

# Phasenübergänge in Coulomb-Ionenkristallen

Beobachtung von Phasenübergängen in Coulomb-Ionenkristallen:  
Strukturen, Nichtgleichgewichtsdynamik und Defektbildung

Dissertation

zur Erlangung des Grades

**Doktor der Naturwissenschaften**

am Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik

der Johannes Gutenberg-Universität

in Mainz

**Stefan Ulm**

geb. in Ulm

Mainz, 2019

JOHANNES GUTENBERG  
UNIVERSITÄT MAINZ



**Dissertation**

*Beobachtung von Phasenübergängen in Coulomb-Ionenkristallen: Strukturen, Nichtgleichgewichtsdynamik und Defektbildung*

Date of the oral defense: 07.01.2021

**Johannes Gutenberg-Universität**

*Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik*

Institut für Quanteninformationsverarbeitung

Staudingerweg 7

68222 Mainz

# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>11</b>
<b>Abstract</b>	<b>13</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>15</b>
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>21</b>
2.1 Dynamischer Einschluss im linearen Paulschen Massenfilter . . . . .	21
2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden . . . . .	25
2.3 Zickzack-Phasenübergang . . . . .	32
2.4 Defekte in Ionenkristallen . . . . .	39
2.5 Gemischte Ionenkristalle . . . . .	39
2.6 Schwingungen in Kristallen mit Defekten . . . . .	40
2.7 Der Kibble-Zurek-Mechanismus . . . . .	44
2.8 Kalziumionenkristalle zur Untersuchung von Coulomb-Kristallstrukturen . .	54
<b>3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen</b>	<b>59</b>
3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen	59
3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge . . . . .	71
3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek- Mechanismus . . . . .	88
3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential . . . . .	108
3.5 Defektbildung in homogenen Ionenkristallen . . . . .	122
3.6 Strukturen und Defekte in gemischten Kristallen . . . . .	125
3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristal- len mit Strukturdefekten . . . . .	133
<b>4 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>153</b>
<b>A Anhang: Falldesign</b>	<b>165</b>
<b>B Anhang: Simulation</b>	<b>169</b>
B.1 Simulationsparametervergleich . . . . .	169
B.2 Simulation des Anisotropieeinflusses . . . . .	171
<b>C Anhang: Liste der wissenschaftlichen Veröffentlichungen</b>	<b>175</b>
C.1 Veröffentlichungen . . . . .	176
C.2 Vorträge . . . . .	176
C.3 Poster . . . . .	177



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Flüssigkristalldomänen von geordneten Molekülen . . . . .	17
1.2	Vortex und Antivortex in $\text{YMnO}_3$ , sowie Vortices in einem BEC . . . . .	17
1.3	Verschiedene Ionenkristalle in linearen Paulfallen . . . . .	18
2.1	Skizze eines Massenfilters . . . . .	21
2.2	CAD-Zeichung einer Paulfalle . . . . .	24
2.3	Simulierter linearer Kristall . . . . .	27
2.4	Kritisches Frequenzverhältnis als Funktion der Ionenanzahl . . . . .	30
2.5	Pseudopotentialberechnung eines Zickzack-Kristalls . . . . .	32
2.6	Mit dem Pseudopotential berechnete Schwingungsmoden eines Fünf-Ionen- Zickzack-Kristalls . . . . .	35
2.7	Gemischter Ionenkristall . . . . .	40
2.8	Schwingungsmodenspektrum eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt . . . .	41
2.9	Unterste Schwingungsmode eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt . . . .	42
2.10	Simuliertes Peierls-Nabarro-Potential für einen Kristall aus 30 $\text{Yb}^+$ -Ionen .	43
2.11	Simuliertes Peierls-Nabarro-Potential . . . . .	43
2.12	Skizze der freien Energie nach dem Phasenübergang . . . . .	45
2.13	Skizze der Antwortzeit . . . . .	46
2.14	Simulierter Kristall der in der Y-Ebene einen Defekt aufweist . . . . .	50
2.15	Simulierter Kristall der in der X-Ebene einen Defekt aufweist . . . . .	51
2.16	Simulierter Kristall mit und ohne Defekt . . . . .	52
2.17	Standardabweichung der Simulationsergebnisse . . . . .	53
2.18	Energielevelstruktur von $\text{Ca}_{40}^+$ -Ionen . . . . .	54
3.1	Autocad-Zeichung der Stabfalle . . . . .	60
3.2	Elektrodenanordnung der Implantationsfalle . . . . .	61
3.3	Ausrichtung der Implantationsfalle . . . . .	62
3.4	Skizze der segmentierten Mikrofalle . . . . .	63
3.5	Einstellen der Anisotropie . . . . .	64

## Abbildungsverzeichnis

3.6	Anisotropie in der unsymmetrischen Falle . . . . .	64
3.7	Ofenausbau und Atomfluoreszenz . . . . .	65
3.8	Laseranordnung . . . . .	66
3.9	Querschnitt der Resonator-kammer . . . . .	69
3.10	Lasersequenz der Spektroskopie . . . . .	70
3.11	Oszillierendes Ion . . . . .	72
3.12	Mittelung der Ionenposition . . . . .	72
3.13	Fit der Ionenpositionen . . . . .	73
3.14	Symmetrieparameter . . . . .	74
3.15	Fit der kritischen Fallenparameter . . . . .	77
3.16	Strukturelle Phasenübergänge . . . . .	78
3.17	Kristall über $\alpha_{\text{krit}2}$ . . . . .	80
3.18	Zickzack-Spektrum . . . . .	81
3.19	Seitenbandspektrum eines Drei-Ionenkristalls in der Zickzack-Konfiguration . . . . .	83
3.20	Zickzackmoden als Funktion des Fallenparameters $q$ . . . . .	85
3.21	Kristallstrukturen . . . . .	86
3.22	Auswertung mittels Fouriertransformation . . . . .	87
3.23	Kompression der Kristalle . . . . .	88
3.24	Skizze des Laboraufbaus . . . . .	89
3.25	Exponentielle Spannungsrampe . . . . .	90
3.26	Fourierspektrum der exponentiellen Rampe . . . . .	91
3.27	Messsequenz der KZM-Messungen . . . . .	92
3.28	Defektrate in Abhängigkeit von der Belichtungszeit . . . . .	94
3.29	Trajektorien-simulation der axialen Ionenpositionen . . . . .	95
3.30	Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit . . . . .	96
3.31	Abhängigkeit der Steigung von der Anzahl der beteiligten Punkte . . . . .	98
3.32	Standardabweichung der Steigung . . . . .	98
3.33	$R^2$ -Abweichung der Steigung . . . . .	99
3.34	Anpassungsgüte $\chi^2$ der Steigung . . . . .	99
3.35	Festlegung der oberen und unteren Grenze der Steigungsanpassung . . . . .	100
3.36	Einfluss der radialen Anisotropie auf die Defektrate . . . . .	101
3.37	Kondensatorspannungsrampe . . . . .	102
3.38	Funktionsgenerator und Kondensatorschaltung . . . . .	103
3.39	Defektraten mit Kondensatorspannungsrampe . . . . .	104
3.40	Sinusförmige Spannungsrampe der Endkappen . . . . .	105
3.41	Defektraten mit sinusförmigen Spannungsrampen . . . . .	105

3.42	Aufteilung der gemessenen Defektrate auf Einzel- und Doppeldefekte . . . .	106
3.43	Renormierte Doppeldefektrate . . . . .	107
3.44	Annihilation zweier Defekte . . . . .	108
3.45	Simulation des Anisotropieeinflusses nach dem Ausheizen . . . . .	109
3.46	Simulation des Anisotropieeinflusses vor dem Ausheizen . . . . .	110
3.47	Simulation und Messungen im Vergleich für verschiedene Ionenanzahlen . .	111
3.48	Kristall von oben . . . . .	112
3.49	Neue Vorlagebilder . . . . .	112
3.50	Messung der radialen Anisotropie . . . . .	114
3.51	Defektrate gegen Anisotropie . . . . .	115
3.52	Lebenszeitmessung für Defekte . . . . .	116
3.53	Lebenszeit eines mittigen Defekts . . . . .	117
3.54	Lebenszeit eines versetzten Defekts . . . . .	117
3.55	Defektraten für Kristallgrößen zwischen 14 und 17 Ionen . . . . .	118
3.56	Defektraten für Kristalle mit weniger als 14 Ionen . . . . .	120
3.57	Defektraten für alle unterschiedlichen Kristallgrößen . . . . .	121
3.58	Steigungen aller Kristallgrößen . . . . .	121
3.59	Doppelmulde zur Erzeugung eines homogenen Kristalls . . . . .	122
3.60	Vergleich der Defektrate eines homogenen und eines inhomogenen Kristalls	123
3.61	Foto der Ionenkanone . . . . .	127
3.62	Spektrum eines gemischten Zwei-Ionenkristalls mit Stickstoff . . . . .	131
3.63	Spektrum eines gemischten Kristalls mit Stickstoff . . . . .	132
3.64	Spektrum eines Ions . . . . .	133
3.65	Frequenzabhängigkeit der Laserleistung bei 729 nm . . . . .	134
3.66	Gemittelte Pulslängenmessung auf der Trägerfrequenz . . . . .	135
3.67	Gemittelte Pulslängenmessung aller Seitenbänder . . . . .	136
3.68	Magnetfeldaufspaltung der Übergänge . . . . .	137
3.69	Bestimmung des Modulationsindex . . . . .	138
3.70	Spektrum eines Zwei-Ionenkristalls . . . . .	139
3.71	Vergleich des Ein- und Zwei-Ionenkristallspektrums . . . . .	140
3.72	Modenverteilung eines Fünf-Ionenkristalls mit Defekt . . . . .	141
3.73	Stabiler Defekt in einem Fünf-Ionenkristall . . . . .	142
3.74	Niedrigste Defektschwingungsmode des Fünf-Ionenkristalls . . . . .	143
3.75	Spektrum eines Fünf-Ionenkristalls mit Defekt . . . . .	143
3.76	Vergleich eines Fünf-Ionenspektrums mit und ohne Defekt durch Änderung der Anisotropie . . . . .	144

## Abbildungsverzeichnis

3.77 Vergleich eines Fünf-Ionenspektrums mit und ohne Defekt durch Änderung der radialen Frequenzen . . . . .	145
3.78 Unterste Defektschwingungsmode eines Sieben-Ionenkristalls . . . . .	147
3.79 Abbildung des Spektrums eines Sieben-Ionenkristalls mit Defekt . . . . .	148
3.80 Vergleich eines Sieben-Ionenspektrums mit und ohne Defekt . . . . .	149
3.81 Die unterste Defektschwingungsmode des Sechzehn-Ionenkristalls . . . . .	150
3.82 Spektrum eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt . . . . .	150
3.83 Vergleich eines Sechzehn-Ionenspektrums mit und ohne Defekt . . . . .	152
A.1 Keramiksubstrat vor dem Beschichten . . . . .	165
A.2 Vergoldete Keramiksubstrate . . . . .	166
A.3 Fertige Falle im Halter . . . . .	167
A.4 Laserschaden der Goldschicht . . . . .	168
A.5 Fokussmessung des gepulsten Lasers . . . . .	168
B.1 Fallenfrequenz als Funktion der Simulationsschrittgröße . . . . .	169
B.2 Vergleich unterschiedlicher Parametereinstellungen . . . . .	170
C.1 Aristoteles . . . . .	179



# Tabellenverzeichnis

2.1	Zickzack-Frequenzen . . . . .	33
2.2	Obere Zickzack-Frequenzen . . . . .	34
3.1	Berechnete Symmetrieparameter für Kristalle mit gerader Ionenzahl . . . . .	75
3.2	Übersicht der Werte des kritischen Anisotropieparameters $\alpha_{krit1}$ . . . . .	76
3.3	Alle in der Stabfalle gemessenen Kristallkonfigurationen . . . . .	79
3.4	Alle in der Implantationsfalle gemessenen Kristallkonfigurationen . . . . .	79
3.5	Frequenzen der untersten beiden Zickzackmoden, sowie der axialen und der unteren radialen Schwerpunktsmoden . . . . .	82
3.6	Obere radiale Fallenfrequenzen vor und nach der Spannungsrampe . . . . .	114
3.7	Steigungen der Kristallgrößen 17, 16, 15 und 14 Ionen . . . . .	119
3.8	Steigungen für 13-, 12- und 11-Ionenkristalle . . . . .	119
3.9	Praseodymladeversuche . . . . .	128
3.10	Stickstoffladeversuche . . . . .	130
3.11	Mittlere Phononenzahl . . . . .	136
B.1	Vergleich unterschiedlicher Zeitschrittgrößen. . . . .	171
B.2	Vergleich unterschiedlicher Parametereinstellungen. . . . .	172
B.3	kritische Fallenparameter für fünf, sieben, neun, zehn, elf und zwölf Ionen. . . . .	172
B.4	kritische Fallenparameter für 13-, 14-, 15-, 16-, 17- und 18-Ionen. . . . .	172
B.5	Gleichgewichtspositionen. . . . .	173



# Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung von Strukturen, Phasenübergängen, der Defektbildung und der Nichtgleichgewichtsdynamik im Modellsystem von Coulomb-Ionenkristallen und der Vergleich mit genauen Rechnungen. Im Gültigkeitsbereich einer harmonischen Näherung werden Ionenkristalle durch ihre Gleichgewichtspositionen, Eigenmoden und Eigenfrequenzen beschrieben. Ein sehr genauer Vergleich der gemessenen Positionen für lineare und zweidimensionale Kristalle mit der Pseudopotentialtheorie ergab eine Übereinstimmung auf dem Niveau von besser als  $\pm 0,55\%$ . Für die Eigenfrequenzen der Schwingungsmoden ergab sich eine Abweichung von  $2,84\%$ , die erst mit der Lösung des zeitabhängigen Problems und der Berücksichtigung der Mikrobewegung erklärt wurde. Mit der Einführung einer dynamischen Theorie über den Floquet-Lyapunov-Ansatz wurde eine Übereinstimmung auf dem Niveau von  $\pm 0,14\%$  erreicht. Der strukturelle Übergang eines Ionenkristalls von einem linearen zu einem zweidimensionalen Kristall wird durch einen Phasenübergang zweiter Ordnung beschrieben. Nahe am kritischen Punkt versagt die harmonische Näherung. Parameter, wie der kritische Punkt, können durch Kontrolle des elektrischen Fallenpotentials durchlaufen werden. Gemäß der Theorie von Thomas Kibble und Wojciech Zurek treten nahe des kritischen Punktes strukturelle Defekte auf, deren Häufigkeit einem universellen Skalierungsgesetz folgt. Für inhomogene Ionenkristalle aus 16 Ionen konnte ich einen exponentiellen Anstieg der Defekterzeugungsrate  $\beta$  mit der Geschwindigkeit, mit der ein Phasenübergang durchlaufen wird, messen. Der dabei experimentell bestimmte Wert von  $\beta = 2,68 \pm 0,06$  bestätigt die theoretische Vorhersage von  $\beta = 8/3 = 2,67$ . Ich konnte über die Fallenanisotropie das Peierls-Nabarro-Potential für den Einschluss der Defekte variieren. Um das Skalierungsverhalten der Defektbildung in Systemen unterschiedlicher Größe zu studieren, habe ich diese in Kristallen zwischen 17 und 11 Ionen experimentell und numerisch untersucht. Dabei beobachtete ich selbst für kleine Systeme einen exponentiellen Anstieg der Defektbildungsrate, dessen  $\beta$  sich von  $\beta = 2,64 \pm 0,4$  auf  $\beta = 1,17 \pm 0,32$  verringerte. Dieses Ergebnis wurde durch Simulationen reproduziert. Um in Zukunft die Defektbildung bei sub-Doppler-Temperaturen studieren zu können und die bisher angewendete Detektionsmethode über die Abbildung der Ionen-Fluoreszenz zu vermeiden, habe ich erste Untersuchungen zur Seitenband-Spektroskopie und zur Kühlung von Ionenkristallen mit Defektstellen durchgeführt.



# Abstract

The aim of this work is to study structures, phase transitions, defect formation and non-linear dynamics in the model system of Coulomb ion crystals as well as the comparison with exact calculations. In the validity range of a harmonic approximation, ion crystals are characterized by their equilibrium positions, eigenmodes and eigenfrequencies. A very precise comparison of measured positions for linear and two-dimensional crystals with predictions from a theoretical model of the pseudopotential yielded an agreement at the level of  $\pm 0.55\%$ . However, measured eigenfrequencies of oscillation modes revealed a relative deviation of  $2.84\%$ , which could be explained by the time dependent solution of the problem and the influence of micromotion. Agreement at the level of  $\pm 0.14\%$  was observed with the introduction of a dynamic theory via the Floquet-Lyapunov approach. Structure of an ion crystal can be driven via the electric trap potential through a second order phase transition from a linear arrangement to a two-dimensional crystal. Close to the critical point the harmonic solution fails. Parameters like the critical point can be passed through by control of electrical trap potentials. According to the theory of Thomas Kibble and Wojciech Zurek, structural defects occur close to the critical point. Frequency of their occurrence, quantified by defect creation rate  $\beta$ , follows a universal scaling law. For inhomogeneous crystals consisting of 16 ions, I was able to observe exponential increase of defect creation rate with respect to the rate at which the phase transition was crossed. Experimentally determined value of  $\beta = 2.68 \pm 0.06$  confirms the theoretical prediction of  $\beta = 8/3 = 2.67$ , with this we were able to determine the universal scaling law in ion traps for the first time. Additionally, I was able to vary experimentally the Peierls-Nabarro-Potential for the confinement of defects via trap anisotropy. In order to study the scaling behaviour of defect creation for mesoscopic systems of different sizes, I examined experimentally and numerically defect creation in crystals ranging from 17 to 11 ions. I was able to observe an exponential increase of defect creation rate with the speed of the phase transition even for smallest systems. However the  $\beta$  of this exponential increase reduced from  $\beta = 2.64 \pm 0.4$  to  $\beta = 1.17 \pm 0.32$ . This result was reproduced by numerical simulations. In order to study the defect creation at sub-Doppler temperatures and to avoid the so far used detection method via ion fluorescence imaging, I have performed initial investigations into sideband spectroscopy and sideband cooling of ion crystals with defects.



# 1 Einleitung

Die wohl bekanntesten und häufig zu beobachtenden Phasenübergänge sind das Schmelzen von Eis und das Verdampfen von Wasser. Als Phasenübergang wird in der Thermodynamik die Umwandlung einer Phase eines Stoffes in eine andere Phase bezeichnet. Der Phasenübergang kann mit der Ehrenfest-Klassifikation [EE11] einer bestimmten Ordnung zugeteilt werden. Dazu werden die thermodynamischen Potentiale des Systems betrachtet, wie beispielsweise die Gibbs-Energie als Funktion einer thermodynamischen Größe. Sind die ersten  $n - 1$  Ableitungen des thermodynamischen Potentials stetig und ist die  $n$ -te Ableitung unstetig, so handelt es sich um einen Phasenübergang  $n$ -ter Ordnung. Mit Hilfe der Landautheorie [Lan36] lassen sich Phasenübergänge noch allgemeiner beschreiben. Dabei wird betrachtet, wie bei einem Phasenübergang Symmetriebrüche von geordneten zu ungeordneten Phasen auftreten. Diese führen zu Sprüngen in den thermodynamischen Größen, die hier als Ordnungsparameter bezeichnet werden. Wichtig hierbei ist der Unterschied zwischen Phasenübergängen erster Ordnung und jenen höherer Ordnung. Dies wird anhand von zwei Beispielen deutlich. Ein Phasenübergang erster Ordnung tritt beim Schmelzen eines Festkörpers auf. Um den Festkörper bei gleichbleibendem Druck zu verflüssigen, muss ihm Wärme zugeführt werden. Am Schmelzpunkt erhöht sich dabei seine Temperatur nicht weiter, stattdessen wird die Energie für die Erhöhung der Entropie benötigt. Dies führt zu einer Unstetigkeit der Entropie, welche sich aus der ersten Ableitung der freien Enthalpie  $G$  nach der Temperatur ergibt. Somit handelt es sich beim Schmelzen eines Festkörpers, beispielsweise von Wassereis, um einen Phasenübergang erster Ordnung. Ebenso gilt dies für das Volumen, welches der ersten Ableitung von  $G$  nach dem Druck entspricht und deshalb ebenfalls einen Sprung am Phasenübergang macht. Die Dichte der Phase ist hier der Ordnungsparameter. Für Phasenübergänge erster Ordnung ist ein Sprung des Ordnungsparameters zu beobachten. Anders verhalten sich hingegen Phasenübergänge zweiter oder höherer Ordnung, bei denen sich der Ordnungsparameter kontinuierlich, über den Phasenübergang hinaus, verändert. So ist etwa der Übergang von der ferromagnetischen zur paramagnetischen Phase eines Ferromagneten bei der Curie-Temperatur ein Phasenübergang zweiter Ordnung [Die00]. Dies ist daran zu erkennen, dass die Magnetisierung, welche den Ordnungsparameter dieses

## 1 Einleitung

Übergangs darstellt, stetig gegen Null geht und dabei keinen Sprung aufweist. Der Sprung ist erst in der Wärmekapazität, der zweiten Ableitung der Enthalpie nach der Temperatur, zu erkennen. Oftmals gehen mit Phasenübergängen grundlegende Änderungen der Materialeigenschaften so einher, dass die Stoffe danach einer neuen Materialklasse zugeordnet werden. Dies ist beispielsweise der Fall beim Übergang vom Normalleiter zur Supraleitung und beim Wechsel zwischen ferro- und dielektrischem Verhalten [ST99, Küh08]. Dabei treten Phasenübergänge sowohl in klassischen Systemen, wie dem Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung [Rey83], als auch in Systemen, die quantenmechanisch beschrieben werden müssen, wie beim Übergang zur Suprafluidität [Kap38], auf. Auch Kombinationen mehrerer Phasenübergänge bei der Änderung eines Ordnungsparameters sind möglich. So ergibt sich durch Variation der Spin-Phonon-Kopplung die Jahn-Teller-Verzerrung und es wird ein magnetisch struktureller Phasenübergang erreicht [KHE<sup>+</sup>13, IPISK13]. Die reiche Physik der Phasenübergänge kann in hochgenau kontrollierbaren Modellsystemen, wie den Ionenkristallen, im Hinblick auf interessante Festkörpereigenschaften in makroskopischen Stoffen, die sich oft einer genauen Beobachtung auf dem Niveau einzelner Atome entziehen, untersucht werden.

Topologische Defekte, Fehler in der räumlichen Anordnung, treten meist in Verbindung mit strukturellen Phasenübergängen auf. Unter strukturellen Phasenübergängen werden Phasenübergänge, bei denen sich die räumliche Ordnung der Bestandteile des Systems ändert, verstanden. So durchlaufen Flüssigkristalle einen strukturellen Phasenübergang, wenn sie weit genug abgekühlt werden, sodass sich die Moleküle aneinander ausrichten. Dabei entsteht eine geordnete Domäne. Werden die Flüssigkristalle schneller abgekühlt als sich die Information der Anordnung im System ausbreiten kann, entsteht mehr als eine Domäne an geordneten Molekülen und die Grenzflächen zwischen diesen Domänen können als topologische Defekte beschrieben werden [BCSS94]. In Abbildung 1.1 sind diese Domänen von geordneten Molekülen (weiße Bereiche) zu verschiedenen Zeitschritten während dem rapiden Abkühlen der Flüssigkristalle zu sehen. Wären die Flüssigkristalle während des gesamten strukturellen Phasenübergangs im Gleichgewichtszustand, so würde immer genau eine Domäne von geordneten Molekülen entstehen, da dies der thermodynamische Grundzustand des Systems nach dem Phasenübergang ist. Durch den strukturellen Phasenübergang werden jedoch kleine Störungen, die das System in einen Nichtgleichgewichtszustand versetzen, zu topologischen Defekten umgewandelt und können somit, da topologische Defekte nicht verschwinden, nicht mehr ausgeheilt werden. Defekte, deren Entstehung auf einen Phasenübergang zurückzuführen ist, finden sich auch in Form von Vortices und Antivortices, die sich zwischen den ferroelektrischen Domänen und der Trimerisationsantiphase in  $\text{YMnO}_3$  bilden [CLH<sup>+</sup>12]. Dies ist in Abbildung 1.2 a)



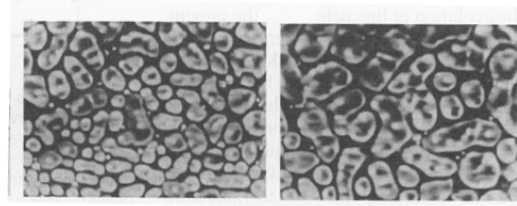


Abbildung 1.1: Domänen von geordneten Molekülen zu verschiedenen Zeitschritten nach dem rapiden Abkühlen der Flüssigkristalle. Bild entnommen aus [BCSS94].

zu sehen. Die hellen Teile sind dabei die Trimerisationsantiphase und die dunklen Bereiche entsprechen den ferroelektrischen Domänen. In Abbildung 1.2 b) ist zu sehen, wie

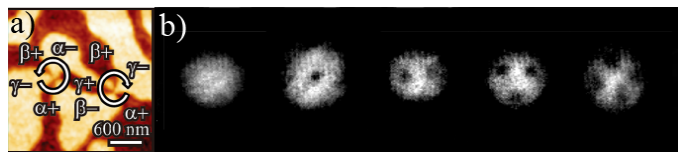


Abbildung 1.2: a) Vortex und Antivortex zwischen der Trimerisationsantiphase und den ferroelektrischen Domänen in  $\text{YMnO}_3$ . Bild entnommen aus [CLH<sup>+</sup>12].  
b) Vortices in einem Bose-Einstein-Kondensat. Bild entnommen aus [MCWD00].

sich Muster aus Vortices in einem Bose-Einstein-Kondensat herausbilden, wenn dieses mit einem Laser umgerührt wird [MCWD00]. Daran ist zu erkennen, dass Defekte nicht nur bei der Entstehung eines Systems in diese eingebaut, sondern dass sie auch durch geeignete Prozesse nachträglich erzeugt werden können. Die Gruppe um Z. Hadzibabic konnte zum Beispiel zeigen, dass in einem neutralen Atomgas bei einem schnellen Übergang in die homogene Bose-Einstein-Phase sich unterschiedliche Phasendomänen ausbilden, und dass deren Erzeugungsrate von dem Verhältnis der Geschwindigkeit des Phasenübergangs zur Informationsgeschwindigkeit abhängt [NGSH15]. Aktuelle Experimente mit wechselwirkenden Rydberg-Atomen, die in der Gruppe um M. Lukin durchgeführt wurden, zeigen dies auch. Dabei ergibt sich beim schnellen Anschalten der Spin-Spin-Wechselwirkung ein Phasenübergang, bei dessen Durchlaufen die Zahl der Defekte studiert wird [KOL<sup>+</sup>19]. Ebenfalls von der Geschwindigkeit des Phasenübergangs abhängig, ist die Erzeugung von Phasenströmen in einem ringförmigen Bose-Einstein-Kondensat [CCB<sup>+</sup>14]. Dabei wird ein dreidimensionales Bose-Gas unterschiedlich schnell verdampfungsgekühlt, wobei die Phasenströme durch den Übergang in ein quasi zweidimensionales Superfluid entstehen. Kibble beschrieb den Effekt der Erzeugung von Defekten bei Phasenübergängen erstmals, als er die Entstehung von kosmischen Strings kurz nach dem Urknall auf diesen Mecha-

## 1 Einleitung

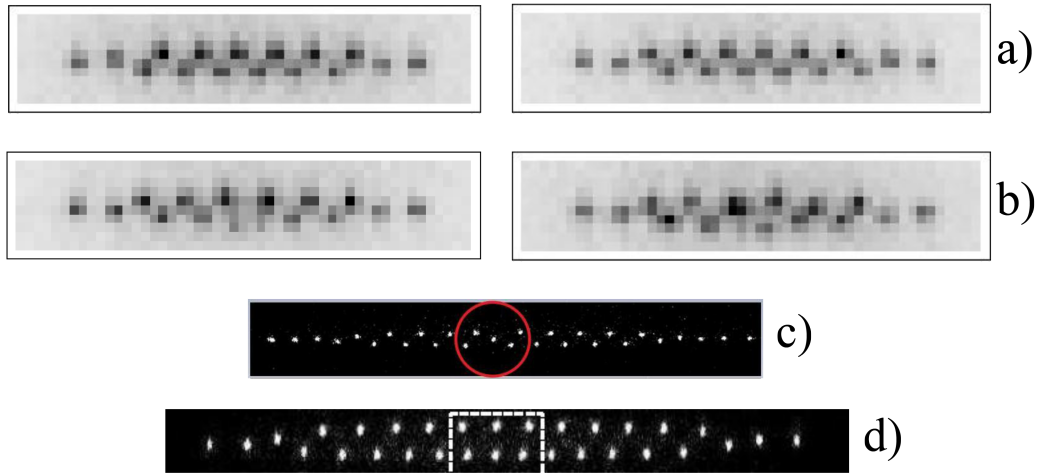


Abbildung 1.3: Verschiedene Ionenkristalle in linearen Paulfallen. Bei a) sind ein Zackzack- (links) und ein Zickzack-Kristall (rechts) aus Kalziumionen abgebildet. Bei b) sind ein Defekt in der Mitte des Kristalls und ein Defekt, der um eine Ionenposition nach links aus der Mitte verschoben ist, dargestellt. Bild c) zeigt einen Ytterbium-Ionenkristall mit Defekt, entnommen aus [PKP<sup>+</sup>13]. Bild d) zeigt einen Magnesium-Ionenkristall mit Defekt, entnommen aus [MBK<sup>+</sup>13].

nismus zurückführte [Kib76, Kib80]. Die kosmischen Strings sollen mit Hilfe moderner Gravitationswellendetektoren beobachtbar sein und würden damit die ersten durch eine String-Theorie vorhergesagten Bestandteile der Raumzeit darstellen, die nachgewiesen werden könnten. Dies würde den Test von String-Theorien mit ihren zusätzlichen Dimensionen und weitere phantastische Möglichkeiten eröffnen.

Die Menge der Störungen, die bei Phasenübergängen in Defekte umgewandelt werden, hängt von der Relaxationszeit und somit von der Geschwindigkeit, mit der der Phasenübergang abläuft, ab. Der Kibble-Zurek-Mechanismus beschreibt allgemein den Einfluss der Geschwindigkeit auf die Defektanzahl für alle strukturellen Phasenübergänge zweiter Ordnung. Dabei kann die anfängliche Störung, die durch den Phasenübergang in topologische Defekte umgewandelt wird, aus thermischen Fluktuationen [DdCM<sup>+</sup>10] oder, falls das System im Grundzustand ist, aus Quanten-Fluktuationen [BCM12] bestehen. Diese strukturellen Defekte können auch in Ionenkristallen in linearen Paulfallen, wie sie bei den hier beschriebenen Messungen verwendet wurden, beobachtet werden (siehe Abbildung 1.3). Ionenkristalle sind ein ideales einstellbares Modellsystem für die Untersuchung von topologischen Defekten, da sie ohne besondere Vorkehrungen keine Defekte aufweisen, die Randbedingungen des Systems genau bekannt sind und alle wichtigen Parameter sehr gut kon-

trolliert werden können. Dabei muss, je nach betrachteter Problemstellung, auch die nicht-lineare Dynamik, der die Ionen zum Beispiel durch die Mikrobewegung unterworfen sind, berücksichtigt werden. So wird für eine exakte Berechnung der Schwingungsmoden eines zweidimensionalen Kristalls der Floquet-Lyapunov-Ansatz benötigt [KUJ<sup>+</sup>12a]. In dieser Arbeit sind zuerst die notwendigen theoretischen Grundlagen zur qualitativen Beschreibung der Messungen dargestellt und es werden die wichtigsten Systemgrößen eingeführt. Anfangs werden die Kristallstrukturen und ihrer Schwingungsmoden allgemein beschrieben, dann wird auf die Besonderheiten der Kristalle in der Zickzack-Phase eingegangen, bevor Defekte in Kristallen und ihr Einfluss auf die Schwingungsmoden erläutert werden. Abschließend werden gemischte Kristalle betrachtet und untersucht, welche Ähnlichkeiten sie zu Kristallen mit Defekten aufweisen. Im anschließenden Kapitel über die Experimente werden erst die Grundlagen, die zur Kontrolle eines Ionenkristalls in einer Paulfalle nötig sind, und die Besonderheiten der Paulfallen, die für die Messungen verwendet wurden, besprochen. Dann werden die Messungen erläutert, die zu strukturellen Phasenübergängen durchgeführt wurden. Anschließend wird erklärt, wie der Kibble-Zurek-Mechanismus in Ionenkristallen beobachtet werden kann und welche Rolle das Peierls-Nabarro-Potential dabei spielt. Abschließend werden die Besonderheiten bei Messungen mit Defekten in homogenen Kristallen erläutert. In den letzten beiden Abschnitten sind die Experimente mit gemischten Kristallen und die ersten spektroskopischen Untersuchungen, die an Defekten in Ionenkristallen durchgeführt wurden, dargestellt. Damit werden die Möglichkeiten der Ionenkristalle für die genaue und quantitative Untersuchung von nichtlinearer Dynamik erheblich erweitert.



## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Dynamischer Einschluss im linearen Paulschen Massenfilter

Bereits 1956 veröffentlichte Wolfgang Paul in seinem Patent [PS56] die grundlegende Bauweise eines Quadrupol-Massenfilters, bestehend aus vier Elektroden (siehe Abbildung 2.1), die symmetrisch angeordnet sind. Von den Elektroden sind zwei diagonal

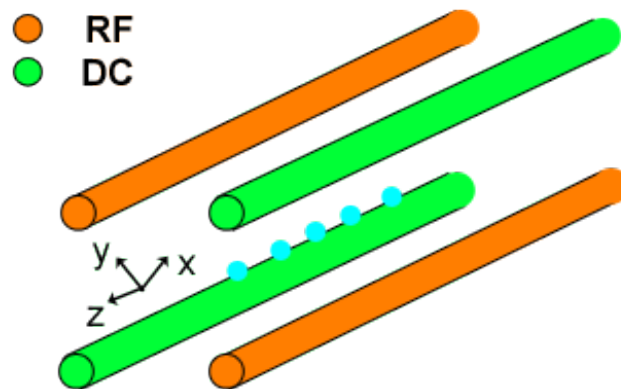


Abbildung 2.1: Einfachste Form einer Paulfalle mit vier um die zentrale Achse symmetrisch angeordneten Metallstäben. Die beiden orangenen Elektroden sind an eine Wechselspannung angeschlossen. An die anderen beiden Elektroden ist eine Gleichspannung angelegt, um das Ion radial, also hier in der x-y-Ebene, einzuschließen.

gegenüberstehende an eine Radiofrequenzspannung (RF) angeschlossen, weshalb sie im Folgenden als Radiofrequenzelektroden bezeichnet werden. Die beiden anderen Elektroden liegen auf Massenpotential und werden als Gleichspannungselektroden (DC) bezeichnet. Mit einem Massenfilter können geladene Teilchen, in Abhängigkeit vom Verhältnis der Masse zur Ladung, beim Durchflug durch den Massenfilter auf der Symmetrieachse der Anordnung gehalten werden, während andere Massen radial ausgelenkt werden und eine gekrümmte Ionenbahn haben. Der Massenfilter kann als zweidimensionale Falle mit Einschluss in x und y Richtung betrachtet werden (vergleiche Abbildung 2.1). Die Fal-

## 2 Theoretische Grundlagen

lenpotentiale in den radialen Richtungen werden auf Grund der Elektrodenanordnung in guter Näherung mit einem quadratischen Ansatz beschrieben:

$$\Psi(r_x, r_y) = \sum_i \Psi_{0,i} \alpha_i \left( \frac{r_i}{\bar{r}} \right)^2, \quad i = x, y \quad (2.1)$$

Hierbei steht  $\Psi_{0,i}$  für die Potentialstärke auf der Oberfläche der Radiofrequenzelektroden,  $\alpha_i$  für die Geometriefaktoren, die den Durchgriff der Elektroden widerspiegeln,  $r_i$  für den Abstand von der Mittelachse der Falle und  $\bar{r}$  für den Abstand der Radiofrequenzelektroden von der Fallennachse. Aus dieser Gleichung, die nur innerhalb der Fallenelektroden gültig ist, ergibt sich in der x-y-Ebene ein harmonischer Einschluss, was für die weitere Beschreibung des Schwingungsverhaltens der gefangenen Teilchen vorteilhaft ist. Wir behandeln daher zunächst nur diese x-y-Richtung. Ein zeitabhängiges Potential ist nötig, um die Ionen einzufangen, da die Laplacegleichung

$$\Delta \Psi = \nabla^2 \Psi = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi = 0 \quad [\text{PS56}] \quad (2.2)$$

keinen statischen Einschluss erlaubt. Um dies doch zu erreichen, wird folgendes Potential für die beiden Radiofrequenzelektroden genutzt:

$$\Psi_{rf} = V_0 \cos(\omega_{rf} t) + U_{r,0} \quad (2.3)$$

$V_0$  ist die Amplitude der Wechselspannung, die angelegt wird,  $\omega_{rf}$  die Frequenz, mit der diese schwingt, und  $U_{r,0}$  ist die Gleichspannungsdifferenz im Verhältnis zur Masse. Nun kann die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{Q}{m} \Delta \Psi(r_x, r_y), \quad (2.4)$$

verwendet werden, um die Bewegung eines Ions zu berechnen, wobei  $Q$  die Ladung des Teilchens und  $m$  die Masse des Teilchens beschreibt. Wird nun das Potential 2.3 in 2.4 eingesetzt, ergibt sich:

$$\frac{d^2 r}{dt^2} + \sum_{i=x,y} \frac{2Q\alpha_i}{m\bar{r}^2} (U_i + V_i \cos(\omega_{rf} t)) r_i = 0 \quad (2.5)$$

## 2.1 Dynamischer Einschluss im linearen Paulschen Massenfilter

Hierbei ist  $V_i = V_0$  und  $U_i = U_{r,0}$ . Durch Substitution wird die Mathiegleichung, das heißt eine Beschreibung in dimensionslosen Variablen, erreicht:

$$\frac{du^2}{d\zeta^2} + \sum_{i=x,y,z} (a_i - 2q_i \cos(2\zeta))u = 0 \quad (2.6)$$

Dabei wurden die Substitutionen

$$\zeta = \frac{\omega_{rf}}{2}t \quad (2.7)$$

$$a_i = -\frac{4\alpha_{i,s}QU_i}{m\bar{r}^2\omega_{rf}^2} \quad (2.8)$$

$$q_i = \frac{2\alpha_{i,rf}QV_i}{m\bar{r}^2\omega_{rf}^2} \quad (2.9)$$

und die Aufspaltung

$$\alpha_i (U_i + V_i \cos(\omega_{rf}t)) = (\alpha_{i,s}U_i + \alpha_{i,rf}V_i \cos(\omega_{rf}t)) \quad (2.10)$$

der Geometriefaktoren benutzt.  $a_i$  und  $q_i$  sind die Stabilitätsparameter, da sie mit  $a_i \ll q_i \ll 1$  die stabilen Lösungen der Mathiegleichung vorgeben [Roo00, McL51, MS54]. Mit der ersten Ordnung in  $q_i$  (auf Grund von  $q_i \ll 1$  können weitere Ordnungen vernachlässigt werden) kann eine Lösung angenähert werden zu

$$r_i(t) = r_{i,0} \cos(\omega_i t + \Phi_i) \left( 1 + \frac{q_i}{2} \cos(\omega_{rf}t) \right) \quad (2.11)$$

Hierbei wurde

$$\omega_{radial,i} = \beta_i \frac{\omega_{rf}}{2} \quad , \quad i = x,y \quad (2.12)$$

und

$$\beta_i = \sqrt{a_i + \frac{q_i^2}{2}} \quad , \quad i = x,y \quad (2.13)$$

verwendet. Die Bewegung  $r_i(t)$  ist für jede Raumrichtung von einer harmonischen Schwingung, der sogenannten Sekularbewegung, mit der Fallenfrequenz  $\omega_i$  dominiert. Darauf aufmoduliert ist eine schnelle, durch die Radiofrequenz  $\omega_{rf}$  erzwungene, Schwingung, die Mikrobewegung. Diese zeigt mit zunehmenden Abstand von der Symmetrieachse eine steigende Amplitude, welche beim Erreichen der Achse verschwindet.

Für das Fallenpotential wird  $\Psi_{rf}$  für  $\Psi_{0,i}$  in Gleichung 2.1 eingesetzt. Wenn das Quadrupol-Potential symmetrisch um die Fallen-Achse ist, vereinfachen sich die Fallenpa-

## 2 Theoretische Grundlagen

parameter zu

$$a_x = a_y = \frac{8QU_{r,0}\alpha_{i,s}}{m\bar{r}^2\omega_{rf}} \quad (2.14)$$

$$q_x = -q_y = -\frac{4QV_0\alpha_{i,rf}}{m\bar{r}^2\omega_{rf}} \quad (2.15)$$

Die Aufspaltung der Geometriefaktoren wurde vorgenommen, da das wechselnde Vorzeichen von  $V_0$  zwischen x- und y-Richtung in den Geometriefaktor übernommen wurde. Wenn nun die Mikrobewegung vernachlässigt wird und nur die harmonische Schwingung der Sekularbewegung berücksichtigt wird, ergibt sich die sogenannte Pseudopotentialnäherung:

$$\Psi = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y} m\omega_i^2 r_i^2 \quad (2.16)$$

### 2.1.1 Axialer Einschluss

Um Ionen in allen drei Raumrichtungen einschließen zu können, muss der Massenfilteraufbau aus Abbildung 2.1 um Endkappen erweitert werden. Diese sind in Abbildung 2.2 zu sehen. Die Endkappen werden auf eine positive Gleichspannung gelegt, um die Ionen entlang der Fallennachse zu fangen. Zur Beschreibung dieses DC-Potentials in z-Richtung

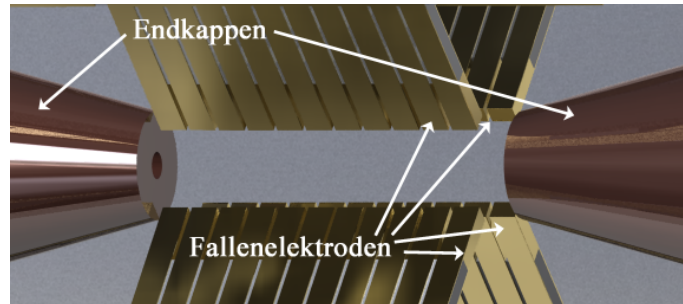


Abbildung 2.2: Durch die beiden Endkappen wird der Massenfilter zur Ionenfalle erweitert. Damit ist es möglich, Ionen in allen drei Raumrichtungen einzufangen.

wird ein quadratischer Ansatz gewählt, denn das Ion wird als Ruheposition die Stelle des minimalen axialen Potentials suchen:

$$\Psi(r_z) = \sum \Psi_{0,z}\alpha_z \left(\frac{z}{z_0}\right)^2 \quad (2.17)$$

Dabei entspricht  $\Psi_0$  der Potentialstärke der Gleichspannung auf den Endkappen,  $z$  dem Abstand vom Fallenmittelpunkt in z-Richtung und  $z_0$  ist der Abstand der Gleichspan-



## 2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden

nungselektroden vom Fallenmittelpunkt. Wenn für den Moment die axialen Radiofrequenzfelder vernachlässigt werden und das Potential mit  $V_i = 0$  und  $U_i = U_{s,0}$  in Gleichung 2.8 eingesetzt wird, so ergibt dies

$$q_z = 0 \quad (2.18)$$

$$a_z = -(a_x + a_y) = \frac{8QU_{s,0}\alpha_{z,s}}{\bar{r}^2\omega_{rf}} \quad (2.19)$$

Aus der Laplacegleichung folgen die Bedingungen  $a_x = a_y = -\frac{1}{2}a_z$  und  $q_x = -q_y$ , da  $\alpha_{x,s} + \alpha_{y,s} + \alpha_{z,s} = 0$  und  $\alpha_{x,rf} + \alpha_{y,rf} = 0$  ( $\alpha_{z,rf}$  entfällt, da in dieser Richtung keine Wechselfeldspannung anliegt). Somit gilt auch  $\alpha_{z,s} = 2 \cdot \alpha_{x,s} = 2 \cdot \alpha_{y,s}$  und die axiale Fallenfrequenz ist gegeben durch

$$\omega_{axial} = \beta_z \frac{\omega_{rf}}{2} \quad (2.20)$$

mit

$$\beta_z = \sqrt{a_z} \quad (2.21)$$

da  $q_z = 0$  ist. Werden der radiale und der axiale Teil nun zusammengesetzt, entsteht für ein einzelnes Ion in der Pseudopotentialnäherung ein Potential mit harmonischen Oszillatortermen in den drei orthogonalen Richtungen x,y,z der Form:

$$\Psi(r_\nu(t)) = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} m\omega_i^2 r_i(t)^2 \quad (2.22)$$

Da in der Regel mit mehr als einem Ion in der Falle gearbeitet wird, muss das Potential noch um den Coulomb-Abstoßungsterm erweitert werden, und es ergibt sich:

$$\Psi(r_\nu(t)) = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \sum_{\nu=1}^N m\omega_i^2 r_{i,\nu}(t)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^N \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq \nu}}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{r_\nu(t) - r_n(t)} \quad (2.23)$$

Hier wird  $\nu$  für den Index des Ions,  $N$  für die Gesamtzahl an Ionen,  $Z$  für den Ionisationsgrad des Ions,  $e$  für die Ladung eines Elektrons und  $\epsilon_0$  für die elektrische Feldkonstante eingeführt.

## 2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden

Mit Hilfe der Gleichung 2.23 können die Gleichgewichtspositionen (GP) von mehreren Ionen im Fallenpotential bestimmt werden. In Abschnitt 2.2.1 wird besprochen, wie die GP berechnet werden und welche Effekte dabei berücksichtigt werden müssen. Anschließend

## 2 Theoretische Grundlagen

werden in Abschnitt 2.2.2 die Eigenschwingungen des Kristalls aus den GP der Ionen in ihrer linearen Konfiguration bestimmt. Am Ende des Kapitels wird in Abschnitt 2.2.3 untersucht, durch welche kritischen Fallenparameter die Kristallkonfiguration beschrieben werden kann. Dabei treten strukturelle Phasenübergänge auf, wie etwa der Übergang von einem linearen zu einem Zickzack-Kristall. Diese Kristallphasen bringen eine ganze Reihe neuer, interessanter, physikalischer Eigenschaften mit sich.

### 2.2.1 Gleichgewichtszustände im Pseudopotential

In diesem Abschnitt wird dem Ansatz, der erstmals 1998 von D.F.V. James beschrieben wurde [Jam98], gefolgt, um die GP der Ionen aus dem Potential berechnen zu können. Hierbei werden die Fallenspannungen so gewählt, dass  $\omega_z \ll \omega_x, \omega_y$ , wodurch die Auslenkung der Ionen in x- und y-Richtung vernachlässigt werden kann und somit nur die z-Position berücksichtigt werden muss (darum gilt ab hier  $i = z$ ). Ausgehend von dem Potential für die Ionen in einer linearen Konfiguration und unter der Annahme, dass nur kleine Abweichungen von den GP auftreten, was bei ausreichender Kühlung und Kompensation der Fall ist, können die Positionen der Ionen umgeschrieben werden zu:

$$r_{z,\nu}(t) \approx r_{z,\nu}(0) + q_{z,\nu}(t) \quad (2.24)$$

wobei  $r_{z,\nu}(0)$  die GP des  $\nu$ -ten Ions ist und  $q_{z,\nu}(t)$  eine Auslenkung desselben Ions aus der GP darstellt, welche in der weiteren Rechnung zunächst vernachlässigt wird. Durch diese Annahme kann jetzt das Potential 2.23 verwendet und die GP berechnet werden, indem folgende Gleichung gelöst wird:

$$\left[ \frac{\partial \Psi}{\partial r_{z,\nu}} \right]_{r_{z,\nu}=r_{z,\nu}(0)} = 0 \quad (2.25)$$

Mit Hilfe der Längenskala  $l$ ,

$$l^3 = \frac{Z^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 m \omega_z^2} \quad (2.26)$$

kann mit der axialen Fallenfrequenz  $\omega_z$  die Gleichung 2.25, durch Einführen der dimensionslosen GP  $u_\nu = \frac{r_{z,\nu}(0)}{l}$ , in  $N$  gekoppelte Gleichungen für  $u_\nu$  umgeschrieben werden:

$$\left[ \frac{\partial \Psi}{\partial r_{z,\nu}} \right]_{r_{z,\nu}=r_{z,\nu}(0)} = u_\nu - \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq \nu}}^N \frac{u_\nu - u_n}{|u_\nu - u_n|^3} = 0 \quad (2.27)$$

## 2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden

Daraus lassen sich numerisch die Ionenpositionen bestimmen. Für einen Kalziumkristall mit 16 Ionen in einer Falle mit der axialen Fallenfrequenz von  $\omega_z = 2\pi \cdot 160 \text{ kHz}$  ergibt sich  $l = 15,1 \mu\text{m}$ . Der simulierte Kristall kann in Abbildung 2.3 betrachtet werden. In der Arbeit von H. Landa [LDRR12b] konnte gezeigt werden, dass die Mikrobewegungsamplitude mit

$$\frac{q_i}{2} \cdot r_i \quad (2.28)$$

berechnet werden kann. Damit ergibt sich eine Abweichung durch die Mikrobewegung in axialer Richtung von maximal 0,6 nm bei den hier beschriebenen Einstellungen.

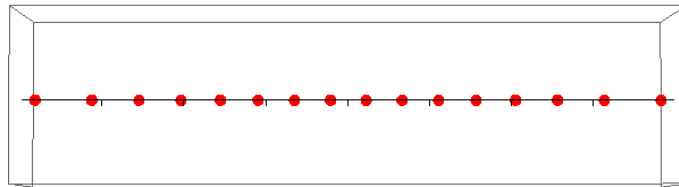


Abbildung 2.3: Wird eine axiale Fallenfrequenz von 160 kHz verwendet, ergibt sich für 16 Ionen bei mindestens 8,2facher radialer Frequenz der hier dargestellte Kristall. Die zur Mitte des Kristalls kleiner werdenden Ionenabstände sind deutlich zu erkennen.

### 2.2.2 Quantisierte Schwingungsmoden im Pseudopotential

Wie in der Arbeit von James [Jam98], soll die Schwingungsstruktur des Kristalls aus seinen GP hergeleitet werden. Wenn die Auslenkungen  $\delta r$  von der Ruhelage klein genug sind, kann die Mikrobewegung vernachlässigt und das Potential angenähert werden. In den meisten linearen Paulfallen ist dies für einige Mikrometer um die GP gegeben, während die Wellenfunktion eines Ions typischerweise eine Größe von 10 nm hat. Um übersichtlichere Gleichungen zu erhalten, werden hier die Kristalle auf lineare Kristalle beschränkt, das heißt, dass die Ionen entlang der z-Achse angeordnet sind. Damit ergibt sich für das

## 2 Theoretische Grundlagen

Potential, indem es bis zur zweiten Ordnung um die GP Taylor-entwickelt wird

$$\begin{aligned} \Psi(r_{z,\nu}(0) + \delta r_{z,\nu}) &\approx \underbrace{\Psi(r_{z,\nu}(0))}_{=konstant} + \sum_{\nu} \underbrace{\nabla_{\nu} \Psi(r_{z,\nu})|_{r_{z,\nu}(0)}}_{=0} \delta r_{z,\nu} \\ &+ \sum_{i,j=x,y,z} \sum_{\nu,n} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(r_{z,\nu})}{\partial r_{i,\nu} \partial r_{j,n}} \Big|_{r_{z,\nu}(0), r_{z,n}(0)} \delta r_{i,\nu} \delta r_{j,n} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Der erste Term ist konstant und kann durch eine Umskalierung der Energie herausgekürzt werden. Der zweite Term muss auf Grund der Definition der GP Null ergeben (siehe Gleichung 2.25). Im dritten Term wird sowohl in  $i$  als auch in  $j$  über alle drei Raumrichtungen summiert und die Ableitung an der Stelle der GP gebildet. Wenn nun wieder auf die dimensionslosen Koordinaten  $u_{\nu}(0)$  übergegangen wird und einige Umformungen angewendet werden, ergibt sich

$$\begin{aligned} \Psi(u_{\nu}(0) + \delta u_{\nu}) &\approx \sum_{i=x,y,z} \sum_{\nu,n} \frac{1}{2} m \omega_i^2 l_z^2 \left[ \delta_{\nu,n} \left( 1 - \kappa_i c_i \sum_{l \neq n} \frac{1}{|u_n(0) - u_l(0)|^3} \right) \right. \\ &\quad \left. + (1 - \delta_{\nu,n}) \frac{\kappa_i c_i}{|u_n(0) - u_{\nu}(0)|^3} \right] \delta u_{i,\nu} \delta u_{i,n} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Hierbei ist  $\delta_{\nu,n}$  das Kronecker-Symbol und es wurden

$$\kappa_i = \left( \frac{\omega_z}{\omega_i} \right)^2, \quad c_i = 1 - 3\delta_{i,z} \quad \text{und} \quad \delta u_{i,\nu} = \frac{\delta r_{i,\nu}}{l_z} \quad (2.31)$$

eingeführt. Anhand von Gleichung 2.30 ist zu erkennen, dass die Bewegungen entlang der unterschiedlichen Hauptachsen der Falle in linearen Kristallen entkoppelt sind, dadurch kann die Entwicklung des Potentials umgeschrieben werden zu

$$\Psi(u_{\nu}(0) + \delta u_{\nu}) \approx \frac{1}{2} m l_z^2 \sum_{i=x,y,z} \omega_i \sum_{\nu,n} \Psi_{\nu,n}^i \delta u_{i,\nu} \delta u_{i,n} \quad (2.32)$$

Aus Gleichung 2.30 kann unmittelbar die Hessematrix  $\Psi_{\nu,n}^i$  des Systems abgelesen werden:

$$\Psi_{\nu,n}^i = \delta_{\nu,n} \left( 1 - \kappa_i c_i \sum_{l \neq n} \frac{1}{|u_n(0) - u_l(0)|^3} \right) + (1 - \delta_{\nu,n}) \frac{\kappa_i c_i}{|u_n(0) - u_{\nu}(0)|^3} \quad (2.33)$$

## 2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden

Die Hessematrix kann diagonalisiert werden durch die Transformation  $M^i$

$$(M^i)^T \Psi^i M^i = \Lambda^i = \text{diag}(\lambda_1^i, \dots, \lambda_N^i) \quad (2.34)$$

Dabei sind die  $\lambda_\nu^i$  die Eigenwerte von  $\Psi_{\nu,n}^i$  und die Transformationsmatrizen haben die Eigenschaft  $M^i (M^i)^T = (M^i)^T M^i = \mathbb{1}$ , sowie

$$\begin{aligned} \sum_m M_{\nu,m}^i M_{k,m}^i &= \delta_{\nu,k} \quad , \quad \sum_n M_{n,m}^i M_{n,b}^i = \delta_{m,b} \\ \text{und} \quad \sum_{n,k} (M_{n,m}^i)^T \Psi_{n,k}^i M_{k,b}^i &= \lambda_m^i \delta_{m,b} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Durch diese Transformation wird die Hessematrix  $\Psi_{\nu,n}^i$  in ein Koordinatensystem gebracht, dessen  $n$  Dimensionen den Normalschwingungen des Kristalls entsprechen. Die Frequenzen dieser Schwingungen können dann aus den Eigenwerten berechnet werden mit

$$\omega_{i,m} = \omega_i \sqrt{\lambda_m^i} \quad (2.36)$$

und die Bewegungsamplitude des  $\nu$ -ten Ions in der  $m$ -ten Schwingungsmode wird durch das Matrixelement  $M_{\nu,m}$  beschrieben. Das bedeutet, dass die Schwingungen des Kristalls vollständig durch die Eigenvektoren von  $\Psi_{\nu,n}^i$  beschrieben werden.

### 2.2.3 Kritische Fallenparameter

Bisher wurden nur eindimensionale Ionenkristalle, also Kristalle mit einer rein linearen Anordnung der Ionen entlang der Fallenachse, berücksichtigt, was durch eine gezielte Wahl der Fallenparameter erreicht wurde. Um verschiedene Parameterbereiche und die damit verbundenen Kristallkonfigurationen unterscheiden zu können, wird das Verhältnis  $\alpha$  zwischen der axialen und der unteren radialen Fallenfrequenz mit

$$\alpha = \left( \frac{\omega_z}{\omega_y} \right)^2 \quad (2.37)$$

eingeführt. Wenn nun  $\alpha$  verändert wird, durchläuft der Kristall bei bestimmten kritischen Werten strukturelle Phasenübergänge. Der erste und bekannteste Übergang ist derjenige, bei dem aus einem linearen eindimensionalen Kristall ein zweidimensionaler Zickzack-Kristall wird. Dieser Übergang tritt auf, wenn  $\alpha \geq \alpha_{\text{krit1}}$  wird. Der erste kritische Wert kann mit der empirischen Formel aus D.G. Enzer [ESG<sup>+</sup>00a] und J.P. Schiffer [Sch93]

$$\alpha_{\text{krit1}} = c \cdot (N)^\beta = 2,53 \cdot (N)^{-1,73} \quad (2.38)$$

## 2 Theoretische Grundlagen

berechnet werden. Hierbei werden die unteren Grenzen für  $c$  und  $\beta$  verwendet, da somit der Phasenübergang höchstens später eintritt als erwartet. Beim Erreichen dieses kritischen Verhältnisses durchlaufen die innersten beiden Ionen den Übergang zur Zickzack-Konfiguration. Dies liegt an der Tatsache, dass ein linearer Kristall in einem harmonischen äußeren Potential im Zentrum engere Abstände zwischen den Ionen aufweist, wie in Abschnitt 2.2.1 berechnet wurde. In diesem Zusammenhang wird von einem inhomogenen Kristall gesprochen. Dies ist auch der Grund, weshalb das kritische Frequenzverhältnis

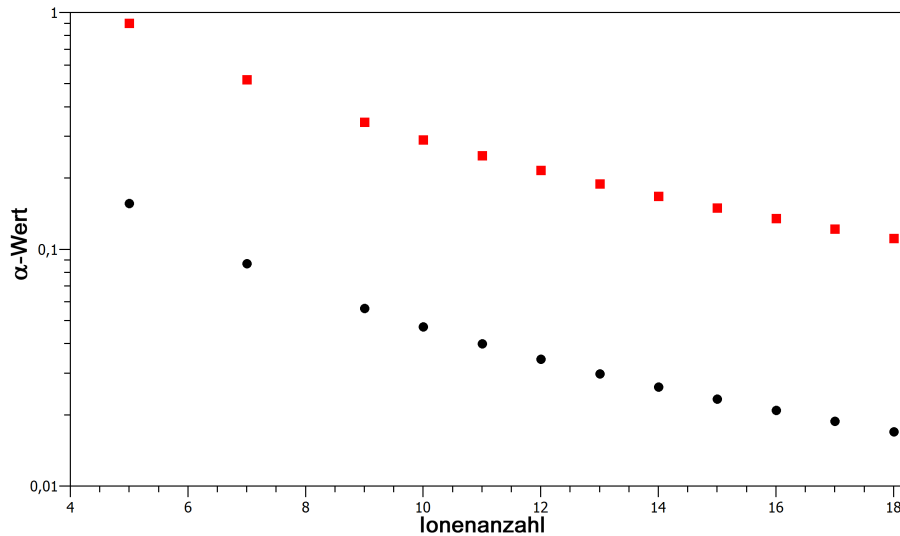


Abbildung 2.4: Aufgetragen sind die ersten beiden kritischen Fallenfrequenzverhältnisse gegen die Anzahl der Ionen. Zur besseren Veranschaulichung wurde die  $\alpha$ -Wert-Achse logarithmisch gezeichnet. Als schwarze Kreise sind die Werte von  $\alpha_{\text{krit1}}$  und als rote Quadrate die Werte von  $\alpha_{\text{krit2}}$  eingetragen. Mit zunehmender Ionenanzahl werden beide Verhältnisse immer kleiner und der Abstand der  $\alpha$ -Werte zueinander nimmt jeweils ab. Zwischen beiden  $\alpha$ -Werten ist der Bereich der Zickzack-Ionenkristalle.

von der Anzahl der Ionen abhängt. Die anderen Ionen erhöhen den tatsächlichen axialen Einschluss der inneren beiden Ionen immer weiter, je größer der Kristall wird und solange dieser noch in seiner linearen Konfiguration vorliegt. Bei  $\alpha \geq \alpha_{\text{krit2}} > \alpha_{\text{krit1}}$  erreicht der Kristall den nächsten strukturellen Phasenübergang. Die Ionenanordnung geht bei diesem Fallenfrequenzverhältnis von der Zickzack-Konfiguration in eine Konfiguration, welche eine höhere Ebenenanzahl aufweist, über. Für den zweiten Phasenübergang wurde in H. Kaufmann [Kau12] die Formel

$$\alpha_{\text{krit2}} = c \cdot (N)^\beta = 12,49 \cdot (N)^{-1,633} \quad (2.39)$$

## 2.2 Kristallstrukturen und Schwingungsmoden

bestimmt. Mit Hilfe der Formeln 2.38 und 2.39 können für jede Kristallgröße die kritischen Frequenzverhältnisse berechnet werden. In Abbildung 2.4 sind die Werte von  $\alpha_{\text{krit1}}$  und die Werte von  $\alpha_{\text{krit2}}$  als Funktion der Ionenanzahl für die Kristallgrößen, welche verwendet wurden, dargestellt.

## 2.3 Zickzack-Phasenübergang

Ausgehend von einem linearen Kristall ist der erste strukturelle Phasenübergang, der durchlaufen wird, wenn  $\alpha$  geändert wird, der des Zickzack-Phasenübergangs. Wenn das kritische Verhältnis  $\alpha_{krit1}$  zwischen der axialen und der unteren radialen Fallenfrequenz erreicht wird, beginnen die Ionen sich nicht nur als eindimensionale Reihe, sondern in einer zweidimensionalen Ebene anzuordnen. Diese Anordnung ermöglicht zum Beispiel die Untersuchung von frustrierten Spinanordnungen in Kagome-Gittern [BAO<sup>+</sup>12].

### 2.3.1 Positionen in Zickzack-Kristallen

Wie im Abschnitt 2.2.1 besprochen, können die GP des Kristalls aus dem Pseudopotential hergeleitet werden. Dieser Ansatz soll auch für Zickzack-Kristalle verwendet werden. Dabei werden weiterhin die Gleichungen aus Abschnitt 2.2.1 benutzt, um die GP zu berechnen, aber diese müssen auf drei Dimensionen erweitert werden. Das bedeutet, dass beide Summen in Gleichung 2.23 vorhanden sind und die Minima nun in allen drei Raumrichtungen mit

$$\left[ \frac{\partial \Psi}{\partial r_{i,\nu}} \right]_{r_{i,\nu}=r_{i,\nu}(0)} = 0, \quad i = x, y, z \quad (2.40)$$

gesucht werden müssen. Da zur Bestimmung der Nullstellen das lokal konvergierende Newton-Verfahren benutzt wurde, müssen die Startpositionen der Ionen zumindest in den beiden radialen Richtungen zufällig variiert und dann die Lösung mit der kleinsten Energie ausgewählt werden. Nur so kann garantiert werden, dass nicht nur ein lokales Minimum gefunden wurde. Für Frequenzen von  $\omega_x = 2\pi \cdot 1100,9 \text{ kHz}$ ,  $\omega_y = 2\pi \cdot 1388,8 \text{ kHz}$  und  $\omega_z = 2\pi \cdot 330,8 \text{ kHz}$  ergibt sich die in Abbildung 2.5 dargestellte Kristallkonfiguration:

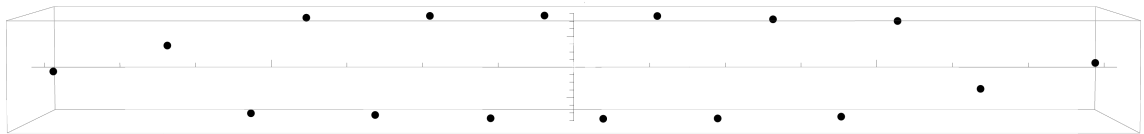


Abbildung 2.5: Mit der Pseudopotentialmethode berechnete Zickzack-Konfiguration eines Sechzehn-Ionenkristalls

Dabei wurde der Parameter  $\alpha$  mit  $\alpha = 0,0903$  verwendet. Dies entspricht 432% von  $\alpha_{krit1}$  und 64% von  $\alpha_{krit2}$  eines Sechzehn-Ionenkristalls. Dadurch entsteht ein Zickzack-Kristall, der auf zwei Dimensionen begrenzt ist und noch deutlich unter dem nächsten Phasenübergang liegt. Mit diesen Frequenzen beträgt die Längenskala  $l_z = 9,29 \mu\text{m}$  für die axiale Richtung, sowie  $l_y = 4,17 \mu\text{m}$  und  $l_x = 3,57 \mu\text{m}$  in den radialen Richtungen.



Um die GP zu berechnen, wurde hier die Mikrobewegung vernachlässigt. Die entsprechende Korrektur läge bei  $< 1\%$  (siehe Abschnitt 2.2.1). Die Werte können der Tabelle B.5 entnommen werden.

### 2.3.2 Pseudopotentialansatz

Bei der Berechnung der Schwingungsmoden des Kristalls ergibt sich folgendes Problem: Aufgrund der Struktur eines Zickzack-Kristalls ist es nicht möglich, alle Ionen im Nullpunkt der Radiofrequenzspannung des Pseudopotentials zu halten. Damit muss entweder eine zeitabhängige Differentialgleichung gelöst werden, die in Abschnitt 2.3.3 besprochen wird, oder die Positionen werden durch ihren Mittelwert genähert. Wird die Näherung verwendet, können die Schwingungsmoden wie in Abschnitt 2.2.2 berechnet werden. Wird für die Taylorentwicklung in Gleichung 2.29 die Mikrobewegung vernachlässigt, werden nur die gemittelten GP verwendet, um die Coulombabstoßung zu berechnen. Da diese nicht linear zu den Ionenabständen ist, ergeben sich für zwei- oder dreidimensionale Kristalle messbare Abweichungen in den Schwingungsfrequenzen (siehe Abschnitt 2.3.3 und Abschnitt 3.2.3). Für einen Fünf-Ionenkristall ergeben sich zum Beispiel die in Tabelle 2.1 dargestellten Frequenzen. Bei einer Wahl der Fallenfrequenzen von  $\omega_x = 2\pi \cdot 1476,5$  kHz,

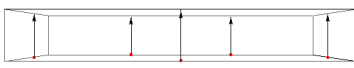
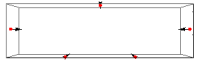


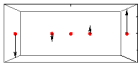
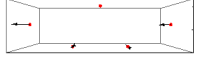
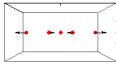
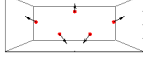
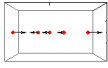
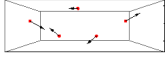
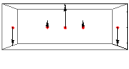
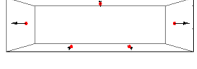
Mode	Frequenz [kHz]	Amplituden <sub>x,z</sub>	Amplituden <sub>y,z</sub>
$\omega_1$	410,5		
$\omega_2$	669,9		
$\omega_3$	675,0		
$\omega_4$	792,6		
$\omega_5$	840,3		
$\omega_6$	931,6		

Tabelle 2.1: Schwingungsmoden eines Fünf-Ionen-Zickzack-Kristalls.

## 2 Theoretische Grundlagen

$\omega_y = 2\pi \cdot 1313,2 \text{ kHz}$  und  $\omega_z = 2\pi \cdot 669,9 \text{ kHz}$  beträgt der Parameter  $\alpha = 0,260231$  und somit liegt der Kristall bei 167% von  $\alpha_{krit1}$  und 29% von  $\alpha_{krit2}$ , was einer reinen Zickzack-Konfiguration entspricht. Weitere Frequenzen sind in Tabelle 2.2 aufgelistet.



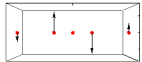
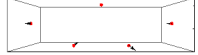
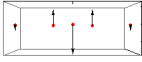
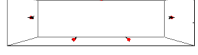

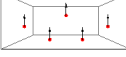









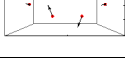
Mode	Frequenz [kHz]	Amplituden $_{x,z}$	Amplituden $_{y,z}$
$\omega_7$	963,4		
$\omega_8$	1129,8		
$\omega_9$	1313,2		
$\omega_{10}$	1315,8		
$\omega_{11}$	1476,5		
$\omega_{12}$	1528,2		
$\omega_{13}$	1548,4		
$\omega_{14}$	1559,1		
$\omega_{15}$	1867,5		

Tabelle 2.2: Höhere Schwingungsmoden eines Fünf-Ionen-Zickzack-Kristalls.

Dabei betragen die Längenskalen  $l_x = 3,43 \mu\text{m}$ ,  $l_y = 3,71 \mu\text{m}$  und  $l_z = 5,81 \mu\text{m}$ . In Abbildung 2.6 ist die spektrale Verteilung der Moden zu sehen.

Um den Einfluss der Näherung der gemittelten GP auf die Genauigkeit der berechneten Positionen und Schwingungsfrequenzen zu ermitteln, wird in Abschnitt 2.3.3 die zeitabhängige Differentialgleichung gelöst und in Abschnitt 3.2 und Abschnitt 3.2.1 werden beide Methoden mit Messungen verglichen.

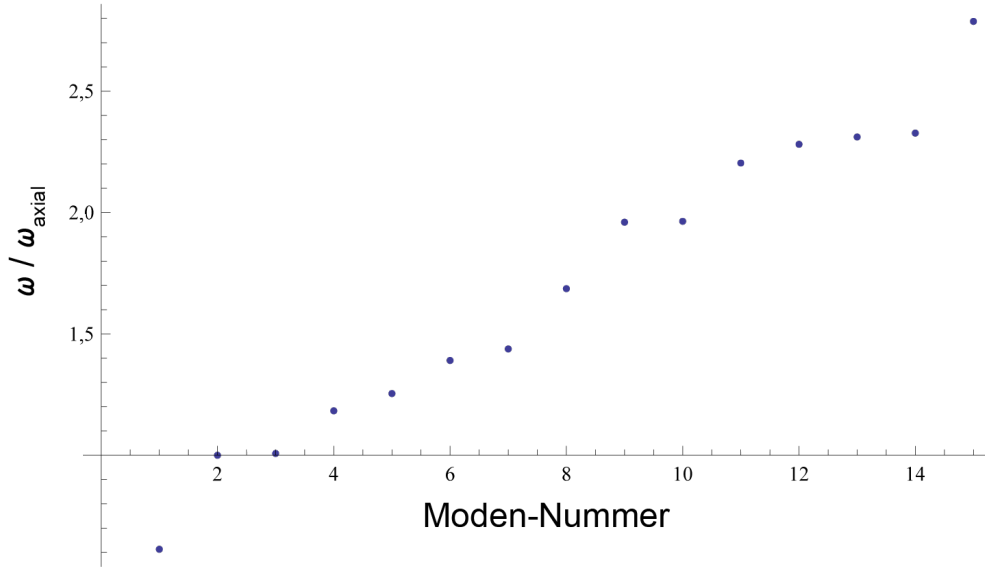


Abbildung 2.6: Mit der Pseudopotentialmethode berechnete Schwingungsmoden eines Fünf-Ionen-Zickzack-Kristalls.

### 2.3.3 Floquet-Lyapunovansatz

Soll das Pseudopotential aus Abschnitt 2.3.2 vermieden werden, muss eine zeitabhängige Lösung für die Mathieugleichung gefunden werden, um die Modenfrequenzen richtig vorherzusagen. Dies ist auf die Nichtlinearität der Coulombwechselwirkung zurückzuführen. Die Abweichung der Schwingungsfrequenzen der Pseudopotentialnäherung im Vergleich zu einer zeitabhängigen Lösung konnte erstmals von Haggai Landa berechnet werden [LDRR12a, LDRR12b]. Um die Nichtlinearität der Coulombwechselwirkung zu berücksichtigen, muss sie für die momentanen Positionen berechnet und erst im Anschluss über die resultierenden Coulombkräfte gemittelt werden. Dabei ergibt sich eine zeitabhängige Differentialgleichung, für deren Lösung der Floquet-Lyapunovansatz verwendet wird. Die folgenden Rechnungen zur Lösung der zeitabhängigen Differentialgleichung orientieren sich an den Arbeiten von Haggai Landa [LDRR12a, LDRR12b]. Um die zeitabhängige Lösung zu erhalten, wird zu Beginn in Gleichung 2.29  $t \rightarrow \frac{\Omega t}{2}$  substituiert:

$$\frac{\delta R_{i,\alpha}}{\delta t} + (a_\alpha - 2q_\alpha \cos(2t))R_{i,\alpha} - \epsilon \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \|R_i - R_j\|^{-3} (R_{i,\alpha} - R_{j,\alpha}) = 0 \quad (2.41)$$

## 2 Theoretische Grundlagen

Durch den Term  $\cos(2t)$  besitzt die Gleichung  $\pi$ -periodische Koeffizienten und es gilt  $\epsilon = \frac{4}{\Omega^2}$ . Außerdem ist sie zeitumkehr-invariant. Für eine  $\pi$ -periodische, zeitumkehr-invariante Lösung gilt die allgemeine Form

$$R_{i,\alpha}^\pi(t) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} B_{2n,i,\alpha} e^{i2nt} \quad (2.42)$$

Dabei ist  $B_{0,i}$  die mittlere Ionenposition, die nicht  $R_i^\pi(t = 0)$  entspricht. Wird nun das Potential 2.29 um die zeitabhängige Lösung  $R_i^\pi(t)$  in den Koordinaten von kleinen Oszillationen  $r_{i,\alpha} = R_{i,\alpha} - R_{i,\alpha}^\pi(t)$  entwickelt, ergibt sich die linearisierte Bewegungsgleichung

$$\ddot{r}_{i,\sigma} + (a_\sigma - 2q_\sigma \cos 2t) r_{i,\sigma} + \epsilon \sum_{j,\tau} K_{i,j}^{\sigma,\tau}(t) r_{j,\tau} = 0 \quad (2.43)$$

Hierzu wird die  $\pi$ -periodische Matrix

$$K_{i,j}^{\sigma,\tau}(t) = \left. \frac{\partial^2 V_{Coulomb}}{\partial R_{i,\sigma} \partial R_{j,\tau}} \right|_{R_i^\pi(t)} \quad (2.44)$$

verwendet, um ein linear gekoppeltes System der Ionenkoordinaten mit  $\pi$ -periodischen Koeffizienten zu erhalten. Der Wechselwirkungsanteil von Gleichung 2.43 ist von derselben Ordnung in  $\epsilon$  wie der Diagonalterm. Durch die Entwicklung der Matrix  $K_{i,j}^{\sigma,\tau}(t)$  in eine Fourierreihe ergibt sich

$$K_{i,j}^{\sigma,\tau} = (K_0)_{i,j}^{\sigma,\tau} - 2(K_2)_{i,j}^{\sigma,\tau}(t) \cos 2t - \dots \quad (2.45)$$

Mit Hilfe der beiden Matrizen

$$A_{i,j}^{\sigma,\tau} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} a_\sigma + \epsilon (K_0)_{i,j}^{\sigma,\tau}, \quad Q_{i,j}^{\sigma,\tau} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} q_\sigma + \epsilon (K_2)_{i,j}^{\sigma,\tau} \quad (2.46)$$

kann die Gleichung 2.43, unter Berücksichtigung der ersten beiden Terme der Fourierreihe und unter Verwendung der dynamischen Variablen  $u_m$ , deren Index  $m$  die beiden Indices von  $r_{i,\sigma}$  ersetzt, umgeschrieben werden zu

$$\ddot{u} + [A - 2Q \cos 2t] u = 0 \quad (2.47)$$

Mit dieser Gleichung wird der Kristall im zeitabhängigen Potential durch linearisierte Störungen um die  $\pi$ -periodischen Lösungen beschrieben. Somit wird die gleiche Form wie in der Mathieugleichung 2.6 erreicht, nur wird die exakte Coulombwechselwirkung der Ionen untereinander berücksichtigt. Für eine höhere Genauigkeit der Lösungen können

höhere Ordnungen der Fourierreihe berechnet werden. Für einen linearen Kristall gilt  $K_2 \approx 0$ , weshalb die Pseudopotentiallösung in diesem Fall näherungsweise exakt ist. Um Gleichung 2.47 zu lösen, wird zuerst das Floquetproblem aufgestellt. Dabei ist für das Newtonsche Problem mit  $f = 3N$  Freiheitsgraden, wobei  $N$  die Anzahl der Ionen ist, das entsprechende Floquetproblem im  $2f$ -dimensionalen Phasenraum durch die Definitionen

$$\Phi = \begin{pmatrix} u \\ \dot{u} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{I}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1_f \\ -(A - 2Q\cos 2t) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

beschrieben. Hierbei ist  $1_f$  die  $f$ -dimensionale Einheitsmatrix. Die Bewegungsgleichung kann mit diesen Definitionen als

$$\dot{\Phi} = \mathbb{I}(t)\Phi \quad (2.49)$$

geschrieben werden. Diese Gleichung hat  $2f$ -unabhängige Spaltenlösungen. Eine fundamentale Lösung muss der Gleichung  $\Phi(0) = 1_{2f}$  genügen. Diese Lösung kann immer in der Form

$$\Phi(t) = \Gamma(t)e^{Bt}\Gamma^{-1}(0) \quad (2.50)$$

dargestellt werden, wobei  $\Gamma$  die Periode  $T$  von  $\mathbb{I}(t)$  hat. Folglich gilt  $\Gamma(t+T) = \Gamma(t)$ . Dabei ist die konstante Matrix  $B$  mit den charakteristischen Exponenten des Floquetproblems diagonal:

$$B = \text{diag} \{i\beta_1, \dots, i\beta_{2f}\} \quad (2.51)$$

Mit Hilfe der Floquet-Lyapunov-Transformation, die durch

$$\Phi(t) = \Gamma(t)\chi(t) \quad (2.52)$$

definiert ist, wird die Gleichung 2.49 in die zeitunabhängige Diagonalform

$$\dot{\chi} = B\chi \quad (2.53)$$

gebracht, deren Lösungen die Floquetmoden

$$\chi_\nu(t) = \chi_\nu(0)e^{i\beta_\nu t} \quad (2.54)$$

sind. Im Allgemeinen mischt  $\Gamma$  die Koordinaten  $u$  und ihre Ableitungen und ist nicht unitär. Darum wird eine Lösung verwendet, die aus zwei linear unabhängigen, komplex

## 2 Theoretische Grundlagen

konjugierten Vektoren besteht

$$u = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} C_{2n} \left[ b e^{i(2n+\beta)t} + c e^{-i(2n+\beta)t} \right] \quad (2.55)$$

wobei  $b$  und  $c$  die komplexen Konstanten sind, die durch die Anfangsbedingungen festgelegt werden. Unter der Annahme, dass alle Floquetmoden stabil sind, ergibt sich

$$B = \begin{pmatrix} iB & 0 \\ 0 & -iB \end{pmatrix}, \quad (B)_{f \times f} = \text{diag} \{ \beta_1, \dots, \beta_f \} \quad (2.56)$$

wobei  $\beta_j$  positiv ist für  $j = 1 \dots f$ . Mit den  $f$ -dimensionalen Vektoren  $C_{2n, \beta_j}$ , die aus Gleichung 2.55 hergeleitet werden, kann die Matrix  $U$

$$(U)_{f \times f} = \left( \sum C_{2n, \beta_j} e^{i2nt} \dots \right) \quad (2.57)$$

sowie die Matrix  $V$

$$(V)_{f \times f} = \left( i \sum (2n + \beta_j) C_{2n, \beta_j} e^{i2nt} \right) \quad (2.58)$$

definiert werden, mit deren Hilfe die Floquet-Lyapunov-Transformation auf die kanonische Form

$$\Gamma(t) = \begin{pmatrix} U & U^* \\ V & V^* \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{-1}(t) = \begin{pmatrix} iV^\dagger & -iU^\dagger \\ -iV^t & iU^t \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

gebracht werden kann. Damit ergeben sich die Variablen

$$\chi = \begin{pmatrix} \xi \\ \varsigma \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

wobei  $\xi$  der neue  $f$ -dimensionale Vektor der Koordinaten ist und  $-i\varsigma$  die neuen konjugierten Impulse sind. Dadurch ergeben sich die zeitabhängigen Moden

$$\xi_j(t) = \xi_j(0) e^{i\beta_j t}, \quad \varsigma_j(t) = \varsigma_j(0) e^{-i\beta_j t} \quad (2.61)$$

Aus den  $\beta_j$  werden die Eigenschwingungen des Kristalls erreicht. In Abschnitt 3.2.1 werden die mit der Pseudopotentiallösung und der Floquet-Lyapunov-Methode berechneten Positionen und Schwingungsmoden mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Bereits für ein einzelnes Ion können Abweichungen von der Pseudopotentiallösung auftreten. Bei starker Anregung einer Schwingungsmoden ergibt sich zum Beispiel für die Amplitude in Abhängigkeit von der Schwingungsfrequenz keine Lorenzkurve mehr, statt-

dessen liegt das Maximum, je nach Richtung aus der die Resonanz vermessen wird, bei einem anderen Wert. Dieses Verhalten wird durch das Duffing-Oszillator-Modell beschrieben und eine genaue Untersuchung davon kann in der Arbeit von R. Ozeri [AKG<sup>+</sup>10] nachgelesen werden.

## 2.4 Defekte in Ionenkristallen

Wie in der Einleitung bereits erwähnt wurde, treten topologische Defekte in einer Vielzahl von Systemen auf, wie bei den Domänen von geordneten Molekülen beim rapiden Abkühlen von Flüssigkristallen, bei Vortices in flüssigem Helium und selbst vermutlich bei kosmischen Strings kurz nach der Entstehung des Universums. In all diesen verschiedenen Systemen sorgen die Defekte für eine prinzipielle Änderung des physikalischen Verhaltens. Im Modellsystem der Ionenkristalle unterscheiden wir zwischen zwei grundlegenden Arten von Defekten. Einerseits gibt es die Massendefekte, bei denen es sich um ein oder mehrere Ionen handelt, die einem anderen Element als die restlichen Ionen des Kristalls angehören. Dadurch ergeben sich andere radiale Eigenfrequenzen der Schwingungen. Im zweiten Fall können in zwei- oder dreidimensionalen Kristallen strukturelle Defekte beobachtet werden. Dabei befinden sich verschiedene Bereiche eines Kristalls in unterschiedlichen Grundzuständen getrennt durch einen oder mehrere Defekte. Beide Grundzustände sind energetisch entartet, weisen jedoch inkompatible Ionenanordnungen auf, sodass nach der Symmetriebrechung an den Grenzflächen strukturelle Defekte entstehen.

## 2.5 Gemischte Ionenkristalle

Neben dem Übergang in die Zickzack-Phase haben zum Beispiel Ionen eines anderen Elements einen Einfluss auf die Schwingungsmodenstruktur und die Form des Kristalls. Dabei wurden außer den von uns standardmäßig genutzten  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen noch Ionen eines anderen Elements gefangen, was bei geeigneter Wahl der Fallenparameter problemlos möglich ist. Für viele Experimente sind diese gemischten Ionenkristalle nötig. So erlauben sie etwa die Benutzung von Elementen, die schwer oder gar nicht lasergekühlt werden können, aber auf Grund anderer Eigenschaften genutzt werden sollen, wie beispielsweise Aluminium in der Quantenlogikuhr [CHK<sup>+</sup>10, RHS<sup>+</sup>08], Antiwasserstoff zur Bestimmung der Schwerebeschleunigung von Antimaterie [HKD<sup>+</sup>14] oder Stickstoff zur Erzeugung von Farbzentren [JGBW<sup>+</sup>16]. In gemischten Ionenkristallen findet das sympathetische Kühlen Anwendung.

### 2.5.1 Sympathetisches Kühlen

Beim sympathetischen Kühlen handelt es sich um das Kühlen von einem oder mehreren ungekühlten Ionen einer anderen Spezies (im weiteren Verlauf werden diese als dunkle Ionen bezeichnet), durch eines oder mehrerer lasergekühlte Ionen (von hier an als helle Ionen bezeichnet). Für diese dunklen Ionen sind keine Kühllaser vorhanden oder werden nicht genutzt. Dabei findet der thermische Ausgleich zwischen den hellen und den dunklen Ionen über die gemeinsamen Schwingungsmoden und somit über die Coulombwechselwirkung statt. Je größer dabei die Bewegungsamplitude der hellen Ionen ist, umso leichter lässt sich diese Mode kühlen. So sind etwa in einer linearen Konfiguration des Kristalls die radialen Moden der dunklen Ionen sehr schwer zu kühlen, da die Auslenkung der hellen Ionen durch diese Moden sehr gering ist und somit die Überlappung mit den Kühllasern gegen null geht. Ein ähnliches Problem tritt auf, wenn die Massendifferenz zwischen den hellen und den dunklen Ionen relativ groß wird. Für den Fall, dass die hellen Ionen deutlich schwerer als die dunklen Ionen sind, bewegen sich die hellen Ionen kaum und es ergibt sich dasselbe Problem wie bei den Radialmoden. Im anderen Fall, also dass die hellen Ionen sehr viel leichter als die dunklen Ionen sind, werden die hellen Ionen schon von sehr kleinen Anregungen der dunklen Ionen so stark zu Schwingungen angeregt, dass das Kühlen schwierig bis unmöglich wird [WAMS12].

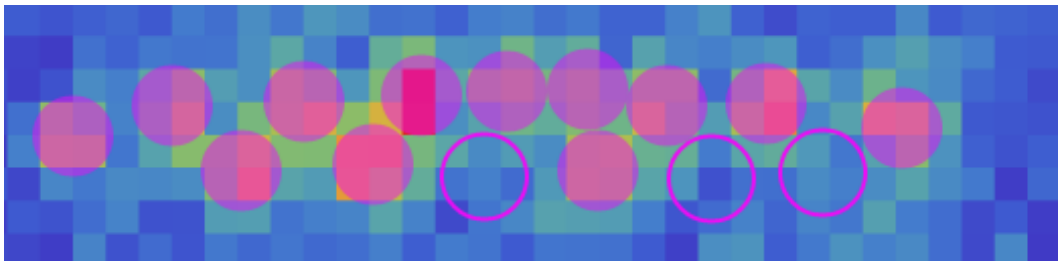


Abbildung 2.7: Fluoreszenzaufnahme eines gemischten Ionenkristalls. Die lila gefüllten Kreise verdeutlichen die Position eines hellen Ions, die lila umrandeten Kreise stellen die ungefähre Position eines dunklen Ions dar.

## 2.6 Schwingungen in Kristallen mit Defekten

Wie in den Arbeiten von H. Landa [LMR<sup>+</sup>10, LRB<sup>+</sup>13] gezeigt wurde, verändern Defekte das Schwingungsmodenspektrum eines Kristalls. Dabei entstehen lokale Schwingungsmoden, die, je nach Art des Defekts, deutlich unter- oder oberhalb der anderen Schwingungsmoden liegen. Dementsprechend wirken Defekte entweder als Phononensenke



oder Barriere. Um diese Effekte beobachten zu können, kann die Seitenbandspektroskopie angewendet werden (siehe Abschnitt 3.7). Dies ermöglicht es zusätzlich, die Defekte auf der  $\mu s$  Zeitskala zu detektieren.

### 2.6.1 Lokale Schwingungsmoden

Wenn sich ein Defekt in der Kristallstruktur befindet, wird die Schwingungsmodenstruktur des gesamten Kristalls verändert. Dabei entstehen lokale Moden, bei denen sich nur die Ionen des Defekts bewegen. Erste theoretische Berechnungen für einen zweidimensionalen Kristall konnten diese Moden vorhersagen [LMR<sup>+</sup>10]. Diese Moden entsprechen Formänderungen des Defekts und sind meistens durch eine Energielücke von den anderen gemeinsamen Schwingungsmoden des gesamten Kristalls getrennt [LRB<sup>+</sup>13]. Ein Beispiel für die Energielücke der Defektmoden ist in Abbildung 2.8 zu sehen. Dabei entsteht zum

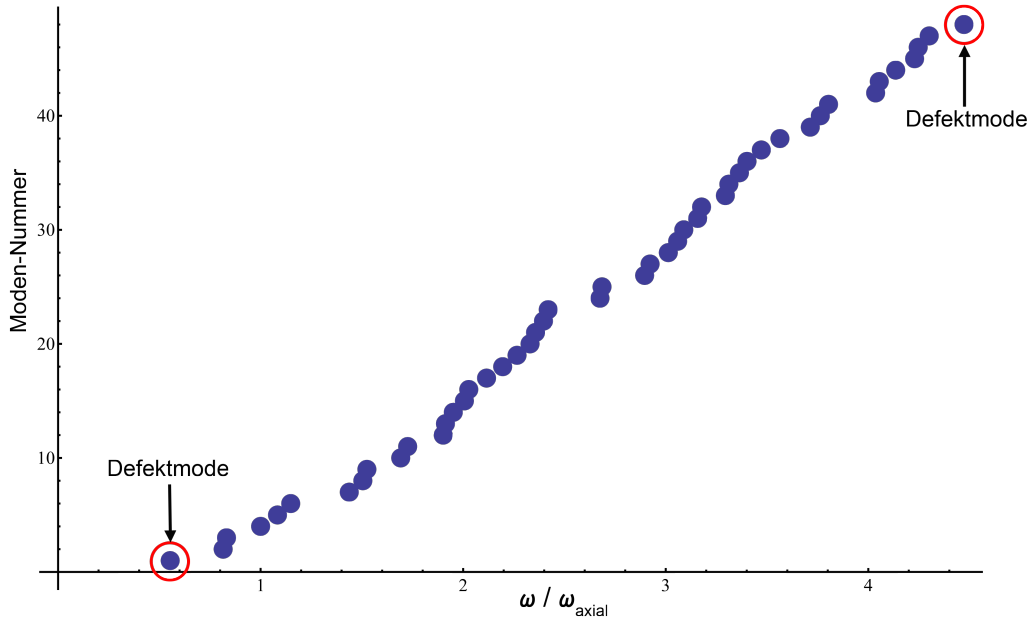


Abbildung 2.8: Schwingungsmodenspektrum eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt. Die einzelnen Moden sind nach ihrer aufsteigenden Frequenz sortiert und die daraus resultierende Modennummer ist über dem Verhältnis der Modenfrequenz zur axialen Schwerpunktsmodenfrequenz aufgetragen. Die untere lokale Defektmode und die obere lokale Defektmode sind rot umrandet. Die Lücke zum Rest des Schwingungsmodenspektrums kann deutlich erkannt werden.

Beispiel die unterste lokale Mode durch die fast isotropen Radialfrequenzen. Bei allen Messungen lag die radiale Anisotropie zwischen  $1,03 \leq \alpha_{\text{aniso}} \leq 1,13$  (siehe Abschnitt 2.7.2).

## 2 Theoretische Grundlagen

Dadurch können sich die Ionen des Defekts bei ihrer Schwingung weiter vom Kristall weg und auseinander bewegen, wie in Abbildung 2.9 zu sehen ist, und somit wird am wenigsten Energie benötigt. Wie zuvor für die Zickzackmoden gezeigt wurde, ist auch bei den lokalen Defektmoden damit zu rechnen, dass die tatsächliche Frequenz von den hier, mit der Pseudopotentialmethode berechneten Frequenzen abweicht, da der Einfluss der Mikrobewegung nicht zu vernachlässigen ist. Für die lokalen Moden gibt es Hinweise darauf, dass die Kohärenzzeit von Anregungen in diesen Moden überraschend lang für dopplergekühlte Kristalle ist [LMR<sup>+</sup>10]. Auf Grund ihrer Energielücke zu den anderen Schwingungsmoden und bei der richtigen Wahl der Fallenparameter können die lokalen Moden gemessen und manipuliert werden, und somit wird ein Zugang zu den langen Kohärenzzeiten für Gatteroperationen bei hohen Kristalltemperaturen ermöglicht.

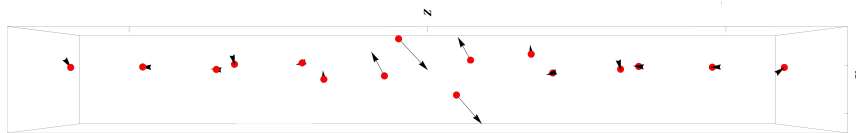


Abbildung 2.9: Unterste Schwingungsmode eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt. Die Pfeile geben die momentane Bewegungsrichtung der Ionen und deren Amplitude an. Es ist zu sehen, dass sich nur die Ionen, die den Defekt bilden, deutlich bewegen.

### 2.6.2 Peierls-Nabarro-Potential und Defektformen

Das Peierls-Nabarro-Potential ist das effektive Potential, das einen Defekt beeinflusst, erzeugt durch den Falleneinschluss und die Energie, die benötigt wird, um den Defekt um ein Ion weiter nach rechts oder links im Kristall zu bewegen. Es verhindert, dass der Defekt in einen der Grundzustände (Zickzack oder Zackzick) zerfällt, wodurch dann metastabile Zustände entstehen, die beobachtet werden können. Mit dem Peierls-Nabarro-Potential kann nicht nur die Stabilität, sondern auch die Bewegung der Defekte im Kristall beschrieben werden. In Abbildung 2.10 sind mehrere Peierls-Nabarro-Potentiale zu sehen [PNB<sup>+</sup>13], die für unterschiedliche radiale Einschlüsse berechnet wurden. Es ist zu erkennen, dass je nach Wahl der Parameter größere oder kleinere Potentialwälle erzeugt werden. An den Punkten A bis E wurden die Energie und die Form der Defekte betrachtet. In Abbildung 2.11 ist ein simuliertes Peierls-Nabarro-Potential zu sehen [LRB<sup>+</sup>13], das in etwa einer Vergrößerung eines Potenzialtopfs aus Abbildung 2.10 entspricht. Hier ist dargestellt, wie sich die Form und die benötigte Energie des Defekts verändert, während der Defekt sich durch den Kristall bewegt. Der grüne Pfeil entspricht der Energie, die der

## 2.6 Schwingungen in Kristallen mit Defekten

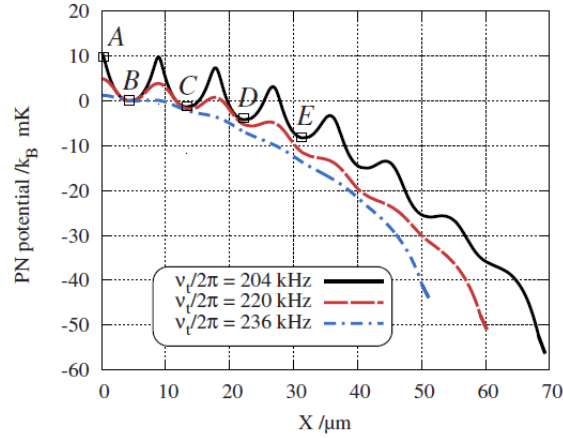


Abbildung 2.10: Simuliertes Peierls-Nabarro-Potential für einen Kristall aus 30  $\text{Yb}^+$ -Ionen. Entnommen aus [PNB<sup>+</sup>13].

Defekt aufbringen muss, um sich weiter nach links zu bewegen, wohingegen der rote Pfeil der Energie entspricht, die der Defekt gewinnt, wenn er sich weiter nach rechts bewegt.

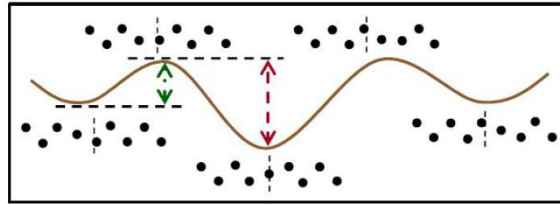


Abbildung 2.11: Simuliertes Peierls-Nabarro-Potential. Entnommen aus [LRB<sup>+</sup>13].

Die Tiefe des Peierls-Nabarro-Potentials hängt von der radialen Anisotropie ab, da die Anisotropie festlegt, wie stark die Defekte auf die Kristallebene begrenzt sind. Bei einer kleinen Anisotropie können sich die Defekte in die dritte Raumrichtung entwickeln, um ihre Energie zu verringern, denn dadurch wird ihre Coulombenergie reduziert und somit die Energie, die der Defekt hat, um sich durch den Kristall zu bewegen. Es ergibt sich also mit einer großen radialen Anisotropie ein flaches Peierls-Nabarro-Potential, aus dem die Defekte sehr leicht entkommen können. Mit einer kleinen Anisotropie ergeben sich tiefe Peierls-Nabarro-Potentialtöpfe, wodurch Defektzustände zu einem stabilen oder zumindest metastabilen Zustand werden können. Nur in diesem Fall zerfallen die Defekte nicht, bevor sie experimentell nachgewiesen werden können, wie in Abschnitt 3.4 gezeigt wird. Um Defekte ohne einen starken Stabilisierungseinfluss des Peierls-Nabarro-Potentials beobachten zu können, müssen sie auf der Zeitskala der Defektdynamik nachgewiesen werden. Wie

dies realisiert werden kann, wird in Abschnitt 2.8.2 gezeigt. Die Gruppe um T. Schätz konnte eine experimentelle Methode zur Bestimmung der Peierls-Nabarro-Potentialtiefe entwickeln [BKB<sup>+</sup>17].

## 2.7 Der Kibble-Zurek-Mechanismus

Die strukturellen Defekte, die zwischen den entarteten Grundzuständen entstehen, können zum Beispiel beim strukturellen Phasenübergang zwischen linearen und Zickzack-Kristallen erzeugt werden. Vergleichbare Prozesse bei der Erzeugung von Defekten können beim rapiden Abkühlen von Flüssigkristallen [BCSS94], der Bildung von Vortices in flüssigem Helium [MCWD00] oder direkt beim Kristallwachstum [CLH<sup>+</sup>12] beobachtet werden. Trotz der Unterschiedlichkeit der Systeme kann die Entstehung all dieser Defekte auf ein universelles Gesetz, den Kibble-Zurek-Mechanismus (KZM) zurückgeführt werden.

### 2.7.1 Topologische Defekte und Phasenübergänge zweiter Ordnung

Kibble konnte erstmals zeigen, dass bei einer spontanen Symmetriebrechung bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung topologische Defekte erzeugt werden können [Kib76, Kib80]. Eine solche Symmetriebrechung am Phasenübergang kann die Änderung der freien Energie von einem einfachen Potentialtopf in einen sogenannten „Mexican Hat“ sein, wie er in Abbildung 2.12 zu sehen ist. Dadurch ergibt sich statt eines Grundzustandes eine ganze Reihe von Zuständen. So zum Beispiel Grundzustände mit einer unterschiedlichen Phase und damit mit unterschiedlichen Eigenschaften. Zurek gelang es zu zeigen, dass dieser Mechanismus die Defektbildung beim plötzlichen Abkühlen von flüssigem Helium über den kritischen Punkt des Phasenübergangs beschreibt [Zur85]. Somit war es nun erstmals möglich, den KZM im Labor zu überprüfen. Bei Ionenkristallen sorgt beispielsweise die Laserkühlung dafür, dass die Antwortzeit des Systems, also die Zeitspanne, die das System benötigt, um nach einer Störung auf diese zu reagieren, divergiert, wenn sich das System dem kritischen Punkt am Phasenübergang nähert (siehe gestrichelte Linie in Abbildung 2.13). Wird nun das System mit einer linearen Rampe des Kontrollparameters über den Phasenübergang getrieben, so erreicht es den Punkt (A), in dem das System nicht mehr in der Lage ist, der linearen Rampe zu folgen, da die Antwortzeit größer ist als die Zeit, die die Rampe bis zum Phasenübergang benötigt. Dadurch verhält sich das System nicht adiabatisch. In dieser Arbeit wurde die Rechnung (siehe Gleichung 2.70) auf eine lineare Rampe beschränkt, um die mathematische Beschreibung möglichst einfach zu halten. Durch den Effekt der zu großen Antwortzeit kann das System momentan vorhandene Defekte nicht ausheilen. Deshalb wird davon gesprochen, dass es eingefroren

ist. Dies gilt bis zum Punkt (B), an dem die Antwortzeit wieder kleiner als die Zeit seit dem Phasenübergang ist. Darum wird das Zeitintervall zwischen den Punkten (A) und (B) auch als Einfrierzeit bezeichnet.

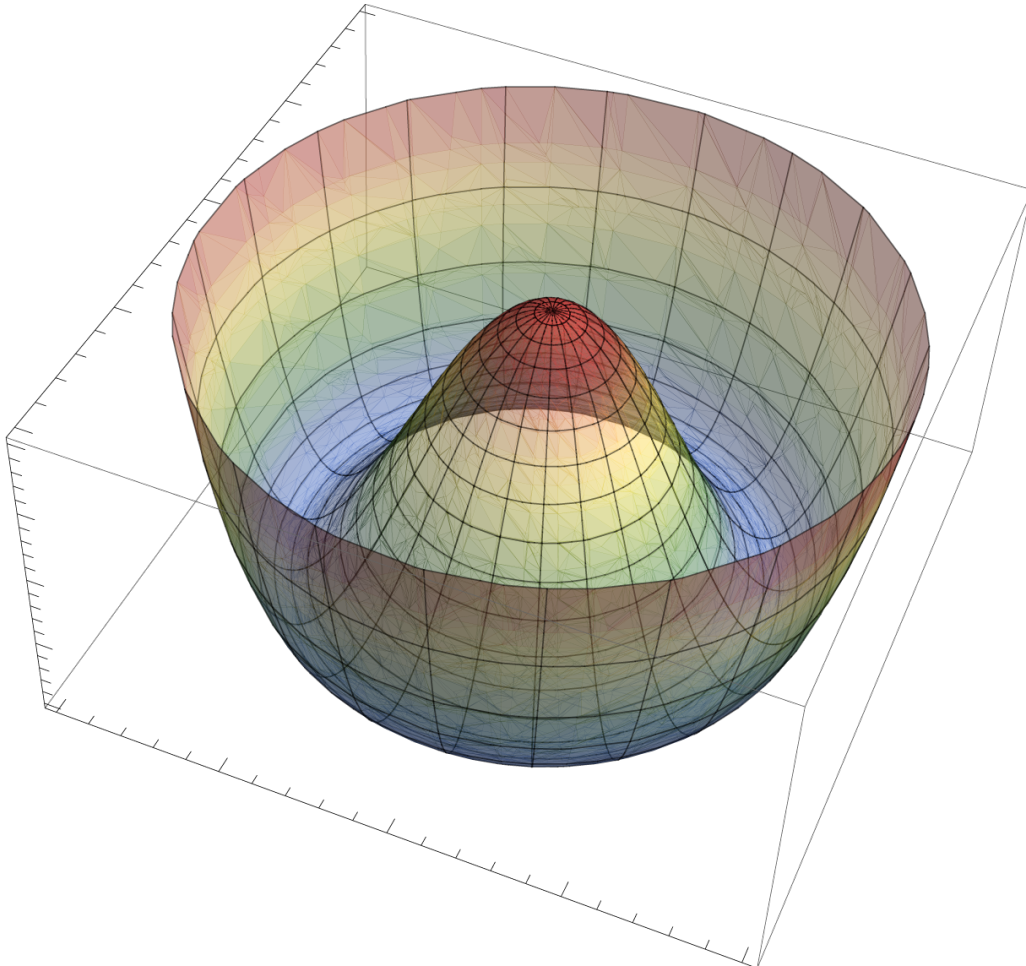


Abbildung 2.12: Skizze der freien Energie nach dem Phasenübergang.

Innerhalb dieser Zeitspanne müssen die Systemparameter so geändert werden, dass sich die Defekte in einem metastabilen oder stabilen Zustand befinden, andernfalls können sie nicht beobachtet werden. Den Gruppen von Morigi, Retzker und Plenio ist es gelungen zu zeigen, dass der KZM auch im inhomogenen System eines Ionenkristalls in einer linearen Paulfalle beobachtet werden kann [FDCM08, dDM<sup>+</sup>10, DdCM<sup>+</sup>10]. Die Inhomogenität bezieht sich auf die nicht gleichbleibenden Abstände der Ionen untereinander, ausgehend vom Rand des Kristalls zur Mitte hin, wie schon in Abschnitt 2.2.1 dargestellt wurde. Bei

## 2 Theoretische Grundlagen

Ionenkristallen können strukturelle Defekte (vergleiche Abbildung 3.23) entstehen, wenn ein linearer Kristall schnell genug über den Phasenübergang zur Zickzack-Konfiguration getrieben wird. In der Zickzack-Konfiguration stehen dem Kristall zwei energetisch entartete Grundzustände, nämlich Zickzack und Zackzick, zur Auswahl, die sich durch eine Spiegelung an der Z-Achse ineinander überführen lassen.

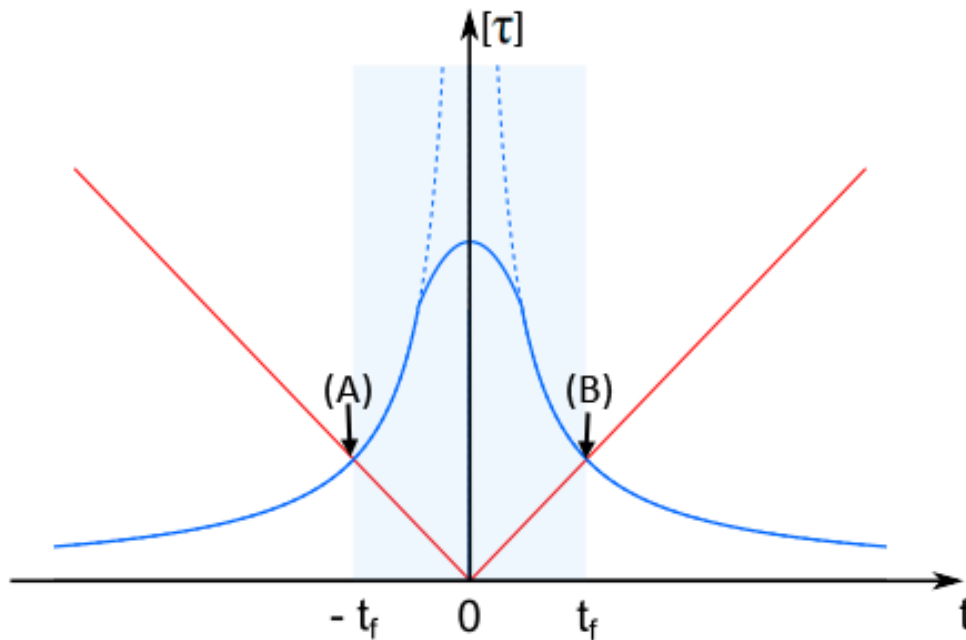


Abbildung 2.13: Skizze der Antwortzeit, wie sie am Phasenübergang divergiert. Die Punkte (A) und (B) markieren die Punkte, an denen die Antwortzeit des Systems größer wird als die Zeit, die das System bis zum Phasenübergang benötigt. In Blau ist die Antwortzeit eingezeichnet, blau gestrichelt sieht man den theoretisch divergierenden Verlauf und die roten Linien markieren den kritischen Bereich, in dem die Antwortzeit größer als die Zeit bis zum Erreichen des Phasenübergangs wird.

Wenn der Kristall nun durch den strukturellen Phasenübergang läuft, haben alle Ionen zunächst die freie Wahl, ob sie in die eine oder andere Kristallkonfiguration übergehen. Allerdings beginnt in einer linearen Paulfalle mit harmonischem Potential der Phasenübergang in der Mitte des Kristalls (siehe Gleichung 2.64), sodass die innersten beiden Ionen oder das innerste Ion (abhängig davon, ob eine gerade oder ungerade Anzahl an Ionen im Kristall vorhanden ist) zuerst entweder in die Zickzack- oder die Zackzick-Konfiguration übergehen. Benötigt die Rampe, die den Phasenübergang vorantreibt, nun

mehr Zeit, um die kritische Frequenz für die nächsten beiden weiter außen gelegenen Ionen zu erreichen als die Coulombwechselwirkung mit der Informationstransportgeschwindigkeit, die durch die Frequenz der Moden gegeben ist, um diesen Ionen die Wahl des weiter innen liegenden Coulomb-Kristalls mitzuteilen, so haben sie keine freie Wahl mehr, sondern werden in dieselbe Konfiguration übergehen. Wird der Phasenübergang jedoch schneller betrieben, als die Informationstransportgeschwindigkeit zwischen den Ionen ist, so können sie sich frei entscheiden und somit entsteht mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% pro Ionenpaar ein Defekt, bei dem die beiden gewählten Grundzustände inkompatibel sind.

### 2.7.2 KZM-Skalierungsverhalten für die Defektformation

Um die Informationstransportgeschwindigkeit mit der Geschwindigkeit des Phasenübergangs vergleichen zu können, wird zuerst die lokale kritische Frequenz benötigt. Im Abschnitt 2.2.3 wurden die kritischen Fallenfrequenzen, die Kombination aus unterer radialer Fallenfrequenz und axialer Fallenfrequenz, bei der der Kristall den Phasenübergang zur Zickzack-Konfiguration durchläuft, eingeführt. Diese hängen nicht nur von der Anzahl der Ionen, sondern auch von ihrer Position im Kristall ab. Deshalb wird die lokale kritische Frequenz  $\omega_{l_{krit}}(i)$  eingeführt. Bei dieser axialen Fallenfrequenz addieren sich die Potentiale der Falle und die der anderen Ionen in solcher Weise auf, dass das  $i$ -te Ion den Phasenübergang durchläuft. Ein relativ einfacher Weg die lokale kritische Frequenz zu berechnen, wenn mit einem linearen Kristall begonnen wird, besteht darin, den Interionenabstand  $d$  wie folgt zu berechnen

$$d_{\nu,n}(\omega_z) = r_{z,\nu}(0,\omega_z) - r_{z,n}(0,\omega_z) = (u_\nu - u_n) \cdot l(\omega_z) \quad (2.62)$$

Dabei werden wieder die GP verwendet, die zuvor berechnet wurden. Nun wird dieser Abstand mit dem kritischen Interionenabstand  $d_{krit}$  verglichen.  $d_{krit}$  ist der Abstand der innersten beiden Ionen (bei einem Kristall mit gerader Anzahl an Ionen ist es der Abstand zwischen den beiden Ionen, sonst ist es der Abstand des innersten Ions von seinen nächsten Nachbarn) bei der axialen Fallenfrequenz  $\omega_{krit,z}$ , bei der der Kristall  $\alpha_{krit1}$  erreicht hat. Folglich gilt

$$d_{krit} = d_{N/2,N/2+1}(\omega_{krit,z}) \quad (2.63)$$

Damit ergibt sich die lokale kritische Frequenz mit:

$$\omega_{l_{krit}}(i) = \sqrt{\frac{(u_i - u_{i+1})^3}{(u_{N/2} - u_{N/2+1})^3}} \cdot \omega_{krit,z} \quad (2.64)$$

## 2 Theoretische Grundlagen

Aufgrund der Tatsache, dass eine axiale Kompression der Fallenfrequenzen auf den Kristall angewendet wird, um ihn über den Phasenübergang zu bringen, und nicht eine radiale Relaxation der Fallenfrequenzen, ist die kritische radiale Frequenz von der axialen Frequenz abhängig und ändert sich mit der Zeit. Im Gegensatz zu dem theoretisch vorgeschlagenen Vorgehen von Fishman, del Campo und de Chiara [FDCM08, dDM<sup>+</sup>10, DdCM<sup>+</sup>10], bei dem die untere radiale Fallenfrequenz solange erniedrigt wird, bis sie die kritische radiale Fallenfrequenz erreicht, ändern wir unsere kritische radiale Fallenfrequenz, bis sie die aktuelle untere radiale Frequenz erreicht. Somit gilt

$$\omega_{krit,y}(t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_{krit}}} \omega_{krit,z}(t) \quad (2.65)$$

Auf den ersten Blick führt dies zu unnötig komplizierten Rechnungen, aber durch diese einfache Transformation profitiert die experimentelle Realisierung von mehreren Vorzügen. Der Erste, der genannt werden muss, ist der direkte Zugriff auf die Ionenkristalle, den wir in unserem Experiment erhalten haben, da wir für eine axiale Kompression die Endkappenelektroden benutzen konnten, welche nicht über elektrische Tiefpassfilter angesteuert sind und daher mit einer variablen schnellen Spannungsrampe belegt werden können. Dadurch vereinfacht sich nicht nur die Berechnung und Messung der tatsächlichen Potentialrampe, die der Kristall erfährt. Zusätzlich ist der experimentelle Aufbau auch nicht durch Zeitkonstanten von Filtern oder anderen elektronischen Bauteilen limitiert, wie dies etwa mit dem Resonanzschaltkreis der Radiofrequenz der Fall wäre, wenn der Phasenübergang durch Ändern des radialen Einschlusses realisiert würde. Dieser direkte Zugang ermöglicht es, die Steigung der Defektrate mit der bisher besten Genauigkeit zu vermessen. Zudem minimieren wir mit dieser Methode den Unterschied in der radialen Anisotropie zwischen der Anfangskonfiguration und der Endkonfiguration. Die radiale Anisotropie kann durch das Verhältnis

$$\alpha_{aniso} = \frac{\omega_y}{\omega_x} \quad (2.66)$$

beschrieben werden. Dieses Verhältnis ist entscheidend für die Defektstabilität, wie in Abschnitt 2.6.2 und Abschnitt 3.4 dargestellt ist. Den theoretischen Gruppen von Morigi, Retzker und Plenio ist es nicht nur gelungen, allgemein zu zeigen, dass der KZM in Ionenkristallen beobachtet werden kann, sondern es war ihnen sogar möglich, konkrete Skalierungsverhalten vorherzusagen [FDCM08, dDM<sup>+</sup>10, DdCM<sup>+</sup>10]. Der ursprüngliche KZM war für homogene Systeme beschrieben worden, bei denen alle Teile des Systems gleichzeitig den Phasenübergang erfahren. Die Beschreibung musste nun für inhomogene Systeme erweitert werden, in denen einzelne Bereiche zu unterschiedlichen Zeitpunkten den Phasenübergang durchlaufen. Die Herleitung wird aus der Arbeit von de Chiara [DdCM<sup>+</sup>10]



verwendet, aber die überdämpften Fälle werden vernachlässigt, da die Laserkühlung bei normaler Anwendung zu einem unterdämpften System führt. Im Fall des homogenen KZM sind die Abstände der Ionen konstant, was durch speziell geformte Potentiale erreicht werden kann, sodass alle Ionen gleichzeitig über den Phasenübergang gehen. Deshalb ist die Defektrate in diesem Fall nur von der Korrelationslänge beim Erreichen des Punktes (A) der Einfrierzeit abhängig. Die Defektrate ändert sich, da durch die Geschwindigkeit, mit der der Phasenübergang durchlaufen wird, die Größe der korrelierten und damit defektfreien Bereiche festgelegt wird. Die Korrelationslänge ergibt sich im homogenen Fall aus der Korrelationsfunktion  $f_k \approx \exp(-\frac{|x|}{\xi})$  [LLP80], wobei  $\xi = \frac{h}{\delta^{1/2}}$ , zu

$$\xi \approx d \left[ \frac{\omega_0^2}{\omega_{krit,y}(\omega_y - \omega_{krit,y})} \right]^{1/2} \quad (2.67)$$

mit dem Interionenabstand  $d$ , der im homogenen Fall konstant ist, dem Parameter  $\delta = \omega_y^2 - \omega_{krit,y}^2$ , der als Maß für den Abstand zum kritischen Punkt des Phasenübergangs dient, und der Informationsausbreitungsgeschwindigkeit  $h = \omega_0 d \sqrt{\log 2}$ . Dabei ist  $\omega_0$  die charakteristische Frequenz des Systems mit  $\omega_0 = \sqrt{\frac{Z^2 e^2}{m d^3}}$ . Die Dämpfung durch den Laser  $\eta$  führt zu einer charakteristischen Relaxationszeit  $\tau$  des Systems mit

$$\tau \approx \eta / \delta \quad (2.68)$$

solange das System weit genug vom kritischen Punkt entfernt ist, wenn also gilt  $\eta^2 \gg \delta$ . Mit dem Zeitintervall  $[-\tau_Q, \tau_Q]$ , in dem der Kristall den Phasenübergang durchläuft, kann nun  $\omega_y$  beschrieben werden durch

$$\omega_y = \sqrt{\omega_{krit,y}^2 + \delta(t)} \quad (2.69)$$

mit

$$\delta(t) = -\delta_0 \frac{t}{\tau_Q} \quad (2.70)$$

Somit gilt  $\delta(-\tau_Q) = \delta_0$ , wobei  $\delta_0$  der Anfangsabstand vom Phasenübergang ist. Hierbei wird eine lineare Rampe in den Fallenfrequenzen angenommen. Im Folgenden werden alle nötigen Größen definiert und das Skalierungsverhalten der Defektrate kann im unterdämpften, homogenen Fall angegeben werden mit

$$d_u \approx \frac{1}{\xi_u} = \frac{1}{d\omega_0} \left( \frac{\delta_0}{\tau_Q} \right)^{1/3} \quad (2.71)$$

## 2 Theoretische Grundlagen

Bei doppelter logarithmischer Auftragung wird eine Steigung von  $\beta = \frac{1}{3}$  erwartet, wenn die Defektrate als Funktion der Rampengeschwindigkeit aufgetragen wird. Im inhomogenen Fall, wie bei einem harmonische Potential in der linearen Paulfalle, läuft eine Phasenfront durch das System, sodass nur in dem Teil des Kristalls, der schneller vom Phasenübergang erreicht wird, als sich die Information der Ionenpositionen im Kristall ausbreitet, Defekte erzeugt werden können. Deshalb modifiziert sich die Defektrate für den unterdämpften, inhomogenen Fall zu

$$d_u \approx \frac{L}{3\omega_{lkrit,y}(N/2)^2 d^2 \omega_0^2} \left( \frac{\delta_0}{\tau_Q} \right)^{4/3} \quad (2.72)$$

mit der halben Länge des Kristalls  $L$  und einer Steigung von  $\beta = \frac{4}{3}$  für die Defektrate als Funktion der Rampengeschwindigkeit. Wenn der Großteil des Kristalls über den kritischen Punkt gebracht werden soll, muss der Kristall deutlich über  $\alpha_{krit1}$  hinaus zusammengedrückt werden. Dabei wird jedoch zu einem deutlich späteren Zeitpunkt auch mit der zweiten radialen Fallenfrequenz das Verhältnis  $\alpha_{krit1,x}$  erreicht, wobei hier beachtet werden muss, dass sich die Abstände auf Grund des Zickzack-Kristalls in der Y-Ebene deutlich vergrößern. Lag bis zu diesem Zeitpunkt bereits ein Defekt im Kristall vor, so ist bereits ein Muster eingepreßt und es ergeben sich keine weiteren Defekte, wie in Abbildung 2.14 zu sehen ist. War jedoch kein Defekt entstanden, so ist aus der X-Richtung betrachtet im-

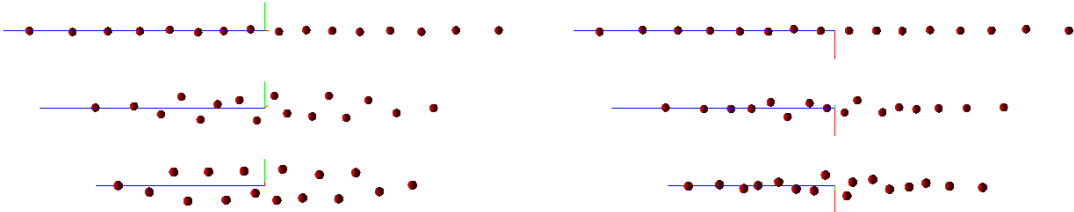


Abbildung 2.14: Simulierter Kristall zu verschiedenen Zeitschritten, der in der Y-Ebene einen Defekt aufweist.

mer noch eine lineare Konfiguration vorhanden, wie in Abbildung 2.15 zu sehen ist. Wenn nun die X-Achse das kritische Anisotropieverhältnis erreicht, ergibt sich hier eine zweite Chance einen Defekt zu erzeugen. Da unsere Rampe auch in diesem Bereich noch linear ist, ergibt sich dieselbe Wahrscheinlichkeit für einen Defekt wie in der Y-Richtung. Da nur Defekte in X-Richtung entstehen, wenn keiner in der Y-Richtung vorhanden ist, kann es keine Auslöschung zwischen den beiden Achsen geben und daraus folgt, dass sich die Defektrate aus beiden Achsen aufaddiert. Dies führt neben Randeffekten (siehe R. Monaco et al. [MMRK09]) zu einer Verdopplung der Steigung im Vergleich zu den theoretischen Vorhersagen, jedoch muss beachtet werden, dass eine reine Addition der Wahrscheinlich-

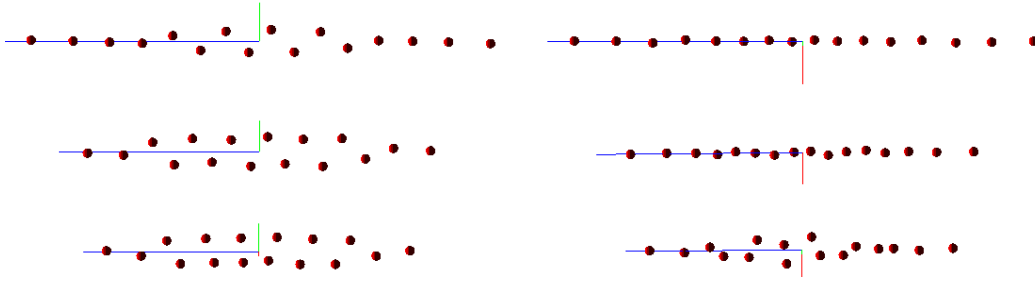


Abbildung 2.15: Simulierter Kristall zu verschiedenen Zeitschritten, der in der X-Ebene einen Defekt aufweist.

keiten nicht genügt, um eine Verdopplung des Exponenten zu erklären. Somit wird bei Messungen mit unseren Kristallen für  $\beta$  erwartet, dass  $\beta_{hom} = \frac{2}{3}$  und  $\beta_{inhom} = \frac{8}{3}$  ist.

### 2.7.3 Simulationen der Defekte

Mit Hilfe von molekulardynamischen, elektrischen Simulationen können Punktladungen der Masse  $m$  mit strukturellen Defekten numerisch analysiert werden. Diese Simulationen ermöglichten es, die Defekte schon direkt nach der Spannungsrampe zu beobachten, denn die entscheidenden Prozesse laufen in den ersten  $100 \mu\text{s}$  nach der Spannungsrampe ab. Diese  $\mu\text{s}$ -Zeitskala war für uns mit der bisherigen Beobachtungstechnik mittels Kamera nicht experimentell zugänglich. Deshalb waren wir auf Simulationen angewiesen, um diese Effekte genauer beschreiben zu können. In den Simulationen wurde der Kristall, genau wie im Experiment, mit einer Spannungsrampe auf den Endkappenelektroden zusammengedrückt (siehe Abschnitt 3.3.1). Dies wurde erreicht, indem zuerst ein realistisches Potential anhand der Elektrodenanordnung berechnet wurde. Dabei wurde die Finite-Element-Methode verwendet, nähere Details dazu sind in K. Singer et al. [SPM<sup>+</sup>10] zu finden. Um die späteren Berechnungen zu beschleunigen, wurde ein harmonisches Potential an das realistische angepasst und im weiteren verwendet. Durch das realistische Potential ist auch bekannt, wie stark sich der Einschluss mit einer Spannungsänderung der Endkappen in allen drei Fallenachsen ändert, sodass dieser korrekt modelliert wurde. Die Laserkühlung wurde mittels einer konstanten Dämpfung und stochastischen Stößen implementiert [PKP<sup>+</sup>13]. In Abbildung 2.16 ist zu sehen, dass in der Simulation dieselben Kristallstrukturen auftraten, wie sie im Experiment beobachtet wurden.

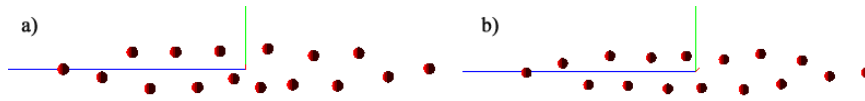


Abbildung 2.16: Simulierter Kristall a) mit Defekt und b) ohne Defekt.

### Verschiedene Propagatoren

Für die Bewegungen der Ionen wurden zwei verschiedene Propagatoren implementiert, zum einen wurde ein Verlet-Integrator benutzt und zum anderen ein Runge-Kutta-Integrator vierter Ordnung. Bei dem Verlet-Integrator wird jeder Zeitschritt halbiert. Damit bewegen sich die Ionen in der ersten Hälfte jedes Simulationsschrittes zuerst unter dem Einfluss der Geschwindigkeiten des vorhergehenden Zeitschrittes. Anschließend werden die neuen Kräfte und damit die neuen Beschleunigungen berechnet. Somit werden immer die Positionen der halben Zeitschritte verwendet, um damit die Coulombwechselwirkung zu berechnen. Die Mikrobewegung wurde durch oszillierende Elektrodenpotentiale modelliert [ARJ<sup>+</sup>12]. Nachdem die resultierenden Beschleunigungen bekannt sind, können die Geschwindigkeiten berechnet und die Ionen während der nächsten Hälfte des Zeitschrittes mit diesen Geschwindigkeiten propagiert werden. Der zweite Propagator, der getestet wurde, ist ein Runge-Kutta-Integrator vierter Ordnung [SPM<sup>+</sup>10], bei dem jeder Zeitschritt in vier Unterschritte zerlegt wird. Deshalb ist dieser Integrator deutlich rechenintensiver, sodass die Simulationen längere Rechenzeiten beanspruchen. Dafür kann bei diesem Integrator eine größere Schrittweite gewählt werden ohne numerische Fehler zu riskieren. Beim Verlet-Integrator sollte die Schrittweite nicht größer als 1 ns sein, um numerische Fehler auszuschließen. Auf diesen und weitere wichtige Parameter der Simulationen wird im folgenden Abschnitt eingegangen. Für die Simulationen von mehreren hundert Ionen mit Hilfe eines parallelisierten Programms und unter Verwendung einer Grafikkarte mit CUDA sei auf die Arbeit von L. Hilico [HKD<sup>+</sup>14] verwiesen.

### Simulationsparameter

In der Simulation konnten verschiedene Parameter festgelegt werden, so etwa die Schrittgröße der einzelnen Zeitschritte, die Dämpfung durch die Laserkühlung und die Temperatur des Kristalls. All diese Parameter mussten in sinnvollen Bereichen gewählt werden, was in Anhang B.1 besprochen wird. So sollte die Größe der Zeitschritte zwischen 1 ns und 0,1 ns liegen. Um die Wiederholbarkeit der Simulationsergebnisse zu testen, wurden acht Durchgänge mit identischen Einstellungen für alle Parameter durchgeführt. In Ab-

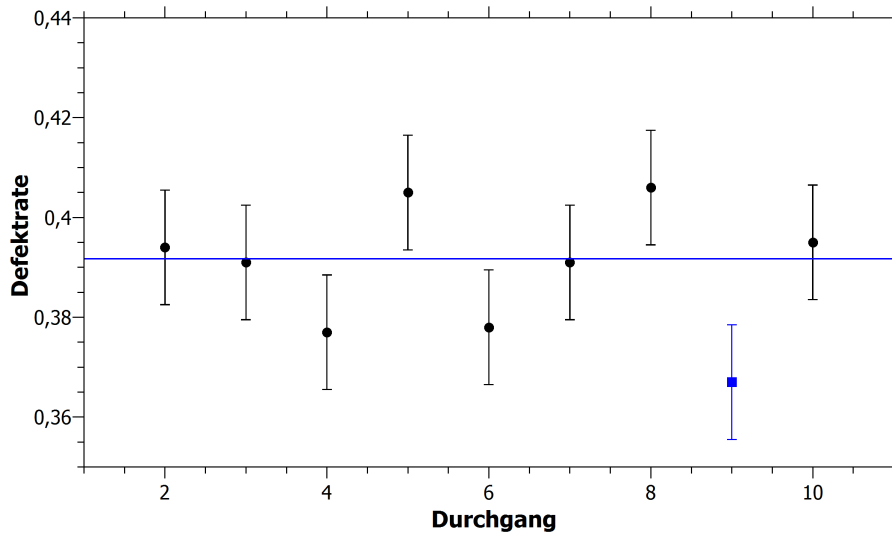


Abbildung 2.17: Dargestellt sind die wiederholten Messungen der oberen radialen Fallenfrequenz bei Einstellungssatz 3 (siehe Tabelle B.1). Der blau markierte Punkt wurde mit der kleineren Schrittweite von 0,1 ns simuliert, die schwarzen Punkte mit einer Schrittweite von 1 ns. Aus dieser Menge wurde die Standardabweichung der Simulationen bestimmt.

Abbildung 2.17 sind diese Messungen zu sehen. Aufgetragen ist die Defektrate gegen die Nummer des Durchgangs, die Durchgänge wurden fortlaufend nummeriert. Für diese Simulationen wurde immer dieselbe Kompressionsgeschwindigkeit verwendet. Die blaue Linie entspricht dem Mittelwert dieser Messungen. Die Fehlerbalken wurden mit Hilfe der Standardabweichung von diesem Mittelwert berechnet. Der neunte Durchgang wurde mit einer Schrittgröße von 0,1 ns statt 1 ns durchgeführt. Es ist zu erkennen, dass die Defektrate nicht von der Schrittgröße abhängt. Die hier berechneten Fehlerbalken wurden für alle Simulationsergebnisse verwendet. Um eine Abhängigkeit des Ergebnisses von anderen Simulationsparametern auszuschließen, wurden fünf verschiedene Einstellungen getestet. Das Ergebnis ist in Anhang B.1 zu sehen. Hierbei wurden verschiedene Anfangstemperaturen des Kristalls und verschiedene Temperaturen für die Stoßamplitude der Laserkühlung getestet. Damit konnte gezeigt werden, dass die Defektraten der Simulationen nur von den eingestellten Frequenzen und den Kompressionsgeschwindigkeiten abhängen, wie dies auch im Experiment der Fall ist.

## 2.8 Kalziumionenkristalle zur Untersuchung von Coulomb-Kristallstrukturen

Unsere Gruppe verwendete Kalziumionen für die Experimente in den Paulfallen. Das Kalzium wurde aus einem Ofen verdampft und dann mittels eines resonanten Zweiphotonenprozesses in der Falle ionisiert. Dabei wurde ein atomarer Übergang bei 423 nm verwendet und mit dem zweiten Photon bei 375 nm das äußerste Elektron des Ca-Atoms ins Kontinuum angeregt. Im ionisierten Zustand ergab sich die Energielevelstruktur, die in Abbildung 2.18 dargestellt ist. Der Übergang zwischen dem  $S_{1/2}$ - und dem  $P_{1/2}$ -Level wurde zum Dopplerkühlen und zur Detektion der Ionen verwendet, da er auf Grund seiner relativ kurzen Lebensdauer von  $6,904 \pm 0,026$  ns eine ausreichend große Streurate hat [HRK<sup>+</sup>15]. Außerdem wurde für die Detektion ebenfalls eine möglichst große Anzahl gestreuter Photonen benötigt, damit ein besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis erreicht wurde, obwohl wir in unseren Aufbauten nur einen sehr kleinen Raumwinkel mit der Beobachtungsoptik abbilden konnten. Um ein geschlossenes System von Übergängen zu erhalten, musste zusätzlich

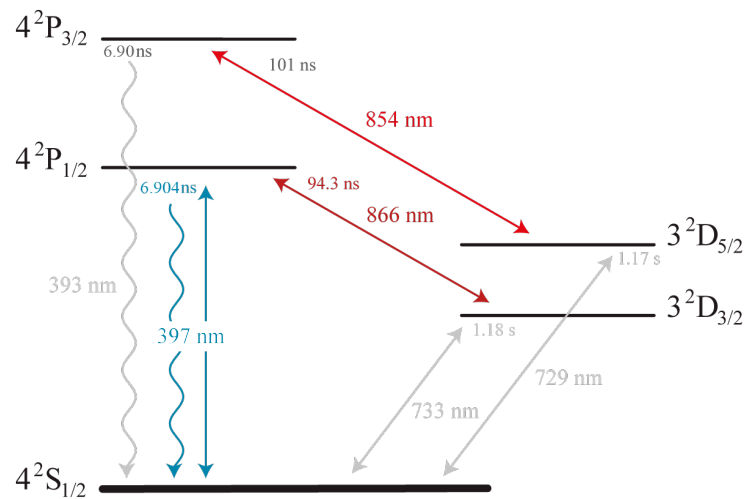


Abbildung 2.18: Energielevelstruktur von  $\text{Ca}_{40}^+$ -Ionen mit den dazugehörigen Übergangswellenlängen.

zum Dopplerkühlaser bei 397 nm ein Laser bei 866 nm eingestrahlt werden, um die Ionen aus dem  $D_{3/2}$ -Zustand zurückzupumpen. Beide Strahlen wurden in einem Winkel von  $45^\circ$  zu den Fallenachsen eingestrahlt, damit sie eine Kopplung an die Schwingungsmoden der Ionen in allen drei Raumrichtungen hatten. Wie in Abschnitt 2.8.1 genauer erklärt wird, wurde der Übergang von  $S_{1/2}$  nach  $D_{5/2}$  bei 729 nm für die Seitenbandspektroskopie genutzt, wie sie etwa in Abschnitt 3.7 verwendet wird. Um auch hier eine geschlossene

## 2.8 Kalziumionenkristalle zur Untersuchung von Coulomb-Kristallstrukturen

ne Übergangsreihe zu erhalten, wurde noch ein Rückpump laser bei 854 nm benötigt. Der Übergang zwischen  $S_{1/2}$  und  $D_{3/2}$  mit 733 nm fand bei uns keine Anwendung. Ebenso setzten wir keinen Laser für den Übergang von  $S_{1/2}$  nach  $P_{3/2}$  bei 393 nm ein, dieser diente uns lediglich als schneller Zerfallskanal nach einem Übergang mit 854 nm vom  $D_{5/2}$ -Niveau auf das  $P_{3/2}$ -Level. Außerdem hatten wir einen kleinen Anteil an 393 nm Licht in unserem Doppl laser, weshalb wir beim Dopplerkühlen einen Laser bei 854 nm miteinstrahlen mussten.

### 2.8.1 Seitenbandspektroskopie

Zur Beschreibung der Seitenbandspektroskopie, muss zuerst die Laser-Atom-Wechselwirkung eingeführt werden. Dazu wird Gleichung 2.23 um die Zwei-Niveau-Näherung für den atomaren Zustand erweitert:

$$H_{\text{atom}} = \hbar \frac{\omega}{2} \sigma_z \quad \text{mit} \quad \sigma_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| \quad (2.73)$$

wobei  $|e\rangle$  dem angeregten Zustand und  $|g\rangle$  dem Grundzustand entspricht. Nun wird die Dipol-Wechselwirkung zwischen dem Laser und dem Ion eingeführt. Für den Laser gilt

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_L t + \phi) \quad (2.74)$$

und somit für die Wechselwirkung mit dem  $l$ -ten Ion:

$$H_{\text{int}} = -e\vec{r}_l \vec{E} = e\vec{r}_l E_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}_l - \omega_L t + \phi) \quad (2.75)$$

mit  $\vec{r}_l = |e\rangle\langle g| \langle e|\vec{r}_l|g\rangle + |g\rangle\langle e| \langle g|\vec{r}_l|e\rangle$ , wobei  $\vec{R}_l = (z_l + q)\vec{e}_z$  der Position des  $l$ -ten Ions, und  $q = \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_i}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$  der Auslenkung in der  $i$ -ten Schwingungsmode entspricht. Damit ergibt sich:

$$H_{\text{int}} = (\vec{p}\sigma_{+,l} + \vec{p}^* \sigma_{-,l}) \cdot \frac{\vec{E}_0}{2} (e^{i(k\cos(\Theta)(z_l+q)-\omega_L t+\phi)} + e^{-i(k\cos(\Theta)(z_l+q)-\omega_L t+\phi)}) \quad (2.76)$$

Mit  $k = \frac{2\pi}{\lambda_L}$  wird der Lamb-Dicke-Parameter definiert zu

$$\eta = k \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_i}} = 2\pi \frac{\Delta x_i}{\lambda_L} \quad (2.77)$$

wobei  $\lambda_L$  die Wellenlänge des Lasers und  $\Delta x_i$  die Ausdehnung des Grundzustands der  $i$ -ten Schwingungsmode beschreibt. Der Ausdruck  $k\cos(\Theta)z_l$  liefert eine feste, konstante

## 2 Theoretische Grundlagen

Phase, die in  $\phi$  geschrieben werden kann. Wird die Kopplungsstärke

$$\kappa = \frac{|\vec{p} \cdot \vec{E}_0|}{\hbar} \quad (2.78)$$

eingeführt und die Phasen von  $\vec{p} \cdot \vec{E}_0$  bzw.  $\vec{p}^* \cdot \vec{E}_0$  durch  $\sigma_{+,l}$  bzw.  $\sigma_{-,l}$  ersetzt, ergibt sich

$$H_{\text{int}} = \frac{\hbar\kappa}{2}(\sigma_{+,l} + \sigma_{-,l}) \cdot (e^{i(\frac{\eta}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\cos\Theta - \omega_L t + \phi)} + e^{-i(\frac{\eta}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\cos\Theta - \omega_L t + \phi)}) \quad (2.79)$$

Im Lamb-Dicke-Regime gilt  $\frac{\eta_i}{\sqrt{N}} \ll 1$ . Daher kann die Entwicklung

$$e^{\pm i \frac{\eta}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\cos\Theta} \approx 1 \pm i \frac{\eta}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\cos\Theta \quad (2.80)$$

verwendet werden und es ergibt sich

$$H_{\text{int}_{LD}} = \frac{\hbar\kappa}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) \cdot (e^{i(\phi - \omega_L t)} + e^{-i(\phi - \omega_L t)}) + \frac{\hbar\kappa}{2} \frac{i\eta\cos\Theta}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \cdot (e^{i(\phi - \omega_L t)} \pm e^{-i(\phi - \omega_L t)}) \quad (2.81)$$

Im Wechselwirkungsbild wird damit unter Benutzung der „Rotating Wave Approximation“ (RWA), sowie mit  $\sigma_+ \rightarrow \sigma_+ e^{i\omega t}$  und  $\hat{a}^\dagger \rightarrow \hat{a}^\dagger e^{i\omega_i t}$ , der Hamiltonian

$$H_{\text{int}}(t) = \frac{\hbar\kappa}{2}(\sigma_+ e^{i\omega t} + \sigma_- e^{-i\omega t})(e^{i(\phi - \omega_L t)} + e^{-i(\phi - \omega_L t)}) + \frac{\hbar\kappa}{2} \frac{i\eta\cos\Theta}{\sqrt{N}}(\sigma_+ e^{i\omega_L t} + \sigma_- e^{-i\omega_L t})(\hat{a} e^{-i\omega_i t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega_i t})(e^{i(\phi - \omega_L t)} - e^{-i(\phi - \omega_L t)}) \quad (2.82)$$

erreicht. Wenn der Laser auf Resonanz eingestellt ist, und somit  $\omega_L = \omega$  gilt, ist

$$H_I(t) \approx_{(RWA)} \frac{\hbar\kappa}{2}(\sigma_+ e^{i\phi} + \sigma_- e^{-i\phi}) + \hat{O}(e^{\pm i\omega_i t}) \quad (2.83)$$

Die Terme der Ordnung  $\hat{O}(e^{\pm i\omega_i t})$  können als schnelle Prozesse in der RWA vernachlässigt werden und für das rote Seitenband der i-ten Mode mit  $\omega_L = \omega - \omega_i$  gilt

$$H_I(t) \approx_{(RWA)} \frac{\hbar\kappa}{2} \frac{i\eta\cos\Theta}{\sqrt{N}}(\sigma_+ \hat{a} e^{i\phi} - \sigma_- \hat{a}^\dagger e^{-i\phi}) \quad (2.84)$$

Für das blaue Seitenband der i-ten Mode mit  $\omega_L = \omega + \omega_i$  ergibt sich

$$H_I(t) \approx_{(RWA)} \frac{\hbar\kappa}{2} \frac{i\eta\cos\Theta}{\sqrt{N}}(\sigma_+ \hat{a}^\dagger e^{i\phi} - \sigma_- \hat{a} e^{-i\phi}) \quad (2.85)$$



## 2.8 Kalziumionenkristalle zur Untersuchung von Coulomb-Kristallstrukturen

In Gleichung 2.83 ist zu sehen, dass der Übergang durch den resonanten Laser in erster Ordnung unabhängig ist von der Schwingungsmode. Beim blauen Seitenband (vgl. Gleichung 2.85) wird hingegen ein Phonon erzeugt und das Ion angeregt, da der Laser diese zusätzliche Energie aufbringt. Umgekehrt wird bei der Emission eines Photons ein Phonon vernichtet und das Ion zerfällt in den Grundzustand. Beim roten Seitenband (siehe Gleichung 2.84) wird ein Phonon vernichtet, wenn das Ion angeregt wird. Das rote Seitenband kann aus diesem Grund zum Nachweis des Grundzustandes verwendet werden, da dieser durch das rote Seitenband nicht angeregt werden kann. Bei den  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen, die verwendet wurden, bietet sich der Übergang zwischen dem  $S_{1/2}$ - und dem  $D_{5/2}$ -Energielevel an, um darauf Seitenbänder zu adressieren, da er auf Grund seiner langen Lebensdauer eine entsprechend kleine natürliche Linienbreite hat, siehe auch Abschnitt 3.1.3.

### 2.8.2 Defektdynamik

Aus den Simulationen von Kristallen, die über den Phasenübergang getrieben werden (siehe Abschnitt 3.4), konnte die Zeitskala, auf der sich die Dynamik von Defekten abspielt, auf unter  $100\ \mu\text{s}$  abgeschätzt werden. Da die Kristallanalyse, solange sie rein auf Kamerabildern basiert, nicht unter einem Zeitintervall von 1 ms funktioniert, konnte die Defektdynamik nicht aufgelöst werden. Jedoch können die lokalen Defektmoden dazu verwendet werden, um eines oder mehrere Ionen, die an dem Defekt beteiligt sind, über das entsprechende Seitenband in den Dunkelzustand zu pumpen. Damit ergibt sich die Möglichkeit, Defekte bereits innerhalb weniger  $\mu\text{s}$  (diese Zeitspanne ist nun lediglich durch die  $\pi$ -Zeit des Seitenbandes begrenzt) nachzuweisen, da der Dunkelzustand eine Lebensdauer von 1,17 s hat und damit ein Kamerabild mit entsprechend langer Belichtungszeit aufgenommen werden kann.

### 2.8.3 Schwingungsmoden gemischter Ionenkristalle

Die Seitenbandspektroskopie kann zur genauen Untersuchung der Schwingungsmodenstruktur eines gemischten Kristalls eingesetzt werden. Die Änderungen in der Schwingungsmodenstruktur von gemischten Ionenkristallen, im Vergleich zu reinen  $^{40}\text{Ca}^+$ -Kristallen, hängt dabei von der Masse der dunklen Ionen, welche in dem Kristall mitgefangen wurden, ab. Um die neuen Schwingungsmoden zu berechnen, muss die Hessematrix  $\Psi_{\nu,n}^i$  mit dem Massentensor

$$M_{\nu,n} = m_{\nu} * m_n \quad (2.86)$$

## 2 Theoretische Grundlagen

modifiziert werden. Damit ergibt sich für die modifizierte Hessematrix

$$\tilde{\Psi}_{\nu,n}^i = \frac{\Psi_{\nu,n}^i}{M_{\nu,n}} \quad (2.87)$$

Das bedeutet, dass sich die Frequenzen für leichtere Ionen erhöhen und für schwerere Ionen niedriger werden. Zusätzlich sind die radialen Auslenkungen auch massenabhängig. Da für die radialen Fallenfrequenzen  $q_i \neq 0$  gilt, ergibt sich Folgendes:

$$\omega_{x,y} \approx \sqrt{\frac{1}{m} + \frac{1}{m^2}} \Rightarrow l_{x,y} \approx \sqrt[3]{\frac{1}{m \cdot (\frac{1}{m} + \frac{1}{m^2})}} = \sqrt[3]{\frac{1}{1 + \frac{1}{m}}} = \sqrt[3]{\frac{m}{m+1}} \quad (2.88)$$

Daran ist zu erkennen, dass  $l_y$  und  $l_x$  nicht mehr von der Masse unabhängig sind und sich somit die radiale Auslenkung der Ionen ändert, wenn ein gemischter Kristall geladen wird. Deshalb müssen bei Zickzack-Kristallen die Positionen der simulierten Kristalle neu skaliert werden, sollte ein Ion durch eines mit einer anderen Masse ersetzt werden. Um die korrekten Frequenzen zu erhalten, muss wiederum die Mikobewegung berücksichtigt werden, da gerade bei schwereren Ionen das Zickzack-Problem auftritt [LDRR12b]. Messungen zu gemischten Kristallen werden in Abschnitt 3.6 beschrieben.

# 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

## 3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen

Bevor auf die einzelnen Experimente eingegangen wird, die ich während meiner Doktorarbeit durchgeführt habe, werden noch ein paar Details der verwendeten Aufbauten betrachtet. Zunächst werden die verschiedenen Fallen, die für die Messungen verwendet wurden, beschrieben. Daran anschließend folgen Details zum Laden und Kühlen der Ionen, sowie zur Seitenbandspektroskopie.

### 3.1.1 Fallengeometrien

Für die Messungen in dieser Arbeit wurden drei verschiedene Fallen verwendet, die Stabfalle, die Mikrofalle und die Implantationsfalle, die im Folgenden dargestellt werden. Bei allen drei Fallen handelt es sich um lineare Paulfallen, deren Grundlagen in Abschnitt 2.1 besprochen wurden. Jedoch unterscheiden sie sich in der Größe des Fallenvolumens, den erreichbaren Fallenfrequenzen und damit einhergehend in der Größe der Ionenkristalle. Auch die Möglichkeiten zur Kontrolle der axialen Potentialform sind in jeder der drei Fallen unterschiedlich, sodass sie sich jeweils für unterschiedliche Experimente besonders eignen.

#### Stabfalle

Bei der Stabfalle handelt es sich um eine Falle, die von Thomas Feldker entworfen und gebaut wurde [FPS<sup>+</sup>14]. Die Stabfalle ist relativ einfach zu fertigen und weist sehr geringe Abweichungen vom Quadrupolpotential in den radialen Richtungen auf. Diese Falle wurde für die Ionisationsstudien dieser Arbeit (siehe Abschnitt 3.6) verwendet, denn die Fallenchips der Implantationsfalle und der Mikrofalle können sehr leicht durch die großen Laserleistungen, die dabei verwendet wurden, zerstört werden (siehe

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Anhang A). Außerdem wurde sie für die Untersuchungen der großen Zickzack-Kristalle genutzt. Die Stabfalle besteht aus vier Metallstäben, die von Endkappen gehalten werden.

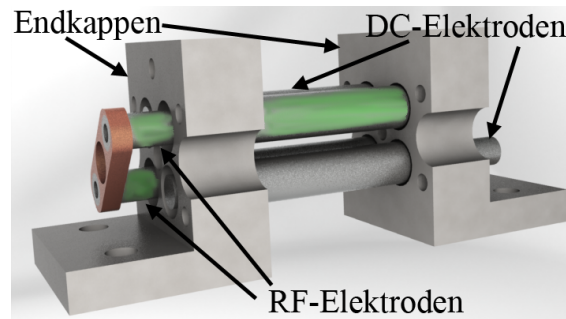


Abbildung 3.1: Autocad-Zeichnung der Elektrodenanordnung der Stabfalle, bestehend aus den vier Metallstäben (RF- und DC-Elektroden) mit einem Durchmesser von 2,5 mm und einem Abstand zwischen den Mittelpunkten der Metallstäbe von 4,7 mm. Die Elektroden werden in einem Abstand von 10 mm von den Metallendkappen gehalten. Die beiden Radiofrequenzelektroden sind grün eingefärbt. Zur Isolation sind um die Enden der Stäbe Vitonfolien gewickelt.

An zwei diagonal gegenüberliegenden Metallstäben (grün markiert in Abbildung 3.1) ist die Wechselspannung angelegt, die anderen beiden liegen auf einer Gleichspannung und erlauben es, die radiale Anisotropie einzustellen. Das Verhältnis vom Elektrodenradius zum Abstand der Elektroden wurde in der verwendeten Stabfalle so gewählt, dass die Elektrodenoberflächen möglichst genau einem Quadrupolpotential in den radialen Richtungen entsprechen [Den71]. Dadurch wird der radiale Einschluss, der ausschließlich über ein Quadrupolfeld genähert wird, erheblich besser beschrieben, als dies bei der Mikrofalle oder der Implantationsfalle der Fall ist. Da alle Bauteile mehrere Millimeter an Material aufweisen und aus Edelstahl sind, wurden durch versehentliche Treffer mit dem gepulsten Laser keine Komponenten unbrauchbar. Jedoch limitierten die großen Elektrodenabstände und die Vakuumdurchführungen (diese sind z.B. für die Endkappen nur bis zu Spannungen von 200 V ausgelegt) die maximal erreichbaren Fallenfrequenzen axial auf 200 kHz und radial auf 500 kHz. Zusätzlich erzeugen die Endkappen axiale Mikrobewegung, weshalb keine axiale Fallenfrequenz unter 60 kHz eingestellt werden konnte, ohne die Ionen zu verlieren. Weitere Details können der Diplomarbeit von Julian Naber entnommen werden [Nab12].

### Implantationsfalle

Die meisten Experimente wurden in der Implantationsfalle durchgeführt, die von Georg Jacob gebaut wurde<sup>1</sup>. Sie besteht aus vier Keramiksubstraten, die auf einem Fallenhalter angebracht sind (siehe Abbildung 3.2). Durch die hochpräzise Fertigung des Halters, das

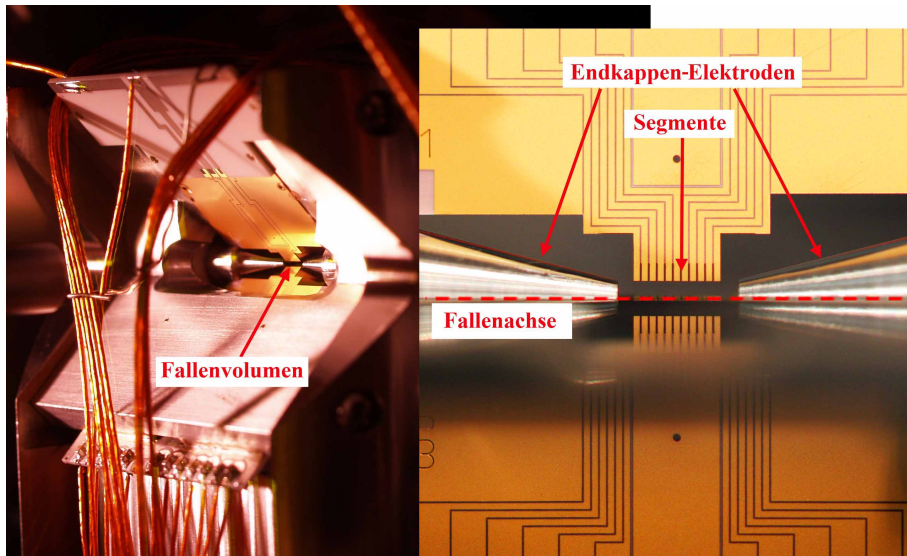


Abbildung 3.2: Elektrodenanordnung der Implantationsfalle. Diese Falle besteht aus vier 125 mm dicken, lasergeschnittenen  $Al_2O_3$ -Keramiksubstraten, die mit 50 nm Titan als Haftsicht und 500 nm Gold beschichtet sind. Jedes Segment ist 200 nm groß und die Isolationsspalten sind 30 nm breit. Senkrecht zur Fallenachse beträgt der Elektrodenabstand 960  $\mu\text{m}$ , entlang der Fallenachse ist der Abstand zwischen den Endkappen 2,9 mm.

heißt, indem dieser aus einem Stück gefertigt wurde, und dadurch, dass die Substrate über spezielle Ausrichtungsecken (siehe Abbildung 3.3) präzise zu den Endkappen ausgerichtet werden konnten, entstand eine radial hochsymmetrische Falle. Diese Eigenschaft war besonders für die Untersuchung von Defekten wichtig (siehe Abschnitt 3.4). Mit einem Elektrodenabstand von knapp 1 mm war es immer noch möglich, axiale Frequenzen von bis zu 1 MHz und radial von 3 MHz zu erreichen. Die Endkappen erlaubten es, dabei nicht nur den Ionenkristall mit Hilfe einer Hochspannung aus der Falle zu extrahieren, sondern zusätzlich konnten auch direkt Spannungsrampen auf den Kristall angewendet werden. Dies war möglich, da die Endkappen nicht gefiltert waren und somit keine limitierenden Zeitkonstanten vorlagen. Ebenfalls wurden die angelegten Rampen durch keine

<sup>1</sup>Die Falle wurde von Georg Jacob, Andreas Kehlberger, Frank Ziesel, Kilian Singer, Ferdinand Schmidt-Kaler und mir entworfen

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Filterfunktion modifiziert. Dieser unmittelbare Zugriff auf den Kristall war besonders für die Beobachtung des Kibble-Zurek-Mechanismus von Vorteil. Nachteilig waren jedoch die Fallensubstrate, da diese nur geringe Laserleistungen aushalten und somit eine gepulste Ionisation, wie sie etwa für das Ionisieren von Stickstoff verwendet wurde (siehe Abschnitt 3.6.1), nur mit einem erheblichen Risiko möglich ist.

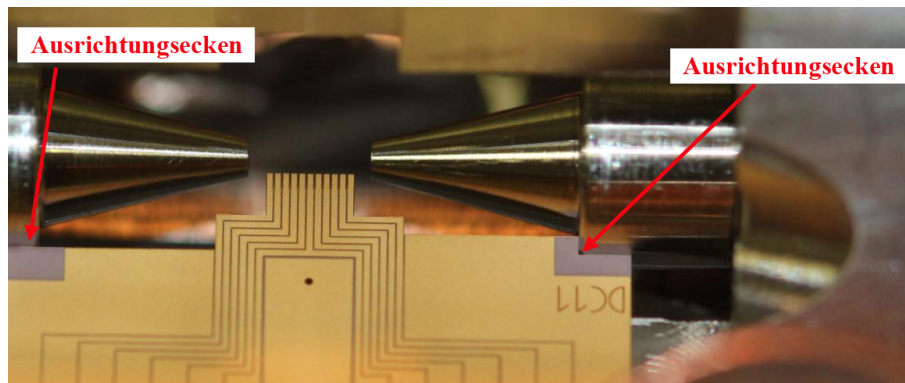


Abbildung 3.3: Ausrichtung der Fallensubstrate der Implantationsfalle mit Hilfe der isolierten Ecken. Dadurch wurden alle Keramiksubstrate an den Endkappen ausgerichtet und waren somit möglichst exakt um die Fallenachse angeordnet.

#### Mikrofalle

Die Mikrofalle wurde von Stefan Schulz entwickelt und gebaut [Sch09] und besteht aus mehreren Keramiksubstraten, die teilweise, wie bei der Implantationsfalle, beschichtet sind. Die Form der Keramiksubstrate wurde mit einem Femtosekunden-Laser geschnitten, wodurch sich fingerförmige Elektroden herstellen ließen. Dadurch wurde der Abstand der isolierenden Flächen zum Fallenzentrum und damit zu den Ionen erhöht, wodurch der Einfluss von Streuladungen reduziert wurde. Insgesamt erhält man bei dieser Falle 31-Elektrodenpaare, die einzeln angesteuert werden können und die so zum Beispiel das Trennen und den Transport von Ionen ermöglichen ([KRS<sup>+</sup>14, RWK<sup>+</sup>14] und [WZR<sup>+</sup>12]). Der sehr kleine Elektrodenabstand erlaubte die höchsten Fallenfrequenzen von allen Fallen in unserer Gruppe, diese betragen axial 2 MHz und radial 4 MHz. Die Sandwichbauweise sorgt jedoch für eine sehr unsymmetrische Falle in radialer Richtung (siehe Abbildung 3.6). Ebenso führt die Verjüngung von der Laderegion zur Experimentregion zu einer starken axialen Mikrobewegung. Die Details zur Falle und zum Aufbau des Lasersystems zum Zeitpunkt der Messungen können in der Arbeit von Ulrich Poschinger[Pos10] nachgelesen werden.

### 3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen

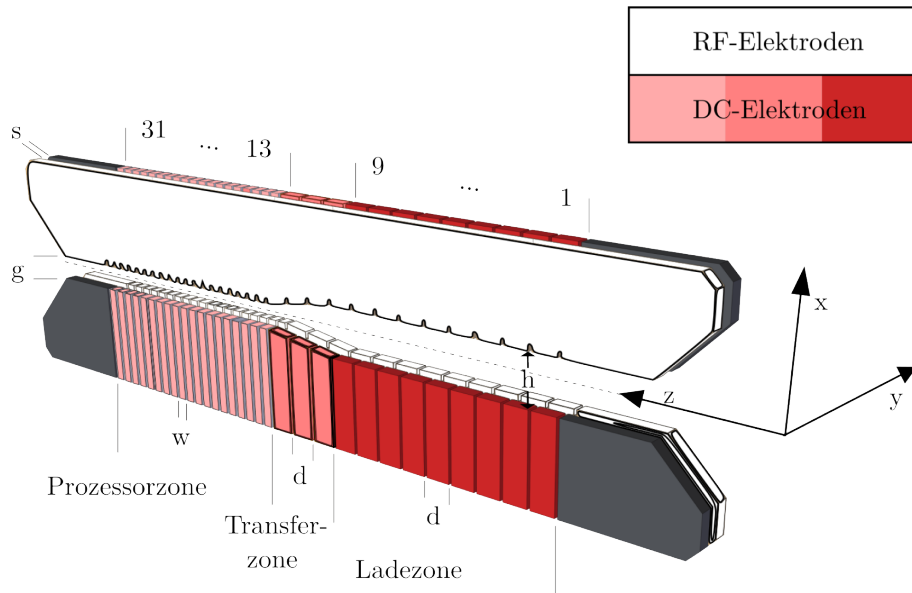


Abbildung 3.4: Skizze der segmentierten Mikrofalle. Bei allen hier vorgestellten Messungen wurde nur die Ladezone verwendet. Die Abstände sind  $d = 250 \mu\text{m}$ ,  $h = 500 \mu\text{m}$ ,  $s = 125 \mu\text{m}$ ,  $w = 125 \mu\text{m}$  und  $g = 250 \mu\text{m}$ . Die Länge des Spaltes zwischen den gegenüberliegenden Elektroden beträgt  $30 \mu\text{m}$ . Alle Abstände sind in der Arbeit von Stefan Schulz [Sch09] erklärt. Für die Messungen wurden die Elektroden vier, fünf und sechs auf die gleiche negative Spannung gelegt und alle anderen Gleichspannungselektroden auf Masse. Die  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Keramiksубstrate sind mit 50 nm Titan als Haftschiicht und 500 nm Gold beschichtet. ( Bild entnommen aus [Kau12].)

#### 3.1.2 Kristalllage

Die radiale Anisotropie konnte in allen vorgestellten Fallendesigns eingestellt werden, indem eine Ausgleichsspannung an die DC-Elektroden angelegt wurde. Dabei beschreibt der Winkel  $\Theta$  den Winkel des Kristalls zum Kühllaser und somit auch zur Kamera. In Abbildung 3.5 ist zu erkennen, dass jede gewünschte Anisotropie mittels der Ausgleichsspannung eingestellt werden konnte. Dies war besonders für die Beobachtung von Defekten (siehe Abschnitt 2.6.2 und Abschnitt 3.3.3) wichtig, da deren Stabilität direkt von der radialen Anisotropie abhängt. Jedoch musste beachtet werden, dass bei einer nicht perfekt symmetrischen Falle, wie etwa der Mikrofalle, sich der Winkel des Kristalls über einen größeren Bereich von Anisotropien langsam von  $+45^\circ$  zu  $-45^\circ$  ändert. In Abbildung 3.6 ist zu erkennen, dass es in diesem Fall für sehr kleine Anisotropien dazu kommen kann, dass die Kristalle sich parallel zur Kamerablickrichtung ausrichten, was die Beobachtung erschwert.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

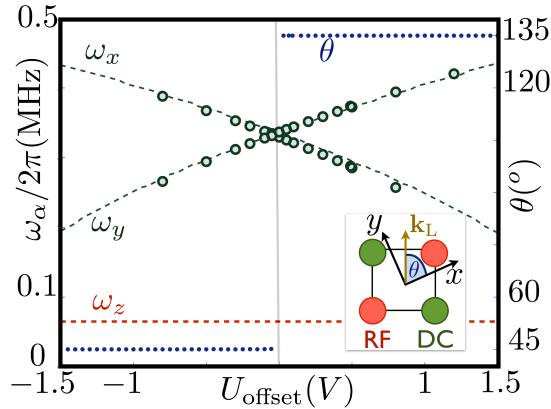


Abbildung 3.5: Aufgetragen ist der Winkel  $\Theta$ , sowie die gemessenen Fallenfrequenzen als Funktion der Ausgleichsspannung. Die Aufspaltung der beiden radialen Fallenfrequenzen kann durch die Ausgleichsspannung beliebig eingestellt werden. Entnommen aus [BAO<sup>+</sup>12].

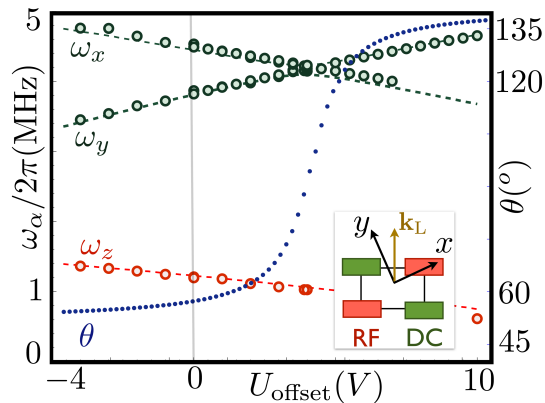


Abbildung 3.6: Ist die Elektrodenanordnung der Falle nicht perfekt radialsymmetrisch, so ändert sich der Winkel  $\Theta$  des Kristalls nicht sprunghaft. Stattdessen dreht der Kristall sich für kleine Anisotropien parallel zur Beobachtungsrichtung, bevor er wieder unter  $45^\circ$  steht. Dargestellt ist der Winkel  $\Theta$  und die Fallenfrequenz gegen die Ausgleichsspannung. Entnommen aus [BAO<sup>+</sup>12].

#### 3.1.3 Ionisieren und Kühlen

Um  $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen zu erhalten, wurden Kalziumatome in einem eigens dafür konstruierten Ofen verdampft (siehe Abbildung 3.7), der mit Kalzium-Pulver befüllt wurde. Der Neutralatomstrahl wurde möglichst genau auf die Fallenmitte ausgerichtet, um eine Beschichtung der Elektroden zu vermeiden. Dabei wurde ein Strom von 3 A durch den Ofen



### 3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen

geschickt, wodurch die Temperatur auf etwa  $400^\circ\text{C}$  anstieg. Dies liegt deutlich unter dem Schmelzpunkt von Kalzium, der  $842^\circ\text{C}$  beträgt. Jedoch wurde der Partialdruck dabei soweit erhöht, dass ein Dampfdruck von etwa  $10^{-6}$  mbar erreicht wurde. Beim Durchflug

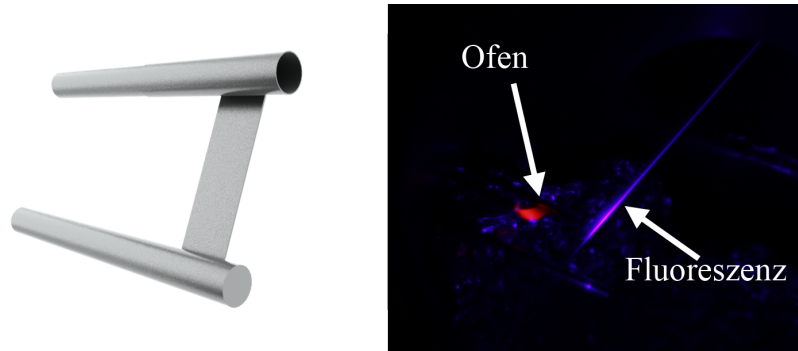


Abbildung 3.7: Links: CAD-Zeichung des Ofens zur Verdampfung des Kalziums. Rechts: Fluoreszenzaufnahme des Atomstrahls auf dem Ionisationsübergang bei  $423\text{ nm}$ , aufgenommen in einer leeren Testkammer.

der Neutralatome durch das Fallenvolumen wurden die Kalziumatome über einen resonanten zwei-Photonenprozess [Rot03] ionisiert. Dabei wurde ein atomarer Übergang bei  $422,79200\text{ nm}$  verwendet und der Laser sollte eine Leistung von  $400\ \mu\text{W}$  besitzen. Die Linienbreite des Lasers war schmal genug, um nur ein Kalziumisotop anzuregen, und mit einem zweiten Laserstrahl bei  $375\text{ nm}$ , welcher etwa  $150\ \mu\text{W}$  haben sollte, wurde das äußerste Elektron des  $^{40}\text{Ca}^+$ -Isotops ins Kontinuum angeregt. Mit dieser Methode wurden nur reine  $^{40}\text{Ca}^+$ -Kristalle geladen. Ebenso war die Ionisation deutlich effizienter als bei anderen Verfahren, wie etwa der Elektronenstoßionisation. Darum konnte der Fluss an neutralem Kalzium bei der gleichen Laderate um Größenordnungen kleiner gewählt werden (siehe [Rot03]), als dies bei der Elektronenstoßionisation der Fall gewesen wäre. Zusätzlich wurde bei dieser Ionisationsmethode das Risiko, die nichtleitenden Teile der Falle elektrisch aufzuladen, im Vergleich zum Laden mittels Elektronenstoß oder auch zum Laden mit Hilfe einer Ionenkanone (siehe Abschnitt 3.61), minimiert. Details zu den Besonderheiten des Atomofens mit anderen Elementen werden in Abschnitt 3.6.2 besprochen.

Zur Detektion der Ionen wurde das gestreute Licht bei  $397\text{ nm}$  verwendet. Um die Hintergrundstreurate zu minimieren, wurde ein Wellenlängenfilter in den Strahlengang eingebaut und mit dem von Robert Maiwald entworfenen Objektiv [Mai06] wurde der EMCCD-Chip der Ixon-Kamera ausgeleuchtet. Je nach verwendeter Kamera und entsprechendem Objektiv Aufbau ergaben sich damit Bilder von  $0,6908 \pm 0,0005\ \mu\text{m}$  [Ulm10] bis  $1,42 \pm 0,07\ \mu\text{m}$  [Kau12] pro Pixel Auflösung. Für das Dopplerkühlen sollte der  $397\text{ nm}$ -Laser dabei um

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

100 MHz – 150 MHz rot verstimmt zur Resonanz bei 396,95949 nm sein, damit eine optimale Kühlung erreicht wurde. Je nach Größe, Konfiguration und Zusammensetzung der Kristalle sollte der Laser zwischen 10  $\mu\text{W}$  und 300  $\mu\text{W}$  Leistung besitzen. Um eine effektive Kühlung zu gewährleisten, sollte der Rückpumplaser bei 866,45185 nm eine Leistung von mindestens 150  $\mu\text{W}$  aufweisen und der Rückpumplaser bei 854,44450 nm benötigte zwischen 10  $\mu\text{W}$  und 150  $\mu\text{W}$  Leistung. Weitere Details zur Fluoreszenzauslese finden sich in [EUZ<sup>+</sup>10]. Das breite Spektrum an Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, wurde in den drei vorgestellten Fällen gemessen, da jede Geometrie unterschiedliche Vorzüge hat, die für die jeweiligen Messungen vorteilhaft waren.

#### 3.1.4 Experimenteller Aufbau

Am Beispiel der Implantationsfalle soll der grundlegende experimentelle Aufbau, der für Experimente mit Kalziumionenkristallen nötig war, erläutert werden. In Abbildung 3.8 sind die Richtungen aller Laserstrahlen eingezeichnet, die für das Ionisieren, das Kühlen und die Spektroskopie benötigt wurden. Die Blickrichtung entspricht dem tatsächlichen Aufbau auf dem optischen Tisch, von vorne links kamen die beiden Ionisationslaser bei 423 nm und 375 nm. Bei dem 423 nm Laser handelte es sich um einen DL100-pro Laser<sup>2</sup>,

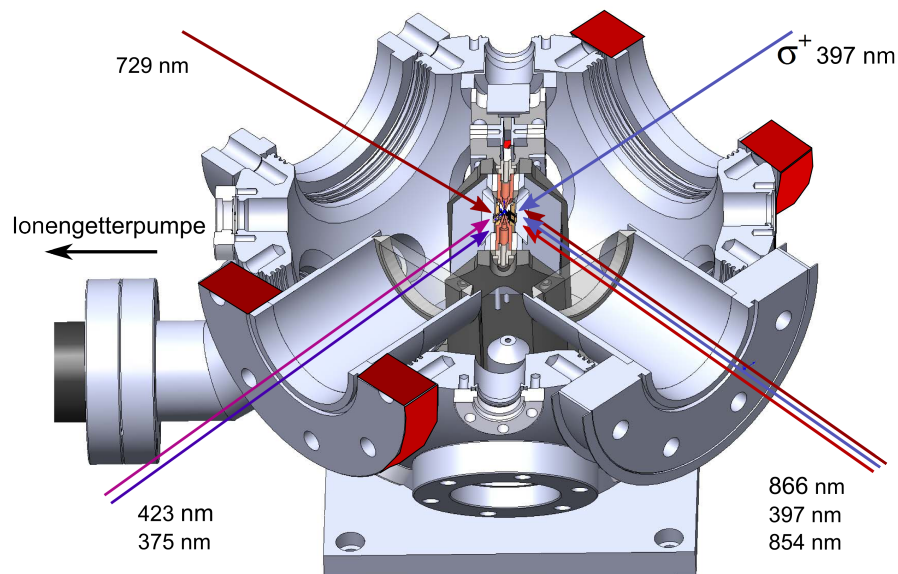


Abbildung 3.8: Anordnung der Laserstrahlen zum Ionisieren, Kühlen und für die Spektroskopie von  $^{40}\text{Ca}^+$ . Angelehnt an [Deg13]

### 3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen

der 375 nm Laser bestand aus einer freilaufenden Diode in einem selbstgebauten Halter. Beide Laser wurden mit Lautsprecherblenden [SJM<sup>+</sup>02] geschaltet, da Schaltzeiten im ms-Bereich für diese Strahlen genügten. Die beiden Laser wurden in einer optischen Faser überlagert. Diese war zusammen mit der Kollimationsoptik an der Falle angebracht. Wie in Abbildung 3.8 dargestellt, wurden alle Laser für das Dopplerkühlen von vorne rechts eingestrahlt. Dazu war eine photonische Faser mit achromatischer Kollimationsoptik angebracht. Bei dem 397 nm Laser und dem 866 nm Laser handelte es sich um DL-100 Laser<sup>3</sup>, der 854 nm Laser wurde von Georg Jacob gebaut [BGB<sup>+</sup>06]. Alle drei Laser durchliefen jeweils einen AOM<sup>4</sup>-Doppelpass, um Nanosekunden kurze Laserpulse erzeugen zu können. Mittels Polarisationsoptik wurden die drei Laser in der photonischen Faser überlagert. Von dem 397 nm Laser wurde für den  $\sigma^+$ -Strahl vor dem AOM-Doppelpass ein Strahl abgezweigt, durch einen separaten AOM-Doppelpass geschickt und über eine polarisationserhaltende Faser zur Vakuumkammer gebracht. In Abbildung 3.8 ist hinten rechts die angebrachte Faser, sowie die Kollimationsoptik und eine  $\lambda/4$ -Platte zu sehen. Mit der  $\lambda$ -Platte wurde die Polarisation im Vergleich zum Magnetfeld der Falle auf  $\sigma^+$  gebracht. Dies wurde für die Auswahl der gewünschten Übergänge benötigt (siehe Abschnitt 3.1.5). Für die Spektroskopie wurde zusätzlich ein Laser für den Quadrupolübergang bei 729 nm benötigt. Der 729 nm Laser war ein TA-pro System<sup>5</sup>, welches auf einen ultrastabilen Resonator stabilisiert und bei dem die Laserfrequenz durch einen AOM verstimmt wurde, dessen Frequenz mit einem VFG<sup>6</sup> verändert werden konnte. Anschließend wurde der Laser in eine Faser gekoppelt. Wie in Abbildung 3.8 zu sehen, erreichte der Laser die Kammer hinten links. Die Fluoreszenzdetektion beim Kühlen oder bei der Spektroskopie erfolgte mit Hilfe der Kamera. Diese konnte entweder kontinuierlich Bilder liefern oder die Aufnahmen wurden mittels TTL<sup>7</sup>-Signalen zu einem bestimmten Zeitpunkt gemacht. Die TTL-Signale zur zeitgesteuerten Bildaufnahme wurden von einem FPGA<sup>8</sup> erzeugt, welcher auch die Digital-Analog-Konverter (DAC) für die Segmentspannungen steuerte. Die DACs erzeugten rauscharme Spannungen für alle elf Fallensegmente und ermöglichten gemeinsame Differenzspannungen, um damit etwa die radiale Anisotropie einzustellen. Die analogen Spannungen der DACs wurden nachverstärkt, um den Spannungsbereich von

---

<sup>2</sup>Laserdesign der Firma TOPTICA Photonics AG

<sup>3</sup>Laserdesign der Firma TOPTICA Photonics AG

<sup>4</sup>Akustooptischer Modulator, durch akustische Wellen wird ein optisches Gitter in diesem Kristall erzeugt, mit dem der Laser in Ausbreitungsrichtung und Frequenz verschoben wird.

<sup>5</sup>Laserdesign der Firma TOPTICA Photonics AG

<sup>6</sup>Versatile Function Generator der Firma TOPTICA Photonics AG.

<sup>7</sup>Transistor-Transistor-Logik; eine Spannung kleiner 0,4 V steht für den Low-Zustand und eine Spannung größer 2,4 V für den High-Zustand

<sup>8</sup>Field Programmable Gate Array (FPGA) mit der Implementierung eines Power-PCs von Kilian Singer und Vidyut Kaushal.

$\pm 10$  V auf  $\pm 40$  V zu vergrößern.

#### 3.1.5 Seitenbandspektroskopie

Bei der Seitenbandspektroskopie wurde der Quadrupolübergang bei 729 nm verwendet, um die Schwingungsmoden des Kristalls als Seitenbänder im Anregungsspektrum der atomaren Übergänge nachzuweisen. Die Linienbreite des Lasers sollte deutlich unter 100 kHz liegen, um die einzelnen Seitenbänder in der Spektroskopie auflösen zu können. Zwar hängt der Abstand der Seitenbänder von den Fallenfrequenzen ab, doch bereits mit einer minimalen Auflösung von 100 kHz können die Parameter in den meisten Fällen so gewählt werden, dass alle Schwingungsmoden einzeln detektiert werden können. Um diese Linienbreite zu erreichen, wurde der Laser auf einen Hochfinesse-Resonator stabilisiert. Damit eine ultrastabile Resonatormode als Referenz für den Laser verwendet werden kann, muss der Aufbau des Resonators vibrationsinsensitiv und möglichst temperaturunabhängig sein. Dies wurde erreicht, indem der Resonator in eine Vakuumkammer aus Aluminium gesetzt (siehe Abbildung 3.9) wurde. Die Vakuumkammer konnte aufgrund ihrer hohen Wärmeleitfähigkeit Temperaturgradienten der Umgebung ausgleichen. In ihr wurde zudem über temperaturisolierende Keramikhalter ein Kupferschild gelagert, welches mit seinem geringen thermischen Widerstand Temperaturfluktuationen kompensierte. Daran angebracht war die eigentliche keramische Halterung des Ultra Low Expansion (ULE)-Blocks<sup>9</sup>, welche durch ihre geringe thermische Leitfähigkeit den Resonator thermisch von der Umwelt entkoppelte. Zusätzlich wurde die Aluminiumkammer über Peltier-Elemente auf den Temperaturnulldurchgang der thermischen Ausdehnung des ULE-Blocks stabilisiert. Der Temperaturnulldurchgang der thermischen Ausdehnung ist eine Besonderheit des ULE-Glases, dessen Zusammensetzung dafür sorgt, dass sich bei einer bestimmten Temperatur die Ausdehnungen genau aufheben. Für unseren Resonator wurde er bei  $T_0 = 27,80 \pm 0,06$  °C gemessen [Deg13]. Die gesamte Vakuumkammer war zur weiteren Schwingungsunterdrückung mit Moosgummi verkleidet und in einer mit Schaumstoff gepolsterten Edelstahlkammer untergebracht (um thermische Schwankungen zu unterdrücken). Eine möglichst geringe Vibrationsempfindlichkeit des Resonators wurde erreicht, indem der ULE-Block über vier Vitonbällchen<sup>10</sup> auf der Keramikplattform abgelegt war. Gleichgroße Rückstellkräfte auf die einzelnen Vitonbällchen ergaben sich, indem die Auflagepunkte der Bällchen symmetrisch zur Resonatorachse gewählt wurden.

Für die jeweils spezielle Resonatorform können die Auflagepunkte mit Hilfe einer Finiten-Element-Methode exakt berechnet werden [WOG07]. Bei unserem Aufbau lagen die Auf-

---

<sup>9</sup>Ultra low expansion glass (ULE) ist ein eingetragener Warenname der Corning Incorporated.

<sup>10</sup>Viton ist ein Warenzeichen der Fa. DuPont Performance Elastomers für einen ihrer Fluorkautschuke.

### 3.1 Grundlegende Techniken zur Kontrolle und Beobachtung von Ionenkristallen

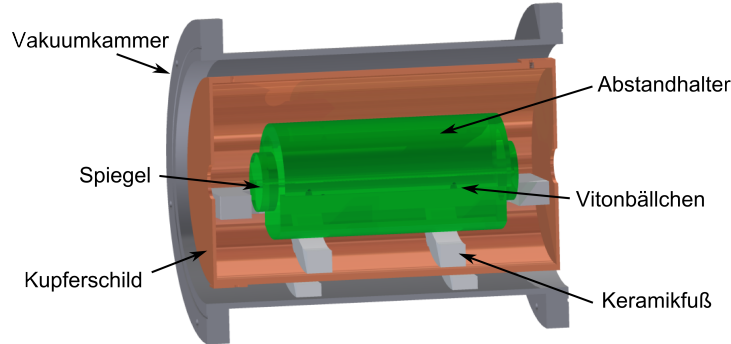


Abbildung 3.9: Querschnitt durch die Konstruktionszeichnung der Resonatorkammer. Aus Darstellungsgründen wurden die nahezu transparenten Spiegel und der ULE-Glas-Abstandhalter grün eingefärbt. Entnommen aus [Deg13]

lagepunkte parallel zur Strahlachse in einem Abstand von 64 mm. Für weitere Details sei auf die Diplomarbeit von Charlotte Degünther verwiesen [Deg13].

Für den stabilisierten Laser ergab sich mit diesem Aufbau eine Linienbreite von  $10,4 \pm 4,5$  Hz [Deg13], somit war es möglich, kleinste Unterschiede in den Frequenzen aufzulösen. Mit der Seitenbandspektroskopie kann der Modulationsindex des Mikrowebewegungsseitenbands bestimmt und somit die optimale Kompensation und der Fehler der automatischen Kompensationsroutine festgelegt werden (siehe Abschnitt 3.7). Zusätzlich konnte aus der Rabifrequenz, beziehungsweise in erster Näherung aus der Anregungswahrscheinlichkeit des entsprechenden Seitenbands, die Phononenanzahl in dieser Schwingungs-mode und somit letztendlich die Temperatur des Kristalls bestimmt werden. Außerdem konnte aus der Aufspaltung der verschiedenen Trägerübergänge die Stärke des Magnetfelds ermittelt werden. Alle diese Messungen werden in Abschnitt 3.7 besprochen. Für die Seitenbandspektroskopie wurde der dipolverbotene  $S_{1/2}$ - nach  $D_{5/2}$ -Übergang des Kalziums bei 729 nm verwendet.

In Abbildung 3.10 ist die Lasersequenz, die für die Seitenbandspektroskopie verwendet wurde, zu sehen. Zuerst wurde der Kristall dopplergekühlt, was an den grauen Balken bei den 397 nm-, 866 nm- und 854 nm-Lasern zu erkennen ist. Dann wurden die Spins in den  $m_s = +1/2$  Zustand initialisiert, indem, statt des normalen 397 nm-Laserstrahls, ein  $\sigma^+$ -polarisierter 397 nm-Strahl für einige  $\mu$ s eingestrahlt wurde. Nun konnte mit einem 729 nm-Laserpuls versucht werden, ob ein Übergang zum  $D_{5/2}$ -Niveau anregbar war.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

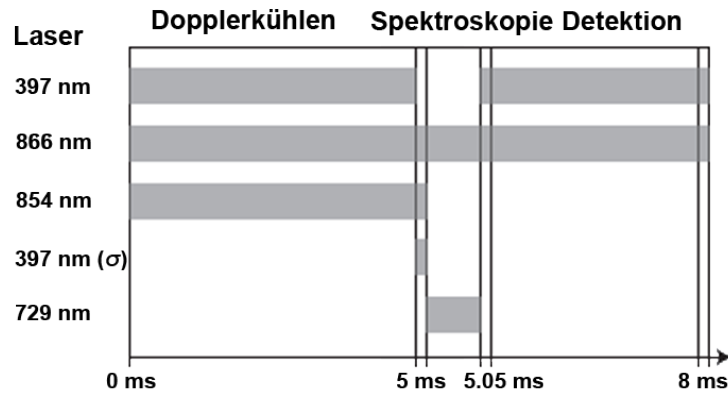


Abbildung 3.10: Lasersequenz der Spektroskopie. Aufgetragen ist die Einstrahlung (grau), beziehungsweise Nichteinstrahlung (weiß) des jeweiligen Lasers gegen die Zeit seit Beginn der Pulssequenz. Diese Sequenz wurde durch TTL-Pulse an die AOM's der einzelnen Laser realisiert.

Die Frequenz dieses Lasers konnte dabei durch einen AOM um bis zu 20 MHz verstimmt werden. Die Pulslänge wurde dabei, entsprechend der Frequenzauflösung, die erreicht werden sollte, zwischen einigen wenigen Mikrosekunden bis zu einer Millisekunde gewählt. Währenddessen musste gewährleistet sein, dass alle 397 nm-Strahlen und der 854 nm-Laser komplett ausgeschaltet waren, um das Ergebnis nicht zu verfälschen. Im Anschluss wurde die Anregung detektiert, indem nur der 397 nm-Laser, sowie der 866 nm-Laser eingestrahlt wurden und damit die Population des  $S_{1/2}$ -Niveaus zur Fluoreszenz angeregt wurde, während alle Ionen, die durch einen Übergang mit dem 729 nm-Laser in das  $D_{5/2}$ -Niveau gepumpt wurden, dunkel blieben. Mit der Seitenbandspektroskopie konnte der Kristall auf der Mikrosekunden-Zeitskala vermessen werden. Zusätzlich hätten die Ionen, etwa durch Seitenbandkühlung, in den Grundzustand der Bewegung gekühlt werden können.

## 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

Wie bereits in Abschnitt 2.2.3 und Abschnitt 2.3 beschrieben wurde, durchlaufen Ionenkristalle bei gewissen Werten von  $\alpha = \left(\frac{\omega_z}{\omega_y}\right)^2$  strukturelle Phasenübergänge. Dabei ergeben sich zwei- oder sogar dreidimensionale Kristalle, die aber immer noch feste Ionenpositionen und Schwingungsfrequenzen aufweisen. Für planare zweidimensionale Ionenkristalle gibt es eine Reihe interessanter Vorschläge zu deren Verwendung, beispielsweise werden laserinduzierte Spin-Spin-Wechselwirkungen auf solchen Kristallen verwendet und damit können frustrierte Spingitter erzeugt werden [BASK<sup>+</sup>11, BAO<sup>+</sup>12]. Auch die Peierls-Instabilität [BP12] oder Jan-Teller-Quantenphasenübergänge [PISK12, IPISK13] können untersucht werden, indem mit der Spin-Phonon-Wechselwirkung die geometrische Form des Kristalls mit der Spin-Spin-Wechselwirkung gekoppelt wird. Für diese Experimente ist die präzise Kontrolle der Ionenkristalle entscheidend. Um dies zu gewährleisten, müssen zuerst die Schwingungsmoden und ihre Frequenzen in zweidimensionalen Kristallen exakt beschrieben werden können. Sie sind wichtig für die Kühlung, wenn etwa Seitenbandkühlen verwendet werden soll, und auch für die spinabhängigen Lichtkräfte durch den Stark-Effekt [BSK<sup>+</sup>12, RTSP08, IEK<sup>+</sup>11]. In meiner Arbeit wurde zunächst untersucht, wie exakt mit der Pseudopotentialmethode die Positionen und damit einhergehend die Frequenzen, bei denen der strukturelle Phasenübergang auftritt, berechnet werden können. Im Anschluss wurden die Frequenzvorhersagen der Pseudopotentialmethode mit denen der zeitabhängigen Floquet-Lyapunov-Methode und mit den gemessenen Schwingungsfrequenzen in Zickzack-Kristallen verglichen.

### 3.2.1 Positionen in Zickzack-Kristallen

Ausgehend von den Berechnungen in Abschnitt 2.3 konnten die Positionen mit Hilfe der Pseudopotentialtheorie unter Vernachlässigung der Mikrobewegung berechnet werden. Dabei wurde die energetisch günstigste Anordnung für das zeitunabhängige Potential mit Gleichung 2.40 berechnet. Zuvor mussten alle drei Fallenfrequenzen gemessen werden, um sie in  $\Psi$  einsetzen zu können. Für diesen Zweck wurden die drei Schwerpunktschwingungen eines einzelnen Ions in dem verwendeten Potential angeregt, indem an eine der Elektroden eine resonante Wechselspannung angelegt wurde [NLSK<sup>+</sup>98]. In Abbildung 3.11 ist das einzelne Ion mit einer stark angeregten Schwingung in axialer Richtung zu sehen. Mit dieser Methode ließen sich die Fallenfrequenzen auf unter ein kHz genau bestimmen, war dies nicht genügend, konnte entweder ein Anregungsspektrum mit der elektronischen Anregung aufgenommen [Ulm10] oder mit der Seitenbandspektroskopie gearbeitet werden. Um die radiale Entartung aufzuheben, wurde in der Stabfalle, die für diese Messungen verwendet

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

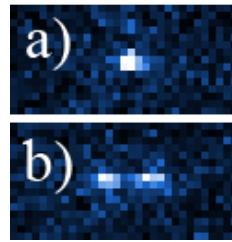


Abbildung 3.11: Aufgeschwungenes Ion. a) einzelnes Ion in der Implantationsfalle. b) angeregte Schwerpunktsmode des einzelnen Ions.

wurde, an die Gleichspannungselektroden (siehe Abbildung 3.1 (DC)) eine Spannung von 0,5 V angelegt. Die Radiofrequenzamplitude betrug  $V_{rf} = 300 V_{pp}$  bei  $\omega_{rf}/2\pi = 14,62$  MHz und die Endkappen waren auf  $U = 350$  V gelegt. Damit wurden Fallenfrequenzen von  $\omega_z/2\pi = 111$  kHz axial und  $\omega_y/2\pi = 316$  kHz radial, sowie ein deutlich höheres  $\omega_x$  in der dritten Raumrichtung erreicht. Die GP der Ionen wurden aus den Fluoreszenzbildern, wie es in Abbildung 3.13 (a) mit einem Sieben-Ionenkristall zu sehen ist, bestimmt, indem über 92 Aufnahmen gemittelt und eine Gaußkurve an die Daten angepasst wurde. Damit

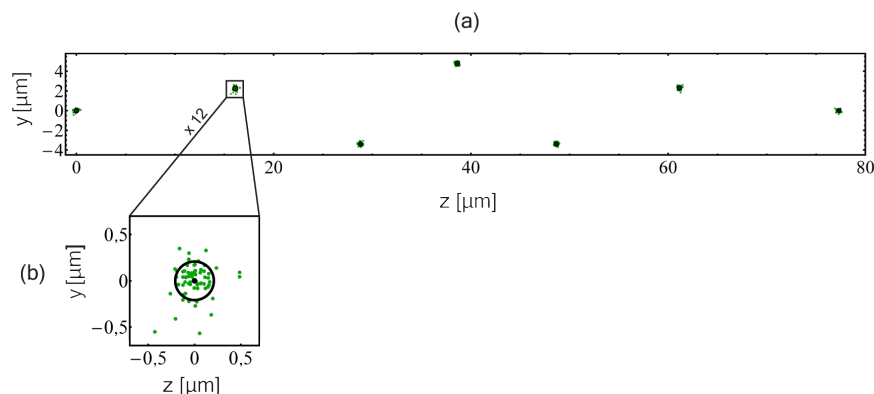


Abbildung 3.12: Gemittelte Ionenpositionen (schwarze Punkte) aus 92 Einzelergebnissen für zweidimensionale Gauß-Fits an die Ionen eines Sieben-Ionenkristalls in der Zickzack-Konfiguration. Jeder grüne Punkt entspricht dem Ergebnis eines einzelnen Gauß-Fits, deren Mittelwert dann der schwarze Punkt ist und der schwarze Kreis entspricht der Standardabweichung von diesem Mittelwert. Damit sich die Streuung um den Mittelwert besser erkennen lässt, ist im Teil (b) die Vergrößerung einer gemittelten Ionenposition mit verhältnismäßig großer Streuung zu sehen. Bild entnommen aus [Kau12].

ergaben sich die in Abbildung 3.12 (a) und (b) dargestellten, gemittelten Ionenpositio-



### 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

nen (schwarze Punkte). Die schwarzen Kreise entsprechen der  $\sigma$ -Standardabweichung, für die sich bei unseren Messungen 50 nm ergab. Da der Kristall unter einem Winkel von  $45^\circ$  beobachtet wurde (siehe Abbildung 3.13 (a)), wurden die Positionen auf der Y-Achse um den Faktor  $\sqrt{2}$  gestaucht, dies wurde für die berechneten Positionen entsprechend berücksichtigt. Um die experimentellen Daten mit den berechneten Daten vergleichen zu können, wurde das Pixelgrößenverhältnis der Kameraoptik benötigt. Zur Bestimmung des Pixelgrößenverhältnisses wurde ein linearer Zwei-Ionenkristall gefangen, die Frequenzen gemessen und mit der Gleichung 2.27 die Positionen und der Abstand berechnet, sowie die Anzahl der Pixel zwischen den beiden Zentren der Ionenpositionen auf dem Fluoreszenzbild ermittelt. Es ergab sich eine Pixelgröße von  $1,42 \frac{\mu\text{m}}{\text{Pixel}}$ . Eine Skalierung der mit der Pseudopotentialmethode berechneten Positionen ergab eine Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Positionen bis auf eine mittlere Abweichung von 84 nm, wie anhand der berechneten Positionen (rote Kreuze) in Abbildung 3.13 (b) und (c) zu sehen ist. Auch in dieser Abbildung entsprechen die schwarzen Punkte den Mittelwerten aus den Einzelaufnahmen und der Kreis der  $\sigma$ -Abweichung. Diese Übereinstimmung wurde für Zickzack-Kristalle mit sechs bis 17 Ionen gefunden [Kau12].

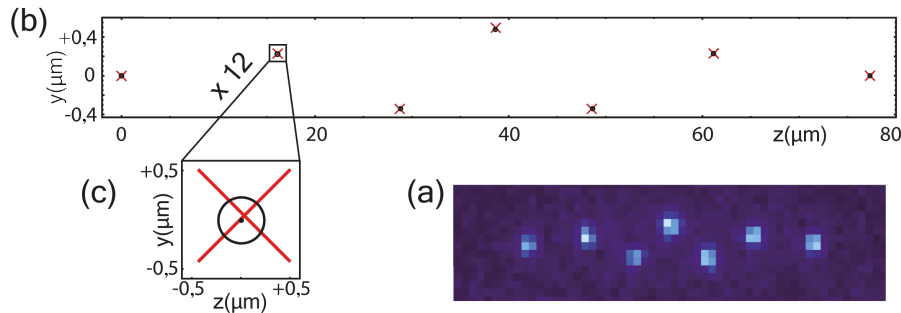


Abbildung 3.13: Vergleich der Ionenpositionen eines Zickzack-Kristalls im Experiment mit den Pseudopotentialberechnungen. (a) zeigt das Fluoreszenzbild des Kristalls, welches mit der Kamera aufgenommen wurde. In (b) und (c) sind die über 100 Bilder gemittelten Ionenpositionen (schwarze Punkte) mit ihrer  $\sigma$ -Standardabweichung von 50 nm (schwarze Kreise) im Vergleich zu den mit der Pseudopotentialmethode für eine harmonische Falle berechneten Positionen (rote Kreuze) zu sehen.

#### 3.2.2 Strukturelle Phasenübergänge

Es wird immer dann von einem strukturellen Phasenübergang gesprochen, wenn sich die Form des Kristalls klar definierbar ändert, so etwa beim Übergang in die Zickzack-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Konfiguration, bei der aus einem eindimensional angeordneten Kristall ein zweidimensionaler wird. Wie im Abschnitt 2.2.3 gezeigt wurde, kann dieser Übergang mit Hilfe des kritischen Fallenparameters  $\alpha_{krit}$  beschrieben werden. Dabei wird der Wert von  $\alpha$  geändert, indem zum Beispiel die axiale Fallenfrequenz erhöht wird, bis ein Phasenübergang auftritt. In der Arbeit von Enzer et. al. [ESG<sup>+</sup>00b] wurde erstmals der Übergang zwischen einem linearen und einem Zickzack-Kristall untersucht. Wir betrachteten jedoch auch weitere Übergänge, wie in Abbildung 3.16 zu sehen ist. Bei Ionenkristallen mit einer geraden Anzahl an Ionen sind diese Übergänge punktsymmetrisch zum Fallenzentrum angeordnet. Liegt die Anisotropie im Bereich von  $\alpha_{sym1} \leq \alpha < \alpha_{sym2}$  tritt eine weitere Symmetrie für die Kristallform auf, geradzahlige Kristalle sind unter dieser Bedingung symmetrisch bezüglich Spiegelungen an allen Achsen. In dieser Konfiguration existieren die beiden unterschiedlichen Grundzustände Zickzack und Zackzick nicht, da die Ionen von den Positionen her in beiden Anordnungen an derselben Stelle liegen und somit nur ein Grundzustand vorhanden ist. Dieser kann auch nicht der Zickzack- oder Zackzick-Konfiguration zugeordnet werden, da die Ionen der oberen und unteren Reihe des Kristalls genau übereinander liegen. Darum finden keine Konfigurationswechsel mehr statt, wodurch ein sehr ruhiger Ionenkristall erreicht wird, in dem etwa einzelne Ionen leichter adressiert werden können. Für die hier betrachteten Ionenanzahlen gilt  $\alpha_{krit1} < \alpha_{sym1} < \alpha_{sym2} < \alpha_{krit2}$ . In Abbildung 3.14 ist zu sehen, wie die Konfiguration eines Sechs-Ionenkristalls im jeweiligen Parameterbereich aussieht. Anhand der  $y$ -Auslenkung eines der beiden äußersten Ionen

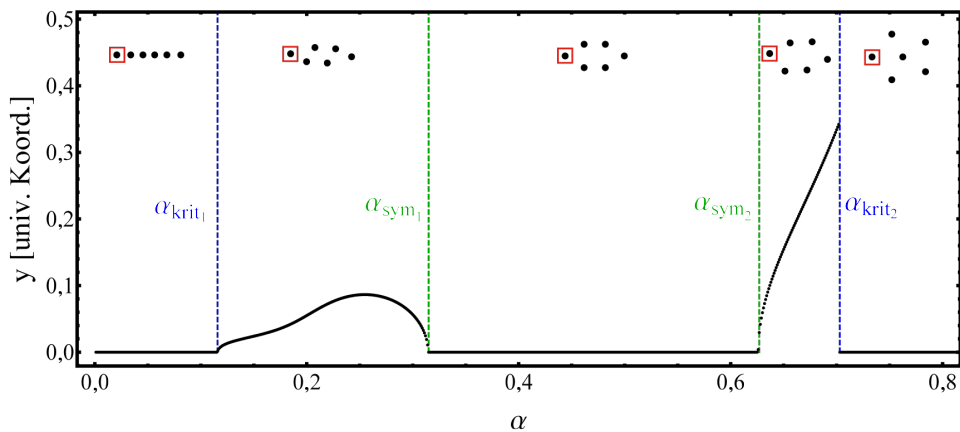


Abbildung 3.14: Symmetrieparameter-Festlegung für einen Sechs-Ionenkristall mittels der  $y$ -Auslenkung des äußersten linken Ions. Die Mittelung über 1000 Positionsberechnungen der Auslenkung (schwarze Linie) ist hier gegen die Anisotropie  $\alpha$  aufgetragen. Bild entnommen aus [Kau12].

### 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

können die beiden Symmetrieparameter leicht festgelegt werden, da die Randpositionen direkt stark von  $\alpha$  beeinflusst werden, da sich innerhalb des hochsymmetrischen Bereichs ihre Auslenkung nicht ändert. Durch Berechnungen der Ionenpositionen können mit Hilfe der Änderung des Aufenthaltsorts der äußersten Ionen die Symmetrieparameter für verschiedene Kristallgrößen festgelegt werden. Für die Tabelle 3.1 wurden die Symmetrieparameter auf drei Nachkommastellen genau berechnet, eine höhere Präzision kann mit kleineren Anisotropieschritten in der Berechnung der Positionen erreicht werden. Für vier

Ionenzahl N	4	6	8	10	12
$\alpha_{sym1}$	0,352	0,315	0,270	0,234	0,205
$\alpha_{sym2}$	-	0,627	0,422	0,278	0,207

Tabelle 3.1: Berechnete Symmetrieparameter für Kristalle mit gerader Ionenanzahl.

Ionen gibt es keinen Übergang bei  $\alpha_{sym2}$  zu einer weniger symmetrischen Konfiguration, da der theoretische Wert von  $\alpha_{sym2}$  über 1 liegt. Dies bedeutet jedoch, dass nicht mehr  $\omega_z$  die niedrigste Fallenfrequenz ist, sondern nun  $\omega_y$  und somit dreht sich der Kristall in die radiale Richtung. Dadurch sind die kritischen Anisotropien nun bei  $\frac{1}{\alpha_{sym1}}$  und  $\frac{1}{\alpha_{krit1}}$  und der Kristall wird in umgekehrter Reihenfolge durch die strukturellen Phasenänderungen bis zu einer linearen Konfiguration in radialer Richtung getrieben, wenn  $\omega_z$  weiter erhöht wird. Um den Verlauf der Symmetrieparameter besser zu veranschaulichen, wurden zwei Funktionen an sie angepasst. Wird  $\alpha_{sym1}(N) = a \cdot N + b$  und  $\alpha_{sym2}(N) = p \cdot N^q$  verwendet, ergeben sich die Fitparameter:

$$\alpha_{sym1}(N) = a \cdot N + b \quad \text{mit} \quad a = -0,0188 \pm 0,0007 \quad \text{und} \quad b = 0,425 \pm 0,007 \quad (3.1)$$

sowie

$$\alpha_{sym2}(N) = p \cdot N^q \quad \text{mit} \quad p = 10,4 \pm 1,6 \quad \text{und} \quad q = -1,56 \pm 0,08 \quad (3.2)$$

Dabei ist die Anpassung an  $\alpha_{sym2}$  deutlich schlechter als diejenige an  $\alpha_{sym1}$ , was an den deutlich größeren Fehlern zu erkennen ist. Nachdem nun die beiden neuen Symmetrieparameter funktional beschrieben werden können und ihre Abhängigkeit von der Ionenanzahl gezeigt wurde, soll dasselbe für die beiden kritischen Anisotropien  $\alpha_{krit1}$  und  $\alpha_{krit2}$  erreicht werden. Zur Berechnung von  $\alpha_{krit1}$  kann Gleichung 2.38 benutzt werden, jedoch wurde für Abbildung 3.15 eine leicht abweichende Methode verwendet, die in der Diplomarbeit von Henning Kaufmann beschrieben wird [Kau12]. In seiner Arbeit wurde  $\alpha_{krit1}$  für Kristallgrößen von  $N = 3$  bis  $N = 25$  Ionen berechnet und die Funktion

$$\alpha_{krit1}(N) = c \cdot (N)^\beta \quad \text{mit} \quad c = 3,05 \pm 0,04 \quad \text{und} \quad \beta = -1,820 \pm 0,009 \quad (3.3)$$

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

aus Gleichung 2.38 entsprechend angepasst. Für größere Kristalle gibt es molekulardynamische Berechnungen von Schiffer [Sch93], experimentelle Ergebnisse zu  $\alpha_{krit1}$  finden sich in der Arbeit von Enzer [ESG<sup>+</sup>00b]. Alle uns bekannten Werte sind zum Vergleich in Tabelle 3.2 aufgeführt. Die Unterschiede in den Werten für die Konstanten  $c$  und  $\beta$

Quelle	$c$	$\beta$
Kaufmann $N = 3 - 25$ (theo.)	$3,05 \pm 0,04$	$-1,820 \pm 0,009$
Schiffer $N = 10, 25, 70, 180, 500$ (theo.)	2,53	-1,73
Enzer $N = 3 - 10$ (exp.)	$3,23^{+0,06}_{-0,2}$	$-1,83 \pm 0,04$
Enzer $N = 3 - 10$ (theo.)	$2,94 \pm 0,07$	$-1,80 \pm 0,01$
Enzer $N = 3 - 100$ (theo.)	$2,88 \pm 0,03$	$-1,773 \pm 0,003$

Tabelle 3.2: Übersicht über alle uns bekannten Werte für den kritischen Anisotropieparameter  $\alpha_{krit1}$ . Für die Funktionsparameter  $c$  und  $\beta$  aus der Arbeit von Schiffer [Sch93] liegen uns keine Angaben über die Fehler vor.

beruhen auf einer unterschiedlichen Gewichtung der Ergebnisse für kleine Ionenanzahlen. So wurden in der Arbeit von Schiffer [Sch93] und Enzer [ESG<sup>+</sup>00b] kleine Anzahlen weniger stark gewichtet als große, wohingegen bei Kaufmann [Kau12] alle Ionenanzahlen gleich gewichtet wurden.

Der kritische Anisotropieparameter  $\alpha_{krit2}$  wurde in der Arbeit von Kaufmann [Kau12] durch Sprünge in den Kristallabmessungen berechnet, vergleichbar mit dem Sprung in Abbildung 3.14 bei  $\alpha = \alpha_{krit2}$  in der y-Auslenkung. Diese Sprünge konnten in den Simulationen nur für Kristallgrößen im Bereich  $6 \leq N \leq 25$  berechnet werden, wobei für  $N = 11$  und  $N = 14$  keine sprunghaften Übergänge auftraten. Darum sind diese Werte mit einem Fehler behaftet worden. Wie bei  $\alpha_{krit1}$  tritt der strukturelle Phasenübergang bei zunehmender Ionenanzahl bei immer kleineren Anisotropien auf, da die lokale Frequenz immer weiter erhöht wird durch den zunehmenden Coulombdruck des Restkristalls. Deshalb kann die gleiche Funktion Gl.3.3 an unsere Werte angepasst werden und es ergibt sich:

$$\alpha_{krit2}(N) = g \cdot (N)^h \quad \text{mit} \quad g = 12,49 \pm 0,97 \quad \text{und} \quad h = -1,633 \pm 0,036 \quad (3.4)$$

In den Arbeiten von Ferreira [FCO<sup>+</sup>08, FFP10] wurden vergleichbare Rechnungen für verschieden geladene Teilchen verwendet, und in der Arbeit von Dubin [Dub93] wurde auch der Übergang von einem zweidimensionalen in ein dreidimensionales System betrachtet. Die von uns postulierte, mit  $\alpha_{krit1}$  vergleichbare funktionale Abhängigkeit von  $N$  für  $\alpha_{krit2}$  ist ein recht gutes Modell, was an den relativ kleinen Fehlern der Parameter und dem ähnlichen Verlauf zu den berechneten Werten in Abbildung 3.15 erkennbar ist. Es ist auch

### 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

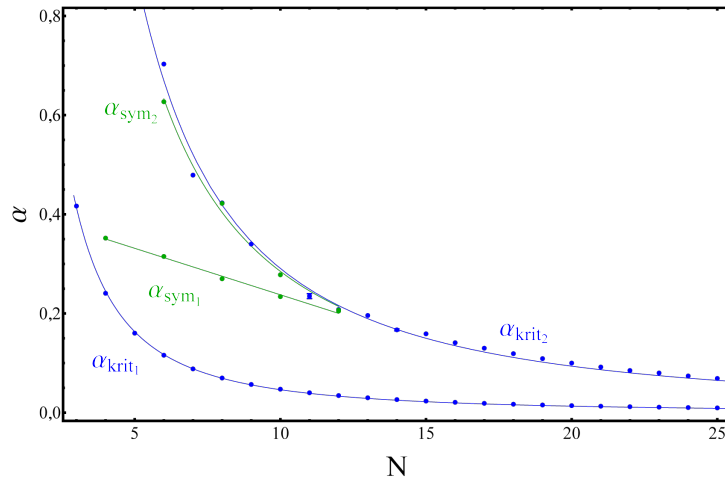


Abbildung 3.15: Alle Anisotropieparameter für strukturelle Änderungen des Kristalls in Abhängigkeit von der Ionenanzahl. Für die Ionenzahlen  $N = 8, 10, 12$  ist zwar der Abstand zwischen  $\alpha_{sym2}$  und  $\alpha_{krit2}$  sehr klein, aber für alle Ionenanzahlen im Bereich  $6 \leq N \leq 12$  gilt  $\alpha_{sym2} < \alpha_{krit2}$ . Bild entnommen aus [Kau12].

zu sehen, dass der Abstand zwischen  $\alpha_{sym2}$  und  $\alpha_{krit2}$  bei zunehmender Kristallgröße immer kleiner wird. Dasselbe gilt für den Abstand von  $\alpha_{sym1}$  und  $\alpha_{sym2}$  zueinander. Somit liegen für  $N > 12$  beide Symmetrieparameter überhalb von  $\alpha_{krit2}$ , daher tritt hier keine hochsymmetrische Phase mehr auf. Aus  $\alpha_{krit2}(N) = 12,49 \cdot N^{-1.633}$  für  $N = 4$  ergibt sich zwar ein Wert von 0,902, der noch erreicht werden kann, doch eine Kristallkonfiguration mit drei Ebenen bei vier Ionen ist wahrscheinlich energetisch zu ungünstig, um sie zu beobachten. Trotz eingehender Untersuchung konnte dieser Übergang in den Simulationen von Kaufmann [Kau12] nicht gefunden werden. Ab  $N = 3$  liegt  $\alpha_{krit2}$  über eins und der Kristall dreht sich somit wieder, statt eine strukturelle Phasenänderung zu durchlaufen. Es ist zu sehen, dass die experimentell ermittelten Kristallkonfigurationen mit den aus der Pseudopotentialtheorie heraus berechneten kritischen  $\alpha$ -Werten übereinstimmen. Werden die kritischen  $\alpha$ -Werte, die mit der Pseudopotentialmethode berechnet wurden, mit Werten aus einer zeitabhängigen Lösung verglichen, so stimmen die Werte bis auf 1% überein. Dieser Unterschied kann von unseren Messdaten nicht aufgelöst werden. Alle Berechnungen der Anisotropieparameter in diesem Abschnitt wurden von Henning Kaufmann durchgeführt und für weitere Details wird auf seine Diplomarbeit verwiesen [Kau12]. Nachdem nun alle Anisotropieparameter für jede Kristallgröße beschrieben werden können, sollen die Werte experimentell verifiziert werden. Um möglichst große Abstände zwischen

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

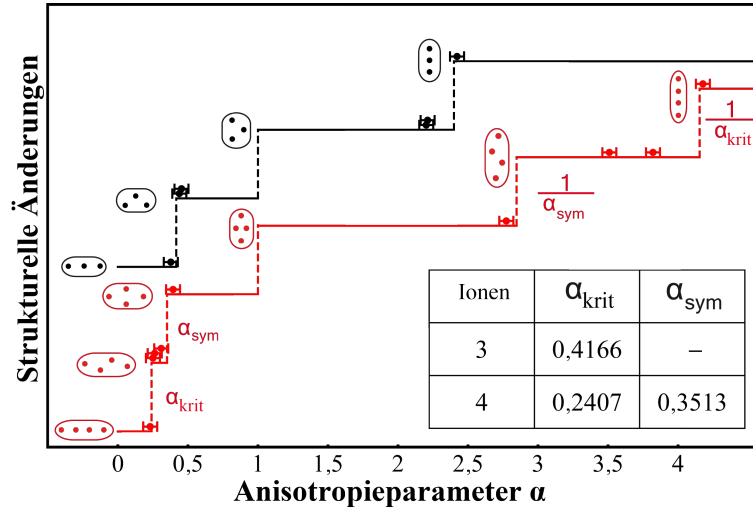


Abbildung 3.16: Gemessene und berechnete strukturelle Änderungen eines Drei- und Vier-Ionenkristalls. Dabei ist die jeweilige Struktur als eine Stufe eingezeichnet, aufgetragen gegen die entsprechende Anisotropie  $\alpha$ . Von kleinen Anisotropien beginnend ist jeweils die entsprechende Struktur am Anfang ihrer Stufe dargestellt, die gemessenen Strukturen sind auf der ihrer Struktur entsprechenden Höhe eingezeichnet. Der Drei-Ionenkristall zeigt lediglich Strukturänderungen bei  $\alpha_{krit1}$  und  $\frac{1}{\alpha_{krit1}}$ .

den Übergängen zu haben, wurden Messungen an Drei- und Vier-Ionenkristallen in der Stabfalle, sowie in der Implantationsfalle durchgeführt. Wir mussten beide Fallen für diese Messungen verwenden, da für hohe Anisotropien von  $\alpha > 1$  Ionenkristalle in der Stabfalle nicht stabil waren, im Gegensatz zu Kristallen in der Implantationsfalle, die jedoch nicht die ganze Zeit zur Verfügung stand. Die Messungen mit  $\alpha < 1$  wurden deshalb in der Stabfalle durchgeführt. Dazu wurde an die Endkappen eine Spannung von  $U_{axial} = 400 \text{ V}$ , sowie eine Kompensationsspannung von  $U_{Komp} = -0,183 \text{ V}$  angelegt. Der radiale Einschluss wurde mit einer Wechselspannung von  $V_{rf} = 300 \pm 15 V_{pp}$  erzeugt und die radiale Anisotropie wurde geändert, indem auf die Gleichspannungselektroden (DC-Elektroden, Abbildung 3.1) die Offsetspannung  $U_{Off}$  angelegt wurde. Für den Anisotropieparameter wird ein relativ großer Fehler von  $\Delta\alpha = 0,05$  angegeben, da die Konfigurationsänderungen anhand der Ionenpositionen auf dem Kamerabild mit seiner Auflösung von  $1,42 \frac{\mu\text{m}}{\text{Pixel}}$ , gemessen wurden. Die Fallenfrequenzen und somit die Anisotropieparameter  $\alpha$  wurden mit der Schwingungsmodenanregung, die schon in Abschnitt 3.2.1 verwendet wurde, gemessen. Die Messungen im Bereich  $\alpha > 1$  wurden in der Implantationsfalle durchgeführt. Dabei wurde an alle Segmente, außer Segment 6, eine positive Gleichspannung von  $2.0 \text{ V}$  angelegt. Segment 6 wurde mit unterschiedlichen negativen Spannungen beschaltet, um

### 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

Ionenanzahl	Konfiguration	$U_{Off}$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
3	Linear	-1,54	199,4(3,0)	0,378(50)
3	Zickzack	-1,64	185,1(3,0)	0,439(50)
3	Zickzack	-1,66	181,9(3,0)	0,454(50)
4	Linear	-1,06	255,3(3,0)	0,231(50)
4	Zickzack	-1,17	245,1(3,0)	0,250(50)
4	Zickzack	-1,21	239,1(3,0)	0,263(50)
4	Zickzack	-1,37	220,4(3,0)	0,309(50)
4	Kreuzgeometrie	-1,56	195,3(3,0)	0,394(50)

Tabelle 3.3: Alle in der Stabfalle gemessenen Kristallkonfigurationen, sowie die dazugehörige untere radiale Fallenfrequenz  $\omega_y$  und die entsprechende Anisotropie  $\alpha$  eines Drei- und Vier-Ionenkristalls bei einer axialen Frequenz von  $\omega_z/2\pi = 122,6 \pm 0,4$  kHz.

so durch Änderung der axialen Fallenfrequenz verschiedene Anisotropien einzustellen. Die Wechselspannungsamplitude betrug  $V_{r,f} = 300 \pm 15 V_{pp}$  und zur Kompensation wurde  $U_{Komp} = 0,026 V$  verwendet. In der Implantationsfalle wurde die Wechselspannung zur

Ionenanzahl	Konfiguration	$U_6$ [V]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]	$\omega_z/2\pi$ [kHz]	$\alpha$
3	Senkrecht Zickzack	-1,07	420,8(3,0)	624,4(4)	2,202(50)
3	Senkrecht Zickzack	-1,07	420,8(3,0)	625,8(4)	2,212(50)
3	Senkrecht linear	-1,10	405,6(3,0)	631,2(4)	2,422(50)
4	Senkrecht Kreuzgeometrie	-1,14	383,5(3,0)	638,7(4)	2,774(50)
4	Senkrecht Zickzack	-1,20	346,6(3,0)	649,3(4)	3,509(50)
4	Senkrecht Zickzack	-1,22	334,0(3,0)	652,9(4)	3,821(50)
4	Senkrecht linear	-1,24	321,3(3,0)	656,7(4)	4,177(50)

Tabelle 3.4: Alle in der Implantationsfalle gemessenen Kristallkonfigurationen, sowie die dazugehörige untere radiale Fallenfrequenz  $\omega_y$ , die axiale Fallenfrequenz  $\omega_z$  und die entsprechende Anisotropie  $\alpha$  eines Drei- und Vier-Ionenkristalls

Fallenfrequenzbestimmung symmetrisch an die Endkappen angelegt. Abbildung 3.16 zeigt alle gemessenen strukturellen Phasenübergänge der Drei- und Vier-Ionenkristalle. Alle Werte für  $\alpha$  sind von den Messungen in der Stabfalle in der Tabelle 3.3 und von den Messungen in der Implantationsfalle in der Tabelle 3.4 eingetragen. Im Bereich  $\alpha > 1$  war  $\omega_y$  statt  $\omega_z$  die niedrigste Fallenfrequenz und die strukturellen Phasenübergänge wurden bei den inversen Werten in umgekehrter Reihenfolge im Vergleich zu  $\alpha < 1$  durchlaufen. Alle Messungen zeigten die zuvor berechneten Strukturen in ihrem jeweiligen  $\alpha$ -Bereich. Der genaue Übergangspunkt konnte von uns jedoch nur auf  $\Delta\alpha = 0,05$  festgelegt werden, da wir durch die rein optische Kontrolle der Kristallkonfiguration mit diesem Fehler behaftet

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

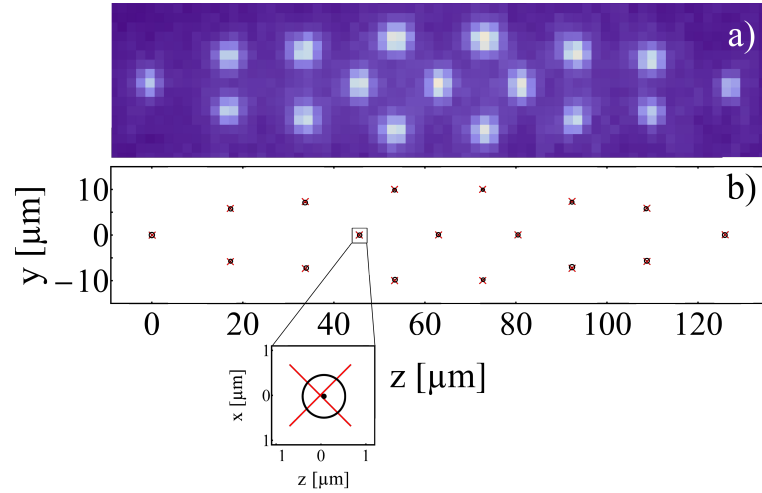


Abbildung 3.17: Siebzehn-Ionenkristall mit drei Ebenen bei einer Anisotropie von  $\alpha = 0,183 \pm 0,004$  und somit oberhalb von  $\alpha_{krit2}$ . a) Fluoreszenzbild des Kristalls bei Fallenfrequenzen von  $\omega_x/2\pi = 390$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 260$  kHz und  $\omega_z/2\pi = 111$  kHz. b) der Vergleich der berechneten (rote Kreuze) und gemessenen Positionen (schwarze Kreise) ergibt einen relativen Fehler von unter 1%.

waren. Im Bereich der sehr hohen Anisotropien haben die Kristalle sehr empfindlich auf kleine Spannungsänderungen reagiert, sodass es dort nicht möglich war, jeden gewünschten Anisotropiewert einzustellen. Deshalb liegen in diesem Bereich die gemessenen Punkte etwas weiter von den Übergängen entfernt, als dies bei den kleinen Anisotropien der Fall ist. Wie vorher besprochen wurde, gibt es bei dem Drei-Ionenkristall nur den Übergang bei  $\alpha_{krit1}$  und bei dem Vier-Ionenkristall nur die Übergänge bei  $\alpha_{krit1}$  und  $\alpha_{sym1}$ , weshalb Abbildung 3.16 auf diese beschränkt ist. Der Übergang bei  $\alpha_{krit2}$  konnte ebenfalls nachgewiesen werden, was daran zu sehen ist, dass die Ionenpositionen des Kristalls in Abbildung 3.17 mit den berechneten übereinstimmen und dieser Kristall oberhalb von  $\alpha_{krit2}$  liegt. Insgesamt konnte mit diesen Messungen gezeigt werden, dass die Ionenpositionen und die strukturellen Phasenübergänge im Anisotropiebereich von  $0,0025 \leq \alpha < 4,5$  mit der Pseudopotentialmethode richtig vorhergesagt werden können.

#### 3.2.3 Zickzackmoden

Ein anderes Bild zeigt sich, wenn die Schwingungsmoden der Zickzack-Kristalle betrachtet werden. Dazu wurden alle Seitenbandspektren in diesem Abschnitt in der Mikrofalle aufgenommen. Da die Frequenzen der Schwingungsmoden durch die Coulombwechselwirkungen zwischen den Ionen an ihrer GP festgelegt sind, wurden diese Kräfte für kleine Auslen-



kungen um die GP entwickelt, linearisiert und die Hessematrix gelöst, um die Frequenzen mit der Pseudopotentialmethode berechnen zu können. Die auf diese Weise berechneten Frequenzen stimmen jedoch nicht mit den gemessenen überein, denn mit Hilfe der Seitenbandspektroskopie können die Eigenfrequenzen mit einer relativen Genauigkeit von 0,2% oder besser bestimmt werden. In Tabelle 3.5 sind die mit der Pseudopotentialme-

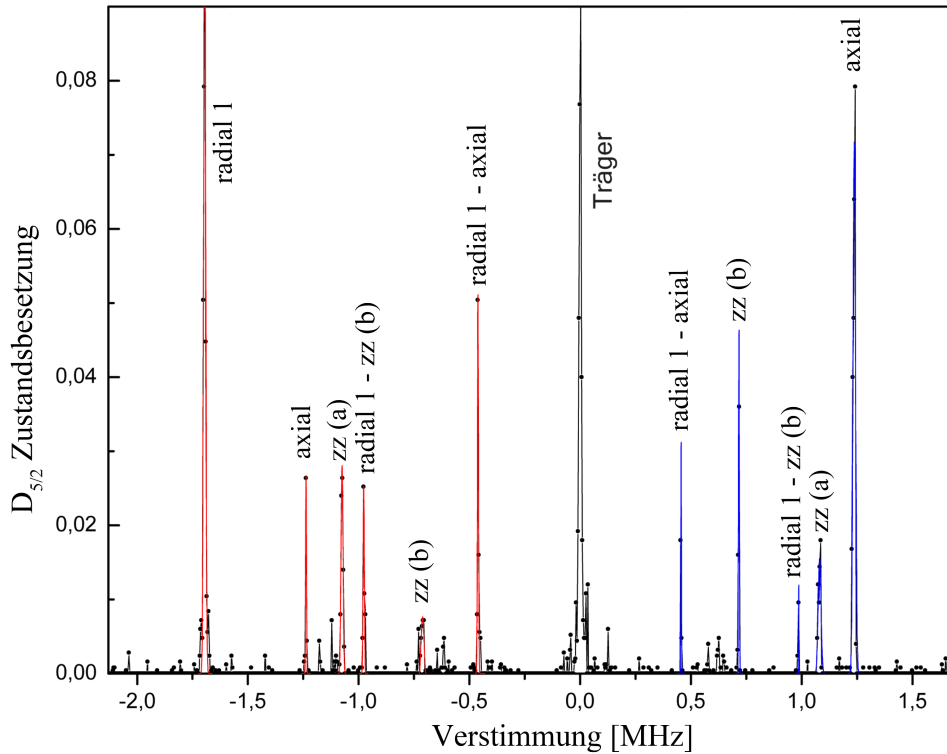


Abbildung 3.18: Seitenbandspektrum eines Drei-Ionenkristalls in der Zickzack-Konfiguration. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des  $D_{5/2}$ -Zustands gegen die Verstimmung des 729 nm-Lasers von der Übergangsfrequenz. Alle Seitenbänder sind mit dem Namen der entsprechenden Schwingungsmode markiert.

thode und der Floquetmethode berechneten, sowie die gemessenen Schwingungsfrequenzen eines Drei-Ionenkristalls mit  $\alpha = 0,53$  eingetragen. Die experimentellen Werte werden beeinflusst von fluktuierenden Fallenspannungen, Laserfrequenzverschiebungen und magnetischen Feldschwankungen während der Messungen. Um deren Fehler abzuschätzen, wurden mehrere rote und blaue Seitenbänder aus mehreren Spektren, wie in Abbildung 3.18 dargestellt, miteinander verglichen. Diese Spektren wurden am selben Tag und mit den gleichen Einstellungen wie die Ergebnisse aufgenommen. Aus der sich anhand der Mes-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

sungen ergebenden Statistik wurden die Fehler ermittelt. Um die Schwingungsfrequenzen mit der Pseudopotentialmethode zu berechnen, wurden zuerst die Frequenzen der Schwerpunktsmoden in  $\omega_z$  und  $\omega_y$  benötigt, die mit Hilfe der Wechselspannungsanregung direkt im Experiment bestimmt werden konnten. Die komplexeren Schwingungsmoden ließen sich nicht mehr mit elektrischen Feldern auf weit entfernten Elektroden anregen, da die Richtung der benötigten Anregung bei diesen Schwingungen von Ion zu Ion wechselt und somit die Anregungswahrscheinlichkeit gegen null geht. Diese wurden erst in den Seitenbandspektren sichtbar. Nachdem nun die Schwerpunktsmoden bekannt waren, konnten die Positionen im Pseudopotential berechnet und daraus die Frequenzen der Zickzackmoden bestimmt werden. Solange die axiale Mikrobewegung vernachlässigt werden konnte, waren die Schwerpunktsmoden unabhängig von der Mikrobewegung. Darum wurde für die Pseudopotentialmethode dasselbe Ergebnis wie für die zeitabhängige Floquetmethode erwartet. Systematische Fehler, wie etwa der AC-Stark Effekt, sind mit  $\Delta f < 1$  kHz in dem Fehler der Frequenzen enthalten, und dieser systematische Fehler führte zu einer Unsicherheit von 14 kHz und 12 kHz für die Frequenzen der Zickzack-Schwingungsmoden. In der Arbeit von Landa [LDRR12b] konnte rechnerisch gezeigt werden, dass der Einfluss der Mikrobewegung signifikante Korrekturen, im Vergleich zu den Werten, die mit der Pseudopotentialmethode bestimmt wurden, zu den berechneten Schwingungsmodenfrequenzen liefert. Dies konnte in unseren Experimenten bestätigt werden [KUJ<sup>+</sup>12a]. Dieser Effekt tritt selbst schon bei relativ kleinen  $q$ -Werten auf. Um diesen Einfluss richtig zu berücksichtigen, wurde die Floquetmethode, die in Abschnitt 2.3.3 besprochen wurde, verwendet, um die Zickzackmoden zu berechnen. Dabei sind die Floquet-Werte in Tabelle 3.5 die beste Anpassung an alle gemessenen Schwingungsfrequenzen [KUJ<sup>+</sup>12b]. Die Pseudopotentialtheorie

Methode	$\omega_{zz}(b)$ [kHz]	$\omega_{zz}(a)$ [kHz]	$\omega_z$ [kHz]	$\omega_y/2\pi$ [kHz]
Experiment	$113,6 \pm 0,3$	$171,6 \pm 0,3$	$197,0 \pm 0,3$	$269,8 \pm 0,5$
PPT	$116,2 \pm 2,2$	$165,7 \pm 1,9$	197,0	269,8
FLT	113,8	171,6	197,3	269,1

Tabelle 3.5: Hier sind die gemessenen und berechneten Frequenzen der untersten beiden Zickzackmoden und der axialen sowie unteren radialen Schwerpunktsmoden zusammengefaßt. Die Abweichung der Pseudopotentiallösung (PPT) von den gemessenen Ergebnissen ist deutlich zu erkennen, die andererseits bis auf 0,2% mit den Lösungen der zeitabhängigen Floquet-Methode (FLT) übereinstimmen.

liefert ungenaue Ergebnisse, da die Näherung in Gleichung 2.11 für Zickzack-Kristalle in der radialen Richtung nicht mehr gültig ist, denn alle Terme ab der Ordnung  $O\left(\frac{q_i^2}{4}\right)$  mit  $i = x, y$  können hier nicht mehr vernachlässigt werden [LDRR12b]. Die schnelle Oszillation

der Ionen um ihre GP mit der Antriebsfrequenz modifiziert periodisch die Coulombwechselwirkung zwischen ihnen und so die Frequenzen der Eigenschwingungen. Darum konnten nicht einfach nur die statischen GP in der Hessematrix benutzt werden, sondern es musste die zeitabhängige Matrix gelöst werden. Zur Lösung der zeitabhängigen Differentialgleichungen wurde die Floquet-Lyapovmethode, die in Abschnitt 2.3.3 beschrieben wurde, verwendet. Indem dabei die Kräfte zwischen den Ionen in eine Fourierreihe entwickelt wurden, ergaben sich wieder entkoppelte Moden [LDRR12b], die nun mit einer Überlagerung der Sekularschwingung mit der Mikrobewegung schwingen. Dieser Effekt ist vergleichbar mit der Lambverschiebung, bei der die Zitterbewegung des Elektrons zu einer Änderung der Energielevels des Wasserstoffs führt [WSKH92]. Für die Ergebnisse der Floquetmethode

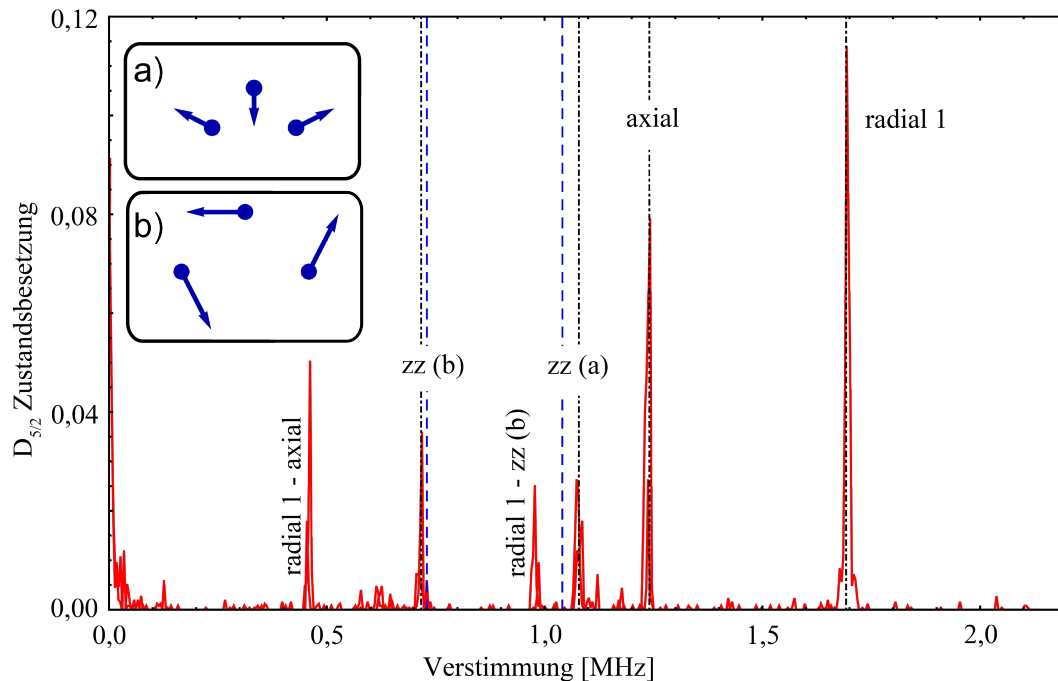


Abbildung 3.19: Gefaltetes Seitenbandspektrum eines Drei-Ionenkristalls in der Zickzack-Konfiguration. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des  $D_{5/2}$ -Zustands gegen die Differenzfrequenz zum Träger. Blau gestrichelt sind die Ergebnisse der Pseudopotentiallösungen eingetragen, schwarz gestrichelt sind die Floquetlösungen eingezeichnet. Unter a) und b) sind die Amplituden und Richtungen der Schwingungen der Ionen in den Zickzackmoden  $zz(a)$  und  $zz(b)$  eingezeichnet.

wurden die fünf Frequenzen der drei Schwerpunktsmoden und der zwei untersten Zickzackmoden mit einem gewichteten Least-Squares-Fit angepasst. Dieser Fit hatte drei Parame-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

ter  $q_y$ ,  $a_z$  und  $a_y$ , da  $a_x = -a_z + a_y$  dank der Laplacegleichung festgelegt werden kann. Die Norm des gewichtete Least-Squares-Fits ist eine Zufallsvariable, die wie  $\chi^2$  mit zwei Freiheitsgraden verteilt ist [KUJ<sup>+</sup>12b]. Während die Anpassung der Pseudopotentiallösungen an alle Messergebnisse eine Übereinstimmungswahrscheinlichkeit von lediglich  $10^{-11}$  ergibt, trifft die Floquetlösung beide Zickzackmoden und hat eine Wahrscheinlichkeit von 22% mit allen Eigenfrequenzen übereinzustimmen. Dies zeigt, dass die Pseudopotentialmethode nicht in der Lage ist, die richtigen Schwingungsfrequenzen für Zickzack-Kristalle vorherzusagen. Um dies weiter zu veranschaulichen, wurde in Abbildung 3.19 das gefaltete Seitenbandspektrum eines Drei-Ionenkristalls in der Zickzack-Konfiguration abgebildet. Die Faltung des Spektrums wurde wie folgt durchgeführt: Zuerst wurde die Frequenz des Trägerübergangs bestimmt. Im Anschluss wurden alle Anregungswahrscheinlichkeiten an dieser Frequenz gespiegelt. Dazu wurden die beiden Wahrscheinlichkeiten multipliziert, die gleich weit über- und unterhalb der Trägerfrequenz lagen, und dieses Ergebnis wurde dann über die Differenzfrequenz zum Träger aufgetragen. Auf diese Weise wurde das Hintergrundrauschen unterdrückt und so konnten auch Moden mit einer geringen Anregungswahrscheinlichkeit relativ gut erkannt werden. In dem Spektrum in Abbildung 3.19 können die Schwingungsmoden des Zickzack-Kristalls betrachtet werden. In den Bildabschnitten a) und b) sind die Bewegungsrichtungen der einzelnen Ionen bei den unteren beiden Zickzackmoden  $zz(a)$  und  $zz(b)$  abgebildet. Im Spektrum ist leicht zu erkennen, dass die berechneten Frequenzen für die Schwerpunktsmoden axial und radial 1 bei beiden Methoden bis auf 0,2% mit den Messungen übereinstimmen, doch bei den beiden Zickzackmoden sind deutliche Abweichungen der Pseudopotentiallösungen zu erkennen. Die Abweichungen betragen 37 kHz beziehungsweise 15 kHz für die Zickzackmoden.

Der Einfluss der Mikrobewegung auf die Schwingungsmoden konnte weiter untersucht werden, indem in den theoretischen Rechnungen der Mathieuparameter  $q$  verändert wurde und beobachtet wurde, wie sich die Frequenzen der beiden Zickzackmoden  $zz(a)$  und  $zz(b)$  dabei verändern. In der Pseudopotentialtheorie sind diese beiden Moden unabhängig vom  $q$ -Parameter, darum sind sie als Konstanten in Abbildung 3.20 eingetragen. In der realen Falle ist der  $q$ -Parameter normalerweise fest und kann nur sehr schwer über einen großen Bereich verändert werden. In der Mikrofalle lag ein  $q$ -Wert von  $q \approx 0,2$  vor, die sich daraus ergebenden Frequenzen für  $zz(a)$  und  $zz(b)$  stimmten mit den Berechnungen der Floquetmethode überein, und hatten eine signifikante Abweichung von den Werten der Pseudopotentialtheorie. Für große  $q$ -Werte kann die relative Frequenzverschiebung bis zu 20% betragen. Wird bedacht, dass die Mikrobewegungsamplitude jedes Ions entgegengesetzt proportional zu seiner radialen GP ist und dass diese Bewegung einen großen Beitrag in der Richtung des Eigenvektors der  $zz(a)$ -Mode hat, kann verstanden werden, dass diese

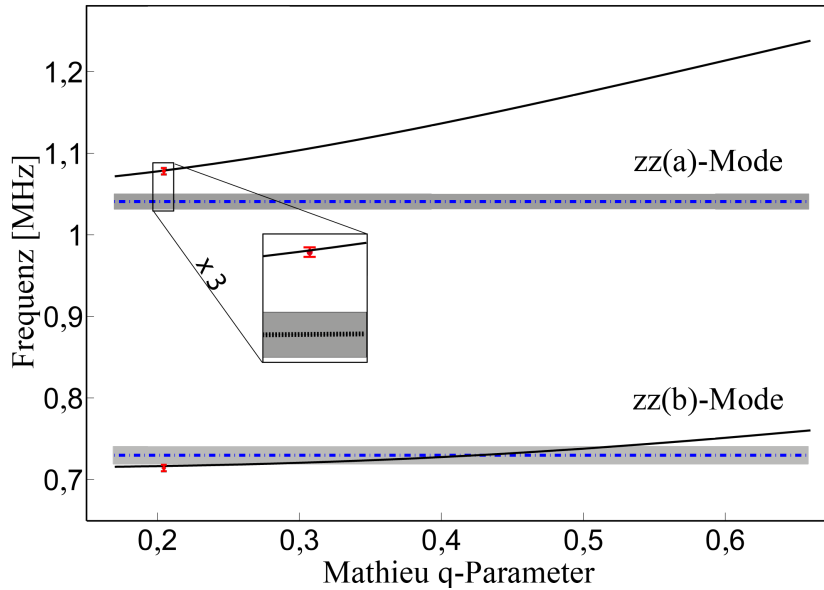


Abbildung 3.20: Frequenz der Zickzackmoden als Funktion des Fallenparameters  $q$ . Die blauen Linien sind die Pseudopotentiallösungen, die schwarzen die Lösungen der Floquetmethode und die roten Punkte die Messwerte für die beiden Zickzackmoden  $zz(a)$  und  $zz(b)$  in der Mikrofalle.

Mode am stärksten von der Mikrobewegung beeinflusst wird. An jedem Punkt der periodischen Bewegung dieser Schwingungsmode sind die Rückstellkräfte für diese Mode stärker als dies in der Mitte der Falle der Fall wäre, darum steigt ihre Frequenz monoton mit der Amplitude der Mikrobewegung und somit mit dem  $q$ -Wert.

### 3.2.4 Detektion von Defekten

In Zickzack-Kristallen können außer den Veränderungen im Schwingungsmodenspektrum des Kristalls strukturelle Defekte auftreten. Einige der möglichen Kristallkonfigurationen, die in Zickzack-Kristallen beobachtet werden konnten, sind in Abbildung 3.21 dargestellt. Bild a) zeigt einen linearen Kristall mit 16 Ionen, wie er unterhalb von  $\alpha_{\text{krit1}}$  vorliegt. In b) und c) sind die Zickzack- sowie die Zackzick-Struktur erkennbar, welche die entarteten Grundzustände oberhalb von  $\alpha_{\text{krit1}}$  sind. Des Weiteren sind unter d) und e) Kristalle mit einem Defekt und unter f) eine Kristallkonfiguration mit zwei Defekten abgebildet. Soll zum Beispiel die Erzeugung dieser Defekte untersucht werden (siehe Abschnitt 3.3), so ist es nötig, eine automatische Klassifizierung von Kristallbildern zu implementieren. Dies war einerseits auf Grund der großen Datenmenge, die für eine verlässliche Statistik benötigt wurde, notwendig und andererseits um eine objektive Zuordnung einzelner Bilder

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

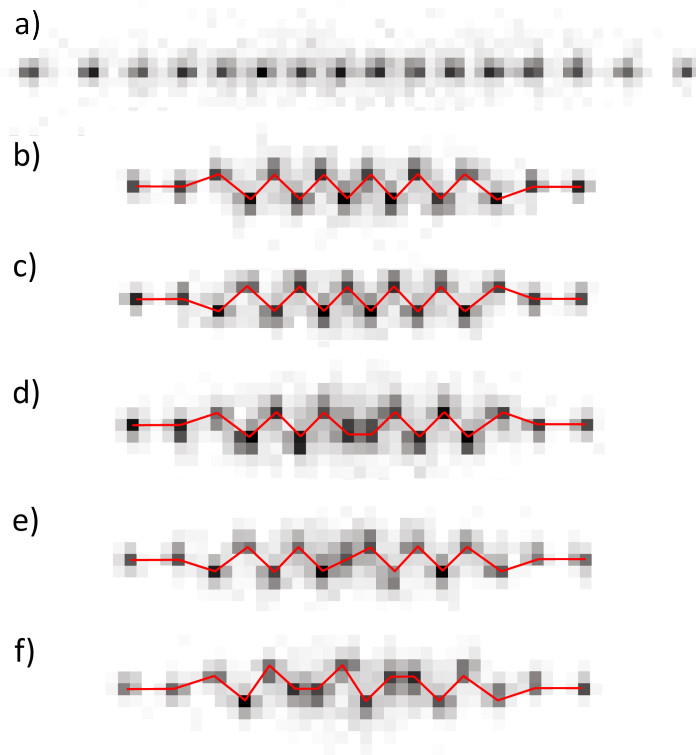


Abbildung 3.21: Die verschiedenen Kristallstrukturen, die wir beobachten konnten. In a) ist ein linearer Sechzehn-Ionenkristall abgebildet, sowie in b) ein Zickzack-Kristall und in c) ein Zackzick-Kristall, die aus a) erzeugt wurden. In d) und e) sieht man zwei einzelne Defekte und in f) ist ein Kristall mit Doppeldefekt abgebildet.

zu einer Kristallstruktur zu gewährleisten. Um dies zu erreichen, wurden zunächst Referenzbilder zu den 15 unterschiedlichen Klassen, die der Kristall als Struktur annehmen kann, erzeugt. Hierfür wurden mehrere Beispielbilder aufsummiert. Die Kristalle wurden in folgende Klassen unterteilt: Zickzack, Zackzick, Defekt oben, Defekt unten, Defekt oben und Defekt unten, Defekt unten und Defekt oben, 15 Ionen mit Zickzack, 15 Ionen mit Zackzick, 17 Ionen mit Defekt oben und Defekt unten, 17 Ionen mit Defekt unten und Defekt oben, 17 Ionen mit Defekt unten, 17 Ionen mit Defekt oben, 17 Ionen mit Zickzack, 17 Ionen mit Zackzick und 16 Kalziumionen mit einem zusätzlichen dunklen Ion. Die Referenzbilder wurden per Hand ausgewählt und aufsummiert. Diese Referenzbilder wurden dann mit einer normalisierten zweidimensionalen Fouriertransformation transformiert. In gleicher Weise wurde mit dem aktuellen Bild verfahren, das einsortiert werden sollte, da die folgende Auswertung dadurch translationsinvariant wurde. Durch die Bildung der  $R^2$ -

### 3.2 Beobachtungen struktureller Phasenübergänge

Abweichung [Sta09] zwischen diesen beiden Fourierbildern konnte das aktuelle Bild der Klasse von Bildern zugeordnet werden, mit denen es die kleinste Abweichung aufwies. Dabei wurden die 15 Vorlageklassen und eine 16. Klasse für Bilder, die die Untergrenze der Übereinstimmung nicht überschreiten konnten, verwendet. Diese Bilder konnten keine höhere Übereinstimmung als die festgelegte Untergrenze erreichen, da sie zum Beispiel zu verschwommen waren. Diese Untergrenze der Übereinstimmung sorgte somit dafür, dass die Bilder mit schlechter Qualität herausortiert wurden. Der Ausschuss betrug weniger als 5% der Gesamtbildermenge. Ein Vergleich der Fourierbilder ist in Abbildung 3.22 zu sehen. Mit Hilfe der automatischen Sortierung von Kristallstrukturen konnten die Defektraten in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit des Phasenübergangs zum Nachweis des Kibble-Zurek-Mechanismus in Ionenkristallen bestimmt werden. Dies wird im folgenden Abschnitt erläutert.

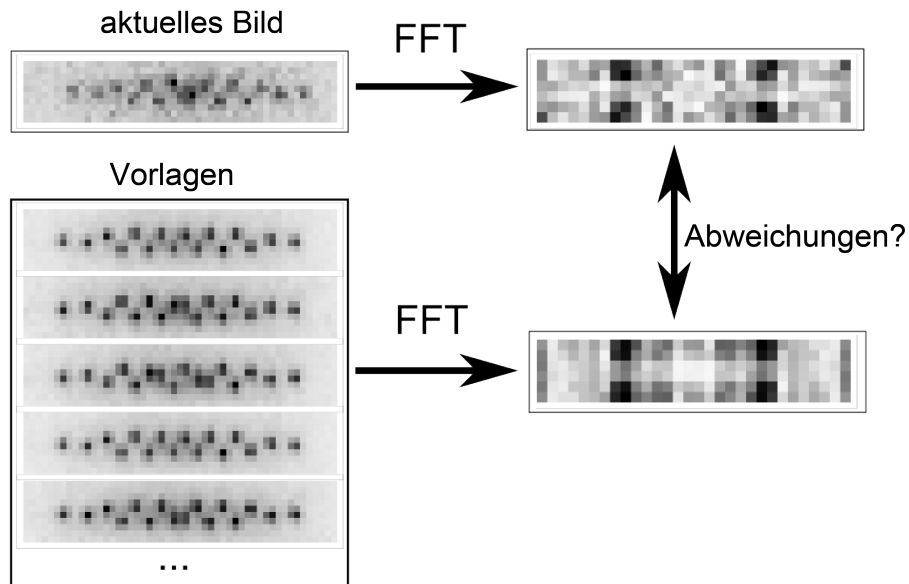


Abbildung 3.22: Hier sind die verschiedenen Kristallstrukturen, die beobachtet wurden, abgebildet. Zur Auswertung des aktuellen Bildes wurde es fouriertransformiert und das resultierende Bild dann mit den fouriertransformierten Bildern der Vorlagen verglichen. Die Abweichung zwischen den Bildern wurde mittels  $R^2$  bestimmt.

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

Wie in Abschnitt 2.7.2 erwähnt wurde, konnten die Gruppen um Giovanna Morigi, Alex Retzker, und Martin Plenio theoretisch zeigen [FDCM08, DdCM<sup>+</sup>10, dDM<sup>+</sup>10], dass der Kibble-Zurek-Mechanismus in linearen Ionenfallen beobachtet werden kann. Um dies auch experimentell zu ermöglichen, wurden die Kristalle in axialer Richtung zusammengedrückt, um über  $\alpha_{krit1}$  zu gelangen. Geschieht dieser Vorgang schnell genug, so entsteht entweder ein Grundzustand, ein Zickzack- bzw. Zackzick-Kristall oder ein Zickzack-Kristall mit einem Defekt, wie dies in Abbildung 3.23 dargestellt ist. Bei der experimentellen Durchführung gelang es, mehrere Teile des Kristalls in unterschiedliche, nicht kompatible Grundzustände übergehen zu lassen, sodass sich an der Grenze dieser unterschiedlichen Bereiche ein Defekt herausbildete. Für die Kompression der Kristalle wurden die Endkappen der Implantationsfalle verwendet, da diese nicht gefiltert waren und uns somit nicht in der Rampengeschwindigkeit limitierten.

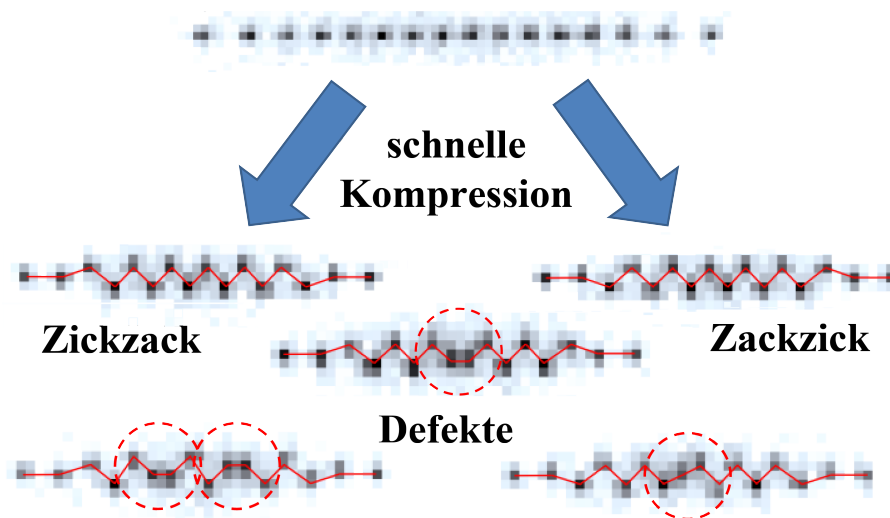


Abbildung 3.23: Durch schnelle Kompression des Kristalls erhalten wir entweder einen der Grundzustände, Zickzack oder Zackzick oder einen Kristall mit Defekt.

#### 3.3.1 Aufbau

Alle Experimente zur Erzeugung von Defekten mittels des Kibble-Zurek-Mechanismus wurden in der Implantationsfalle durchgeführt. Dabei wurde zu Beginn eine axiale Fal-



### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

lenfrequenz von  $\omega_z = 169,5 \pm 0,2 \text{ kHz}$ , sowie radial von  $\omega_y = 1397,0 \pm 0,2 \text{ kHz}$  und  $\omega_x = 1443,7 \pm 0,3 \text{ kHz}$  eingestellt. Dies ergab eine Anisotropie von  $\alpha = 0,01472 \pm 0,00004$  und entsprach  $70,5 \pm 0,2\%$  von  $\alpha_{krit1}$ . Dadurch wurde sichergestellt, dass in einer linearen Konfiguration angefangen wurde und der nichtlineare Teil der Rampe vor Erreichen des kritischen Punktes durchlaufen wurde. Wie in Abbildung 3.24 zu erkennen ist, wurden die Spannungsrampen für die Kompression der Kristalle mit Hilfe eines arbiträren Funktionsgenerators an die Endkappen angelegt. Dies erlaubte es uns, beliebige Rampenformen zu wählen. Die freie Wahl der Rampenform war entscheidend für die resultierende Defektrate.

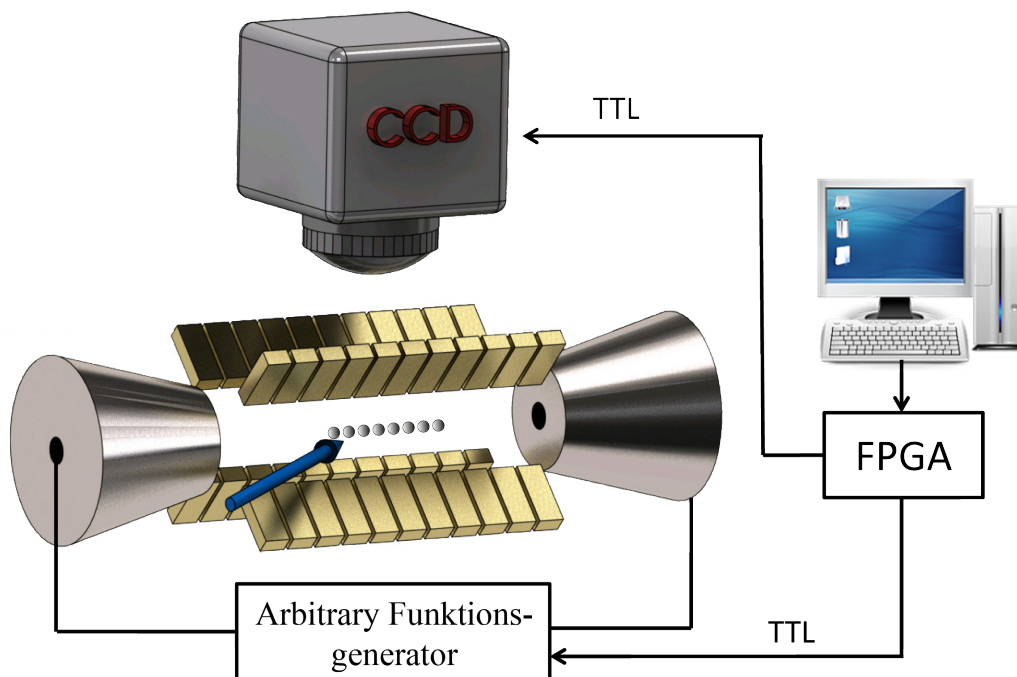


Abbildung 3.24: Kompletter Aufbau für die Messungen mit exponentiellen, sowie sinusförmigen Rampen. Von dem Laborcomputer wurden die Messsequenzen auf den FPGA geschrieben. Sobald dieser gestartet wurde, wurden die Kamera, der Funktionsgenerator, sowie die Laser (blauer Pfeil) durch den FPGA mit einer Zeitaufösung von 40 ns gesteuert. Dabei nahm die Kamera Fluoreszenzbilder auf und der arbiträre Funktionsgenerator erzeugte die Spannungsrampen auf den Endkappen für die Kompression der Kristalle.

Die erfolgreichste Rampenform, die verwendet wurde, bestand aus einem exponentiellen Anstieg, der in einen langen linearen Bereich überging und schließlich exponentiell auslief.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Die Funktion der Spannungsrampe wird beschrieben durch

$$U_{\text{endkappe}}(t) = \frac{2}{1 + e^{-\frac{(t-t_0)}{\tau}}} - 1 \quad , \quad (3.5)$$

dabei ist  $t_0$  der Zeitpunkt, in dem die Spannungsrampe startet.  $\tau$  ist die Zeitkonstante

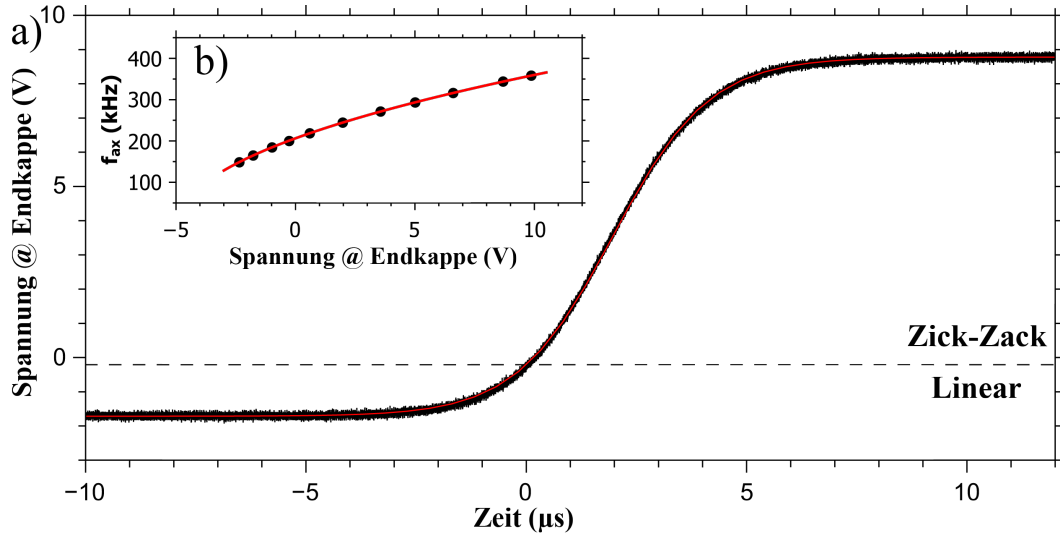


Abbildung 3.25: a) Die gemessene exponentielle Spannungsrampe (schwarze Linie) als Funktion der Zeit bis zum kritischen Punkt des Phasenübergangs. Die gestrichelte Linie entspricht der kritischen axialen Fallenfrequenz, bei der die innersten beiden Ionen den Phasenübergang durchlaufen. Die rote Linie ist die an die Spannungsrampe angepasste Funktion  $U_{\text{endkappe}}(t)$  für die Endkappenspannung. Unter b) ist die axiale Fallenfrequenz als Funktion der Endkappenspannung dargestellt. Die schwarzen Punkte wurden mit Hilfe der Wechselspannungsmethode gemessen. Die Rote Linie entspricht der Fallenfrequenzfunktion  $\omega_{\text{axial}}(U)/2\pi$ , die an die Messwerte angepasst wurde.

der Rampe, die für unterschiedliche Kompressionsgeschwindigkeiten variiert wurde. Diese Funktion musste noch mit der Funktion der axialen Frequenz in Abhängigkeit von der Endkappenspannung

$$\omega_{\text{axial}}(U) = A * \sqrt{U - U_{\text{offset}}} + \omega_{\text{offset}} \quad (3.6)$$

gefaltet werden. Dabei steht  $U_{\text{offset}}$  für einen Versatz in der Endkappenspannung, da der Scheitelpunkt der Wurzel nicht bei 0 V liegen muss, und mit  $\omega_{\text{offset}}$  wurde der Einschluss durch die Segmente zusammengefasst. Die Messungen zur Festlegung dieser Kurve und die daran angepasste Funktion ist in Abbildung 3.25 zu sehen. Damit konnte zu jedem

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

Zeitpunkt die axiale Fallenspannung und Frequenz angeben werden. Dank der funktionalen Beschreibung der Fallenfrequenz in Abhängigkeit von der Endkappenspannung konnte die Steigung der Rampe an dem Punkt, an dem das kritische Anisotropieverhältnis erreicht wurde, bestimmt und so die Kompressionsgeschwindigkeit festgelegt werden. Der exponentielle Anstieg der Spannungsrampe war wichtig, um eine möglichst geringe Anregung der Schwingungsmoden des Kristalls zu erreichen. Die Fouriertransformation der

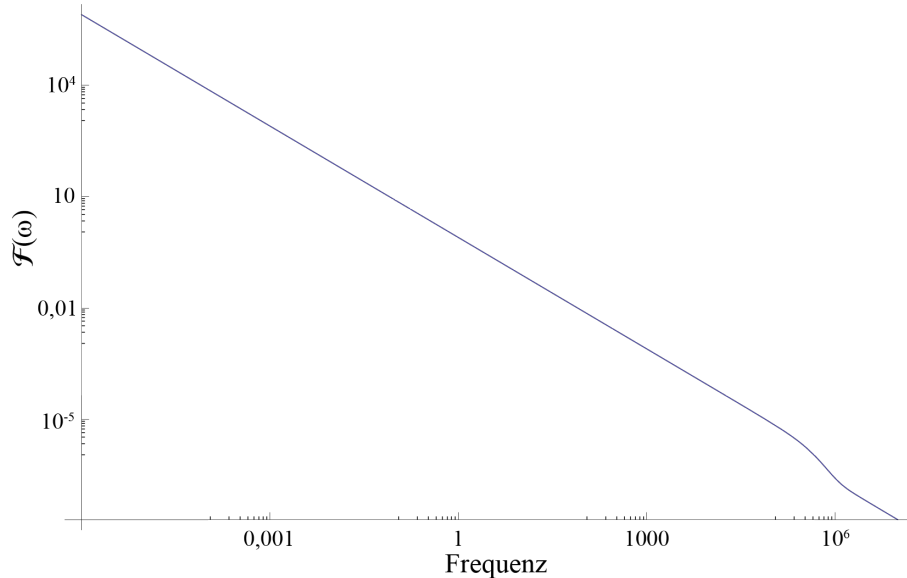


Abbildung 3.26: Zu sehen ist das Fourierspektrum der Rampenfunktion. Es ist der Frequenzanteil der Funktion gegen die Frequenz aufgetragen. Im Bereich der Schwingungsmoden 100 kHz bis 10 MHz ist die Anregung um fünf Größenordnungen unterdrückt.

Exponentialfunktion ist

$$\mathcal{F}_x \left[ e^{-2\pi k_0 |x|} \right] (k) = \frac{1}{\pi} \frac{k_0}{k^2 + k_0^2} \quad . \quad (3.7)$$

Durch die Fouriertransformation der Exponentialfunktion (Gleichung 3.7) besaß die Spannungsrampe einen vernachlässigbaren Beitrag im Frequenzbereich der Schwingungsmoden, sodass keine direkte Anregung dieser stattfand. Das Fourierspektrum der Rampenfunktion ist in Abbildung 3.26 zu sehen. Besonders starke Anregungen der axialen Atmungsmode sollten vermieden werden, da diese im Extremfall dazu führen konnten, dass der Phasenübergang mehrfach durchlaufen wurde. Eine ausreichend große Amplitude der Atmungsmode konnte dazu führen, dass der Zickzack-Kristall wieder zu einer linearen Kette gezogen wurde. Das gleiche Problem ergab sich mit dem Ende der Rampe, weshalb auch

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

hier ein exponentielles Auslaufen gewählt wurde. Im Abschnitt 3.3.4 wird auf die Ergebnisse mit anderen Rampenformen eingegangen. Um die genaue zeitliche Abfolge der

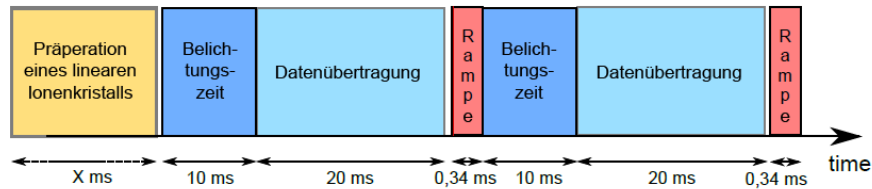


Abbildung 3.27: Messsequenz der KZM-Messungen. Zuerst wurde ein linearer Kristall erzeugt (gelber Block) und ein Kontrollbild aufgenommen (dunkel- und hellblauer Block). Anschließend wurde die Spannungsrampe (roter Block) angelegt. Das Ergebnisbild wurde direkt im Anschluss aufgenommen (dunkel- und hellblauer Block) und der Kristall dann mit der inversen Rampe (roter Block) in die Ausgangslage zurückgebracht. Diese Schritte wurden für jede Messung wiederholt.

Messsequenzen zu gewährleisten, wurden sowohl die Kamera als auch der Funktionsgenerator durch einen „Field Programmable Gate Array“ (FPGA) gesteuert. Dies erlaubte es uns, eine Zeitauflösung von 40 ns zu erreichen. In Abbildung 3.27 ist die komplette Messsequenz dargestellt. Begonnen wurde mit der Präparation eines linearen Kristalls, der die gewünschte Ionenzahl besaß. Dies wurde vollautomatisch mit Hilfe eines Kontrollbildes direkt vor der Spannungsrampe überprüft. Fehlten noch Ionen, so wurde mittels kurzer Pulse der beiden Ionisationslaser versucht, die gewünschte Anzahl zu erreichen. Waren dagegen zu viele Ionen im Kristall, so wurde das axiale Fallenpotential kurzzeitig automatisch verringert, um einen gewissen Anteil des Kristalls zu verlieren. Erst wenn die gewünschte Anzahl genau erreicht war, fuhr die Messsequenz weiter fort. Als nächstes wurde der Kristall mit der Spannungsrampe zusammengedrückt und somit durch den strukturellen Phasenübergang gebracht. Direkt 100  $\mu$ s nach der Rampe begann die 10 ms-Belichtungszeit des Ergebnisbildes. Diese Verzögerung war nötig, um die zeitlichen Schwankungen von 80  $\mu$ s im Auslösezeitpunkt der Rampe auszugleichen, die durch Rauschen auf den Signaleingängen des arbiträren Funktionsgenerators hervorgerufen wurde. Im Anschluss an die Aufnahme des Ergebnisbildes wurde eine langsame inverse Rampe benutzt, um wieder in die Ausgangslage, den linearen Kristall, zu gelangen. Sollte der Kristall nach dem Erreichen der Ausgangslage nicht mehr die korrekte Anzahl an Kalziumionen oder dunklen Ionen enthalten haben, was ebenfalls mit einer neuen Aufnahme überprüft wurde, so begann erneut der Nachladeprozess. Durch Hintergrundgasstöße oder beim Durchlaufen der inversen Rampe war es möglich, dass einige Ionen verloren gingen. Falls der Kristall dunkle Ionen

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

enthielt, wurde der komplette Kristall verworfen und es wurde wieder mit dem Laden der korrekten Anzahl an Ionen in die nun leere Falle begonnen. Die Detektion dunkler Ionen musste jedoch noch per Hand durchgeführt werden, da eine stabile und automatisierte Detektion auf den Bildern nicht gewährleistet werden konnte. Für den Fall, dass die Anzahl jedoch stimmte und keine dunklen Ionen im Kristall vorhanden waren, ging es direkt mit der Spannungsrampe der nächsten Messung weiter. Mit Hilfe dieser automatisierten Messsequenz konnte eine Wiederholungsrate von einem Experiment pro Sekunde erreicht werden. Ein durchschnittlicher Messdurchgang mit 2400 einzelnen Messungen dauerte etwa eine Stunde. Während der gesamten Messsequenz wurde der Kristall dopplergekühlt. Dies war wichtig, um die Divergenz der Relaxationszeit des Systems zu gewährleisten, wie dies bereits in Abschnitt 2.7.1 erläutert wurde. Außerdem konnte damit die durch die Kompression zugeführte Energie dem System wieder entnommen werden.

#### 3.3.2 Auswertung der Defektrate

Wir erhielten also mit jedem Durchgang der Messsequenz ein Ergebnisbild. Um aus den einzelnen Ereignisbildern verlässliche statistische Aussagen zu erhalten, wurden für jede Kompressionsgeschwindigkeit mindestens 1800 Messungen durchgeführt. Um diese Datenmenge effektiv und objektiv auszuwerten, wurde eine automatische Auswertung geschrieben (siehe Abschnitt 3.2.4). Diese sortierte die Ergebnisbilder in eine der möglichen Kristallkonfigurationsklassen. Die Defektrate wurde aus der Anzahl von Bildern in den unterschiedlichen Klassen mit  $d = \frac{n_1 + 2 \cdot n_2}{N}$  berechnet. Dabei war  $n_1$  die Anzahl an Bildern mit einem einzelnen Defekt.  $n_2$  war die Anzahl an Bildern mit Doppeldefekten und  $N$  die Anzahl aller Bilder, also der Klassen Zickzack, Zackzick, sowie Einzel- und Doppeldefekte. Alle weiteren Kristallstrukturen, wie etwa 15 Kalziumionen und ein dunkles, wurden als unbrauchbare Bilder verworfen. Um die Langzeitstabilität der Kristallstruktur während der Aufnahmezeit abschätzen zu können, wurden die Kristalle mit unterschiedlichen Belichtungszeiten beobachtet. Änderte sich die Kristallstruktur während der Belichtungszeit, zum Beispiel durch den Verlust eines Defektes, so war dies in einem verschwommenen Bild zu erkennen. Für die Bestimmung der Langzeitstabilität wurden für jede Belichtungszeit mehr als 500 Bilder aufgenommen, ebenfalls wurde dabei die Belichtungszeit von 10 ms bis zu 1800 ms variiert. Mit zunehmender Belichtungszeit nahm der Anteil an nicht verschwommenen Bildern mit einer Zeitkonstanten von  $\tau = 800 \pm 140$  ms exponentiell ab. Der Fehler der Messpunkte wurde berechnet, indem eine Binomialverteilung für die zwei möglichen Ergebnisse (verschwommen und nicht verschwommen) angenommen wurde. Hierzu wurde dann noch ein Fehler für den Sortierungsalgorithmus addiert. Daraus konnte geschlossen werden, dass in den 10 ms, die mindestens für die Aufnahme eines

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Bildes benötigt wurden, die Wahrscheinlichkeit für eine Änderung der Kristallstruktur, was den Verlust eines Defekts mit einschließt, in der Größenordnung von wenigen Prozenten lag. Auch anhand der direkten Messungen war der Einfluss von Hintergrundgasstößen

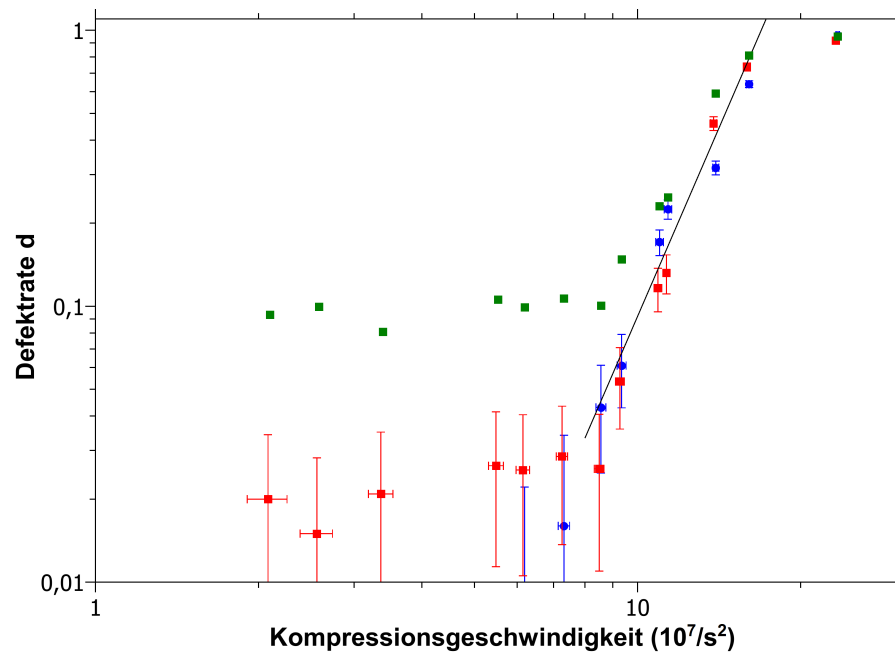


Abbildung 3.28: Die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Belichtungszeit. Die grüne Kurve wurde mit 30 ms Belichtungszeit aufgenommen, die rote Kurve ergab sich für dieselben Einstellungen bei einer Belichtungszeit von 10 ms. Die blauen Punkte sind die Ergebnisse der Simulation. Die schwarze Linie ist die Steigung der roten Datenpunkte und soll zeigen, dass die Simulationsergebnisse, sowie alle Messwerte innerhalb des nicht gesättigten Bereichs die gleiche Steigung aufweisen.

auf das Experiment erkennbar. Durch Vergleich der beiden Kurven mit 10 ms und 30 ms Belichtungszeit (siehe Abbildung 3.28) ist ersichtlich, dass im Bereich der langsamen Rampen mit 30 ms in etwa 10% der Messungen Defekte durch Hintergrundgasstöße aufwiesen. Dahingegen konnte die Defektrate bei 10 ms Belichtungszeit auf etwa 2% reduziert werden. Die Steigung wurde dadurch jedoch nicht beeinflusst. Dies ist daran erkennbar, dass unterhalb der Sättigung die Defektrate bei denselben Rampengeschwindigkeiten für alle Punkte um etwa 8% tiefer lag und somit dieselbe Steigung aufwies.

### 3.3.3 Skalierungsverhalten von Defekten

Um sicherzustellen, dass während der Spannungsrampen keine Ionen aneinander vorbeigeschoben wurden oder sogar der ganze Kristall schmolz, wurde eine molekulardynamische Simulation verwendet, um die Bewegungen der einzelnen Ionen zu verfolgen. In Abbildung 3.29 ist zu erkennen, wie sich die axiale Ionenposition mit der Zeit änderte. Die schwarzen Rauten symbolisieren die Zeitpunkte, in denen das Fallenpotential für das entsprechende Ion die lokale kritische Frequenz erreichte. Somit durchlief das Ion zu diesem Zeitpunkt den Phasenübergang zur Zickzack-Konfiguration. Anhand der Wellenbewegungen nach

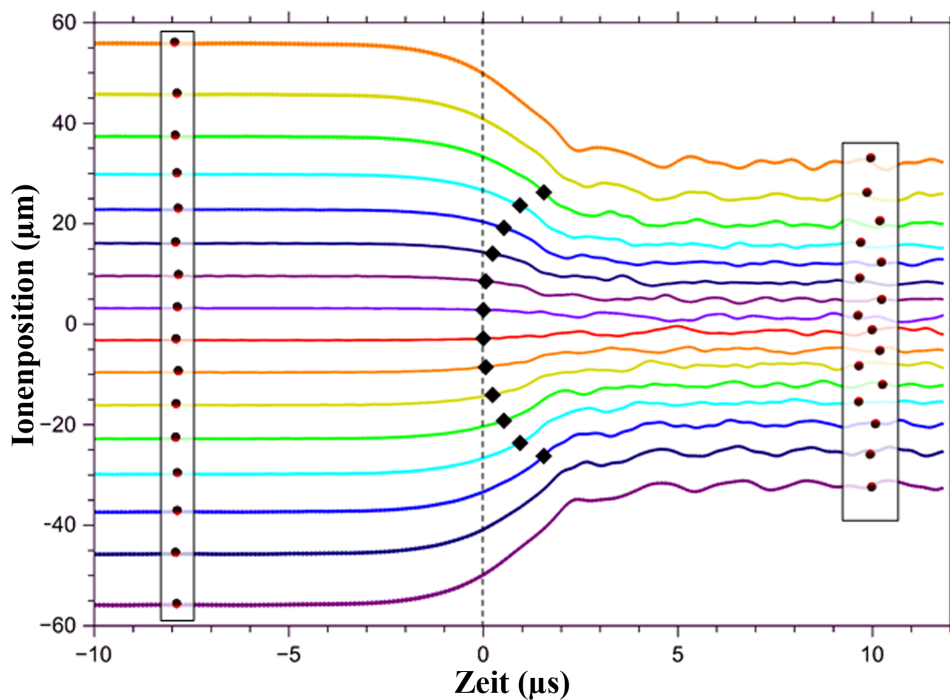


Abbildung 3.29: Trajektorien-Simulation der axialen Ionenpositionen während einer exponentiellen Rampe mit einem Sechzehn-Ionenkristall. Die Rauten zeigen den Zeitpunkt an, in dem das entsprechende Ion den Phasenübergang durchlief. Der Ursprung der Zeitachse liegt im kritischen Punkt der innersten beiden Ionen. Links ist der Kristall vor der Kompression, rechts danach zu sehen.

der Spannungsrampe kann gesehen werden, dass der Kristall zwar zu leichten Schwingungen angeregt wurde, diese aber nicht ausreichten, damit Ionen die Plätze tauschen konnten. Auch ein starkes Zurückschwingen in axialer Richtung konnte dank des exponentiellen Anfangs und Endes der Rampe vermieden werden. Dies war nötig, da das starke Zurückschwingen zu einem erneuten Durchlauf des Phasenübergangs hätte führen können.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Die beiden Kristallbilder (rote Punkte links und rechts in der Abbildung 3.29) zeigen die Ionen-Konfigurationen vor (links) und nach der Spannungsrampe (rechts) und wurden mit einer molekulardynamischen Simulation angefertigt. Auf die Details der Simulation wurde in Abschnitt 2.7.3 eingegangen. Nachdem sichergestellt war, dass der Phasenübergang des

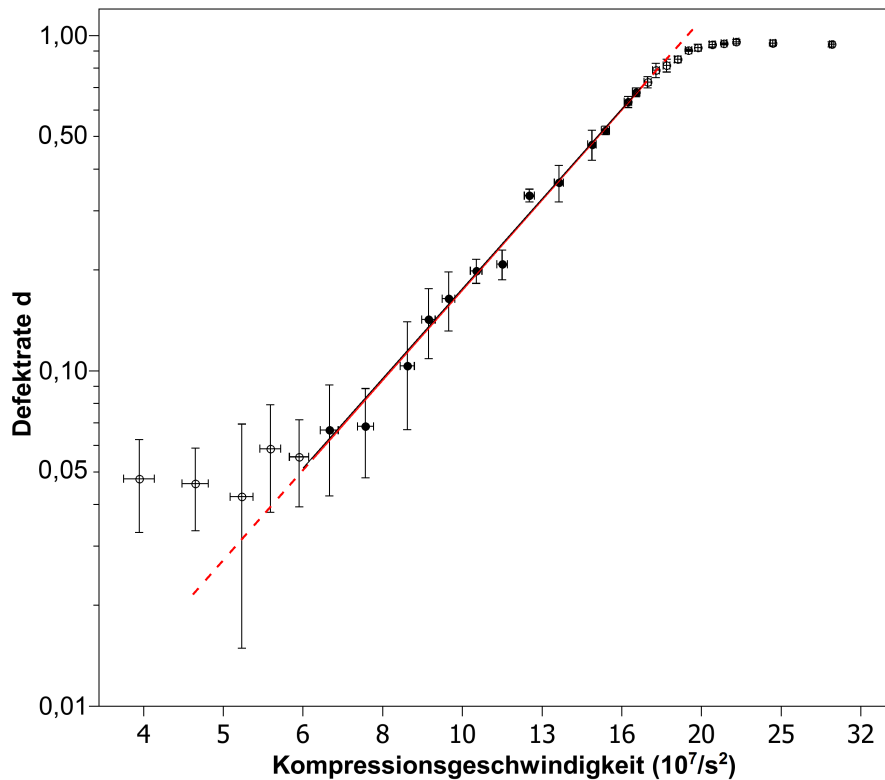


Abbildung 3.30: Defektrate  $d$  als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit, die anhand der Ableitung der axialen Fallenfrequenz am kritischen Punkt des Phasenübergangs festgelegt wurde. Zwischen den Randbereichen konnte mit den 13 gefüllten Punkten eine Steigung von  $2,68 \pm 0,06$  ermittelt werden (rote Linie), die für den verdoppelten inhomogenen Fall bis auf 0,5% mit dem theoretisch erwarteten Wert von  $\frac{8}{3}$  übereinstimmt.

Ionenkristalls kontrolliert werden konnte, konnte die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit aufgenommen werden. Die Kompressionsgeschwindigkeit entspricht der Zeit, die benötigt wurde, um den Phasenübergang zu durchlaufen. Gleichzeitig konnte gezeigt werden, dass dabei nicht die Kristallstruktur beeinflusst wurde, indem etwa Ionen aneinander vorbeigedrückt wurden. Bei diesen Messungen wurden ausschließlich Ionenkristalle mit 16 Ionen verwendet. Die entsprechenden Klassifizierungsvorlagen sind in Abbildung 3.21 zu sehen. Alle Spannungsrampen entsprachen der Form, die in Ab-



### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

bildung 3.25 zu sehen ist. Die Fallenfrequenzen betragen  $\omega_{z,\text{start}}/2\pi = 169,5 \pm 0,2$  kHz,  $\omega_{y,\text{start}}/2\pi = 1397,0 \pm 0,2$  kHz und  $\omega_{x,\text{start}}/2\pi = 1443,7 \pm 0,3$  kHz vor der Rampe. Nach der Rampe wurden Frequenzen von  $\omega_{z,\text{ende}}/2\pi = 345,5 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_{y,\text{ende}}/2\pi = 1379,6 \pm 0,3$  kHz und  $\omega_{x,\text{ende}}/2\pi = 1428,6 \pm 0,4$  kHz erreicht. Dies entsprach einer Änderung des kritischen Fallenparameters  $\alpha$  von  $\alpha_{\text{start}} = 0,01472 \pm 0,00004$  zu  $\alpha_{\text{ende}} = 0,06271 \pm 0,00006$ . Das waren anfänglich  $70,5 \pm 0,2\%$  von  $\alpha_{\text{krit1}}$  und am Ende  $300,1 \pm 0,3\%$  von  $\alpha_{\text{krit1}}$  und  $44,47 \pm 0,03\%$  von  $\alpha_{\text{krit2}}$ . Damit entsprach dies einem Zickzack-Kristall, der noch deutlich unterhalb des nächsten Phasenübergangs lag und eine radiale Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,03$  aufwies. Für sehr schnelle Kompressionsgeschwindigkeiten ist am rechten Rand von Abbildung 3.30 zu sehen, dass sich die Defektrate einem konstanten Wert annähert. Am linken Ende der Abbildung 3.30 ist zu erkennen, dass bei sehr langsamen Kompressionsgeschwindigkeiten ebenfalls eine konstante Defektrate erreicht wurde. Wie in Abschnitt 3.2.4 besprochen wurde, liegt dies an Defekten, die durch Hintergrundgasstöße bei einem Druck von  $1 \cdot 10^{-9}$  mbar erzeugt wurden. Zwischen diesen beiden Extremen konnten wir, dank des arbiträren Funktionsgenerators, 13 Punkte messen, für die sich eine Steigung von  $\beta = 2,68 \pm 0,06$  ergab. Diese Steigung für den verdoppelten inhomogenen KZM entspricht der theoretischen Vorhersage von  $\frac{8}{3}$ , wie er für kleine inhomogenen Systeme erwartet wird. Unser Ergebnis hat dabei eine Genauigkeit von 2% und stimmt im Rahmen der Fehlerbalken mit allen Messungen des KZM in Ionenkristallen überein [PKP<sup>+</sup>13, EH13]. Insgesamt besteht die Kurve aus 30 Punkten, die aus 60000 Messungen ermittelt wurden. Die Steigung wurde bestimmt, indem die Funktion

$$f(x) = x^\beta \cdot 10^k \quad (3.8)$$

an die Daten angepasst wurde und es ergaben sich die Parameter  $\beta = 2,68 \pm 0,06$ , sowie  $k = -3,43 \pm 0,07$ . Wie in Abbildung 3.31 zu sehen ist, wird das Ergebnis für die Steigung um bis zu 12% durch die Auswahl der Punkte beeinflusst, die in die Steigung mit einfließen. Die Punkte wurden ab der unteren Grenze gezählt, auf deren Festlegung später noch eingegangen wird.

Das Ergebnis für die Steigung (blau gestrichelte Linie) fällt in Abbildung 3.31 fast mit dem Theoriewert (rote Linie) zusammen und entspricht dem Wert für 13 Punkte. Für eine objektive Festlegung, bis zu welchem Punkt die Messdaten in die Steigung mit einfließen sollten, wurden mehrere statistische Größen berücksichtigt. Daraus konnte der Bereich der Daten bestimmt werden, der nicht durch die Sättigung am oberen Ende oder die Hintergrundrate am unteren Ende der Kurve beeinflusst wurde. Zuerst wurde die Standardabweichung der jeweiligen Steigungen betrachtet. Ausgehend von der unteren Grenze ist in Abbildung 3.32 die resultierende Standardabweichung der Steigung (Balken) für die

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

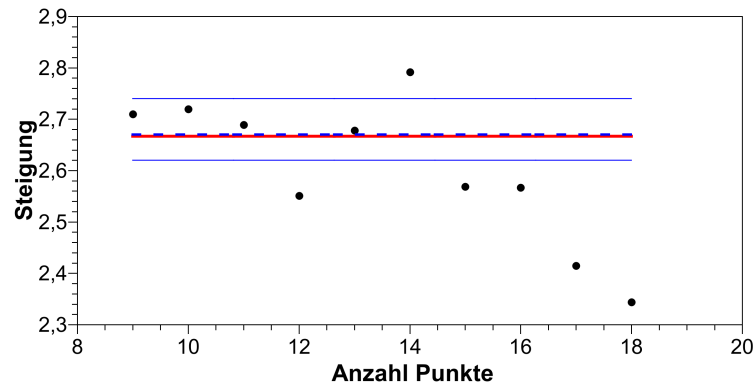


Abbildung 3.31: Dargestellt ist die Abhängigkeit der Steigung von der Anzahl der beteiligten Punkte, gezählt ab der Untergrenze. Die schwarzen Punkte sind das entsprechende Ergebnis für die Steigung bei den verschiedenen Anzahlen an Punkten. Blau gestrichelt ist die abschließend gewählte Steigung eingezeichnet, die blauen Linien entsprechen dem oberen und unteren Fehler der Anpassung dieses Ergebnisses. Die rote Linie stellt den theoretisch erwarteten Wert dar.

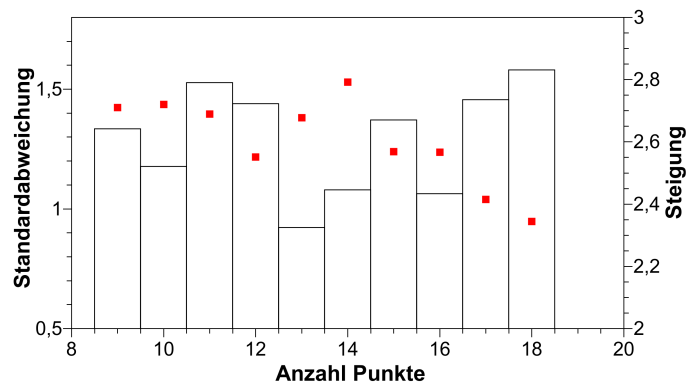


Abbildung 3.32: Der Wert der Standardabweichung der Steigung (Säulen) aufgetragen gegen die Anzahl der an der Anpassung beteiligten Punkte, wieder gezählt ab der unteren Grenze. Die roten Punkte sind die entsprechenden Steigungen, die bei den unterschiedlichen Anzahlen an Punkten ermittelt wurden.

jeweilige Anzahl an Punkten abgebildet, sowie die entsprechende Steigung (rote Punkte). Bei 13 beteiligten Punkten besitzt die Steigung die geringste Standardabweichung. Betrachten wir die  $R^2$ -Abweichung der Anpassung für die Steigung, so ist in Abbildung 3.33 zu sehen, dass auch hier die Steigung für 13 Punkte eine der kleinsten Abweichungen zeigt. In Abbildung 3.34 ist die Anpassungsgüte  $\chi^2$  als Funktion der an der Anpassung

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

beteiligten Punkte aufgetragen.

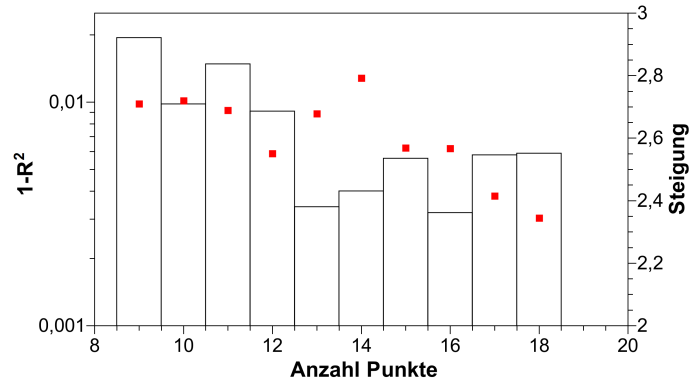


Abbildung 3.33:  $R^2$ -Abweichung als Funktion der Anzahl der an der Anpassung beteiligten Punkte (Säulen). Die roten Punkte zeigen die ermittelte Steigung bei dieser Anzahl an Punkten.

Der Wert für 13 Punkte ist zusätzlich mit dem Pfeil markiert. Anhand der Anpassungsgüte  $\chi^2$  ist am deutlichsten zu erkennen, warum 13 Punkte für die Anpassung gewählt wurden.

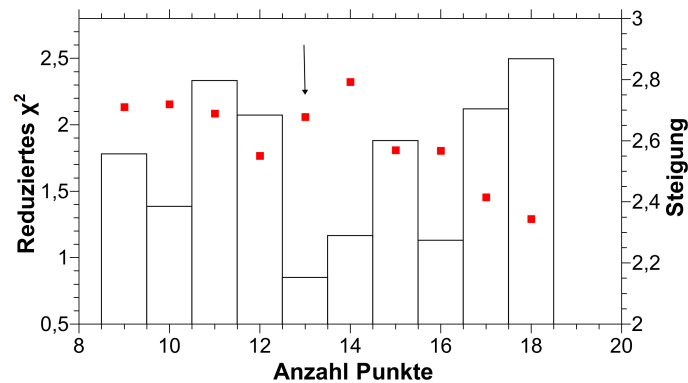


Abbildung 3.34: In Abhängigkeit von der Anzahl der an der Anpassung beteiligten Punkte ist der Wert der Anpassungsgüte  $\chi^2$  aufgetragen (Säulen). Die ermittelte Steigung bei der entsprechenden Anzahl an Messwerten wird durch die roten Punkte dargestellt.

Bei dieser Anzahl wird die Steigung mit Abstand am besten durch die Funktion 3.8 beschrieben und da alle betrachteten Größen bei 13 Punkten den kleinsten Fehler aufweisen, ergibt sich mit dieser Anzahl an Punkten das objektivste Ergebnis. Nachdem nun die obere Grenze festgelegt wurde, soll auf die Wahl der unteren Grenze eingegangen werden. Dabei wurde immer der Mittelwert der beteiligten Punkte gebildet, beginnend bei dem Punkt mit der langsamsten Kompressionsgeschwindigkeit. Anschließend wurde der Punkt

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

der nächst schnelleren Rampe betrachtet. Lag dieser außerhalb des  $\sigma$ -Abweichungsbandes des Mittelwerts, so wurde er als unteres Ende der Steigung festgelegt. Die Defektrate dieses Punktes kann dann eindeutig nicht nur aus der konstanten Hintergrundstoßrate kommen. Bei den Messungen dieses Abschnitts traf diese Definition für die sechst langsamste Kompressionsgeschwindigkeit zu. Anhand dieser Kriterien wurden Beginn und Ende der Punktmenge festgelegt, die für die Bestimmung der Steigung berücksichtigt wurden. Dies wird in Abbildung 3.35 veranschaulicht. Wenn die radiale Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,03$  auf  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,05$  erhöht wurde, konnten mit derselben Kompressionsgeschwindigkeit etwa 60% weniger Defekte nachgewiesen werden. Diese reduzierte Defektrate betraf jedoch alle Punkte gleichermaßen, sodass zwar eine geringere Absolutzahl an Defekten detektiert wurde, die Steigung jedoch unbeeinflusst blieb. Dies ist in Abbildung 3.36 zu sehen, bei der sich für die untere der beiden Kurven eine Steigung von  $\beta = 2,62 \pm 0,15$  ergab. Auf die Ursache dieser reduzierten Defektraten wird in Abschnitt 3.4 eingegangen. In unserer Arbeit [URJ<sup>+</sup>13] konnte das Skalierungsverhalten des KZM mit der größten bisherigen Präzision mit einem Fehler von 2% zu  $\beta = 2,68 \pm 0,06$  gemessen werden. Die beiden Arbeiten von Pyka und Ejtemaee [PKP<sup>+</sup>13, EH13] kommen mit deutlich geringerer Genauigkeit im Rahmen ihrer Fehler zu demselben Ergebnis. Diese drei Messungen konnten

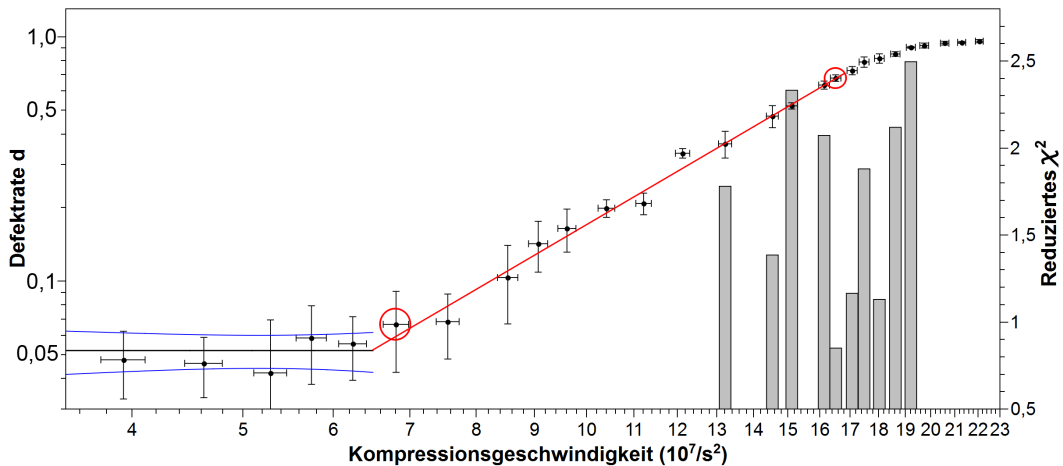


Abbildung 3.35: Hier ist die Festlegung der oberen und unteren Grenze der Punkte, die in die Steigungsanpassung mit einfließen, zu sehen. Die untere Grenze (linker roter Kreis) wurde an den ersten Punkt gelegt, der nicht mehr in der  $\sigma$ -Abweichung des Mittelwerts der bisher berücksichtigten Punkte lag. Dabei wurde von der langsamsten Kompressionsgeschwindigkeit her begonnen. Die obere Grenze wurde auf den Punkt mit der kleinsten Anpassungsabweichung  $\chi^2$  gelegt (rechter roter Kreis).

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

zum ersten Mal experimentell den KZM in Ionenfallen nachweisen.

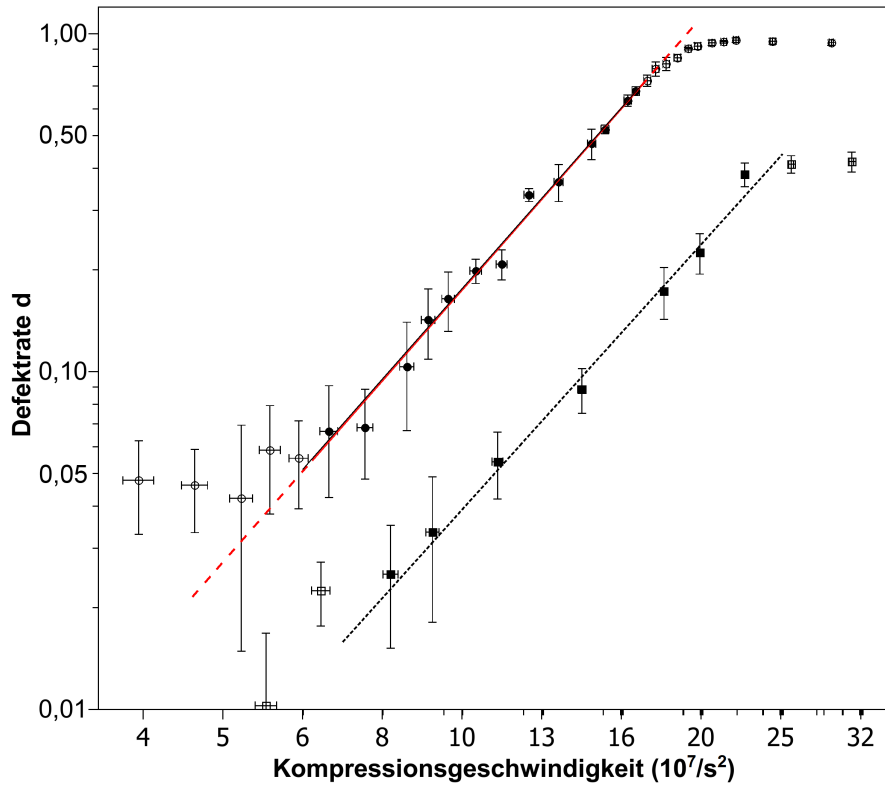


Abbildung 3.36: Wenn die radiale Anisotropie von  $\alpha_{aniso} = 1,03$  auf  $\alpha_{aniso} = 1,05$  erhöht wird, ergibt sich, statt der oberen Kurve für die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit, die untere Kurve. Dabei wurde bei derselben Kompressionsgeschwindigkeit eine etwa 60% niedrigere Defektrate gemessen.

#### 3.3.4 Defektstatistik

In diesem Abschnitt soll die Statistik der gemessenen Defekte genauer betrachtet werden. Zuerst wird dazu ein Blick auf andere Spannungsrampen geworfen, denn wie in Abschnitt 3.3.1 besprochen wurde, hat die Form der Spannungsrampen Einfluss auf die gemessene Defektrate. Danach wird die Statistik von Doppelfekten besprochen.

##### Kondensatorrampe

Neben der exponentiellen Spannungsrampe wurde eine Kondensatorladekurve verwendet, um damit eine Spannungsrampe zu erzeugen, siehe Abbildung 3.37. Es wurde wieder die

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Endkappenspannung gegen die Zeit aufgenommen.

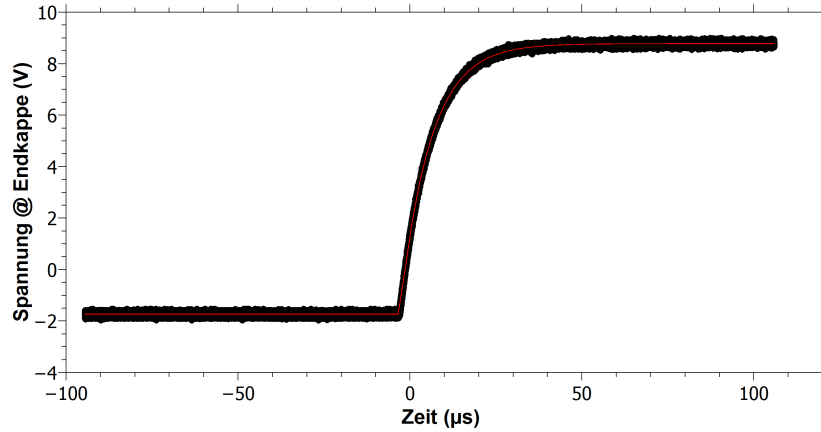


Abbildung 3.37: Spannungsrampe der Endkappen in Form einer Kondensatorladekurve. Aufgetragen ist die Endkappenspannung gegen die Zeit bis zum kritischen Punkt des Phasenübergangs. Die rote Linie stellt die daran angepasste Funktion  $U_{\text{endkappe}}(t) = A * (1 - e^{(t-t_0)/\tau}) + U_{\text{Offset}}$  dar.

Wie bei der exponentiell beginnenden Rampe ergibt sich die Kompressionsgeschwindigkeit, indem die Ableitung der Faltung dieser Kurve mit der Kurve der Fallenfrequenz in Abhängigkeit von der Endkappenspannung gebildet wird. Somit wurde erneut die Möglichkeit geschaffen, zu jedem Zeitpunkt die Fallenfrequenzen anzugeben. Im Gegensatz zu der exponentiellen Rampe kann diese Kurvenform durch eine einfache Schaltung erzeugt werden. Dabei wurden mittels TTL gesteuerter Schalter unterschiedlich große Kapazitäten zusammengeschaltet. In Abbildung 3.38 ist diese Schaltung, die nach dem arbiträren Funktionsgenerator eingebaut ist, zu sehen. Der arbiträre Funktionsgenerator diente hier nur als Konstantspannungsquelle. Diese Rampen lassen sich daher mit deutlich geringerem technischen Aufwand erzeugen, als dies für die exponentiellen Rampen der Fall war. Für die aufgenommenen Messpunkte wurden Kapazitäten von 100 nF bis 1115 nF verwendet. Für Abbildung 3.38 wurden 13 verschiedene Kompressionsgeschwindigkeiten mit jeweils 1500 Messungen aufgenommen. Die Fallenfrequenzen waren auf  $\omega_{z,\text{start}}/2\pi = 168,7 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_{y,\text{start}}/2\pi = 1396,2 \pm 0,6$  kHz und  $\omega_{x,\text{start}}/2\pi = 1443,3 \pm 1,2$  kHz vor der Rampe und  $\omega_{z,\text{ende}}/2\pi = 345,1 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_{y,\text{ende}}/2\pi = 1378,7 \pm 0,7$  kHz und  $\omega_{x,\text{ende}}/2\pi = 1428,2 \pm 1,1$  kHz nach der Rampe eingestellt. Damit wurde der kritische Fallenparameter  $\alpha$  von  $\alpha_{\text{start}} = 0,01460 \pm 0,00003$ , was 70% des  $\alpha_{\text{krit1}}$ -Wertes sind, auf  $\alpha_{\text{ende}} = 0,06265 \pm 0,00009$ , was 300% des  $\alpha_{\text{krit1}}$ -Wertes und 44% des  $\alpha_{\text{krit2}}$ -Wertes entspricht, geändert. Die Änderungen sind somit in der gleichen Größenordnung wie bei den exponentiellen Rampen. Zur Überprüfung der Abläufe

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

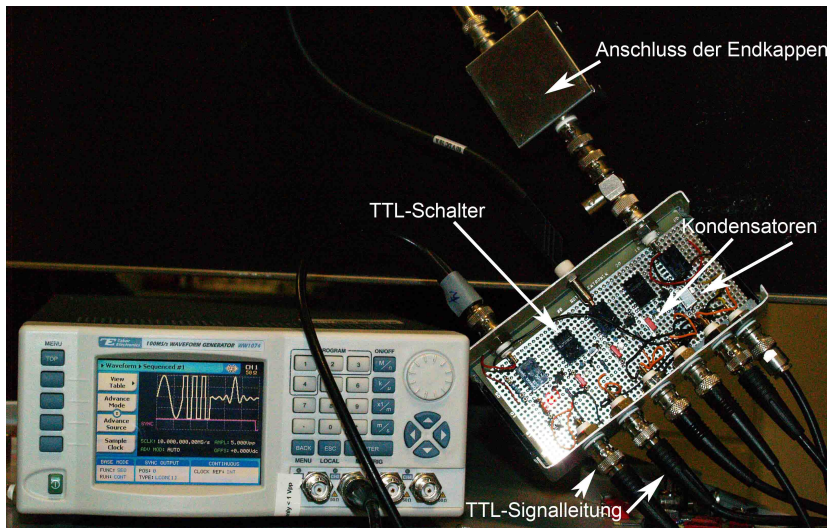


Abbildung 3.38: Arbiträrer Funktionsgenerator mit nachgeschalteter Kondensatorschaltung. Mit Hilfe der Schalter können verschiedene Kapazitäten für die Spannungsrampe verwendet werden.

bei dieser Rampenform wurden Simulationen mit der Kondensatorrampe und denselben Einstellungen wie im Experiment durchgeführt. In diesen Simulationen konnte beobachtet werden, dass durch die Spannungsrampe die Atmungsmode stark genug angeregt wurde, um den Kristall während der Rampe wieder komplett in die lineare Konfiguration zu ziehen. Dies geschah, nachdem bereits Teile des Kristalls die Zickzack-Konfiguration erreicht hatten. Damit wurde der Phasenübergang nicht nur einmal, sondern, je nach Anregung und Kompressionsgeschwindigkeit, mehrfach durchlaufen. Dies spiegelt sich in der gemessenen Defektrate wieder, die in Abbildung 3.39 zu erkennen ist. Die Steigung, die sich mit diesen Rampen ergab, betrug  $\beta = 4,55 \pm 0,42$ , woraus sich schließen lässt, dass durch die hohen Schwingungsanregungen eine stärkere Abhängigkeit von den Kompressionsgeschwindigkeiten erreicht wurde. Der abrupte Beginn der Kurve lieferte große Anregungsbeiträge im Frequenzbereich der Schwingungsmoden des Kristalls. Diese Schwingungsanregungen, wie sie in Abbildung 3.29 in geringem Maße nach der Rampe zu erkennen sind, traten bei Verwendung der Kondensatorrampe bereits während des Phasenübergangs mit großen Amplituden auf. Der deutlich steilere Anstieg legt nahe, dass bei langsamen Kompressionsgeschwindigkeiten zu wenige Defekte beobachtet wurden. Das kann daran liegen, dass sie zum Beispiel auf Grund der hohen Anregung leichter den Kristall verließen. Vor allem wurden bei den schnelleren Rampen zu viele Defekte beobachtet. Dies kann durch ein mehrfaches Durchlaufen des Phasenübergangs erklärt werden. Für die Ermittlung der

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Steigung wurden die grün markierten Punkte verwendet. Die grün markierten Punkte entsprechen einer Kompressionsgeschwindigkeit zwischen  $8,5 \frac{10^7}{s^2}$  und  $15,9 \frac{10^7}{s^2}$ .

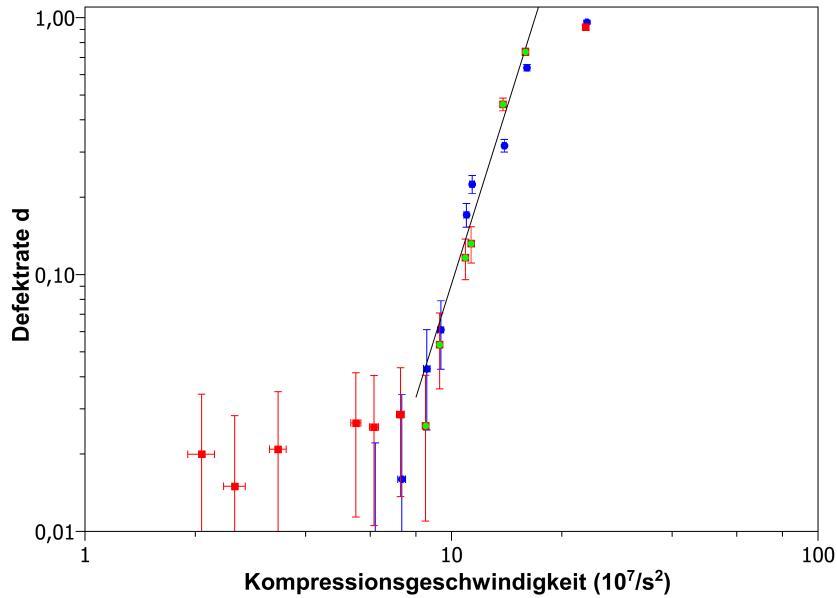


Abbildung 3.39: Mit Hilfe von Kondensatorrampen erzeugte Defektraten. Doppeltlogarithmisch eingezeichnet ist die Defektrate gegen die Kompressionsgeschwindigkeit. Die für die Steigung verwendeten Punkte sind grün eingefärbt, die Simulationen sind als blaue Punkte eingetragen.

#### Sinusrampe

Außer der Kondensatorrampe wurde auch eine sinusförmige Spannungsrampe verwendet, wie sie in Abbildung 3.40 zu sehen ist. Dabei wurden Fallenfrequenzen von  $\omega_{z,start}/2\pi = 169,1 \pm 0,1 \text{ kHz}$ ,  $\omega_{y,start}/2\pi = 1396,4 \pm 0,1 \text{ kHz}$  und  $\omega_{x,start}/2\pi = 1444,1 \pm 0,1 \text{ kHz}$  als Ausgangswerte verwendet und diese dann auf  $\omega_{z,ende}/2\pi = 345,2 \pm 0,1 \text{ kHz}$ ,  $\omega_{y,ende}/2\pi = 1378,3 \pm 0,1 \text{ kHz}$  und  $\omega_{x,ende}/2\pi = 1428,4 \pm 0,1$  gerampt. Der kritische Fallenparameter  $\alpha$  wurde somit von  $\alpha_{start} = 0,015$ , was 70% des  $\alpha_{krit1}$ -Wertes entspricht, auf  $\alpha_{ende} = 0,063$ , was 300% des  $\alpha_{krit1}$ -Wertes und 45% des  $\alpha_{krit2}$ -Wertes sind, geändert. Der Frequenzanteil im Bereich der Schwingungsmoden konnte durch die Sinusform von  $3,5 \cdot 10^{-5}$  bis  $3,1 \cdot 10^{-6}$  bei den Kondensatorkurven auf  $3,5 \cdot 10^{-5}$  bis  $2,5 \cdot 10^{-6}$  reduziert werden. Wie an der Defektrate in Abbildung 3.41 zu sehen ist, waren die Anregungen der Schwingungsmoden immer noch zu groß, sodass der Kristall wieder mehrmals durch den Phasenübergang getrieben wurde und sich deshalb immer noch eine zu steile Steigung ergab. Die Steigung in Abbildung 3.41 beträgt  $\beta = 3,81 \pm 0,48$ .



### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

Somit konnte gezeigt werden, dass der Frequenzanteil der Spannungsrampe im Bereich der Schwingungsmoden auf unter  $8 \cdot 10^{-6}$  reduziert werden sollte, wie dies mit den exponentiellen Spannungsrampen der Fall ist. Dies ist nötig, um sicher zu stellen, dass der Phasenübergang nur einmal durchlaufen und die Steigung nicht durch die Rampenform beeinflusst wird.

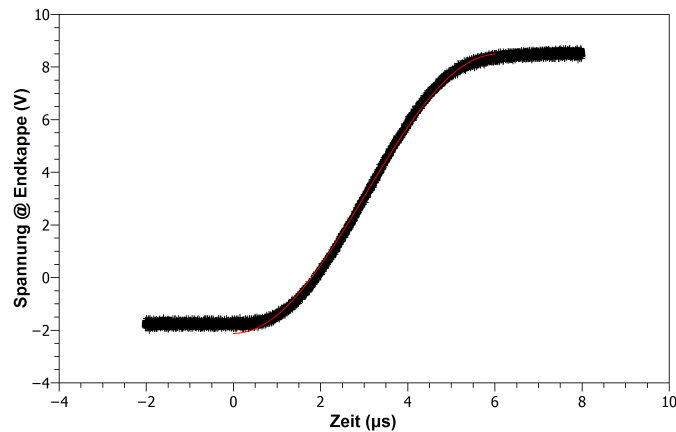


Abbildung 3.40: Sinusförmige Spannungsrampe der Endkappen. Aufgetragen ist die Endkappenspannung gegen die Zeit bis zum Auslösen der Rampe beim Eintreffen des TTL-Signals. Die rote Linie stellt die daran angepasste Funktion  $U_{\text{endkappe}}(t) = A \cdot \sin\left(\frac{2}{\pi} \cdot f \cdot t - \frac{\pi}{2}\right) + U_{\text{Offset}}$  dar.

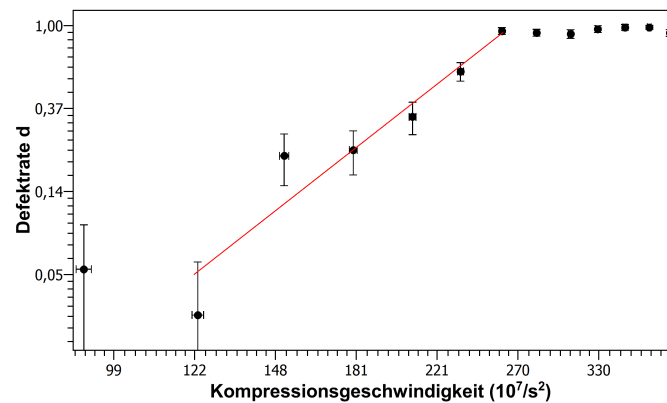


Abbildung 3.41: Doppeltlogarithmische Darstellung der Defektraten gegen die Kompressionsgeschwindigkeiten, die bei Verwendung sinusförmiger Spannungsrampen gemessen wurden. Die für die Steigung verwendeten Punkte liegen in dem mit der roten Geraden markierten Bereich.

### Doppeldefektstatistik

Wie in Abbildung 3.21 f) zu sehen ist, konnten auch Doppeldefekte beobachtet werden. Damit würden wir intuitiv erwarten, dass die Defektrate erst bei 200% und nicht schon bei 100% sättigt. Wenn jedoch die Statistik der Doppeldefekte genauer betrachtet wird, ist

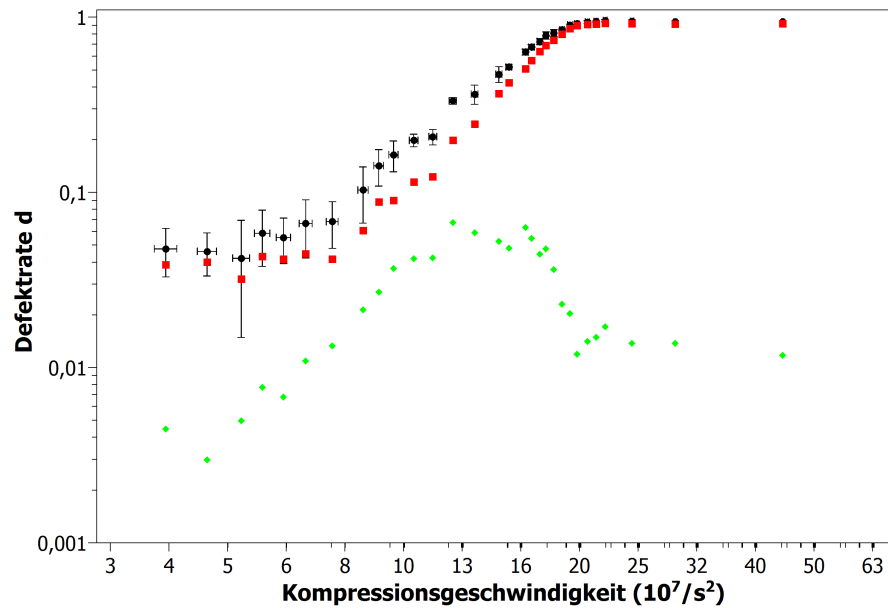


Abbildung 3.42: Aufteilung der gemessenen Defektrate auf Einzel- und Doppeldefekte. Die schwarzen Punkte sind die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit, die roten Punkte entsprechen der Defektrate, die sich ergibt, wenn nur Einzeldefekte als Defekt gezählt werden. Die grüne Kurve ergibt sich, wenn nur Doppeldefekte gezählt werden, diese jedoch weiterhin einzeln zählen. Somit wird die Anzahl der Bilder mit zwei Defekten durch die Gesamtzahl der Zickzack, Zackzick, Einzeldefekt und Doppeldefektbilder geteilt.

deutlich zu erkennen, warum dies nicht der Fall ist. In Abbildung 3.42 ist in Schwarz die Gesamtdefektrate  $d = \frac{n_1 + 2 \cdot n_2}{N}$  zu sehen, in Rot ist die Defektrate, die sich aus den Einzeldefekten  $d_{\text{einzel}} = \frac{n_1}{N}$  ergibt, und in Grün die Doppeldefektrate  $d_{\text{doppel}} = \frac{2 \cdot n_2}{N}$  dargestellt. Die Abnahme der Doppeldefektrate bei schnelleren Kompressionsgeschwindigkeiten kann dadurch verstanden werden, dass durch die höhere Anregung eine Anihilation der Defekte wahrscheinlicher wird. Defekte können sich gegenseitig auslöschen, da sie ihr eigenes Antiteilchen sind. An dem Maximum der Doppeldefektrate von 7% ist erkennbar, weshalb diese das Ergebnis nicht deutlich beeinflussen konnten. Doppeldefekte stellen immer ein seltenes Ereignis dar. Werden nun die Einzeldefekte aus der Gesamtzahl  $N$  heraus-

### 3.3 Messungen zur Skalierung der Defektrate gemäß dem Kibble-Zurek-Mechanismus

genommen, wie dies etwa für die falsche Ionenanzahl schon getan wurde, so ergibt sich die in Abbildung 3.43 veranschaulichte Grafik. Hier ist deutlich zu sehen, dass auch die

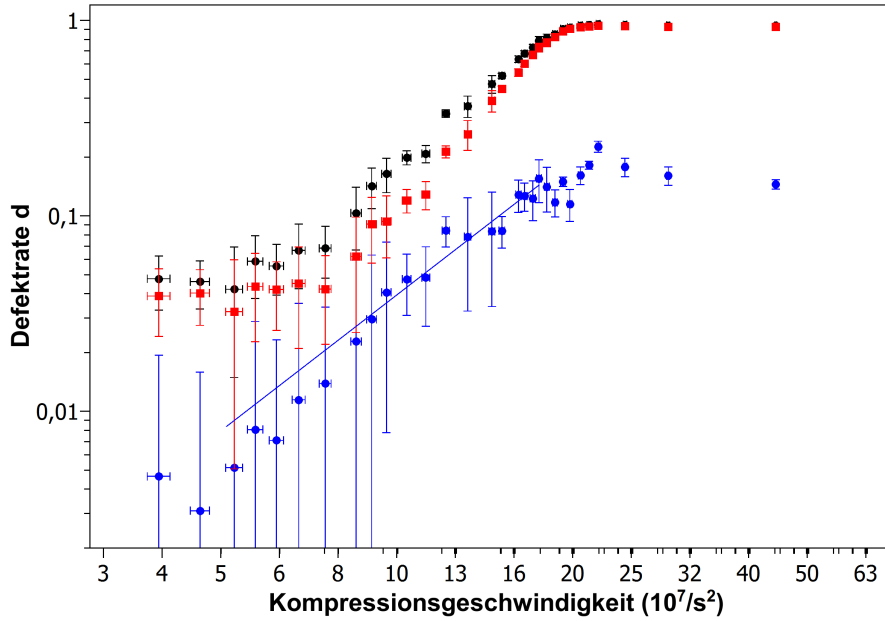


Abbildung 3.43: Renormierte Doppeldefektrate. Dazu wurde die Defektrate mit  $d_{doppel} = \frac{2 \cdot n_2}{N}$  bestimmt, wobei nur die Anzahlen an Zickzack, Zackzick und Doppeldefektbildern zu  $N$  aufaddiert wurden. Zur Ermittlung der Steigung von  $\beta = 2,32 \pm 0,17$  wurde der Bereich mit derselben Methode wie beim Skalierungsverhalten von Defekten festgelegt. In Blau ist die renormierte Doppeldefektrate eingezeichnet, in Schwarz die Gesamtdefektrate  $d = \frac{n_1 + 2 \cdot n_2}{N}$  und Rot zeigt die Defektrate, die sich aus den Einzeldefekten  $d_{einzel} = \frac{n_1}{N}$  ergibt.

Doppeldefekte eine Steigung von  $\beta = 2,32 \pm 0,17$  aufweisen, jedoch schon bei 20% die Sättigungsgrenze erreichen. Bei diesem Bild ist zu beachten, dass die Statistik nicht sehr belastbar ist, da relativ wenige verwendbare Bilder aufgenommen werden konnten, weil Doppeldefekte selten auftreten. Doch innerhalb der Fehlergrenzen unterscheidet sich der Wert von  $\beta$  für Doppeldefekte nicht von dem für Einzeldefekte. Während man vermutet, dass die KZM-Bildungsrate für Doppeldefekte gleich ist wie für Einzeldefekte, haben die Doppeldefekte andere Zerfallsmechanismen, als dies bei den Einzeldefekten der Fall ist. Ein Einzeldefekt muss durch die gesamte Kette wandern, um verloren zu gehen, und kann daher im PN-Potential stabilisiert werden, dahingegen kann ein Doppeldefekt sich selbst anihilieren, indem er nur einen PN-Potentialwall überwindet.

Weitere Diskussionen zu Defektlebensdauern sind in Abschnitt 3.4.1 zu finden.

### 3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential

In Abschnitt 3.3.3 war zu sehen, dass die gemessenen Defektraten stark von der radialen Anisotropie abhängen, jedoch die Steigung hiervon nicht beeinflusst wird. Um dieses Verhalten zu verstehen, musste zuerst geklärt werden, welche Bedingungen erfüllt sein müssen, um einen Defekt zu detektieren. Zunächst musste ein Defekt erzeugt werden und, um ihn dann zu detektieren, musste er lang genug im Kristall erhalten bleiben. Das bedeutet, dass seine Lebensdauer musste ausreichend groß für unsere Belichtungszeit sein musste. Wie bei den Doppeldefekten schon besprochen wurde, wurde die Lebensdauer durch die Möglichkeit der Auslöschung zweier Defekte begrenzt. Dies geschieht, wenn sie in Kontakt zueinander kommen. Defekte sind ihre eigenen „Antiteilchen“, da ein Kristall, wenn er zwei Defekte besitzt, wie folgt aufgebaut ist. Beim ersten Defekt wechselt der Kristall zum Beispiel von der Zickzack-Konfiguration in die Zackzick-Konfiguration. Beim zweiten Defekt geht der Übergang dann von der Zackzick- in die Zickzack-Konfiguration. Somit sind die Kristallstrukturen außerhalb der beiden Defekte kompatibel. Bewegen sich die Defekte nun auf dieselben Ionen und somit auf dieselbe Position im Kristall, so löschen sie sich gegenseitig aus und es entsteht ein reiner Zickzack-Kristall. Die andere Möglichkeit, einen

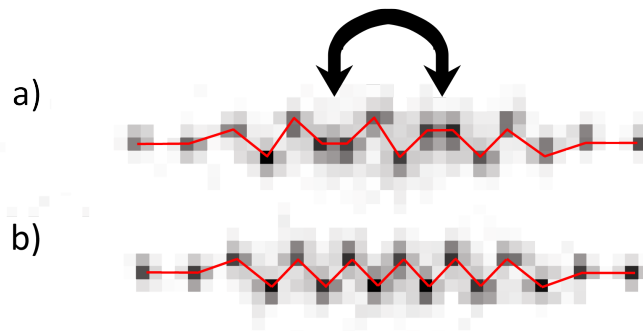


Abbildung 3.44: Zwei Defekte, die sich auslöschen. Bewegen sich die beiden Defekte aus a) auf dieselbe Position im Kristall, löschen sie sich aus und es entsteht ein reiner Zickzack-Kristall wie in b).

Defekt zu verlieren, bestand darin, dass er den Kristall über dessen Rand verlässt. Beide Prozesse sind mit dem Peierls-Nabarro-Potential verknüpft, da mit diesem die Beweglichkeit der Defekte im Kristall beschrieben wird, siehe Abschnitt 2.6.2. Wie dort diskutiert wurde, hängt die Tiefe des Peierls-Nabarro-Potentials von der radialen Anisotropie ab und somit auch die Lebensdauer der Defekte. Um dies zu zeigen, wurden Messungen mit unterschiedlichen radialen Anisotropien durchgeführt, die in Abschnitt 3.4.1 besprochen werden. Nicht nur die Beweglichkeit der Defekte, sondern auch die Kristallgröße und die

Ladungsverteilung im Kristall haben einen Einfluss auf die Defektraten, die gemessen wurden, was in Abschnitt 3.4.1 und Abschnitt 3.5 gezeigt wird. Um ein genaueres Bild dieser Effekte zu erhalten, wurden weitere Simulationen durchgeführt, die es erlaubten, auch auf der  $\mu\text{s}$ -Zeitskala Defekte zu beobachten.

### Simulationsergebnisse

Nachdem in Abschnitt 2.7.3 der Einfluss verschiedener Parameter auf die Simulationen untersucht wurde, soll hier betrachtet werden, welchen Effekt die radiale Anisotropie  $\alpha_{\text{aniso}}$  auf die simulierten Defektraten hat. Dazu wurde  $\alpha_{\text{aniso}}$  in einem Bereich von 1,085 bis

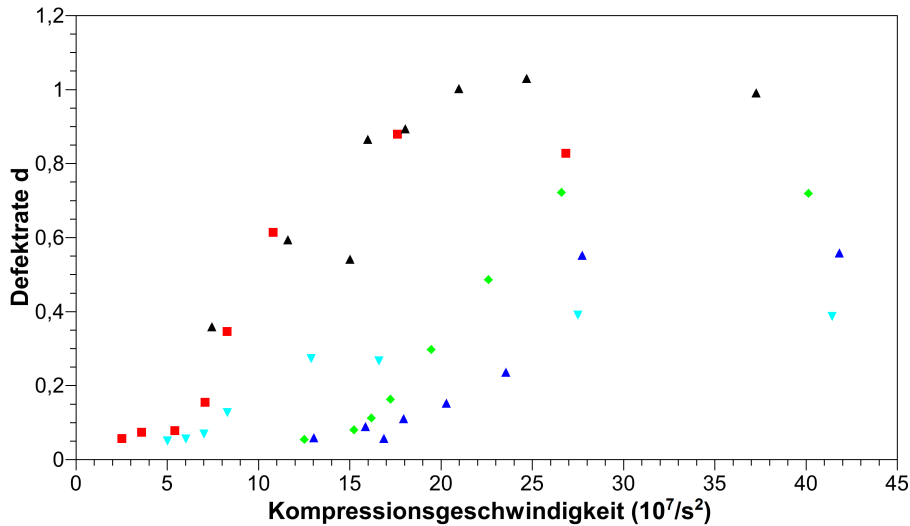


Abbildung 3.45: Simulationen zur Untersuchung des Einflusses der radialen Anisotropie auf die Defektrate. Verwendet wurden die Frequenzen aus Abschnitt 3.4.1. Die radiale Anisotropie nimmt bei jeder Farbe zu, von Schwarz mit  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,085$  über Rot mit  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,096$ , Grün mit  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,107$  und Blau mit  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,124$  zu Hellblau mit  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,138$ .

1,138 variiert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.45 zu sehen. Darin aufgetragen ist die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit, wobei jede Farbe einer Anisotropieeinstellung entspricht. Wenn die Messwerte der schnellsten Rampen bei den unterschiedlichen Anisotropien betrachtet werden, ist ganz deutlich zu sehen, dass die Defektrate mit zunehmender Anisotropie abnimmt. Um diesen Effekt noch einmal zu verdeutlichen, wurden Simulationen mit den Einstellungen aus Abschnitt 3.3 gemacht, da hier die größte Datenmenge für eine Anisotropie zur Verfügung stand. In Abbildung 3.46 sind die Ergebnisse dieser Simulationen zu sehen. Dabei beschreibt die blaue Kurve die Simulation mit

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

den gleichen Einstellungen wie bei der schwarzen, experimentellen Kurve. Für die grünen

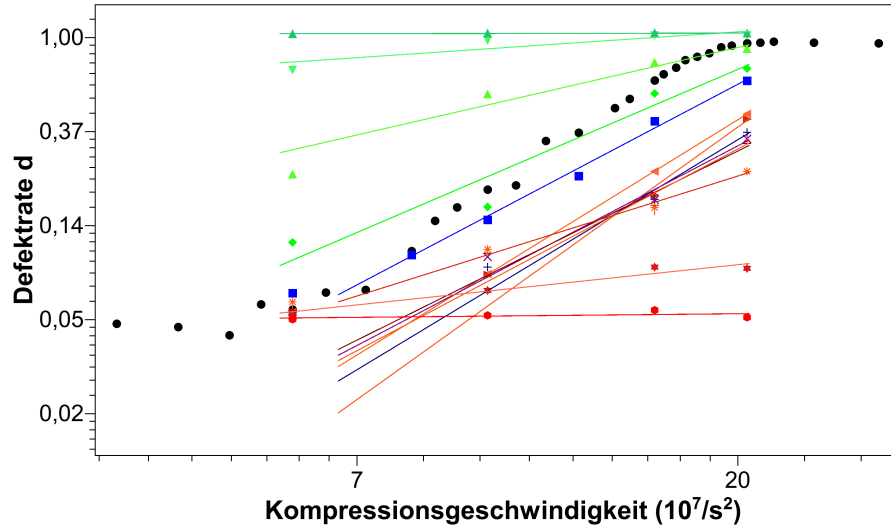


Abbildung 3.46: Simulation des Anisotropieeinflusses bei den Einstellungen aus Abschnitt 3.3. Dabei ist die Defektrate gegen die Kompressionsgeschwindigkeit aufgetragen. Die blaue Kurve entspricht exakt den Einstellungen der experimentellen Daten (schwarz). Ausgehend von diesen Einstellungen wurde die Anisotropie immer weiter verringert (grüne Kurven), sowie immer weiter erhöht (rote Kurven).

Kurven wurde die radiale Anisotropie  $\alpha_{\text{aniso}}$  immer weiter verringert, bis nur noch eine konstante Defektrate von 100% für alle Kompressionsgeschwindigkeiten erreicht wurde. Bei den roten Kurven wurde die radiale Anisotropie  $\alpha_{\text{aniso}}$  immer weiter erhöht, bis keine Defekte mehr eingefangen werden konnten. Die genauen Einstellungen sind in Anhang B.2 zu finden. Die Restrate von 5% beruht auf der Hintergrundstoßrate, die auf alle Simulationsergebnisse aufaddiert wurde. Im mittleren Bereich ergibt sich bei der Simulation für sieben Kurven eine Steigung von  $2,66 \pm 0,66$ , dies entspricht dem gemessenen Ergebnis. Somit konnte gezeigt werden, dass die Steigung in einem weiten Bereich nicht von der Anisotropie abhängt.

In Abschnitt 3.4.1 wird gezeigt, dass im Experiment die Steigung von der Größe des Kristalls abhängt. Dieser Effekt soll auch mit den Simulationen nachgewiesen werden. Dazu wurde in Abbildung 3.47 die Defektrate gegen die Kompressionsgeschwindigkeit aufgetragen, einmal für einen Sechzehn-Ionenkristall (blau) und einmal für einen Dreizehn-Ionenkristall (rot), sowie die simulierte Kurve für dreizehn Ionen (grün). Für die rote und grüne Kurve mussten andere Fallenfrequenzen verwendet werden, da der kritische Punkt hier bei  $\alpha_{\text{krit}13} = 0,0299$  statt bei  $\alpha_{\text{krit}16} = 0,0209$  liegt. Dazu wurde

### 3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential

$\omega_{z,\text{start}}/2\pi = 166,5 \text{ kHz}$ ,  $\omega_{y,\text{start}}/2\pi = 1086,6 \text{ kHz}$  und  $\omega_{x,\text{start}}/2\pi = 1172,5 \text{ kHz}$  für den Start verwendet und der Kristall bis zu  $\omega_{z,\text{ende}}/2\pi = 340,9 \text{ kHz}$ ,  $\omega_{y,\text{ende}}/2\pi = 1068 \text{ kHz}$  und  $\omega_{x,\text{ende}}/2\pi = 1151,5 \text{ kHz}$  gerammt. Damit wurde der kritische Fallenparameter  $\alpha$  von  $\alpha_{\text{start}} = 0,0235$  auf  $\alpha_{\text{ende}} = 0,1019$  geändert, was zu Beginn 78% von  $\alpha_{\text{krit}1_{13}}$  entsprach und dann 340% von  $\alpha_{\text{krit}1_{13}}$ , sowie 54% von  $\alpha_{\text{krit}2_{13}}$ . Es ist zu sehen, dass die Steigung der

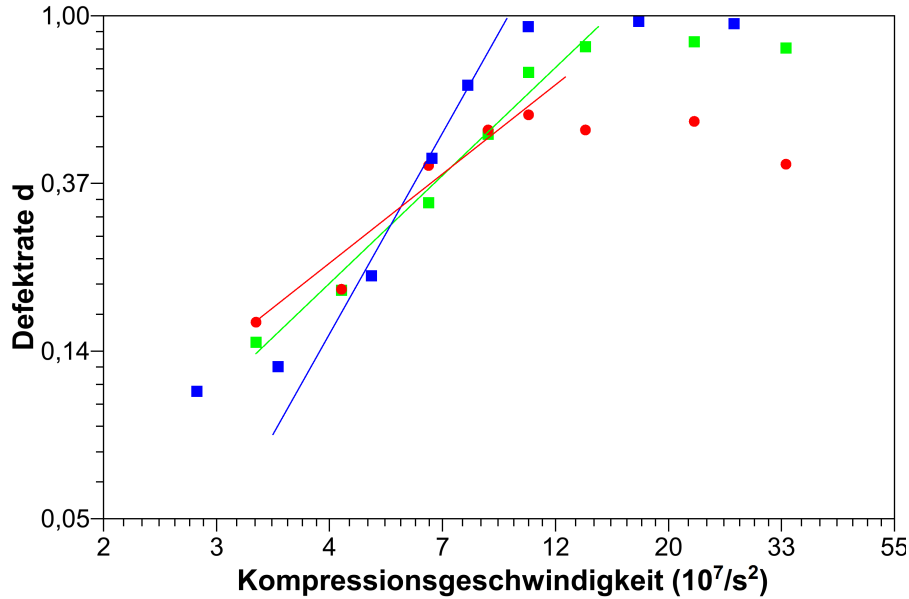


Abbildung 3.47: Simulation und Messungen im Vergleich für verschiedene Ionenanzahlen. Alle Kurven zeigen die gemessenen oder simulierten Defektraten als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit. In roten Kreisen eingezeichnet sind die Ergebnisse der Simulation mit 13 Ionen. In grünen Rechtecken sind die experimentellen Ergebnisse mit 13 Ionen und in blauen Rechtecken die experimentellen Ergebnisse mit 16 Ionen dargestellt.

experimentellen Dreizehn-Ionenkurve sich auf  $1,29 \pm 0,13$  verringerte und somit um 46%, im Vergleich zu der Steigung von  $2,39 \pm 0,28$  der experimentellen Kurve mit sechzehn Ionen, abnahm. Die simulierte Kurve mit dreizehn Ionen hatte eine Steigung von  $1,06 \pm 0,16$ , damit ist die Abnahme der Steigung auch in der Simulation zu beobachten. Neben der Kristallgröße besitzt auch die Ladungsverteilung einen Einfluss auf die Steigung, die im Experiment gemessen wurde, wie in Abschnitt 3.5 gezeigt wird.

#### 3.4.1 Peierls-Nabarro-Messungen

Um die Effekte der radialen Anisotropie  $\alpha_{\text{aniso}}$ , der Kristallgröße und der Ladungsverteilung auch experimentell zu studieren, wurden weitere Messreihen durchgeführt. Für diese

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Messungen mussten neue Einstellungen der Falle verwendet werden, da in der Zwischenzeit die Vakuumkammer der Implantationsfalle wegen eines Umbaus ausgeheizt werden musste. Dabei hatten sich die Fallenchips leicht gegeneinander verzogen. Wie in Abschnitt

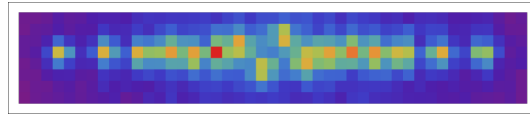


Abbildung 3.48: Kristall senkrecht von oben.

2.6.2 gezeigt wurde, ändert sich der Winkel des Kristalls in der Falle bei weniger symmetrischen Fallen früher, als dies im symmetrischen Fall auftritt. Deshalb konnten die Kristalle nach dem Ausheizen nur noch senkrecht von oben beobachtet werden. Dies ist in Abbildung 3.48 zu sehen, für deren Aufnahme wurden die Einstellungen aus Abschnitt 3.3 verwendet. Unter diesem Winkel war die Auswertung der Kristallbilder, beispielsweise die Überprüfung, ob die richtige Ionenanzahl vorhanden ist, erschwert. Deshalb wurden neue Fallenparameter gesucht, bei denen der Kristall wieder frontal abgebildet wurde. Für

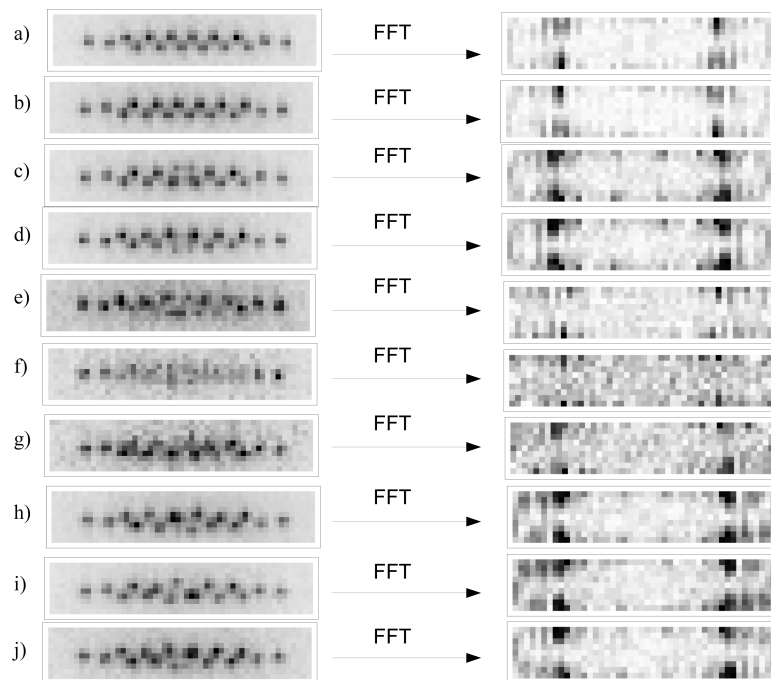


Abbildung 3.49: Vorlagebilder für die neuen Falleneinstellungen.

die neuen Einstellungen wurden neue Vorlagen für die Kristallstrukturen benötigt, diese sind in Abbildung 3.49 zu sehen. Unter a) und b) sind die Vorlagen für die Zickzack- und



Zackzick-Kristalle dargestellt. Um die Stabilität der Defekte richtig zu beschreiben, war es nötig, Einzeldefekte noch weiter als bisher zu unterscheiden, weshalb in c) und d) die Vorlagen für einen mittigen Defekt oben und unten zu sehen sind. Deren Lebensdauer kann sich von der Lebensdauer eines Defekts, der sich in einer weiter in Richtung Kristallrand gelegenen Potentialmulde des Peierls-Nabarro-Potentials befindet, deutlich unterscheiden. Dies liegt daran, dass die Potentialtiefen positionsabhängig sind, was Abbildung 2.6.2 entnommen werden kann. Die Vorlagen für einen Defekt, der um eine Ionenposition nach links verschoben ist, sind in g) (oben) und h) (unten) zu sehen. Für die um eine Ionenposition nach rechts verschobenen Defekte oben und unten sind die Vorlagen in i) und j) abgebildet. Bei den neuen Einstellungen konnten Doppeldefekte nur noch mit etwa 0,1% beobachtet werden. Daher sind die Vorlagen e) und f) deutlich verrauschter, da uns nicht genug Beispielbilder zur Verfügung standen. Wie aber an den fouriertransformierten Bildern auf der rechten Seite zu erkennen ist, ist trotzdem ein deutlicher Unterschied zwischen Doppeldefekten und anderen Vorlageklassen zu erkennen. Außer den hier abgebildeten Vorlagen wurden weitere für Kristalle mit einem Ion zu viel oder zu wenig, sowie mit einem dunklen Ion darin verwendet. Damit wurden wieder alle Voraussetzungen erfüllt, um die Defektraten studieren zu können.

#### Stabilität von Defekten

Begonnen wurde mit dem Einfluss der radialen Anisotropie  $\alpha_{\text{aniso}}$ . Dazu wurde ein Sechszehn-Ionenkristall und die folgenden axialen Frequenzen  $\omega_{z,\text{start}}/2\pi = 145,8 \pm 2,0 \text{ kHz}$  und  $\omega_{z,\text{ende}}/2\pi = 333,0 \pm 1,0 \text{ kHz}$ , sowie die unteren radialen Frequenzen von  $\omega_{y,\text{start}}/2\pi = 1202,7 \pm 3,9 \text{ kHz}$  und  $\omega_{y,\text{ende}}/2\pi = 1184,5 \pm 4,0 \text{ kHz}$  verwendet. Damit wurde der kritische Fallenparameter  $\alpha$  von  $\alpha_{\text{start}} = 0,0147$ , was 70% von  $\alpha_{\text{krit1}}$  am Anfang waren, auf  $\alpha_{\text{ende}} = 0,0790$ , was 378% von  $\alpha_{\text{krit1}}$  und 56% von  $\alpha_{\text{krit2}}$  waren, nach der Rampe geändert. Um die Werte für  $\alpha_{\text{krit1}}$ , die bei der Messung erreicht wurden, nicht zu ändern, musste die untere radiale Fallenfrequenz für alle radialen Anisotropien konstant gehalten und nur die obere radiale Fallenfrequenz variiert werden. Dies wurde erreicht, indem einerseits eine Ausgleichsspannung  $U_{\text{offset}}$  an die Gleichspannungselektroden der Falle angelegt wurde. Gleichzeitig wurde die Wechselspannungsamplitude so angepasst, dass die untere radiale Fallenfrequenz wieder denselben Wert hatte. In Tabelle 3.6 sind die Werte der verschiedenen Kurven für die obere radiale Fallenfrequenz vor und nach der Spannungsrampe, sowie die daraus resultierende Anisotropie von Abbildung 3.50 dargestellt.

Es ist zu sehen, dass die Defektrate, die mit einer bestimmten Kompressionsgeschwindigkeit erreicht wurde, mit steigender Anisotropie abnimmt. Außerdem bewegte sich der

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

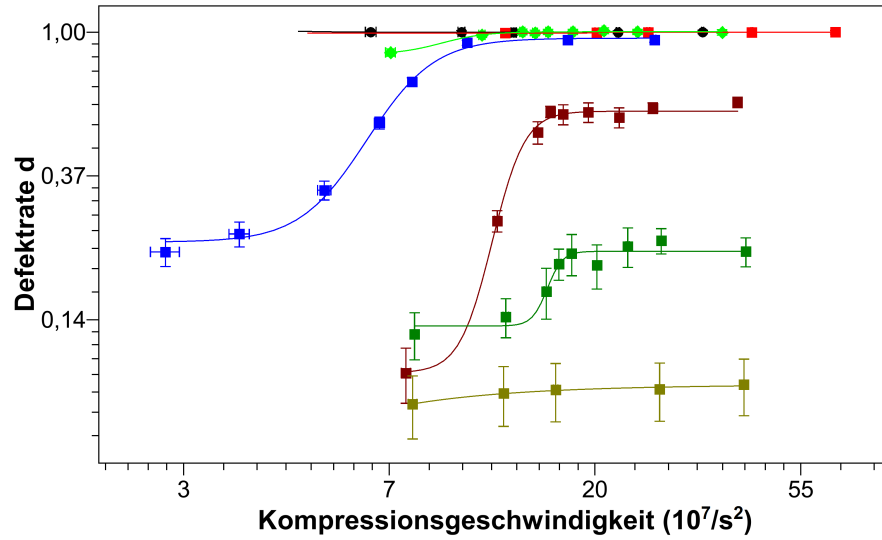


Abbildung 3.50: Messung der radialen Anisotropie. Aufgetragen sind die unterschiedlichen Defektraten der verschiedenen Anisotropien gegen die Kompressionsgeschwindigkeit.

Bereich, in dem eine Steigung gemessen werden konnte, von unten rechts nach oben links, während die Anisotropie verringert wurde. Derselbe Zusammenhang zwischen der Defektrate und der radialen Anisotropie konnte auch in den Simulationen beobachtet werden, wie in Abbildung 3.45 und Abbildung 3.46 zu sehen ist.

Somit konnte sowohl in den Experimenten als auch in den Simulationen gezeigt werden, dass die Defektrate von der radialen Anisotropie abhängt. Die Abhängigkeit von der Anisotropie konnte noch deutlicher gezeigt werden, indem die Daten für eine bestimmte Kompressionsgeschwindigkeit, in diesem Fall für die Schnellste, gewählt wurden und diese Defektraten bei gleichbleibender Kompressionsgeschwindigkeit gegen die Anisotropie auf-

Kurvenfarbe	$\omega_{x,start}/2\pi$ [kHz]	$\omega_{x,end}/2\pi$ [kHz]	$\alpha_{aniso}$	Anisotropie
schwarz	$1283,5 \pm 0,5$	$1267,1 \pm 5,6$	$1,0674 \pm 0,0003$	80 kHz
rot	$1296,3 \pm 2,4$	$1277,9 \pm 2,5$	$1,0755 \pm 0,0007$	90 kHz
grün	$1307,8 \pm 4,9$	$1289,9 \pm 4,7$	$1,0855 \pm 0,0006$	103 kHz
blau	$1317,6 \pm 2,4$	$1300,0 \pm 2,3$	$1,0956 \pm 0,0005$	114 kHz
dunkelrot	$1328,4 \pm 4,4$	$1310,8 \pm 4,3$	$1,1076 \pm 0,0005$	129 kHz
dunkelgrün	$1353,5 \pm 2,1$	$1336,2 \pm 2,2$	$1,1236 \pm 0,0008$	149 kHz
dunkelgelb	$1365,4 \pm 3,1$	$1348,4 \pm 3,2$	$1,1383 \pm 0,0006$	169 kHz

Tabelle 3.6: Obere radiale Fallenfrequenzen vor und nach der Spannungsrampe, sowie die radialen Anisotropien der Messungen aus Abbildung 3.50.

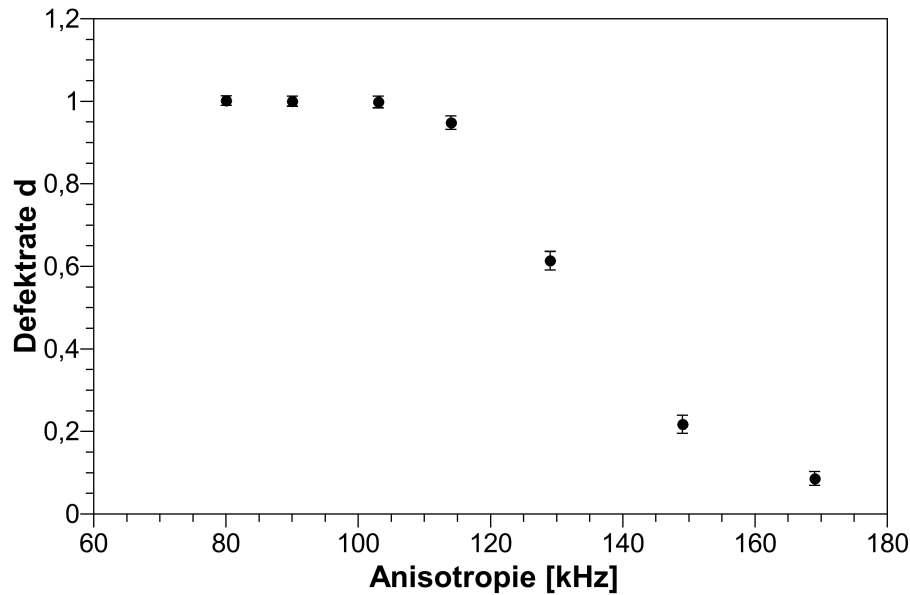


Abbildung 3.51: Einfluss der radialen Anisotropie. Die Defektraten der schnellsten Kompressionsgeschwindigkeit wurden gegen die Anisotropie aufgetragen.

getragen wurden. Die Daten der schnellsten Kompressionsgeschwindigkeit wurden gewählt, da sie am meisten Defekte produzierten und somit das beste Signal-zu-Rausch-Verhältnis aufwiesen. Deutlich ist in Abbildung 3.51 zu erkennen, dass die Defektrate zunimmt, wenn die radiale Anisotropie abnimmt. Bisher ist uns jedoch noch keine analytische Funktion bekannt, mit der die Defektrate als Funktion der Anisotropie beschrieben werden kann. Wenn nun für jede Anisotropie eine Lebenszeitmessung für die Defekte durchgeführt wurde und die Ergebnisse dargestellt wurden, ergibt sich Abbildung 3.52. Eine Lebenszeitmessung für Defekte war wie folgt aufgebaut: Es wurde eine normale KZM-Messung, also die Präparation und Kontrolle des Kristalls und das Fahren der Spannungsrampe, durchgeführt.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

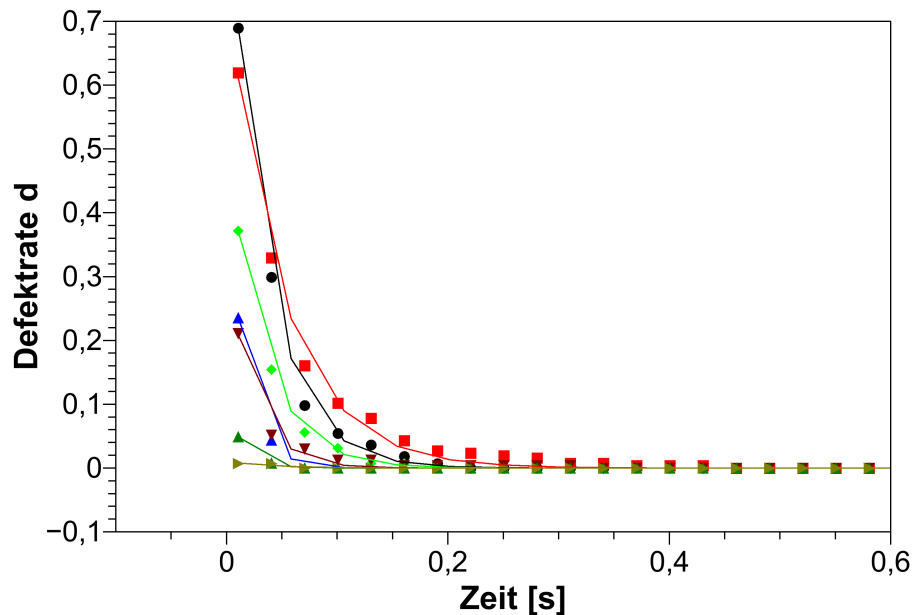


Abbildung 3.52: Lebenszeitmessung für Defekte. Jede Kurve entspricht einer Bilderserie bei einer Anisotropie, beginnend bei Schwarz mit 80 kHz, dann Rot mit 90 kHz, Grün mit 103 kHz, Blau mit 114 kHz, Dunkelrot mit 129 kHz, Dunkelgrün mit 149 kHz und Dunkelgelb mit 169 kHz.

Doch statt einem einzigen Ergebnisbild wurde eine Serie von Bildern mit jeweils 10 ms Belichtungszeit aufgenommen. Diese wurde nur von 20 ms unterbrochen, der Zeit, die die Kamera benötigte, um das Bild vom CCD-Chip in den Speicher zu transferieren. Diese Bilderserie wurde sortiert. Dabei zählte zu den späteren Zeitschritten ein Defekt nur dann, wenn er auch zuvor schon als solcher erkannt wurde. Dadurch wurden alle Defekte, die durch Hintergrundgasstöße erzeugt wurden, unterdrückt. Bei dieser Auswertung musste zwischen mittigen Defekten und solchen, die um eine Position nach rechts oder links versetzt sind, unterschieden werden. Defekte, die weiter als eine Ionenposition von der Mitte abweichen, konnten nicht beobachtet werden.

Diese Unterscheidung musste vorgenommen werden, da die Peierls-Nabarro-Potentialtöpfe, in denen sich diese Defekte befinden, unterschiedlich tief waren und sich somit die mittlere Lebensdauer unterscheiden sollte. Es konnten jedoch alle versetzten Defekte, sowie die oberen und unteren Defekte zusammengefasst werden, da es keinen Hinweis darauf gab, dass das Peierls-Nabarro-Potential unsymmetrisch sein sollte. Bei dieser Auswertung zählten Defekte, die sich um eine Ionenposition bewegt hatten, auch als zerfallen. Die Ergebnisse für Defekte, die sich in der Mitte des Kristalls befanden, sind in Abbildung 3.53 zu sehen. Die Ergebnisse für die versetzten Defekte sind in Abbildung 3.54 abgebildet. Bei

### 3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential

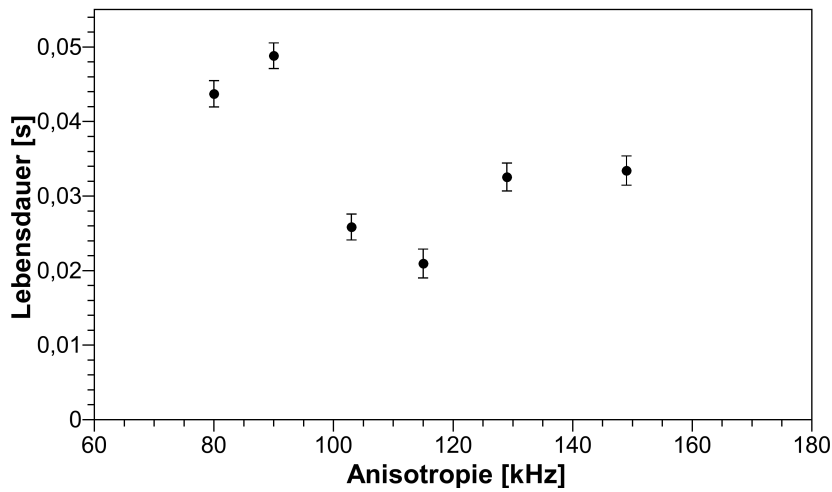


Abbildung 3.53: Mittlere Lebenszeit eines mittleren Defekts aufgetragen gegen die Anisotropie.

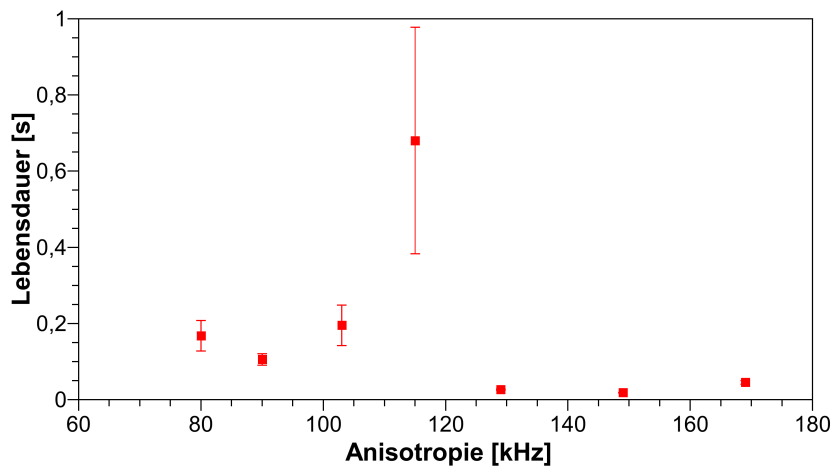


Abbildung 3.54: Dargestellt ist die mittlere Lebenszeit eines versetzten Defekts als Funktion der Anisotropie.

den Ergebnissen für die Lebenszeiten ist zu beachten, dass auf Grund der genaueren Unterteilung unsere Statistik nicht sehr belastbar ist. Als nächstes wurde betrachtet, welchen Einfluss die Kristallgröße auf die Defektrate hat.

#### **Kibble-Zurek-Skalierungsverhalten in Abhängigkeit von der Ionenanzahl**

Zur Bestimmung des Einflusses der Kristallgrößen wurden zunächst die Defektraten als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeiten für einen Sechzehn-Ionenkristall unter den

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

neuen Einstellungen gemessen. Die Messungen wurden, wie im Abschnitt 3.3 beschrieben, durchgeführt. Da die Gruppe von Tanja Mehlstäubler an der PTB [PKP<sup>+</sup>13, PNB<sup>+</sup>13] für Kristalle mit 40 Ionen dieselbe Steigung gemessen hatte, beschränkten wir unsere Messungen auf Kristalle von 17 Ionen und weniger, da für größere Kristalle keine Änderung erwartet wurde. Sattdessen wurde der Schwerpunkt der Messungen auf kleinere Kristalle gelegt. Hierbei sollte überprüft werden, wie klein ein Ionenkristall sein kann, um noch dem Skalierungsverhalten des KZM zu folgen, welcher ja aus einer Theorie abgeleitet wird, die im thermodynamischen Limit gültig ist. Für jede neue Kristallgröße wurde ein neuer Satz

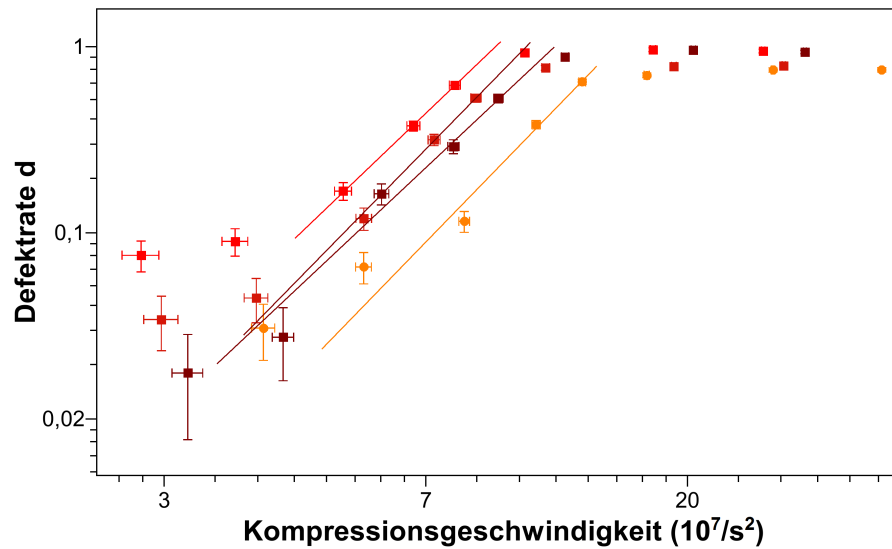


Abbildung 3.55: Dargestellt sind die Defektraten für unterschiedliche Kristallgrößen. Die Kurve von 17 Ionen ist in Weinrot, für 16 Ionen in Rot, für 15 Ionen in Dunkelrot und für 14 Ionen in Orange eingezeichnet. Bis zu einer Größe von 14 Ionen ist die Steigung mit im Mittel  $2,83 \pm 0,65$  unabhängig von der Kristallgröße.

Vorlagenbilder erstellt, sowie jeweils der Frequenzbereich bestimmt, in dem die Steigung möglichst genau gemessen werden konnte. Das bedeutet, es wurden die Fallenfrequenzen jeweils so gewählt, dass der größte Unterschied in der Defektrate zwischen schnellen und langsamen Spannungsrampen erreicht wurde. Eine Anpassung der Fallenfrequenzen war dennoch in jedem Fall nötig, da das kritische Fallenfrequenzverhältnis  $\alpha_{\text{krit}1}$  weiter zunahm, je mehr die Kristallgröße abnahm. Deshalb würde der Kristall bei gleichbleibenden Frequenzen nicht mehr soweit über den Phasenübergang hinaus komprimiert werden, wie dies zuvor der Fall war. Das könnte dann sogar dazu führen, dass weniger Ionen über den Phasenübergang gebracht werden als zuvor. Bis zu einer Größe von 14 Ionen wurden

### 3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential

Kristallgröße	17	16	15	14
$\omega_{z,start}/2\pi$ [kHz]	$148,6 \pm 0,5$	$148,9 \pm 0,3$	$149,1 \pm 0,5$	$151,2 \pm 0,3$
$\omega_{z,ende}/2\pi$ [kHz]	$331,7 \pm 0,3$	$334,2 \pm 0,3$	$334,5 \pm 0,6$	$333,4 \pm 0,3$
$\omega_{y,start}/2\pi$ [kHz]	$1243,7 \pm 0,7$	$1203,1 \pm 2,7$	$1145,0 \pm 0,3$	$1137,0 \pm 0,8$
$\omega_{y,ende}/2\pi$ [kHz]	$1226,4 \pm 1,1$	$1185,2 \pm 2,5$	$1126,0 \pm 0,4$	$1118,2 \pm 0,8$
$\omega_{x,start}/2\pi$ [kHz]	$1359,0 \pm 0,7$	$1318,0 \pm 2,4$	$1259,5 \pm 2,1$	$1223,3 \pm 0,9$
$\omega_{x,ende}/2\pi$ [kHz]	$1342,0 \pm 0,7$	$1300,3 \pm 2,4$	$1240,8 \pm 1,9$	$1204,2 \pm 1,0$
Steigung $[1/(10^7/s^2)]$	$2,64 \pm 0,40$	$2,69 \pm 0,48$	$2,95 \pm 0,62$	$3,04 \pm 1,08$

Tabelle 3.7: Fallenfrequenzen und Steigungen der verschiedenen Kristallgrößen für 17, 16, 15 und 14 Ionen. Innerhalb aller Fehlerbereiche der hier gemessenen Steigungen liegt die Steigung unserer Präzisionsmessung mit 16 Ionen von  $\beta = 2,68 \pm 0,06$ .

Steigungen gemessen, die keine signifikante Abweichung zur Steigung von  $\frac{8}{3}$  des verdoppelten inhomogenen KZM aufwiesen. Alle Fallenfrequenzen für die Kristalle von 17 Ionen bis 14 Ionen sind in Tabelle 3.7 zu sehen und in Abbildung 3.55 sind die Kurven, die sich dabei ergaben, dargestellt. Es kann deutlich gesehen werden, dass die an die Steigung der Kurven angepassten Geraden relativ parallel verlaufen. Für Kristalle der Größen 16, 15 und 14 Ionen bewegt sich der Bereich, in dem die Steigung gemessen werden konnte, von links (den langsameren Spannungsrampen) nach rechts (den schnelleren Spannungsrampen). Die Ergebnisse für die einzelnen Steigungen sind in Tabelle 3.7 eingetragen. Diese weisen deutlich größere Fehler auf, als dies bei den Messungen im Abschnitt 3.3 der Fall war, da bisher im Vergleich eine kleinere Statistik vorliegt. Wurde die Größe der Kristalle jedoch weiter reduziert, so ist in Abbildung 3.56 zu sehen, dass die Steigungen flacher wurden. Aufgetragen sind die Kurven für 13, 12 und 11 Ionen. Für noch kleinere Kristalle

Kristallgröße	13	12	11
$\omega_{z,start}/2\pi$ [kHz]	$165,7 \pm 0,2$	$193,5 \pm 1,0$	$210,9 \pm 0,2$
$\omega_{z,ende}/2\pi$ [kHz]	$340,8 \pm 0,4$	$381,1 \pm 0,3$	$390,0 \pm 0,2$
$\omega_{y,start}/2\pi$ [kHz]	$1086,6 \pm 0,5$	$1231,4 \pm 1,3$	$1204,8 \pm 0,5$
$\omega_{y,ende}/2\pi$ [kHz]	$1067,0 \pm 0,5$	$1210,7 \pm 1,2$	$1184,4 \pm 0,5$
$\omega_{x,start}/2\pi$ [kHz]	$1172,7 \pm 0,5$	$1291,4 \pm 1,2$	$1249,8 \pm 0,5$
$\omega_{x,ende}/2\pi$ [kHz]	$1152,5 \pm 0,5$	$1268,6 \pm 1,2$	$1225,5 \pm 0,5$
Steigung $[1/(10^7/s^2)]$	$1,27 \pm 0,21$	$0,90 \pm 0,50$	$1,17 \pm 0,32$

Tabelle 3.8: Fallenfrequenzen und Steigungen für 13-, 12- und 11-Ionenkristalle.

ist es uns nicht gelungen, einen Bereich zu finden, in dem eine Änderung der Defektrate zu sehen war. Der Grund hierfür war, dass mit abnehmender Größe der Kristalle der

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Anisotropiebereich immer kleiner wurde, der zwischen den Bereichen lag, in denen nur Defekte oder gar keine Defekte gemessen wurden. Die Frequenzen und Steigungen der

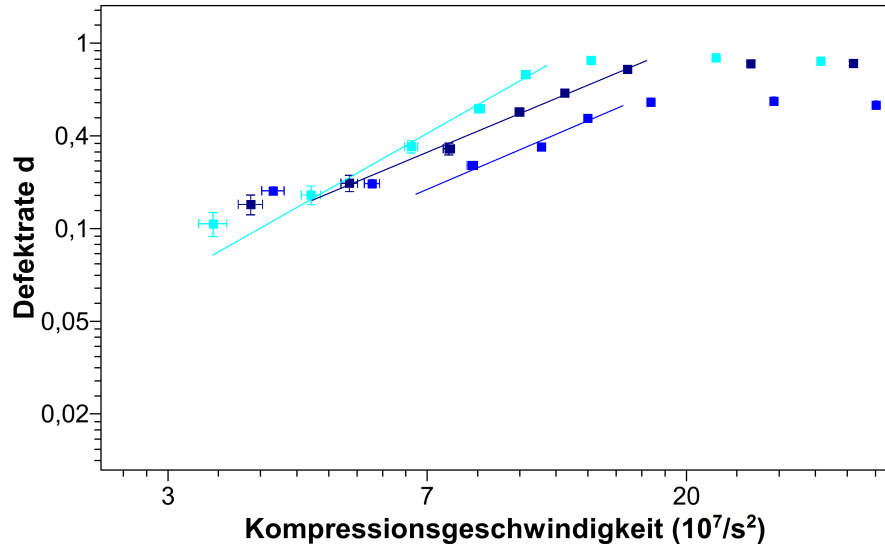


Abbildung 3.56: Eingezeichnet sind die Defektraten für Kristalle mit weniger als 14 Ionen. In Hellblau ist die Defektrate von 13 Ionen, in Blau für 12 Ionen und in Dunkelblau für 11 Ionen abgebildet. Ab einer Kristallgröße von 13 Ionen und weniger nahm die Steigung ab und näherte sich dem Wert für den verdoppelten homogenen Fall.

Kristalle sind in Tabelle 3.8 zu finden. Der Unterschied in der Steigung zwischen Kristallen, die aus mehr als 13 Ionen bestehen, und denen mit weniger als 14 Ionen wird verdeutlicht, wenn sie in einer Abbildung dargestellt werden. Deshalb sind in Abbildung 3.57 für alle Kristallgrößen die gemessenen Defektraten gegen die Kompressionsgeschwindigkeiten aufgetragen. Anhand der Geraden, die an die jeweiligen Steigungen angepasst wurden, ist zu sehen, dass alle roten Kurven deutlich steiler sind als die blauen Geraden. Um dies quantitativ darzustellen, wurden die gemessenen Steigungen gegen die Ionenanzahl des Kristalls aufgetragen. In Abbildung 3.58 ist zu sehen, dass bei einer Kristallgröße von 14 Ionen und mehr die verdoppelte inhomogene KZM-Steigung von  $\frac{8}{3}$  innerhalb der Fehlerbalken liegt. Bei den kleineren Kristallen näherte sich die Steigung dem Wert des verdoppelten homogenen KZM mit  $\frac{2}{3}$  an. Dies kann verstanden werden, wenn folgendes Bild berücksichtigt wird. Ein Drei-Ionenkristall muss selbst in einer harmonischen Falle homogen in seinen Abständen sein. Folglich muss es zwischen dem Drei-Ionenkristall und dem Sechzehn-Ionenkristall einen Übergang zwischen homogenen Kristallen und inhomogenen Kristallen geben. Die Steigungswerte weisen jedoch noch relativ große Fehler auf und die Anzahl beteiligter Punkte könnte größer sein.



### 3.4 Untersuchungen zum Peierls-Nabarro-Potential

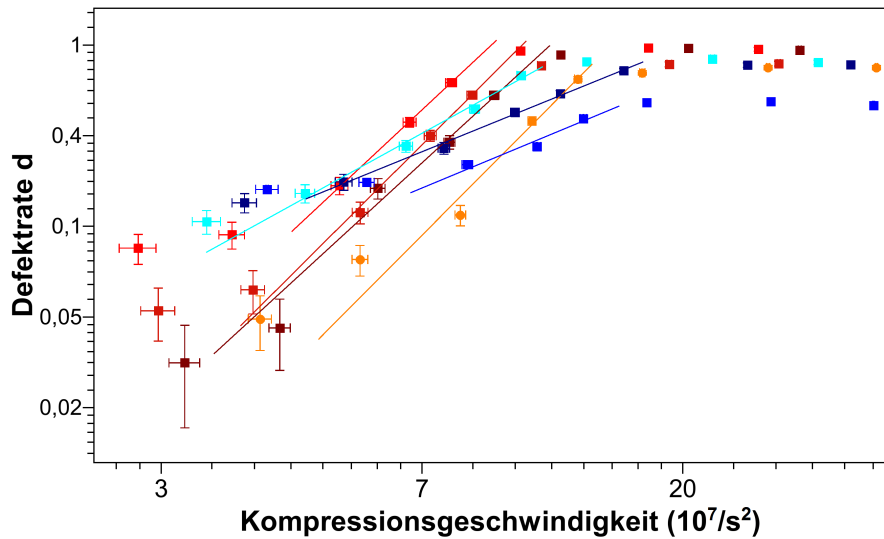


Abbildung 3.57: Hier sind die Kurven aller Kristallgrößen zusammengefasst. Dabei wurden alle Kurven von Kristallen mit mehr als 13 Ionen in roten Nuancen gehalten und alle Kurven von Kristallen mit weniger als 14 Ionen in blauen Nuancen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Kurven mit 13, 12 und 11 Ionen flacher sind als die der größeren Kristalle.

Der Einfluss eines homogenen Kristalls auf die Steigung wird im nächsten Abschnitt genauer untersucht.

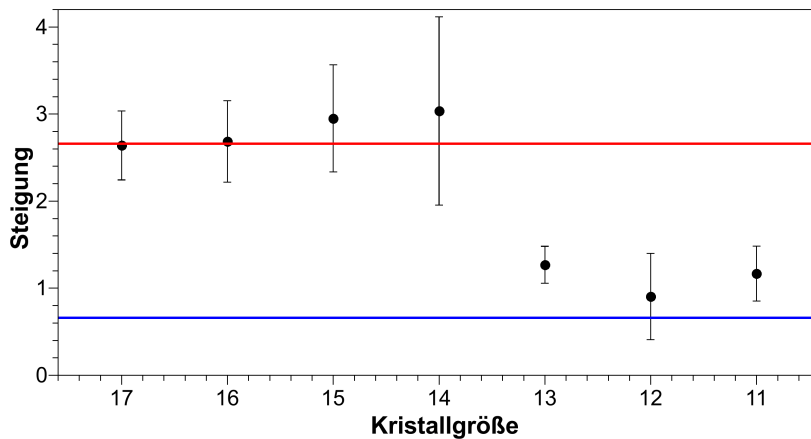


Abbildung 3.58: Hier sind die Steigungen aller Kurven aller Kristallgrößen zusammengefasst. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Steigungen bei 13, 12 und 11 Ionen flacher sind als die der größeren Kristalle. In Rot ist die verdoppelte inhomogene KZM Steigung von  $\frac{8}{3}$  und in Blau der Wert des verdoppelten homogenen KZM mit  $\frac{2}{3}$  eingezeichnet.

### 3.5 Defektbildung in homogenen Ionenkristallen

Für die genauere Untersuchung der homogenen Kristalle wurde unsere segmentierte Falle benutzt, um die Ladungsverteilung der Kristalle zu beeinflussen. Dabei wurde ein Doppelmuldenpotential, wie es in Abbildung 3.59 gesehen werden kann, erzeugt. Die Tiefe

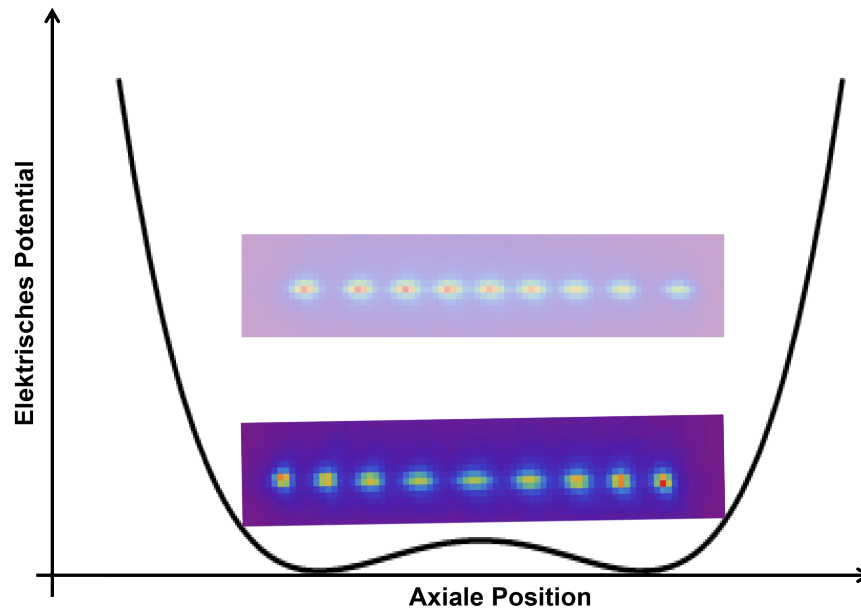


Abbildung 3.59: Doppelmulde zur Erzeugung eines homogenen Kristalls. Dargestellt ist das elektrische Potential entlang der Fallachse und der homogene Kristall, der durch dieses erzeugt wurde. Zum Vergleich ist darüber ausgegraut ein inhomogener Kristall gleicher Größe abgebildet.

der beiden Töpfe im Verhältnis zum Gesamtpotential wurde so gewählt, dass der Kristall mit seinen GP auf dem Potentialberg in der Mitte der Falle lag. Mit dem Potentialberg konnte dann, gegen den Coulombdruck des Restkristalls, die Mitte des Kristalls auseinander gedrückt werden und somit eine homogene Verteilung der Ionen erreicht werden. Die Homogenität der Ionen wurde anhand der Ionenpositionen auf den Kamerabildern überprüft. Da die axiale Fallenfrequenz während der Spannungsrampe verändert wurde, konnte bei gleichbleibenden Segmentspannungen nur in einem gewissen Bereich ein homogener Kristall erzeugt werden. Daher wurde der homogene Kristall genau bei der kritischen axialen Fallenfrequenz eingestellt, davor ergab sich ein Kristall, dessen Ladungsverteilung zum Rand hin dichter wurde. Im späteren Verlauf der Spannungsrampe dominierte dann der Einschluss durch die Endkappen, sodass wieder eine größere Ionen-

### 3.5 Defektbildung in homogenen Ionenkristallen

dichte in der Mitte des Kristalls vorlag. Um die Fallenfrequenzen zu bestimmen, musste bei den Kristallen im Doppelmuldenpotential darauf geachtet werden, dass bei der Frequenzmessung sechzehn Ionen im Kristall waren. Dies war nötig, da der Einschluss nun auch von der Ionenanzahl abhing. Nachdem eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Ionen am kritischen Punkt des Phasenübergangs eingestellt wurde, wurden noch die Fal-lenfrequenzen vor und nach der Spannungsrampe gemessen. Um möglichst vergleichbar mit den bisherigen Messungen zu sein, wurden folgende Frequenzen eingestellt:  $\omega_{z,\text{start}}/2\pi = 144,5 \pm 0,6$  kHz,  $\omega_{y,\text{start}}/2\pi = 1211,4 \pm 0,4$  kHz und  $\omega_{x,\text{start}}/2\pi = 1326,3 \pm 0,3$  kHz vor Beginn der Rampe und  $\omega_{z,\text{ende}}/2\pi = 330,3 \pm 0,3$  kHz,  $\omega_{y,\text{ende}}/2\pi = 1196,9 \pm 0,6$  kHz und  $\omega_{x,\text{ende}}/2\pi = 1305,6 \pm 0,4$  kHz am Ende der Rampe. Damit wurde der kritische Fallenparameter  $\alpha$  von  $\alpha_{\text{start}} = 0,0142 \pm 0,0001$  auf  $\alpha_{\text{ende}} = 0,0761 \pm 0,0001$  geändert, genau wie bei den inhomogenen Kristallen. Dies entsprach 68% von  $\alpha_{\text{krit1}}$  zu Beginn und 364% von  $\alpha_{\text{krit1}}$ , sowie 54% von  $\alpha_{\text{krit2}}$  am Ende der Rampe. Wenn diese homogenen Kristalle für die

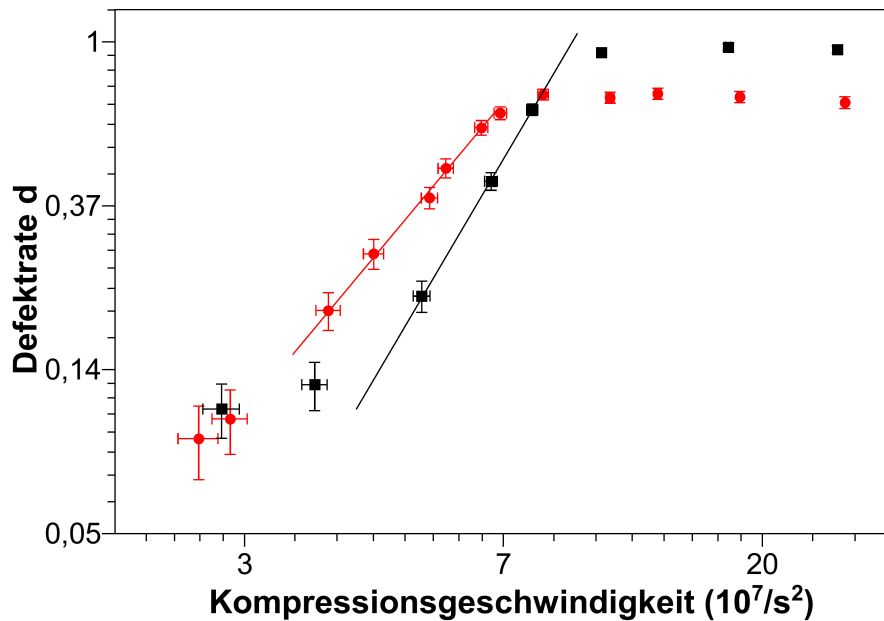


Abbildung 3.60: Vergleich eines homogenen und eines inhomogenen Kristalls. In Schwarz sind die Defektraten, die mit inhomogenen Kristallen erreicht wurden, eingezeichnet. In Rot sind die Ergebnisse, die mit den homogenen Kristallen erzielt wurden, aufgetragen. Dabei hat die Defektrate der inhomogenen Kristalle eine Steigung von  $2,68 \pm 0,06$  und die Defektrate der homogenen Kristalle eine Steigung von  $1,89 \pm 0,08$ .

Experimente verwendet wurden, ergab sich die rote Kurve von Abbildung 3.60 für die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit. Zum Vergleich wurde in Schwarz

### *3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen*

die Kurve der Defektraten eines inhomogenen Sechzehn-Ionenkristalls bei den gleichen Einstellungen, nur ohne zusätzliche Segmentspannungen für die Dopplemulde, eingetragen. Mit den homogenen Kristallen reduzierte sich die Steigung der Kurve um 30%, von  $2,68 \pm 0,06$  auf  $1,89 \pm 0,08$ . Dies stellte das Einsetzen des homogenen KZM für Ionenkristalle dar. Um den Einfluss der homogenen Ladungsverteilung auf die KZM-Steigung weiter zu klären, sind numerische Simulationen geplant.

## 3.6 Strukturen und Defekte in gemischten Kristallen

In Abschnitt 2.5 wurde gezeigt, wie mit Hilfe des sympathetischen Kühlens gemischte Kristalle gefangen werden können. Für viele der experimentell interessanten Elemente, wie etwa Stickstoff oder Praseodym zur Erzeugung von Farbzentren, standen jedoch keine direkten Photoionisationsschemata zur Verfügung. Deshalb wurden zur Ionisation verschiedene Methoden getestet, die hier kurz erläutert werden sollen. Anschließend werden die ersten Ergebnisse, die beim Nachweis von Praseodym- und Stickstoff-Ionen erzielt wurden, gezeigt.

### 3.6.1 Ionisationsmethoden

Um verschiedenste Elemente ionisieren zu können, standen uns drei Methoden zur Verfügung, die Multiphotonenionisation mittels eines gepulsten Lasers, die Elektronenstossionisation durch einen Elektronenstrahl aus einer Elektronenkanone und die Elektronenstossionisation in einer Ionenkanone. In den folgenden Abschnitten werden die Vor- und Nachteile aller drei Methoden erörtert.

#### Multiphotonenanregung

Da für die Ionisationsübergänge im Stickstoff und im Praseodym keine passenden Laser vorhanden waren, konnte nur eine Anregung mittels mehrerer Photonen benutzt werden, um diese Elemente zu ionisieren. Daher wurde ein gepulster ND-YAG Laser<sup>11</sup> verwendet, um eine ausreichend hohe Photonendichte zu erzeugen, sodass die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs mit mehreren Photonen ausreichend groß wurde, um den gewünschten Übergang zu treiben. Der gepluste Laser hatte eine Pulslänge von 4 ns und eine maximale Energie von 20 mJ. Es wurden so hohe Energiedichten benötigt, da es sich bei Stickstoff um einen 7-Photonenprozess handelt. Bei Praseodym liegen die Energielevel deutlich günstiger. Hier waren nur 3 Photonen erforderlich. Wie jedoch in Anhang A gezeigt wird, erleidet die Goldbeschichtung der Keramiksubstrate, wie sie etwa in der Implantationsfalle verwendet wurde, schon bei einer Energie von  $0,19 \frac{\text{J}}{\text{cm}^2}$  einen deutlich sichtbaren Schaden. Deshalb musste sichergestellt werden, dass zu keinem Zeitpunkt die Fallenelektroden getroffen wurden, sollte diese Ionisationsmethode mit einer Keramiksubstratfalle verwendet werden. Auch Kupferelektroden auf PVC-Chips, wie sie in der ersten Version der Implantationsfalle [Sch10] verwendet wurden, können bei diesen Leistungen irreparabel beschädigt werden. Daher wurde für unsere Tests die relativ robuste Stabfalle verwendet, deren Eigenschaften selbst durch oberflächliche Beschädigungen der Metallstäbe nicht beeinflusst

---

<sup>11</sup>Minilite I der Firma Continuum

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

wurden. Der entscheidende Vorteil der Multiphotonenionisation lag darin, dass diese zu jeder Zeit an eine Falle angebracht werden konnte, da der Laser lediglich einen optischen Zugang benötigte und nicht, wie bei den anderen Methoden, das Vakuum der Kammer gebrochen werden musste.

#### **Elektronenstoßionisation mit Elektronenkanone**

Um für die Untersuchung gemischter Ionenkristalle das Risiko einer möglichen Zerstörung der Ionenfalle zu vermeiden, konnte zum Beispiel auf die Elektronenstoßionisation zurückgegriffen werden. Dabei wurde mit einer Elektronenkanone ein Elektronenstrahl bei der benötigten Ionisationsenergie des jeweiligen Elements erzeugt und mit diesem in die Falle gezielt. Dank der Beschleunigungslinse und der Ablenkelektroden konnte ein großer Bereich an Elektronenenergien und Strahlpositionen abgedeckt werden. Jedoch musste für die Anbringung an die Kammer das Vakuum gebrochen werden. Der größte Nachteil dieser Methode lag darin, dass der Elektronenstrahl nur während der Nulldurchgänge der Radiofrequenz ungehindert auf die eingestellte Position in der Falle traf. Während der restlichen Zeit bestand immer die Gefahr, dass Aufladungen erzeugt wurden, die das Potential beeinflussen. Zusätzlich wurde ein relativ hoher Ladungsfluss benötigt, um eine ausreichend große Ionisationswahrscheinlichkeit zu erhalten.

#### **Elektronenstoßionisation in Ionenkanone**

Eine weitere Ionisationsmethode ist die Elektronenstoßionisation mit Hilfe einer kommerziellen Ionenkanone<sup>12</sup>. Hierbei wird das zu ionisierende Gas direkt in die Ionenkanone geleitet, wo es mittels Elektronenstoßionisation ionisiert wird. Anschließend werden die Ionen mittels einer Linse beschleunigt und fokussiert, zudem kann der Strahl noch über Ablenkelektroden verschoben werden. Die gesamte Ionenkanone wurde über eine differentielle Pumpstrecke an die Fallenkammer angebracht. Dadurch wurde einer der größten Vorteile erreicht: Obwohl der Druck in der Kammer deutlich besser war als in der Ionenkanone, konnte innerhalb der Ionenkanone ein relativ hoher Druck des gewünschten Elements, wie etwa Stickstoff, erzeugt werden, sodass eine hohe Ionisationswahrscheinlichkeit erreicht wurde. Die benötigte Menge an Stickstoffionen konnte gezielt über die Beschleunigungsspannung eingestellt werden. Deshalb war das Risiko, eine Aufladung in der Falle zu erzeugen, auch deutlich geringer als beim Elektronenstrahl, da nur so viel Ladung eingebracht wurde, wie Stickstoffatome benötigt wurden. Zusätzlich besteht bei leitenden Elementen kaum die Gefahr, dass die Fallenelektroden kurz geschlossen werden,

---

<sup>12</sup>Ionenkanone des Modells IQE12/38 der Firma Specs

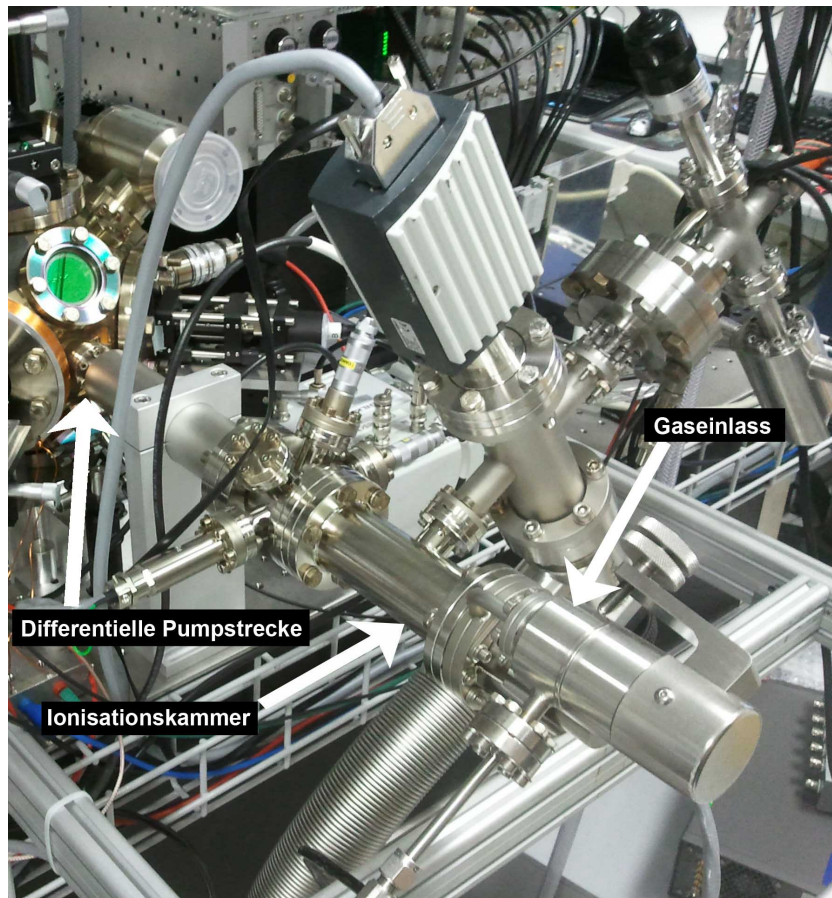


Abbildung 3.61: Foto der Ionenkanone, wie sie an die Fallenkammer angebracht war.

da der Atomfluss nur in der Ionenkanone hoch ist, deren Elektrodengeometrie aber makroskopische Abmessungen hat. Der größte Nachteil dieser Methode lag in ihren relativ hohen Anschaffungskosten. Zusammenfassend hat sich gezeigt, dass für uns die Elektronenstoßionisation mit der Ionenkanone die beste Möglichkeit war, um gemischte Kristalle zu erzeugen, da hierbei der Ionisationsprozess mit seinen potentiell gefährlichen Energien außerhalb der Falle stattfand und nur die Ionen in der Falle gefangen werden mussten.

#### 3.6.2 Ionisation von Praseodym

Mit Hilfe der Multiphotonenionisation konnten einzelne Praseodymionen in der Stabfalle gefangen werden. Um dies zu ermöglichen, wurden zunächst Praseodymöfen in der Vakuumkammer angebracht. Vorab musste bestimmt werden, ob unsere Standardöfen geeignet sind, um Praseodym zu verdampfen. Dazu wurde die Temperatur und die daraus

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

resultierende Atomanzahl für Kalzium anhand der Ergebnisse von Daniel Rotter [Rot03] abgeschätzt. Bei einer Ofentemperatur von  $T = 573^\circ\text{C}$  ergab sich mit

$$P_{\text{Dampf}} = p_0 \cdot e^{(-W/(k_B \cdot T))} \quad (3.9)$$

ein Dampfdruck von  $P_{\text{Dampf}} = 1,01 \cdot 10^{-6}$  mbar. Dabei wurde die Verdampfungsenergie  $W = 2,99 \cdot 10^{-19}$  J von Kalzium, die Boltzmannkonstante  $k_B$ , die Temperatur  $T$  des Ofens und der Initialdruck  $p_0 = 8,96 \cdot 10^7$  mbar verwendet. Damit ergibt sich ein Atomfluss von

$$n = \frac{P_{\text{Dampf}}}{(k_B \cdot T)} = 4,36 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{m}^3} \quad (3.10)$$

aus unseren Standardöfen. Soll nun eine vergleichbare Menge Praseodym verdampft werden, so wird auf Grund der größeren Masse eine deutlich höhere Temperatur benötigt. Bei einer Temperatur des Ofens von  $T = 1023^\circ\text{C}$  ergibt sich für Praseodym mit Gleichung 3.9 ein Dampfdruck von  $P_{\text{DampfPraseodym}} = 2,22 \cdot 10^{-9}$  mbar. Damit wird ein Atomfluss von  $n = 1,57 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{m}^3}$  erreicht, was in der gleichen Größenordnung wie der Kalziumfluss liegt. Die verwendeten Werte für die Verdampfungsenergie von  $W = 5,50 \cdot 10^{-19}$  J und den Initialdruck von  $p_0 = 1,77 \cdot 10^8$  mbar für Praseodym wurden der Arbeit von Clarence Habermann entnommen [Hab31]. Da Praseodym deutlich schneller und vollständig mit Sauerstoff reagiert, mussten die Öfen unter einer Stickstoffatmosphäre befüllt und mit einer Indiumdichtung luftdicht abgeschlossen werden. Dies war notwendig, um gewährleisten zu können, dass reines atomares Praseodym in die Falle eingebracht wird. Mit diesen Vorkehrungen konnten gemischte Kristalle vermessen werden. Die Frequenzverschiebung aufgrund des dunklen Ions legte bei diesen Messungen den Einfang von Praseodym nahe. In Tabelle 3.9 sind die Kristallstrukturen, Frequenzen und daraus resultierenden Isotopmassen abgebildet. Zuerst wurde jeweils eine Referenzmessung mit einem Kalziumion durchgeführt,

Kristallstruktur	$\omega_{\text{axial}}/2\pi$ [kHz]	Isotopmasse
<i>o</i>	$135,5 \pm 0,1$	40
<i>ooxo</i>	$99,9 \pm 0,2$	150
<i>oxo</i>	$100,9 \pm 0,2$	123
<i>oxo</i>	$99,6 \pm 0,2$	127
<i>oooxooo</i>	$97,5 \pm 0,2$	252

Tabelle 3.9: Kristallstrukturen, Fallenfrequenzen und Isotopmassen, die bei den Praseodymladeversuchen gemessen wurden. Dabei steht jedes *o* für ein Kalziumion und jedes *x* für ein dunkles Ion.

um die Fallenfrequenzen zu bestimmen. Anschließend wurde mit mehreren Laserpulsen



### 3.6 Strukturen und Defekte in gemischten Kristallen

ein gemischter Kristall erzeugt und dessen niedrigste Fallenfrequenz vermessen. Aus der Änderung der Schwerpunktsmode ließ sich dann die Masse des dunklen Ions bestimmen. Dazu wurde die Transformationsmatrix  $M^i$  aus Gleichung 2.34 mit einem Massentensor erweitert. Dieser ist für einen Zwei-Ionenkristall der Form  $ox$  (dabei steht  $o$  für das Kalziumion und  $x$  für das dunkle Ion) mit einem Praseodymion wie folgt aufgebaut:

$$\begin{aligned}
 a &= \begin{pmatrix} m_{\text{Ca}}/m_{\text{Ca}} \\ m_{\text{Pr}}/m_{\text{Ca}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 141/40 \end{pmatrix} \\
 a^T &= \begin{pmatrix} 1 & 141/40 \end{pmatrix} \\
 A_{i,j} &= \sqrt{a_i \cdot a_j^T} \\
 A &= \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{\frac{141}{40}} \\ \sqrt{\frac{141}{40}} & \frac{141}{40} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Mit dem Massentensor  $A$  wird  $M^i$  modifiziert zu  $\bar{M}^i = M^i/A$  und aus Gleichung 2.36 ergeben sich die Schwingungsmoden des gemischten Kristalls. Für die Bestimmung der Isotopenmassen wird nun die Ionenmasse in der Rechnung solange verändert, bis die gemessene Frequenz und die errechnete Frequenz übereinstimmen. Die Abweichung von etwa  $10\text{ u}$  zwischen den gemessenen Massen und der Masse von Praseodym könnte einerseits daran liegen, dass der Kristall eine Zickzack-Struktur angenommen hatte und eine der Zickzackmoden statt der Schwerpunktsmode gemessen wurde. Andererseits könnten Aufladungen die Fallenfrequenz leicht verschoben haben, da bereits Schwankungen von  $3\text{ kHz}$  einer Massenänderung von  $10\text{ u}$  entsprechen. Bei dem Kristall mit der Masse von  $252\text{ u}$  für das dunkle Ion waren wahrscheinlich zwei Praseodymionen ein Teil des Kristalls. Um eine effizientere Ionisation von Praseodym oder anderen Feststoffen zu gewährleisten, soll in Zukunft ein Praseodymofen an der Ionenkanone angebracht werden. Dabei soll ein hoher Praseodymdruck in der Ionisationkammer der Ionenkanone erzeugt werden, indem der Ofen auf diese ausgerichtet wird. Das Praseodym soll dann mittels Elektronenstoß ionisiert und die Ionen gezielt in die Falle eingeschossen werden. Auf diese Weise könnten deutlich mehr Kristalle bei einem besseren Druck und ohne Aufladungen vermessen werden, sodass auch die Bestimmung aller Schwingungsmoden des Kristalls möglich sein sollte. Jedoch kann auf Grund der großen Atommassen, die für diese Frequenzverschiebungen nötig sind, davon ausgegangen werden, dass Praseodym gefangen wurde. Denn ein spontanes Auftreten von Antimon ( $123\text{ u}$ ), Tellur ( $127\text{ u}$ ) oder Samarium ( $150\text{ u}$ ), während der Praseodymofen betrieben wurde, ist sehr unwahrscheinlich. Eine von Karin Grooth-Berning et al. entwickelte Lademethode für Thorium mit Hilfe von Laserablation und einer Ionenkanone zeigt

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

sehr gute Ergebnisse beim Laden gemischter Kristalle (siehe [GBSJ<sup>+</sup>19]).

#### 3.6.3 Ionisation von Stickstoff

Erste Versuche Stickstoff zu ionisieren und in einem Kalziumkristall einzufangen, wie dies mit Praseodym gemacht wurde, fanden ebenfalls unter Verwendung der Multiphotonenionisation in der Stabfalle statt. Dazu wurde Stickstoffgas direkt über ein Ventil in die Falle eingelassen. Die gemessenen Frequenzänderungen sind in Tabelle 3.10 zu sehen. Für jede

Kristallstruktur	$\omega_{\text{axial}}/2\pi$ [kHz]	Isotopmasse
<i>o</i>	$98,6 \pm 0,1$	40
<i>ooxo</i>	$102,9 \pm 0,2$	26
<i>oxo</i>	$104,7 \pm 0,2$	26
<i>oox</i>	$104,2 \pm 0,2$	26

Tabelle 3.10: Kristallstrukturen, Fallenfrequenzen und Isotopmassen die bei den Stickstoffladeversuchen gemessen wurden. Dabei steht jedes *o* für ein Kalziumion und jedes *x* für ein dunkles Ion.

der Messungen wurde ein neuer Kristall geladen. Anhand der Struktur der Kristalle wurden die Schwerpunktsmoden berechnet und somit durch Vergleich mit den gemessenen Schwerpunktsmodenfrequenzen die Masse der dunklen Ionen bestimmt. Mit einer Masse von 26 u würde es sich um Magnesium handeln. Jedoch genügt, je nach Größe des Kristalls, bereits eine Abweichung von 0,4 kHz–1 kHz, um eine Masse von 28 u zu erhalten, was der Masse eines N<sub>2</sub>-Moleküls entspricht. Die Messung eines kompletten Spektrums war in der Stabfalle nicht möglich, da durch das direkte Einleiten des Stickstoffs in die Falle der Druck in der Falle zu hoch war. Dies hatte zur Folge, dass der Kristall nach wenigen Minuten geschmolzen war oder weitere Ionen eingefangen wurden. Erst durch die Ionisation des Stickstoffs mittels der Ionenkanone konnten ausreichend stabile Verhältnisse erreicht werden, um die Seitenbandspektroskopie anwenden zu können. In Abbildung 3.62 sind die Spektren eines Zwei-Ionenkristalls für Kalzium und Stickstoff zu sehen, diese wurden mit der Spektroskopiesequenz, die in Abschnitt 3.1.5 beschrieben wurde, aufgenommen. Das schwarze Spektrum erfolgte durch die Aufnahme mit einem reinen Kalziumkristall, während für das blaue Spektrum ein Kristall aus einem Kalziumion und einem dunklen Ion verwendet wurde. An dem Spektrum des gemischten Kristalls ist zu erkennen, dass die durch die Spektroskopiesequenz reduzierte Kühlung nicht ausreichte, um ein Schmelzen des Kristalls durch Hintergrundgasstöße oder andere Anregungen zu verhindern. Andererseits war sie jedoch noch groß genug, um den Kristall nach der Anregung wieder kondensieren zu lassen. Darum sind in dem blauen Spektrum immer wieder Ausreißer nach oben

### 3.6 Strukturen und Defekte in gemischten Kristallen

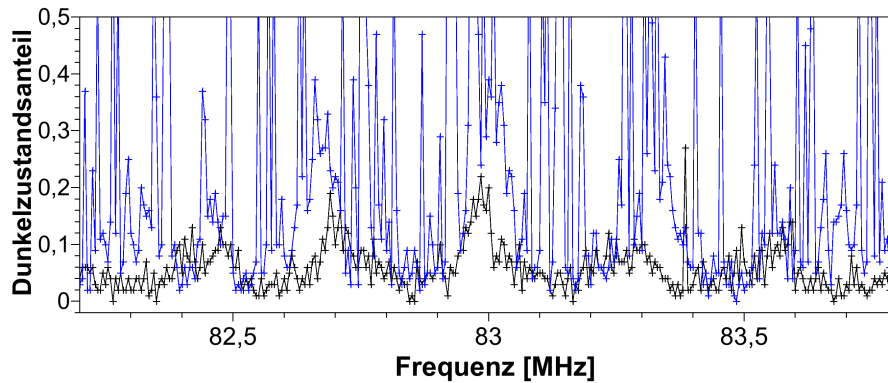


Abbildung 3.62: Spektrum eines gemischten Zwei-Ionenkristalls mit Stickstoff in Blau, im Vergleich zum Spektrum eines gleichgroßen Kalziumkristalls. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands als Funktion der halben Frequenzverstimmung durch den AOM. Die Sprünge nach oben entstanden durch das kurzzeitige Schmelzen des Kristalls, da dadurch weniger Photonen zurück gestreut wurden.

zu sehen. Um eine bessere Rauschunterdrückung zu erhalten und um diese Ausreißer zu unterdrücken, wurden die Spektren am Träger gespiegelt. Dadurch fielen die roten und blauen Seitenbänder aufeinander. Die Werte wurden dann multipliziert und abschließend die Wurzel davon gezogen. Die so bearbeiteten Spektren sind in Abbildung 3.63 dargestellt. Bei beiden Spektren wurde an den Träger und die ersten beiden Seitenbänder jeweils eine Gaußfunktion angepasst, um den genauen Abstand des Schwerpunktsmodenseitenbandes zu bestimmen. Für den reinen Kalziumkristall ergab sich eine Schwerpunktsmodenfrequenz von  $558 \pm 9$  kHz und für den gemischten Kristall eine Schwerpunktsmodenfrequenz von  $653 \pm 10$  kHz. Damit ergab sich eine Masse des dunklen Ions von  $12 \pm 6$  u. Beide natürlich vorkommenden Stickstoffisotope liegen innerhalb der Fehlerbalken. Um diese Ergebnisse zu verbessern, sollten die Rauschquellen, die die einzelnen Seitenbänder auf eine Varianz von 150 kHz verbreiterten, beseitigt werden. So sollte es möglich sein, die Masse auf unter eine atomare Masseneinheit genau zu bestimmen.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

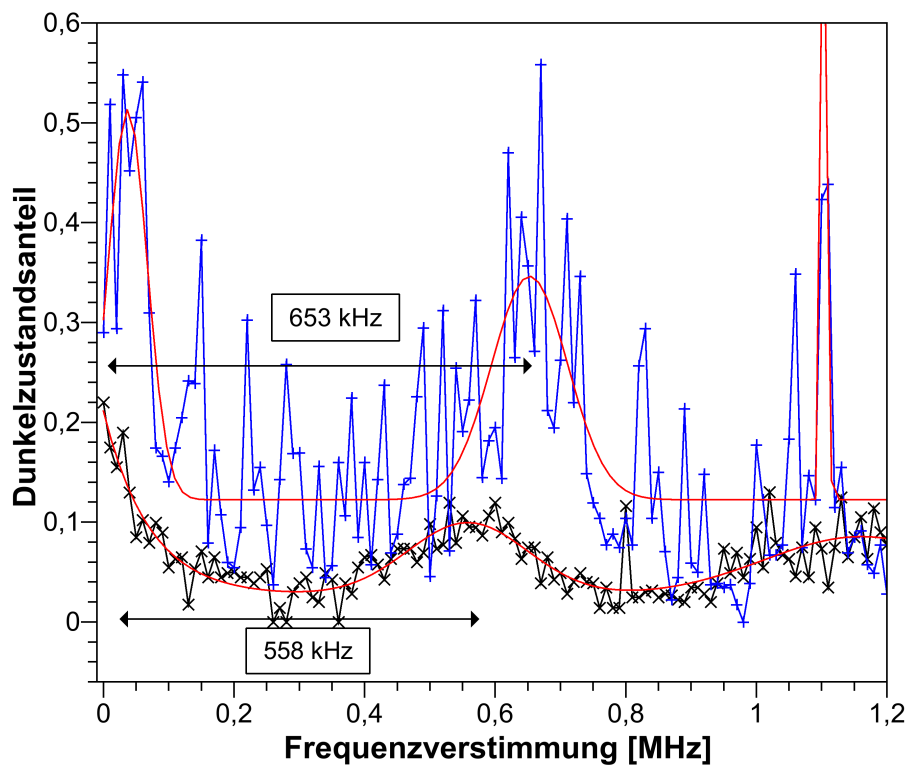


Abbildung 3.63: Bearbeitetes Spektrum eines gemischten Kristalls mit Stickstoff, sowie eines Zwei-Ionenkalziumkristalls. An die Spektren wurden jeweils drei Gaußverteilungen angepasst, diese sind in Rot eingezeichnet.

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

Es wird vermutet, dass Defekte lokale Schwingungsmoden haben, wie in Abschnitt 2.6.1 besprochen wurde. Um diese nachweisen zu können, wurde die Seitenbandspektroskopie verwendet. Zunächst wurden mit einem Ion die Fallencharakteristiken bestimmt, anschließend wurden günstige Spannungseinstellungen bestimmt, um Defekte in Kristallen mit fünf, sieben und sechzehn Ionen zu spektroskopieren. Dabei wurde zum einen darauf geachtet, dass die Defekte möglichst stabil waren, um die Spektroskopie zu vereinfachen. Zum anderen wurden mit Hilfe von Pseudopotentialberechnungen Fallenfrequenzen gewählt, bei denen die Schwingungsmoden relativ große Abstände voneinander aufwiesen.

#### 3.7.1 Ionenspektren

In Abbildung 3.64 ist das Spektrum eines Ions zu sehen. Der Übergang, dessen Seitenbänder vermessen wurden, liegt bei einer Zentralfrequenz des AOM's von 82,518 MHz, die Ergebnisse sind gegen die Frequenzverstimmung zum Träger des Übergangs aufgetragen, die durch den AOM erzeugt wurde. Der Träger des Übergangs liegt somit im

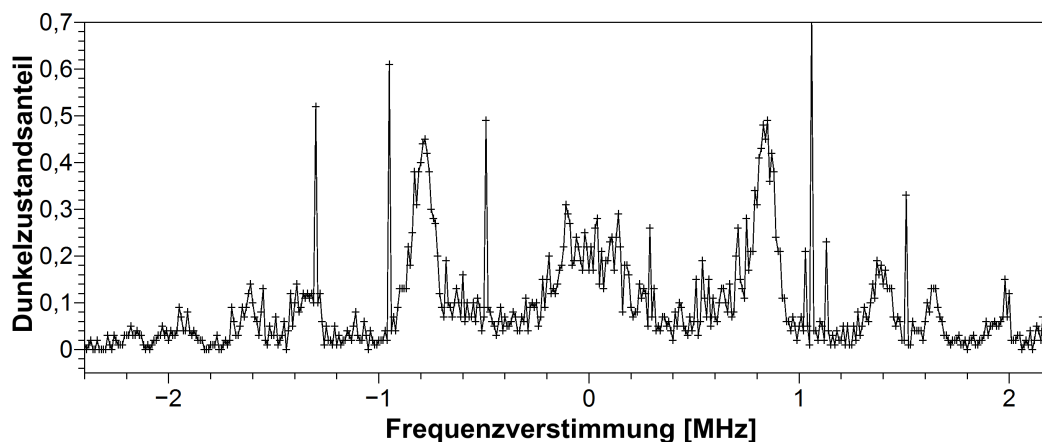


Abbildung 3.64: Spektrum eines Ions. Abgebildet ist die Wahrscheinlichkeit einer Anregung des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung zum Träger.

Ursprung. Da die Pulslänge so gewählt wurde, dass die maximale Anregung auf dem axialen Seitenband erreicht wird, sind das blaue und rote axiale Seitenband höher als der Träger und liegen bei  $\pm 817$  kHz. Bei  $\pm 1360$  kHz sind die Seitenbänder der unteren radialen Fallenfrequenz zu sehen und bei  $\pm 1954$  kHz liegen die Seitenbänder der oberen radialen

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Fallenfrequenz. Bei  $\pm 1634$  kHz ist das zweite axiale Seitenband sichtbar. Alle Frequenzen wurden zuvor durch Anregung der Schwingungsmode überprüft. Bei den Spektren muss

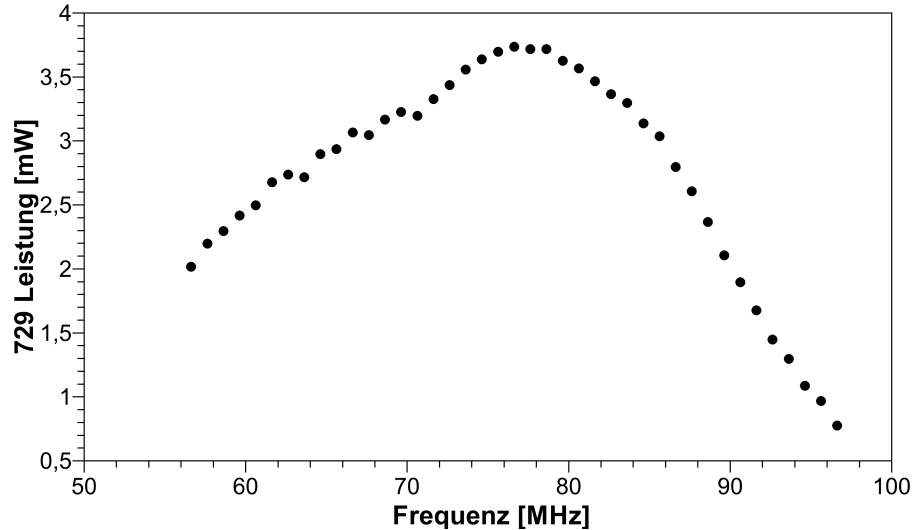


Abbildung 3.65: Frequenzabhängigkeit der 729 nm Laserleistung. Gemessen wurde die Laserleistung direkt vor der Fallenkammer in Abhängigkeit von der Frequenzverstimmung durch den AOM.

noch berücksichtigt werden, dass mit zunehmender Verstimmung durch den AOM die Laserleistung abnimmt, da die Fasereinkopplung verschlechtert wird und die Beugungseffizienz des AOM abnimmt. Um diesen Effekt berechnen zu können, wurde die Laserleistung als Funktion der Verstimmungsfrequenz aufgenommen. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.65 dargestellt. Indem der AOM auf die Trägerfrequenz des Übergangs eingestellt wurde und die Pulslänge des 729 nm-Lasers verändert wurde, ergab sich die Pulslängenmessung, die in Abbildung 3.66 zu sehen ist. Dabei wurde der Mittelwert von 600 Messungen gebildet, um Schwankungen der Ergebnisse auszugleichen. Aus diesem Datensatz konnte die Rabi-Frequenz und die Pulslänge eines  $\pi$ -Pulses (Pulslänge mit maximaler Anregung des Dunkelzustands) bestimmt werden. Die  $\pi$ -Pulslänge für diese Einstellungen war  $5,5 \mu\text{s}$ . Wenn die Pulslängenmessung für die Seitenbänder der Fallenfrequenzen wiederholt wurde, ergaben sich die in Abbildung 3.67 dargestellten Ergebnisse. Dabei wurde wieder die Anregungswahrscheinlichkeit des  $D_{5/2}$ -Zustands als Funktion der Pulslänge des 729 nm-Laserpulses aufgetragen. In Schwarz ist die Mittelung der Messungen des Trägers des Übergangs eingezeichnet. Die Messungen der axialen Seitenbänder wurde in Rot eingezeichnet und dazu wurde für jedes Seitenband die Mittelung zweier Messungen verwendet. Deutlich zu erkennen ist, dass das Maximum der axialen Seitenbänder erst bei einer Pulslänge von  $9,5 \mu\text{s}$

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

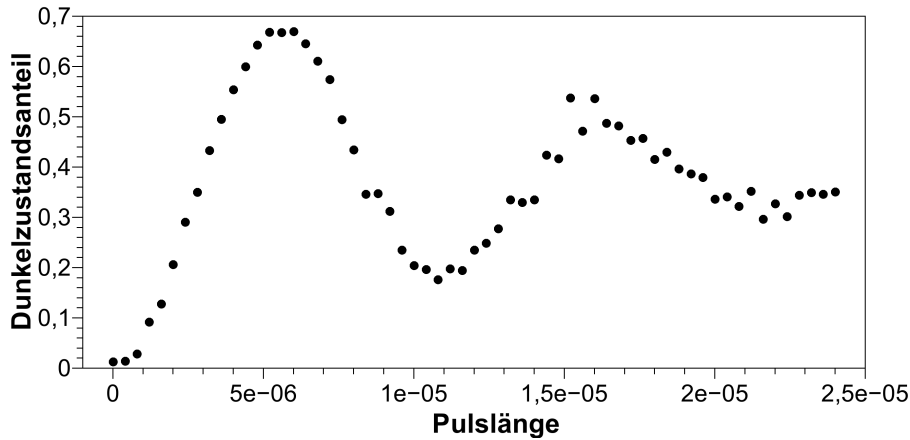


Abbildung 3.66: Gemittelte Pulslängenmessung auf der Trägerfrequenz. Eingezeichnet ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die 729 nm-Laserpulslänge. Die Oszillation mit der Rabi-Frequenz ist deutlich zu erkennen, sowie die Dekohärenz, die dazu führt, dass der Dunkelzustand bei langen Pulsen mit 50% der maximalen Anregungswahrscheinlichkeit erreicht wird.

und damit deutlich später als beim Träger erreicht wurde. Aus diesem Unterschied in der Anregungswahrscheinlichkeit lässt sich die Anzahl der Phononen  $\bar{n}$  in dieser Schwingungsmode berechnen. Wird der Anstieg der Kurven linear angenähert, so kann folgende Formel

$$\bar{n} = \frac{\rho_{D_{\text{Seitenband}}}}{\rho_{D_{\text{Träger}}} \cdot \eta^2} \quad (3.12)$$

verwendet werden, um die mittlere Phononenzahl der zu dem Seitenband gehörenden Schwingungsmode zu berechnen. Hier steht  $\rho_{D_{\text{Seitenband}}}$  für die Anregungswahrscheinlichkeit des Seitenbandes,  $\rho_{D_{\text{Träger}}}$  für die Anregungswahrscheinlichkeit des Trägers und  $\eta$  für den Lamb-Dicke-Parameter. Der Lamb-Dicke-Parameter kann mit Gleichung 2.77 berechnet werden. Dann sind alle Komponenten vorhanden, um die mittlere Phononenzahl und damit die Temperatur des Kristalls zu bestimmen. Dabei wurde die mittlere Phononenzahl für alle gemessenen Pulslängen bis zum Maximum der Anregung des Trägers gemittelt. Die Seitenbänder der unteren radialen Fallenfrequenz sind in Blau eingetragen und die oberen radialen Seitenbänder sind in Grün eingezeichnet. Die Ausreißer nach oben lagen an Hintergrundgasstößen, die während der Messung den Kristall kurzzeitig zum Schmelzen gebracht hatten. Für diese Messungen wurden Fallenfrequenzen von  $\omega_z/2\pi = 816,8 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1359,8 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1954,0 \pm 0,1$  kHz verwendet und damit die Temperaturen in Tabelle 3.11 gemessen. In dieser werden die

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

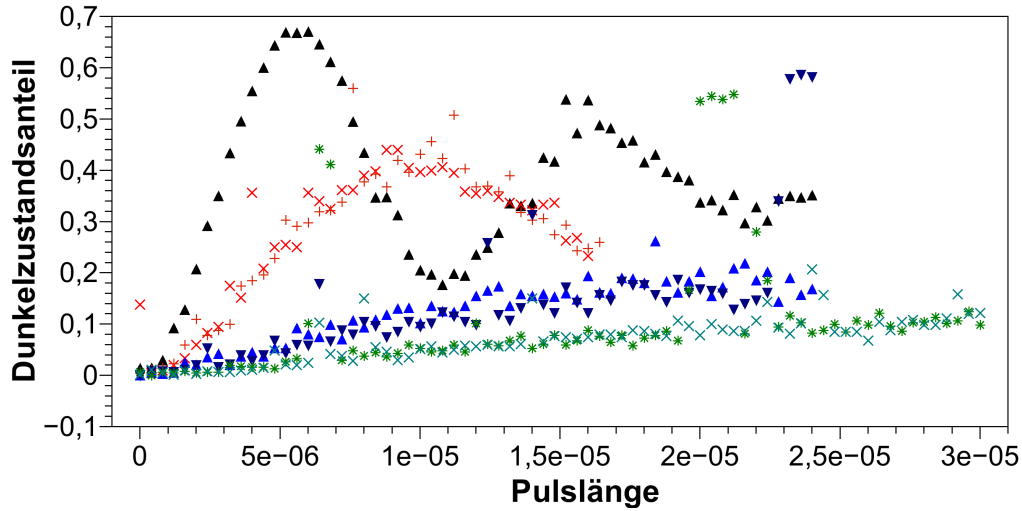


Abbildung 3.67: Gemittelte Pulslängenmessung aller Seitenbänder. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die 729 nm-Laserpulslänge. Zusätzlich zu der Pulslängenmessung des Trägers (schwarz) sind hier die Anregungswahrscheinlichkeiten aller Seitenbänder eingezeichnet. In Hell- und Dunkelblau sind die beiden unteren radialen Seitenbänder aufgetragen und die beiden oberen radialen Seitenbänder sind in Hell- und Dunkelgrün eingezeichnet.

Abkürzungen RSB für rotes Seitenband und BSB für blaues Seitenband verwendet.

Schwingungsmode	$\eta$	$\bar{n}$
$\omega_{z,COM}$ RSB	0,075	$72 \pm 33$
$\omega_{z,COM}$ BSB	0,075	$81 \pm 37$
$\omega_{y,COM}$ RSB	0,041	$57 \pm 12$
$\omega_{y,COM}$ BSB	0,041	$58 \pm 19$
$\omega_{x,COM}$ RSB	0,034	$38 \pm 8$
$\omega_{x,COM}$ BSB	0,034	$36 \pm 10$

Tabelle 3.11: Mittlere Phononenzahl der einzelnen Schwingungsmoden, sowie der jeweilige Lamb-Dicke-Parameter.

Anhand der Frequenzen der Träger wurde zusätzlich die Aufspaltung durch das Magnetfeld und somit die Feldstärke des Magnetfeldes gemessen. In Abbildung 3.68 sind die beiden Träger, die bei einer vollständigen Spininitialisierung in den Zustand von  $m_s = +\frac{1}{2}$  angeregt werden können, zu sehen. Dies liegt daran, dass die Polarisation und Richtung des 729 nm-Lasers senkrecht zum Magnetfeld und senkrecht zueinander gewählt wurden, so dass nur Übergänge mit  $\Delta m = 2$  getrieben werden konnten. Weitere Details hierzu sind in



### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

der Arbeit von Christian Roos zu finden [Roo00]. Die Träger waren bei  $76,936 \pm 0,014$  MHz und  $82,548 \pm 0,006$  MHz für  $S_{1/2}$  und bei  $73,602 \pm 0,094$  MHz und  $78,902 \pm 0,020$  MHz für  $S_{-1/2}$ . Aus dieser Frequenzaufspaltung ergab sich eine Magnetfeldstärke von 2.412 Gs. Auch für die Mikrobewegung ergaben sich Seitenbänder, diese sollten in unserem Fall

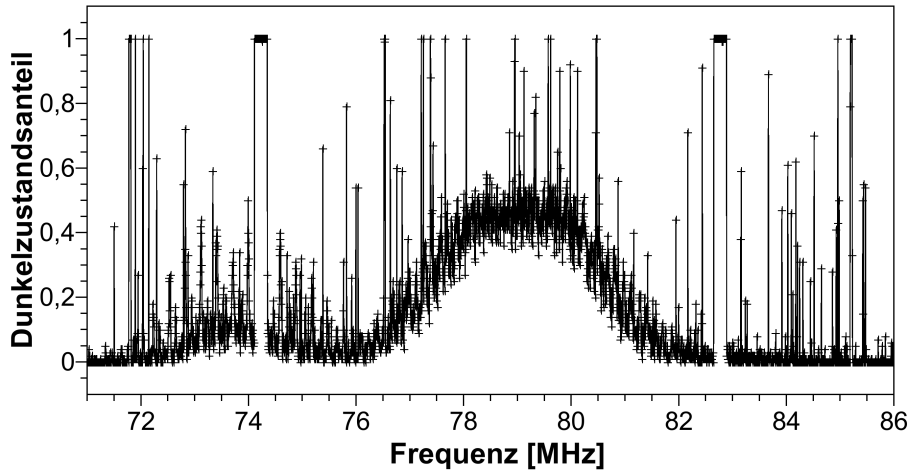


Abbildung 3.68: Aufspaltung der Träger durch das Magnetfeld. Abgebildet ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des 729 nm-Lasers. Bei  $73,602 \pm 0,094$  MHz ist der Übergang von  $m = -1/2$  nach  $m' = -5/2$  und bei  $78,902 \pm 0,020$  MHz der Übergang von  $m = -1/2$  nach  $m' = 3/2$  zu sehen. Die Sprünge nach oben entstanden durch das kurzzeitige Schmelzen des Kristalls, da dadurch weniger Photonen zurück gestreut wurden.

22,95 MHz von den Trägern entfernt sein. Auch für alle Seitenbänder der Schwingungsfrequenzen des Kristalls ergaben sich wieder Mikrobewegungsseitenbänder. Die Amplitude des Mikrobewegungsseitenbands des Trägers von  $82,548 \pm 0,006$  MHz wurde bei unterschiedlichen Kompensationsspannungen gemessen. Daraus konnte die minimale Mikrobewegungsamplitude der Ionen bestimmt werden. Als Startwert wurden die Spannungen der Kompensationselektroden, die mittels der automatischen Kompensation [Ulm10] in beiden radialen Richtungen ermittelt wurden, gewählt. In Abbildung 3.69 ist die Amplitude des Mikrobewegungsseitenbands des Trägers als Funktion der Kompensationsspannung auf den Gleichspannungselektroden zu sehen und die verschiedenen Kurven entsprechen den verschiedenen Spannungen auf den Wechselspannungskompensationselektroden. Es ist erkennbar, dass das absolute Minimum der Mikrobewegungsanregung um +3 V in Richtung der Wechselspannungselektroden von dem zuvor bestimmten Optimum abweicht, auch in der Gleichspannungsrichtung liegt das Optimum um  $-1$  mV neben dem zuvor Bestimm-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

ten. Diese Abweichung entspricht in beiden Dimensionen genau einem Spannungsschritt und ist auf die höhere Genauigkeit der spektroskopischen Methode zurückzuführen. Mit der kleinsten Amplitude ergibt sich, wenn die Rabifrequenz wieder durch eine lineare Näherung mit den Anregungsamplituden ersetzt wird, aus der Gleichung

$$m = \frac{2 \cdot A_{MMT}}{A_T} \quad (3.13)$$

ein Modulationsindex von 0,173 für die Mikrobewegung. Dabei steht  $A_{MMT}$  für die Amplitude des Mikrobewegungsseitenbandes des Trägers und  $A_T$  für die Amplitude des Trägers. Aus dem Modulationsindex können wir die Amplitude der Auslenkung durch die Mikrobewegung berechnen. Diese ergibt 20 nm für den minimalen Modulationsindex. Nachdem

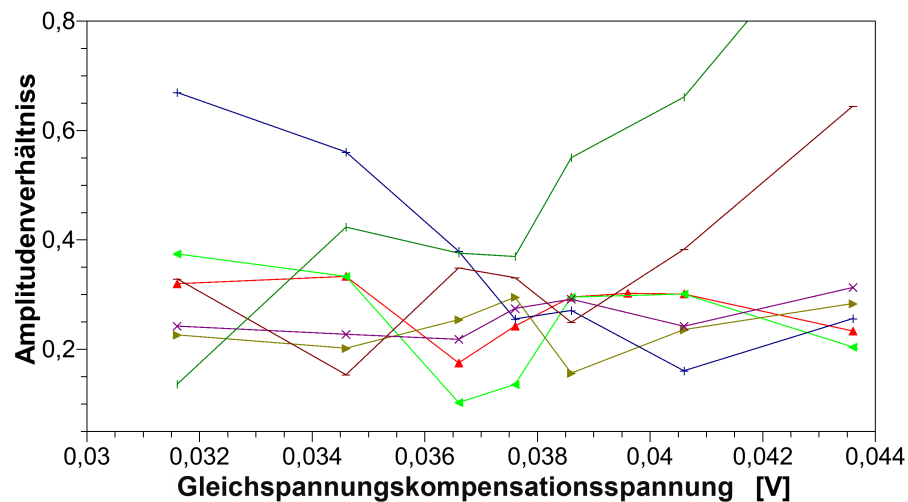


Abbildung 3.69: Bestimmung des Modulationsindex. Aufgetragen ist das Verhältnis der Amplitude des Mikrobewegungsseitenbandes des Trägers zur Amplitude des Trägers als Funktion der Gleichspannungskompensationsspannung. Jede Kurve entspricht einer anderen Radiofrequenzkompensationsspannung, dabei ist die rote Kurve mit den Kompensationsspannungswerten der automatischen Kompensationsmethode durchgeführt worden. Grün, Oker und Dunkelblau sind die Kurven, die eine Spannungsdifferenz von +3 V, +9 V und +18 V gegenüber der roten Kurve haben. -3 V, -9 V und -18 V sind in Lila, Dunkelrot und Dunkelgrün eingezeichnet.

nun die optimale Kompensation und die Temperatur der Ionen in der Implantationsfalle bekannt waren, konnte damit begonnen werden, die ersten Spektren von Kristallen aufzunehmen. Dazu wurde ein Kristall mit zwei Ionen geladen, dieser hatte nun sechs

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

Schwingungsmoden statt der bisherigen drei. Da die radialen Moden aber eine geringere Amplitude aufwiesen, konnte in Abbildung 3.70 nur die axiale Atmungsmode neben den Schwerpunktsmoden in allen drei Richtungen sicher identifiziert werden. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands in Abhängigkeit von der Frequenzverstimmung. Das Atmungsmodenseitenband wurde markiert, es lag bei  $\omega_{z, \text{Atmung}}/2\pi = 1048,3 \pm 13,4 \text{ kHz}$ . Dies entspricht den Erwartungen, da die Atmungsmode bei  $\omega_{z, \text{Atmung}}2\pi = \sqrt{3} \cdot \omega_{z, \text{Schwerpunkt}}2\pi = 1,732 \cdot (591,6 \pm 3,0 \text{ kHz}) = 1024,7 \pm 5,2 \text{ kHz}$  liegen sollte. Um einen direkten Vergleich zwischen dem Spektrum eines Ions und zweier Ionen zu

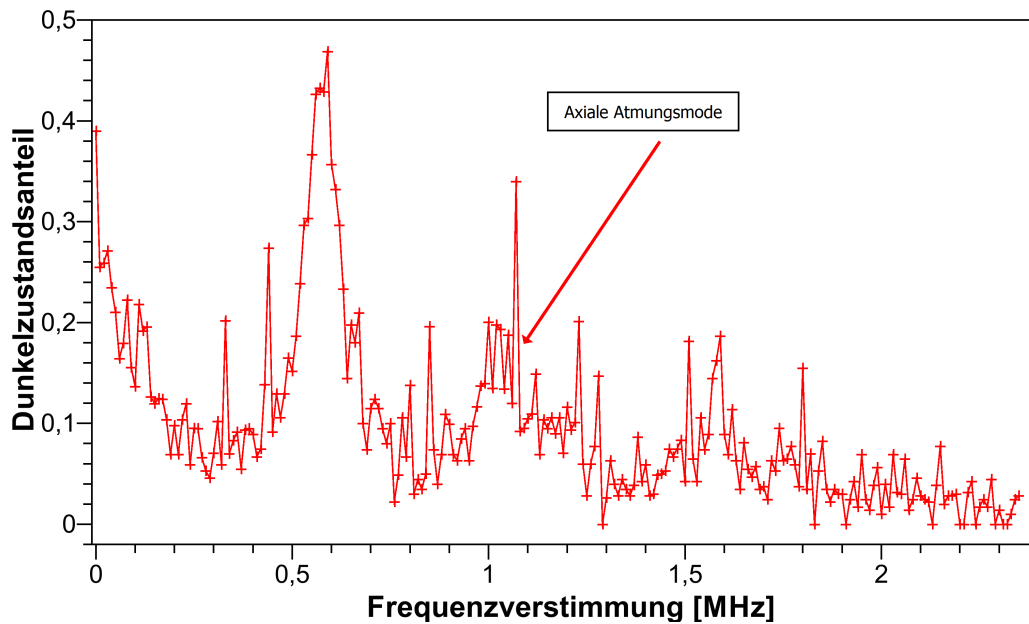


Abbildung 3.70: Spektrum eines Zwei-Ionenkristalls. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des 729 nm-Lasers durch den AOM. Die Anregungsspitze der axialen Atmungsmode wurden zusätzlich markiert.

haben, wurden in Abbildung 3.71 beide Spektren zusammen eingetragen. Deutlich zu erkennen ist, dass in dem Spektrum des einzelnen Ions die Anregungsspitze bei der Frequenz der Atmungsmode fehlt. Somit ist die Anregungsspitze mit  $\omega_{z, \text{Atmung}} = 1048,3 \pm 13,4 \text{ kHz}$  der Atmungsmode zuzuordnen. Beide Spektren wurden mit einer Pulslänge des 729 nm-Lasers gemessen, die einem  $\pi$ -Puls auf dem axialen Seitenband entsprach, deshalb waren diese höher als der Träger.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

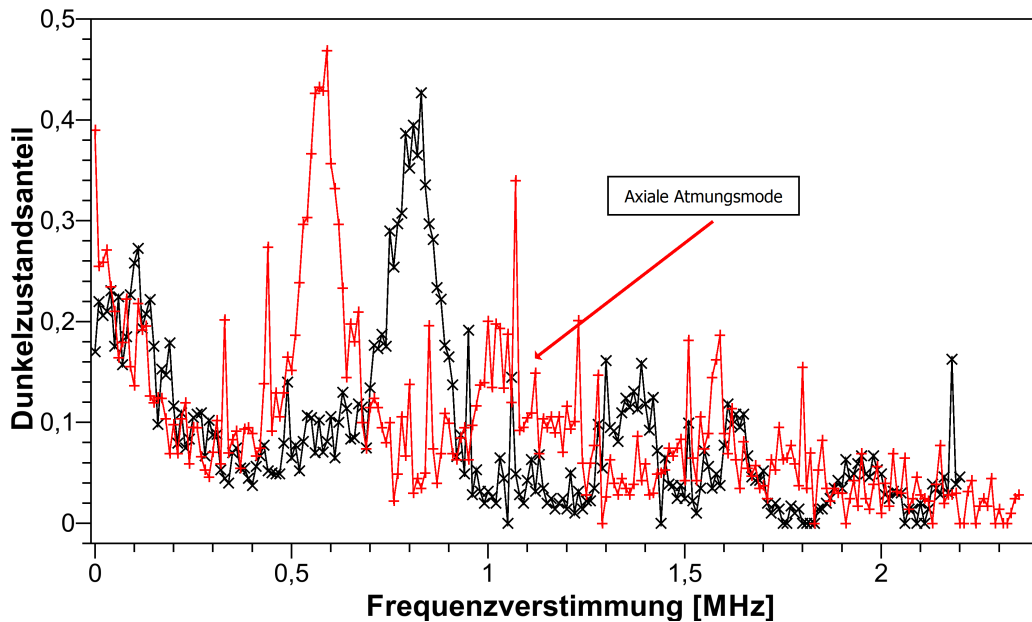


Abbildung 3.71: Vergleich der Spektren von einem (schwarz) und zwei Ionen (rot). Ein-gezeichnet ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des 729 nm-Lasers durch den AOM. In dem schwarzen Spektrum des Ein-Ionenkristalls ist die Schwerpunktsmode bei 817 kHz zu sehen, sowie bei 1360 kHz die untere Radialmode, bei 1954 kHz die obere Radialmode und bei 1632 kHz die doppelte Schwerpunktsmode. Im roten Spektrum des Zwei-Ionenkristalls ist bei 577 kHz die Schwerpunktsmode und bei 1048 kHz die Atmungsmode zu sehen.

#### 3.7.2 Defektspektren

Für den Nachweis der Defektmoden wurde ein vergleichbares Schema, wie es in Abschnitt 3.7.1 für die Atmungsmode angewendet wurde, verwendet. Das bedeutet, einerseits wurden die Frequenzen der Defektmoden berechnet, die bei den gegebenen Fallenfrequenzen erwartet wurden. Andererseits wurde das Spektrum eines Kristalls mit Defekt gemessen und dann die Fallenparameter so geändert, dass ein reiner Zickzack-Kristall ohne Defekt entstand. Abschließend wurden diese beiden Spektren miteinander verglichen. In Abbildung 3.72 sind alle Schwingungsmoden eines Fünf-Ionenkristalls eingezeichnet. Dabei wurde die Modennummer gegen das Verhältnis der Frequenz der entsprechenden Schwingungsmode zu der Frequenz der axialen Schwerpunktsmode aufgetragen. Diese Modennummer wurde wie folgt vergeben. Die Schwingungsmoden wurden aufsteigend nach ihrer Frequenz sortiert und dann nummeriert. Kristalle mit Defekten zeigten dabei eine interessante Eigenschaft: Sie besitzen lokale Schwingungsmoden, die sogenannten Defektmoden. Bei die-

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

sen bewegen sich nur die Ionen des Defekts und die unterste und oberste Defektmode haben eine deutlich höhere oder niedrigere Frequenz als die anderen Schwingungsmoden [LMR<sup>+</sup>10, LRB<sup>+</sup>13]. Die Defektmoden wurden in Abbildung 3.72 mit roten Kreisen

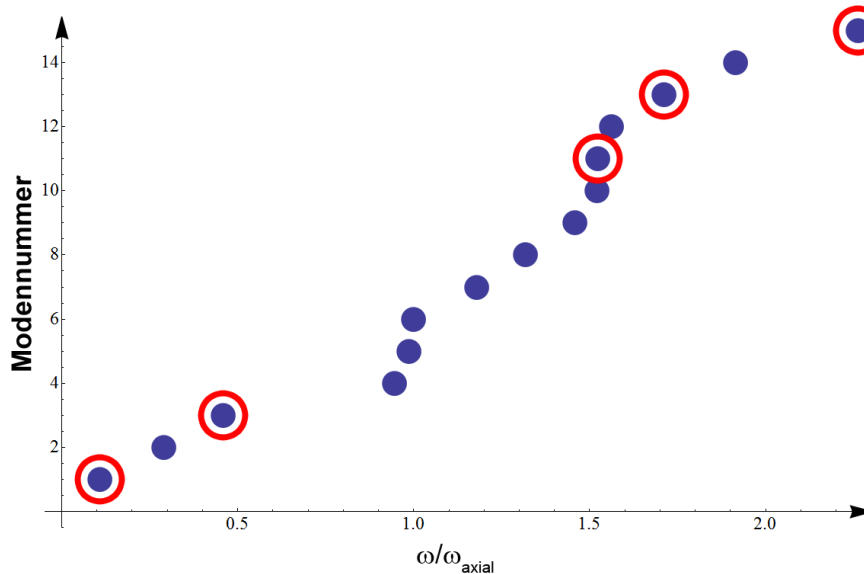


Abbildung 3.72: Modenspektrum eines Fünf-Ionenkristalls. Aufgetragen ist die Modennummer gegen das Verhältnis der Modenfrequenz zur Frequenz der axialen Schwerpunktsmode. Die Defektmoden wurden zusätzlich mit roten Kreisen markiert.

markiert, und es ist zu sehen, dass die erste und die letzte Frequenz einen deutlichen Frequenzabstand zu den anderen Moden aufweisen. Wenn diese Seitenbänder adressiert werden können, ermöglicht dies, Defekte innerhalb von Mikrosekunden zu detektieren, statt der Millisekunden, die für ein Kamerabild benötigt werden. Dabei ergäbe sich nicht nur der Nachweis, dass zur Zeit des 729-nm-Laserpulses ein Defekt im Kristall vorhanden war, sondern auch dessen Position. Dies wäre möglich, da die Frequenz positionsabhängig ist und die am Defekt beteiligten Ionen mit der größten Wahrscheinlichkeit dunkel gepumpt werden. Der 729-nm-Laserpuls könnte direkt nach der Spannungsrampe, also maximal mit der 10 ns Zeitauflösung, die der FPGA vorgibt, angewendet werden. Die Auslese der dunklen Ionen könnte dann mit einer ausreichend langen Belichtungszeit für deutliche Bilder von 10 ms bis 30 ms durchgeführt werden, da die Lebensdauer des Dunkelzustands 1 s ist. Zusätzlich wäre es damit unter Umständen möglich, Defekte in ihren Grundzustand zu kühlen, und es gibt Hinweise darauf, dass die Defektmoden eine deutlich längere Kohärenzzeit aufweisen, als dies normalerweise der Fall ist. Erstmals haben wir in der Ar-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

beit zur Untersuchung von Zickzack-Kristallen [Kau12] Moden in zweidimensionalen Kristallen vermessen. Die Defektspektroskopie stellt eine weitere Steigerung der Komplexität dar, da unter anderem eine größere Anzahl an Ionen benötigt wird. Die hier vorgestellten Experimente der Seitenbandspektroskopie sind daher ein erster Versuch, an solch hochkomplexen Ionenkristallen die Seitenbandspektroskopie zu etablieren. Es wurden bereits weitere Verbesserungen bezüglich der Kühlung der Kristalle und der Auslese der Zustände unternommen, trotzdem stellen die folgenden Messungen Pionierexperimente auf dem Weg zur Defektspektroskopie dar und weisen entsprechendes Verbesserungspotential auf.

#### Fünf-Ionenkristall mit Defekt

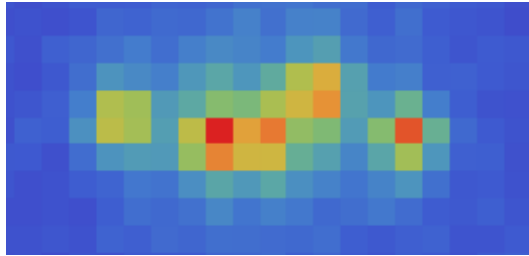


Abbildung 3.73: Fluoreszenzaufnahme eines Fünf-Ionenkristalls mit stabilem Defekt.

Um die Spektroskopie von Defekten zu vereinfachen, wurde zuerst der kleinst mögliche Kristall für einen Defekt gewählt. Dieser bestand aus fünf Ionen, sodass je ein Ion am Rand war und drei Ionen in der Mitte den Defekt bildeten. Damit wurde die Anzahl an Schwingungsmoden auf fünfzehn reduziert. Zusätzlich ermöglichte dies, durch geeignete Parameterwahl den Kristall mit Defekt als Grundzustand zu erhalten, das bedeutet, dass keine Spannungsrampe benötigt wurde, um einen Defekt zu erhalten und dass diese dann stabil waren. Dabei wurden Fallenfrequenzen von  $\omega_z/2\pi = 947,7 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1380,7 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1478,0 \pm 0,1$  kHz verwendet. Damit wurde ein  $\alpha = 0,471$ , was 301% von  $\alpha_{krit1_{fünf}} = 0,156$  und 52% von  $\alpha_{krit2_{fünf}} = 0,902$  entsprach, und eine radiale Anisotropie von  $\alpha_{aniso} = 1,070$  erreicht. Bei der kleinen Kristallgröße konnten außerdem deutlich höhere Fallenfrequenzen benutzt werden, ohne über  $\alpha_{krit2}$  zu kommen. Daraus resultierten somit größere Abstände zwischen den einzelnen Schwingungsmoden, was die Identifikation der Defektmoden weiter erleichterte. In Abbildung 3.73 ist das Fluoreszenzbild eines Kristalls bei diesen Einstellungen zu sehen. Das der Kristall mit Defekt nun den Grundzustand darstellt, ist auch in den Simulationen zu sehen. Wie in Abschnitt 2.3 besprochen wurde, wurde die energetisch günstigste Kristallkonfiguration in der Zickzack-Positionsrechnung bestimmt. Bei der momentanen Wahl der Fallenfre-

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

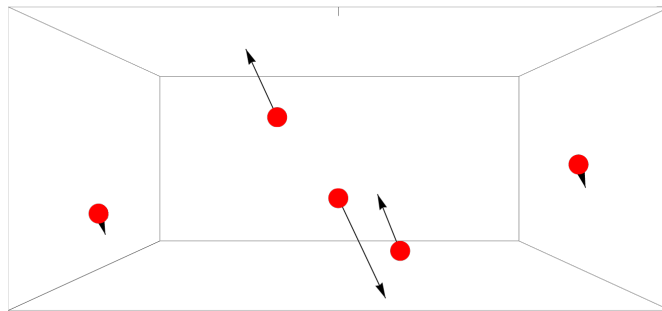


Abbildung 3.74: Mit der Pseudopotentialmethode berechnete Positionen und Amplituden der untersten Defektschwingungsmoden des Fünf-Ionenkristalls. Dabei ist klar zu erkennen, dass sich nur die Ionen, die am Defekt beteiligt sind, in dieser lokalen Mode bewegen.

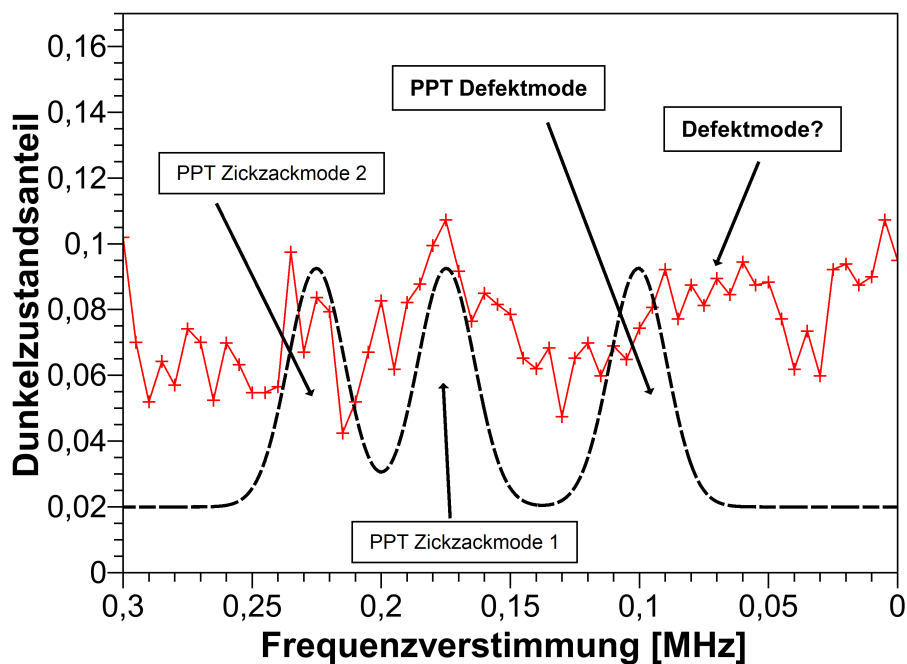


Abbildung 3.75: Spektrum eines Fünf-Ionenkristalls mit Defekt. Abgebildet ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's (rote Kurve). Die Anregungsspitze im erwarteten Bereich der Defektmode ist markiert. In Schwarz eingezeichnet sind die mit der Pseudopotentialmethode berechneten Frequenzen der Defektmode, sowie die untersten beiden Zickzackmoden.

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

quenzen war dies der Kristall mit Defekt. Die Anordnung der Ionen kann in Abbildung 3.74 gesehen werden. Die darin eingezeichneten Amplituden der Ionen (schwarze Pfeile) entsprechen der Bewegung der Ionen in der untersten Defektmode. Mit diesem Kristall wurden Seitenbandspektren aufgenommen. Diese Spektren wurden am Träger gespiegelt und, wie in Abschnitt 3.6.3 beschrieben, bearbeitet, um ein besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu erreichen. Alle weiteren Spektren wurden auf dieselbe Weise bearbeitet. In Abbildung 3.75 ist dieses Ergebnis gegen die Verstimmung der Laserfrequenz aufgetragen. Für die schwarze Theoriekurve wurden die Frequenzen der Schwingungsmoden mit der Pseudopotentialmethode ohne Mikrobewegung berechnet. Diese wurden dann mit einer durchschnittlichen Breite eingezeichnet, und es ist zu sehen, dass die Zickzackmoden 1 und 2 mit zwei Anregungsspitzen zusammenfallen. Auch die theoretisch berechnete Defektmode liegt in der Nähe einer Anregungsspitze. Die Abweichung zwischen der berechneten und der gemessenen Frequenz kann auf den Einfluss der Mikrobewegung zurückgeführt werden, wie es in Abschnitt 3.2.3 schon für einzelne Frequenzen in Zickzack-Kristallen gezeigt wurde. Die mögliche Defektmode im Spektrum des Kristalls wurde markiert, ge-

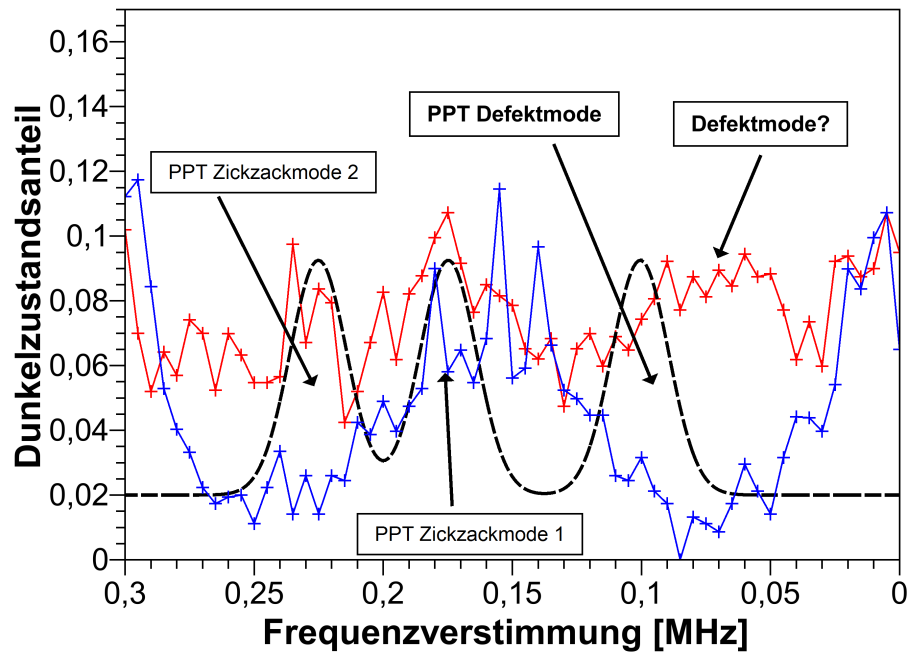


Abbildung 3.76: Vergleich des Spektrums eines Fünf-Ionenkristalls mit Defekt mit dem Spektrum eines Fünf-Ionenkristalls ohne Defekt. Dargestellt ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's für den Kristall mit Defekt (rote Kurve) und für den Kristall ohne Defekt (blaue Kurve).



### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

nauso wie die einzelnen Moden der Theoriekurve. Um weiter zu testen, ob die Anregung, die bei  $66,1 \pm 7,9$  kHz zu sehen ist, von der Defektmode stammt, wurde die radiale Anisotropie erhöht bis ein reiner Zickzack-Kristall ohne Defekt entstand. Die Frequenzen, bei denen dies erreicht wurde, sind  $\omega_z/2\pi = 835,7 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1313,7 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1608,9 \pm 0,1$  kHz. Damit musste die radiale Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,070$  auf  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,225$  geändert werden, um einen reinen Zickzack-Kristall zu erhalten. In Abbildung 3.76 wurde in Blau das Spektrum des Zickzack-Kristalls eingezeichnet. Zum Vergleich ist das Spektrum des Defektkristalls in Rot eingetragen. Es ist zu sehen, dass das Signal der Defektmode verschwunden ist, wohingegen der Träger und die erste Zickzackmode noch an derselben Position sind. Die zweite Zickzackmode ist ebenfalls verschwunden, dies liegt wahrscheinlich daran, dass sie Bewegungskomponenten in Richtung der höheren radialen Fallenfrequenz hat, und diese nun um  $130,9 \pm 0,1$  kHz weiter entfernt vom Träger liegt. Als letzter Test wurde die Amplitude der Wechselspannung erhöht, ausgehend von den Einstellungen für den Fünf-Ionenkristall mit Defekt. Dadurch wurde der

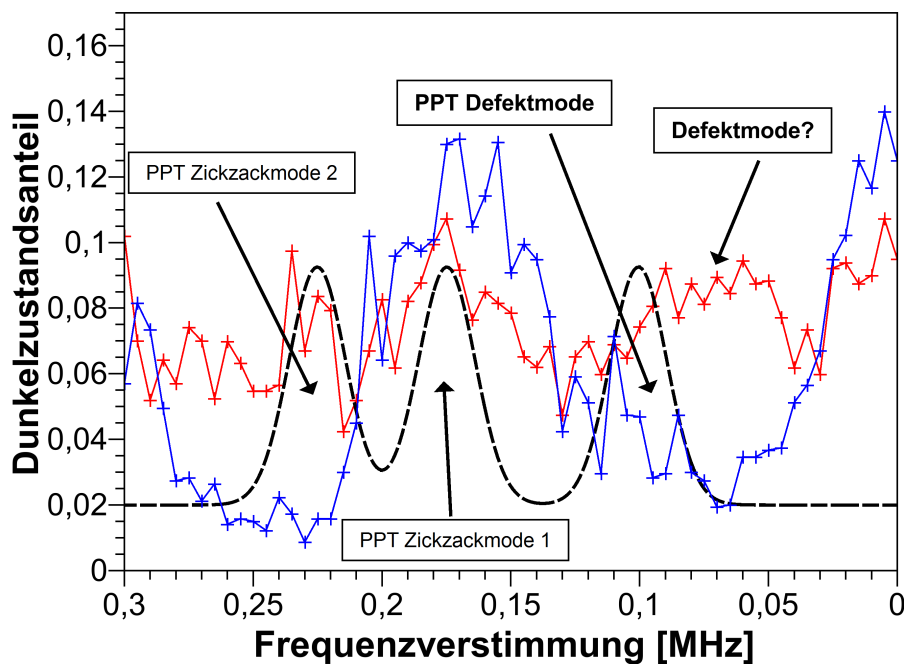


Abbildung 3.77: Die beiden Spektren eines Fünf-Ionenkristalls mit Defekt und ohne Defekt. Eingezeichnet ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's für den Kristall mit Defekt (rote Kurve) und für den Kristall ohne Defekt (blaue Kurve).

kritische Fallenparameter verringert, bis sich reine Zickzack-Kristalle ergaben. Es war eine

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

Änderung des kritischen Fallenparameters von  $\alpha = 1,070$  auf  $\alpha = 1,046$  nötig, um reine Zickzack-Kristalle zu erhalten. Die Fallenfrequenzen betragen  $\omega_z/2\pi = 947,7 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1609,9 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1684,7 \pm 0,1$  kHz. In Abbildung 3.77 ist in Blau das Spektrum zu sehen, das mit diesen Einstellungen gemessen wurde. Wird es mit dem Defektspektrum (rote Kurve) verglichen, so ist die Defektmode erneut verschwunden, wohingegen die erste Zickzackmode immer noch an derselben Position ist. Dies kann als erster Hinweis auf die erwartete Defektmode verstanden werden.

### Sieben-Ionenkristall mit Defekt

Da die Unterscheidung zwischen einem zweidimensionalen Kristall mit Defekt und einem dreidimensionalen Kristall bei einem Fünf-Ionenkristall sehr schwierig ist, wurde die Ionenanzahl erhöht. Mit sieben Ionen ist es erneut gelungen, die entsprechenden Fallenparameter zu finden, bei denen die Defekte stabil waren. Die Fallenfrequenzen betragen dabei  $\omega_z/2\pi = 803,7 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1442,3 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1510,8 \pm 0,1$  kHz. Dabei wurde ein kritischer Fallenparameter von  $\alpha = 1,047$ , was 356% von  $\alpha_{\text{krit1sieben}} = 0,087$  und 60% von  $\alpha_{\text{krit2sieben}} = 0,521$  entspricht, und eine radiale Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,047$  verwendet. Wurde dies wieder in die Pseudopotentialrechnung eingesetzt, ergaben sich

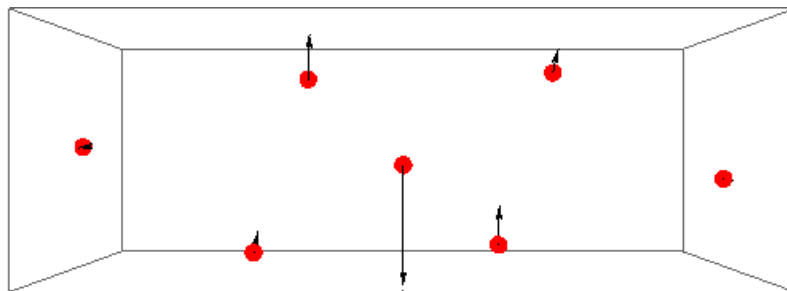


Abbildung 3.78: Mit der Pseudopotentialmethode berechnete Positionen und Amplituden der untersten Defektschwingungsmoden des Sieben-Ionenkristalls. Die lokale Mode ist daran zu erkennen, dass sich nur die Ionen, die am Defekt beteiligt sind, bewegen.

für die unterste Defektmode die Ionenpositionen und Schwingungsamplituden, die in Abbildung 3.78 eingezeichnet sind. Diese Einstellungen wurden für ein Seitenbandspektrum verwendet, welches in Abbildung 3.79 dargestellt ist. Des Weiteren wurden die mit der Pseudopotentialtheorie berechnete Defektmode, sowie die ersten beiden Zickzack-Schwingungsmoden und die axiale Schwerpunktsmode eingezeichnet. Es sind wieder leichte Abweichungen zu erkennen. Wird jedoch der Fehler der Theoriewerte, der aus den Zickzack-Spektren mit  $\pm 37$  kHz abgeschätzt werden kann, berücksichtigt, so wurde eine gute Übereinstimmung erreicht. Erneut wurde die radiale Anisotropie erhöht, um zu testen, ob die Defektmode in einem Zickzack-Kristall nicht vorhanden ist. Dazu wurden Frequenzen von  $\omega_z/2\pi = 794,3 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1206,3 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1705,6 \pm 0,1$  kHz und damit eine radiale Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,414$  verwendet. Damit ergab sich die grüne Kurve aus Abbildung 3.80. Bei den Sieben-Ionenkristallen konnten wir, auf Grund technischer Limitierungen, nicht als dritten Test die beiden radialen Fallenfrequenzen so weit erhöhen, bis ein reiner Zickzack-Kristall entstand. Deshalb wurde die axiale Fallen-

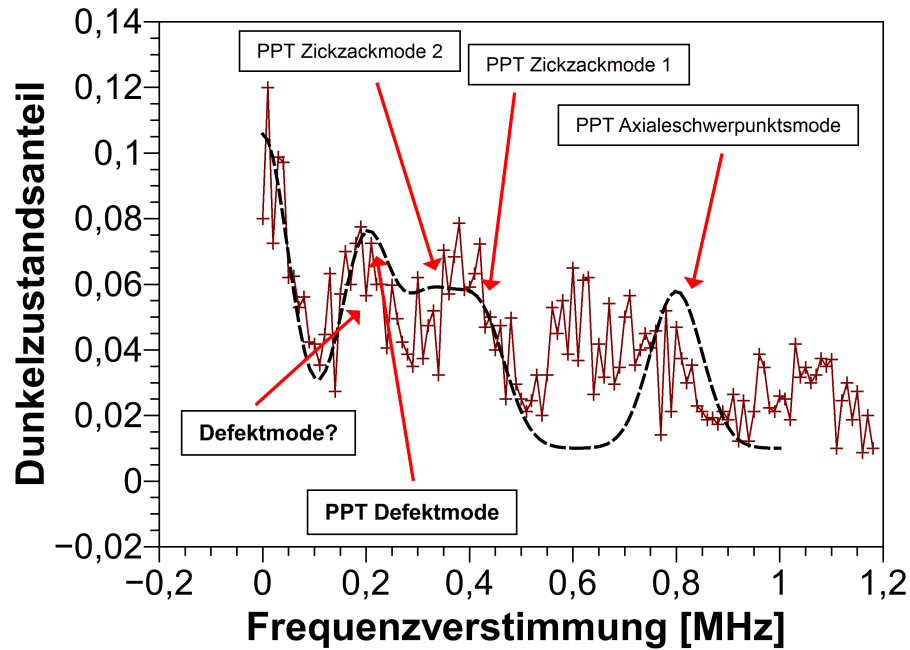


Abbildung 3.79: Abbildung des Spektrums eines Sieben-Ionenkristalls mit Defekt. Aufgetragen ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's (schwarze Kurve). Die Anregungsspitze im erwarteten Bereich der Defektmode ist markiert. Zusätzlich sind die mit der Pseudopotentialmethode berechneten Frequenzen der Defektmode, sowie die untersten beiden Zickzackmoden und der axialen Schwerpunktsmode als gestrichelte Linie eingezeichnet.

frequenz von  $\omega_z/2\pi = 803,7 \pm 0,1$  kHz auf  $\omega_z/2\pi = 680,7 \pm 0,1$  kHz verringert. Damit ergab sich  $\alpha = 0,243$ , statt des bisherigen  $\alpha = 0,311$ . Das damit gemessene Spektrum wurde in Rot in Abbildung 3.80 eingezeichnet. Bei beiden Zickzack-Spektren ist zu sehen, dass es keine Anregung im Bereich der zuvor gemessenen Defektmode bei  $193,3 \pm 8,4$  kHz gab. Auch hier sind leichte Abweichungen von den mit der Pseudopotentialtheorie berechneten Frequenzen (gestrichelte Kurve) der Defektschwingungsmoden zu erkennen.

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

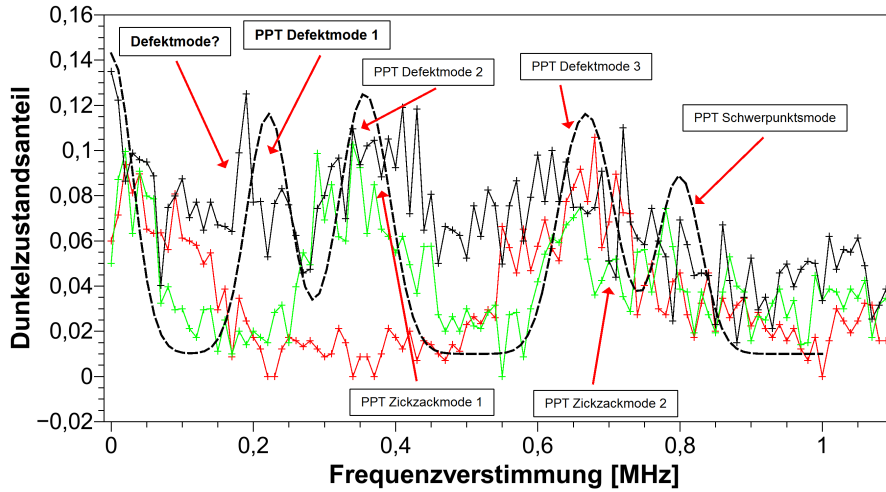


Abbildung 3.80: Vergleich eines Spektrums eines Sieben-Ionenkristalls mit Defekt mit den Spektren von Kristallen ohne Defekt. Dargestellt ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's. Die schwarze Kurve beschreibt das Spektrum eines Kristalls mit Defekt, die grüne Kurve das eines Kristall ohne Defekt, bei dem die radiale Anisotropie so lange erhöht wurde, bis keine Defekte mehr auftreten und die rote Kurve ist das Spektrum eines Kristalls ohne Defekt, bei dem die axiale Fallenfrequenz soweit verringert wurde, dass keine Defekte mehr beobachtet werden konnten.

#### Sechzehn-Ionenkristall mit Defekt

Nachdem nun für Fünf- und Sieben-Ionenkristalle Defektmoden nachgewiesen werden konnten, wurde versucht, dies auch für einen Sechzehn-Ionenkristall zu erreichen. Bei diesem ergab sich der Vorteil, dass eine große Datenmenge an Kristallstrukturen mit Defekt vorhanden war, sodass ein dreidimensionaler Kristall mit Sicherheit ausgeschlossen werden konnte. Jedoch waren die Abstände zwischen den einzelnen Moden hier am kleinsten, da wir einerseits durch  $\alpha_{krit2} = 0,135$  in den maximalen Frequenzen limitiert waren und andererseits waren es nun 48 Schwingungsmoden. Die unterste Defektmode ist mit ihren Schwingungsamplituden in Abbildung 3.81 dargestellt. Die Positionen, die hier zu sehen sind, entsprechen den Fallenfrequenzen von  $\omega_z/2\pi = 502,9 \pm 0,1$  kHz,  $\omega_y/2\pi = 1581,4 \pm 0,1$  kHz und  $\omega_x/2\pi = 1884,8$  kHz, bei denen stabile Defekte erzeugt wurden. Damit wurde eine radiale Anisotropie von  $\alpha_{aniso} = 1,192$  verwendet und der kritische Fallenparameter lag bei  $\alpha = 0,101$ , was 484% von  $\alpha_{krit1} = 0,0209$  und 75% von  $\alpha_{krit2} = 0,135$  sind. In Abbildung 3.82 wurde das Spektrum des Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt aufgetragen (blaue Kurve) und die mit der Pseudopotentialmethode berechne-

### 3 Experimentelle Untersuchungen an Ionenkristallen

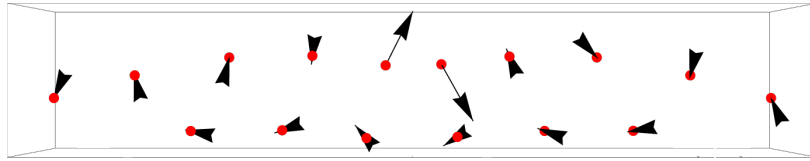


Abbildung 3.81: Abgebildet sind die Positionen und Amplituden der Ionen in der untersten Defektschwingungsmode des Sechzehn-Ionenkristalls. Diese wurden mit der Pseudopotentialmethode berechnet. Die lokale Mode ist daran zu erkennen, dass sich nur die Ionen, die am Defekt beteiligt sind, bewegen.

ten Frequenzen der untersten Defektmode, sowie der axialen Schwerpunktsmode (gestrichelte Kurve) eingezeichnet. Es ist eine Abweichung von  $37,2 \pm 37,9$  kHz zwischen dem Theoriewert und der gemessenen Anregung für die Defektmode zu erkennen, dies liegt aber im Rahmen der Fehlerbalken beider Werte. Als abschließenden Test wurde die axiale Fallenfrequenz von  $\omega_z/2\pi = 502,9 \pm 0,1$  kHz auf  $\omega_z/2\pi = 412,2 \pm 0,1$  kHz verringert,

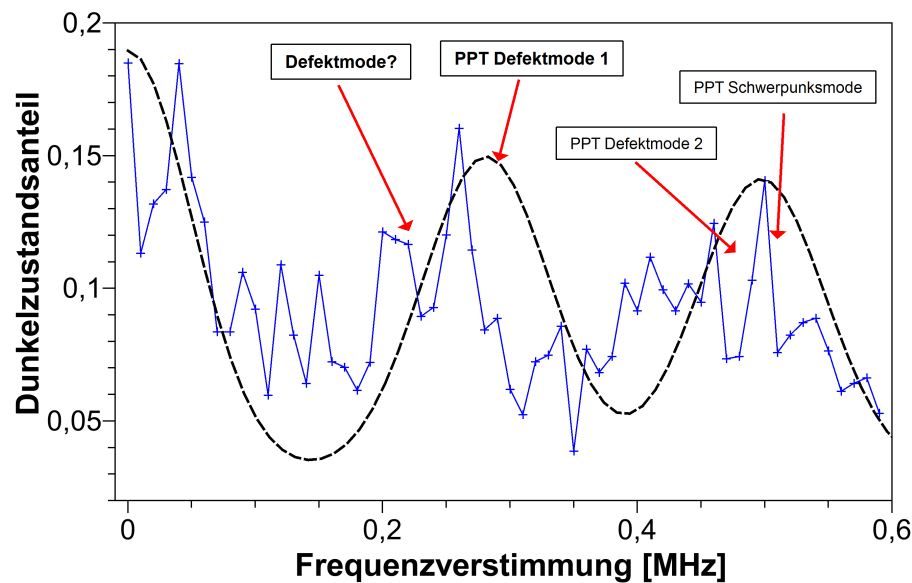


Abbildung 3.82: Gemessenes Spektrum eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt. Abgebildet sind die Anregungswahrscheinlichkeiten des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's. Die Anregungsspitzen im erwarteten Bereich der Defektmode sind markiert. Mit Hilfe der Pseudopotentialmethode wurden die Frequenzen der untersten beiden Defektmoden und der axialen Schwerpunktsmode berechnet und als gestrichelte Linie eingetragen.

### 3.7 Untersuchungen der Schwingungsmoden mit Laserspektroskopie an Kristallen mit Strukturdefekten

um einen reinen Zickzack-Kristall zu erhalten. Dadurch verringerte sich der Wert von  $\alpha = 0,101$  auf  $\alpha = 0,070$ . Die Frequenz der axialen Schwerpunktsmode wurde in beiden Fällen präzise durch die Pseudopotentialmethode vorhergesagt und es ist deutlich zu erkennen, dass der Zickzack-Kristall kein anregbares Seitenband im Bereich der Defektmode aufweist. Somit wurden für verschiedene Kristallgrößen Seitenbänder im erwarteten Bereich der Defektmoden nachgewiesen, die jedes Mal mit dem Defekt aus dem Kristall verschwunden waren, wenn ein defektfreier Zickzack-Kristall verwendet wurde. Wir konnten somit erstmals zeigen, dass Defektmoden in Zickzack-Kristallen spektroskopisch nachgewiesen werden können. Um deutlichere Ergebnisse zu erhalten sollte die Kühlung der Defektkristalle weiter verbessert werden. Außerdem sollten die Fallenfrequenzen daraufhin optimiert werden, dass der Abstand zwischen den Defektmoden und anderen Frequenzen maximiert wird. Zusätzlich sollte, um die Ergebnisse besser zu verifizieren, die Berechnung der Fallenfrequenzen mit der Floquet-Lyapunov-Methode erfolgen, und nicht über die Pseudopotentiallösungen. Dies stellt die nächsten dringlichen Verbesserungsschritte für die Defektspektroskopie dar.

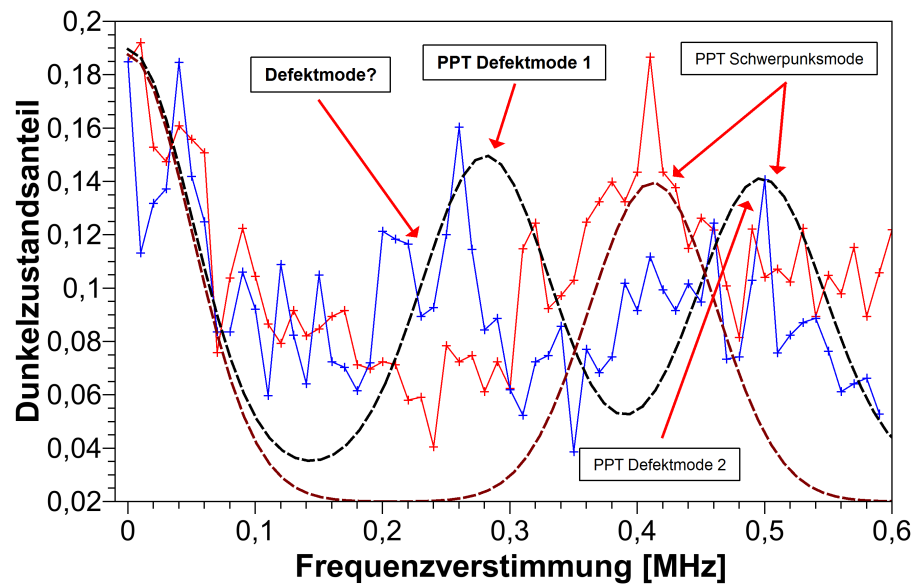


Abbildung 3.83: Vergleich des Spektrums eines Sechzehn-Ionenkristalls mit Defekt mit dem Spektrum eines Sechzehn-Ionenkristalls ohne Defekt. Dargestellt ist die Anregungswahrscheinlichkeit des Dunkelzustands  $D_{5/2}$  gegen die Frequenzverstimmung des AOM's. Die blaue Kurve gehört zu dem Kristall mit Defekt und die rote Kurve zu dem Kristall ohne Defekt. Um einen defektfreien Kristall zu erhalten, wurde die axiale Fallenfrequenz soweit verringert, dass keine Defekte mehr auftraten. Um den Unterschied in der axialen Fallenfrequenz zu veranschaulichen, wurde für beide Einstellungen die axiale Schwerpunktsmode, sowie für den Defektkristall die Defektmode mit der Pseudopotentialmethode berechnet und eingezeichnet.



## 4 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden strukturelle Phasenübergänge, kritische Fallenfrequenzen und ihr Einfluss auf das Modenspektrum von Ionenkristallen untersucht. Durch geeignete Wahl der Fallenfrequenzen konnten Zickzack-Kristalle erzeugt werden, die durch den ersten strukturellen Phasenübergang aus linearen Kristallen hervorgegangen waren. Die spektroskopische Untersuchung der Zickzack-Kristalle zeigte, dass die Schwingungsmodenfrequenzen in diesen zweidimensionalen Kristallen deutlich von den Vorhersagen der Pseudopotentialtheorie abweichen [Kau12]. Darauf aufbauend konnte der Kibble-Zurek-Mechanismus in Ionenkristallen beobachtet werden, indem die Erzeugungsrate für strukturelle Defekte beim Zickzack-Phasenübergang untersucht wurde. Es gelang die bisher genaueste Messung des inhomogenen Kibble-Zurek-Skalierungsverhaltens von  $\beta = 2,68 \pm 0,06$  [URJ<sup>+</sup>13]. Außerdem konnte gezeigt werden, welchen Einfluss Doppeldefekte und unterschiedliche Spannungsrampen, die für den Phasenübergang verwendet wurden, auf das Skalierungsverhalten haben. Doppeldefekte veränderten die gemessenen Steigungen nicht, da sie zum einen maximal 7% der Gesamtmessungen ausmachten und zum anderen eine Steigung von  $\beta = 2,32 \pm 0,17$  aufwiesen. Anders verhielt es sich für die unterschiedlichen Spannungsrampen. Die Kondensatorrampen hatten eine Steigung von  $\beta = 4,55 \pm 0,42$  und die Sinusrampen eine Steigung von  $\beta = 3,81 \pm 0,48$ , was deutlich von dem inhomogenen Kibble-Zurek-Skalierungsverhalten abweicht. Das liegt daran, dass mit diesen beiden Spannungsrampentypen starke Schwingungen in den Kristallen angeregt wurden, die das Ergebnis beeinflussten. Des Weiteren wurde untersucht, inwiefern sich die radiale Anisotropie und die Größe des verwendeten Kristalls auf das Defektskalierungsverhalten in den Messungen und in den Simulationen auswirkte. Dabei zeigte sich, dass die radiale Anisotropie entscheidend für die Menge beobachtbarer Defekte ist, sich jedoch in einem großen Bereich nicht auf die gemessene Steigung auswirkt. So konnte durch eine Änderung der radialen Anisotropie von  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,03$  auf  $\alpha_{\text{aniso}} = 1,05$  die Anzahl beobachtbarer Defekte um etwa 60% verringert werden, während die Steigung der Defektrate immer noch bei  $\beta = 2,62 \pm 0,15$  war. Bei der Größe der Kristalle zeigte sich, dass bei einer Größe von 14 Ionen und mehr das gleiche Skalierungsverhaltens von  $\beta = 2,64 \pm 0,4$  gemessen werden konnte. Jedoch ab 13 Ionen und weniger reduzierte sich die Steigung zu  $\beta = 1,17 \pm 0,32$ , was auf einen Übergang hin zum

#### 4 Zusammenfassung und Ausblick

homogenen Kibble-Zurek-Skalierungsverhalten zurückgeführt werden konnte. Zusätzlich wurde überprüft, inwiefern das homogene Kibble-Zurek-Skalierungsverhalten mit einer homogenen Ladungsverteilung vermessen werden kann. Um sowohl Praseodym als auch Stickstoff zu ionisieren, wurden unterschiedliche Ionisationsmethoden verwendet. Die Elemente wurden in gemischten Ionenkristallen gefangen und es konnte gezeigt werden, dass tatsächlich Stickstoff und Praseodym eingefangen wurden. Außer den Frequenzmessungen durch Einstrahlung einer resonanten Radiofrequenz wurden auch spektroskopische Messungen an gemischten Kristallen durchgeführt. Abschließend wurden erste Experimente zur spektroskopischen Untersuchung von Kristallen mit strukturellen Defekten durchgeführt, in denen erstmals Defektmoden experimentell nachgewiesen werden konnten.

Mögliche nächste Schritte sind die weitere Verbesserung der Defektspektroskopie. Dazu sollte die Kühlung der Defektkristalle optimiert werden, um das Schmelzen der Kristalle während der Spektroskopiesequenzen zu vermeiden. Zusätzlich sollten die verwendeten Fallenfrequenzen optimiert werden, um möglichst große Abstände zwischen den einzelnen Schwingungsmoden im Frequenzraum zu erzielen. Die Defektmoden könnten mit der Floquet-Lyapunov-Methode berechnet werden, um den Einfluss der Mikrobewegung auf die Schwingungsfrequenzen genauer zu berücksichtigen und damit eine bessere Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Frequenzen zu erzielen. Des Weiteren könnten noch Simulationen zu den Messungen an homogenen Kristallen durchgeführt werden, indem die Simulationen um Doppelmuldenpotentiale erweitert werden. Dadurch könnten die Messungen der Defekterzeugungsrate in homogenen Kristallen mit Simulationsergebnissen verifiziert werden.

# Literaturverzeichnis

- [AKG<sup>+</sup>10] AKERMAN, N., S. KOTLER, Y. GLICKMAN, Y. DALLAL, A. KESELMAN und R. OZERI: *Single-ion nonlinear mechanical oscillator*. Phys. Rev. A, 82:061402, 2010.
- [ARJ<sup>+</sup>12] ABAH, O., J. ROSSNAGEL, G. JACOB, S. DEFFNER, F. SCHMIDT-KALER, K. SINGER und E. LUTZ: *Single-Ion Heat Engine at Maximum Power*. Phys. Rev. Lett., 109:203006, 2012.
- [BAO<sup>+</sup>12] BERMUDEZ, A., J. ALMEIDA, K. OTT, H. KAUFMANN, S. ULM, U. POSCHINGER, F. SCHMIDT-KALER, A. RETZKER und M. B. PLENIO: *Quantum magnetism of spin-ladder compounds with trapped-ion crystals*. New Jour. Phys., 14(9):093042, 2012.
- [BASK<sup>+</sup>11] BERMUDEZ, A., J. ALMEIDA, F. SCHMIDT-KALER, A. RETZKER und M. B. PLENIO: *Frustrated Quantum Spin Models with Cold Coulomb Crystals*. Phys. Rev. Lett., 107:207209, 2011.
- [BCM12] BALTRUSCH, J. D., C. CORMICK und G. MORIGI: *Quantum quenches of ion Coulomb crystals across structural instabilities*. Phys. Rev. A, 86(3):032104, 2012.
- [BCSS94] BOWICK, M. J., L. CHANDA, E. A. SCHIFF und A. M. SRIVASTAVA: *The Cosmological Kibble Mechanism in the Laboratory: String Formation in Liquid Crystals*. Science, 263(5149):943–945, 1994.
- [BGB<sup>+</sup>06] BAILLARD, X., A. GAUGUET, S. BIZE, P. LEMONDE, PH. LAURENT, A. CLAIRON und P. ROSENBUSCH: *Interference-filter-stabilized external-cavity diode lasers*. Optics Communications, 266(2):609–613, 2006.
- [BKB<sup>+</sup>17] BROX, J., P. KIEFER, M. BUJAK, T. SCHAEZT und H. LANDA: *Spectroscopy and Directed Transport of Topological Solitons in Crystals of Trapped Ions*. arXiv e-prints, 119:153602, 2017.

## Literaturverzeichnis

- [BP12] BERMUDEZ, A. und M. B. PLENIO: *Spin Peierls Quantum Phase Transitions in Coulomb Crystals*. Phys. Rev. Lett., 109:010501, 2012.
- [BSK<sup>+</sup>12] BRITTON, J. W., B. C. SAWYER, A. C. KEITH, C.-C. J. WANG, J. K. FREERICKS, H. UYS, M. J. BIERCUK und J. J. BOLLINGER: *Engineered two-dimensional Ising interactions in a trapped-ion quantum simulator with hundreds of spins*. Nature, 484(7395):489–492, 2012.
- [CCB<sup>+</sup>14] CORMAN, L., L. CHOMAZ, T. BIENAIMÉ, R. DESBUQUOIS, C. WEITENBERG, S. NASCIMBÈNE, J. DALIBARD und J. BEUGNON: *Quench-Induced Supercurrents in an Annular Bose Gas*. Phys. Rev. Lett., 113:135302, 2014.
- [CFVI19] CLKER-FREE-VECTOR-IMAGES: *Bauarbeiten Vectorzeichnung*. <https://pixabay.com/de/vectors/anmelden-stra2019>.
- [CHK<sup>+</sup>10] CHOU, C. W., D. B. HUME, J. C. J. KOELEMELIJ, D. J. WINELAND und T. ROSEN BAND: *Frequency Comparison of Two High-Accuracy Al<sup>+</sup> Optical Clocks*. Phys. Rev. Lett., 104:070802, 2010.
- [CLH<sup>+</sup>12] CHAE, S., N. LEE, Y. HORIBE, M. TANIMURA, S. MORI, B. GAO, S. CARR und S.-W. CHEONG: *Direct Observation of the Proliferation of Ferroelectric Loop Domains and Vortex-Antivortex Pairs*. Phys. Rev. Lett., 108:167603, 2012.
- [DdCM<sup>+</sup>10] DE CHIARA, G., A. DEL CAMPO, G. MORIGI, M. B. PLENIO und A. RETZKER: *Spontaneous nucleation of structural defects in inhomogeneous ion chains*. New Jour. Phys., 12(11):115003, 2010.
- [dDM<sup>+</sup>10] DEL CAMPO, A., G. DE CHIARA, G. MORIGI, M. B. PLENIO und A. RETZKER: *Structural Defects in Ion Chains by Quenching the External Potential: The Inhomogeneous Kibble-Zurek Mechanism*. Phys. Rev. Lett., 105:075701, 2010.
- [Deg13] DEGÜNTHER, C.: *Untersuchung struktureller Defekte in Ionenkristallen*. Diplomarbeit, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2013.
- [Den71] DENISON, D. R.: *Operating Parameters of a Quadrupole in a Grounded Cylindrical Housing*. Journal of Vacuum Science and Technology, 8(1):266–269, 1971.
- [Die00] DIETERICH, W.: *Vorlesungsskript Theorie der Phasenübergänge*, 2000.

- [Dub93] DUBIN, D. H.: *Theory of structural phase transitions in a trapped Coulomb crystal*. Phys. Rev. Lett., 71(17):2753, 1993.
- [EE11] EHRENFEST, P. und T. EHRENFEST: *Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik*, 1911.
- [EH13] EJTEMAEE, S. und P. C. HALJAN: *Spontaneous nucleation and dynamics of kink defects in zigzag arrays of trapped ions*. Phys. Rev. A, 87(5):051401, 2013.
- [ESG<sup>+</sup>00a] ENZER, D. G., M. M. SCHAUER, J. J. GOMEZ, M. S. GULLEY, M. H. HOLZSCHEITER, P. G. KWIAT, S. K. LAMOREAUX, C. G. PETERSON, V. D. SANDBERG, D. TUPA, A. G. WHITE, R. J. HUGHES und D. F. V. JAMES: *Observation of Power-Law Scaling for Phase Transitions in Linear Trapped Ion Crystals*. Phys. Rev. Lett., 85:2466–2469, 2000.
- [ESG<sup>+</sup>00b] ENZER, D. G., M. M. SCHAUER, J. J. GOMEZ, M. S. GULLEY, M. H. HOLZSCHEITER, P. G. KWIAT, S. K. LAMOREAUX, C. G. PETERSON, V. D. SANDBERG, D. TUPA, A. G. WHITE, R. J. HUGHES und D. F. V. JAMES: *Observation of Power-Law Scaling for Phase Transitions in Linear Trapped Ion Crystals*. Phys. Rev. Lett., 85:2466–2469, 2000.
- [EUZ<sup>+</sup>10] EBLE, J., S. ULM, P. ZAHARIEV, F. SCHMIDT-KALER und K. SINGER: *Feedback-optimized operations with linear ion crystals*. Journal of the Optical Society of America B, 27:A99, 2010.
- [FCO<sup>+</sup>08] FERREIRA, W. P., J. C. N. CARVALHO, P. W. S. OLIVEIRA, G. A. FARIAS und F. M. PEETERS: *Structural and dynamical properties of a quasi-one-dimensional classical binary system*. Phys. Rev. B, 77:014112, 2008.
- [FDCM08] FISHMAN, S., G. DE CHIARA, T. CALARCO und G. MORIGI: *Structural phase transitions in low-dimensional ion crystals*. Phys. Rev. B, 77:064111, 2008.
- [FFP10] FERREIRA, W. P., G. A. FARIAS und F. M. PEETERS: *A two-component mixture of charged particles confined in a channel: melting*. Journal of Physics: Condensed Matter, 22(28):285103, 2010.
- [FPS<sup>+</sup>14] FELDKER, T., L. PELZER, M. STAPPEL, P. BACHOR, D. KOLBE, J. WALZ und F. SCHMIDT-KALER: *Mode shaping in mixed ion crystals of  $^{40}\text{Ca}^{2+}$  and  $^{40}\text{Ca}^+$* . Applied Physics B, 114:11, 2014.

Literaturverzeichnis

- [GBSJ<sup>+</sup>19] GROOT-BERNING, KARIN, FELIX STOPP, GEORG JACOB, DMITRY BUDKER, RAPHAEL HAAS, DENNIS RENISCH, JÖRG RUNKE, PETRA THÖRLE-POSPIECH, CHRISTOPH E. DÜLLMANN und FERDINAND SCHMIDT-KALER: *Trapping and sympathetic cooling of single thorium ions for spectroscopy*. Phys. Rev. A, 99:023420, 2019.
- [Hab31] HABERMANN, C. E.: *VAPOR PRESSURES OF THE RARE EARTH METALS*. Doktorarbeit, Iowa State University of Science and Technology, 1931.
- [HKD<sup>+</sup>14] HILICO, L., J.-P. KARR, A. DOULLIET, P. INDELICATO, S. WOLF und F. SCHMIDT-KALER: *Preparing single ultra-cold antihydrogen atoms for free-fall in GBAR*. International Journal of Modern Physics: Conference Series, 30:1460269, 2014.
- [HRK<sup>+</sup>15] HETTRICH, M., T. RUSTER, H. KAUFMANN, C. F. ROOS, C. T. SCHMIEGELow, F. SCHMIDT-KALER und U. G. POSCHINGER: *Measurement of Dipole Matrix Elements with a Single Trapped Ion*. Phys. Rev. Lett., 115:143003, 2015.
- [IEK<sup>+</sup>11] ISLAM, R., E. E. EDWARDS, K. KIM, S. KORENBLIT, C. NOH, H. CARMICHAEL, G.-D. LIN, L.-M. DUAN, C.-C. JOSEPH WANG, J. K. FREERICKS und C. MONROE: *Onset of a quantum phase transition with a trapped ion quantum simulator*. Nat. Commun., 2:377, 2011.
- [IPISK13] IVANOV, P. A., D. PORRAS, S. S. IVANOV und F. SCHMIDT-KALER: *Simulation of the Jahn-Teller-Dicke magnetic structural phase transition with trapped ions*. Journal of Physics B, 46:104003, 2013.
- [Jam98] JAMES, D. F. V.: *Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation*. Appl. Phys. B, 66:181, 1998.
- [JGBW<sup>+</sup>16] JACOB, G., K. GROOT-BERNING, S. WOLF, S. ULM, L. COUTURIER, S. T. DAWKINS, U. G. POSCHINGER, F. SCHMIDT-KALER und K. SINGER: *Transmission Microscopy with Nanometer Resolution Using a Deterministic Single Ion Source*. Phys. Rev. Lett., 117:043001, 2016.
- [Kap38] KAPITZA, P.: *Viscosity of liquid helium below the  $\lambda$ -point*. Nature, 141(3558):74, 1938.

- [Kau12] KAUFMANN, H.: *Experimentelle und theoretische Untersuchung von Zickzack-Ionenkristallen*. Diplomarbeit, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2012.
- [KHE<sup>+</sup>13] KLAER, P., H. C. HERPER, P. ENTEL, R. NIEMANN, L. SCHULTZ, S. FÄHLER und H. J. ELMERS: *Electronic structure of the austenitic and martensitic state of magnetocaloric Ni-Mn-In Heusler alloy films*. Phys. Rev. B, 88(17):174414, 2013.
- [Kib76] KIBBLE, T. W. B.: *Topology of cosmic domains and strings*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 9(8):1387, 1976.
- [Kib80] KIBBLE, T. W. B.: *Some implications of a cosmological phase transition*. Physics Reports, 67(1):183 – 199, 1980.
- [KOL<sup>+</sup>19] KEESLING, ALEXANDER, AHMED OMRAN, HARRY LEVINE, HANNES BERNIEN, HANNES PICHLER, SOONWON CHOI, RHINE SAMAJDAR, SYLVAIN SCHWARTZ, PIETRO SILVI, SUBIR SACHDEV et al.: *Quantum Kibble–Zurek mechanism and critical dynamics on a programmable Rydberg simulator*. Nature, 568(7751):207, 2019.
- [KRS<sup>+</sup>14] KAUFMANN, H., T. RUSTER, C. T. SCHMIEGELOW, F. SCHMIDT-KALER und U. G. POSCHINGER: *Dynamics and control of fast ion crystal splitting in segmented Paul traps*. New Jour. Phys., 16:073012, 2014.
- [Küh08] KÜHN, M.: *Numerische Simulation dielektrischer und ferroelektrischer Materialeigenschaften basierend auf lokalen Feldberechnungen und einem stochastisch-dynamischen Monte-Carlo-Algorithmus*. Doktorarbeit, Universität des Saarlandes, 2008.
- [KUJ<sup>+</sup>12a] KAUFMANN, H., S. ULM, G. JACOB, U. G. POSCHINGER, H. LANDA, A. RETZKER, M.B. PLENIO und F. SCHMIDT-KALER: *Precise experimental investigation of eigenmodes in a planar ion crystal*. Phys. Rev. Lett., 109:263003, 2012.
- [KUJ<sup>+</sup>12b] KAUFMANN, H., S. ULM, G. JACOB, U. G. POSCHINGER, H. LANDA, A. RETZKER, M.B. PLENIO und F. SCHMIDT-KALER: *Supplemental Material von <http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevLett.109.263003>*, 2012.

## Literaturverzeichnis

- [Lan36] LANDAU, L.: *The theory of phase transitions*. Nature, 138(3498):840–841, 1936.
- [LDRR12a] LANDA, H., M. DREWSSEN, B. REZNIK und A. RETZKER: *Classical and quantum modes of coupled Mathieu equations*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 45(45):455305, 2012.
- [LDRR12b] LANDA, H., M. DREWSSEN, B. REZNIK und A. RETZKER: *Modes of oscillation in radiofrequency Paul traps*. New Jour. Phys., 14(9):093023, 2012.
- [LLP80] LANDAU, L. D., E. M. LIFSHITZ und L. P. PITAEVSKII: *Statistical Physics*. Oxford: ReedEducational and Professional Publishing Ltd., 3. Auflage, 1980.
- [LMR<sup>+</sup>10] LANDA, H., S. MARCOVITCH, A. RETZKER, M. B. PLENIO und B. REZNIK: *Quantum Coherence of Discrete Kink Solitons in Ion Traps*. Phys. Rev. Lett., 104:043004, 2010.
- [LRB<sup>+</sup>13] LANDA, H., B. REZNIK, J. BROX, M. MIELENZ und T. SCHAEZT: *Structure, dynamics and bifurcations of discrete solitons in trapped ion crystals*. New Jour. Phys., 15(9):093003, 2013.
- [Mai06] MAIWALD, R.: *Abbildungs- und Steuerungssystem für ein Experiment mit einzelnen Ionen*. Diplomarbeit, Universität Ulm, 2006.
- [MBK<sup>+</sup>13] MIELENZ, M., J. BROX, S. KAHRA, G. LESCHHORN, M. ALBERT, T. SCHAEZT, H. LANDA und B. REZNIK: *Trapping of Topological-Structural Defects in Coulomb Crystals*. Phys. Rev. Lett., 110:133004, 2013.
- [McL51] MCLACHLAN, N. W.: *Theory and application of Mathieu functions*. Clarendon, 1951.
- [MCWD00] MADISON, K. W., F. CHEVY, W. WOHLLEBEN und J. DALIBARD: *Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate*. Phys. Rev. Lett., 84(5):806, 2000.
- [MMRK09] MONACO, R., J. MYGIND, R. J. RIVERS und V. P. KOSHELETS: *Spontaneous fluxoid formation in superconducting loops*. Phys. Rev. B, 80:180501, 2009.
- [MS54] MEIXNER, J. und F.W. SCHÄFKE: *Mathiesche Funktionen und Sphäroidfunktionen: mit Anwendungen auf physikalische und technische Probleme*. Nummer Bd. 71 in *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*



*in Einzeldarstellungen mit besonderer Berücksichtigung der Anwendungsgebiete.* Springer, 1954.

- [Nab12] NABER, J.: *Aufbau und Betrieb einer Paulfalle zur Rydberganregung von Ionen.* Diplomarbeit, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2012.
- [NGSH15] NAVON, NIR, ALEXANDER L. GAUNT, ROBERT P. SMITH und ZORAN HADZIBABIC: *Critical dynamics of spontaneous symmetry breaking in a homogeneous Bose gas.* Science, 347(6218):167–170, 2015.
- [NLSK<sup>+</sup>98] NÄGERL, H.C., D. LEIBFRIED, F. SCHMIDT-KALER, J. ESCHNER und R. BLATT: *Coherent excitation of normal modes in a string of Ca<sup>+</sup> ions.* Optics Express, 3:89, 1998.
- [PISK12] PORRAS, D., P. A. IVANOV und F. SCHMIDT-KALER: *Quantum Simulation of the Cooperative Jahn-Teller Transition in 1D Ion Crystals.* Phys. Rev. Lett., 108:235701, 2012.
- [PKP<sup>+</sup>13] PYKA, K., J. KELLER, H. L. PARTNER, R. NIGMATULLIN, T. BURGERMEISTER, D. M. MEIER, K. KUHLMANN, A. RETZKER, M. B. PLENIO, W. H. ZUREK, A. DEL CAMPO und T. E. MEHLSTÄUBLER: *Topological defect formation and spontaneous symmetry breaking in ion Coulomb crystals.* Nat. Commun., 4, 2013.
- [PNB<sup>+</sup>13] PARTNER, H. L., R. NIGMATULLIN, T. BURGERMEISTER, K. PYKA, J. KELLER, A. RETZKER, M. B. PLENIO und T. E. MEHLSTÄUBLER: *Dynamics of topological defects in ion Coulomb crystals.* New Jour. Phys., 15(10):103013, 2013.
- [Pos10] POSCHINGER, U. G.: *Quantum Optics Experiments in a Microstructured Ion Trap.* Doktorarbeit, Universität Ulm, 2010.
- [PS56] PAUL, W. und H. STEINWEDEL: *Verfahren zur Trennung bzw. zum getrennten Nachweis von Ionen verschiedener spezifischer Ladung.* Deutsches Patentamt, 1956.
- [Rey83] REYNOLDS, O.: *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels.* Proceedings of the royal society of London, 35(224-226):84–99, 1883.

Literaturverzeichnis

- [RHS<sup>+</sup>08] ROSEN BAND, T., D. B. HUME, P. O. SCHMIDT, C. W. CHOU, A. BRUSCH, L. LORINI, W. H. OSKAY, R. E. DRULLINGER, T. M. FORTIER, J. E. STALNAKER, S. A. DIDDAMS, W. C. SWANN, N. R. NEWBURY, W. M. ITANO, D. J. WINELAND und J. C. BERGQUIST: *Frequency Ratio of Al<sup>+</sup> and Hg<sup>+</sup> Single-Ion Optical Clocks; Metrology at the 17th Decimal Place*. Science, 319(5871):1808–1812, 2008.
- [Roo00] ROOS, C. F.: *Controlling the quantum state of trapped ions*. Doktorarbeit, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, 2000.
- [Rot03] ROTTER, D.: *Photoionisation von Kalzium*. Diplomarbeit, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, 2003.
- [RTSP08] RETZKER, A., R. C. THOMPSON, D. M. SEGAL und M. B. PLENIO: *Double Well Potentials and Quantum Phase Transitions in Ion Traps*. Phys. Rev. Lett., 101:260504, 2008.
- [RWK<sup>+</sup>14] RUSTER, T., C. WARSCHBURGER, H. KAUFMANN, C. T. SCHMIEGELOW, A. WALTHER, M. HETTRICH, A. PFISTER, V. KAUSHAL, F. SCHMIDT-KALER und U. G. POSCHINGER: *Experimental realization of fast ion separation in segmented Paul traps*. Phys. Rev. A, 90:033410, 2014.
- [Sch93] SCHIFFER, J. P.: *Phase transitions in anisotropically confined ionic crystals*. Phys. Rev. Lett., 70:818–821, 1993.
- [Sch09] SCHULZ, S. A.: *Scalable Microchip Ion Traps for Quantum Computation*. Doktorarbeit, Universität Ulm, 2009.
- [Sch10] SCHITZLER, W.: *Deterministic ultracold ion source targeting the Heisenberg limit*. Doktorarbeit, Universität Ulm, 2010.
- [SJM<sup>+</sup>02] SINGER, K., S. JOCHIM, M. MUDRICH, A. MOSK und M. WEIDEMÜLLER: *Low-cost mechanical shutter for light beams*. Review of scientific instruments, 73(12):4402–4404, 2002.
- [SPM<sup>+</sup>10] SINGER, K., U. G. POSCHINGER, M. MURPHY, P. A. IVANOV, F. ZIESEL, T. CALARCO und F. SCHMIDT-KALER: *Colloquium: Trapped ions as quantum bits: Essential numerical tools*. Rev. Mod. Phys., 82:2609, 2010.
- [ST99] SCHRIEFFER, J. R. und M. TINKHAM: *Superconductivity*. Rev. Mod. Phys., 71:S313–S317, 1999.

- [Sta09] STAPLETON, J. H.: *Linear statistical models*, Band 719. John Wiley & Sons, 2009.
- [Ulm10] ULM, S.: *Spektroskopie gemischter Ionenkristalle*. Diplomarbeit, Universität Ulm, 2010.
- [URJ<sup>+</sup>13] ULM, S., J. ROSSNAGEL, G. JACOB, C. DEGÜNTHER, S. T. DAWKINS, U. G. POSCHINGER, R. NIGMATULLIN, A. RETZKER, M. B. PLENIO, F. SCHMIDT-KALER und K. SINGER: *Observation of the Kibble-Zurek scaling law for defect formation in ion crystals*. Nat. Commun., 4:2290, 2013.
- [WAMS12] WÜBBENA, JANNES B., SANA AMAIRI, OLAF MANDEL und PIET O. SCHMIDT: *Sympathetic cooling of mixed-species two-ion crystals for precision spectroscopy*. Phys. Rev. A, 85:043412, 2012.
- [WOG07] WEBSTER, S. A., M. OXBORROW und P. GILL: *Vibration insensitive optical cavity*. Phys. Rev. A, 75:011801, 2007.
- [WSKH92] WEITZ, M., F. SCHMIDT-KALER und T. W. HÄNSCH: *Precise Optical Lamb Shift Measurements in Atomic Hydrogen*. Phys. Rev. Lett., 68:1120, 1992.
- [WZR<sup>+</sup>12] WALTHER, A., F. ZIESEL, T. RUSTER, S. T. DAWKINS, K. OTT, M. HETTRICH, K. SINGER, F. SCHMIDT-KALER und U. G. POSCHINGER: *Controlling fast transport of cold trapped ions*. Phys. Rev. Lett., 109:080501, 2012.
- [Zur85] ZUREK, W. H.: *Cosmological experiments in superfluid helium?* Nature, 317:505–508, 1985.



## A Anhang: Fallendesign

Bei der Neugestaltung der Paulfalle für das Implantationsexperiment wurden erstmals Keramiksubstrate mit einem dreidimensionalen Fallenaufbau kombiniert. Um dies zu erreichen, wurde die Paulfalle in vier separate Elektrodenflügel unterteilt. Jeder dieser Flügel bestand aus einem  $125\ \mu\text{m}$  Keramiksubstrat und war mit individuell beschaltbaren Elektrodensegmenten versehen. Dabei wurden die Keramiksubstrate zuerst mit Hilfe von Femtosekundenlaserpulsen in die entsprechende Form geschnitten. Das Ergebnis dieser Bearbeitung ist auf der Mikroskopaufnahme in Abbildung A.1 zu sehen. In diesem ersten Pro-

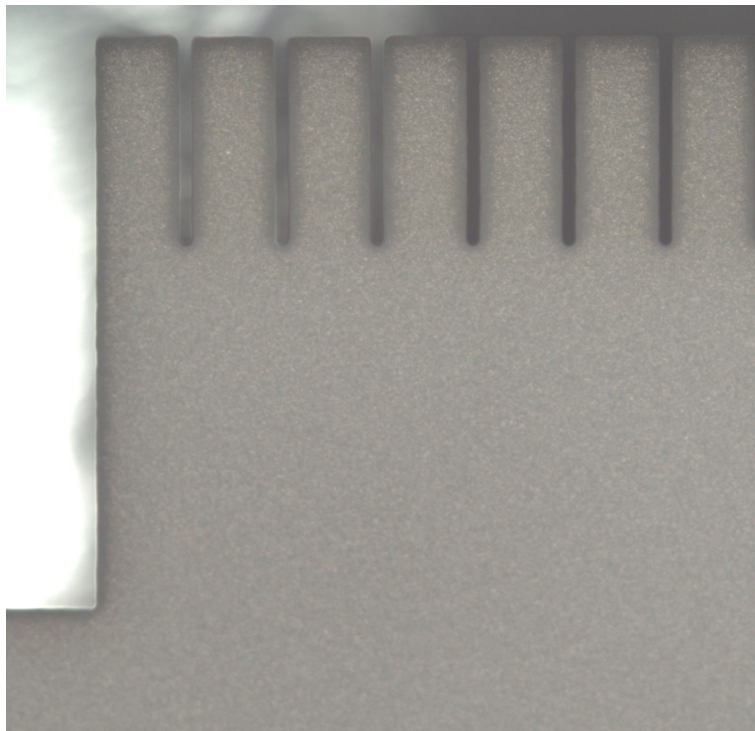


Abbildung A.1: Mikroskopaufnahme eines Keramiksubstrats nach dem ersten Bearbeitungsschritt, bei dem die Segmente in das Substrat geschnitten wurden. Im oberen Bildteil sind die ersten sieben Segmente zu erkennen.

zessschritt wurden die Segmente und die Ausrichtungskanten so in die Keramiksubstrate

## A Anhang: Fallendesign

geschnitten, dass diese später über die Substrate auf dem dreidimensionalen Fallenhalter relativ zu den Endkappen und somit auch zueinander ausgerichtet werden konnten. Die so vorbereiteten Substrate wurden dann mit 50 nm Titan als Haftschrift und anschließend mit einer 500 nm dicken Goldschicht beschichtet. Für diese Prozedur wurde eine Sputteranlage des Instituts für Optoelektronik der Universität Ulm verwendet. Die Beschichtungen wurden von Herrn Rösch angefertigt, der die besten Ergebnisse im Vergleich mit anderen uns zur Verfügung stehenden Anlagen erzielen konnte. Nach dem Vergolden der Oberfläche

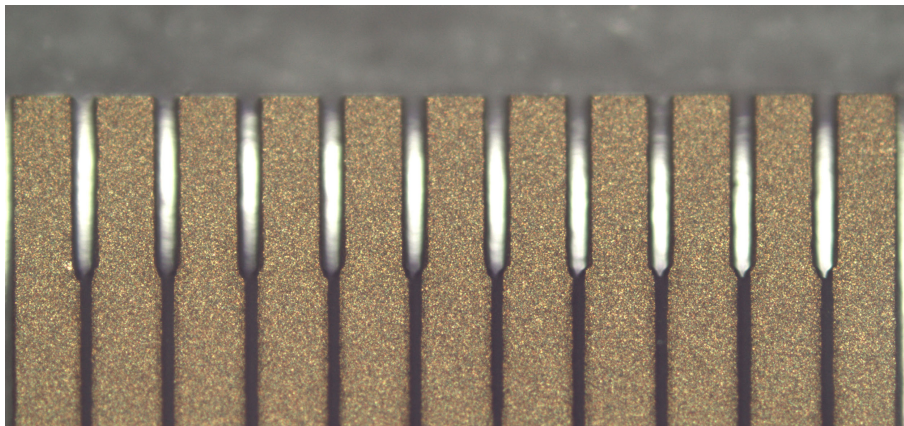


Abbildung A.2: Diese Mikroskopaufnahme wurde nach der Beschichtung mit Titan und Gold, sowie nach der anschließenden zweiten Bearbeitung durch den Laser, aufgenommen. Die Goldschicht auf den Segmenten und die nichtleitenden Bereiche zwischen ihnen sind deutlich zu erkennen. In den nichtleitenden Bereichen wurde die Goldschicht bei der zweiten Laserbearbeitung wieder entfernt, um einzelne Elektroden zu erhalten.

wurden die einzelnen Elektroden nochmals mit Laserpulsen aus der Oberfläche gearbeitet. Abschließend wurden die fertigen Substrate auf dem Halter angebracht und über die Abstandshalteecken relativ zu den Endkappen ausgerichtet. Die komplett montierte Falle ist in Abbildung A.3 zu sehen. Dabei sind alle vier Fallenchips auf dem Fallenhalter festgeklebt und die einzelnen Elektroden mit isolierten Drähten angeschlossen. Außerdem sind die Endkappen eingebaut und verkabelt, sowie alle geerdeten Bereiche über den Fallenhalter leitend mit der Vakuumkammer verbunden. Die Vakuumkammer diente dabei als zentraler Massenpunkt des Aufbaus. Bei der Multiphotonenionisation von Stickstoff und anderen Elementen werden im Vergleich zu den anderen Experimenten relativ hohe Laserleistungen eingesetzt. Diese hätte z.B. zu Beschädigungen an den Fallensubstraten führen können, da die Fallensubstrate auf Grund ihrer Bauart sehr wenig Material aufweisen. Nur solange der Laserstrahl annähernd ideal durch die Fallenmitte geführt wurde, war mit keinen Beschädigungen zu rechnen. Der Bereich, in dem der Laserstrahl keinen

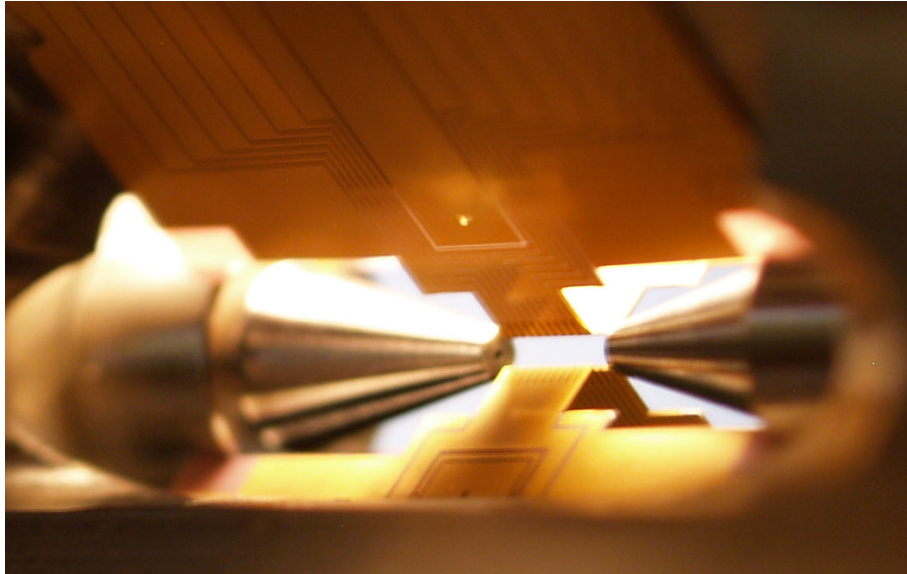


Abbildung A.3: Diese Aufnahme zeigt die fertig zusammengebaute Falle im dreidimensionalen Fallenhalter. Die Leiterbahnen auf den Keramiksubstraten sind deutlich zu erkennen.

Kontakt zu der Falle hatte, war aber relativ klein, sodass mit dem Einwirken des Lasers auf die Fallensubstrate zu rechnen war. Zur Bestimmung der Laserenergie, ab der die Substrate dabei beschädigt werden würden, wurde die Laserleistung und die Größe des Fokus vermessen und gleichzeitig der Einfluss dieser Energiedichte auf das beschichtete Substrat bestimmt. Dazu wurde das Substrat zusammen mit einer Schneidkante auf einem Verschiebetisch montiert. Anschließend wurde die Goldschicht des Substrats in den Fokus des Lasers verschoben und mit 5 mJ Pulsen bearbeitet. In Abbildung A.4 ist die dabei entstandene Beschädigung in der Goldschicht zu sehen. Der Radius der bei dieser Leistung beschädigten Goldschicht wurde aus vier Punkten ermittelt. Als nächstes wurde die Energie in Abhängigkeit der Position der Schneidkante vermessen, um daraus den Radius des Lasers zu ermitteln. Die dabei ermittelte Kurve ist in Abbildung A.5 dargestellt. Hierfür wurde eine Gaußsche Fehlerfunktion mit Hilfe eines Skripts von Georg Jacob an die Messpunkte angepasst. Weitere Details zur Anwendung von Gaußschen Fehlerfunktionen bei der Strahlcharakterisierung finden sich in der Arbeit von Jacob [JGBW<sup>+</sup>16]. Aus der Schneidkantenmessung ergab sich ein Radius von 0,959 mm und somit eine Fläche von 3,013 mm<sup>2</sup>. Da der Schadensradius größer war als der Sigma-Radius des Lasers, wurde der Schadensradius zur Bestimmung der Energiedichte pro cm so gewählt, dass sich eine untere Grenze der Energiedichte ergab. Diese belief sich auf  $0,189 \frac{\text{J}}{\text{cm}^2}$ .

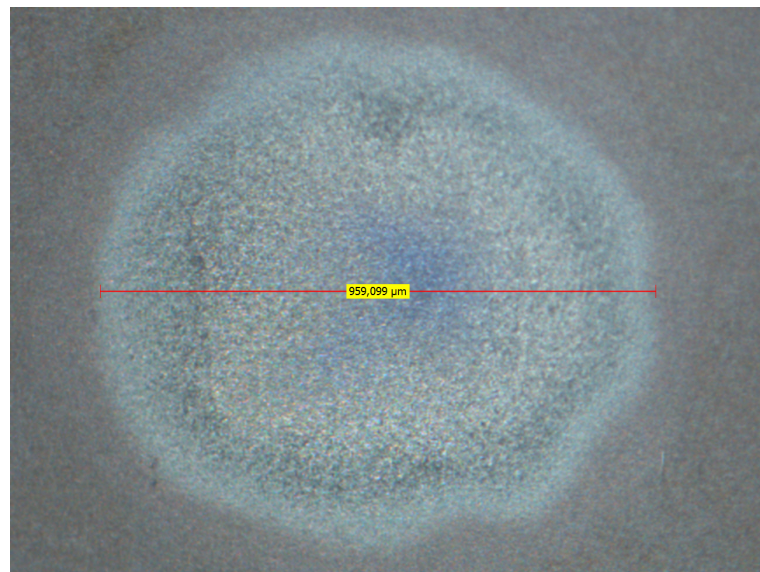


Abbildung A.4: Mikroskopaufnahme der beschädigten Goldschicht, die durch den gepulsten Ionisationslaser hervorgerufen wurde.

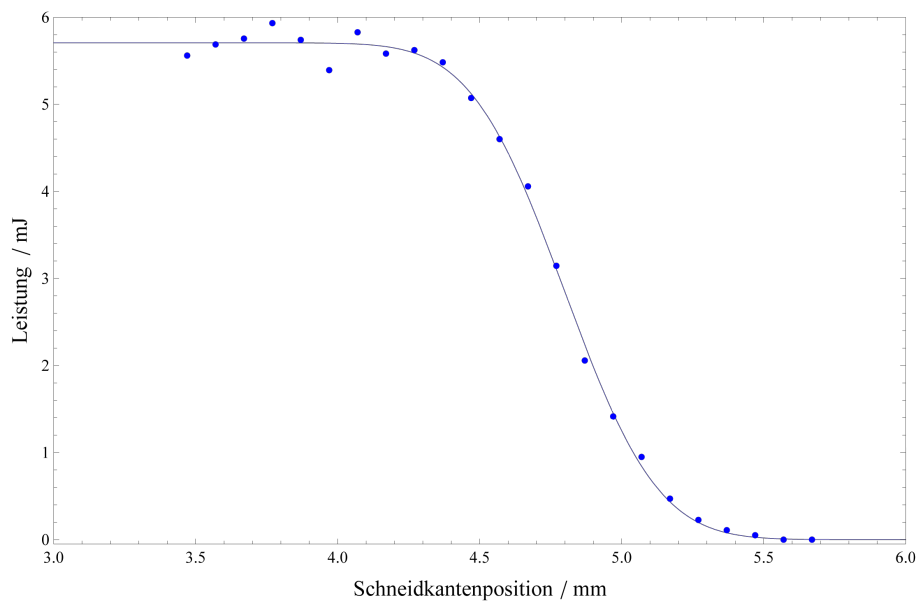


Abbildung A.5: Aufgetragen ist die gemessene Leistung hinter der Schneidkante als Funktion der Schneidkantenposition. Dabei wurde die Schneidkante schrittweise in den Laserstrahl verschoben, bis keine Leistung mehr hinter der Schneidkante gemessen werden konnte.



## B Anhang: Simulation

### B.1 Simulationsparametervergleich

Um einen Einfluss der Zeitschrittgröße auf die Simulationsergebnisse auszuschließen, wurde wiederholt die obere radiale Fallenfrequenz  $\omega_x$  in der Simulation bestimmt und dabei die Größe der Zeitschritte variiert. In Abbildung B.1 ist das Ergebnis dieser Messungen zu sehen. Aufgetragen ist die gemessene radiale Fallenfrequenz gegen die Zeit-

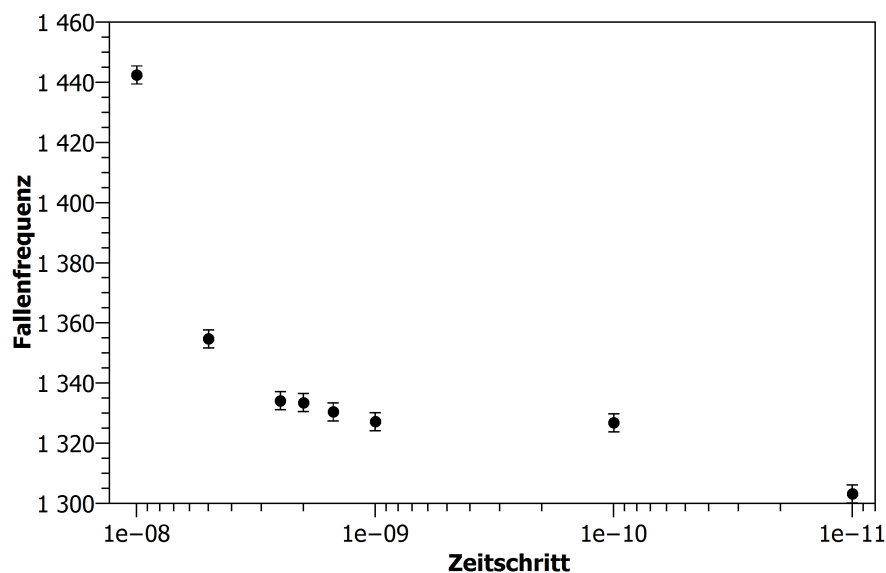


Abbildung B.1: Aufgetragen ist die obere radiale Fallenfrequenz als Funktion der Simulationsschrittgröße. Nur im Bereich von 1 ns bis 0,1 ns ist die Fallenfrequenz unabhängig von der Simulationsschrittweite.

schrittgröße. Es ist zu sehen, dass für Schrittgrößen größer als 1 ns die Fallenfrequenz stark von der Schrittgröße abhängt. Auch bei einer Schrittgröße von 0,01 ns ergibt sich eine andere Fallenfrequenz. Nur bei Schrittgrößen zwischen 1 ns und 0,1 ns ist kein Unterschied in der Fallenfrequenz zu beobachten. Dies ist wie folgt zu verstehen: Sind die Simulationszeitschritte zu groß gewählt worden, sind die berechneten Positionen und Geschwindigkeiten zu ungenau und es treten Abweichungen auf. Wird die Schritt-

## B Anhang: Simulation

größe zu klein gewählt, so werden zu viele numerische Fehler aufgesammelt und daher ergeben sich ebenfalls falsche Ergebnisse. Innerhalb des Bereichs der Schrittgrößen von 1 ns bis zu 0,1 ns sind beide Bedingungen erfüllt und die Ergebnisse unabhängig von der Schrittgröße. In Abbildung B.2 sind die Ergebnisse für fünf verschiedene Einstellungen der Simulation zu sehen. Darin abgebildet ist die Defektrate als Funktion der Kompressionsgeschwindigkeit. Die schwarzen Punkte sind die im Experiment gemessenen Daten mit einer radialen Anisotropie von  $\alpha_{aniso} = 1,096$ . Die Fallenfrequenzen waren  $\omega_{z,start}/2\pi = 150,1$  kHz,  $\omega_{y,start}/2\pi = 1200,4$  kHz und  $\omega_{x,start}/2\pi = 1315,4$  kHz vor der Rampe. Nach der Rampe wurden Frequenzen von  $\omega_{z,ende}/2\pi = 333,6$  kHz,  $\omega_{y,ende}/2\pi = 1182,5$  kHz und  $\omega_{x,ende}/2\pi = 1298,2$  erreicht. Dies entspricht einer Änderung des kritischen Fallenparameters  $\alpha$  von  $\alpha_{start} = 0,0156$ , was 75% von  $\alpha_{krit1}$  entspricht, zu  $\alpha_{ende} = 0,0796$ , was 381% von  $\alpha_{krit1}$  und 56% von  $\alpha_{krit2}$  sind. Die Simulationen wurden mit denselben Fallenfrequenzen und identischen Spannungsrampen durchgeführt. Alle Simula-

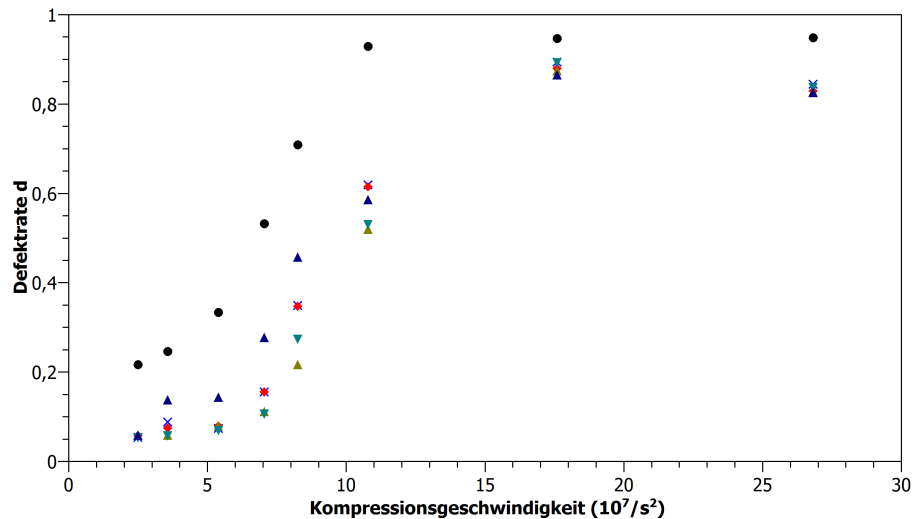


Abbildung B.2: Vergleich unterschiedlicher Parametereinstellungen.

tionen in Abbildung B.2 wurden mit einer Schrittweite von 0,1 ns und einer Dämpfung der Bewegung für die Laserkühlung während des simulierten Experiments von  $4 \cdot 10^{-21}$  durchgeführt. Die Defektrate hängt im Rahmen der Fehlerbalken nicht von der Laserdämpfung ab. Dies wurde bereits im Vorfeld durch einen Vergleich der Ergebnisse mit einer Dämpfung von  $4 \cdot 10^{-21}$  und mit einer von  $4 \cdot 10^{-22}$  getestet. Zu Beginn der Simulationen wurden die Ionen für  $8 \mu s$  mit einer erhöhten Dämpfung gekühlt, um alle Anregungen, durch zum Beispiel Anfangspositionen der Ionen, die nicht exakt symmetrisch um die Potentialmitte sind, zu beseitigen. Für die nächsten  $20 \mu s$  wurden die Ionen mit der normalen

Laserdämpfung gekühlt. Um dabei einen stetigen Übergang zu erreichen, wurden in den ersten  $0,5 \mu\text{s}$  noch keine stochastischen Stöße berechnet. Direkt nach den  $20 \mu\text{s}$  setzte die Spannungsrampe ein. Um die gesamte Dynamik der Defekte zu berücksichtigen, wurden noch weitere  $60 \mu\text{s}$  simuliert. Bei einer Verlängerung des Simulationendes auf bis zu  $300 \mu\text{s}$  wurden keine Abweichungen in der Defektrate im Vergleich zum Ergebnis bei  $60 \mu\text{s}$  beobachtet. Hierbei musste beachtet werden, dass die Amplituden der stochastischen Stöße des Verlet-Integrators richtig dimensioniert sind. Ansonsten konnte ein Zuwachs der Defektanzahl mit zunehmender Simulationszeit beobachtet werden. In Abbildung B.2 sind die Defektraten bei unterschiedlichen Einstellungen zu sehen. Dabei gehört die blaue Kurve zu Einstellungssatz 3, die rote Kurve zu Einstellungssatz 4, die dunkelgelbe Kurve zu Einstellungssatz 5, die grüne Kurve zu Einstellungssatz 6 und die dunkelblaue Kurve zu Einstellungssatz 7. Alle Parameter der verschiedenen Einstellungssätze sind in Tabelle B.1 zu sehen. Es ist zu erkennen, dass die Temperatur der Stöße keinen Einfluss auf die Defek-

Einstellungssatz	Schrittweite	Dämpfung	Anfangsdämpfungsfaktor	Temperatur
3	0,1 ns	$4 \cdot 10^{-21} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$	2000000	16 mK
4	0,1 ns	$4 \cdot 10^{-21} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$	2000000	25 mK
5	0,1 ns	$4 \cdot 10^{-21} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$	20000000	25 mK
6	0,1 ns	$4 \cdot 10^{-21} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$	20000000	16 mK
7	0,1 ns	$4 \cdot 10^{-21} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$	200000000	25 mK

Tabelle B.1: Vergleich unterschiedlicher Zeitschrittgrößen.

trate hat. Auch die Unterschiede durch verschiedene Anfangsdämpfungen haben nur einen so kleinen Einfluss auf die Defektraten, dass die Ergebnisse im Rahmen der Fehlerbalken liegen, obwohl dies zu unterschiedlichen Anfangstemperaturen des Kristalls führt. Die Abweichung zwischen den Simulationen und dem Experiment kann auf unterschiedlich große Defektraten aus den Hintergrundgasstößen zurückgeführt werden. Diese wurde hier mit 5% für die Simulationen angenommen und als Konstante dazuaddiert.

## B.2 Simulation des Anisotropieeinflusses

Um einen möglichen Einfluss der Anisotropie auf die gemessene Defekterzeugungsrate bewerten zu können, wurde eine Reihe von Simulationen mit verschiedenen Anisotropieeinstellungen und vergleichbaren weiteren Einstellungen durchgeführt. Die Einstellungen sind in Tabelle B.2 zu sehen, die Ergebnisse werden in Abbildung 3.46 dargestellt. Dabei wurden die Frequenzen im selben Bereich wie bei den Messungen eingestellt und nur die radiale Anisotropie verändert.

Einstellungssatz	Farbe	Steigung	Offset	Temperatur
1	Dunkeltürkis	0,006	107 kHz	16 mK
2	Türkis	0,275	117 kHz	25 mK
3	Hellgrün	0,931	127 kHz	25 mK
4	Grün	1,737	133 kHz	16 mK
5	Blau	2,135	137 kHz	25 mK
6	Hellorange	2,504	147 kHz	25 mK
7	Orange	2,900	157 kHz	25 mK
8	Dunkelblau	2,448	167 kHz	25 mK
9	Lila	2,125	177 kHz	25 mK
10	Dunkelrot	2,012	187 kHz	25 mK
11	Dunkelorange	2,147	197 kHz	25 mK
12	Dunkelrot	1,276	257 kHz	25 mK
13	Hellrot	0,428	357 kHz	25 mK
14	Rot	0,038	457 kHz	25 mK

Tabelle B.2: Vergleich unterschiedlicher Parametereinstellungen.

### B.2.1 Kritische Fallenfrequenzverhältnisse und Ionenpositionen

In Tabelle B.2.1 und Tabelle B.2.1 sind die kritischen Fallenparameter  $\alpha_{krit1}$  und  $\alpha_{krit2}$  für die verschiedenen Ionenanzahlen, die in den Experimenten verwendet wurden, dargestellt.

$\alpha$	5 Ionen	7 Ionen	9 Ionen	10 Ionen	11 Ionen	12 Ionen
$\alpha_{krit1}$	0,1563	0,0873	0,0565	0,0471	0,03995	0,0344
$\alpha_{krit2}$	0,9019	0,5206	0,3454	0,2908	0,2489	0,2159

Tabelle B.3: kritische Fallenparameter für fünf, sieben, neun, zehn, elf und zwölf Ionen.

$\alpha$	13 Ionen	14 Ionen	15 Ionen	16 Ionen	17 Ionen	18 Ionen
$\alpha_{krit1}$	0,0299	0,0263	0,0234	0,0209	0,0188	0,0170
$\alpha_{krit2}$	0,1894	0,1679	0,1500	0,1350	0,1222	0,1114

Tabelle B.4: kritische Fallenparameter für 13-, 14-, 15-, 16-, 17- und 18-Ionen.

Damit ergeben sich aus Gleichung 2.40 die GP in einem Sechzehn-Ionenkristall in Zickzack-Konfiguration bei Frequenzen von  $\omega_x = 2\pi \cdot 1100,9$  kHz,  $\omega_y = 2\pi \cdot 1388,8$  kHz und  $\omega_z = 2\pi \cdot 330,8$  kHz zu den, in Tabelle B.5 dargestellten GPs:

## B.2 Simulation des Anisotropieefflusses

Ion #	$u_{x,\nu}$	$u_{y,\nu}$	$u_{z,\nu}$	$r_{x,\nu}(0)$	$r_{y,\nu}(0)$	$r_{z,\nu}(0)$
Ion 1	0,03	0	-3,44	$0,11\mu m$	$0\mu m$	$-31,97\mu m$
Ion 2	-0,14	0	-2,69	$-0,50\mu m$	$0\mu m$	$-24,95\mu m$
Ion 3	0,30	0	-2,14	$1,07\mu m$	$0\mu m$	$-19,84\mu m$
Ion 4	-0,32	0	-1,77	$-1,14\mu m$	$0\mu m$	$-16,41\mu m$
Ion 5	0,31	0	-1,31	$1,11\mu m$	$0\mu m$	$-12,21\mu m$
Ion 6	-0,34	0	-0,95	$-1,21\mu m$	$0\mu m$	$-8,83\mu m$
Ion 7	0,34	0	-0,55	$1,21\mu m$	$0\mu m$	$-5,12\mu m$
Ion 8	-0,34	0	-0,19	$-1,21\mu m$	$0\mu m$	$-1,80\mu m$
Ion 9	0,34	0	0,19	$1,21\mu m$	$0\mu m$	$1,80\mu m$
Ion 10	-0,34	0	0,55	$-1,21\mu m$	$0\mu m$	$5,12\mu m$
Ion 11	0,34	0	0,95	$1,21\mu m$	$0\mu m$	$8,83\mu m$
Ion 12	-0,31	0	1,31	$-1,11\mu m$	$0\mu m$	$12,21\mu m$
Ion 13	0,32	0	1,77	$1,14\mu m$	$0\mu m$	$16,41\mu m$
Ion 14	-0,30	0	2,14	$-1,07\mu m$	$0\mu m$	$19,84\mu m$
Ion 15	0,14	0	2,69	$0,50\mu m$	$0\mu m$	$24,95\mu m$
Ion 16	-0,03	0	3,44	$-0,11\mu m$	$0\mu m$	$31,97\mu m$

Tabelle B.5: Gleichgewichtspositionen.



## **C Anhang: Liste der wissenschaftlichen Veröffentlichungen**

## **C.1 Veröffentlichungen**

### **C.1.1 Nature Communications**

07. August 2013, „Observation of the Kibble-Zurek scaling law for defect formation in ion crystals“; S. Ulm, J. Roßnagel, G. Jacob, C. Degünther, S. T. Dawkins, U. G. Poschinger, R. Nigmatullin, A. Retzker, M. B. Plenio, F. Schmidt-Kaler, K. Singer. Nat. Commun. 4:2290 doi: 10.1038/ncomms3290.

### **C.1.2 Physical Review Letters**

28. Dezember 2012, „Precise experimental investigation of eigenmodes in a planar ion crystal“; H. Kaufmann, S. Ulm, G. Jacob, U. G. Poschinger, H. Landa, A. Retzker, M.B. Plenio, F. Schmidt-Kaler. PRL 109, 263003.

### **C.1.3 New Journal of Physics**

25. September 2012, „Quantum Magnetism of Spin-Ladder Compounds with Trapped-Ion Crystals“; A. Bermudez, J. Almeida, K. Ott, H. Kaufmann, S. Ulm, U. G. Poschinger, F. Schmidt-Kaler, A. Retzker, M. B. Plenio. NJP 14, 093042 (2012).

### **C.1.4 Journal of the Optical Society of America B**

27. April 2010, „Feedback-optimized operations with linear ion crystals“; J. Eble, S. Ulm, P. Zahariev, F. Schmidt-Kaler, K. Singer. JOSA B 27, A99.

## **C.2 Vorträge**

### **C.2.1 ECTI III**

Mainz, 15.-19. September 2014, „Observation of the Kibble-Zurek scaling law and stability of defects in ion crystals“; S. Ulm, K. Groot-Berning, G. Jacob, J. Roßnagel, C. Degünther, S.T. Dawkins, U.G. Poschinger, O. Estrada, K. Singer, F. Schmidt-Kaler, R. Nigmatullin, A. Retzker, M. B. Plenio.

### **C.2.2 Workshop on Quantum Gases, Fluids and Solids**

São Carlos, 14.-17. August 2014, „Moving ions“; S. Ulm, K. Groot-Berning, J. Roßnagel, G. Jacob, N. Tolazzi, O.Estrada, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.



### **C.2.3 DPG-Frühjahrstagung**

Berlin, 17.-21. März 2014, „Stabilität von Defekten in Ionenkristallen und experimentelle Bestimmung des Peierls-Nabarro Potential“; S. Ulm, K. Groot-Berning, J. Roßnagel, G. Jacob, O. Estrada, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

### **C.2.4 DPG-Frühjahrstagung**

Hannover, 18.-22. März 2013, „Präzise Vermessung des Kibble-Zurek Mechanismus in Ionenkristallen“; S. Ulm, J. Roßnagel, G. Jacob, C. Degünther, S.T. Dawkins, U.G. Poschinger, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

### **C.2.5 DPG-Frühjahrstagung**

Hannover, 08.-12. März 2010, „Feedback-optimierte Operationen mit linearen Ionenkristallen“; S. Ulm, J. F. Eble, P. Zahariev, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

## **C.3 Poster**

### **C.3.1 IonTech2: Techniques for Trapped Ions**

Paris, 23.-25. Oktober 2013, „Precise measurement of the Kibble-Zurek mechanism in ion crystals“; S. Ulm, J. Roßnagel, G. Jacob, C. Degünther, S.T. Dawkins, U.G. Poschinger, R. Nigmatullin, A. Retzker, M.B. Plenio, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

### **C.3.2 ECTI II**

Obergurgl, 10.-14. September 2012, „Experimental and theoretical studies of planar zigzag ion crystals“; S. Ulm, H. Kaufmann, J. Roßnagel, G. Jacob, S. Wolf, K. Ott, S. Dawkins, T. Feldker, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

### **C.3.3 DPG-Frühjahrstagung**

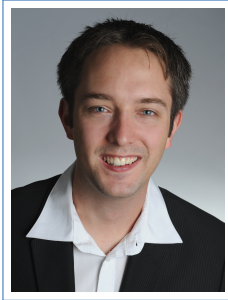
Stuttgart, 12.-16. März 2012, „Experimentelle und theoretische Untersuchung von Zickzack-Ionenkristallen“; H. Kaufmann, S. Ulm, G. Jacob, S. Dawkins, T. Feldker, F. Schmidt-Kaler, K. Singer.

#### **C.3.4 DPG-Frühjahrstagung**

Dresden, 13.-18. März 2011, „Fallendesignstudien für eine deterministische hochauflösende Einzelionenquelle“; Georg Jacob, Stefan Ulm, Andreas Kehlberger, Stefan Weidlich, Ferdinand Schmidt-Kaler, Kilian Singer.



Abbildung C.1: Aristoteles: „Freude an der Arbeit lässt das Werk trefflich geraten.“. Bild entnommen aus [CFVI19]



Stefan Ulm

---

## — Persönliche Daten

Geburtsdatum 13. Oktober 1983  
Geburtsort Ulm  
Familienstand verheiratet  
Nationalität deutsch

## — Berufstätigkeit

Seit 2018 AKKA DSW GmbH  
Teamleiter Embedded Software  
Schwerpunkt: Projektleitung, System-Architekt, Disziplinarische und Fachliche Führung von Mitarbeitern und Studenten

2015-2018 Gigatronik Technologies GmbH  
Entwickler im Bereich Embedded Software  
Schwerpunkt: Bootloader Entwicklung, AUTOSAR, Diagnose-tools

2010-2015 Johannes-Gutenberg-Universität Mainz  
Promotion in der Physik  
Schwerpunkt: Atom- und Laserphysik sowie Quantenoptik

## — Schulausbildung und Wehrdienst

2004–2010 Universität Ulm Studiengang Diplom Physik  
Thema der Abschlussarbeit: Spektroskopie gemischter Ionenkristalle

2003–2004 Wehrdienst im IT-Zug 2./FMBTL 210 HE

1994–2003 Kepler Gymnasium Ulm

1990–1994 Grundschule Offenhausen

*Dornierstraße 2 – 89231 Neu-Ulm*  
✉ *ulmst@uni-mainz.de*