound-Drever-Hall Frequenzstabilisierung:

Für die Stabilisierung der Laser über einen längeren Zeitraum wird in unserem Labor das Pound-Drever-Hall Verfahren eingesetzt. Hierfür wird das Laserlicht mit einer sinusförmigen Wechselspannung von einem VCO (vom engl. Ausdruck Voltage Controlled Oscillator) frequenzmoduliert. Ein kleiner Teil des Laserstrahls wird zusätzlich in einem stabilen Resonator (Referenz-Cavity) eingekoppelt, in dem sich darauffolgend frequenzabhängige Resonatormoden bilden. Das aus der Cavity reflektierte, frequenzmodulierte Laserlicht wird über eine Photodiode in ein elektrisches Signal umgewandelt und mit dem VCO-Signal über einen Phasendetektor gemischt. Dabei entsteht ein Fehlersignal, welches proportional zur Abweichung der gewünschten Laserfrequenz ist. Dieses wird einerseits an einen schnellen PID-Regelkreis zugeführt, der den Strom der Laserdiode und folglich

schnelle Störungen (wenige kHz) ausgleicht. Andererseits wird das Fehlersignal einem PID-Regler mit hohem Integralteil weitergegeben, welcher über den Piezo des Lasers langsame Drifts und Diskrepanzen korrigiert.

Akusto-optische Modulatoren:

Außerdem befinden sich akusto-optische Modulatoren (AOM) in beinahe allen Stahlengängen, um diese einzeln mit dem Labor-Computer schalten zu können. AOMs sind optische Bauelemente, in denen der Laser einen Kristall durchquert und dabei aufgrund einer Modulation der Brechungszahl – erzeugt durch einen Piezo – leicht abgelenkt werden kann. Durch Anlegen einer sinusförmigen Antriebsfrequenz von einigen MHz an den Piezo werden Schallwellen generiert, welche eine Dichtemodulation zur Folge haben, was wiederum eine Modulation der Brechzahl verursacht. Durch konstruktive Interferenz bilden sich Beugungsordnungen aus, wovon eine – zumeist die erste – mit Hilfe einer Blende herausgefiltert wird und somit der Laserstrahl mit einer Genauigkeit im ns-Bereich geschaltet werden kann. Zusätzlich wird die Frequenz des Laserlichts um die Antriebsfrequenz des AOMs erhöht, was wiederum für ein sehr genaues Einstellen der Laserfrequenz eingesetzt werden kann. Die beiden überlagerten Photoionisationslaser, die über eine Faser auf unseren Tisch gelangen, werden hingegen mit Hilfe eines einfachen, selbstgebauten Shutters geschalten [70], da hier keine exakten Schaltzeiten benötigt werden.



Abb. 3.8: Die Fallenkammer mit den verschiedenen Zugängen (siehe Text)

Die Fallenkammer:

Die Falle selbst befindet sich in einer sogenannten Magdeburger Halbkugel², die insgesamt sieben Zugänge aufweist (siehe Abb. 3.9). Die Ausgänge A, B1 und B2 werden durch

²Kimball, MCF450-MH102044/8-A

Fenster als optische Zugänge nutzbar gemacht. Die große Stirnseite A dient hierbei als Zugang zur Beobachtung der Ionen mittels einer EMCCD-Kamera³ (vom englischen Ausdruck Electron Multiplying Charge Coupled Device), sowie als Eintrittsöffnung für den gepulsten Laser. Die Kühl- und Rückpumplaser werden über B1 eingestrahlt, der Photoionisationstrahl hingegen über B2. Die Extraktion der Ionen erfolgt über den Zugang C2, der über ein Ventil mit der Detektorkammer verbunden ist. Der Zugang C1 dient der Zuleitung der Radiofrequenz, welche zunächst von einem Frequenzgenerator⁴ erzeugt wird. Bei einer Antriebsfrequenz von $\omega_{RF} = 2\pi \cdot 12,155$ MHz wird diese anhand eines helikalen $\lambda/4$ -Resonators überhöht und gelangt dadurch mit einer Peak-to-Peak-Spannung von $U_{RF,pp} \approx 400$ V an die Fallenrails. In der Öffnung D1 ist eine weitere elektrische Vakuumdurchführung montiert, mit der die DC-Segmente der Falle angesteuert werden. Das Vakuumsystem ist über die Öffnung D2 mit der Hauptkammer verbunden.



Abb. 3.9: Foto des Versuchsaufbaus inkl. der Laserwege (sichtbar gemacht durch eine Aufnahme mit Langzeitbelichtung) und einen Zoom der Fallenkammer

³Andor, iXon 885

 $^{^{4}}$ Marconi, 2019A

Das Vakuumsystem:

Zum Fangen, Kühlen und erfolgreichen Extrahieren ist ein Ultrahoch-Vakuum in der Fallen- sowie Detektorkammer notwendig. Dieses wird durch eine Turbomolekularpumpe aufrechterhalten. Damit jedoch Drücke von wenigen 10^{-9} mbar erzeugt und dauerhaft aufrecht erhalten werden können, kommen zusätzlich eine Ionengetterpumpe und eine Titan-Sublimationspumpe zum Einsatz. Zudem ist die zweite Kammer, die sogenannte Detektorkammer, mit einem Verbindungsschlauch direkt mit der Turbopumpe verbunden (siehe Abb. 3.7 halb durchsichtig angedeutet), um das darin befindliche Vakuum zu verbessern. Mit Hilfe mehrerer Ventile können die beiden Kammern komplett voneinander getrennt werden, um ein möglichst schnelles Wechseln zukünftiger Substrate in der Detektorkammer zu ermöglichen. In dieser zweiten Kammer befanden sich während der Versuchsreihen neben einem Detektor noch eine kompakte Nanometer-Verschiebeeinheit mit mehreren Aperturen, sowie die entwickelte Einzellinse (siehe nachfolgende Kapitel 4 und 5).

Die Abbildungsoptik:

Zur Beobachtung der Ionen in der Falle dient eine spezielle Abbildungsoptik, welche das Ion auf eine EMCCD-Kamera abbildet. Ein dafür speziell entworfenes Objektiv, welches das ausgesandte Licht sammelt, besteht aus fünf Linsen und ist für einen Raumwinkel von $4\pi \cdot 0,0248$, bei einer Lichtwellenlänge von 397 nm optimiert. Somit kann ein maximaler Vergrößerungsfaktor von 20 erreicht werden. Die maximale Auflösung des Objektives beträgt 0,85 µm. Der Chip der angebrachten EMCCD-Kamera besitzt eine Auflösung von 1004×1002 Pixel, deren Kantenlänge jeweils 8 µm beträgt. Die Quanteneffizienz und die rauscharme Verstärkung reichen aus, um die auf der Kamera abgebildeten Ionen einzeln am Rechnerbildschirm beobachten zu können.

Experimentsteuerung:

Die Steuerung des Experiments wird über einen Laborcomputer vorgenommen. Die Software hierfür ist in unserer Gruppe entwickelt und modular angelegt worden, so dass jederzeit zukünftige Experimente eingebunden bzw. aktuelle Versuche ausgebaut werden können. Damit lassen sich am Rechner die Ablenkspannungen sowie die Kompensationsspannungen einstellen und mit Hilfe eines Digital-Analog-Wandlers an die Falle weitergeben. Außerdem können die Laser – wie oben bereits erwähnt wurde – über die AOMs bzw. einen Shutter geschaltet werden, indem ein TTL-Signal vom Computer bzw. der eingebauten PCI-Karte (National Instruments) erzeugt wird. Ebenso wird auch der Extraktionsprozess mit Hilfe des Experimentsteuerprogramms des Computers ausgelöst (siehe Kapitel 3.4).

3.3 Betrieb der Ionenfalle

Mit der eben vorgestellten Ionenfalle ist es im Prinzip möglich, eine Vielzahl von verschiedenen ionisierten Elementen zu fangen. Einschränkungen hierfür sind lediglich eine realisierbare Umsetzung eines entsprechenden Ofens, der einen Atomstrahl des benötigten Elements emittiert. Zusätzlich muss das Lasersystem in der Lage sein, die Atome aus dem Strahl zu ionisieren und deren optische Übergänge anzutreiben. Folglich werden Laser mit geeigneten Wellenlängen benötigt, um das Ionisieren, das Kühlen und das Beobachten der einzelnen Teilchen zu ermöglichen. Ist dies für eine Spezies von Ionen gewährleistet, so können diese als Kühl-Ionen für weitere Elemente dienen (sympathetisches Kühlen). In unserem Experiment wurden hierfür Kalzium-Teilchen ⁴⁰Ca herangezogen, da sich diese bei Quanteninformationsexperimenten in Ionenfallen bereits bewährt haben [63, 71, 72].

3.3.1 Erzeugung von einzelnen lonen

Zunächst ist es notwendig, einen neutralen Atomstrahl zu realisieren, aus dem Ionen erzeugt werden können. In unserem Aufbau geschieht dies durch einen speziellen Ofen, bestehend aus einem einseitig offenen Edelstahlrohr und einer darumliegenden Drahtwicklung mit alternierender Wicklungsrichtung, um die Erzeugung von störenden Magnetfeldern zu vermeiden. Das Rohr ist mit metallischem Kalziumgranulat⁵ gefüllt, welches eine Körnchengröße von bis zu 1,2 mm und eine Reinheit von über 95 % aufweist. Mit Hilfe eines elektrischen Stromes von ca. 0,4 A, der die Drahtwindungen durchfließt, wird das Ofenrohr mit einer Heizleistung von ungefähr 3 Watt erhitzt. Am offenen Ende des Rohres entsteht dabei ein gerichteter Atomstrahl, der auf eine Region der Falle ausgerichtet ist, in der gefangen werden soll. Dieser Atomstrahl kann anschließend ionisiert werden.

In unserer Gruppe wird die Ionisation der Teilchen durch einen mehrstufigen Photoionisationsprozess realisiert. Mittels des als REMPI (vom engl. Ausdruck Resonant Enhanced Multi-Photon Ionization) bezeichneten Verfahrens werden gebundene Elektronen in meh-

 $^{^5 \}mathrm{Alfa}$ Aesar, Calcium granules, redistilled, -16 mesh, 99,5 %

reren resonanten Schritten zunächst in höhere Niveaus und von dort in das Kontinuum angeregt. Durch Verwendung resonanter Übergänge bzw. der darauf abgestimmten Laser, ist das Verfahren sehr effizient, äußerst selektiv und wenn nötig sogar auf einzelne Isotope beschränkbar. Die Erzeugung von mehrfach geladenen Ionen bzw. Fremdionen kann somit vermieden werden.



Abb. 3.10: (a) Termschema zur Ionisation von ⁴⁰Ca. (b) Möglichkeiten zur Mehrphotonenionisation von ⁵²Cr. [67]

Bei dem von uns verwendeten ⁴⁰Ca sind zwei unterschiedliche Zweiphotonen-Ionisationsprozesse möglich (siehe Abb. 3.10 (a)), sogenannte 1+1-REMPI. Eine mögliche Variante stellt die Einstrahlung eines Lasers der Wellenlänge 272 nm dar. Er regt zunächst das Elektron vom Grundzustand $4^{1}S_{0}$ in den Zustand $5^{1}P_{0}$ an, wovon es nach einer spontanen Emission in den Zustand $3^{1}D_{2}$ zerfällt und von dort mit dem selben Laser in das Kontinuum gebracht wird [73]. Zwar wird hierfür nur ein Laser benötigt, jedoch ist dieser aufgrund seiner Wellenlänge teuer und schwer zu handhaben. Bei unserem Experiment wird deshalb auf die zweite mögliche Ionisation von Kalzium zurückgegriffen (siehe Abb. 3.10 (a) blau). Ein erster Laser der Wellenlänge 423 nm hebt das Elektron aus dem Grundzustand in den Zustand $4^{1}P_{1}$ an, wovon es anschließend eine Anregung in das Kontinuum mittels eines zweiten Lasers der Wellenlänge 374 nm erfährt. Ähnliche Ionisationsprozesse sind für andere chemische Elemente ebenso denkbar (siehe Abb. 3.10 (b) für Chrom z.B. zur Farbzentrenerzeugung in Rubin). Die in unserem Aufbau erzeugten, einfach ionisierten ⁴⁰Ca-Atome lassen sich nun in dem oben beschriebenen Potential der Falle fangen und mit Hilfe von Laserkühlmethoden in einem Kristall anordnen und beobachten. Mögliche andere erzeugte Ionen werden von den ⁴⁰Ca⁺ Teilchen mitgekühlt und können somit ebenso von der Falle gefangen werden.

Bevor die Kühlmechanismen genauer beschrieben werden, ist der bereits oben erwähnte gepulste Laser unserer Versuchsanordnung zu nennen. Es handelt sich hierbei um eine Frequenzverdreifachten Nd-YAG-Laser mit einer Pulsenergie von 7mJ und einer Pulsdauer von ca. 4 ns. Aufgrund dieser hohen Intensität der Laserpulse kann er ebenso zur Ionisation von Atomen verwendet werden. Für ein breites Spektrum an verschiedenen Atomsorten ist eine Ionisation anhand von Mehrphotonenprozessen möglich, selbst wenn die Wellenlänge nicht zu den entsprechenden elektronischen Übergängen passt. Die Elektronen nehmen – ähnlich dem Photoeffekt – die Energie eines bzw. mehrerer Photonen auf und gelangen so direkt in das Kontinuum. Hierbei muss jedoch die Bindungsenergie der Elektronen kleiner sein als die von den Photonen zugeführte, so dass eine kinetische Energie zum Verlassen des Atompotentials übrig bleibt:

$$E_{kin} = h\nu - W_B$$
 (Einstein-Gleichung) (3.10)

Ein Nachteil der Mehrphotonenionisation ist jedoch, dass das Verfahren nicht elementselektiv arbeitet. Dies bedeutet, dass möglicherweise ungewollte Atome des Hintergrundgases mitionisiert werden. Für die Extraktion bzw. Implantation unterschiedlicher Elemente ist ein gepulster Laser dieser Leistung ein probates Mittel, um auf die speziell an die Atomsorte angepassten und folglich aufwendigen Lasersysteme zu verzichten. In der Fallenkammer befindet sich – für erste Tests zusätzlich geladener Ionensorten – ein zweiter Ofen aus einem Nickel-Chrom-Heizdraht, welcher durch einfaches Glühen einen Atomstrahl zur Ionisation bereitstellt.

3.3.2 Beobachtung der Ionen und laserbasierte Kühlverfahren

In Abbildung 3.11 sind die Energieniveaus des nach der Ionisation entstanden, einfach geladenen ⁴⁰Ca⁺-Ions aufgetragen. Besonders interessant ist hierbei der Dipolübergang zwischen dem 4²S_{1/2}-Niveau und dem 4²P_{1/2}-Niveau, da er nur eine Lebensdauer von $\tau = 7,4$ ns aufweist. Dies bedeutet, dass durch Anregen des Übergangs mit Hilfe des entsprechenden Lasers eine sehr hohe Streurate von idealerweise mehreren 10⁷ Photonen pro Sekunde erzielt werden kann (natürliche Linienbreite $\Gamma = \frac{1}{2\pi\tau} \approx 22$ MHz). Die dabei, durch den Rückfall der Ionen in den Grundzustand 4²S_{1/2}, ausgesandte Fluoreszenz



Abb. 3.11: Übergänge im ⁴⁰Ca⁺ und Lebensdauer der Zustände [67]. Die farbig eingezeichneten Übergänge sind die für die Beobachtung und Dopplerkühlung relevanten Übergänge.

wird mit Hilfe der oben beschriebenen Abbildungsoptik und der EMCCD-Kamera gesammelt, um das Ion zu beobachten. Außerdem dient der Übergang der Dopplerkühlung des Ions. Aus dem Termschema in Abb. 3.11 wird weiterhin ersichtlich, dass ein in das $4^2P_{1/2}$ -Niveau angeregtes Ion nicht nur zurück in den Grundzustand, sondern auch mit einer statistischen Übergangswahrscheinlichkeit in den metastabilen Zustand $3^2D_{3/2}$ fallen kann. Dieser weist eine sehr hohe Lebensdauer von 1,18 s auf. Da das Ion in dieser Zeit aber keinen Fluoreszenzübergang vollzieht, kann es weder beobachtet noch gekühlt werden. Um dies zu verhindern, wird das ⁴⁰Ca⁺ mit Hilfe des infraroten Rückpumplasers der Wellenlänge 866 nm in das $4^2P_{1/2}$ -Niveau zurück befördert und steht anschließend dem Kühl- und Beobachtungszyklus wieder zur Verfügung. Ein weiterer, sogenannter dunkler Zustand ist das $3^2D_{5/2}$ -Niveau mit einer ähnlich langen Lebensdauer von 1,17 s. Durch Stöße des Ions mit Restgasatomen kann es von Zeit zu Zeit in dieses Niveau gelangen, von welchem es wiederum mit einem weiteren Rückpumplaser mit 854 nm Wellenlänge in den Kühlzyklus zurückgeführt wird.

Die Dopplerkühlung:

Nachdem die Ionen aus Atomen erzeugt werden, die selbst wiederum aus einer thermischen Quelle stammen, sind diese im Moment vor dem Einfangen sehr schnell. Damit die Teilchen aber dauerhaft in der Falle gefangen bleiben, müssen sie stark abgebremst und somit auf wenige mK oder μ K gekühlt werden.

Der erste Schritt hierfür ist das bereits angedeutete Dopplerkühlen. Dies geschieht über den 397 nm-Übergang zwischen dem S_{1/2}- und P_{1/2}-Niveau und nützt die verbreiterte Absorptionslinie bewegter Ionen. Diese Verbreiterung um die Resonanzfrequenz ω_0 rührt von der Bewegung der Ionen im Fallenpotential her und kann als ein einfacher Dopplereffekt gedeutet werden. Wird nun ein ins Rote verstimmter Laser ($\omega_L < \omega_0$) eingestrahlt, so haben die Photonen der spontanen Emission eine durchschnittlich höhere Energie als die zuvor absorbierten Photonen (E_0 =



Abb. 3.12: Energieprofile bei der Dopplerkühlung [74].

 $\hbar\omega_0 > E_L = \hbar\omega_L$). Dem Ion wird also während des Absorptions-Emissions-Zykluses effektiv Energie entzogen. Es handelt sich also – wie oben bereits vorweg genommen – um einen Kühlzyklus. Dieser Kühlvorgang wird anhand Abb. 3.12 anschaulich verdeutlicht: Ionen absorbieren Photonen aus dem rotverstimmten Laserlicht (in Abb. 3.12 dunkelblau) und emittieren es jedoch in das gesamte Dopplerprofil (hellblau).

Die Einstrahlrichtung des Lasers sollte so gewählt werden, dass sie weder zur axialen, noch zur radialen Fallenrichtung parallel verläuft. Hiermit wird ein gleichzeitiges Kühlen sämtlicher Schwingungrichtungen ermöglicht. Ein geringer Teil des Dopplerprofils, der weiter im Roten liegt (siehe Abb. 3.12), verhindert jedoch ein Kühlen bis in den Grundzustand. Ein Gleichgewicht zwischen diesem noch vorhandenen Heizen und dem Laserkühlen bildet sich somit heraus. Diese minimal erreichbare Temperatur wird als Dopplerlimit T_{min} bezeichnet [74]:

$$T_{min} = (1+\xi)\frac{\hbar\Gamma\sqrt{1+s}}{4k_B}\cos^2\Theta$$
(3.11)

 Γ steht hier erneut für die Linienbreite des optischen Übergangs, *s* für den Sättigungsparameter, welcher angibt, wie stark der atomare Übergang durch das Laserlichtfeld angeregt wird, und ξ für einen Geometriefaktor⁶. Außerdem gibt Θ den Winkel zwischen der Einstrahlrichtung des Lasers und der betrachteten Achse wieder. Mit Hilfe der Dopplerkühlung ist es somit möglich, in den Bereich weniger mK zu kühlen. Es ist jedoch zu beachten, dass

⁶Aufgrund der Dipolstrahlung gilt hier der Wert $\xi = 2/5$ [67].

das Limit T_{min} im Experiment nie gänzlich erreicht werden kann, da bei der theoretischen Betrachtung von einem reinen Zwei-Niveau-System ausgegangen wird. Ebenso bleiben weitere Heizeffekte in der Falle – beispielsweise Zeeman-Unterzustände oder Sättigungseffekte – unberücksichtigt. In Abbildung 3.13 (a)-(g) sind einige Bilder von gefangenen, doppler-



Abb. 3.13: Fotogalerie von verschiedenen ⁴⁰Ca⁺-Anordnungen in der Falle (siehe Text).

gekühlten ⁴⁰Ca⁺-Ionen in der Falle dargestellt, so wie diese auf dem Laborbildschirm zu sehen sind. In Bild (a) ist eine heiße Ionenwolke zu sehen, welche durch mehrere gefangene, heftig schwingende Ionen erzeugt wird. Wird diese Wolke jedoch mit der geeigneten rotverstimmten Laserquelle gekühlt, so kommt es zu einem Phasenübergang und die Ionen kristallisieren. Aufgrund der abstoßenden Coulombwechselwirkung arrangieren sich die Ionen in einem linearen Kristall von wenigen Ionen, z.B. drei Stück in Foto (c). Bei einem niedrigen Ofenstrom ist es aber auch möglich, einzelne ⁴⁰Ca⁺-Ionen zu fangen, zu kühlen und deutlich zu erkennen (b). Die bei einem Kristall entstehende Gitterkonstante hängt von der Steifigkeit des äußeren Potentials ab, das den repulsiven Coulombkräften entgegenwirkt. In unserer Versuchsanordnung beträgt der Abstand zwischen den Ionen ca. 10 μ m. In Foto (d) sind drei gefangene Ionen zu sehen, welche aufgrund schlechter Kompensation der Mikrobewegung (siehe dazu nachfolgendes Kapitel 3.3.3) leicht aufgeschwungen sind. In dem aus insgesamt zehn ⁴⁰Ca⁺-Ionen bestehendem Kristall in Bild (e) ist nach dem vierten Ion von rechts eine größere Lücke zu erkennen. Dies ist ein klares Indiz für ein dunkles Ion, welches durch die restlichen ⁴⁰Ca⁺-Ionen sympathetisch mitgekühlt wird und vermutlich ein durch Reaktion mit dem Hintergrundgas der Kammer entstandenes CaO⁺-Teilchen ist. Die Funktionsweise des sympathetischen Kühlens und der exakten Identifizierung von dunklen Ionen wird im späteren Kapitel 3.3.4 beschrieben. Ist das axiale Fallenpotential relativ flach eingestellt, d.h. die DC-Elektroden erzeugen den axialen Einschluss nur mit einer Spannung von ca. 15 V, so können lineare Kristalle von bis 15 Ionen erzeugt werden (f). Wird hingegen durch Erhöhung der Gleichspannung das Potential steifer gemacht, ergeben sich zwei- oder sogar dreidimensionale Strukturen, da dadurch der radiale Einschluss relativ zum axialen geschwächt wird. In der Bildschirmaufnahme (g) wurde auf diese Weise eine zick-zack-förmige Anordnung des Kristalls erzeugt.

Seitenbandkühlung:

Um unter das oben beschriebene Dopplerlimit zu gelangen bzw. die Ionen bis in den Grundzustand zu kühlen, stehen verschiedene Methoden zur Verfügung. Zunächst wäre hier das Seitenbandkühlen zu nennen, welches in unserer Gruppe bereits erfolgreich angewendet wird [72]. Die Bewegungsenergie des Ions in der Falle kann näherungsweise durch einen



Abb. 3.14: Schema der Seitenbandkühlung. Durch die Kombination von atomaren Niveaus $|g\rangle$ bzw. $|a\rangle$ und harmonischen Fallenniveaus entsteht eine Art Leiterstruktur, die für Erzeugung (Heizen) bzw. Vernichtung (Kühlen) eines Phonons verwendet werden können [75].

quantenmechanischen harmonischen Oszillator beschrieben werden. Es ergeben sich somit, in diskreten phononischen Fockzuständen $|n\rangle$, die Energieniveaus $E_n = \hbar \omega_z (n+1/2)$. Diese koppeln an die atomaren Anregungsniveaus und ergeben insgesamt eine Art Leiterstruktur (siehe Abb. 3.14). Durch optisches Anregen ist es möglich, die Fock-Zustände, also die Energie der Ionen, stufenweise zu ändern bzw. zu verringern. Übergänge, bei denen sich die Schwingungsenergie der Ionen nicht ändert, werden als Träger bezeichnet. Hingegen werden Übergänge, bei denen sich die Fockzahl ändert, als Seitenbänder bezeichnet. Bei



Abb. 3.15: Spektrale Betrachtung der Seitenbandkühlung im Bezugssystem des Ions [67].

sogenannten roten Seitenbändern (RSB) wird die Energie des Ions um ein Schwingungsquant verringert, da hier für die Anregung des Ions die alleinige Energie des Lasers nicht ausreicht. Bei blauen Seitenbändern (BSB) wird hingegen ein zusätzliches Schwingungsquant durch die Anregung des Lasers frei, da dessen Energie größer als die des Übergangs ist. Folglich erhöht sich die Energie des Ions. Somit kann mit Hilfe eines rot verstimmten Lasers, der den Phonon-Vernichtungsprozess bevorzugt, das Ion bei jedem Durchlauf des Zyklus um eine Stufe der Lei-

terstruktur – also einer Fockzahl n bzw. eines Phonons – gekühlt werden.

In Abb. 3.15 wird die Funktionsweise des Kühlprozesses nochmals anschaulich deutlich gemacht. Das Anregungsprofil des Lasers ist exakt um ω_z in das Rote verschoben, so dass das RSB als einziger Anregungspeak vollständig vom Absorptionsprofil der Linienbreite Γ des optischen Übergangs überlagert wird und somit eine wesentlich höhere Wahrscheinlichkeit der Phononvernichtung gegeben ist. Dennoch bleibt eine gewisse Restwahrscheinlichkeit, dass der Übergang auf dem BSB bzw. dem Träger getrieben wird und folglich eine minimal erzielbare mittlere Phononzahl

$$\langle n \rangle_{SBK} \approx \left(\frac{\Gamma}{2\omega_z}\right)^2 > 0$$
 (3.12)

erreicht werden kann. Die Seitenbandkühlung funktioniert zudem nur, wenn die Phononzahl des Ions bereits mittels Dopplerkühlung stark verringert wurde. Dadurch wird das Lamb-Dicke-Regime

$$\eta^2(2n+1) \ll 1$$
 mit $\eta = k\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_z}}\cos\Theta$ (3.13)

erreicht, in welchem das Ion nur selten vom angeregten Zustand $|a\rangle$ unter Emittieren eines Photons in das höhere Schwingungsniveau auf $|g\rangle$ zurückfällt. η wird hierbei als Lamb-Dicke-Parameter bezeichnet, in den die Laserfrequenz ω_z , der Wellenvektor k, der Einfallswinkel Θ und die Masse m eingeht. Er gibt das Verhältnis zwischen der Ausdehnung der Grundzustandswellenfunktion und der Laserwellenlänge an. Insgesamt lässt sich mit diesem Verfahren bis nahe an den Grundzustand kühlen. Diese Methode ist jedoch zum Kühlen von Kristallen mit mehreren Ionen oder mit zusätzlichen Fremdionen nur bedingt zu gebrauchen, da immer nur eine Schwingungsmode gekühlt werden kann. Für diese Zwecke eignet sich das nachfolgend beschriebene EIT-Kühlen wesentlich besser.



Abb. 3.16: Drei-Niveau-System in Lambda-Konfiguration. Mittels des Raman-Niveaus (gestrichelt) wird eine Bevölkerung des angeregten Niveaus |a⟩ verhindert. Die Indizes "g" bzw. "r" beim Detuning Δ und bei der Rabi-Frequenz Ω stehen für den Kühl- bzw. Kopplungslaser [67].

EIT-Kühlung:

Dieses Verfahren nutzt im Gegensatz zum Seitenbandkühlen einen Effekt eines Drei-Niveau-Systems in Lambda-Konfiguration – die Dunkelresonanz bzw. elektromagnetisch

induzierte Transparenz (EIT). Beispielsweise können für Kalzium die drei Niveaus durch $S_{1/2}$, $P_{1/2}$ und $D_{3/2}$ dargestellt werden. Zusätzlich wird ein weiterer Laser benötigt, der sogenannte Kopplungslaser, welcher das dritte Niveau $|r\rangle$ mit dem angeregten Niveau $|a\rangle$ koppelt. Wie in Abb. 3.16 zu sehen ist, werden beide Laser so verstimmt, dass sie über ein sogenanntes virtuelles Raman-Niveau miteinander gekoppelt sind. Mit dieser Detuning-Bedingung $\Delta_g = \Delta_r$ wird eine Bevölkerung des Zustands $|a\rangle$ verhindert. Somit fallen die Fluoreszenzübergänge weg und das Ion wird dunkel. Die Zustände, die durch die Kopplung des weiteren Lasers mit dem Atom entstehen, werden durch soge-



Abb. 3.17: Absorptionsprofil der EIT-Kühlung [67].

nannte "dressed states" beschrieben. Der Laser verursacht einen AC Stark-Shift, der das

Absorptionsprofil des Kühllasers um den Betrag

$$\delta = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta_r^2 + \Omega_r^2} - |\Delta_r| \right) \tag{3.14}$$

weiter aus der Resonanz verschiebt [76]. Werden die Laserparameter so eingestellt, dass $\delta \simeq \omega_z$ gegeben ist, ergibt sich das in Abb. 3.17 gezeigte Absorptionsprofil. Hier wird deutlich, dass der Trägerübergang vollständig und das blaue Seitenband beinahe gänzlich ausgeblendet wird. Das rote Seitenband hingegen liegt erneut vollständig unterhalb des Absorptionsprofils. Höhere rote Seitenbänder und somit weitere Schwingungsmoden werden ebenso vom Profil überdeckt, was das Vefahren bzw. die damit erzielte Kühlung äußerst effektiv macht.

Beim EIT-Kühlen können dadurch Phonenzahlen unter denen der Seitenbandkühlung erreicht werden:

$$\langle n \rangle_{EIT} = \frac{\langle n \rangle_{SBK}}{1 + \frac{4\xi}{\cos^2 \Theta}}, \qquad \langle n \rangle_{EIT,min} = \frac{\Gamma^2}{(4\Delta_r)^2}$$
(3.15)

Für ξ kann wiederum der Wert 2/5 für Dipolstrahlung verwendet werden und Θ stellt erneut den Winkel zwischen Laser und Fallenachse dar. Der minimale Wert der Phononenzahl $\langle n \rangle_{EIT,min}$ gilt exakt dann, wenn $\delta = \omega_z$ erfüllt ist. Der gesamte Ionenkristall bzw. mehrere Moden können folglich gleichzeitig in den Schwingungsgrundzustand gekühlt werden [77]. Die vorbereitenden Messungen hierfür wurden an einer weiteren Falle gleichen Bautyps in einer anderen Vakuumkammer auf dem optischen Tisch bereits durchgeführt, womit das Verfahren in naher Zukunft zur Verfügung stehen wird [78]. Generell wichtig bei der Umsetzung solcher Kühlverfahren ist eine gute Kompensation der Mikrobewegung der Ionen, welche nachfolgend erläutert wird.

3.3.3 Kompensation der Mikrobewegung

Eine Kompensation ist außer für das Kühlen, ebenso für eine erfolgreiche Extraktion der Ionen entscheidend. Nur gut kompensierte, ruhige Ionen haben eine genau definierte Extraktionsposition und erzeugen folglich einen Ionenstrahl mit einer geringen Geschwindigkeitsfluktuation und räumlichen Divergenz. Die durch die eingestrahlte Radiofrequenz erzeugte Mikrobewegung der Ionen ist hierbei proportional zur Auslenkung aus dem Minimum des Pseudopotentials. Durch leichte Asymmetrien in der Anordnung der Falle bzw. durch Ladungen auf den dielektrischen Oberflächen befinden sich die Ionen im Experiment eigentlich nie gänzlich in diesem Potentialknoten. Bereits leichte Auslenkungen rufen somit starke Reaktionen der Ionen auf das Wechselfeld in Form von induzierten Schwingungen hervor (siehe Abb. 3.13 (d)). Die Ionen sollten demnach möglichst nahe an bzw. in das Minimum bewegt werden.



Abb. 3.18: Bias-T-Schaltung zum Anlegen einer statischen Offsetspannung an die RF-Rails.

Diese Position der Ionen im Fallenpotential kann durch zusätzliche statische, elektrische Felder geändert und somit in das RF-Minimum verschoben werden. Nachdem in unserer Kammer aber keine speziellen Kompensationselektroden verbaut sind, wird das Ion durch Anlegen von Offset-Spannungen an den Rails radial verschoben. An einem der zwei sich gegenüberliegenden Rail-Paaren ist dies durch Anlegen einer DC-Spannung einfach zu realisieren. Die Rails, welche im unkompensierten Zustand geerdet sind, ermöglichen somit die Verschiebung des Ions in einer radialen Richtung. Für die zweite radiale Raumrichtung müssen die RF-Rails herangezogen werden, welche mit Hilfe einer Bias-T-Schaltung einen Offset erhalten (siehe Abb. 3.18).

Die Kompensation kann in mehrere Schritte und Methoden untergliedert werden. Als erster Kompensationsschritt werden die gefangen Ionen so verschoben, dass ein Kristall einzelner, deutlich getrennter Ionen entsteht (vgl. z.B. unkompensierte Ionen in Galeriefoto 3.13 (d) und kompensierte in 3.13 (c)). Danach kann mit Hilfe einer Vergrößerung der RF-Spannungsamplitude herausgefunden werden, wo sich das Pseudopotentialminimum ungefähr befindet. Durch die Erhöhung wird das Potential steifer, d.h. die Ionen bewegen sich aus einer möglichen Auslenkung in Richtung Minimum. Die Einstellung ist optimal, sobald sich die Ionen beim Erhöhen bzw. Erniedrigen der RF-Amplitude nicht mehr bewegen. Dies kann jedoch nur als Startpunkt der Kompensation dienen.

Für eine exaktere Kompensation empfiehlt es sich, die Verbreiterung der Spektrallinie des $S_{1/2} \leftrightarrow P_{1/2}$ -Übergangs zu verringern. Hierbei wird der Übergang zunächst entsättigt und der Laser bei 397 nm so verstimmt, dass die Hälfte der maximalen Resonanzfluoreszenz vorliegt. Durch geschickte Kompensation können nun die Mikrobewegungsseitenbänder verringert, d.h. die Breite der Resonanzlinie verringert werden, was sich in der Photonenstreurate ebenfalls durch deren Abnehmen bemerkbar macht. Der Laser wird erneut auf die Hälfte der maximalen Fluoreszenz verstimmt und der Vorgang beginnt von vorn. Dies wird so lange wiederholt, bis durch weiteres Kompensieren keine Verbesserung mehr erzielt werden kann.

Zuletzt wird eine weitere Methode kurz vorgestellt, die auf der Dopplerverschiebung des $S_{1/2} \leftrightarrow P_{1/2}$ -Übergangs beruht – die Kompensation durch Korrelationsmessung [79]. Hierbei wird ausgenutzt, dass Ionen, welche eine Mikrobewegung aufweisen, bevorzugt Photonen einer bestimmten Phase ihrer Schwingungsbewegung streuen. Diese hängt wiederum von der Verstimmung des Kühllasers ab. Da die Lebensdauer des angeregten Niveaus $S_{1/2}$ nur ungefähr ein Zehntel der RF-Periodendauer beträgt, ist die Streurate der Ionen geschwindigkeitsabhängig und folglich ebenso abhängig von der Phase der Radiofrequenz. Diese Abhängigkeit lässt sich anhand einer Korrelationsmessung zwischen Ankunftszeit der emittierten Ionen und des Nulldurchgangs der RF-Spannung sichtbar. Eine optimale Kompensation ergibt bei einer solchen Messung folgerichtig keinerlei Korrelation zwischen der RF-Phase und der Photonen-Zählrate.

3.3.4 Kühlung und Identifikation dunkler Ionen

In der Bildergalerie der Abbildung 3.13 ist in Foto (e) eine deutliche Leerstelle im Ionenkristall zu erkennen, welche ein klares Indiz für ein dunkles, mitgekühltes Ion ist. Auf ähnliche Weise kann das Vorhandensein mehrerer dunkler Ionen erkannt werden, da die sichtbaren Kühlionen in ihrer Position versetzt sind. Mindestens eines dieser sichtbaren Ionen – in unserem Fall ⁴⁰Ca⁺-Ionen – ist für den Betrieb immer nötig, da ausschließlich diese durch die Laser direkt gekühlt werden können. Die Kühlung der dunklen Ionen hingegen geschieht indirekt über das bereits mehrfach erwähnte sympathetische Kühlen. Hierbei wird die Coulomb-Wechselwirkung von geladenen Teilchen ausgenützt, welche die Kühlung auf das dem Laserlicht unzugängliche Ion überträgt [80].

Um heraus zu finden, welche dunkle Ionen sich in der Kette befinden, können diese durch sogenanntes "Wiegen" identifiziert werden. Dies ist gerade bei einer Ionenfalle als universelle Ionenquelle wichtig, da die verschiedensten Arten von Ionen gefangen, identifiziert und anschließend implantiert werden sollen. Zur Identifikation der gefangenen Teilchen ist es notwendig, die radialen und axialen Fallenfrequenzen (ω_r bzw. ω_z) genau zu kennen. Zwar können diese im Vornherein mit Hilfe numerischer Simulationen grob bestimmt werden, deren exakte Determinierung ist jedoch erst im Experiment möglich. Hierfür wird ein einzelnes Ion, dessen Masse m bekannt ist, gefangen und an eine Elektrode außerhalb des Fallenzentrums eine Wechselspannung angelegt. Wird die Frequenz der angelegten Wechselspannung variiert, so beginnt das Ion exakt bei der axialen Fallenfrequenz zu schwingen. Durch Anlegen eines Wechselfeldes an die Elektroden in der axialen Potentialmitte, lässt sich auf die selbe Weise die radiale Fallenfrequenz bestimmen. Sind die Frequenzen bestimmt, lassen sich auf ähnlichem Weg auch die Massen der dunklen Ionen herausfinden.

Für Kristalle aus mehreren Ionen gibt es neben der Grundschwingungsmode – COM-Mode (vom englischen Ausdruck Center Of Mass Mode) – noch weitere Schwingungsanregungen, die z.B. als "breathing mode" oder "rocking mode" bezeichnet werden. Diese spielen jedoch eine untergeordnete Rolle. Die COM-Mode eines Ionenkristalls aus zwei einzelnen Teilchen mit unterschiedlichen Massen hat die Schwingungsfrequenz

$$\omega_{\pm}^2 = \left[\left(1 + \frac{m}{m_x} \right) \pm \sqrt{1 - \frac{m}{m_x} + \left(\frac{m}{m_x}\right)^2} \right] \omega_z, \qquad (3.16)$$

wobei m die bekannte Masse und m_x die unbekannte Masse darstellt. Die Genauigkeiten der Messmethode liegen bei etwa 1 % und ist durch die Dämpfung der Ionenbewegung den zur Dopplerkühlung eingesetzten Laser beschränkt [74]. Weitere Formeln existieren ebenso für größere Ionenkristalle, bei welchen jedoch zusätzlich die Gleichgewichtsposition bestimmt werden muss [81]. Somit können auch die dem Laserlicht unzugänglichen Ionen identifiziert werden, was wiederum die von uns entwickelte Quelle universell einsetzbar macht. Die einzelnen Ionen, welche für die Implantation benötigt werden, können anschließend entweder in der Falle oder nach der Extraktion – aufgrund unterschiedlicher Flugzeiten – separiert bzw. gefiltert werden.

3.4 Extraktion der lonen

Bevor jedoch die Implantation von Ionen in Substrate vollzogen werden kann, gilt es diese gezielt aus der Falle zu extrahieren. Welcher Mechanismus angewandt bzw. wie dieser experimentell umgesetzt wurde, wird nachfolgend genauer beleuchtet.

3.4.1 Extraktionsmechanismus

Die Extraktion der Ionen kann über verschiedene Wege vollzogen werden. Beispielsweise ist es mit unserer Falle möglich, das gesamte axiale Potential auf einen mehrere Hundert Volt großen Offset zu legen und anschließend eine der beiden äußeren Elektroden auf Masse zu schalten. Das Ion rollt sozusagen im Moment der Erdung das Potential hinunter und erhält somit die Offsetspannung als kinetische Energie. Das dauerhafte Anlegen einer solch hohen Spannung führt jedoch verstärkt zu unvorhersagbaren Aufladungseffekten der Falle. Folglich muss häufig nachkompensiert werden, um das Ion im Potentialminimum halten zu können.



Abb. 3.19: Schematische Darstellung der Fangeigenschaften. (a) Experimentell verwendete Spannungsbelegung der Elektroden. (b) Simulierter Potentialtopf im Fallenzentrum, wobei in axialer Richtung die Position unterhalb der Elektrode 10 als Ursprung dient.

Aufgrund dieser negativen Einflüsse wird in unserem Experiment ein anderer Mechanismus angewendet. Das Ion wird zunächst mit einer Spannung von 35 V an Elektrode 7 und 13 gefangen (siehe Abb. 3.19 (a)). Das Potential im Fallenzentrum, welches das Ion erfährt, beträgt jedoch aufgrund des Abstandes des Teilchens zur spannungstragenden Elektrode nur wenige Volt (siehe Abb. 3.19 (b)) und stellt somit keine große Barriere während der Extraktion dar.

Zum Beschleunigen der Ionen werden die beiden Elektroden 9 und 10 innerhalb weniger



Abb. 3.20: Schematische Darstellung des verwendeten Extraktionsmechanis. (a) Experimentell verwendete Spannungsbelegung für die Extraktion. Durch schnelles Hochschalten (wenige ns) der Spannungen an Elektrode 9 und 10 überwinden die Ionen das Einschlusspotential und werden aus der Falle geschossen. (b) Simuliertes Potential im Fallenzentrum während der Extraktion. Die Mitte der Elektrode 10 ist wiederum der Ursprung der axialen Richtung.

Nanosekunden auf eine Hochspannung – von uns wurden 500 V gewählt – geschalten (siehe Abb. 3.20 (a)). Das dabei entstehende Potential ist asymmetrisch um die Fangposition verteilt und führt somit zum Schuss des Ions aus der Falle (siehe Abb. 3.20 (b)). Nachdem jedoch das Ion bereits unmittelbar nach Anlegen der Spannung – wenn sich das Potential noch nicht vollständig ausgebildet hat – eine Beschleunigungswirkung verspürt, erfährt es nicht die gesamte Energie des Extraktionsfeldes. Außerdem wird das Ion aufgrund der asymmetrischen Spannungsbelegung nur von der Potentialflanke beschleunigt, was wiederum die erzielte kinetische Energie der Ionen nach der Extraktion verringert. Insgesamt ist dieser Mechanismus allerdings dem eingangs erwähnten vorzuziehen, da die Fallenelektroden nur kurzzeitig mit der hohen Spannung belastet werden und somit Aufladung auf den Fallenflügel möglichst klein gehalten werden können.

3.4.2 Experimentelle Umsetzung

Für die Implementierung des Mechanismus in den experimentellen Aufbau ist es wichtig, den Extraktionszeitpunkt exakt festzulegen und die hohe Spannung möglichst schnell an die Elektroden zu schalten. In Abb. 3.21 ist der Aufbau zur Extraktion und Detektion der

Ionen schematisch dargestellt.



Abb. 3.21: Schematische Zeichnung des Extraktions- und Detektionsaufbaus (siehe Text).

Um bei jeder Extraktion die exakt selben Bedingungen in der Falle vorzugeben und somit ein reproduzierbares Extrahieren zu gewährleisten, ist ein Phasen-Delaytrigger im Versuchsaufbau integriert. Dieser verzögert den am Labor-Rechner ausgelösten Extraktionsmoment um eine exakt definierte Zeit nach dem Nulldurchgang der Radiofrequenz (siehe Abb. 3.22). Hierfür wird das vom Rechner kommende TTL-Signal über einen Digital-Analog-Wandler (DA-Wandler) in den Phasen-Delaytrigger eingespeist und so lange zurückgehalten, bis eine gewisse Zeitspanne nach dem Nulldurchgang der RF-Spannung vergangen ist. Erst danach wird das Signal an das mit dem Detektor verbundene Oszilloskop⁷, sowie die Hochspannugsschalter⁸ (HV-Schalter) weitergegeben. Der entwickelte Delaytrigger wurde während dieser Diplomarbeit mit Hilfe neuer Elektronik verbessert (Schaltplan im Anhang A) und weist nun eine experimentell gemessene Standardabweichung der

⁷Agilent, infiniium 54832 D MSO

⁸Behlke inc., HTS 41-06-GSM

Verzögerungszeit von lediglich 0,34 ns auf. Die Hochspannung wird von einem Netzteil⁹ bereitgestellt, welcher über einen CAN-Bus-Controller ebenso vom Computer aus gesteuert werden kann. Die Hochspannungsschalter geben die

von uns gewählten 500 V innerhalb weniger ns (prinzipiell sind bis zu 4 kV innerhalb 20 ns spezifiziert) an die Elektroden weiter. Mit demselben Triggersignal startet das Oszilloskop seine Aufnahme des Detektorsignals und eine erfolgreiche Detektion kann aufgezeichnet werden. Das Signal, das der Detektor (für eine genauere Beschreibung siehe nachfolgendes Kapitel 4.2.1) in einem Abstand von 30 cm von der Falle erzeugt, weist aufgrund der endlichen Ge-



Abb. 3.22: Oszilloskop-Bild des zur RF verzögerten TTL-Signals.

schwindigkeit der Ionen und der daraus resultierenden Flugzeit eine Zeitverzögerung auf. Mit Hilfe der daraus erzielbaren Flugzeitspektren, sowie einer Vermessung der Strahldivergenz, kann diese neuartige Ionenquelle nachfolgend charakterisiert werden.

 $^{^9\}mathrm{iseg}$ inc. Model EHQ-8010p



Charakterisierung der neuartigen Ionenquelle

In unserer Gruppe wurde die segmentierte, lineare Paul-Falle als eine neuartige Ionenquelle entwickelt und etabliert. Eine genaue Charakterisierung der Quelle ist auf zwei verschiedenen Wegen erfolgt, einerseits mit der oben beschriebenen experimentellen Versuchsanordnung, andererseits mit Hilfe eines in unserer Gruppe entwickelten numerischen Simulationsprogrammes. Ohne dieses wäre die Entwicklung der speziellen Fallengeometrie nicht möglich gewesen. Zuden kann die Extraktion anhand anschaulicher Simulationen besser verstanden und somit weiter optimiert werden. In diesem Kapitel sollen zunächst die Simulation der Ionenfalle sowie der erzeugte Ionenstrahl und dessen Abhängigkeiten untersucht werden. Anschließend werden die Geräte zur experimentellen Charakterisierung der Quelle und die damit erzielten Ergebnisse – Energiefluktuation und Strahldivergenz – vorgestellt.

4.1 Simulation der Ionenquelle

Das numerische Simulationsprogramm wurde im Hinblick auf zwei wichtige Eigenschaften entwickelt: Zum einen sollen damit makroskopische Strukturen, wie etwa die mehrere cm 4 Charakterisierung der neuartigen Ionenquelle



Abb. 4.1: Computermodell der Falle (AutoCAD). Die Farben definieren die jeweiligen Elektroden, welche in der Simulation separat mit Spannungen versehen werden können.

große Ionenfalle, verarbeitet und trotzdem eine große Genauigkeit der simulierten Felder und Potentiale im Subnanometer-Bereich erreicht werden können. Zum anderen wurde auf die effektive und schnelle Berechnung der elektrischen Felder von komplizierten Strukturen und die darin stattfindenden Teilchenbewegungen ein wichtiges Augenmerk gelegt. Nur so kann garantiert werden, dass die Berechnungen von Ionentrajektorien und somit die Falleneigenschaften ausreichend genau und realitätsnah vorhergesagt werden können. Kommerziell verfügbare Programme, wie beispielsweise FEMLAB, sind hierfür nicht ausreichend. Außerdem wurde es mittels des Simulationsprogrammes möglich, eine spezialisierte Ionenoptik zu entwickeln (siehe Kap. 5), welche auf den erzeugten Ionenstrahl angepasst ist. Das entwickelte Simulationsprogramm basiert auf der BEM-Methode (vom englischen Ausdruck Boundary Element Method) und wurde mit Hilfe des Fast-Multipole-Algorithmus beschleunigt. Die Teilchenbewegung im berechneten elektrischen Feld wird dabei mit Hilfe der Verletschen Intergrationsmethode simuliert. Für eine genauere Beschreibung des Simulationsprogrammes wird an dieser Stelle auf Anhang B verwiesen.

Die spezielle Fallengeometrie wurde in einem CAD-Programm (AutoCAD) gezeichnet (siehe Abb. 4.1) und in das Simulationsprogramm eingelesen. Somit können virtuell an die selben Elektroden die jeweiligen Spannungen wie im Experiment angelegt werden
4.1 Simulation der Ionenquelle



Abb. 4.2: Simulierte radiale Bewegung der Ionen in der Falle. Die aufmodulierte Mikrobewegung mit einer Amplitude von ca. 2 nm ist deutlich zu erkennen. Die radiale Fallenfrequenz beträgt $\omega_{rad} = 2\pi \cdot 410$ kHz.

 $(U_{DC} = 35 \text{ V} \text{ an Elektrode 7 und 13 bzw. } U_{RF,pp} = 400 \text{ V} \text{ mit } \omega_{RF} = 2\pi \cdot 12,155 \text{ MHz} \text{ an die Rails}).$ Die damit simulierte radiale Bewegung ist in Abbildung 4.2 dargestellt, wobei ein ruhendes Ion zu Beginn angenommen wurde. Man sieht deutlich die aus der Theorie vorhergesagte Mikrobewegung, die auf die Säkularbewegung aufmoduliert ist. Letztere weist eine Amplitude von ca. 30 nm auf, die Mikrobewegung hingegen nur eine von ungefähr 2 nm. Eine Kompensationsspannung musste hingegen nur im Bereich von unter 1 mV angelegt werden, was natürlich bei einer idealisierten Simulation zu erwarten ist.

Die Simulation für die axiale Bewegung zeigt ebenfalls leichte Schwingungen auf der Säkularbewegung (siehe Abb. 4.3). Die Amplitude beträgt, im Gegensatz zur "echten" Mikrobewegung in radialer Richtung, ungefähr 5 nm. Eine mögliche Ursache hierfür ist die endliche Schrittweite der Verlet-Integration bzw. das Vorhandensein des sog. Tapers (Verjüngung des Abstandes zwischen den Flügeln) in Richtung der Ladezone der Falle (siehe Abb. 3.5). Ferner ist die Amplitude der axialen Schwingung mit ca. 0,22 μ m wesentlich größer, als die der radialen Säkularbewegung. Bei der Simulation der axialen Ionenbewe-



Abb. 4.3: Simulierte axiale Bewegung der Ionen in der Falle. Es ist eine kleine Schwingung mit einer Amplitude von 5 nm zu erkennen, welche in der numerischen Berechnung der Ionenbahn begründet ist. Die daraus bestimmte axiale Fallenfrequenz beträgt $\omega_{ax} = 2\pi \cdot 294$ kHz.

gung wurde zudem ein optimaler Startpunkt gefunden, der um ca. 22 nm aus der Mitte der Elektrode 10 verschoben ist. Nachdem die ideale Simulation keine Aufladungseffekte kennt, müssen erneut das Fallendesign bzw. der Taper, sowie numerische Berechnungsfehler als Ursache der Abweichung angenommen werden.

4.1.1 Erzeugung des Ionenstrahls

Mit Hilfe des Simulationsprogrammes ist es möglich, einzelne Ionen mit der experimentell angewandten Technik aus der Falle zu extrahieren und den dabei entstehenden Strahl zu betrachten (siehe Abb. 4.4). Überdies kann mit der Simulation die Abhängigkeit des Strahls von den verschiedenen Einstellungsparametern aufgezeigt und somit ein besseres Verständnis für die neuartige Ionenquelle erlangt werden.

Die Extraktion selbst findet virtuell in derselben Weise statt, wie diese im Experiment vollzogen wird. Zu einem wählbaren Phasenzeitpunkt der Radiofrequenz werden

4.1 Simulation der Ionenquelle



Abb. 4.4: Dreidimensionale Darstellung von Ionentrajektorien während der Extraktion.

an Elektrode 9 und 10 jeweils 500 V angelegt, die das Ion über das Einschlusspotential aus der Falle befördern. Nach 70 mm wird die zur Trajektorienberechnung verwendete Verlet-Methode beendet, da die Ionen das Feld der Falle verlassen haben. Für die weitere Berechnung der Flugbahn genügt folglich die Orts- und Geschwindigkeitskoordinate des extrahierten Ions. In einem Abstand von 24,7 cm, an dem im Experiment der Detektor bzw. ein Blende angebracht ist (siehe Kapitel 4.2.1), wird der jeweilige simulierte Ort und die dazugehörigen Geschwindigkeiten aufgezeichnet. Durch eine vielfache Wiederholung des Experiments entsteht ein sogenanntes Spot-Diagramm. Die bei der Betrachtung der Ionenbewegungen in der Falle ermittelte optimale Fangposition wird als Startwert für die Berechnung der Extraktion herangezogen. Die Anfangsgeschwindigkeiten werden mit Hilfe einer Monte-Carlo-Simulation hingegen zufällig erzeugt. Da eine thermische Verteilung angenommen werden kann, wurde für die Geschwindigkeiten in alle drei Raumrichtungen eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$W(v) \sim e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} \tag{4.1}$$

zu Grunde gelegt. In Abb. 4.4 sind zur Verdeutlichung die räumlichen Trajektorien von 15 Ionen während der Extraktion aufgetragen. Hier ist das unterschiedlich starke Aufschwingen der Ionen aufgrund verteilter Anfangsgeschwindigkeiten und das daraus resultierende Auseinanderlaufen der Bahnen nach der Extraktion deutlich ersichtlich (siehe außerdem Abb.4.5 (a)). Um diese Strahldivergenz genauer zu determinieren, kann das 24,7 cm ent-



Abb. 4.5: (a) Simulierte Trajektorien während einer Extraktion mit 500 V bei einer Ionentemperatur von 2 mK. (b) Das daraus resultierende Spot-Diagramm in einem Abstand von 24,7 cm. Der blaue Ring veranschaulicht den errechnten 1σ -Spotradius von 16 μ m.

fernte Spot-Diagramm Aufschluss geben. Wie in Abbildung 4.5 (b) zu sehen ist, ergibt sich näherungsweise eine Gauß-Verteilung der Auftreffpunkte der Ionen. Somit kann die Spotgröße in Einheiten der 1 σ -Varianz angegeben werden. Bei zuvor auf 2 mK gekühlten Ionen beträgt der 1 σ -Spotradius $\Delta r = 16 \ \mu$ m, was einer Strahldivergenz von 134 μ rad entspricht. Im Vergleich zur mittleren Endgeschwindigkeit der Ionen von $\overline{v}_{ax} = 22,1$ km/s, ist die Geschwindigkeitsfluktuation mit einer 1 σ -Varianz von $\Delta v_{ax} = 1,3$ m/s äußerst gering. Jeder der einzeln simulierten Schüsse wurde hierbei – ähnlich den realen Extraktionen – zur Phase der RF-Spannung synchronisiert. In Abbildung 4.5 wurde der experimentell verwendete Phasenwinkel von 260° eingestellt. Die eben genannten Ergebnisse, sowie die Annahme eines Gauß-verteilten Spots, gelten aber nur solange keine Verwendung der Ablenkelektroden notwendig ist. Der Einfluss solcher Ablenkspannungen auf die Extraktionsbahnen der Ionen ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Ionen werden noch innerhalb der Falle aus dem Potentialminimum gedrückt, was ein stärkeres Aufschwingen und demzufolge eine größere



Abb. 4.6: (a) Ionenbahnen während einer Extraktion bei zusätzlicher Verwendung der Ablenkelektroden. Für die Ablenkspannungen wurden hierbei dem Experiment ähnliche Werte herangezogen. 7,5 V zwischen den Ablenkelektroden bei den RF-Rails und 9,1 V zwischen den beiden anderen Ablenkelektroden. (b) Das daraus resultierende Spot-Diagramm ergibt ovale Form der Größe 230 μ m × 120 μ m. Ein 1 σ -Wert für den Spotradius kann aufgrund fehlender Gauß-Verteilung nicht mehr angegeben werden.

Aufweitung des Strahls nach dem Extrahieren zur Folge hat. Der erzielbare Spot weist folglich größere Ausmaße (ca. 230 μ m × 120 μ m) und zusätzlich eine ovale Form auf. Die Geschwindigkeitsfluktuation Δv_{ax} wird zwar ebenfalls negativ beeinflusst, jedoch nur um einen geringeren Faktor und beträgt 2,7 m/s. Somit wird schon jetzt deutlich, dass eine möglichst genaue Ausrichtung der Fallenachse zum Substrat bzw. einer davor befindlichen Ionenoptik entscheidend für eine gut funktionierende Ionenquelle auf der Basis einer Paul-Falle ist. Welche Faktoren bzw. Startparameter sich auf den erzeugten Ionenstrahl noch auswirken und in welchem Maße, wird in den nächsten Kapiteln genauer beleuchtet.

4.1.2 Abhängigkeit von der Ionentemperatur in der Falle

Zunächst ist die Abhängigkeit der erzielbaren Spotgrößen und der Geschwindigkeitsfluktuationen von der Temperatur der Ionen in der Falle zu untersuchen. Bei sämtlichen nachfolgenden Betrachtungen wird immer wieder auf diese beiden Merkmale des Ionenstrahls das Augenmerk gelegt, da sie die entscheidenden charakterisierenden Faktoren einer Ionenquelle darstellen. Gerade im Bezug auf ein notwendiges Fokussieren mittels einer Io-

nenoptik sind dies die ausschlaggebenden Charakteristiken, da sie die erzielbare Auflösung der Linse aufgrund chromatischer und sphärischer Abberation bestimmen.



Abb. 4.7: Simulierte Spotgrößen in Abhängigkeit von der Ionentemperatur. Jeder eingetragene Punkt beruht auf 1000 simulierten Einzelschüssen.

Die Temperatur, welche wir mit der oben erläuterten Dopplerkühlung erreichen, beträgt ungefähr 2 mK. Mit Sub-Dopplerkühlverfahren ist das Erreichen des Bewegungsgrundzustandes möglich, was wiederum mit einer Temperatur von ca. 100 μ K angenähert werden kann. Bei dieser Temperatur befinden sich gerade so wenige Phononen im System (< 10), dass eine klassische Betrachtung der Teilchentrajektorien noch als ein erster Richtwert angesehen werden kann. Da die Simulation rein klassische Teilchenbewegungen (siehe Kap. B) berechnet, d.h. das Ion in Form einer kleinen Kugel durch das Potential bewegt wird, muss somit ab dieser Temperatur das Ergebnis mit Vorsicht betrachtet werden. Je näher die Teilchen sich dem Heisenbergschen Limit nähern, desto stärker kommen quantenmechanische Effekte zum Tragen. Anstatt der klassischen Ionenbewegung müsste das Wellenpaket des Ions im Potential propagiert werden. Diese exakte Berechnung der Bewegung des Wellenpakets könnte zudem, aufgrund der schnellen unsymmetrischen Änderung des Potentials bei der Extraktion der Ionen, zur Erzeugung der nichtklassischen, gequetschten Zustände führen [82]. Eine solche Berechnung, über eine Strecke von ca. 30 cm, ist jedoch nicht innerhalb eines zweckmäßigen Aufwandes durch numerische Simulationen zu realisieren und muss deshalb ausbleiben. Dennoch werden im Nachfolgenden immer wieder Berechnungen für eine Temperatur bis 100 μ K angegeben, da somit zumindest eine vorsichtige Abschätzung der Verbesserungsmöglichkeiten durch die Implementierung fortgeschrittener Kühlmethoden – z.B. der EIT-Kühlung – gegeben werden kann.



Abb. 4.8: Simulierte Geschwindigkeitsfluktuation Δv_{ax} bei einer mittleren Geschwindigkeit $\overline{v}_{ax} = 22,1$ km/s in Abhängigkeit von der Ionentemperatur. Wiederum wurden 1000 Einzelschüsse als Grundlage der präsentierten Ergebnisse verwendet.

Für etwa einen Temperaturbereich von über 2 mK bis ca. 100 μ K sind die sich ergebenden Spotgrößen in Abbildung 4.7 aufgetragen. Es zeigt sich, dass sich der erzeugte Ionenstrahl – von den bereits in Kap. 4.1.1 erwähnten 16 μ m bei 2 mK – bei einer Temperatur von 100 μ K auf einen 1 σ -Spotradius $\Delta r = 3,7 \,\mu$ m reduzieren lässt. Dies lässt sich mit der geringer werdenden Ionenbewegung in der Falle und der daraus folgenden Verkleinerung der Säkular- und Mikrobewegung während der Extraktion anschaulich erklären. Die Strahldivergenz ist demnach auf ca. 30 μ rad beim Erreichen des Grundzustandes begrenzt.

Nachdem die Ionen eine Strecke von 24,7 cm zurückgelegt haben, weisen diese eine mittlere Geschwindigkeit von 22,1 km/s auf. Dieser Wert bleibt bis auf die dritte Nachkommastelle für alle Temperaturen der gleiche und wird somit nicht stark von der Temperatur der Ionen in der Falle beeinflusst. Die Fluktuation der Geschwindigkeit Δv_{ax} nimmt hingegen mit ansteigender Temperatur linear zu. Für die ungefähr erreichbare Temperatur im Grundzustand von 100 $\mu \rm K$ reduziert sich die Fluktuation auf knapp unter 1 m/s (exakt 0,994 m/s).

4.1.3 Abhängigkeit von der RF-Phase zum Extraktionszeitpunkt

Bei der Ionenbewegung vor bzw. während der Extraktion ist der Einfluss der Radiofrequenz in Form von Mikrobewegungen deutlich zu erkennen. Eine Abhängigkeit der Ionenstrahlcharakteristiken von der RF-Phase zum jeweiligen Extraktionszeitpunkt ist somit eine logische Folge.



Abb. 4.9: Simulierte Spotcharakteristiken bei einer Änderung der Triggerphase zum Extraktionszeitpunkt ohne Verwendung der Ablenkelektroden. Die mittleren Geschwindigkeiten der Spots und deren jeweilige Fluktuation (Fehlerbalken) sind braun, die 1σ -Spotradien blau dargestellt. Alle Ergebnisse wurden aus 500 Einzelschüssen berechnet.

Um diesen Einfluss zu überprüfen, wurden für unterschiedliche Phasenzeitpunkte jeweils 500 Extraktionen simuliert und die entstandenen Spot-Diagramme untersucht. Zunächst wurden die Ablenkspannungen geerdet und die Phase von 0° bis 330° schrittweise geändert. Die Ergebnisse in Abbildung 4.9 zeigen für die Spotgrößen eine leichte Varianz von 16 μ m - 18 μ m. Eine solche Spanne ist jedoch als unwesentlich zu betrachten. Hingegen weisen die mittleren Geschwindigkeiten \overline{v}_{ax} eine Oszillation im Intervall von $(22,2 \pm 0,2)$ km/s auf. Ebenso variiert der Wert der jeweiligen Geschwindigkeitsfluktuation Δv_{ax} in einem Bereich von 1,4 m/s bis maximal 2,3 m/s (minimal 1,4 m/s bei 180° -280°). Somit nimmt die gewählte RF-Phase einen nicht zu verachtenden Einfluss auf die Geschwindigkeit und deren Fluktuation.



Abb. 4.10: Simulierte Spots für verschiedene Triggerphasen aus jeweils 200 Ionenextraktionen unter Verwendung der Ablenkelektroden (7,5 V bzw. 9,1 V).

Wesentlich stärker wirkt sich die gewählte Triggerphase auf den Ionenstrahl aus, wenn dieser mit Hilfe der Ablenkspannungen während der Extraktion beeinflusst wird. Die in Abb. 4.10 dargestellten Spots – bestehend aus jeweils 200 Einzelschüssen – sind nicht nur, wie beabsichtigt, abgelenkt worden (Ablenkung um ca. 18 mm bzw. 33 mm), sondern über eine große Fläche von 4 mm × 8 mm verteilt. Einzeln betrachtet sind die Spots, wie in Abb. 4.6 (b) bereits gezeigt wurde, zudem in einer Achse gestaucht bzw. in der dazu senkrechten gestreckt worden. Die Schwankungen der mittleren Geschwindigkeit sowie der Geschwindigkeitsfluktuation werden ohne eine phasenstabile Extraktion größer. Die mittlere Geschwindigkeit \overline{v}_{ax} variiert zwischen 21,5 km/s und 22,4 km/s für unterschiedliche RF-Phasen. Für die Fluktuation der Geschwindigkeiten der einzeln extrahierten Ionen ergibt sich ein Intervall von minimal 1,4 m/s bis maximal 4,0 m/s. Insgesamt gilt somit,

dass eine gezielte Extraktion mit der Ionenfalle nur möglich ist, wenn der Zeitpunkt des Schusses genau mit der Phase der Radiofrequenz abgestimmt ist. Da jedoch der negative Einfluss ohne Verwendung der Ablenkelektroden eher gering ausfällt, sollte auf eine exakte Ausrichtung der Fallenachse erneut großen Wert gelegt werden. Die Ablenkelektroden sollten folglich nur für eine minimale Strahlführung herangezogen werden.

4.1.4 Abhängigkeit von der Extraktionsposition

Im realen Fallenbetrieb wird es sich nie ganz vermeiden lassen, dass sich auf den dielektrischen Oberflächen der Falle Ladungen befinden. Diese sog. Patch-Ladungen führen zu einem Versatz der Ionen aus dem Potentialminimum und wirken sich ebenfalls negativ auf die Extraktionsgenauigkeit aus.



Abb. 4.11: Simulierte Spotcharakteristiken in Abhängigkeit von einem Versatz aus dem Potentialminimum vor der Extraktion ohne Verwendung der Ablenkelektroden. Die mittleren Geschwindigkeiten der Spots und deren jeweilige Fluktuation (Fehlerbalken) sind braun, die 1σ -Spotradien erneut blau eingezeichnet. Den Ergebnissen liegen 1000 Einzelschüsse zugrunde.

Um dies mittels numerischer Simulationen zu überprüfen, wurden nachfolgend Extraktionen mit anfänglichem Versatz aus dem Potentialminimum untersucht. Wiederum wurden zunächst die Ablenkelektroden auf Masse gelegt und jeweils 1000 Einzelextraktionen für unterschiedliche Startpositionen simuliert (siehe Abb. 4.11). Es ergaben sich 1σ -Spotradien mit einer Größe von (16,6 ± 1,5) µm, was als beinahe konstant angesehen werden kann. Gerade da keine Vergrößerung des Spots bei einem Versatz von über 400 µm (entspricht bereits einer Startposition zwischen zwei Elektroden) zu sehen ist, kann der Einfluss eines Startpunktversatzes unmittelbar vor der Ionenextraktion im Bezug auf die Strahldivergenz vernachlässigt werden. Im Gegensatz dazu ist die Geschwin-



Abb. 4.12: Spots aus jeweils 500 Einzelextraktionen bei unterschiedlichen Startpositionen. Die Ablenkelektroden wurden bei jedem Schuss auf einer Spannung von 7,5 V bzw. 9,1 V gehalten.

digkeitsfluktuation im Ionenstrahl stark abhängig von einem möglichen Versatz aus dem Potentialminimum. Zwar bleiben die mittleren Geschwindigkeiten \overline{v}_{ax} bei Werten von $(22,0 \pm 0,2)$ km/s nahezu konstant, jedoch variiert die Fluktuation der einzeln simulierten Teilchengeschwindigkeiten enorm. Von einem minimalen Wert von $\Delta v_{ax} = 1,3$ m/s bei Ionen aus dem Potentialminimum weitet sich die Fluktuation bis auf 1,4 km/s bei einem Versatz um 420 μ m extrem auf. Somit ist die Extraktionsposition der Ionen zwar im Bezug auf die Spotgröße unerheblich, jedoch auf die ebenfalls entscheidende Fluktuation der

Ionengeschwindigkeit hat ein Versatz stark negative Auswirkungen.

Wird wiederum mit Hilfe der Ablenkelektroden versucht, die Strahlführung zu beeinflussen, so ändert sich die Auswirkung auf die Spotgröße bzw. dessen Form dramatisch. Der erzeugte Spot ist weiterhin um einen gewissen Wert versetzt (bei 7,5 V bzw. 9,1 V beträgt die Ablenkung erneut ungefähr 19 mm bzw. 30 mm), jedoch ändert sich die ovale Spotform beim Extrahieren aus dem Potentialminimum in eine schraubenähnliche Verteilung der extrahierten Ionen. Diese breitet sich zudem über eine Fläche von 8 mm × 20 mm (420 μ m Versatz) aus, was ein gezieltes Schießen der Ionen unmöglich macht. Zusätzlich verhalten sich die mittleren Geschwindigkeiten sowie die Geschwindigkeitsfluktuation der extrahierten Ionen ähnlich dem oben genannten Fall – ohne Hinzunahme von Ablenkspannungen. Die Variation von \overline{v}_{ax} erstreckt sich von 21,5 km/s bis 22,3 km/s, mit umso kleiner werdenden Werten, je größer der Versatz ist. Zusätzlich steigt die Fluktuation der Geschwindigkeiten an den stark versetzten Startpunkten auf bis zu 1,6 km/s an.

4.1.5 Simulierte Extraktionen unterschiedlicher chemischer Elemente

Da unsere Falle universell einsetzbar sein soll, ist es sinnvoll, mittels des numerischen Simulationsprogrammes zu überprüfen, ob auch andere chemische Elemente exakt extrahiert werden können und welche Eigenschaften der damit erzeugt Strahl aufweist. In Tabelle 4.1 sind die erzielten Ionenstrahleigenschaften für die chemischen Elemen-

| | Stickstoff N ⁺ | Kalzium Ca^+ | $\rm Chrom \ Cr^+$ | Nickel Ni ⁺ |
|-----------------------------------|---------------------------|----------------------|-----------------------|------------------------|
| \overline{m} | 14 u | 40 u | 52 u | 59 u |
| Δr | 11,3 $\mu { m m}$ | 16,5 $\mu { m m}$ | 14,5 $\mu {\rm m}$ | 13,8 $\mu{\rm m}$ |
| \overline{v}_{ax} | $36,17~\mathrm{km/s}$ | $22{,}09~\rm km/s$ | $19{,}43~\rm km/s$ | $18{,}37~\rm km/s$ |
| Δv_{ax} | $2,82 \mathrm{~m/s}$ | $1,33 \mathrm{~m/s}$ | $1{,}00~\mathrm{m/s}$ | $0{,}96~\mathrm{m/s}$ |
| $\Delta v_{ax}/\overline{v}_{ax}$ | $7,8 \cdot 10^{-5}$ | $5,9 \cdot 10^{-5}$ | $5,1.10^{-5}$ | $5,2 \cdot 10^{-5}$ |

Tab. 4.1: Simulierte Strahleigenschaften für weitere chemische Elemente. Die Werte wurden ohne Hinzunahme der Ablenkspannungen und mit 2 mK gekühlten Ionen aus 1000 Einzelschüssen ermittelt. Dabei bezeichnet m die Masse, Δr den 1 σ -Spotradius, \overline{v}_{ax} die mittlere Geschwindigkeit, Δv_{ax} die Geschwindigkeitsfluktuation und $\Delta v_{ax}/\overline{v}_{ax}$ die relative Varianz der Geschwindigkeit.

te Stickstoff (N⁺), Chrom (Cr⁺) und Nickel (Ni⁺) aufgetragen. Ersteres erscheint für

einen Festkörperquantencomputer basierend auf NV-Farbzentren essentiell, wohingegen die beiden letzteren Spezies bereits in unserem Experiment durch einen Nickel-Chrom-Ofen verfügbar sind. Zum Vergleich sind die bereits genannten Simulationsergebnisse von 40 Ca⁺ zusätzlich in der Tabelle eingetragen. Für alle Werte wurden die Ablenkelektroden geerdet und eine Temperatur von 2 mK angenommen. Es ist zu erkennen, dass die Spotgrößen keine signifikanten Schwankungen aufweisen, wobei für das leichteste Element – Stickstoff – der kleinste Spot mit 11,3 μ m simuliert wurde. Bei diesem wurde aufgrund der Masse folgerichtig die größte Geschwindigkeit von 36,17 km/s sowie deren größte Fluktuation mit einem Wert von 2,82 m/s festgestellt. Werden demzufolge die relativen Varianzen der Geschwindigkeiten betrachtet, gleichen sich die Ergebnisse stark. Die Simulation zeigt somit, dass die oben erläuterten Charakteristiken nicht nur für Kalzium-Ionen, sondern auch für andere, einfach geladene Elemente unterschiedlicher Massen gelten.

Abschließend kann anhand sämtlicher aufgezeigter Simulationsergebnisse die Falle charakterisiert werden. Die von uns entwickelte lineare, segmentierte Paul-Falle entspricht im bestmöglichsten Fall, d.h. wenn bis Nahe an das theoretische Heisenberg-Limit gekühlt wird und die Fallenachse perfekt ausgerichtet ist, einer nahezu perfekten Punktquelle. Zwar können die klassischen Simulationen bei diesen Temperaturen nur als Richtwerte dienen, jedoch versprechen ein Strahldivergenz von ungefähr 30 μ rad und eine Geschwindigkeitsfluktuation von ca. 1 m/s sehr gute Ausgangspositionen für eine anschließende Fokussierung. Die relative Varianz der Geschwindigkeiten von $4,5\cdot10^{-5}$, welche durch Nachbeschleunigung der Ionen beinahe beliebig weiter verbessert werden kann, spricht ebenfalls für die äußerst guten Eigenschaften des erzeugten Strahls. Den negativen Einfluss variierender Startpositionen sowie RF-Phasen zum Extraktionszeitpunkt gilt es jedoch zu minimieren. Außerdem sagen Simulationen auch für andere chemische Elemente eine ähnlich gute Arbeitsweise vorher, was die Falle zu einer universell einsetzbaren, deterministischen Einzelionenquelle macht. Inwieweit diese idealisierten Simulationswerte im Experiment realisiert werden können, wurde ebenfalls im Laufe dieser Diplomarbeit untersucht.

4.2 Experimentelle Charakterisierung

Ähnlich der eben diskutierten Charakterisierung der Quelle mit Hilfe numerischer Simulationen wurde die Geschwindigkeitsfluktuation und die räumliche Divergenz des Strahls experimentell bestimmt. Welche Geräte dafür nötig sind bzw. von uns eingesetzt wurden, wird zunächst knapp erläutert. Anschließend werden die damit erzielten Ergebnisse

ausführlich diskutiert.



4.2.1 Detektion und Vermessung des erzeugten Ionenstrahls

Abb. 4.13: (a) Foto des von uns verwendeten Detektors (Quelle: Hersteller). (b) Konstruktionszeichnung des Detektors mit transparent dargestellter Seitenwand und bemaßter Eingangslochmaske.

Nachdem die Ionen aus der Falle extrahiert wurden, werden sie in etwa 30 cm Entfernung von einem Detektor registriert. Bei dem von uns verwendeten Detektor¹ handelt es sich um einen Sekundärelektronenvervielfacher (EMT vom englischen Ausdruck Electron Multiplier Tube), der speziell für positiv geladene Teilchen ausgelegt ist (siehe Abb. 4.13 (a)) [67]. Wie in der Konstruktionszeichnung in Abbildung 4.13 (b) zu sehen ist, hat die Eingangslochmaske einen Durchmesser von 20 mm. Im Betrieb ist der Detektor bei einer Spannung von ca. $U_{det} = -2.5$ kV mit einer Quanteneffizienz von etwa 70 % -80 % und einer Verstärkung von 5·10⁵ vom Hersteller spezifiziert. Durch Materialalterung der Dynoden werden diese im Gebrauch ineffizienter, was allerdings durch eine Erhöhung von U_{det} ausgeglichen werden kann.

In Abbildung 4.14 sind typische Detektorsignale aufgetragen. Jedes Detektionssignal weist eine Amplitude von ungefähr 100 mV auf und ist als sogenannter Dip mit einer Breite von ca. 10 ns am angeschlossenen Oszilloskop zu erkennen. Wird ein Kristall aus mehreren Ionen extrahiert, erscheinen dementsprechend mehrere Dips am Oszilloskop, welche zumeist sehr gut voneinander zu unterscheiden sind (siehe Abb. 4.14 (a) und (b)).

 $^{^{1}}$ ETP Modell: 14553



Abb. 4.14: (a) Bildschirmaufnahme eines 2-Ionenkristalls und (b) die dazugehörige Oszilloskopaufnahme des Detektorsignals ca. 12,7 μ s nach der Extraktion. (c) Leicht nach rechts versetztes ⁴⁰Ca⁺-Ion aus einem gemischten Kristall mit zwei weiteren, dunklen Ionen links daneben. (d) Detektorsignal des gemischten Kristalls. Das leichtere ⁴⁰Ca⁺ kommt bereits ca. 12,8 μ s nach der Extraktion an, die beiden dunklen Ionen nach ungefähr 15,3 μ s. Eine Analyse dieser Flugzeiten deutet auf zwei CaO⁺-Ionen hin. Die Flugzeiten beziehen sich bei diesen Messungen auf einen Abstand von 24,7 cm zwischen Fallenmitte und Detektor.

Ferner können dunkle, sympathetisch mitgekühlte Ionen – neben der Identifikation am Bildschirm aufgrund von Fehlstellen im Kristall – ebenso vom Detektor nachgewiesen werden. Dies geschieht mittels einer Flugzeitanalyse, mit der auf die Masse bzw. chemische Art zurückgeschlossen werden kann. In Abbildung 4.14 (c) und (d) ist dies für einen Ionenkristall bestehend aus einem ⁴⁰Ca⁺-Ion und zwei CaO⁺-Ionen exemplarisch dargestellt. Kalziumoxid hat eine größere Masse als das alleinige Kalziumion, ist also träger und kommt somit später am Detektor an. Mit Hilfe des sehr genau getriggerten Extraktionszeitpunktes (gemessene Standardabweichung 0,34 ns) und den exakt definierten Detektionsdips können demzufolge Flugzeitspektren aufgenommen werden, aus welchen wiederum die Fluktuation der mittleren Ionengeschwindigkeit berechnet werden kann.

Um die Strahldivergenz zu bestimmen, bedarf es hingegen einer Möglichkeit, den Ionenstrahl räumlich zu vermessen. Hierfür wurde unmittelbar vor dem Detektor eine Blen-



Abb. 4.15: (a) Foto der Blendenplatte und der Halterung. Die Blendenplatte ist hinter der Hauptlochblende auf einem Piezoschlitten (siehe (b); Quelle: Hersteller) montiert und weist fünf Bohrungen (v.l. ⊘ 1; 2; 5; 0,5; 0,3 mm) auf.

denplatte montiert, die mit Hilfe einer Nanometer-Verschiebeeinheit bewegt werden kann. Diese Verschiebeeinheit besteht aus einem 40 mm langen und 20 mm breiten linearen Positionierer² (siehe Abb. 4.15 (b)), welcher für das Ultrahochvakuum geeignet ist. Zusätzlich sind Positionssensoren integriert, mit deren Hilfe jederzeit die Position des beweglichen Schlittens bestimmt werden kann. Der Positionierer ist über eine Vakuumdurchführung mit einem Regelungssystem verbunden, mit dem jede Position auf ungefähr 5 nm genau angefahren werden kann. Die Bewegung geschieht über einen Piezo, welcher den kugelgelagerten Schlitten durch Nachgreifen bis zu 27 mm weit verschieben kann. Auf diesem Schlitten befindet sich eine Blendenplatte, die mit Bohrungen von 300 μ m, 500 μ m, 1 mm, 2 mm und 5 mm Durchmesser versehen ist (siehe Abb. 4.15 (a)). Die Verschiebeeinheit ist hinter einer Hauptlochblende auf einer Halterung montiert, die direkt in der Vakuumkammer fixiert wird, so dass die gesamte Einheit jederzeit geerdet ist. Durch Einbringen der verschiedenen Blenden in den Ionenstrahl und einer Beobachtung der Detektionsrate kann der Strahl somit räumlich vermessen werden. Anhand oben untersuchter Simulationen ist zu erwarten, dass der Strahldurchmesser wesentlich geringer ist als der Durchmesser der großen Aperturen. Durch Änderung der Ablenkspannungen kann jedoch versucht werden, die Blenden durch einen Scan nachzuzeichnen und somit das Zentrum der Blende zu bestimmen.

 $^{^{2}}$ Smaract SL-2040

Für sämtliche Messungen kann eine Temperatur der Ionen von ungefähr 2 mK angenommen werden. Diese wurde von der Linienbreite des optischen Übergangs zwischen dem $S_{1/2}$ -Niveau und dem $P_{1/2}$ -Niveau abgeleitet. Der Wert liegt knapp überhalb des Doppler-Limits, kann aber durch zukünftige Implementierung weiterer Kühlverfahren (EIT-Kühlung wird zur Zeit vorbereietet) bis auf den Grundzustand (ca. 100 μ K) abgesenkt werden.

4.2.2 Einfluss vom Druck in der Kammer und der Extraktionsphase

Bevor die kinetische Energiefluktuation der Ionen und deren Strahldivergenz bestimmt wird, sollen zur vollständigen Charakterisierung der Quelle die Abhängigkeit der Trefferquote vom Druck in der Kammer und der Triggerphase genannt werden. Mit kleiner



Abb. 4.16: (a) Abhängigkeit der Detektionsrate von der Qualität des Vakuums. Die Messung basiert auf 310 Extraktionen, wovon 251 erfolgreich detektiert wurden. Eine lineare Ausgleichsgerade (braun) und deren Standardabweichung (blau) deuten auf eine maximal mögliche Trefferquote von 92,5 % hin. (b) Einfluss der RF-Triggerphase auf die Trefferquote. Aufgrund dieser Messung wurde im Nachfolgenden eine Phase von ca. 260° gewählt. [66,67]

werdenden Drücken ist eine geringe Verbesserung der Detektionsrate der extrahierten Ionen möglich (siehe Abb. 4.16 (a)). Dieser Zusammenhang ist hauptsächlich durch seltener werdende Stöße der Ionen mit Teilchen aus dem Hintergrundgas zu erklären. Ferner wird die Stabilität der Ionen mit einer Verbesserung der Vakuumqualität in der Falle größer, was zu einer gezielteren Extraktion führt. Bei Drücken von wenigen 10^{-9} mbar ergeben sich Trefferquoten von 80 % - 90 % – für das perfekte Vakuum sogar idealisierte 92,5 % – welche

über der vom Hersteller spezifizierten Quanteneffizienz liegen. Der Anbieter des Detektors ist vermutlich zur Bestimmung der Effizienz auf herkömmliche, statistische Ionenquellen angewiesen, welche weniger exakt arbeiten als die hier verwendete deterministische Ionenquelle. Da der Detektor somit am Limit seiner Effizienz arbeitet, sind folglich sämtliche Messungen durch die Detektoreffizienz begrenzt.

In Abbildung 4.16 (b) ist der Einfluss der RF-Phasenwahl zum Extraktionszeitpunkt zu sehen. Wie bereits die Simulationen aus Kapitel 4.1.3 deutlich machen, ergibt sich eine starke Abhängigkeit der Trefferquote von der Triggerphase, gerade im Zusammenspiel mit der Verwendung der Ablenkelektroden. Für die Ergebnisse im Schaubild wurden Ablenkspannungen von jeweils 22 V zwischen den gegenüberliegenden Elektroden eingestellt, wodurch ein Maximum bei etwa 250° - 270° auszumachen ist. Da bei dieser Messreihe die Blendenplatte noch nicht in der Kammer montiert war, die Ionen demnach nur durch die Detektorblende von 20 mm eingeschränkt wurden, ist das Maximum über einen Bereich von ca. 20° verwaschen. Führt man sich zusätzlich die simulierte Verteilung in Abbildung 4.10 noch einmal vor Augen, so lassen sich die weiteren Treffer bei 50° - 150° ebenfalls erklären. Hier verteilten sich über den gesamten Scan die einzelnen Spots über eine ovale Struktur, wodurch zwei gegenüberliegende Spots durch die Detektorblende gelangen könnten. Die Simulation hilft somit bei der Interpretation der experimentell erzielten Ergebnisse.

4.2.3 Bestimmung der Geschwindigkeitsfluktuation

Eine der charakteristischen Eigenschaften der Ionenquelle ist die Geschwindigkeitsfluktuation der einzelnen Ionen. Je kleiner diese ist, desto genauer können die Ionen mit Hilfe einer Linse fokussiert werden, da sich die chromatische Abberation der Optik weniger stark auswirkt. Um die Fluktuation der Geschwindigkeiten zu messen, wurden einzelne Ionen aus der Falle extrahiert und die Detektionszeiten aufgenommen. Aus dem in Abbildung 4.17 dargestellten Flugzeit-Spektrum mit einer Intervallgröße von 2 ns kann mit Hilfe eines Gauß-Fits der Mittelwert von $\bar{t} = 14,74 \ \mu$ s und eine 1 σ -Abweichung von 4,75 ns errechnet werden. Da die 123 erfolgreichen Messungen mit der Blendenplatte vor dem Detektor ermittelt wurden, muss eine Flugstrecke von 28,7 cm zugrunde gelegt werden. Dies ergibt, unter Vernachlässigung der äußerst kurzen Beschleunigungphase, eine mittlere Geschwindigkeit von $\bar{v} = 19,47 \ \text{km/s}$. Die 1 σ -Fluktuation der Geschwindigkeit Δv beträgt ferner 6,3 m/s. Insgesamt ergibt sich für die Messreihe folglich eine relative Ungenauigkeit der



Abb. 4.17: Das Flugzeitspektrum von 123 Extraktionen einzelner Ionen. Ein Gauß-Fit (braun) ergibt eine mittlere Flugzeit von 14,74 μ s mit einer 1 σ -Varianz von 4,75 ns. Die Messung wurde mit der Blendenplatte im Strahlengang vollzogen, was zu einem Abstand von 28,7 cm zwischen Fallenmitte und Detektor führt.

Geschwindigkeit von $\Delta v/v = 3,2 \cdot 10^{-4}$. Die Geschwindigkeitsfluktuation konnte somit im Rahmen dieser Diplomarbeit mit Hilfe des verbesserten Phasen-Delaytriggers um einen Faktor von 6 verringert werden. Dieser Wert kann mit Hilfe anschließender Nachbeschleunigung zudem noch weiter verringert werden, was die von uns entwickelte Ionenfalle zu einer energetisch sehr präzisen Ionenquelle macht.

Da für die eben dargestellten 123 detektierten Ionen lediglich 139 Einzelextraktionen benötigt wurden, ergibt sich eine Detektionsrate von $88,5(^{+2,7}_{-3,3})$ %. Außerdem befand sich während der Aufnahme der Messreihe die Blende mit dem Durchmesser von 1 mm im Strahlengang. Ein Vergleich mit den erzielten Trefferquoten ohne Apertur zeigt somit deutlich, dass der Strahl durch die 1 mm Apertur nicht beeinflusst wird. Um die Divergenz des Strahls genau zu bestimmen, wird nachfolgend mit verschiedenen Ablenkspannungen und Blenden der Strahl vermessen.

4.2.4 Bestimmung der Strahldivergenz

Um die Srahldivergenz zu ermitteln, wurde zunächst versucht, die Mitte der eingebrachten Apertur zu bestimmen. Anschließend kann durch sukzessives Verringern des Durchmessers der Blende und gleichzeitiger Beobachtung der Detektionsrate die räumliche Ausdehnung des Strahls bestimmt werden. Zunächst wurde über die größte Blende mit 5 mm Durchmes-



Abb. 4.18: Zielscan über die 5 mm Apertur durch kontinuierliches Verändern der Ablenkspannungen inklusive der dabei nachgezeichneten Blende (braun).

ser durch kontinuierliches Verändern der Ablenkspannungen gescannt (siehe Abb. 4.18). Hierfür wurden die Spannungen U_1 zwischen 6 V und 20 V und U_2 zwischen 8 V und 15 V variiert. Die Spannung U_1 steht hierbei für die gegenüberliegenden Ablenkelektroden der RF-tragenden Fallenflügel, U_2 hingegen für die Spannung an den Fallenchips, bei welchen die Rails geerdet bzw. mit einer Gleichspannung zur Kompensation versehen sind. Bei jedem Messpunkt – also für eine gewisse Einstellung der Ablenkspannungen – sind 5 bzw. 10 Schüsse mit Ionenkristallen unterschiedlicher Anzahl vollzogen und detektiert worden. Daraus ergab sich der in Abbildung 4.18 dargestellte Zielscan. In beide Scanrichtungen ist ein scharfer Abfall der Detektionsrate zu erkennen, was der Blendenkante entspricht. Die 5 mm Apertur kann somit deutlich nachgezeichnet werden und entspricht einem Spannungsintervall von ungefähr 10 V für U_1 und 5 V für U_2 . Außerdem können die Spannungen ermittelt werden, mit welchen zentral durch die Blende geschossen wird, um anschließend eine kleinere Apertur in den Strahl zu schieben.



Abb. 4.19: Zielscan über die 1 mm Lochblende. Die Ablenkspannungen werden wiederum kontinuierlich verändert und damit die Blendenöffnung nachgezeichnet (braun).

In Abbildung 4.19 ist derselbe Zielscan für die 1 mm Blendenöffnung dargestellt. Wiederum kann anhand der Detektionswahrscheinlichkeit die Blendenöffnung nachgezeichnet werden. Hierbei ist folgerichtig eine Abnahme der Spannungsintervalle, in welchen mit einer hohen Trefferwahrscheinlichkeit extrahiert werden kann, zu erkennen. Für U_1 ergibt sich ungefähr ein Bereich von 5 V, für U_2 ein Bereich von 2 V. Zusätzlich ist eine Abnahme der Trefferwahrscheinlichkeit zu erkennen. Diese beruht auf der Extraktion von Kristallen mit bis zu 7 Ionen, welche durch das 1 mm große Blendenloch nicht mehr vollständig am Detektor ankommen. Wie oben bereits erwähnt wurde, ist eine Detektionsrate von einzelnen Ionen mit der 1 mm-Apertur mit einer Wahrscheinlichkeit von 88,5 % möglich. Durch diesen Scan ist es wiederum möglich, die Mitte der Öffnung zu bestimmen und die jeweiligen Ablenkspannungen auf die kleineren Aperturen anzuwenden.

Bei der kleinsten uns zur Verfügung stehenden Lochblende mit einem Durchmesser von $300 \ \mu m$ ist ein Zielscan hingegen nicht mehr möglich. Bereits die Detektionsrate einzeln extrahierter Ionen zeigt einen Abfall von den vormalig knapp 90 % auf 68,6 %. Der ermittelte

Wert beruht auf insgesamt 121 erfolgten Extraktionen einzelner 40 Ca⁺-Ionen, von denen 83 erfolgreich am Detektor nachgewiesen wurden. Der Rückgang der Detektionsrate ist auf ein Abschneiden des Strahls durch die Blendenkante zurückzuführen. Anhand der ermittelten Trefferquote von 68,6 % durch die 300 μ m Apertur kann somit die Strahldivergenz bestimmt werden. Wird eine Gauß-Verteilung der Ionen im Strahl zugrundegelegt und die Detektoreffizienz von ca. 90 % miteinbezogen, so kann ein 1 σ -Radius von 83 μ m angegeben werden, also eine Strahldivergenz von 600 μ rad [65]. Wird hingegen die Verteilung der Ionen im erzeugten Strahl betrachtet, welche die Simulationen für die im Experiment eingestellten Werte ergibt, so ist eine Gauß-Annahme nicht mehr möglich. In welchem Maße der simulierte Spot jedoch mit den experimentellen Ergebnissen in Einklang zu bringen ist, wird in Kapitel 4.3 behandelt. Vorab wird näher auf einen experimentell gemessenen Drift des Strahls eingegangen.

4.2.5 Drift des Ionenstrahls

Während der gesamten Messreihen war ein Drift des Ionenstrahls bemerkbar. Um diesen genauer zu bestimmen bzw. die Extraktionen durch die 300 μ m Blende erst möglich zu machen, ist der oben erläuterte Scan über die 5 mm Apertur zu zwei verschiedenen Zeitpunkten durchgeführt worden. Hierbei wurde ein Drift von ungefähr 15 μ m/min gemessen, wodurch die Spannungswerte der Ablenkelektroden um 2,5 V für U_1 bzw. 5 V für U_2 geändert werden mussten, um weiterhin das Zentrum der Apertur zu treffen. Ist dieser Drift bei den Messungen mit Aperturen im mm-Bereich nur über einen längeren Messzeitraum zu spüren, so sind die Detektionsraten beim Extrahieren durch das 300 μ m Loch nach kurzer Zeit von dem Drift beeinflusst. In Abbildung 4.20 wird eine durch die Bewegung des Strahl hervorgerufene, kontinuierliche Abnahme der Detektionsrate über einen Zeitraum von 25 Minuten dargestellt. Die anfängliche Trefferquote von über 60 % reduziert sich aufgrund der kontinuierlichen Verschiebung des Strahls auf etwa 10 %. Hierbei gilt zu beachten, dass bisher keine Automatisierung der Lade- und Extraktionsrate vorhanden ist, wodurch sie für einzelne Ionen auf ein bis zwei Extraktionen pro Minute beschränkt sind. Die Ursache für die relativ geringe Rate ist im oftmaligen Laden von Ionenkristallen mit mehr als einem Ion begründet, da diese Extraktionen anschließend verworfen werden müssen und nicht für die Statistik herangezogen werden können. Der gezeigte Graph ergibt sich somit aus einer sehr geringen Anzahl von 23 Extraktionen und ist dadurch mit großen Unsicherheiten behaftet. Dies erklärt beispielsweise die Trefferquote von 10 % nach



Abb. 4.20: Abnahme der Detektionsrate bei der 300 μm Apertur und konstant gehaltenen Ablenkspannungen.

25 Minuten Messzeit, obwohl der Strahl bereits gänzlich von der Apertur weggewandert sein müsste. Dennoch veranschaulicht Abbildung 4.20 deutlich den Rückgang der Detektionsrate mit fortschreitender Zeit, so lange die Ablenkspannungen nicht zum Ausgleich des Drift herangezogen werden.

Ein solche Korrektur mit Hilfe der Ablenkelektroden wurde während der Messreihe mit der 300 μ m Blende vorgenommen, damit trotz des Drifts die oben genannte Detektionsrate von 68,6 % aufrecht erhalten werden konnte (siehe Abb. 4.21). Für jede Einstellung der Ablenkspannung wurden im Schnitt zwischen 15 und 20 einzelne Ionen extrahiert, bevor die Spannungen zur Korrektur des Drifts neu eingestellt werden mussten.

Als Ursache für den Drift können mögliche Temperaturänderungen der Falle angenommen werden. Diese könnte sich aufgrund der recht hohen RF-Spannung leicht erwärmen, was zu einer geringen Verformung der Falle während des Betriebes führen könnte. Mögliche negative Einflüsse auf die gezielte Extraktion basierend auf äußeren Magnetfeldschwankungen – verursacht durch Nachbarlabore oder Aufzüge des Gebäudes – konnten hingegen durch Messen eines im μ T-Bereich konstanten Magnetfeldes ausgeschlossen werden.



Abb. 4.21: Korrektur des Drifts mit Hilfe der Ablenkspannungen, was eine mittlere Detektionsrate von 68,6 % im Falle der 300 μ m Apertur gewährleistet hat.

4.2.6 Extraktion von Ionenkristallen

Zwar wurde zumeist das Augenmerk auf einzeln extrahierte Ionen gelegt, jedoch wurden ebenso Kristalle mit zwei oder drei Ionen detektiert. Die extrahierten Ionenkristalle konnten zumeist vollständig detektiert werden; zumindest bei Messungen ohne Aperturenplatte bzw. Blenden von mindestens 1 mm Durchmesser. Ebenso ist der Abstand der erzeugten Dips sehr konstant und liegt bei etwa 26 ns (siehe hierfür [67]). Die Schlussfolgerung, dass die Ionen noch in der kristallinen Struktur, die in der Falle erzeugt wird, am Detektor ankommen, ist folglich erlaubt. Dies ist vor allem für einen späteren universellen Einsatz mit verschiedenen Spezies von Ionen enorm wichtig. Nur so kann sicher gestellt werden, dass die Dotierionen auch nach der Extraktion noch von den Kühlionen getrennt werden können (siehe hierfür das Kapitel 5.5). Hierfür ist es einerseits notwendig, dass der Extraktionszeitpunkt anhand des Triggersignals der RF-Phase genau bekannt ist, andererseits dass die Flugzeiten aufgrund unterschiedlicher Massen deutlich voneinander abweichen (vergleiche hierfür auch die Simulationswerte in Tabelle 4.1 in Kapitel 4.1.5).

In Tabelle 4.2 sind die gemessenen Trefferquoten für die Extraktion von 2-Ionenkristal-

| $20~\mathrm{mm}$ Detektorblende | | 1 mm Apertur | | $300 \ \mu m$ Apertur | |
|---------------------------------|--------------------------------|-----------------|----------------------------------|-----------------------|--------------------------------|
| 174 Extraktionen | | 48 Extraktionen | | 62 Extraktionen | |
| # Dips | # Detektionen | # Dips | # Detektionen | # Dips | # Detektionen |
| | / Trefferquote | | / Trefferquote | | / Trefferquote |
| 1 | 76 / 43,6 $(^{+4,0}_{-4,0})\%$ | 1 | 18 / 37,5 $\binom{+8,1}{-7,6}\%$ | 1 | 32 / 51,6 $(^{+7,0}_{-7,0})\%$ |
| 2 | 93 / 53,4 $(^{+4,0}_{-4,0})\%$ | 2 | 27 / 56,2 $\binom{+7,9}{-8,2}$ % | 2 | 5 / 8,1 $(^{+5,0}_{-3,4})\%$ |

Tab. 4.2: Erzielte Trefferquoten für die Extraktion von 2-Ionenkristallen.

len dargestellt. Beim Vergleich der ersten Spalte, in der die Werte für Extraktionen ohne Apertur-Blende eingetragen wurden, mit der zweiten Spalte, welche hingegen die Ergebnisse für die Messungen mit der 1 mm Apertur enthält, lässt sich keine Verschlechterung der erzielten Trefferquoten erkennen. Dies zeigt, dass die Ionen auch nach der Extraktion nicht transversal stark auseinander driften und gezielt aus der Falle geschossen werden können. Die Effizienz der gemeinsamen Detektion von beiden Ionen des Kristalls ist dennoch gegenüber der Messung mit einem Ion vermindert und liegt unter 60 %. Es gilt jedoch zu beachten, dass das Ergebnis der Einzelextraktion von ca. 90 % allein aufgrund der Quanteneffizienz des Detektors, welche beim 2-Ionenkristall zweimal zum Tragen kommt, nicht erreichbar ist.

| 20 mm Detektorblende | | 1 mm Apertur | | $300 \ \mu m$ Apertur | |
|----------------------|----------------------------------|-----------------|------------------------------------|-----------------------|-----------------------------------|
| 21 Extraktionen | | 32 Extraktionen | | 12 Extractionen | |
| # Dips | # Detektionen | # Dips | # Detektionen | # Dips | # Detektionen |
| | (Trefferquote) | | (Trefferquote) | | (Trefferquote) |
| 1 | $1 / 4,7 (^{+10,0}_{-3,9})\%$ | 1 | $5 / 15,4 (^{+9,1}_{-6,6})\%$ | 1 | 7 / 58,3 $\binom{+16,6}{-18,2}$ % |
| 2 | $5 / 23,8 (^{+12,8}_{-9,8})\%$ | 2 | 12 / 37,5 $\binom{+10,3}{-9,4}$ % | 2 | 0 / 0 % |
| 3 | 15 / 71,4 $(^{+10,6}_{-13,0})\%$ | 3 | 15 / 46,8 $\binom{+10,3}{-10,0}$ % | 3 | $1 / 8,3 (^{+16,6}_{-6,9})\%$ |

Tab. 4.3: Gemessene Trefferquoten für Extraktionen von 3-Ionenkristallen.

Ebenso wurden 3-Ionenkristalle extrahiert, was in Tabelle 4.3 dargestellt wird. Nachdem jedoch das Laden von 3 Ionen, beim Versuch einzelne Ionen zu fangen, eher selten ist, ergab sich keine großen Anzahl an Schüssen mit einem solchen Kristall. Trotz der relativen statistischen Unsicherheit der Ergebnisse sind die Werte hier aufgetragen, um

zu verdeutlichen, dass sich hierbei die Begrenzung durch eine Apertur bereits bei 1 mm Durchmesser bemerkbar macht.

Insgesamt kann somit festgehalten werden, dass die Ionen in ihrer kristallinen Struktur extrahiert werden, was vor allem bei gemischten Kristallen eine Trennung der einzelnen Ionen nach der Extraktion ermöglicht. Eine gleichzeitige Implantation von mehreren Ionen ist hingegen nur auf Kosten der Zielgenauigkeit möglich.

4.3 Vergleich der Simulation mit dem experimentellen Ergebnis

Nachdem nun die Falle mittels Ergebnissen aus Simulationen und Experimenten charakterisiert wurde, lohnt sich ein genauerer Vergleich der beiden Ergebnisse. Hierfür kann die Simulation mit den im Experiment verwendeten Parametern durchgeführt werden. Dies bedeutet:

- Temperatur = 2 mK
- Triggerphase = 260°
- Ablenkspannungen: $U_1 = 7.5$ V und $U_2 = 9.1$ V

Für eine solche Simulation ergibt sich eine Geschwindigkeitsfluktuation von Δv_{sim} = 2,7 m/s. Im Experiment hingegen wurde eine Fluktuation von $\Delta v_{exp} = 6.3$ m/s gemessen, was um einen Faktor von 2,3 schlechter ist. Die beiden mittleren Geschwindigkeiten stimmen hingegen wesentlich genauer überein, da sich diese mit $\overline{v}_{sim} = 22,36$ km/s bzw. $v_{exp} = 19,47$ km/s nur um einen Faktor von ca. 1,1 unterscheiden. Der große Unterschied im Bezug auf die Geschwindigkeitsfluktuation ist anhand der Idealisierung in den Simulationen einfach erklärbar. Es bleiben beispielsweise das endliche Vakuum in der Kammer sowie die Vakuumkammer selbst und sämtliche Bauteile unberücksichtigt. Zusätzlich kommen Asymmetrien im experimentellen Aufbau, Ladungen an isolierenden Oberflächen und Störfelder von außen hinzu, welche die schlechteren Ergebnisse des Experiments verursachen. Neben der Geschwindigkeitsfluktuation ist weiterhin der Unterschied zwischen Experiment und Simulation in der Strahldivergenz von Interesse. Da die Strahldivergenz aufgrund einer möglichen ovalen Spotform nicht direkt verglichen werden kann, soll der ermittelte Faktor der Geschwindigkeitsfluktuation ebenfalls für die räumliche Aufweitung des Ionenstrahls angenommen werden. Wird infolgedessen das simulierte Spotdiagramm mit dem Faktor 2,3 aufgeweitet, so lässt sich das Ergebnis der Messreihe bezüglich der



Abb. 4.22: Vergleich der Simulation mit dem Experiment. Das Spotdiagramm ist um den Faktor 2,3, welcher sich aus einem Vergleich der beiden Geschwindigkeitsfluktuationen ergeben hat, vergrößert worden. Bei dem sich ergebenden Spot wären 65 % der extrahierten Ionen (schwarz) durch eine 300 μ m große Blende (braun) getroffen worden, was dem Experiment (68,6 %) sehr nahe kommt.

300 μ m-Blende mit dem der Simulation vergleichen (siehe Abb. 4.22). Wird über den vergrößerten Spot eine virtuelle Blende mit eben diesem Durchmesser gelegt, so kann untersucht werden, wieviele simulierte Ionen durch die Apertur gelangt wären. Es ergibt sich eine Trefferquote von 65 %, welche der experimentell bestimmten mit 68,6 % sehr nahe kommt. Dies kann zum einen als deutlicher Hinweis auf die Genauigkeit der Simulation aufgefasst werden. Zum anderen deutet es darauf hin, dass nicht nur der simulierte Strahl der Ionenfalle eine ovale Struktur aufweist, sondern dieser auch in der Realität keine Gauß-förmige Struktur mehr haben könnte. Da dies für ein genaues Zielen und späteres Fokussieren nachteilig ist, sollte die Fallenachse möglichst genau zur Detektorachse ausgerichtet werden, wodurch ein Einsatz der Ablenkelektroden minimiert und die ovale Form verhindert werden kann. Obwohl der eben aufgezeigte Vergleich die Simulation mit dem Experiment äußerst gut in Einklang bringt, sollte er dennoch mit Vorsicht zu betrachten sein. Eine daraus zurückgerechnete Verkippung der Fallenachse um 4,2° für die eine und 7,2° für die andere Richtung müsste mit dem Auge zu sehen sein, was aber nicht

der Fall ist. Außerdem ist die Ablenkung um ca. 18,4 mm bzw. 31,0 mm im Experiment aufgrund des Verbindungsstückes zwischen Fallen- und Detektorkammer, welches einen Innendurchmesser von lediglich 10 mm aufweist, sehr unwahrscheinlich. Dennoch kann die Falle mit Hilfe der Simulationen besser verstanden und dadurch in ihren Eigenschaften als Ionenquelle verbessert und weiterentwickelt werden.

Nachdem die Charakterisierung der Falle nun vollständig durchgeführt und damit abgeschlossen wurde, ist festzuhalten, dass die neuartige Ionenquelle einerseits deterministisch und universell einsetzbar ist, andererseits bereits sehr gute Eigenschaften wie eine kleine Geschwindigkeitsfluktuation und eine geringe Strahldivergenz aufweist. Letzteres ist jedoch mit einer räumlichen Ausdehnung von mehreren Hundert μ m nicht ausreichend, um als Implantierverfahren eingesetzt werden zu können. Eine Platzierung mit der Genauigkeit von wenigen Nanometern ist unbedingt notwendig. Genau dies wird im nächsten Kapitel im Zentrum stehen: die Entwicklung einer speziell an die Strahleigenschaften angepassten Ionenoptik, welche es ermöglicht, Ionen auf bis zu einen Nanometer genau zu platzieren.

5

Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

Linsen und ihre fokussierenden Eigenschaften für Photonen bzw. Lichtstrahlen sind aus der klassischen Optik für Licht bekannt. Ähnliche Wirkungen lassen sich auch für geladene Teilchen – wie beispielsweise Ionen – mit Hilfe elektrostatischer Felder erzielen. Die Brechungsindizes verschiedener Medien in der photonischen Optik n_i spiegeln sich beinahe analog in den erzeugten Potentialen der Elektrostatik wider. So kann dort beispielsweise ein Brechungsgesetz, welches dem von Snellius ähnlich ist, für zwei unterschiedliche elektrische Potentialbereiche Φ_1 und Φ_2 bzw. deren Quadratwurzel formuliert werden:

$$\frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{n_2}{n_1} \quad \text{(Snellius)} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \sqrt{\frac{\Phi_2}{\Phi_1}} \quad \text{(Ionenoptik)}. \tag{5.1}$$

Natürlich ist die Vorstellung von zwei direkt aneinander anschließenden Potentialen, welche sich ähnlich wie die Brechungsindizes zweier Materialien, abrupt ändern, frei idealisiert und in der Realität nicht umsetzbar. Praktische Relevanz hat jedoch die Möglichkeit, dass bei der elektrostatischen Optik der Brechungskoeffizient über mehrere Größenordnungen variiert werden kann, was in der Licht-Optik nur über etwa eine halbe Größenordung möglich ist. Aus dieser Betrachtung wird deutlich, dass geladene Teilchen mit Hilfe von elektrischen Feldern in ihrer Bahn beeinflusst und somit auch fokussiert werden können,

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

ähnlich wie es in der Optik für Licht der Fall ist. Der größte Nachteil der elektrostatischen Optik ist jedoch die Tatsache, dass es nicht wie in der photonischen Optik möglich ist, die Brechung durch das Schleifen des Materials zu beeinflussen. Eine dadurch bedingte, einfache Korrektur von Abbildungsfehlern, wie etwa chromatische oder sphärische Aberration, ist in der elektrostatischen Optik, welche im ladungsfreien Raum immer der Laplace-Gleichung genügen muss, nicht möglich. Aber auch hier können Verfahren gefunden werden, welche diese Einschränkung der elektrostatischen Optik umgehen (siehe Kap. 5.4).

Generell besteht für geladene Teilchen sogar eine zweite Möglichkeit der gezielten Ablenkung – die Beeinflussung der Trajektorie unter Zuhilfenahme von magnetischen Feldern. Aufgrund der großen Ionenmassen ist diese jedoch eher von geringer Bedeutung und soll demzufolge in dieser Arbeit nicht behandelt werden. Bevor die entwickelte Ionenoptik für unsere Quelle genauer behandelt und charakterisiert werden soll, wird zunächst die Physik der Ionenoptik ein wenig näher beleuchtet.

5.1 Physik der Ionenoptik

Um die Funktionsweise einer Linse besser zu verstehen, ist es sinnvoll, die Bewegungsgleichung des geladenen Teilchens im elektrostatischen Feld eines sich ändernden Potentials zu betrachten¹. Da es sich um rotationssymmetrische Linsen und folglich um rotationssymmetrische Potentiale – $\Phi(r, z)$ mit der z-Achse als Symmetrieachse – handelt, kann die Laplace-Gleichung in Zylinderkoordinaten geschrieben werden:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) = 0 \tag{5.2}$$

Das axialsymmetrische Potential kann als geradzahliges Polynom von r geschrieben werden, welches sich, eingesetzt in Gleichung (5.2), wie folgt ergibt:

$$\Phi(r,z) = A_0(z) - \frac{A_0''(z)r^2}{2^2} + \frac{A_0^{(4)}(z)r^4}{2^2 \cdot 4^2} + \dots \quad .$$
(5.3)

Die gestrichenen Potentiale (') stehen hierbei für Differentiationen nach z.

Paraxiale Näherung:

Um zur Bewegungsgleichung in paraxialer Näherung zu gelangen, werden zunächst nur

¹Hierfür wird der Notation und Herangehensweise von [83] gefolgt.

die Terme zweiter Ordnungen verwendet (für Aberrationseffekte müssen später höhere Ordnungen zugelassen werden), wodurch sich für die Komponenten des elektrischen Feldes folgendes ergibt

$$E_z = -\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -\Phi' \qquad E_r = -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = \frac{r}{2}\Phi''.$$
(5.4)

Die radiale Bewegung ist somit für die Ladung q, welche das entgegengesetzte Vorzeichen des Potentials aufweisen soll, gegeben durch

$$m\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = qE_r = \frac{qr}{2}\Phi'' \tag{5.5}$$

Nachdem die axiale Geschwindigkeit wesentlich größer als die radiale ist, kann zudem $\frac{1}{2}m(dz/dt)^2 + q\Phi = 0$ angenommen werden. Somit ergibt sich durch Einsetzen und Umformen für die Bewegungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2} \frac{\Phi'}{\Phi} \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z} = -\frac{r}{4} \frac{\Phi''}{\Phi}$$
(5.6)

Es ist zu erkennen, dass weder die Masse noch die Ladung in die Formel einfließen und sie somit für jegliche Art von geladenen Teilchen gültig ist. Unter Einführung eines sog. reduzierten Radius $R = r\Phi^{1/4}$ (wobei für positive Teilchen Φ als $|\Phi|$ angesehen werden soll) und einer neuen Variablen $T = \Phi'/\Phi$ vereinfacht sich diese Gleichung weiter zur Picht-Gleichung [83]:

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{3}{16}RT^2.$$
(5.7)

Mit Hilfe dieser Gleichung ist die konvergierende Wirkung einfach zu verstehen. Ein zur z-Achse paralleler Strahl, bei dem R_1 konstant bleibt (da eine Veränderung im realen Radius r_1 von der Änderung vom Potential ausgeglichen werden kann), ergibt nach direkter Integration der Picht-Gleichung die Lösung

$$\int_{-\infty}^{\infty} R'' dz = R'_2 - R'_1 = -\frac{3}{16} R_1 \int_{-\infty}^{\infty} T^2 dz.$$
 (5.8)

Mit $R'_1 = 0$ $(R_1 = const)$ weist R'_2 folglich das inverse Vorzeichen von R_1 auf. Weiterhin gilt

$$R_2' = r_2' \Phi_2^{1/4} + \frac{r_2}{4} \Phi_2^{-3/4} \Phi_2'$$
(5.9)

wobei o.B.d.A. $\Phi'_2 \cong 0$ angenommen werden kann und natürlich für $\Phi_2^{1/4} > 0$ gelten muss. Für r'_2 folgt somit das gleiche Vorzeichen wie für R'_2 und daraus die Tatsache,



Abb. 5.1: Simulierte Trajektorien zur Verdeutlichung der Aberrationsfehler.

dass ein einfallendes Teilchen immer zur Achse hin abgelenkt wird. Es gibt also in der elektrostatischen Optik keine Zerstreuungslinse.

Ebenso wie in der Optik für Licht, gibt es auch in der elektrostatischen Optik Verschlechterungen der Fokussierwirkung durch Aberrationsfehler (siehe Abb. 5.1). Um die beiden für diese Arbeit einflussreichsten Fehler – die Abweichung von der paraxialen Näherung (sphärische Aberration) und die Geschwindigkeitsfluktuationen der fokussierten Teilchen (chromatische Aberration) – mit einzubeziehen, kann die Bewegungsgleichung (5.6) mit Hilfe einer störungstheoretischen Rechnung modifiziert werden. Die Aberrationsfehler werden zumeist mit den speziellen Koeffizienten C_s und C_c für die sphärische und chromatische Aberration dargestellt. Diese können zum einen aus der Potentialverteilung berechnet werden, falls diese exakt bekannt sein sollte. Zum anderen lassen sich anhand der Koeffizienten verschiedene Linsengeometrien charakterisieren.

Sphärische Aberration:

Die Abweichung von einer idealen Linsenwirkung, aufgrund eines gewissen Abstandes von der optischen Achse bzw. einer radialen Geschwindigkeitskomponente, wird durch Umschreiben der Gleichungen (5.5) und (5.6) berücksichtigt. Bei Ersterer wird der Term der vierten Ordnung der Potentialentwicklung, bei Zweiterer die radiale Komponente der ki-

5.1 Physik der Ionenoptik

netischen Energie hinzugefügt. Es ergibt sich somit

$$m\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = qE_r = q\left(\frac{r}{2}\Phi'' - \frac{r^3}{16}\Phi^{(4)}\right)$$
(5.10)

$$\frac{1}{2}m\left[\left(\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2\right] + q\left(\Phi - \frac{r^2}{2}\Phi''\right) = 0 \tag{5.11}$$

Hieraus lässt sich erneut eine Bewegungsgleichung für geladene Teilchen aufstellen, welche sich wie folgt ergibt:

$$\frac{\mathrm{d}^{2}r}{\mathrm{d}z^{2}} + \frac{1}{2}\frac{\Phi'}{\Phi}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z} + \frac{r}{4}\frac{\Phi''}{\Phi} = \left[\frac{1}{32}\frac{\Phi^{(4)}}{\Phi} - \frac{1}{16}\left(\frac{\Phi''}{\Phi}\right)^{2}\right]r^{3} + \frac{1}{8}\left(\frac{\Phi'''}{\Phi} - \frac{\Phi''\Phi'}{\Phi^{2}}\right)r^{2}r' - \frac{1}{4}\frac{\Phi''}{\Phi}rr'^{2} - \frac{1}{2}\frac{\Phi'}{\Phi}r'^{3} \quad (5.12)$$

Diese lässt sich mit dem störungstheoretischen Ansatz $r = r_p + r_s$ lösen, wobei r_p für den paraxialen Teil und r_s für die kleine Störung eingesetzt wird. Nach einer längeren Rechnung (siehe [83]) kann somit der sogenannte Koeffizient der sphärischen Aberration ermittelt werden:

$$C_s = \frac{1}{64\sqrt{\Phi_0}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R^4}{\sqrt{\Phi}} \left[3T^4 + 5T'^2 - \frac{11}{2}T^2T' \right] + 4TT'\frac{R'}{R} dz.$$
(5.13)

Hierbei steht Φ_0 für das Potential an der unteren Integrationsgrenze und R sowie T für die oben eingeführten Werte des reduzierten Radius und der Variable zur vereinfachten Darstellung.

Chromatische Aberration:

Um den Koeffizient der chromatischen Aberration zu erhalten, muss ebenfalls Gleichung (5.6) abgeändert werden. Dies gelingt über die Einführung einer konstanten Änderung des Potentials $\delta \Phi$, die im Vergleich zu Φ klein ist. Daraus folgt:

$$\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2} \frac{\Phi'}{(\Phi + \delta\Phi)} \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z} + \frac{r}{4} \frac{\Phi''}{(\Phi + \delta\Phi)} = 0.$$
(5.14)

Mit dem Ansatz $r = r_p + r_c$, bei dem r_c einer kleiner Störung der Trajektorie entspricht, und einer längeren Rechnung kann wiederum der Koeffizient der chromatischen Aberration errechnet werden:

$$C_{c} = \frac{1}{\sqrt{\Phi_{0}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{3}{8} T^{2} R^{2} \mathrm{d}z$$
 (5.15)

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

Wird nun mittels elektrostatischer Linsen versucht, mehrere geladene Teilchen auf einen möglichst kleinen Spot zu fokussieren, so wirken sich die beiden Koeffizienten der Aberration wie folgt auf die Spotgröße D aus [84]:

$$D^2 = D_s^2 + D_c^2, (5.16)$$

$$D_s = \frac{1}{2}C_s\alpha^3, \tag{5.17}$$

$$D_c = C_c \alpha(\Delta E/E). \tag{5.18}$$

Hierbei steht α für den halben Winkel der Strahldivergenz der Quelle und $\Delta E/E$ für die Energiefluktuation des Strahls. Die erzielbare Spotgröße für die von uns eingesetzte Ionenpunktquelle wird demzufolge durch die beiden Aberrationsfehler vergrößert.

Die Einzellinse:

Wie bereits oben angedeutet wurde, lassen sich Trajektorien von geladenen Teilchen mit Hilfe elektrostatischer Felder auf einen Punkt fokussieren. Hierfür sind mehrere Linsenkonfigurationen möglich (siehe [83,85]). Die in unserem Fall eingesetzte Linsenkonfiguration entspricht einer sog. elektrostatischen Einzellinse, welche aus drei Apertur-Elektroden besteht. Die beiden äußeren Elektroden werden jeweils mit der gleichen Spannung versorgt, was in unserem Fall einer Erdung entspricht. Das Potential der Einzellinse gleicht einer Satteloberfläche, bei dem die ansteigenden Flanken zur Elektrode hin gerichtet sind.

Eine weitere Eigenschaft von Einzellinsen ist ihre ausschließlich fokussierende Wirkung. Dies bringt den Vorteil, dass die Mittelelektrode eine von der Teilchenladung unabhängige Spannung aufweisen kann und dennoch in ihrer Wirkung der einer Sammellinse ähnlich bleibt (siehe Abbildung 5.2). Folglich ergeben sich für die Erzeugung des oben genannten Sattel-Potentials und somit für den Betrieb einer solchen Linse zwei charakteristische Betriebsmodi: Der erste Modus ist der sog. Decel-Accel-Modus (vom englischen Ausdruck Decelerating-Accelerating), bei welchem die Spannung an der mittleren Elektrode das gleiche Vorzeichen wie das der Teilchenladung aufweist (siehe Abb. 5.2 (a)). Hierbei wird die Geschwindigkeit beim Eintritt der Teilchen in den Potentialbereich verlangsamt und der Bahnverlauf ein wenig aufgeweitet. Nach Überschreiten des Potentialmaximums werden die geladenen Partikel wieder beschleunigt und erfahren insgesamt eine konvergierende Kraft, da selbst bei einer symmetrischen Linsengeometrie die Wirkung in konvergierenden Bereichen aufgrund einer längeren Aufenthaltszeit größer ist. Der zweite Betriebsmodus wird als Accel-Decel-Modus (vom englischen Ausdruck Accelerating-Decelerating) bezeichnet und erfordert eine Mittelelektrodenspannung, welche das entgegengesetzte Vorzeichen



Abb. 5.2: Querschnitt einer einfachen Einzellinse in zwei verschiedenen Betriebsmodi mit dem jeweiligen Potential und den resultierenden Trajektorien. (a) Decel-Accel-Modus, bei dem die mittlere Elektrode (dunkelrot) an einer Spannung mit dem gleichen Vorzeichen wie dem der geladenen Teilchen liegt. (b) Accel-Decel-Modus, bei dem an der Mittelelektrode (dunkelblau) eine Spannung anliegt, welche das inverse Vorzeichen der Teilchenladung hat.

der Ladung des Teilchens aufweist (siehe Abb. 5.2 (b)). Die Partikel werden beim Eintritt beschleunigt und direkt in Richtung der optischen Achse fokussiert. Nach der Durchquerung des Potentialminimums der Linse verringert sich bei einer weiteren Fokussieren die kinetische Energie wieder.

Welcher der beiden Modi gewählt wird, hängt von dem jeweiligen Einsatz bzw. den Eigenschaften des Strahls ab, da jeder Modus Vor- und Nachteile aufweist. Im Accel-Decel-Betrieb beispielsweise haben die geladenen Teilchen im Inneren der Linse aufgrund der anfänglichen Beschleunigung eine geringere relative Geschwindigkeitsfluktuation, wodurch der chromatische Fehler weniger stark zum Tragen kommt. Außerdem befinden sich die geladenen Teilchen aufgrund sofortiger Fokussierwirkung näher an der optischen Achse, was die sphärischen Aberrationsfehler ebenso verringert. Nachteilig ist jedoch, dass im Vergleich zum Decel-Accel-Betrieb mit wesentlich höheren Spannungen gearbeitet werden muss, um die gleiche fokale Länge zu erzielen. Außerdem ist in der Decel-Accel-Betriebsart eine Korrektur der sphärischen Aberration möglich (siehe Kap. 5.4). Überdies ist die gänzliche Reflektion der Teilchen durch das Feld der Linse möglich, wodurch sie als Filter eingesetzt werden kann (siehe Kap. 5.5) [85]. Für unsere Quelle, welche bereits über eine sehr kleine Strahldivergenz sowie Geschwindigkeitsfluktuation verfügt, überwiegen folglich die Vorteile des Decel-Accel-Modus. Neben diesem Betriebsmodus hängt die fokussierende Wirkung aber vor allem von dem speziellen Linsendesign ab. Welches Design für den von uns erzeugten Ionenstrahl das Beste ist, wird im nächsten Kapitel mit Hilfe numerischer Simulation untersucht.

5.2 Vergleich verschiedener Einzellinsen

Um die Eigenschaften einer Einzellinse zu optimieren, sind verschiedene Linsendesigns denkbar und wurden bereits für herkömmliche Ionenquellen bzw. Elektronenstrahlen diskutiert [84–89]. Angefangen vom Durchmesser der einzelnen Elektrodenaperturen, über die Breite und Form der Elektroden, bis hin zu den jeweiligen Abständen zwischen ihnen, tragen viele Parameter zu einer gut fokussierenden Linse bei. Zusätzlich gilt es jedoch, an die experimentelle Umsetzung zu denken, welche die freie Wahl des Designs ein wenig einschränkt.Insgesamt muss demnach ein Kompromiss zwischen bestmöglichen Eigenschaften und Realisierbarkeit gefunden werden.

Hierfür wurden im Laufe dieser Diplomarbeit eine große Anzahl an verschiedenen Linsenkonstruktionen entworfen und anhand von Simulationen untersucht. Am Wichtigsten ist es, die einzelnen Elektroden perfekt zueinander auszurichten, so dass eine vollkommen rotationssymmetrische Linse entsteht. Dies ist zwar im Bezug auf denkbare Designs keine große Einschränkung, jedoch bei der experimentellen Umsetzung mancher Elektrodenanordnungen und -formen nicht immer zu verwirklichen. Darüber hinaus ist eine hohe Spannungsstabilität notwendig, da die erzeugte Fokusebene und folglich der erzielte Spot beim gewählten Abstand stark davon abhängt. Natürlich muss die konstante Spannung zunächst von einer stabilen Versorgungseinheit gewährleistet werden. Diese konstante Spannung ist an den Elektroden aber nur dann gesichert, wenn sie voneinander elektrisch getrennt sind, was den Abstand zwischen den Elektroden aufgrund möglicher Isoliermaterialien begrenzt.

Abgesehen von diesen Einschränkungen bezüglich einer experimentellen Realisierbarkeit, gilt als erste Regel für die Linsenentwicklung: Je kleiner die Ausmaße der Einzellinse, desto besser ist ihre Fokussierwirkung. Die Verkleinerung der Linsendimensionen wird jedoch durch die Größe des Ionenstrahls begrenzt, da sphärische Aberrationsfehler der Linse umso stärker zum Tragen kommen, je kleiner der Unterschied zwischen Strahlund Elektrodendurchmesser wird. Für den von uns erzeugten Strahl wurde folglich ein Apertur-Durchmesser der ersten Elektrode von 1 mm gewählt. Hiermit konnten sehr gute
Spotgrößen simuliert werden, ohne eine zu große Spannung anlegen zu müssen, die experimentell kaum umsetzbar wäre. Weiterhin ist damit sicher gestellt, dass die extrahierten Ionen immer durch die Linse geschossen werden können. Weitere Verbesserungen der Linseneigenschaften können durch die Abstände der einzelnen Elektroden zueinander erzielt werden. Der Spalt zwischen den beiden ersten Linsenelektroden ist hierbei so schmal wie möglich zu wählen, der Spalt zwischen der zweiten und dritten hingegen sollte wesentlich größer sein, wobei z.B. der fünffache Durchmesser der Eingangsapertur als ausreichend groß angesehen werden kann. Für die Materialstärke der Elektroden gilt außerdem, dass eine dünne erste Elektrode den erzielbaren Spot verkleinert. Die Breite der dritten Elektrode hingegen macht sich nur weniger deutlich in den Spotgrößen bemerkbar und kann demzufolge den experimentellen Anforderungen angepasst werden. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit liegt in der Variation der Elektrodenform. Hier ist jedoch zu beachten: je komplizierter die Geometrie der Linse, desto schwieriger ist ihre exakte Umsetzung, beispielsweise durch leichte Ausrichtungsfehler. Die erzielte Steigerung der Eigenschaften in den Simulationen kann nach der experimentellen Umsetzung folglich verloren sein bzw. zu einer Verminderung der Fokussierung führen.

Aus der Vielzahl an unterschiedlichen Linsengeometrien, welche im Laufe dieser Diplomarbeit zur optimalen Anpassung der Linse an unsere Ionenquelle erdacht und untersucht wurden, sind in Abbildung 5.3 vier verschiedene Typen inklusive ihrer Abmessungen dargestellt. Zur Veranschaulichung des Einflusses des Linsendesigns ist zudem für jede der abgebildeten Linsen der erzielte 1σ -Spotradius für zwei Temperaturen dargestellt. Einerseits wurden die Spots für 2 mK gekühlte Ionen ermittelt, da im Experiment von einer solchen Temperatur ausgegangen wird, andererseits werden wie der der Untersuchung des Ionenstrahls nun die Spotgrößen für 100 μK kalte Ionen angegeben. Diese Temperatur stellt sozusagen eine Gültigkeitsgrenze dar, unterhalb der unsere Simulationen aufgrund der klassischen Teilchenbetrachtung ihre Aussagekraft verlieren. Des weiteren wurden für jede Linse die beiden Modi – Decel-Accel-Modus und Accel-Decel-Modus – angegeben, um deren Einfluss ebenfalls zu verdeutlichen. Nachdem die Ionen in unserem Strahl positiv geladen sind, wird die Linse für den Decel-Accel-Modus mit einer positiven Spannung versorgt, wohingegen an die Linse im Accel-Decel-Betrieb eine Spannung negativen Vorzeichens angelegt wird. Um die jeweilige Empfindlichkeit auf mögliche Geschwindigkeitsfluktuationen bzw. eine räumliche Ausdehnung des Strahls geben zu können, wurde zudem die Koeffizienten der chromatischen und sphärischen Aberration berechnet. Hierfür wurde die Spotgröße für einen Strahl ohne Geschwindigkeitsfluktuation sowie für einen mit äußerst



Abb. 5.3: Vergleich verschiedener Linsengeometrien, wobei für jeden Querschnitt die spannungstragende Elektrode braun, die beiden geerdeten hingegen blau dargestellt wurden. Die Ionen gelangen jeweils von links nach rechts durch die Linse und werden in der Fokusebene gesammelt (der hierbei angegebene Abstand wird vom Linseneingang aus gemessen).
(a) Einfachstes Einzellinsendesign(b) Eine von Septier [89] entwickelte, speziell geformte Linsengeometrie mit minimalen sphärischen Aberrationsfehlern. (c) Einzellinse mit einer konischen Form der zweiten Elektrode, welche ebenfalls die Aberrationsfehler verringert.
(d) Speziell auf unsere Ionenquelle abgestimmtes Linsendesign, welches zusätzlich an die experimentelle Realisierung angepasst wurde.

geringer Divergenz simuliert. Aus diesen konnten mit Hilfe der Formeln 5.17 und 5.18 die Aberrationskoeffizienten C_s und C_c berechnet werden.

Bereits eine einfache Linse, wie die in Abbildung 5.3 (a) gezeigt, ist in der Lage, den von uns erzeugten Ionenstrahl auf ungefähr 20 nm zu fokussieren. Bei dieser wurde, abgesehen von minimierten Elektrodenabständen, auf jegliche Optimierung des Designs verzichtet. Mit 100 μ K kalten Ionen sind dennoch Spotgrößen von 5 nm bzw. 3 nm möglich. Dies ist ein deutliches Indiz für die Qualität des Einzelionenstrahls. Weiterhin zeigt sich an dieser einfachen Linsengeometrie die bessere Fokussierwirkung im Accel-Decel-Betrieb aufgrund verminderter chromatischer Aberrationsfehler, welche jedoch eine äußerst große Spannung von -700 V benötigt. Der gewählte Elektrodenabstand von 50 μ m wäre zudem nur schwer umzusetzen, wenn eine vollständig isolierende Wirkung der einzubringenden Abstandshalter gewährleistet werden soll.

Die Linse in Abb. 5.3 (b) hingegen zeigt eine von Septier entwickelte Linse [89] mit speziell geformten und angeordneten Elektroden. Sie basiert auf einer Linse mit einer hyperbolischen Feldverteilung, da diese auch für schräg einfallende Strahlen gute Abbildungseigenschaften aufweist. Davon ausgehend wurde ihr Design auf Reduktion der sphärischen Aberration optimiert, was sich in den Aberrationskoeffizienten deutlich widerspiegelt. Jede der drei Elektroden hat eine unterschiedliche Form und einen unterschiedlichen Durchmesser der Blende, was wiederum eine experimentelle Umsetzung schwierig gestaltet. Die Wirkung kann damit aber im Vergleich zur einfachen Einzellinse aus Abb. 5.3 (a) um den Faktor 4 gesteigert werden, was vor allem von einer verbesserten sphärischen Aberration herrührt. Zudem sind wesentlich geringere Spannungen nötig, um zu den erwünschten Ergebnissen zu gelangen. Mit einem Strahl aus Ionen, welche in den Grundzustand gekühlt wurden, sind mit dieser Linse sogar 1σ -Spotradien von weniger als 1 nm möglich, was die sehr guten Strahlcharakteristiken unserer Ionenquelle erneut verdeutlicht. Aufgrund der komplexen Geometrie, den unterschiedlichen Durchmessern sowie den abgerundeten Elektrodenkanten, ist die Linse jedoch schwer experimentell umsetzbar bzw. wäre bei der Realisierung anfällig auf Ausrichtungsfehler.

Die dritte hier präsentierte Linse aus Abb. 5.3 (c) ist im Vergleich dazu einfacher zu realisieren und hat dennoch ähnliche Eigenschaften. Zwar bleibt der Spot im Sub-Nanometer-Bereich unerreicht, aber die Spotgröße von 1,1 nm ist dennoch wesentlich besser als die einer nicht optimierten Einzellinse. Die Verbesserung wird hierbei durch eine Vergrößerung des Abstandes zwischen der zweiten und dritten Elektrode auf knapp 5 mm erreicht. Überdies wurde die Mittelelektrode mit einem konischen Verlauf und die dritte

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

Elektrode mit einer größeren Blendenöffnung versehen. Letztere Optimierungen führen, ähnlich der Elektroden in Abb. 5.3 (b), zu einem kontinuierlicheren Potentialverlauf innerhalb der Linse und zu dem daraus resultierenden, kleineren Spot.

Nachdem aber auch hier aufgrund des konischen Verlaufs der Mittelelektrode die Gefahr für einen Versatz der einzelnen Elektroden zueinander größer ist, wurde die in Abb. 5.3 (d) gezeigte Geometrie für unsere experimentelle Umsetzung gewählt. Bei dieser weisen alle Elektroden den gleichen Innendurchmesser auf und können dadurch einfacher zueinander ausgerichtet werden. Zudem haben sie einen ausreichend großen Abstand voneinander, um die vollständige Isolierung in den benötigten Spannungsbereichen sicherzustellen. Die dritte Elektrode wurde so breit gewählt, dass es möglich ist, die gesamte Linse daran zu befestigen bzw. sie als Linsenhalterung in der Vakuumkammer zu verwenden. Trotz dieser Einschränkungen sind die mit Hilfe der Simulation vorhergesagten Spotgrößen von bis zu 1,2 nm weiterhin sehr gering. Vor allem der Wert für den Accel-Decel-Modus ist hier von Bedeutung, da dieser in unserem Experiment zum Einsatz kommt. Die Aberrationskoeffizienten sind zwar nicht so klein wie die der beiden Linsen vorher, jedoch ist keiner der beiden Werte besonders schlecht, wodurch die Aberrationsfehler der Linse nicht zu stark ins Gewicht fallen. Das entwickelte Design stellt somit einen sehr guten Kompromiss zwischen vorhergesagter Spotgröße und experimenteller Umsetzung dar. Die genauen Charakteristiken dieser Linse sowie deren experimentelle Realisierung werden in den nachfolgenden Kapiteln besprochen.

5.3 Charakterisierung der entwickelten Ionenlinse

Die Geometrie der gewählten Einzellinse ist möglichst einfach gehalten, um eine Ausrichtung der einzelnen Blenden so einfach und dadurch exakt wie möglich zu machen. Die Aperturen haben bei allen drei Elektroden einen Durchmesser von 1 mm. Die Breite der Elektroden beträgt 0,2 mm bei der ersten, 0,4 mm bei der zweiten und 1 mm bei der dritten Elektrode. Der Abstand zwischen den ersten beiden Elektroden ist mit 150 μ m ausreichend groß gewählt worden, um einen ausreichend gut isolierenden Abstandshalter realisieren zu können (siehe hierfür auch Kap. 5.7). Mit dem Abstand von 5,1 mm zwischen der mittleren und der letzten Elektrode weist die Linse insgesamt eine Länge von 6,85 mm auf. Mit 100 μ K gekühlten Ionen und im Accel-Decel-Betrieb mit einer Spannung von -170 V wird ein 1 σ -Spotradius von 1,2 nm in 7,33 mm Entfernung nach der ersten Linsenapertur erzielt (5,4 nm @ 2,0 mK). Für den in unserem Experiment vorgesehenen

5.3 Charakterisierung der entwickelten Ionenlinse



Abb. 5.4: Potentialverlauf der entwickelten Linse bei einer angelegten Spannung von 65 V. Die äußeren, geerdeten Elektroden sind grau, die an 65 V gelegte Mittelelektrode ist dunkelrot dargestellt.

Decel-Accel-Modus wird an die mittlere Elektrode eine Spannung von 65 V angelegt und damit ein 1σ -Spotradius von ebenfalls 1,2 nm bei 100 μ K gekühlten Ionen erzeugt (11,0 nm @ 2,0 mK). Die Fokusebene liegt hierbei 0,38 mm nach der letzten Elektrode.

Der in der Linse existierende Potentialverlauf im Decel-Accel-Betrieb ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Hier wird der starke Anstieg des Potentials ersichtlich, welcher auf der optischen Achse ein Maximum von ca. 60 V erreicht. Der Abfall des Potentials verläuft danach, aufgrund der weiter nach hinten versetzten Elektrode, wesentlich flacher und ist zudem über einen größeren räumlichen Bereich gestreckt. Dieser größere Potentialbereich erklärt folglich die kleineren Spannungswerte gegenüber einer kürzeren, symmetrischen Anordnung. Im Bereich der Mittelelektrode gleicht das Potential einer Satteloberfläche, bei der die beiden ansteigenden Flanken zu den Elektroden hinzeigen. Anhand der dreidimensionalen Darstellung des Potentials in Abb. 5.5 lässt sich die Wirkung der Linse nochmals verdeutlichen. Wie bereits oben erwähnt wurde, werden die Ionen zunächst von der optischen Achse weg defokussiert und abgebremst (worauf im Zuge der Aberrations-

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls



Abb. 5.5: Dreidimensionale Darstellung des Linsenpotentials. An die Mittelelektrode wurde hierfür eine Spannung von 65 V angelegt.

korrektur in Kapitel 5.4 noch genauer eingegangen wird). Nach Überquerung des Potentialsmaximums werden die Ionen wieder beschleunigt und in dem gewünschten Fokuspunkt gebündelt. Die Fokussierung im Decel-Accel-Modus der Linse beruht also auf den unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Ionen während der Durchquerung des Potentials. Die simulierten Trajektorien von ⁴⁰Ca⁺-Ionen während der Durchquerung der Linse, sowie der daraus resultierende Spot ca. 0,5 mm nach der letzten Elektrode, sind in Abbildung 5.6 (a) und (b) illustriert. Die Abbildung ist mit 2 mK gekühlten Ionen numerisch simuliert worden und verdeutlicht den 11 nm großen 1 σ -Spotradius. Ebenso wie die oben beschriebene Aufweitung des Ionenstrahls am Linseneingang, wird weiterhin deutlich, dass die Fokusebene für eine Spannung von 65 V direkt hinter der letzten Elektrode liegt. Das fokussierte Spot-Diagramm in Abbildung 5.6 (b) weist im Vergleich zu einem unfokussierten Spot-Diagramm, wie beispielsweise dem aus Abbildung 5.6 (b), eine Verteilung auf, die nicht eindeutig mit einer Gauß-Verteilung identifiziert werden kann. So wird zwar weiterhin mit der Angabe von 1 σ -Spotradien die Charakterisierung der Linse vorgenommen,



Abb. 5.6: (a) Simulierte Trajektorien der fokussierten ⁴⁰Ca⁺-Ionen, welche in der Falle auf 2 mK gekühlt waren. Die im Text beschriebene Aufweitung des Strahls am Eingang der Linse ist deutlich erkennbar. (b) Das resultierende Spot-Diagramm in einem Abstand von 0,48 mm nach der letzten Elektrode. Der blaue Ring veranschaulicht den erzielten 1σ-Spotradius von 11 nm.

jedoch ist darauf hinzuweisen, dass diese Angabe mit dem Radius gleichgesetzt werden kann, in welchem sich 68~% der fokussierten Ionen befinden.

5.3.1 Abhängigkeit von der lonentemperatur

Bei der Charakterisierung der Ionenfalle ist bereits der Einfluss der Temperatur auf die Strahldivergenz und die Geschwindigkeitsfluktuation untersucht worden. Ebenso ist es nun interessant, wie sich diese temperaturbedingten Strahleigenschaften auf die fokussierten Spots der Linse auswirken, um somit die Abhängigkeit von der Ionentemperatur zu bestimmen. In Abbildung 5.7 ist dieser Zusammenhang zwischen der Ionentemperatur in der Falle und den damit erzielbaren Spotradien dargestellt. Ein linearer Zusammenhang ist hieraus deutlich zu erkennen. Dies wiederum zeigt, dass weiterführende Kühlmethoden eine direkte Verbesserung des Auflösungsvermögens der Paul-Falle als Instrument zur Ionenimplantation zur Folge haben. Außerdem sind mit dieser hier vorgestellten, einfachen Einzellinse und einer reinen Dopplerkühlung bereits Bereiche von wenigen Nanometern zugänglich. 5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls



Abb. 5.7: Abhängigkeit der erzielbaren 1σ -Spotradien von der Temperatur der Ionen innerhalb der Falle. Die gestrichelte Linie verdeutlicht die Grenze von einem Nanometer.

5.3.2 Abhängigkeit von der Linsenspannung

Bisher wurden nur zwei Spannungswerte – eine für den Decel-Accel-Betrieb und eine für den Accel-Decel-Modus – angewandt und die erzielbaren Spotradien vorgestellt. In wie weit die oben angedeutete Spannung an der Mittelelektrode stabil sein muss, ohne dass der Spot an Präzision verliert, wird nachfolgend untersucht. Dass die Spots bei einer niedrigeren Spannung an der Mittelelektrode nicht mehr in derselben Fokusebene liegen, wird in Abbildung 5.8 deutlich. Die Simulationen zeigen jedoch auch, dass die Spotgröße über einen Spannungsbereich von ungefähr 20 V beinahe konstant bleibt. Die Spannung kann somit genutzt werden, um die Fokusebene in der Tiefe zu verändern und somit den Strahl exakt auf eine Probe zu fokussieren. Die einmal gewählte Spannung sollte jedoch anschließend möglichst konstant gehalten werden, da nur in der Fokusebene die bestmögliche Spotgröße erzielt wird. Wird der Strahlenverlauf (siehe Abb. 5.6 (a)) betrachtet, so ist erkennbar, dass ein um weniger als einen Millimeter aus der Fokusebene verschobener Spot bereits Spotradien im μ m-Bereich aufweist und folglich ein nanometergenaues Implantieren unmöglich machen würde. Eine eindeutige experimentelle Bestimmung der Lage der Fokusebene bei einer konstanten Spannung und anschließendem Bewegen der Probe, bei-



Abb. 5.8: Resultierende Spotgrößen in Abhängigkeit von der Linsenspannung. Die dabei entstandenen Fokusebenen sind farblich dargestellt und sind vom Linseneingang aus gemessen worden.

spielsweise durch einen x-y-z-Verschiebetisch mit Nanometer-Auflösung, ist für ein genaues Implantieren der Ionen folglich vorzuziehen.

5.3.3 Abhängigkeit von einem Strahlversatz

Mit Hilfe der Ablenkelektroden unserer Paul-Falle lässt sich der Strahl äußerst genau beeinflussen und somit auf die Achse der Linse ausrichten. Inwiefern dies für die Linsenwirkung ausschlaggebend ist, veranschaulicht Abbildung 5.9. Bereits ein Versatz des ankommenden Ionenstrahls am Linseneingang von 170 μ m aus der Mitte weitet den Spot nach der Linse auf einen Durchmesser von über 20 μ m auf. Mit größer werdendem Strahlversatz wird die bündelnde Wirkung nicht nur weiter geschwächt, sondern sogar ins Gegenteil verkehrt. Ein beispielsweise um 330 μ m verschobener Strahl wird von einem Spotradius von 16 μ m auf etwa 100 μ m - 150 μ m aufgeweitet. Dies zeigt zum einen erneut die enorme Bedeutung einer exakten Ausrichtung der Fallenachse zur optischen Achse der Ionenlinse. Zum anderen wird deutlich, wie wichtig die Ablenkelektroden für eine Feinjustage sind. Mit diesen kann der Strahl, nach einem groberen mechanischen Ausrichten exakt auf die Achse der Linse

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls



Abb. 5.9: Die Spotdiagramme zeigen eine starke Abhängigkeit von einem Versatz des Ionenstrahls aus der Blendenmitte. Die verschiedenen Farben verdeutlichen verschieden starke Abweichungen aus der Mitte. Die angegebenen Werte der Abweichungen beziehen sich auf den Linseneingang und in positiver x-Richtung.

gebracht werden. Zwar verschlechtert ein übermäßiger Einsatz der Ablenkelektroden die Strahlcharakteristiken, jedoch genügen für die Ablenkung um etwa 250 μ m bei der Linse bereits ungefähr 0,36 V an den Ablenkelektroden. Der dadurch leicht versetzte Spot vor der Linse weist eine geringfügige Vergrößerung von 16,1 μ m auf 17,2 μ m auf. Dies ist tolerabel, vor allem wenn die mit einem Versatz von 250 μ m verbundene Verschlechterung der Linsenwirkung in Betracht gezogen wird.

Insgesamt kann die entwickelte Ionenlinse im Decel-Accel-Modus trotz der einfachen Bauweise als sehr gut eingestuft werden, besonders im Falle eines möglichst exakt entlang der optischen Achse einfallenden Ionenstrahls. Eine weitere Verbesserung der Ergebnisse kann zudem mit Korrekturmechanismen bezüglich der Aberrationsfehler erzielt werden.

5.4 Korrektur der sphärischen Abberation

Nachdem die Geschwindigkeitfluktuation bereits bei Doppler-gekühlten Ionen (2 mK) äußerst gering ausfällt (simuliert: 1,3 m/s), wirken sich chromatische Aberrationsfehler der Linse weniger stark negativ aus. Außerdem zeigt die entwickelte Linse im Vergleich zu der von Septier (siehe Abb. 5.3 (b)), welche auf Reduzierung der sphärischen Fehler optimiert ist, etwas größere Spotradien. Demnach wurde bei der Korrektur von Aberrationen das Augenmerk auf die sphärischen Fehler der Linse gelegt. Diese lassen sich für unsere Ionenquelle besonders einfach minimieren. Neben der sehr genau definierten Geschwindigkeit der extrahierten Ionen spielt hierbei vor allem eine besondere Eigenschaft unserer Quelle eine wichtige Rolle: die Synchronisation des Extraktionsmomentes auf die Radiofrequenz-Phase. Dadurch wird ermöglicht, dass die Ionen während des gesamten Fluges in Raum und Zeit sehr genau definiert sind.

Mit dieser speziellen Qualität des deterministischen Extrahierens lässt sich das sog. Scherzer Theorem für elektrostatische Linsen umgehen [90]. Dieses Theorem besagt, dass für rotationssymmetrische, elektrostatische Einzellinsen in einem ladungsfreien Raum keine Korrektur der Aberrationsfehler möglich ist. Es ist – anders formuliert – unmöglich eine Linse mit divergierender Wirkung zu realisieren, welche z.B. in der photonischen Optik verwendet werden, um Fehler auszugleichen. Mit unserer Quelle kann eine der Prämissen des Theorems, die Elektrostatik, verworfen und somit das Theorem umgangen werden. Hierfür wird die Linse mit einem zeitabhängigen elektrostatischen Feld betrieben, wodurch beispielsweise auch divergierende Linsen realisiert werden könnten. Im Falle der Korrektur der sphärischen Aberration muss die Linsenspannung während der Durchquerung der Teilchen auf nachfolgend beschriebene Weise geändert werden [91]. Nach dem leichten Divergieren der Ionen zu Beginn des Linsenpotentials überschreiten sie dessen maximalen Punkt und werden anschließend fokussiert. Wird nun genau an diesem Umkehrpunkt der Bewegung die Spannung sehr schnell auf einen höheren Wert geschalten, erfahren die Ionen eine zusätzliche axiale Beschleunigung. Die weiter außen befindlichen Ionen erfahren, aufgrund ihrer Nähe zur Elektrode, eine stärkere Kraft als die Teilchen, welche sich näher an der optischen Achse der Linse befinden. Da diese aufgrund der sphärischen Aberration aber normalerweise die optische Achse früher kreuzen würden, kann die zusätzliche Beschleunigung den Aberrationsfehler ausgleichen. Der Potentialverlauf für solch ein geschaltetes Potential ist in Abb. 5.10 dargestellt. Der genaue Zeitpunkt der Schaltung muss allerdings, für eine akkurate Funktion der Korrektur, exakt definiert und die Schaltdauer so kurz

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls



Abb. 5.10: Potentialverlauf für die Korrektur der sphärischen Aberration. 210 ns nach dem Eintritt der Ionen in die Linse wird die Spannung an der Mittelelektrode (dunkelrot) von anfänglich 35 V auf 85 V geschalten.

wie möglich sein. Die bereits erwähnten Hochspannungsschalter unserer Versuchsanordnung haben Schaltzeiten im Bereich weniger Nanosekunden und sollten somit ausreichend schnell sein.

Der Schaltzeitpunkt sowie die Schaltspannungen müssen zudem an den jeweiligen Ionenstrahl angepasst werden. Beispielsweise ergeben Simulationen für den Strahl aus 2 mK gekühlten Ionen einen Schaltzeitpunkt von 170 ns nach dem Eintritt in die Linse. Diese wiederum sollte zunächst geerdet sein und anschließend auf 60 V geschalten werden. Der dadurch erzielte 1σ -Spotradius reduziert sich ungefähr um den Faktor 2 von 11 nm auf 6 nm. Dieselben Einstellungen verbessern die Spotgröße für grundzustandsgekühlte Ionen (100 μ K) von 1,2 nm auf 0,9 nm. Die größeren sphärischen Fehler unserer Linsengeometrie – gegenüber dem speziellen Design von Septier – können demnach gänzlich korrigiert werden. Für räumlich stärker aufgeweitete Ionenstrahlen vergrößert sich der Faktor der Verbesserung sogar noch weiter. Nach den in Kapitel 4 erläuterten Erkenntnissen sollte unsere Ionenfalle in der Lage sein, nach einer perfekten Ausrichtung der Fallen- zur Lin-



Abb. 5.11: Ausschnitt der simulierten Trajektorien im Bereich der Fokusebene. Für den einfallenden Strahl wurde ein 1σ-Spotradius von 36 µm gewählt (ähnlich dem von uns im Experiment erwarteten). In den ersten beiden Diagrammen (a) und (b) wurde die chromatische Aberration unterdrückt, um den Verbesserungeffekt der Korrektur der sphärischen Aberration hervorzuheben. (a) Der unkorrigierte Spot zeigt einen 1σ-Spotradius von 52 nm bei einer Linsenspannung von konstanten 65 V. (b) Im Gegensatz dazu weist der sphärisch korrigierte Spot eine 1σ-Spotgröße von lediglich 12 nm auf. Die Linse wurde hierfür nach 210 ns von 35 V auf 85 V geschalten. (c) Der korrigierte Spot des selben Strahls wie zuvor, jedoch wurde eine Geschwindigkeitsfluktuation von ca. 6 m/s hinzugefügt, was zu einer Vergrößerung des Spotradius auf 57 nm führt. Der Wert ist demnach hauptsächlich durch chromatische Fehler bedingt.

senachse, einen Strahl zu liefern, welcher um den Faktor 2,3 schlechter als der simulierte ist. Wird ein Strahl mit diesen Eigenschaften (ungefähr 6 m/s Geschwindigkeitsfluktuation, 19,5 km/s mittlere Geschwindigkeit und ein 1 σ -Spotradius von 36 μ m) mit einer unkorrigierten Linse mit 65 V an der Mittelelektrode fokussiert, so ergibt sich eine Spotgröße von 138 nm. Wird jedoch die sphärische Aberration ausgeglichen, kann der Spot auf 57 nm reduziert werden (siehe Abb. 5.11 (c)). Die Schaltzeit müsste hier auf 210 ns nach dem Eintritt in die Linse festgelegt werden, wobei zum Schaltzeitpunkt die Spannung von zunächst 35 V auf 85 V erhöht werden müsste. Wird zusätzlich der chromatische Fehler – also die Geschwindigkeitsfluktuation der Ionen – unterdrückt, indem alle Ionentrajektorien mit der gleichen Geschwindigkeit simuliert werden, ist sogar eine Spotgröße von 12 nm für die korrigierte Linse möglich (52 nm unkorrigiert; siehe Abb. 5.11 (a) bzw. (b)). Dies zeigt, dass mit dem vorgeschlagenen Verfahren die sphärischen Abberationsfehler der Linse deutlich minimiert werden können. Die resultierenden Spotgrößen beruhen demnach hauptsächlich auf der chromatischen Aberration. Diese wurde bisher nicht durch Simulationen auf eine Korrektur hin untersucht, es besteht jedoch ebenfalls die Möglichkeit, zeitlich ändernde Felder dafür einzusetzen [91].

5.5 Einzellinse als Flugzeit-Ionenfilter

Ein weiterer Einsatz der Schaltung des Linsenpotentials ist die Reflexion einzelner Ionen des Strahls. Dadurch kann die Linse als eine Art Ionenfilter eingesetzt werden, um die für die Implantation möglicherweise unwichtigen Kühlionen aus dem Strahl zu filtern. Abbildung 5.12 zeigt die Trajektorien von ⁴⁰Ca⁺-Ionen, die an dem Potential der Linse



Abb. 5.12: Potentialverteilung der Linse für die Reflexion der ⁴⁰Ca⁺-Ionen. Hierfür wurde die Mittelelektrode an 115 V gelegt.

reflektiert werden. Die minimal benötigte Reflexionsspannung der Linse beträgt hierbei 115 V, was lediglich 50 V über der Betriebsspannung liegt und folglich einfach geschalten werden kann. Somit können die in der Falle benötigten Kühlionen von den Dotieratomen auch nach der Extraktion getrennt werden. Auf diese Weise können Heizprozesse, welche bei einer Trennung der Ionen in der Falle enstehen [92], vermieden werden. Ein Stickstoff-Ion wird beispielsweise auf eine Geschwindigkeit von 36,17 km/s beschleunigt, d.h. es kommt ca. 4,3 μ s vor dem ⁴⁰Ca⁺-Ion an der Linse an. Die Linse kann folglich nach dem Passieren der Stickstoff-Teilchen auf die Reflexionsspannung von 115 V geschaltet werden, wodurch der Weg für das ⁴⁰Ca⁺-Ion versperrt ist. Demzufolge erfüllt die entwickelte Einzellinse nicht nur die Funktion einer exakten Fokussierung des Ionenstrahls, sondern dient gleichzeitig als Filter für die zur Implantation unbrauchbaren Ionen.

5.6 Nachbeschleunigung der Ionen

Bevor auf die experimentelle Realisierung der entwickelten Linse eingegangen wird, ist ein weiterer Vorteil der sehr genau definierten Positionen in Raum und Zeit unserer deterministischen Extraktion von Ionen zu nennen. Mit Hilfe einer einfachen Zylinderelektrode, welche mittig im Strahl platziert wird, lassen sich die Ionen nachbeschleunigen und gleichzeitig fokussieren. Simulationen sagen für einen Zylinder mit einem Innendurchmesser von 4,8 mm und für Ionen, die auf 100 μ K gekühlt wurden, einen 1 σ -Spotradius von lediglich 4 Å voraus. Die Zylinderelektrode muss hierfür zunächst an eine Hochspannung von 10 kV angeschlossen werden, was neben der Fokussierung zu einer Nachbeschleunigung auf über 200 km/s führt. Sobald das Ion im feldfreien Inneren des Zylinders ist, wird der Zylinder schnellstmöglich geerdet. Die Ionen werden somit auf ungefähr 8,3 keV beschleunigt. Zwar kann demnach eine Auflösung im Bereich weniger Å erreicht werden, die Schaltzeiten müssen hingegen aufgrund der erhöhten Geschwindigkeiten noch präziser und kürzer sein. Desweiteren geht der Gewinn an räumlicher Präzision teilweise durch den Implantationsprozess selbst und die dabei auftretenden Straggling-Effekte wieder verloren. Mit größer werdenden kinetischen Energien macht sich nämlich ebenso die Streuung der Dotierionen im Material während des Abbremsprozesses stärker bemerkbar. Beispielsweise würden Stickstoff-Ionen, die auf 2 MeV beschleunigt werden, zwar 1 μ m unter die Oberfläche von Diamant gelangen, ihre Position ist aufgrund von lateralem Straggling um 0,07 μ m nicht mehr auf wenige Nanometer festzulegen [93]. Bei den hier genannten Nachbeschleunigungen auf wenige keV ist dieser negative Effekt zwar nicht ganz so stark zu erwarten, jedoch ist die Verbesserung des Spots bereits mit einem Straggling von nur einem Nanometer bereits zunichte gemacht. Bei den im Experiment erzeugten Ionen mit etwa 80 eV (19,47 km/s) kinetischer Energie ist ein Straggling, aufgrund einer erwarteten Eindringtiefe von etwa ein bis zwei Atomlagen, äußerst gering einzuschätzen. Ein optimaler Kompromiss aus verbesserter Fokussierung durch Nachbeschleunigung und

5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

verschlechternden Stragglingeffekten gilt es somit zukünftig zu bestimmen².

5.7 Experimentelle Realisierung

Zum Abschluss wird die experimentelle Realisierung der im Laufe dieser Diplomarbeit entwickelten und charakterisierten Einzellinse beschrieben. In Abbildung 5.13 (a)-(h) sind die





Abb. 5.13: Fotos der realisierten Einzellinse. (a) 1. Elektrode, (b) 2. Elektrode, (c) Abstandshalter,
(d) 3. Elektrode, (e) Montageschrauben, (f) Stift zur Ausrichtung der Elektroden,
(g) Kapton-Isolierung zwischen Elektrode 1 und 2, (h) Kapton-Isolierung zwischen Elektrode 2 und Abstandshalter, (i) Zusammengesetzte Linse mit Größenvergleich.

einzelnen Bauteile der Linse zu sehen. Jede Elektrode besteht aus Edelstahl und weist die jeweilige Materialstärke und einen Innendurchmesser von 1 mm auf. Der Außendurchmesser wurde, bezüglich der Einbaumaße der Halterung in der Vakuumkammer, größtmöglich gewählt und beträgt 27 mm. Die dritte und letzte Elektrode dient hierbei zusätzlich als Träger und weist die dafür notwendige Form auf. Der Abstand zwischen Elektrode zwei und

²Hierfür kann beispielsweise das Programm SRIM (vom engl. Ausdruck: The Stopping and Range of Ions in Matter) von James Ziegler angwendet werden. Für weitere Information bezüglich des Programms, siehe http://www.srim.org/

drei wird durch einen ebenfalls leitenden Abstandshalter aus Edelstahl gesichert. Dieser weist einen Innendurchmesser von 20 mm auf und schließt direkt an die dritte Elektrode an, worüber er folglich ebenfalls geerdet ist. Die Isolierung zwischen den Elektroden 1 und 2, sowie zwischen Elektrode 2 und dem Abstandshalter, wird durch eine 50 μ m dicke Kaptonfolie erzeugt. Diese wurde für jede Isolierzwischenschicht dreifach genommen,

wodurch ein Abstand von 150 μ m entsteht. Die Isolierung wurde vor dem Einbau auf eine Spannung von bis zu 200 V geprüft. Um eine möglichst perfekte Ausrichtung der drei Elektroden zueinander zu gewährleisten, wurde ein passgenauer Stift angefertigt, welcher bei der Montage durch die drei Aperturen gesteckt werden kann und damit für eine symmetrische Anordnung sorgt. Die einzelnen Elektroden werden mit vier Schrauben zusammengehalten, welche gleichzeitig die erste Elektrode mit der dritten kontaktieren und somit für deren Erdung sorgen. Die Spannung für die Einzellinse wird über eine Vakuumdurchführung direkt an die zweite Elektrode geführt. In der Va-



Abb. 5.14: 3D-Konstruktionszeichnung inkl. halbdurchsichtigem Ausschnitt.

kuumkammer befindet sich hinter der Linse weiterhin der Piezo-Schlitten und der Detektor, welcher die Ionen nach erfolgreicher Durchquerung des Linsenpotentials registriert. Außerdem wurde für eine erste, einfache Vermessung des mit der Linse erzeugten Spots eine Rasierklinge auf dem Piezo-Schlitten montiert. Während der Messung der Detektionsrate kann diese in nm-Schritten in den Spot gefahren werden, um dadurch erste Aussagen über die erzeugte Spotgröße machen zu können. Eine exakte Bestimmung der Spotgröße mit Hilfe anspruchsvollerer Verfahren gilt folglich als der nächste Schritt auf dem Weg zu der ersten deterministischen Implantation einzelner Ionen mit einer Auflösung im Nanometer-Bereich. 5 Ionenoptik zur Fokussierung des Ionenstrahls

6

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die lineare Paul-Falle als deterministische Einzelionenquelle experimentell und anhand von numerischen Simulationen vollständig charakterisiert. Hierbei

zeigte sich, dass eine möglichst geringe Temperatur der Ionen in der Falle ebenso Einfluss auf eine optimale Funktion der Ionenquelle hat, wie die für den Extraktionszeitpunkt gewählte Phase der RF-Spannung und die Position der Ionen. Die negativen Auswirkungen werden hierbei durch das Verwenden der Ablenkspannungen zusätzlich deutlich verstärkt. Um deren Verwendung zu minimieren, wird für zukünftige Messungen eine Vorrichtung zur mechanischen Bewegung der Detektorkammer während des laufenden Betriebs im Versuchsaufbau implementiert (siehe Abb. 6.1). Experimentell wurde die Geschwindigkeitsfluktuation mit Hilfe eines



Abb. 6.1: Apparatur zur Ausrichtung der Detektorkammer.

verbesserten Phasentriggers weiter verringert und ist mit einem Wert von 6,3 m/s bei

6 Zusammenfassung und Ausblick

einer mittleren Geschwindigkeit von 19,47 km/s äußerst gering. Die Strahldivergenz wurde zudem anhand von Extraktionen durch unterschiedlich große Aperturen vermessen. Bei einer im Strahlengang befindlichen Blende mit 1 mm Durchmesser wurden knapp 90 % der extrahierten Ionen erfolgreich detektiert. Bei Messungen mit einer 300 μ m Blende wurde eine Abnahme der Extraktionsrate auf 68,6 % festgestellt. Um mit einer Auflösung von wenigen Nanometern implantieren zu können, wurde zudem eine auf die Quelle angepasste Ionenlinse entwickelt und ebenfalls anhand von Simulationen charakterisiert. Vorhergesagte Spotgrößen im Bereich weniger Nanometer sind hierbei vielversprechende Ergebnisse. Die entwickelte Linse wurde bereits realisiert und in die Detektorkammer eingebaut. Der nächste Schritt besteht somit darin, die prognostizierte Fokussierung experimentell nachzuweisen.



Abb. 6.2: Nano-Apertur. [60]

Für eine exakte Bestimmung von einzeln platzierten bzw. extrahierten Ionen bieten sich zwei verschiedene Wege an. Zunächst kann auf eine ähnliche Weise wie bisher versucht werden, durch eine Blende zu schießen, um dadurch die Auflösung auf direktem Weg zu bestimmen. Blendendurchmesser mit wenigen Nanometern Durchmesser sind hierfür bereits verfügbar [60, 62]. Mit Hilfe eines hochenergetischen Gallium-FIB wird beispielsweise in eine AFM-Spitze aus SiN ein Loch gebohrt. In dem Moment, in dem die Ionen das Material vollständig durchbohrt haben und einen Transmissionsstrom erzeugen, wird der FIB

abgeschaltet. Die dabei entstandene Blende ist an einer Öffnungsseite ungefähr 140 nm breit, auf der anderen hingegen weniger als 30 nm (siehe Abb. 6.2). Diese Nano-Apertur könnte somit im Strahlengang unserer Ionenquelle die erzeugte Spotgröße auf 30 nm genau vermessen.

Ein weiterer möglicher Ansatz ist der Nachweis des Auflösungsvermögens durch implantierte Ionen. Für diese indirekte Bestimmung der Auflösung bieten sich zum Beispiel die zu Beginn der Arbeit erwähnten Farbzentren in Diamant an. Ihre hohe Leuchtkraft ermöglicht das Auffinden der implantierten Ionen und die exakte räumliche Vermessung kann durch die gegenseitige Kopplung der implantierten Teilchen auf ca. 5 nm genau bestimmt werden [93]. Die Herausforderung liegt hierbei darin, die Erzeugungseffizienz von Farbzentren aus eingebrachten Stickstoff-Ionen trotz niedriger Implantationsenergien zu erhöhen, ohne deren Position und demzufolge die erzielte Auflösung zu verfälschen. Ebenfalls indirekt, d.h. nach einer Implantation, kann die erzielte Fokussierwirkung der Linse

mit Hilfe eines STM nachgewiesen werden. Teilchen, die sich knapp unter der Oberfläche einer Kupferprobe befinden, können mittels einer STM-Spitze aufgespürt werden [95]. Die von der Spitze in das Material getunnelten Elektronen werden an den Teilchen gestreut und teilweise zurück an die Oberfläche reflektiert. Dort ergeben sich aufgrund der Rückreflexion Interferenzmuster, welche mit dem STM gemessen werden können (siehe Abb. 6.3). Absolut reines Kupfer mit einer äußerst planen Oberfläche ist hierbei die Voraussetzung für einen Erfolg.



Abb. 6.3: STM-Messung (a) ohne und (b) mit Fremdatom unter der Oberfläche. [94]

Neben der Vermessung der durch die Linse erzeugten Fokusgröße sind außerdem das gezielte Laden und Extrahieren von Fremdionen mit Hilfe des gepulsten Lasers weiter vor-

anzutreiben. Nur somit kann das zu Beginn der Arbeit gesteckte Ziel einer universell einsetzbaren Paul-Falle als deterministisches Implantierwerkzeug einzelner Ionen, die zudem eine Auflösung von wenigen Nanometern aufweisen soll, erfüllt werden. Als Abschluss dieser Diplomarbeit soll als Ansporn für die zukünftigen, experimentellen Herausforderungen, eine Aussage John Bells genannt werden. Ebenso kann mit diesen Worten eine passende Erwiderung auf die eingangs erwähnte Aussage Schrödingers bezüglich der Unmöglichkeit von Experimenten mit einzelnen Teilchen gegeben werden:

"... what is proved by impossibility proofs is lack of imagination." [102] John Bell 6 Zusammenfassung und Ausblick



Schaltplan des Delay-Phasentriggers

Für die Extraktion der Ionen aus der Falle wurde ein Signal benötigt, das mit der Phase der Radiofrequenz synchronisiert ist. Der dafür eingesetzte Phasentrigger wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit weiterentwickelt. Das TTL-Signal vom Labor-Computer wird mit Hilfe der nachfolgenden Schaltung um eine einstellbare Zeitspanne nach dem Nulldurchgang der RF-Spannung verzögert. Außerdem wird das TTL-Signal zur Triggerung der Extraktionsspannung nur für einen Zeitraum von wenigen ms an die HV-Schalter gegeben, so dass die Spannung von 500 V nur für sehr kurze Zeit auf die Elektroden der Falle durchgeschaltet ist. Die Genauigkeit der nachfolgenden Schaltung wurde experimentell gemessen und ergab eine Standardabweichung von 0,34 ns.



A Schaltplan des Delay-Phasentriggers

Simulationsprogramm

Für sämtliche in dieser Arbeit präsentierten Simulationen wurde ein in unserer Gruppe entwickeltes Programm verwendet, welches speziell für unsere Anforderung optimiert ist. Die Berechnung von Potentialen und Feldern, die von Strukturen mit Abmessungen von mehreren Zentimetern, erzeugt werden, ist sozusagen die Grundlage, dass Ionenfallen und deren Potentiale simuliert werden können. Dennoch muss das Programm eine Genauigkeit aufweisen, dass damit Ionentrajektorien, welche sich auf einer Nanometer-Skala bewegen, berechnet werden können. Zusätzlich sollten die Berechnungen eine Rechenleistung und Zeitdauer in Anspruch nehmen, die das Vorhaben nicht auf teure, schnelle Großrechner beschränkt bzw. mehrere Tage andauert. Kommerzielle Programme sind für die eben genannten Anforderungen nicht verfügbar. Die Potentialberechnung bedient sich hierbei der BEM-Methode (vom engl. Ausdruck Boundary Element Method), welche durch einen FFM-Algorithmus (vom engl. Ausdruck Fast Multipole Method) beschleunigt wird. Zusätzlich werden Symmetrien der betrachteten Geometrien berücksichtigt. Ist das Potential berechnet, werden die darin möglichen Ionentrajektorien mit Hilfe des Verletschen Integrationsverfahren einfach und effektiv simuliert.

B Simulationsprogramm

BEM - Boundary Element Method: Die BEM ist eine numerische Methode, die zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen (pDGL) verwendet wird [96,97]. Zu dieser Sorte von Differentialgleichungen gehört auch die Laplace-Gleichung

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}) = 0, \tag{B.1}$$

mit welcher physikalische Fragestellungen der Elektrostatik beschrieben werden können. Bei der BEM wird zunächst diese pDGL in eine Integralgleichung der Grenzfläche umgeschrieben und darauffolgend diskretisiert. Das Ergebnis bleibt aber mathematisch äquivalent zur ursprünglichen pDGL. Für die dreidimensionale Laplace-Gleichung kann die sogenannte Green's Funktion $G(\vec{x}, \vec{y})$ angegeben werden, welche den Einfluss eines Punktes des Gebiets bei \vec{y} auf den Punkt \vec{x} auf der Grenzfläche beschreibt [98]:

$$G(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi r}, \quad \text{mit} \quad r = |\vec{x} - \vec{y}|.$$
 (B.2)

Mit Hilfe der zweiten Greenschen Identität kann für die Green's Funktion $G(\vec{x}, \vec{y})$ und das Potential Φ geschrieben werden

$$\int_{V} (G(\vec{x}, \vec{y}) \nabla^2 \Phi - \Phi \nabla^2 G(\vec{x}, \vec{y})) \mathrm{d}V = \int_{S} \left[G(\vec{x}, \vec{y}) \frac{\partial \Phi}{\partial n} - \Phi \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y})}{\partial n} \right] \mathrm{d}S.$$
(B.3)

Hierbei steht V für das betrachtete Volumen, S für die Grenzfläche des Volumens und $\partial/\partial n$ für die Ableitung in die Richtung der nach außen gerichteten Normalen. Nach weiteren Umformungen bzw. Umstellungen kann daraus die Integralgleichung der Grenzfläche erhalten werden

$$\frac{1}{2}\Phi\vec{x} = \int_{S} [G(\vec{x}, \vec{y})q(\vec{y}) - F(\vec{x}, \vec{y})\Phi(\vec{y})] \mathrm{d}S(\vec{y}), \tag{B.4}$$

wobei gilt

$$q(\vec{y}) = \frac{\partial \Phi(\vec{y})}{\partial n(\vec{y})} \quad \text{und} \quad F(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y})}{\partial n(\vec{y})}.$$
 (B.5)

Bei der BEM müssen somit im anschließenden Diskretisierungsschritt nur die Grenzflächen in konstante Elemente unterteilt werden und nicht das gesamte Volumen, was einer effektiven Erniedrigung der Dimension des Problems um den Wert 1 entspricht. Durch die Unterteilung des Randes in kleine Gitterstücke ΔS_j kann die Integralgleichung in eine Matrix-Vektor-Form gebracht werden. Für N Elemente gilt

$$\sum_{j=1}^{N} f_{ij} \Phi_j = \sum_{j=1}^{N} g_{ij} q_i, \quad \text{für} \quad i = 1, 2, ..., N,$$
(B.6)

wobei

$$g_{ij} = \int_{\Delta S_j} G(\vec{x}_i, \vec{y}) \mathrm{d}S(\vec{y}), \qquad (B.7)$$

$$f_{ij} = \frac{1}{2}\delta_{ij} + \int_{\Delta S_j} F(\vec{x}_i, \vec{y}) \mathrm{d}S(\vec{y}).$$
(B.8)

Durch Umstellen nach den unbekannten Randwerten λ ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$A\lambda = b \tag{B.9}$$

mit einer Koeffizientenmatrix A, bei der jeder Eintrag für die Wechselwirkung zwischen einem Quellpunkt \vec{x} und einem Punkt des Gebiets \vec{y} , und dem bekannten Vektor b auf der rechten Seite steht. Die dafür benötigten numerischen Berechnungsschritte und der Speicherbedarf skalieren folglich bei einem reinen BEM-Verfahren mit $O(N^2)$, was den Algorithmus für große Maßstäbe langsam und ineffizient macht. Dieses Problem wurde in unserem Programm durch die sog. Fast Multipol Methode behoben.

FMM - **Fast Multipole Methode:** Bei der FMM wird eine starke Reduktion der Rechenzeit und des Speicherbedarfs dadurch ermöglicht, dass das Randelementgitter in einen Nahfeld- und einen Fernfeldanteil aufgespalten wird [98–100]. Nur für den Nahfeldanteil wird die Lösung durch die herkömmliche Auswertung der Green's Funktion berechnet. Im Fernfeldanteil werden die Randelemente in verschiedene Cluster eingeteilt und in der Struktur eines Baumes organisiert. Auf jeder Ebene des Clusterbaumes wird ein Nahfeldbereich definiert, indem festgelegt wird, wie groß der Abstand der Cluster dafür sein darf. Alle wichtigen Berechnungen werden nur auf der untersten Ebene, der sog. Blattebene durchgeführt. Anschließend werden die Ergebnisse zwischen verschiedenen Ebenen ausgetauscht, wobei die eigentliche Multipol-Zerlegung nur für eine kleine Anzahl an Clustern gemacht werden muss.

Mathematisch bedeutet dies, dass die Green's Funktion B.2 und deren Richtungsableitung aus Gleichung B.5 bzw. die beiden Integralgleichungen B.7 und B.8 in harmonische Kugelfunktionen und deren Legendre-Polynome entwickelt werden müssen. Mit den Additionstheoremen der Kugelfunktionen lassen sich dann die benötigten Translations- bzw. Konvertierungsoperatoren bilden.

Der Algorithmus selbst wird in drei Phasen durchgeführt [100]: Initialisierung: Es wird eine geeignete Wahl der entscheidenden Parameter festgelegt und

B Simulationsprogramm

die hierarchische Clusterstruktur erzeugt. Zu den Parametern zählen ein Abstandsparameter, der Entwicklungsgad der Multipolentwicklung, und die maximale Verfeinerungsstufe, d.h. wie viele Ebenen der Baumstruktur maximal entstehen sollen.

Aufwärtsdruchlauf: Hier erfolgt die Berechnung der Multipol-Entwicklung für die Cluster jeder Stufe. Zunächst wird für jedes Cluster der Blattebene die Multipol-Entwicklung des Potentialfeldes berechnet. Anschließend wird in der Struktur levelweise aufgestiegen und die Multipolentwicklung der nächsthöheren Ebene berechnet, indem die Summe der in das Zentrum verschobenen Entwicklungen der darunterliegende Ebene berechnet wird. Abwärtsdurchlauf: In diesem Durchlauf werden die Interaktionen auf der feinstmöglichen Stufe berechnet. In einer sog. lokalen Entwicklung bezüglich eines Mittelpunktes jedes Clusters, wird das Feld beschrieben, welches von Teilchen aus dem Fernbereich ausgeht. Dieser Vorgang wird absteigend bis hin zur feinsten Ebene vollzogen, wobei die jeweils berechneten lokalen Entwicklungen der Cluster in die Mittelpunkte der darunterliegenden Ebenen verschoben werden. Stehen nun alle lokalen Entwicklungen auf der Blattebene zur Verfügung, kann das Potential der im Fernfeld liegenden Teilchen berechnet werden. Zuletzt wird noch für alle Teilchen das Potential des Nahbereichs zum Multipol-Anteil des Fernfeldes addiert und man erhält das gesuchte Ergebnis.

Insgesamt kann mit diesem Algorithmus eine Effizienz erreicht werden, bei der die benötigten numerischen Berechnungsschritte und der Speicherbedarf mit lediglich O(N)skalieren. Für zusätzliche Beschleunigung unseres Simulationsprogrammes werden darüber hinaus Symmetrieeigenschaften des berechneten Objekts berücksichtigt. Die Berechnung der Fallenpotentiale konnte somit innerhalb weniger Stunden durchgeführt werden. Das Einlesen der Linsengeometrie in das Simulationsprogramm benötigte aufgrund der einfacheren Struktur sogar nur ungefähr eine Stunde. Die Potentiale konnten anschließend durch virtuelles Anlegen der gewünschten Spannung erzeugt werden, für die Bewegung der Ionen musste hingegen ein zusätzliches Verfahren in das Programm eingebaut werden.

Verletsche Intergrationsmethode: Bei dem Verletschen Integrationsverfahren handelt es sich um ein Verfahren, mit dem einfach und effizient Teilchenbewegungen in eine Potential bzw. Kraftfeld berechnet werden können [101].

In der Verletschen Methode wird die Zeit in diskrete Schritte $\Delta t = h$ unterteilt, aus welchen sich dann die jeweiligen räumlichen Koordinaten bzw. die Geschwindigkeiten errechnen lassen. Angenommen die zu Beginn festgelegte Zeitdauer beträgt $t_n = nh$, so lässt sich folglich jede Position \vec{x}_n und Geschwindigkeit \vec{v}_n berechnen. Für die Herleitung des Verlet-Algorithmus soll zunächst die Taylor-Entwicklung der Ortsfunktion betrachtet werden:

$$\vec{x}(t\pm h) = \vec{x}(t) \pm \dot{\vec{x}}(t)h + \frac{1}{2}\ddot{\vec{x}}(t)h^2 \pm \frac{1}{6}\vec{x}^{(3)}(t)h^3 + O(h^4)$$
(B.10)

Werden nun die beiden Gleichungen für $\vec{x}(t+h)$ und $\vec{x}(t-h)$ addiert, so erhält man:

$$\vec{x}(t+h) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t-h) + \ddot{\vec{x}}(t)h^2 + O(h^4)$$
(B.11)

Dieser Ausdruck ist für jede ausreichend oft differenzierbare Funktion $\vec{x}(t)$ gültig. Außerdem gilt für eine klassische Bewegung eines Teilchen der Ladung q im Feld \vec{E}

$$\ddot{\vec{x}} = \frac{\vec{F}(t)}{m} = \frac{q\vec{E}(x(t))}{m}.$$
(B.12)

Wenn nun die Terme der vierten Ordnung und höher vernachlässigt werden und dies in Gleichung B.11 eingesetzt wird, gelangt man zum Verlet-Algorithmus. Da dieser Algorithmus stabil ist, d.h. die gemachten Fehler sich mit fortschreitender Entwicklung verkleinern, lässt sich mit Hilfe zweier vorhergehender Zeitschritte der dritte berechnen. Desweiteren können die Trajektorien durch Verbinden der diskret berechneten Position nachgezeichnet werden. Auf einem ähnlichen Weg lässt sich anschließend der Ausdruck für die Geschwindigkeit ermitteln

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{x}(t+h) - \vec{x}(t-h)}{2h} + O(h^4), \tag{B.13}$$

woraus sich der gesamte Verlet-Algorithmus zur Berechnung von geladene Teilchen in elektrischen Feldern – in unserem Fall Ionen in der Falle bzw. während der Extraktion – ergibt. Die Verlet-Methode ist trotz der Vernachlässigung der Terme der vierten Ordnung ausreichend exakt, was die, in dieser Arbeit präsentierten, Ergebnisse widerspiegeln. Dennoch ist stets zu beachten, dass es hierbei um eine rein klassische Teilchenbewegungen handelt, hingegen grundzustandsgekühlte Ionen als Wellenpakete betrachtet werden müssten und demzufolge quantentheoretische Effekte aufweisen können.

B Simulationsprogramm

Wissenschaftliche Publikationen

C.1 Physical Review Letters

Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit

W. Schnitzler, N. M. Linke, R. Fickler, J. Meijer, F. Schmidt-Kaler, Kilian Singer. Veröffentlicht am 19 February 2009 für die Fachzeitschrift: Physical Review Letters

(Ausgabe: 102 / Seite: 070501 / Jahrgang: 2009)

PRL 102, 070501 (2009)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending 20 FEBRUARY 2009

Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit

W. Schnitzler,¹ N. M. Linke,¹ R. Fickler,¹ J. Meijer,² F. Schmidt-Kaler,¹ and K. Singer^{1,*} ¹Institut für Quanteninformationsverarbeitung, Universität Ulm, Albert-Einstein-Allee 11, 89081 Ulm, Germany[†] ²RUBION, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, Germany (Received 26 September 2008; revised manuscript received 2 December 2008; published 19 February 2009)

The major challenges to fabricate quantum processors and future nano-solid-state devices are material modification techniques with nanometer resolution and suppression of statistical fluctuations of dopants or qubit carriers. Based on a segmented ion trap with mK laser-cooled ions we have realized a deterministic single-ion source which could operate with a huge range of sympathetically cooled ion species, isotopes or ionic molecules. We have deterministically extracted a predetermined number of ions on demand and have measured a longitudinal velocity uncertainty of 6.3 m/s and a spatial beam divergence of 600 μ rad. We show in numerical simulations that if the ions are cooled to the motional ground state (Heisenberg limit) nanometer spatial resolution can be achieved.

070501-1

DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.070501

The miniaturization of semiconductor devices has reached length scales of a few tens of nanometers, where statistical Poissonian fluctuations of the number of doping atoms in a single transistor significantly affect the characteristic properties, e.g., gate voltage or current amplification [1]. Further miniaturization will even cause statistical device failure. Particularly fatal are statistical dopant fluctuations for a future solid state quantum processor based on single implanted qubit carriers like color centers in diamond or phosphorous dopants in silicon [2-5]. So far, the only known methods to control the number of dopants utilize statistical thermal sources followed by a postdetection of the implantation event, either by the observation of Auger electrons, photoluminescence, phonons, the generation of electron-hole pairs, or changes in the conductance of field effect transistors [6-10]. To make the detection of such an event successful the methods require either highly charged ions or high implantation energies which, as a down side, generate defects in the host material. In these systems resolutions of less than 10 nm are achieved by means of masks and apertures shielding the substrate from incident ions and leading to compulsory losses of dopants. Another fabrication method, specific for Si surfaces, uses hydrogen terminated surfaces structured with the tip of a tunneling microscope, followed by a chemical reactive surface binding of doping atoms [11-15]. With this technique sub-nm resolution can be achieved but the applicability is mainly limited to specific substrates and impurities in the background gas can cause severe impairment.

Here, we present the experimental proof of a novel ultracold ion source which can be used for the deterministic implantation of a predetermined number of single ions [16]. Our technique is based on a segmented linear Paul trap with laser-cooled ⁴⁰Ca⁺ ions similar to setups used for scalable quantum information processing with ions [17]. Additionally loaded doping ions of different elements or ionic molecules cannot be directly laser cooled but could be sympathetically cooled by ⁴⁰Ca⁺ ions. Although invis-

0031-9007/09/102(7)/070501(4)

PACS numbers: 03.67.-a, 29.25.Ni, 81.16.Rf, 85.40.Ry

ible to the laser light they are still identified [18,19] and counted by exciting collective vibrational modes. Our segmented ion trap allows for the separation of the cooling ion from the dopant ion, which is finally extracted by a tailored electric field. The implantation method is in principle independent of the dopant species and the target substrate. For 2 mK laser-cooled ions accelerated to 80 eV the measured longitudinal velocity distribution shows a 1σ spread of 6.3(6) m/s [20] and a spatial 1σ -spot radius of $83(\frac{+8}{3}) \ \mu\text{m}$ at a distance of 257 mm (beam divergence: 600 $\ \mu\text{rad}$). These properties reduce chromatic and spherical aberration of any focusing ion optics. The resolution of our system is thereby not enforced by additional masks or apertures but is an intrinsic property of our setup.

The core of the experimental setup is a Paul trap—a universal tool for trapping charged particles such as atomic and molecular ions or charged clusters using a combination of static (dc) and alternating (rf) electric fields. A pseudopotential of a few eV depth is generated with a properly chosen rf amplitude and frequency Ω .

For our application it is necessary that the ions arrange as a linear crystal such that they can be identified and counted using laser induced fluorescence. During the extraction we apply voltages to additional dc segments tailoring the axial potential. In a conventional linear segmented Paul trap this would lead to a loss of the radial confinement because the applied extraction potential exceeds the radial pseudopotential. We have developed a special design of our trap, in which the ions are radially guided even during the axial extraction. Our trap consists of four copper plated polyimide blades of 410 μ m thickness and 65 mm length which are arranged in a x-shaped manner [21] (see Fig. 1 for a schematic view). The rf is applied to the inner front faces of two opposing blades; the front faces of both other blades are grounded. The distance between inner front faces of opposing blades is 2 mm. dc voltages are applied to eight segments of 0.7 mm width which are placed on the top and bottom areas of all four blades. Under typical

© 2009 The American Physical Society



FIG. 1. (a) Sketch of the segmented linear Paul trap with dc electrodes (white) and rf electrodes (dark grey). Deflection electrodes (light gray) are used to alter the trajectories of ions which are extracted out of the trap. (b) Front view showing that rf and rf-ground electrodes (generating the radial confinement) are only covering the two 410 μ m wide front faces of the blades.

operating conditions we apply to the rf electrodes an amplitude of 200 V at the frequency of $\Omega/2\pi$ 12.155 MHz leading to a radial secular frequency $\omega_{\rm rad.}/2\pi = 430$ kHz for a ${}^{40}{\rm Ca^+}$ ion. The dc-electrode trap segments 2 and 8 are supplied with 35 V and the remaining electrodes with 0 V resulting in an axial potential with $\omega_{ax}/2\pi = 280$ kHz. The location of trapped ions is above electrode 5. The trap assembly is housed in a stainless steel vacuum chamber with enhanced optical access held by a turbomolecular pump and an ion-getter pump at a pressure of 3×10^{-9} mbar. Ions are illuminated by resonant laser light near 397 and 866 nm for Doppler cooling. Scattered photons are collected by a f/1.76 lens on a EMCCD camera to image individual ⁴⁰Ca⁺ ions; see Figs. 2(a)-2(c). From the width of the laser excitation spectrum on the $S_{1/2}$ - $P_{1/2}$ laser cooling transition, we deduce a temperature of about 2 mK slightly above the Doppler cooling limit.

Calcium and dopant ions are generated in a multiphoton ionization process by a pulsed frequency tripled Nd-YAG laser at 355 nm with a pulse power of 7 mJ. Dopant ions are sympathetically cooled and identified from the voids in the fluorescence image compared to that of a regular linear ⁴⁰Ca⁺ crystal. Figure 2(d) shows the fluorescence of an ion crystal consisting of a single ⁴⁰Ca⁺ and two molecular CaO+ ions resulting from a chemical reaction with background residual gas [18]. We identify the species of dark ions by exciting collective vibrational modes with an ac voltage applied to electrode 4 and observing a blurring of the ⁴⁰Ca⁺ fluorescence image at the resonance frequency ω_{ax} [19]. Alternatively, amplitude modulated resonant laser light is used [18] to determine the charge to mass ratio of trapped particles at a precision of better than 0.2%. Before extraction, the sympathetically cooled doping ions may be separated from the ⁴⁰Ca⁺ ions. This is achieved by converting the axial trapping potential into a double well. The doping ions are further transported away from the ⁴⁰Ca⁺ ions by time dependent dc-electrode voltages [21]. As heating generated during this separation process [17] cannot be cooled away anymore an alternative separation



FIG. 2. Typical fluorescence image of a single ${}^{40}Ca^+$ ion (a), and linear ion crystals of two (b) and four (c) ions. After the extraction we record EMT detector signal traces with a singleion detection event (e), two events (f) and four events (g), correspondingly. The EMCCD image (d) shows fluorescence from a single ${}^{40}Ca^+$ ion only; however, we can discover from its position that it is trapped in a linear crystal together with two dark ions at the left-hand side. As the mixed ion crystal is extracted, we detect three events, one from the ${}^{40}Ca^+$ near 12.8 μ s and two events near 15.3 μ s. From this time-of-flight spectroscopy, we reveal the mass of CaO⁺ ions for both dark ions. All measurements were conducted without the movable aperture plate with an effective distance of 247 mm between trap center and detector.

method would deflect the unwanted 40Ca+ ions after extraction, e.g., by increasing the electrode voltages of an einzel-lens. For the extraction we increase the dc voltage of segments 4 and 5 to 500 V within a few tens of nanoseconds. The switching of the extraction voltage (supplied by iseg inc., Model EHQ-8010p) is performed by two high voltage switches (Behlke inc., HTS 41-06-GSM) triggered via a computer-controlled TTL signal and synchronized with the rf-field phase. Synchronization is crucial in order to minimize shot to shot fluctuations of velocity and position. An electronic phase synchronization circuit delays the TTL signal for extraction such that a constant delay to the next zero crossing of the trap drive with frequency Ω is ensured. We found the optimum extraction parameters by matching the time of extraction with a certain phase of the radio frequency and by adjusting the dc voltages on the deflection electrodes, which alter the ion trajectory during extraction. All measurements described below use these settings. The detection of the extracted ions is performed via an electron multiplier tube (EMT) with 20 dynodes from ETP inc., model AF553, which can detect positively charged ions with a specified quantum efficiency of about 80%. The detector is housed in a separate vacuum chamber at a distance of 287 mm from the trap. At typical operating conditions the detector is supplied with a voltage of

070501-2

PRL 102, 070501 (2009)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending 20 FEBRUARY 2009

-2.5 kV. The gain is specified with 5×10^5 and we observe an electrical signal of about 100 mV. The detection events show a width of 10 to 15 ns. In order to measure the beam divergence a movable aperture plate was installed in front of the detector. This plate, mounted on a nanopositioning stage from Smaract, model SL-2040, features hole diameters ranging from 5 mm down to 300 μ m.

Typical EMT detector signals for different numbers of ions are shown in Figs. 2(e)-2(g). Figure 2(h) displays the detector events for one 40Ca+ ion and two CaO+ ions, which arrive at $t = 15.3 \ \mu$ s. From a time-of-flight analysis through the 1 mm aperture we deduce a mean ion velocity of 19.47 km/s for the ${}^{40}\text{Ca}^+$ ions. At 3×10^{-9} mbar we detect $87\binom{+7}{-11}\%$ of all extracted single ions within a 1σ -confidence interval. We found that the efficiency slightly depends on the residual gas pressure but is mainly limited by the detector efficiency (which we measure to be higher than specified). The measured longitudinal velocity distribution (see Fig. 3) shows a 1σ -spread of 6.3(6) m/s which is about a factor of 10 larger than the velocity distribution inside the trap at T = 2 mK. This leads to a relative velocity uncertainty $\Delta v/v$ of 3.2×10^{-4} which may be further reduced by post-accelerating the ions after extraction. From measurements conducted with the smallest aperture (300 μ m) we deduce a 1 σ -spot radius of $83(^{+8}_{-2})$ µm for the trajectories of the extracted ions. Here we assume a Gaussian spatial distribution and the error is due to counting statistics. Note that this value is an upper limit as our measurements are currently affected by a measured drift of the ion beam of about 15 μ m/min possibly caused by temperature drifts of the setup.

For a comparison of measured data with numerical Monte Carlo simulations we need accurate electrostatic potentials which we deduce from a complete CAD-model of the trap geometry created with AUTOCAD. Electrostatic potentials and fields are calculated by using a boundary





element method accelerated by the fast multipole method [22]. Symmetry properties of the trap are exploited to reduce numerical errors. The ion trajectories are obtained by applying the Verlet integration method. The initial momentum and position is determined from the thermal Boltzmann distribution in the trapping potential. As a test, we have compared measured trap frequencies ω_{ax} and $\omega_{\rm rad.}$ for various traps of different size and shape in our lab [23] with corresponding simulations and found an agreement at the level of 2% to 3%. The ion trajectory calculation takes into account the full time dependent dynamics, including the micromotion at frequency Ω yielding a 1σ -velocity spread of 12 m/s and a beam divergence of 130 μ rad. Simulated velocity uncertainty and beam divergence agree within 1 order of magnitude with experimental results (see Table I).

In order to implant single ions into solid state materials with nanometer spatial resolution, the detector will be replaced by a simple electrostatic einzel-lens [24] with a diameter of 1 mm and a focal length of 9 mm. Simulations predict a 1 σ -spot radius of 7 nm for 2 mK and 2 nm for 100 μ K, respectively (see Fig. 4 and Table I).

We attribute the discrepancies between experimental results and numerical simulations to patch electric fields on insulating surfaces, geometrical imperfections of the electrodes and fluctuations of the extraction voltage power supply (specified with $\Delta U/U = 10^{-5}$). The aforementioned drift of the ion beam will be reduced in future experiments by installing magnetic shielding and a temperature stabilization.

Currently, our initial mean spatial and momentum spread is a factor of 10 larger than at the Heisenberg limit. An ideally suited cooling method for reaching this fundamental limit uses the electromagnetically induced transparency, as it allows cooling of all degrees of freedom at different oscillation frequencies even for mixed ion crystals [25,26]. This would lead to the perfect single-ion single-mode matter-wave source. By changing the trapping parameters we can freely adjust the ratio between the variance of the spatial components versus variance of the momentum components.

Thus, the spot size would be limited by the diffraction of the matter wave, which results in a spot size of 10^{-10} m if we assume a numerical aperture of 0.001 for the ion lens and an energy of 80 eV. To assure the proper alignment of a short focal length lens system with respect to the substrate

TABLE I. Comparison between experimental and numerical 1σ -longitudinal velocity uncertainty Δv , beam divergence α (full angle) and 1σ -focal spot radius r_f for different initial ion temperatures *T*.

| | Т | Δv | α | r_f |
|-------|---------------|------------|--------------|-------|
| Meas. | 2 mK | 6.3 m/s | 600 µrad | |
| Calc. | 2 mK | 12 m/s | 130 µrad | 7 nm |
| Calc. | $100 \ \mu K$ | 1 m/s | 30 μ rad | 2 nm |

070501-3



FIG. 4. Monte Carlo simulation of extracted ions. Left side: (a) Spot diagram at a distance of 247 mm from the trap center for an initial ion temperature of 2 mK. (b) Focal spot diagram generated by an einzel-lens with a 1σ -spot radius of 7 nm. (c) Histogram of radial distribution of spots in the focal plane. Right side: (d)-(f) Similar diagrams as on the left side but for a temperature of 100 µK.

we propose to implant through a hole in the tip of an atomic force microscope [27,28]. This would bring along the additional advantage that the charged particle could be placed with respect to surface structures (such as gate electrodes) in deterministic doping applications. A further possible application of our system is as on-demand source for matter-wave interferometry with ultracold slow ions, which until now was only possible with electrons, neutrons, and neutral atoms and molecules [29-32]. Being compatible with state of the art ion trap quantum processors, our setup may be used to convey qubits directly from one trap to the other by transmitting the qubit carrier itself.

In conclusion, we have experimentally realized a deterministic ultracold source for single ions and ionic molecules. For an ion temperature of a few mK we measured a longitudinal velocity distribution of extracted ions which shows a 1σ -spread of a few meters per second which is a promising starting point for the application of ion optical elements. Ion ray tracing simulations predict nm resolution

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending 20 FEBRUARY 2009

for our setup when combined with an electrostatic einzellens. If the ions are further cooled to the motional ground state our setup could realize the perfect matter-wave source at the Heisenberg limit.

We acknowledge financial support by the Landesstiftung Baden-Württemberg in the framework "atomics" (Contract No. PN 63.14), the European commission within EMALI (Contract No. MRTN-CT-2006-035369) and the Volkswagen Stiftung.

*kilian.singer@uni-ulm.de

[†]URL: http://www.quantenbit.de

- [1] T. Shinada, S. Okamoto, T. Kobayashi, and I. Ohdomari, Nature (London) 437, 1128 (2005).
- M. V. Gurudev Dutt et al., Science 316, 1312 (2007).
- [3] P. Neumann et al., Science 320, 1326 (2008).
- [4] B.E. Kane, Nature (London) 393, 133 (1998)
- [5] A.D. Greentree, B.A. Fairchild, F.M. Hossain, and S. Prawer, Mater. Today 11, 22 (2008).
- [6] T. Shinada, H. Koyama, C. Hinishita, K. Imamura, and I. Ohdomari, Jpn. J. Appl. Phys. 41, L287 (2002).
- A. Persaud et al., Quant. Info. Proc. 3, 233 (2004). [7]
- [8] M. Mitic et al., Microelectron. Eng. 78, 279 (2005)
- [9] A. Batra et al., Appl. Phys. Lett. 91, 193502 (2007). T. Shinada et al., Nanotechnology 19, 345202 (2008). [10]
- [11] J.L. O'Brien et al., Phys. Rev. B 64, 161401(R) (2001).
- [12] S. R. Schofield et al., Phys. Rev. Lett. 91, 136104 (2003).
- [13] F.J. Ruess et al., Nano Lett. 4, 1969 (2004).
- [14] W. Pok et al., IEEE Trans. Nanotechnol. 6, 213 (2007).
- [15] F.J. Ruess et al., Small 3, 563 (2007)
- [16] J. Meijer et al., Appl. Phys. A 83, 321 (2006).
- [17] M. A. Rowe et al., Quantum Inf. Comput. 2, 257 (2002).
- [18] M. Drewsen, A. Mortensen, R. Martinussen, P. Staanum, and J.L. Sørensen, Phys. Rev. Lett. 93, 243201 (2004).
- [19] H. Nägerl et al., Opt. Express 3, 89 (1998)
- Y. Lee et al., J. Vac. Sci. Technol. B 16, 3367 (1998) [20] reports measurements of a narrow ion velocity distribution in nondeterministic sources with additional velocity filtering. Our measured velocity uncertainty is more than 1 order of magnitude smaller.
- [21] G. Huber et al., New J. Phys. 10, 013004 (2008).
- [22] L. Greengard, The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems (M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1988).
- S. Schulz, U. Poschinger, F. Ziesel, and F. Schmidt-Kaler, [23] New J. Phys. 10, 045007 (2008).
- [24] A. Septier, CERN Report No. 60-39 (1960).
- [25] C.F. Roos et al., Phys. Rev. Lett. 85, 5547 (2000).
- [26] F. Schmidt-Kaler *et al.*, Appl. Phys. B **73**, 807 (2001).
 [27] A. Persaud *et al.*, Nano Lett. **5**, 1087 (2005).
- [28] J. Meijer et al., Appl. Phys. A 91, 567 (2008).
- [29] C. Jönsson, Z. Phys. 161, 454 (1961).
- [30] O. Carnal and J. Mlynek, Phys. Rev. Lett. 66, 2689 (1991).
- [31] M. Arndt et al., Nature (London) 401, 680 (1999).
- [32] H. Rauch, W. Treimer, and U. Bonse, Phys. Lett. A 47, 369 (1974).

070501-4

C Wissenschaftliche Publikationen
C.2 Journal of Modern Optics

C.2 Journal of Modern Optics

Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution

R. Fickler, W. Schnitzler, F. Schmidt-Kaler, Kilian Singer. Eingereicht am 11. März 2009 für die Fachzeitschrift: Journal of Modern Optics (arXiv / arXiv:0903.3425v1 [quant-ph]) March 11, 2009 11:29 Journal of Modern Optics implant JMO submitted Journal of Modern Optics Vol. 00, No. 00, 00 Month 200x, 1-17 RESEARCH ARTICLE Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution Robert Fickler, Wolfgang Schnitzler, Ferdinand Schmidt-Kaler, Kilian Singer* Institut für Quanteninformationsverarbeitung, Universität Ulm, Ulm, Germany (28.February 2009) Using a segmented ion trap with mK laser-cooled ions we have realised a novel single ion source which can deterministically deliver a wide range of ion species, isotopes or ionic molecules [Schnitzler et al., Phys. Rev. Lett. 102, 070501 (2009)]. Experimental data is discussed in detail and compared with numerical simulations of ion trajectories. For the novel ion source we investigate numerically the influence of various extraction parameters on fluctuations in velocity and position of the beam. We present specialized ion optics and show from numer-ical simulations that nm resolution is achievable. The Paul trap, which is used as a single ion source, together with the presented ion optics, constitutes a promising candidate for a deterministic ion implantation method for applications in solid state quantum computing or classical nano-electronic devices Keywords: Laser cooling, deterministic single ion source, ion optics 1. Motivation Over the last few years, integrated semiconductor devices have reached structure sizes in the order of a few tens of nanometres, and further miniaturization is ex-

pected. Thus it is becoming more and more important to dope the devices in an exact predetermined and reproducible manner. In the next few years, the amount of doping atoms in the active region of a field effect transistor might drop below 100, then statistical Poissonian fluctuations which arise from conventional doping techniques will be significant. At nanometre length scales, only small fluctuations in the number of doped atoms are sufficient such that the assumption of homogeneously distributed doping atoms is no longer valid and the electronic characteristics are disturbed (1). But not only conventional solid state devices would benefit from an accurate quantity of doping atoms, a future solid state quantum computer fully relies on precisely placed single dopant atoms; at well defined separation distances and depths. In those quantum devices, single embedded impurity atoms, e.g. phosphorus dopants in silicon (2) or colour centres in diamond (3), are used to retain and process information in a quantum mechanical way. Nowadays it is possible to address single quantum devices like nitrogen-vacancies (NV) colour centres in diamond and manipulate them coherently over several μs or even ms (4, 5). However, when it comes to scalable quantum computers with more than a few qubit carriers. one of the most important challenges is to place the dopant atoms at an exact position and with uniform separation at nm resolution. One method proposed for fabrication of these assemblies uses lithography based on scanning tunneling mi-

*Corresponding author. Email: kilian.singer@uni-ulm.de

ISSN: 0950-0340 print/ISSN 1362-3044 online © 200x Taylor & Francis DOI: 10.1080/0950034YYxxxxxxxx http://www.informaworld.com

2

croscopy (STM) (6-10). A hydrogen terminated silicon surface is structured with an STM, followed by chemical reactive surface binding of the doping atoms. Although the positioning of the incorporated single phosphorous dopants is realised with sub-nm accuracy, the technique is limited to silicon surfaces and unavoidable impurities in the background gas can lead to functional impairment. Another method for controlling the amount of doping atoms is the direct implantation of atoms or ions. Here, the common approach utilizes statistical thermal sources which provide a dense ion beam that has to be thinned out by several choppers and apertures. To ensure single ion implantation it is necessary to detect the implantation event by observing the generated Auger electrons, photoluminescence, phonons, electron-hole pairs or changes in the conductance of a field effect transistor (11-15). Therefore, the implantation only works if either the ions are highly charged or if they are implanted with large kinetic energies. With both systems it is possible to achieve a resolution of less than 10 nm, but their use is limited to cases where either highly charged states or high kinetic energies are available, and therefore deep implantation is unavoidable. Both methods lead to surface damages and additional inaccuracies in depth and lateral position due to statistical straggling. Our method is universally applicable to a wide range of doping atoms and it allows implanting at very low energies, thus avoiding the problems described above.

2. Ultracold deterministic ion point source

We have realised a novel system for direct implantation of ions into solid state surfaces by using a Paul trap as an ultracold deterministic ion source (16-18).

Specialized linear Paul trap: Central component of our technique is a linear segmented Paul trap with laser cooled ⁴⁰Ca⁺ ions similar to those utilised for scalable quantum information processing (37). A Paul trap is a well known tool for trapping single, charged particles by using static (dc) electric fields and an alternating (rf) field thereby producing a pseudo-potential of around 1 eV depth. With various laser cooling techniques, the trapped ions can be cooled to the motional ground state (19, 20). In addition, it is possible to trap other charged particles or even molecules that cannot be directly laser cooled but can be sympathetically cooled due to their electrostatic interaction. Identification of those additionally loaded doping ions, which are invisible to laser light, can be conducted by exciting collective vibrational modes (22, 23). The segmented trap design is capable of separating and transporting ions over a distance of a few cm (21). Our design consists of four copper plated polyimide blades of 410 μ m thickness and 65 mm length arranged in an x-shaped manner with a distance of 2 mm between opposing blades (18). The dc voltages are applied to eight segments of 0.7 mm width on the top and bottom of each blade. A unique feature of our design is that it is capable to shoot out ions in a well defined axial direction by switching two of the electrode segments to a higher voltage. Unlike conventional linear Paul traps, our design does not lose its radial confinement even when biasing the dc trap potential to high voltages. This is realised by applying the rf to the electrodes at the inner front edges of two opposing blades, while the other two are grounded. Furthermore, the trap provides an additional broader deflection electrode on every blade, which is used to aim the extracted ions in the demanded direction. This special arrangement enables the exact axial extraction of the cooled ${}^{40}\text{Ca}^+$ ions and sympathetically cooled dark ions due to the preservation of the radial confinement during the extraction sequence. The development of this special design was only feasible with our custom designed simulation software, see sect. 3. Characteristic working conditions are an rf voltage with an amplitude of 200 V at a frequency of $\Omega/2\pi = 12.155$ MHz, which yields

a radial secular frequency $\omega_{\rm rad}/2\pi = 430$ kHz for a $^{40}{\rm Ca}^+$ ion. The required dc potential is generated by a voltage of 35 V which is applied to trap segments 2 and 8 and leads to a frequency of the axial potential of $\omega_{\rm ax}/2\pi = 280$ kHz. The vacuum chamber itself is made out of stainless steel and evacuated down to a base pressure of 3×10^{-9} mbar by a turbo molecular pump, an ion-getter pump and a titanium sublimation pump. Calcium and dopant ion generation is induced via a multiphoton process e.g. by a pulsed frequency tripled Nd-YAG laser with a wavelength of 355 nm and a pulse power of 7 mJ.

Observation of ions: With this setup the trapped ${
m ^{40}Ca^+}$ ions are located above segment 5, where they are Doppler cooled and illuminated by laser light near 397 nm, 866 nm and 854 nm. In order to image single ions or ion-crystals we collect the scattered photons by a f/1.76 lens on an electron multiplying charge coupled device (EMCCD) camera. While the calcium ions can be directly cooled by the installed laser system and identified on the image from the camera, the additionally loaded doping ions are sympathetically cooled and can be easily identified by the voids in the image of the ion crystal (18) as they are invisible to the irradiated laser light. By applying an ac voltage to an electrode located under the ion crystal we can stimulate collective vibrational modes with characteristic resonance frequencies $\omega_{\rm ax}$ and therefore specify the exact species of these dark ions (22). Another determination of the additionally loaded doping ions can be implemented by measuring the mass ratio with amplitude modulated resonant laser light (23). So far, the trapped particles are simply Doppler cooled down to T = 2 mK, which is slightly above the Doppler limit and was deduced from the width of the excitation spectrum on the $S_{1/2}$ - $P_{1/2}$ laser cooling transition. With further cooling methods using electromagnetically induced transparency, which is currently implemented in our lab, it is possible to cool the broad band of vibrational frequencies of an ion crystal simultaneously and thereby reach the motional ground state (19, 24). Under these initial conditions the ion trap would operate at the fundamental limit given by the Heisenberg uncertainty relation. In order to exclusively implant doping ions they can be separated from the cooling ${}^{40}Ca^+$ ions by either splitting the ions inside the trap before the extraction is performed or after extraction by deflecting unwanted ions e.g. by increasing the voltage of an einzel-lens. The separation of the ${}^{40}\text{Ca}^+$ ions and the doping ion inside the trap can be achieved by converting the axial potential into a double well and transporting the doping ion away by subsequently applying time dependent dc voltages (21).

Extraction of ions: The extraction process itself is induced by biasing segments 4 and 5 with 500 V (supplied by iseg inc., Model EHQ-8010p) within a few nanoseconds. This fast switching is achieved by two high voltage switches (Behlke inc., HTS 41-06-GSM) which are triggered by a TTL signal from our control computer. In addition, we synchronized the switching event with the rf field phase in order to reduce fluctuations of velocity and position of the ion by implementing an electronic phase synchronization circuit which delays the TTL signal to a well defined constant time period after the zero crossing of the rf. The experimentally measured standard deviation of the delay time equals 0.34 ns. For the detection of the extracted ions or dopants we use an electron multiplier tube (EMT) with 20 dynodes (ETP inc., Model AF553) which is supplied with a voltage of -2.5 kV and has a specified quantum efficiency of about 80% for positively charged particles. The gain is specified with 5×10^5 and provides a 100 mV electrical signal which is 10 to 15 ns wide for each detection event. The EMT is accommodated in a second vacuum chamber which is located at 247 mm from the trap and can be completely separated by a valve to facilitate prospective changes of target probes.

3

4

3. Numerical simulation of the ion source and specialized ion optics

For designing an optimised trap and ion optics we developed a simulation software package which is based on a fast multipole solver (25, 26) with additional high accuracy solvers respecting symmetry properties of the trap and the ion optics. The software allows deducing accurate electrostatic potentials from any CAD-model. With this simulation software we describe the trajectories during the extraction and the expected spots at the target. We analyse the dependence of the spatial dimension and the velocity fluctuation of the single ion beam on the initial ion temperature, the start position inside the trap and the trigger phase of the rf voltage at the extraction event. Additionally, we compare different designs of possible einzel-lenses and study the simulated focusing properties as well as the possibility of our system to correct spherical abberation of the lens and to filter the cooling ions during the implantation process. To verify our simulation with experimental data we have checked different trap geometries and found an agreement of the axial and radial trapping frequencies within 2 to 3 %.

3.1. Deterministic ion point source

For an exact simulation of the trap potentials we have sketched the complete trap geometry as a full three dimensional CAD-model. By virtually applying the same voltages as we do in the real experiment (values mentioned above) we are able to calculate the trajectories of the trapped particles with full time dependent dynamics including micro motion at frequency Ω . The initial momentum and position of the ion inside the trap is determined from the thermal Boltzmann distribution at a selectable temperature. The extraction process is triggered by switching two segments on every trap blade to 500 V synchronized to a well defined phase of the rf voltage. The plotted trajectories show the influence of the micro motion during the extraction and the resulting spread of the ion beam (see Fig. 1(a)). Slight numerical asymmetries, which appear despite the symmetrization procedure, are corrected by small compensation voltages on the rails as in the real experiment.

Dependence of the ion beam on the initial ion temperature: With an initial ion



Figure 1. (a) Trajectories of $^{40}\mathrm{Ca^+}$ ions during extraction from the trap with an initial temperature of 2 mK. (b) Resulting spot diagram at a distance of 247 mm between trap centre and target amounts to a beam divergence of 134 μ rad (light grey circle illustrates the 1 σ -spot radius of 16 μ m).



Figure 2. Dependence of the ion beam on the start position (positive values mean towards the extraction direction). (a) Resulting mean longitudinal velocities and 1*σ*-spot sizes after extraction at a distance of 247 mm from the trap centre with deflection electrodes grounded. (b) Resulting spot diagrams of extracted ions when the deflection electrodes are biased to 7.5 V between two opposing trap blades and 9.1 V between the other two blades respectively.

temperature of 2 mK the results show a 1σ -spot¹ radius of 16.5 μ m at a distance of 247 mm between trap centre and target which amounts to a full angle beam divergence of 134 μ rad (see Fig. 1(b)). The specified temperature of 2 mK is similar to the experimentally achieved value and the deflection electrodes are grounded during the extraction simulation. The mean longitudinal velocity of the extracted ions at the target is calculated to be 22.1 km/s with an 1σ -uncertainty of only 1.3 m/s. Therefore, the predicted ion beam shows promising characteristics for subsequent focusing with ion optics due to small spherical and chromatical aberration. The predictions are even better if sub-Doppler-cooling methods are applied. This would lead to mean phonon expectation values below 1 and temperatures of 100 μK for the ions inside the trap can be achieved. Then the setup would work at the Heisenberg limit. The full angle divergence of the generated ion beam shrinks to 30 μ rad. This means the 1σ -spot size at the target amounts to 3.7 μ m and therefore the beam improves significantly. However, as the extraction voltage remains the same, the mean longitudinal velocity is not influenced by the smaller initial temperature. but the 1σ -velocity uncertainty decreases slightly to 1 m/s. Our simulations show that by applying voltages to the deflection electrodes, the characteristics of the resulting spot shapes change enormously. For example, if 7.5 V between two opposing deflection electrodes and 9.1 V between the others are applied respectively (which resembles our experimental setup), the spot is approximately shifted 19.4 mm in the horizontal and 30.5 mm in the vertical direction. In addition to this expected deflection the spot is stretched from the former Gaussian to a cigar-shaped distribution and therefore the 1σ -spot size value cannot be calculated (see Fig. 3(b) zoomed area). This drastic change is simulated for 2 mK cooled ions as well as for sub-Doppler-cooled ions.

Dependence of the ion beam on the initial start position: Aside from the dependence on the initial temperature, the transversal expansion and the velocity of the ion beam with its uncertainty strongly depends on the start position of the extracted ion. Whereas altering the initial position does not change the size and the (Gaussian) spot shape at the target significantly when deflection electrodes are grounded, the velocity fluctuation is strongly affected (see Fig. 2(a)). For displacements up to $\pm 400 \ \mu m$ the mean longitudinal velocity for the different displacements

¹Note that the 1σ -expression is always used to express that 68% of the studied data lies within the given interval, although the some results are not perfectly reproduced by a Gaussian distribution.

6

has a constant value of 22 km/s (± 2 %). On the contrary, the velocity spread at each displacement varies enormously: from only 1.3 m/s when the ions are extracted from the theoretical minimum of the axial potential, it increases up to 1.5 km/s when they are shifted around 420 μ m out of the centre of the potential before being extracted. This is caused by a strong increase of the micro motion of a trapped ion when it is no longer in the minimum of the trapping potential, and therefore has a highly varying initial momentum. For the 1σ -spot sizes it is also advantageous to extract the ion out of the potential minimum. Then, a 1σ -spot of about 16 μ m can be achieved. However, a displacement of ±400 μ m only leads to an enlargement of the 1σ -spot size by additional 2 μ m. The influence of the start position on the ion beam properties becomes more crucial when the deflection electrodes are supplied with a non zero voltage. Due to slightly displaced trajectories during the extraction process, the ions begin to oscillate by reacting to the rf field and therefore lose their well-defined extraction direction. In Figure 2(a) the ions are displaced up to 420 μ m from the potential minimum before extraction which means that the ion is trapped in the middle of two electrodes. The former cigar shaped extension of the spot of around half a millimetre increases tremendously to about 10 to 20 mm. Additionally, the shape changes to a screw like structure (see Fig. 2(a)) and deterministic aiming becomes nearly impossible. The mean value of the longitudinal velocity sums to around 22 km/s and changes only by 2 % for different extraction positions, while fluctuations increase to a maximum of 1.6 km/s for ions shifted 420 μ m out of the trapping potential minimum.

Dependence of the ion beam on the phase of the rf voltage: Similar results are calculated for the augmentation of the beam expansion while changing the phase of the rf voltage at the time of the extraction event (see Fig. 3(b)). Here, the 1σ -spot



Figure 3. Dependence of the ion beam on the phase of the rf voltage. Initial temperature of the ions inside the trap is kept constant at 2 mK and the distance is set to 247 mm from the trap centre for all shown results. (a) Resulting mean longitudinal velocities and 1*σ*-spot sizes with deflection electrodes grounded. (b) Resulting spot diagrams of extracted ions with deflection electrodes are biased to 7.5 V between two opposing trap blades and 9.1 V between the other two blades respectively. In (b) one spot is zoomed in to show that a Gaussian distribution is no longer an accurate assumption if the ions are deflected during extraction.

size varies from 16 $\mu\rm{m}$ to 19 $\mu\rm{m}$ over a whole period of the radio frequency voltage but remains Gaussian distributed. The mean longitudinal velocity oscillates in a sine-like manner over an interval of 0.5 km/s around 22.2 km/s during the different trigger phases. The velocity spread only varies negligibly between 1.3 m/s and 2.3 m/s. This shows that with deflection electrodes grounded, the trigger phase at the extraction event is important to reach a single ion beam featuring the promising characteristics of a narrow velocity fluctuation and a small beam divergence. Again, even more important becomes the exact triggering phase of the extraction

7

event when the deflection electrodes are used to aim the ions during the extraction process. In Figure 3(b) the simulated spots are shown for altering the trigger phase and deflecting the ions with the same voltages mentioned above. The spot shape for a constant trigger phase maintains its oval shape and size. When changing the phase the spots are distributed over an area of 10 mm by 15 mm. The mean velocity for each different trigger phase stays within 1 % at around 22 km/s, and the fluctuations only add up to around 2.5 m/s. Hence, to achieve a beam of single deterministic extracted ions suitable for implantation it is important to align the trap axis to the ion optic axis as accurately as possible and therefore avoid the usage of the deflection electrodes. Besides the alignment, it is also crucial to position the ion into the radial pseudo-potential minimum. Furthermore, the extraction itself has to be synchronised to the rf field as exactly as possible.

3.2. Ion optics

In order to use our specially designed ion trap as a deterministic implantation tool it does not suffice to shoot the ions out of the trap with the aforementioned small values of beam divergence and velocity fluctuations: the ion trajectories have to be focused down to a few nm. To realise this goal we have developed ion optics which should be able to focus the beam down to the required nanometre regime, even to a 1σ -spot size of around one nm without any aberration corrections. Due to the narrow ion trajectories and the low fluctuations in the longitudinal velocity of the ions, the focusing optics can be kept simple without sophisticated aberration corrections (27-30). A rotationally symmetric simple electrostatic einzel-lens yields adequate results. This type of ion lens consists of three electrodes where the first and the third electrode are on the same potential. The electrostatic potential resembles a saddle surface and can be generated in two different modes, decel-accel and accel-decel mode. The former mode is achieved when the middle electrode is biased to a voltage with the same sign as the charged particle (in our case a positive voltage) while the lens operates in the accel-decel mode with a voltage of the opposite sign of the charged particles. Both modes offer different advantages (31). In the accel-decel mode the undesirable chromatical and spherical aberrations are smaller than in the decel-accel mode. The chromatic aberration is reduced due to higher velocities of the particles inside the lens and a therefore lower relative velocity spread $\Delta v/v$. Additionally, spherical aberration is smaller because the ion trajectories are closer to the optical axis during their passage through the lens (32)since they are always deflected towards the axis, while in the decel-accel mode the ions diverge at first before being focused to the centre. On the other hand, the decel-accel mode offers three essential advantages. Firstly, the lens requires lower centre electrode voltages for reaching a similar focal length. In addition, by applying positive voltages it is possible to correct spherical aberration by switching the voltage to a higher potential while the particle is going through the lens (33) and in our setup the lens can be used as a deflector for different ion species (both will be discussed more in detail below).

Comparison of different lens designs: In order to optimize the properties of the lens, different shapes are imaginable and have been discussed (30-32, 34, 35). Generally, the most important feature is a perfect alignment of the electrodes in connection with voltage stability which depends, on the one hand, on the voltage supply, and on the other hand on the insulating material between the electrodes. For the properties of the lens it can be presumed that the smaller the dimensions of the lens, the better its focusing properties are. However, the decreasing of the lens dimension is limited by the extension of the ion beam because spherical aberration



8

effects become stronger when the size of the beam approaches the lens diameter. To assure that all ions easily go through the lens and spherical aberration is not dominant, we designed lenses with a main aperture of 1 mm. Usually the lens' properties improve when the first electrode is thinner than the second one and the gap spacing between them is minimal. On the contrary, the distance between the second and the third electrode has to be much larger to minimize the focal spot size (see Fig. 4(a) and (c)). Another possibility to improve the focusing properties is to change the shape of the electrodes e.g. to a special design developed by Septier (35). The design is based on a lens with hyperbolic field distribution which has good imaging characteristics even for steeply inclining beams, but has been modified to reduce spherical aberration (see Fig. 4(b)). Each of the three electrodes has a different aperture and a completely different shape. For an optimal adjustment of the lens to our single ion source we have developed a huge range of different lenses and simulated the achievable spot sizes. In Figure 4 we present three different types



Figure 4. Comparison of three different shapes of einzel-lenses. Non-optimized simple lens (a) which is able to focus down the beam by a maximum factor of about 1200. Special shaped einzel-lens (b) with a design developed by Septier (35) where the minimal achievable I*σ*-spot size is more than three times smaller than the one of the non-optimized einzel-lens. Custom made einzel-lens (c) which is implemented in our setup due to realisable electrode shapes with similar focusing properties as the special shaped lens (b). Aside from a maximum focusing factor of approximately 3000, the simulation predicts for the decelaccel mode (middle electrode repulsive) optimal results which is important for further implementation of spherical aberration correction and utilization of the lens as an ion deflector. Voltages are applied to the centre electrode (light gray) while the outer ones are grounded (dark gray).

to demonstrate the enormous influence of the lens design, each with the focal distance and the appropriate optimized focal spot size at different voltages and temperatures. A non-optimized einzel-lens made out of three equivalent electrodes and gaps in between in the decel-accel mode (see Fig. 4(a)) allows to focus down the non deflected ion beam to a 1σ -spot radius of 25.9 nm with 2 mK cooled ions (5.1 nm @ 100μ K). Slightly better results are obtained in the accel-decel mode, where the 1σ -spot size produces 20.7 nm for ion beams of 2 mK cooled ions (3.0 nm @ 100 μ K). Although this simple einzel-lens already achieves nanometre spot sizes, the required voltages, especially in the accel-decel mode, are too high to ensure the isolating property of the spacer between the electrodes. On the contrary, the lens in Figure 4(b), which resembles the one developed by Septier, is able to achieve (in decel-accel mode) a focal 1σ -spot radius of 6.3 nm, even with ions of 2 mK temperature before extraction. With ions cooled to the motional ground state (100 μ K) the simulated spot size decreases down to 1.7 nm. Even better are the results for the accel-decel mode where the 1σ -spot size amounts to 5.5 nm for 2 mK and only 0.9 nm for 100 μ K. This proves the desired qualities of our achieved ion beam and shows explicitly that our setup is able to operate at nm resolution.

9

However, the realisation of this lens is quite difficult because of different apertures, the inclined electrodes and the rounded edges. For this reason we have developed a design with similar focusing properties but which is easily realisable (see Fig. 4(c)).

Analysis of the developed einzel-lens: The apertures of all three electrodes of the our developed einzel-lens equal 1 mm, which facilitates exact alignment. The gaps between the electrodes are 150 μ m wide to ensure the required insulation. For the accel-decel mode it is possible to reach a 1 σ -spot size of 1.2 nm for 100 μ K cooled ions (1.5 nm @ 2 mK) which is slightly above the results for the special shaped lens from Septier. Although the outcomes in the accel-decel mode for 2 mK are better than in the decel-accel mode, which means this mode shows bigger chromatical aberration effects, we have chosen to use the lens in the decel-accel mode to be able to implement spherical aberration correction and to utilise the lens as an switchable deflector for ions. With 2 mK cooled ions inside the trap we can achieve a 1 σ -spot size of the extracted ions after focusing through the lens of 11.0 nm and 1.2 nm for ground state cooled ions, respectively. In Figure 5, the induced



Figure 5. (a) Potential of the lens from Fig. 4(c) which is biased to 65 V. (b) Three dimensional view of the potential distribution.

potential for the lens of Fig. 4(c) is plotted when the centre electrode is biased to 65 V. The potential plot illustrates the function of an einzel-lens in the decel-accel mode. Before the ions enter the lens, they are slowed down and deflected slightly away from the axis. After further defocusing, the ions reach the highest point of the potential which is approximately 60 V and therefore have the slowest velocity. Afterwards the ions are accelerated out of the lens and focused strongly to the axis. The focusing effect relies on the different ion velocities inside the lens potential. The longitudinal velocity of the ion is higher during the defocusing period while climbing to the maximum potential and it is lower during the focussing period thereafter. This generates the focusing force even for complete symmetric lens constructions as Fig. 4(a), and explains the lower voltages for lens designs where the focusing space is stretched by positioning the last electrode further away from the centre electrode (see Fig. 4(b) and (c)). In Figure 6, trajectories of extracted ${}^{40}Ca^+$ ions through the lens are shown, as well as the focal spot at a distance of 7.33 mm after entering the lens. When the ions are extracted with 2 mK initial temperature and the lens is biased to 65 V, the focal spot occurs half a millimetre after the last electrode and shows a $1\sigma\text{-spot}$ size of only 11 nm. Reducing the voltage of the centre electrode moves the focal spot size further behind the lens almost without impairment of the focusing properties. Lowering the voltage, for instance to 50 V,



Figure 6. (a) Trajectories of extracted ${}^{40}Ca^+$ ions at 2 mK which are focused by the lens of Fig. 4(c) in the decel-accel mode (65 V) to a 1 σ -spot size of 11 mm. (b) Resulting spot diagram in the focal spot around 0.5 mm after the last electrode of the lens (light grey circle illustrates the 1 σ -spot radius).

generates the spot 8.5 mm after the last electrode, but the spot size is hardly affected and remains at 12 nm. Therefore, the focal distance can be adjusted over a few mm by simply changing the voltages of the centre electrode. However, the varying range should be as small as possible since further decreasing of the voltage increases the spot size (see Fig. 7(a)). A further reduction to 25 V, for example, enlarges the spot size up to 52 nm by a movement of around 100 mm. As described



Figure 7. (a) Enlargement of the 1σ -spot size by applying smaller voltages to the centre electrode of the lens. The focal plane moves away from the lens. 65 V is the upper limit for the lens voltage because even higher voltages would generate a focus of the beam inside the lens. (b) If the initial beam is dislocated out of the centre of the lens, the focusing properties of the lens worsen or even annihilate. Here, the focal plane is kept constant at 0.5 mm after the lens as well as the voltage of 65 V. The incoming beam is displaced upward in the positive x-axis to different distances.

above, our ion source is able to deflect the ions during extraction by biasing the deflection electrodes. Small discrepancies in the alignment of the setup can be corrected by slight deflection of the beam into the optical axis. The importance of shooting through the lens without even small initial dislocation of the ion beam is shown in Figure 7(b). For example, a displacement of the incoming beam of half the aperture radius (250 μ m) annihilates the focusing property. Besides the displacement of the outgoing beam in the opposite direction, it also diverges to similar spot dimensions as it has without any ion optics. With further shifting of the ion beam the lens even enlarges the spot size in the intended focal plane. Hence,

11

for this required precise alignment, the deflection electrodes present the best way to aim the extracted ion beam to the centre of the lens aperture. A displacement in one direction of the trap axis of 250 μ m for example is neutralized by applying a potential of 0.36 V to two opposing trap blades and leads only to a small increase of the 1 σ -spot size from 16.1 μ m to 17.2 μ m. However, when our setup is adjusted accurately, it is, in combination with the specially developed einzel-lens, a perfect implantation source, where nearly every species of charged particles or molecules can be deterministically implanted to any substrate with nanometre resolution.

Correction of the spherical aberration: One of the most advantageous properties of our setup is the fact that the ion extractions are synchronised to the rf voltage and the relative velocity uncertainty is extremely low. Thus, the ions are well defined in space and time during the whole extraction, as well as during the focusing process. With that, it is possible to switch the lens to different voltages at different points in time, which enables the correction of aberration effects. When compared



Figure 8. Zoom of the focal regions to show the effect of spherical aberration correction. All diagrams were calculated with an incoming beam with a 1σ -spot radius of $36 \ \mu$ m. For the first two diagrams (a) and (b) the chromatical aberration effect is artificially removed by setting the velocity fluctuations of the ions to zero. The uncorrected spot (a) is achieved with the lens constantly biased to 65 V and shows a 1σ -spot radius of 52 nm. On the contrary, the spherical corrected spot (b) only has 1σ -size of 12 nm. 210 ns after the ions has entered the lens, the voltage of the centre electrode is switched from 35 V to 85 V. The same incoming beam and correction settings of the lens are used for the trajectories in diagram (c), only with an added velocity fluctuation of 6.3 m/s to show the negative effect of the chromatic aberration of the lens. Here, 68 % of all simulated ion trajectories lie within a spot radius of 57 nm.

to the lens from Septier our design shows a larger spherical aberration which enlarges the spot size a little bit. According to Scherzer's theorem, it is not possible to avoid such spherical and chromatical aberration with rotationally symmetric electrostatic einzel-lenses in a charge free space (36). Another way of interpreting the theorem is by stating the impossibility of the realisation of a diverging lens. One way of circumventing this theorem is to use time dependent electrostatic fields (33) simply by switching the lens to another voltage at a well defined time. This leads to forces a diverging lens would create and therefore spherical aberration can be reduced. Because of a fast increase of the lens potential at a well defined time, the particle is accelerated and therefore slightly diverged. Ions with outer trajectories react stronger on the potential shift and subsequently intersect the optical axis further away. The switching time, where the lens voltage is altered from one value to another, has to be accurately chosen and has to be as short as possible. With our high voltage switches mentioned above we are able to vary the voltage within 5 ns, which should be short enough to neglect additional energy broadening due to finite rise time of the electric field. However, the spherical aberration correction has to be adjusted to the incoming single ion beam. Simulation shows that for 2 mK cooled ions (which means a 1σ -spot size of 16.1 μ m) the best results are obtained when the lens is primarily grounded then biased to 60 V, 170 ns after

12

the ions have passed the first aperture. Thus the 1σ -spot in the focal plane can be nearly reduced by a factor of 2 from 11 nm down to 6.0 nm. The same switching time and voltage reduces the focal 1σ -spot size for ground state cooled ions from 1.2 nm to 0.9 nm. If the ion beam dimensions are increased, the factor of improvement also increases slightly. For example, beam characteristics similar to the ones we expect in our experiment after perfectly aligning the lens axis to the trap axis $(1\sigma$ -spot of 36 μ m and a maximum velocity uncertainty of only 6 m/s) requires a different setting for the switching time and voltage, but the reduction of the focal spot increases by more than a factor of 2 (see Fig. 8). Here, the voltage is switched from 35 V during the entering of the ions to 85 V after 210 ns. The focused spot amounts to 138 nm when the lens is constantly biased to 65 V and decreased down to 57 nm for the spherical aberration corrected lens due to switching of the voltage (see Fig. 8(c)). The remaining spread of the focal spot is therefore mainly due to the remaining chromatic aberration of the lens because of the velocity fluctuation. In order to show solely the enhancement of the correction of the spherical aberration, the velocity fluctuations have been artificially removed in Figure 8(a) and 8(b). Here, the spot improves with the spherical aberration correction from a 1σ -spot size of 52 nm down to 15 nm. Note that the spot in Figure 8(a) does not show an accurate Gaussian distribution and therefore the measured value of 68% within 52 nm cannot obviously be read out from the plot. But Figures 8(a) and 8(b) give a good insight of the enhancement due to spherical aberration correction, whereas Figure 8(c) shows the effect of chromatic aberration. So far chromatic errors will not be corrected by the presented ion optics, but this can be implemented with time dependent electric fields (33).

Reflection of the cooling ions and possible post acceleration: Another advantage of the triggered extraction is the possibility to reflect the cooling ions during the implantation process. Because of unavoidable heating processes during a possible separation of the ions inside the trap (37), it is preferable to separate the cooling 40 Ca⁺ ions from the implantation particles by reflecting the cooling ions at the einzel-lens. Due to different masses of the additionally loaded, sympathetically cooled ions compared to the 40 Ca⁺ ions, the flight velocities differ from each other. Therefore, the cooling ions arrive at different times at the lens and can be easily reflected by applying higher voltages. Nitrogen, for instance, is accelerated in the simulation up to 36.2 km/s due to its smaller mass, and thus arrives approximately 4.3 μ s earlier at the lens than the 40 Ca⁺ ions. Hence, the lens has to be switched to



Figure 9. Trajectories of reflected ${}^{40}Ca^+$ ions and potential distribution of the lens set to 115 V at the centre electrode (red).

a higher potential after the nitrogen particles have passed. The required voltage for reflection has to be at least 115 V, which is experimentally feasible (see Fig. 9). Also worth mentioning is that post-acceleration will even improve the focusing results by

13

reducing the chromatical aberration due to a smaller relative velocity fluctuation. A simple cylindrical tube positioned in the ion beam axis and biased to 10 kV shows promising focusing effects when switched off after the ions are inside the tube. First simulated results predict velocities above 600 km/s and focal 1σ -spot sizes of less than 4 Å for ground-state cooled ions. However, switching times have to be even more precise due to higher velocities and therefore shortened timescales. Moreover, the gained reduction of the spatial resolution is partly neutralised by straggling effects of the implanted ions inside the target material.

4. Experimental results of the novel ion source

We have implemented a linear segmented Paul trap as a novel ion source which is deterministic and has promising characteristics in velocity fluctuations and spot sizes for focusing the beam to nanometre resolution (18). As mentioned above, the source has to be accurately synchronised to the phase of the rf trap drive voltage. We have therefore developed electronics that synchronise the TTL signal from the lab computer to the rf phase. The dependence of the hit rate on the extraction trigger phase is shown in Figure 10(a) where the detection probability has a maximum at a rf phase of around 250° to 270°. During all these measurements, the deflection voltages were kept constant and no additional apertures were placed in front of the detector (entrance aperture of the detector equals 20 mm). With smaller apertures, the contrast between detecting 90 % of the extracted ions and missing the detector would be even stronger. Additionally, the experiment shows a weak dependence on



Figure 10. (a) Dependence of detection probability on different extraction trigger phases. (b) Detection probability during the extraction of single ions while the pressure changes. A linear fit is added (black line) as well as the standard deviation (grey line). The measurement is based on 251 successful extractions out of 310 shots. Both diagrams are measured without any aperture in front of the detector.

the pressure in the vacuum chamber (see Fig. 10(b)). When improving the vacuum down to a few 10^{-9} mbar, the detection rate again improves to almost 90 % as well. A linear extrapolation leads to a maximum detection probability of 92.5 %. The dependency on the pressure is mainly based on possible collisions with the background residual gas particles. Furthermore, the stability of the ions in the trapping potential is lessened with higher pressure, which leads to higher fluctuations of the extraction trajectories. However, our measured hit-rate lies above the specified quantum efficiency of the detector (80 %).

Determination of the velocity fluctuation: In order to get information concerning the velocity fluctuation of the extracted ions we have measured the time of flight of each detected ion or ion crystal. The time of flight spectrum for ion crystals



Figure 11. (a) Time of flight spectrum for two-ion crystals based on 93 successful detections without any aperture plates in front of the detector. The mean value for the first detected ion (white bins) amounts to 12.699 μ s with a 1 σ -spread of 56 ns (light grey line) and for the second ion (grey bins) to 12.725 μ s with a 1 σ -spread of 59 ns respectively (grey line). The difference in arrival time between the first and the second ion amounts to $\Delta \bar{t}=26$ ns. Additionally, the mean value (dark grey bins) for the bin size of the histogram is 10 ns. (b) Time of flight spectrum for single ion crystals based on 123 successful detections out of 139 shots through the 1 mm aperture. Gaussian fit of the data leads to an average time of 14.74 μ s with a 1 σ -spread of 9.5 ns. The bin size of the histogram equals 2 ns. Note that the different average times in (a) and (b) are caused by a repositioning of the detector backwards due to the installation of an aperture plate, and that the improvement of the 1 σ -spread is mainly due to the enhancement of the electronics of the phase delay trigger.

consisting of two ions is depicted in Figure 11(a). The difference between the arrival times of the first and the second ion results in $\Delta \bar{t}=26.3$ ns, which is mainly based on the Coulomb interaction. The spectrum shows that the ions remain in their crystalline structure during the extraction, which is important for the above mentioned post separation of the ⁴⁰Ca⁺ ions from possible dopant ions or the implantation of a whole crystal with one extraction event. In order to characterize the spatial divergence of the ion beam, a movable aperture plate was installed in front of the detector. Along with this modification, a faster and more stable trigger phase electronic unit was also implemented. The subsequent measurements of the time of flight spectra are shown in Figure 11 (b). With the improvement of the phase delay trigger the 1σ -width reduces from the previous 50 ns down to 9.5 ns. The movement of the detector further away from the trap of about 30 mm causes an elongation of the time of flight from around 12.7 μ s up to 14.74 μ s. Therefore, the mean velocity of the extracted single ${}^{40}Ca^+$ ions is measured to be 19.47 km/s with a 1σ -width of 6.3 (6) m/s, meaning that the velocity uncertainty is a factor of 10 larger than inside the trap for the 2 mK cooled ions. The relative velocity uncertainty $\Delta v/v$ is only 3.2×10^{-4} with the possibility of further reduction due to post-acceleration.

Determination of the spatial beam dimension: The beam divergence is determined by scanning the beam over different apertures of 5 mm, 1 mm and 300 μ m diameter by altering the deflection voltages. Measurements conducted with the 5 mm aperture have shown that over a voltage range of 5 V between two opposing blades and 10 V between the other two opposing blades we are even able to detect ion crystals of up to 6 ions with an efficiency above 90% (see Fig. 12(a)). The edge of the aperture is also clearly recognizable in the scan diagram due to a sharp decrease of the detection rate. When reducing the aperture diameter to 1 mm the scanning range of the deflection voltages are scaled down to 1 V and 2 V respectively (see Fig. 12(b)). In the centre of the scanned voltage range we detect 87% of the single extracted ions while the detection of ions which are extracted in a crystal shows a reduced detection rate of 78%. Note that the detection rate of nearly 90% for

C Wissenschaftliche Publikationen



simulated spot snape with all experimentally used settings. The resulting simulated spot again shows an oval shape. The velocities have a Gaussian distribution (similar to the experiment) with a 1σ -spread of only 2.7 m/s. This means the experimentally measured values are by a factor of 2.2 worse than the simulated results. If it is assumed that the same holds for the spatial spreading of the spot, it is possible to compare the results of the experiment and the simulation. With the cigar shaped spot that is enlarged by a factor of 2.2, it would be possible to

16

REFERENCES

get 65% of the extracted ions through the 300 μ m aperture (see Fig. 13(b)). In our experiment we are able to detect 68% of the single ions after the 300 μ m hole, with adjustment of the deflection voltages during the extractions. From the simulation, we can also deduce that our trap is tilted by an angle of 4.2° at the x-axis and 7.2° for the y-axis.

Outlook 5.

We have shown that our setup is able to deterministically extract single ions on demand. With additional optimized ion optics, the numerical simulation predicts a spot size with nm dimension. For an experimental confirmation of the predicted focal spot, different methods are conceivable. Similar to the previous measurements of the spatial beam divergence, it is possible to implement an aperture with less than 30 nm, which can be drilled, for example, by a focused ion beam (FIB) (16, 17). Another possibility to confirm the expected nm resolution of our combined system of ion trap and ion optics is to measure the achieved resolution after implanting the ions into solid state surfaces. With a STM, it is possible to identify subsurface impurities with nm resolution, produced by cobalt particles in a copper bulk material, for example (38). A further method to confirm the resolution of single implanted ions makes use of generated NV colour centres in diamond (5). Dipolar coupling of single nuclei localized close to the defect can be used to measure the achieved implantation resolution.

Acknowledgment

We acknowledge financial support by the Landesstiftung Baden-Württemberg in the framework 'atomics' (Contract No. PN 63.14) and the 'Eliteprogramm Postdoktorandinnen und Postdoktoranden', the European commission within EMALI (Contract No. MRTN-CT-2006-035369) and the VolkswagenStiftung.

References

- Shinada, T.; Okamoto, S.; Kobayashi, T.; Ohdomari, I. Nature 2005, 437, 1128.
 Kane, B. E. Nature 1998, 393, 133.
 Greentree, A.D.; Fairchild, B.A.; Hossain, F. M.; Prawer, S. Materials Today 2008, 11, 22.
 Gurudev Dutt, M. V.; et al. Science 2007, 316, 1312.

- Gurudev Dutt, M. V.; et al. Science 2007, 316, 1312.
 Neumann, P.; et al. Science 2008, 329, 1326.
 O'Brien, J. L.; et al. Phys. Rev. B 2001, 64, 161401(R).
 Schofield, S.R.; et al. Phys. Rev. Lett. 2003, 91, 136104.
 Ruess, F.J.; et al. Nano Letters 2004, 4(10), 1969.
 Pok, W.; et al. IEEE Trans. Nanotech. 2007, 6(2), 213.

- (3) 105, W., et al. *IEEE Trans. Natioect.* 2007, *6*(2), 213.
 (10) Ruess, F. J.; et al. *Small* 2007, *3*(4), 563.
 (11) Shinada, T.; et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2002, *41*, L 287.
 (12) Persaud, A.; et al. *QIP* 2004, *3*, 233.
 (13) Mitic, M.; et al. *Microelectron. Eng.* 2005, *78*, 279.

- (14)
- (16)
- (17)
- Mitic, M.; et al. Microelectron. Eng. 2005, 78, 279.
 Batra, A.; et al. Appl. Phys. Lett. 2007, 91, 193502.
 Shinada, T.; et al. Nanotechnology 2008, 19, 345202.
 Meijer, J.; et al. Appl. Phys. A 2006, 83, 321.
 Meijer, J.; et al. Appl. Phys. A 2008, 91, 567.
 Schnitzler, W.; et al. Phys. Rev. Lett. 2009, 102, 070501.
 Roos, C. F.; et al. Phys. Rev. Lett. 2009, 85, 5547.
 King, B. E.; et al. Phys. Rev. Lett. 1998, 81, 1525.
 Huber, G.; et al. New J. Phys. 2008, 10, 013004.
 Nägerl, H.; et al. Optics Express 1998, 3, 89.
 Drewsen, M.; et al. Phys. Rev. Lett. 2004, 93, 243201. (18)
- (19)
- (20)
- (21)(22)
- (23)
- (25)
- Brageri, H., et al. Optics Topics 1050, 9, 65.
 Drewsen, M.; et al. Phys. Rev. Lett. 2004, 93, 243201.
 Schmidt-Kaler, F.; et al. Appl. Phys. B 2001, 73, 807.
 Greengard, L.; The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems; M.I.T. Press, 1988.
 Nabors, K.; Korsmeyer, F.T.; Leighton, F.T.; and White, J.; SIAM J. Sci. Stat. Comp. 1994, 713.

| March 11, 2009 | 11:29 | Journal of Modern Optics | implant JMO submitted | |
|----------------|--|--|---|-----------------|
| | | | REFERENCES | 17 |
| | (27) (28) (29) (30) (31) (32) (33) (34) (35) (36) (37) (38) | Weißbäcker, Ch.; Rose, H. Jpr Weißbäcker, Ch.; Rose, H. Jpr Szep, J.; Szilagyi, M. IEEE 14 Hawkes, P. W.; Kasper, E. Pr Liebl, H.; Applied Charged Pa Shimizu, K. Jpn. J. Appl. Phy Schönhense, G.; Spiecker, H. J. Riddle, G. H. N. J. Vac. Sci. Septier, A. CERN Report 196 Scherzer, O. Z. Phys. 1936, 1 Rowe, M.A.; et al. Quant. Inf. Weismann, A.; et al. Science 2 | Soc. Elec. Microscopy 2001, 50, 383. Soc. Elec. Microscopy 2002, 51, 45. 88, 35, 1181. inciples Of Electron Optics; London: Academ tricle Optics; Berlin: Springer, 2008. 8: 1983, 22, 1623. Vac. Sci. Technol. B 2002, 20, 2526. Technol. 1978, 15, 857. 0, 60-39. 01, 593. Comp. 2002, 2, 257. 2009, 323, 1190. | ic Press, 1989. |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |

Literaturverzeichnis

- E. Schrödinger, Are there quantum jumps? PART II, British Journal of the Philosophy of Science 3, S. 240 (1952).
- [2] K. Autumn et al., Adhesive force of a single gecko foot-hair, Nature 405, S. 681 (2000).
- [3] R. Wing et al., Crystal structure analysis of a complete turn of B-DNA, Nature 287, S. 755 (1980).
- [4] G. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, Electronics 38, Nr. 8 (1965).
- [5] S. Natarajan et al., A 32nm logic technology featuring 2ⁿd-generation high-k + metalgate transistors, enhanced channel strain and 0.171μm² SRAM cell size in a 291Mb array, Electron Devices Meeting 2008 IEEE IEDM 2008 (2008).
- [6] Y. Manin, Computable and Uncomputable (auf Russisch), Sovetskoye Radio, (1980).
- [7] R. Feynman, Simulating physics with computers, International Journal of Theoretical Physics 21, Nr. 6/7, S. 476 (1982).
- [8] P. W. Shor, Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer, arXiv:9508027v2 [quant-ph] (1996).
- [9] L. K. Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, ar-Xiv:9605043v3 [quant-ph] (1996).
- [10] D. Deutsch, R. Josza, Rapid Solution of Problems by Quantum Computation, Proceedings of the Royal Society London A 439, S. 553 (1992).
- [12] The International Technology Roadmap for Semiconductors, 2007 edition.

- [13] P. Ebert, N. D. Jäger, K. Urban, E. R. Weber, Nanoscale fluctuations in the distribution of dopant atoms: Dopant-induced dots and roughness of electronic interfaces, Journal of Vacuum Science and Technology B 22, Nr. 4, S. 2018 (2004).
- [14] N. Sano, M. Tomizawa, Random dopant model for three-dimensional drift-diffusion simulations in metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors, Applied Physics Letters 79, Nr. 14, S. 2267 (2001).
- [15] T. Shinada1, S. Okamoto, T. Kobayashi, I Ohdomari, Enhancing semiconductor device performance using ordered dopant arrays, Nature 437, S. 1128 (2005).
- [16] H. Häffner et al., Scalable multiparticle entanglement of trapped ions, Nature 438, S. 643 (2005).
- [17] D. Leibfried et al., Creation of a six-atom Schrödinger cat state, Nature 438, S. 639 (2005).
- [18] D. L. Moehring et al., Ion Trap Networking: Cold, Fast, and Small LASER SPEC-TROSCOPY Proceedings of the XVII International Conference, S. 421-42 (2005).
- [19] B. E. Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, Nature 393, S. 133 (1998).
- [20] M. S. Brandt et al., Spin Echoes in the Charge Transport through Phosphorus Donors in Silicon, Physical Review Letters 100, S. 177602 (2008).
- [21] D. R. McCamey et al., Electrically detected magnetic resonance in ion-implanted Si:P nanostructures, Applied Physics Letters 89, S. 182115 (2006).
- [22] J. J. L. Morton, Solid-state quantum memory using the ³1P nuclear spin, Nature 455, S. 1085 (2008).
- [23] L. C. L. Hollenberg et al., Charge-based quantum computing using single donors in semiconductors, Physical Review B 69, S. 113301 (2004).
- [24] G. P. Lansbergen et al., Gate-induced quantum-confinement transition of a single dopant atom in a silicon FinFET Nature Physics 4, S. 656 (2008)
- [25] S. G. Schirmer, D. K. L. Oi, A. D. Greentree, Controlled phase gate for solid-state charge-qubit architectures Physical Review A 71, S. 012325 (2005).
- [26] A. D. Greentree, B. A. Fairchild, F. M. Hossain, S. Prawer, *Diamond integrated quantum photonics*, Materials Today 11, Nr. 9, S.22 (2008).
- [27] S. Prawer, A. D. Greentree, *Diamond for Quantum Computing*, Science **320**, S.1601 (2008).

- [28] J. Wrachtrup, F. Jelezko, Processing quantum information in diamond, Journal of Physics: Condensed Matter 18, S. 807 (2006).
- [29] T. Gaebel et al., Room-temperature coherent coupling of single spins in diamond, Nature Physics 2, S. 408 (2006).
- [30] F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa, A. Gruber, J.Wrachtrup, Observation of Coherent Oscillations in a Single Electron Spin, Physical Review Letters 92, Nr. 7, S. 076401-1 (2004).
- [31] L. Childress et al., Coherent Dynamics of Coupled Electron and Nuclear Spin Qubits in Diamond, Science 314, S. 281 (2006).
- [32] P. Neumann et al., Multipartite Entanglement Among Single Spins in Diamond, Science 320, S. 1326 (2008).
- [33] M. V. Gurudev Dutt et al., Quantum Register Based on Individual Electronic and Nuclear Spin Qubits in Diamond, Science 316, S. 1312 (2007).
- [34] P. Kok, B. W. Lovett, *Qubits in the pink*, Nature 444, S. 49 (2006).
- [35] R. Hanson, F. M. Mendoza, R. J. Epstein, D. D. Awschalom, *Polarization and Readout of Coupled Single Spins in Diamond*, Physical Review Letters **97**, S. 087601 (2006).
- [36] S. J. Devitt et al., Photonic module: An on-demand resource for photonic entanglement, Physical Review A 76, S. 052312 (2007).
- [37] C.-H. Su, A. D. Greentree, L. C. L. Hollenberg, Towards a picosecond transformlimited nitrogen-vacancy based single photon source, Optics Express 16, Nr. 9, S. 6240 (2008).
- [38] J. R. Maze et al., Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond, Nature 455, S. 644 (2008).
- [39] J. M. Taylor et al., High-sensitivity diamond magnetometer with nanoscale resolution, Nature Physics 4, S. 810 (2008).
- [40] J. L. O'Brien et al., Towards the fabrication of phosphorus ubits for a silicon quantum computer, Physical Review B 64, S. 161401 (2001).
- [41] S. R. Schofield et al., Atomically Precise Placement of Single Dopants in Si, Physical Review Letters 91, Nr. 13, S. 136104 (2003).
- [42] W. Pok et al., Electrical Characterization of Ordered Si:P Dopant Arrays, IEEE Transactions on Nanotechnology 6, Nr. 2, S. 213 (2007).

- [43] F. J. Rueß et al. Toward Atomic-Scale Device Fabrication in Silicon Using Scanning Probe Microscopy, Nano Letters N4, Nr. 10, S. 1969 (2004).
- [44] F. J. Rueß et al., Realization of Atomically Controlled Dopant Devices in Silicon, Small 2007 3, Nr. 4, S. 563 (2007).
- [45] T. Shinada, Y. Kumura, J. Okabe, T. Matsukawa, I. Ohdomari, *Current status of single ion implantation*, Journal of Vacuum Science and Technology B 16, Nr. 4., S. 2489 (1998).
- [46] T. Shinada, A. Ishikawa, M. Fujita, K. Yamashita, I. Ohdomari, Influence of Secondary Electron Detection Efficiency on Controllability of Dopant Ion Number in Single Ion Implantation, Japanese Journal of Applied Physics 38, S.3419 (1999).
- [47] T. Shinada, H. Koyama, C. Hinoshita, K. Imamura, I. Ohdomari, Improvement of Focused Ion-Beam Optics in Single-Ion Implantation for Higher Aiming Precision of One-by-One Doping of Impurity Atoms into Nano-Scale Semiconductor Devices Japanese Journal of Applied Physics 41, S. L287 (2002).
- [48] A. Persaud et al., Single ion implantation with scanning probe alignment, Journal of Vacuum Science and Technology B 22, Nr. 6, S. 2992 (2004).
- [49] A. Persaud et al., SQuantum Computer Development with Single Ion Implantation, Quantum Information Processing 3, Nr. 1-5, S. 233 (2004).
- [50] E. Sideras-Haddad et al., Electron emission and defect formation in the interaction of slow, highly charged ions with diamond surfaces, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 256, S. 464 (2007).
- [51] D. N. Jamieson et al., Controlled shallow single-ion implantation in silicon using an active substrate for sub-20-keV ions, Applied Physics Letters 86, S. 202101 (2005).
- [52] M. Mitic et al., Single atom Si nanoelectronics using controlled single-ion implantation, Microelectronic Engineering 78–79, S. 279 (2005).
- [53] T. Hopf et al., Low-Noise Detection System for the Counted Implantation of Single Ions in Silicon, IEEE Transactions on Nuclear Science 55, Nr. 2, S. 812 (2008).
- [54] A. Greiner, Erzeugung eines lasergekühlten Atomstrahls in einem Magnetleiter Eine intensive Quelle für die Atomlithographie, Dissertation, Universität Stuttgart (2008).
- [55] A. Greiner et al., Loading chromium atoms in a magnetic guide Journal of Physics B 40, S. F77 (2007).
- [56] A. M. Steane, M. Chowdhury, C. J. Foot, *Radiation force in the magneto-optical trap*, Journal of the Optical Society of America B 9, S. 2142 (1992).

- [57] S. B. Hill, J. J. McClelland, Atoms on demand: Fast, deterministic production of single Cr atoms, Applied Physics Letters 82, Nr. 18, S. 3128 (2003).
- [58] J. L. Hanssen, J. J. McClelland, E. A. Dakin, M. Jacka, Laser-cooled atoms as a focused ion-beam source, Physical Review A 74, S. 063416 (2006).
- [59] J. L. Hanssen, S.B. Hill, J. Orloff, J. J. McClelland, Magneto-Optical-Trap-Based, High Brightness Ion Source for Use as a Nanoscale Probe, Nano Letters 8, Nr. 9, S. 2844 (2008).
- [60] J. Meijer et al., Concept of deterministic single ion doping with sub-nm spatial resolution, Applied Physics A 83, S. 321 (2006).
- [61] M. Drewsen, A. Mortensen, R. Martinussen, P. Staanum, and J. L. Sørensen, Nondestructive Identification of Cold and Extremely Localized Single Molecular Ions, Physical Review Letters 93, S. 243201 (2004).
- [62] J. Meijer et al., Towards the implanting of ions and positioning of nanoparticles with nm spatial resolution, Applied Physics A 91, S. 567 (2008).
- [63] G. Huber et al., Transport of ions in a segmented linear Paul trap in printed-circuitboard technology, New Journal of Physics 10, S. 013004 (2008).
- [64] H.C. Nägerl, D. Leibfried, F. Schmidt-Kaler, J. Eschner, R. Blatt, Coherent excitation of normal modes in a string of Ca+ ions, Optics Express 3, Nr. 2, S. 89 (1998).
- [65] W. Schnitzler, N. M. Linke, R. Fickler, J. Meijer, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, *Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit*, Physical Review Letters 102, S. 070501 (2009).
- [66] R. Fickler, W. Schnitzler, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution, eingereicht im März 2009 für Journal of Modern Optics, arXiv:0903.3425v1 [quant-ph] (2009).
- [67] N. M. Linke, Kalte Ionenkristalle in einer segmentierten Paul-Falle als deterministische Einzelionenquelle, Diplomarbeit, Universität Ulm (2007).
- [68] J. F. Eble, Stabilisierung von Lasern zum Erzeugen und K"uhlen von Ionen in einer Paul-Falle, Diplomarbeit, Universität Ulm (2006).
- [69] R. W. P. Drever et al., Laser Phase and Frequency Stabilization Using an Optical Resonator, Applied Physics B 31, S. 97 (1983).
- [70] K. Singer, S. Jochim, M. Mudrich, A. Mosk, and M. Weidemüller, Low-cost mechanical shutter for light beams, Review of Scientific Instruments 73, S. 4402 (2002).

- [71] S. A. Schulz, U. G. Poschinger, F. Ziesel, F. Schmidt-Kaler, Sideband cooling and coherent dynamics in a microchip multi-segmented ion trap, New Journal of Physics 10, S. 045007 (2008).
- [72] U. G. Poschinger et al., Coherent Manipulation of a 40Ca+ Spin Qubit in a Micro Ion Trap, arXiv:0902.2826v1 [quant-ph] (2009).
- [73] N. Kjaergaard, L. Hornekaer, A.M. Thommesen, Z. Videsen, M. Drewsen, *Isotope selective loading of an ion trap using resonance-enhanced two-photon ionization*, Applied Physics B **71**, S. 207 (2000).
- [74] T. W. Deuschle, Kalte Ionenkristalle in einer segmentierten Paul-Falle, Dissertation, Universität Ulm (2006).
- [75] F. Ziesel, Spektroskopie und Transport von Ionen in einer Mikrofalle, Diplomarbeit, Universität Ulm (2008).
- [76] G. Morigi, J. Eschner, C. H. Keitel, Ground State Laser Cooling Using Electromagnetically Induced Transparency, Physical Review Letters 85, Nr. 21, S. 4458 (2000).
- [77] C. F. Roos et al., Experimental Demonstration of Ground State Laser Cooling with Electromagnetically Induced Transparency, Physical Review Letters 85, Nr. 26, S. 5547 (2000).
- [78] G. Schütz, Kühlen von Ionenketten mit elektromagnetisch induzierter Transparenz, Diplomarbeit, Universität Ulm (2009).
- [79] D. J. Berkeland, J. D. Miller, J. C. Bergquist, W. M. Itano, D. J. Wineland, *Mini*mization of ion micromotion in a Paul trap, Journal of Applied Physics 83, Nr. 10, S. 5025 (1998).
- [80] D. Larson, J. Bergquist, J. Bollinger, W. Itano, and D. Wineland, Sympathetic Cooling of Trapped Ions: A Laser-Cooled Two-Species Nonneutral Ion Plasma, Physical Review Letters 57, S. 70 (1986).
- [81] G. Morigi, H. Walther, Low temperature dynamics and laser-cooling of two-species Coulomb chains for quantum logic, arXiv:0005082v3 [quant-ph] (2000).
- [82] D. M. Meekhof, C. Monroe, B. E. King, W. M. Itano, D. J. Wineland, Generation of Nonclassical Motional States of a Trapped Atom, Physical Review Letters 76, Nr. 11, S. 1796 (1996).
- [83] D.W.O. Heddle, *Electrostatic Lens Systems*, Bristol: Institute of Physics Publishing ²2000.

- [84] G. H. N. Riddle, Electrostatic einzel lenses with reduced spherical aberration for use in field-emission guns, Journal of Vacuum Science and Technology 15, Nr. 1, S. 857 (1978).
- [85] H. Liebl, Applied Charged Particle Optics, Berlin: Springer 2008.
- [86] S. Nomura, Electrostatic accel-decel lens with the advantage of reduced chromatic aberration, Journal of Vacuum Science and Technology B 16, Nr.1, S. 104 (1998).
- [87] P. W. Hawkes, E. Kasper, *Principles Of Electron Optics*, London: Academic Press 1989.
- [88] K. Shimizu, Determination of the Optimum Electron Shape of Electrostatic Einzel Lenses, Japanese Journal of Applied Physics 22, S. 1623 (1983).
- [89] A. Septier, Aberration spherique de quelques lentilles electrostatiques a symetrie de revolution pour des faisceaux de grande ouverture, CERN Report 60-39, (1960).
- [90] O. Scherzer, Über einige Fehler von Elektronenlinsen, Zeitschrift für Physik A 101, Nr. 9-10, S. 593 (1936).
- [91] G. Schönhense, H. Spiecker, Correction of chromatic and spherical aberration in electron microscopy utilizing the time structure of pulsed excitation sources, Journal of Vacuum Science and Technology B 20, S. 2526 (2002).
- [92] M.A. Rowe et al., Transport of Quantum States and Separation of Ions in a Dual RF Ion Trap, Quantum Information and Computation 2, S. 257 (2002).
- [93] J. Meijer et al., Generation of single color centers by focused nitrogen implantation, Applied Physics Letters 87, S. 261909 (2005).
- [94] A. J. Heinrich, Looking Below the Surface, Science **323**, S. 1178 (2009).
- [95] A. Weismann et al., Seeing the Fermi Surface in Real Space by Nanoscale Electron Focusing, Science 323, S. 1190 (2009).
- [96] C.A. Brebbia, J. Dominguez, Boundary Elements An Introductory Course, Boston: WIT Press ²1992.
- [97] A. A. Becker, The boundary element method in engineering: a complete course, New York: McGraw-Hill Book Company 1992.
- [98] L. Shen, Y. J. Liu, An adaptive fast multipole boundary element method for threedimensional potential problems, Computational Mechanics 39, S. 681 (2007).

- [99] L. Greengard, V. Rohklin, A New Version of the Fast Multipole Mthod for the Laplace Equation in Three Dimensions, Research Report YALEU / DCS RR-1115, (1996).
- [100] G. Of, *Die Multipolmethode für Randintegralgleichungen*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2001).
- [101] L. Verlet, Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, Physical Review 159, Nr. 1, S. 98, (1967).
- [102] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, New Delhi: Foundation Books / Cambridge University Press First South East Asia Edition 2002.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Ulm, den 14. April 2009

Robert Alexander Fickler