

Institut für Physik, Johannes Gutenberg Universität Mainz

Diplomarbeit

Entwicklung und Aufbau einer neuartigen Ionenfalle

vorgelegt von:

Andreas Kehlberger

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom Physiker

24. Mai 2011

Hauptberichter:

Prof. Dr. Ferdinand Schmidt-K

Mitberichter:

Prof. Dr. Wilfried Nörtershäus



Abstract:

Ion traps with single cold ions can be used to accomplish many different tasks in the field of quantum information processing. In this diploma thesis I have designed various Paul trap geometries and optimised them through the use of computer simulation. The numerical method employed enabled the study of complex trap structures that cannot be solved analytically. This permitted the development of two Paul trap designs that expand upon the established capabilities of ion traps. This work is therefore presented in two sections which rely on the numerical methods presented in a theoretical section of this thesis.

The first section deals with the planning, investigation and optimisation of a Paul trap, which is intended for use as a single ion source for ion implantation in solid state substrates with the ultimate goal of realising scalable quantum information devices. Such a trap requires high trapping frequencies, in order to achieve effective cooling of the ions, and subsequent strong focussing of the ion beam. To this end, various fundamental geometries were analysed and a crossed-electrode design in combination with an extraction tube was found to be the best choice. The final design is predicted to produce a trap with a beam emittance about 100 times superior to our existing trap. In addition, the ions emitted from this trap should have kinetic energy in the order of more than 2 keV, which represents an increase of two orders of magnitude.

The second section investigates the capacity of an alternative Paul trap to achieve scalability of quantum information devices, in particular through the concept of ion transport in three dimensions, achieved by judicious manipulation of the radio frequency amplitudes. The Paul trap presented herein is an extension of a linear Paul trap with two radio frequency electrodes. I was able to demonstrate that, via the simulation, that with this arrangement of the electrodes, it is possible to transfer ions between two linear Paul traps via a pseudo-potential. In collaboration with Hartmut Häffner from Berkeley University, this calculation method was additionally applied to analyze a planar trap structure. The variation of radio frequency amplitudes opens the way to bringing the pseudo-potentials of the two traps arbitrarily close to one another, and therefore allowing for the interaction of two separate ion crystals. I have built a prototype of this style of trap and subsequently used it to demonstrate the transport process with lycopodium powder.

Kurzfassung:

Ionenfallen mit einzelnen kalten Ionen eignen sich für vielseitige Aufgaben im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung. In dieser Diplomarbeit habe ich unterschiedliche Paulfallengeometrien entworfen und mit Hilfe von Computersimulationen optimiert. Die eingesetzte Methode der numerischen Analyse erlaubte es, komplexe, mit analytischen Werkzeugen nicht zu beschreibende, Fallenstrukturen zu untersuchen. Dies gestattete die Entwicklung zweier Paulfallenkonzepte, welche die etablierten Ionenfallenanwendungen erweitern. Die Arbeit gliedert sich den beiden Schwerpunkte entsprechend in zwei Bestandteile, basierend auf den im Theorieteil erklärten numerischen Evaluationsmethoden.

Der erste Teil der Arbeit behandelt die Planung, Untersuchung und Optimierung einer Paulfalle, welche als Einzel-Ionenquelle für eine deterministische Implantation von beliebigen Ionensorten in Festkörpersubstrate dient. Dabei wird das Ziel verfolgt, Quanteninformationsverarbeitung in Festkörpersystemen skalierbar zu machen. Die Anforderungen sind eine gut fokussierbare Ionenextraktion und hohe Fallenfrequenzen für eine gute Kühlung der Ionen. Zu diesem Zweck wurden verschiedene Grundgeometrien an Paulfallen hinsichtlich ihrer Eigenschaften für die experimentell angestrebten Ziele analysiert, wobei sich das Design der kreuzförmig angeordneten Paulfalle in Kombination mit einem Hohlzylinder für die Extraktion als beste Wahl herausstellte. Damit werden wir die Strahlqualität gegenüber der bestehenden Falle um einen Faktor von etwa 100 verbessern können. Außerdem erschließt diese Falle Extraktionsenergien im Bereich von über 2 keV, was einer Energiesteigerung von zwei Größenordnungen entspricht.

Die zweite in dieser Arbeit untersuchte Paulfallen-Anwendung verfolgt ebenfalls das Ziel, die Skalierbarkeit von Quanteninformationsexperimenten durch das Konzept des Transports in drei Dimensionen mit Hilfe von zeitlich variablen Radiofrequenz-Amplituden zu verbessern. Die vorgestellte Paulfalle ist eine Erweiterung der linearen Paulfalle um zwei Radiofrequenzelektroden. In der Simulation konnte ich zeigen, dass es mit dieser Elektrodenanordnung möglich ist, die Ionen zwischen zwei linearen Paulfallen mit Hilfe der Pseudopotentiale zu transferieren. In Kollaboration mit Hartmut Häffner von der Universität Berkeley wurde die Berechnungsmethode außerdem auf eine planare Fallenstruktur angewandt. Die Variation der Radiofrequenz-Amplituden eröffnet zudem die Option, die Pseudopotentiale zweier Paulfallen einander beliebig nahe zu bringen und somit den radialen Abstand zweier linearer Ionenkristalle beeinflussen zu können. Ein Funktionsmodell der Falle wurde von mir konstruiert und anhand von geladenen Bärlappsporen der Transportprozess demonstriert.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Theorie	7
2.1. Theoretische Grundlagen zur Berechnung der Felder von Paulfallen	7
2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle	11
3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation	33
3.1. Implantationssystem der PCB-Falle	35
3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle	39
3.3. Grundgeometrien von Paulfallen	51
3.4. Optimierung der neuen Falle	88
3.5. Konzept der Fallenhalterung	101
4. Neue Methode des Ionentransports	109
4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports	109
4.2. Das Prinzip der Pseudopotentialverschmelzung	122
4.3. „Proof of principle“ mit einer makroskopischen Paulfalle	128
5. Zusammenfassung und Ausblick	135
A. Wissenschaftliche Veröffentlichung	145
B. Bestimmung der Beugungsmaßzahl	159
C. Konstruktionszeichnungen	161
D. Schaltskizze der makroskopischen Paulfalle	165
E. Keramik Stecksystem	167
Eidesstattliche Erklärung	168

Abbildungsverzeichnis

1.1. Skizze der klassischen Paulfalle.	2
1.2. Zusammenstellung verschiedener Paulfallgeometrien.	3
2.1. Skizze einer linearen Paulfalle	8
2.2. Skizze der von der Paulfalle erzeugten Sattelpotentiale	9
2.3. Simulierte Mustertrajektorien der linearen Paulfalle.	10
2.4. CAD Skizze und Fotografie der Mikrofalle	11
2.5. Simuliertes Potential und Pseudopotential der linearen Paulfalle.	12
2.6. Abbildung zweier simulierter Hohlzylinder	14
2.7. Darstellung eines 2D Randwertproblems	16
2.8. x/y-Trajektorien- und Phasenraumdiagramm der Implantationsfalle	19
2.9. Beispiel eines Potentialfits.	20
2.10. Darstellung des Pseudopotentials der linearen Paulfalle.	21
2.11. Fangende und nicht fangende x/y-Trajektoriensimulation	23
2.12. UV-Stabilitätsdiagramm	24
2.13. Darstellung der Trajektorien der einzelnen Fallenachsen	26
2.14. Extraktionstrajektorien und Spotdiagramm	28
2.15. Beispielplot der Emittanz	29
2.16. Beschriftet Phasenellipse	31
3.1. NV-Farbzentren	33
3.2. Fotografie der PCB-Falle im experimentellen Aufbau	35
3.3. Multifokus-Aufnahme eines Fallenflügels der PCB-Falle	38
3.4. Termschema von $^{40}\text{Ca}^+$	40
3.5. Mikroskopaufnahme der Laserbearbeitung des Keramiksubstrates	44
3.6. Skizze des Messaufbaus für die Vermessung des Nd:YAG Laser	45
3.7. Mikroskopaufnahme des Lasertest auf dem Substrat	47
3.8. Mikroskopaufnahme einzelner Laserpulse auf dem Goldfilm	49
3.9. Quadrierte Durchmesser des gepulsten Lasers aufgetragen gegen die Position des Substrates	50
3.10. Skizze der beiden Designs einer Kreuzfalle	52
3.11. Skizze der beiden Designs einer Ebenenfalle	54
3.12. Skizze des Design einer planaren Paulfalle	56
3.13. Modell des in der Simulation verwendeten Modells der Rail-Kreuzfalle	57
3.14. Simulierte Pseudopotentiale der Kreuzfalle	58
3.15. Simulierte Pseudopotentiale der 3-Ebenenfalle	59
3.16. Simuliertes RF- und DC-Potential der Kreuzfalle	61

Abbildungsverzeichnis

3.17. Simuliertes RF- und DC-Potential der Rail-Kreuzfalle	62
3.18. Simulierte Fallenfrequenzen der Kreuzfalle und Rail-Kreuzfalle	63
3.19. Simulierte Potentiale der einzelnen Elektroden	65
3.20. Simulierte Fallenfrequenzen der fünf vorgestellten Fallen.	68
3.21. Simuliertes Potential der Segmentextraktion entlang der Fallenachse.	70
3.22. Skizze einer Kreuzfalle mit Endkappe und entstehendes Extraktionspotential	70
3.23. Simulierte Extraktionspotentiale und Ortsverteilungen für die Extraktion mittels Segmenten	74
3.24. Simulierte Extraktionspotentiale und Ortsverteilungen für die Extraktion mittels Endkappe	78
3.25. Simulierte Emittanzen und Standardabweichungen von v_z für verschiedene Zeitkonstanten	84
3.26. Simulierte Spotradien und Divergenzwinkel für verschiedene Zeitkonstanten	85
3.27. Schaltskizze der Pspicesimulation und erhaltene Abklingkurve	86
3.28. Modell der simulierten Geometrie der Implantationsfalle	88
3.29. Simulierte axiale Fallenfrequenzen für verschiedene Fallenflügelabstände . .	90
3.30. Simulierte axiale Fallenfrequenzen für unterschiedliche Elektrodenkonfigu- rationen	91
3.31. Simulierte Extraktionsparameter für verschiedene Fallenflügelabstände . . .	92
3.32. Simulierte Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit für verschie- dene Abstände der Endkappe	93
3.33. Simulierte Abhängigkeit der Extraktion von den Radien der Endkappe . . .	95
3.34. Wertevergleich zwischen PCB- und Implantationsfalle	97
3.35. Simulierte Abhängigkeit der Extraktion von der Anfangstemperatur der Ionen	98
3.36. Simulierte Abhängigkeit der Extraktion von der Radiofrequenzphase	99
3.37. Simulierte Extraktion verschiedener Elemente	100
3.38. Skizze des Konzepts der Fallenhalterung	102
3.39. CAD-Rendergrafik der zusammengebauten Fallenflügel in der Fallenhalterung	103
3.40. Fotografien der Befestigung des Fallenhalters und des eigentlichen Fallen- halters	104
3.41. Foto der Endkappe und der Keramikpasshülse	104
3.42. CAD-Rendergrafik des DC-Fallenflügels der Implantationsfalle	105
3.43. CAD-Rendergrafik. Nahaufnahme des Fangbereiches.	106
3.44. Fotografien der Fallenleiterplatten	107
4.1. Simulierte superpositionierte Fallenpotentiale und Elektrodenspannungen des DC-Transports	113
4.2. Fallenskizze der RFA-Transport Paulfalle	114
4.3. Pseudopotentialverschiebung während des RFA-Transports	115
4.4. Aus der Regularisierung erhaltene RF-Amplitudenfunktion des RFA-Transports	116
4.5. Simulierter Frequenzverlauf während des RFA-Transports	117
4.6. Trajektoriendiagramm des RFA-Transports	118
4.7. Skizze der planaren RFA-Transport Paulfalle	119

4.8. Aus der Regularisierung erhaltene RF-Amplitudenfunktion für den Transport in der planaren Falle	120
4.9. Simulierter Frequenzverlauf während des RFA-Transports in der planaren Fallen	121
4.10. Skizze der Elektrodenanordnung für die Pseudopotentialverschmelzung . . .	122
4.11. Simulierte Pseudopotentiale für verschiedene RF-Amplitudenverhältnisse . .	123
4.12. Verlauf des trennenden Pseudopotentialanteils während der „Verschmelzung“	124
4.13. Simulierter Verlauf der Fallenfrequenzen für das Erhöhen von χ	125
4.14. Modell der simulierten RFA-Falle und Verlauf des harmonischen Potentialparameters für unterschiedliche Radienverhältnisse	126
4.15. Simulierter relativer Abstand der Minima gegen χ und das erforderliche χ gegen das Radienverhältnis	126
4.16. Fotografien der makroskopischen Paulfalle	129
4.17. Verlauf der Transformatorspannungen für die Pseudopotentialverschmelzung	130
4.18. Digitalkamera-Aufnahmen der Messung in der makroskopischen Paulfalle . .	131
4.19. Vergleich zwischen gemessenem Ionenabstand und simuliertem Abstand . .	132
4.20. Skizze einer möglichen Anwendung in der RFA-Falle	133
C.1. Konstruktionszeichnung der Endkappe.	162
C.2. Konstruktionszeichnung der Fallenhalterung.	163
C.3. Konstruktionszeichnung der Befestigung der Fallenhalterung.	164
D.1. Skizze der Schaltung der makroskopischen Paulfalle	166
E.1. Fotografie der entworfenen Keramiksteckfallen	167

Tabellenverzeichnis

1.1. Übersicht über die in dieser Diplomarbeit beschriebenen Paulfallen.	5
2.1. Tabelle der aus dem Fit ermittelten Koeffizienten und Potentialparameter. . .	21
2.2. Auflistung der errechneten Fallenfrequenzen und der benutzten Methode. . .	25
3.1. Übersicht der Anforderungen und möglichen Lösungen.	39
3.2. Tabelle der für den Pulslasertest verwendeten Energieeinstellung.	48
3.3. Liste der aus dem Fit ermittelten Werte.	50
3.4. Tabelle der optischen Zugangs und Öffnungswinkels der vorgestellten Fal- lengeometrien.	55
3.5. Auflistung der Pseudopotentialtiefen der einzelnen Fallentypen.	59
3.6. Tabelle der Potentialkoeffizienten der verschiedenen Fallentypen.	60
3.7. Übersicht über die Peakhöhe und des FWHM eines Fallensegmentes für unterschiedlichen Fallen.	65
3.8. Auflistung experimentell angestrebten Arbeitsparameter.	66
3.9. Tabelle der für die Simulation gewählten Radiofrequenzen der einzelnen Fallen.	67
3.10. Auflistung der simulierten Extraktionseigenschaften für die Segmentextrak- tion mit ausgeschalteter Fangspannung.	73
3.11. Übersicht über die simulierten Extraktionseigenschaften für die Segmentex- traktion mit angeschalteter Fangspannung.	75
3.12. Tabelle der simulierten Extraktionseigenschaften für die Endkappenextrak- tion mit ausgeschalteter Fangspannung.	77
3.13. Auflistung der simulierten Extraktionseigenschaften für die Endkappenex- traktion mit angeschalteter Fangspannung.	79
3.14. Wertevergleich zwischen Emittanz der PCB- und Implantationsfalle.	96
3.15. Auflistung der auf Calcium normierten Emittanz der einzelnen Elemente für verschiedene Extraktionsspannungen.	100
4.1. Übersicht über die einzelnen normierten Potentialparameter.	127
4.2. Tabelle des Verhältnisses von ϵ_2 zu ϵ_3 mit steigendem r/r_0 -Verhältnis. . . .	128

1. Einleitung

„Nur scheinbar hat ein Ding eine Farbe, nur scheinbar ist es süß oder bitter; in Wirklichkeit gibt es nur Atome im leeren Raum.“

Demokrit \sim 400 v.Chr. [Capelle, 1935]

Der Begriff des Atoms, des „unteilbaren“ Grundbausteins, wurde lange vor der Zeit der empirischen Erforschung dieses Gebiets definiert und blieb dieser auch lange Zeit voraus. Über 2000 Jahre mussten vergehen, bis der englische Forscher John Dalton diesen Grundgedanken wieder aufgriff [Dalton, 1808] und damit die Erklärung des „Gesetz der konstanten Proportionen“ ermöglichte. Noch 100 Jahre später zu Beginn der Quantenmechanik galt es als undenkbar, jemals die beschriebenen Gedankenexperimente mit einzelnen Atomen vornehmen zu können. Heute ist es in vielen Laboren auf der Welt tagtägliche Praxis, Atome oder Ionen im „leeren“ Raum zu fangen und mit ihnen Experimente zu betreiben, die weit über die Gedankenkonstrukte der damaligen Zeit hinausgehen. Zum Beispiel ermöglicht es die Magneto-optische Falle (kurz MOT), neutrale Atome durch die Kombination von Lichtwechselwirkung und magnetischen Feldern räumlich einzuschließen. Auch für Ionen wurden Konzepte zur Speicherung und Manipulation entwickelt. Der Schwerpunkt dieser Arbeit handelt von einem von Wolfgang Paul 1953 vorgeschlagenen „Verfahren zur Trennung bzw. zum getrennten Nachweis von Ionen verschiedener spezifischer Ladung“, [Paul and Steinwedel, 1956], für das Paul 1989 den Nobelpreis erhielt. In diesem Patent stellten Paul und Helmut Steinwedel die ersten Quadrupolion-Fallen vor. Die sogenannte Paul-Falle (im Folgenden als „Paulfalle“ bezeichnet) macht sich die Ladung des Atoms zunutze, indem sie das Ion durch elektrische Wechselfelder innerhalb eines Volumens einschließt. In Abbildung 1.1 ist einer der in der Patentschrift enthaltenen Entwürfe dargestellt.

1. Einleitung

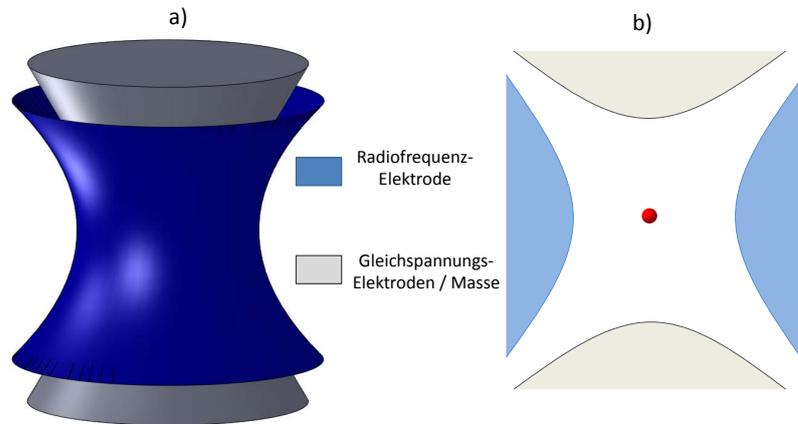


Abbildung 1.1.: Skizze eines Paulfallenentwurfs von Wolfgang Paul. a) In der Isometrischen Ansicht. b) Schnitt durch die Fallenelektroden. In rot ist das Ion eingezeichnet.

Derart gebundene Ionen können mit Hilfe von elektromagnetischen Feldern manipuliert werden, sodass sich eine Vielzahl neuer Anwendungen daraus ergibt. So lässt sich dieses System unter anderem dazu nutzen, den von Feynman 1982 vorgeschlagenen Quantencomputer zu konstruieren [Feynman, 1982]. Genau wie bei weiteren Anwendungen der Quanteninformation bedient sich dieser der Ionen in der Falle als sogenannte Quantenbits oder kurz Qubits. Diese das dichotome Bit ersetzende Speichereinheit wird durch ein quantenmechanisches Zwei-Niveau-System repräsentiert und erlaubt es, quantenmechanische Probleme exakt und in Echtzeit zu simulieren, statt diese numerisch zu berechnen. Der Stand der Technik in der Quanteninformationsverarbeitung hat sich seit dem Vorschlag von Feynman enorm weiterentwickelt und der Quantencomputer ist über die Phase des Nachweises der Funktionalität weit hinaus. Die Ansprüche an die Anzahl der Qubits und die Art des Einschlusses wurden immer spezieller und führten zu der Entwicklung einer Vielzahl von Paulfallen-Geometrien (siehe Abbildung 1.2), die das Fangen von Ionen ermöglichen. Während die klassische Paulfalle lediglich die Speicherung eines Ions und somit ein Qubit garantiert, sind bereits lineare Paulfallen in planarer und dreidimensionaler Struktur in der Lage, eindimensionale Ionenkristalle zu fangen und bis zu 14 verschränkte Qubits zu erzeugen [Monz et al., 2010].

Thema dieser Diplomarbeit ist die Weiterentwicklung des Konzepts der Paulfalle für die mögliche Lösung des zentralen Problems der Skalierbarkeit der Quanteninformation. Im Zuge dieser Diplomarbeit wurden daher von mir zwei unterschiedliche Paulfallentypen entwickelt, welche es ermöglichen, mehrdimensional angeordnete Qubits zu erschaffen und

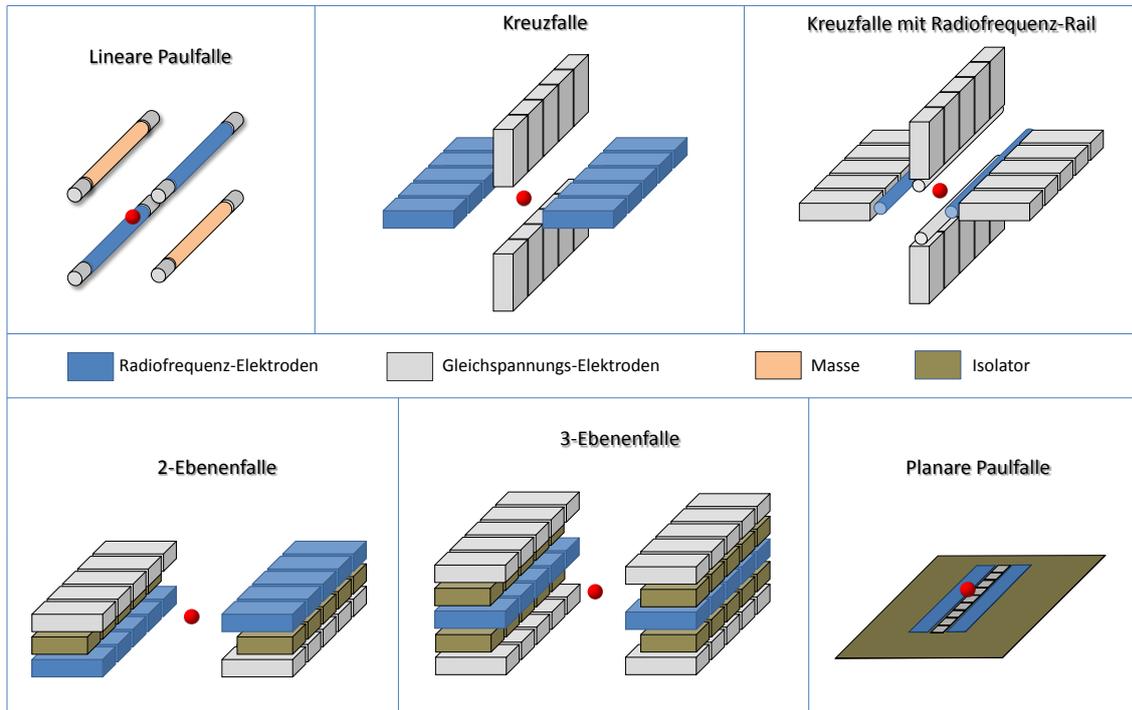


Abbildung 1.2.: Zusammenstellung verschiedener Paulfallgeometrien.

dadurch eine hohe Anzahl an Qubits zu realisieren. Aufgrund der komplexen Geometrien und speziellen Anwendungskonzepte war es unumgänglich, die vorgestellten Fallendesigns mit Hilfe von numerischen Methoden zu analysieren. Ein eigens von unserer Gruppe entwickeltes Simulationsprogramm [Singer et al., 2010] erlaubte es, komplexe Geometrien nachzubilden und sub-nm-genaue Berechnungen der Potentiale und der Trajektorien anzufertigen.

Das erste optimierte System nutzt die Ionenfalle als Ausgangspunkt zur deterministischen Implantation von Ionen in Festkörpern. In Abständen von 20 nm gezielt erzeugte Defekte ermöglichen es, diese miteinander wechselwirken zu lassen und somit zweidimensionale stabile Festkörperqubits zu erschaffen. Die Idee der Festkörperqubits geht auf Bruce Kane [Kane, 1998] zurück, welcher vorschlug, Kernspinzustände von Phosphoratomen in einem Siliziumsubstrat als Qubit zu nutzen. Eine neuere Realisierung der Festkörperquanteninformation basiert auf Stickstoff-Farbzentren im Diamantgitter [Gaebel et al., 2006]. Die Ionenfalle dient bei dem von unserer Arbeitsgruppe verfolgten Konzept der Implantation als definierte Quelle für einzelne Ionen. Die diskreten Schwingungszustände erlauben es, die Ionen durch Laser zu kühlen und somit für die Extraktion zu präparieren. Im Ver-

1. Einleitung

gleich zu anderen Systemen kann hierbei die Extraktion für beliebige Ionensorten in unterschiedliche Substrate vorgenommen werden. In unserer Gruppe existierten bereits eine für die Implantation verwendete Ionenfalle und ein entsprechender ionenoptischer Aufbau. Die Herausforderung dieser Diplomarbeit bestand darin, die bereits bestehende durch eine neue, für den Vorgang der Extraktion ausgelegte und optimierte Falle zu ersetzen. Zu diesem Zweck wurden im Zuge dieser Diplomarbeit fünf verschiedene Paulfallenkonzepte mit der etablierten Falle verglichen. Die aus der Simulation gewonnenen Erkenntnisse ermöglichten es, die ideale Kombination von Paulfallengeometrie und Extraktionmethode auszuwählen. Im Anschluss an das Auswahlverfahren wurde das gewählte Design durch Variation von Parametern optimiert. Außerdem wurde überprüft, welchen Einfluss unterschiedliche Anfangsbedingungen auf die Extraktion des Ions in dieser Falle ausüben. Die Optimierung der Implantationsfalle implizierte auch die Konstruktion einer dazugehörigen Halterung, die die Fehler durch die Justage der Falle minimiert.

Das zweite in dieser Diplomarbeit vorgestellte Konzept einer Paulfalle nutzt die Falle selbst für die skalierbare Quanteninformation. Die Falle erlaubt, neben einzelnen Ionen, welche ein Qubit repräsentieren, eine Kristall von Ionen zu laden und die Ionen innerhalb dieses Kristalls durch die Coulomb-Kraft miteinander wechselwirken zu lassen. Die Interaktion mit Photonen gestattet es, die einzelnen Qubits miteinander zu verschränken und so komplexe Gatter zu erzeugen. Der Entwurf der in dieser Diplomarbeit verfolgten Paulfalle sieht eine Erweiterung der linearen Paulfalle um zwei Elektroden vor. Durch diese zusätzlichen Elektroden ist es möglich, mit Hilfe der durch die Radiofrequenzelektroden erzeugten Potentiale die Ionen innerhalb der Falle zu verschieben. In Kombination mit dem bereits etablierten Transport durch die DC-Elektroden eröffnet dies die Option einer dreidimensionalen Verschiebung der Ionen innerhalb der Falle. Diese Eigenschaft erweist sich als essentiell für die skalierbare Quanteninformationsverarbeitung in Paulfallen. Größere Qubitanzahlen können durch eine Unterteilung der Falle in Prozessor und Speicherregion basierend auf einem Entwurf von Kielpinski [Kielpinski et al., 2002] erzielt werden. Nur durch Transportoperationen innerhalb der Falle ist es daher möglich, die Ionen zwischen den einzelnen Bereichen der Falle zu verschieben und diese miteinander interagieren zu lassen. Beispiele der hierfür notwendigen Paulfallengeometrien wurden in planarer und dreidimensionaler Struktur auf ihr Transportverhalten hin untersucht. Neben dem neuen Transportverfahren eröffnet diese Anordnung der Elektroden eine weitere Anwendung. Durch das Nutzen variabler Radiofrequenzamplituden besteht die Möglichkeit, die beiden Potentialminima zweier separat arbeitender Paulfallen einander beliebig nahe zu bringen und so die Wechselwirkungsstärke zwischen linearen Ionenkristallen beliebig zu modulieren. Das freie Gestalten

des Kristallabstands kann zur Umsetzung komplexer Quantengatter genutzt werden und gestattet die Untersuchung der Spin-Spin-Wechselwirkung in sehr gut zu präparierenden zweidimensionalen Geometrien. Um das Konzept der Potentialverschmelzung belegen zu können, wurde ein Experiment mit einer makroskopischen Paulfalle durchgeführt und mit den aus der Simulation erhaltenen Daten verglichen. Darüber hinaus wurden Auswirkungen verschiedener geometrischer Parameter auf die Potentialverschmelzung untersucht, um experimentelle Vorgaben für den späteren Fallenbau zu ermitteln.

Im Verlauf der vorliegenden Diplomarbeit werden unterschiedliche Paulfallentypen vorgestellt und diskutiert. Um den Überblick zu erleichtern wird folgende Nomenklatur eingeführt:

Fallenbezeichnung	Fallentyp	Status	Abbildung
Klassische Paulfalle	Paulfalle	Skizze	1.1
Lineare Paulfalle	Lineare Paulfalle	Simulierte Falle	1.2, 2.1
Mikrofalle	Segmentierte Paulfalle	Reale Keramikfalle	2.4
PCB-Falle	Segmentierte Paulfalle mit separater RF-Leiterbahn	Simulierte, reale Leiterplattenfalle	3.2
Rail-Kreuzfalle*	Segmentierte Paulfalle mit separater RF-Leiterbahn	Simulierte Falle	1.2, 3.10 a) 3.13
Kreuzfalle*	Segmentierte Paulfalle	Simulierte Falle	1.2, 3.10 b), 3.22
2-Ebenenfalle*	Segmentierte Paulfalle	Simulierte Falle	1.2, 3.11 a)
3-Ebenenfalle*+	Segmentierte Paulfalle	Simulierte Falle	3.11 b)
Planare Paulfalle	Planare segmentierte Paulfalle	Skizze	1.2, 3.12
Implantationsfalle	Segmentierte Paulfalle mit Extraktionselektroden	Simulierte Falle & im Bau	3.28, 3.38, 3.39, 3.43
RFA-Transport Falle	Lineare Paulfalle	Simulierte Falle Bau in Planung	4.2 4.14
Planare RFA-Transport Falle	Planare segmentierte Paulfalle	Simulierte Falle	4.7
Makroskopische RFA-Falle	Lineare Paulfalle	Simulierte, reale Drahtfalle	4.16

Tabelle 1.1.: Übersicht über die in dieser Diplomarbeit beschriebenen Paulfallen. Alle mit einem * versehenen Fallen wurden auch in einer Variante mit Endkappe simuliert. + Die 3-Ebenenfalle wurde auch in der Variante mit vertauschten Elektroden simuliert und wird als 3-Ebenenfalle.v2 bezeichnet.

2. Theorie

2.1. Theoretische Grundlagen zur Berechnung der Felder von Paulfallen

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf den numerischen Simulationen komplexer Paulfallen, die mit analytischen Methoden nicht hinreichend beschrieben werden können. Für das grundlegende Verständnis der Funktionsweise der Paulfalle und der einfachen Bewegungen des Ions und dessen Speicherbedingungen in der Falle erweist sich die analytische Herangehensweise als verständlicher. Im Folgenden wird daher kurz die klassische Betrachtung der Paulfalle erläutert und im Anschluss daran die Numerik des Simulationsprogramms diskutiert.

Samuel Earnshaw bewies mit seinem Theorem 1842 [Earnshaw, 1842], dass im quellenfreien Raum der Einschluss eines Objektes in drei Dimensionen mit Hilfe eines statischen Feldes, egal ob elektrisch oder magnetisch, nicht möglich ist. Definiert man, ausgehend von der Coulombkraft, ein quadratisches dreidimensionales Potential

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

so stellt man fest, dass zum Erfüllen der Laplace-Gleichung

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

immer in einer Raumrichtung ein nicht einschließender Anteil vorliegt. Wolfgang Paul und Helmut Steinwedel entdeckten eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen. 1953 reichten sie ein Patent über Konzepte zur Speicherung und ladungsspezifischen Trennung von Ionen ein [Paul and Steinwedel, 1956]. Die Grundidee dieses Prinzips basiert auf dem dynamischen Einschluss des Ions in einer Quadrupolfalle. Statt der Verwendung rein statischer elektrischer Felder wird zum Einschluss je nach Fallendesign in zwei oder drei Dimensionen ein Wechselfeld an die Elektroden angelegt. Ein zusätzlicher Einschluss in der verbleibenden Dimension kann durch die Nutzung eines statischen Feldes realisiert werden [Leibfried et al., 2003]. Nahe dem Fallenzentrum können die sich ergebenden Potentiale

2. Theorie

durch eine quadratische Näherung aus statischem und dynamischem Anteil

$$\Phi(x, y, z, t) = \frac{V_{pp}}{2} \cos(\Omega_{rf} t) (\alpha_{rf} x^2 + \beta_{rf} y^2 + \gamma_{rf} z^2) + \frac{U_0}{2} (\alpha_{dc} x^2 + \beta_{dc} y^2 + \gamma_{dc} z^2). \quad (2.3)$$

beschrieben werden. Die nach diesem Prinzip arbeitenden Ionenfallen werden heutzutage als Paulfallen bezeichnet. Eine der einfachsten Geometrien, welche die Gleichung 2.3 näherungsweise in ihrem Fallenmittelpunkt erfüllt, ist die der linearen Paulfalle (siehe Abbildung 2.1).

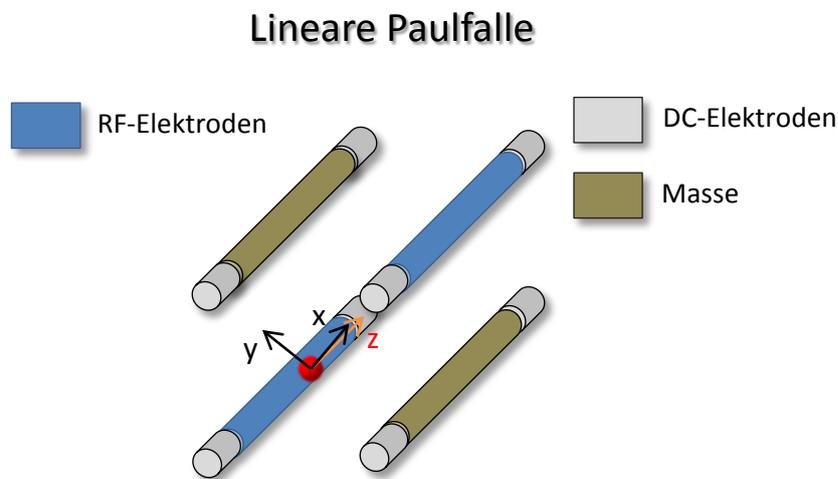


Abbildung 2.1.: Skizze einer linearen Paulfalle. In der Mitte der Falle ist ein Ion in der sich ergebenden Fangposition eingezeichnet. Zusätzlich sind die Hauptachsen des Fallenpotentials abgebildet. In schwarz die radialen Fallenachsen, in orange die axiale Fallenachse.

Wechselspannungspotential und Gleichspannungspotential müssen die Laplace-Gleichung unabhängig voneinander erfüllen. Aus der in Abbildung 2.1 gezeigten Anordnung der Elektroden ergibt sich für die Koeffizienten folgender Zusammenhang

$$\alpha_{rf} = -\beta_{rf}, \quad \gamma_{rf} = 0, \quad \alpha_{dc} = \beta_{dc} = -\frac{\gamma_{dc}}{2}. \quad (2.4)$$

Die vier in blau und braun gekennzeichneten Elektroden definieren den Fangbereich der Falle. An zwei diagonal gegenüberliegenden Elektroden wird eine Wechselspannung V_{pp} ¹ mit der Frequenz Ω_{rf} angelegt. Für das Fangen von Ionen wie Calcium ($^{40}\text{Ca}^+$) liegen die

¹Abkürzung des englischen Begriffs *Vpeak-to-peak*, im Folgenden als RF-Spannung bezeichnet

2.1. Theoretische Grundlagen zur Berechnung der Felder von Paulfallen

Frequenzen der notwendigen Wechselspannung im Radiofrequenz-Bereich von 100 kHz bis 100 MHz, sodass sich die Bezeichnung Radiofrequenz-Elektrode oder kurz RF-Elektrode eingebürgert hat. Die verbleibenden zwei langen Elektroden werden geerdet. Daraus resultiert ein mit der Frequenz $\Omega_{\text{rf}}/2\pi$ umklappendes Sattelpotential (siehe Abbildung 2.2).

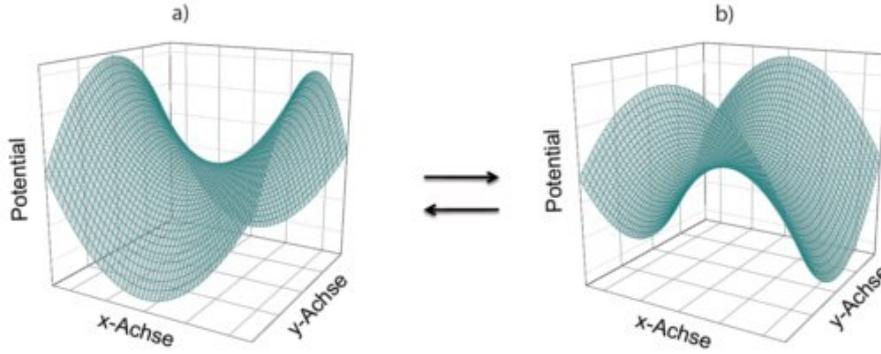


Abbildung 2.2.: Skizze der durch die RF-Elektroden erzeugten Sattelpotentiale. Die Fälle a) und b) unterscheiden sich in der Radiofrequenzphase um 180° .

Berechnet man die resultierende Kraft über $m\ddot{\vec{x}} = -q\vec{\nabla}\Phi(\vec{x})$ und führt die Substitutionen von Gl. 2.6 ein, so ergeben sich die *normierten Mathieu'schen Differentialgleichungen*

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + [a_u - 2q_u \cos(2\xi)]u(\xi) = 0 \quad u = \{x, y\} \quad (2.5)$$

für die x- und y-Achse der vorgestellten Falle. Eine Vereinfachung wurde durch die Wahl folgender Ersetzungen erzielt

$$\xi = \frac{\Omega_{\text{rf}} t}{2}, \quad a_u = \pm \frac{4|q|U_0\chi_{\text{dc}}}{m\Omega_{\text{rf}}^2}, \quad q_u = \mp \frac{2|q|V_{\text{pp}}\chi_{\text{rf}}}{m\Omega_{\text{rf}}^2}, \quad \chi = \{\alpha, \beta\}. \quad (2.6)$$

Lösungen dieser Differentialgleichungen sind stabil, solange $0 \leq \sqrt{a_u + q_u^2} \leq 1$ erfüllt ist. Die Tatsache, ob ein Ion in der Falle gefangen wird, hängt zum einen von den Anfangsbedingungen wie dem Ort und der Geschwindigkeit des Ions und zum anderen von der Wahl der Fallenparameter U_0 , V_{pp} und Ω_{rf} ab. Trägt man a_u gegen q_u oder vereinfacht U_0 gegen V_{pp} auf, so erhält man für ein festes Ω_{rf} eine graphische Darstellung des Wertebereichs, welcher das Fangen des Ions ermöglicht (siehe Abbildung 2.3), das sogenannte Stabilitätsdiagramm. Mit den Bedingungen ($|a_u| \ll 1$, $q_u^2 \ll 1$) vereinfacht sich die Lösung von Gl. 2.6 weiter zu

$$u(t) = u_0 \cos(\omega_u t) \left(1 + \frac{q_u}{2} \cos(\Omega_{\text{rf}} t)\right), \quad \omega_u = \sqrt{a_u + \frac{q_u^2}{2}} \frac{\Omega_{\text{rf}}}{2}. \quad (2.7)$$

2. Theorie

Hieran sieht man, dass das Ion Bewegungen im Potential mit zwei unterschiedlichen Schwingungen durchführt. Der erste Term beschreibt langsame Säkularbewegungen (ω_u), während der zweite Teil für schnelle Mikrobewegungen mit der Radiofrequenz Ω_{rf} verantwortlich ist. Der axiale Einschluss wird in dieser Geometrie durch die acht grauen symmetrisch angeordneten Elektroden an den Fallenden sichergestellt. Das Anlegen einer Gleichspannung U_0 an diese Elektroden führt zum Ausbilden eines harmonischen Potentials entlang der Fallachse z . Diese, für den axialen Einschluss verantwortlichen Elektroden, werden im Folgenden als DC-Elektroden² bezeichnet. Für die Bewegung durch das von den Gleichspannungselektroden erzeugte Potential ergibt sich die Frequenz $\omega_z = \sqrt{|q|U_0\gamma_{\text{dc}}/m}$.

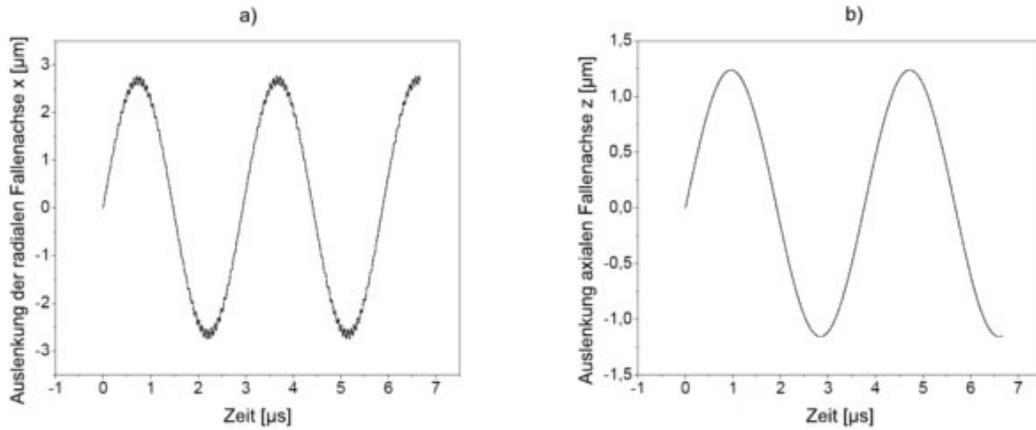


Abbildung 2.3.: Simulierte Mustertrajektorien der linearen Paulfalle mit einem Elektrodenradius von 0,3 mm und Abstand von 2 mm zueinander. In a) ist die Bewegung eines ^{40}Ca -Ions in der radialen Fallachse x gegen die Zeit aufgetragen. Zu erkennen ist die der Säkularbewegung aufmodulierte Mikrobewegung. b) zeigt die Bewegung des Ions in der axialen Fallachse z . Parameter der Simulation: $V_{\text{pp}} = 200 \text{ V}$, $\Omega_{\text{rf}} = 15 \text{ MHz}$, $U_0 = 10 \text{ V}$.

Liegen die Fallenparameter im Bereich des Stabilitätsdiagramms, kann dieser dynamische Einschluss vereinfacht werden durch ein pondermotives Potential, das sogenannte Pseudopotential,

$$V_{\text{pseudo}} = \frac{(|q||\vec{E}|)^2}{4m\Omega_{\text{rf}}^2} \quad (2.8)$$

beschrieben werden. Die Ladung q entspricht der des Ions, m dessen Masse und $|\vec{E}|$ dem durch die Wechselspannung erzeugten \vec{E} -Feld.

²DC vom englischen Ausdruck **direct current**

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

Die quadratische Näherung der Potentiale (Gl. 2.3) diente als Ausgangspunkt für die analytische Beschreibung der Vorgänge in der Paulfalle. Diese Betrachtung reicht aus, um ein grundlegendes Verständnis für die Ionenbewegung und Speicherbedingung zu erhalten. In der experimentellen Praxis kommen jedoch komplexere geometrische Strukturen zum Einsatz. Leiterbahnen und von der Idealform abweichende Elektroden verändern den Verlauf der Felder. Außerdem werden für Transportoperationen innerhalb der Falle superpositionierte Potentiale mehrerer DC-Elektroden³ genutzt (siehe Abschnitt 3.3.1). Zudem erfordert die Extraktion der Ionen aus der Falle eine genaue Kenntnis über die Trajektorien innerhalb und in den Randbereichen der Falle. Die hierfür notwendigen Berechnungen überfordern die Möglichkeiten analytischer Methoden. Aus diesem Grund wurde von unserer Gruppe ein numerisches Simulationsprogramm entwickelt [Singer et al., 2010], um die Eigenschaften komplexer makroskopischer Strukturen zu untersuchen. Mit Hilfe von im Programm implementierten Befehlen oder Importierungen aus 3D-Konstruktionprogrammen wie AutoCAD⁴ kann man Strukturen im Bereich von mehreren cm in das Programm einbinden (siehe Abbildung 2.4).

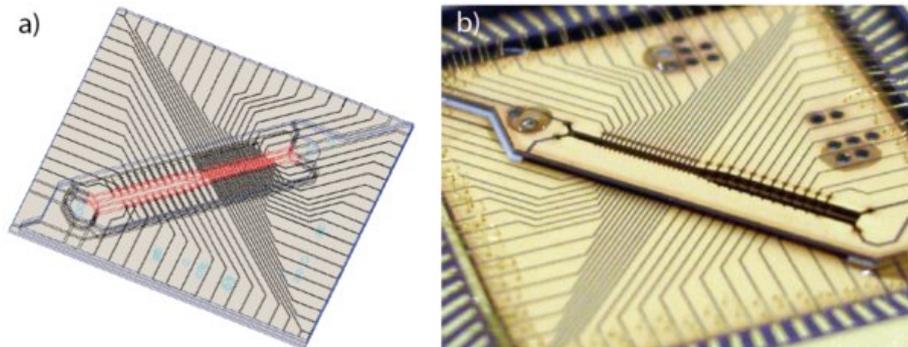


Abbildung 2.4.: a) CAD-Zeichnung der von unserer Gruppe eingesetzten Mikrofalle [Schulz, 2009]. Diese wurde von Stephan Schulz angefertigt. b) Foto der Mikrofalle, entnommen aus [Deiß et al., 2009]. Die Falle besitzt drei unterschiedliche Fallenregionen und 2x31 einzeln ansteuerbare DC-Elektroden.

Das Programm ist in der Lage, die resultierenden Oberflächen in vom Benutzer frei wählbare Regionen zu unterteilen. Dadurch ist es möglich, Potentiale und Felder mit einer Präzision im Subnanometerbereich zu untersuchen. Das Programmpaket bietet außerdem die Möglichkeit, Ionentrajektorien zu berechnen, was eine exakte Prognose des zu erwartenden

³Im folgenden als segmentierte DC-Elektroden bezeichnet.

⁴Kommerzielles Programm der Firma Autodesk www.autodesk.de

2. Theorie

Ionenverhaltens erlaubt. Sämtliche in dieser Diplomarbeit durchgeführten Untersuchungen wurden mit Hilfe dieses Programmpakets durchgeführt. Im Folgenden werden daher die vom Programm bereitgestellten Routinen eingehender beschrieben.

2.2.1. Potential- und Feldberechnung

Das wichtigste in dem Simulationsprogramm enthaltene Verfahren ist das zum Berechnen der Potentiale und Felder der Fallengeometrie. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Die Potentialberechnung basiert auf einem Verfahren zum numerischen Lösen von Randwertproblemen, der sogenannten Randelementmethode (abgekürzt REM⁵).

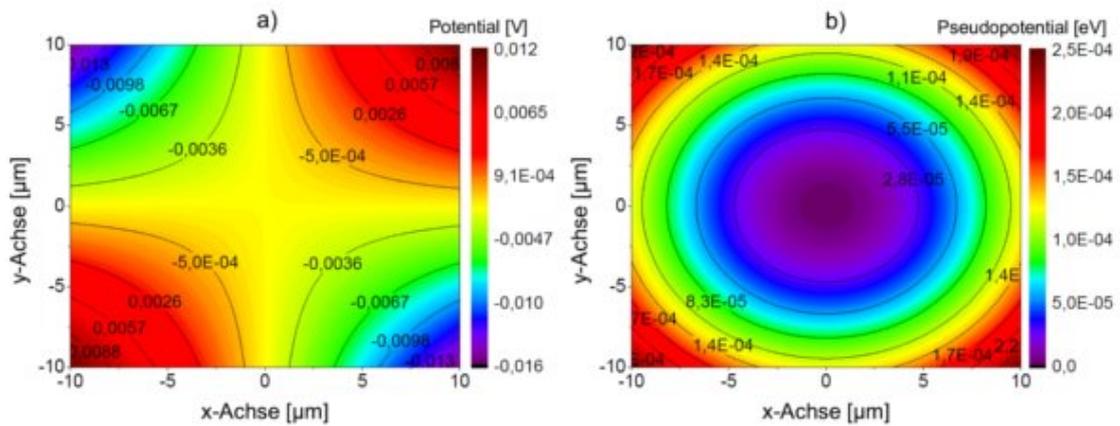


Abbildung 2.5.: Simuliertes Potential a) und das aus den \vec{E} -Feldern mittels Gl.2.8 berechnete Pseudopotential b) der linearen Paulfalle. Parameter der Simulation: $V_{pp} = 200 \text{ V}$, $\Omega_{rf} = 15 \text{ MHz}$, $\frac{q}{m} = 2,41187 \cdot 10^6 \text{ C/kg}$ von einfach geladenem ^{40}Ca .

Der Vorteil dieser Herangehensweise ist, dass lediglich die Oberflächen der Geometrie berücksichtigt werden müssen und nicht das Volumen des gesamten Aufbaus, was der Systematik der **Finite Element Method**⁶ entspräche und das Einbinden großer komplexer Strukturen ermöglicht. Das Randwertproblem ergibt sich aus einer klassischen elektrostatischen Betrachtung. Die von Ladungen erzeugten Potentiale müssen der Laplace-Gleichung $\Delta\Phi(\vec{x}) = 0$ im freien Raum genügen. Die Poisson-Gleichung $\Delta\Phi(\vec{x}) = -4\pi\rho(\vec{x})$ und die Laplace-Gleichung werden durch die Greenfunktion

⁵im Englischen **B**oundary **E**lement **M**ethod, abgekürzt BEM

⁶Abgekürzt FEM

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

$$G(\vec{x}, \vec{y}) = -\frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|}, \quad \Delta_x G(\vec{x}, \vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}) \quad (2.9)$$

erfüllt. Die sich hieraus ergebenden Lösungen gelten für Punktladungen ohne weitere Nebenbedingungen. In der für unseren Fall relevanten Problemstellung ist das Potential auf dem Rand eines Gebiets R gegeben. Zwei unterschiedliche Randwertdefinitionen sind möglich, um das Problem zu beschreiben.

$$\text{Dirichlet: } \Phi(\vec{x})|_{(\vec{x} \in R)} = \Phi_0(\vec{x}), \quad \text{Neumann: } \left. \frac{\partial \Phi(\vec{x})}{\partial \vec{n}} \right|_{(\vec{x} \in R)} = \vec{\sigma}_0(\vec{x}) \quad (2.10)$$

Der Dirichlet-Randwert definiert die Vorgabe eines Leiters, welcher ein definiertes Potential auf der Oberfläche vorgibt. Eine Neumannsche Randbedingung entspricht einer statischen Oberflächenladungsverteilung. Um beide Probleme zu berücksichtigen, bedient man sich der zweiten Greenschen Identität

$$\int_V (G(\vec{x}, \vec{y}) \Delta \Phi(\vec{y}) - \Phi(\vec{y}) \Delta G(\vec{x}, \vec{y})) d^3 y = \int_R \left(G(\vec{x}, \vec{y}) \frac{\partial \Phi(\vec{y})}{\partial \vec{n}} - \Phi(\vec{y}) \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y})}{\partial \vec{n}} \right) d\vec{f}. \quad (2.11)$$

Löst man diese mit Hilfe der Laplace-Gleichung und der Greenfunktion auf, so erhält man

$$\frac{\Phi(\vec{x})}{2} = \int_R \left(G(\vec{x}, \vec{y}) \frac{\partial \Phi(\vec{y})}{\partial \vec{n}} - \Phi(\vec{y}) \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y})}{\partial \vec{n}} \right) d\vec{f}. \quad (2.12)$$

Der Koeffizient $1/2$ resultiert aus der Betrachtung, dass man lediglich Punkte auf der Oberfläche von R berücksichtigt [Liu and Nishimura, 2006]. Diese Gleichung wird auch als **Boundary Integral Equation**⁷ bezeichnet. Der für die Numerik wichtige Schritt besteht nun im Zerlegen der vorgegeben Leitergeometrie in N Oberflächenelemente s_i mit $i = 0 \dots N$ (siehe Abbildung 2.6). Eine feinere Elektrodenunterteilung erlaubt eine präzisere Potentialberechnung.

Der nun folgende Diskretisierungsschritt besteht im Überführen des Flächenintegrals in eine Summe über die einzelnen Oberflächenelemente. Für das Potential eines Flächenelements ergibt sich somit

$$\Phi(\vec{y}_j) = -2 \sum_{i=1}^N \alpha_i(\vec{y}_j) \frac{\partial \Phi(\vec{y}_i)}{\partial n} + 2 \sum_{i=1}^N \beta_i(\vec{x}_j) \Phi(\vec{x}_i) \quad (2.13)$$

mit

⁷Abgekürzt BIE

2. Theorie

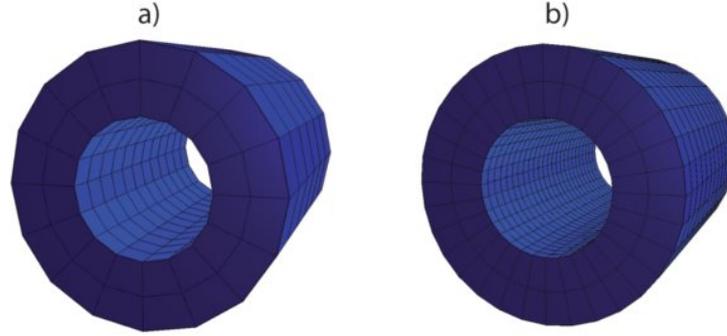


Abbildung 2.6.: Darstellung zweier im Programm definierter Hohlzylinder mit Loch. a) Hohlzylinder mit einer Unterteilung in 16 Kanten. b) Hohlzylinder mit einer Unterteilung in 32 Kanten. Jedes abgebildete Viereck beschreibt ein Oberflächenelement s_i .

$$\alpha_i(\vec{y}_j) = \oint_{s_i} G(\vec{x}, \vec{y}_j) ds \quad \beta_i(\vec{y}_j) = \oint_{s_i} \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{y}_j)}{\partial n} ds. \quad (2.14)$$

Ein Umstellen dieser Gleichung nach den unbekanntem Randwerten $\vec{\sigma}$ führt zu dem linearen Gleichungssystem

$$\vec{U} = \hat{C}\vec{\sigma}. \quad (2.15)$$

\hat{C} stellt eine Koeffizientenmatrix dar. Vereinfacht kann dies interpretiert werden als die Spannung U_j , welche auf dem Flächenelement s_j durch die Superposition von den Oberflächenladungsegmenten $\sigma_i = \frac{\partial \Phi(\vec{x}_i)}{\partial n}$ erzeugt wird. Die Hauptidee von BEM besteht also im Lösen einer Matrixinversion von \hat{C} . Diese Matrix wird für jede Elektrode, sprich für die zusammenhängenden Oberflächenladungen, separat bestimmt. Dies erfolgt, indem an eine Gruppe von zugehörigen Flächenelementen eine Spannung angelegt wird, während die restlichen Elemente geerdet werden. Sind diese Matrizen bestimmt, kann das Potential jedes beliebigen Raumpunktes über

$$\Phi(\vec{y}) = - \sum_{i=1}^N \alpha_i(\vec{y}_j) \frac{\partial \Phi(\vec{y}_i)}{\partial n} + \sum_{i=1}^N \beta_i(\vec{x}_j) \Phi(\vec{x}_i) \quad (2.16)$$

berechnet werden. Die erhaltenen Lösungen sind sehr exakt, jedoch skaliert die Matrixinversion mit $\mathcal{O}(N^3)$. Auf komplexe Strukturen angewandt sorgt dies für einen enormen Speicherbedarf und lange Rechenzeiten, sodass diese Methode vergleichsweise ineffizient wird. Aber es besteht die Möglichkeit, den Algorithmus zu beschleunigen.

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

Die Problemlösung mit Hilfe von BEM ist keine neue. Bereits 1963 wurden von Jaswon die BIE für ein zweidimensionales Problem gelöst [Jaswon, 1963]. Die Methode wurde verfeinert und im Laufe der Jahre weiterentwickelt [Brebbia, 1978, Mukherjee, 1982], sodass daraus der BEM-Algorithmus in seiner vorgestellten Form resultierte. Trotz seiner Vorteile, komplexe Probleme einfach einbinden zu können, fristete diese Methode aufgrund der benötigten hohen Rechenleistung lange ein Schattendasein. 1988 entwickelten Greengard und Rokhlin die **F**ast **M**ultipol **M**ethode⁸ [Greengard LF, 1987] zur schnellen Bewältigung von BIE-Problemen. Es dauerte allerdings ein Jahrzehnt bis das Potential der Kombination von FMM-BEM erkannt wurde [Greengard and Rokhlin, 1996]. Eine genaue Erläuterung der notwendigen Mathematik würde den Rahmen dieser Diplomarbeit überspannen, daher werden an dieser Stelle nur die Grundgedanken der Fast Multipol Methode erklärt und für eine ausführliche Diskussion auf [Of, 2001] verwiesen.

Die wesentliche Idee von FMM ist das Zusammenfassen von Ladungen zu Multipolentwicklungen, was zu einer Minimierung der zu berücksichtigenden Elemente führt. Aus Gründen der Anschaulichkeit wird eine zweidimensionale Betrachtung gewählt. Die Entscheidung, ob eine Multipolentwicklung vorgenommen wird oder nicht, hängt davon ab, ob sich die Flächenelemente im Nah- oder Fernfeld zum betrachteten Bereich befinden. Darum wird eine Zerlegung des Potentials vorgenommen.

$$\Phi = \Phi_{\text{Nahfeld}} + \Phi_{\text{Fernfeld}} \quad (2.17)$$

Bevor jedoch eine Multipolentwicklung vorgenommen werden kann, muss das komplette Problem in sogenannte hierarchische Cluster (im Folgenden auch Baumstruktur genannt) überführt werden (siehe Abbildung 2.7). Im ersten Schritt wird um die komplette Ladungsverteilung ein Würfel gelegt (Ebene 0), der im zweiten Schritt wiederum in vier identische Würfel zerlegt wird. Diese schrittweise Verfeinerung des Problems wird bis zum Erreichen einer Würfelgröße durchgeführt, welche nur noch ein durch BEM definiertes Flächenelement s_i enthält (in diesem Beispiel). Diese Ebene n wird Blattebene genannt. Würfel, welche keine Ladungsverteilung enthalten, müssen nicht berücksichtigt werden, was die Anzahl der relevanten Würfel je nach Problem erheblich reduziert.

Beginnend von der untersten, der feinsten Auflösung, werden nun die Würfel wieder zu sogenannten Cluster zusammengefasst. Hierfür wird eine Multipolentwicklung der Ordnung l um den Mittelpunkt des kleinsten Würfels vorgenommen. Anschließend erfolgt eine Multipolentwicklung der Würfel der Ebene n um den Mittelpunkt des nächsthöheren Würfels (Ebene $n-1$) bzw. Clusters. Die Berechnungen werden bis hin zur Verfeinerungsstufe $n \geq 2$

⁸Abgekürzt FMM

2. Theorie

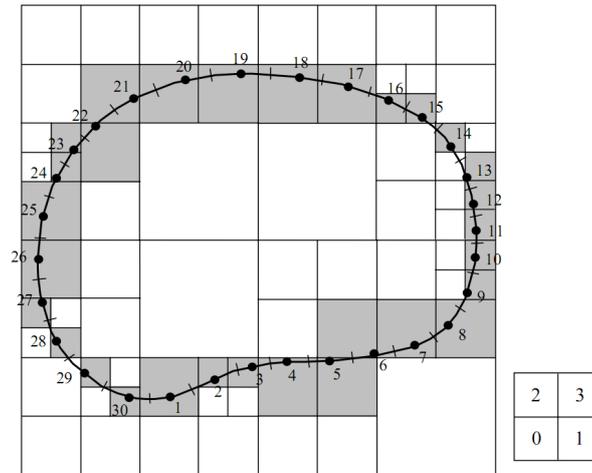


Abbildung 2.7.: Darstellung eines zweidimensionalen Randwertproblems. Die Struktur wird zuerst in 30 Streckenstücke unterteilt. Anschließend erfolgt die gezeigte Aufteilung in vier Hierarchiestufen. Die in grau eingezeichneten Bereiche enthalten ein Flächenelement, während die weißen Bereiche keine Rolle für die Berechnung spielen. Die Grafik wurde aus [Liu and Nishimura, 2006] entnommen.

der Cluster durchgeführt.

Als nächstes erfolgt eine umgekehrte Entwicklung für jedes einzelne Blatt. Jeder an das Blatt angrenzende Würfel wird als Nahbereich definiert. Die restlichen Cluster gelten als Fernfeld (dies wird auch als „wohl getrennt“ bezeichnet). Beginnend in der Verfeinerungsstufe $n = 2$ werden die Multipolentwicklungen der wohl getrennten Cluster zusammengefügt. Durch eine lokale Entwicklung werden sie auf die Mittelpunkte der darunterliegenden Clusterebene $n + 1$ verschoben. Angekommen in der tiefsten Schicht steht eine lokale Entwicklung des Fernfeldes in der Auflösung des Blattes zur Verfügung. Der Nahbereich wird auf herkömmliche Weise berechnet und muss für den Erhalt der kompletten Lösung hinzuzaddiert werden.

Durch die Nutzung von FMM kann die notwendige Rechenleistung auf $\mathcal{O}(N)$ reduziert werden. Definiert man zusätzlich Symmetrien für die Oberflächenelemente des Systems, führt dies zu einer weiteren Beschleunigung der Berechnung. Im Fall der Implantationsfalle kann die notwendige Rechenzeit für das Erstellen der \hat{C} -Matrix somit von mehreren Stunden auf etwa 20 Minuten reduziert werden (siehe Abbildung 3.28). FMM kann auch zur Beschleunigung der Potentialberechnung im freien Raum eingesetzt werden (Gl. 2.16), jedoch führt dies zu einem Verlust der sub-nm-Genauigkeit. Für diese Berechnung wird empfohlen, auf die konventionellen Matrizen-Multiplikationsmethoden zurückzugreifen. Durch numerische

Ableitungen ist es nach Erhalt der Potentiale ebenso möglich, die Felder der entsprechenden Elektroden zu bestimmen.

2.2.2. Numerische Trajektorienberechnung

Eine weitere von dem Programmpaket zur Verfügung gestellte Rechenroutine ist die Trajektorien-Simulation. Die Grundidee des Verlet-Algorithmus besteht in der getrennten Berechnung von Ort und Geschwindigkeit. Im Vergleich dazu basiert die Euler-Methode auf Differentialen erster Ordnung, während die Verlet-Methode auf Differentialen zweiter Ordnung beruht. Die Verlet-Methode [Verlet, 1967] wird dadurch invariant unter Zeitumkehr und erhält das Phasenraumvolumen und die Energie. Der Fehler, welcher sich aus der Rechnung ergibt, wächst mit der vierten Ordnung ($\mathcal{O}(\Delta t^4)$). Die sonst übliche Euler-Methode besitzt einen Fehler, der mit der zweiten Ordnung skaliert ($\mathcal{O}(\Delta t^2)$). Die Ausgangssituation der Verlet-Methode ist die Taylorentwicklung der Ortsfunktion bis zur dritten Ordnung

$$\vec{x}(t \pm \Delta t) = \vec{x}(t) \pm \dot{\vec{x}}\Delta t + \frac{\ddot{\vec{x}}(t)}{2}\Delta t^2 \pm \frac{\dddot{\vec{x}}(t)}{6}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.18)$$

Addiert man $\vec{x}(t + \Delta t)$ mit $\vec{x}(t - \Delta t)$, so erhält man

$$\vec{x}(t + \Delta t) + \vec{x}(t - \Delta t) = 2\vec{x}(t) + \ddot{\vec{x}}(t)\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.19)$$

Die erste und dritte Ordnung heben sich gegenseitig auf, sodass lediglich ein Fehler der vierten Ordnung erhalten bleibt. Zur numerischen Berechnung muss die Zeit in diskrete Schritte $\Delta t = h$ aufgeteilt werden. Die gewählte Zeitdauer kann anschließend mit $t_n = nh$ berechnet werden. Stellt man die Formel 2.19 um, so erkennt man, dass diese den sogenannten zentralen Differenzenquotienten zweiter Ordnung darstellt

$$\frac{\vec{x}(t_{n+1}) - 2\vec{x}(t_n) + \vec{x}(t_{n-1}))}{h^2} = \ddot{\vec{x}}(t_n). \quad (2.20)$$

Die Beschleunigung kann durch

$$\ddot{\vec{x}}(t_n) = -\frac{q\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}(t_n))}{m} \quad (2.21)$$

ersetzt werden. Das Problem der sich hieraus ergebenden Iteration ist, dass der Schritt $\vec{x}(t_{-1})$ unbekannt ist, lediglich $\vec{x}(0)$ und $\vec{v}(0)$ liegen zu Beginn vor. Problematisch ist, dass die Geschwindigkeit nur mit einem Fehler zweiter Ordnung berechnet werden kann

$$\vec{v}(t_n) = \frac{\vec{x}(t_{n+1}) - \vec{x}(t_{n-1}))}{2h}. \quad (2.22)$$

2. Theorie

Der Trick, diese Probleme zu umgehen, ist die Verwendung des sogenannten *Velocity-Verlet-Algorithmus*, welcher auf der *Leapfrog-Methode* basiert. Dieser verwendet lediglich halbe Zeitschritte für die Geschwindigkeit, erzielt jedoch weiterhin die gleiche Genauigkeit wie der klassische Verlet-Algorithmus für den Ort.

$$\vec{v}(t_{n+1/2}) = \vec{v}(t_n) + \frac{h}{2} \ddot{\vec{x}}(t_n) \quad (2.23)$$

$$\vec{x}(t_{n+1}) = \vec{x}(t_n) + h\vec{v}(t_{n+1/2}) \quad (2.24)$$

$$\vec{v}(t_{n+1}) = \vec{v}(t_{n+1/2}) + \frac{h}{2} \ddot{\vec{x}}(t_{n+1}) \quad (2.25)$$

Die Berechnung einer Dimension der Trajektorie besteht somit aus den folgenden Schritten:

1. Feldberechnung durch BEM von $\vec{x}(t_0)$.
2. Lösen der Gleichung 2.23.
3. Einsetzen in Gleichung 2.24.
4. Feldberechnung durch BEM von $\vec{x}(t_1)$.
5. Lösen der Gleichung 2.25.

Als Beispiel für aus der Simulation erhaltener Ortskoordinaten und Geschwindigkeiten dient Abbildung 2.8.

Die ungleiche Skalierung der Achsen im Diagramm der Lissajous-Figur lässt die unterschiedlichen Fallenfrequenzen in den einzelnen Achsen anhand der Trajektorien erahnen (siehe Abschnitt 2.2.3). Im Diagramm des Phasenraums ist gut die Mikrobewegung des Ions bei maximaler Auslenkung zu erkennen. Zum Vergleich mit dem reinen Ortsraum wird auf die Trajektorie in Abbildung 2.3 verwiesen, welche für dieselben Fangparameter erstellt wurde.

2.2.3. Verwendete Evaluationsmethoden der Simulationsresultate

Die im Rahmen dieser Diplomarbeit vorgestellten Paulfallen wurden mit verschiedenen Verfahren auf ihre Tauglichkeit für das spätere Experiment hin untersucht. Um ein besseres Verständnis der später folgenden Diskussion zu ermöglichen, werden die Methoden der Frequenzbestimmung und die der Ermittlung der Pseudopotentialtiefe an dieser Stelle kurz erläutert. Es wird gezeigt, wie es möglich, ist für eine gegebene Radiofrequenz und

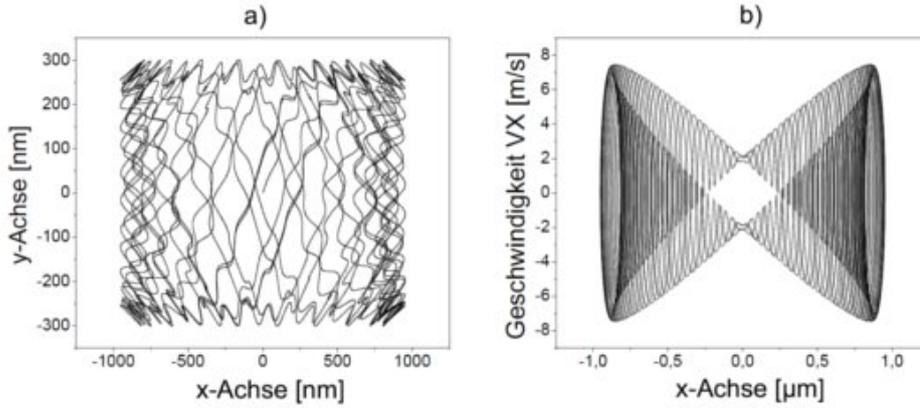


Abbildung 2.8.: Darstellung der aus der Simulation erhaltenen Trajektorien. a) x/y-Diagramm der Ortskoordinaten. In Abbildung b) ist das zur x-Achse gehörende Phasenraumdiagramm abgebildet. Für die Simulation wurde die Implantationsfalle verwendet mit folgenden Parametern ($\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 16,5 \text{ MHz}$, $V_{\text{pp}} = 200 \text{ V}$, $U_0 = -3 \text{ V}$). Die Abbildung entspricht 200000 Schritten über eine Zeitdauer von $18,182 \mu\text{s}$.

einen festgelegten Wertebereich von V_{pp} und U_0 zu ermitteln, ob ein Ion in der Falle gefangen werden kann. Außerdem wird erklärt, wie der Extraktionsvorgang aus der Paulfalle mit Hilfe der numerischen Methoden simuliert wird und welche Bedingungen hierbei zu beachten sind. Zum Abschluss dieses Kapitels wird der für die Ionenextraktion wichtige Qualitätsparameter der Emittanz erklärt, der als Kriterium für die Beurteilung der später gezeigten Paulfallen verwendet wird.

Bestimmung der Potentialparameter

Die Potentiale der Paulfalle zeichnen sich durch zwei elementare Parameter aus. Der erste wichtige Parameter ist der Anteil des quadratischen Terms um das Minimum des Fallententials. Dieser definiert die Fallenfrequenzen im Idealfall einer perfekt harmonischen Quadrupolfalle (siehe Abschnitt 2.2.3). Im Vergleich mit den Potentialparametern höherer Ordnung beschreibt dieser die Harmonizität des Potentials. Nur harmonische Potentiale sorgen für äquidistante Energieniveaus. Die Beimischung anharmonischer Terme verursacht Heizeffekte am Ion. Die Simulation gewährt Zugriff auf das Potential und das \vec{E} -Feld der Falle. Aus beiden kann mittels Fit eines Polynoms n-ter Ordnung

$$\Phi(x) = U_{\text{dc/rf}} \sum_{n=0}^N \alpha_n (x - x_0)^n \quad (2.26)$$

2. Theorie

der entsprechende Koeffizient α_n bestimmt werden. x_0 berücksichtigt die Verschiebung des Potentials aus der numerischen Null. Als Beispiel für die Vorgehensweise dient das Potential in Abbildung 2.9, an welches ein Polynom vierter Ordnung angefitet wurde.

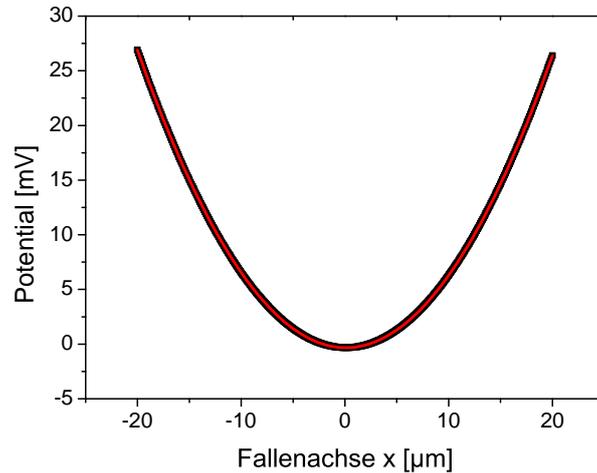


Abbildung 2.9.: Simuliertes radiales Fallenpotential entlang der Fallenachse x . Die Simulation entspricht einer RF-Spannung von $V_{pp} = 200$ V. Die rote Linie markiert den Fit des Polynoms vierter Ordnung.

Damit die aus dem Potentialfit ermittelten Werte miteinander verglichen werden können, müssen diese für einen vom Nullpunkt ausgelenkten Punkt innerhalb des Potentials

$$\alpha'_n = \alpha_n \cdot x^n \quad (2.27)$$

umgerechnet werden. Dabei muss beachtet werden, dass der gewählte Punkt nicht zu nah oder zu weit von der Null des Potentials entfernt liegt. Wählt man den Abstand zu gering, berücksichtigt man nicht die komplette Auslenkung des Ions. Im Falle eines zu großen Bereiches ergibt sich ein zu schlechter Wert, welcher von bereits gekühlten Ionen nicht wahrgenommen wird. Aus dem in Abbildung 2.9 gezeigten Fit mit einem Polynom vierter Ordnung ergeben sich die in der Tabelle 2.1 aufgelisteten Koeffizienten und die entsprechenden Potentialparameter für einen Abstand von $1 \mu\text{m}$.

Der Potentialparameter erster Ordnung übt keine ortsabhängige Kraft aus und ist daher von keiner entscheidenden Relevanz. Im direkten Vergleich wird deutlich, wie gut die lineare Paulfalle die quadratischen Näherungen erfüllt. Der Betrag der zweiten Ordnung wird durch sieben Größenordnungen von der dritten und durch zehn Größenordnungen von der vierten Ordnung in einem Abstand von $1 \mu\text{m}$ vom Ursprung des Potentials getrennt.

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

Polynom Koeffizient	α_n [1/mm ⁿ]	α'_n
1 Ordnung	$-6,37 E - 5$	$-6,37 E - 8$
2 Ordnung	$3,31 E - 1$	$3,37 E - 7$
3 Ordnung	$-4,75 E - 5$	$-4,75 E - 14$
4 Ordnung	$4,47 E - 4$	$4,47 E - 17$

Tabelle 2.1.: Tabelle der aus dem Fit ermittelten Koeffizienten und Potentialparameter.

Ermittlung der Pseudopotentialtiefe

Aus dem Potential respektive dem Pseudopotential lässt sich ein weiterer wichtiger Parameter gewinnen. Die Tiefe des Pseudopotentials definiert in Kombination mit dem Stabilitätsdiagramm (siehe Abschnitt 2.2.3), ob das Ion in der Falle gefangen werden kann. Unabhängig von den Fallenparametern V_{pp} , Ω_{rf} und U_0 ist es notwendig, die Fallentiefe des Potentials zu kennen, um gewährleisten zu können, dass Ionen mit einer gewissen Energie im Potential gebunden werden können. Die in unserer Arbeitsgruppe eingesetzten Ionenfallen nutzen Öfen für die Erzeugung von neutralen Atomen. Die Atome fliegen, der Maxwell-Boltzmann-Verteilung folgend, aus dem gerichteten Ofenstrahl in Richtung des Fallenpotentials. Solange die Atome nicht ionisiert sind, nehmen diese die \vec{E} -Felder der Falle nicht wahr und können problemlos in den Fangbereich der Falle vordringen. Auf diesen Bereich eingestellte Ionisationslaser (siehe Abschnitt 3.2.3) entfernen ein Elektron aus der Hülle des Atoms, sodass das Ion ab diesem Zeitpunkt von den Feldern der Falle beeinflusst wird (siehe Abbildung 2.10).

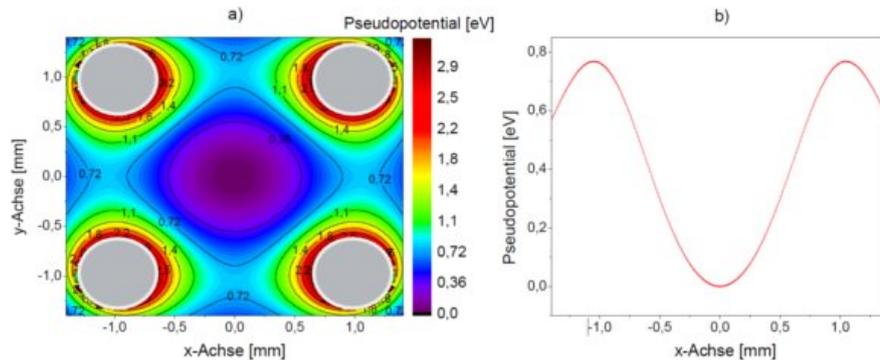


Abbildung 2.10.: a) Darstellung der Pseudopotentiale der linearen Paulfalle in zweidimensionaler Ansicht. Die RF-Elektroden sind als graue Kreise im Diagramm markiert. b) Schnitt durch die x-Achse des Potentials. Parameter der Simulation: $V_{pp} = 200$ V, $\Omega_{rf} = 15$ MHz, $\frac{q}{m} = 2,41187 \cdot 10^6$ C/kg.

2. Theorie

Abhängig von seiner Position zum Ionisationszeitpunkt gewinnt das Ion eine gewisse Anfangsenergie aus dem Potential der Falle. Wird das Ion zu weit von dem Mittelpunkt der Falle ionisiert, verlässt es aufgrund seiner zusätzlichen kinetischen Energie die Falle. Eine genaue Laserjustage ist daher notwendig. Die Simulation erlaubt es, die Pseudopotentialtiefe anhand der \vec{E} -Felder mit Hilfe von Gl. 2.8 zu berechnen und somit abschätzen zu können, ob die Tiefe ausreicht, die aus dem Ofen stammenden Ionen zu fangen. Statt das komplette zweidimensionale Pseudopotential (siehe Abbildung 2.10 a)) nach dem entsprechenden schwächsten Punkt zu untersuchen, erweist es sich als effektiver, Schnitte durch kritische Ebenen im Potential vorzunehmen (siehe Abbildung 2.10 b)). Bei der linearen Paulfalle ist der schwächste Punkt des Potentials zwischen den Elektroden auf den Achsen der Simulation zu finden. Aus dem Schnitt durch das Pseudopotential kann durch Vergleich der erhaltenen Maxima die Tiefe angegeben werden. Für die lineare Paulfalle ergibt sich ein Wert von 0,77 eV bei einer RF-Spannung $V_{pp} = 200$ V, mit $\Omega_{rf} = 15$ MHz und einem Ladung-zu-Masse-Verhältnis von $\frac{q}{m} = 2,41187 \cdot 10^6$ C/kg für ^{40}Ca . Aus der Formel für das Pseudopotential (Gl. 2.8) ist ersichtlich, dass die Tiefe proportional zu $1/\Omega_{rf}^2$ ist. Hohe Fallenfrequenzen benötigen daher eine höhere RF-Spannung, um das Ion in der Falle zu binden.

UV-Stabilitätsdiagramm

Übertrifft die Tiefe des Pseudopotentials die Energie des Ions, kann dieses trotzdem noch aus der Falle entkommen. Wie bereits in der analytischen Betrachtung der Paulfalle erklärt wurde, gibt es einen Wertebereich für V_{pp} und U_0 für jede Radiofrequenz Ω_{rf} , welcher das Fangen des Ions ermöglicht (siehe Abschnitt 2.1). Im späteren experimentellen Betrieb stehen durch Beschränkungen der Elektronik nur Teile dieses Stabilitätsdiagramms zur Verfügung. Es erweist sich daher als notwendig, die von der Falle zugänglichen Stabilitätsbereiche zu ermitteln, um abschätzen zu können, ob die Falle mit den verfügbaren Spannungen und Radiofrequenzen betrieben werden kann. Die Trajektorien simulation stellt hierfür die Grundlagen bereit. Die Idee besteht im Definieren eines Aufenthaltsbereiches des Ions, welcher als Fangregion aufgefasst werden kann. Verlässt das Ion diese Region während der Trajektorien simulation, wird das für diesen Simulationsschritt gewählte Wertepaar (aus U_0 , V_{pp} und Ω_{rf}) als nicht fangend vermerkt (siehe Abbildung 2.11). Für den Test erweist es sich als wichtig, die Anfangsenergie des Ions derart zu wählen, dass auch bei schwachem Einschluss die Trajektorie nicht über den festgelegten Bereich hinaus verläuft. Gleichzeitig muss gewährleistet sein, dass das Ion den Bereich mit der gegebenen Geschwindigkeit im Rahmen der Simulationsdauer verlassen kann.

Das Durchfahren der Spannungsparameter U_0 und V_{pp} erlaubt das Erstellen des UV-

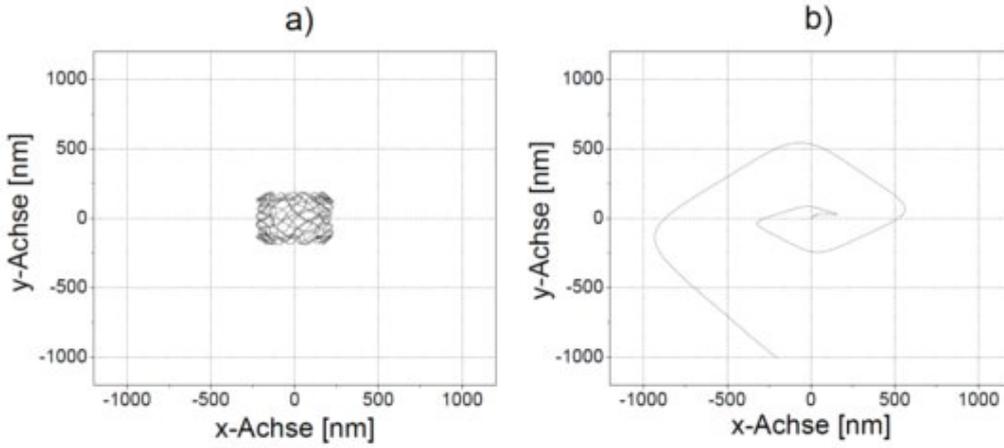


Abbildung 2.11.: Darstellung der aus der Simulation erhaltenen Trajektorien. Das Diagramm in a) zeigt die x/y-Trajektorien für die Fangparameter $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 16,5 \text{ MHz}$, $V_{\text{pp}} = 400 \text{ V}$, $U_0 = -3 \text{ V}$. Die Trajektorien in Diagramm b) entsprechen dem nicht fangenden Fall für $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 16,5 \text{ MHz}$, $V_{\text{pp}} = 1000 \text{ V}$, $U_0 = -3 \text{ V}$. Als Fangbereich wurde $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ gewählt. Für die Simulation wurde die Implantationsfalle verwendet. Die Simulationsdauer beträgt im Fall der fangenden Trajektorie $6,06 \mu\text{s}$, im Fall der abgebrochenen Simulation $0,25 \mu\text{s}$.

Stabilitätsdiagramms für jede beliebige Radiofrequenz Ω_{rf} . Als Beispiel wurde für 12 MHz , $16,5 \text{ MHz}$ und 20 MHz das Stabilitätsdiagramm abgebildet, welches sich für die Parameter U_0 im Bereich 0 bis 40 V in 1 V Schritten und V_{pp} im Bereich 0 bis 1000 V in 2 V Schritten ergibt (siehe Abbildung 2.12). Für jedes Stabilitätsdiagramm wurden somit $40 \times 500 = 20000$ Kombinationen überprüft. Ein Vergleich mit dem sich aus der reinen analytischen Betrachtung ergebenden Stabilitätsdiagramm wird anhand einer gemeinsamen Abbildung 2.12 veranschaulicht.

Auffällig ist der Offset, welcher sich für die aus der Simulation erhaltenen Stabilitätsdiagramme ergibt. Dieser kann erklärt werden durch die Tatsache, dass die analytische Betrachtung auch Werte von $a_u = 0$ und $q_u = 0$ als fangend verzeichnet (Stabilitätsbedingung $0 \leq \sqrt{a_u + q_u^2} \leq 1$) und die Simulation eine Schrittweite von 2 V DC-Spannung besitzt. Das aus der Simulation erhaltene Stabilitätsdiagramm liegt immer innerhalb des analytischen, wodurch angenommen werden darf, dass somit extreme Werte von $\sqrt{a_u + q_u^2}$ von der Simulation automatisch vermieden werden. Dies liegt unter anderem daran, dass die Simulation durch die den Ionen mitgegebenen Anfangsgeschwindigkeiten die Potentialtiefen mit berücksichtigt. Anhand der abgebildeten Stabilitätsdiagramme (siehe Abbildung 2.12) ist zu erkennen, wie sich der stabile Bereich für unterschiedliche Radiofrequenzen Ω_{rf}

2. Theorie

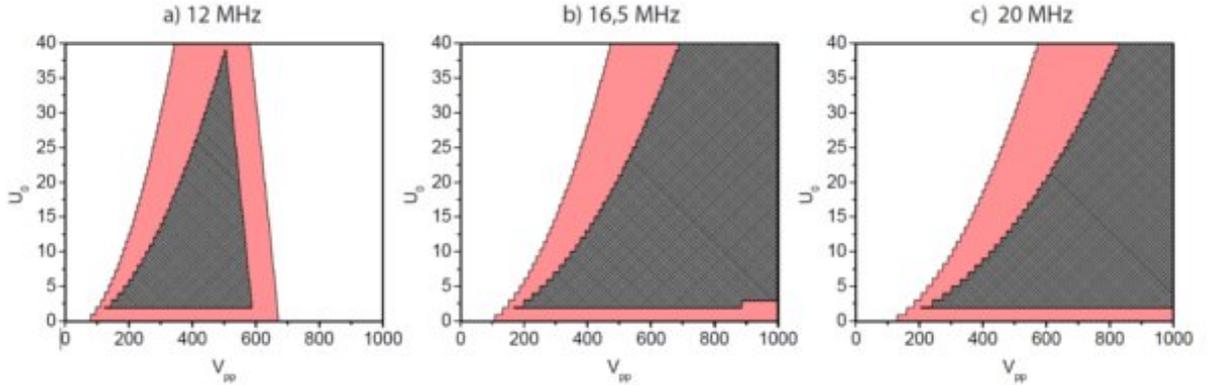


Abbildung 2.12.: Analytische und simulierte Stabilitätsdiagramme der Implantationsfalle. Die analytischen Diagramme sind in hellrot dem simulierten Diagramm zugrunde gelegt. a) entspricht dem UV-Stabilitätsdiagramm für $\Omega_{rf}/(2\pi) = 12$ MHz, b) dem Diagramm für $\Omega_{rf}/(2\pi) = 16,5$ MHz und c) einer Radiofrequenz von $\Omega_{rf}/(2\pi) = 20$.

durch den gewählten Wertebereich verschiebt. Für $\Omega_{rf} = 12$ MHz liegt das komplette aus der Simulation erhaltene Stabilitätsdiagramm innerhalb des betrachteten Bereichs. Für $\Omega_{rf} = 16,5$ MHz ergibt sich das größte der drei Stabilitätsdiagramme. Erhöht man die Radiofrequenz weiter kann beobachtet werden wie sich das UV-Stabilitätsdiagramm aus dem definierten Bereich hin zu höheren RF-Spannungen verschiebt.

Frequenzermittlung

Der letzte wichtige Test der grundlegenden Eigenschaften einer Paulfalle besteht im Evaluieren der Fallenfrequenzen, wofür zwei verschiedene Verfahren verwendet werden können. Die erste Methode basiert auf der analytischen Betrachtung des Fangpotentials. Die Simulation gewährt Zugriff auf die Potentiale oder die \vec{E} -Felder der Falle. Aus beiden kann mittels Fit eines Polynoms n-ter Ordnung der entsprechende Koeffizient α_n bestimmt werden (siehe Abschnitt 2.2.3). Die Frequenzen errechnen sich im Anschluss über die im ersten Kapitel angegebene Formel für die Fallenparameter a_u und q_u ($u = \{x, y\}$) (siehe Formel 2.6). Verwendet man die Felder als Grundlage, so muss der Faktor der Ableitung berücksichtigt werden. Außerdem muss in beiden Fällen das der Simulation zugrunde gelegte Skalierungsmodell beachtet werden.

$$\text{Radialfrequenz : } \omega_u = \sqrt{a_u + \frac{q_u^2}{2} \frac{\Omega_{rf}}{2}}, \quad \text{Axialfrequenz : } \omega_{axial} = \sqrt{\frac{|q|U_0\alpha_{dc}}{m}}. \quad (2.28)$$

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

Es ist wichtig für die Simulation der radialen Fallenfrequenzen, sowohl RF- als auch DC-Potentiale zu simulieren, um die entsprechenden Frequenzverschiebungen zu berücksichtigen. Die andere durch die Verlet-Methode ermöglichte Variante besteht im Bestimmen der Frequenz aus der Trajektorie. Zwei weitere Verfahren sind hier ebenfalls denkbar. Zum einen eine Fourieranalyse mittels einer **F**ast **F**ourier **T**ransformation⁹

$$x'_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-i2\pi k \frac{n}{N}}, \quad k = 0, \dots, N-1 \quad (2.29)$$

der Trajektorie und zum anderen die Bestimmung der Frequenzen aus den Mittelpunktsdurchgängen der Trajektorie. Eine Glättung ist notwendig, um Fehler durch die Mikrobewegung zu minimieren. Was durch eine Faltung der Trajektorie

$$x'_i = \sum_{j=0}^M x_{i+j} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(j-\omega_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.30)$$

mit einer Gaußfunktion erreicht wird. Die Parameter ω_0 , σ und M müssen der Schrittweite der Simulation entsprechend gewählt werden. Für eine aus 50000 Schritten bestehende Trajektorienimulation haben sich die Werte von $M = 300$, $\omega_0 = 150$ und $\sigma = 50$ bewährt. Die vier Methoden wurden für die Implantationsfalle aus Abschnitt 3.4 miteinander verglichen und die so ermittelten Wert in Tabelle 2.2 aufgelistet.

Methode	$\omega_x/(2\pi)$ [Hz]	$\omega_y/(2\pi)$ [Hz]	$\omega_z(2\pi)$ [Hz]
Potentialfit	364001 (2909)	1148320 (1718)	524638 (56)
E-Feldfit	364121 (20616)	1148280 (2302)	524622 (1)
FFT	363000 (16000)	1155001 (16000)	528000 (16000)
Gauß	364182 (40)	1154890 (32)	525166 (12)
Abgelesen	363660 (3000)	1150630 (4000)	524810 (2000)

Tabelle 2.2.: Auflistung der errechneten Fallenfrequenzen und der benutzten Methoden.

Zum besseren Vergleich wurde die Frequenz zusätzlich aus dem Diagramm 2.13 abgelesen. Für die Fehler der Fitergebnisse wurde die Gaußsche Fehlerfortpflanzung verwendet. Der Fehler der FFT-Ermittlung entspricht der halben Schrittweite, welche von Origin¹⁰ verwendet wurde. Der Fehler für die Methode der Gaußglättung ergibt sich aus der Standardabweichung von zehn wiederholten Simulationen zu je zufälligen Anfangsgeschwindigkeiten und Positionen. Wichtig ist hierbei, dass die Trajektorienimulation mindestens 1000 Ra-

⁹ Abgekürzt FFT

¹⁰ Kommerzielles Programm der Firma Originlabs <http://www.originlab.com>

2. Theorie

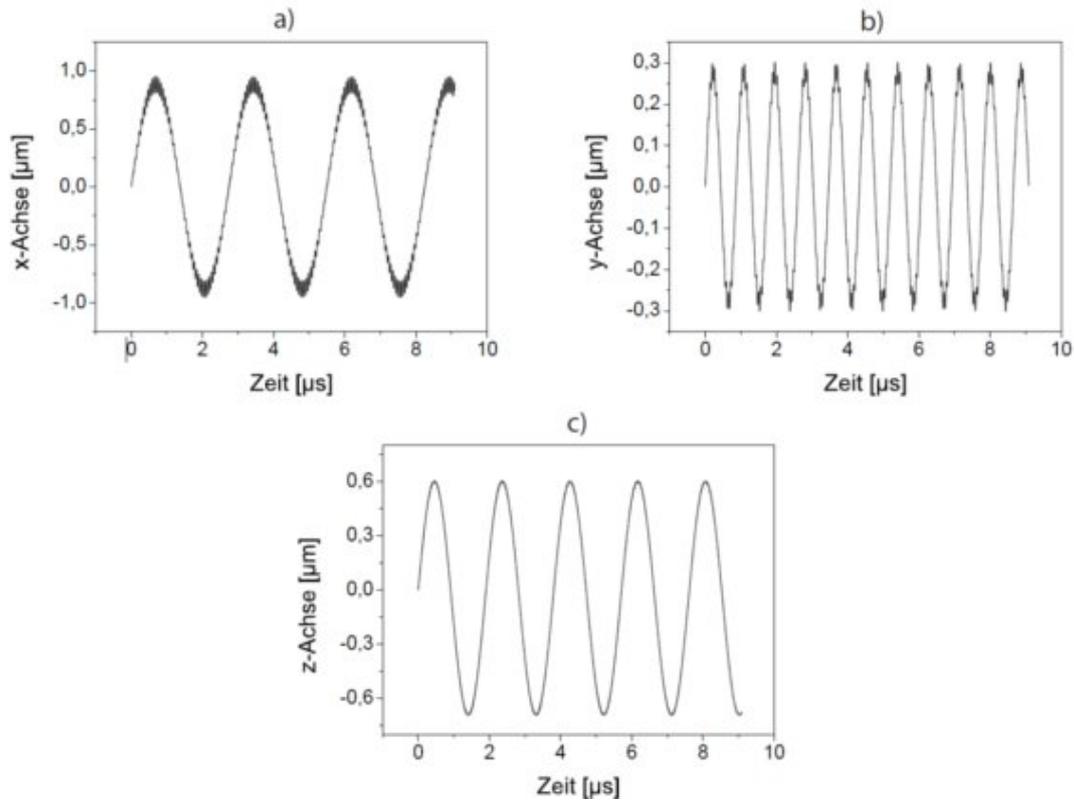


Abbildung 2.13.: Darstellung der aus der Simulation erhaltenen Trajektorien. In Abbildungen a) und b) sind die radialen Fallenachsen abgebildet, in c) sind die Axiale. Für die Simulation wird die Falle aus Abschnitt 3.4 verwendet, dabei werden folgenden Parametern ($\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 16,5 \text{ MHz}$, $V_{\text{pp}} = 200 \text{ V}$, $U_0 = -3 \text{ V}$) verwendet. Die Abbildung entspricht 50000 Schritten über eine Zeitdauer von $9,09 \mu\text{s}$.

diolfrequenzperioden andauert, was die Fehler der Methode erheblich minimiert ohne dabei den Zeitaufwand der Gaußglättung merklich zu verlängern.

Die Methode des linearen Fits liefert den größten Fehler für die Frequenz der x-Achse. Dies ist auf den stark nichtlinearen Anteil der DC-Elektroden zurückzuführen (siehe auch Abschnitt 3.3.1). Generell sind die aus den Fits erhaltenen Frequenzen stark von den betrachteten Bereichen des Potentials abhängig. Damit die vorherigen Fits den Trajektorienimulationen qualitativ entsprechen können, müsste zuerst aus der Trajektorie die Auslenkung ermittelt werden und diese als Grundlage für den Potential- oder E-Feldauschnitt dienen. Für die aus den Fits abgebildeten Werte wurde Mathematica¹¹ benutzt. Die Verwendung

¹¹Kommerzielles Programm der Firma Wolfram <http://www.wolfram.com>

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

von anderen Analyseprogrammen führt bereits zu leicht unterschiedlichen Werten, sodass auch hieraus eine Unsicherheit resultiert. Die Methode der FFT-Signalanalyse lässt sich nur mit externen Programmen zufriedenstellend realisieren und weist zugleich die größten Fehler auf. Als die am schnellsten und am einfachsten zu implementierende Variante erwies sich die Gaußglättung, welche im Folgenden für die Ermittlung der Fallenfrequenzen verwendet wird. Unterscheiden sich die Fallenachsen von den Achsen der Simulation in ihrer Ausrichtung, muss die Frequenzermittlung mittels Fit-Algorithmus erfolgen.

Nachdem nun die Methoden zur Bestimmung der elementaren Falleneigenschaften erklärt wurden, folgt eine Erläuterung des simulierten Extraktionsprozesses der Ionen. Diese Untersuchung ist für die im Kapitel 3 vorgestellten Fallen von entscheidender Bedeutung.

Simulation der Ionenextraktion

Die für die Implantation vorgesehene Ionenfalle soll im späteren Experiment in der Lage sein, Ionen auf nm-große Bereiche fokussieren zu können. Für die Planung und Konstruktion der Falle ist es daher notwendig, die sich ergebenden Extraktionseigenschaften der Falle charakterisieren zu können. Die Trajektorien-simulation bietet die Option, die Ionen über die gesamte axiale Ausdehnung der Falle zu simulieren und Auswirkungen der Geometrie auf die Flugbahn zu untersuchen. Im Experiment unterliegen die Ionen einer thermischen Verteilung, was durch die Annahme einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$w(v) \propto e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \quad (2.31)$$

berücksichtigt wird. Das Ion wird mit dieser Energie in der Falle für eine gewisse Zeit gespeichert. Die Länge dieser Speicherdauer wird zufällig festgelegt und gewährleistet unterschiedliche Ausgangsbedingungen für jeden Extraktionsvorgang. Nach Ablauf dieser Zeitspanne wird die Extraktionsspannung an die dafür vorgesehenen Elektroden angelegt (siehe Abschnitt 3.3.3). Das entstehende Potential befördert das Ion aus dem Fangbereich der Falle und beschleunigt es in die gewünschte Extraktionsrichtung. Die Trajektorien-simulation wird über die Falle hinaus ausgedehnt, sodass der Einfluss der Randbereiche der Geometrie ebenfalls berücksichtigt wird. Eine Ebene, welche sich in genügend großem Abstand zur Falle befindet, um als feldfrei aufgefasst werden zu können, dient als Simulationsende. Erreichen die Ionen diese Ebene, gilt die Extraktion als Erfolg und die Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten dieser Position werden gespeichert. Durch die mehrfache Wiederholung des Extraktionsvorgangs ergibt sich ein sogenanntes Spotdiagramm für die radiale Orts- und Geschwindigkeitsverteilung, wie in Abbildung 2.14 b) zu sehen ist.

Aus der Monte-Carlo-Simulation können die wichtigsten Eigenschaften des Ionenstrahls

2. Theorie

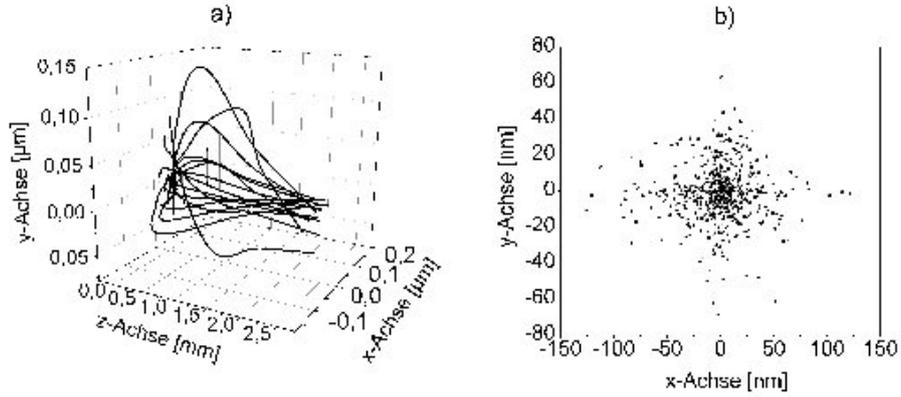


Abbildung 2.14.: a) Verlauf von 15 Trajektorien bei der simulierten Extraktion aus der Implantationsfalle. b) Entstehendes x/y Spotdiagramm. Für die Temperaturverteilung wurden 2 mK angenommen. Die verwendete Extraktionsspannung beträgt 500 V mit einer Zeitkonstanten von $\tau = 25\text{ns}$ für das Abklingen der Radiofrequenz (siehe Abschnitt 3.3.3).

bestimmt werden. Die radialen Verteilungen geben Ausdruck über die zu erwartende Spotgröße und den Divergenzwinkel. Zusammengefasst werden diese beiden Eigenschaften in der Emittanz des Ionenstrahls (siehe Abschnitt 2.2.3). Aus der Simulation ergibt sich zudem die Extraktionsgeschwindigkeit und die somit zu erwartende Energie. Außerdem können durch das mehrmalige Wiederholen der Simulation Fehler für sämtliche Größen angegeben werden. Besonders für die Extraktionsenergie ist dies ein wichtiges Maß, da diese zusammen mit der Emittanz die Qualität der Nachfokussierung bestimmt.

Emittanz

Ein bekanntes Merkmal aus der Beschleunigerphysik und Ionenphysik für die Qualität von Ionenstrahlen ist die Emittanz. Diese stellt ein Maß für die transversale Strahlenqualität dar. Die Herleitung orientiert sich an dem Buch von Hinterberger [F.Hinterberger, 2007]. Jedes extrahierte Ion wird durch einen Punkt im Phasenraum charakterisiert, welcher Ort und Impuls des Teilchens markiert. Das Produkt aus der transversalen Orts- σ_x und Impulsunschärfe $\sigma_{x'}$ misst die Emittanz des Teilchen-Ensembles.

$$E_{\text{RMS}} = \pi \sigma_x \sigma_{x'}. \quad (2.32)$$

Diese Fläche charakterisiert die Abweichung des Teilchenensembles vom gedachten Zentralteilchen. Üblicherweise ergibt sich eine Ellipsenform für die Fläche, sodass die Emittanz

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

konventionell mit einem Faktor von π multipliziert wird (siehe Abbildung 2.15). Je kleiner die Emittanz ist, desto besser lässt sich der Strahl fokussieren.

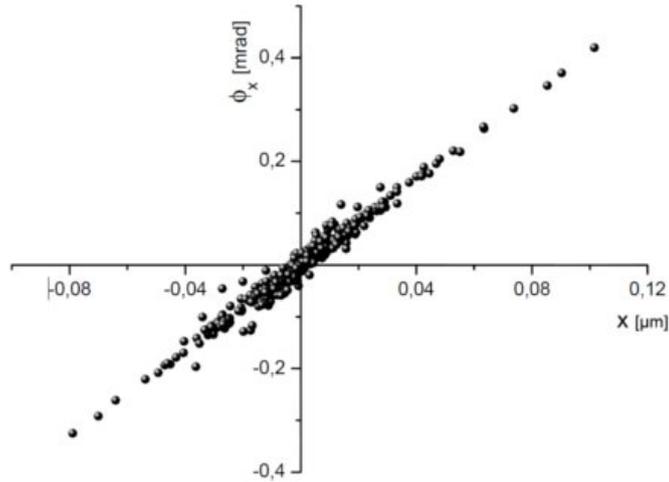


Abbildung 2.15.: Beispielplot für die Emittanz der x-Achse. Abgebildet ist die Emittanz der Implantationsfalle bei einer Extraktionsspannung von 500V und ausgeschalteter Radiofrequenz.

Im idealen Fall der Strahlenoptik ist die Emittanz eine Erhaltungsgröße. Neben der Fokussierbarkeit des Ionenstrahls gibt die Neigung der Ellipse Auskunft über ein mögliches nichtlineares Verhalten der Apparatur. In der Praxis ist es üblich, statt des Impulses den Divergenzwinkel

$$\phi_x = \arctan\left(\frac{v_x}{v_{\text{Extr}}}\right) \quad (2.33)$$

anzugeben, den das Teilchen gegenüber der Flugrichtung einschlägt. Gemessen wird die Emittanz somit in mm mrad. Man charakterisiert die radiale Phasenellipse der Emittanz durch eine symmetrische (2×2) Matrix

$$\sigma_\epsilon = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

mit positiver Determinante. σ_{11} ist die transversale Varianz des Ortes, σ_{22} die transversale Varianz des Radianzen, σ_{12} die Kovarianz. Die Gleichung für die Phasenellipse lautet somit

2. Theorie

$$X^T \sigma_\epsilon^{-1} X^T = 1. \quad (2.35)$$

X ist der Vektor vom Koordinatenursprung zum Rand der Ellipse

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

und σ_ϵ^{-1} die inverse Matrix zu σ_ϵ

$$\sigma_\epsilon^{-1} = \frac{1}{\det(\sigma_\epsilon)} \begin{pmatrix} \sigma_{22} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{21} & \sigma_{11} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Das Auflösen der Matrixgleichung 2.35 führt zu der Gleichung

$$\sigma_{22}x_1^2 - 2\sigma_{12}x_1x_2 + \sigma_{11}x_2^2 = \det(\sigma_\epsilon) = \epsilon^2. \quad (2.38)$$

Damit ergibt sich die Emittanz aus den Parametern der Ellipse über

$$E = \pi\epsilon = \pi\sqrt{\det(\sigma_\epsilon)} = \pi\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{12}^2}. \quad (2.39)$$

Geometrisch messen die Haupteinträge der Matrix die maximale Ausdehnung der Ellipse in Ort und Winkel:

$$x_{\max} = \sqrt{\sigma_{11}}, \quad \phi_{x_{\max}} = \sqrt{\sigma_{22}}. \quad (2.40)$$

Aus σ_{12} ergibt sich der Korrelationskoeffizient r_{12}

$$r_{12} = \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}}}, \quad (2.41)$$

für den gilt

$$-1 \leq r_{12} \leq +1. \quad (2.42)$$

Der Koeffizient misst die Korrelation zwischen Ort- und Divergenzwinkel. Ein von Null abweichender Korrelationskoeffizient weist auf einen linearen Zusammenhang zwischen den Größen hin. Eine perfekte lineare Korrelation liegt für die Werte -1 und +1 vor. Positive Werte entsprechen einer nach rechts verkippten Phasenellipse, was einem divergenten Strahl entspricht. Negative Werte entsprechen einer nach links geneigten Ellipse und konvergentem Strahl. Für den Fall von $r_{12} = 0$ liegt keine lineare Korrelation vor. Die Ellipse

2.2. Methoden der numerischen Analyse einer Paulfalle

zeigt keine Neigung. Diese Situation entspricht zum Beispiel der Strahlteile des Ionenstrahls während einer Driftstrecke.

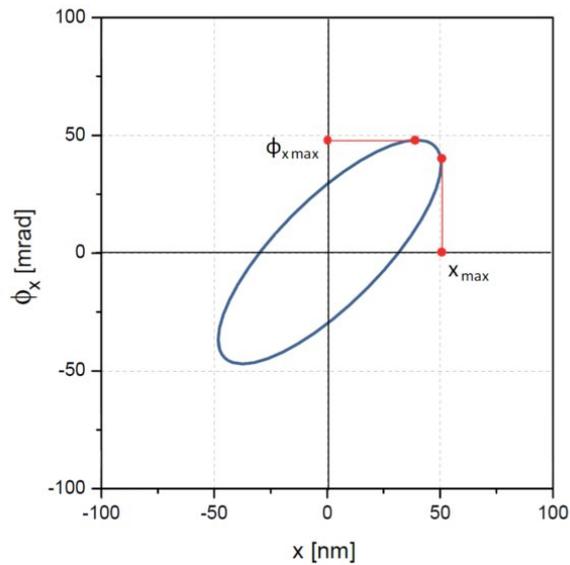


Abbildung 2.16.: Beispiel einer beschrifteten Phasenellipse.

In unserem Fall der Ionenextraktion betrachten wir einen transversalen Ionenstrahl entlang der z -Achse mit einer Ausdehnung in zwei Dimensionen (x,y). Bei der im folgenden Abschnitt zu optimierende Falle muss daher ein vierdimensionales Phasenraumvolumen E minimiert werden. Dieses besteht aus Emittanzen der einzelnen radialen Fallachsen $E_x \cdot E_y = E$. Die Emittanz wird daher in $(\text{nm mrad})^2$ angegeben. Je kleiner die Emittanz ist, desto besser lässt sich der aus der Falle erhaltene Ionenstrahl mit Hilfe einer Ionenlinse auf ein Substrat fokussieren.

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Festkörperquantensysteme bieten gegenüber Paulfallen den Vorteil der einfacheren Skalierbarkeit [(ARDA) Advanced Research and Development Activity, 2004]. Aussichtsreiche Kandidaten für die Realisierung dieser Systeme sind NV^- -Farbzentren [Wrachtrup and Jelezko, 2006], die sich aus vergleichbaren Festkörpersystemen durch ihre lange Kohärenzzeiten hervorheben [Neumann et al., 2008]. Hierbei handelt es sich um optisch aktive Stickstoff-Fehlstellen-Zentren im Diamantgitter (siehe Abbildung 3.1). Farbzentren sind auch in Naturdiamanten zu finden, so sind Stickstoff-Verunreinigungen für eine gelblich-grünliche Verfärbung verantwortlich, während eine bläuliche Verfärbung durch Bor hervorgerufen wird. Einmal erzeugt sind diese Farbzentren sehr stabil und können, im Gegensatz zu anderen Systemen, bei Raumtemperatur zur Quanteninformationsverarbeitung (QIV) genutzt werden [Jelezko et al., 2004].

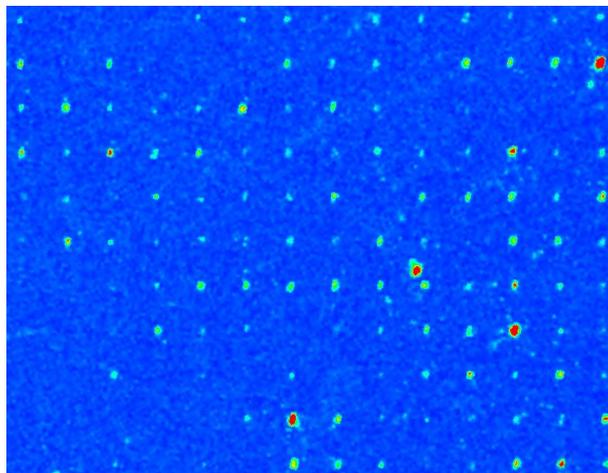


Abbildung 3.1.: Konfokale-Fluoreszenz-Mikroskopieaufnahme implantierter NV^- -Zentren. Diese Bild wurde entnommen aus [Meijer et al., 2006].

Für die wissenschaftliche Nutzung sind diese natürlich vorkommenden Systeme nicht rein genug. Fehlstellen anderer Atomsorten verursachen ungewollte Spin-Spin-Wechselwirkungen,

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

sodass auf eine künstliche Erzeugung in hoch reinen Diamanten zurückgegriffen werden muss. Die Implantation der nutzbaren Farbzentren in Diamantsubstraten unterliegt verschiedenen Kriterien, welche für die Effizienz der Erzeugung ausschlaggebend sind. Eine hohe Energie der Ionen ist erforderlich, um eine Konversionseffizienz zu erreichen. Energien von 2 MeV sind notwendig, damit eine Effizienz von mindestens 50 % erlangt werden kann [Pezzagna et al., 2010]. Darüber hinaus wird eine gewisse Eindringtiefe benötigt, um zu gewährleisten, dass die NV^- -Zentren stabil sind. Die Erzeugung muss mit einer Auflösung von wenigen Nanometern erfolgen, da die NV^- -Zentren auf einen definierten Abstand von 10 – 20 nm zueinander gebracht werden müssen, um eine Verschränkung der einzelnen Qubits miteinander zu ermöglichen [Gaebel et al., 2006].

Die bisher genutzten Methoden sind nicht in der Lage, diese Bedingungen für die Implantation von Stickstoff gleichzeitig zu erfüllen. Thermische Ionenquellen z.B. besitzen Energien im 20 keV Bereich und einen hohen Fluss von 10^3 Ionen pro Sekunde. Mittels Elektronenstrahlolithographie gefertigte Masken dienen dabei zur Einschränkung der beschossenen Bereiche. Erreichbare Auflösungen liegen im 60 nm Bereich. Bei dem Beschuss wird so ein Array möglicher NV^- Zentren gefertigt, jedoch liegt die Konversions Effizienz hierfür bei $5 \pm 2\%$. Nach Untersuchungen mittels STED-Mikroskopie konnten im Mittel $1,4 \pm 0,2\%$ NV^- -Zentren pro 60 nm großem Spot gefunden werden [Toyli et al., 2010]. Die Grenzen dieser Methode liegen klar in der Limitierung, nur wenige miteinander verschränkte Qubits zu erzeugen, und in dem zeitaufwendigen Suchverfahren, diese zu finden. Die Paulfalle als Ionenquelle hingegen ist theoretisch in der Lage, die notwendigen Kriterien bzgl der Auflösung zu erfüllen [Meijer et al., 2006, Meijer et al., 2008]. Zudem ermöglicht sie eine deterministische Implantation, sodass eine aufwendige nachträgliche Untersuchung und Detektion des Targetmaterials reduziert werden kann. Gefangene Ionen können mittels Laserkühlung in eine optimale Ausgangssituation für die Extraktion gebracht werden. Da die Ionen in der Paulfalle bis in den Grundzustand der Bewegung gekühlt werden können, stellt sie eine ideale Punktquelle dar. In Kombination mit einer entsprechenden Ionoptik führt dies zu einer nm bis sub-nm Auflösung der Ionenplatzierungen auf dem Targetmaterial. Das System bestehend aus Paulfalle und Einzellinse ist nicht auf die Implantation von Stickstoff oder spezielle Substrate beschränkt, unterschiedliche Ionensorten können für die Dotierung ähnlicher Systeme verwendet werden.

Bevor auf die im Rahmen dieser Diplomarbeit durchgeführten Simulationen zur Entwicklung der nächsten Generation von Paulfalle eingegangen wird, soll eine kurze Zusammenfassung über das bestehende System gegeben werden. Ebenso werden die Gründe aufgeführt, welche uns dazu bewogen haben, eine neue Falle zu planen.

3.1. Implantationssystem der PCB-Falle

Die bereits in der Arbeitsgruppe zur Implantation verwendete Falle wurde mit dem in der Industrie etablierten Platinenätzverfahren¹ gefertigt. Die Falle, im Folgenden als PCB-Falle bezeichnet, besteht im Wesentlichen aus vier identischen Fallenflügeln, welche in einer Kreuzgeometrie zueinander angeordnet sind. Jeder Flügel besitzt neben den auf den Flächen aufgetragenen DC-Elektroden eine auf der vorderen Kante verlaufende Radiofrequenzleiterbahn, welche im Folgenden als RF-Rail bezeichnet wird. Dieses Design entspricht der Grundgeometrie einer Rail-Kreuzfalle (siehe auch Abschnitt 3.3).

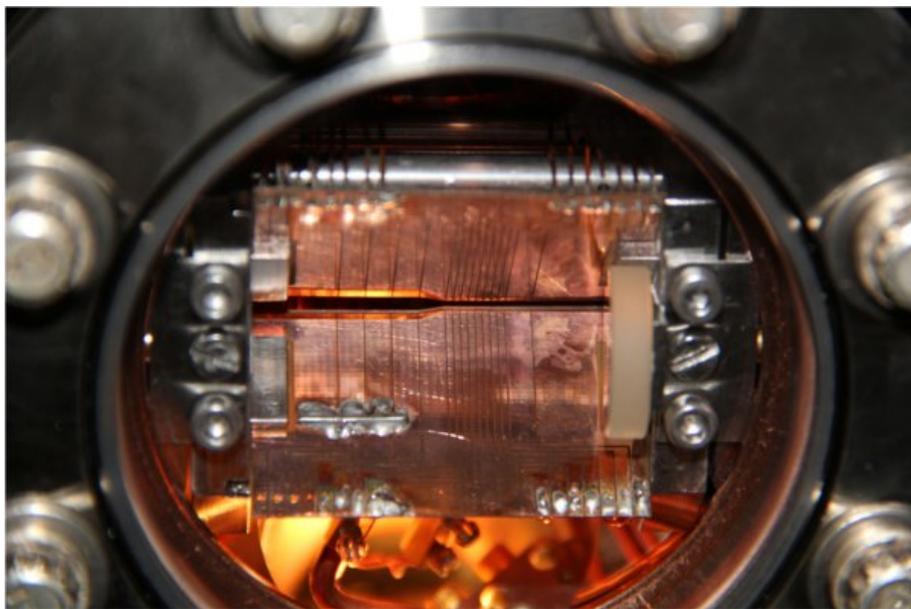


Abbildung 3.2.: Fotografie einer PCB-Falle im experimentellen Aufbau. Die einzelnen Elektroden und ihre Abtrennung gegenüber der Rail sind gut ersichtlich durch die dunkle Isolation. Die Abmaße eines Flügels betragen: Länge ca. 65 mm, Höhe ca. 24 mm und Dicke von 436 μm (Substrat + Leiterflächen).

Das Foto der Falle in Abbildung 3.2 verdeutlicht die Geometrie. Die Fallenflügel sind in zwei Arbeitsregionen mit unterschiedlichen Flügelabständen aufgeteilt. Die Laderegion besitzt einen Abstand von 4 mm und Segmente mit einer Breite von 2,8 mm. Die Prozessorregion hat einen kleineren Abstand von 2 mm und 700 μm breite Segmente. Im Betrieb der Falle wird die Prozessorregion zum Laden, Messen und Extrahieren genutzt. Auf eine nähere Beschreibung der Laderegion wird daher verzichtet. Für den axialen Einschluss werden zwei, durch fünf Segmente getrennte DC-Elektroden auf 35 Volt gelegt. Auf zwei gegenüberlie-

¹Englischer Fachausdruck **Printed Circuit Board**, Abgekürzt *PCB*

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

genden Rails wird eine Radiofrequenz von $\omega_{\text{Falle}}/2\pi = 12,511$ MHz mit einer Spannung von $400 V_{\text{pp}}$ gegeben. Die verbleibenden beiden Rails werden zur Kompensation mittels einer DC-Spannung genutzt.

Die Falle erreicht im Normalbetrieb Fallenfrequenzen von $\omega_{\text{radial}}/2\pi = 431,65$ kHz und $\omega_{\text{axial}}/2\pi = 295$ kHz. Die Segmentierung der Elektroden ermöglicht sowohl das Transportieren einzelner Ionen, als auch das von Ionenkristallen [Huber et al., 2008]. Der Trennvorgang und das Wiedervereinen von Ionenkristallen wurden im Verlauf der vorherigen Diplomarbeit von Stefan Ulm [Stefan Ulm, 2010] automatisiert. Mit wiederholten Messungen konnte gezeigt werden, dass die Erfolgswahrscheinlichkeit für diese Prozesse 95 % beträgt [Eble et al., 2010]. Die Verwendung einer Mehrphotonenionisation ermöglicht das Laden verschiedener Elemente (siehe auch Abschnitt 3.2.3). Legt man an den ionennahen Elektroden eine Wechsellspannung an, besteht die Möglichkeit die Ionen zur Schwingung anzuregen. Anhand der Resonanzfrequenz können Ionensorten identifiziert werden, die über keine geeigneten optischen Übergänge verfügen oder für die in unserem Aufbau kein Laser vorhanden ist [Stefan Ulm, 2010]. Auf diese Weise gelingt es, gezielt Ionensorten für die spätere Extraktion auszuwählen und durch angepasste Fallenpotentiale Ionenkristalle beliebiger Länge zu präparieren. Entsprechende Messungen wurden von Georg Jacob durchgeführt [G. Jacob, 2010].

Derart präparierte Ionen werden durch eine an benachbarte Segmente angelegte Hochspannung aus der Falle heraus befördert (für weitere Erklärung siehe Abschnitt 3.3.3). Mit Hilfe eines Sekundärelektronenvervielfachers² konnte der Nachweis der Funktionalität des Extraktionssystems erfolgen [Schnitzler et al., 2009]. Die ersten entsprechenden Messungen wurden von Wolfgang Schnitzler im Verlauf seiner Doktorarbeit durchgeführt, aus diesen ergab sich eine mittlere Geschwindigkeit für extrahiertes $^{40}\text{Ca}^+$ von $19,47$ km/s mit einer 1σ -Abweichung von $6,3$ m/s. Die einzelnen Messungen ermöglichen außerdem das Identifizieren verschiedener Elemente anhand ihrer Flugzeit [Schnitzler et al., 2009]. Zur Erweiterung des Aufbaus wurde eine Einzellinse eingebaut und eine Vermessung der sich ergebenden radialen Verteilung vorgenommen. Aus den Messungen ergab sich ein 1σ -Radius von $(4,6 \pm 1,3)$ μm [G. Jacob, 2010, Fickler, 2009]. Im Verlauf dieser Arbeiten wurden mehrere Verbesserungsmöglichkeiten des bestehenden Systems offensichtlich. Diese ergaben sich aus Limitierungen die nun kurz näher ausgeführt werden sollen.

²AF553,ETP electron multipliers, Ermington, NSW Australien

3.1.1. Experimentelle Limitierungen der Leiterplatten(PCB)-Falle

Aufgrund der niedrigen Fallenfrequenzen der PCB-Falle sind fortgeschrittene Kühlmetho- den nur bedingt möglich (siehe auch 3.2.1). Mittels Dopplerkühlung, welche in der Falle realisiert werden konnte, erreicht man Iontemperaturen von etwa 2 mK. Durch niedri- gere Temperaturen beziehungsweise grundzustandsgekühlte Ionen kann die Spotgröße re- spektive die Emittanz des Ionenstrahls erheblich verbessert werden (siehe Abschnitt 3.4.4 und [Fickler, 2009]). Kleinere Geometrien bieten den Vorteil, steife Potentiale zu ermög- lichen ohne den Einsatz experimentell nicht zugänglicher höherer Spannungen. Aufgrund der Dimension und des als Leiter verwendeten Kupfers kommt es im längeren Betrieb der PCB-Falle zu thermischen Drifts der Ionen. Diese Drifts machen es erforderlich, neue Fang- und Kompensationsspannungen im Laufe eines Experimentes festzulegen, was die Reproduzierbarkeit eines Extraktionsvorgangs mindert [Wolfgang Schnitzler, 2010]. Wäh- rend der Vermessung des Strahlfokus mittels Lochblende wurde ein Driften des Strahls um $15 \mu\text{m}/\text{min}$ detektiert [Fickler, 2009]. Die Nutzung der Mehrphotonenionisation bietet die Möglichkeit, verschiedene Elemente in die Falle zu laden, gleichzeitig entstehen durch den Einsatz des hierfür notwendigen gepulsten Lasers (siehe Abschnitt 3.2.3) statische Aufladungen der isolierenden Oberflächen. Diese Aufladungseffekte machen es notwendig, nach jedem Ladevorgang die Ionen neu in der Falle zu kompensieren, um die entstehen- de Mikrobewegung zu minimieren [Wolfgang Schnitzler, 2010]. Dies führt zu immer neuen Ausgangsbedingungen für die Extraktion und verhindert genau wie die thermischen Drifts einen reproduzierbaren Extraktionsvorgang und somit eine exakte Fokussierung. Die star- ken Effekte der Aufladung sind vor allem auf die sich zwischen den DC-Elektroden und der RF-Rail befindliche Isolation zurückzuführen. Bei dem neuen Design ist daher darauf zu achten, solche, der Fangposition des Ions nahen Isolationsbereiche zu vermeiden (siehe Abbildung 3.3).

Die Nutzung der Fallensegmente für die Extraktion, limitiert die Extraktionsspannungen auf unter 1000 V, um Spannungsüberschläge auf dem Fallenflügel und den Kontaktierungen zu vermeiden. In der bisherigen Paulfalle konnten daher lediglich Energien von 80 eV bei der Extraktion von Calcium Ionen nachgewiesen werden [Wolfgang Schnitzler, 2010]. Dies führte zu der Entwicklung einer Nachbeschleunigungslinse von Georg Jacob aus unserer Arbeitsgruppe. Mit dieser Erweiterung kann der Bereich von 1 – 4 kV mit der PCB-Falle erschlossen werden. [G. Jacob, 2010]. Die neue Ionenfalle sollte diese Energien selbstständig erreichen, um eine größere Flexibilität des Aufbaus zu erreichen. Eine prinzipielle Fehlau- srichtung der Ionenfalle gegenüber der Einzellinse und des Substrates ist nicht zu vermeiden, weshalb eine Ablenkvorrichtung vonnöten ist, um dies nachträglich korrigieren zu können. Bisher wurden hierfür die Endelektroden der PCB-Falle verwendet, was sich als unprak-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

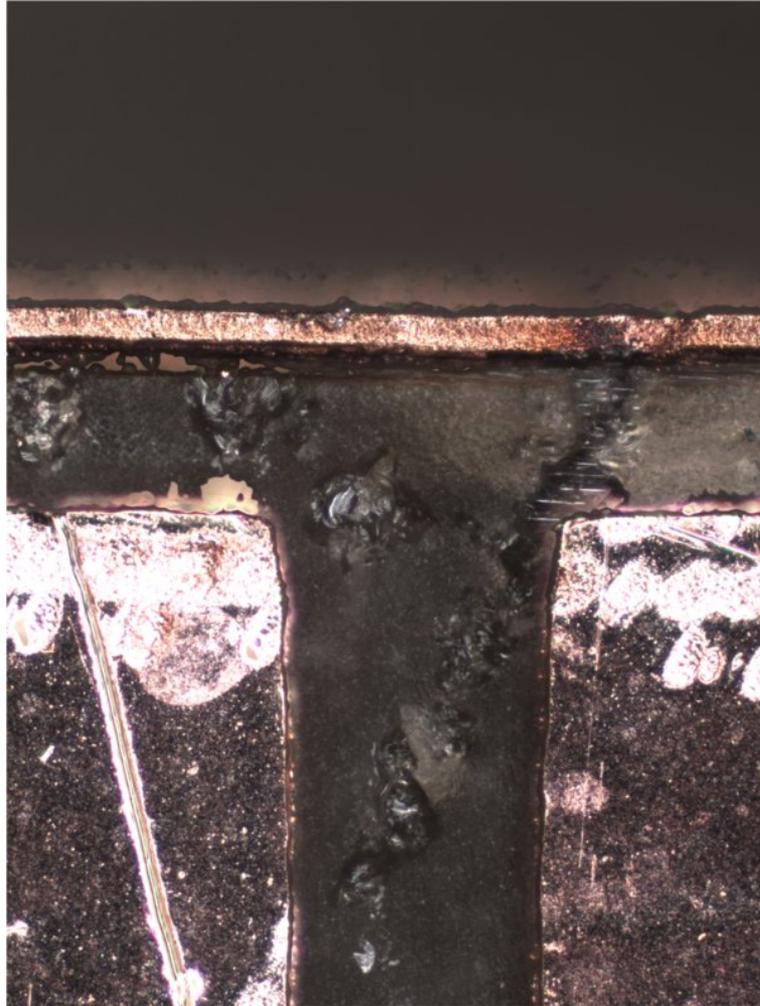


Abbildung 3.3.: Mikroskop Multifokus-Aufnahme der Vorderkante eines Fallenflügels. Deutlich zu erkennen sind die Spuren des gepulsten Lasers, welche auf dem Isolatormaterial hinterlassen wurden. Bei dem auf dem Foto gezeigten ausgebauten Fallenflügel kam es durch das Entfernen des Isolatormaterials auch zu einem Ablösen der RF-Leiterbahn, was den Flügel irreparabel beschädigte.

tikabel erwies und zu einer Verschlechterung der Strahlqualität führte [Fickler, 2009]. In der nächsten Generation muss daher ein neues System für eine μm -genaue Halterung der Falle gefunden werden, welches diese Justagefehler minimiert und eine andere Methode der Strahlkorrektur erlaubt (siehe Abschnitt 3.5). Diese und weitere Anforderungen an das neue Design werden im kommenden Abschnitt besprochen.

3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle

Der experimentelle Betrieb der PCB-Falle zeigte Probleme und Verbesserungsmöglichkeiten, welche nur durch eine Neuentwicklung der Ionenfalle behoben werden können. Dazu gehören die niedrigen Fallenfrequenzen, thermische Drifts und statische Ladungen. Jedes dieser zu vermeidenden Probleme kann durch spezielle Herstellungsverfahren minimiert oder durch Wahl geometrischer Einschränkungen behoben werden. Die Anforderungen und die daraus resultierenden Bedingungen für den Bau der neuen Falle sind zur besseren Übersicht in Tabelle 3.1 aufgelistet.

Anforderung	Lösung
<ul style="list-style-type: none"> - Verkleinerung der Geometrie - Hohe Materialpräzision - Temperaturstabilität - Segmentierung der Elektroden 	Keramikkbauweise
<ul style="list-style-type: none"> - Guter optischer Zugang - Segmentierung - Wenig Isolatorflächen 	Optimale Fallengeometrie
<ul style="list-style-type: none"> - DC-Kontrollspannungen im Spannungsbereich von 0 bis 40 V - Höhere Fallenfrequenzen im Bereich > 1 MHz 	Verkleinerung der Geometrie in den μm Bereich
<ul style="list-style-type: none"> - Deterministische Extraktion - Höhere Extraktionsenergien 	Optimale Fallengeometrie für Segmentextraktion oder Extraktion mittels Endkappe (siehe Abschnitt 3.3.3)

Tabelle 3.1.: Übersicht der Anforderungen und möglichen Lösungen.

Ein maßgebliches Ziel sind höhere axiale wie radiale Fallenfrequenzen, die Vorteile auf den Kühlvorgang der Ionen werden im nächsten Abschnitt dargelegt.

3.2.1. Fallenfrequenzen und Laserkühlmethoden

Die von uns eingesetzten Lasersysteme sind auf die Übergänge von Calcium ($^{40}\text{Ca}^+$) ausgelegt. Anhand des in Abbildung 3.4 gezeigten Termschemas kann erkannt werden, dass hierfür drei Laser notwendig sind.

Der für die Dopplerkühlung wichtigste Übergang ist der Dipolübergang $4^2S_{1/2} \rightarrow 4^2P_{1/2}$ mit einer Wellenlänge von 397 nm. Die kurze Lebensdauer von 8 ns erlaubt eine hohe Photonenstreurrate und gestattet es, diesen als Kühlübergang zu verwenden. Zwei weitere Laser mit den Wellenlängen 866 nm und 854 nm sind für das Rückpumpen in die kurzlebigen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

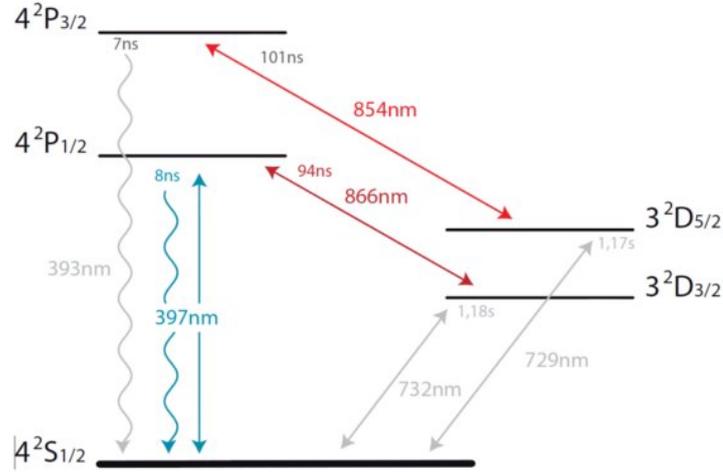


Abbildung 3.4.: Termschema von $^{40}\text{Ca}^+$. Die für die Kühlung relevanten Niveaus wurden farblich hervorgehoben. Das Termschema wurde aus [Fickler, 2009] entnommen.

Niveaus notwendig um den Kühlvorgang aufrecht erhalten zu können. Die durch die Doppelerkühlung minimal erreichbare Temperatur T_{\min} , wird bestimmt durch das energetische Gleichgewicht aus gewonnener und emittierter Photonenenergie. Beeinflusst wird diese durch die Linienbreite, der für die Kühlung notwendigen Niveaus, die Laserintensität und den Einstrahlwinkel zur Quantenisierungsachse des Systems [Leibfried et al., 2003]. Die Messungen in der PCB-Falle konnten zeigen, dass die tiefste durch Dopplerkühlung zu erreichende Iontemperatur bei ~ 2 mK liegt [Fickler, 2009]. Für die erreichbaren Zustände kann eine thermische Verteilung der Phononen

$$p_n = \frac{\bar{n}^n}{(\bar{n} + 1)^n + 1} \quad (3.1)$$

innerhalb jeder Fallenachse angenommen werden.

$$\bar{n} = \frac{k_B T_{\min}}{\hbar \omega_{\text{Falle}}} \quad (3.2)$$

beschreibt die Anzahl der mittleren Phononen pro Fallenachse. Zwischen der mittleren Phononenzahl und der Fallenfrequenz der jeweiligen Achse liegt somit ein antiproportionaler Zusammenhang vor. Rechnet man diesen für die PCB-Falle aus, ergibt sich für die axiale Fallenachse ($\omega_{\text{axial}}/2\pi = 295$ kHz) ein Wert von \bar{n} von 30. Der geplante Schritt in den Fallenfrequenzbereich von über 1 MHz sollte eine Verkleinerung der mittleren Pho-

nonenzahl um einen Faktor von 3 bis 5 bringen. Bereits ab einer Fallenfrequenz von $\omega_{axial}/2\pi = 1,5 \text{ MHz}$ erhält man eine mittlere Phononenanzahl von $\sim 6,4$. Eine Erhöhung der Frequenzen geht einher mit einem größeren Energieabstand der einzelnen quantelten Schwingungszustände in der Falle. Umgekehrt führt dies zu einer geringeren Phononendichte, in den durch reine Dopplerkühlung erreichbaren Zuständen. Eine geringe Phononendichte ist notwendig, um die Heizraten zu minimieren und somit eine stabile Ausgangssituation für Implantation in der Falle zu gewährleisten.

Neben der Dopplerkühlung soll als weitere Kühlmethode das Seitenbandkühlen zu Verfügung stehen und somit die Möglichkeit, in den Grundzustand der Fallenmode zu gelangen. Die Realisierung dieser Kühlmethode hängt entscheidend vom Auflösen der Seitenbänder der Fallenniveaus im Spektrum der Ionen und dem Erreichen des sogenannten Lamb-Dicke-Regime ab [Schulz et al., 2008]. Dieses Regime kann nur durch eine zuvor erfolgte Dopplerkühlung erreicht werden und wird gekennzeichnet durch $\eta^2(2\bar{n} + 1) \ll 1$. Als Lamb-Dicke-Parameter wird $\eta = \sqrt{\frac{\omega_{\text{Rückstoß}}}{\omega_{\text{Falle}}}}$ bezeichnet, welcher den Überlapp zweier harmonischer Oszillatorzustände nach der Streuung eines Photons angibt. Eine Erhöhung der Fallenfrequenzen führt zu einer Verringerung dieses Parameters und vereinfacht somit zusätzlich mit der niedrigeren Phononenanzahl die Anwendung der Seitenbandkühlung in der Falle. Der Wunsch höherer Fallenfrequenzen für das Erreichen des Lamb-Dicke-Regimes lässt zwei Optionen offen. Zum einen können die Spannungen mit denen die Falle betrieben wird erhöht werden, zum anderen kann die gesamte Struktur verkleinert werden. Die erste Möglichkeit scheidet an der Bedingung der Spannungsstabilität und Präzision. Für die bestehende Falle müssten Spannungen im Kilovolt-Bereich verwendet werden, um entsprechende Frequenzen zu erreichen. Um im elektronisch leicht erschließbaren Bereich von 0 bis 40 V zu bleiben, ist eine Miniaturisierung der Fallengeometrie nötig.

3.2.2. Herstellungsmöglichkeiten einer Mikropaulfalle

Der Wunsch nach höheren Fallenfrequenzen zwingt zu einer Verkleinerung der Geometrie und zu Herstellungsverfahren jenseits der klassischen Materialbearbeitung. Im Bereich der Mikromaterialbearbeitung stehen Verfahren wie das Senk- oder Drahterodieren, Photolithographie oder die Lasermikrobearbeitung zu Verfügung. Nicht jede dieser Herstellungsmethoden eignet sich für die Fertigung der notwendigen Fallenstrukturen. Ein Haupthindernis stellen die segmentierten Elektroden dar (siehe auch Abschnitt 3.3.1). Senk- und Drahterodieren ermöglichen die präzise Verarbeitung einer Vielzahl von leitenden Materialien. Die einzelnen Elektroden könnten in diesem Verfahren leicht gefertigt werden, jedoch nur die Elektroden und nicht die sie gegeneinander isolierende Halterung. Daraus ergibt sich das Problem, eine Halterung in einem weiteren Verfahren zu fertigen, welche die Finger

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

ausrichtet und gleichzeitig die Kontaktierung ermöglicht. Die Risiken der Fehlmontage, die sich somit allein aus der Fertigung eines Fallenflügels ergeben, sind zu groß, um diese Methode weiter zu verfolgen. Die Kombination von Lithographie und Ätztechniken wird bereits erfolgreich zur Herstellung von planaren Paulfallen eingesetzt [Salvador, 2008]. Die Vorteile dieser Technik liegen in der präzisen Fertigung komplexer planarer Strukturen und in der prinzipiell einfachen Skalierbarkeit. Die Fertigung von dreidimensionalen freitragenden Strukturen ist jedoch mit erheblichem Aufwand verbunden, sodass komplett vergoldete Elektrodenfinger, welche mit dem Trägersubstrat und getrennten Leiterbahnen verbunden sind, sich als zu aufwendig erweisen. Die für unser Vorhaben ideale Technik ist die Laserbearbeitung, welche im Folgenden eingehender erklärt wird.

Laserbearbeitung

In vielen Bereichen der Werkstoffverarbeitung haben sich Laser als effektives Werkzeug etabliert. Der Bereich der Mikrostrukturierung war jedoch lange Zeit nicht zugänglich. Kontinuierliche Laser oder Laser mit Pulsen im Nanosekundenbereich ermöglichten keine präzise reproduzierbare Verarbeitung der Materialien. Nanosekunden lange Pulszüge, welche auch von dem von unserer Gruppe zur Photoionisation verwendeten Nd:YAG Laser (siehe Abschnitt 3.2.3) emittiert werden, erzeugen beim Einwirken auf das Material unterschiedliche Effekte. Es kommt zu Aufschmelzungen, thermischen Spannungen, welche zu Grat- und Rissbildungen führen, und dem Abplatzen von Schichten [Nolte et al., 1999]. Dies beschränkt die erreichbaren Abmessungen im Fall von Metallen auf ca. 10 μm . Durch die Erschließung des Piko- und Femtosekunden Bereichs für die Dauer der Laserpulse ändert sich dieser Umstand. Der hierdurch erzielte Gewinn der Auflösung beträgt zwei Größenordnungen. Durch die kurze Pulseinwirkung wird das Material direkt in ein Plasma überführt und es kommt zur Ausbildung einer definierten Schnittkante. Während sich mit pikosekunden langen Laserpulsen vorwiegend dünne Metalle und Halbleiter bearbeiten lassen, eignen sich die femtosekunden langen Pulse zur Bearbeitung von nahezu allen Materialien. Für den Fallenbau ergibt sich damit die Möglichkeit Keramiksubstrate¹ zu verwenden. Aluminiumoxid bietet sich aufgrund seiner physikalischen Eigenschaften an, als Träger für die Leiterbahnen verwendet zu werden. Es besitzt einen hohen spezifischen Widerstand ρ von 10^{12} Ohm, sodass eine Isolation zwischen Leiterbahnen auf beiden Seiten des Substrates besteht. Der Ausdehnungskoeffizient liegt im Bereich von $6,5-8,9 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$, was thermische Drifts der Falle minimiert. Eine hohe Biegefestigkeit ermöglicht lange freitragende Strukturen, wie sie für die einzelnen Elektroden benötigt werden. Nicht zuletzt

¹Al₂O₃ mit einer Reinheit von 99,6 %

3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle

ist es aufgrund seiner hohen Reinheit Ultrahochvakuum²-tauglich. Die Laserbearbeitung der Substrate erlaubt, neben dem Schneiden der Struktur, auch das Bohren von Löchern. Zudem kann auf die Keramik aufgebrachtes Gold gezielt entfernt werden. Trotz der theoretisch guten Voraussetzungen ist es notwendig, die Laserbearbeitung auf das zu verwendende Material abzustimmen. Zu hohe Pulswiederholungsraten können Schäden wie Brüche oder Risse verursachen. Eine stabile und präzise Halterung ist notwendig, um ein gutes Schnittmuster zu garantieren, und Testschnitte werden benötigt, um die zu verwendende Intensität, Arbeitsabstände und weitere Parameter festzulegen. Die Optimierung der Bearbeitung wurde bereits in Zusammenarbeit von Frank Korte³ und Stefan Schulz zur Herstellung der Mikrofalle durchgeführt und stellt daher ein bewährtes System dar. Ein optimales Ergebnis für die Präzision wurde für ein Substrat mit einer Dicke von 125 μm erzielt. Dünnere Substrate sind mit einem großen Fehler der Oberflächenrauigkeit verbunden. Die für die Herstellung geeigneten Bereiche müssten mit einem Profilometer zuerst untersucht und markiert werden. Dicke Substrate erleiden bei der Laserbearbeitung einen höheren Fehler aufgrund der Fokaleigenschaft des Lasers. In unserem Fall wird die Laserbearbeitung einseitig vorgenommen, da die Halterung kein Drehen des Keramiksubstrates erlaubt. Der Laserfokus liegt zu Beginn der Bearbeitung auf der Oberfläche des Substrates. Während der Bearbeitung wird der Fokus systematisch durch das Substrat gefahren, um einen sauberen Schnitt zu ermöglichen. Das Aufweiten der Strahltaile sorgt somit dafür, dass sich auf der Oberfläche des Substrates eine größere Schnittfläche ergibt als auf der Unterseite. Bei einer Substratdicke von 125 μm liegt die obere Kante ca. 7 μm hinter der unteren. Für dickere Substrate ergeben sich größere Abweichungen, welche die Elektrodenstruktur negativ beeinflussen. Durch die enorme Energiekonzentration des Lasers bildet sich beim Entfernen der Keramik ein Plasma, welches das gesamte über ihm befindliche Material mit abträgt. Das sich hieraus ergebende Schnittmuster ähnelt dem einer Trompete (siehe Abbildung 3.5). Dies limitiert diese Bearbeitungsmethode auf Substrate bis zu einer Dicke von 125 μm . Die kleinste durch die Laserbearbeitung reproduzierbare Struktur beträgt 30 μm . Dies wird verwendet, um die einzelnen Elektroden mit Hilfe von Schnitten durch die Keramik voneinander zu trennen (siehe Abbildung 3.5).

Auf die geschnittene Keramik wird eine ~ 100 nm dicke Titanschicht als Haftschrift für die folgende ~ 500 nm dicke Goldschicht aufgedampft (Die genauen Schichtdicken befinden sich noch in der Erprobung). Diese leitenden Ebenen können in einem weiteren Laserbearbeitungsschritt gezielt sublimiert werden, sodass die gewünschte Leiterbahnstruktur produziert wird. Durch die Kombination von Keramiksubstraten und zugeschnittenen Gold-

² Abgekürzt UHV, Druckbereich 10^{-7} bis 10^{-12} mbar

³ Geschäftsführer der Micreon GmbH Hannover <http://www.micreon.de>

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

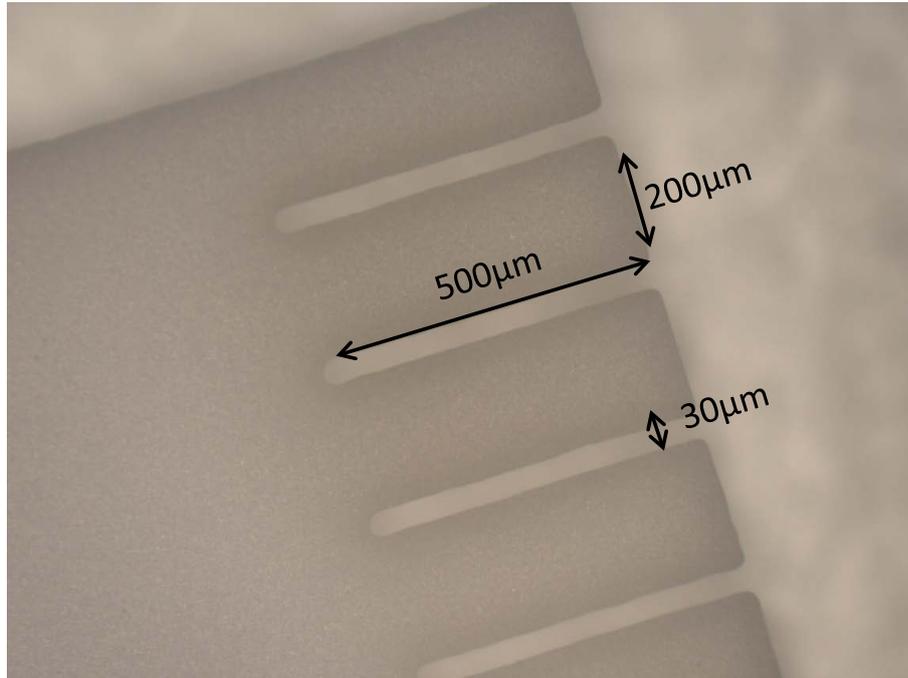


Abbildung 3.5.: Mikroskopaufnahme der aus der Keramik herausgeschnittenen Fallenelektroden.

leiterbahnen ist es möglich, getrennte Elektroden mit hohem Aspektverhältnis zu fertigen. Die einzelnen Elemente sind flexibel anordenbar und besitzen dank der Keramik eine hohe Stabilität, sodass eine Vielzahl an Paulfallegeometrien realisiert werden kann. Eine Limitierung ergibt sich aufgrund des optischen Zugangs, welcher unter anderem für das im nächsten Abschnitt vorgestellte Ionisationsverfahren wichtig ist.

3.2.3. Bestimmung der Limitierungen durch den Nd:YAG Ionisations-Laser

Zwei Ionisationsarten kommen in den von uns verwendeten Fallen zum Einsatz. Zum einen wird die für die Falle ungefährliche resonante Photoionisation, kurz REMPI (vom englischen Ausdruck *Resonance Enhanced Multi-Photon Ionisation*) genutzt. Für weitere Information wird auf [Kjaergaard et al., 2000] verwiesen. Zum anderen, um in der Wahl der Ionensorte flexibel zu sein, wird die Ionisation per Mehrphotonenübergang ins Kontinuum verwendet. Hierfür wird ein gepulster, frequenzverdoppelter Nd:YAG Laser⁴ verwendet. Der Laser wird bei einer Wellenlänge von 532 nm genutzt, bei der er laut Herstellerangaben eine Pulsenergie von 12 mJ und eine Pulsdauer von 3-5 ns aufweist. Über einen Schiebereg-

⁴Minilite 1 von Continuum

3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle

ler auf der Oberseite des Gehäuses ist man in der Lage, die Energieeinstellung des Lasers mittels eines Dämpfungsgliedes zu regulieren. Außerdem verfügt der Laser zusätzlich über einen niedrigenergie-Modus („Low Energie Modus“), welcher die emittierte Leistung weiter herabsenkt. Bei gewöhnlicher Photoionisation muss die Energie des Photons mindestens der Bindungsenergie des Elektrons entsprechen. Durch die hohe Photonendichte des gepulsten Lasers sind Mehrphotonenübergänge ins Kontinuum möglich. Diese Ionisation ist im Gegensatz zur REMPI weniger abhängig von internen Übergängen des Atoms. Die n -fache Photonenkombination muss lediglich genug Energie aufweisen, um das Elektron ins Kontinuum anzuheben. Die verbleibende Energie wird in kinetische Energie umgewandelt. Neben der erwünschten Atomsorte werden jedoch auch Fremdatome aus dem Restgas ionisiert. Darüber hinaus kommt es bei jedem Ladevorgang zu Aufladungseffekten der Isolatorflächen. Diese Streuladungen verursachen Feldfehler und machen es notwendig, das Ion neu zu kompensieren. Ein weiterer negativer Effekt tritt beim Ausrichten des Lasers auf. Bereits bei einer leicht fehlerhaften Justierung kann es zu Beschädigungen der Fallenflügel kommen (siehe auch Abbildung 3.3).

Um sich in der nächsten Generation vor entsprechenden Effekten schützen zu können, wurde der Strahldurchmesser und die Auswirkungen verschiedener Energieeinstellungen des gepulsten Lasers mittels einer Materialprobe vermessen. Der experimentelle Aufbau ist in Abbildung 3.6 gezeigt.

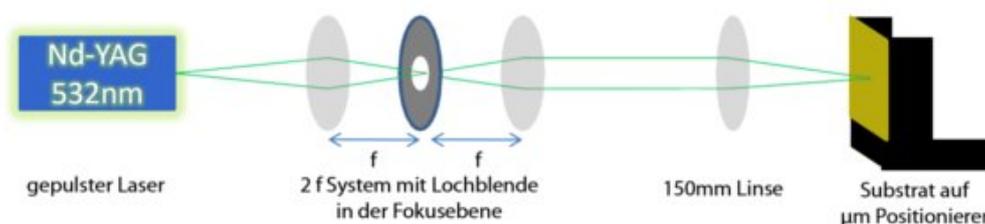


Abbildung 3.6.: Skizze des Messaufbaus für die Vermessung des Nd:YAG Laser. Um die Strahlqualität zu verbessern, wird der aus dem Laser kommende Puls zuerst durch einen Teleskopaufbau geschickt. In der Fokusebene des Teleskops befindet sich eine verstellbare Lochblende. Die Fokussierung auf das Substrat erfolgt mit einer 150mm Linse, welche auch im späteren Experiment verwendet werden wird.

Mit dem Prinzip der Fourieroptik lässt sich dieser Aufbau leichter verstehen. Der an der ersten Linse einfallende Strahl wird in seine parallelen Wellenfrontanteile zerlegt. Jede unter einem anderen Winkel einfallende parallele Wellenfront wird durch die Linsen in eine Parabolwelle transformiert, welche ihren Ausgangspunkt in der Fokalebene hat. In dieser

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Ebene ist die Blende positioniert. Somit wird jeder Einfallswinkel in einen Punkt auf der Blende übersetzt $(x, y) = (\theta_x f, \theta_y f)$. Liegt dieser Ausgangspunkt auf der Blende, wird der Anteil des unter diesem Winkel einfallenden Lichtes entfernt. Die zweite Linse, welche ihren Fokus ebenfalls auf der Blende hat, transformiert die Parabolwellen wieder zurück in parallele Wellenfronten. Je kleiner die verwendete Blendenöffnung ist, desto besser lässt sich der Strahl mit der finalen Linse auf dem Substrat fokussieren.

Zur Messung wird der Laserstrahl mittels einer 150 mm Linse auf ein mit Gold bedampftes Keramiksubstrat fokussiert. Die Schichtdicke des Golds beträgt in etwa 500 nm, die der Keramik 125 μm . Das gleiche Material soll zum Bau der späteren Falle verwendet werden und dient daher als Untersuchungsgrundlage (siehe auch Kapitel 3.2.2). Das Substrat ist auf einem μm Positioniertisch befestigt, sodass einzelne Punkte entlang des Strahls aufgenommen werden können.

In der ersten Messung sollen die Auswirkungen der Laserpulse auf den Goldfilm untersucht werden. Die Messung startet im „Low“ Powermodus auf der niedrigsten Einstellung, pro Energieeinstellung werden sechs Messungen durchgeführt. Es werden jeweils ein, zwei bzw. fünf Schüsse mit langer Zeitdauer zwischen den einzelnen Pulsen abgegeben. Drei weiteren Messungen werden bei jeweils 2s, 10s und 30s im Dauerbetrieb aufgenommen. Das auf diese Weise erstellte Array aus Messpunkten wurde mit dem Mikroskop⁵ vermessen.

⁵Leica DM 4000M www.leica-microsystems.com

3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle

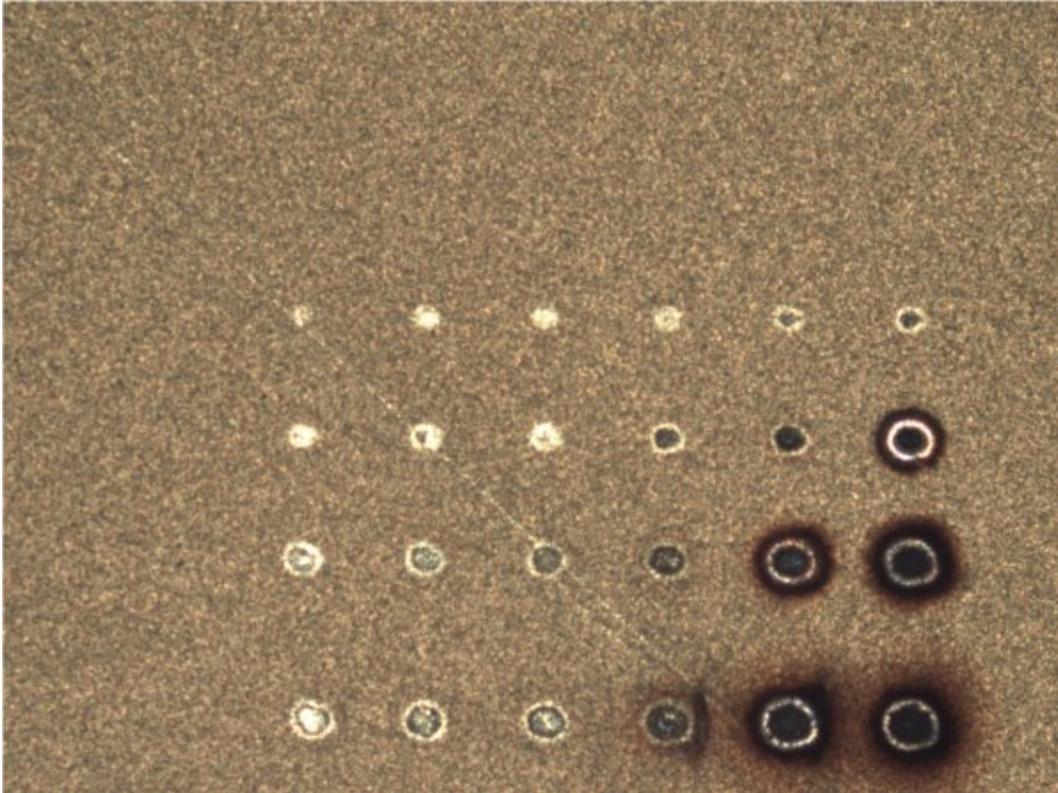


Abbildung 3.7.: Mikroskopaufnahme des durch den Test entstanden Arrays auf dem Goldsubstrat. Die ersten vier Testreihen hinterließen keine unter dieser Vergrößerungseinstellung erkennbaren Schäden. Für die Energien in der ersten (0,075 mJ), zweiten (0,1 mJ), dritten (0,17 mJ) und vierten Zeile (0,275 mJ) können deutliche Spuren der Laserpulse auf dem Gold erkannt werden. Der Verlauf einer Messreihe erfolgt von links nach rechts beginnend mit einem Einzelschuss, endend mit 30 s Dauerbetrieb. Für jede Energieeinstellung wurde eine neue Zeile begonnen.

Die niedrigste mit dem Auge noch erkennbare Lasereinstellung hinterließ keine Spuren, welche mit dem Mikroskop erkennbar gewesen wären. Das zur Energiebestimmung verwendete Powermeter war nicht in der Lage, den geringen Wert dieser Einstellung zu messen. Die Strahlenergie wird daher mit einem kleineren Wert vermerkt, als der erste messbare Wert. An dieser Stelle wird nochmals darauf hingewiesen, dass sämtliche Messungen im „Low“ Powermodus des Lasers durchgeführt wurden. Für die Ionisation einer ausreichenden Ionenanzahl wird mindestens die Energie, entsprechend der dritten Schalterstellung im „Normal“ Powermodus, benötigt. In Tabelle 3.2 sind die einzelnen Energieeinstellungen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

aufgelistet.

Schalterstellung	Energie [mJ]	Schäden	Kommentar
< 5	< 0,075	nein	-
5	< 0,075	nein	-
4, 5	< 0,075	nein	-
4	< 0,075	ja	Unter der 10x fachen Vergrößerung konnte eine leichte Verfärbung für den 10s Dauerbetrieb und größer >10s erkannt werden
3, 5	0,075	ja	Für die Einzelschüsse ist eine Verfärbung erkennbar, welche auf ein Anschmelzen des Goldes hindeutet. Für 10s und 30s Pulsdauer kann eine Rußschicht in der Mitte des Spots erkannt werden.
3	0,100	ja	Im 30s Dauerbetrieb wurde das Substrat derart stark erhitzt, dass sich um den eigentlichen Spot herum sich ein Rußring gebildet hat.
2, 5	0,170	ja	-
2	0,275	ja	-

Tabelle 3.2.: Tabelle der für den Pulslasertest verwendeten Energieeinstellung.

Die Messung im „Low“ Powermodus konnte zeigen, dass für die Justage des Lasers 0,075 mJ für die Strahlenergie nicht überschritten werden sollte, um Schäden an den Elektroden ausschließen zu können. Diese Energie reicht aus, um den Laser erkennen zu können und ihn entsprechend auszurichten. Die Verwendung einer optischen Faser für die Strahlführung würde eine zusätzliche Stabilität gegen das Wandern des Strahls bieten.

Die zweite Messung soll Aufschluss über die Strahlqualität des Lasers und seine Fokussierbarkeit liefern. Die Strahleigenschaft eines idealen Lasers wird durch den Gausstrahl (TEM₀₀ Mode) beschrieben. Wegen seiner minimalen Divergenz und der radialen gaußförmigen Intensitätsverteilung stellt diese ein Optimum eines zu fokussierenden Lasers dar. Diese Idealisierung kann in der Praxis selbst von hochwertigen Lasersystemen nicht erfüllt werden. Verschlechterungen des Strahls werden durch das Anschwingen höherer transversaler Moden sowie Amplituden- und Phasenstörungen durch zum Beispiel eine inhomogene

3.2. Anforderungen an eine neue Ionenfalle

Verstärkung im Lasermedium verursacht. Diese Imperfektionen sorgen für höhere Divergenzen, eine schlechtere Fokussierbarkeit und verringern somit die Strahldichte. Ein Maß, diese Abweichung zu beschreiben, stellt die Beugungsmaßzahl M^2 dar,

$$M^2 = \frac{d_0 \theta_m}{4\lambda/\pi} = \frac{\theta_m}{\theta_{ideal}} \quad (3.3)$$

welche das Verhältnis misst zwischen der Divergenz des untersuchten Strahls und einem idealen Gaußstrahl mit dem selben Durchmesser an der Strahltaile. Für eine nähere Beschreibung wird auf den Anhang B verwiesen. Um den Strahldurchmesser entlang seines Verlaufs zu vermessen, wird das bereits in der ersten Messung eingesetzte Substrat verwendet. Pro Messpunkt wird in der höchstmöglichen Energieeinstellung des Lasers ein Schuss abgegeben. Jeder Puls entfernt in Abhängigkeit von seiner Leistungsdichte eine gewisse Menge Gold von dem Substrat. Die auf diese Weise erzeugten Einschusslöcher (siehe Abbildung 3.8) werden mit dem Mikroskop vermessen.

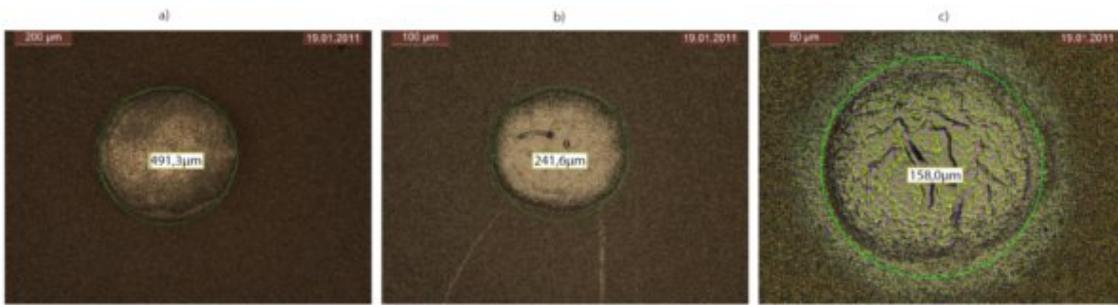


Abbildung 3.8.: Mikroskopaufnahmen der Strahldurchmesser. Die Bilder zeigen Aufnahmen von unterschiedlichen Positionen entlang der Fokusachse. a) Aufnahme mit 10x Vergrößerung 9,5 cm entfernt vom Fokus. b) Aufnahme mit 20x Vergrößerung 4,5 cm entfernt vom Fokus. c) Aufnahme mit 50x Vergrößerung 0,5 cm entfernt vom Fokus.

Die Durchmesser werden für verschiedene Abstände der Fokalebene aufgenommen. An die quadrierten Durchmesser wird ein Polynom zweiten Grades angefitet, aus welchem sich die Strahlparameter errechnen lassen (siehe Anhang B). Die sich ergebende Beugungsmaßzahl besitzt keine vom Goldsubstrat unabhängige Aussagekraft, wie nachher genauer erläutert, und wird daher mit M_{Gold}^2 bezeichnet.

Aus dem Fit ergeben sich folgende Werte für den Strahl (siehe Tabelle 3.3).

Auffällig ist der schlechte M_{Gold}^2 Wert von $11,8 \pm 2,1$. Eine Messung des Strahldurchmessers mittels einer Schneidkante und einem CCD⁶-Chip erwies sich als nicht durchführbar, da

⁶ Abkürzung des Englischen Begriffs „charge-coupled device“

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

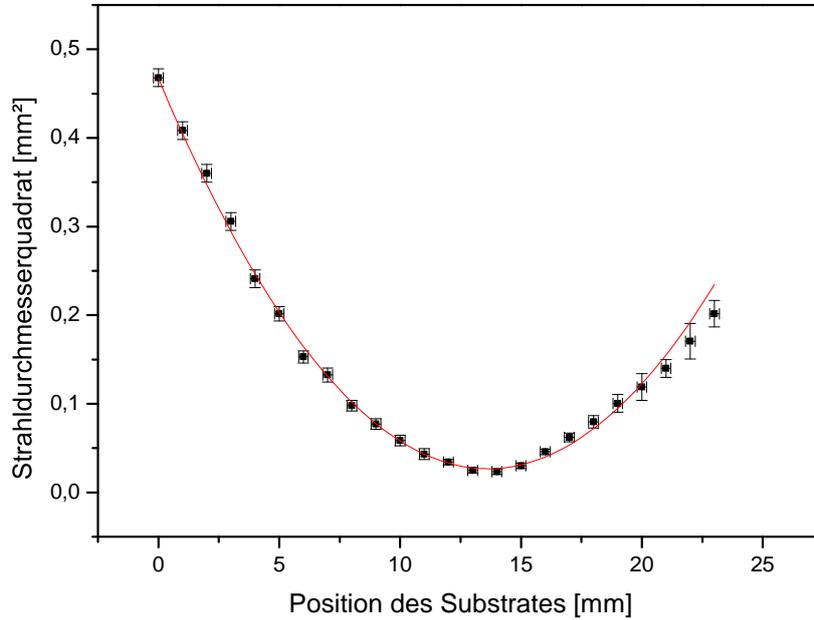


Abbildung 3.9.: Aufgetragen sind die quadrierten Messdaten des Strahldurchmessers gegen die Position des Substrates. Die in rot abgebildete Kurve entspricht dem angepassten Polynom.

Größe	Wert	Fehler
θ	50,4 mrad	1,0 mrad
d_0	159,2 μm	25,6 μm
M_{Gold}^2	11,8	2,1

Tabelle 3.3.: Liste der aus dem Fit ermittelten Werte.

eine Beschädigung des Chips und der Schneidkante durch den Laser nicht ausgeschlossen werden konnte. Bei der verwendeten Methode ist unklar, welcher Spotradius vermessen wurde. Es ist nicht anzunehmen, dass es sich hierbei um den durch $1/e^2$ definierten Strahlradius der Laserintensität handelt. Die Leistung, welche benötigt wird, um den Goldfilm auf dem Substrat zu verdampfen oder zu schmelzen, ist konstant, während die Flächenleistungsdichte des Strahls mit zunehmender Entfernung von der Strahltaile abnimmt. Die vermessenen Durchmesser stellen somit vielmehr den Anteil des Laserstrahls dar, welcher Schäden auf genau jener Materialkombination hinterlässt. Der eigentliche Strahldurchmes-

ser dürfte weitaus größer sein. Es wurde nur ein Schuss pro Messung abgegeben, um ein reproduzierbares Ergebnis zu erhalten. Im späteren Experiment wird der Laser im Dauerbetrieb verwendet, sodass eine Vergrößerung des Bereiches, welcher Schaden nimmt, wahrscheinlich ist. M^2 wird durch die Mode TEM_{00} festgelegt. Im Fall des gepulsten Lasers ist allerdings anzunehmen, dass eine kompliziertere Intensitätsverteilung durch eine Mischung unterschiedlicher Moden vorliegt. Eine TEM_{20} Mode besitzt bereits ein M^2 von 5 [J. Eichler, 2010], welches die Qualität der ermittelten Beugungsmaßzahl relativieren würde. Handelsübliche Helium-Neon Laser besitzen ein $M^2 < 1,1$, vergleichbare Hochleistungs-Vielmodenlaser ein M^2 im Bereich von 3 bis 4 [Saleh and Teich, 2006].

Um Beschädigung im Normalbetrieb der späteren Falle auszuschließen, wird ein optischer Zugang von mindestens $500\ \mu\text{m}$ empfohlen, sodass gewährleistet werden kann, dass keine Beschädigungen und starke Ionisationen des Materials auftreten. Abschließend soll an dieser Stelle noch darauf hingewiesen werden, dass der verwendete Laser ein Abschwächermedium zum Dämpfen seines Pulses verwendet. Dieses Medium wird mechanisch in den Strahlengang des Lasers, mittels des Reglers auf der oberen Seite des Gehäuses, geschoben. Zwischen Maximal- und Minimalstellung konnte ein Wandern des Strahlfokus von 2 mm in longitudinaler Richtung beobachtet werden. Zwischen dem „Low“- und „Normal“-Powermodus verschob sich der Fokus um $\sim 2\ \text{cm}$ in Richtung der Linse. Dies muss bei der Kalibrierung des Lasers mit berücksichtigt werden. Somit haben wir nun alle die Geometrie limitierenden Parameter besprochen und können nun die einzelnen Paulfallenkonzepte miteinander vergleichen.

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

Bereits in der Einleitung wurden mehrere unterschiedliche Grundgeometrien für die Paulfalle vorgestellt. Diese werden nun auf ihre Eigenschaften, wie den optischen Zugang, Pseudopotentialtiefe und Fallenfrequenzen hin untersucht. Im Anschluss daran wird geprüft, ob sich die noch verbliebenen Fallen zur Extraktion eignen. Zuerst werden die beiden Realisierungsmöglichkeiten einer Kreuzfalle besprochen.

Die Kreuzfallen

Die Kreuzfalle erlaubt es durch die Verwendung rechteckiger segmentierter Elektroden, diese einzeln anzusteuern und auf diese Weise mehrere axiale Fangpotentiale zu erzeugen, oder die Ionen zu transportieren (siehe Abschnitt 3.3.1). In Abbildung 3.10 sind Skizzen der beiden möglichen Auslegungen dieser Falle abgebildet. Die erste Variante (Rail-Kreuzfalle Abbildung 3.10 a)) nutzt eine Radiofrequenz-Leiterelektrode (RF-Rail) vor den segmen-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

tierten DC-Elektroden, um den radialen Einschluss zu erzeugen. Die Symmetrie des Pseudopotentials wird durch zwei weitere auf Masse gelegte Rails gewährleistet.

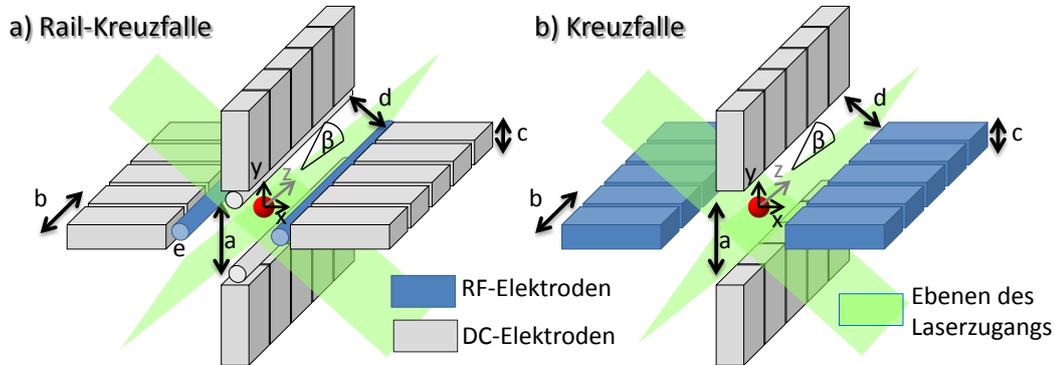


Abbildung 3.10.: Skizze der Kreuzfalle mit RF-Rail a) und der einfachen Kreuzfalle b) mit eingezeichneten Ebenen für den Laserzugang. In der Mitte der Falle ist das Ion in seiner gedachten Fangposition zu sehen. Zusätzlich sind die sich im Fangpotential ergebenden Fallenachsen des Ions eingezeichnet. In schwarz die radialen Achsen, in grau die axiale. Die Parameter a, b, c, d, e und β markieren wesentliche Größen, welche die Falleigenschaften beeinflussen. a markiert den Abstand in der Mitte der Falle zwischen den gegenüberliegenden Elektroden. b gibt die Breite eines DC-Segmentes an. c entspricht der Dicke einer Elektrode. Der diagonale Abstand und gleichzeitig der radiale optische Zugang wird durch d gekennzeichnet. e gibt den Durchmesser der RF-Rail an. β entspricht dem halben Öffnungswinkel.

Die konstruktionstechnisch einfachere Variante der Kreuzfalle (Abbildung 3.10 b)) nutzt zwei der Fallenflügel als RF-Elektroden. Der axiale Einschluss wird durch die zwei verbleibenden Fallenflügel erreicht, sodass das DC-Potential ein Sattelpotential in der radialen Richtung erzeugt. Dies führt zu einer durchaus erwünschten Aufhebung der Entartung der radialen Fallenfrequenzen (siehe Abschnitt 3.3.1) sowie dem Verlust des symmetrischen Extraktionspotentials, was im Abschnitt 3.3.3 ausführlich dargelegt wird. Der optische Zugang erfolgt über die beiden in hellgrün eingezeichneten Ebenen. Diese stehen im 45° Winkel zu beiden radialen Fallachsen. Durch den diagonalen Abstand d der Flügel bzw. der Rails zueinander wird der optische Zugang limitiert. Dieser ergibt sich im Fall der Rail-Kreuzfalle zu

$$d_{\text{Rail}} = \left(\frac{(a + e)}{\sqrt{2}} - e \right). \quad (3.4)$$

Der halbe Öffnungswinkel β des Laserzugangs lässt sich über

$$\beta_{\text{Rail}} = \arcsin \left(\frac{\left(\frac{(a+e)}{\sqrt{2}} - e \right)}{a+e} \right) \quad (3.5)$$

berechnen. Für die reine Kreuzfalle sind die beiden Parameter durch

$$d_{\text{ohne}} = \sqrt{2} \left(\frac{a}{2} - \frac{c}{2} \right) \quad (3.6)$$

und

$$\beta_{\text{ohne}} = \arcsin \left(\frac{\sqrt{2}(a/2 - c/2)}{\sqrt{a^2 + c^2}} \right) \quad (3.7)$$

gegeben. Die Kreuzfallen stellen ein Optimum des möglichen optischen Zugangs dar. Die Schwierigkeit dieses Designs besteht in der genauen Ausrichtung der Flügel zueinander, da durch die Fallengeometrie keine Konstruktionsfreiheitsgrade festgelegt werden, wie beispielsweise bei der Ebenenfalle. Die Rail-Kreuzfalle entspricht von ihrer Bauart der PCB-Falle unserer Gruppe (siehe Abschnitt 3.1). Wie in dem Abschnitt 3.1.1 erklärt wurde, sorgt der gepulster Laser für Aufladungen der Isolatoren zwischen DC-Elektroden und RF-Elektrode. Die Auswirkungen dieses Effekts würden sich in einer kleineren Falle verstärken. Eine Lösung stellt das Spannen eines Drahtes vor den DC-Elektroden dar. Die RF-Elektroden werden daher im Folgenden immer als zylinderförmig angenommen. Es gestaltet sich als schwierig in der Dimension der Rail von $125 \mu\text{m}$ ein ausreichend stabiles, starres und leitendes Material zu finden. Jedoch können Drähte aus Wolfram in entsprechender Stärke hergestellt werden⁷.

Die Ebenenfallen

Die bereits in der Gruppe etablierte Mikrofalle [Schulz et al., 2008] stellt eine Ebenenfalle aus 2 Leiterlagen da. Die Falle besteht aus einer sandwichartigen Struktur, bei welcher die RF-Elektroden von der DC-Elektrode durch einen Abstandshalter gegeneinander isoliert und gehalten werden (siehe Abbildung 3.11). Die Anordnung kann ohne viel Aufwand um eine weitere Leiterlage erweitert werden, zur sogenannten 3-Ebenenfalle.

Der Abstandshalter verschafft den Vorteil eines einfach zu definierenden Abstandes von DC- zu RF-Elektrode. Die Ausrichtung dieser beiden übereinanderliegenden Elektroden zueinander wird durch Montagelöcher ebenfalls stark erleichtert. Es ist außerdem möglich, die gesamte Falle in einen Mikrochiphalter einzubauen und somit die Kontaktierung der

⁷<http://www.wolfram-industrie.com/>

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

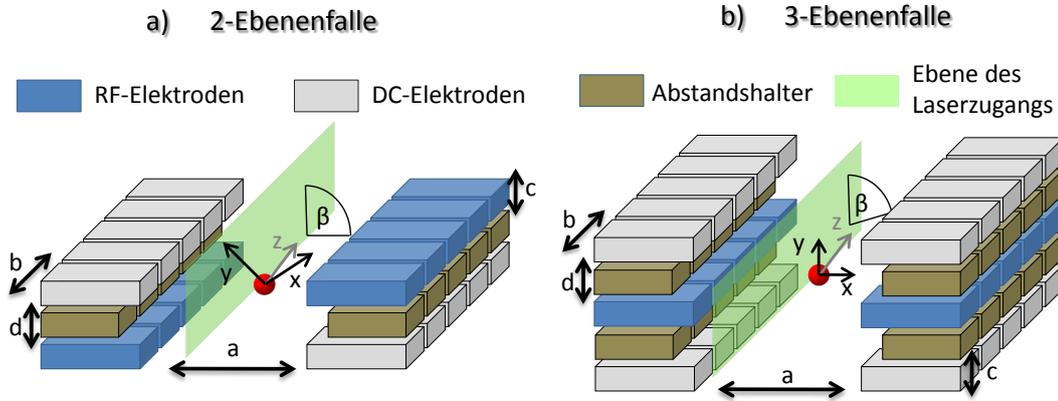


Abbildung 3.11.: Skizze der 2-Ebenenfalle a) und 3-Ebenenfalle b) mit eingezeichnetem Laserzugang. In der Mitte der Falle ist das Ion in seiner gedachten Fangposition zu sehen. Zusätzlich wurden die Fallenachsen des Ions im Fangpotential skizziert. In schwarz die radialen Achsen, in grau die axiale. Die Parameter a, b, c, d und β markieren wesentliche Größen, welche die Falleneigenschaften beeinflussen. a markiert den Abstand in der Mitte der Falle zwischen DC- und RF-Elektrode. b gibt die Breite eines DC-Segementes an. c entspricht der Dicke einer Elektrode. Die Dicke der Abstandshalterschicht wird durch d gekennzeichnet. β entspricht dem halben Öffnungswinkel.

Falle enorm zu vereinfachen. Der radiale Laserzugang in die Falle ist in erster Linie durch den Parameter a , welcher den Abstand der beiden Flügel zueinander misst, limitiert. Der halbe Öffnungswinkel lässt sich für die 2-Ebenenfalle über

$$\beta_{2\text{Ebenen}} = \arctan\left(\frac{a/2}{c + d/2}\right) \quad (3.8)$$

beziehungsweise für die 3-Ebenenfalle über

$$\beta_{3\text{Ebenen}} = \arctan\left(\frac{a/2}{\frac{3c}{2} + d}\right) \quad (3.9)$$

berechnen. Senkrecht von oben auf die Falle eingestrahlt Laser stehen im 45° Winkel zu den radialen Fallenachsen im Falle der 2-Ebenenfalle. Bei der 3-Ebenenfalle trifft der Laser unter 0° auf die eine und unter 90° auf die radiale Fallenachse. Die Effizienz der um 90° zum Laser verlaufenden Fallenachse wird daher durch $\beta_{3\text{Ebenen}}$ bestimmt. Ein Kühlen der axialen Fallenachse wird durch ein weiteres Verkippen in Richtung der z-Achse ermöglicht. Über diese eine gedachte Ebene hinaus optischen Zugang zu erhalten, erweist

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

sich allerdings als schwierig. Dies erschwert das Kompensieren beider Fallenachsen bzw. die Möglichkeit der Autokompensation [Eble et al., 2010] und verkompliziert komplexere optische Aufbauten wie beispielsweise ein optisches Gitter.

Beide Ebenenfallen sind durch die in der Zeichnung aufgeführten Parameter nicht vollständig beschrieben. Die zueinander orientierten Innenflächen der Elektroden üben einen Einfluss auf den Feldverlauf aus. Die 3-Ebenenfalle bietet durch das Verkürzen oder Verlängern der in der Mitte befindlichen Elektrode die Option, den radiale Einschluss auf Kosten des axialen Einschlusses zu schwächen beziehungsweise zu stärken. Außerdem besteht die Möglichkeit, die Rollen von RF-Elektroden und DC-Elektroden zu vertauschen. Eine solche 3-Ebenenfalle verwendet 4 RF-Elektroden und nur 2 DC-Elektroden. Diese Anordnung wird ebenfalls untersucht und im Folgenden als 3-Ebenenfalle.v2 bezeichnet.

Der Vorteil der einfachen Montage erweist sich zugleich als größter Nachteil für die Extraktion aus der Falle. Um den axialen Fallenzugang in beide Richtungen zu ermöglichen, müsste der Mikrochiphalter zerschnitten werden, was wieder die Montage verkompliziert und die Anzahl der Freiheitsgrade erhöht. Beide Fallentypen erzeugen außerdem bei der Extraktion durch die Segmente ein asymmetrisches Extraktionspotential, sodass der resultierende Strahlfokus eine enorme Divergenz aufweist. Eine ausführliche Diskussion der Extraktionsproblematik ist im Abschnitt 3.3.3 zu finden.

Mit den in den vorherigen Abschnitten definierten Größen für den optischen Zugang von mindestens $500\ \mu\text{m}$ und der aus der Keramikbauweise resultierenden Dicke des Substrates von $125\ \mu\text{m}$ ergeben sich für die vier vorgestellten Fallenmodelle folgende Werte (siehe Tabelle 3.4).

Fallentyp	Abstand Fallenmitte [μm]	Halber Öffnungswinkel [$^\circ$]
Rail-Kreuzfalle	759	34,5
Kreuzfalle	832	36,5
2-Ebenenfalle	500	53,1
3-Ebenenfalle	500	38,7

Tabelle 3.4.: Tabelle der optischen Zugangs und Öffnungswinkels der vorgestellten Fallengeometrien.

Als Durchmesser für die Rails in der Kreuzfalle wurden $125\ \mu\text{m}$ verwendet. Für die 2- und 3-Ebenenfalle wurde ein Abstandshalter von $125\ \mu\text{m}$ angenommen, um der bereits optimierten Geometrie der Mikrofaller zu entsprechen [Schulz et al., 2008].

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Die Planare Paulfalle

Einen Sonderfall in der Reihe der vorzustellenden Paulfallen ist die planare Geometrie. Durch das Übertragen von DC- und RF-Elektroden in die selbe Ebene ergibt sich ein fangendes Potentialminimum oberhalb und unterhalb dieser Ebene. In der Praxis wird diese Art der Falle im Lithographieverfahren produziert. Planare Fallen profitieren von dieser Herstellung, da es komplexere und kleinere Strukturen als in dreidimensionalen Fallen erlaubt. In Abbildung 3.12 ist der grundlegende Aufbau skizziert.

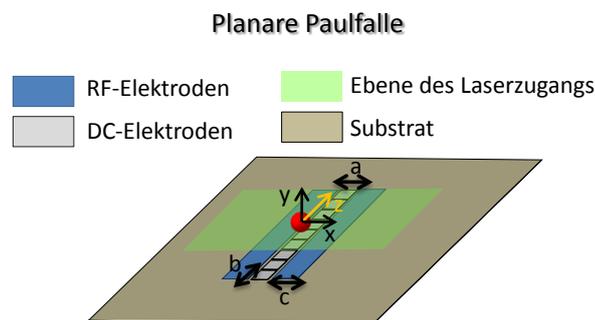


Abbildung 3.12.: Skizze einer planaren Paulfalle mit eingezeichneter Ebene für den Laserzugang. In der Mitte der Falle ist das Ion in seiner gedachten Fangposition zu sehen. Zusätzlich wurden die Fallenachsen des Ions im Fangpotential eingezeichnet. In schwarz die radialen Achsen, in orange die axiale. Die Parameter a, b und c markieren wesentlichen Größen, welche die Falleigenschaften beeinflussen. a misst die Breite der DC-Elektrode, b entspricht der Länge der DC-Elektrode, c gibt die Breite der RF-Elektrode an.

Der optische Zugang zur planaren Falle wird vor allem durch die Fanghöhe des Ions und die verwendete Fallenhalterung definiert. Übliche Fanghöhen belaufen sich meist auf 50-200 μm oberhalb der Elektroden. Eine Ionisation durch den gepulsten Laser wird daher zu starken Aufladungen der Falle führen. Dieses Fallenmodell scheidet daher aus, und wurde nicht weiter für den Zweck der Extraktion optimiert. Eine Extraktion aus der planaren Geometrie ist jedoch grundsätzlich möglich. Ionen können über Löchern im Substrat gefangen werden. Legt man eine gegenüber dem Ion negative Hochspannung an, werden Ionen durch das Loch extrahiert. Bereits die Präparation von Ionenkristallen oberhalb der entsprechende Elektrode gestaltet sich jedoch als Herausforderung. Die vorgestellten Fallengeometrien werden nun bezüglich ihrer Potentialparameter und Fallenfrequenzen getestet, um abschätzen zu können wie geeignet diese für den späteren experimentellen Betrieb sind.

3.3.1. Radiale und axiale Fallenpotentiale

Die Dimensionierung der Fallen entspricht den im vorherigen Abschnitt definierten Größen für einen optischen Zugang von $500\ \mu\text{m}$. Zuerst erfolgt eine Aufzählung des für den radialen Einschluss wichtigsten Parameters, der Tiefe des Pseudopotentials. Anschließend wird kurz die Besonderheit der Rail-Kreuzfalle erklärt. Für die Analyse wurden sämtliche Fallengeometrien durch im Simulationsprogramm enthaltene Geometrieroutinen nachgebildet. In Abbildung 3.13 ist als Beispiel hierfür die Rail-Kreuzfalle abgebildet. Zu beachten ist, dass sämtliche Fallen die gleiche Orientierung des gezeigten Modells besitzen.

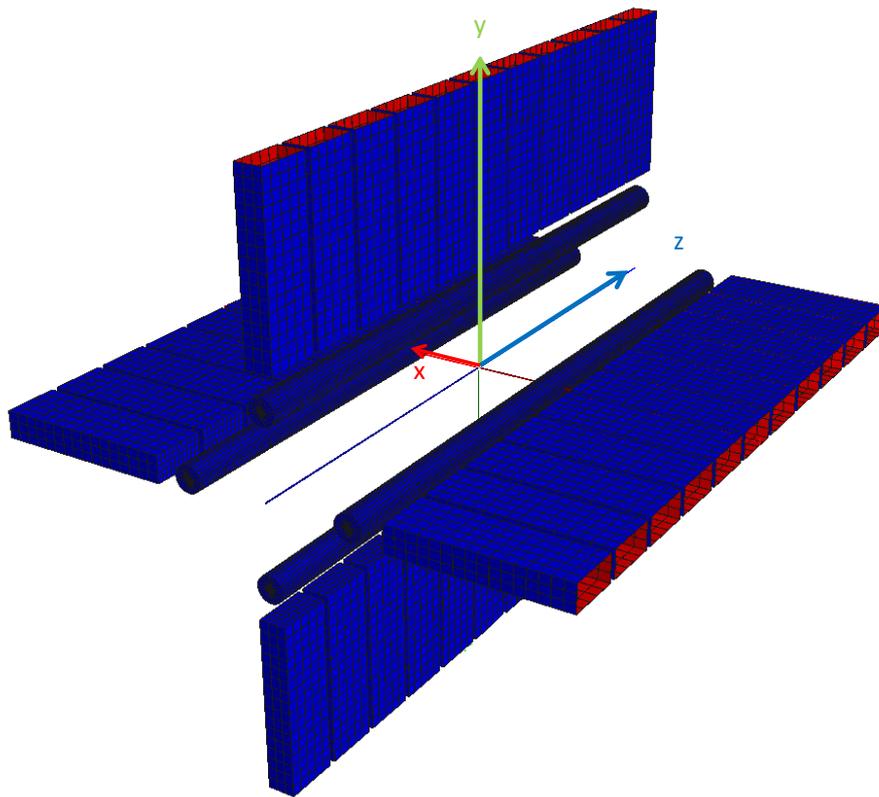


Abbildung 3.13.: Modell des in der Simulation verwendeten Modells der Rail-Kreuzfalle. Zusätzlich wurden die in der Simulation verwendeten Achsen eingezeichnet. Die Orientierung jeder anderen simulierten Falle ist identisch mit diesem Muster. Die axiale Fallenachse verläuft entlang der z-Achse (blau), während die radialen Fallenachsen der roten x-Achse und der grünen y-Achse entsprechen. Jedes Modell ist symmetrisch um den Ursprung aufgebaut, sodass dieser gleichzeitig die Fangposition für das Ion bezeichnet.

Aus Platzgründen werden nicht für alle Fallen die simulierten Potentiale und Pseudopoten-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

tiale abgebildet. Es wurde eine Auswahl getroffen, um die wichtigsten Daten anschaulich diskutieren zu können.

Tiefe und Form des Pseudopotentials

Sämtliche gezeigten Pseudopotentiale sind für eine Radiofrequenz von $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 10$ MHz, einer Spannung von $200 V_{\text{pp}}$ und für das Verhältnis $\frac{q}{m} = 2,41187 \cdot 10^6$ C/kg von einfach geladenem ^{40}Ca berechnet worden.

In Abbildung 3.14 ist das Pseudopotential und ein Schnitt in diagonaler Richtung durch das Pseudopotential der Kreuzfalle ohne Rail abgebildet.

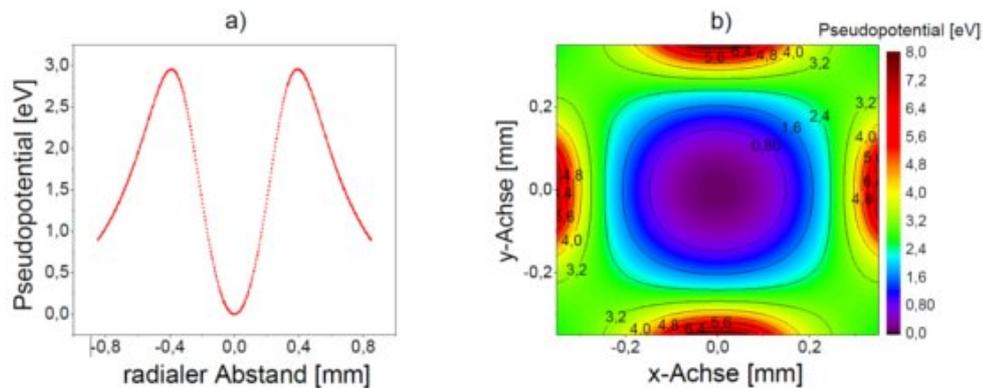


Abbildung 3.14.: Simulierte Pseudopotentiale der Kreuzfalle. a) zeigt den diagonalen Schnitt durch das Pseudopotential. In b) ist das komplette Pseudopotential über einen Bereich von $700 \mu\text{m}$ in x- und y-Richtung an der Stelle $z=0$ abgebildet.

Das Pseudopotential beider Kreuzfallen ist fast identisch. Es liegt lediglich ein Unterschied in der Tiefe und dem Abklingen in den Randbereichen vor. In diagonaler Richtung zwischen den Elektroden ergeben sich Potentialmaxima, welche die maximale Höhe des Pseudopotentials definieren. In Abbildung 3.15 ist das Pseudopotential der 3-Ebenenfalle dargestellt. Die Potentiale der Elektroden der Falle wurden nicht mit eingezeichnet, um die eigentliche Form des Pseudopotentials hervorheben zu können.

Die 2- und 3-Ebenenfalle weisen eine ähnliche Form des Pseudopotentials auf, jedoch zeigt die 2-Ebenenfalle eine leichte Verkippung der Hauptachse. Bei den Fallenpotentialen liegt die schwächste Stelle des Pseudopotentials in der Achse des optischen Zugangs. Die 3-Ebenenfalle wurde in den beiden möglichen Betriebsarten simuliert (siehe Abschnitt 3.3). Für die Tiefe der verschiedenen Pseudopotentiale ergeben sich aus der Simulation die in Tabelle 3.5 aufgelisteten Werte.

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

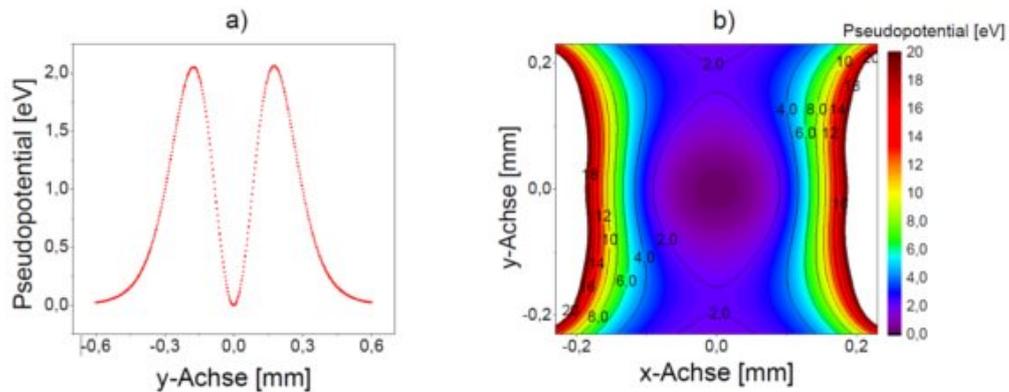


Abbildung 3.15.: Simulierte Pseudopotentiale der 3-Ebenenfalle. a) zeigt den diagonalen Schnitt durch das Pseudopotential. Abbildung b) zeigt das komplette Pseudopotential über einen Bereich von 460 μm in x- und y-Richtung, an der Stelle $z=0$.

Fallentyp	Pseudopotentialtiefe [eV]	Fallen Abbildung unter
Rail-Kreuzfalle	4,24	3.10 a)
Kreuzfalle	2,96	3.10 b)
2-Ebenenfalle	2,48	3.11 a)
3-Ebenenfalle	2,05	3.11 b)
3-Ebenenfalle.v2	1,70	3.11 b) RF- und DC-Elektroden sind vertauscht

Tabelle 3.5.: Auflistung der Pseudopotentialtiefen der einzelnen Fallentypen.

Die Rail-Kreuzfalle bietet das tiefste Pseudopotential. Dies resultiert aus der geometrischen Anordnung, welche nur eine kleine Lücke im Pseudopotential zulässt. Die Kreuzfalle besitzt einen größeren Abstand, sodass der Einschluss reduziert wird. Die Ebenenfallen profitieren zwar von ihrem kürzeren Elektrodenabstand, jedoch ist die sich ergebende Lücke zu groß, um tiefe Potentiale zu ermöglichen. Die sich ergebende Reihenfolge der Pseudopotentialtiefen der einzelnen Fallen behält für jede Radiofrequenz und RF-Spannung ihre Gültigkeit. Neben dieser Reihenfolge behalten ebenfalls die im nächsten Abschnitt diskutierten Potentialkoeffizienten der radialen Potentiale ihre Relation untereinander.

Vergleich Potentialkoeffizienten der radialen Fallenpotentiale

Die Potentialkoeffizienten geben Aufschluss über die Harmonizität der Fallen und somit über die Heizeffekte durch anharmonische Beiträge zum Potential (siehe Abschnitt 2.2.3).

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Diese werden aus dem Potential der RF-Elektroden für eine Spannung von $V_{pp} = 200 \text{ V}$ bestimmt. Ohne ein Anschalten der DC-Spannungen sind die beiden radialen Fallenfrequenzen entartet (siehe Abschnitt 3.3.1), es wird daher lediglich der Koeffizient für eine Achse ermittelt. In der Tabelle 3.6 sind die sich aus dem Fit und der Umrechnung mit Gl. 2.27 (mit $x = 1 \mu\text{m}$) ergebenden Werte abgebildet.

Fallentyp	α'_1	α'_2	α'_3	α'_4
Rail-Kreuzfalle	$1,13 E - 17$	$3,88 E - 6$	$-2,63 E - 17$	$2,15 E - 10$
Kreuzfalle	$9,96 E - 17$	$2,41 E - 6$	$-2,32 E - 16$	$-2,36 E - 10$
2-Ebenenfalle	$2,59 E - 7$	$5,20 E - 6$	$6,03 E - 12$	$-5,73 E - 12$
3-Ebenenfalle	$1,86 E - 18$	$5,49 E - 6$	$-4,35 E - 18$	$3,26 E - 10$
3-Ebenenfalle.v2	$-9,40 E - 17$	$5,22 E - 6$	$2,19 E - 16$	$-1,20 E - 10$

Tabelle 3.6.: Tabelle der Potentialkoeffizienten der verschiedenen Fallentypen.

Ein Vergleich der Größenordnungen zeigt deutlich, dass die 2-Ebenenfalle die größten Anharmonischen Anteile enthält. Zwar ist der Parameter vierter Ordnung kleiner als bei den anderen Fallen, dieser wirkt sich jedoch weit weniger schlimm als die dritte Ordnung aus, da dieser symmetrisch ist. Bei den anderen Fallen unterscheiden sich der Parameter zweiter und dritte Ordnung um 10 bis 12 Größenordnungen, während bei der 2-Ebenenfalle diese lediglich 6 Größenordnungen trennen. An der Größe des quadratischen Potentialanteils α'_2 lässt sich außerdem feststellen, dass die Ebenenfalle, bei gleicher Radiofrequenz und RF-Spannung eine höhere radiale Fallenfrequenz besitzen als die Kreuzfalle. Die Parameter charakterisieren das reine Radiofrequenzpotential. Ein Anschalten der DC-Spannungen führt zu einer Aufheben der Entartung der radialen Fallenfrequenzen. Dieser Effekt wird im nächsten Abschnitt erklärt.

Einfluss der DC-Spannung auf die radialen Fallenfrequenzen

Eine für Paulfallen interessante Eigenschaft ist die der entarteten Fallenfrequenzen. Entartung bedeutet, dass die radialen Frequenzen identisch sind. Die Extraktion profitiert hiervon durch die ähnlichen Trajektorien der einzelnen Achsen. Nachteile durch die Entartung ergeben sich für das Kühlen der radialen Fallenachsen. Ein symmetrischer DC-Einschluss sorgt dafür, dass die radialen Fallenfrequenzen unabhängig von den axial angelegten DC-Spannungen sind. Dies stellt den Grundtyp einer Paulfalle dar, bei welcher zum axialen Einschluss Endkappen auf der Fallenachse am Ende der Falle verwendet werden. Die von diesen Elektroden erzeugten Felder verlaufen rotationsymmetrisch bezüglich der axialen Fallenachse. Das hieraus resultierende radiale Potential wirkt auf beide radialen Fallenach-

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

sen gleichermaßen. Ein Verschieben der DC-Elektroden aus der axialen Fallenachse heraus sorgt für einen wachsenden Einfluss auf die Felder in radialer Ebene. Eine asymmetrische Anordnung der DC-Elektroden zerstört die Radialsymmetrie und sorgt für eine ungleichmäßige Veränderung der beiden Radialfrequenzen mit steigender DC-Spannung.

Als einzige der vorgestellten Fallen besitzt die Rail-Kreuzfalle eine radialsymmetrische DC-Elektroden-Anordnung. Durch die von den DC-Elektroden getrennten Rails, welche auf Masse gelegt werden, übt die an DC-Elektroden angelegte Spannung nur eine vergleichsweise geringe Wirkung auf das radiale Fangpotential aus. Um dies zu verdeutlichen, werden für die Kreuzfalle und die Rail-Kreuzfalle jeweils RF- und DC-Potential simuliert. Das RF-Potential wird mit einer Spannung von 100 V an den RF-Elektroden und den auf Masse gelegten DC-Elektroden, das DC-Potential mit einer DC-Spannung von -50 V auf drei aufeinander folgenden DC-Elektroden und geerdeten RF-Elektroden simuliert (für die Kreuzfalle siehe Abbildung 3.16 und für die Rail-Kreuzfalle Abbildung 3.17).

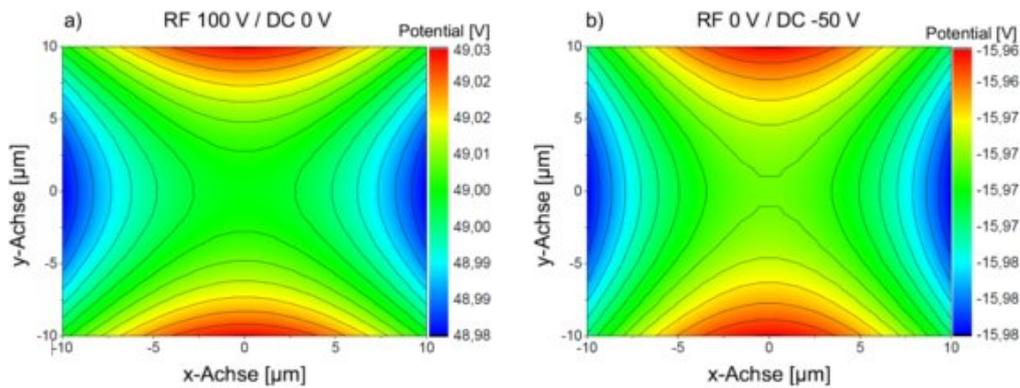


Abbildung 3.16.: Simuliertes RF- und DC-Potential der Kreuzfalle. Der simulierte Bereich beträgt jeweils $20 \mu\text{m}$ entlang der x- sowie y-Achse am Punkt $z=0$. Die verwendeten RF-Elektroden liegen in der y-Ebene, die somit verbleibenden DC-Elektroden befinden sich in der x-Ebene.

Vergleicht man die Form des RF-Potentials der Kreuzfalle mit dem seines radialen DC-Potentials so ist auffällig, dass beide die gleiche Form aufweisen. Durch das Anlegen einer Spannung an die DC-Elektroden ergibt sich ein quadratisches Sattelpotential wie bei den RF-Elektroden. Jedoch ist dies ein starres Potential und wirkt einer Ausrichtung des RF-Sattelpotentials entgegen. Eine radiale Fallenachse wird daher durch dieses Potential in ihrem Einschluss vermindert, während die um 180° versetzte in seinem Einschluss verstärkt wird. Es kommt also zu einem Auseinanderlaufen der beiden radialen Frequenzen mit steigender DC-Spannung (siehe Abbildung 3.18 a)).

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

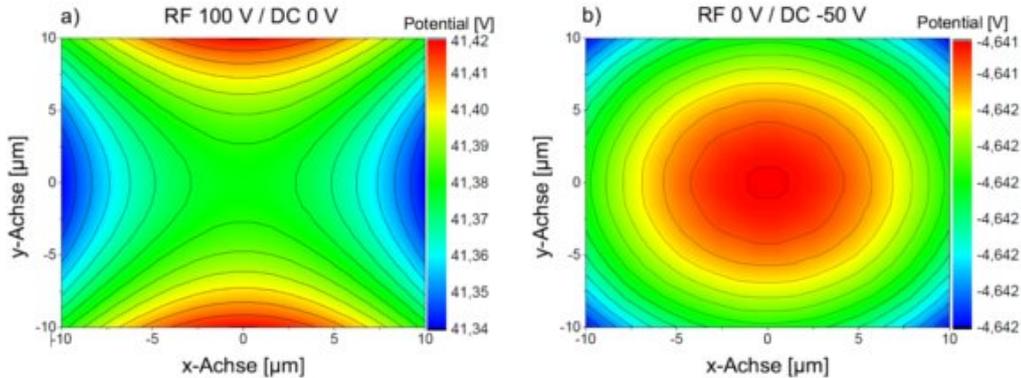


Abbildung 3.17.: Simuliertes RF- und DC-Potential der Rail-Kreuzfalle. Der simulierte Bereich beträgt jeweils $20 \mu\text{m}$ entlang der x- sowie y-Achse am Punkt $z=0$. Die verwendeten RF-Rail-Elektroden liegen in der y-Ebene, die Rail in der x-Achse ist geerdet.

In der Rail-Kreuzfalle (siehe Abbildung 3.17) bildet sich ebenfalls ein Potentialoffset, jedoch besitzt das DC-Potential die Form eines Potentialbergs, und somit die umgekehrte Form des Pseudopotentials (siehe Abbildung 3.14 b)). Da Pseudopotential und DC-Potential somit radialsymmetrisch sind, sorgt das DC-Potential lediglich für eine Verringerung der Fallenfrequenzen für höhere Spannungen. Beide Frequenzen werden jedoch in gleichem Maße beeinflusst (siehe Abbildung 3.18 b)). Vergleich man die Werte des DC-Potential von Kreuzfalle und Rail-Kreuzfalle, sind große Unterschiede erkennbar. Die Kreuzfalle besitzt ein Potential in diesem Bereich von ca. -16 V , während sich bei der Rail-Kreuzfalle eine Potentialstärke von $-4,6 \text{ V}$ ergibt. Die Abschirmung durch die RF-Rails mindert stark den Durchgriff der DC-Elektroden und somit deren Wirkung auf die Fallenfrequenzen. Betrachtet man im Unterschied dazu den in Abbildung 3.17 a) abgebildeten Potentialbereich des RF-Potentials lässt sich bereits jetzt prognostizieren, dass die Rail-Kreuzfalle bei gleicher Radiofrequenz höhere radiale Fallenfrequenzen besitzt, da diese die steiferen Potentiale (Potentialbereich $41,42 \text{ V} - 41,34 \text{ V} = 0,08 \text{ V}$) erzeugt. Dies kann auch an dem quadratischen Potentialparameter festgestellt werden (siehe Abschnitt 3.3.1).

Zur Veranschaulichung des Verlaufs der radialen Fallenfrequenzen für steigende DC-Spannungen wird auf Abbildung 3.18 verwiesen. Diese zeigt die Simulation beider Kreuzfallen für unterschiedliche Fangparameter aber ähnliche Fallenfrequenzen. Für die Simulation der Kreuzfalle wird eine Radiofrequenz von $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 10 \text{ MHz}$ und eine RF-Spannung von $V_{\text{pp}} = 200 \text{ V}$ verwendet und für die Rail-Kreuzfalle ein $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 23 \text{ MHz}$ bei einer RF-Spannung von $V_{\text{pp}} = 400 \text{ V}$.

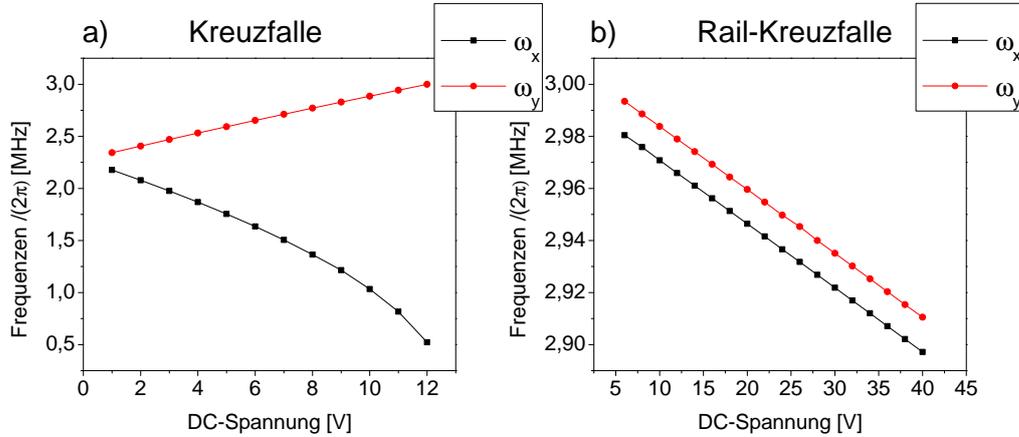


Abbildung 3.18.: Simulierte Fallenfrequenzen aufgetragen gegen den Betrag der verwendeten DC-Spannung. Zur besseren Übersicht wurden die Simulationspunkte miteinander verbunden. Diese Interpolation ist linear und darf nicht mit den zu erwartenden Frequenzen gleichgesetzt werden.

Im Fall der Kreuzfalle liegt eine $\sim 1/U_{DC}$ Abhängigkeit der radialen Fallenfrequenz ω_x vor. Ähnliche Zusammenhänge ergeben sich für jeweils eine der radialen Fallenfrequenzen der 2- und 3-Ebenenfalle (siehe Abschnitt 3.3.2). Der Vorteil ähnlicher Fallenfrequenzen besteht in der Anzahl der zum Kühlen notwendigen Laser. Identische Fallenfrequenzen beinhalten die Gefahr, dass ein Energieaustausch zwischen den radialen Fallenachsen stattfindet. Für zwei weit auseinanderliegende Fallenfrequenzen ist es nötig, diese mittels zweier unterschiedlicher Laser zu kühlen, da die Linienbreite eines Lasers zu gering ist. Auffällig sind die zum Fangen benötigten Spannungen der DC-Elektroden bei der Rail-Kreuzfalle. Nachdem die Eigenschaften der radialen Fallenpotentiale beschrieben worden sind, folgt nun eine Diskussion der axialen Fallenelemente.

Axiale Fallenelemente

Für den normalen axialen Falleneinschluss sind zwei Konfigurationen denkbar. Verwendet man DC-Spannungen mit dem gleichen Vorzeichen wie die Ladung des Ions, werden zum Erzeugen des fangenden Potentials zwei Elektroden benötigt. Jede Elektrode erzeugt für sich einen Potentialberg. Durch die Kombination beider Elektroden erhält man eine Potentialmulde zwischen den beiden Elektroden. Verwendet man Spannungen mit umgekehrtem Vorzeichen gegenüber der Ladung des Ions, reicht es, eine Elektrode zu nutzen während die restlichen geerdet sind. Der durch die Elektrode erzeugte Potentialwall wird von dem Ion als Mulde wahrgenommen, sodass es darin gefangen wird. Statt nur einer oder zwei Elek-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

troden werden in den von uns verwendeten Fallen eine Reihe an DC-Elektroden verwendet. Die segmentierten DC-Elektroden erlauben das Verschieben der Ionen entlang der Fallachsen (siehe Abschnitt 4.1.1). Weiterhin ist es möglich, Ionenkristalle zu trennen und gezielt einzelne Ionen aus dem Kristall zu befreien. Diese Fähigkeiten des axialen Potentials sind für die zur Extraktion verwendeten Fallen von entscheidender Bedeutung. Beim Ladevorgang mit dem gepulsten Laser wird neben Calcium der für die Diamantimplantation nötige Stickstoff ionisiert. Der Stickstoff wird durch sympathetisches Kühlen gekühlt, sodass mindestens immer ein zusätzliches Calcium-Ion geladen werden muss. Bei der Extraktion würde dieses allerdings die Trajektorie des Stickstoffs stören und muss daher vor der Extraktion aus der Falle entfernt werden. Selektiertes Umlenken der Ionen durch die Ablenkelektroden würde sehr schnelle Schaltzeiten erfordern. Es lässt sich nicht vermeiden neben den gewünschten Elementen, auch Restgasatome zu ionisieren und zu laden. Die Anzahl der geladenen Ionen kann ebenfalls nicht beeinflusst werden. Eine Segmentierung der DC-Elektroden ermöglicht es jedoch, die geladenen Ionen auf die gewünschte Anzahl zu reduzieren und die Restgasionen zu entfernen [G. Jacob, 2010].

Bei der Segmentierung der Falle ist darauf zu achten, dass die sich ergebenden Potentiale der einzelnen Elektroden sich ausreichend überlappen, um die Ausbildung eines glatten Potentialverlaufs entlang der Fallachse zu gewährleisten. Dies ist eine Voraussetzung für einen kontinuierlichen Ionentransport mittels der DC-Elektroden (siehe Abschnitt 4.1.1). Gleichzeitig müssen die Elektroden einen scharfen Potentialberg besitzen, um das gezielte Auftrennen von Ionenkristallen zu gewährleisten. Die Breite und Höhe des Potentialbergs werden beeinflusst durch die Breite des verwendeten Segments und des Abstands zur nächsten geerdeten Elektrode. Aber auch jede Fallengeometrie übt einen Einfluss aus. Je kleiner die Lücke zwischen den Elektroden ist desto besser ist auch ihr Überlapp. Wie im Abschnitt der Laserbearbeitung (siehe Abschnitt 3.2.2) aufgeführt wurde, ergibt sich der kleinste herstellbare Elektrodenabstand zu $30\ \mu\text{m}$. Für stabile Elektroden muss eine mindest Segmentbreite von $100\ \mu\text{m}$ eingehalten werden. Um bei der späteren Konstruktion der Falle keine Verluste an Elektrodenfinger zu erleiden, wird für die Simulation eine stabilere Segmentbreite von $200\ \mu\text{m}$ getestet. Zum Test wird an die einzelnen Elektroden nacheinander eine Spannung von $10\ \text{V}$ angelegt, während die restlichen Elektroden geerdet werden. Die durch die Elektroden erzeugten Potentiale entlang der axialen Fallachse werden übereinandergelegt und untersucht. Als Beispiel sind die sich ergebenden Potentiale der Kreuzfalle abgebildet (siehe Abbildung 3.19).

Für alle Fallen konnte ein ausreichender Überlapp der einzelnen Elektroden für die verwendete Breiten festgestellt werden. Die sich aus der Simulation ergebenden Werte für die

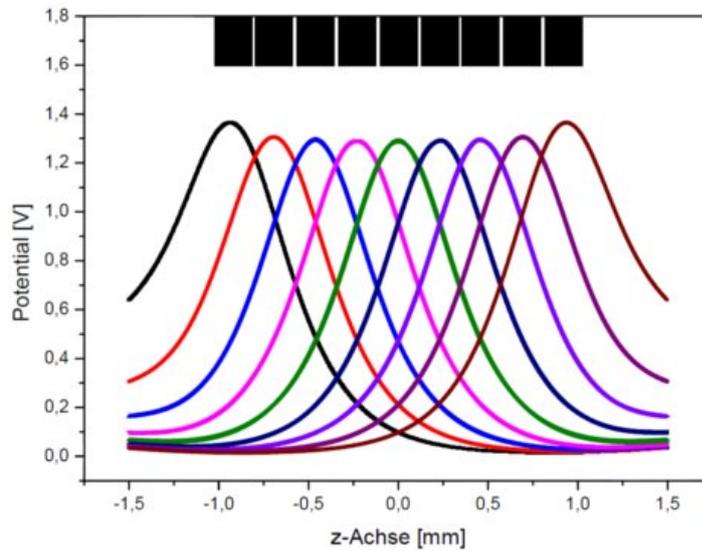


Abbildung 3.19.: Simulierte Potentiale der einzelnen Elektroden entlang der axialen Fallenaehse. Zur besseren Übersicht sind die einzelnen Potentiale farblich getrennt und die verwendeten Elektroden eingezeichnet.

Höhe und der FWHM einer einzelnen Elektrode der verschiedenen Fallen sind Tabelle 3.7 abgebildet.

Fallentyp	Peakhöhe [V]	FWHM [μm]	Fallen Abbildung unter
Rail-Kreuzfalle	0,35	906	3.10 a)
Kreuzfalle	1,29	730	3.10 b)
2-Ebenenfalle	1,81	492	3.11 a)
3-Ebenenfalle	1,89	546	3.11 b)
3-Ebenenfalle.v2	1,99	438	3.11 b) RF- und DC-Elektroden sind vertauscht

Tabelle 3.7.: Übersicht über die Peakhöhe und des FWHM eines Fallensegmentes für unterschiedlichen Fallen. Die angelegte Spannung beträgt 10 V.

Die schlechten Werte der Kreuzfalle können durch den größeren Abstand der DC-Elektroden vom Fangbereich erklärt werden. Anhand der Höhe des Potentialbergs wird der schlechte Durchgriff der Rail-Kreuzfalle offensichtlich. Die vor den DC-Elektroden verlaufende Rail wirkt als Abschirmung des Fangbereiches. Dies verringert den Durchgriff der DC-Elektroden enorm und sorgt für breitere Potentiale der Elektroden. Hohe axiale Frequenzen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

können somit nur durch hohe Spannungen erreicht werden. Der Durchgriff kann verbessert werden, indem mehrere Elektroden auf dasselbe negative Potential gelegt werden, was aber die feine Segmentierung überflüssig macht. Eine Verbesserung ist nur durch eine Veränderung des Verhältnisses von Railedurchmesser zu Keramiksubstratdicke der DC-Elektroden zu erreichen. Der Schritt zu dickeren Substraten ist von Seiten der Herstellung mit großen Fehlern verbunden, wie in Abschnitt 3.2.2 erklärt wurde. Den Durchmesser der Rail zu verkleinern stellt die einfachere Lösung des Problems dar. Die Realisation der Rail-Kreuzfalle scheitert bereits an der Halterung eines 125 μm dicken Drahtes, wie in Abschnitt 3.3.2 zu lesen ist. Es wurde daher auf eine Simulation einer Rail-Kreuzfalle mit dünneren Rails verzichtet. Nachdem die prinzipiellen Eigenschaften der fünf Fallen beschrieben worden sind, soll nun simuliert werden, inwieweit die vorgestellten Fallen im Bereich der experimentellen Vorgaben arbeiten können und welche Fallenfrequenzen daraus resultieren.

3.3.2. Test der experimentellen Vorgaben

Experimentell soll die spätere Falle in einem einfach zugänglichen Spannungsbereich arbeiten können. Die einzelnen Beschränkungen sind in Tabelle 3.8 aufgelistet.

Parameter	Parameterbereich
Radiofrequenz $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi)$	10 – 50 MHz
RF-Spannung	< 1000 V _{pp}
DC-Spannung	< 40 V

Tabelle 3.8.: Auflistung experimentell angestrebten Arbeitsparameter.

Um eine für die Falle geeignete Radiofrequenz zu bestimmen, werden die UV-Stabilitätsdiagramme (siehe Abschnitt 2.2.3) der einzelnen Fallen überprüft. Dabei ist darauf zu achten, dass hohe Fallenfrequenzen erreicht werden und die Stabilitätsparameter a_u und q_u (siehe Gl. 2.6) gering gewählt werden um einen Verlust des Ions zu vermeiden, was im Fall hoher Werte auftreten kann. Niedrige Werte von a_u und q_u werden erreicht durch eine hohe Radiofrequenz bei gleichzeitig kleinen RF- und DC-Spannungen. Setzt man in Gl. 2.28 der radialen Fallenfrequenzen, die Formel für a_u und q_u (Gl.2.6) ein, so erhält man

$$\omega_{\text{Radialfrequenz}} = \sqrt{\frac{|q|U_0\chi_{\text{dc}}}{m} + \frac{|q|^2V_{\text{pp}}^2\chi_{\text{rf}}^2}{2m^2\Omega_{\text{rf}}^2}}. \quad (3.10)$$

Anhand dieser Formel ist ersichtlich, dass zum Erreichen hoher radialer Fallenfrequenzen hohe Frequenzspannungen gewählt werden sollten, jedoch hohe Radiofrequenzen dies wiederum beschränken. Bei der Wahl der Arbeitsfrequenz muss somit ein Kompromiss

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

eingegangen werden. Die für die einzelnen Fallen gewählten Radiofrequenzen sind in der Tabelle 3.9 aufgelistet.

Fallentyp	$\frac{\Omega_{\text{rf}}}{2\pi}$ [MHz]
Rail-Kreuzfalle	23
Kreuzfalle	19
2-Ebenenfalle	28
3-Ebenenfalle	30
3-Ebenenfalle.v2	30

Tabelle 3.9.: Tabelle der für die Simulation gewählten Radiofrequenzen der einzelnen Fallen.

Zum Test der axialen Fallenfrequenzen werden für die gewählten Radiofrequenzen die Fallenfrequenzen für steigende DC-Spannungen aus der Simulation bestimmt. Die DC-Spannung wird hierzu an drei aufeinanderfolgende Elektroden angelegt. Dies ist notwendig, um einen ausreichenden Durchgriff für die Rail-Kreuzfalle erzielen. Es wird eine RF-Spannung von $600 \text{ V}_{\text{pp}}$ für alle Fallen verwendet. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abbildung 3.20 zu sehen.

Die aus der Simulation erhaltenen Frequenzen in der radialen Ebene sind für alle Fallen hoch genug, um fortgeschrittene Kühlmethode anwenden zu können. Aus dem Verlauf der radialen Frequenzen ist zu erkennen, dass für zu hohe DC-Spannungen die radialen Fallenfrequenzen rapide bei allen Fallen mit Ausnahme der Rail-Kreuzfalle abfallen (siehe Abschnitt 3.3.1). Dieses schwächt den radialen Einschluss derart, dass für hohe DC-Spannungen das Ion nicht mehr im Potential gebunden werden kann. Im Gegenzug führt der gute DC-Durchgriff zu hohen axialen Fallenfrequenzen bei allen Fallen ohne Rail. Die Rail-Kreuzfalle ist nur mit DC-Spannungen über 36 V in der Lage, eine axiale Fallenfrequenz von mehr als 1 MHz zu erzeugen. Dies schränkt die Nutzbarkeit der Rail-Kreuzfalle mit niedrigen DC-Spannungen erheblich ein. Bevor auf den Mechanismus der Extraktion näher eingegangen wird, erfolgt eine kurze Zusammenfassung der bereits ermittelten Falleneigenschaften.

Fazit der simulierten Fangeigenschaften

Von den fünf möglichen Designs weicht hauptsächlich die Rail-Kreuzfalle von den anderen Geometrien ab. Nah beieinander liegende radiale Fallenfrequenzen, sehr guter radialer Einschluss und optischer Zugang über 2-Ebenen prädestinieren diesen Fallentyp als späteren Falle. Als große Probleme erweisen sich die niedrigen axialen Frequenzen und die

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

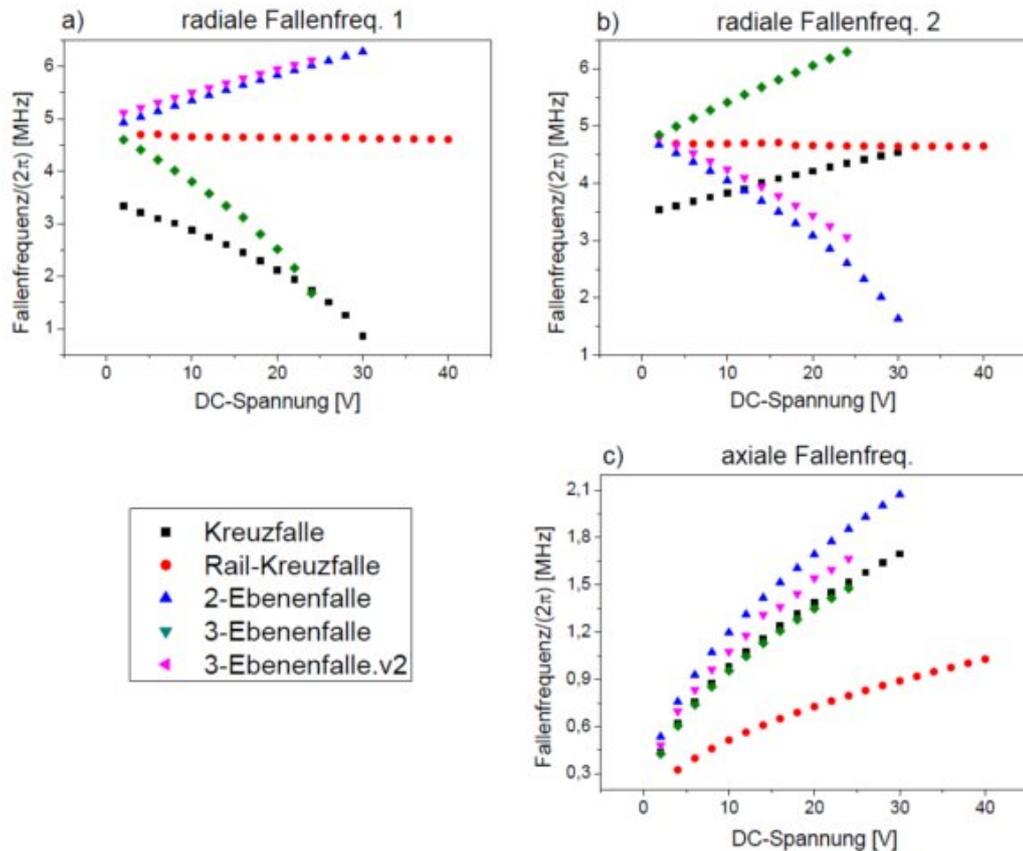


Abbildung 3.20.: Simulierte Fallenfrequenzen der fünf vorgestellten Fallen für zunehmende DC-Spannungen. In den Diagrammen a) und b) sind die radialen Fallenfrequenzen gegen den Betrag der angelegten DC-Spannung aufgetragen. Im Diagramm c) ist die axiale Fallenfrequenz gezeigt.

verbreiterten Potentiale der einzelnen Segmente. Die Rail der Falle zu verkleinern stellt die einzige Option zur Lösung dieser Mängel dar. An diesem Punkt muss allerdings darauf hingewiesen werden, in welcher Dimension sich die vorgestellten Fallen bewegen. Die DC-Elektroden bestehen aus $125\ \mu\text{m}$ dünnen vergoldeten Keramikplatten, welche im Gegensatz zur Ebenenfalle keine einfache Justage untereinander ermöglichen. Konstruktionsfreiheitsgrade ergeben sich in allen drei Raumrichtungen. Hinzu kommt die komplizierte Befestigung der Rail in Bezug zu den DC-Elektroden.

Die Halterung der Drähte müsste einen Abstand von $30\ \mu\text{m}$ zwischen der Vorderkante der DC-Elektroden und dem Draht über die gesamte Länge des Fangbereichs garantieren können. Neben Herstellungsfehlern wie Formabweichungen und variierender Dicke der Drähte,

kann eine Fehlausrichtung gegenüber dem Verlauf der axialen Fallenachse auftreten. Die hieraus resultierenden Feldfehler können von der Simulation nicht in ausreichender Form abgeschätzt werden und stellen ein Risiko für die tatsächliche Funktionalität der Falle dar. Besonders die Extraktion erleidet große Fehler durch eine in sich verdrehte Falle, aufgrund zusätzlicher Mikrobewegung. Die Konstruktion einer Rail-Kreuzfalle in den angegebenen Dimensionen stellt zu hohe Anforderungen an die Art der Halterung, um realisiert werden zu können. Auf die Simulation weiterer kleinerer Raildicken wird daher verzichtet. Die Falle wird aus Gründen der Vollständigkeit noch weiter mit einer Raildicke von $125\ \mu\text{m}$ diskutiert, auch wenn an dieser Stelle schon darauf hingewiesen wird, dass eine Herstellung ausgeschlossen wird.

Die einfache Kreuzfalle und die Ebenenfallen erfüllen, die an die Fangeigenschaften gestellten Anforderungen. Im folgenden Abschnitt wird sich herausstellen, ob die gewählten Geometrien neben dem Fangen von Ionen ebenfalls für die deterministische Extraktion geeignet sind.

3.3.3. Extraktionsmethoden

Die Extraktion aus der Falle kann über zwei grundsätzlich verschiedene Methoden erfolgen. Eine Möglichkeit besteht in der Verwendung der DC-Segmente zum Extrahieren der Ionen. Hierbei wird das Ion über dem Mittelsegment der Falle gefangen und gekühlt. Ist dies erfolgt, wird das Segment unter ihm und ein benachbartes Segment auf eine abstoßende Hochspannung gelegt, sodass ein Extraktionspotential in Form von Abbildung 3.21 resultiert.

Das Ion wird aus der Falle herausgedrückt und fliegt mit der ihm durch das Potential verliehenen Energie weiter in Richtung des Substrates. Diese Methode wurde bereits erfolgreich in der PCB-Falle genutzt und ermöglichte Extraktionsenergien von $80\ \text{eV}$ bzw. $22\ \text{km/s}$ bei einer Extraktionsspannung von $500\ \text{V}$ für Calcium [Wolfgang Schnitzler, 2010]. Die Segmentextraktion ist auf niedrige Extraktionsspannungen limitiert, da leicht Schäden an der Falle durch Spannungsüberschläge zwischen den Elektroden auftreten können. Zudem ist es möglich, dass es zu einer lawinenartigen Auslösung von Elektronen kommt, was wiederum zu einer längerfristigen Aufladung der Falle führt.

Die andere Methode nutzt eine nicht in der Falle befindliche Elektrode, die sogenannte Endkappe. Die Endkappe wird außerhalb der Falle auf der axialen Fallenachse platziert. Diese zylinderförmige Elektrode ist mit einem Loch in der Mitte versehen, um den Flug der Ionen aus der Falle nicht zu blockieren (siehe Abbildung 3.22).

Aufgrund ihrer Entfernung von der Fangposition hat die Endkappe nur minimalen Einfluss auf die Potentiale in der Mitte der Falle und wurde daher nicht in die Diskussion der Fan-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

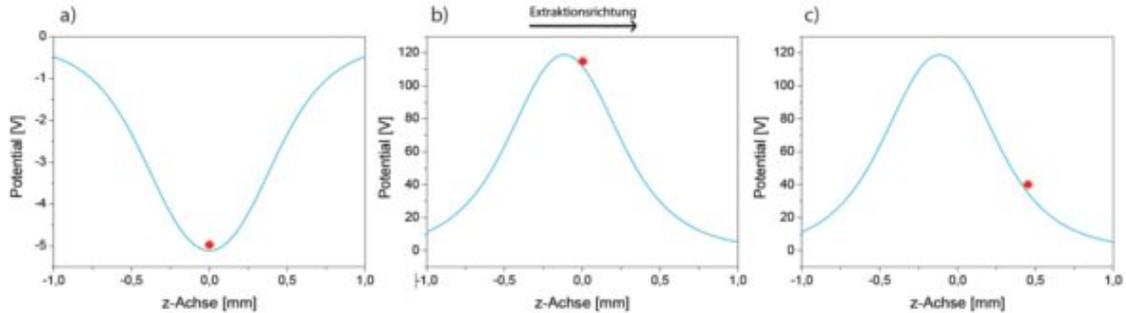


Abbildung 3.21.: Skizze des Ablaufs einer Segmentextraktion in der einfachen Kreuzfalle. In rot ist das Ion gekennzeichnet. a) zeigt das Ion im anfänglichen axialen Fangpotential für eine Spannung von -1 V und den Fallensegmenten 4,5 und 6. In b) ist das Extraktionspotential für eine Spannung von 500 V an den Elektroden 5 und 6 abgebildet mit geerdeter Elektrode 4. Zusätzlich ist das Ion in seiner ursprünglichen Position in der Mitte des Fangpotential eingezeichnet. c) zeigt das Ion zu einem späteren Zeitpunkt der Extraktion während des Verlassens der Falle, aufgrund des Extraktionspotential.

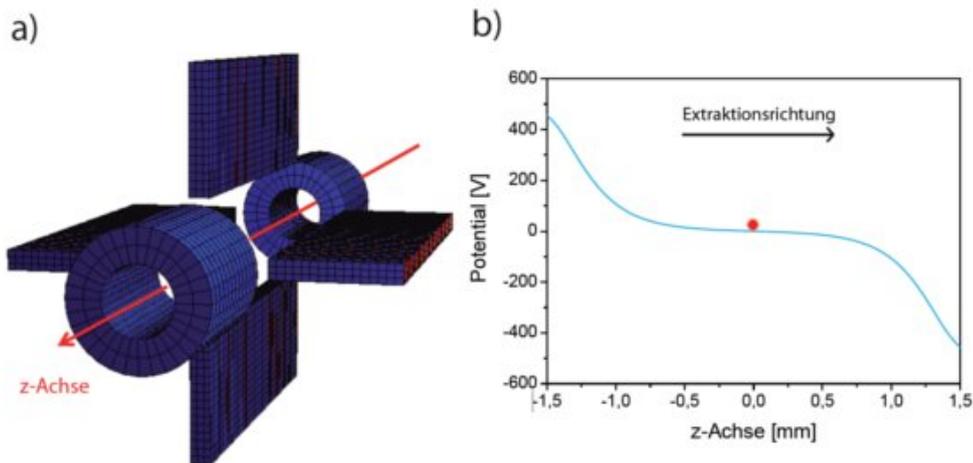


Abbildung 3.22.: a) Skizze der Kreuzfalle mit Endkappe. b) Simuliertes Extraktionspotential entlang der Fallenachse z . Erzeugt wird das Potential durch Anlegen von -500 V an der Endkappe für positive z und 500 V an der gegenüberliegenden Endkappe. In rot ist das Ion in der Position des Fangpotentials eingezeichnet.

geigenschaften mit einbezogen. Für die Simulation der Extraktion ist es notwendig, zwei Endkappen zu simulieren, um die Symmetrie der Falle nicht zu brechen. Dies hätte eine Verschiebung der numerischen Null aus der Fallenmitte zur Folge und würde die Fangei-

enschaften der Falle geringfügig ändern. Die Extraktion erfolgt über das Anlegen einer anziehenden Spannung an eine Endkappe. Dies stört den axialen Einschluss der Falle und das Ion wird in Richtung Endkappe aus der Falle gesaugt. Zusätzlich wird auf die zweite Endkappe eine gegenüber dem Ion abstoßende Spannung angelegt. Der Einfluss dieser Endkappe ist jedoch nur gering. Der Vorteil dieser Methode besteht in der Ausnutzung des erhaltenen Extraktionspotentials. Das Ion fliegt beim Verlassen der Falle durch das komplette Potential der anziehenden Endkappe, sodass es dieses zur Energiegewinnung effektiv ausnutzen kann. Eine abstoßende Endkappe alleine würde aufgrund der Abschwächung des Potentials innerhalb der Falle eine zu geringe Effizienz besitzen. Die Extraktion durch Nutzung der Endkappen bietet den Vorteil getrennter Fang- und Extraktionselektroden, sodass bei diesem Vorgang die Falle in ihrer Arbeitsweise autark bleibt. Da keine Hochspannung an die empfindlichen DC-Segmente angelegt werden muss, können Aufladungseffekte vermieden werden. Der Nachteil dieser Methode besteht in der Verschlechterung des direkten axialen optischen Zugangs, welcher durch die Endkappe eingeschränkt wird.

Für die vorgesehenen Fallen werden beide Methoden simuliert und verglichen. Von experimenteller Seite her besteht ein hohes Interesse an der Realisierung der Extraktion durch eine Endkappe, um höhere Energien schon bei dem Verlassen der Falle zu erhalten. Dies könnte allerdings auch durch eine Nachbeschleunigungslinse erzielt werden [G. Jacob, 2010], welche wie die Endkappe ein weiteres ionenoptisches Bauteil darstellt. Während die Ausrichtung der Endkappe aufgrund ihrer Nähe zur Falle verhältnismäßig einfach vorgenommen werden kann, birgt die Platzierung der Beschleunigungslinse eine größere Fehlerquelle bei der Konstruktion. Für beide Methoden werden Spotgröße (Standardabweichung der Ortsverteilung) σ_x und σ_y , Spotform, Emittanz E , Extraktionsgeschwindigkeit v_z und Standardabweichung σ_{vz} der Extraktionsgeschwindigkeit bei einer Extraktionsspannung von 500 V untersucht. Die Spotgröße und -form dienen zur Erklärung von Extraktionseffekten. Die Emittanz beschreibt die Qualität des aus der Falle kommenden Ionenstrahls (siehe Abschnitt 2.2.3). Die Extraktionsgeschwindigkeit und ihre Standardabweichung zeigen die zu erreichenden Energien und wie genau diese definiert sind.

Segmentextraktion

Die, für die Segmentextraktion, simulierten Fallen bestehen aus elf 200 μm langen DC-Elektroden, welche in einem Abstand von 30 μm zueinander angeordnet sind. Die simulierten Fallen besitzen damit alle eine Länge von 2,5 mm. Für die Extraktionssimulation wird die Störmer-Verlet-Trajektorien-Simulation genutzt (siehe Abschnitt 2.2.3). Für die Anfangsgeschwindigkeiten des Ions wird die Maxwell-Boltzmann-Verteilung um 2 mK verwendet.

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Die Radiofrequenzphase (im Folgenden als Extraktionsphase bezeichnet) zum Zeitpunkt des Anlegens der Extraktionsspannung wird nicht festgelegt. Diese Zufälligkeit der Phase entspricht einer Art „schlimmster Fall“-Szenario. Bereits in der PCB-Falle konnte gezeigt werden, dass die Extraktionsphase Einflüsse auf die Extraktion hat [Fickler, 2009]. Es wurde versucht, diesen Effekt durch das Triggern auf den Nulldurchgang der Radiofrequenz zu vermeiden. In der PCB-Falle verschlimmerten sich die Auswirkungen der Phasenabhängigkeit durch das Ablenken der Ionen innerhalb der Falle. Für die neuen Fallentypen werden externe Ablenkelektroden verwendet, sodass dieser Effekt nicht auftreten sollte. Um dies zu überprüfen, wurden alle Fallengeometrien auf ihre Abhängigkeit von der Extraktionsphase hin untersucht, jedoch konnte keine Phasenabhängigkeit im Rahmen des Fehlers der Simulation festgestellt werden. Aus Platzgründen wird lediglich für die am Ende dieses Abschnittes gewählte Fallengeometrie die Analyse der Extraktionsphase im Abschnitt der Fallenoptimierung aufgeführt (siehe Abschnitt 3.4.4).

Zu Beginn der Extraktionssimulation wird das Ion über der Elektrode 6, welche die Mitte der Falle darstellt, durch eine negative Spannung an den Elektroden 5,6 und 7 gefangen. Durch Anlegen einer Hochspannung von 500 V an die Segmente 5 und 6 verlässt das Ion die Falle in die positive z -Richtung. Die hintere Kante des letzten Fallensegmentes liegt bei 1,25 mm. Die Simulation wird noch weitere 700 μm fortgesetzt, um auslaufende Felder miteinbeziehen zu können. Danach wird die Trajektorien simulation beendet und die Werte für Ort und Geschwindigkeit werden gespeichert. Der weitere Verlauf der Trajektorie wird von hieran als linear angesehen, sodass eine Extrapolation der Daten zum Ort der Implantation keine neuen Erkenntnisse über die Falle liefern würde. Pro Falle werden 6×400 Extraktionen durchgeführt. Diese werden sowohl für angelegte Fangspannung (U_0 , V_{pp}) während der Extraktion, als auch für parallel zur Extraktion ausgeschaltete Fangspannung simuliert. Dies ermöglicht ein klares Bild über die Auswirkungen der Fallengeometrie sowie die Einflüsse von Radiofrequenz- und DC-Spannung auf die Trajektorie des Teilchens. Zwecks zusätzlicher Klärung wird ein Schnitt durch das Extraktionspotential am Ort des Ions angegeben.

Um einen Vergleichswert zu haben und die Größe der Emittanz E sowie die 1σ -Standardabweichung des Spots beurteilen zu können, werden dieselben Werte für die PCB-Falle simuliert, jedoch für eine feste Radiofrequenzphase von 180° . Ohne das Festlegen der Extraktionsphase verdoppeln sich im Falle der PCB-Falle sämtliche Größen. Wie bereits erwähnt, konnte dies bei den neuen Fallendesigns nicht festgestellt werden. Sämtliche Extraktionssimulationen werden mit $^{40}\text{Ca}^+$ durchgeführt. Die Fallen müssen aufgrund ihrer unterschiedlichen Fangeigenschaften mit verschiedenen Radiofrequenzen betrieben werden (siehe Abschnitt 3.3.2). Bei der Festlegung dieses Wertes wurde darauf geachtet, dass die

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

Falle in dem vorgeschriebenen Fallenfrequenzbereich von $\omega_{\text{radial}} > 2 \text{ MHz}$ und $\omega_{\text{axial}} > 1 \text{ MHz}$ betrieben wird.

Die RF-Elektroden beider Kreuzfallen und der 3-Ebenenfalle liegen in der x-Achse der Simulation. Die RF-Elektroden der 2-Ebenenfalle liegen im ersten $((+x, +y))$ und dritten Quadranten $((-x, -y))$. Die 3-Ebenenfalle.v2 besitzt vier RF-Elektroden, jeweils eine pro Quadrant.

Segmentextraktion, Fangspannung ausgeschaltet					
Fallentyp	σ_x [nm]	σ_y [nm]	E [(nm mrad) ²]	v_z [m/s]	σ_{vz} [m/s]
PCB Falle	1551	1485	131	22209	1,36
Rail-Kreuzfalle	130	263	17	9585	0,63
Kreuzfalle	138	852	7,4	22468	0,20
2-Ebenenfalle	446	950	288	25239	0,22
3-Ebenenfalle	805	62	2,4	25840	0,68
3-Ebenenfalle.v2	201	661	2,8	26463	0,81

Tabelle 3.10.: Auflistung der simulierten Extraktionseigenschaften für die Segmentextraktion mit ausgeschalteter Fangspannung.

Die Simulation zeigt deutlich, dass eine symmetrische Form des radialen Extraktionspotentials notwendig ist, um eine gleichförmige Spotverteilung zu erhalten. Die simulierten Ionen erfahren, die Rail-Kreuzfalle ausgenommen, auf ihrer Flugbahn durch das Extraktionspotential eine größere Ablenkung in Richtung der RF-Elektroden. Dies ist gut an den sich ergebenden größeren Potentialunterschieden bzw. Gradienten in Richtung der RF-Elektroden (siehe Abbildung 3.23) und den größeren Standardabweichungen der Ortsverteilungen zu erkennen. Für die 2-Ebenenfalle wird dies besonders deutlich, da diese nicht nur die Front ihrer Elektroden dem Ion zuwendet, sondern auch deren Innenflächen. Die Kreuzfalle und 3-Ebenenfalle.v2 nutzen beide nur zwei der Flügel zur Extraktion, wodurch sich eine Ausdehnung des Spots in die jeweils andere Achse ergibt. Bei der 3-Ebenenfalle sorgen die nahen geerdeten RF-Elektroden für eine Aufweitung des Spots. Abgesehen von der 2-Ebenenfalle besitzen alle Fallen sehr kleine und dadurch bessere Emittanzen im Vergleich zur PCB-Falle (siehe Tabelle 3.10). Dies kann auf die steiferen Potentiale und somit kleineren Ausgangspositionen für die Extraktion zurückgeführt werden. Auffallend ist auch, dass die Extraktionsgeschwindigkeit der Rail-Kreuzfalle um einen Faktor 2 geringer ist als bei den anderen simulierten Fallen. Dies resultiert aus der Abschirmung durch die Rails. Um ein besseres Verständnis des Extraktionsvorgangs zu ermöglichen, sind die Emittanzen der x- und y-Achse jeweils einzeln und zusammengerechnet in der Tabelle 3.11 notiert, wobei die einzelnen Achsen zu multiplizieren sind. Die Rail-Kreuzfalle verdeutlicht nochmals

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

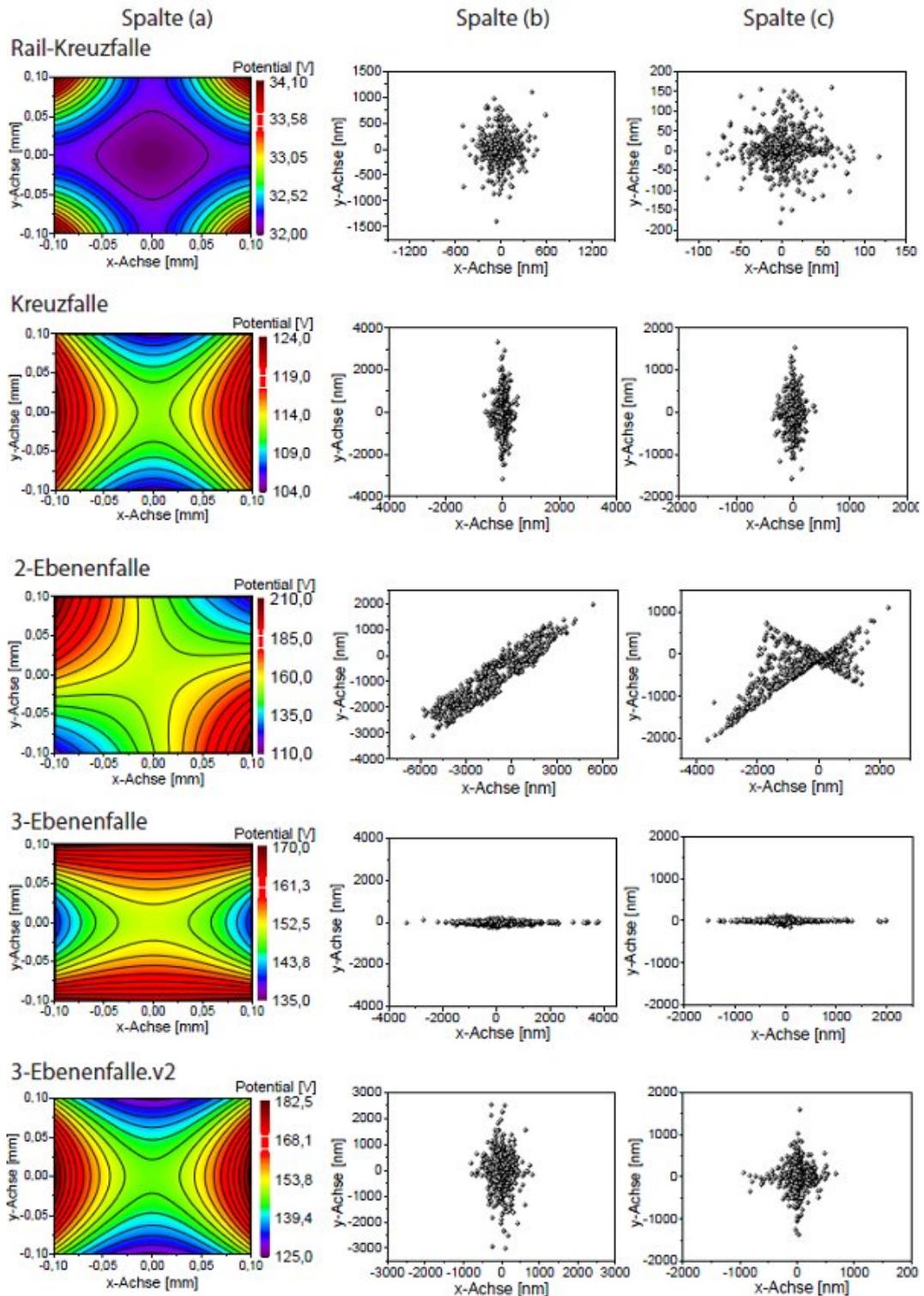


Abbildung 3.23.: Spalte (a) zeigt einen Schnitt durch das Extraktionspotential am Ort des Ions. In Spalte (b) ist das Spotdiagramm für ausgeschaltete Fangspannung bei der Extraktion abgebildet. Spalte (c) enthält das Spotdiagramm für angeschaltete Fangspannung bei der Extraktion. Ein Spot besteht aus 600 Einzelextraktionen.

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

Segmentextraktion, Fangspannung angeschaltet					
Fallentyp	σ_x [nm]	σ_y [nm]	E [(nm mrad) ²]	v_z [m/s]	σ_{vz} [m/s]
PCB Falle	406	355	128	22086	2, 2
Rail-Kreuzfalle	29	53	7, 9	9660	575
Kreuzfalle	86	396	$4, 7 \cdot 157 = 731$	22423	900
2-Ebenenfalle	504	407	129817	25118	494
3-Ebenenfalle	386	25	$209 \cdot 1, 50 = 315$	25858	1229
3-Ebenenfalle.v2	163	289	$258 \cdot 93 = 2383$	26406	1417

Tabelle 3.11.: Übersicht über die simulierten Extraktionseigenschaften für die Segmentextraktion mit angeschalteter Fangspannung.

die Verbesserung der Emittanz (kleinere Emittanz) durch eine Verkleinerung der Geometrie.

Auffällig ist die erhöhte Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit sämtlicher Mikrofallen. Verursacht wird die hohe Fluktuation der Geschwindigkeit durch die RF-Elektroden am Ende der Falle. Die RF-Felder beeinflussen die z -Komponente der Geschwindigkeit, indem zeitweise ein anziehender oder abstoßender Potentialoffset erzeugt wird. Innerhalb der Falle verlaufen die Felder der Elektroden radial und besitzen nur einen sehr schwachen axialen Anteil. Außerhalb der Falle verlaufen die Felder zurück zu den Elektroden, sodass sich starke Komponenten entlang der z -Achse ausbilden. Der geringere Abstand der Mikrofallenelektroden zum Ion verstärkt, im Vergleich zur PCB-Falle, den ungewollten Einfluss der RF-Elektroden auf die Trajektorie in den Randbereichen.

Ein weiterer Fehler der Standardabweichung σ_{vz} folgt aus den für die Simulation verwendeten Geometrien. Die RF-Elektroden der PCB-Falle besitzen in der Simulation keine Flächen, die von der Falle weg weisen. Aus diesem Grund ergeben sich schwächere Wechselfelder außerhalb der Falle. Zusätzlich enthält die simulierte Geometrie der PCB-Falle neben den genutzten Elektroden auch ungenutzte großflächig geerdete Elektroden und Leiterbahnen an den Enden der Falle. Dies verstärkt das Abklingen der Potentiale außerhalb der Falle. In den Randbereichen der anderen Fallen klingen die Potentiale nur langsam ab, da diese großen Leiterstücke fehlen. Bei den simulierten Mikrofallen werden lediglich 1 mm lange Elektroden simuliert, da diese Länge im Verhältnis zur Fallengröße gesehen einer ausreichenden Größe entspricht, um die grundlegenden Falleneigenschaften abschätzen zu können.

Im späteren Experiment wird die Standardabweichung σ_{vz} somit geringer ausfallen als die aus der Simulation erhaltene, da weitere Leiter durch Halterung, Ofen und Vakuumtopf für ein schnelleres Abklingen der Potentiale sorgen werden. Dies konnte schon für die PCB-Falle

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

festgestellt werden [Wolfgang Schnitzler, 2010]. Dieser Effekt kann für die Mikrofallen mit einer Verbesserung der Standardabweichung um eine Größenordnung abgeschätzt werden. Die simulierten Emittanzen verschlechtern sich nicht durch ein höheres σ_{vz} . Erst bei der Berechnung der Fehler spielt dies eine Rolle. Die Emittanz wird vor allem von dem gegenüber dem Pseudopotential asymmetrischen Extraktionspotential beeinflusst. Deutlich ist dies an den Emittanzen der x-Achse der 3-Ebenenfallen und der y-Achse der Kreuzfalle zu erkennen. Das Extraktionspotential besitzt in radialer Ebene die Form eines Sattelpotentials und übt somit eine Kraft entgegen denen des Pseudopotentials aus. Beim Einschalten gewinnen die Ionen nicht nur wie gedacht in axialer Richtung, sondern auch in radialer Richtung Energie.

Die angelegte Radiofrequenz zwingt die Ionen, während der Extraktion weiterhin die Säkular- und Mikrobewegung auszuführen. Der Einschluss sorgt dafür, dass die Ionen während der Extraktion nicht stark divergent auseinander laufen. Dies garantiert zwar, dass die Spotgröße kleiner bzw. in der selben Dimension ist wie bei der Extraktion ohne Radiofrequenz, jedoch erleidet das Ion durch die angeschaltete Radiofrequenz weiterhin Mikrobewegung, die sich in Kombination mit dem asymmetrischen Extraktionspotential sogar deutlich verstärkt, was sich in einer höheren Emittanz niederschlägt. Die Kreuzfalle und die 3-Ebenenfalle sind hiervon ebenfalls betroffen, allerdings in geringerem Maße. Die Form des Pseudopotentials und die des Extraktionspotentials sind für die PCB-Falle identisch. Diese Art der Extraktion erweist sich als ideal für diese Fallengeometrie.

Nicht explizit wurden die Auswirkungen des DC-Potentials auf die Extraktion simuliert. Die Effekte sind für die Segmentextraktion aber von untergeordneter Rolle. Das Extraktionspotential wird, genau wie die Fangspannung, ebenfalls an die Segmente angelegt. Diese sorgt somit hauptsächlich für eine leichte Abschwächung des Extraktionspotentials.

Endkappenextraktion

Für die Extraktion mit den Endkappen gelten dieselben Voraussetzung wie für die Segmentextraktion. Es werden Ionen einer thermischen Verteilung folgend mit einer Temperatur von 2 mK erzeugt, in der Falle für eine gewisse Zeit gespeichert und bei einer zufälligen Extraktionsphase anschließend extrahiert. Die Endkappen werden hierfür jeweils auf -500 V und $+500$ V gelegt. Die Falle besitzt wie bei der ersten Simulation elf Segmente. Die Endkappen haben eine Länge von 1 mm und befinden sich in einem Abstand von $200 \mu\text{m}$ zu den beiden Enden der Falle. Der Durchmesser der Endkappe beträgt $800 \mu\text{m}$ und in ihrer Mitte befindet sich ein durchgehendes Loch mit einem Durchmesser von $400 \mu\text{m}$. Die Extraktion wird, nachdem das Ion in die Mitte der Endkappe gelangt ist, beendet. Dies geschieht in der Annahme, dass sich das Ion im abgeschirmten homogenen Potential der Endkappe

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

befindet. Die Endkappe kann in diesem Moment abgeschaltet werden, sodass das Ion eine lineare Flugbahn bis zum Erreichen des Substrates durchführt. Für eine Spezifikation der Extraktion durch die Endkappen werden für jede Falle 6×400 Extraktionen bei an- und ausgeschalteter Fangspannung durchgeführt.

Im Gegensatz zu den Extraktionspotentialen der Segmentextraktion handelt es sich hierbei um anziehende Potentiale. Anhand der radialen Extraktionspotentiale in Abbildung 3.24 Spalte (a) kann erkannt werden, dass die Ionen im Fall der Kreuzfallen auf den äußeren Ring der Endkappe hin beschleunigt werden. Diese defokussierende Wirkung entsteht durch das sich bildende Potential, welches von seiner Form einem Potentialberg entspricht. Beide 3-Ebenenfallen besitzen das gleiche Extraktionspotential. Dieses wirkt vor allem in der y-Achse defokussierend, da durch die in der x-Achse befindlichen Elektroden das Potential stärker abgeschwächt wird als in der y-Achse (Achse des optischen Zugangs). Spotform und Emittanz (siehe Tabelle 3.12) weisen daher größere und somit schlechtere Werte in dieser Achse auf. Bei den Kreuzfallen deckt sich die aus dem radialen Extraktionspotential erwartete Spotform mit der aus der Simulation erhaltenen. Die 2-Ebenenfalle erleidet große Fehler in der Simulation durch eine nicht durchführbare Symmetrisierung der Oberflächenladungen. Im späteren Verlauf dieses Abschnittes wird dieses Problem ausführlicher besprochen.

Endkappenextraktion, Fangspannung ausgeschaltet					
Fallentyp	σ_x [nm]	σ_y [nm]	E [(nm mrad) ²]	v_z [m/s]	σ_{vz} [m/s]
Rail-Kreuzfalle	36	67	0,66	49090	0,09
Kreuzfalle	8,9	10,3	1,6	49093	0,07
2-Ebenenfalle	15,6	2569	$1,67 \cdot 183 = 306$	49084	0,93
3-Ebenenfalle	22	1304	$0,93 \cdot 4,40 = 4,09$	49088	0,25
3-Ebenenfalle.v2	18	1774	$0,84 \cdot 7,40 = 6,22$	49088	0,33

Tabelle 3.12.: Tabelle der simulierten Extraktionseigenschaften für die Endkappenextraktion mit ausgeschalteter Fangspannung.

Um ein besseres Verständnis des Extraktionsvorgangs zu ermöglichen, sind die Emittanzen für die x- und y-Achse jeweils einzeln und zusammengerechnet in der Tabelle 3.12 notiert. Im Fall der Ebenenfallen ist zu erkennen, dass eine schlechtere Emittanz (größerer Wert) und somit größere Divergenz in der y-Achse auftritt. Für eine zylindersymmetrische Ionenlinse gestaltet es sich als schwierig, einen Ionenstrahl richtig zu fokussieren, der stark unterschiedliche Emittanzen in den jeweiligen Achsen besitzt. Aus den unterschiedlichen Divergenzen resultieren verschiedene Fokusslängen. Eine neue Einzellinse wäre daher im Fall einer Ebenenfalle erforderlich. Dieses Problem gilt ebenfalls für die unterschiedlichen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

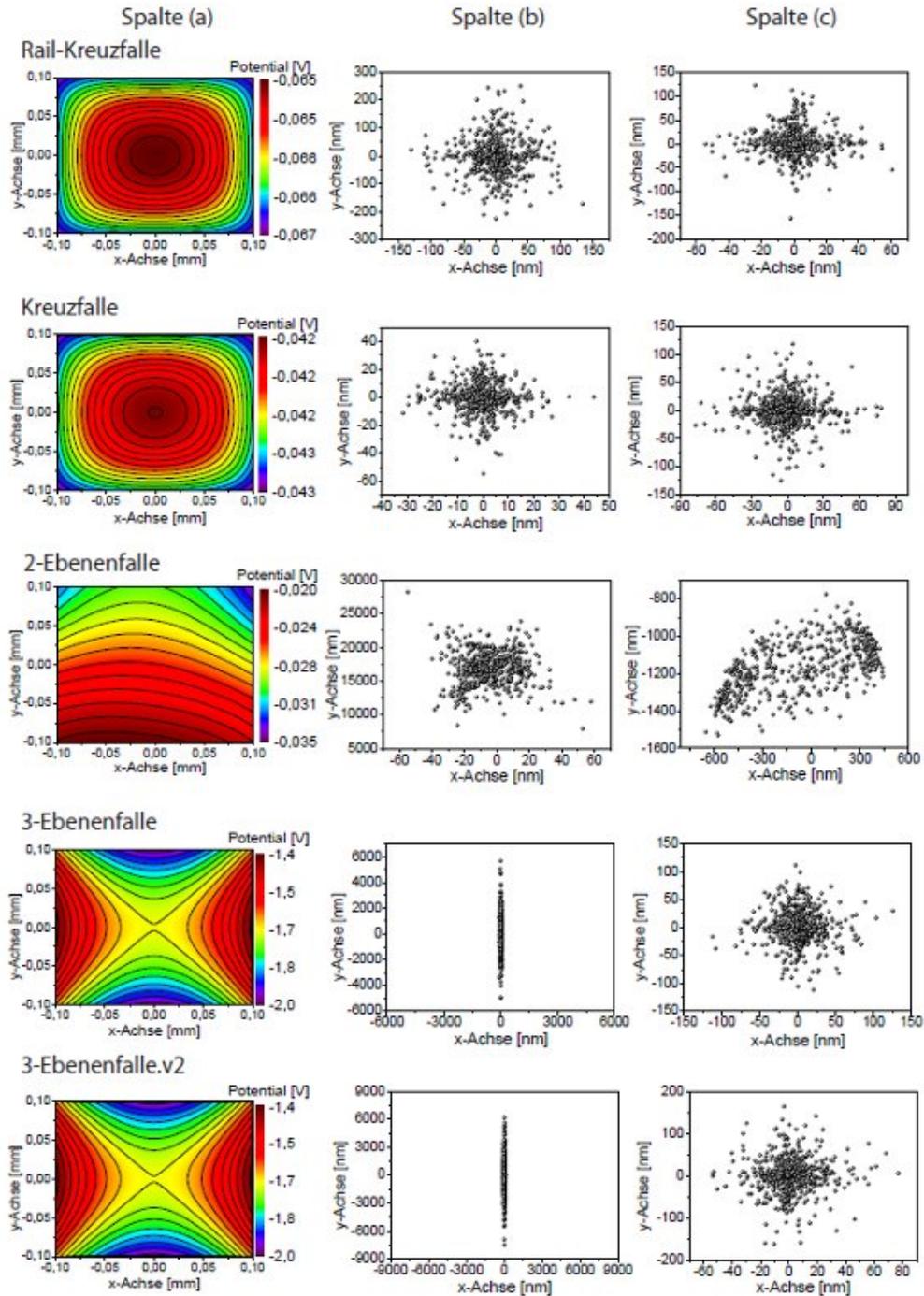


Abbildung 3.24.: Spalte (a) zeigt einen Schnitt durch das Extrapotential am Ort des Ions. In Spalte (b) ist das Spotdiagramm für ausgeschaltete Fangspannung bei der Extraktion abgebildet. Spalte (c) enthält das Spotdiagramm für angeschaltete Fangspannung bei der Extraktion. Ein Spot besteht aus 600 Einzelextraktionen.

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

Emittanzen bei der Segmentextraktion. Hiervon sind, mit Ausnahme der Rail-Kreuzfalle, alle Fallen betroffen.

Die Kreuzfallen hingegen profitierten von der Methode der Extraktion. Aufgrund der symmetrischen Anordnung der Elektroden ergibt sich ein fast radialsymmetrisches Extraktionspotential. Die Verteilung kann als gaußförmig charakterisiert werden und stellt ein Idealmaß einer zu fokussierenden Ionenquelle dar. Die Werte der Emittanzen liegen, mit Ausnahme der 2-Ebenenfalle, unter denen der PCB-Falle.

Eine Extraktion mittels einer Endkappe ist nur aus sehr kurzen Fallen möglich, da ansonsten der das axiale Fangpotential schwächende Durchgriff fehlt. Eine Endkappe für die PCB-Falle ist aufgrund ihrer Länge daher nicht möglich. Die Extraktionsgeschwindigkeiten betragen bei gleicher Extraktionsspannung mehr als das Doppelte als bei der Segmentextraktion. Der Wert von 49 km/s verdeutlicht die exzellente Ausnutzung des Extraktionspotentials. Die maximal verfügbare Energie des auf -500 V gelegten Endkappenpotentials beträgt 500 eV. Für 49 km/s ergibt sich für Calcium eine Energie von $\sim 498,7$ eV. Die Ausnutzung beträgt somit 99,73 %.

Endkappenextraktion, Fangspannung angeschaltet					
Fallentyp	σ_x [nm]	σ_y [nm]	E [(nm mrad) ²]	v_z [m/s]	σ_{vz} [m/s]
Rail-Kreuzfalle	14,4	31	0,65	49020	2679
Kreuzfalle	20	30	1,3	49084	3243
2-Ebenenfalle	327	141	3649	48810	2469
3-Ebenenfalle	26	29	0,48	49148	3435
3-Ebenenfalle.v2	17,8	44	0,75	48873	2291

Tabelle 3.13.: Auflistung der simulierten Extraktionseigenschaften für die Endkappenextraktion mit angeschalteter Fangspannung.

Mit angeschalteter Fangspannung während der Extraktion verschwinden die Effekte der unterschiedlichen Emittanzen und Ortsverteilungen (siehe Tabelle 3.13). Die Radiofrequenz bietet den Vorteil, dass die Ionen bis zum Verlassen der Falle geführt werden. Die Ebenenfallen profitieren hiervon am meisten. Die Form des Extraktionspotentials ändert sich, je näher man der Endkappe kommt, hin zu einem radialsymmetrischen Potential. Die Asymmetrie des Extraktionspotentials übt daher im Vergleich zur Segmentextraktion nur einen geringen Einfluss auf die Emittanz aus.

Am auffälligsten sind die hohen Werte von σ_{vz} im Bereich von 3000 m/s, welche sich für alle Fallen ergeben. Die Ursache liegt in der geringen Entfernung der Endkappe zum Fallende ($200 \mu\text{m}$) und somit zu den RF-Elektroden. Die Felder der Elektrodenflächen am Rand der Falle verlaufen vermehrt auf die dem Ion zugewandten Seite der Endkappe. Das Potential

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

im Nahbereich der Endkappe wird daher mit der Frequenz der Radiofrequenz moduliert. Während das Ion in der Mitte der Falle gefangen ist, nimmt es diesen Effekt nicht wahr. Die äußeren Segmente der Falle schirmen Felder von außen stark ab, was schon am Verlauf des Extraktionspotentials (siehe Abbildung 3.22) erkannt werden kann. Beim Extrahieren kommt das Ion der Endkappe immer näher, sodass es eine Mikrobewegung in z -Richtung erfährt und somit eine hohe Fluktuation der Geschwindigkeit erleidet.

Die erzielten Werte für Emittanz und Spotgröße sind, mit Ausnahme der 2-Ebenenfalle, welche einen Sonderfall darstellt, sehr gut. Die in die Simulation eingebunden Elektroden der 2-Ebenenfalle können in keine symmetrische Beziehung zueinander gebracht werden, da sie getrennt angesprochen werden müssen. Das Simulationsprogramm verteilt daher die Oberflächenladungen unterschiedlich. Die Fangeigenschaften werden hierdurch nur minder beeinflusst, jedoch ergeben sich große Feldfehler zwischen der Endkappe und den Fallenelektroden. Die gewonnenen Daten sind somit nur bedingt aussagekräftig, werden jedoch der Vollständigkeit halber aufgeführt. Vom Verhalten her kann jedoch angenommen werden, dass die 2-Ebenenfalle bei der Extraktion mittels Endkappe ähnliche Eigenschaften wie die 3-Ebenenfalle aufweist. Bei den restlichen Fällen konnte eine erfolgreiche Symmetrisierung der Oberflächenladungen vorgenommen werden.

Fazit der Extraktionseigenschaften

Die 2-Ebenenfalle erweist sich als unbrauchbar für die Extraktion. Sowohl für die Segmentextraktion als auch für die Extraktion mit Hilfe einer Endkappe ergeben sich schlechte Werte für die Emittanz. Die resultierende Spotform erweist sich als ungünstig für das bestehende System der Fokussierung.

Die 3-Ebenenfallen sind für die Extraktion mittels DC-Elektroden ungeeignet. Es ergeben sich zu starke Unterschiede in den Emittanzen der einzelnen Achsen, um diese mit der bestehenden Ionenoptik weiter fokussieren zu können. Bei höheren Extraktionsspannungen würden sich diese Effekte verschlimmern. Die erreichten Geschwindigkeiten bzw. Energien sind zwar höher als die der PCB-Falle, allerdings leidet der für die spätere Fokussierung wichtige Parameter der Standardabweichung von v_z unter einer angeschalteten Radiofrequenz bei der Extraktion. Eine Möglichkeit würde im Abschalten der Radiofrequenz für die Extraktion bestehen (siehe Abschnitt 3.3.3).

Aufgrund ihrer Bauart sind die DC-Elektroden und RF-Elektroden durch eine $125\ \mu\text{m}$ dicke Schicht Isolatormaterial getrennt. Dies stellt die Idealform eines Plattenkondensators dar und sorgt somit für sehr große Kapazitäten innerhalb der Falle. Hohe Kapazitäten

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

(>pF) verhindern unter anderem ein schnelles Abklingen der RF-Spannungen und sorgen für lange Lade- bzw. Entladevorgänge der Elektrode. Bei den verwendeten Frequenzen im MHz-Bereich entsteht hierdurch eine hohe kapazitive Last am Verstärker der Radiofrequenz.

Die Extraktion mittels einer Endkappe ist nur bei angeschalteter Radiofrequenz sinnvoll. Die Simulation liefert auch hier hohe Standardabweichungen von v_z im Vergleich zur PCB-Falle. An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass die 3-Ebenenfalle durch ein Verkürzen der RF-Elektroden modifiziert werden kann. Dies führt zu symmetrischeren Potentialen bei der Extraktion. In gleichem Maße wird aber der Einschluss durch das Pseudopotential vermindert, sodass die Stabilitätsbereiche der Falle hierunter leiden. Die ohnehin schon kleinen Bereiche, in denen das Fangen von Calcium und Stickstoff möglich ist, würden weiter reduziert werden. Eine andere Möglichkeit, diese Geometrie für die Extraktion zu verändern, besteht im Verwenden dickerer Abstandshalter zwischen den Elektroden. Die vorderen Flächen der Elektroden verlieren durch den größeren Abstand an Einfluss auf das Potential. Die zueinander gewandten Innenflächen der Elektroden gewinnen mit zunehmendem Abstand der Elektroden an Bedeutung für den Feldverlauf innerhalb der Falle. Dies führt zu einer Verschlimmerung der Asymmetrie, statt diese zu verbessern. Zusätzlich wird der Winkel des optischen Zugangs durch größere Abstandshalter verkleinert.

Die Rail-Kreuzfalle stellt eine verkleinerte Version der PCB-Falle dar. Die steiferen Potentiale und somit kleineren Fangbereiche führen zu besseren Emittanzen. Das Design der Falle eignet sich besonders für die Segmentextraktion, da die vier symmetrischen DC-Elektroden ein Potential erzeugen, welches die selbe Form wie das Pseudopotential besitzt. Dies führt im Fall der angeschalteten Fangspannung bei der Extraktion zu den besten Emittanzen der getesteten Fallen. Bei der Segmentextraktion erweist sich die 125 μm dicke Rail jedoch auch gleichzeitig als Nachteil. Die Effizienz des Durchgriffs wird deutlich gemindert und verursacht eine um einen Faktor 2 kleinere Extraktionsgeschwindigkeit. Eine Verkleinerung der Rail verkompliziert die ohnehin schon schwierige Konstruktion (siehe Abschnitt 3.3.2). Die Standardabweichungen der Geschwindigkeiten sind um zwei Größenordnungen schlechter als bei der PCB-Falle.

Von Nachteil erweist sich auch die Nähe der Elektroden zueinander. Die 30 μm breite Lücke zwischen den Segmenten sollte im Ultrahochvakuum eine Durchbruchsspannung von 30000 V ermöglichen [Slade and Taylor, 2002]. Im realen Experiment sind allerdings Kurzschlüsse bei wesentlich kleineren Werten möglich. Die aus dem Calciumofen kommenden Atome lagern sich zum Teil auf der Oberfläche der Falle an und können unbemerkt leitende

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Strukturen zwischen den Elektroden bilden. Das Anlegen einer Hochspannung hätte zerstörerische Folgen für Elektronik und Falle. Auch bei der Fertigung kann es zu Abweichungen kommen oder kleine Goldreste auf der Oberfläche verbleiben. Diese Imperfektionen mindern die Durchbruchsspannung lokal und führen zu einer unvorhersehbaren Gefahr für die Falle.

In der Theorie der Falle wird diese hauptsächlich als Kondensator angesehen. In der Praxis ergeben sich allerdings trotzdem kleine Ströme zwischen den Elektroden. Die Kontaktierung der Elektroden findet durch sogenannte gebondete Drähte statt (siehe Abschnitt 3.5). Diese $100\ \mu\text{m}$ dicken Drähte stellen Sollbruchstellen in der Kontaktierung dar, welche aufgrund der kurzzeitig entstehenden Wärmeentwicklung beim Anlegen einer Hochspannung abgesprengt werden können.

Bei der Extraktion mittels der Endkappen erzielt die Falle gute Werte, allerdings kann diese Elektrodenanordnung nur in der Simulation existieren. In der Realität kann die Rail nicht auf der Seite der Endkappe gehalten werden. Es müssten isolierende Führungslöcher durch die auf Hochspannung gelegte Elektrode gebohrt werden. Der optische Zugang würde durch diese Halterung reduziert werden, da sich ein sämtliche Elektroden haltender und ausrichtender Kasten an den jeweiligen Enden der Falle befinden würde und dies in einem sehr geringen Abstand zur Mitte der Falle. Ein $125\ \mu\text{m}$ dicker Draht, welcher sich über eine Strecke von mehr als 2 mm selbst trägt, ist ebenfalls auszuschließen, sodass die Rail-Kreuzfalle nicht realisierbar ist.

Die einfache Kreuzfalle leidet bei der Extraktion mittels Fallensegmenten unter dem Problem einer größeren Emittanz für eine Fallenachse gegenüber der anderen. Bei angelegter Radiofrequenz sorgen die bereits erklärten Effekte durch den Unterschied zwischen Pseudopotential und Extraktionsspannung für eine weitere Verschlechterung der Emittanz. Diese Extraktionsmethode scheidet somit für diese Falle aus.

Die Extraktion mit einer Endkappe erweist sich als ideal für diese Art der Elektrodenanordnung. Die erzielten Emittanzen liegen hierbei zwei Größenordnungen unter denen der PCB-Falle. Durch die Anordnung der Elektroden werden Unterschiede in den Emittanzen und Ortsverteilungen der einzelnen Achsen verhindert. Die sich ergebende Spotform passt daher zu dem bestehenden Fokussiersystem der Einzellinse. Die Extraktionsgeschwindigkeit kann bei gleicher Extraktionsspannung verdoppelt werden und es besteht die Möglichkeit, weit höhere Spannungen an die Endkappe anzulegen. Der relative Fehler der axialen Extraktionsgeschwindigkeit bleibt bei der Extraktion mit angeschalteten Fangspannungen dennoch zwei Größenordnungen über dem der PCB-Falle. Einen Ausweg stellt das Ab-

schalten der Radiofrequenz für den Extraktionsvorgang da. Ob diese Annahme sich als realistisch für das Experiment erweist, soll im nächsten Abschnitt geklärt werden.

Ausschalten der Radiofrequenz

In der einfachsten elektronischen Betrachtung wird die Falle als einfacher Kondensator angesehen. In der Realität liegt durch Leitungen, Lötstellen, Vakuumdurchführungen und den Topfkreis, welcher zur Überhöhung der Radiofrequenz benutzt wird, ein komplexer Schaltkreis mit Induktivitäten, Kapazitäten und Verlusten vor. Zum Abschalten der Radiofrequenz erweist es sich am einfachsten, die Radiofrequenz-Versorgung zwischen Topfkreis und Elektroden außerhalb des Vakuums zu trennen. Die Fallenelektroden werden geerdet und es kommt zu einer Entladung des noch verbleibenden RLC-Schwingkreises.

Zu Beginn dieser Überlegung soll untersucht werden, welche Zeitkonstante $\tau = R \cdot C$ durch die Simulation der Trajektorien sich als notwendig erweist, um den Einfluss der Radiofrequenz auf die Extraktion zu minimieren. Die Simulation wird für eine feste Extraktionsphase von 180° vorgenommen. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird gezeigt, dass bei der Kreuzfalle hieraus kein feststellbarer Unterschied zur Simulation mit zufälliger Phase auftritt (siehe Abschnitt 3.4.4). Für das Abklingen der Radiofrequenzamplitude wird ein exponentieller Zerfall angenommen, welcher durch $(V_{pp}/2) \cdot \exp(-t/\tau)$ definiert wird. Nach 5τ ist die Spannung zu 99,9 % abgefallen. Getestet werden die Zeitkonstanten 10 ns, 25 ns, 50 ns und 75 ns mit Extraktionsspannungen von 500 V bis 3000 V, welche in 500 V Schritten variiert werden. Verwendet wird die Geometrie der Kreuzfalle des folgenden Abschnitts (siehe Abbildung 3.28), sodass die Untersuchung der Abhängigkeit nicht zweimal durchgeführt werden muss. Um einen Fehler für Emittanz und σ_{vz} angeben zu können, werden für jede Extraktionsspannung und Zeitkonstante sechs vollständige Extraktionen zu je 250 Wiederholungen ausgeführt und die sich daraus ergebende Standardabweichung gebildet. Im Plot von σ_{vz} aus Abbildung 3.25 a) zeigt sich der erwartete Zusammenhang zwischen Zeitkonstante, Standardabweichung und Extraktionsspannung. Für große Zeitkonstanten dringt das Ion zu schnell in die Randbereiche der Falle vor und wird von den Radiofrequenzfeldern, die zur Endkappe verlaufen, durch die axiale Mikrobewegung negativ beeinflusst. Eine hohe Extraktionsspannung zieht das Ion ebenfalls zu schnell aus der Falle, sodass die RF-Amplitude nicht schnell genug abklingen kann. Für kleinere Zeitkonstanten von 25 ns und 10 ns ist ein leichter bzw. kein Einfluss der Radiofrequenz mehr zu erkennen.

Interessant gestalten sich die Auswirkungen auf die Emittanzen. Wie in Abbildung 3.24 Spalte (a) der Kreuzfalle zu erkennen ist, bewirkt das Potential der Endkappe eine zusätzliche Beschleunigung in die radiale Richtung. Je weiter sich das Ion von der axialen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

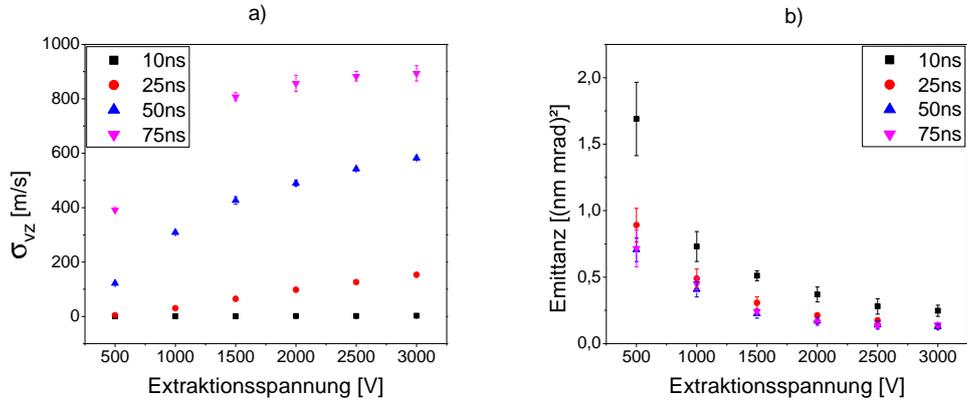


Abbildung 3.25.: Überblick über die aus der Simulation erhaltenen Daten für das Abschalten der Radiofrequenz. Abbildung a): Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit gegen Extraktionsspannung für verschiedene Zeitkonstanten. Abbildung b): Emittanz gegen Extraktionsspannung für verschiedene Zeitkonstanten. Gut zu erkennen ist, dass sich die Emittanz mit größerer Zeitkonstanten τ verbessert (verkleinert).

Fallenachse entfernt, desto stärker fällt diese aus. Dem entgegen wirkt das Pseudopotential der RF-Elektroden. Wirkt das Pseudopotential länger auf das Ion ein (lange Zeitkonstanten τ), verbleibt es länger nahe an der Fallenachse und erfährt eine geringere Divergenz in radialer Richtung (siehe Abbildung 3.26 b)). Außerdem wird die Strahlaufweitung und somit die 1σ -Spotgröße beschränkt (siehe Abbildung 3.26 a)), solange die RF-Spannung ausreicht, das Ion einzuschließen. Dadurch verbessert (verkleinert) sich die Emittanz für langsam abklingende RF-Amplituden, sprich für große Zeitkonstanten τ (siehe Abbildung 3.24 b)).

Mit steigender Extraktionsspannung sinken sämtliche Emittanzen aufgrund des formelnen Zusammenhangs mit der Extraktionsgeschwindigkeit (siehe Abschnitt 2.2.3). Jedoch schwinden die Unterschiede zwischen den einzelnen Zeitkonstanten mit wachsender Extraktionsspannung, da das Ion kürzer auf die Führung durch die Radiofrequenz angewiesen ist.

Der 1σ -Radius fällt für kürzere Zeitkonstanten größer aus, da die Ionen innerhalb der Falle früher die Führung verlieren. Aufgrund des beschriebenen Energiegewinns in den radialen Achsen weist der Divergenzwinkel dasselbe Verhalten auf.

Ein Abschalten der Radiofrequenz bringt nur bedingt einen Vorteil. Kleinere Emittanzen werden durch eine angeschaltete RF-Spannung während der Extraktion begünstigt, während definierte Extraktionsenergie bzw. Geschwindigkeiten in axialer Richtung von kurzen

3.3. Grundgeometrien von Paulfallen

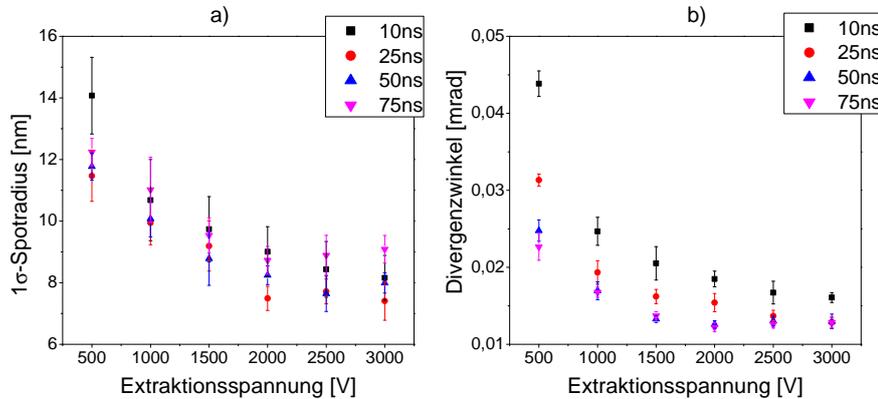


Abbildung 3.26.: Überblick über die aus der Simulation erhaltenen Daten für das Abschalten der Radiofrequenz. Abbildung a): 1σ -Spotradius gegen Extraktionsspannung für verschiedene Zeitkonstanten einer Fallenachse. Abbildung b): Divergenzwinkel der Extraktionsgeschwindigkeit gegen Extraktionsspannung für verschiedene Zeitkonstanten einer Fallenachse.

Abklingzeiten profitieren. Im Experiment ist ein Kompromiss zu wählen, wobei der Vorzug bei klar definierten Extraktionsenergien (kleinem σ_{vz}) liegt, da dies zu einer Minimierung der chromatischen Aberration der Einzellinse führt [Fickler, 2009]. Die sich von experimenteller Seite stellende Frage ist, ob eine Realisation solch kurzer Abklingzeiten überhaupt möglich ist. Mit Pspice¹ wurde versucht, ein System zu simulieren, welches dem in der Realität vorliegenden Aufbau nahe kommt.

Aus der Simulation mit Pspice (siehe Abbildung 3.27 a)) folgt, dass es möglich sein sollte, eine entsprechend niedrige Abklingzeit zu erhalten. Jedoch ist diese entscheidend von der abfallenden Flanke der verwendeten Wechsellspannungsschalter (im folgenden als AC-Switch bezeichnet) abhängig. Die Firma Behlke² bietet geeignete Produkte an, jedoch wurden die bestellten AC-Switches im zeitlichen Rahmen dieser Diplomarbeit nicht geliefert, sodass die wichtige Messung der Zeitkonstanten nicht möglich war. Für die weiteren Simulationen wird daher eine Zeitkonstante von 25 ns gewählt.

Der Vollständigkeit halber soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die Simulationen mit einer festen Extraktionsphase ausgeführt wurden. Für eine Extraktionsspannung von 3000 V liefert die Simulation Werte für eine Dauer des Extraktionsvorgangs zwischen 65 ns und 110 ns, je nach verwendeten Fallenparametern. Die Länge einer Radiofrequenzperiode beträgt für eine Antriebsfrequenz von 16,5 MHz lediglich 60,6 ns. Ein gewisser

¹Cadence Design Systems www.cadence.com

²www.behlke.de

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

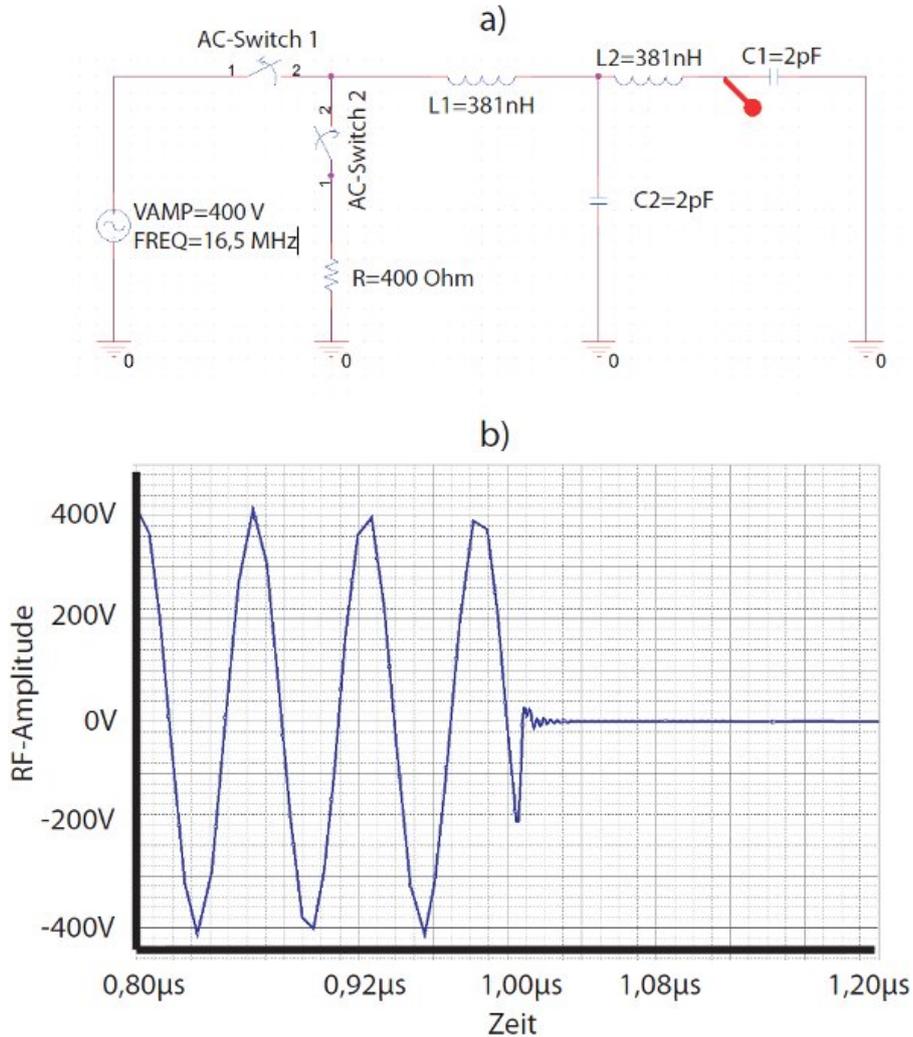


Abbildung 3.27.: a) Aufbau der mit Pspice simulierten Schaltung. C1 entspricht der Kapazität der Falle, C2 der Kapazität der Vakuumdurchführung. L1 und L2 entsprechen den Induktivitäten der verwendeten Kapton Drähte. R entspricht mit 400 Ohm dem zu wählenden Widerstand für ein schnelles Abklingen des Systems. AC-Switch 1 & 2 sind die vermessenden Schalter von Behlke. In der Simulation wurde eine Falltime von 10 ns gewählt. b) Spannungsverlauf am Messpunkt. In der Schaltung ist der Messpunkt durch den roten Abgriff markiert.

Einfluss der Radiofrequenzphase auf die Extraktion ist somit nicht auszuschließen, auch wenn dieser im Rahmen der Genauigkeit der Simulation nicht aufzulösen war.

Es würde den zeitlichen Rahmen dieser Diplomarbeit überspannen, die entsprechend not-

wendigen Simulationen zur Charakterisierung der Auswirkung der Extraktionsphase bei unterschiedlichen Zeitkonstanten durchzuführen. Für das Bestimmen der optimalen Parameter müsste ein vierdimensionaler Parameterraum durchsucht werden. Die Endkappenpositionen müssten in Abhängigkeit von der Extraktionsspannung für verschiedene Zeitkonstanten und Radiofrequenzphasen getestet werden, um ein Optimum zu finden. Der hierdurch erzielte Gewinn in der Qualität der Parameter wird als zu gering eingeschätzt im Verhältnis zu dem nötigen zeitlichen Aufwand.

Der Vollständigkeit halber wurde für eine Position der Endkappe und eine Zeitkonstante mit der finalen Fallengeometrie eine Simulationsreihe durchgeführt. Eine Diskussion erfolgt im Abschnitt 3.4.4. Unter Berücksichtigung aller Fallenparameter und Extraktionseigenschaften kann ein favorisiertes Fallendesign bestimmt werden, worauf das folgende Fazit kurz eingeht.

Fazit der Fallenvergleiche

Nach dem Sammeln sämtlicher, für den Bau einer Implantationsfalle relevanter Fakten ist ein zu bevorzugendes Design erkennbar. Die Kreuzfalle in Kombination mit einer Endkappe erfüllt alle gestellten Anforderungen. Die durch die Laserbearbeitung verfügbaren Keramiksubstrate ermöglichen die Konstruktion einer dreidimensionalen Falle für die Extraktion. Das Design der Kreuzfalle mit Endkappe erweist sich als schwierig, jedoch lösbar. Im Abschnitt 3.5 wird die gewählte Methode für die Halterung der Fallenflügel vorgestellt. Die Dimensionierung im Bereich von <1 mm gewährleistet hohe Frequenzen bei kleinen verwendeten Fangspannungen und bietet somit Zugang zu besser gekühlten Ionen, welche die Emittanz weiter verbessern (siehe Abschnitt 3.4.4). Eine Extraktion mittels der Endkappe schützt die Falle vor Schäden durch hohe Spannungen und liefert Emittanzen die im Vergleich mit der PCB-Falle um einen Faktor von 100 besser sind. Die Extraktionsenergien liegen dank der hohen Effizienz im keV Bereich (siehe Abschnitt 3.4.4). Ein Abschalten der Radiofrequenz verbessert zusätzlich die Standardabweichung der Energie um einen Faktor von 100. Eine im nächsten Abschnitt folgende Untersuchung soll klären, ob das gewählte System weiter optimiert werden kann.

3.4. Optimierung der neuen Falle

Die gewählte Geometrie der Kreuzfalle wurde mit einer Segmentbreite von $200\ \mu\text{m}$ versehen, welche eine sinnvolle Größe für die vorgestellte Dimension der Falle darstellt. Diese Wahl erfolgte aufgrund konstruktionstechnischer Überlegungen. Im Folgenden wird untersucht, ob eine Optimierung der Segmentbreite vorgenommen werden kann und eine Vergrößerung des optischen Zugangs möglich ist, ohne den Verlust der erwünschten axialen Frequenz von über $1,5\ \text{MHz}$ zu erleiden. Die Simulationen des vorherigen Abschnitts wurden mit einfachen Grundgeometrien der Fallen durchgeführt. Um den späteren experimentell zu erwartenden Bedingungen zu entsprechen, werden dem Modell Leiterbahnen und Kompensationselektroden hinzugefügt (siehe Abbildung 3.28). Die Anwesenheit der Leiterbahnen hat maßgeblich Einfluss auf die Felder innerhalb der Falle. Es wurde daher darauf geachtet, dass die Symmetrie der Falle nicht durch den Verlauf der Leiterbahnen gestört wird und somit unerwünschte Effekte produziert werden.

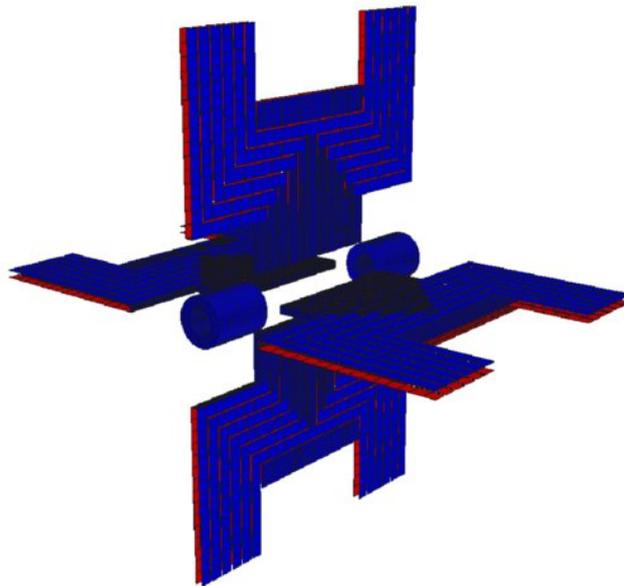


Abbildung 3.28.: Modell der für die Simulation verwendeten Falle. Die Falle besitzt elf getrennt ansteuerbare DC-Elektroden. Die Leiterbahnen verlaufen ausgehend von den $800\ \mu\text{m}$ langen Elektroden um die Kompensationselektrode herum und sind identisch für Vorder- und Rückseite des Fallenflügels. Die Kompensationselektroden befinden sich auf beiden Seiten des Fallenflügels und besitzen die gleiche Länge wie der Fangbereich der Falle ($2,5\ \text{mm}$).

Nach der Optimierung der freien Parameter der Falle erfolgt eine Optimierung der Endkappe. Der Abstand zum Fallenende und die Größe der Endkappe können verändert werden. Zum Abschluss dieses Kapitels werden die Auswirkungen der frei wählbaren Anfangsparameter wie Extraktionsphase und Temperatur auf die Extraktion diskutiert.

3.4.1. Optimierung der Segmentbreite

Im vorherigen Abschnitt wurde bereits ermittelt, dass die axiale Fallenfrequenz bei einem Flügelabstand (DC- zu DC- oder RF- zu RF-Elektrode) von $832\ \mu\text{m}$ im Bereich von $>1\ \text{MHz}$ liegt, bei DC-Spannungen von 0 bis 40 V. Nicht geklärt ist, ob $200\ \mu\text{m}$ die ideale Segmentbreite darstellen. Die segmentierten Elektroden erlauben unterschiedliche Elektrodenkonfigurationen zum Fangen der Ionen. Zu Beginn der Untersuchung wird geklärt, welche das tiefste und somit später im Experiment am häufigsten verwendete Fangpotential zur Verfügung stellt. Aus der Simulation ergibt sich die beste Konfiguration für drei Segmenten auf positiver Spannung, gefolgt von drei Segmenten auf negativer Spannung und wieder gefolgt von drei Segmenten auf positiver Spannung. Somit werden neun der elf Segmente eines Fallenflügels verwendet. Nimm man die beiden äußersten Elektroden hinzu, führt dies zu einer Verschlechterung des Einschlusses. Diese Elektroden an den jeweiligen Enden der Falle erzeugen nicht die gleiche Potentialform wie die inneren Elektroden, sondern besitzen aufgrund der fehlenden Nachbarelektroden wesentlich stärkere Potentiale und führen zu einer Verringerung der Potentialmulde in der Mitte der Falle. Die Form des sich aus mehreren zusammen geschalteten Elektroden ergebenden Fangpotentials ist abhängig von der Breite der einzelnen Elektroden. Bei zu kleinen Elektroden können die äußeren Elektroden das fangende Potential reduzieren, während sich bei zu großen Elektroden ein flacheres Muldenpotential mit niedriger Fallenfrequenz ergibt. Zusätzlich zur Variation der Segmentbreite wird die Suche für verschiedene Flügelabstände durchgeführt, um zu ergründen, ob ein größerer Zugang axiale Fallenfrequenzen über $1,5\ \text{MHz}$ ermöglichen kann. Der Betrag der angelegten Spannung wird für jede der neun Elektroden auf 21 V festgelegt. Aus der Simulation (siehe Abbildung 3.29) ergibt sich eine ideale Segmentbreite von ungefähr $150\ \mu\text{m}$ bei einem Abstand der Fallenflügel von $820\ \mu\text{m}$. Ab einem Abstand von $960\ \mu\text{m}$ erweist sich die Segmentbreite von $200\ \mu\text{m}$ als geeignet. Die erschlossenen axialen Fallenfrequenzen für diesen Flügelabstand sind hoch genug, um das Seitenbandkühlen zu gewährleisten. Es bietet sich daher an, den Flügelabstand zu vergrößern, sodass die Aufladungseffekte durch den gepulstern Laser minimiert werden. Der Abstand der Fallenflügel wird folglich erhöht, wobei noch die Auswirkungen auf die Harmonizität des axialen Fangpotentials zu überprüfen sind. Zu diesem Zweck wird das durch neun Elektroden erzeugte Fangpotential mit dem durch drei Elektroden auf einer negativen Spannung verglichen. Harmonische

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

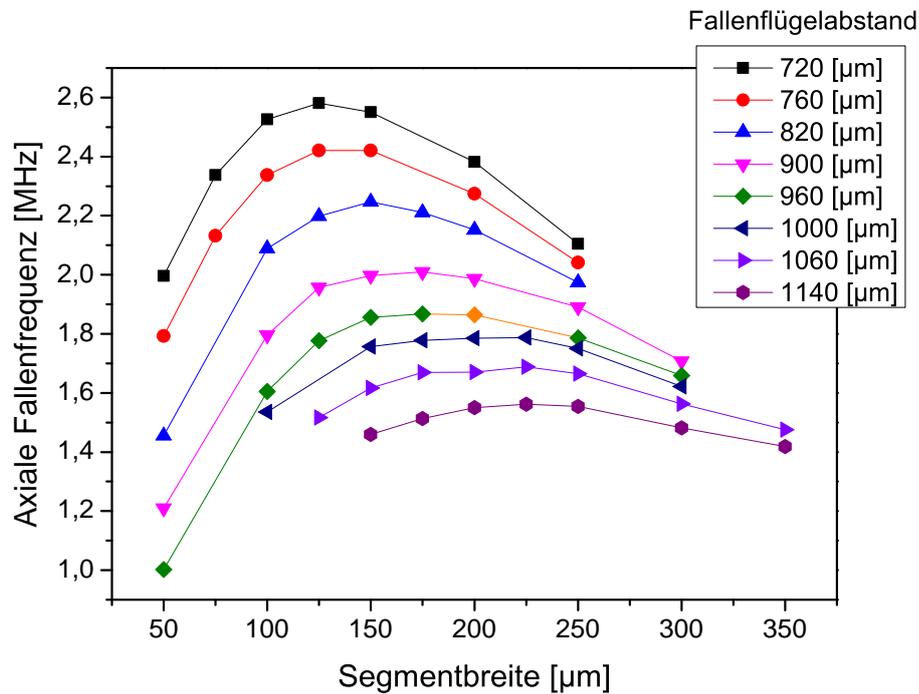


Abbildung 3.29.: Simulierte axiale Fallenfrequenzen für verschiedene Fallenflügelabstände aufgetragen gegen die verwendete Segmentbreite. Zur besseren Übersicht wurden die Punkte miteinander verbunden, es liegt allerdings kein linearer Zusammenhang vor. Die gewählte Konfiguration wurde in orange markiert.

Potentiale besitzen die Eigenschaft, dass die sich ergebenden Frequenzen unabhängig von der Auslenkung sind. Die axiale Fallenfrequenz wird daher für unterschiedliche Startpositionen des Ions entlang der z-Achse bestimmt. Ermittelt werden die Frequenzen anhand der Trajektorien (Gaußglättung). Ein Vorteil dieser Methode besteht darin, dass lediglich die für das Ion relevanten Bereiche des Potentials auf ihre Harmonizität getestet werden. Es ergeben sich Abweichungen von 310 Hz für den Einschluss durch neun Elektroden und 260 Hz für den Einschluss durch drei Elektroden. Dies entspricht einer relativen Abweichung von $\sim 1,6 \cdot 10^{-5} \%$. Die normale Wellenfunktionsgröße eines dopplergekühlten Ion beträgt 150 nm bzw. 300 nm im Potential. Eine ausreichende Harmonizität der beiden Potentialformen kann somit im Rahmen der Genauigkeit der Simulation bestätigt werden. Die radialen Potentiale können nur bedingt hinsichtlich einer höheren Harmonizität optimiert werden. Ein dickeres Substrat und eine Vergrößerung des Abstandes der einzelnen Elektroden bewirken eine Verbesserung. Ersteres ist durch die Laserbearbeitung nicht zu-

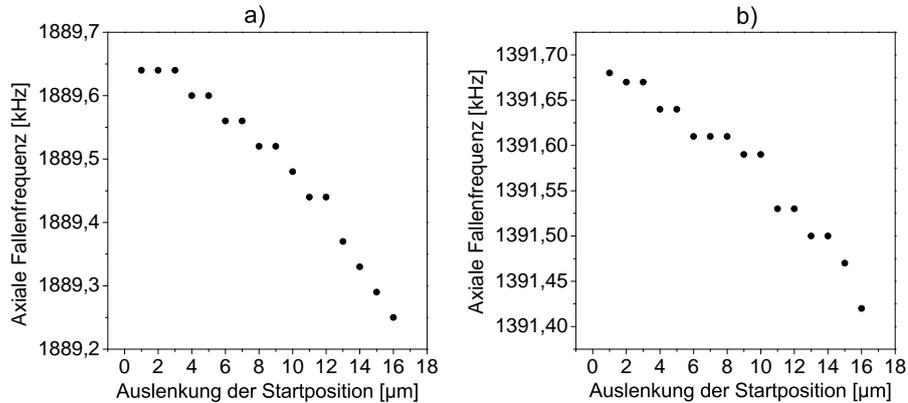


Abbildung 3.30.: Simulierte axiale Fallenfrequenzen für verschiedene Startpositionen. a) Simulierte Frequenzen für das axiale Fangpotential durch neun Elektroden. b) Simulierte Frequenzen für das axiale Fangpotential mit drei Elektroden auf negativer Spannung

gänglich (siehe Abschnitt 3.2.2). Eine Vergrößerung des Abstandes der einzelnen Elektroden macht die Falle anfälliger für Streuladungen, deren Effekt ebenfalls um ein Vielfaches größer ist als der Gewinn in der Harmonizität. Eine Optimierung der radialen Harmonizität wird somit nicht weiter verfolgt. Unklar ist jedoch, ob der größere Flügelabstand deutlich negative Auswirkungen auf die Emittanz hat.

Auswirkungen des Flügelabstandes auf die Extraktion

Im letzten Schritt der Optimierung der Falle wird untersucht, ob merkliche Verschlechterungen der Extraktionsparameter zu beobachten sind, falls die Flügelabstände im Bereich von $\sim 100\mu\text{m}$ variiert werden. Die Fangparameter werden für alle Fallen derart gewählt, dass radiale und axiale Fallenfrequenzen im vorgeschriebenen Bereich vorliegen. Zur Erstellung der Daten werden unter Verwendung von Calcium jeweils 250 Extraktionen zu je sechs Wiederholungen für jede Extraktionsspannung und jeden Flügelabstand durchgeführt. Als Zeitkonstante für das Abklingen der RF-Spannung wird ein τ von 25 ns gewählt.

Eine Vergrößerung des Flügelabstandes führt zu einer Erhöhung der Emittanz für niedrige Extraktionsspannungen (siehe Abbildung 3.31). Der größere Abstand verschlechtert den radialen und axialen Einschluss und sorgt somit für einen höheren radialen Energiegewinn beim Flug des Ions durch das Extraktionspotential. Zusätzlich schirmen die Fallenflügel das Extraktionspotential weniger ab, was zu größeren Potentialunterschieden im radialen Verlauf führt. Für hohe Extraktionsspannungen nähern sich die Werte wieder einander an, da das Ion kürzer innerhalb der Falle verbleibt und weniger Mikrobewegung erleidet.

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

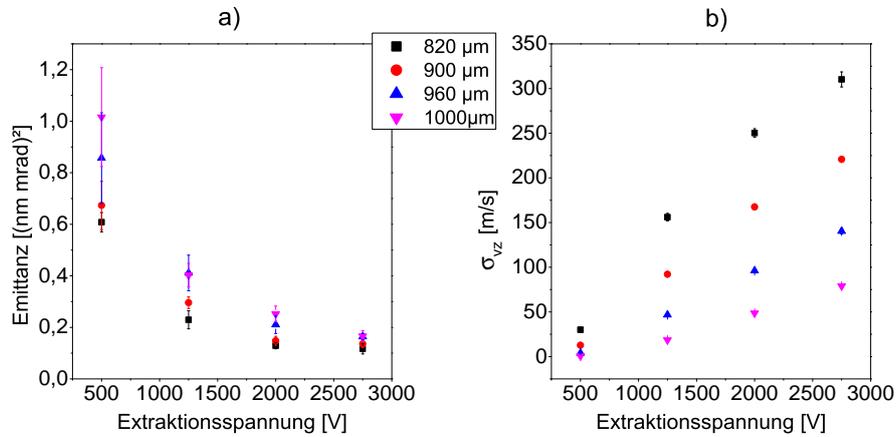


Abbildung 3.31.: Simulierte Extraktionsparameter für verschiedene Flügelabstände. a) Emittanz aufgetragen gegen Extraktionsspannung. b) Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit gegen Extraktionsspannung.

Bei den beabsichtigten Extraktionsspannungen zwischen 2 und 3 kV resultiert aus einer Vergrößerung des Flügelabstandes auf 960 µm keine nennenswerte Verschlechterung der Emittanz.

Die Endkappe besitzt einen Außenradius von 400 µm. Vergrößert man den Abstand der Fallenflügel, so vergrößert sich ebenfalls der Abstand zu der Endkappe. Dies verringert die axiale Mikrobewegung, die durch die Endkappe verursacht wird und verbessert somit σ_{vz} . Die Wahl des Flügelabstandes kann bei fester Endkappengeometrie somit alleine von den Fallenfrequenzen abhängig gemacht werden. Für die weiteren Simulationen wird der Abstand der Fallenflügel auf 960 µm festgelegt. Die freien Parameter der Fallen selbst wurden damit alle festgelegt. Das letzte verbleibende Bauteil, welches einer Charakterisierung seiner Eigenschaften bedarf, ist die Endkappe.

3.4.2. Optimierung der Endkappe

Im Fall der Endkappe können der Radius der Bohrungen durch die Endkappe, der äußere Radius und der Abstand zum Ende der Falle variiert werden. Die Extraktionseigenschaften werden zusätzlich von der Zeitkonstanten τ in Beziehung zur Extraktionsspannung beeinflusst. Hieraus ergibt sich ein fünfdimensionaler Parameterraum, welcher zu untersuchen wäre, um in Abhängigkeit der Extraktionsspannung ein Optimum für Emittanz und σ_{vz} der Extraktionsgeschwindigkeit zu finden. Ein Einschränken mancher Parameter wäre daher für eine genauere Analyse nötig. Zum Zeitpunkt dieser Diplomarbeit befanden sich

die Fallenflügel allerdings noch in Produktion und die erste Produktionsreihe der Endkappen bedarf weiterer Verbesserungen. Eine genauere Analyse kann daher nicht erfolgen. Stattdessen wird für eine Zeitkonstante von $25\ \mu\text{s}$ untersucht, welche Auswirkungen eine Variation der einzelnen drei Parameter der Endkappe verursacht.

Variation des Abstands zur Falle

Zuerst werden die Auswirkungen einer Veränderung des Abstandes zwischen Falle und Endkappe vorgestellt. Der Außenradius der Endkappe beträgt $400\ \mu\text{m}$ und der Innenradius $200\ \mu\text{m}$. Es werden 250 Extraktionen zu je sechs Wiederholungen bei verschiedenen Extraktionsspannungen durchgeführt. Die Ergebnisse der Simulationen zeigen bei verschiedenen Entfernungen keine Auswirkung auf die Emittanzen. Jedoch ergibt sich mit vergrößertem Abstand eine Verbesserung für die Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit (siehe Abbildung 3.32).

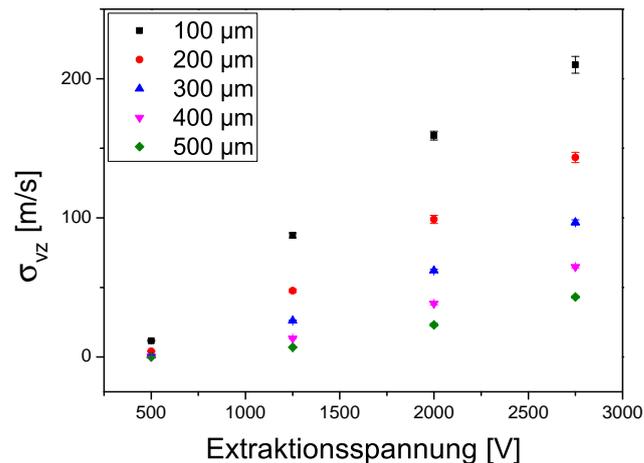


Abbildung 3.32.: Simulierte Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit für verschiedene Abstände der Endkappe bezüglich dem Ende der Ionenfalle

Der größere Abstand sorgt für einen schwächeren Übergriff der Radiofrequenz auf die Endkappe. Zusätzlich benötigt das Ion mehr Zeit, um zur Endkappe zu gelangen, was die Wahl größerer Zeitkonstanten für das Abschalten der Radiofrequenz begünstigt. Ein größerer Abstand bietet vom Standpunkt der Simulation nur Vorteile. Von experimenteller Seite begünstigt der Abstand den axialen Laserzugang, da der Winkel zu der Fallenachse verkleinert werden kann. Es muss allerdings bedacht werden, dass die Simulation ein ideales System ohne Störungen darstellt. Für die Emittanzen ergeben sich daher keine

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

feststellbaren Unterschiede, da weder die Potentialform noch der Durchgriff merklich verschlechtert werden. Felder durch Kontaktierungsdrähte, Öfen oder statische Aufladungen der Halterung, welche sich ebenfalls sehr nahe am Fangbereich der Falle befinden, werden nicht berücksichtigt. In der Falle selbst spielen solche Streufelder eine eher untergeordnete Rolle, da diese durch die Leiterbahnen der Fallenflügel gut abgeschirmt werden. Zwischen den Enden der Falle und der Endkappe ist der Einfluss jedoch stärker und eine Verlängerung des Abstands bietet mehr Möglichkeiten durch Störfelder die Trajektorie des Ions zu beeinflussen. Eine Verkleinerung der Entfernung verbessert daher die Abschirmung. Ein Abstand im Bereich von 200 bis 300 μm ist somit größeren vorzuziehen.

Variation des Außen- und Innenradius der Endkappe

Die letzten beiden freien Parameter verändern jeweils die Größe der Außenfläche der Endkappe. Beide Größen werden getrennt voneinander bei einem Abstand von 200 μm zwischen Falle und Endkappe untersucht. Die erste Simulationsreihe variiert die Größe des Außenradius (A) für einen festen Innenradius (I). In der zweiten Simulationsreihe wird der Außenradius (A) fixiert und der Innenradius (I) verändert. Es werden 250 Extraktionen zu je sechs Wiederholungen bei verschiedenen Extraktionsspannungen durchgeführt. Für die Emittanzen ergeben sich in beiden Fällen keine Unterschiede. Eine größere Fläche wie im Fall der Variation des Außenradius ändert nicht den Feldverlauf, sondern lediglich den Durchgriff des Potentials. Der Radius des inneren Lochs der Endkappe übt keinen nennenswerten Einfluss auf die Emittanz aus. In der Simulation wurden nur sinnvolle Werte für die Radien verwendet. Innenradien, welche erheblich größer als der halbe Flügelabstand sind, erzeugen stark divergente Felder und verschlechtern die Emittanz.

Für die Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit können merkliche Unterschiede festgestellt werden (siehe Abbildung 3.33).

Größere Außenradien führen zu einer Zunahme von σ_{vz} , während für größere Innenradien eine Abnahme erfolgt. Beide Effekte besitzen die gleiche Ursache. Bei einer Vergrößerung der dem Ion zugewandten Fläche der Endkappe erhöht sich der Einfluss der Radiofrequenz und verschlimmert den Effekt der axialen Mikrobewegung. Dies entspricht der Situation größerer Außenradien. Umgekehrt verbessert eine Verkleinerung der Fläche diesen Effekt, wie im Fall der größeren Innenradien zu beobachten ist. Eine entsprechende Minimierung der Fläche stellt somit ein Optimum da.

Insgesamt beeinflussen die geometrischen Parameter der Endkappe die Strahlqualität nur gering. Die Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit profitiert von großen Ab-

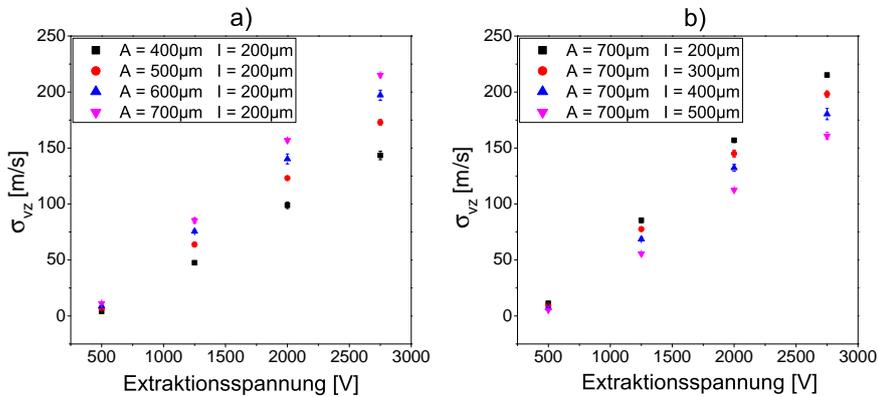


Abbildung 3.33.: Simulierte Fluktuation der Extraktionsgeschwindigkeit für a) verschiedene Außenradien A der Endkappe mit festen Innenradius I , b) verschiedene Innenradien I für festen Außenradius A .

ständen, schnellen Schaltzeiten und kleinen Geometrien. Da all diese Größen ebenfalls durch die Schaltzeit bzw. Zeitkonstante beeinflusst werden können, ist es vor allem sinnvoll, Größen für die Endkappe zu wählen, welche fertigungstechnisch ein qualitativ hochwertiges Ergebnis liefern. Die richtige Wahl der Zeitkonstanten stellt nach der Konstruktion der Falle ein probates Mittel dar, um die erhaltene Geometrie zu optimieren (siehe Abschnitt 3.3.3). Mechanisch gefertigte Endkappen, welche im Zuge dieser Diplomarbeit in Auftrag gegeben wurden, konnten mit einem Außenradius von ca. $450 \mu\text{m}$ und einen Innenradius von $200 \mu\text{m}$ hergestellt werden. Das System der neuen Implantationsfalle ist somit vollständig charakterisiert und kann einem endgültigen Vergleich mit der etablierten PCB-Falle unterzogen werden.

3.4.3. Vergleich mit der PCB-Falle

Das Design der Kreuzfalle mit Endkappe stellt eine gute Ausgangssituation für die Implantation dar. Gegenüber der PCB-Falle konnte die Emittanz um einen Faktor von 153 bis 250 verbessert werden (siehe Abbildung 3.34). Die Emittanz ist abhängig von der Extraktionsgeschwindigkeit (siehe Abschnitt 2.2.3), woraus aufgrund der Effizienz der Endkappe eine große Verbesserung resultiert. Normiert man die Emittanz der Implantationsfalle auf die Geschwindigkeiten der PCB-Falle (Faktor $\sim 2,19$), bietet sich einem der in Tabelle 3.14 gezeigte Direktvergleich.

Aus der normierten Emittanz folgt eine Verbesserung um einen Faktor von 70 bis 113, wobei dieser für höhere Extraktionsspannungen größer wird. Die Kreuzfalle mit Endkappe

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

Extraktions- spannung [V]	Emittanz [(nm mrad) ²] PCB-Falle	Norm. Emittanz [(nm mrad) ²] Kreuzfalle
500	136,4	1,98
1000	71,0	1,08
1500	40,5	0,68
2000	32,5	0,47
2500	29,0	0,39
3000	31,3	0,28

Tabelle 3.14.: Wertevergleich zwischen Emittanz der PCB- und Implantationsfalle.

minimiert die Emittanz nicht nur durch ihre höhere Extraktionsgeschwindigkeit, sondern hauptsächlich durch ihre kleinere Geometrie und die gewählte Extraktionsmethode. Eine Endkappe erlaubt die Wahl höherer Extraktionsspannungen und bietet zugleich eine größere Effizienz des angelegten Potentials. Um einen Faktor 2-3 höhere Extraktionsgeschwindigkeiten sind im Vergleich mit der Segmentextraktion erreichbar, da die Energie des Extraktionspotentials immer zu $\sim 99\%$ ausgenutzt werden kann. Die PCB-Falle nutzt ihre potentielle Energie zu lediglich $\sim 20,1\%$ aus. Durch die Fertigung mittels Laserbearbeitung wird eine hohe Präzision erzielt und die Abstände zwischen den Elektroden können verkleinert werden, was die Gefahr von Drifts durch Oberflächenaufladungen minimiert. Kleinere Geometrien erhöhen die Fallenfrequenzen, sodass die Zugänglichkeit fortgeschrittener Kühlmethoden erleichtert wird. Im nächsten Abschnitt wird gezeigt wie sich dadurch die Emittanz und Standardabweichung der Geschwindigkeit verbessern lassen.

3.4.4. Einflüsse der Startparameter auf die Extraktion

Im Zuge der Diplomarbeit von Robert Fickler [Fickler, 2009] wurde die PCB-Falle eingehend untersucht. Interessant ist, vor allem die sich ergebende Phasenabhängigkeit der Extraktion. Für die Implantationsfalle, erfolgt nun zum Vervollständigen der Eigenschaften der Falle eine ähnliche Untersuchung. Ein wichtiger Parameter ist neben der Phase der Radiofrequenz die Anfangstemperatur des Ions in der Falle. Sämtliche bisher durchgeführten Extraktionsimulationen wurden für ^{40}Ca durchgeführt. Die spätere Falle wird neben Calcium, durch das sympatetische Kühlen in der Lage sein, weitere Ionensorten gekühlt zu extrahieren.

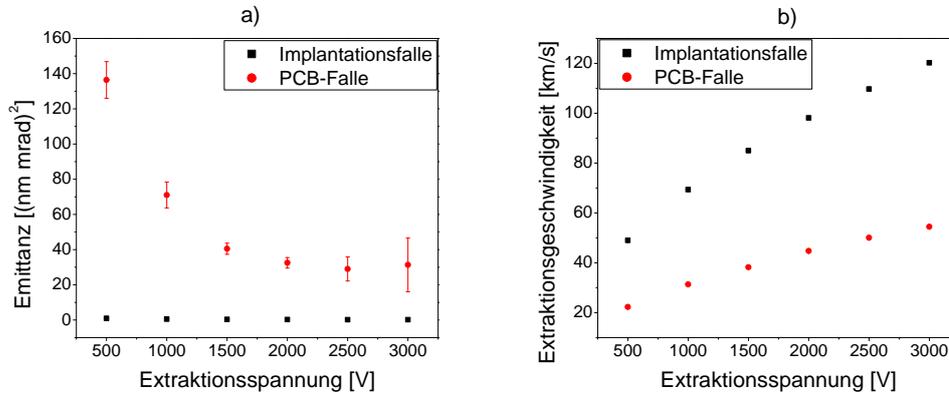


Abbildung 3.34.: Aus der Simulation erhaltene Daten für Extraktion aus der Implantationsfalle und der PCB-Falle für verschiedene Extraktionsgeschwindigkeiten. Für beide Fallen wurde eine Starttemperatur von 2 mK definiert. Die Daten basieren auf 6×250 Extraktionen je Extraktionsspannung. Die Zeitkonstante beträgt 25 ns für die Kreuzfalle. a) Emittanz gegen Extraktionsspannung für beide Fallen b) Extraktionsgeschwindigkeit gegen Extraktionsspannung.

Einfluss der Iontemperatur auf die Extraktion

Aus der PCB-Falle ist bereits bekannt, dass ein Vermindern der Anfangsenergie sich positiv auf die Segmentextraktion auswirkt [Fickler, 2009]. Um diesen Effekt für die Endkappenextraktion verifizieren zu können, wird eine Simulation bei einer Extraktionsspannung von 1500 V durchgeführt. Beginnend mit 2 mK, wird der Schwerpunkt der Temperaturverteilung, für jeden Simulationspunkt um 0,2 mK reduziert. Pro Datenpunkt wurden 6×250 Extraktionen durchgeführt.

Für die Emittanz ergibt sich der erwartete Zusammenhang zwischen Anfangsenergie des Ions und Strahlqualität. Mit sinkender Anfangsenergie ist es möglich, die Emittanz weiter zu verbessern. So kann die Emittanz von $\sim 0,29 (\text{nm mrad})^2$ bei 2 mK auf $\sim 0,071 (\text{nm mrad})^2$ bei 1 mK gesenkt werden, was einem Faktor vier entspricht. Dies verdeutlicht, dass die bei der Extraktion gewonnene Energie in radialer Richtung geringer ist als die durch das Pseudopotential gespeicherte. Erst für Temperaturen um 0,6 mK ist ein Konvergieren zu erkennen. Es sollte allerdings bedacht werden, dass die Simulation klassische Trajektorien simuliert. Auswirkungen der quantenmechanischen Natur des Teilchens sind in diesem Temperaturbereich allerdings zu erwarten, da sich die Ausdehnung des Wellenpakets dem Heisenberg-Limit nähert. Statt der klassischen Ionenbewegung müsste die Propagation des Wellenpakets des Ions durch das Potential betrachtet werden. Entsprechende Rechnungen

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

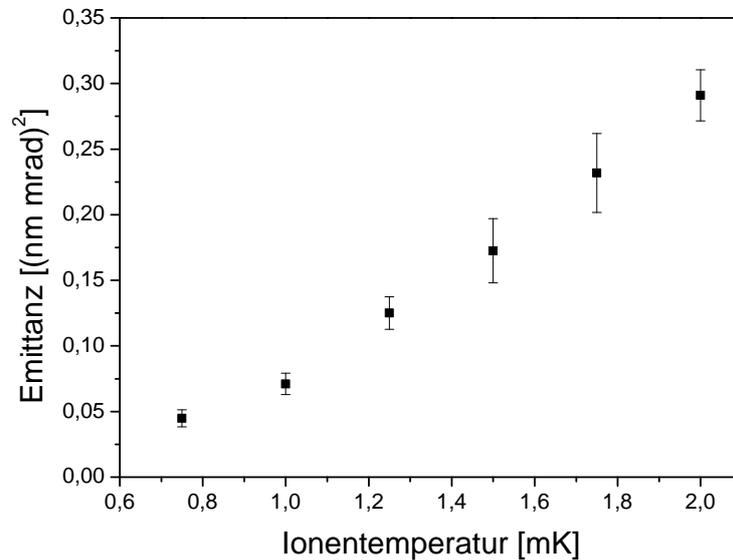


Abbildung 3.35.: Aus der Simulation erhaltene Daten für die Extraktion mit 1500 V aus der Implantationsfalle. Die Emittanz ist aufgetragen gegen die Anfangstempatur des Ions in der Falle. Die Zeitkonstante beträgt 25ns.

erweisen sich jedoch als zu aufwendig, um im Rahmen dieser Diplomarbeit durchgeführt zu werden. Die Verbesserung der Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit wird durch den Einfluss der Radiofrequenz verdeckt, für kürzere Zeitkonstanten wäre diese jedoch zu beobachten.

Einfluss der Radiofrequenzphase auf die Extraktion

In der PCB-Falle konnte eine starke Abhängigkeit der Spotgröße und Position von der Radiofrequenzphase zum Zeitpunkt der Extraktion festgestellt werden [Fickler, 2009]. Um zu überprüfen, ob dies ebenfalls für die Implantationsfalle zutrifft, wird die Simulation für eine zufällige und fünf festgelegte Extraktionsphase je Extraktion durchgeführt (siehe Abbildung 3.36).

Die Abhängigkeit von der Radiofrequenzphase wird durch die Extraktion mittels einer Endkappe verringert beziehungsweise aufgehoben. Weder für die Emittanz noch für die Standardabweichung der Extraktionsgeschwindigkeit konnte eine Abhängigkeit im Rahmen der Genauigkeit der Simulation gefunden werden. Aus Untersuchungen der Schwerpunkte der Spotdiagramme ergibt sich kein Unterschied für verschiedene oder zufällige

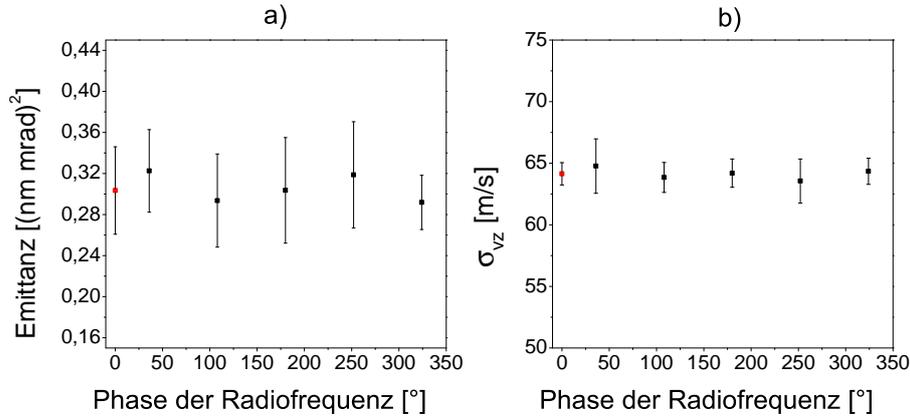


Abbildung 3.36.: Simulierte Daten der Extraktion mit einer Spannung von 1500 V. Bei 0° ist der Wert für eine zufällige Extraktionsphase bei jedem Extraktionvorgang in rot eingezeichnet. Die verwendete Zeitkonstante beträgt 25 ns. a) Aufgetragen ist die Emittanz gegen die Radiofrequenzphase. b) Standardabweichung σ_{vz} aufgetragen gegen die Radiofrequenzphase.

Extraktionsphasen. Dies kann auf das Abschalten der Radiofrequenz für den Extraktionsvorgang zurückgeführt werden. Wie schon in Abschnitt 3.3.3 diskutiert wurde, ist ein gewisser Einfluss der Radiofrequenzphase nicht auszuschließen. Der zeitliche Aufwand, diesen herauszuarbeiten, wird jedoch im Verhältnis zu dem sich ergebenden Einfluss auf die Extraktion als zu hoch eingeschätzt.

Extraktion anderer Elemente

Für den späteren Betrieb der Falle ist es interessant, abschätzen zu können, wie sich die Extraktion mittels Endkappe auf andere Ionensorten auswirkt. Um einen Vergleich zu erhalten, wird die Simulation daher für den für die Implantation wichtigen Stickstoff (^{14}N) und Chrom (^{24}Cr) durchgeführt (siehe Abbildung 3.37). Ein Nickel-Chrom-Ofen wurde bereits in den bestehenden Fallenaufbau integriert [Wolfgang Schnitzler, 2010].

Die Simulationen werden für eine Anfangstemperatur von 2 mK und verschiedene Extraktionsspannungen ausgeführt. Aus den Simulationen folgt, dass besonders die Emittanzen des Stickstoffs davon profitieren. Dies hat die gleiche Ursache wie die Verschlechterung von σ_{vz} , was beides anhand der Extraktionsgeschwindigkeit erklärt werden kann. Die aus dem Potential erhaltene Energie beträgt für jedes Element $\sim 99\%$. Bei den leichteren Elementen ergibt sich daraus eine größere Extraktionsgeschwindigkeit als für die schweren. Ab einer Extraktionsspannung von 3000 V erreicht Stickstoff Geschwindigkeiten von über 203 km/s,

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

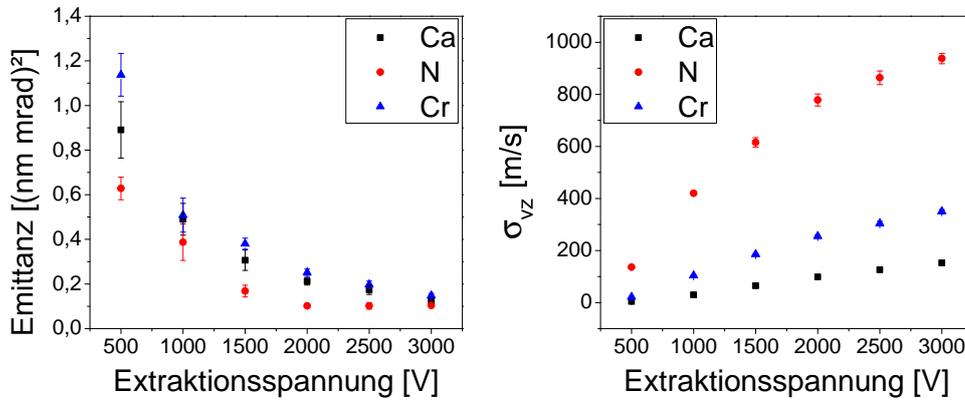


Abbildung 3.37.: Aus der Simulation erhaltene Daten für die Extraktion von Calcium, Stickstoff und Chrom. Abbildung a) zeigt das Verhalten der Emittanzen, Abbildung b) den Verlauf von σ_{vz} in Abhängigkeit der Extraktionsgeschwindigkeit.

sodass die gewählte Zeitkonstante von 25 ns nicht ausreicht, um die RF-Spannung stark genug zu dämpfen. Stickstoff und Chrom erleiden daher eine stärkere axiale Mikrobewegung bei höheren Extraktionsspannungen als Calcium (siehe Abbildung 3.37 b)). Die Emittanz ist, wie bereits erwähnt wurde, abhängig von der Geschwindigkeit des Ions (siehe Abschnitt 2.2.3). Für den Vergleich unterschiedlicher Ionensorten bietet es sich daher an, die Emittanz auf ein Element zu normieren. Die Normierung erfolgt auf die Geschwindigkeiten von Calcium bei der jeweiligen Spannung (für Stickstoff ergibt sich ein Umrechnungsfaktor von $\sim 1,69$, für Chrom $\sim 1,29$).

Extraktions- spannung [V]	Emittanz $[(\text{nm mrad})^2]$ Ca	Norm. $[(\text{nm mrad})^2]$ Emittanz N	Norm. $[(\text{nm mrad})^2]$ Emittanz Cr
500	0,890	1,062	1,922
1000	0,489	0,654	0,859
1500	0,306	0,284	0,643
2000	0,211	0,172	0,423
2500	0,173	0,172	0,334
3000	0,125	0,176	0,250

Tabelle 3.15.: Auflistung der auf Calcium normierten Emittanz der einzelnen Elemente für verschiedene Extraktionsspannungen.

Aus den normierten Werten (siehe Tabelle 3.15) ist ersichtlich, dass sich die Verteilung in

Orts- und Impulsraum für Stickstoff und Calcium ähnlich verhält. Die Werte gleichen sich für zunehmende Extraktionsspannungen einander an. Für Chrom verschlechtert sich die Emittanz um einen Faktor von zwei, was jedoch immer noch einen guten Wert darstellt. Die zukünftige Implantationsfalle ist durch die Angabe der in diesem Abschnitt erfolgten Größen weitgehend charakterisiert. Nach der Diskussion aller noch freien Parameter der Falle und der Endkappe soll nun zum Abschluss des Kapitels der Implantationsfalle eine kurze Beschreibung über den realen Aufbau der Fallenflügel und Halterung erfolgen.

3.5. Konzept der Fallenhalterung

Für die spätere Funktionalität der Falle ist von entscheidender Bedeutung, mit welchem System die Ausrichtung der Elemente zueinander gewährleistet wird. Die Bauart aus einzelnen gefertigten Fallenflügeln führt zu einer hohen Anzahl an Freiheitsgraden, welche es zu eliminieren gilt. Jedes weitere Bauteil erhöht die Wahrscheinlichkeit, durch Fertigungsfehler eine Dejustage zu erleiden. Eine Minimierung der Anzahl der Bauelemente ist daher wünschenswert. In Abbildung 3.38 ist das Konzept der Justage skizziert.

Die hohe Präzision der Laserverarbeitung wird genutzt, um einen definierten Anschlag und Auflageflächen für die Flügel zu erhalten. Zusätzlich liegen die Flügel mit ihren 125 µm dicken Frontflächen auf den Endkappen auf. Auf den Flügeln sind die einzigen komplett isolierten Flächen die in rot eingezeichneten Bereiche, sodass diese als Auflagefläche und Schubkante bzgl. der Endkappe genutzt werden können. Sämtliche in dunkelgrau eingefärbten Flächen markieren Goldoberflächen. Die Endkappen werden von beiden Seiten in die mittigen Bohrungen der Fallenhalterung geschoben. Isoliert werden sie gegen diese durch Keramikpasshülsen (siehe Abbildung 3.41). Auf den roten Flächen der Halterung liegen die Fallenflügel mit ihren vergoldeten Rückseiten auf. Das Setzen von Klebepunkten wird durch Löcher in den Fallenflügeln und der Auflagefläche der Halterung gestattet, da diese durch die komplette Halterungsfläche erodiert sind, um Lufteinschlüsse zu verhindern. Die Ausfräsung der Auflagefläche der Halterung dient der Minimierung der Kapazität der Radiofrequenzflügel. In Abbildung 3.39 ist die zusammengebaute Fallenhalterung mit allen Bauteilen zu sehen.

Die Fallenhalterung (siehe Abbildung 3.39 a), 3.40 a). Konstruktionszeichnung siehe Anhang C.2) ist aus einem einzigen Stück Titan mit einer 3D-Fräse gefertigt worden und hat eine Länge von 44 mm, während die Flügelspannweite 50 mm misst. Das Zentral durch die gesamte Halterung gehende Loch für die Keramikpasshülsen und Endkappen besitzt einen Durchmesser von 10 mm. Durch einen 110,25 mm hohen Aufsatz wird die Befestigung der Fallenhalterung gewährleistet (siehe Abbildung 3.39 b), Abbildung 3.40 b)). Konstruktions-

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

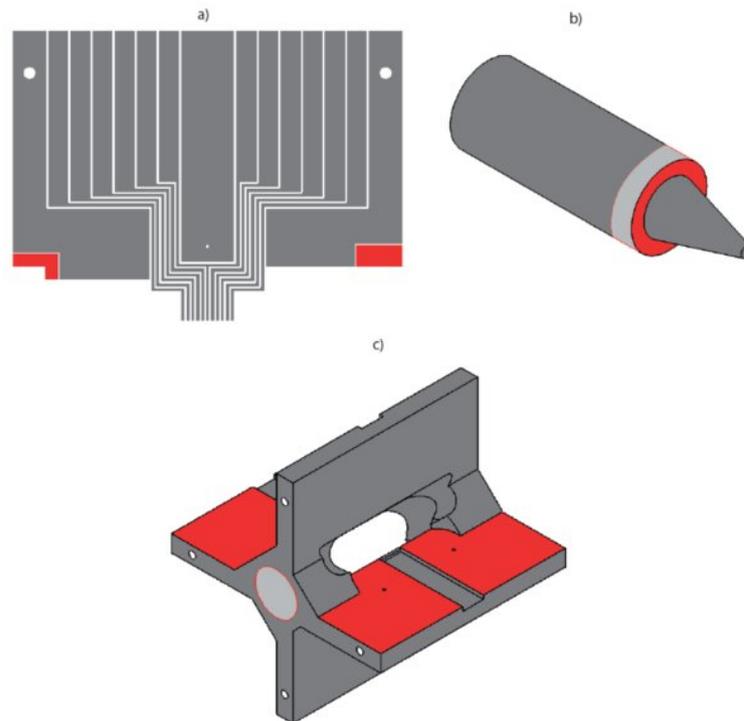


Abbildung 3.38.: Skizziertem Prinzip der Fallenjustage. In rot sind die für die Justage relevanten Elemente markiert. a) Skizze der Vorderseite eines DC-Fallenflügels. Die in rot eingefärbten Kanten markieren die wichtige Auflageflächen bzgl. der Endkappe. b) Isometrische Ansicht der Endkappe mit rot eingefärbter Kante und hellgrau hervorgehobener Auflagefläche. c) Isometrische Ansicht des Flügelhalters. Rot markiert sind die Auflageflächen für die Fallenflügelrückseiten und die Bohrung zum Einschub der Endkappe.

zeichnung siehe Anhang C.3). Dieser Halterungsposten wird direkt auf den unteren Flansch des Vakuumaufbaus montiert und verkürzt dadurch die Kabelführung im Vakuum. Vier gegeneinander abgeschirmte Kabelkanäle ermöglichen die getrennte Kontaktierung der beiden Endkappen, der RF-Elektroden und der DC-Elektroden.

Die X-förmige Ausfräsung garantiert einen flachen Winkel für den axialen Laserzugang.

Neben der vorgestellten Variante der Fallenhalterung wurden weitere Methoden untersucht. Im Anhang E sind Fotografien der sehr präzisen Keramik-Steckverbindung gezeigt. Diese ließ sich jedoch nicht mit dem Konzept der eigenständigen Endkappe vereinbaren. Für einfachere Mikrofallendesigns könnte diese Methode große Vorteile bieten.

3.5. Konzept der Fallenhalterung

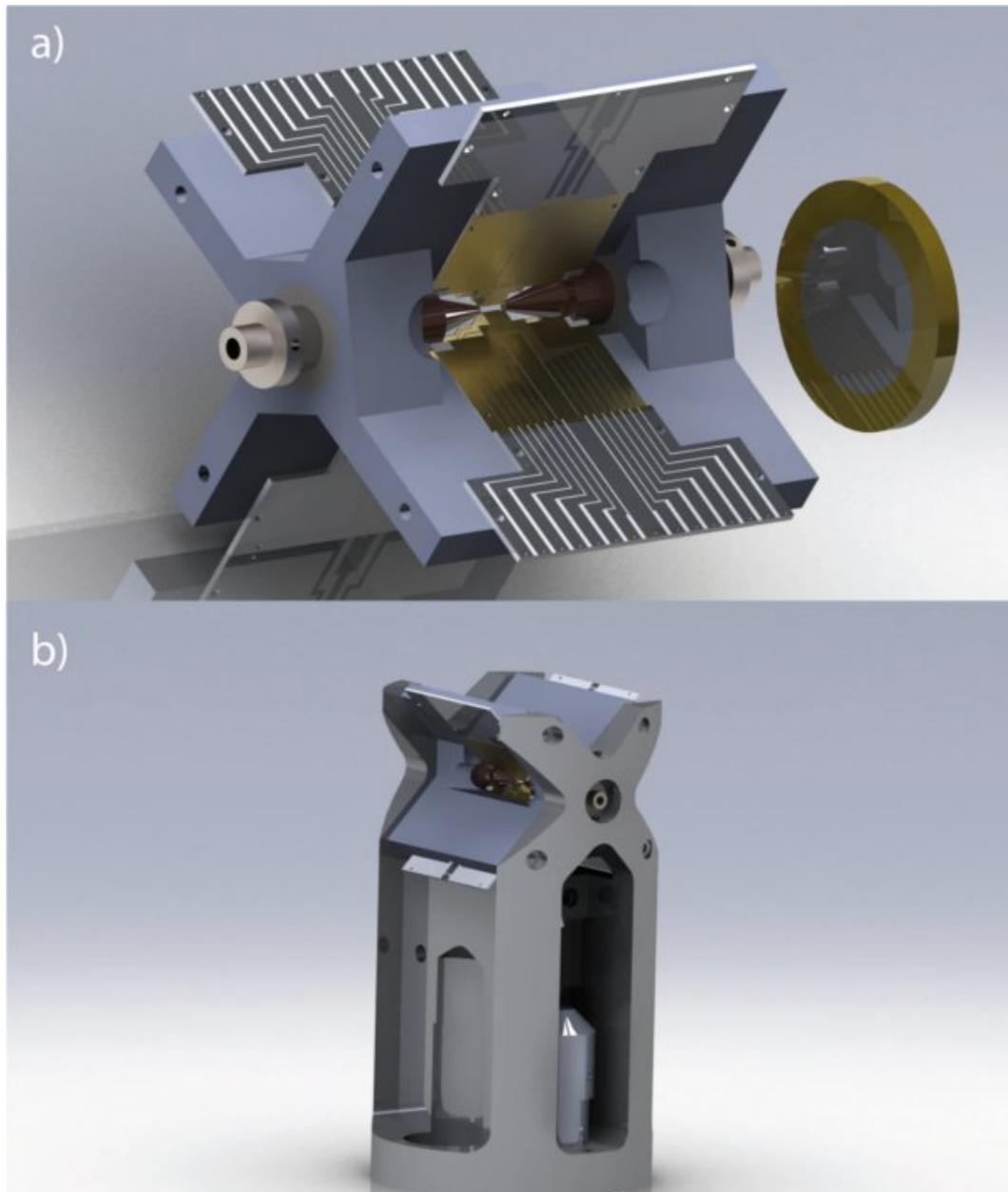


Abbildung 3.39.: Die Rendergrafik a) zeigt die Fallenhalterung mit eingebauten Fallenflügel und Leiterplatten. Für besseren Größenvergleich wurde ein 1-Eurostück hinzugefügt. In b) ist eine Rendergrafik des Halters der Fallenhalterung dargestellt.

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

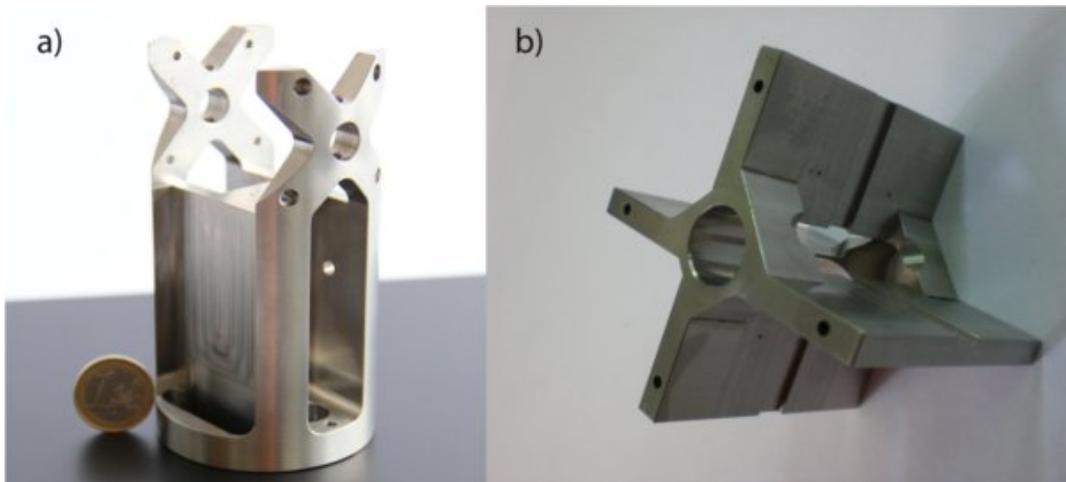


Abbildung 3.40.: Fotografien der Befestigung des Fallenhalters (Bild a)) und des eigentlichen Fallenhalters (Bild b)).



Abbildung 3.41.: Foto der Keramikpasshülse und einer Endkappe.

Fallenflügelpezifikation

Die elf Keramikfinger, die sich jeweils auf den DC- und RF-Flügeln befinden, besitzen eine Breite von $200 \pm 1 \mu\text{m}$, einen Abstand von $30 \pm 1 \mu\text{m}$ (siehe Abbildung 3.5) und sind frei-

3.5. Konzept der Fallenhalterung

tragend über eine Länge von $500\ \mu\text{m}$. Der Verlauf der Leiterbahnen auf den Oberflächen des Substrates übt einen großen Einfluss auf die Potentiale aus. Zum Zeitpunkt dieser Diplomarbeit waren zwar bereits die Finger aus den Keramiksubstraten geschnitten, es fehlte jedoch die Goldbeschichtung und die darauf folgende Laserstrukturierung der Leiterbahnen. Bei den Leiterbahnen ist wichtig, diese symmetrisch vom Ort des Ions weg zuführen. Unsymmetrisch verlaufende Leiterbahnen verursachen Störfelder entlang der Fallenachse. Besonders für die Extraktion ergeben sich daraus Ablenkungen des Ions, welche nur schwer kompensiert werden können. Aus diesem Grund werden die Leiterbahnstrukturen auch auf der Rückseite des Substrates bis kurz vor die Auflagefläche geführt. In Abbildung 3.42 ist jeweils eine Rendergrafik von der Vorder- und Rückseite eines DC-Flügels abgebildet.

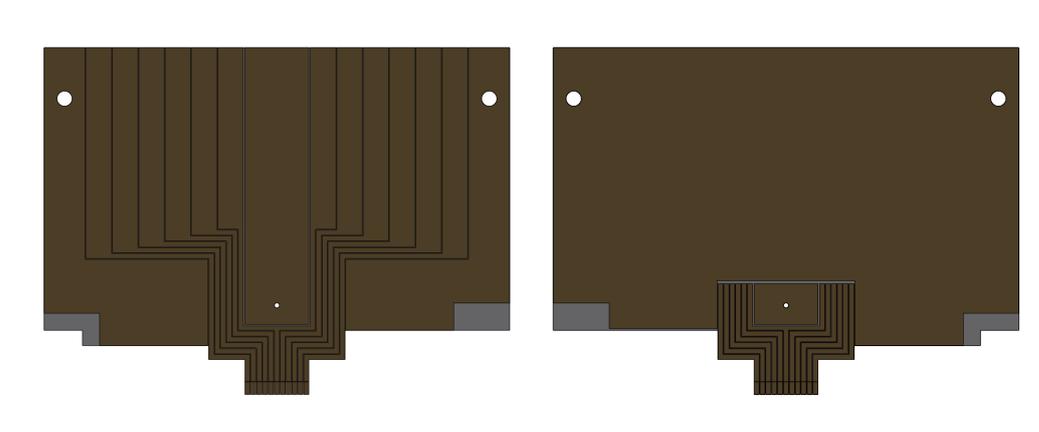


Abbildung 3.42.: CAD-Rendergrafik des in Solidworks nachgebildeten DC-Fallenflügels. a) zeigt die Vorderseite des Fallenflügels, b) die Rückseite. Graue Elemente stellen die Keramik dar, braune die leitende Goldoberfläche.

Die Leiterbahnen, ausgehend von den $200\ \mu\text{m}$ breiten Elektroden, werden um die Kompensationselektrode herumgeführt und auf eine Breite von $1\ \text{mm}$ vergrößert, um das „Ballbonding“ auf die Leiterplatten zu erleichtern (siehe Abbildung 3.39 a) und Abbildung 3.44). Eine sich über die gesamte Länge des Fangbereichs ($2,5\ \text{mm}$) erstreckende Elektrode auf beiden Flügelseiten kann zum Kompensieren verwendet werden. Vorder- und Rückseite sind durch ein $200\ \mu\text{m}$ breites Kontaktierungsloch verbunden. Eine große leitende Fläche auf der Rückseite des DC-Flügels dient als definierte Auflage gegenüber der Halterung aus Titan verwendet. Die beiden $600\ \mu\text{m}$ großen Löcher dienen der Fixierung durch Klebeboltzen auf der Titanhalterung. An den seitlichen Enden des Flügels sind die isolierten Anschlagskanten zu sehen (siehe Abbildung 3.43). Jeder Flügel wird durch ein Rechteck mit einer Breite von $18,2\ \text{mm}$ und einer Höhe von $13,62\ \text{mm}$ begrenzt. Die Flügel der RF-Elektroden besitzen ebenfalls $200\ \mu\text{m}$ breite und $500\ \mu\text{m}$ lange Elektrodenfinger. Im Gegensatz zu den

3. Entwicklung einer Paulfalle zur deterministischen Implantation

DC-Elektroden sind diese jedoch durch Leiterstrukturen alle miteinander verbunden. Die Segmentierung wurde bei den RF-Flügel vorgenommen, um eine möglichst symmetrische Potentialform zu gewährleisten.

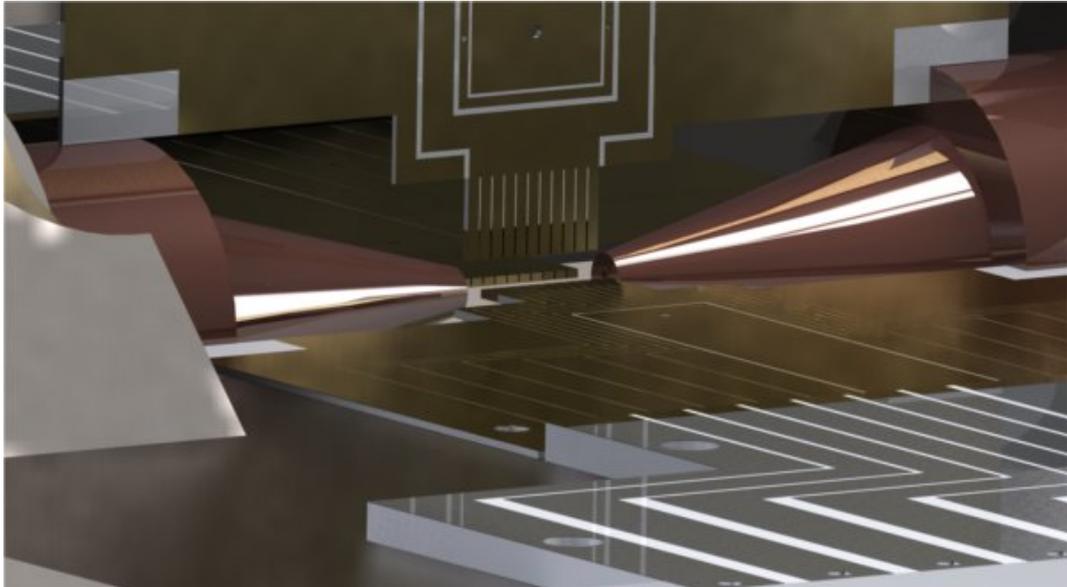


Abbildung 3.43.: Nahaufnahme der gerenderten Falle. Im Vordergrund ist die $630\ \mu\text{m}$ dicke Leiterplatte zu sehen, welche zum Kontaktieren der Flügel verwendet wird. Bei dem oberen Fallenflügel handelt es sich um einen Radiofrequenzflügel. Gut zu erkennen ist die Auflage auf der Endkappe.

Mittels „Ball-Bonding“ werden die Fallenflügeln mit den in Abbildung 3.44 gezeigten Leiterplatten verbunden. Die Leiterplatten besitzen auf der Rückseite leitende Flächen, die auf dem geerdeten Fallenhalter aufliegen. Diese werden durch im Siebdruckverfahren aufgebraute SMD-Kondensatoren ($10\ \text{pF}$) mit den DC-Elektroden verbunden. Dadurch wird ein Tiefpass realisiert, um die DC-Elektroden vor hochfrequenter Spannung zu schützen. Damit sind nun alle grundlegenden Bestandteile des neuen Fallendesigns vorgestellt und der aktuelle Bearbeitungsstand präsentiert worden. Nach der Fertigstellung der noch fehlenden Teile sollte die Implantationsfalle in Kombination mit der Einzellinse in der Lage sein, Prototypen von skalierbaren Festkörperquantensystemen herzustellen. Im nächsten Abschnitt wird ein Konzept vorgestellt, welches die Skalierbarkeit von auf Paulfallen basierenden Quanteninformationssystemen durch die Nutzung neuartiger Transportverfahren verbessert.

3.5. Konzept der Fallenhalterung

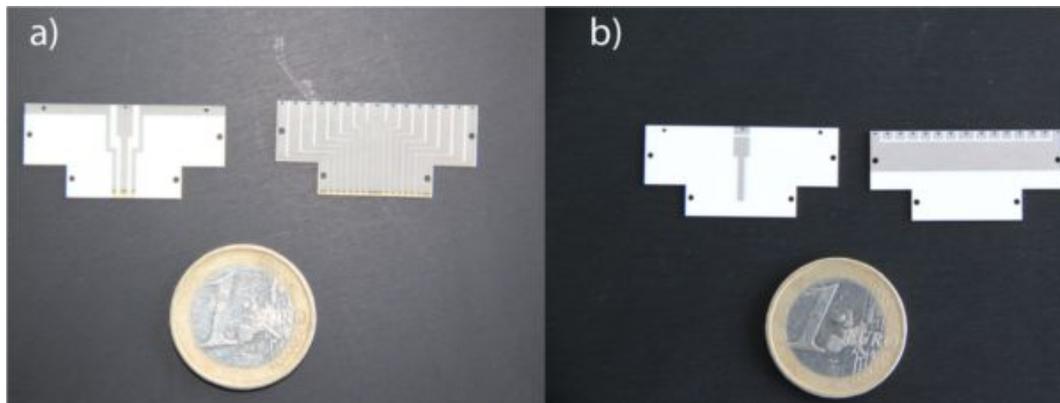


Abbildung 3.44.: Fotografie der Fallenleiterplatten. a) zeigt die Vorderseite der beiden $630\ \mu\text{m}$ Keramikleiterplatten. Links ist die RF-, rechts die DC-Platte positioniert. An den unteren Flügelkanten kann die für das „Ball-Bonding“ genutzte Goldfläche erkannt werden. Die Leiterbahnen bestehen aus einer Silber-Palladium-Legierung. In b) sind die Rückseiten der beiden Platten zu sehen. Links im Bild ist die RF-, rechts die DC-Platte.

4. Neue Methode des Ionentransports

Acht Ionen stellten lange Zeit das Maximum an verschränkbaren Ionen innerhalb einer Falle dar [Häffner et al., 2005]. In jüngster Zeit ist es gelungen, diesen Rekord auf 14 verschränkte Ionen auszuweiten [Monz et al., 2010]. Der weiteren Skalierbarkeit dieses Systems sind durch den technischen Aufwand, große Ionenkristalle innerhalb einer Falle zu kontrollieren, jedoch Grenzen gesetzt [Wineland et al., 1998]. Ein Schlupfloch bietet die Möglichkeit die Fallen in Prozessor und Speicherregion zu unterteilen und durch Transportoperationen die Qubits miteinander kommunizieren zu lassen [Kielpinski et al., 2002]. Spätere Quantencomputer könnten nach theoretischen Abschätzungen 95% ihrer Rechenzeit für Transportoperationen benötigen [Huber et al., 2008]. Aus diesen Gründen wurde in der Vergangenheit und wird weiterhin viel Aufwand in die Optimierung des DC-Transports in segmentierten Paulfallen investiert. Der Transport der Ionen mit Hilfe variabler Radiofrequenzamplituden, im Folgenden mit RFA-Transport abgekürzt, erweitert die Skalierbarkeit, da alle drei Raumdimensionen ausgenutzt werden können. Erste Erprobungen des RFA-Transports in planaren Strukturen wurden in den Gruppen von I. Chuang [Kim et al., 2010] und R. Blatt [Kumph et al., 2011] gezeigt. Erst die Nutzung numerischer Methoden gestattet die Realisierung eines verlustfreien und adiabatischen Transports. Außerdem erlaubt sie komplexere Elektrodenanordnungen wie dreidimensionale Fallen, oder segmentierte RF-Elektroden [Karin et al., 2006].

4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports

Bereits durch die Variation der RF-Amplitude einer Elektrode ist es in einfachen Geometrien möglich die Ionen zu verschieben [Kumph et al., 2011]. In komplexeren Fallenstrukturen wie der in Abbildung 4.7 gezeigten planaren Falle muss jedoch eine numerische Berechnung der für den Transport notwendigen RF-Amplitudenfunktionen vorgenommen werden. Einen hierfür geeigneten Algorithmus stellt die Tikhonov-Regularisierung bereit.

4. Neue Methode des Ionentransports

4.1.1. Tikhonov-Regularisierung der Fallenkontrollspannungen

In den vorherigen Abschnitten wurde für die Potentialsimulationen eine Spannung vorgegeben und daraus das Potential berechnet. Bei der Ermittlung der für den Transport notwendigen Spannungen steht man vor dem umgekehrten Problem. Form und Position des Potentials (DC-Transport) oder des Pseudopotentials (Radiofrequenzamplitudentransport, kurz RFA-Transport) sind vorgegeben, jedoch ist unklar, welche Spannungen hierfür erforderlich sind. Durch den BEM-Algorithmus steht ein lineares Gleichungssystem für den Zusammenhang zwischen der Kontrollspannung U_j und dem erzeugten Potential $\Phi(x_i) = \Phi_i$ in der Form von

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} U_j, \quad i = 1, \dots, M \quad N < M \quad (4.1)$$

zu Verfügung. Die Matrix A_{ij} enthält N Spalten, welche jeweils für eine separat regelbare Elektrode stehen. Die Anzahl der Zeilen M definiert die Menge der zu berechnenden Potentialpunkte. Um aus einem gegebenen Potential die Spannungen zu erhalten, muss eine Inversion der Matrix A_{ij} vorgenommen werden. Im vorliegenden Fall handelt es sich jedoch um ein „überbestimmtes“ Gleichungssystem. Zur Erzeugung eines Potentials sind mehrere Spannungs konfigurierungen möglich. Desweiteren tragen weit vom Problem entfernte Elektroden nur gering zu der Erzeugung bei, sodass divergierende Werte auftreten können. Dieses „inverse Problem“ wird daher am besten durch die Tikhonov-Regularisierung gelöst [Tikhonov and Arsenin, 1977]. Anstatt die Matrixgleichung zu lösen, minimiert diese Methode das Residuum unter Berücksichtigung der Euklidischen Norm

$$\|A\vec{U} - \vec{\phi}\|^2 + \alpha \|\vec{U}\|^2 = 0. \quad (4.2)$$

Zusätzlich erlaubt die Einführung eines weiteren Terms $\alpha \|\vec{U}\|^2$ die Minimierung divergenter Werte, wobei der Faktor α es gestattet einzelne Beiträge zu gewichten. Eine Beschleunigung dieses Algorithmus wird erzielt, indem vor dem Anwenden der Regularisierung die Singulärwertzerlegung¹ auf die Matrix A angewandt wird. Die Matrix $A_{M \times N}$ mit Rang r wird in ein Produkt

¹im Englischen **S**ingular **V**alue **D**ecomposition genannt, kurz SVD

4. Neue Methode des Ionentransports

Die etablierte Transportmethode mittels segmentierter DC-Elektroden

Zuerst konnte der axiale Transport in unserer Gruppe in der PCB-Falle (siehe Abbildung 3.2) realisiert werden [Huber et al., 2008]. Auch in der Mikrofaller konnte von Frank Ziesel gezeigt werden, dass der verlustfreie und adiabatische Transport möglich ist [Ziesel, 2008]. Bei der neuesten segmentierten Falle handelt es sich um eine planare Paulfalle [Welzel et al., 2011]. Der Transport war bereits möglich, jedoch wurde dieser bisher nicht eingehender optimiert. Bei dem Transport mittels DC-Elektroden wird die durch das statische axiale Potential, erzeugte Potentialmulde verschoben. Wichtig ist, dass die Verschiebung entlang des Mittelpunkts des Pseudopotentials erfolgt, sodass kein Heizeffekt durch die von den RF-Elektroden verursachte Mikrobewegung auftritt. Die Ionen können somit immer nur entlang der Fallenachse des DC-Einschlusses verschoben werden. Ausgehend von der Spannungsconfiguration des Fangpotentials wird eine Transportfunktion für die Spannungen angewendet, um das bereits bestehende Potentialminimum entlang der Fallenachse zu verschieben. Durch Verwendung von segmentierten Elektroden, deren Potentiale sich genügend überlappen (siehe auch Abschnitt 3.3.1), ist es möglich, die Potentialparameter wie die Potentialkrümmung und die Potentialtiefe für die Dauer des Transportprozesses konstant zu halten. Die Superposition des Potentials ergibt sich hierbei aus einer nicht trivialen Kombination der einzelnen Elektroden Spannungen, wie in Abbildungen 4.1 zu erkennen ist. Im späteren Experiment weichen die notwendigen Spannungen minimal von den numerisch ermittelten ab.

Die von Johannes Eble und Stefan Ulm entwickelte Methode [Eble et al., 2010] des „feedback“ optimierten Transports ermöglicht die schnelle Anpassung der Vorgaben an das Experiment. Die erhaltenen Transportschemata können unter anderem verwendet werden, um das Ion als Messprobe entlang der Fallenachse einzusetzen. Andreas Walther und Ulrich Poschinger konnten auf diese Weise den magnetischen Feldgradienten über den kompletten Verlauf der Fallenachse vermessen [Walther et al., 2011]. Der DC-Transport hängt entscheidend von der Segmentbreite, dem Abstand der Segmente eines Flügels und dem Abstand der einzelnen Fallenflügel zueinander ab. Eine ausführliche Diskussion dieser Parameter ist unter [Schulz et al., 2006] nachzulesen. Im Gegensatz zum Transport durch DC-Elektroden verwendet der im nächsten Abschnitt folgende RFA-Transport, das Pseudopotential zum Verschieben der Ionen.

4.1.2. Der Radiofrequenzamplitudentransport

Das Variieren der RF-Amplituden erlaubt eine Veränderung der Ionenposition in der radialen Ebene für die lineare Paulfalle aus Abbildung 2.1. Der eigentliche RFA-Transport

4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports

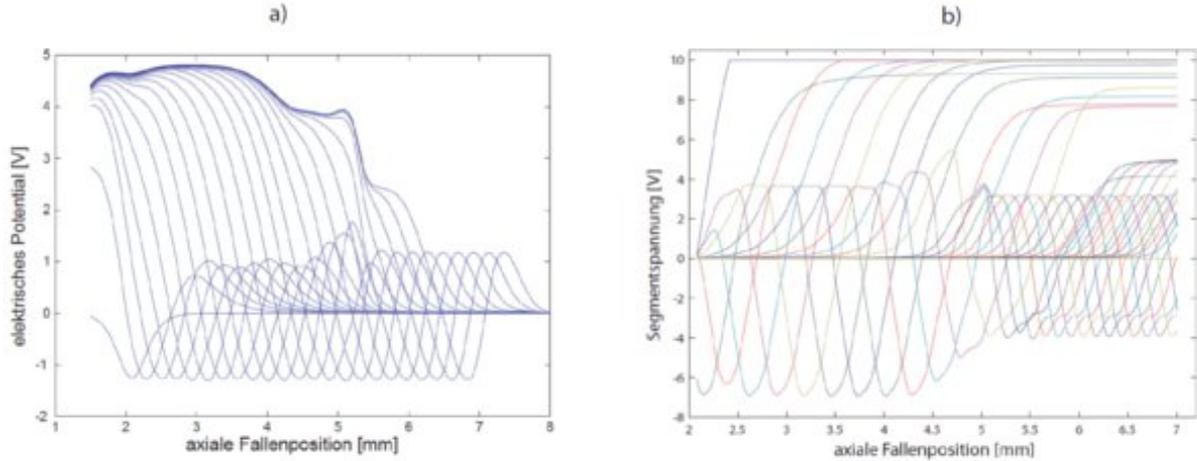


Abbildung 4.1.: a) zeigt die aus der Simulation errechneten superpositionierten Fallenpotentiale entlang der Fallenachse. Gut zu erkennen ist die konstant bleibende Form des harmonischen Potentials mit einem Offset von $\sim 1,2\text{V}$. b) zeigt den Verlauf der Spannungen von den verwendeten Elektroden. Jeder Elektrode ist eine andere Farbe zugeordnet. Die Grafiken wurden [Huber et al., 2010] entnommen.

wird erst sinnvoll, wenn die Geometrie um zwei weitere Elektroden ergänzt wird (siehe Abbildung 4.2). Diese zusätzlichen RF-Elektroden bilden zusammen mit den mittleren eine zweite lineare Paulfalle.

Der RFA-Transport erlaubt es, entlang der in grün eingezeichneten Achse (siehe Abbildung 4.2), Ionen oder Ionenkristalle von einer Falle in die andere zu transportieren. Wichtig ist in diesem Fall, dass die Ionen nicht aus dem Mittelpunkt des statischen DC-Einschlusses herausgeschoben werden, sodass eine für Heizeffekte sorgende Mikrobewegung vermieden werden kann. Die gezeigte DC-Elektrodenanordnung, erfüllt dieses Kriterium entlang der in grün eingezeichneten Achse. Die Frequenz Ω_{rf} und Phasenbeziehung der Wechselspannung muss für sämtliche RF-Elektroden identisch sein, da es sonst zu einer ungewollten Verschiebung oder Aufhebung des Pseudopotentialminimums kommt. Zur Realisierung des Transports, werden die Amplituden der einzelnen RF-Elektroden verringert oder erhöht. Entscheidend für die verwendeten relativen Amplituden ist hierbei das Verhältnis von r_0 , dem Abstand der Fallenmitte zur RF-Elektrode, zu r , dem Radius der Elektroden (siehe Abbildung 4.2 b) und Abschnitt 4.2.1). Für die folgenden Simulationen wurde ein r/r_0 -Verhältnis von 0,54 mit $r = 1\text{ mm}$ verwendet. Die eigentlichen Pseudopotentialminima der beiden linearen Ionenfallen liegen bei jeweils $x = -2\text{ mm}$ und $x = 2\text{ mm}$. Abbildung 4.3 zeigt die Verschiebung des Pseudopotentials, welche sich für den RFA-Transport entlang

4. Neue Methode des Ionentransports

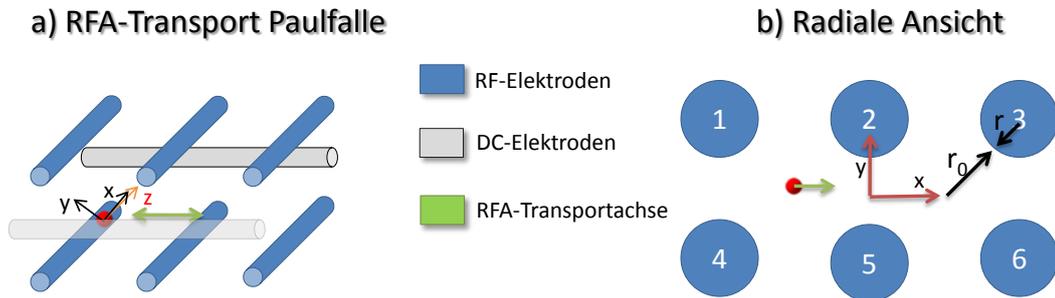


Abbildung 4.2.: a) Isometrische Skizze der RFA-Falle. Die Falle besteht aus zwei separat arbeitenden linearen Paulfallen. In der Mitte der ersten Falle ist ein Ion in der sich ergebenden Fangposition eingezeichnet. Zusätzlich sind die Hauptachsen des Ions abgebildet. Schwarz gezeichnet sind die radialen Fallenachsen, die axiale Fallenachse wurde orange hervorgehoben. Die grüne Achse deutet die durch RFA-Transport möglich werdende Transportachse an. b) Radiale Ansicht der Falle. Die roten Achsen kennzeichnen die von der Simulation verwendeten Achsen und den Ursprung. Es wurden zusätzlich die für die Falleneigenschaften wichtigen Parameter r (Elektrodenradius) und r_0 (Abstand der Elektroden zur Fallenmitte) eingezeichnet. Die RF-Elektroden sind von 1 bis 6 durchnummeriert.

der x -Achse ergibt. Die Regularisierung dieser Konfiguration wird mit einer Schrittweite von $\Delta x = 50 \mu\text{m}$ durchgeführt, sodass sich insgesamt 80 Schritte ergeben.

Die Regularisierung ist in der Lage, das Minimum des Pseudopotentials von der linken Falle in die rechte zu verschieben. Der Verlauf der Spannungen (siehe Abbildungen 4.4) verdeutlicht den komplizierten Zusammenhang zwischen der Position des Pseudopotentials und der hierfür notwendigen RF-Amplituden. Die Grenzen für die Radiofrequenzamplitude betragen 0 und 400 V.

Die Spannungen zeigen für manche Elektroden Sprünge, welche auf Konvergenzprobleme des Simulationsprogramms zurückzuführen sind. Die mittleren Elektroden tragen in dem ermittelten Spannungsschema nur begrenzt zum Transport bei. Durch die Beschränkung auf positive Werte für die Amplitude ist es nur durch Verringern der inneren und Erhöhen der äußeren RF-Amplituden möglich, das Ion zu verschieben. Erlaubt man die Wahl einer Phasenverschiebung von 180° für den Transport (entspricht negativen Amplituden), resultiert dies in einen sauberen Verlauf. Dieser Phasensprung lässt sich elektronisch jedoch nur schwer realisieren. Aus der Analyse der Pseudopotentiale ergibt sich eine durchschnittliche Tiefe von $\sim 0,4 \text{ eV}$. Beim Durchqueren der Mitte zwischen Elektrode 2 und 5 sinkt das Pseudopotential auf $\sim 0,05 \text{ eV}$ ab. Deutlich wird dies ebenfalls an den Fallenfrequenzen

4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports

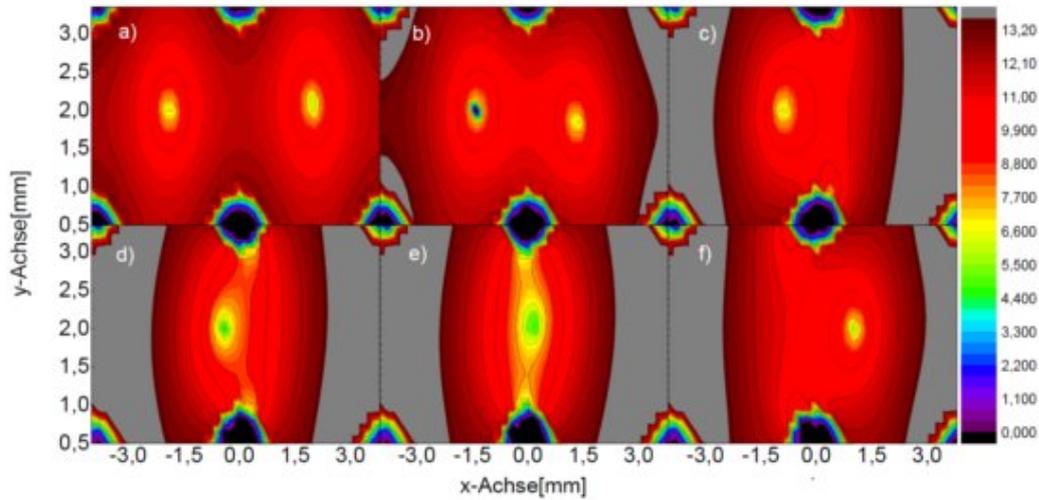


Abbildung 4.3.: Simuliertes \vec{E} -Feld dargestellt als $\log\left(\left(\frac{E}{c}\right)^2\right)$ ($c = 1 \text{ Vm}$) für ausgewählte Schritte der Regularisierung. a) zeigt die Startkonfiguration. b) zeigt Schritt Nr.11. c) Schritt Nr.21. d) Schritt Nr.30. e) Schritt Nr.40. f) Schritt Nr.60.

während des Transports. In Abbildung 4.5 ist zu erkennen, dass ab einem Abstand des Minimums von $x = -0,8 \text{ mm}$ bis $x = 0,8 \text{ mm}$ zum Ursprung stark verringerte radiale Fallenfrequenzen auftreten.

Die Ursache davon liegt in den Elektroden 2 und 5, welche durch ihren zu groß gewählten Radius die äußeren Elektroden zu gut abschirmen. Dieser Effekt kann durch ein kleineres $\frac{r}{r_0}$ -Verhältnis oder höhere Grenzen für die Amplituden verringert werden. Trotz des geringen Einschlusses war es in der Simulation möglich, den Transport von einer Seite zur anderen durchzuführen (siehe Abbildung 4.6). Die Ionen werden gekühlt ($\sim 2 \text{ mK}$) in die linke Falle geladen. Die Amplitudenfunktion der einzelnen Elektroden wird zwischen den Regularisierungsschritten linear interpoliert, um einen glatten Verlauf zu erhalten.

Die Transportdauer wird auf $857 \mu\text{s}$ festgelegt und in 160000 Einzelschritte unterteilt. Vergleicht man die Projektionen der Trajektorien im Anfangspotential und während des Transports, so ergibt sich für die y-Achse eine Aufweitung von bis zu $\sim 60 \mu\text{m}$ gegenüber der ursprünglichen. Gut zu erkennen ist vor allem der Energiegewinn in der Mitte der Falle, welcher bis zum Ende des Transports erhalten bleibt. Anhand der x-Position ist ersichtlich, dass die Regularisierung in der Mitte der Falle nicht in der Lage ist, die Spannungen für die vorgegebene Potentialposition zu ermitteln. Die schon vor diesem Punkt erhaltenen Werte für die RF-Amplitude stoßen an die für den Transport eingestellte Grenze von 400 V . Eine

4. Neue Methode des Ionentransports

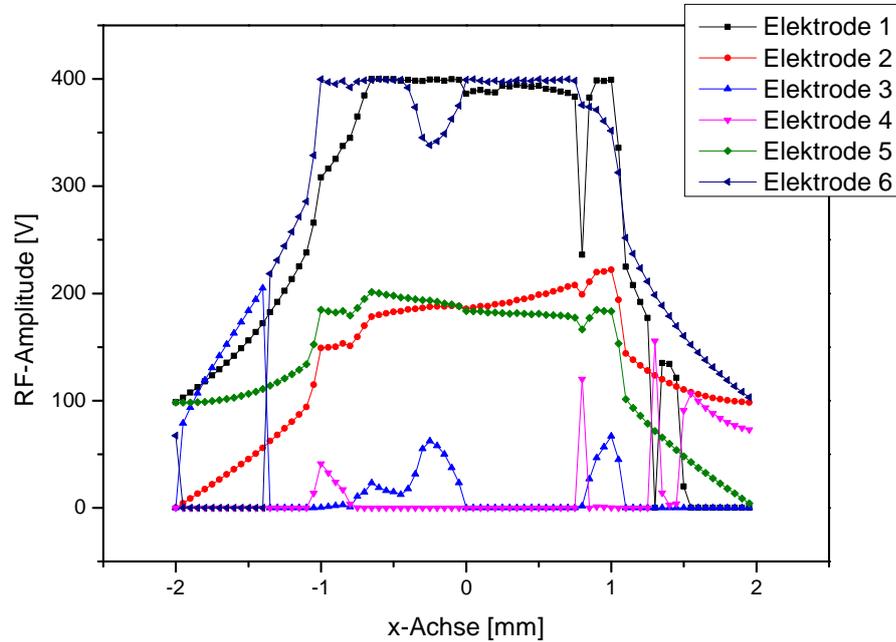


Abbildung 4.4.: Simulierte Amplitudenfunktionen der einzelnen Elektroden gegen die Position des Pseudopotentialminimums. Die einzelnen Schritte sind linear interpoliert, was ebenfalls im späteren Experiment genutzt werden kann, um einen glatten Verlauf der Spannungen zu erhalten.

Erhöhung dieser Grenze um weitere 400 V bringt nur eine leichte Verbesserung, sodass es sich als einfacher erweist, die Geometrie zu modifizieren. Erst nach dem Verlassen der kritischen Region gleicht die Regularisierung das errechnete Potential wieder der Vorgabe an. Die z-Achse kann während des Transports als stabil angesehen werden. Für eine experimentelle Realisierung des Transports muss eine Optimierung der Fallengeometrie hin zu kleineren Radien vorgenommen werden, um den Durchgriff der Elektroden zu erhöhen.

Eine andere Möglichkeit das Problem der mittleren Elektroden zu umgehen, stellt der Übergang von der dreidimensionalen zur zweidimensionalen Struktur dar. Diese vielversprechende Geometrie soll im nächsten Abschnitt besprochen werden.

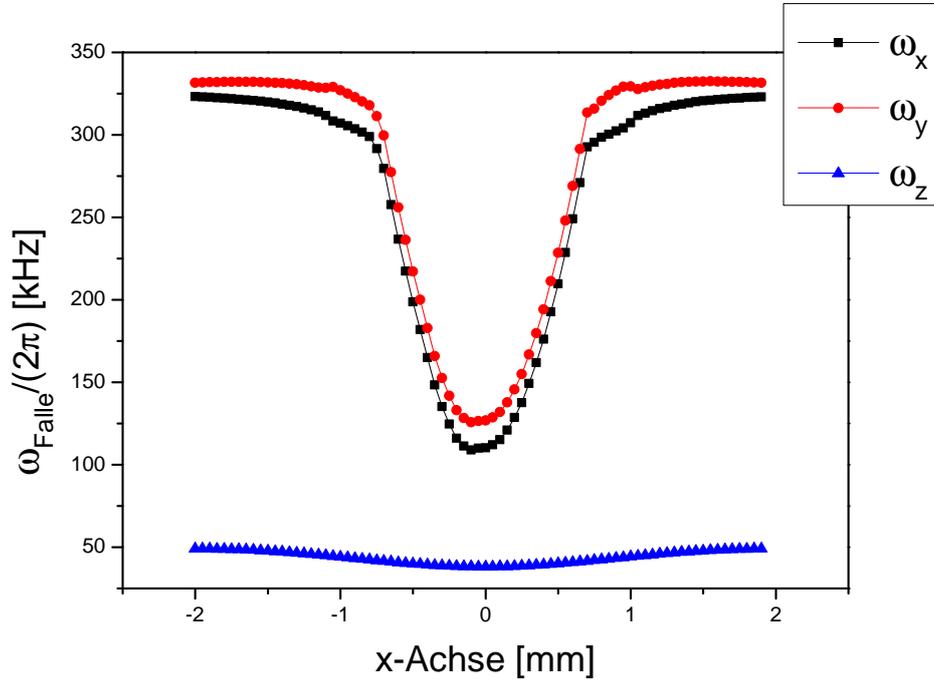


Abbildung 4.5.: Aus Potentialfits ermittelte Frequenzen für die einzelnen Schritte des RFA-Transports. An die DC-Elektroden ist eine Spannung von 3 V angelegt, während eine Radiofrequenz von $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 7$ MHz verwendet wird.

4.1.3. Die planare Paulfalle für den RFA-Transport

In Zusammenarbeit mit Todd Karin und Isabela Le Bras, aus der Arbeitsgruppe von Hartmut Häffner¹, wurde eine Falle für den RFA-Transport in planarer Geometrie entwickelt (siehe Anhang A oder [Karin et al., 2006]). Der Vorteil dieses Fallendesigns (siehe Abbildung 4.7) besteht im Ermöglichen des mikrobewegungsfreien Ionentransports über alle Pfade einer X-Kreuzung. In planaren Fallen erweisen sich Kreuzungen als essentiell, um die Skalierbarkeit der Falle zu gewährleisten [Amini et al., 2010]. Aus diesem Grund wurde eine Anordnung aus segmentierten DC- und RF-Elektroden zusammengestellt, die es erlaubt, eine Kreuzung aus beiden Elektrodentypen zu bilden. Eine Transportrichtung wird durch das Verändern der Spannungen der DC-Elektroden, die andere durch das Verändern der RF-Amplitude realisiert. Gleichzeitig befindet sich das Ion immer in der Null des Pseudopotentials, welches durch die RF-Elektroden mit statischer RF-Amplitude erzeugt wird.

¹University of California Berkeley

4. Neue Methode des Ionentransports

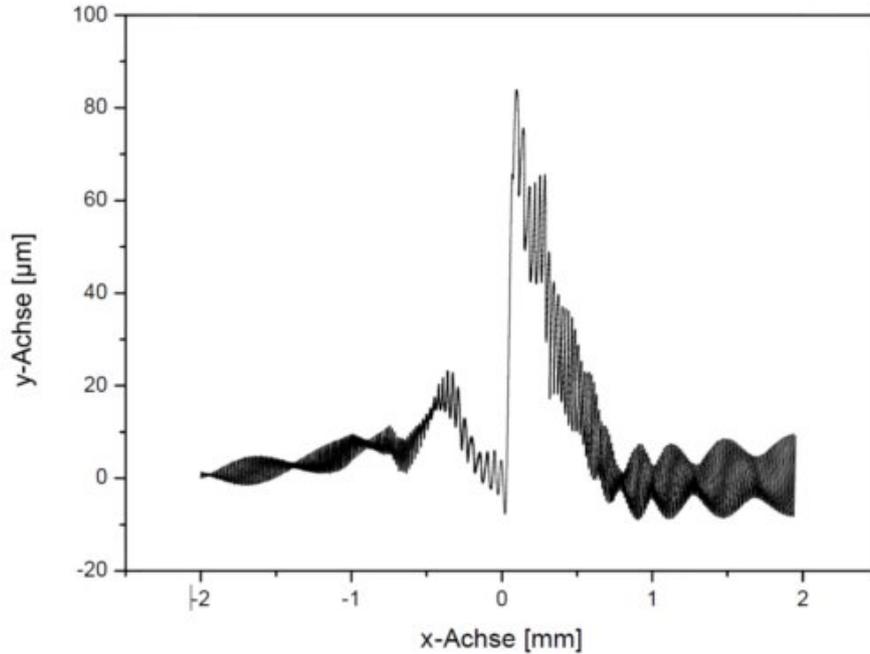


Abbildung 4.6.: Trajektoriendiagramm des RFA-Transports. Aufgetragen sind die Projektionen der Trajektorien auf die Achsen der Simulation. Für die x- und y-Achse ergeben sich daher Schwebungen. Die gewählten Fallenparameter sind: $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 7 \text{ MHz}$ und $U_0 = 3 \text{ V}$.

Die planare Falle verwendet drei unterschiedliche Elektrodentypen. Die RF-Elektroden mit statischen RF-Amplituden ermöglichen in Kombination mit den segmentierten DC-Elektroden den Transport entlang der z-Achse. Fünf RF-Elektroden mit variablen RF-Amplituden wiederholen sich periodisch entlang der x-Achse. Durch die Variation der Amplitude dieser Elektroden ist es möglich, das Ion von einer zur nächsten Kreuzung zu transportieren (grüner Pfeil in Abbildung 4.7). Aufgrund der Periodizität muss die Regularisierung lediglich von der Mitte von Elektrode 5 zur Mitte zwischen Elektrode 3 und 2 durchgeführt werden. Die zu überwindende Distanz beträgt $x = 140 \mu\text{m}$. Um zu der nächsten Kreuzung zu gelangen, muss das Transportschema zyklisch vertauscht angewandt werden. Der Verlauf der aus der Simulation erhaltenen Amplitudenfunktion der RF-Elektroden ist in Abbildung 4.8 gezeigt.

Für die planare Falle ist es möglich, einen glatten Verlauf der Amplituden aus der Regularisierung zu berechnen. Überprüft man die numerische Null des Pseudopotentials, so stellt man fest, dass sich die Fanghöhe ($54,5 \mu\text{m}$ über den Elektroden entlang der y-Achse)

4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports

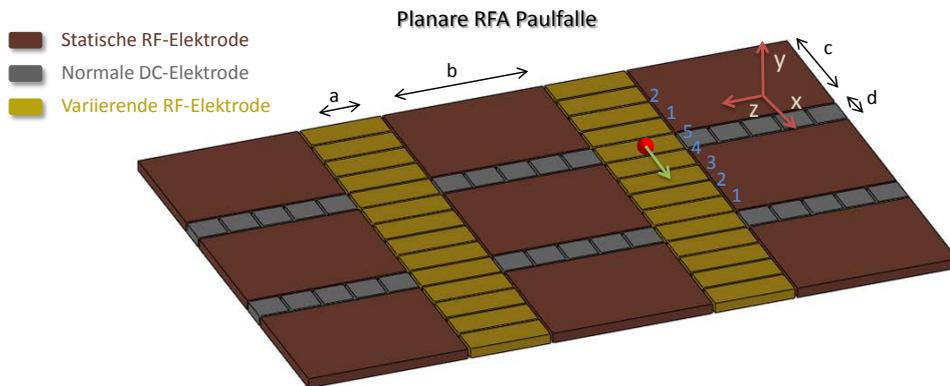


Abbildung 4.7.: Skizze der planaren Falle für den RFA-Transport. Die Ausrichtung der Fallenachsen deckt sich mit denen der Simulation. Die wichtigen Parameter der Geometrie wurden zusätzlich eingezeichnet. Die in braun eingezeichneten RF-Elektroden mit statischen RF-Amplituden haben eine Breite von $b = 270 \mu\text{m}$ und eine Länge von $c = 215 \mu\text{m}$. Die DC-Elektroden sind quadratisch und besitzen eine Seitenlänge von $d = 50 \mu\text{m}$. Die Seitenlänge a der RF-Elektroden mit variablen RF-Amplituden beträgt $160 \mu\text{m}$. Der grüne Pfeil deutet die Richtung des RFA-Transports an.

um maximal $1,2 \mu\text{m}$ während des Transports ändert. Die Ausgangsposition der z-Achse hat anfänglich einen Wert von $-3,9 \mu\text{m}$, dieser erleidet eine maximale Abweichung von $1,1 \mu\text{m}$. Dies stellt, angesichts der sich während des Transports stark ändernden Elektrodeneinflüsse, ein sehr gutes Ergebnis dar. In Abbildung 4.9 sind die sich für den Transport ergebenden Frequenzen dargestellt.

Die Fallenfrequenz, welche sich für die entlang der Transportachse orientierte x-Achse ergibt, verdoppelt sich zwischen der Start- und Endposition. ω_y zeigt einen unruhigen Verlauf und kreuzt für $17,8 \mu\text{m}$ und $96,0 \mu\text{m}$ die Fallenfrequenz der x-Achse. Die Frequenz für die z-Achse kann für den Verlauf des Transportes fast konstant gehalten werden. Dies resultiert aus dem stabilen Einschluss der RF-Elektroden mit statischen Amplituden entlang der z-Achse. Den schwächsten Einschluss erhält man für die Startposition des Transportvorgangs. Dieser beträgt 50 meV und kann für den ganzen Transportvorgang gewährleistet werden. Bis zur Transportposition von $x = 95 \mu\text{m}$ wächst die Pseudopotentialtiefe auf 150 meV an. Für in der Ausgangsposition gefangene und gekühlte Ionen kann somit der Transport bewerkstelligt werden. Eine weitere Anwendung, die durch die variablen RF-Amplituden zugänglich wird, ist die Verschmelzung zweier Pseudopotentiale.

4. Neue Methode des Ionentransports

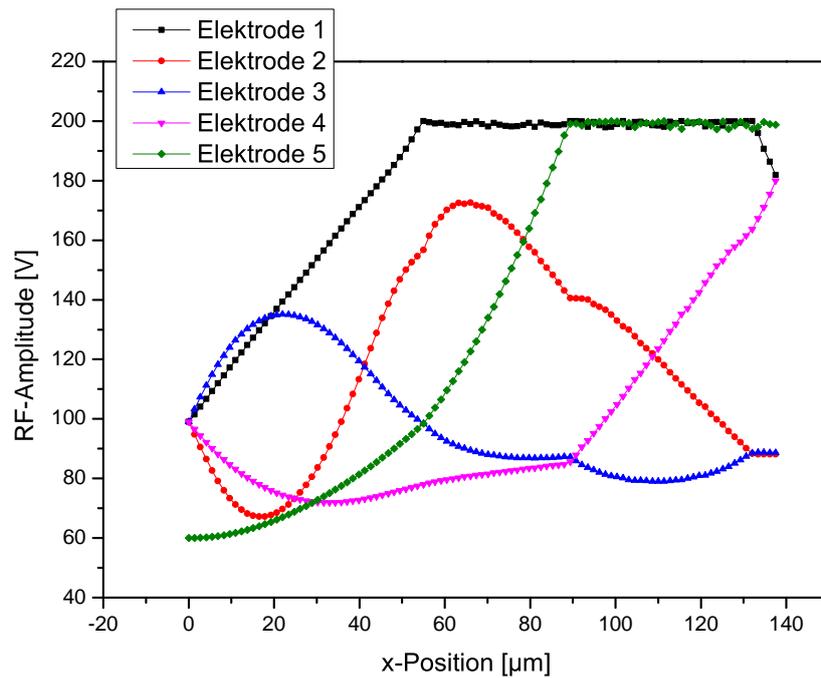


Abbildung 4.8.: Abbildungen der aus der Regularisierung erhaltenen Amplitudenfunktion der einzelnen Elektroden aufgetragen gegen die Position der Berechnung. Der zu betrachtende Bereich wird dabei in 100 Schritte unterteilt. Für den Transportvorgang wird an die RF-Elektroden mit statischen RF-Amplituden eine Spannung V_{pp} von 120 V angelegt. Die Radiofrequenz beträgt für alle RF-Elektroden $\Omega_{rf}/(2\pi) = 50$ MHz.

4.1. Das Prinzip des Radiofrequenzamplitudentransports

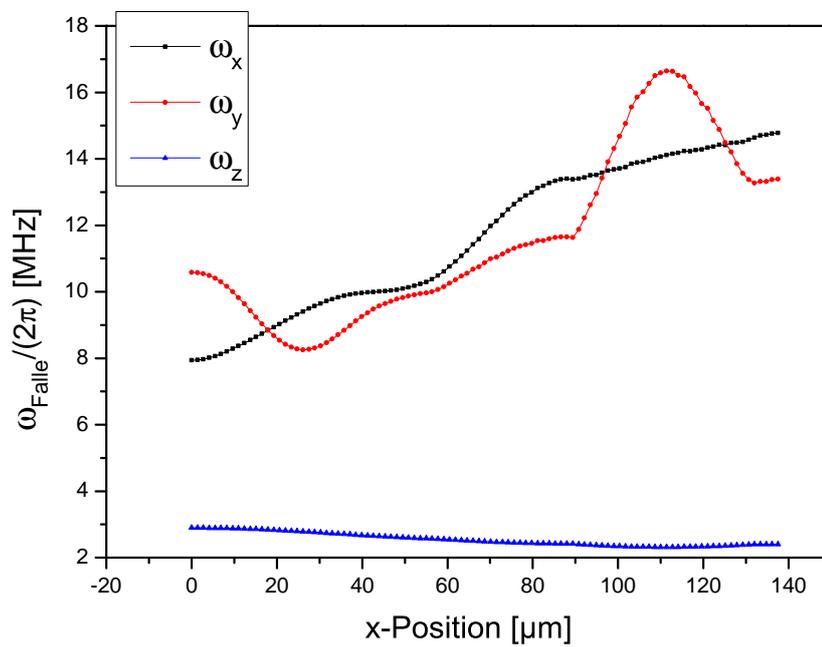


Abbildung 4.9.: Abbildungen der sich für die einzelnen Transportschritte ergebenden Frequenzen aufgetragen gegen die Transportposition. Die Fallenfrequenzen wurden mittels linearem Fit an die elektrischen Feldkomponenten ermittelt.

4.2. Das Prinzip der Pseudopotentialverschmelzung

Das Prinzip wird anhand einer dreidimensionalen Paulfalle demonstriert. Für eine vergleichbare Umsetzung in planaren Fallen wird auf die Arbeit der Gruppe von R. Blatt [Kumph et al., 2011] verwiesen. Die Elektrodenkonfiguration zweier linearer Paulfallen (siehe Abbildung 4.2) bildet unsere dreidimensionale Falle mit den in Abbildung 4.10 gezeigten RF-Amplitudenbeziehungen. Diese Ausgangsposition gestattet das Fangen zweier linearer Ionenkristalle.

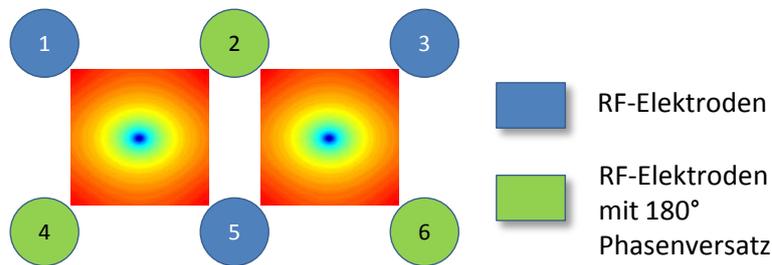


Abbildung 4.10.: Radiale Ansicht der Elektrodenanordnung. Die grünen RF-Elektroden besitzen gegenüber den blauen RF-Elektroden einen Phasenversatz von 180° . Zusätzlich sind die sich ergebenden Pseudopotentialminima für identische Amplituden der 6 Elektroden eingezeichnet.

Der Abstand der Minima zueinander kann um ein Vielfaches verringert werden. Notwendig hierfür ist ein Ändern des Amplitudenverhältnisses χ

$$\chi = \frac{V_{\text{außen}}}{V_{\text{innen}}} \quad (4.7)$$

der inneren (Elektroden 2 und 5) zu den äußeren RF-Elektroden (Elektroden 1,3,4 und 6). Durch Erhöhen der Amplituden der äußeren Elektroden oder Verringern der Amplituden der inneren Elektroden nähern sich die Pseudopotentialminima einander an (siehe Abbildung 4.11). Die mittleren Elektroden dürfen nicht geerdet werden, da sich sonst kein fangendes Potential für die Ionen ergibt. Genau wie bei dem RFA-Transport ist das r/r_0 -Verhältnis entscheidend für das benötigte χ , um die Potentiale einander näher zu bringen (siehe Abschnitt 4.2.1). Die in Abbildung 4.14 a) simulierte Falle besitzt ein r/r_0 -Verhältnis von 0,2 bei einem Elektrodenradius von $r_0 = 0,4$ mm. Die beiden Pseudopotentialminima liegen für $\chi = 1$, der Ausgangsposition entsprechend, 0,679 mm auseinander.

Durch die sukzessive Erhöhung der Amplitude der äußeren Elektroden (1,3,4 und 6) ver-

4.2. Das Prinzip der Pseudopotentialverschmelzung

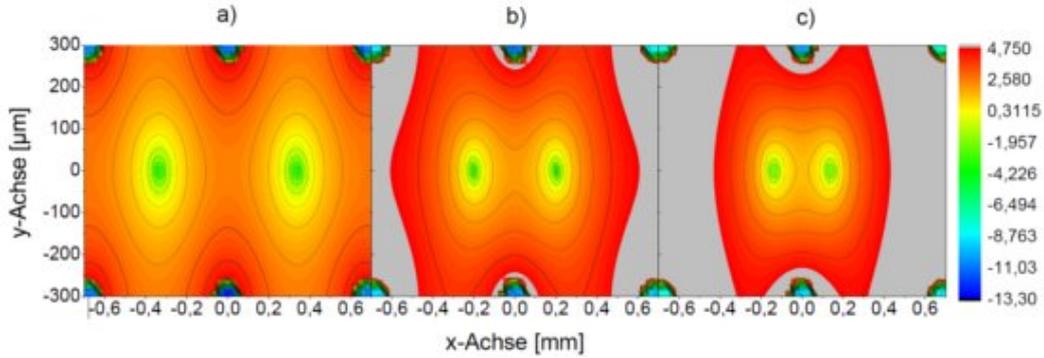


Abbildung 4.11.: Simulierte Pseudopotentiale Φ_{Pseudo} für verschiedene Amplitudenverhältnisse. Dargestellt als $\log((\frac{\Phi_{\text{Pseudo}}}{c})^2)$ ($c = 1 \text{ eV}$). a) zeigt das Pseudopotential für $\chi = 1$. Für b) wird ein Verhältnis von $\chi = 3$ und für c) von $\chi = 5$ verwendet. Die für die Plots benutzte Radiofrequenz beträgt $\Omega_{\text{rf}}/(2\pi) = 18 \text{ MHz}$ und $V_{\text{pp}} = 400 \text{ V}$ für die inneren Elektroden.

größert sich das Verhältnis χ , sodass die Minima des Pseudopotentials in Richtung der schwächeren Elektroden verschoben werden. Entscheidend ist der Potentialwall, welcher die beiden Minima voneinander trennt. In Abbildung 4.12 ist dieser gegen den absoluten Abstand der beiden Minima aufgetragen.

In der Vergrößerung von Abbildung 4.12 ist zu erkennen, dass die Minima auf einen Abstand von $\sim 72 \mu\text{m}$ zueinander gebracht werden können und sie immer noch durch einen Potentialwall von 51 meV getrennt werden. Dies entspricht einer Verkleinerung des ursprünglichen Abstandes um einen Faktor von $\sim 9,4$. Dieser Faktor kann weiter verbessert werden, indem die Radiofrequenz niedriger gewählt wird. Somit nimmt der Pseudopotentialwall zu, aufgrund des formellen Zusammenhangs mit $1/\Omega_{\text{rf}}^2$ (siehe Formel 2.8). Dies führt zu einem geringeren Abstand in der Ausgangsgeometrie und einem stärkeren Durchgriff der Elektroden.

Ionenkristalle können somit in der Anfangsposition gefangen werden, anschließend gekühlt und in diesem Zustand aufeinander zubewegt werden. Entscheidend für die Stabilität eines linearen Kristalls aus N Ionen ist das Verhältnis von radialer Fallenfrequenz ω_r zu axialer Fallenfrequenz ω_z

$$\frac{\omega_r}{\omega_z} = 0,73N^{0,86}. \quad (4.8)$$

Dieses behält für $N < 1000$ seine Gültigkeit [Steane, 1997]. Wird das Verhältnis verletzt, kommt es zu der Ausbildung einer Zick-Zack-Anordnung der Ionen. Aus diesem Grund wird der Verlauf der radialen Fallenfrequenzen für das Verschieben der Ionen aus der Anfangs-

4. Neue Methode des Ionentransports

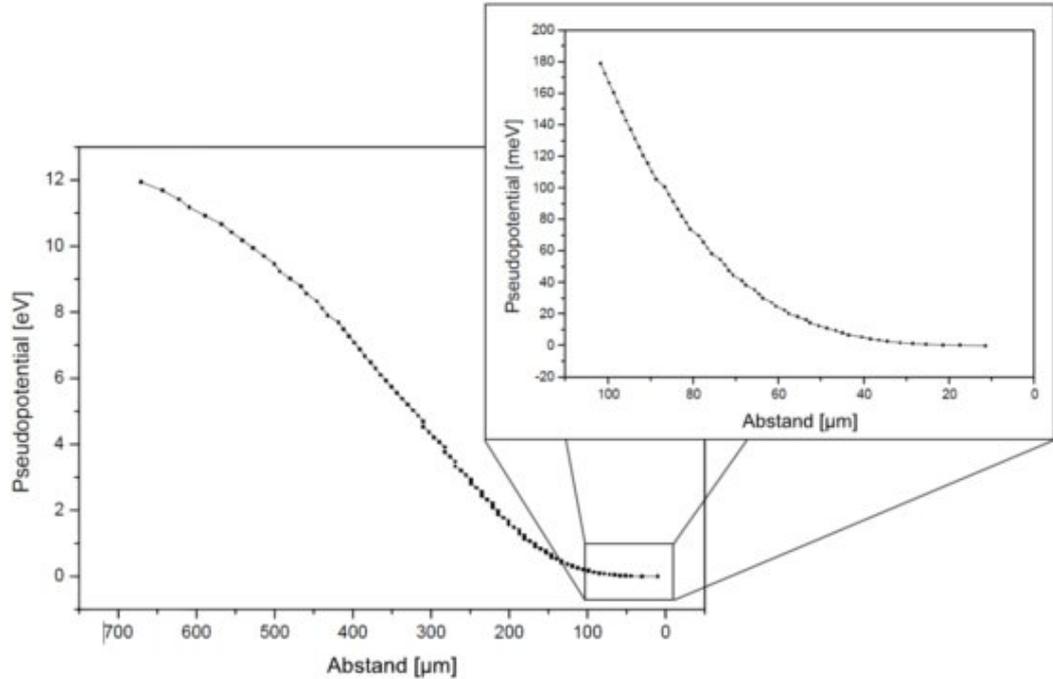


Abbildung 4.12.: Pseudopotentialwall zwischen den beiden Minima aufgetragen gegen den absoluten Abstand der beiden Minima zueinander. Die interessante Region von $100 \mu\text{m}$ bis $0 \mu\text{m}$ ist vergrößert abgebildet. Für die Simulation wurden die Parameter $V_{pp} = 400 \text{ V}$ und $\Omega_{rf}/2\pi = 18 \text{ MHz}$ verwendet.

position zu dem später im Experiment verwendeten Abstand simuliert (siehe Abbildung 4.13).

Aus der Simulation geht hervor, dass ein ausreichend hohes Verhältnis für den kompletten Transportvorgang gewährleistet werden kann. Mit den gewählten Einstellungen ist die Stabilität eines Kristalls mit bis zu 25 Ionen theoretisch sichergestellt. Die leichte Verschiebung der axialen Frequenz resultiert aus den kurzen DC-Elektroden (siehe Abbildung 4.14). Bei der Verschmelzung der Pseudopotentiale kann beobachtet werden, wie sich die Pseudopotentiale leicht deformieren. Im Abschnitt 4.2.1 wird daher kurz auf die zu erwartende Harmonizität der Potentiale in Abhängigkeit des gewählten r/r_0 -Verhältnisses eingegangen. Die Simulationen der Pseudopotentialverschmelzung konnten zeigen, dass es prinzipiell möglich sein sollte, Ionenkristalle bei geeigneter Fallengeometrie einander beliebig nahe zu bringen. Welche Faktoren der Geometrie hierbei eine entscheidende Rolle spielen, wird im nächsten Abschnitt erklärt.

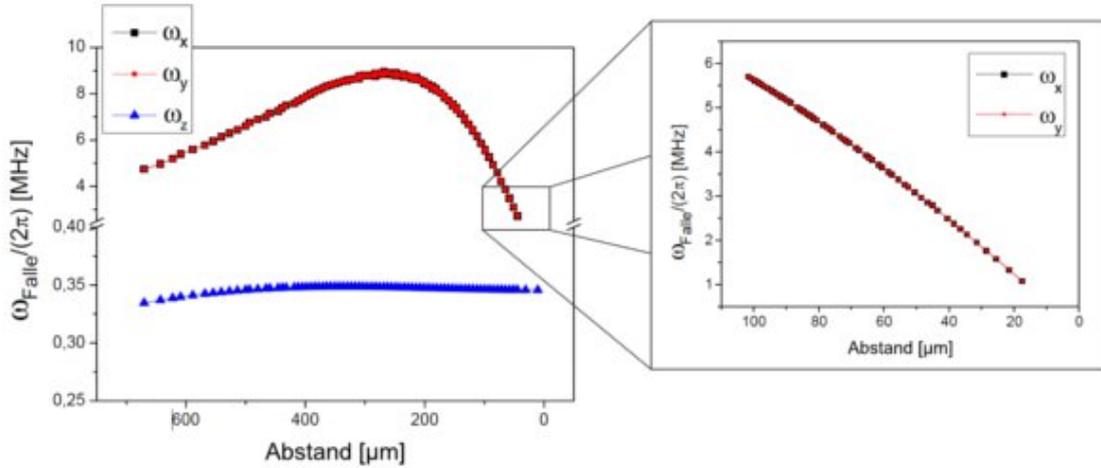


Abbildung 4.13.: Aus den Potentialfits ermittelte Fallenfrequenzen aufgetragen gegen den absoluten Abstand der Minima. Die interessante Region von 100 μm bis 0 μm ist vergrößert dargestellt. Für die Simulation werden die Parameter $U_0 = 5 \text{ V}$, $V_{\text{pp}} = 400 \text{ V}$ und $\Omega_{\text{rf}}/2\pi = 18 \text{ MHz}$ verwendet.

4.2.1. Einfluss der Elektrodengeometrie auf das Zusammenführen der Pseudopotentiale

Der wichtigste den RFA-Transport und das Zusammenführen der Pseudopotentiale beeinflussende Parameter ist das Verhältnis von r zu r_0 . Diese Relation hat Auswirkung auf das benötigte χ und die Harmonizität des Pseudopotentials. Für den Massenfiter und somit für die lineare Paulfalle wurde bereits das ideale Verhältnis zu $\frac{r}{r_0} = 1,1468$ bestimmt [Denison, 1971]. Verringert man diese Beziehung, senkt man im Gegenzug den quadratischen Potentialparameter α_2 (siehe Gleichung 2.26) des Potentials (siehe Abbildung 4.14 b)) und stärkt den Einfluss der anharmonischen Terme. Diese Auswirkung wurde in der in Abbildung 4.14 a) gezeigten Falle simuliert.

Mit der Absicht einer späteren experimentellen Umsetzung der Fallengeometrie nahe zu kommen, werden kurze DC-Elektroden simuliert. Dies gewährleistet einen guten optischen axialen Zugang. Der Abstand der Elektroden zum Fallenmittelpunkt r_0 wird auf einen Wert von 0,4 mm festgelegt. Die unterschiedlichen Verhältnisse werden durch eine Verkleinerung des Elektrodenradius r erreicht. In Abbildung 4.15 a) ist das Verhalten des relativen Abstands der Potentialminima für verschiedene χ und unterschiedliche r/r_0 -Verhältnisse aufgetragen. Aus dem Graphen wird ersichtlich, dass für den Verlauf des relativen Abstands kein linearer Zusammenhang mit χ vorliegt.

In Abbildung 4.15 b) ist für einen ausgewählten relativen Abstand von 10% das hier-

4. Neue Methode des Ionentransports

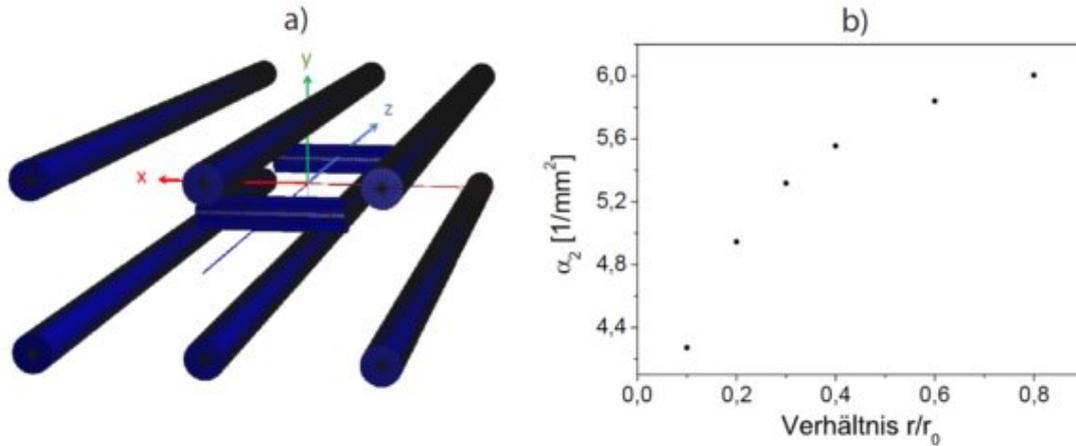


Abbildung 4.14.: In a) ist das Grundmodell der simulierten Fallen abgebildet. Die in der Simulation verwendeten Achsen sind ebenfalls eingezeichnet. Der Graph in b) zeigt die aus dem Potentialfit erhaltenen Werte für den quadratischen Anteil des Potentials aufgetragen gegen das r/r_0 -Verhältnis. Die Länge der verwendeten RF-Elektroden beträgt 5 mm, die Länge der DC-Elektroden 1,5 mm.

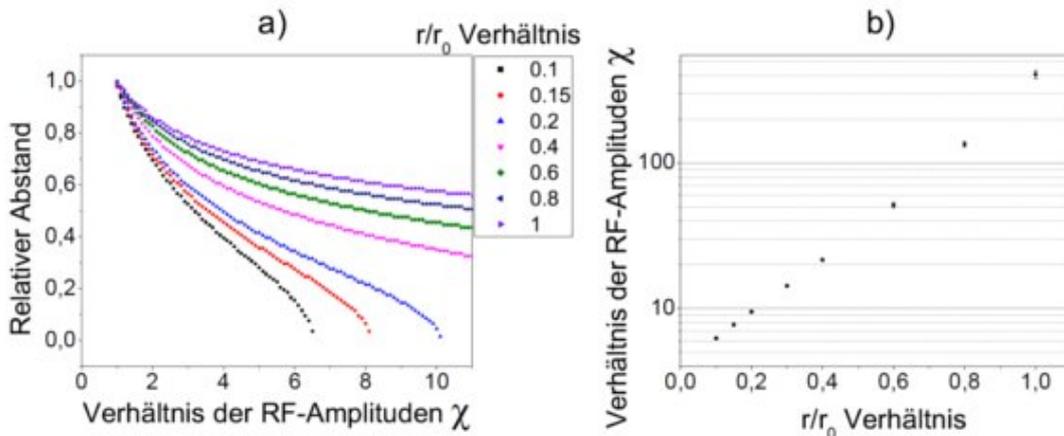


Abbildung 4.15.: Der Graph in a) zeigt den relativen Abstand der Minima zueinander aufgetragen gegen den verwendeten Parameter χ . Der relative Abstand gibt das Verhältnis zwischen dem Anfangsabstand und dem für dieses χ resultierenden an. Das erforderliche χ , um einen relativen Abstand von $\sim 0,1$ zu erhalten, ist in b) gegen das jeweilige Verhältnis von $\frac{r}{r_0}$ aufgetragen.

für benötigte χ bei den jeweiligen r/r_0 -Verhältnissen (Radienverhältnis) aufgetragen. Der relative Abstand gibt das Verhältnis zwischen dem Anfangsabstand des jeweiligen Radi-

4.2. Das Prinzip der Pseudopotentialverschmelzung

enverhältnisses und dem für dieses χ resultierenden an. Das benötigte χ um die beiden Potentialminima auf einen relativen Abstand von $\sim 0,1$ zu bringen, wächst exponentiell mit größerem r/r_0 -Verhältnis an. Aus dem Fit mit einer e-Funktion ergibt sich der Zusammenhang zwischen χ und $R = \frac{r}{r_0}$ zu

$$\chi(R) = (3,99 \pm 0,11) \cdot e^{\frac{R}{0,231 \pm 0,005}}. \quad (4.9)$$

Dieser Zusammenhang kann nur im Rahmen sinnvoller Verhältnisse $R < 1,1$ als gültig angesehen werden. Bei zu großen Elektrodenradien wird die Lücke zwischen den Elektroden in der Mitte der Falle geschlossen. Auch wenn der gezeigte Zusammenhang nur für einen relativen Abstand von 10% ermittelt wurde, darf angenommen werden, dass der Verlauf der Amplitudenfunktion des RFA-Transports in gleicher Weise von kleineren r/r_0 -Verhältnissen profitiert. Interessant gestalten sich auch die Auswirkungen auf das Potential, nachdem die beiden Minima auf einen relativen Abstand von $\sim 0,1$ gebracht wurden. Die Potentialkomponenten werden aus einem Fit mit einem Polynom vierter Ordnung erhalten (siehe Abschnitt 2.2.3). Zur besseren Übersicht werden die aus dem Fit ermittelten und mit Gl. 2.27 für $x = 1 \mu\text{m}$ umgerechneten Werte auf den umgerechneten quadratischen Potentialparameter $\alpha'_{2\chi=1}$ des Potentials der Ausgangsposition für ein $\chi = 1$

$$\epsilon_n = \frac{\alpha'_n}{\alpha'_{2\chi=1}} \quad (4.10)$$

normiert. Wichtig hierbei ist die Wahl des Abstandes x von der Mitte des Potentials. Wird dieser zu groß gewählt, bestimmt die Analyse die Anharmonizität eines Potentialbereichs, der das Ion nicht betrifft. Ist das Ion jedoch ungekühlt, nimmt es möglicher Weise weiter entfernte Regionen im Potential wahr, und der ermittelte Wert entspricht nicht dem reellen. Für die vorgestellten Werte wird ein x von $1 \mu\text{m}$ verwendet, um den schwachen Einschluss des Pseudopotentials mit zu berücksichtigen.

Verhältnis $\frac{r}{r_0}$	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4
0,1	0,75	$4,52 E - 3$	$-9,69 E - 10$
0,2	0,96	$5,75 E - 3$	$-9,66 E - 9$
0,3	1,25	$7,10 E - 3$	$-2,70 E - 9$
0,4	1,61	$8,64 E - 3$	$-1,74 E - 9$
0,6	2,61	$1,27 E - 2$	$2,10 E - 8$
0,8	4,02	$1,86 E - 2$	$-3,196 E - 7$

Tabelle 4.1.: Übersicht über die einzelnen normierten Potentialparameter.

4. Neue Methode des Ionentransports

Die in Tabelle 4.1 abgebildeten Werte sind auf den harmonischen Parameter $\alpha'_{2\chi=1}$ für 400 V_{pp} normiert. Eine Zunahme des harmonischen Anteils für große Verhältnisse ist daher nicht verwunderlich. Beispielsweise wird ein χ von ~ 134 benötigt, um bei einem $\frac{r}{r_0}$ von 0,8 die beiden Minima auf einen relativen Abstand von 10 % zu bringen. Der Anteil von ϵ_4 wächst mit zunehmenden Radienverhältnissen stark an, kann im Vergleich zu den anderen Potentialkomponenten jedoch vernachlässigt werden. Auffällig ist der hohe Betrag von ϵ_3 . In der Ausgangsposition des Potentials ist dieser nahezu Null ($\epsilon_3 = 7,10 E - 6$ für $\frac{r}{r_0} = 0,6$). Durch das Annähern der Minima wächst dieser Anteil rapide. Vergleicht man ϵ_3 mit ϵ_2 der jeweiligen Falle, so fällt auf, dass dieses um einen Faktor von ~ 200 auseinander liegt.

Verhältnis $\frac{r}{r_0}$	$\frac{\epsilon_2}{\epsilon_3}$
0,1	167
0,2	166
0,3	176
0,4	187
0,6	206
0,8	216

Tabelle 4.2.: Tabelle des Verhältnisses von ϵ_2 zu ϵ_3 mit steigendem r/r_0 -Verhältnis.

Dieser Unterschied nimmt mit wachsendem Radienverhältnis zu (siehe Tabelle 4.2). Dies bestätigt, dass ähnlich wie bei der linearen Paulfalle die Harmonizität des Verschmelzungspotentials durch ein größeres Verhältnis von $\frac{r}{r_0}$ begünstigt wird. In der experimentellen Realisation der Falle sollte das größtmögliche Radienverhältnis verwendet werden. Im Gegenzug dazu wächst das benötigte χ exponentiell an, sodass die zugänglichen RF-Amplituden dies limitieren. Es muss außerdem bedacht werden, dass der Elektrodenradius den optischen Zugang zur Mitte zwischen den beiden Fallen beschränkt. Ein Kühlen sämtlicher Fallachsen wird hierdurch verkompliziert. Die Falle wird einen Kompromiss zwischen Handhabbarkeit und dem idealem Verhältnis eingehen müssen.

4.3. „Proof of principle“ mit einer makroskopischen Paulfalle

Eine Realisierung einer mikroskopischen Falle war im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht möglich. Aus diesem Grund wurde eine makroskopische Falle angefertigt, um einen Beweis des Prinzips zu erbringen (siehe Abbildung 4.16). Die Falle besteht aus acht Drähten mit einem Durchmesser von 0,8 mm. Sechs dieser Drähte sind in der Anordnung der RFA-Falle (Abbildung 4.2) mit einem Abstand von 5 mm zueinander gespannt. Dies ergibt ein r/r_0 -Verhältnis von 0,128. Die verbleibenden zwei Drähte sind parallel zueinander in einem

4.3. „Proof of principle“ mit einer makroskopischen Paulfalle

Abstand von 10 mm zwischen den beiden Lagen der Wechselspannungselektroden gespannt. Diese Drähte werden für den axialen Einschluss verwendet.

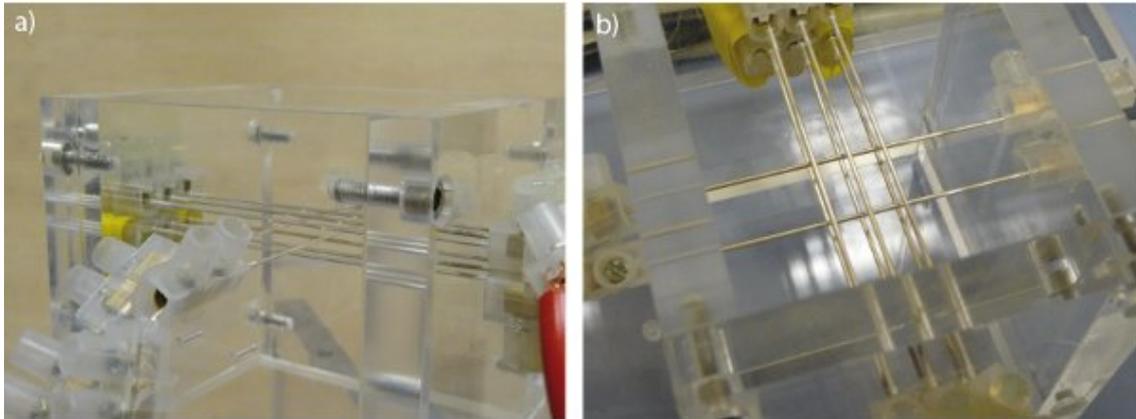


Abbildung 4.16.: Fotografien der verwendeten Falle. a) zeigt eine seitliche Ansicht der Falle. Die komplette Falle befindet sich in einem Plexiglasgehäuse, um die Gefahren der verwendeten Hochspannung zu minimieren. Gleichzeitig dient der Schutzkasten als Führung für die Drähte. b) Ansicht der Falle von oben. Vertikal verlaufen die sechs Wechselspannungselektroden, horizontal die beiden DC-Elektroden.

Als geladene Teilchen dienen Bärlappsporen¹. Diese Sporen ionisieren sich bereits beim Abstreifen von einem Pinsel gegenseitig, sodass sie lediglich in die angeschaltete Falle gestreut werden müssen. Die Luftreibung kühlt die Sporen bei ihrer Bewegung innerhalb der Falle. Für die Wechselspannung wird eine Phase der Netzspannung (50 Hz) verwendet. An zwei Regeltransformatoren, welche wiederum an zwei Hochspannungstransformatoren angeschlossen sind, wird die Spannung angelegt. Sekundärseitig sind diese Transformatoren mit den Fallenelektroden verbunden. Im Anhang D ist die komplette für den Fangaufbau verwendete Schaltung zu finden. Die normale Wechselspannung, welche zum Fangen in einer der beiden Fallen notwendig war, betrug $\sim 3000 V_{pp}$. Mittels eines Netzgeräts² wurde die Gleichspannung auf die DC-Elektroden gegeben. Über den gesamten Verlauf der Messungen wurde ein U_0 von 39 V verwendet. Das Verschmelzen und wiederholte Trennen des Potentials wurde mittels einer Digitalkamera³ festgehalten. In jeder der einzelnen Messungen wurde sowohl das Verschmelzen als auch das Trennen der Sporen durchgeführt. In der gezeigten Messreihe wurden 61 Positionen dokumentiert. Für jede Position wurde ein Bild und die dazugehörigen Spannungen der Regeltransformatoren notiert. In Abbildung 4.17

¹auch bekannt unter dem Namen der Gattung: „Lycopodiumsporen“

²HP 6516 A DC Power Supply www.hp.com

³Imagingsource DFK 21BF04 www.theimagingsource.com

4. Neue Methode des Ionentransports

sind die verwendeten Transformatorspannungen gegen die Bildnummern aufgetragen.

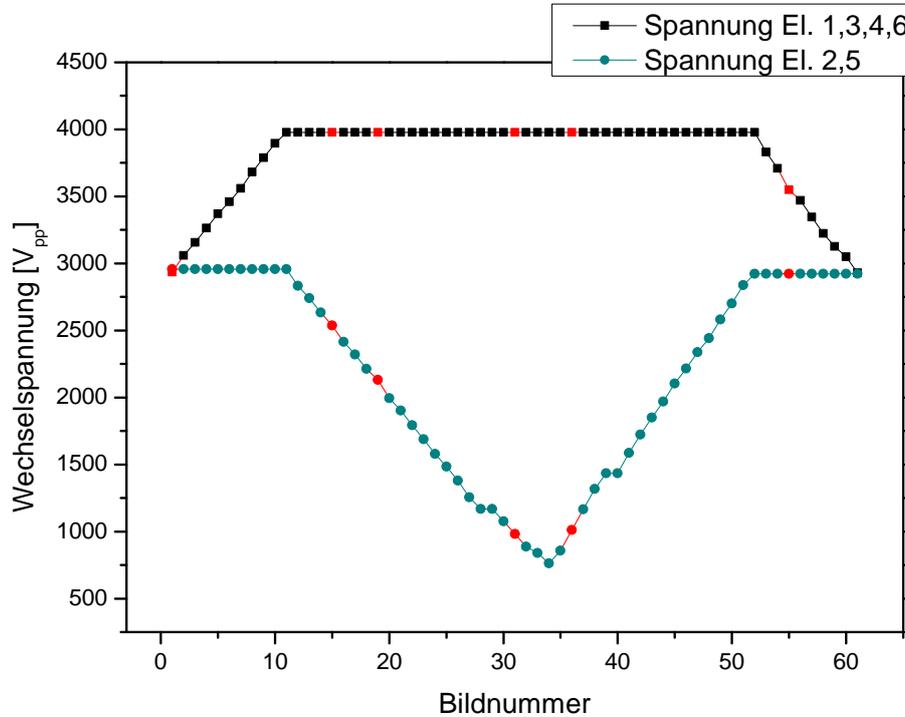


Abbildung 4.17.: Verwendete Transformatorspannungen der einzelnen Elektroden aufgetragen gegen die jeweilige Bildnummer. Die in Abbildung 4.18 gezeigten Bilder wurden rot markiert.

Ein roter „Laserpointers“ wird dazu genutzt, die Sporen zu illuminieren. Die gewählte Perspektive ist schräg von oben in die Kammer der Falle hinein. In Abbildung 4.18 sind ausgewählte Bilder der Messung gezeigt.

Die horizontalen roten Striche entsprechen den einzelnen geladenen Sporen in der Falle. Das Aufschwingen der Ionen wird durch eine starke Mikrobewegung verursacht, sodass auf dem Foto das sich bewegende Ion zu einem Strich verschmiert. Die Mikrobewegung ist eine Folge der Schwerkraft und der Qualität der verwendeten Netzspannung. Eine Abstoßung in vertikaler Richtung durch die Coulombabstoßung führt zu dem Aufreihen der Ionen entlang der axialen Fallenachse. Die vom Laserpointer beleuchteten Wechselspannungselektroden bewirken die vertikal verlaufenden Reflexe. Auf den Bildern a), b) und c) ist gut zu erkennen, wie die Sporen sich näher kommen. In d) und e) reicht das Pseudopotential nicht mehr aus, um die Sporen in den beiden Minima binden zu können. Bedingt durch die star-

4.3. „Proof of principle“ mit einer makroskopischen Paulfalle

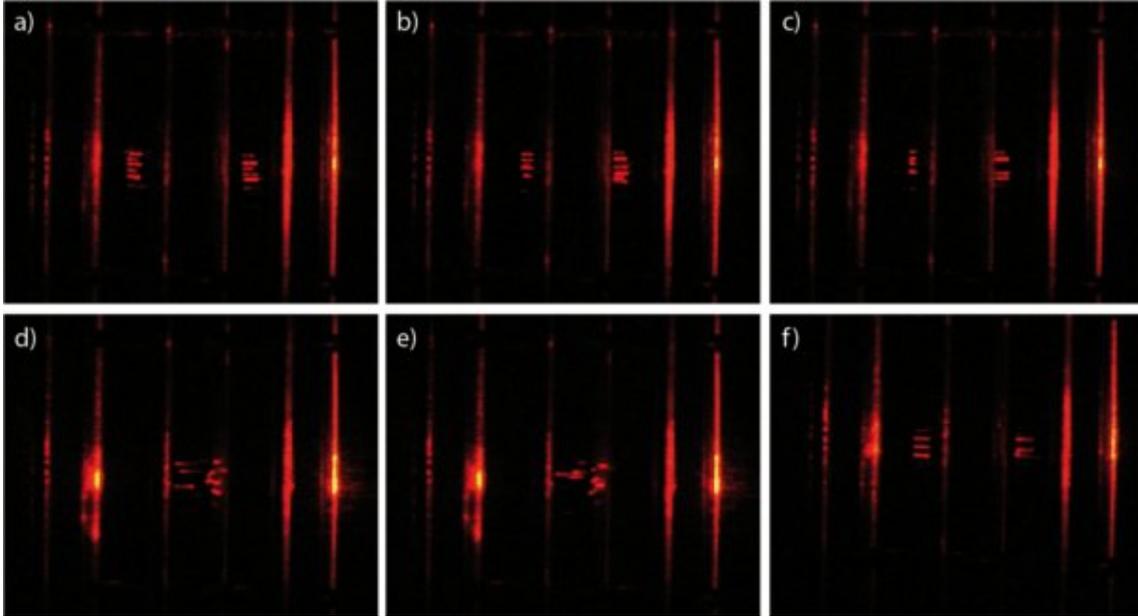


Abbildung 4.18.: Digitalkamera-Aufnahmen der Messung. Die verwendeten Transformatorspannungen sind: a) El. 1,3,5,6 : 2934 V, El. 2,5 : 2957 V, b) 3977 V, 2537 V, c) 3977 V, 2130 V, d) 3977 V, 980 V, e) 3977 V, 1012 V, f) 3548 V, 2921 V.

ke Mikrobewegung wechseln die Ionen zwischen den Potentialmulden. Die Spannung der mittleren Elektroden wird anschließend erhöht, sodass die Ionen wieder getrennt werden können, zu erkennen in Bild f). Während der Messung werden keine Ionen nachgeladen. Sämtliche Bilder wurden hinsichtlich des Abstands der Ionen zueinander ausgewertet und mit den sich aus der Simulation dieser Falle ergebenden Werten verglichen (siehe Abbildung 4.19).

Die Position der Sporen wurde in der Annahme ermittelt, dass die Mikrobewegung gleichmäßig in beide Richtungen um die Null des Potentials ausgeführt wird. Als Position dient somit der Mittelpunkt eines Striches. Die eingezeichneten Fehler entsprechen der beobachteten Mikrobewegung. In den Bildern 23 bis 26 werden die Sporen der linken Falle vollständig durch die Elektroden verdeckt. Starke Mikrobewegung in Kombination mit dem schwachen Einschluss erschwert die Positionsbestimmung in den Bildern 26 bis 44. Die äußeren Messpunkte zeigen eine gute Übereinstimmung mit den von der Simulation vorhergesagten Positionen. Das Prinzip der Potentialverschmelzung kann ebenfalls gut beobachtet werden. Mit einigen Verbesserungen des Aufbaus wie einer Kompensationselektrode für die Schwerkraft und einer stabilisierenden Spannungsquelle müssten auch die kurzen Potentialabstände näher an denen der Simulation liegen. Nachdem die Trans-

4. Neue Methode des Ionentransports

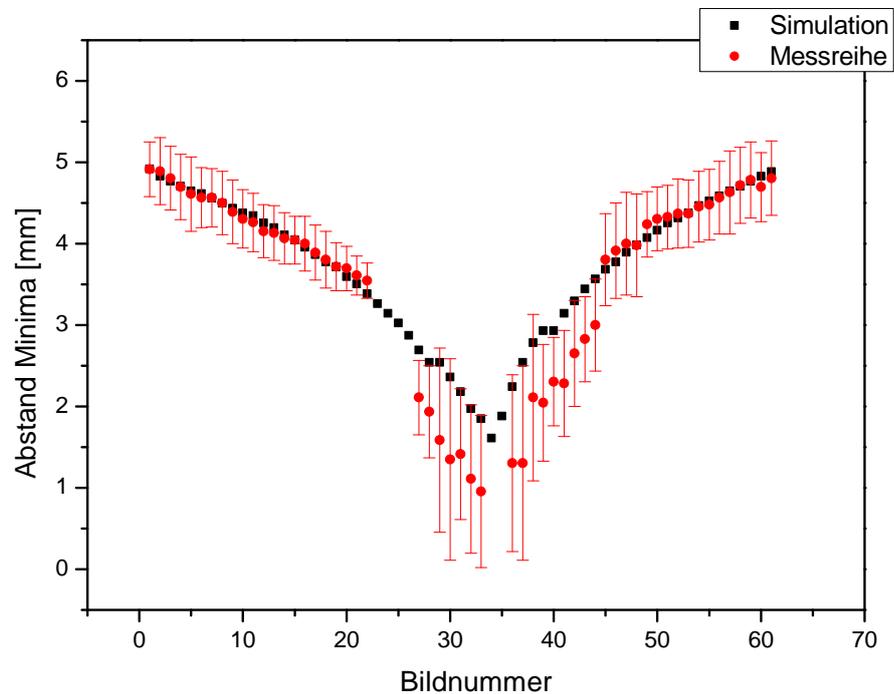


Abbildung 4.19.: Gemessener Abstand der Ionen zueinander und simulierter Abstand der Potentialminima aufgetragen gegen die Bildnummer.

formatoren wieder auf ihre Ausgangsspannungen gestellt wurden, konnte nur ein geringer Verlust der zu Beginn geladenen Sporen festgestellt werden. Zwar wechselten die Sporen die Pseudopotentialmulde, jedoch reichte die Mikrobewegung nicht aus, die Falle zu verlassen. Nachdem die Realisierbarkeit der Pseudopotentialverschmelzung gezeigt wurde, kommen wir nun zu möglichen Anwendungen.

4.3.1. Mögliche Anwendungen der Pseudopotentialverschmelzung

Mittels der vorgestellten Fallengeometrie ist man in der Lage, lineare Ionenkristalle von ihrem ursprünglichen Abstand auf jede gewünschte Entfernung zueinander zu bringen, die durch die Coulombabstoßung der beiden Kristalle voneinander noch zugelassen wird. Die Falle ermöglicht somit, die Wechselwirkungsstärke in dem Kristall selbst durch den DC-Einschluss und die Wechselwirkungsstärke zwischen den Kristallen zu modulieren. Dies erlaubt eine Vielzahl von neuen Untersuchungen. Neben den sich neu ergebenden Eigenmoden zwischen den Ionenkristallen kann in diesem neuen System eine Reihe von verschränk-

4.3. „Proof of principle“ mit einer makroskopischen Paulfalle

ten Zuständen erzeugt werden, welche in konventionellen linearen Fallen nicht möglich sind. Einem Vorschlag von Cirac und Zoller folgend [Cirac and Zoller, 2000], können benachbarte Ionen mit einem Abstand von wenigen μm miteinander verschränkt werden. Die vermittelnde Kraft ist die Coulomb-Wechselwirkung, welche in dieser Falle beliebig variiert werden kann.

Eine kleine Erweiterung des Aufbaus eröffnet weitere Anwendungen dieser Falle. Legt man einen Strom an die Elektroden der Falle an, ist es möglich, einen B-Feldgradienten zu erzeugen. Wird zum Beispiel an die DC-Elektroden ein Strom angelegt, ergibt sich ein Gradient in longitudinaler Richtung zu den Ionenkristallen. Die Stern-Gerlach-Kraft sorgt im Fall von parallel orientierten Spins für eine Verringerung der Energie. Der Gradient sorgt somit für eine ferromagnetische Ausrichtung der Ionenspins innerhalb eines Kristalls (siehe Abbildung 4.20 a)). Bringt man die Kristalle nun einander näher, wird man eine definierte Spinausrichtung der Kristalle zueinander beobachten können. Um den durch die Coulomb-Abstoßung verursachten Energiegewinn beim Annähern der Kristalle zu reduzieren, wird einer der Kristalle sich antiferromagnetisch gegenüber dem zweiten Kristall orientieren (siehe Abbildung 4.20 b)).

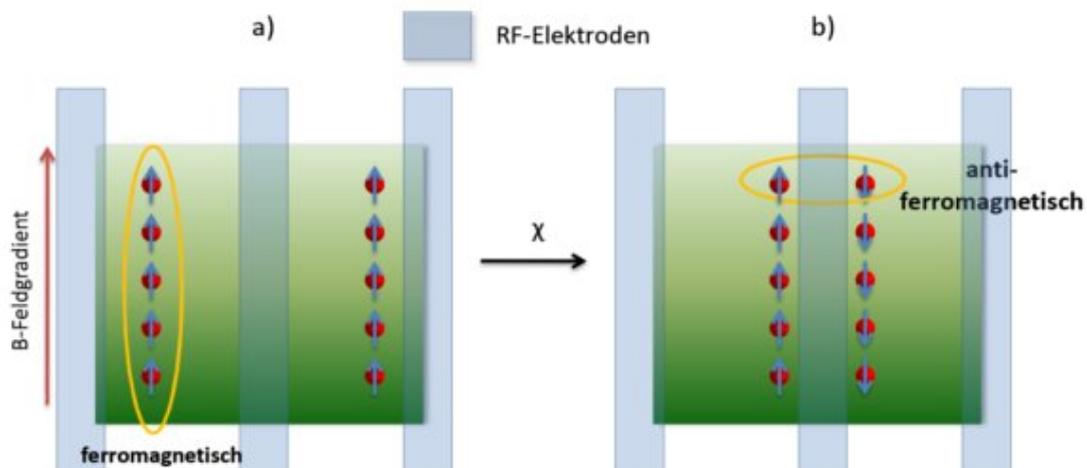


Abbildung 4.20.: Ansicht der RFA-Falle von oben. a) zeigt die Ausgangssituation, welche sich für einen B-Feldgradienten entlang der axialen Fallenachse ergibt. Im Übergang zu Bild b) wurde χ erhöht und damit die Kristalle einander näher gebracht.

Der Strom kann auch an den RF-Elektroden angelegt werden und somit einen transversalen Gradienten bezüglich der Ionenkristalle bewirken. Segmentiert man die DC-Elektroden,

4. Neue Methode des Ionentransports

ergibt sich die Option, sogenannte „Frustrierte Ionen“ zu erzeugen. Hierbei handelt es sich um einen Überlagerungszustand möglicher Spinzustände, für eine nähere Diskussion dieser Thematik wird auf die Diplomarbeit von Jens Welzel verwiesen [Welzel, 2011].

5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Verlauf dieser Diplomarbeit wurden zwei neue Fallenkonzepte für die skalierbare Quanteninformationsverarbeitung entwickelt.

Die Auslegung der ersten Falle erfolgte für eine nanometergenaue Implantation von Ionen in Festkörpern. Zu diesem Zweck sind sechs verschiedene Fallendesigns miteinander verglichen und mit Hilfe numerischer Simulationen untersucht worden, welche es ermöglichen, sowohl Erkenntnisse über die grundlegenden Eigenschaften der Falle als auch über komplexe Zusammenhänge der Extraktion zu gewinnen. Es konnte gezeigt werden, dass das Konzept der Endkappe wesentliche Vorteile in den Punkten der Extraktionsenergie und Emittanz gegenüber dem bestehenden System der Segmentextraktion bietet. Die Abhängigkeit des Extraktionsvorgangs von der Radiofrequenzphase konnte minimiert werden, sodass eine große Fehlerquelle des bestehenden Fallendesigns beseitigt werden konnte. Freie Parameter der Konstruktion wie die Segmentbreite und der Abstand der Fallenflügel zueinander wurden optimiert, um im späteren Experiment die bestmögliche Ausgangssituation zu gewährleisten. Desweiteren erfolgte eine Charakterisierung der Attribute der Endkappe, anhand derer die Auswirkung späterer Fertigungsfehler abgeschätzt werden kann. Die entwickelte Implantationsfalle übertrifft den Aufbau der PCB-Falle in Hinsicht auf die Strahlqualität (Emittanz) um einen Faktor von bis zu 113 und die erreichbaren Extraktionsenergien um ein bis zwei Größenordnungen. Die prognostizierten Fallenfrequenzen von radial (> 3 MHz) und axial ($> 1,7$ MHz) erlauben zudem das Kühlen der Ionen in den Grundzustand. Das Design der Falle wurde dahingehend optimiert, die Schwächen der alten Falle wie große Isolatorflächen und thermische Drifts zu vermeiden. Der positive Einfluss der Iontemperatur auf die Extraktion konnte von der Simulation für die Implantationsfalle nachgewiesen werden und eine Verbesserung der Emittanz um einen Faktor von mindestens vier wird vorhergesagt. Das Konzept der Halterung und Fertigung wurde sorgfältig geplant und minimiert mögliche Fehlausrichtungen der einzelnen Komponenten zueinander. Nach dem Einbau in das neu geplante Fallenkammersystem und einer Optimierung der Betriebsspannungen der Ablenkelektroden sowie der bereits eingebauten Ionenlinse sollte eine Auflösung im Bereich von wenigen Nanometern erschlossen werden können.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Die zweite in dieser Diplomarbeit entwickelte Falle wurde für den radialen Transport und das Verschmelzen der Pseudopotentiale konzipiert. Mit Hilfe der Simulation konnte gezeigt werden, dass es allein durch das Verändern der Radiofrequenz-Amplituden möglich ist, die Ionen über eine Distanz von 4 mm von einer linearen Falle in die nächste zu transportieren. In Kombination mit dem Transport durch DC-Elektroden ist eine dreidimensionale Verschiebung der Ionen realisierbar. Paulfallengeometrien, welche aus abwechselnden Schichten von DC-Elektroden und RF-Elektroden bestehen, werden dadurch zugänglich und erlauben es, eine große Anzahl separat arbeitender und trotzdem verbundener Fallen zu erzeugen. Das für den RFA-Transport erweiterte Regularisierungsprogramm konnte erfolgreich auf eine planare Fallengeometrie angewandt werden und ergab stetige Amplitudenfunktionen für die einzelnen RF-Elektroden. Somit konnte gezeigt werden, dass das Ion über eine Strecke von 140 μm ausschließlich mit Hilfe der RF-Elektroden transportiert werden kann. Die in Kooperation mit der Universität von Berkeley entwickelte Geometrie der planaren Falle bietet die Option, Ionen mikrobewegungsfrei über alle Achsen einer X-Kreuzung zu transportieren. Diese Fähigkeit erweist sich als ein elementarer Baustein des späteren Quantencomputers. Die Radiofrequenz-Amplituden-Modifikation stellt eine große Herausforderung elektronischer Natur dar, weil gewährleistet werden muss, dass die Phasen sämtlicher Radiofrequenz-Elektroden stabil zueinander sind. Dieses Problem konnte jedoch bereits von Muir Kumph [Kumph et al., 2011] gelöst werden. Neben dem Transportieren der Ionen durch das Pseudopotential konnte gezeigt werden, dass die Anordnung zweier linearer dreidimensionaler Paulfallen es erlaubt, kleinere Fallenstrukturen zu schaffen, als durch die Geometrie vorgegeben. Ein Beweis des Prinzips der Pseudopotentialverschmelzung konnte anhand einer makroskopischen Paulfalle mit Bärlappsporen erbracht werden. Die Analyse des Verhältnisses von r/r_0 lieferte wichtige Erkenntnisse über das Verhalten der für die Pseudopotentialverschmelzung relevanten Parameter. Aus den Simulationen ergab sich eine exponentielle Abhängigkeit zwischen dem verwendeten Radienverhältnis und dem notwendigen Amplitudenverhältnis, um die Potentialminima auf einen definierten Abstand von 10% der anfänglichen Distanz zu bringen. Es konnte ebenfalls bestätigt werden, dass mit steigendem r/r_0 -Verhältnis ein Anwachsen des harmonischen Potentialparameters vorliegt. Die gewonnenen Erkenntnisse können für den Bau einer späteren Ionenfalle verwendet werden. Der anfängliche Abstand der Ionenkristalle zueinander kann auf unter 10% reduziert werden. Dies eröffnet die Möglichkeit, die Stärke der Coulomb-Wechselwirkung zwischen linearen Ionenkristallen beliebig variieren zu können. Wohldefinierte Spinsysteme können mittels an den Elektroden angelegten Strömen

präpariert werden. Laserkühlung gestattet es, die gefangenen Ionen durch Grundzustandskühlung in eine gute Ausgangssituation zu versetzen, um die Spin-Spin-Wechselwirkung eingehender zu untersuchen [Friedenauer et al., 2008].

Literaturverzeichnis

- [Amini et al., 2010] Amini, J. M., Uys, H., Wesenberg, J. H., Seidelin, S., Britton, J., Bollinger, J. J., Leibfried, D., Ospelkaus, C., VanDevender, A. P., and Wineland, D. J. (2010). Toward scalable ion traps for quantum information processing. *New Journal of Physics*, 12.
- [(ARDA) Advanced Research and Development Activity, 2004] (ARDA) Advanced Research and Development Activity (2004). A quantum information science and technology roadmap.
- [Brebbia, 1978] Brebbia, C. (1978). The boundary element method for engineers. *London: Pentech Press*.
- [Capelle, 1935] Capelle, W. (1935). Galen über Demokrit; zitiert nach Wilhelm Capelle: Die Vorsokratiker. *Kröner*, 135.
- [Cirac and Zoller, 2000] Cirac, J. I. and Zoller, P. (2000). A scalable quantum computer with ions in an array of microtraps. *Nature*, 404:709–711.
- [Dalton, 1808] Dalton, J. (1808). A New System of Chemical Philosophy. *Printed by S. Russel*, 1.
- [Deiß et al., 2009] Deiß, M., Poschinger, U., Huber, G., Ziesel, F., Hettrich, M., and Schmidt-Kaler, F. (2009). Quantum Operations with Ions in a Micro Trap. *Scala Summerscool 09*.
- [Denison, 1971] Denison, D. R. (1971). Operating parameters of a quadrupole in a grounded cylindrical housing. *Journal of Vacuum Science and Technology*, 8:266–269.
- [Earnshaw, 1842] Earnshaw, S. (1842). On the nature of the molecular forces which regulate the constitution of the luminiferous ether. *Trans. Camb. Phil. Soc.*, 7:97–112.
- [Eble et al., 2010] Eble, J., Ulm, S., Zahariev, P., Schmidt-Kaler, F., and Singer, K. (2010). Feedback-optimized operations with linear ion crystals. *Journal of the Optical Society of America B: Optical Physics*.

Literaturverzeichnis

- [Eichler et al., 2004] Eichler, J., Dunkel, L., and Eppich, B. (2004). Die Strahlqualitat von Lasern. *Laser Technik Journal*.
- [Feynman, 1982] Feynman, R. (1982). Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, 21:467–488.
- [F.Hinterberger, 2007] F.Hinterberger (2007). *Physik der Teilchenbeschleuniger*. 2nd edition. Springer.
- [Fickler, 2009] Fickler, R. (2009). Kalte einzelne Ionen fur die Implantation in Festkorper mit nm Auflosung. *Diplomarbeit, Universitat Ulm*.
- [Friedenauer et al., 2008] Friedenauer, A., Schmitz, H., Glueckert, J., Porras, D., and Schaetz., T. (2008). Simulating a quantum magnet with trapped ions. *Nature Physics*, 4:757–761.
- [G. Jacob, 2010] G. Jacob (2010). Diplomarbeit: Fokussierung einzelner kalter Ionen zur nm genauen Dotierung von Festkorpern. *Diplomarbeit, Universitat Ulm*.
- [Gaebel et al., 2006] Gaebel, T., Domhan, M., Popa, I., Wittmann, C., Neumann, P., Jelezko, F., Rabeau, J. R., Stavrias, N., Greentree, A. D., Prawer, S., Meijer, J., Twamley, J., Hemmer, P. R., and Wrachtrup, J. (2006). Room-temperature coherent coupling of single spins in diamond. *Nature Physics*, 2:408.
- [Greengard and Rohklin, 1996] Greengard, L. and Rohklin, V. (1996). A New Version of the Fast Multipole Method for the Laplace Equation in Three Dimensions. *Research Report YALEU/DCS*, RR-1115.
- [Greengard LF, 1987] Greengard LF, R. V. (1987). A fast algorithm for particle simulations. *J Comput Phys*, 73:325–348.
- [Haffner et al., 2005] Haffner, H., Hansel, W., Roos, C. F., Benhelm, J., al kar, D. C., Chwalla, M., Korber, T., Rapol, U. D., Riebe, M., Schmidt, P. O., Becher, C., Guhne, O., Dur, W., and Blatt, R. (2005). Scalable multiparticle entanglement of trapped ions. *Nature*, 438:643.
- [Huber et al., 2008] 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 Journal of Physics*, 10:013004.

- [Huber et al., 2010] Huber, G., Ziesel, F., Poschinger, U. G., Singer, K., and Schmidt-Kaler, F. (2010). A trapped-ion local field probe. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 100:725.
- [J. Eichler, 2010] J. Eichler, H. (2010). Laser,Bauformen,Strahlführung,Anwendungen. *Springer*, 7:489.
- [Jaswon, 1963] Jaswon, M. (1963). Integral equation methods in potential theory I. *Proceeding of the Royal Society A*, 275:23–32.
- [Jelezko et al., 2004] Jelezko, F., Gaebel, T., Popa, I., Gruber, A., and Wrachtrup, J. (2004). Observation of Coherent Oscillations in a Single Electron Spin. *Physical Review Letters*, 92:076401.
- [Kane, 1998] Kane, B. E. (1998). A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature*, 393:133.
- [Karin et al., 2006] Karin, T., Bras, I. L., Kehlberger, A., Singer, K., Daniilidis, N., and Häffner, H. (2006). Transporting particles in three dimensions via adjustable radio frequency fields and its application to scalable quantum information processing. *Fortschritte der Physik*, 54:666–685.
- [Kielpinski et al., 2002] Kielpinski, D., Monroe, C., and J. Wineland, D. (2002). Architecture of a large-scale iontrap quantum computer. *Nature*, 417:709–711.
- [Kim et al., 2010] Kim, T. H., Herskind, P. F., Kim, T., Kim, J., and Chuang, I. L. (2010). A surface electrode point Paul trap. *arXiv:1008.1603v1*.
- [Kjaergaard et al., 2000] Kjaergaard, N., Hornekaer, L., Thommesen, A. M., Videsen, Z., and Drewsen, M. (2000). Isotope selective loading of an ion trap using resonance-enhanced two-photon ionization. *Applied Physics B*, 71:207.
- [Kumph et al., 2011] Kumph, M., Brownnutt, M., and Blatt, R. (2011). 2 dimensional arrays of rf ion traps with addressable interactions. *arXiv:1103.5428v1*.
- [Leibfried et al., 2003] Leibfried, D., Blatt, R., Monroe, C., and Wineland, D. J. (2003). Quantum dynamics of single trapped ions. *Reviews of Modern Physics*, 75:281.
- [Liu and Nishimura, 2006] Liu, Y. J. and Nishimura, N. (2006). The fast multipole boundary element method for potential problems: A tutorial. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 30:371–381.

Literaturverzeichnis

- [Meijer et al., 2008] Meijer, J., Pezzagna, S., Vogel, T., Burchard, B., Bukow, H. H., Rangelow, I. W., Sarov, Y., Wiggers, H., Plümel, I., Jelezko, F., Wrachtrup, J., Schmidt-Kaler, F., Schnitzler, W., and Singer, K. (2008). Towards the implanting of ions and positioning of nanoparticles with nm spatial resolution. *Applied Physics A*, 91:567.
- [Meijer et al., 2006] Meijer, J., Vogel, T., Burchard, B., Rangelow, I. W., Bischoff, L., Wrachtrup, J., Domhan, M., Jelezko, F., Schnitzler, W., Schulz, S. A., Singer, K., and Schmidt-Kaler, F. (2006). Concept of deterministic single ion doping with sub-nm spatial resolution. *Applied Physics A*, 83:321.
- [Monz et al., 2010] Monz, T., Schindler, P., Barreiro, J. T., Chwalla, M., Nigg, D., Coish, W. A., Harlander, M., Hänsel, W., Hennrich, M., and Blatt, R. (2010). Coherence of large-scale entanglement. *arXiv:1009.6126v1*.
- [Mukherjee, 1982] Mukherjee, S. (1982). Boundary element methods in creep and fracture. *New York: Applied Science Publishers*.
- [Neumann et al., 2008] 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.
- [Nolte et al., 1999] Nolte, S., Momma, C., Chichkov, B. N., and Welling, H. (1999). Nolte Mikrostrukturierung mit ultrakurzen Laserpulsen. *Physikalische Blätter* 55.
- [Of, 2001] Of, G. (2001). Die Multipolmethode für Randintegralgleichungen. *Diplomarbeit, Universität Stuttgart*.
- [Paul and Steinwedel, 1956] Paul, W. and Steinwedel, H. (1956). Verfahren zur Trennung bzw. zum getrennten Nachweis von Ionen verschiedener spezifischer Ladung. *Deutsches Patentamt*, 944900:12.
- [Pezzagna et al., 2010] Pezzagna, S., Naydenov, B., Jelezko, F., Wrachtrup, J., and Meijer, J. (2010). Creation efficiency of nitrogen-vacancy centres in diamond. *New Journal of Physics*, 12.
- [Saleh and Teich, 2006] Saleh, B. E. and Teich, M. C. (2006). Grundlagen der Photonik. *Wiley-VCH*.
- [Salvador, 2008] Salvador, A. B. (2008). Microfabrication of a planar paul trap. *Diplomarbeit, Universität Ulm*.

- [Schnitzler et al., 2009] Schnitzler, W., Linke, N. M., Fickler, R., Meijer, J., Schmidt-Kaler, F., and Singer, K. (2009). Deterministic Ultracold Ion Source Targeting the Heisenberg Limit. *Physical Review Letters*, 102:070501.
- [Schulz, 2009] Schulz, S. A. (2009). Scalable microchip ion traps for quantum computation. *Dissertation, Universität Ulm*.
- [Schulz et al., 2006] Schulz, S. A., Poschinger, U. G., Singer, K., and Schmidt-Kaler, F. (2006). Optimization of segmented linear paul traps and transport of stored particles. *Fortschritte der Physik*, 54:666–685.
- [Schulz et al., 2008] Schulz, S. A., Poschinger, U. G., Ziesel, F., and Schmidt-Kaler, F. (2008). Sideband cooling and coherent dynamics in a microchip multi-segmented ion trap. *New Journal of Physics*, 10:045007.
- [Singer et al., 2010] Singer, K., Poschinger, U. G., Murphy, M., Ivanov, P. A., Ziesel, F., Calarco, T., and Schmidt-Kaler, F. (2010). Colloquium: Experiments with atomic quantum bits - essential numerical tools. *Review of Modern Physics*.
- [Slade and Taylor, 2002] Slade, P. G. and Taylor, E. D. (2002). Electrical breakdown in atmospheric air between closely spaced (0.2 ?m-40 ?m) electrical contacts. *IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies*.
- [Steane, 1997] Steane, A. (1997). The ion trap quantum information processor. *Applied Physics B*, 64:632.
- [Stefan Ulm, 2010] Stefan Ulm (2010). Diplomarbeit: Spektroskopie gemischter ionenkristalle. *Diplomarbeit, Universität Ulm*.
- [Tikhonov and Arsenin, 1977] Tikhonov, N. A. and Arsenin, V. A. (1977). Solution of ill-posed problems. *Winston & Sons, Washington, D.C.*
- [Toyli et al., 2010] Toyli, D. M., Weis, C. D., Fuchs, G. D., Schenkel, T., and Awschalom, D. D. (2010). Chip-scale nanofabrication of single spins and spin arrays in diamond. *NANOLetters*, 10:3168–3172.
- [Verlet, 1967] Verlet, L. (1967). Computer experiments on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Physical Review*, 159:98.
- [Walther et al., 2011] Walther, A., Poschinger, U., Ziesel, F., Hettrich, M., Wiens, A., Welzel, J., and Schmidt-Kaler, F. (2011). A single ion as a shot noise limited magnetic field gradient probe. *arXiv:1103.2253*.

Literaturverzeichnis

- [Welzel, 2011] Welzel, J. (2011). Diplomarbeit: Planare Spin-Spin Simulatoren. *Diplomarbeit, Universität Ulm*.
- [Welzel et al., 2011] Welzel, J., Bautista-Salvador, A., Abarbanel, C., Wineman-Fisher, V., Wunderlich, C., Folman, R., and Schmidt-Kaler, F. (2011). Designing spin-spin interactions with one and two dimensional ion crystals in planar micro traps. *arXiv:1102.3645*.
- [Wineland et al., 1998] Wineland, D. J., Monroe, C., Itano, W. M., Leibfried, D., King, B. E., and Meekhof, M. D. (1998). Experimental issues in coherent quantum-state manipulation of trapped atomic ions. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 103:259–328.
- [Wolfgang Schnitzler, 2010] Wolfgang Schnitzler (2010). Doktorarbeit: Deterministic ultracold ion source targeting the heisenberg limit. *Doktorarbeit, Universität Ulm*.
- [Wrachtrup and Jelezko, 2006] Wrachtrup, J. and Jelezko, F. (2006). Processing quantum information in diamond. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18:807.
- [Ziesel, 2008] Ziesel, F. (2008). Spektroskopie und Transport von Ionen in einer Mikrofalle. *Diplomarbeit, Universität Ulm*.

A. Wissenschaftliche Veröffentlichung

Transporting particles in three dimensions via adjustable radio frequency fields and its application to scalable quantum information processing

Todd Karin, Isabela Le Bras, Andreas Kehlberger, Kilian Singer, Nikos Daniilidis und Hartmut Häffner

Eingereicht am 29. November 2010

arXiv:1011.6116v2

arXiv:1011.6116v2 [physics.atom-ph] 3 Jan 2011

Transporting particles in three dimensions via adjustable radio frequency fields and its application to scalable quantum information processing

Todd Karin¹, Isabela Le Bras¹ ‡, Andreas Kehlberger², Kilian Singer², Nikos Daniilidis¹, and Hartmut Häffner¹

1. Physics Department, University of California Berkeley

2. Institut für Physik, Johannes Gutenberg Universität Mainz, 55128 Mainz, Germany

E-mail: toddakarin@gmail.com, hhaeffner@berkeley.edu

Abstract. We propose a planar architecture for scalable quantum information processing (QIP) which includes X-junctions through which particles can move without micromotion. This is achieved by adjusting radio frequency (rf) amplitudes to move an rf null along the legs of the junction. We provide proof-of-principle by transporting macroscopic particles in three dimensions via adjustable rf potentials in a 3D trap. For the proposed planar architecture, regularization techniques provide amplitude settings which guarantee a smooth transport through the X-junction. The amplitude settings respect the experimental boundary conditions due to maximal rf voltages and crosstalk. We also study the high spatial resolution of rf electrodes.

PACS numbers: 37.10.Ty

‡ Both first authors contributed equally to this work.

1. Introduction

Trapped ions present a promising avenue for scalable quantum computing [1, 2]. One of the outstanding questions in ion trap quantum computing is how to accomplish two-qubit operations between arbitrary ions in large quantum registers. Current efforts focus on transporting the ions close to one another [3, 1] because the major building blocks of such a system have been shown to work [4, 5, 6, 7, 8].

Junctions (places where ions can be sent in three or more directions) are needed to bring arbitrary ions close to one another. Currently, three dimensional trap geometries allow high-fidelity coherent transport of ions through three and four-way junctions with low motional heating [9, 10]. In developing scalable quantum information processing (QIP), planar traps have advantages over 3D traps: such as ease of fabrication and the integration of trap electronics [11, 12]. While many of the building blocks of a planar system have already been demonstrated, transport through junctions on planar traps exhibits excessive heating [13].

Most radio frequency (rf) ion traps transport particles using variable dc potentials and constant amplitude rf. Usually, the rf confines the ions in a linear field free region along which the ions are pushed using the dc potentials. However, no planar structure has been found which exhibits such an rf null (place of no micromotion) throughout transport in a Y, T, or X-type junction [14]. Micromotion is undesirable because it alters atomic transition line shapes [15] and can lead to heating [16]. Here we propose using adjustable amplitude rf to transport particles, thus keeping them at an rf null and eliminating micromotion. Recently, some groups have adjusted rf amplitudes to change ion positions. By changing the ratio of rf on two electrodes, ions have been moved stepwise on a planar trap perpendicular to the trap plane [17, 18], and radially in a linear Paul trap [19].

In the first section of this paper, we describe a 3D trap for macroscopic particles demonstrating the basic concept of rf transport. We implement a six-way junction and transport charged particles in three dimensions between trapping zones by adjusting the rf pseudopotentials. In the second part, we suggest a planar ion trap design for scalable QIP. Our design includes X-junctions through which ions can move without micromotion. Keeping ions at the rf null and trap frequencies constant throughout transport could increase transport fidelity and decrease heating. Additionally, our design is compact because subsequent junctions can be placed close to one another.

2. 3D Trap for Macroscopic Particles

2.1. Methods

To demonstrate the basic concept of rf transport, we set up a 3D trap for moving macroscopic charged particles in three dimensions using adjustable amplitude rf §. We

§ The driving frequency of our trap is 40 Hz. However, we will call these rf electrodes to conform to common ion trapping parlance.

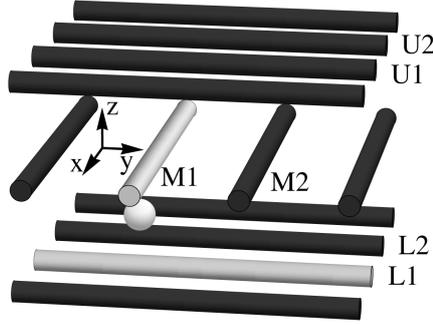


Figure 1. TRAP DIMENSIONS AND DESIGN: The trap consists of three sets of coplanar rods alternating in x and y directions. Note that the trap design could be repeated an arbitrary number of times in all directions. Assuming that we apply rf to the grey electrodes and ground the black electrodes, trapping occurs at the intersection where the ball is shown. In the experiments we describe, only the labeled electrodes are rf electrodes with variable amplitude. L refers to lower, M to middle and U to upper. The distance between the centers of neighboring electrodes and layers of electrodes is 10 mm. Each electrode has a 1 mm radius.

looked for several characteristics in a model trap: control over location of rf minimum, optical access of trapped particles, scalability to a larger trap and trap depth. Our starting point for the design was the linear Paul trap [20, 21]. Through a combination of modeling and testing of various traps, we arrived at the trap shown in Fig 1, similar in geometry to the trap proposed by Castrejón-Pita *et al.* [22]. We constructed the trap using rigid copper rods as electrodes and plexiglass plates as a frame.

We load chalk particles into the trap by dipping a statically charged zip-tie (zip-ties appear to be sufficiently charged without any special treatment) into powdered climbing chalk (MgCO_3) and flicking the zip-tie against trap electrodes near the trapping site. A plexiglass box around the trap blocks air currents. Laser pointers illuminate the chalk particles for detection.

We modeled the pseudopotential of this trap using an electrostatics solver [23]. The solver uses the fast multipole method detailed by Nabors *et al.* [24]. This method works by placing a small patch of charge on an electrode, calculating the potential elsewhere in space using multipole expansions, and adjusting the charge so as to satisfy boundary conditions on other electrodes. The pseudopotential is calculated using the magnitude of the electric field at each point:

$$V_{\text{pseudo}} = \frac{q^2}{4m\Omega^2} E_0^2, \quad (1)$$

where q and m are the charge and mass of the ion, Ω is the drive frequency on the rf electrodes, and E_0 is the maximum amplitude of the electric field due to the rf electrodes at a given point [25].

Transport in the macroscopic trap requires electronics that can produce independent adjustable amplitude rf channels. A microcontroller (Atmel AtMega32A) controls a DAC (Maxim Max 534), outputting a 0-5V 40Hz sinusoid. This signal is electrically isolated using an optocoupler (4N35); a high pass filter removes the resulting offset. The signal is amplified by a high voltage op amp (PA240CC) to a maximum of 100V. This is further amplified by a transformer (120V-3.3.kV). We measure the output with a voltage divider.

2.2. Results

We measured the charge-to-mass ratio of the trapped particles using the relation between the amplitude of the micromotion ξ and the electric field strength E_0 , from [25]

$$\xi = \frac{qE_0}{m\Omega^2}. \quad (2)$$

We moved the particles to various trap positions using a dc electrode, measured the amplitude of the micromotion at each position and calculated the theoretical electric field value at each point. The charge-to-mass ratio of a trapped particle was found to be $+5.7 \times 10^{-4}$ C/kg with a spread of $\pm 0.7 \times 10^{-4}$ C/kg.

We can move the particles horizontally (x or y direction) by changing the amplitude on the various rf electrodes. For example, to move in the y direction, consider a particle trapped at the intersection of L1 and M1 as shown in Fig 1. By first ramping up the rf amplitude on M2, and then ramping down the rf amplitude on M1, the particle is moved to the intersection of L1 and M2. Fig 2 shows the modeled pseudopotential of this motion scheme, the associated voltage configurations and experimental pictures of the transport.

The main advantage of transport using solely rf fields is minimal micromotion. This is because the particle is always trapped at the rf null, where the electric field strength is zero, provided there are no additional forces. For ion trapping, gravity forces are negligible because of the high charge-to-mass ratio. In our macroscopic trap, gravity becomes important because the charge-to-mass ratio of the trapped particles is ten orders of magnitude lower than that of ions. Thus gravity pulls the particles out of the rf null, inducing micromotion (this can be seen by the elongated shape of the particle in Fig 2). The micromotion can be compensated with a dc voltage offset that pushes the particle back into the rf null.

On moving horizontally in the x direction, gravity leads to loss of particles. Compensation of gravity with a dc offset to U1 ($-800V$) is essential for successful transport. Once these corrections were made, we completed 1000 transports in x and y without loss.

We moved particles in the vertical direction z using variable amplitude rf electrodes as illustrated in Fig 3. The particle is moved up under M1 and then over between M1 and M2. If we attempt to raise the particle symmetrically (i.e. M1, M2, L1 are connected to rf, then the amplitude of L1-rf is lowered), the particle falls out of the trap in the

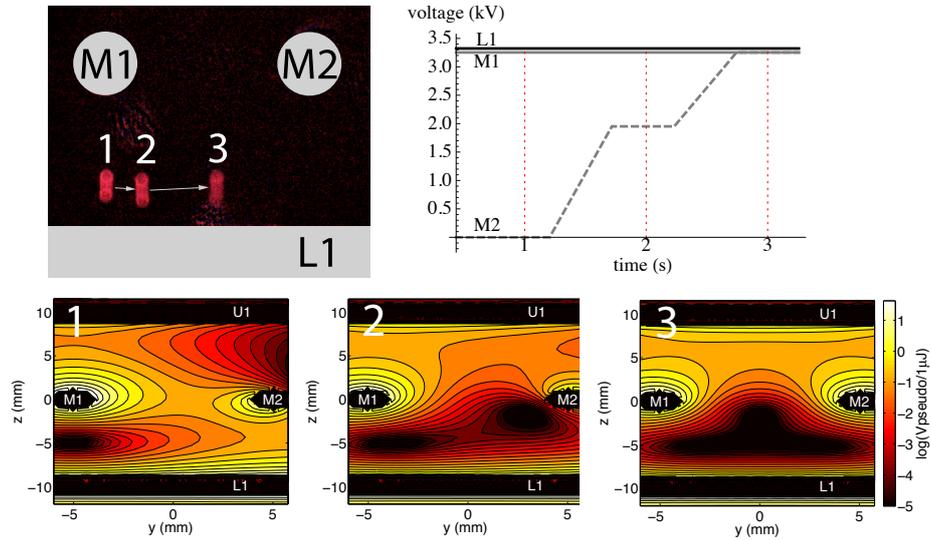


Figure 2. HORIZONTAL TRANSPORT IN THE 3D TRAP: In the top left are overlaid photographs of trapped particles illuminated by a laser. Their positions are labeled by a number and the electrodes are drawn in and labeled for clarity. The voltage ramps corresponding to the particle positions are illustrated on the top right. Below these, we have the modeled pseudopotential contours on the y - z plane, using $q = 5 \times 10^{-9}$ C, $m = 1 \times 10^{-5}$ kg, $f = 50$ Hz. The position number is written in white in the top left corner of each contour plot. The contour plots have a lower and an upper cutoff energy which facilitates viewing.

negative z direction. Moving the particle up asymmetrically allows for vertical transport using solely rf amplitude modulation.

The two types of transport demonstrated so far show that transport between arbitrary lattice sites using adjustable amplitude rf is possible; i.e., arbitrary transport between lattice sites can be built using a sum of vertical and horizontal transports. Next, we propose a planar ion trap which incorporates these ideas to facilitate scalable QIP.

3. Planar Ion Trap Proposal

Multi-zone planar traps are one of the most promising routes towards scalable quantum information processing with trapped ions [1]. Here we propose a design that takes advantage of transporting ions using adjustable rf pseudopotentials. Our scalable planar ion trap allows for micromotion free transport through all paths of an X-junction. In addition, we propose the use of rf electrodes dedicated to splitting of ion strings, providing an improvement by a factor of more than 4 in the resolution with which ion

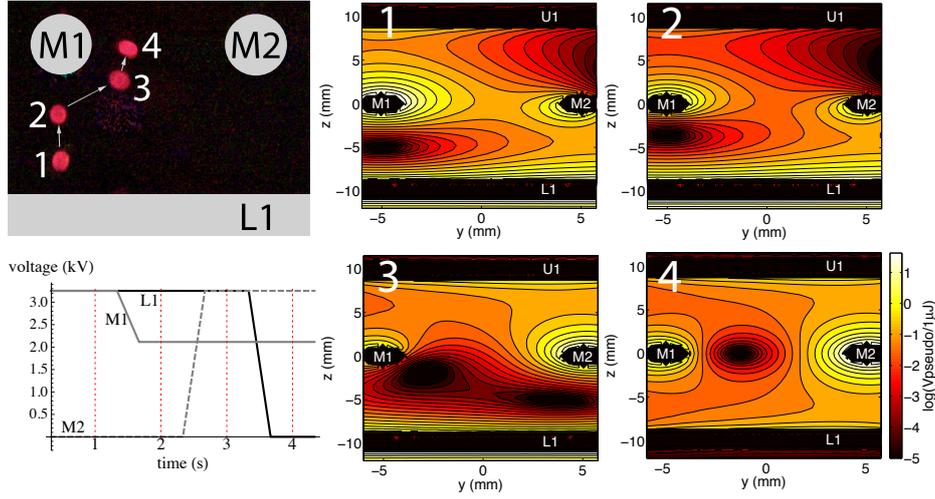


Figure 3. VERTICAL TRANSPORT IN THE 3D TRAP: In the top left corner, there are four overlaid photographs of trapped particles. Their positions are numbered and the electrodes are drawn in for clarity. In the bottom left corner, the voltages that correspond to particle positions are shown. To the right, there are four modeled pseudopotential contour plots on the y - z plane, corresponding to the particle positions from the photographs. The position number is written in white in the top left corner of each contour plot. Transport from between M1 and M2 into the upper plane (see Fig. 1) is analogous. The contour plots were modeled using $q = 5 \times 10^{-9}$ C, $m = 1 \times 10^{-5}$ kg, $f = 50$ Hz.

strings can be split.

The planar design is depicted in Fig 4. Ions are trapped above long channels of dc electrodes (in the z direction) for storage and computation. The ions can be moved within the computation channel by changing the position of the well created by the dc electrodes. To move ions along the rf channel (the vertical channel), we propose five rf channel electrodes. The central rf channel electrodes are grouped in fours to form an effective rf electrode as wide as the outer permanent rf electrode.

The 4:1 ratio of rf:dc widths is slightly larger than the optimal ratio of 3.68 found by Nizamani *et al.* due to pragmatic concerns [26]. We wish to minimize the number of variable amplitude rf channels for ease of construction. A 4:1 ratio requires a reasonably small number of rf electrodes while being close to the optimal ratio.

The method for varying the rf amplitude is illustrated in Fig 5, where channels are labeled as in Fig 4. This motion scheme was found using numerical regularization techniques [23] which keep the trap frequency and depth relatively constant. This is discussed further in Sec. 3.3. The rf channel acts as a conveyor belt for ions, shuttling all ions that are moved into it in the same direction. Neighboring rf channels shuttle ions

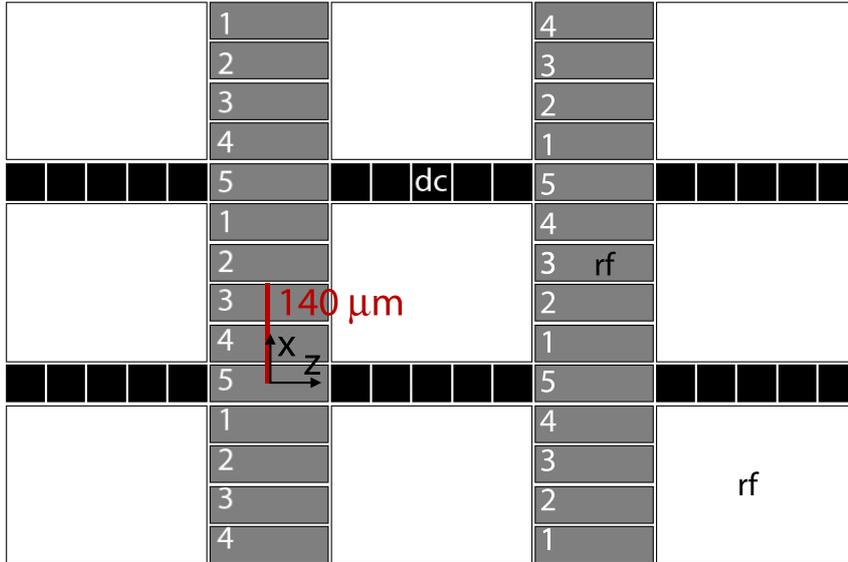


Figure 4. PLANAR TRAP DESIGN: The storage and computation channels are oriented horizontally (black). The large white electrodes are permanent rf electrodes. The rf transport channel (grey) uses variable amplitude rf electrodes to transport ions with minimal micromotion. Neighboring rf channels have complementary voltages, thus minimizing micromotion in the center of the computation channels. The ion can be moved through the X-junction in any direction. The path (red) from $x = 0\mu\text{m}$ to $140\mu\text{m}$ shows the path on which regularized voltages were calculated (Sec. 3.3).

in opposite directions; this suppresses micromotion in the center of the computation channel. The basic design elements—the X junction, computation channel and rf channel—can be repeated in a compact way.

3.1. Spatial resolution of rf potentials

An interesting feature of the rf pseudopotential is that it does not obey the Laplace equation. We conjecture that this property can be applied beyond three-dimensional trapping of charged particles in rf traps. In particular, we show that rf potentials have a higher spatial resolving power than static potentials enabling improved selective excitation of individual ions in long ion strings.

We define the resolving power $r \equiv (d^2U/dz^2)_{z_0}/U(z_0)$, by using the normalized second derivative of the pseudopotential, $U(z)$, at the axial position of highest curvature, z_0 . Physically, this corresponds to the ratio of the spatial gradient of the force on a charged particle to the maximum of the pseudopotential. In the case of an rectangular high-aspect ratio x_e/z_e electrode, the position of highest curvature is directly above

the middle of the electrode for static potentials, whereas for rf splitting there are two positions of highest curvature, axially displaced from the electrode by approximately $\pm\sqrt{3}y_0$, where y_0 is the trapping height.

For a trapping height of 100 μm and an electrode with an axial width $z_e = 10 \mu\text{m}$, we numerically determine the resolving power of the rf pseudopotential to be a factor of 6 higher than that of a static dc potential. In the limit of a splitting electrode with vanishingly small extent in the axial (z) direction, we find that the resolving power of the rf pseudopotential is 4.5 times larger than that of a static potential.

We investigated potential advantages of the increased resolving power for splitting of ion strings [27], however, could not find any significant advantages of rf potentials over dc potentials. The main reason for this is that a more appropriate figure of merit is the absolute strength of the achievable octupole term in the potential for a given maximal voltage overruling the advantage of an increased resolving power [28].

3.2. Rf design

Creating several adjustable high voltage rf channels in an ion trap could be a challenge due to capacitive coupling. Suggestions for the implementation of rf control include changing tapping location of a helical resonator continuously [18] and varying load capacitances in a resonating circuit [19]. Fast switching of rf amplitudes can be achieved by using multiple step-up resonators. In a test set-up with helical resonators, however, we observed strong coupling between the resonators making it virtually impossible to vary the rf amplitudes independently without compromising the relative phase between the rf signals. Therefore, we propose using coaxial resonators (consisting of ordinary coaxial cables in a T-junction) attached directly to the trap, thus shielding the resonators from each other very effectively.

We tested the degree of control over the rf amplitude with coaxial resonators by applying 100 V at 50 MHz to neighboring electrodes of a test trap (100 $\mu\text{m} \times 2000 \mu\text{m}$ electrodes, separated by 10 μm) [29]. We added a capacitance of 10 pF from each electrode to ground to minimize the pickup from the neighboring electrode. The high voltage rf was generated with an rf signal generator, a 5 W rf amplifier and a coaxial resonator consisting of an ordinary RG58 coaxial cable for step up. With this set-up we successfully varied one channel from 20–100 V amplitude while holding the neighboring electrode at 100 V amplitude. The lower rf voltage limit of 20 V on the trap electrodes arises from residual rf pickup. This could be improved by adding a π phase shift to eliminate the rf signal, decreasing the capacitance between neighboring rf electrodes or increasing capacitance to ground.

Since the pseudopotential scales with the square of the electric field amplitude, reducing the rf amplitude on an electrode to 20% is equivalent to reducing the force due to the pseudopotential to 4%. Our simulations show that transport is hardly affected by a pick-up of this size. In Sec. 3.3, we show how a micromotion free transport is still possible with this constraint. Therefore, we anticipate no major road-blocks for the

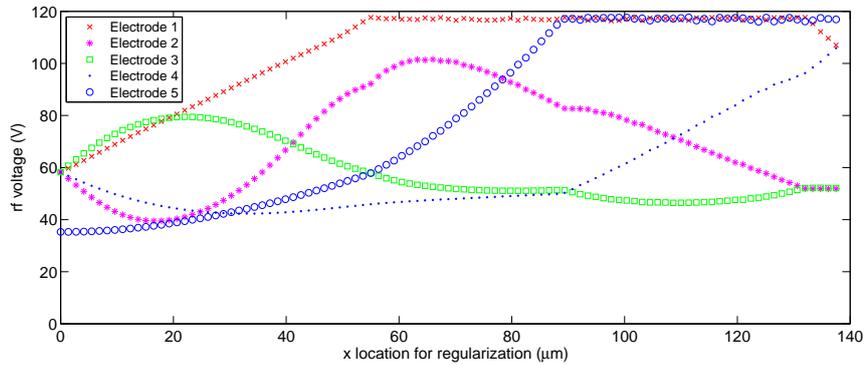


Figure 5. REGULARIZED TRAP VOLTAGES FOR RF TRANSPORT: Resulting rf amplitudes from the Tikhonov regularization versus x position with iterative adjustment of weighting factors in order to comply with constraints. The pseudopotential minimum is moved in the positive x direction.

implementation of variable amplitude rf in our proposal.

3.3. Optimized rf transport

The previously mentioned constraints imposed by rf pickup pose a challenge to the proper choice of the rf amplitudes during transport. We would like to ensure a trapping depth of 25meV during the process and avoid parametric heating. Thus we would like to keep the trap frequencies fixed or at least ensure that they change slowly. We also seek to avoid jumps of the trapping position during the transport. To accomplish this we employed the Tikhonov regularization technique presented in [23]. In order to find the rf amplitudes for a desired geometry we used the inverse method on the electric fields generated by the rf drive \parallel .

A model field was calculated over the junction by keeping the underlying rf electrode 5 at an rf amplitude of 35.3 V and all other rf electrodes at an rf amplitude of 58.2 V, yielding a trap located at a height of 55 μm over electrode 5. This constitutes the starting condition at $x = 0 \mu\text{m}$. This model field is then translated in the positive x direction sequentially (100 steps) until the minimum is located between electrodes 2 and 3 at $x = 140\mu\text{m}$ (see Fig. 4). The other half of the transport is the same by symmetry. The voltages are obtained by the numerical regularization method which calculates the inverse of the field equations. As the large rf electrodes (white in Fig. 4) are kept at an amplitude of 58.2 V, we perform regularization without the field that they create, then add it back afterward. The initial voltages are chosen such that z and y positions of

\parallel The source code is supplied as supplementary online material and can be downloaded from <http://kilian-singer.de/ent>.

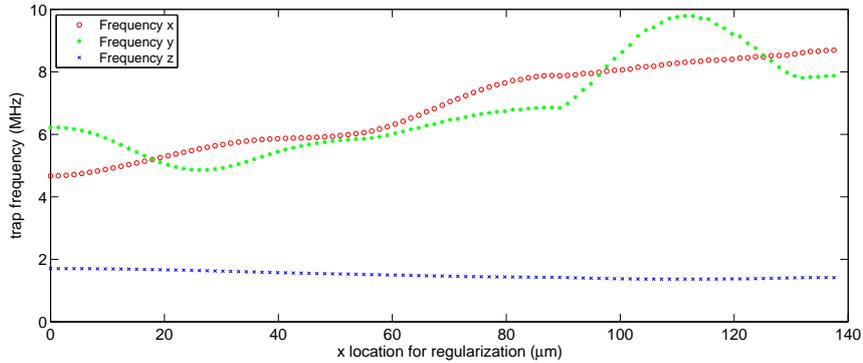


Figure 6. TRAP FREQUENCIES: Trapping frequencies versus position of the trap minimum as realized by the rf amplitudes from Fig. 5. A constant trapping frequency cannot be realized due to the constraints caused by the limitation of the rf amplifier and mutual crosstalk.

the pseudopotential minimum are kept as constant as possible during transport. If the Tikhonov regularization leads to results exceeding the constraints then weighting factors are iteratively adjusted as described in [23] until the constraints are fulfilled. Whenever the rf amplitude has to be reduced on one electrode, other electrodes are adjusted to compensate while optimizing the trapping potentials.

The height (y) of the calculated transport path is $54.4 \mu\text{m}$ with a maximum deviation of $1.2 \mu\text{m}$; the z position of the path is $-3.9 \mu\text{m}$ with a maximum deviation of $1.1 \mu\text{m}$. Fig. 4 shows the transport path. Fig. 5 depicts the voltages calculated as a result of the Tikhonov regularization. Fig. 6 shows the trapping frequencies along all three axes. We estimate the trap depth by calculating the potential energy along 27 lines through the minimum of the trap and find that the energy barrier is always larger than 25 meV along any of these lines (Fig. 7).

4. Conclusion

We proposed a new planar architecture for scalable QIP. The design includes X-junctions through which particles can be transported without micromotion due to rf fields. Minimizing micromotion can help lower heating rates and increase the fidelity of transport. High fidelity X-junctions present a new tool and have the potential to improve the scalability of ion trap quantum computers. We also showed that adjustable rf amplitudes have a higher spatial resolution as compared to slowly varying static voltages making them attractive for splitting ion strings. We studied feasibility of this approach by transporting macroscopic particles between arbitrary lattice sites on a three dimensional trap.

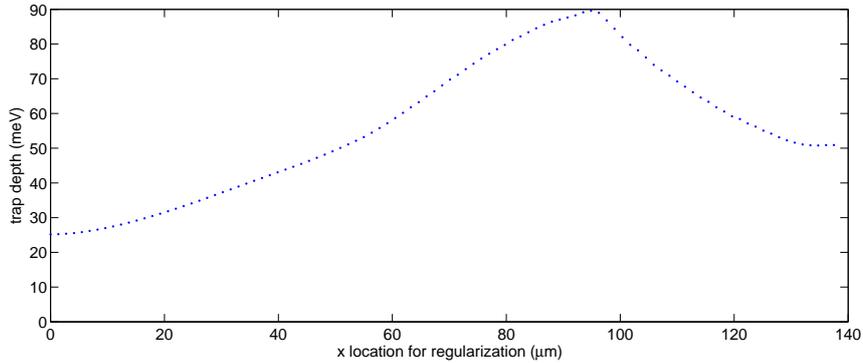


Figure 7. DEPTH OF THE PSEUDOPOTENTIAL: Minimal pseudopotential depth. A minimum trap depth of more than 25 meV can be guaranteed during the whole transport operation.

The experiments were supported by the Laboratory Directed Research and Development Program of Lawrence Berkeley National Laboratory under U.S. Department of Energy Contract No. DE-AC02-05CH11231. KS acknowledges additional financial support by the VolkswagenStiftung. ND was supported by the Office of the Director of National Intelligence (ODNI), Intelligence Advanced Research Projects Activity (IARPA), through the Army Research Office. We also acknowledge J. Home for very useful comments on an earlier version of our manuscript.

- [1] Kielpinski, D., Monroe, C., and Wineland, D. J. *Nature* **417**(6890), 709–711 (2002).
- [2] Haeffner, H., Roos, C. F., and Blatt, R. *Physics Reports* **469**(4), 155–203 (2008).
- [3] Wineland, D. J. et al. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Tech.* **103**, 259 (1998).
- [4] Monroe, C., Meekhof, D. M., King, B. E., Itano, W. M., and Wineland, D. J. *Phys. Rev. Lett.* **75**(25), 4714–4717 (1995).
- [5] Sackett, C. A., Kielpinski, D., King, B. E., Langer, C., Meyer, V., Myatt, C. J., Rowe, M., Turchette, Q. A., Itano, W. M., Wineland, D. J., and Monroe, C. *Nature* **404**, 256–259 (2000).
- [6] *Appl. Phys. B: Lasers and Optics* **77**, 789–796 (2003).
- [7] Home, J. P., Hanneke, D., Jost, J. D., Amini, J. M., Leibfried, D., and Wineland, D. J. *Science* **325**(1227) (2009).
- [8] Hanneke, D., Home, J. P., Jost, J. D., Amini, J. M., Leibfried, D., and Wineland, D. J. *Nature Physics* **6**, 13–16 (2009).
- [9] Hensinger, W. K., Olmschenk, S., Stick, D., Hucul, D., Yeo, M., Acton, M., Deslauriers, L., and Monroe, C. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 34101 (2006).
- [10] Blakestad, R. B., Ospelkaus, C., VanDevender, A. P., Amini, J. M., Britton, J., Leibfried, D., and Wineland, D. J. *Phys. Rev. Lett.* **102**(15), 153002 (2009).
- [11] Seidelin, S., Chiaverini, J., Reichle, R., Bollinger, J. J., Leibfried, D., Britton, J., Wesenberg, J. H., Blakestad, R. B., Epstein, R. J., Hume, D. B., Itano, W. M., Jost, J. D., Langer, C., Ozeri, R., Shiga, N., and Wineland, D. J. *Phys. Rev. Lett.* **96**(25), 253003 Jun (2006).
- [12] Pearson, C. E., Leibbrandt, D. R., Bakr, W. S., Mallard, W. J., Brown, K. R., and Chuang, I. L. *Phys. Rev. A* **73**(3), 032307 Mar (2006).

- [13] Amini, J. M., Uys, H., Wesenberg, J. H., Seidelin, S., Britton, J., Bollinger, J. J., Leibfried, D., Ospelkaus, C., VanDevender, A. P., and Wineland, D. J. *New Journal of Physics* **12**(3), 033031 (2010).
- [14] Wesenberg, J. H. *Phys. Rev. A* **79**(1), 013416 (2009).
- [15] Berkeland, D. J., Miller, J. D., Bergquist, J. C., Itano, W. M., and Wineland, D. J. *Journal of Applied Physics* **83**(10), 5025–5033 (1998).
- [16] Blümel, R., Kappler, C., Quint, W., and Walther, H. *Phys. Rev. A* **40**(2), 808–823 (1989).
- [17] Cetina, M., Grier, A., Campbell, J., Chuang, I., and Vuletić, V. *Phys. Rev. A* **76**(4), 041401 Oct (2007).
- [18] VanDevender, A. P., Colombe, Y., Amini, J., Leibfried, D., and Wineland, D. J. *Phys. Rev. Lett.* **105**(2), 023001 Jul (2010).
- [19] Herskind, P. F., Dantan, A., Albert, M., Marler, J. P., and Drewsen, M. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **42**(15), 154008 (2009).
- [20] Paul, W. *Rev. Mod. Phys.* **62**(3), 531–540 (1990).
- [21] Leibfried, D., Blatt, R., Monroe, C., and Wineland, D. *Rev. Mod. Phys.* **75**(1), 281–324 (2003).
- [22] Castrejón-Pita, J. R. and Thompson, R. C. *Phys. Rev. A* **72**(1), 013405 (2005).
- [23] Singer, K., Poschinger, U., Murphy, M., Ivanov, P., Ziesel, F., Calarco, T., and Schmidt-Kaler, F. *Rev. Mod. Phys.* **82**(3), 2609–2632 (2010).
- [24] Nabors, K., Kormeyer, F. T., Leighton, F. T., and White, J. *SIAM J. Sci. Comput.* **15**(3), 713–735 (1994).
- [25] Gerlich, D. *ADVANCES IN CHEMICAL PHYSICS LXXXII* (1992).
- [26] Nizamani, A. H. and Hensinger, W. K. *Arxiv preprint arXiv:1007.3542* July (2010).
- [27] Home, J. P., McDonnell, M. J., Lucas, D. M., Imreh, G., Keitch, B. C., Szwed, D. J., Thomas, N. R., Webster, S. C., Stacey, D. N., and Steane, A. M. *New J. Phys.* **8**, 188 (2006).
- [28] Home, J. P. *private communication, ETH Zürich* (2010).
- [29] Daniilidis, N., Lee, T., Clark, R., Narayanan, S., and Haeffner, H. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **42**(15), 154012 (2009).

B. Bestimmung der Beugungsmaßzahl

Die folgende Herleitung orientiert sich eng an [Eichler et al., 2004]. Ein Gaußstrahl, welcher entlang der z -Achse verläuft, kennzeichnet sich durch seine in der Radialebene (x,y) gaußförmige Intensitätsverteilung

$$I(r, z) = I_0 \left(\frac{W_0}{W(z)} \right)^2 \exp \left(-\frac{2r^2}{W^2(z)} \right) = I(z)_{max} \exp \left(\frac{-8r^2}{d^2(z)} \right) \quad (\text{B.1})$$

und einen entlang der z -Achse mit $\sim 1/r^2$ abfallendem $I(z)_{max}$. Der Strahlradius ist mit $W(z)$ bezeichnet und ist definiert als der radiale Abstand bei welchem die Intensität um $1/e^2$ abgefallen ist. Der hierdurch definierte Kreis enthält 86 % der Strahlleistung. $d(z) = 2W(z)$ gibt den Strahldurchmesser

$$d(z) = d_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}} \quad \text{mit} \quad z_R = \frac{\pi d_0^2}{4\lambda}. \quad (\text{B.2})$$

an. z_R markiert die Rayleighlänge des Strahls und ist festgelegt als der Abstand zur Strahl-taille bei welchem sich der Strahldurchmesser d_0 um einen Faktor von $\sqrt{2}$ aufgeweitet hat. λ entspricht der Wellenlänge des Lichts. Im Fernfeld kann die Näherung $z \gg z_R$ angenommen werden. Damit kann der erste Term in Gl. B.2 vernachlässigt werden. Dies führt zu der Beziehung

$$d(z) \approx \frac{d_0 z}{z_R} = \theta z \quad (\text{B.3})$$

mit

$$\theta = \frac{d_0}{z_R} = \frac{4\lambda}{\pi d_0}. \quad (\text{B.4})$$

θ gibt den vollen Öffnungswinkel des Strahls an. Stellt man die Gl. B.4 um, so ergibt sich das Strahlparameterprodukt

$$\frac{d_0 \theta}{4} = \frac{\lambda}{\pi}. \quad (\text{B.5})$$

Dieses Relation gilt nur für die Grundmode TEM_{00} . Höhere Transversalmoden oder ein

Gemisch aus unterschiedlichen Moden führen zu größeren Divergenzen und einen um einen Faktor M größeres Produkt

$$\frac{d_0\theta}{4} = M^2 \frac{\lambda}{\pi}. \quad (\text{B.6})$$

M^2 wird als die Beugungsmaßzahl bezeichnet. Diese ist ein Maß für die Strahlqualität $K = 1/M^2$ und Fokussierbarkeit des Lasers. Für die Messung von M^2 wird der Laser mittels einer Linse fokussiert und Strahldurchmesser entlang seines Strahlverlaufs bestimmt. Es sollte dabei beachtet werden, dass Messungen innerhalb der Rayleighlänge aufgenommen werden. Quadriert man Gl. B.3 und nimmt an, dass sich die Strahltaile nicht bei $z=0$ befindet, sondern bei z_0 , erhält man

$$d^2(z) = d_0^2 + (z - z_0)^2 \theta^2 \quad (\text{B.7})$$

Quadriert man nun ebenfalls die entlang der Strahltaile aufgenommen Durchmesser, kann man ein Polynom zweiter Ordnung

$$d^2 = A + Bz + Cz^2 \quad (\text{B.8})$$

an die Messwerte anfitzen. Die relevanten Strahlgrößen ergeben sich hieraus über

$$z_0 = \frac{-B}{2}, \quad d_0 = \sqrt{A - \frac{B^2}{4C}}, \quad \theta = \sqrt{C}. \quad (\text{B.9})$$

Mit diesen Werten kann die Beugungsmaßzahl aus Gl. B.6 berechnet werden.

C. Konstruktionszeichnungen

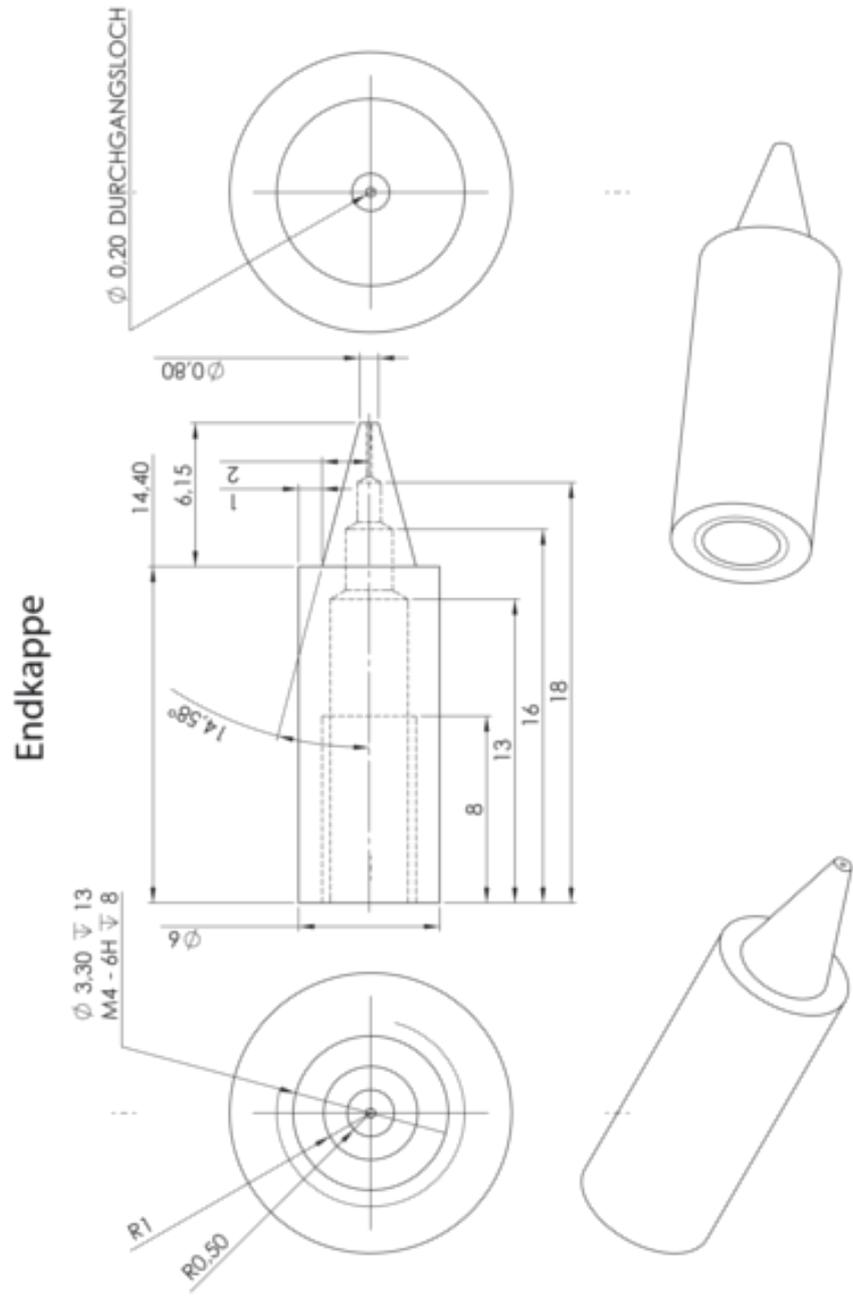


Abbildung C.1.: Konstruktionszeichnung der Endkappe.

D. Schaltskizze der makroskopischen Paulfalle

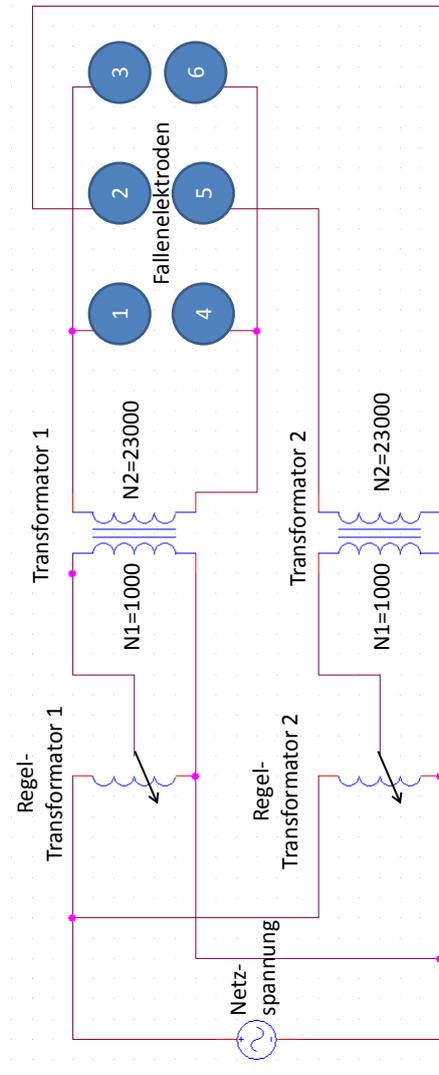


Abbildung D.1.: [Skizze der Schaltung der makroskopischen Paulfalle. Bei den Regeltransformatoren handelt es sich um Spar-Stelltransformatoren. Primär- und Sekundärseite sind daher nicht getrennt. Transformatortyp ESS-102.

E. Keramik Stecksystem

Neben der im Abschnitt 3.5 vorgestellten Fallenflügelhalterung wurde untersucht, ob eine reine Steckverbindung aus 125 μm dicken Substraten bestehende Konstruktion sich selbst trägt. Der Vorteil dieser Methode besteht darin, dass die Laserbearbeitung auch für die Halterung der Falle genutzt werden kann. Dies minimiert erheblich die Fehlerquellen der Halterung.

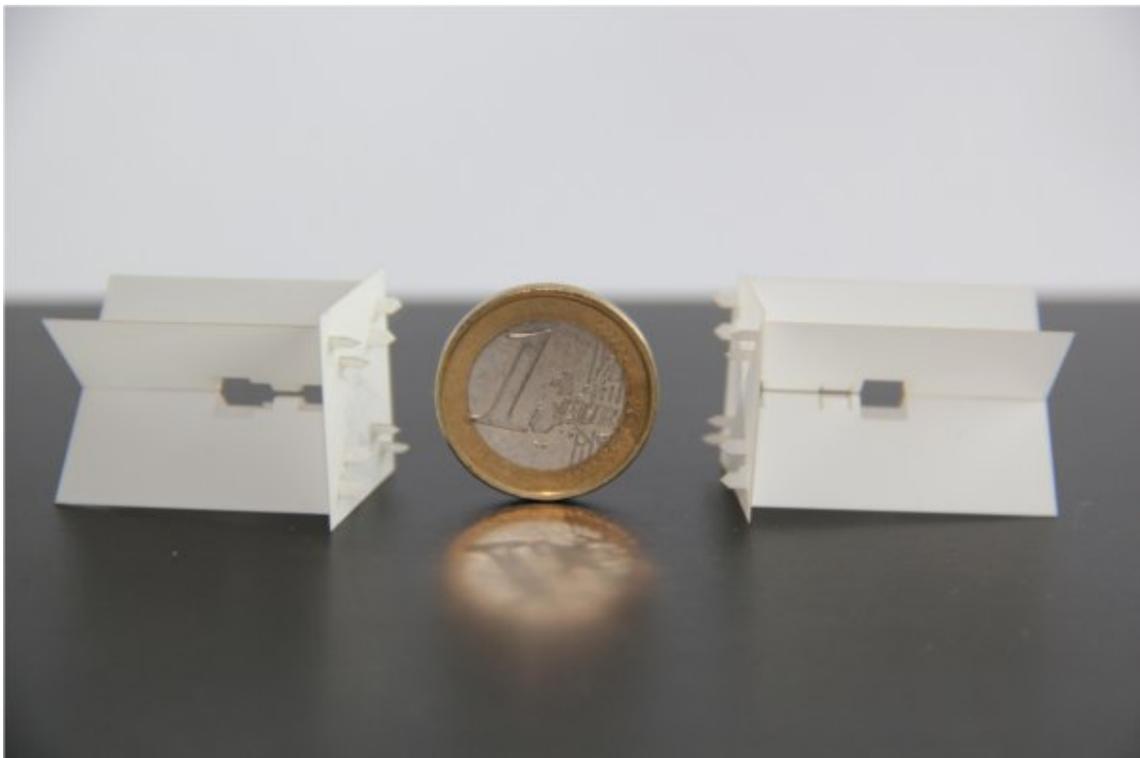


Abbildung E.1.: Fotografie der entworfenen Keramiksteckfallen.

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst und nach bestem Wissen und Gewissen keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Ort, Datum

Andreas Kehlberger