Fokussierung einzelner kalter Ionen zur nm genauen Dotierung von Festkörpern

Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades Diplom-Physiker

vorgelegt von

Georg Jacob

30. Juli 2010

Abstract

The ongoing progress in the miniaturisation of semiconductor chips causes a decline in the size of its building blocks. As a consequence, statistical fluctuations in the spatial arrangement as well as in the number of doping atoms can result in a functional impairment, ultimately leading to a device failure. Hence, developing a method which allows one to deterministically implant single doping atoms into solid state materials with high accuracy is of crucial relevance for a further miniaturization of semiconductor structures. In addition, the deterministic implantation of single dopants could allow for the realization of a solid state quantum computer or the fabrication of quantum repeaters for communication purposes.

The starting point of this work, an ion source based on a segmented linear Paul trap was already existent, allowing for the extraction of a random number of 40 Ca⁺ ions at a certain point of time. During this diploma thesis, the ion source was upgraded in order to deterministically load a predetermined number of ions. Here, an efficiency of 96.7(7) % has been achieved. A single-ion beam, which was produced by this source, was focused by means of an electrostatic einzel-lens. Starting from an initial 1 σ -spot radius of about 50 µm, it was shown that the ion beam could be focused down to (4.62 ± 1.25) µm. Thus, it was reduced to about 10% of its initial size. Furthermore, numerical simulations were carried out in order to develop a switchable einzel-lens, which is not only capable of focusing the ions, but also allows for accelerating them to energies in the range of 2-6 keV for a prospective implantation into a substrate. For Doppler cooled ions, the 1 σ -spot radius is expected to be in the range of a few nanometers and for ground state cooled ions even in the 10⁻¹⁰ m range at a depth of a few nanometers.

Kurzfassung

Infolge einer fortschreitenden Steigerung der Dichte von Bauelementen auf einem Halbleiterchip, sinkt entsprechend die Größe der einzelnen Komponenten. Damit einhergehend erreichen statistische Fluktuationen in der räumlichen Anordnung und der Anzahl von Dotieratomen Funktionsbeeinträchtigende Ausmaße. Somit ist die Entwicklung von Verfahren, welche das Implantieren einer deterministischen Anzahl von Atomen mit höchster Genauigkeit erlauben, von entscheidender Relevanz für eine weitere Miniaturisierung von Halbleiterstrukturen. Ein anderes zukünftiges Anwendungsfeld deterministischen Dotierens besteht in einem Festkörper Quantencomputer oder auch in einem Quantenrepeater für Kommunikationszwecke.

Zu Beginn dieser Arbeit existierte bereits eine auf einer Paul-Falle basierende Ionenquelle, die in der Lage ist, eine zufällige Anzahl von ⁴⁰Ca⁺ Ionen zu einem exakt festgelegten Zeitpunkt zu extrahieren. Im Verlauf dieser Diplomarbeit wurde diese Ionenquelle um die Fähigkeit, eine vorher festgelegte Anzahl von Ionen deterministisch zu laden erweitert. Die dabei erzielte Effizienz beträgt 96.7(7) %. Ein mit dieser Quelle erzeugter Ionenstrahl aus einzelnen Ionen wurde zudem mittels einer elektrostatischen Einzellinse fokussiert. Mit einer speziellen Messmethode konnte nachgewiesen werden, dass der Ionenstrahl dadurch von einem anfänglich mehr als 50 µm großen 1 σ -Radius auf (4, 62 ± 1, 25) µm fokussiert und somit auf rund 10 % seiner ursprünglichen Größe reduziert wird. Des Weiteren wurden numerische Simulationen durchgeführt, um eine geschaltete Einzellinse zu entwickeln, welche die extrahierten Ionen sowohl zu fokussieren, als auch deren kinetische Energie etwa für eine Implantation in ein Substrat - durch Nachbeschleunigen zu steigern vermag. Für Dopplergekühlte Ionen lassen die Ergebnisse einen 1 σ -Radius von wenigen Nanometern und für grundzustandsgekühlte Ionen sogar im Bereich von 10⁻¹⁰ m erwarten, während sie gleichzeitig auf Energien von 2-6 keV beschleunigt werden.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung				1					
2	The	Theoretische Grundlagen							
	2.1	Die lineare Paul-Falle							
		2.1.1	Dynamische Speicherung von Ionen	5					
		2.1.2	Moden der Bewegung	9					
	2.2	Ionenc	ptik	12					
		2.2.1	Theorie der Ionenoptik	12					
		2.2.2	Numerische Verfahren	14					
	2.3	Licht -	Ion Wechselwirkung	17					
		2.3.1	Dipolübergänge und Fluoreszenz Detektion	17					
		2.3.2	Dopplerkühlen von Kalzium	18					
		2.3.3	Photoionsiation von Kalzium	19					
		2.3.4	Photoionsiation von Dotierungsatomen	20					
3	Aufbau des Implantationsexperimentes 23								
	3.1	Vakuu	mkammer	23					
	3.2 Lasersysteme			25					
	3.3 Fallendesign								
	3.4	Ionenc	ptik	27					

	3.5	Ionenc	letektor	28			
	3.6	Exper	Experimentsteuerung				
4	4 Messverfahren und Ergebnisse			31			
	4.1	1 Die Paul-Falle als deterministische Ionenquelle					
		4.1.1	Laden von Kalzium Ionen	31			
		4.1.2	Fangen, kühlen und identifizieren anderer Elemente	33			
		4.1.3	Deterministisches Reduzieren der Anzahl der gefangenen Ionen	35			
		4.1.4	Extraktionsprozess und Detektion	36			
	4.2	Bestin	nmung des Strahldurchmessers	38			
		4.2.1	Beschreibung des verwendeten Messverfahrens	38			
		4.2.2	Numerische Simulationen	41			
		4.2.3	Messungen mittels einer Schneidkante	44			
5	Ver	besser	te Abbildungsoptik	49			
	5.1	Simula	ationen zur Nachbeschleunigung der Ionen	50			
	5.2	Konsti	ruktion und Bau	54			
6	Zus	ammei	nfassung und Ausblick	55			
A	Konstruktionszeichnung der Linse						
в	Wis	Wissenschafftliche Publikationen 6					

Abbildungsverzeichnis

2.1	Skizze der Stabfalle	6
2.2	Stabilitätsdiagramm der Paul-Falle	9
2.3	Termschema von ionisiertem Kalzium	17
2.4	Termschema von neutralem Kalzium	19
2.5	Mehrphotonenionisation	21
3.1	Computergraphik der Magdeburger Halbkugel	24
3.2	Bild des Vakuumaufbaus	25
3.3	Schema eines Fallenflügels	26
3.4	Skizze der Einzellinse mit Abmessungen und Foto	27
3.5	Bild des Detektors	29
3.6	Bildschirmaufnahme der MCP Programmoberfläche	30
4.1	Simulation der Potentiale in axialer und radialer Richtung	32
4.2	Bilder der Ionenkristalle	33
4.3	Simulation des axialen Potentials	35
4.4	Simulation des axialen Potentials zur Extraktion	37
4.5	Schema des Messverfahrens	38
4.6	Gaußsche Fehlerfunktion	39
4.7	Strahlengang durch eine Linse	40

4.8	Plot der Standardabweichung des Strahlprofils	41
4.9	Plots der Potentiale der Linsen	43
4.10	Trajektorien mit Schneide	44
4.11	Simulation der Transmissionsrate in Abhängigkeit der Schneidenposition	45
4.12	Experimentelle Bestimmung des Strahldurchmessers	46
4.13	Strahlradien als Funktion des Versatzes des Strahls	46
5.1	Potential der Beschleunigungslinse	51
5.2	Querschnitt der Beschleunigungslinse	52
5.3	Fokusradius in Abhängigkeit der Fluktuation des Schaltzeitpunktes	53
5.4	Bild der Beschleunigungslinse	54

Einleitung

Mit dem Aufkommen der elektronischen Datenverarbeitung durch die Verfügbarkeit leistungsfähiger integrierter Schaltkreise in den 70er und 80er Jahren des letzten Jahrhunderts, wurde eine Entwicklung angestoßen, die ob ihrer heutigen gesellschaftlichen und kulturellen Relevanz, als Auftakt eines Informationszeitalters betrachtet werden kann. Die Auswirkungen in einer solchen Tragweite sind nicht zuletzt der charakteristischen Dynamik dieser Entwicklung geschuldet, welche sich bereits 1965 im sogenannten Moorschen Gesetz [Moo65], wonach sich die Komplexität integrierter Schaltkreise etwa alle zwei Jahre verdoppelt, manifestierte. Als Konsequenz einer steigenden Bauelementedichte auf einem Halbleiterchip, sinkt entsprechend die Größe der einzelnen Transistoren. Der gegenwärtige Stand der Technik erlaubt bereits Strukturgrößen im unteren zweistelligen Nanometerbereich. In dieser Größenordnung erreichen statistische Fluktuationen in der Anzahl der Dotieratome eines Transistors bereits funktionsbeeinträchtigende Ausmaße, so dass die Gewährleistung einer konstanten Anzahl sowie eine exakte Platzierung der Dotieratome unabdingbare Voraussetzungen für eine weitere Verkleinerung der Strukturen darstellen.

Überdies ist in naher Zukunft mit einem Vordringen in Größenordnungen, bei denen Quanteneffekte eine Rolle spielen, zu rechnen. Während dererlei Effekte in einer herkömmlichen Konzeption unerwünscht sind, eröffnen sie andererseits die Möglichkeit neuartiger Verfahren der Informationsverarbeitung auf Grundlage ihrer Quantennatur. Der am weitesten verbreitete Ansatz hierbei ist sicherlich das Speichern von binärer Information in quantenmechanischen Zweiniveausystemen, Quantenbits oder kurz Qubits genannt. Die Zweckmäßigkeit einer darauf basierenden Informationsverarbeitung unter expliziter Ausnutzung von Quanteneffekten konnte bereits David Deutsch beweisen [Deu92]. Damit wurde auch der Startschuss für eine Suche nach weiteren Algorithmen gegeben, der bis heute beträchtliche Erfolge beschieden sind. So zeigt beispielsweise ein von Peter Shor entwickelter Algorithmus [Sho97], verglichen mit einem konventionellen Ansatz, einen fundamentalen Geschwindigkeitsvorteil beim Berechnen der Primteiler einer Zahl. Diese Algorithmen profitieren dabei alle von einer wesentlichen Eigenschaft der Quantenmechanik, nämlich dem Superpositionsprinzip, welches ein paralleles Auswerten mehrerer Rechenwege ermöglicht. Ein entsprechender Algorithmus muss nun derart beschaffen sein, dass sich die gesuchte Lösung gewissermaßen heraus interferiert. Eine Quanteninformationsverarbeitung, wie sie bereits in etlichen Feldern der experimentellen Physik Gegenstand der Forschung ist, könnte auf der Basis von Halbleitertechnik von deren guten Eigenschaften hinsichtlich der Skalierbarkeit sowie der Möglichkeit einer Fertigung im industriellen Maßstab profitieren. Ein entsprechender Vorschlag wurde schon 1998 von Bruce Kane gemacht [Kan98]. Dabei werden Kernspinzustände von Phosphoratomen in einem Siliziumsubstrat als Speicher quantenmechanischer Information verwendet. Ein weiterer vielversprechender Kandidat für die Realisierung eines Festkörperquantenkomuters sind Farbzentren in Diamant [Gre08, Pra08]. Auch bei diesen beiden Vorschlägen ist das exakte Positionieren und die Gewährleistung eines bestimmten Abstandes der als Quantenbits dienenden Systeme entscheidend.

Etablierte Implantationsverfahren, basierend auf thermischen Quellen mit einer daraus resultierenden statistischen Charakteristik, sind sämtlich auf eine nachträgliche Detektion des Implantationsereignisses angewiesen, was eine Reihe von Nachteilen mit sich bringt. Im Falle der Detektion durch Sekundärelektronen [Shi99] etwa sind entweder relativ hohe Geschwindigkeiten erforderlich, so dass beim Eintreten der Ionen in den Festkörper Streueffekte auftreten, welche die laterale Auflösung verschlechtern und das Substrat beschädigen können; oder man benötigt mehrfach geladene Ionen, was wiederum die Auswahl an verfügbaren Elementen einschränkt. Eine weitere Möglichkeit ist die Detektion von Elektron-Loch Paaren die infolge einer Implantation auftreten [Jam05]. Dieses Verfahren setzt jedoch ein spezielles Implantationssubstrat voraus, welches gleichzeitig als Detektor fungiert. Bei einem weiteren Verfahren wird eine einatomige Schicht aus Wasserstoff [O'B01, Sch03] auf eine hochreine Siliziumoberfläche aufgebracht. Mit einer STM-Spitze werden nun einzelne Atome daraus entfernt. Die so entstehenden Fehlstellen lassen sich nun durch Phosphoratome ersetzten. Damit lassen sich Genauigkeiten im Subnanometerbereich erzielen, die Methode ist jedoch auf Siliziumoberflächen beschränkt.

Deterministische Quellen auf der Basis von Atom- oder Ionenfallen benötigen keine nachträgliche Detektion des Implantationsereignisses und sind auch nicht auf spezielle Substrate angewiesen. Zu diesen zählt auch die in dieser Arbeit präsentierte Methode zur Implantation einzelner Ionen in Festkörperoberflächen. Die verwendete Quelle auf Grundlage einer linearen Paul-Falle erlaubt das deterministische Extrahieren von Ionen einer Vielzahl von Elementen unabhängig von der Art und Beschaffenheit des Substrates. Aufgrund der divergenten Eigenschaft des hierbei erzeugten Ionenstrahls, ist für das punktgenaue Dotieren eine Fokussiereinrichtung notwendig. Im vorliegenden Fall wird dies durch eine elektrostatische Einzellinse gewährleistet, deren Fokussiereigenschafften in dieser Arbeit erstmals vermessen wurden. Des Weiteren wurde eine neuartige Linse entwickelt mit der es einmal möglich sein wird, Ionen zusätzlich zu beschleunigen um somit die für eine Implantation erforderlichen Energien zu erreichen. 

Theoretische Grundlagen

2.1 Die lineare Paul-Falle

Die lineare Paul-Falle oder auch Quadrupol-Ionenfalle ist eine Weiterentwicklung des von Wolfgang Paul entwickelten elektrischen Massenfilters [Pau53]. Sie erlaubt die Speicherung von Ionen und Ionenkristallen in dynamischen elektrischen Feldern.

2.1.1 Dynamische Speicherung von Ionen

Da ein elektrostatisches Potentialminimum nicht in allen drei Raumrichtungen gleichzeitig möglich ist, muss ein räumlicher Einschluss geladener Teilchen mit dynamischen elektrischen Feldern erfolgen. Diese Behauptung ist aufgrund folgender Überlegung zwingend. Ein solches Potentialminimum hat in erster Näherung die Form:

$$\Phi \sim \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2, \tag{2.1}$$

während die Koeffizienten α , β und γ positiv sein müssen. Aufgrund der Laplacegleichung

$$\triangle \Phi = 0 \tag{2.2}$$

ist dies jedoch nicht möglich, da beim Einsetzen der Beziehung (2.1) sofort die Bedingung

$$\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2 = 0 \tag{2.3}$$

folgt. Für die Erfüllung der Laplacegleichung durch ein Potential der Form (2.1) ist es also stets erforderlich, dass einer der Koeffizienten ein negatives Vorzeichen aufweist.

Um dennoch ein geladenes Teilchen in allen drei Raumrichtungen einzuschließen, wird nun im Falle der Paul-Falle in einer Ebene (hier o.B.d.A die *x-y*-Ebene) ein zeitlich veränderliches Potential verwendet, d.h. einer der beiden entsprechenden Koeffizienten (hier α und β) wird zeitlich abwechselnd negativ gesetzt. Aufgrund der Massenträgheit der eingeschlossenen Partikel entsteht nun in dieser Ebene, die im Folgenden als radiale Ebene bezeichnet wird, ein sogenanntes Pseudopotential. Der Einschluss senkrecht dazu - gemäß obiger Konvention in axialer Richtung - erfolgt durch ein gewöhnliches elektrostatisches Potentialminimum, d.h. durch Wahl des dritten Koeffizienten (hier γ) mit einem positiven Vorzeichen.

Anschaulich klarmachen kann man sich das Funktionsprinzip am Beispiel der Stabfalle, wie sie in Abbildung 2.1 zu sehen ist. Der radiale Einschluss wird dabei durch das dynamische Quadrupol-Potential der Stabelektroden, welche durch Anlegen einer Wechselspannung an ein gegenüberliegendes Paar selbiger erreicht wird, gewährleistet. Das resultierende Potential hat die Form eines Sattels, dessen Enden abwechselnd nach oben und unten schwingen. Der axiale Einschluss geschieht mittels sogenannter Endkappen, die auf ein statisches Potential gelegt werden und dadurch im dazwischenliegenden Raum ein Potentialminimum erzeugen.



Abbildung 2.1: Skizze der Stabfalle mit einem gefangenen Ion (blau) in der Mitte.

Um nun die klassische Bewegungsgleichung eines geladenen Teilchens im Potential einer Paul-Falle abzuleiten, beginnt man mit der allgemeinsten Form eines Potentials in quadratischer Näherung, welches einen statischen und einen oszillierenden Anteil besitzt. Man schreibt:

$$\Phi(x, y, z, t) = U_{\text{stat}} \frac{1}{2} \sum_{i} \alpha_{i} x_{i}^{2} + U_{\text{osz}} \cos(\omega_{\text{rf}} t) \frac{1}{2} \sum_{i} \alpha_{i}' x_{i}^{2}, \quad \text{mit} \quad i \in \{x, y, z\}.$$
(2.4)

Hierbei bezeichnet U_{stat} die Amplitude des Gleichspannungsanteils und U_{osz} die Amplitude des oszillierenden Teils. Da das Potential zu jedem Zeitpunkt die Laplacegleichung erfüllen muss, gilt für die Koeffizienten

$$\sum_{i} \alpha_i = 0, \qquad (2.5)$$

$$\sum_{i} \alpha'_{i} = 0. \tag{2.6}$$

Damit man in x-y-Richtung einen dynamischen und in z-Richtung einen statischen Einschluss erhält, wählt man

$$-(\alpha_x + \alpha_y) = \alpha_z > 0, \qquad (2.7)$$

$$\alpha'_x = -\alpha'_y. \tag{2.8}$$

Die Bewegungsgleichung bekommt man durch

$$\vec{F} = Q\vec{E} \tag{2.9}$$

$$m\ddot{\vec{x}} = Z |q| \vec{E} = -Z |q| \nabla \Phi.$$
(2.10)

Für das hier betrachtete Potential (2.4) ergibt sich somit in der radialen Ebene

$$\ddot{x}_i(t) = -\frac{Z|q|}{m} \frac{\partial \Phi(t)}{\partial x_i} = -\frac{Z|q|}{m} \left[U_{\text{stat}} \alpha_i + U_{\text{osz}} \alpha_i' \cos(\omega_{\text{rf}} t) \right] x_i(t), \quad i \in \{x, y\}, \quad (2.11)$$

sowie

$$\ddot{x}_{z}(t) = -\frac{Z|q|}{m} \frac{\partial \Phi(t)}{\partial x_{z}} = -\frac{Z|q|}{m} U_{\text{stat}} \alpha_{z} x_{z}(t)$$
(2.12)

in axialer Richtung, was der Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators entspricht. Damit schwingt das Teilchen in dieser Dimension mit der Kreisfrequenz

$$\omega_z = \sqrt{\frac{Z |q|}{m} U_{\text{stat}} \alpha_z}.$$
(2.13)

Durch Einführen der Substitutionen

$$\xi = \frac{\omega_{\rm rf} t}{2}, \quad a_i = \frac{4QU_{\rm stat}\alpha_i}{m\omega_{\rm rf}^2}, \quad q_i = \frac{4QU_{\rm osz}\alpha_i'}{m\omega_{\rm rf}^2} \tag{2.14}$$

lässt sich (2.11) in der Standarddarstellung der Mathieuschen Differentialgleichung schreiben:

$$\frac{\mathrm{d}^2 x_i}{\mathrm{d}\xi^2} + [a_i - 2q_i \cos(2\xi)] x_i = 0$$
(2.15)

Mit dem Floquet Theorem kann man nun die Lösungen dieser Gleichung errechnen:

$$x(\xi) = Ae^{\mathrm{i}\beta_x\xi} \sum_{N\in\mathbb{Z}} C_2 n e^{\mathrm{i}2n\xi} + Be^{-\mathrm{i}\beta_x\sigma} \sum_{N\in\mathbb{Z}} C_{2n} e^{-\mathrm{i}2n\xi}, \qquad (2.16)$$

wobei β_i eine reelwertige Zahl ist und wie die Koeffizienten C_{2n} von den Parametern a_i und q_i abhängt. A und B sind frei wählbare Konstanten, die genutzt werden können, um die Randbedingungen zu erfüllen. Durch Einsetzen von (2.16) in (2.15) ergeben sich die Rekursionsformeln:

$$C_{2n+2} - D_{2n}C_{2n} + C_{2n-2} = 0, (2.17)$$

$$D_{2n} = \left[a_i - (2n + \beta_i)^2\right] / q_i.$$
(2.18)

Eine Lösung heißt stabil, falls ihre Trajektorie beschränkt ist. Dies ist der Fall für

$$0 < \beta_i < 1, \quad \forall i \in \{x, y, z\}.$$
 (2.19)

Da die β_i nur von a_i und q_i abhängen, ergeben sich daraus die Stabilitätskriterien für die Parameter a_i und q_i . Dabei wird der Bereich

$$a_i = 0 \quad \text{und} \quad q_i = 0, \quad \forall i \in \{x, y, z\},$$
 (2.20)

der erste Stabilitätsbereich genannt (Abbildung 2.2 (b)). Für den gesamten Stabilitätsbereich einer linearen Paul-Falle erhält man mit den Bedingungen (2.8) und mit den Gleichungen (2.14) folgende Beziehungen zwischen den Parametern:

$$q_y = -q_x, \quad q_z = 0.$$
 (2.21)

Abbildung 2.2 (a) zeigt das zugehörige Stabilitätsdiagramm.

Für die Näherungslösung der Mathieugleichung (2.15) gilt laut [Lei03] im Falle von $(|a_i|, q_i) \ll$ 1 und mit der Anfangsbedingung A = B in erster Ordnung

$$x_i(t) \approx 2AC_0 \cos\left(\beta_i \frac{\omega_{\rm rf}}{2} t\right) \left[1 - \frac{q_x}{2} \cos(\omega_{\rm rf} t)\right], \quad {\rm mit} \quad \beta_i \approx \sqrt{a_i + \frac{q_i^2}{2}}.$$
 (2.22)

Wie aus Gleichung (2.22) hervorgeht, besteht die Trajektorie des gefangenen Partikels in der radialen Ebene aus einer Superposition zweier harmonischer Schwingungen: Zum einen die sogenannte Säkularbewegung mit der Frequenz

$$\omega_i = \beta_x \frac{\omega_{\rm rf}}{2} \ll \omega_{\rm rf}, \tag{2.23}$$



Abbildung 2.2: (a) Stabilitätsdiagramm der linearen Paul-Falle. (b) Der erste Stabilitätsbereich mit den Frequenzen ω_x und ω_y in Einheiten von $\omega_{\rm rf}/2$.

die der Schwingung im Pseudopotential

$$\Psi = \frac{1}{2} \sum_{i} m \omega_i^2 r_i^2, \quad \forall i \in \{x, y\}$$

$$(2.24)$$

entspricht, und zum anderen die schnellere, offresonant aufgeprägte Oszillation der Radiofrequenz $\omega_{\rm rf}$, welche auch Mikrobewegung genannt wird. Die Amplitude dieser Mikrobewegung ist, wie Gleichung (2.22) impliziert, proportional zur Auslenkung des Teilchens durch die Säkularbewegung.

Im realen Experiment kann eine zusätzliche Auslenkung des Schwingungsmittelpunktes von der radialen Symmetrieachse entweder durch Streuladungen auf den Elektroden oder räumlichen Abweichungen im Aufbau der Falle hervorgerufen werden, was für realistische Werte die Lösung zwar nicht aus dem Stabilitätsbereich zu schieben vermag, jedoch ebenfalls zu einer verstärkten Mikrobewegung führt. Technisch kann man dies größtenteils mittels Anlegen zusätzlicher statischer Spannungen zwischen gegenüberliegenden Elektroden kompensieren.

2.1.2 Moden der Bewegung

Um die Eigenfrequenzen der Schwingungsmoden eines linearen Ionenkristalls zu bestimmen, bedient man sich des Lagrange Formalismus. Die potentielle Energie eines linearen Ionenkristalls der Länge N in einem harmonischen Potential ist

$$V = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^{N} m_i \omega_z^2 z_i^2 + \sum_{i,j=1, i \neq j}^{N} \frac{Q^2}{8\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|z_i - z_j|} \right],$$
(2.25)

wobei z_i die Position des *i*-ten Ions ist. Sie setzt sich zusammen aus den Energien der einzelnen Teilchen im Potential und den Wechselwirkungsenergien, hervorgerufen durch die paarweise Coulombabstoßung. Die Gleichgewichtspositionen $z_i^{(0)}$ der Ionen erhält man dann mit

$$\left. \frac{\partial V}{\partial z_i} \right|_{z_i^{(0)}} = 0. \tag{2.26}$$

Analytische Lösungen für das aus obiger Bedingung resultierende Gleichungssystem existieren nur für $N \leq 3$. Mit diesem Potential ergibt sich sodann für die Lagrange Funktion

$$L = T - V = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^{N} m_i \dot{q}_i^2 - \sum_{i=1}^{N} V_{ij} q_i q_j \right], \qquad (2.27)$$

hierbei ist $q_i = x_i - x_i^{(0)}$ der Abstand von der Gleichgewichtsposition des *i*-ten Ions. Dabei wurde die potentielle Energie (2.25) bis zum harmonischen Term entwickelt, womit der Koeffizient 2. Ordnung den Elementen einer Kopplungsmatrix entspricht:

$$V_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} V(z_1, \dots, z_N) \Big|_{z_i^{(0)}}.$$
(2.28)

Mit der potentiellen Energie (2.25) ergibt sich somit

$$V_{ij} = \begin{cases} m_i \omega_z^2 + 2 \sum_{k=1, k \neq i}^{N} \frac{Q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\left|z_i^{(0)} - z_k^{(0)}\right|^3}, & \text{falls } i = j, \\ -2 \frac{Q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\left|z_i^{(0)} - z_j^{(0)}\right|^3}, & \text{falls } i \neq j. \end{cases}$$
(2.29)

Die Matrize (V_{ij}) genügt nun der Eigenwertgleichung:

$$\sum_{j=1}^{N} V_{ij}\beta_j^{\alpha} = \omega_{\alpha}^2 m_i \beta_i^{\alpha}, \qquad (2.30)$$

wobei die Eigenwerte ω_{α} die Eigenfrequenzen der Ionenkette sind.

Homogene Ionenkristalle

Im Falle $m_i = m, \forall i \in \mathbb{N}$ vereinfacht sich Gleichung (2.30) zu:

$$\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{N} V_{ij}\beta_j^{\alpha} = \Omega_{\alpha}^2 \beta_i^{\alpha}.$$
(2.31)

Da die Matrix (V_{ij}) hermitesch ist, erhält man die Eigenfrequenzen durch Berechnen ihrer Eigenwerte. Für die ersten drei haben sich folgende Namen etabliert:

- Die Grundschwingung, genannt Schwerpunktsmode, oder kurz COM-mode (vom englischen center of mass mode), bei der alle Teilchen gemeinsam in dieselbe Richtung mit der Frequenz ω_z.
- Bei der zweiten harmonischen, auch Atmungsmode (engl. breathing mode) genannt, schwingen die Partikel auf den gegenüberliegenden Abschnitten beiderseits des Schwerpunktes gegenphasig. Die Frequenz der Oszillation ist dabei unabhängig von der Ionenanzahl $\sqrt{3}\omega_z$.
- Die dritte harmonische wird oft als ägyptische Mode (engl. egyptian mode) bezeichnet. Bei ihr schwingen die Ionen um den Schwerpunkt gegenphasig zu den Flanken. Die Kreisfrequenz ist dabei $\sqrt{29/5}\omega_z$.

Die Frequenzen höherer Moden hängen von der Anzahl der Ionen in der Kette ab und lassen sich nur numerisch berechnen.

Gemischte Ionenkristalle

Im Falle unterschiedlicher Massen führt man nach [Mor00] gewichtete Koordinaten $q'_i = \sqrt{m_i}q_i$ ein. Gleichung (2.30) wird so zu:

$$\sum_{j=1}^{N} V_{ij}^{\prime} \beta_j^{\prime \alpha} = \omega_{\alpha}^2 \beta_i^{\prime \alpha}, \qquad (2.32)$$

wobei nun $V'_{ij} = V_{ij}/\sqrt{m_i m_j}$ gilt. Damit kann man die Eigenfrequenzen ω_{α}^2 wieder erhalten, indem man die Eigenwerte von V'_{ij} berechnet.

Für die Eigenfrequenzen eines Zweiionenkristalls mit unterschiedlichen Massen $m_i \in \{M, m\}$ und $\mu = \frac{M}{m}$ ergibt sich somit:

$$\omega_{\pm}^{2} = \omega_{z}^{2} \left(1 + \frac{1}{\mu} \pm \sqrt{1 + \frac{1}{\mu^{2}} - \frac{1}{\mu}} \right).$$
(2.33)

Im Falle von $\mu = 1$ entsprechen ω_{-} der COM-Mode und ω_{+} der Atmungs-Mode. Für $\mu > 1$ behalten die auftretenden Moden zwar einige Charakteristika der COM und Atmungsmode - so schwingen die Teilchen bei ω_{-} in Phase und bei ω_{+} gegenphasig - aber sie lassen sich nun nicht mehr in deren Anteile zerlegen. Für eine genauere Diskussion sei hierbei auf [Mor00] verwiesen.

2.2 Ionenoptik

In unserer Gruppe wurde bei der Entwicklung von Einzellinsen auf analytische Verfahren weitgehend verzichtet, da uns mit dem selbst entwickelten BEM-Paket ein leistungsfähiges Programm zur numerischen Simulation von Linsen- und Fallengeometrien zur Verfügung steht. Trotzdem wird hier im ersten Abschnitt eine kurze Motivation der fokussierenden Eigenschaft einer elektrostatischen Einzellinse auf analytischem Wege vorgenommen, um einen Einblick in ihre Funktionsweise zu erlangen. Im zweiten Abschnitt wird dann die Arbeitsweise des Simulationsprogrammes erläutert.

2.2.1 Theorie der Ionenoptik

Die folgende Herleitung folgt im Wesentlichen der Herangehensweise und Notation von [Hed00]. Da hier ausschließlich radialsymmetrische Linsen betrachtet werden, liegt es nahe, die Rechnung in Zylinderkoordinaten durchzuführen. Die Laplacegleichung lautet dann:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = 0, \qquad (2.34)$$

wobei $\phi(r, z)$ das Potential ist. Aufgrund der radialen Symmetrie kann man sich bei der Entwicklung von ϕ auf die geraden Potenzen beschränken:

$$\phi(r,z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(z) r^{2n}.$$
(2.35)

Damit ergibt sich:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n''(z) r^{2n}.$$
(2.36)

sowie

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\phi}{\partial r}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} 4n^2 a_n(z) r^{2(n-1)}.$$
(2.37)

Da die Summe der Koeffizienten der selben Potenz von r Null ergeben muss, erhält man die Relation:

$$a_{n+1}(z) = \frac{a_n''(z)}{4(n+1)^2}$$
(2.38)

und damit man für die Potenzreihenentwicklung

$$\phi(r,z) = a_0(z) - \frac{a_0''(z)r^2}{2^2} + \frac{a_0^{(4)}(z)r^4}{2^2 \cdot 4^2} + \dots$$
(2.39)

Somit ist das Potential entlang der Achse einfach $V(z) = a_0(z)$. In paraxialer Näherung werden nur die ersten beiden Terme berücksichtigt, daher kann man die axialen und radialen Feldkomponenten ausdrücken durch:

$$E_z = -\frac{\partial \phi}{\partial z} = -\phi' \qquad E_r = -\frac{\partial \phi}{\partial r} = \frac{r}{2}\phi'' \tag{2.40}$$

Da die axiale Geschwindigkeit sehr viel größer ist als die radiale, gilt:

$$\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}\right)^2 + q\phi = 0. \tag{2.41}$$

Die Bewegungsgleichung in radialer Richtung lautet

$$m\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = qE_r = \frac{qr}{2}\phi''.$$
(2.42)

Um t zu eliminieren, wird $\frac{d^2z}{dt^2}$ wie folgt erweitert:

$$\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left(\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z} \right). \tag{2.43}$$

Setzt man nun (2.42) und (2.41) ein, so ergibt sich

$$\frac{qr}{2m}\phi'' = \sqrt{\frac{-2q\phi}{m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(\sqrt{\frac{-2q\phi}{m}}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z}\right).$$
(2.44)

Durch Umformen erhält man

$$-\frac{r}{4}\frac{\phi''}{V} = \frac{d^2r}{dz^2} + \frac{1}{2}\frac{\phi'}{\phi}\frac{dr}{dz}.$$
 (2.45)

Diese Gleichung hängt weder von der Masse noch von der Ladung ab und ist somit gültig für alle Arten geladener Teilchen. Durch Einführen eines reduzierten Radius $R = r\phi^{\frac{1}{4}}$ lässt sich die zweite Ableitung des Potentials eliminieren. Die doppelte Ableitung nach z ergibt:

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}z^2} = \phi^{\frac{1}{4}} \left[\frac{r}{4} \frac{\phi''}{\phi} + \frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}z} - \frac{3r}{16} \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2 \right].$$
(2.46)

Durch Einsetzen von (2.45) vereinfacht sich der Ausdruck zur sogenannten Picht-Gleichung:

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{3}{16} R \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2. \tag{2.47}$$

Eine formale Integration ergibt

$$\int_{-\infty}^{\infty} R'' \,\mathrm{d}z = R'_2 - R'_1 = -\frac{3}{16} R_1 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2 \,\mathrm{d}z. \tag{2.48}$$

Da der einfallende Strahl parallel zur z-Achse verlaufen soll, kann man $R'_1 = 0$ setzen. Für die Fokuslänge einer Linse gilt $f_2 = -r_1/\alpha_2$. Identifiziert man nun α_2 mit r'_2 erhält man

$$\frac{1}{f_2} = -\frac{r_2'}{r_1} = -\frac{R_2'}{R_1} \left(\frac{\phi_1}{\phi_2}\right)^{\frac{1}{4}} = \frac{3}{16} \left(\frac{\phi_1}{\phi_2}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2 \,\mathrm{d}z. \tag{2.49}$$

Dabei wurde $r'_2 = R'_2/\phi_2^{\frac{1}{4}}$ verwendet. Man erhält diese Relation aus:

$$R_2' = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} R_2 = r_2' \phi_2^{\frac{1}{4}} + \frac{r_2}{4} \frac{\phi_2'}{\phi_2^{\frac{3}{4}}}$$
(2.50)

mit $\phi'_2 = 0$ außerhalb der Linse. Verfolgt man einen zunächst achsparallelen Strahlengang von der anderen Seite ergibt sich analog:

$$\frac{1}{f_1} = \frac{3}{16} \left(\frac{\phi_2}{\phi_1}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{\infty}^{-\infty} \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2 \,\mathrm{d}z \tag{2.51}$$

und damit für das Verhältnis der Fokuslängen:

$$\frac{f_1}{f_2} = \left(\frac{\phi_1}{\phi_2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(2.52)

Diese Gleichung kann als Brechungsgesetz analog zum Snelliusschen Brechungsgesetzes in der Optik aufgefasst werden.

2.2.2 Numerische Verfahren

Bereits in der Vergangenheit wurden in unserer Gruppe umfangreiche numerische Simulationen mit einem eigens dafür entwickelten Programm durchgeführt, um Fallen und Linsengeometrien in der Entwicklungsphase zu prüfen. Auch alle in dieser Diplomarbeit präsentierten Simulationen wurden mit diesem in unserer Gruppe entwickelten Simulationsprogramm durchgeführt. Der Kern dieses Programms besteht aus einem Algorithmus zur Berechnung der Potentialverteilung einer beliebigen Geometrie von Leiteroberflächen. Das angewandte Verfahren basiert auf der sogenannten Randelementmethode (engl. *Boundary Element Method* oder kurz BEM) kombiniert mit einem FMM Algorithmus (vom englischen Ausdruck *Fast Multipole Method*) um die hierbei nötige Matrizenberechnung zu beschleunigen [She07]. In den so gewonnenen Potentialen werden nun mit dem Verletschen Integrationsverfahren die Trajektorien von elektrisch geladenen Teilchen simuliert.

Die folgende Herleitung orientiert sich an [She07], dort sind auch weiterführende Details zu finden. Eine umfassende anwendungsbezogene Diskussion in einem breiteren Kontext findet sich in [Sin10]. Die Aufgabenstellung besteht zunächst darin, das Potential in der Umgebung einer Leitergeometrie mit vorgegebenem Oberflächenpotential zu bestimmen. Da sich zwischen den Leitern keine freien Ladungen befinden, ist die Ladungsdichte dort null und das Problem genügt somit der Laplacegleichung:

$$\Delta \phi = 0. \tag{2.53}$$

Um diese Gleichung für das oben formulierte Problem zu lösen, bedient man sich des zweiten Stokesschen Satzes:

$$\int_{V} G(x,x') \, \bigtriangleup_{x'} \phi(x') - \phi(x') \, \bigtriangleup_{x'} G(x,x') \, \mathrm{d}V' = \int_{S} G(x,x') \, \frac{\partial \phi(x')}{\partial n} - \phi(x') \, \frac{\partial G(x,x')}{\partial n} \, \mathrm{d}S'.$$
(2.54)

Aus $G(x, x') = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x-x'|}$ folgt $\triangle_{x'} G(x, x') = -4\pi \,\delta(x-x')$. Setzt man dies und die Laplacegleichung in Gleichung (2.54) ein, erhält man:

$$\phi(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{S} G(x, x') \frac{\partial \phi(x')}{\partial n} - \phi(x') \frac{\partial G(x, x')}{\partial n} \,\mathrm{d}S'. \tag{2.55}$$

Um diese Gleichung zu diskretisieren, wird nun die Leiteroberfläche in kleine Elemente ΔS_i mit konstanten Werten unterteilt. Damit wird die Gleichung zu:

$$\sum_{j=1}^{N} f_{ij}\phi_j = \sum_{j=1}^{N} g_{ij}q_j, \qquad \text{für} \quad i = 1, \dots, N,$$
(2.56)

 mit

$$g_{ij} = \int_{\Delta S_j} G(x_i, x') \,\mathrm{d}S'. \tag{2.57}$$

und

$$f_{ij} = \delta_{ij} + \int_{\Delta S_j} \frac{\partial G(x_i, x')}{\partial n} \, \mathrm{d}S'.$$
(2.58)

Auflösen von (2.56), indem alle unbekannten Randelemente in einen Vektor λ geschrieben werden, liefert das lineare Gleichungssystem

$$A\lambda = b. \tag{2.59}$$

Dabei sind *b* die bekannten Werte und *A* ist eine Koeffizientenmatrix deren Berechnung $\mathcal{O}(N^2)$ Schritte erfordert. Mit der bereits erwähnten FMM lässt sich nun dieser Aufwand auf $\mathcal{O}(N)$ Berechnungsschritte reduzieren, was entscheidend für die Anwendbarkeit des Verfahrens ist.

Das Grundprinzip dieser Methode besteht in der Aufspaltung des Potentials in einen Nahbereich, bei dem die Ladungsverteilung herkömmlich ausgewertet, und einen Fernbereich, dessen Potential mittels Multipolentwicklung berechnet wird. Dazu unterteilt man den betrachteten Raumbereich in Würfel mit einer vorher festgelegten Größe. Zum Nahbereich

eines Würfels zählen nun alle Würfel, die den ersten berühren. Durch Zusammenfassen von je acht Würfeln zu einem Würfel mit der doppelten Kantenlänge, wird eine hierarchische Struktur definiert. Die durch einen Würfel zusammengefassten Ladungen werden auch als Cluster bezeichnet. Cluster, die nicht im Nahbereich liegen, heißen wohl getrennt. Der nun folgende Algorithmus gliedert sich in mehrere Schritte. Zunächst wird beginnend auf der kleinsten Würfelebene eine Multipolentwicklung um den Würfelmittelpunkt aller im Würfel enthaltener Ladungen gemacht. In der Hierarchie aufsteigend wird nun für jeden größeren Würfel eine Multipolentwicklung um den Würfelmittelpunkt vorgenommen. Dies geschieht durch Aufsummieren aller im größeren Würfel enthaltener Multipolentwicklungen der kleineren Würfel, die dazu in den Mittelpunkt des größeren Würfels verschoben werden. Im nächsten Schritt wird absteigend in der Struktur das Feld aller sich nicht im aktuellen Cluster befindlichen Ladungen, das heißt das Feld der wohl getrennten Cluster, in jeder Verfeinerungsstufe hinzugerechnet. Für den jeweils nächsten Iterationsschritt wird dazu die eben berechnete lokale Entwicklung in die Mittelpunkte der Cluster der eine Stufe tieferen Schicht verschoben. Angekommen in der tiefsten Schicht verfügt man nun über die lokale Entwicklung des Fernfeldes in der feinsten Auflösung. Schließlich muss jeweils noch der Potentialanteil des Nahbereichs hinzuaddiert werden.

Die zur Berechnung der Ionentrajektorien verwendete Verlet Methode ist ein numerisches Verfahren die Bewegungsleichung der Teilchen zu Integrieren. Der dabei gemachte Fehler in der Position ist $\mathcal{O}(\Delta t^4)$, im Gegensatz zum Euler Verfahren wo er $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ beträgt. Dabei ist Δt der Zeitschritt. Dies wird durch unmittelbares berechnen der nächsten Position aus der Aktuellen und der Letzten erreicht, ohne dabei die Geschwindigkeit als Zwischenschritt zu benötigen, wie dies beim Euler Verfahren der Fall ist.

Die Herleitung erfolgt über die Taylor Entwicklung der Position in beide Zeitrichtungen:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{a(t)}{2}\Delta t^{2} + \frac{\dot{a}(t)}{6}\Delta t^{3} + \mathcal{O}(\Delta t^{4})$$
(2.60)

und

$$x(t - \Delta t) = x(t) - v(t)\Delta t + \frac{a(t)}{2}\Delta t^2 - \frac{\dot{a}(t)}{6}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4).$$
(2.61)

Durch addieren beider Gleichungen ergibt sich

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) + x(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$
(2.62)

Falls die Geschwindigkeit benötigt wird muss diese allerdings separat berechnet werden:

$$V(t) = \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$
(2.63)

Hier ist der Fehler jedoch $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Daher wird in der Simulation eine abgewandelte Version des Verlet Algorithmus verwendet:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{a(t)}{2}\Delta t^2 +,$$
 (2.64)

$$v(t + \frac{\Delta t}{2}) = v(t) + \frac{a(t)}{2}\Delta t,$$
 (2.65)

$$a(t + \Delta t) = -\frac{1}{m} \nabla V(r(t + \Delta t)), \qquad (2.66)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{a(t + \Delta t)}{2}\Delta t.$$

$$(2.67)$$

Diese Methode wird auch *Leapfrog-Verfahren* oder *Velocity Verlet* genannt. Außerdem ist dieses Verfahren äquivalent zur *semi-impliziten Euler-Methode*.

2.3 Licht - Ion Wechselwirkung

2.3.1 Dipolübergänge und Fluoreszenz Detektion



Abbildung 2.3: Termschema von ionisiertem Kalzium.

Zur Detektion und Abbildung der Kalzium Ionen in der Falle wird das Fluoreszenzlicht des Dipolübergangs vom $4^2P_{1/2}$ Niveau in den $4^2S_{1/2}$ Grundzustand verwendet (Abbildung 2.3). Da die Streurate aufgrund der geringen Lebensdauer von 7,7 ns des angeregten Zustandes rund 10⁸ Photonen pro Sekunde beträgt, wird dieser Übergang auch zum Laserkühlen verwendet (für eine ausführlichere Beschreibung siehe hierzu Kapitel 2.3.2). Neben diesem zur Beobachtung und Kühlung verwendeten Übergang existieren zwei weitere metastabile Niveaus $3^2D_{3/2}$ und $3^2D_{5/2}$, die aufgrund ihrer mit 1,17s beziehungsweise 1,18s extrem langlebigen Quadrupolübergängen in den Grundzustand einen parasitären Einfluss auf den

Kühlzyklus haben. In ersteres gelangt das System mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 1/10 durch spontanen Zerfall aus dem angeregten $4^2P_{1/2}$ Zustand, in das $3^2D_{5/2}$ Niveau hingegen durch Stöße des Ions mit dem Hintergrundgas. Um den Kreislauf schneller wieder zu schließen, verfügt das Experiment über zwei weitere Laser mit Wellenlängen von 866 nm und 854 nm, die das System aus den metastabilen Zuständen in das $4^2P_{1/2}$ beziehungsweise $4^2P_{3/2}$ Niveau bringen von denen es dann wieder mit hoher Wahrscheinlichkeit spontan in den Grundzustand ($4^2S_{1/2}$) zerfällt, und damit für weitere Fluoreszenszyklen zur Verfügung steht.

2.3.2 Dopplerkühlen von Kalzium

In einer Paul-Falle werden durch statische und dynamische elektrische Felder ortsabhängige Kräfte auf das Ion ausgeübt und gewährleisten somit einen räumlichen Einschluss des Teilchens. Um das Ion zu kühlen, bedarf es allerdings einer geschwindigkeitsabhängigen Kraft. Diese lässt sich durch das sogenannte Dopplerkühlen, welches zu den Laserkühltechniken zählt, realisieren. Das Dopplerkühlen wurde 1975 in zwei voneinander unabhängigen Veröffentlichungen von Hänsch und Schalow [Hän75], als auch von Wineland und Dehmelt [Win75] vorgeschlagen und drei Jahre später von Wineland, Dullinger und Walls [Win78] an Magnesiumionen, als auch von Neuhauser, Hohenstatt, Toschek und Dehmelt [Neu78] an Bariumionen erstmals experimentell durchgeführt.

Das Prinzip des Dopplerkühlens von Atomen beruht auf der Streuung von Photonen und dem damit verbundenen Impulsübertrag: Während mit einer Absorption immer eine Impulsaufnahme in Ausbreitungsrichtung des Laserlichtes einhergeht, ist nur der Gesamtimpulsübertrag infolge einer stimulierten Emission gerichtet. Da jedoch auch spontane Emission auftritt und die Richtung des Impulsübertrages hierbei statistisch verteilt über den gesamten Raumwinkel erfolgt, bleibt nach vielen Streuereignissen eine Nettobeschleunigung in Richtung des Laserstrahles. Um nach dieser Methode zu kühlen, wird nun die Frequenz des Lasers so ins Rote verstimmt, dass die Atome unter Ausnutzung des Dopplereffekts nur dann Photonen aufnehmen und als Folge dessen abgebremst werden, sobald sie sich auf die Laserquelle zubewegen.

Da die Teilchen in einer Paul-Falle durch elektrische Potentiale eingeschlossen sind, kann das Kühlen in allen drei Raumrichtungen durch einen einzigen Laserstrahl erfolgen. Jedoch darf dazu der einfallende Laserstrahl zu keiner der ausgezeichneten Fallenachsen senkrecht stehen. Als weitere Voraussetzung für das Dopplerkühlen in einer Paul-Falle muss die Dauer einer Schwingungsperiode im Fallenpotential groß im Verhältnis zu einem Kühlzyklus aus Absorption und spontaner Emission sein. Daher sollte der Kühlübergang eine entsprechend kurze Lebensdauer aufweisen. Es ist einleuchtend, dass die dabei erzielte Kühlrate neben der Geschwindigkeit des Teilchens auch von der Lebensdauer des Übergangs abhängig ist. Im Mittel ist der Impulsübertrag durch die Emission zwar Null, tatsächlich stellt sich aber - aufgrund der statistischen Natur dieses Prozesses - eine konstante Heizrate ein, die dem Kühlen entgegenwirkt. Während die Geschwindigkeit mit zunehmender Dauer des Kühlvorgangs immer weiter abnimmt, verringert sich auch die Kühlrate soweit, bis ein Gleichgewicht zwischen Kühlen und Heizen herrscht. Laut [Lei03] ist dieses sogenannte Dopplerlimit eines Zweiniveausystems unter Vernachlässigung der Korrelation zwischen dem Absorptions- und Emissionsvorgang gegeben durch

$$T_{\rm min} = \frac{\hbar\Gamma\sqrt{1+2\,|\Omega|^2\,/\Gamma^2}}{4k_{\rm B}}\,(1+\xi)\,.$$
(2.68)

Dabei ist Ω die Rabi-Frequenz und Γ die Linienbreite des Kühlübergangs. ξ ist ein Geometriefaktor, welcher der unterschiedlichen Richtung der Impulsüberträge von Absorption und Emission Rechnung trägt. Für Dipolstrahlung nimmt er den Wert $\xi = \frac{5}{2}$ an. Für eine Atom oder ein Ion mit einer Multi-level Struktur kann diese Formel jedoch nur einen groben Anhaltspunkt bieten. Zusätzliche Korrekturen zur abgeschätzten Temperatur ergeben sich aus der Mikrobewegung des Ions in der Falle, sowie der Aufspaltung der Zeeman-Zustände und Übergänge durch ein angelegtes Magnetfeld. Es besteht außerdem eine Abhängigkeit von der Strahlrichtung des Kühllasers bezüglich der Hauptachsen der Ionenfalle.

2.3.3 Photoionsiation von Kalzium



Abbildung 2.4: Termschema von neutralem Kalzium.

Nahezu alle hier präsentierten Experimente wurden mit ⁴⁰Ca⁺ durchgeführt. Um die Atome für den Einschluss durch dynamische elektrische Felder zu ionisieren, gibt es mehrere Methoden. Ein in anderen Gruppen verbreitetes Verfahren ist das Ionisieren mittels Stoßionisation. Dabei werden die Elektronen der Atomhülle durch Stöße mit schnellen Elektronen herausgeschlagen. Der gravierende Nachteil dieser Technik liegt in der großen Anzahl der freien Elektronen, welche auf den isolierenden Flächen der Falle Streuladungen bilden können, begründet. Daher, und aufgrund weiterer Vorteile, kommt bei dem hier behandelten Experiment die resonante Photoionisation oder kurz REMPI (vom englischen Ausdruck Resonance Enhanced Multi-Photon Ionisation) zum Einsatz. Im Unterschied zur gewöhnlichen Photoionisation, bei der ein Elektron durch Absorption eines Photons genug Energie aufnimmt, um das atomare Potential zu verlassen, erfolgt hier die Ionisation über mindestens einen Zwischenschritt, bei dem das Elektron in einen höher angeregten Zustand gebracht wird. Dies hat den Vorteil, dass die zur Anregung nötigen Laser eine größere Wellenlänge besitzen als im Falle der direkten Ionisierung über ein Photon. Zudem ist dieses Verfahren aufgrund der charakteristischen Niveaustruktur (Abbildung 2.4) isotopenselektiv. Für ⁴⁰Ca existieren zwei Kaskaden, die für eine experimentelle Anwendung in Betracht kommen. Bei der ersten Variante wird das Elektron durch Einstrahlen von Licht der Wellenlänge 272 nm von Grundzustand in das $5^1 P_1$ Niveau angeregt. Dieses zerfällt durch spontane Emission in den $3^{1}D_{2}$ Zustand, von dem aus es dann durch Licht derselben Wellenlänge ionisiert wird. In Ermangelung günstiger Laserquellen bei 272 nm wurde diese Möglichkeit zu Gunsten einer Ionisation mit zwei unterschiedlichen Lasern, die als Diodenlaser verfügbar sind, verworfen. Dabei wird das Elektron zunächst durch Einstrahlen von Laserlicht der Wellenlänge 423 nm in das 4¹P₁ Niveau angeregt und in einem weiteren Schritt von diesem Zustand mittels 374 nm über die Ionisationsschwelle gehoben.

2.3.4 Photoionsiation von Dotierungsatomen

Bei der gewöhnlichen Photoionisation muss die Photonenenergie mindestens der Ionisierungsenergie entsprechen [Ein05], das heißt $\hbar \omega \geq I_p$. Ab einer genügend hohen Photonendichte existiert überdies die Möglichkeit der Mehrphotonenionisation oder kurz MPI *N*-ter Ordnung [Hal65, Vor65]. Dabei wird die zur Ionisation nötige Energie von *N* Photonen der Energie $\hbar \omega$ aufgebracht (Abbildung 2.5), so dass gilt

$$N\hbar\omega + A \to A^+ + e^-. \tag{2.69}$$

Im Gegensatz zu dem im vorherigen Abschnitt behandelten Verfahren der resonanten Photoionisation ist es hiermit möglich, beliebige Elemente mit einem Laser, dessen Wellenlänge



Abbildung 2.5: Schema zur Mehrphotonenionisation. Im Gegensatz zur gewöhnlichen Photoionisation (linke Seite) wird bei der MPI eine Kaskade von Photonen zur Ionisation genutzt (rechte Seite).

nicht speziell auf die Niveaus einer Spezies zugeschnitten ist, zu ionisieren. Allerdings büßt man dadurch auch die Selektivität ein, so dass ein separates Identifizieren der ionisierten Elemente unabdingbar wird.

3

Aufbau des Implantationsexperimentes

Mit Beginn dieser Diplomarbeit waren bereits Teile des Aufbaus des Implantationsexperimentes in Betrieb. Die Konstruktion, der Zusammenbau und die Auswahl der Komponenten wurden hauptsächlich von Wolfgang Schnitzler während seiner Doktorarbeit durchgeführt. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden Veränderungen an der Fokussiereinrichtung des Ionenstrahls sowie im Aufbau des Strahlengangs des gepulsten Lasers zur Mehrphotonenionisation vorgenommen. Gleichwohl soll hier der Übersicht halber und um ein besseres Verständnis der in Kapitel 4 präsentierten Messungen zu ermöglichen, eine kurze Beschreibung des experimentellen Aufbaus erfolgen.

3.1 Vakuumkammer

Die Hauptkammer des Ultrahochvakuumaufbaus ist eine sogenannte Magdeburger Halbkugel der Firma Kimball Physics¹, in deren Zentrum die Paul-Falle montiert ist. Abbildung 3.1 zeigt ein gerendertes Bild der Kammer. Der Innendurchmesser beträgt 91,5 mm bei einer Gesamtlänge von 106 mm. Sie besitzt insgesamt vier DN16CF Zugänge, von denen zwei

¹ MCF450-MH10204/8-A, Kimball Physics Inc., Wilton, NH, USA



Abbildung 3.1: Bild der Magdeburger Halbkugel, welche dem Experiment als Hauptkammer dient. [Sch10a]

unter einem Winkel von 55° zur Fallenachse angebracht und mit Fenstern für den Zugang des Kühl- und Rückpumplasers (B1) sowie der Ionisationslaser (B2) versehen sind. Die restlichen beiden sind in Richtung der Fallenachse ausgerichtet. Davon wird einer zur Extraktion der Ionen genutzt (C2) und ist zu diesem Zweck über ein Ventil mit der Detektorkammer verbunden. Der andere (C1) dient als Zuleitung für die Radiofrequenz und ist hierfür mit einer vierpoligen Vakuumdurchführung ausgestattet. Des Weiteren verfügt die Kammer über zwei DN40CF Flansche, davon ist der obere (D1) mit einer 20-poligen Vakuumdurchführung für die Segmentansteuerung ausgerüstet. Am unteren (D2) sind über einen Flansch ein Druckmesser² und die Vakuumpumpen angeschlossen; darunter eine Ionengetterpumpe³, eine Titansublimationspumpe⁴, sowie ein Ventil über das eine Turbomolekularpumpe⁵ mit einer entsprechenden Vorpumpe zugeschaltet werden kann. Die Beobachtung der gefangenen Ionen in der Falle erfolgt mittels einer EMCCD-Kamera⁶ durch ein Fenster, das auf einem seitlichen DN63CF Flansch (A) angebracht ist. Über diesen Zugang finden auch die Einstrahlung des gepulsten Lasers zur Mehrphotonenionisation und das Herausführen der anderen Laserstrahlen statt. Der gesamte zusammengesetzte Vakuumaufbau ist in Abbildung 3.2 zu sehen.

² UHV-24p Nude Bayard-Alpert Type Ionization Gauge Tube, Varian Inc., Palo Alto, CA, USA

³ VacIon Plus 20, Varian Inc., Palo Alto, CA, USA

⁴ TSP Filament Cartridge, Varian Inc., Palo Alto, CA, USA

⁵ TURBOVAC TW 70, Oerlikon Leybold Vacuum GmbH, Köln, Deutschland

 $^{^{6}\,}$ iXon DV885KCS-VP, Andor Technology, Belfast, Northern Ireland



Abbildung 3.2: Darstellung des kompletten Vakuumaufbaus. In der Mitte befindet sich die Magdeburger Halbkugel mit der darin befindlichen Falle. Dahinter sind die Ionengetter- und die Titansublimationspumpe angebracht. Rechts sieht man, durch ein Ventil mit der Fallenkammer verbunden, die Detektorkammer. [Sch10a]

3.2 Lasersysteme

Die im vorliegenden Experiment eingesetzten Lasersysteme werden dazu verwendet, die elektronischen Zustände von Atomen beziehungsweise Ionen anzuregen. Dies geschieht jedoch zu zwei unterschiedlichen Zwecken. Im ersten Anwendungsgebiet werden Laser dazu genutzt, um Atome zu ionisieren. Hierfür stehen dem Experiment wiederum zwei unterschiedliche Verfahren zur Auswahl (siehe hierzu auch Kapitel 2.3.3 und 2.3.4). Zum einen ein zweistufiger Photoionisationsprozess, zu dessen Umsetzung ein gitterstabilisierter Laser der Wellenlänge 374 nm und ein frequenzverdoppelter Laser mit einer Wellenlänge von 423 nm, der mittels des Pound-Drever-Hall-Verfahrens [Dre83] frequenzstabilisiert wird, vorhanden sind. Zum Anderen wird ein gepulster frequenzverdreifachter Nd:YAG-Laser mit einer Wellenlänge von 355 nm zur Mehrphotonenionisation der Kalziumatome verwendet. Das zweite Einsatzfeld ist das Dopplerkühlen der Ionen, dessen Funktionsprinzip in Kapitel 2.3.2 beschrieben ist. Die Anregung des Kühlübergangs erfolgt durch einen ebenso mit dem Pound-Drever-Hall-Verfahren stabilisierten Diodenlaser bei 397 nm. Um den Kühlkreislauf zu schließen, wird das Rückpumpen aus den beim Kühlen unerwünschten $3\,^2\mathrm{D}_{5/2}$ und $3\,^2\mathrm{D}_{3/2}$ Niveaus durch Laser mit einer Wellenlänge von $854\,\mathrm{nm}$ beziehungsweise 866 nm erreicht, wobei die Frequenz des ersteren gleichermaßen durch das Pond-Drever-Hall-Verfahren stabilisiert wird.



Abbildung 3.3: Skizze eines Fallenflügels, der sich in insgesamt 15 Segmente gliedert. Diese sind in der Abbildung gelb dargestellt, die Isolation dazwischen schwarz. Eine breite Ladezone (1-4) verjüngt sich mit Elektrode 5 zur Experimentierzone (6-13). An der unteren Kante des Flügels ist ein dünnes Kupferband zur Erzeugung des radialen Pseudopotentials angebracht. In der Vergrößerungsansicht ist diese RF-Elektrode deutlich zu sehen. [Sch10b]

3.3 Fallendesign

Die Falle besteht im Wesentlichen aus vier identischen Fallenflügeln (Abbildung 3.3, die X-förmig um die Fallenachse angeordnet sind. Die Flügel sind in PCB-Technologie (vom englischen Ausdruck *printed circuit board*) ausgeführt und daher mit herkömmlichen Lithographieverfahren, wie sie in der Elektronikindustrie weit verbreitet sind, herstellbar. Jeder Flügel ist dabei beidseitig mit 18 µm dickem Kupfer beschichtet, welches wie bei elektronischen Leiterplatten durch heraus geätzte Vertiefungen unterbrochen ist, um segmentierte Elektroden zur Erzeugung des axialen Fallenpotentials zu formen. Gegenüberliegende Elektroden sind dabei galvanisch verbunden. Zur Bildung des radialen Potentials sind auf der Vorderkante der Platten zusätzliche Kupferbänder mit einer Stärke von rund 22 µm angebracht, welche mit einer Radiofrequenz von 12, 155 MHz beschaltet werden. Diese Besonderheit unterscheidet die Falle von herkömmlichen linearen Paul-Fallen, bei denen die Radiofrequenz nur an zwei der insgesamt vier Elektroden angelegt wird. Die Falle kann dabei in zwei Bereiche gegliedert werden: Der Erste ist die sogenannte Ladezone, sie reicht von Elektrode 2 bis Elektrode 4. Hier haben die Segmente eine Breite von 2,8 mm und die
Fallenflügel weisen einen Abstand von 4 mm auf. Mit Beginn von Elektrode 5 verjüngt sich dieser zur Experimentierzone, sie erstreckt sich von Elektrode 6 bis Elektrode 13. Während die Flügel hier einen Abstand von 2 mm haben, besitzen die betreffenden Segmente eine Breite von 0,7 mm. Dieser Abschnitt wird durch die Elektroden 14 und 15 um zwei weitere Segmente verlängert, dabei dienen die Elektrode 15 und ihre Gegenstücke auf den anderen Fallenflügeln der Ablenkung des Ionenstrahls.

Unter typischen Arbeitsbedingungen wird zur Erzeugung des radialen Potentials eine Wechselspannung mit einer Amplitude von $400 V_{ss}$ bei einer Frequenz von 12, 155 MHz an die Radiofrequenzelektroden gelegt, was zu einer radialen Fallenfrequenz von rund 475 kHz führt. Der axiale Einschluss wird durch Anlegen von jeweils 35 V an die Elektroden 7 und 13 gewährleistet. Das so entstehende Potential ist um die Elektrode 10 symmetrisch und weist eine Fallenfrequenz von rund 298 kHz auf.



3.4 Ionenoptik

Abbildung 3.4: (a) Maßstabsgetreuer Längsschnitt der Einzellinse mit den genauen Abmessungen. (b) Fotographie der zusammengebauten Einzellinse. Die orangefarbene Umrandung ist eine überstehende Kaptonfolie. Zum Größenvergleich liegt ein Centstück daneben. (c) Dreidimensionale Computergraphik der kompletten Fokussier- und Messapparatur. Im Vordergrund ist die Einzellinse zu sehen, dahinter der Piezoschlitten mit der darauf montierten Aperturblendenplatte. Die gesamte Apparatur wird durch eine Klemmvorrichtung in der Detektorkammer gehaltert. [Sch10b]

Die bei den Messungen in Kapitel 4.2.3 eingesetzte Einzellinse wurde von Robert Fick-

ler während seiner Diplomarbeit [Fic09a] entworfen und durch eine Vielzahl numerischer Simulationen mit dem in unserer Gruppe entwickelten BEM^7 Packet [Sin10] bereits vor dem Bau auf ihre Tauglichkeit überprüft. Sie besteht im Wesentlichen aus drei Elektrodenblenden, die aus rostfreiem Stahl (V2A) gefertigt sind und einen Außendurchmesser von $27 \,\mathrm{mm}$ aufweisen. Die erste Elektrode hat eine Dicke von $0, 2 \,\mathrm{mm}$ und wie die zweite, einen Blendendurchmesser von 8 mm. Die Stärke dieser zweiten Elektrode beträgt 0,4 mm. Die letzte Elektrode besteht aus zwei Teilen, einem 4,95 mm breiten Abstandshalter sowie einer Blendenplatte mit einer Dicke von 1 mm und einem Innendurchmesser von 4 mm. Diese Platte wird zusätzlich dazu verwendet, die restlichen Teile der Linse zu haltern. Dafür ist sie mit der ersten Elektrode durch Schrauben verbunden, die zudem einen elektrischen Kontakt gewährleisten. Beide Elektroden liegen im Experiment auf Masse, während die mittlere, beiderseits isoliert durch 50 µm dicke Kaptonfolien die gleichzeitig als Abstandshalter dienen, mittels einer seitlichen Kontaktierungsöse auf Potential gelegt wird. Weitere Details und Abmessungen können der Skizze in Abbildung 3.4 (a) entnommen werden. Eine Fotographie der zusammengebauten Linse ist in Abbildung 3.4 (b) gezeigt. Um eventuell durch den Fertigungsprozess entstandene Grate zu entfernen und die Oberfächenrauigkeit der Elektroden zu verringern, sind alle Edelstahlteile elektropoliert.

Zur Bestimmung des Strahldurchmessers ist 0,3 mm hinter der letzten Elektrode eine 1 mm dicke Aperturblendenplatte angebracht. Diese ist auf einem Piezoschlitten montiert, der es ermöglicht, durch Bewegung senkrecht zur optischen Achse der Linse, die Blendenöffnungen der Platte mit Durchmessern von 300 µm, 1 mm, 2 mm und 5 mm in den Strahl zu fahren. Um eine genau definierte Abrisskante zu erhalten ist, zusätzlich hinter der 2 mm Blende eine Rasierklinge angebracht. Abbildung 3.4 (c) zeigt eine dreidimensionale Ansicht der kompletten Fokussier- und Messapperatur. Zu sehen ist auch die Vorrichtung zur Halterung in der Detektorkammer. Das zur Bestimmung des Strahldurchmessers angewandte Verfahren ist ausführlich in Kapitel 4.2.1 beschrieben.

3.5 Ionendetektor

Um Experimente wie beispielsweise Flugzeitmessungen oder die in Kapitel 4.2 vorgenommene Bestimmung des Strahldurchmessers durchzuführen, verfügt der Aufbau über einen Ionendetektor. Der verwendete Sekundärelektronenvervielfacher⁸ besitzt 20 Dynoden und hat eine Eingangsapertur von 20 mm. Er ist 30 mm hinter der ersten Elektrode der Einzellinse

⁷ Vom englischen Ausdruck Boundary Element Method.

⁸ AF553, ETP electron multipliers, Ermington, NSW, Australien



Abbildung 3.5: (a) Fotographie des Herstellers. (b) Computergenerierte Darstellung des Detektors mit transparenten Seitenwänden. [Sch10a]

angebracht. Bei einer Versorgungsspannung von -2,5 kV beträgt die vom Hersteller spezifizierte Quanteneffizienz für positiv geladene Ionen etwa 80%, im Experiment wurden jedoch rund 87% gemessen [Sch09]. Das Signal des Detektors wird über ein auf den Extraktionszeitpunkt getriggertes Speicheroszilloskop ausgewertet. Dadurch lässt sich nun die Flugzeit der Teilchen bestimmen.

3.6 Experimentsteuerung

Die softwareseitige Steuerung des Experiments wird mittels eines eigens dafür in unserer Gruppe entwickelten Programms realisiert. Dieses ermöglicht es durch Verwendung einer zur Laufzeit konfigurierbaren modularen Benutzeroberfläche (Abbildung 3.6) schnell auf Änderungen der experimentellen Anforderungen zu reagieren. Aus Gründen der Übersichtlichkeit und Effizienz ist die verarbeitende Programmschicht in C++ geschrieben. Außerdem können hier einzelne Programmteile scriptartig ausgeführt werden, um die nötige Flexibilität zu gewährleisten. Ferner ist es möglich, kurzfristig Bibliotheken zur Ansteuerung neuer Hardware, wie auch Programmroutinen zur Automatisierung von Messungen und Auswertung von Messdaten einzubinden. Durch die Software werden in dieser Weise der Piezoschlitten, die Digital-Analog-Wandler für die Spannungen an den Segmenten der Falle und zur Frequenzverstimmung der Laser, sowie die TTL Signale zum Schalten der Akusto-Optischen-Modulatoren, gesteuert. Es existiert auch bereits ein Modul für die Ansteuerung der EMCCD-Kamera.

MasterCont	rolProgram									
Datei Help										
New Project	Open Project Save Project	Save As	Load Dil Reload Dil Full Rebuilt Refresh Gui Load Gui Only Add Gui Emergency							
Imp				₽×						
Laser Waveler	ngth		Photoionisation & Extraction Laser Controls							
Laser 397_a1.	set 3,30600	÷	PhotoionTTL.set Ion_Bouncer Laser397TTL.set							
Laser866_a2.	et 3,46800_		SHOOTER AutoReload Min / V 0,00000 Laser854TTL.set	V						
			PhotoionAuto Max / V 3,08250 Laser866TTL.set	•						
Deflection Volt	ages		Time 5,00000							
DC15_RO_a4	set -8.75000	÷								
DC16_RU_a5	set 8,75000	. 🗄	X-Y-Z Nano Positioning Stage							
DC17_LU_a6	set 8,75000	. 🗄	PiezoInit PiezoRelease PiezoFindReferenceMark							
DC18_LO_a7	set -8.75000	÷	Piezo 1GotoPositionAbsoulte 0 2 Piezo 1GetPos							
			Piezo 1StepNeg Piezo 1StepPos Piezo 1SetStepSize 10000							
Compensatio	n Voltages		Piezo2GotoPositionAbsoulte 0 Piezo2GetPos							
komp_LO_a8.	set 0,21200	÷	Piezo2StepNeg Piezo2StepPos Piezo2SetStepSize 0							
komp_LU_a9.	set -2,80702	÷	Eived Dacilions							
komp_RO_a10	set -1,75000	*	Piezo4mm Piezo2mm							
komp_RU_a11	set -1,31579	÷								

Abbildung 3.6: Bildschirmaufnahme der MCP Programmoberfläche in der Modifikation für das Implantationsexperiment.

Dadurch können Bildinformationen ausgewertet werden, um so beispielsweise eine automatisierte Massenspektroskopie der Ionen durchzuführen [Ulm10]. Auch ist es hierdurch möglich, rückgekoppelte Transportoperationen mit Ionenkristallen durchzuführen [Ebl10].

4

Messverfahren und Ergebnisse

4.1 Die Paul-Falle als deterministische Ionenquelle

Für eine Ionenquelle, die als Grundlage eines Implantationsexperiments dienen soll, ist die Gewährleistung einer deterministischen Anzahl der extrahierten Teilchen aus zweierlei Gründen wichtig: Einerseits ist es natürlich wünschenswert, beim Implantieren genau ein oder eine fest vorgegebene Anzahl von Teilchen an einer bestimmten Position zu deponieren, andererseits wird durch die Verwendung von Einzelionen die Strahldivergenz entscheidend verkleinert [Fic09a].

4.1.1 Laden von Kalzium Ionen

Das Laden von ⁴⁰Ca⁺ Ionen in die Paul-Falle besteht aus einer Abfolge mehrerer teilweise eng miteinander verknüpfter Prozesse. Zunächst gilt es, Neutralatome für eine anschließende Ionisierung zur Verfügung zu stellen. Im vorliegenden Experiment geschieht dies durch einen Kalziumofen, dessen Funktionsprinzip auf dem verdampfen von Kalzium durch erhitzen von selbigem mit einem Heizdraht beruht. [Sch10a] bietet eine ausführliche Beschreibung der Bau- und Funktionsweise des verwendeten Ofens. Zum Ionisieren des Kalziums stehen dem Experiment zwei unabhängige Systeme zur Verfügung, die beide nach dem Prinzip der Photoionisation arbeiten und im Kapitel 2.3.3 detailliert erläutert werden. Zum einen ist dies ein zweistufiger resonanter Photoionisierungsprozess, mit zwei Laserquellen bei Wellenlängen von 432 nm und 374 nm, der bei einem Großteil der hier präsentierten Experimente eingesetzt wurde. Dieses Verfahren ist seiner Natur nach isotopenselektiv und im vorliegenden Falle aufgrund der verwendeten Laser auf das Ionisieren von ⁴⁰Ca ausgelegt. Zum anderen steht eine monochromatische Mehrphotonenionisation mittels eines gepulsten Nd:YAG Lasers mit einer Wellenlänge von 355 nm zur Verfügung. Nach dem Ionisieren der Teilchen im Fangvolumen werden diese durch die elektrischen Felder der Paul-Falle gespeichert (siehe hierzu auch Kapitel 2.1.1). Abbildung 4.1 zeigt Simulationen des Fallenpotentials in axialer (a) und radialer Richtung (b). Die dabei er-



Abbildung 4.1: (a) Schnitt des simulierten Potentials in axialer Richtung, bei einer Spannung von 35 V an den Elektroden 7 und 13. Die restlichen Elektroden liegen dabei auf Masse. Die gestrichelte Linie ist eine an das Potential angepasste quadratische Funktion. Die sich daraus ergebende Fallenfrequenz beträgt 298, 52 kHz (vergleiche Kapitel 2.1.1). (b) Schnitt durch das simulierte radiale Pseudopotential bei einer Radiofrequenzamplitude von 400 V_{ss} und einer Fallenfrequenz von 475, 32 kHz.

mittelte axiale Fallenfrequenz beträgt 298, 52 kHz. Im eingeschlossenen Zustand wird nun durch Laserkühlen (siehe Kapitel 2.3.2) die Bewegungsenergie der Teilchen solange reduziert, bis diese kristallisieren. Die Anordnung des Kristalls hängt dabei vom Verhältnis von radialer zu axialer Fallenfrequenz ab. Für eine Ionenzahl N < 1000 ist laut [Ste97] das Verhältnis für den Übergang von einer linearen zu einer zickzackförmigen Anordnung

$$\frac{\omega_r}{\omega_z} = 0,73 \, N^{0,86}. \tag{4.1}$$

Abbildung 4.2 zeigt Aufnahmen der EMCCD-Kamera von Ionenkristallen verschiedener Anordnung und Länge.



Abbildung 4.2: (a) Typische Aufnahme der EMCCD-Kamera eines linearen Ionenkristalles bestehend aus acht ⁴⁰Ca⁺ Ionen. (b) Übergang zu zickzackförmiger Anordnung beim Laden von 11 Ionen in ein identisches Potential

4.1.2 Fangen, kühlen und identifizieren anderer Elemente

Die Fähigkeit, eine Vielzahl verschiedener Elemente zu fangen und zu kühlen, zu identifizieren und schließlich zu implantieren, ist entscheidend für den universellen Einsatz der hier diskutierten Methode. Prinzipiell ist das Fangen aller Elemente, deren Masse im Stabilitätsbereich der Paul-Falle liegen, realisierbar. Eine zusätzliche Voraussetzung ist das Vorhandensein eines geeigneten Atomofens für das entsprechende Element. Darüber hinaus ist es auch möglich, Atome aus dem Hintergrundgas zu laden. Zur Ionisation der unterschiedlichen Elemente bietet sich die Mehrphotonenionisation an, zumal diese nicht auf ein spezielles Termschema angewiesen ist (siehe hierzu auch 2.3.4). Da das Ionisieren dadurch aber weder isotopen- noch elementselektiv ist, kann diese Methode zwar universell eingesetzt werden, benötigt aber ein separates Verfahren, um die ionisierten Elemente zu identifizieren. Als Alternative wäre die Stoßionisation neutraler Atome durch einen Elektronenstrahl zu nennen. Dort besteht jedoch die Gefahr einer starken Aufladung der Falle infolge der Anlagerung freier Elektronen.

Ein weiteres Problem stellt das Kühlen der zusätzlichen Ionenspezies dar. Da ein separates Laserkühlsystem für jedes der gewünschten Elemente einen hohen technischen und finanziellen Aufwand bedeutet und in manchen Fällen mangels geeigneter optischer Übergänge nicht möglich ist, bedient man sich der sogenannten sympathetischen Kühlung. Dieses Verfahren macht sich die Coulomb Wechselwirkung zwischen den Ionen zunutze: Ionen, die aktiv mittels Laser gekühlt werden, nehmen Bewegungsenergie der Ionen, für die kein Kühllaser zur Verfügung steht, auf und kühlen diese dadurch mit [Lar86]. Im Kamerabild sind die sympathetisch gekühlten Ionen dann als dunkle Fehlstellen im Ionenkristall zu erkennen, weshalb diese auch "dunkle Ionen" genannt werden. Da man, wie bereits erwähnt, die sympathetisch gekühlten Elemente weder durch selektives Ionisieren noch unmittelbar anhand ihres Kühlübergangs identifizieren kann, muss ein entsprechendes Verfahren zusätzlich implementiert werden. Hierzu verwendet man die bereits in Kapitel 2.1.2 behandelte Technik, den gemischten Ionenkristall unter variabler Frequenz zum Schwingen anzuregen und so mittels Detektion der Amplitude die Resonanzfrequenz zu ermitteln. Unter Verwendung von Gleichung (2.32) ist es dann möglich, die Masse des unbekannten Ions zu bestimmen. Im Experiment wird die Schwingungsanregung durch das Anlegen einer Wechselspannung an Elektrode 5 realisiert. Alternativ wäre dies auch durch eine Modulation der Intensität des Kühllasers möglich.

Da der experimentelle Aufbau über einen zusätzlichen NiCr Ofen verfügt, liegt es nahe, damit eine Verfahrensprüfung der sympathetischen Kühlung mit anschließender Massenbestimmung durchzuführen. Beim Laden von Ca-Ionen mit dem gepulsten Nd:YAG Laser zeigte sich eine dadurch induzierte Bildung von Streuladungen auf der Falle, was sich in einem Verschieben der Ionenposition im Bild der EMCCD-Kamera bemerkbar machte. Durch das Messen der Fallenfrequenzen nach den Ladeprozessen wurde der quantitative Einfluss dieses Effektes bestimmt. Eine entsprechende Messung mit 20 Ladevorgängen einzelner Ca-Ionen ergab eine Standardabweichung von $\Delta \omega_z = 1,51\,\mathrm{kHz}$ bei einer mittleren Fallenfrequenz von $\omega_z = 283, 50 \,\mathrm{kHz}$. Mit dem ersten Wert kann der Fehler bei der Massenbestimmung berechnet werden. Nach Inbetriebnahme des NiCr Ofens zeigte sich zunächst ein vermehrtes Auftreten von dunklen Ionen beim Laden mit dem gepulsten Laser. Da sich die Zeit der Ionen im kristallisierten Zustand - vermutlich aufgrund vieler ungekühlter dunkler Ionen im Fallenvolumen - auf etwa eine halbe Minute verkürzte, konnte eine Spektroskopie zur Massenbestimmung eines dunklen Ions zu diesem Zeitpunkt nicht erfolgen. Auch stieg dabei der Kammerdruck um über eine Größenordnung an. Mit fortschreitender Betriebszeit des NiCr Ofens zeigte sich dann ein anderes Bild: Zwar verbesserte sich der Kammerdruck nicht wesentlich, das Verhältnis der geladenen dunklen Ionen nahm aber zu Gunsten von Ca-Ionen ab. Dieses Verhalten könnte darauf zurückzuführen sein, dass bei der Inbetriebnahme des NiCr Ofens anfänglich eine Oxid- und Verunreinigungsschicht verdampft wurde. Während den darauf folgenden Versuchen, Nickel oder Chrom zu laden, wurde dann fast ausschließlich Kalzium geladen. Mit den wenigen dunklen Ionen, die dennoch auftraten, wurde eine Spektroskopie durchgeführt. In einem Fall verlief diese erfolgreich und ergab eine Masse von $44,87 \pm 0,85$ u. Der angegebene Fehler beruht auf der oben berechneten Unsicherheit der Fallenfrequenz infolge der Streuladungen durch die Mehrphotonenionisation. Da dieser Fehler größer als eine halbe atomare Masseneinheit ist kommen mehrere Resultate in Betracht. Für die Ordnungszahl 45 existiert nur ein stabiles Scandium Isotop, allerdings ist es wahrscheinlicher, dass es sich bei dem unbekannten Element um ⁴⁴Ca⁺ handelt, welches mit einer Häufigkeit von rund 2% das zweithäufigste Kalzium Isotop ist.

4.1.3 Deterministisches Reduzieren der Anzahl der gefangenen Ionen

Eine notwendige Voraussetzung für den Einsatz einer Paul-Falle als deterministische Ionenquelle ist das deterministische Laden der Teilchen. Bei einer immer gleichen Einschaltdauer des Photoionisationslasers, ist die Anzahl der geladenen Ionen statistisch verteilt. Um diese Anzahl auf genau ein Ion zu verringern, stehen zwei Ansätze zur Verfügung. Eine Möglichkeit ist das Installieren einer automatischen Regelung, die es erlaubt, den Ladeprozess zu unterbrechen, sobald sich die gewünschte Anzahl von Ionen in der Falle befindet. Da jedoch die installierte Kameraoptik das Detektieren und Zählen der Ionen nur im kristallisierten Zustand erlaubt und der zeitliche Abstand zwischen dem Ionisieren zweier Atome kürzer ist als die Dauer der Kristallisation, sind in der Regel mit dem Einstellen des Ionisierungsvorgangs bei der Detektion des ersten Ions bereits weitere Ionen im Fallenvolumen. Aus diesem Grund wurde die zweite Methode gewählt: Eine beliebige Anzahl von Ionen wird gefangen und erst nach dem Kristallisieren auf die gewünschte Menge reduziert.



Abbildung 4.3: (a) Die Ausgangssituation des Potentials in axialer Richtung bei einer Spannung von 35 V an den Elektroden 7 und 13. (b) Das gleiche Potential wie in (a), aber mit einer Spannung von 54,8 V an den Elektroden 9 und 10, um die Anzahl der gefangenen Ionen durch Verringern der Potentialtiefe auf 0,45 eV auf genau ein Ion zu reduzieren.

Im Experiment wird dies durch folgendes Verfahren realisiert: Man bedient sich dazu der Fähigkeit der linearen segmentierten Paul-Falle, das axiale Potential nach Bedarf zu modellieren: Das ursprünglich mit 4 eV relativ tiefe Potential, hervorgerufen durch das Anlegen von jeweils 35 V an die Elektroden 7 und 13 (Abbildug 4.3), wird durch Schalten einer Spannungsrampe von ungefähr 55 V an den Elektroden 9 und 10 in seiner Tiefe soweit reduziert, dass es nur noch ein einziges Ion zu fangen vermag. Nach dem Zurückfahren der Spannungsrampe besitzt das Potential wieder die Ausgangsform. Um die Effizienz dieses Verfahrens zu überprüfen, wurde der beschriebene Vorgang mit Ionenkristallen unterschiedlicher Länge statistisch untersucht. Die Wahrscheinlichkeit, nach dem Prozess genau ein Ion in der Falle zu haben, liegt demnach bei 97, 7(7) %. Mit diesem einfachen wie robusten Verfahren wird zudem eine erhebliche Steigerung der Repetitionsrate erzielt. Erreicht wird dies durch Ausführen der Prozedur gleich nach dem Kristallisieren des ersten Ions. Somit muss das Kristallisieren aller sich im Fallenvolumen befindlichen Ionen nicht mehr abgewartet werden.

4.1.4 Extraktionsprozess und Detektion

Die Ausgangssituation für eine Extraktion entspricht der nach Abschnitt 4.1.1 beziehungsweise nach 4.1.3, das heißt das axiale Potential wird zunächst durch Anlegen von jeweils 35 V an die Elektroden 7 und 13 erzeugt (Abbildung 4.1 (a)) und es befindet sich ein Ionenkristall mit einer bestimmten Länge in der Falle. Um die Ionen nun zu extrahieren werden die Elektroden 9 und 10 innerhalb weniger Nanosekunden mittels eines schnellen elektronischen Hochspannungsschalters ¹ auf 500 V gelegt. Abbildung 4.4 (b) zeigt das simulierte axiale Potential nach dem Anlegen der Spannung. Da die Elektroden nicht in Plattenkondensatorkonfiguration angeordnet sind und auch der Durchgriff der Felder aufgrund der abschirmenden Wirkung der Radiofrequenzelektroden nicht optimal sein kann, beläuft sich die maximale Höhe des Potentials auf 140 eV anstatt der angelegten 500 eV. Um die Extraktion unabhängig von der Mikrobewegung zu machen, verfügt das Experiment über eine zusätzliche Schaltung, welche das Auslösen der Extraktionsspannung mit der Radiofrequenzphase synchronisiert. Durch Flugzeitmessungen, die nicht während dieser Diplomarbeit stattfanden, konnte die tatsächliche kinetische Energie der Teilchen ermittelt werden. Sie beträgt rund 80 eV [Sch09]. Diese scheinbare Diskrepanz kann damit begründet werden, dass das Ion nicht die gesamte Spannungsdifferenz durchläuft, weil es von einem Punkt startet, der nicht beim Potentialmaximum liegt. Um den Ionenstrahl in seiner Richtung zu beeinflussen und damit auf ein Ziel auszurichten, ist die Falle mit zusätzlichen

¹ HTS 41-06-GSM, Behlke Power Electronics GmbH, Kronberg, Deutschland



Abbildung 4.4: (a) Die Ausgangssituation des Potentials in axialer Richtung bei einer Spannung von 35 V an den Elektroden 7 und 13. (b) Das gleiche Potential wie in (a), aber mit einer Spannung von 500 V an den Elektroden 9 und 10, um die Ionen zu extrahieren.

Ablenkelektroden versehen. Wie bereits Simulationen des Extraktionsprozesses [Fic09a] vermuten lassen, führt das Anlegen einer Ablenkspannung zu unerwünschten Ablenk- und Aufheizeffekten. Da die Radiofrequenzelektroden parallel zu den Ablenkelektroden weitergeführt werden, resultiert das Ablenken in einer Auslenkung der Teilchen im radialen Pseudopotential, was eine verstärkte Mikrobewegung zur Folge hat. Dieses Verhalten tritt bei den Messungen in Abschnitt 4.2 auf und wird bei der anschließenden Diskussion der Ergebnisse berücksichtigt. Um diesem Effekt vorzubeugen, ist das Experiment zusätzlich mit einer Vorrichtung, die ein mechanisches Ausrichten der Detektorkammer auf den Ionenstrahl erlaubt, ausgestattet. Da ein solches Ausrichten auf mechanischem Wege allerdings extrem zeitaufwändig ist, wurde bei der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Messung darauf verzichtet. Zukünftig sollen daher separate Ablenkelektroden ein einwandfreies Ausrichten des Ionenstrahls gewährleisten.

Zur Detektion der Ionen wird der schon in Kapitel 3.5 beschriebene Sekundärelektronenvervielfacher eingesetzt. Damit wurden in der Vergangenheit [Lin07, Fic09a, Sch10a] Flugzeitmessungen durchgeführt, um die Geschwindigkeitsfluktuation und die Divergenz des Ionenstrahls auszumessen. Hierfür musste zunächst die genaue Detektoreffizienz und die Abhängigkeit der Detektionsrate vom Kammerdruck ermittelt werden. Für einen Druck von $3 \cdot 10^{-9}$ mbar ergaben die Messungen eine Detektionseffizienz von $87 \binom{+7}{-11} \%$. Messungen der Flugzeit ergaben eine Standardabweichung der Geschwindigkeit von $(6, 3 \pm 0, 6)$ m/s bei einer mittleren Geschwindigkeit von 19, 47 km/s.

4.2 Bestimmung des Strahldurchmessers

4.2.1 Beschreibung des verwendeten Messverfahrens

Die für die Messungen des Strahldurchmessers verwendete Apparatur ist in Kapitel 3.4 beschrieben. Das Messverfahren verläuft dabei folgendermaßen: An einer festen Position 7,96 mm nach der ersten Blende der Einzellinse wird eine Rasierklinge, die auf einem Piezoschlitten befestigt ist, sukzessive in radialer Richtung und senkrecht zur optischen Achse der Einzellinse in den Strahl gefahren (Abbildung 4.5). Nimmt man dabei für



Abbildung 4.5: Schema des verwendeten Messverfahrens: Die Schneide der Rasierklinge, im Bild grau dargestellt, wird senkrecht zur Achse des Strahls (rote gestrichelte Linie) in diesen hineingefahren (roter Pfeil). Dadurch erreicht man ein schrittweises Abschneiden des Strahlprofils.

verschiedene Schneidenpositionen die Detektionsrate auf, so genügen diese einer Funktion, die wie folgt motiviert werden kann. In der Ebene der Schneidkante lässt sich die von der Schneidenposition y abhängige Transmissionsrate durch eine Heaviside-Funktion $h(x) = \Theta(x - y)$ beschrieben, das heißt nur für x > y passieren die Teilchen die Schneide. Für das Strahlprofil kann man eine radialsymmetrische zweidimensionale Gaußverteilung annehmen. Damit erhält man durch Projektion auf die Richtung der Schneidenbewegung (hier x) mittels Integration in y-Richtung, eine eindimensionale Gaußverteilung $f(y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y-a}{\sigma})^2}$. Da die Detektionsrate nur von der Position des Schnittpunktes der Trajektorien mit der Schneidenebene abhängt und nicht von der weiteren Bahn des Teilchens, erhält man deren Abhängigkeit von der Schneidenposition durch die Faltung der Heaviside-Funktion mit dem Gaußprofil:

$$D(x) = (f * h)(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{c}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-a}{\sigma}\right)^2} \Theta(y-x) \,\mathrm{d}y = \frac{c}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x-a}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right). \quad (4.2)$$



Dabei trägt der zusätzliche Vorfaktor c der Detektoreffizienz Rechnung, während a der

Abbildung 4.6: Plot der Funktion $D(x) = \frac{c}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x-a}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right)$ mit $c = 0, 8, \sigma = 1$ und a = 1.

radiale Versatz des Strahls von der Symmetrieachse in Bewegungsrichtung der Schneide ist und σ dessen Halbwertsbreite. Um mit dieser Methode den Strahldurchmesser des Ionenstrahls im Fokus der Abbildungsoptik zu bestimmen, führt man diese Messung idealerweise für verschiedene Abstände der Schneide von der Linse durch. Da der, zum Zeitpunkt der Messungen die während dieser Diplomarbeit durchgeführt wurden, im Experiment eingebaute Piezoschlitten lediglich in der Lage ist, eine Bewegung senkrecht zur optischen Achse der Linse auszuführen, musste die Messung für verschiedenen Linsenspannungen durchgeführt werden, um so den Radius der Strahltaille zu bestimmen. Inzwischen steht dem Experiment auch ein drei-Achsen Positioniertisch zur Verfügung. Die folgende Rechnung, die darauf abzielt, weitere Strahlparameter wie die Quellgröße und die Strahldivergenz aus solch einer zusammenhängenden Messreihe zu bestimmen, wird zunächst für verschiedene Abstände durchgeführt. Um daraus eine Beschreibung des Systems mit einem festen Abstand aber variabler Linsenspannung zu erhalten, muss man lediglich die Abhängigkeit der Brennweite von der Linsenspannung $f \propto \frac{1}{U_{\rm L}}$ berücksichtigen. Analog zur Optik kann man die durch Linsen beeinflussten Trajektorien der geladenen Teilchen geometrisch beschreiben. Laut [Dem 09] gilt für den Abstand r_2 einer Trajektorie von der optischen Achse an einem beliebigen Punkt b nach der Hauptebene der Linse:

$$r_2(b) = \left(1 - \frac{b}{f}\right)r_1 + \left(a + b + \frac{ab}{f}\right)\alpha_1.$$

$$(4.3)$$

Dabei wird die Linse durch die Brennweite f charakterisiert, während a die Gegenstandsweite ist. Abbildung 4.7 veranschaulicht den Zusammenhang, wobei b hier mit der Bildebene zusammenfällt. Die Gleichung (4.3) gilt auch für dicke Linsen. In diesem Falle wird a zur ersten und b zur zweiten Hauptebene gemessen. Legt man nun der Gleichung eine ausgedehnte Quelle mit einer Verteilung $\rho_r(r_1)$ und eine Winkelverteilung $\rho_\alpha(\alpha_1)$ zugrunde,



Abbildung 4.7: Strahlengang durch eine dünne Linse: Der achsparallele Strahl (rote gestrichelte Linie) schneidet die optische Achse (OA) bei der Brennweite f und trifft sich mit dem Strahl, der unter dem Winkel α am Abstand r_1 das Objekt verlässt in der Fokusebene.

so erhält man für den mittleren Abstand der Trajektorien von der optischen Achse im Punkt b:

$$\Delta r_2(b) = \sqrt{\overline{r^2} - \underbrace{\overline{r}^2}_{0}} = \left(\iint_{-\infty}^{\infty} \rho_r(r_1) \, \rho_\alpha(\alpha_1) \, r_2^2(r_1, \alpha_1) \, \mathrm{d}r_1 \mathrm{d}\alpha_1 \right)^{\frac{1}{2}}.$$
 (4.4)

Diese Funktion beschreibt die Standardabweichung des Strahlprofils an der Stelle *b*. Unter der Annahme, dass ρ_r und ρ_{α} Gaußverteilt um Null sind, das heißt

$$\rho_r(r_1) = \frac{1}{\sigma_r \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{\sigma_r}\right)^2} \quad \text{und} \quad \rho_\alpha(\alpha_1) = \frac{1}{\sigma_\alpha \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_1}{\sigma_\alpha}\right)^2}, \tag{4.5}$$

ist (4.4) analytisch lösbar. Dies ergibt

$$\Delta r_2(b) = \sqrt{\frac{b^2 f^2 \sigma_{\alpha}^2 + a b f 2 \left(f - b\right) \sigma_{\alpha}^2 + \left(b - f\right)^2 \left(a^2 \sigma_{\alpha}^2 + \sigma_r^2\right)}{f^2}}.$$
(4.6)

In Abbildung 4.8 ist die Standardabweichung des Strahlprofils für die Gaußverteilte Quellenausdehnung sowie die ebenfalls Gaußverteilte Strahldivergenz zu sehen. Hierbei fällt die Strahltaille mit dem geringsten Querschnitt im Allgemeinen nicht - wie man es vielleicht erwarten würde - mit der Bildebene zusammen. Dies wäre der Fall, wenn die Quelle eine gleichverteilte Strahldivergenz besäße. Dabei spielt auch die Blende der Linse eine Rolle, da diese einen Einfluss auf die Winkelverteilung hat. Hat man nun aus Messungen mittels der eingangs dieses Abschnitts beschriebenen Methode die Halbwertsbreite des Strahls für verschiedene Abstände b von der Hauptebene der Linse bestimmt, lässt sich durch Anpassen der Kurve (4.6) an die Datenpunkte die Halbwertsbreite der Quellgröße σ_r sowie



Abbildung 4.8: Plot der Funktion (4.6) mit den Werten a = 3, $f = \sigma_r = \sigma_\alpha = 1$. Aus der Abbildungsgleichung lässt sich die Bildebene $B = \frac{a \cdot f}{a - f}$ berechnen. Sie liegt für diese Parameter bei b = 1, 5 und ist durch die gestrichelte Linie dargestellt.

die mittlere Strahldivergenz σ_{α} bestimmen. Damit ergibt sich laut [Hin08] mit nichtrelativistischen Partikelgeschwindigkeiten für die Emittanz der Quelle

$$\pi \epsilon = \pi \sigma_r \sigma_\alpha. \tag{4.7}$$

Um nun Gleichung (4.6) abhängig von der Spannung zu erhalten, wählt man wegen $f \propto \frac{1}{U_{\rm L}} \Rightarrow f = \frac{k}{U_{\rm L}}$ und setzt für *b* den festen Abstand der Schneidenebene ein. *k* ist eine zunächst unbekannte Proportionalitätskonstante, die es durch die Messung zu ermitteln gilt. Dadurch erhöht sich natürlich die Anzahl der unbekannten Parameter.

4.2.2 Numerische Simulationen

Die seinerzeit von Robert Fickler im Laufe seiner Diplomarbeit [Fic09a] durchgeführten Simulationen umfassen eine komplette Nachbildung der dreidimensionalen Elektrodenstruktur, sowohl der Falle als auch der Linse und des von ihnen erzeugten elektrischen Feldes; außerdem eine Berechnung der Trajektorien der sich in den Feldern bewegenden geladenen Teilchen. So konnte der gesamte Extraktionsmechanismus digital rekonstruiert und Vorhersagen über die Strahlqualität unter verschiedenen Anfangs- und Randbedingungen, wie der Temperatur des extrahierten Kristalls oder das Anliegen unterschiedlicher Ablenkspannungen, gemacht werden. Ferner war es möglich, Vorhersagen über die Fokusqualität der Linse in Abhängigkeit der genannten Parameter zu machen. Die zunächst im Experiment verwendete elektrostatische Einzellinse wurde ebenfalls von R. Fickler en-

twickelt und ist in [Fic09a] und in [Fic09b] ausführlich dokumentiert. Die dabei verwendete Geometrie geht auf A. Septier [Sep60] zurück, wurde jedoch erheblich angepasst, um der Forderung nach einer einfachen Fertigung gerecht zu werden. Dementsprechend wurde auf eine komplizierte Elektrodenform zu Gunsten einer einfacheren und genaueren Ausrichtung beim Zusammenbau der Linse verzichtet. Die von R. Fickler durchgeführten umfangreichen Simulationen zeigen auf, dass sich die Beeinträchtigungen der Fokusqualität infolge dieser Vereinfachungen in einem vertretbaren Rahmen halten. Wie sich aber nach dem Bau der Linse im Experiment herausstellen sollte, gestaltet sich die Ausrichtung des Ionenstrahls auf die optische Achse der Linse aufgrund der kleinen Aperturblende von 1 mm als äußerst schwierig und nimmt viel Zeit in Anspruch. Weitergehende Simulationen ergaben jedoch, dass die Qualität des Fokus bei einer Erweiterung der Blende auf 8 mm nur unwesentlich leidet. Das Ausrichten des Strahls auf die Linse erleichtert sich aber auf Grund dieser Maßnahme erheblich. Daher wurden bei der neuen Linse die Blendendurchmesser der ersten beiden Elektroden auf 8mm vergrößert, die Dicken der Blenden sowie die Abstände dazwischen, der Einfachheit halber, beibehalten. Der Durchmesser der Blendenöffnung in der letzten Elektrode beläuft sich auf 4 mm. Dies stellt einen Kompromiss zwischen einer großen Öffnung mit den oben genannten Vorteilen und einer möglichst guten Abschirmung des rückwärtigen Bereichs gegen elektrische Felder aus dem Innenraum der Linse dar. Die Notwendigkeit dieser Maßnahme liegt vor allem im geringen Abstand der zur Messung verwendeten geerdeten Schneidkante von der letzten Blende und dem damit verbundenen Symmetriebruch der Linsengeometrie begründet. Tatsächlich zeigen Simulationen, dass mit einem größeren Durchmesser der Felddurchgriff schnell ansteigt. Tabelle 4.1 vergleicht die zunächst verwendete 1 mm Linse mit der später eingesetzten 8 mm Linse und stellt die wichtigsten Parameter beider Linsen gegenüber. Die für die Sim-

Linse	1 n	nm	$8\mathrm{mm}$	
Temperatur	$2\mathrm{mK}$	100 µK	$2\mathrm{mK}$	$100\mu\mathrm{K}$
Spannung	$65\mathrm{V}$	$65\mathrm{V}$	$250\mathrm{V}$	$250\mathrm{V}$
1σ -Radius	$7,3\mathrm{nm}$	$0,8\mathrm{nm}$	$44,9\mathrm{nm}$	$1,1\mathrm{nm}$

Tabelle 4.1: Vergleich der zunächst verwendeten 1 mm Linse mit der später eingesetzten 8 mmLinse. Die 1σ -Radien wurden an der Position der Strahltaille erhoben.

ulationen der Linse verwendeten Datensätze der Anfangspositionen und Geschwindigkeiten der Teilchen entstammen einer von R. Fickler durchgeführten Extraktionssimulation. Da die von der Ionentemperatur abhängigen Anfangskoordinaten und Geschwindigkeiten der Ionen in der Falle auf einer Monte-Carlo-Simulation beruhen, zeigen die so erzeugten Daten realistische Fluktuationen beider Parameter. Um den experimentellen Ergebnissen gerecht zu werden, wurden sie außerdem mit dem Faktor 2,3 in der *x-y*-Ebene multipliziert [Sch09]. Der Wert des Faktors entstammt einem Vergleich der gemessenen mit der simulierten Geschwindigkeitsverteilung. Abbildung 4.9 zeigt die Geometrien und die elektrischen Potentiale beider Linsen im Vergleich. Um Probleme infolge der eventuell auftre-



Abbildung 4.9: (a) Querschnitt der zuerst entwickelten Linse mit Blendendurchmesser von einem Millimeter. An der zweiten Elektrode (rot) liegt eine Spannung von 65 V an.
(b) zeigt das dazugehörige Potential. (c) Querschnitt der neueren Ausführung der Linse mit einer Blendenöffnung von 8 mm der ersten beiden Elektroden, beziehungsweise 4 mm der dritten Elektrode. Im Betrieb werden typischerweise 150 V an die mittlere Elektrode gelegt. Ein Querschnitt des Potentials der Linse bei einer Spannung von 250 V ist in (c) zu sehen.

tenden Potentialverformungen, verursacht durch die zur Messung verwendeten Schneidkante (vergleiche hierzu Kapitel 4.2.1), vorzubeugen, wurde der gesamte Messprozess in einer numerischen Simulation nachgebildet. Dazu musste die Aperturblende mit der darauf befestigten Schneide für verschiedene radiale Positionen als CAD-Modell abgebildet werden. Des Weiteren galt es das dadurch hervorgerufene Blockieren der Trajektorien, verbunden mit einer entsprechenden statistischen Auswertung, zu implementieren. Abbildung 4.10 veranschaulicht die Auswirkung der Schneide auf die Flugbahnen. Auffällig dabei ist das leichte "Wegdrücken" der Trajektorien von der Schneide. Das Ergebnis der kompletten



Abbildung 4.10: Simulation der Ionentrajektorien bei Anwesenheit einer Schneidkante (grau) in der Mitte, das heißt bei einem Versatz von 0 μm (a) und bei einem Versatz von 150 μm (b).

Auswertung aller in diesem Zusammenhang durchgeführten Simulationen ist in Abbildung 4.11 zu sehen. Gezeigt ist die Transmissionsrate in Abhängigkeit von der Schneidenposition. Das Anpassen der Kurve ergab einen 1 σ -Radius von 80, 4 nm, bei einem tatsächlichen 1 σ -Radius von 146, 2 nm. Somit ist trotz des oben beschriebenen Einflusses der Schneidkante mit realistischen Ergebnissen dieser Messmethode zu rechnen. Bei diesen Simulationen wurde das Anlegen einer Ablenkspannung mit berücksichtigt. Siehe dazu auch Kapitel 4.2.3. Der dort aus der Simulation ermittelte 1 σ -Radius beträgt 268, 4 nm. Diese Diskrepanz ist mit einer Erweiterung des Simulationsbereiches um 40 mm vor der Linse zu erklären. Dadurch werden Streufelder vor der Linse mit berücksichtigt, die zu einer Aufweitung des Strahls führen.

4.2.3 Messungen mittels einer Schneidkante

Alle Messungen mit der Schneidkante, die während dieser Diplomarbeit durchgeführt wurden, waren mit starken Drifts des Ionenstrahls in radialer Richtung behaftet. Diese resultieren vermutlich aus Schwankungen der Startposition der Ionen in der Falle, verursacht durch Streuladungen auf den Fallenflügeln, oder thermisch induzierte Verformungen der



 Abbildung 4.11: Simulierte Werte der Transmissionsrate in Abhängigkeit der Schneidenposition

 (•). Die rote Kurve ist die zur Gewinnung des Strahlradius an die Simulationswerte angepasste Kurve (4.2).

Falle. Aufgrund dieser Drifts konnte daher keine zusammenhängende Messreihe aufgenommen werden. Die Messungen des Strahlquerschnitts müssen deshalb für jede Spannung voneinander unabhängig betrachtet werden und können somit nicht einer Berechnung der Quellgröße sowie der Strahldivergenz und schließlich der Emittanz als Grundlage dienen; für weitere Experimente sind obige Formeln jedoch von Interesse. Aufgrund der relativ geringen Repetitionsrate von ungefähr drei Extraktionen pro Minute wurde - um Drifts vorzubeugen - die Anzahl der Extraktionen pro Schneidenposition auf zehn beschränkt. Die genaueste Messung wurde bei einer Linsenspannung von 150 V durchgeführt. Aus dem Anpassen der Kurve ergab sich ein 1σ -Radius von $(4, 62 \pm 1, 25)$ µm. Gemäß früherer Messungen in [Sch09] wurde dabei der Faktor für die Detektoreffizienz c = 0.87 gewählt. Die Diskrepanz zwischen den Ergebnissen der numerischen Simulationen in Abschnitt 4.2.2 und den Messergebnissen hat vermutlich mehrere Ursachen. Für grundzustandsgekühle Ionen bei einer Temperatur von etwa 100 µK lassen die Simulationsergebnisse einen Radius von rund einem Nanometer erwarten. Dieser verschlechtert sich für dopplergekühlte Ionen bei einer Temperatur von 2 mK auf 45 nm. Da bei den vorliegenden Messungen die Ausrichtung des Strahls auf die Linse durch Ablenkelektroden erfolgte, müssen auch die damit einhergehenden Aufweitungseffekte berücksichtigt werden [Fic09a]. Zusammengenommen ergeben all diese Einflüsse einen 1σ -Radius von 270 µm. Durch einen parallelen Versatz des Strahls in der Hauptebene der Linse aus der Mitte vergrößert sich der Strahlradius weiter; dabei reicht bereits ein Abstand von 520 µm aus, um den im Experiment gemessenen Radius zu reproduzieren.



Abbildung 4.12: Experimentelle Bestimmung des Strahldurchmessers: • sind die Messdaten der Detektionsrate in Abhängigkeit der Schneidenposition bei einer Linsenspannung von 150 V. Die rote Linie ist die daran angepasste Kurve (4.2). Daraus resultiert ein 1σ -Strahlradius von (4, 6 ± 1, 3) µm. [Sch10b]

In Abbildung 4.13 sind die Ergebnisse einer Simulationen des 1σ -Radius in Abhängigkeit des Strahlversatzes dargestellt.



Abbildung 4.13: Aufgetragen sind die simulierten Strahlradien als Funktion des Versatzes des Strahls in der Hauptebene der Linse. Die Ergebnisse zeigen außerdem eine starke Abhängigkeit von der Temperatur: für 2 mK wurde einmal mit (•) als auch ohne Ablenkspannung (*) simuliert. Außerdem für 100 μK ohne Ablenkspannung (◊).

Dafür kommen zwei Ursachen in Betracht: Zum einen ein mechanischer Versatz der Aperturblende, die verwendet wurde, um den Strahl auf die Achse der Linse auszurichten. Dieser liegt in den Fertigungstoleranzen begründet und beläuft sich auf maximal 200 µm. Zum anderen ein Versatz des Strahls innerhalb dieser Blende mit einem Durchmesser von 1 mm, das heißt der maximale Fehler beim Ausrichten beträgt rund 400 µm, wenn ein entsprechender Strahldurchmesser zugrunde gelegt wird. In der Summe ergeben beide Abweichungen einen Versatz von 600 µm, was ausreichend ist, die beobachtete Aufweitung des Strahls zu erklären.

5

Verbesserte Abbildungsoptik

Die bisher mit der als Ionenquelle verwendeten Paul-Falle erreichten kinetischen Energien von rund 80 eV sind für eine Implantation der Teilchen in einen Festkörper aus verschiedenen Gründen nicht ausreichend. Erstens ist bei dieser Energie die Implantationstiefe zu gering und zweitens erhöht sich bei der Erzeugung von sogenannten NV-Farbzentren durch Implantation von Stickstoff in Diamant, die Effizienz bei der Erzeugung eines Farbzentrums. Für eine Steigerung dieser Konversionseffizienz rund 50% wären allerding Energien von 2MeV notwendig [Pez10]. Dadurch würde sich jedoch die Auflösung in der radialen Ebene durch Streueffekte stark verschlechtern. Ein Ausweg könnte hier die Nachträgliche Implantation von Kohlenstoff darstellen, das Verfahren befindet sich allerdings noch in der Erprobungsphase [Nay10]. Vorerst ist also eine Steigerung auf Energien bis zu 4 keV erforderlich um eine hinreichende Eindringtiefe der Ionen zu gewährleisten. Ein durch Implantation von Cer in Yttrium-Orthosilikat erzeugtes Farbzentrum könnte hier zur Überprüfung der Auflösung und der Konzepttauglichkeit dienen.

Durch Verwenden höherer Extraktionsspannungen kann die kinetische Energie nicht wesentlich gesteigert werden, da dies die Bauweise der Falle nicht zulässt - wegen der geringen Abstände der Segmente könnten Überschläge die empfindlichen Elektrodenstrukturen auf Leiterplattenbasis zerstören. Da bei einer deterministischen Quelle die Position des extrahierten Partikels zu jedem Zeitpunkt hinreichend genau bekannt ist, besteht die Möglichkeit, das Ion durch geschaltete elektrische Felder nachzubeschleunigen. Wie sich in ersten Simulationen schnell zeigte, gestaltet es sich schwierig, die konvergierende Wirkung einer solchen Apparatur zu unterdrücken. Daher liegt es nahe, die Fähigkeit zu fokussieren und nachzubeschleunigen in einem Gerät zu kombinieren. Überdies sollte sich herausstellen, dass sich durch diese Maßnahme die Fokusqualität in den Subnanometerbereich steigern lässt.

5.1 Simulationen zur Nachbeschleunigung der Ionen

Bei der Entwicklung der Beschleunigungslinse galt es zunächst eine geeignete Linsengeometrie zu finden, welche dann hinsichtlich den technischen Anforderungen und Einschränkungen optimiert werden konnte. Die Vorgehensweise war dabei wie folgt: Eine vielversprechend erscheinende Geometrie wurde vorderhand auf ihre Fokus- und Beschleunigungseigenschaften hin untersucht, um die daraus gewonnenen Erkenntnisse dann auf die nächste Ausführung anzuwenden. Oftmals sollten sich dabei einige intuitive Annahmen als unbegründet oder falsch erweisen. Beispielsweise verkehrten Bildladungen, hervorgerufen durch die starken elektrischen Felder die ursprünglich gewünschte Wirkung der Elektrodenanordnung ins Gegenteil.

Um die Funktionsweise der Beschleunigungslinse zu erläutern und das Vorgehen bei ihrer Konstruktion zu motivieren, wird zunächst auf das Wirkungsprinzip einer herkömmlichen elektrostatische Einzellinse eingegangen. Eine solche besteht im Wesentlichen aus drei hintereinander angeordneten Apertur-Elektroden. Dabei gibt es zwei Betriebsmodi, die man in ihrer Elektrodenbeschaltung und Arbeitsweise unterscheidet. Beiden gemein ist das Anlegen der Spannung an der mittleren Elektrode; ist diese gleichen Vorzeichens wie die Ladung des Ions, spricht man vom Decel-Accel-Modus, bei entgegengesetztem Vorzeichen hingegen vom Accel-Decel-Modus. Die Bezeichnungen kommen dabei von den englischen Ausdrücken deceleration und acceleration, welche die unterschiedlichen Wirkungsbereiche der Linse charakterisieren. Neben einer verzögernden, respektive beschleunigenden Wirkung haben diese Abschnitte auch einen konvergierenden beziehungsweise divergierenden Einfluss auf einen Strahl geladener Partikel. Die Linseneigenschaft dieser Anordnung und die Tatsache, dass es nur fokussierende elektrostatische Einzellinsen geben kann [Sch36], resultiert aus der Asymmetrie der Aufenthaltszeiten im jeweiligen Regime. So ist in beiden Betriebsmodi die Dauer der fokussierenden Phase länger, womit der fokussierende Einfluss überwiegt.

Um die Ionen zu beschleunigen, genügt es daher, die Linse auszuschalten, während sich

das Teilchen im verzögernden Abschnitt befindet. Folglich kann auf diesen Bereich und somit auf eine Elektrode verzichtet werden. Da es wie bereits angedeutet aufgrund der starken elektrischen Felder zu Bildladungseffekten kommt, wurde die Methode, das Ion durch anziehende elektrische Felder zu beschleunigen, ausgeschlossen. Übrig bleibt nur die Variante, ein abstoßendes elektrisches Feld nach dem Passieren der Elektrode einzuschalten. In Abbildung 5.1 ist das Potential der letztlich gebauten Beschleunigungslinse zu sehen. Mit dem Überqueren der gestrichelten Linie wird die Linse geschaltet.



Abbildung 5.1: Querschnitt des radialsymmetrischen Potentials der Beschleunigungslinse beim Anlegen von 2500 V an die erste Elektrode (dunkelgrau).

Im Laufe der Untersuchungen wurden insgesamt über 20 Geometrien simuliert, wobei die schließlich favorisierte Geometrie, deren Querschnitt in Abbildung 5.2 zu sehen ist, nicht zuletzt wegen der einfachen Bauweise gewählt wurde. Zunächst galt es, den Einfluss verschiedener Parameter auf die Fokusqualität zu untersuchen. Hierbei erwiesen sich die meisten als verhältnismäßig unkritisch, so dass diese unter baulichen Gesichtspunkten gewählt werden konnten. Demgemäß zeigte der wegen der hohen Spannungen nötige Abstand zwischen den Elektroden keine negativen Auswirkungen auf das Fokussiervermögen. Ebenfalls änderte eine Variation der Dicke der letzten Elektrode nichts an der Fokusqualität und somit konnte diese von der bisherigen Linse übernommen werden. Einige Linsengeometrien mit ansonsten guter Charakteristik mussten verworfen werden, da bei diesen der Fokus zu eng an der letzten Elektrode oder sogar innerhalb der Elektrodenanordnung lag. Wie bei allen untersuchten Geometrien wurde auch hier der Schaltzeitpunkt variiert,



Abbildung 5.2: Querschnitt der Beschleunigungslinse: Die erste Elektrode wird zum Schalten der Linse auf ein Hochspannungspotential gelegt, sie hat eine Länge von 30 mm und einen Innendurchmesser von 8 mm. Der Abstand zwischen den Elektroden beträgt 1 mm. Die zweite Elektrode dient der Halterung und ist geerdet. Sie weist eine Dicke von 1 mm auf sowie eine Blendenöffnung mit 4 mm Durchmesser.

um einerseits ein Optimum des Fokusradius zu finden und andererseits die Abhängigkeit der Fokusdistanz davon zu ermitteln. Auch ist dies hinsichtlich der Vorbeugung möglicher systematischer Fehler beim Schalten der Linse, wie zum Beispiel einer Verzögerung des Schaltzeitpunktes durch Signallaufzeiten, von Interesse. Die Resultate sind in Tabelle 5.1 aufgeführt.

Spannung / V	Schaltzeit / s	Temp. / mK	Fokuslänge / mm	1 σ -Radius / nm
0 auf 2500	$0,6\cdot 10^{-6}$	2	32,76	2,19
0 auf 2500	$0, 8 \cdot 10^{-6}$	2	$32,\!78$	2,26
0 auf 2500	$1, 0 \cdot 10^{-6}$	2	$32,\!89$	2,16
0 auf 2500	$1, 2 \cdot 10^{-6}$	2	$33,\!70$	1,94
0 auf 2500	$0, 8 \cdot 10^{-6}$	$0,\!1$	32,78	$4,33 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 5.1: Abhängigkeit des Fokusradius und der Fokusdistanz vom Schaltzeitpunkt. Während die Fokusdistanz mit zunehmender Schaltzeit ansteigt, liegt der geringfügigen Schwankung des Fokusradius keine erkennbare Systematik zu Grunde. Wie bei den anderen Linsen findet sich jedoch eine deutliche Abhängigkeit von der Ionentemperatur. So errechnet sich bei einer Temperatur von 100 µK der Ionen in der Falle ein 1 σ -Radius von nur 4, 33 Å.

Abhängig vom Schaltzeitpunkt weisen die Radien zwar eine gewisse Schwankung auf, dieser liegt jedoch keine erkennbare Systematik zu Grunde. Somit sind die Fluktuationen in dieser Größenordnung höchstwahrscheinlich ein Artefakt der numerischen Simulation. Ein weiterer Beleg dafür ist das Auftreten dieser unkorrelierten Schwankungen bei einer minimalen Veränderung anderer Parameter wie zum Beispiel der Linsenspannung. Zudem tritt dieses Verhalten auch bei allen anderen simulierten Geometrien auf. Die Fokusdistanz hingegen zeigt wie erwartet eine Abhängigkeit vom Schaltzeitpunkt. Daher ist es notwendig, die Stabilität der Fokusdistanz und folglich auch des Fokusradius gegen Fluktuationen im Schaltzeitpunkt der Hochspannungsschalter zu untersuchen. Um die Anfälligkeit diesbezüglich zu minimieren, hat die erste Elektrode eine Länge von 30 mm, so dass das Potential bei anliegender Spannung um den Mittelpunkt der Elektrode hinreichend konstant ist. Durch diese Maßnahme wird eine Vergrößerung des Fokusradius um etwa 30% in Kauf genommen. Während das Ion die Mitte der ersten Elektrode passiert wird die Linse eingeschaltet und das Potential dadurch angehoben, dabei wirken jedoch keine Kräfte auf das Teilchen. Erst im abfallenden Potential zwischen den Elektroden wird das Ion beschleunigt, währenddessen erfährt es eine fokussierende Kraft. Der Fokusradius abhängig von der Fluktuation des Schaltzeitpunktes ist in Abbildung 5.3 dargestellt.



Abbildung 5.3: Fokusradius in Abhängigkeit der gaußverteilten Fluktuation des Schaltzeitpunktes um einen Mittelwert 0,8·10⁻⁶ s nach Eintreten des Teilchens in die Elektrode. Die Temperatur der Ionen vor der Extraktion liegt bei 2 mK. Dabei liegen jedem Fokusradius die Trajektorien von 1000 simulierten Ionentrajektorien zu Grunde. Die gestrichelte rote Linie ist die vom Hersteller des Hochspannungsschalters angegebene Fluktuation von 2 ns im Schaltzeitpunkt.

Eine weitere Anforderung ist ein einfaches Ausrichten des Ionenstrahls auf die optische Achse der Linse unter gleichzeitiger Abschirmung des rückwärtigen Bereichs vor Feldern aus dem Inneren der Elektrodenanordnung. Dies wird wie schon bei der vorherigen Einzellinse durch Aperturgrößen von 8 mm der ersten Blende sowie 4 mm der zweiten Blende gewährleistet (vergleiche hierzu Kapitel 4.2.2).

5.2 Konstruktion und Bau

Die 30 mm lange erste Elektrode wurde in Edelstahl gefertigt. Der Außendurchmesser beträgt 27 mm, der Innendurchmesser 8 mm. Sie ist mittels vier Schrauben auf der zweiten Elektrode gehaltert und durch insgesamt acht Hülsen aus Macor[®] von dieser elektrisch isoliert. Die Kontaktierung zum Anlegen der Beschleunigungsspannung erfolgt über eine Klemmschraube an der Seite der Elektrode. Das Bauteil der letzten Elektrode wird von der vorherigen Einzellinse übernommen. Wie auch dort dient es zur Halterung der restlichen Linse, ist deshalb mechanisch und galvanisch mit der Vakuumkammer verbunden und somit geerdet. Wie bei den vorherigen Linsen wird beim Zusammenbau die Ausrichtung der Elektroden zueinander durch einen Passstift garantiert. Die Konstruktionszeichnungen der Linse sind unter Anhang A zu finden.



Abbildung 5.4: Fotographie der Beschleunigungslinse.

6

Zusammenfassung und Ausblick

Im Verlauf dieser Arbeit wurde ein Verfahren entwickelt, welches eine Erfolgswahrscheinlichkeit von 97,7% im deterministischen Laden von Ionen in einer linearen segmentierten Paul-Falle garantiert. Eine solche Eigenschaft ist für eine dadurch realisierte Ionenquelle bislang einzigartig. Des Weiteren konnte ein mit dieser Quelle erzeugter Ionenstrahl mittels einer elektrostatischen Einzellinse erfolgreich fokussiert werden. Auch gelang es, den Radius des fokussierten Strahls durch eine spezielle Messmethode zu bestimmen. Zwar sollten sich die Erwartungen der theoretischen Vorhersagen diesbezüglich nicht vollständig erfüllen; die Ursachen für die gegenwärtige Diskrepanz konnten jedoch größtenteils eingegrenzt werden, um somit die Voraussetzung für eine zukünftige Verbesserung der verwendeten Fokussierund Messmethode zu schaffen. Zu diesen Maßnahmen zählt sicherlich die Entwicklung einer separaten Ablenkvorrichtung, um die Probleme der bisher praktizierten Ablenkung in der Falle zu umgehen. Eine weitere Verbesserung liese sich mit der Installation einer Mikrokanalplatte mit Ortsauflösung (engl. micro-channel plate oder kurz MCP) erzielen. Damit könnte das Ausrichten des Ionenstrahls auf die Linse automatisiert und damit soweit beschleunigt werden, dass die beobachteten radialen Drifts des Strahls in ihrer Auswirkung entscheidend eingedämmt würden.

Ein weiterer Schwerpunkt dieser Diplomarbeit lag auf der Entwicklung einer geschalteten

Linse. Diese ist sowohl dazu in der Lage, einen Strahl aus einzelnen Ionen zu fokussieren, als auch deren kinetische Energie zur Implantation in ein Substrat durch Nachbeschleunigen zu steigern. Im Zuge der dabei durchgeführten numerischen Simulationen konnten die Vorhersagen für den zu erwartenden Fokusradius im Vergleich zu bisherigen Linsen weiter gesteigert werden. Eine entsprechende Untersuchung ergab für dopplergekühlte Ionen einen 1σ -Radius von rund zwei Nanometern. Für Ionen mit einer Ausgangstemperatur von 100 µK konnten sogar Ergebnisse im einstelligen Angströmbereich erzielt werden. Unter realen Bedingungen muss zusätzlich die Streuung am Gitter des Substrates berücksichtigt werden. Dies führt zu einer energieabhängigen transversalen Ablenkung (engl. *straggling*) der Ionen, so dass eine Nanometer genaue Auflösung nur bei niedrigen Implantationsenergien von weniger als 1 kV garantiert werden kann.

Neben einer genaueren Vermessung des Strahlradius ist mittelfristig die Implantation in ein Substrat mit anschließender Bestimmung der erzielten Auflösung und der Effizienz im Erzeugen von Farbzentren das Ziel weiterer Anstrengungen. Der Vorteil dieser Farbzentren bei einer Charakterisierung der Fokussiereigenschaften der Apparatur liegt in der Möglichkeit, die räumliche Auflösung einer Anhäufung selbiger durch optische Verfahren, etwa mit dem STED-Verfahren (vom englischen Ausdruck *Sitmulated Emission Depletion*), auszumessen. Da für solche Zwecke die Konversionseffizienz beim Implantieren von Stickstoff in Diamant zur Erzeugung sogenannter NV-Farbzentren sehr gering ist, wird eine Implantation von Cer in Yttrium-Orthosilikat angestrebt, da dadurch unmittelbar ein Farbzentrum erzeugt werden kann. Eine weitere Möglichkeit stellt das Dotieren von reinsten Kupferoberflächen dar. Hier wird der entsprechende Nachweis durch ein auf einem STM basierendem Verfahren geführt, welches die implantierten Fremdatome mittels der an ihnen gestreuten Elektronen detektiert.



Konstruktionszeichnung der Linse









Anhang A. Konstruktionszeichnung der Linse


Wissenschafftliche Publikationen

Focusing a deterministic single-ion beam

W. Schnitzler, G. Jacob, R. Fickler, F. Schmidt-Kaler and K. Singer
 Veröffentlicht am 28 Juni 2010 im wissenschafflichen Journal:
 New Journal of Physics

(Volume: 12 / Page: 065023 / Year: 2010)



Contents

2

1.	Motivation	2
2.	Experimental set-up	3
	2.1. UHV set-up	3
	2.2. Segmented linear rail trap	3
	2.3. Optical set-up	5
	2.4. Extraction mechanism and set-up	6
	2.5. Ion optics	7
3.	Experimental results	9
	3.1. Deterministic single-ion loading	9
	3.2. Experimental determination of the spot size	10
4.	Conclusion and outlook	12
Ac	Acknowledgments	
Re	References	

1. Motivation

In the age of electronic data processing, the demand for more powerful and faster computers is paramount. As already stated by Gordon E Moore in 1965, the number of transistors that can be placed inexpensively on an integrated circuit has increased exponentially, doubling approximately every two years. The miniaturization of semiconductor devices has reached length scales of a few tens of nanometers, where statistical Poissonian fluctuations in the number of doping atoms in a single transistor significantly affect the characteristic properties of the device, e.g. gate voltage or current amplification. Especially when thinking about future solid state quantum processors, statistical fluctuations of the dopant concentration are fatal for systems that are based on single implanted qubit carriers, like color centers in diamond or phosphorus dopants in silicon [1]-[4]. Until recently, most implantation techniques resorted to thermal sources, where control of the number of doping atoms is possible only via a postdetection of the implantation event. However, although a wide range of postdetection schemes (e.g. the observation of Auger electrons, the generation of electron-hole pairs or changes in the conductance of field effect transistors) are available [5]-[9], most of these techniques require either highly charged ions or high implantation energies, which, as a down side, generate unintentional defects in the host material. Another fabrication method revolves around the structuring of chemically treated Si surfaces. Using a hydrogen-terminated Si surface as the starting point, the tip of a tunneling microscope allows for the removal of single hydrogen atoms, which are then replaced by doping atoms such as phosphorus due to a chemical reactive surface binding [10]-[14]. Although this technique is capable of placing single dopants with sub-nm resolution, the applicability is mainly restricted to specific substrates. In order to circumvent the necessity of any postdetection schemes and to expand the applicability to a wider range of elements, deterministic single-ion sources on the basis of optical lattices [15], magneto-optical [16]-[18] and segmented linear Paul traps [19] have been developed.

Here, we present the experimental set-up to focus down on an ion beam consisting of single ${}^{40}Ca^+$ ions to a spot size of a few μ m by utilizing an einzel lens. The single-ion beam is generated by a segmented linear Paul trap that allows us to deterministically extract single ions

on demand [19]–[21]. Due to the small beam divergence and narrow velocity distribution of our single-ion source, chromatic and spherical aberration at the einzel lens is strongly reduced, presenting a promising starting point for focusing single ions on a prospective substrate.

The paper is organized as follows. We first describe in section 2 the experimental setup used for the trapping, imaging and manipulation of ${}^{40}Ca^+$ and this includes a detailed description of the ultrahigh vacuum (UHV) setup, the specially designed segmented linear ion trap, the optical setup as well as the extraction mechanism and the utilized ion optics. In section 3, we present the experimental results, namely the deterministic loading of single ${}^{40}Ca^+$ ions and the focusing of the single-ion beam to a 5 μ m spot. Finally, in section 4, we give a short conclusion and sketch possible future applications.

2. Experimental set-up

2.1. UHV set-up

The core piece of the UHV set-up is a Magdeburg hemisphere from Kimball Physics⁴ with an inner diameter of 91.5 mm and a total length of 106 mm. It features a total of seven different access ports with flange sizes ranging from DN16CF to DN63CF. A specifically designed segmented linear ion trap (see section 2.2) is mounted inside the hemisphere with the trap axis being located 165 mm above the optical table.

All access ports are equipped with fused silica (SiO_2) windows, allowing for optical access with laser beams and for imaging the ions. A 20-pin vacuum feedthrough for the dc electrodes and the ovens is connected via a T-piece to the hemisphere, whereas the power supply for the rf electrodes is managed using a separate 4-pin vacuum feedthrough, which is mounted on a four-way cross, see also figure 1. Using an all-metal gate valve from VAT⁵, the main vacuum chamber is connected to a separate detector chamber, which is attached to a specifically designed translation stage. In combination with a membrane below, the translation stage allows for rotating the detector chamber in the horizontal and vertical directions with respect to the trapping position of the ion, compensating for any misalignment between the trap axis and the optical axis of the utilized ion optics. The complete set-up measures 850 mm in length with a depth of 480 mm and a total height of about 380 mm. The pressure is held by a 20 litre s⁻¹ VacIon *Plus* StarCell ion getter pump and a titanium sublimation pump⁶. In addition, both the main vacuum and the detector chamber are connected via all-metal angle valves to a turbomolecular pump from Oerlikon⁷. The base pressure of the UHV set-up equals 5×10^{-10} mbar, which is measured using a Varian UHV-24p Bayard-Alpert-type ionization gauge tube.

2.2. Segmented linear rail trap

The trap consists of four copper-plated polyimide blades, which were manufactured using printed circuit board (PCB) technology and are arranged in an X-shaped manner [22]. It features a total of 15 independent dc electrodes, which can be assigned to three different trap sections: a wide loading zone (electrodes 1–4) is connected via a taper (electrode 5) to a narrow

- ⁴ Kimball Physics Inc., USA.
- ⁵ VAT Deutschland GmbH, Germany.
- ⁶ Varian Inc., USA.
- ⁷ Oerlikon Leybold Vacuum GmbH, Germany.

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)



Figure 1. Schematic drawing of the UHV set-up. The set-up consists of a main vacuum chamber and a detector chamber, which are connected via an all-metal gate valve. A membrane below in combination with a specifically designed translation stage allows for rotating the detector chamber in the horizontal and vertical directions with respect to the trapping position of the ion.

experimental zone (electrodes 6–14). A deflection electrode (electrode 15) is used to alter the trajectories of ions that are extracted out of the trap. In order to generate the radial confinement, an additional electrode runs along the inner front face of each blade, which will be referred to as a rail in the following. The blade itself has a total length of 65 mm and a thickness of 410 μ m with 18 μ m copper plating on both sides. Electrodes 2–5 as well as electrode 14 have a width of 2.8 mm, and electrodes 6–13 have a width of 0.7 mm. In order to efficiently deflect ions by targeted application of low voltages, the deflection electrode has been elongated in the extraction direction, featuring a total length of 20.6 mm. The distance between the rf rail and the dc electrodes as well as between adjacent dc electrodes equals 0.1 mm (see also figure 2 for a technical drawing of one of the four trap blades).

The distance between the inner front faces of opposing blades equals 4 mm in the loading zone and 2 mm in the experimental zone. In the case of a standard Paul trap, the rf voltage is supplied to two of the four blades. The other two blades are used for the axial confinement and are therefore divided into several electrodes. However, in the case of our rail trap, all four blades are identical. Apart from the deflection electrodes, the corresponding electrodes on all four blades (i.e. electrode 1 of each of the blades) are electrically connected together, resulting in a stronger and more symmetrical axial confinement than in the standard case. The rf voltage is only applied to the rails of two opposing blades; the front faces of both of the other blades are grounded, generating the quadrupole potential for the radial confinement. As these rails run along the whole trap axis and continue around the corner at the end of each blade, the

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)





Figure 2. Technical drawing of one of the four trap blades featuring a total of 15 independent dc electrodes. A wide loading zone (electrodes 1–4) is connected via a taper (electrode 5) to a narrow experimental zone (electrodes 6–14). A deflection electrode (electrode 15) is used to alter the trajectories of the extracted ions. The rf rail has a thickness of about 22 μ m and covers the whole front of the blade. Isolated parts are colored black. The close-up view shows a microscope image of the front part of the blade.

radial confinement is sustained during the whole extraction process and targeted shooting is accomplished.

Under typical operating conditions, we apply a voltage of $400 V_{pp}$ at a frequency of $\Omega/2\pi = 12.155$ MHz to the rf electrodes, leading to a radial secular frequency $\omega_{rad}/2\pi = 430$ kHz for a ⁴⁰Ca⁺ ion. The dc-electrode trap segments 7 and 13 are supplied with 35 V and the remaining electrodes with 0 V, resulting in an axial trapping potential with $\omega_{ax}/2\pi = 280$ kHz. The location of trapped ions is above electrode 10.

2.3. Optical set-up

The generation of the necessary laser beams is mainly done by using commercial grating stabilized diode laser systems from TOPTICA⁸. The ions are illuminated by resonant laser light near 397 and 866 nm for Doppler cooling. Scattered photons are collected by an f/1.76 lens on an EMCCD camera⁹ to image individual ⁴⁰Ca⁺ ions. 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

- ⁸ TOPTICA Photonics AG, Germany.
- ⁹ Andor Technology, model DV885KCS-VP.

fluorescence image compared to that of a regular linear ⁴⁰Ca⁺ crystal. The species of dark ions can be identified by exciting collective vibrational modes with an ac voltage applied to electrode 9 and observing a blurring of the ⁴⁰Ca⁺ fluorescence image at the resonance frequency ω_{ax} . [23]. Alternatively, amplitude-modulated resonant laser light is used [24] to determine the charge-to-mass ratio of trapped particles at a precision of better than 0.2%. In order to suppress vibrations of the building and to reduce thermal elongations to a minimum, the complete set-up is located on an air-suspended optical table that is situated in a temperature-stabilized laboratory.

2.4. Extraction mechanism and set-up

6

Initially, the ion is trapped at the center of electrode 10 by supplying a voltage of 35 V to electrodes 7 and 13 (see also figure 5(a) for a simulation of the trapping potential in the axial direction). However, due to the distance from the electrodes to the trap center, the generated axial trapping potential only features a depth of about 4 eV, not representing a large barrier during the extraction process. The extraction process is then initiated by increasing the dc voltages on electrodes 9 and 10 to 500 V within a few tens of nanoseconds. The extraction voltage generates a repulsive potential at the position of the ion, effectively canceling the axial confinement. However, as the ion already gets accelerated by the developing potential during the switching process, the ion does not sense the full potential strength and the effective energy transfer is lessened. In addition, due to the asymmetric voltage configuration, the peak voltage is not at the position of the ion and it is only accelerated by the shoulder of the generated potential, reducing the kinetic energy even further. From a time-of-flight analysis, one can deduce a final kinetic energy of about 80 eV for the extracted 40 Ca⁺ ions [20].

Figure 3 shows a schematic drawing of the extraction set-up. After a specified number of ions has been loaded into the trap (in this case, a linear ion crystal consisting of four ${}^{40}\text{Ca}^+$ ions), the extraction process is triggered via a computer-controlled TTL signal that is fed in a phase synchronization circuit (phase delay trigger). The phase synchronization circuit delays the TTL signal such that a constant delay to the next zero crossing of the trap drive frequency Ω is ensured as the synchronization is crucial in order to minimize shot-to-shot fluctuations of the velocity and position of the extracted ions. The measured delay time shows a 1σ -spread of 0.34 ns. The switching of the extraction voltage¹⁰ is experimentally realized by two high voltage switches¹¹, which can switch voltages of up to 4 kV within a time span of 20 ns. However, as the extraction voltage leads to a temporary charging of the trap, the TTL trigger signal is supplied for only a few milliseconds to the high-voltage switches, reducing the unintentional charging to a minimum.

The detection of the extracted ions is then performed via an electron multiplier tube $(\text{EMT})^{12}$ with 20 dynodes and a main entrance aperture of 20 mm that can detect positively charged ions with a specified quantum efficiency of about 80% and a specified gain of 5×10^5 . Under typical operating conditions, the detector is supplied with a voltage of $-2.5 \,\text{kV}$, leading to detection signals with a width of 10–15 ns and an amplitude of about 100 mV, which are recorded via an oscilloscope¹³. As already stated in section 2.1, the detector is housed in a separate vacuum chamber with a distance of 287 mm from the trap center.

¹⁰ ISEC Inc., model EHQ-8010p.

¹¹ Behlke Inc., model HTS 41-06-GSM.

¹² ETP Inc., model AF553.

¹³ Agilent Infiniium 54832D MSO.



Figure 3. Schematic drawing of the extraction set-up. After a certain number of ions have been loaded into the trap, the extraction process is triggered via a TTL signal that is synchronized to the trap drive frequency Ω using a phase synchronization circuit (phase delay trigger). Two high-voltage switches then increase the dc voltages on electrodes 9 and 10 to 500 V within a few tens of nanoseconds, leading to the extraction of the trapped ions. Upon entering the detector chamber, the extracted ions are detected using an electron multiplier tube, leading to signal dips on an oscilloscope.

2.5. Ion optics

The utilized einzel lens consists of three stainless steel electrodes that feature an outer diameter of 27 mm. The first electrode has a thickness of 0.2 mm with an inner diameter of 8 mm, and the second electrode has a thickness of 0.4 mm and an inner diameter of 8 mm. The third electrode consists of two parts: the first part is a cylindrical-shaped spacer with an inner diameter of 16 mm and a thickness of 4.95 mm, whereas the second part consists of a stainless steel plate with a thickness of 1 mm featuring a 4 mm aperture that is also used as a mounting for all the other electrode. The first and third electrodes are conductively interconnected, whereas the second electrode is electrically insulated by using Kapton sheets with a thickness of 0.05 mm (see also figure 4(a) for a schematic drawing of the einzel lens). The calculation of the electrostatic



Figure 4. (a) Schematic drawing of the einzel lens with the dc electrode depicted in light grey and grounded electrodes colored dark grey. The razor blade (depicted in white), which is mounted behind the 2 mm aperture of the movable aperture plate, is also included. (b) Picture of the assembled einzel lens, with a one-cent coin for size comparison. Under typical operating conditions, the dc electrode is supplied with a voltage of 150 V. (c) Schematic drawing of the einzel lens and the nanopositioning stage, which are located at the beginning of the detector chamber directly in front of the EMT.

potentials of the einzel lens and the ion ray tracing simulations are performed by a high-accuracy boundary-element solver package [25]. A detailed description of the imaging characteristics for different types of lens configurations can be found in [26].

All parts are electropolished in order to remove ridges that were formed during the manufacturing process and to reduce the overall surface roughness. For electropolishing, we use a solution of phosphoric acid (H_3PO_4), methanesulfonic acid (CH_3SO_3H) and triethanolamine ($C_6H_{15}NO_3$).¹⁴ The parts are polished for a timespan of 15 min at a temperature of 65 °C using an anodic current density of 5 A dm^{-2} . Figure 4(b) shows a picture of the assembled einzel lens, with a one-cent coin for size comparison. Under typical operating conditions, the second electrode of the einzel lens is supplied with a voltage of 150 V, whereas the other two electrodes are grounded.

In order to determine the diameter of the single-ion beam, a movable aperture plate is installed between the einzel lens and the detector, featuring hole diameters ranging from 5 mm down to $300 \,\mu$ m. In addition, a razor blade is attached behind the 2 mm aperture, effectively creating a well-defined tearing edge (see also figure 4(a) and section 3.2). The plate is mounted on a nanopositioning stage¹⁵, which allows the aperture plate to be moved with an accuracy of

¹⁴ Patent specification DE102006050317B3.

¹⁵ SmarAct, model SL-2040.

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)



Figure 5. (a) Simulated trapping potential in the axial direction. The potential is generated by supplying dc electrodes 7 and 13 with a voltage of 35 V and all the remaining electrodes with 0 V, resulting in an axial trapping frequency $\omega_{ax.} = 2\pi \times 280$ kHz and a trap depth of about 4 eV. The center of electrode 10 is used as the point of reference for the axial position. (b) The same potential as in (a) but with a voltage of 54.8 V applied to electrodes 9 and 10, reducing the axial trap depth to about 0.45 eV in order to get rid of the surplus ions.

a few tens of nanometers. An internal sensor module guarantees that the absolute position of the stage is kept constant. Figure 4(c) shows a schematic drawing of the einzel lens and the nanopositioning stage, which are located at the beginning of the detector chamber directly in front of the EMT.

3. Experimental results

3.1. Deterministic single-ion loading

In order to reduce the divergence of the ion beam to a minimum, it is necessary to ensure that only one ion is extracted out of the trap with each shot. In the case of a Paul trap, there are, in principle, two options to achieve this goal. The first option is to avoid the loading of more than one ion at a time. Since this is not feasible due to the fact that the number of loaded ions follows a Poissonian distribution for equal loading times, one needs to implement a feedback control in order to stop the ionization after one ion has been loaded into the trap. As it turned out, it was not possible to implement this method in our set-up as the time that elapses between the ionization and crystallization of a one-ion crystal has to be much shorter than the average time between ionization incidents of two different ions. Therefore, we have chosen the second possibility, namely to get rid of the redundant ions after the crystallization process. For this task, we have come up with a very simple and robust procedure that is described next.

To drop the surplus ions, we exploit the potential shaping capabilities offered by our segmented linear rail trap (see also section 2.2). At the beginning, the ions are trapped above electrode 10 by supplying a voltage of 35 V to electrodes 7 and 13, leading to an axial trapping potential with a trap depth of about 4 eV (see also figure 5(a)). By using the offset input of our high-voltage switches (see also section 2.4), the voltage supplied to electrodes 9 and 10 is

linearly ramped up from 0 to 54.8 V within a timespan of about 50 ms before it is again linearly reduced to 0 V after a waiting time of 200 ms. As a consequence, the depth of the axial trapping potential is reduced to about 0.45 eV, thus becoming shallow enough that only one ion will remain inside the trap (see also figure 5(b)). In order to determine the reproducibility of our method, we repeated the procedure described above with ion crystals of various sizes, yielding a total efficiency of 96.7(7)% for reducing the amount of ions to exactly one. By means of this approach, it is also possible to reduce the number of ions in the chain to an arbitrary predefined quantity, e.g. from 5 to 4 ions, but since this is not used for the experiments below, we do not discuss it any further.

3.2. Experimental determination of the spot size

10

In former measurements, we determined the size of our ion beam by shooting single ions through the 300 μm aperture, yielding a spot radius of $83(^{+8}_{-3})\,\mu m$ and a full-angle beam divergence of $600 \,\mu$ rad at a distance of 257 mm from the trap center [20]. Here, 68.3% of all detected ions were located inside the stated spot radius. However, in order to compare these values with our current measurements, we converted them according to equation (1), resulting in a 1σ -spot radius of $55\binom{+5}{-2}\mu$ m. To further improve the resolution of our single-ion beam, we installed an einzel lens between the trap and the detector (see also section 2.5). In order to obtain an optimal alignment with respect to the optical axis of the einzel lens, the radial adjustment of the ion beam is performed by utilizing the deflection electrodes of our segmented rail trap. Using the 1 mm aperture behind the einzel lens, the optimal deflection voltages are retrieved by gradually changing them, maximizing the hit rate on the detector. As it turns out, the hit rate is very sensitive to changes of the deflection and compensation voltages, i.e. a minor change in the range of a few millivolts is already sufficient to miss the 1 mm aperture, effectively reducing the measured hit rate to zero. Hence, to keep adjacent measurements consistent with each other, all the measurements presented were conducted with a fixed set of deflection and compensation voltages.

In order to determine the spot size of the ion beam in the focal plane of the installed ion optics, we utilize the aforementioned razor blade that is mounted behind the 2 mm aperture (see also section 2.5). By moving the razor blade stepwise into the path of the generated single-ion beam, a gradual cut-off of the ion trajectories is achieved, leading to a reduction in the overall hit rate on the detector. To derive the 1σ -spot radius, these points are then fitted with an error function, which itself is obtained by integrating a Gaussian distribution that will be assumed for the radial cross-section of the single-ion beam:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{c}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-a}{\sigma}\right)^{2}\right] dy = \frac{c}{2}\left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x-a}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right).$$
(1)

Here, σ denotes the radius of the ion beam with *a* being the offset in the *x*-direction. The parameter *c* is used as a scaling factor in order to account for the detector efficiency, which has been experimentally measured to be 0.87 [20]. As the timespan needed for doing a single measurement is considerably long (\approx 3 incidents per minute), we had to reduce the number of measurements taken for each blade position to a total of ten individual shots. This was done in order to avoid changes in the deflection and compensation voltages, which would have been necessary to counteract long-term drifts caused by a thermal expansion of the trap.

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)





Because the exact focal distance of our einzel lens is unknown, one would normally have to repeat the measurement described above for different spacings between the einzel lens and the razor blade. However, as our nanopositioning stage is only capable of moving perpendicular to the ion beam, the location of the focal plane of the einzel lens has to be adjusted by changing the lens voltage. Measuring the spot radius for different lens voltages in the plane of the razor blade, therefore, should allow for obtaining the minimal spot radius. In the experiment, we have measured a 1σ -spot radius of $(4.6 \pm 1.3) \mu m$ for a lens voltage of 150 V (see also figure 6). Compared to the original beam diameter, our einzel lens is thus capable of focusing the singleion beam by a factor of 12.

Numerical simulations predict that an even higher resolution should be feasible. In the case of ground-state cooled ions with a temperature of $100 \,\mu$ K, simulations predict a 1σ -spot radius of 1 nm, which is enlarged to 45 nm for a temperature of 2 mK. However, in the experiment, additional deflection voltages are needed in order to align the ion beam with respect to the optical axis of the utilized einzel lens. Including these deflection voltages in the numerical simulations leads to a further decline in resolution, resulting in a 1σ -spot radius of about 270 nm. Only taking into account a spatial displacement of the incident ion beam in the principal plane of the lens, numerical simulations predict that a mismatch of 520 μ m with respect to the optical axis is already sufficient in order to obtain a spot size of $4.6 \,\mu\text{m}$ in the focal plane of the lens (see also figure 7). In the case of our experiment, this displacement is caused by a mechanical misalignment of the center of the aperture with respect to the optical axis of the einzel lens, as well as a displacement of the ion beam itself within the 1 mm aperture. The former can be ascribed to manufacturing imperfections, which are estimated to be about 200 μ m. The latter is caused by the initial adjustment of the ion beam using the 1 mm aperture. By taking into account the original beam diameter, a displacement of less than $400\,\mu m$ can be assumed. Hence, both errors result in a maximum total deviation of $600 \,\mu$ m, explaining the numerically predicted mismatch. A more compact experimental set-up as compared with the total length of about 260 mm (see figure 1) is envisioned for the future.

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)





Figure 7. Simulated 1σ -spot radii as a function of the spatial displacement of the ion beam in the principal plane of the lens. The radii were calculated for an initial ion temperature of 2 mK with (•) and without (Δ) deflection voltages as well as for an initial ion temperature of $100 \,\mu$ K without deflection voltages (\diamond). In order to explain the experimentally measured 1σ -spot radius of 4.6 μ m for 2 mK laser-cooled ions, a displacement of half a millimeter is already sufficient (dashed lines). Note that the initial ion temperature and deflection voltages for the simulated dataset (•) match the experimental conditions, whereas the spatial displacement was not determined experimentally.

4. Conclusion and outlook

Using a segmented linear Paul trap as a deterministic point source for laser-cooled ions, we have demonstrated the focusing of an ion beam consisting of single ⁴⁰Ca⁺ ions to a spot size of a few micrometers. By utilizing the potential shaping capabilities of our ion trap, we were able to deterministically load a predetermined number of ions, which will allow for further automatization of the loading and extraction procedure, resulting in orders of magnitude increased repetition rates. In future experiments, efforts will be made to avoid the usage of the deflection electrodes by aligning the beam mechanically and to implement more sophisticated cooling techniques like side band or EIT cooling in order to reduce the divergence of the ion beam. Moreover, the utilized nanopositioning stage will be exchanged for a modular set-up consisting of three independent stages in order to move apertures and substrates in all three spatial directions. The additional degrees of freedom will not only allow for a more precise alignment with respect to the optical axis of the einzel lens but also allow us to determine the optimal focal length and spot size more accurately. Using two perpendicular edges of the substrate in the same way as the razor blade will then allow for approaching a specific location on the substrate relative to the corner formed by the two edges. Alternatively, one could think of mounting the einzel lens on the tip of an AFM, thus allowing for determining the implantation position with respect to potential surface structures [21]. A new lens design, which is currently in development, will facilitate better focusing of the single-ion beam and additionally allow for

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)

post-accelerating the extracted ions in order to reach higher implantation energies of a few keV, i.e. improving the conversion efficiency for the generation of color centers in diamond [27]. Due to the high spatial and temporal resolution of the focused single-ion beam, one might also consider shooting ions from one ion trap into another. This would allow us to transport quantum information stored in the internal, electronic states of the ions much more quickly and over larger distances than currently possible when performing standard ion transport in multi-segmented micro ion traps.

Acknowledgments

We acknowledge the financial support of the Landesstiftung Baden–Württemberg in the framework of 'Atomics' (contract no. PN 63.14) and the excellence program.

References

- Gurudev Dutt M V, Childress L, Jiang L, Togan E, Maze J, Jelezko F, Hemmer P R, Zibrov A S and Lukin M D 2007 Quantum register based on individual electronic and nuclear spin qubits in diamond *Science* 316 1312
- [2] Neumann P, Mizuochi N, Rempp F, Hemmer P, Watanabe H, Yamasaki S, Jacques V, Gaebel T, Jelezko F and Wrachtrup J 2008 Multipartite entanglement among single spins in diamond *Science* 320 1326
- [3] Kane B E 1998 A silicon-based nuclear spin quantum computer Nature 393 133
- [4] Greentree A D, Fairchild B A, Hossain F M and Prawer S 2008 Diamond integrated quantum photonics Mater. Today 11 22
- [5] Shinada T, Koyama H, Hinishita C, Imamura K and Ohdomari I 2002 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 *Japan. J. Appl. Phys.* **41** L287
- [6] Persaud A, Park S J, Liddle J A, Rangelow I W, Bokor J, Keller R, Allen F I, Schneider D H and Schenkel T 2004 Quantum computer development with single ion implantation *Quantum Inf. Process.* 3 233
- [7] Mitic M et al 2005 Single atom Si nanoelectronics using controlled single-ion implantation Microelectron. Eng. 78–79 279
- [8] Batra A, Weis C D, Reijonen J, Persaud A, Schenkel T, Cabrini S, Lo C C and Bokor J 2007 Detection of low energy single ion impacts in micron scale transistors at room temperature *Appl. Phys. Lett.* **91** 193502
- [9] Shinada T, Kurosawa T, Nakayama H, Zhu Y, Hori M and Ohdomari I 2008 A reliable method for the counting and control of single ions for single-dopant controlled devices *Nanotechnology* 19 345202
- [10] O'Brien J L, Schofield S R, Simmons M Y, Clark R G, Dzurak A S, N J, Curson Kane B E, McAlpine N S, Hawley M E and Brown G W 2001 Towards the fabrication of phosphorus qubits for a silicon quantum computer *Phys. Rev.* B 64 161401
- [11] Schofield S R, Curson N J, Simmons M Y, Ruess F J, Hallam T, Oberbeck L and Clark R G 2003 Atomically precise placement of single dopants in Si *Phys. Rev. Lett.* 91 136104
- [12] Ruess F J, Oberbeck L, Simmons M Y, Goh K E J, Hamilton A R, Hallam T, Schofield S R, Curson N J and Clark R G 2004 Toward atomic-scale device fabrication in silicon using scanning probe microscopy *Nano*. *Lett.* 4 1969
- [13] Pok W, Reusch T C G, Scappucci G, Rueb F J, Hamilton A R and Simmons M Y 2007 Electrical characterization of ordered Si:P dopant arrays *Trans. IEEE. Nanotechnol.* 6 213
- [14] Ruess F J, Pok W, Reusch T C G, Butcher M J, Goh K E J, Scappucci G, Hamilton A R and Simmons M Y 2007 Realization of atomically controlled dopant devices in silicon Small 3 563
- [15] Greiner A, Sebastian J, Rehme P, Aghajani-Talesh A, Griesmaier A and Pfau T 2007 Loading chromium atoms in a magnetic guide J. Phys. B: At. Mol. Phys. 40 F77

New Journal of Physics 12 (2010) 065023 (http://www.njp.org/)

[16] Hill S B and McClelland J J 2003 Performance of a feedback-controlled, deterministic source of single chromium atoms J. Opt. Soc. Am. B 21 473

14

- [17] Hanssen J L, McClelland J J, Dakin E A and Jacka M 2006 Laser-cooled atoms as a focused ion-beam source Phys. Rev. A 74 063416
- [18] Hanssen J L, Hill S B, Orloff J and McClelland J J 2008 Magneto-optical-trap-based, high brightness ion source for use as a nanoscale probe Nano Lett. 8 2844
- [19] Meijer J et al 2006 Concept of deterministic single ion doping with sub-nm spatial resolution Appl. Phys. A 83 321
- [20] Schnitzler W, Linke N M, Fickler R, Meijer J, Schmidt-Kaler F and Singer K 2009 Deterministic ultracold ion source targeting the Heisenberg limit *Phys. Rev. Lett.* **102** 070501
- [21] Meijer J et al 2008 Towards the implanting of ions and positioning of nanoparticles with nm spatial resolution Appl. Phys. A 91 567
- [22] Huber G, Deuschle T, Schnitzler W, Reichle R, Singer K and Schmidt-Kaler F 2008 Transport of ions in a segmented linear Paul trap in printed-circuit-board technology New J. Phys. 10 013004
- [23] Naegerl H, Blatt R, Eschner J, Schmidt-Kaler F and Leibfried D 1998 Coherent excitation of normal modes in a string of Ca⁺ ions Opt. Express 3 89
- [24] Drewsen M, Mortensen A, Martinussen R, Staanum P and Sørensen J L 2004 Nondestructive identification of cold and extremely localized single molecular ions *Phys. Rev. Lett.* 93 243201
- [25] Singer K, Poschinger U, Murphy M, Ivanov P, Ziesel F, Calarco T and Schmidt-Kaler F 2009 Colloquium: experiments with atomic quantum bits—essential numerical tools arXiv:0912.0196
- [26] Fickler R, Schnitzler W, Linke N M, Schmidt-Kaler F and Singer K 2009 Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution J. Mod. Opt. 56 2061
- [27] Jelezko F and Wrachtrup J 2006 Single defect centres in diamond: a review Phys. Status Solidi a 203 3207

Literaturverzeichnis

- [Dem09] W. Demtröder, Experimentalphysik 2, Springer-Lehrbuch, Springer Berlin Heidelberg, 2009, 5th ed.
- [Deu92] D. Deutsch and R. Jozsa, Rapid Solution of Problems by Quantum Computation, Proceedings: Mathematical and Physical Sciences 439, 553 (1992).
- [Dre83] R. W. P. Drever, J. L. Hall, F. V. Kowalski, J. Hough, G. M. Ford, A. J. Munley, and H. Ward, Laser Phase and Frequency Stabilization Using an Optical Resonator, Applied Physics B 31, 97 (1983).
- [Eb110] J. F. Eble, S. Ulm, P. Zahariev, F. Schmidt-Kaler, and K. Singer, Feedbackoptimized operations with linear ion crystals, J. Opt. Soc. Am. B 27, A99 (2010).
- [Ein05] A. Einstein, Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt, Annalen der Physik 322, 132 (1905).
- [Fic09a] R. Fickler, Kalte einzelne Ionen für die Implantation in Festkörper mit nm Auflösung, Diplomarbeit, Universität Ulm (2009).
- [Fic09b] R. Fickler, W. Schnitzler, N. M. Linke, F. Schmidt-Kaler, and K. Singer, Optimized focusing ion optics for an ultracold deterministic single ion source targeting nm resolution, Journal of Modern Optics 56, 2061 (2009).
- [Gre08] A. D. Greentree, B. A. Fairchild, F. M. Hossain, and S. Prawer, *Diamond inte-grated quantum photonics*, Materials Today 11, 22 (2008).
- [Hal65] J. L. Hall, E. J. Robinson, and L. M. Branscomb, Laser Double-Quantum Photodetachment of I-, Phys. Rev. Lett. 14, 1013 (1965).
- [Hed00] D. W. O. Heddle, *Electrostatic Lens Systems*, 2nd edition, Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 2000.

- [Hin08] F. Hinterberger, Physik der Teilchenbeschleuniger und Ionenoptik, Springer Berlin Heidelberg, 2008, 2nd ed.
- [Hän75] T. Hänsch and A. Schawlow, Cooling of gases by laser radiation, Optical Communications 13, 68 (1975).
- [Jam05] D. N. Jamieson, C. Yang, T. Hopf, S. M. Hearne, C. I. Pakes, S. Prawer, M. Mitic, E. Gauja, S. E. Andresen, F. E. Hudson, A. S. Dzurak, and R. G. Clark, *Controlled shallow single-ion implantation in silicon using an active substrate for sub-20-keV ions*, Applied Physics Letters 86, 202101 (2005).
- [Kan98] B. E. Kane, A silicon-based nuclear spin quantum computer, Nature 393, 133 (1998).
- [Lar86] D. J. Larson, J. C. Bergquist, J. J. Bollinger, W. M. Itano, and D. J. Wineland, Sympathetic Cooling of Trapped Ions: A Laser-Cooled Two-Species Nonneutral Ion Plasma, Physical Review Letters 57, 70 (1986).
- [Lei03] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe, and D. J. Wineland, Quantum dynamics of single trapped ions, Reviews of Modern Physics 75, 281 (2003).
- [Lin07] N. M. Linke, Kalte Ionenkristalle in einer segmentierten Paul-Falle als deterministische Einzelionenquelle, Diplomarbeit, Universität Ulm (2007).
- [Moo65] G. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, Electronics 38, 8 (1965).
- [Mor00] G. Morigi and H. Walther, Low temperature dynamics and laser-cooling of twospecies Coulomb chains for quantum logic, arXiv:0005082v3 [quant-ph] (2000).
- [Nay10] B. Naydenov, V. Richter, J. Beck, M. Steiner, P. Neumann, G. Balasubramanian, J. Achard, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and R. Kalish, *Enhanced generation of single* optically active spins in diamond by ion implantation, Applied Physics Letters 96 (2010).
- [Neu78] W. Neuhauser, M. Hohenstatt, P. Toschek, and H. Dehmelt, Optical-Sideband Cooling of Visible Atom Cloud Confined in Parabolic Well, Physical Review Letters 41, 233 (1978).
- [O'B01] J. L. O'Brien, S. R. Schofield, M. Y. Simmons, R. G. Clark, A. S. Dzurak, N. J. Curson, B. E. Kane, N. S. McAlpine, M. E. Hawley, and G. W. Brown, Towards the fabrication of phosphorus qubits for a silicon quantum computer, Physical Review B 64, 161401(R) (2001).

- [Pau53] W. Paul and H. Steinwedel, Quadrupole mass filter, Zeitschrift f
 ür Naturforschung A8, 448 (1953).
- [Pez10] S. Pezzagna, B. Naydenov, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and J. Meijer, Creation efficiency of nitrogen-vacancy centres in diamond, New Journal of Physics 12, 065017 (2010).
- [Pra08] S. Prawer and A. D. Greentree, Diamond for Quantum Computing, Science 320, 1601 (2008).
- [Sch36] O. Scherzer, über einige Fehler von Elektronenlinsen, Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei 101, 593 (1936).
- [Sch03] S. R. Schofield, N. J. Curson, M. Y. Simmons, F. J. Ruess, T. Hallam, L. Oberbeck, and R. G. Clark, Atomically Precise Placement of Single Dopants in Si, Physical Review Letters 91, 136104 (2003).
- [Sch09] W. Schnitzler, N. M. Linke, R. Fickler, J. Meijer, F. Schmidt-Kaler, and K. Singer, Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit, Physical Review Letters 102, 070501 (2009).
- [Sch10a] W. Schnitzler, Deterministic ultracold ion source targeting the Heisenberg limit, Dissertation, Universität Ulm (2010).
- [Sch10b] W. Schnitzler, G. Jacob, R. Fickler, F. Schmidt-Kaler, and K. Singer, Focusing a deterministic single-ion beam, New Journal of Physics 12, 065023 (2010).
- [Sep60] A. Septier, Aberration spherique de quelques lentilles electrostatiques a symetrie de revolution pour des faisceaux de grande ouverture, CERN Report **60-39** (1960).
- [She07] L. Shen and Y. J. Liu, An adaptive fast multipole boundary element method for three-dimensional potential problems, Computational Mechanics 39, 681 (2007).
- [Shi99] T. Shinada, A. Ishikawa, M. Fujita, K. Yamashita, and I. Ohdomari, Influence of Secondary Electron Detection Efficiency on Controllability of Dopant Ion Number in Single Ion Implantation, Japanese Journal of Applied Physics 38, 3419 (1999).
- [Sho97] P. W. Shor, Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer, SIAM J. Comput. 26, 1484 (1997).
- [Sin10] K. Singer, U. Poschinger, M. Murphy, P. Ivanov, F. Ziesel, T. Calarco, and F. Schmidt-Kaler, *Colloquium: Trapped ions as quantum bits: Essential numerical* tools, akzeptiert zur Publikation in Reviews of Modern Physics (2010).

- [Ste97] A. Steane, The ion trap quantum information processor, Applied Physics B 64, 632 (1997).
- [Ulm10] S. Ulm, Spektroskopie gemischter Ionenkristalle, Diplom Arbeit, Universität Ulm (2010).
- [Vor65] G. S. Voronov and N. B. Delone, Ionization of the xenon atom by the electric field of ruby laser emission, Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters 1, 66 (1965).
- [Win75] D. J. Wineland and H. G. Dehmelt, Proposed $10^{14} \Delta \nu < \nu$ Laser Fluorescence Spectroscopy on Tl⁺ Mono-Ion Oscillator III, Bulletin of the American Physical Society **20**, 637 (1975).
- [Win78] D. J. Wineland, R. E. Drullinger, and F. L. Walls, Radiation-pressure cooling of bound resonant absorbers, Physical Review Letters 40, 1639 (1978).

Hiermit erkläre ich, Georg Jacob, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet sowie die wörtlich und inhaltlich übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht und die Satzung der Universität Ulm zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis beachtet habe.

Ulm, Juni 2010

Georg Jacob