
Quanteninformationsverarbeitung mit Ionenkristallen in einer Penningfalle

Jens Domagoj Baltrusch



ulm university universität
uulm

J. D. Baltrusch

Quanteninformationsverarbeitung mit
Ionenkristallen in einer Penningfalle

Diplomarbeit

Quanteninformationsverarbeitung mit Ionenkristallen in einer Penningfalle

Jens Domagoj Baltrusch

Diplomarbeit
an der Fakultät für
Naturwissenschaften
der Universität Ulm

Vorgelegt von
Jens Domagoj Baltrusch

Ulm, den 13. November 2008

Autor:

Jens Baltrusch
Institut für Quanten-
informationsverarbeitung
Universität Ulm
Albert-Einstein Allee 11
89069 Ulm
GERMANY
`jens.baltrusch@uni-ulm.de`

Diplomarbeit angefertigt an der
Fakultät für Naturwissenschaften
Universität Ulm
© 2008

ERSTGUTACHTER: Prof. T. Calarco
ZWEITGUTACHTER: Prof. M. Freyberger

ERKLÄRUNG ZUR DIPLOMARBEIT:

Hiermit erkläre ich, dass ich Diplomarbeit eigenständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Jens Domagoj Baltrusch
Ulm, 13. November 2008



Zusammenfassung

Gefangene Ionen stellen ein vielversprechendes System für die Realisierung eines Quantencomputers dar. Die Qubits werden in den internen Energieniveaus der Ionen gespeichert. Die in ihnen enthaltene Quanteninformation kann mit Laserlicht geeigneter Polarisation und Frequenz manipuliert werden. Die Implementierung von Zwei-Qubit-Gattern wird mit Hilfe der kollektiven Bewegungsmoden der Ionen durchgeführt. Diese grundlegenden Bausteine eines Quantenprozessors wurden schon experimentell in linearen Paulfallen realisiert, jedoch ist eine einfache Vergrößerung der Zahl der Qubits wegen auftretender Dekohärenzeffekte nicht möglich. Die experimentellen und theoretischen Bemühungen konzentrieren sich derzeit deshalb darauf, einen skalierbaren Ansatz für die Realisierung eines Quantencomputers zu finden.

In Penningfallen können bis zu 10^6 Ionen gefangen werden, die unter geeigneten Bedingungen in einem zweidimensionalen Gitter mit hexagonaler Struktur kristallisieren. Durch die gegenseitige Coulomb-Abstoßung sind die Abstände in der Größenordnung von $10\text{ }\mu\text{m}$, so dass der Quantenzustand einzelner Ionen direkt mit stark fokussierten Laserstrahlen manipuliert werden kann. Aufgrund der Modenstruktur kann der Kristall jedoch nicht soweit gekühlt werden, dass einzelne Schwingungsmoden auflösbar sind. Deswegen wurden große Ionenkristalle in einer Penningfalle lange Zeit nicht für Zwecke der Quanteninformationsverarbeitung in Betracht gezogen. Jedoch gibt es neue Vorschläge zu einer Umsetzung eines Zwei-Qubit-Gatters, die robust sind gegenüber hohen Besetzungen der Schwingungsmoden, so dass diese Kristalle für die Quanteninformationsverarbeitung interessant werden.

Notwendig für die folgenden Überlegungen ist deswegen zunächst ein gründliches Verständnis, welchen Randbedingungen gefangene Ionen in einer Penningfalle unterliegen. Beginnend mit der Analyse der Einzelteilchendynamik werden in dieser Arbeit die wichtigsten Eigenschaften der Ionen in der Falle besprochen, so unter anderem der Bereich erlaubter Rotationsfrequenzen, die Anforderungen an die Kristallisation, und die Kristallstruktur der Ionen in Abhängigkeit der gewählten Parameter.

Die Simulation der Gatteroperation benötigt eine Bestimmung der Bewegungsmoden in den Normalkoordinaten. Diese werden durch eine quadratische Entwicklung des Hamil-

tonoperators um die Gleichgewichtspositionen und einer kanonischen Koordinatentransformation ermittelt. Diese Transformation wurde jedoch bisher nur unter Vernachlässigung der Kopplung zwischen den Impulsen und Koordinaten der Ionen durchgeführt, die durch das Magnetfeld der Falle hervorgerufen wird. Eine Berücksichtigung der Kopplung stellt weitere Anforderungen an die Transformation, so dass diese nicht einfach ermittelt werden kann.

In dieser Arbeit wurden die Gleichgewichtspositionen der Ionen durch eine numerische Bestimmung der Minimumsenergie und unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Gesamtdrehimpulses ermittelt. Bei der Minimierung wurde auch die Rotationsgeschwindigkeit der Ionen bestimmt und die starre Rotation der Ionen nachgewiesen. Dabei wurden die Berechnungen für verschiedene Parameterbereiche ausgeführt. Bei einer geeigneten Wahl der Parameter können dabei auch strukturelle Phasenübergänge in Abhängigkeit des Gesamtdrehimpulses durchlaufen werden, wie anhand eines Beispiels dargestellt wurde.

Bei der Bestimmung der Normalmoden ist der entscheidende Schritt die Entkopplung der Koordinaten und Impulse durch eine kanonische Transformation. Dazu wurden zunächst die Eigenschaften kanonischer Transformationen näher untersucht, um daraus Schlüsse für die Form der gesuchten Transformation zu ziehen. Die Normalmoden wurden dann für zwei Ionen in Abhängigkeit der Rotation des Plasmas bestimmt und dargestellt. Für größere Ionenzahlen ist die Bestimmung dieser Transformation für beliebige Rotationsfrequenzen nicht möglich, so dass hierfür eine neue Methode zur Bestimmung der Normalkoordinaten gefunden werden muss.

Abschließend wurde die Umsetzung des Gatters mit Hilfe der Dipolkraft diskutiert. Diese wirkt auf ein Atom in einem Intensitätsgradienten eines Laserfeldes, dessen Frequenz gegenüber einem atomaren Übergang verstimmt ist. Dabei wurde untersucht, unter welchen Umständen sich eine zustandsabhängige Kraft realisieren lässt, und wie diese sich mit den weiteren Anforderungen an das Gatter in Einklang bringen lässt.

Für die Geduld und Unterstützung meiner Eltern.

Vorwort

Gefangene Ionen spielen in verschiedenen Teilgebieten der Physik eine Rolle. Viele der ursprünglichen Untersuchungen mit Ionen in Penningfallen stammen aus der Plasma-physik, jedoch gibt es zunehmend mehr Berührungspunkte mit der Atom-, Molekül- und optischen Physik aufgrund von Experimenten zur Hochpräzisionsspektroskopie oder zu der Weiterentwicklung von Atomuhren. Eine genaue Untersuchung der Modenstruktur eines Ionenkristalls wurde jedoch bis jetzt nicht durchgeführt, da in diesen Gebieten die statistische Beschreibung des Systems im Rahmen der Theorie einkomponentiger Plasmen ausreichend ist. Ein anderes Beispiel sind typische Experimente in der Quantenin-formation, die mit einigen, wenigen Ionen durchgeführt werden, da der Quantenzustand der Ionen gezielt manipuliert wird. Die meisten Untersuchungen beziehen sich dabei auf Ionenkristalle in linearen Paulfallen. Während die Bewegung der gefangenen Ionen in Paulfallen harmonisch, und damit einfach zu beschreiben ist, hat die Bewegung der Ionen in einer Penningfalle eine komplizierte Struktur. Deswegen ist die Untersuchung von Ionenkristallen in Penningfallen im Rahmen der Quanteninformation eher ungewöhnlich. So schließt die Untersuchung von Ionenkristallen in einer Penningfalle eine Lücke zwischen verschiedenen Gebieten der Physik.

Diese Arbeit entstand unter der Betreuung von Prof. Dr. Tommaso Calarco und in Zusammenarbeit mit Dr. Jacob Taylor vom Massachusetts Institute of Technology, der während der Zeit meiner Diplomarbeit unser Institut mit mehreren Besuchen beehrt hat. In den gemeinsamen Gesprächen entstanden viele wertvolle Ideen, die den Weg in diese Arbeit gefunden haben.

Kapitel 1 gibt zunächst eine kurze Einführung in einige wesentliche Prinzipien der Quanteninformationsverarbeitung. Danach wird die grundlegende Idee für die Implementierung eines Quantencomputers in einem Ionenkristall in einer Penningfalle vorgestellt, und die weitere Vorgehensweise motiviert.

In Kapitel 2 werden die wichtigsten physikalischen Eigenschaften von Ionen in einer Penningfalle dargestellt. So besprechen wir zunächst den Aufbau und die Funktionsweise einer Penningfalle für ein einzelnes Teilchen, bevor wir uns der Beschreibung von Ionenplasmen zuwenden. So werden wichtige Eigenschaften wie Rotation und Dichte des

Plasmas besprochen, und anschließend Methoden zur Kühlung des Plasmas vorgestellt. Das Kapitel schließt mit einer Diskussion der verschiedenen thermodynamischen und strukturellen Phasenübergänge.

Die Bestimmung der Normalmoden des Ionenkristalls wird in Kapitel 3 untersucht. Zunächst werden die Gleichgewichtspositionen der Ionen in bestimmt, und die Ergebnisse bei unterschiedlichen Parametern diskutiert. So wird auch der Bereich eines strukturellen Phasenübergangs besprochen. Die weitere Diskussion widmet sich dann der Bestimmung der Normalmoden. Dazu werden zunächst die Anforderungen an die Transformation zur Bestimmung der Normalmoden genauer angegeben. Für zwei Ionen wird die Transformation ermittelt, und die Moden und Teilchentrajektorien werden dargestellt. Abschließend wird noch ein Ansatz zur Bestimmung der Transformation für viele Teilchen skizziert.

Kapitel 4 beginnt mit der Erklärung des Phasengatters. Es werden dann verschiedene Gattertypen vorgestellt, die sich trotz einer hohen Besetzung der Phononenmoden implementieren lassen. Dann wird die Umsetzung eines dieser Gatters mit Hilfe der Dipolkraft besprochen.

Kapitel 5 fasst die Ergebnisse der Diplomarbeit zusammen, und gibt einen Ausblick auf noch offene Fragestellungen und zukünftige Forschungsarbeiten mit Ionenkristallen in einer Penningfalle.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	VII
Vorwort	XI
Inhaltsverzeichnis	XII
1 Einführung und Motivation	1
2 Ionenkristalle in einer Penningfalle	9
2.1 Funktionsweise der Penningfalle	9
2.1.1 Aufbau	9
2.1.2 Einzelteilchendynamik	11
2.2 Ionenplasmen	16
2.2.1 Rotation und Dichte des Plasmas	16
2.2.2 Eigenschaften des Ionenplasmas bei höheren Temperaturen	23
2.2.3 Kühlen des Plasmas	25
2.3 Phasenübergänge des Ionenplasmas	27
2.3.1 Thermodynamische Phasenübergänge	27
2.3.2 Strukturelle Phasenübergänge	29
3 Bestimmung der Normalmoden	33
3.1 Bestimmung der Gleichgewichtskonfiguration	34
3.1.1 Bereich ohne Phasenübergang	34
3.1.2 Bereich mit Phasenübergang	41
3.2 Quadratische Entwicklung des Hamiltonoperators	43
3.3 Normalmodentransformation	45
3.3.1 Kanonische Transformationen	46
3.3.2 Schema der Diagonalisierung	49
3.4 Normalmoden für zwei Ionen	53
3.4.1 Normalmoden bei Rotation mit halber Zyklotronfrequenz	54
3.4.2 Normalmoden bei Rotation nahe der halben Zyklotronfrequenz	58
3.4.3 Normalmoden bei Rotation nahe der minimalen Rotationsfrequenz	63
3.5 Normalmodentransformation für größere Ionenzahlen	66

4 Realisierung des Gatters	69
4.1 Schema eines Phasengatters in Gegenwart von Phononen	70
4.1.1 Das Phasengatter - Funktionsweise	70
4.1.2 Ein robustes Phasengatter - push gate	71
4.1.3 Adiabatisches Gatter	75
4.1.4 Schnell-moduliertes Gatter	76
4.2 Umsetzung des Gatters	77
4.2.1 Schema der Umsetzung	78
4.2.2 Magnetfeldaufspaltung	80
4.3 Berechnung der Dipolkräfte	83
4.3.1 Anforderungen an die Dipolkraft	83
4.3.2 Berechnung der Energieverschiebungen	84
4.3.3 Berechnung der Kopplungsstärken	87
4.3.4 Dipolkräfte in Abhängigkeit des eingestrahnten Lichtes	88
4.4 Mögliche Gatterausführungen	92
4.4.1 Gatter mit gleichgerichteter Polarisation	92
4.4.2 Gatter mit entgegengesetzter Polarisation	94
4.4.3 Variante des Gatters mit entgegengesetzter Polarisation	95
5 Ausblick	99
Literaturverzeichnis	109
Abbildungsverzeichnis	112
Tabellenverzeichnis	113

Einführung und Motivation

Das Feld der Quanteninformation ist neben der Erforschung ultrakalter Quantengase sicherlich das am schnellsten expandierende Forschungsgebiet im Feld der Atom-, Molekül- und optischen Physik, und vielleicht sogar darüber hinaus (siehe z.B. Nielsen und Chuang [2000]). Der Entwicklung eines Quantencomputers kommt dabei eine tragende Rolle zu. Die ersten Ideen zur Quantensimulation wurden schon vor circa 25 Jahren von Richard P. Feynman formuliert [Feynman, 1982], eine systematische Untersuchung wurde dann aber erst später vor allem von David Deutsch begonnen, der das Konzept der Quanten-Turing-Maschine definiert hat [Deutsch, 1985]. Weiteren Auftrieb bekam das Feld nach der Veröffentlichung von Peter Shors Algorithmus zur Faktorisierung großer Zahlen [Shor, 1994], dessen Bedeutung man sich an Hand der darauf basierenden asymmetrischen Verschlüsselungstechnik und deren heutigen Verbreitung in Internet- und Telefonnetzwerken oder bei bargeldlosen Bezahlungssystemen klarmachen kann. Heute scheint die Realisierung eines Quantencomputers mit gefangenen Ionen nicht mehr unerreichbar, dessen Grundlagen erstmals von Ignacio Cirac und Peter Zoller [Cirac und Zoller, 1995] formuliert wurde.

Quantencomputer - ein kurzer Überblick

In Gesprächen über meine Diplomarbeit taucht von Laien immer wieder die Frage auf, was denn nun genau der Unterschied zwischen einem normalen (klassischen) Computer und einem Quantencomputer sei. Nun, der Unterschied rührt von den Grundeigenschaften der Quantenmechanik her: Ein Quantencomputer kann zusätzlich auf die Eigenschaften der *Superposition* und *Verschränkung* zweier Zustände zurückgreifen, die auslesbare Information ist jedoch durch den quantenmechanischen *Messprozess* beschränkt. Im Folgenden sollen die Unterschiede gegenüber einem klassischen Computer genauer beschrieben werden.

Ein klassischer Computer rechnet mit Bits und speichert seine Information in ihnen.

Diese können dabei die beiden logischen Zustände 0 und 1 einnehmen. In einem Quantencomputer dagegen wird die Information in *Qubits* gespeichert, einem quantenmechanischen System, welches nach einer Messung nur die beiden Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ annehmen kann. Die Information kann ebenfalls nur in diesen beiden Zuständen präpariert und ausgelesen werden, aber während eines Algorithmus kann das System eben auch Zustände einnehmen, die aus der *Superposition* der beiden Qubits bestehen: $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, wobei α und β komplexe Zahlen sind mit der Bedingung $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Es ist dabei zu betonen, dass der Quantenzustand nicht mehr Ressourcen zur Speicherung der Information dieses Superpositionszustandes benötigt als zur Speicherung eines der beiden Qubits alleine. In einem Qubit können also zwei Zahlen gespeichert werden¹, und in einem System von 100 Qubits lassen sich folglich in einer geeigneten Superposition 2^{100} verschiedene Zahlen speichern - eine Informationsmenge, die für klassische Computer unvorstellbar ist. Es ist zu betonen, dass in einer Menge an Qubits nicht mehr Information gespeichert werden kann als in der gleichen Anzahl klassischer Bits, vielmehr ist dieser zusätzliche Speicherplatz nur während der Durchführung eines Algorithmus zugänglich.

Als unmittelbare Folge der Linearität der Quantenmechanik wirkt eine einzige Operation U auf alle Teile eines Superpositionszustandes oder eines verschränkten Zustandes *gleichzeitig*: $U(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha U|0\rangle + \beta U|1\rangle$. Dies gilt auch für einen Superpositionszustand oder verschränkten Zustand von N Qubits, welcher mit einer überschaubaren Anzahl an Operationen (in der Größenordnung von N) präpariert werden kann.

Am Ende eines jeden Algorithmus können wir aber nur auslesen, ob sich ein Qubit im Zustand $|0\rangle$ oder im Zustand $|1\rangle$ befindet, da die Superposition beim Messprozess verloren geht. Der Algorithmus muss also die riesige Menge der Zwischenergebnisse zurück auf ein messbares Ergebnis bringen. Dies kann mit Hilfe der *Interferenz* von Quantenzuständen umgesetzt werden. Der Quantencomputer kann also für Algorithmen vorteilhaft genutzt werden, die eine große Anzahl an Zwischenergebnissen vorhalten, aber am Ende zu einem einfachen Ergebnis führen. Die Interferenz von vielen Superpositionszuständen ist natürlich höchst sensitiv gegenüber Fehlern und Ungenauigkeiten bei der experimentellen Ausführung des Algorithmus, woran wir auch schon eine der Schwierigkeiten bei der experimentellen Realisierung eines Quantencomputers sehen.

Das Paradebeispiel eines solchen Algorithmus ist der von Peter Shor gefundene Algorithmus zur Faktorisierung großer Zahlen sowie zur Bestimmung des diskreten Logarithmus [Shor, 1994]. Klassisch wächst die benötigte Rechenzeit exponentiell mit der Größe der Zahl, mit Shors Algorithmus dagegen benötigt man nur noch eine polynomielle Rechenzeit - eine ungeheure Verbesserung. In der Folge wurden noch weitere vorteilhafte Algorithmen gefunden, wie etwa der Grover-Algorithmus² zur Suche in Datenbanken

¹auch wenn diese nicht direkt ausgelesen werden können.

²allerdings hat dieser Algorithmus „nur“ eine quadratische Verbesserung hinsichtlich der Rechenzeit zur Folge, was allerdings bei großen Datenbanken immer noch sehr vorteilhaft ist.

[Grover, 1996], mit denen wir uns hier jedoch nicht weiter beschäftigen werden.

So wurden notwendige Kriterien für die experimentelle Realisierung eines Quantencomputers aufgestellt [DiVincenzo, 2000], die wir hier kurz inhaltsgetreu wiedergeben möchten:

1. **Qubits:** Wir benötigen ein physikalisches System mit wohldefinierten Qubits, die auch in Superpositionszuständen und verschränkten Zuständen präpariert werden können. Der Zustand von N Qubits lässt sich dann wie folgt beschreiben:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k_1, \dots, k_N=0}^1 |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \otimes \dots \otimes |k_N\rangle \quad (1.1)$$

Oft werden zur Vereinfachung der Notation die Tensorproduktsymbole \otimes weggelassen, und es wird einfach $|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle$ geschrieben. Um die Eigenschaft der Superposition für die Algorithmen der Quanteninformationsverarbeitung nutzen zu können, müssen die Qubits zudem von störenden Einflüssen der Umgebung abgeschirmt werden, sie benötigen also hinreichend lange Dekohärenzzeiten.

2. **Präparieren:** Man benötigt die Möglichkeit, die Qubits mit Wahrscheinlichkeit gleich 1 in einen bestimmten Anfangszustand zu initialisieren, z.B. alle Qubits werden im Zustand $|0\rangle$ präpariert.
3. **Menge universeller Quantengatter:** Für die kontrollierte Manipulation der Qubits benötigen wir die Möglichkeit der Durchführung von unitären Operationen U auf $|\Psi\rangle$. Es lässt sich zeigen [Barenco u. a., 1995], dass jedes beliebige U sich zerlegen lässt in eine Folge bestehend ausschließlich aus Gattern zugehörig einer Menge universeller Quantengatter. Können wir also die Gatter dieser Menge durchführen, so können wir jede beliebige Rechenoperation als eine Folge dieser Teiloperationen durchführen. Weiter kann man zeigen, dass alle Mengen dieser universellen Quantengatter äquivalent zueinander sind, üblicherweise bestehen diese aus einem *Zwei-Qubit-Gatter* sowie zusätzlich einer bestimmten Menge an *Ein-Qubit-Gattern*. Es sei bemerkt, dass die Implementierung der Zwei-Qubit-Gatter in der Regel der bedeutend schwierigere Teil ist, da diese eine zustandsabhängige Wechselwirkung zweier Qubits miteinander erfordern. Dies bedeutet aber auch, dass jegliche andere Wechselwirkung mit den restlichen Qubits oder der Umgebung vermieden werden muss, da sonst die Zwei-Qubit-Operation nicht mehr reversibel, also auch nicht mehr unitär ist.
4. **Auslesen:** Um ein Ergebnis des Algorithmus zu erhalten, benötigt man eine Möglichkeit, den Zustand nach Beendigung des Algorithmus auszulesen, also eine Messung des physikalischen Zustandes. Dies ist aber eine irreversible Projektion (eine nicht-unitäre Operation) des Zustandes jedes einzelnen Qubits auf seine ortho-

gonale Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, bei der mögliche Superpositionszustände verloren gehen³. Bei der Messung erhalten wir also nur die binäre Information (haben aber natürlich trotzdem den Vorteil, alle möglichen Superpositionszustände während des Algorithmus zu nutzen).

5. **Skalierbarkeit:** Der Aufwand um Quantengatter durchzuführen, Messungen zu machen usw. darf nicht exponentiell mit der Anzahl der Qubits wachsen, um die Vorteile der Quantenalgorithmen nicht zunichte zu machen. Insbesondere dürfen die Fehler bei der Durchführung der Operationen nicht exponentiell mit der Anzahl der Qubits wachsen. Die Durchführung einer Quanten-Fehlerkorrektur [Shor, 1995; Steane, 1996] gewährleistet dies, so lange die Fehler einzelner Operationen unter einer gewissen Fehlerschwelle in der Größenordnung von 10^{-4} liegen.

Insbesondere die letzte Anforderung stellt für die experimentelle Umsetzung eines Quantencomputers eine große Herausforderung dar. Die im System enthaltene Information muss während der Rechnung vor äußeren Störeinflüssen geschützt bleiben, weswegen die experimentellen Methoden besser werden, um die Qubits besser vor dem Einfluß der Umgebung zu schützen und die Information sensitiver zu messen.

Ionenfallen-Quantencomputer

In der Vielzahl aller für die Umsetzung eines Quantencomputer vorgeschlagenen physikalischen Systeme sind in elektromagnetischen Fallen gefangene ionisierte Atome zur Zeit eines der vielversprechendsten. Die experimentellen Techniken zur Kontrolle und Manipulation des Quantenzustandes einzelner Ionen (oder allgemeiner Atomen) sind dabei in den in den Gebieten der Präzisionsspektroskopie und der Atomuhren entwickelt worden, mit denen heutzutage die genauesten Messungen erzielt werden [Wineland u. a., 1983; Blatt u. a., 1992; Thompson u. a., 1997; Leibfried u. a., 2003a]. Die gleichen Techniken können dabei auch für die Manipulation einzelner Ionen im Rahmen der Quanteninformation genutzt werden. Die Qubits bestehen dabei aus zwei internen Energieniveaus eines ionisierten Atoms, so beispielsweise aus verschiedenen Niveaus der Zeemanaufspaltung oder Hyperfeinstruktur des Grundzustandes oder anderer metastabiler Zustände, die faktisch sehr lange Dekohärenzzeiten aufweisen. Ionenfallen arbeiten zudem im Ultrahochvakuum, so dass eine Wechselwirkung mit der Umgebung weitestgehend vermieden wird, und nur noch auf Stöße mit Restgasatomen, ungewollten Hintergrundfeldern, Ladungsschwankungen und Bildladungen auf den Elektroden reduziert wird.

Die Präparation der Qubits erfolgt mit Hilfe der Technik des optischen Pumpens. Dabei wird ein Laser resonant zu einem Übergang vom Zustand $|1\rangle$ in einen Hilfszustand $|h\rangle$ eingestrahlt. $|h\rangle$ ist ein weiteres Energieniveau des Atoms, das jedoch nur eine kurze

³Natürlich ist es möglich, die Koeffizienten α und β aufwändig durch mehrere Messungen in wiederholten Experimenten über die Bornsche Regel annähernd zu bestimmen.

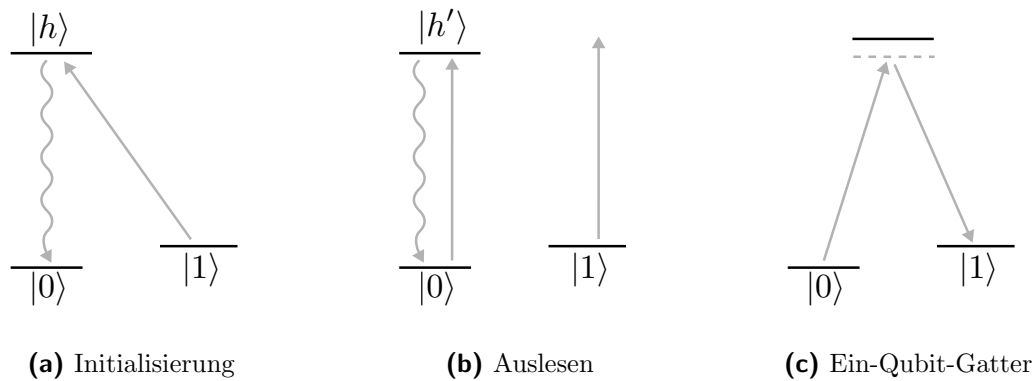


Abbildung 1.1: Initialisierung eines Qubits in Atomen oder Ionen (a) im Zustand $|0\rangle$ geschieht mit Hilfe der Technik des optischen Pumpens. Dabei wird mit einem starken Laser der Übergang von $|1\rangle$ nach $|h\rangle$ getrieben, von wo aus jede Population schnell in $|0\rangle$ zerfällt. Das Auslesen der Quanteninformation (b) geschieht mit einem stark getriebenen Übergang von $|0\rangle$ erneut in ein Hilfsniveau $|h'\rangle$, das wieder rasch in den Grundzustand $|0\rangle$ zerfällt. Detektiert man Fluoreszenzlicht, so weiß man mit Sicherheit, dass das System sich im Zustand $|0\rangle$ befindet. Ein-Qubit-Operationen (c) werden in der Regel mit Hilfe von Zwei-Photon-Raman-Übergängen realisiert, mit denen Rabi-Oszillationen zwischen den beiden Zuständen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ getrieben werden.

Lebensdauer aufweist, so dass das Atom nach Anregung in den Zustand $|h\rangle$ sofort in den Zustand $|0\rangle$ zerfällt. Nach kurzer Zeit wurde die gesamte Population des Zustandes $|1\rangle$ so in den Zustand $|0\rangle$ „gepumpt“.

Für das Auslesen benötigt man erneut ein Hilfsniveau $|h'\rangle$, welches eine Übergangsfrequenz von $|0\rangle$ nach $|h'\rangle$ hat, so dass es keinen entsprechenden Übergang von $|1\rangle$ in ein anderes, höheres Energieniveau mit der gleichen Frequenz gibt. Der Zustand $|h'\rangle$ soll dabei erneut schnell in den Zustand $|0\rangle$ zerfallen. Befindet sich das Qubit also im Zustand $|1\rangle$ und man strahlt mit dem Laser dieser Frequenz ein, so gibt es keinen resonanten Übergang zu einem höheren Energieniveau, und das Atom bleibt im Zustand $|1\rangle$. Befindet es sich dagegen im Zustand $|0\rangle$, so wird es in das Niveau $|h'\rangle$ gehoben, von wo es Photonen sowohl zurück in die Lasermode (stimulierte Emission) als auch in alle Raumrichtungen emittieren kann (spontane Emission), wodurch es mit einem optischen System detektiert werden kann⁴.

Ein-Qubit-Operationen werden durch Adressierung einzelner Qubits durch stark fokussierte Laserstrahlen realisiert, mit denen Rabi-Oszillationen getrieben werden. In der Regel geschieht dies mit Hilfe von Raman-Übergängen. Zwei-Qubit-Operationen benötigen dagegen wie bereits erwähnt eine Wechselwirkung der Ionen untereinander, die

⁴Deswegen ist die kurze Lebensdauer des Niveaus wichtig, um ein starkes Signal zu erhalten.

zudem abhängig von dem Zustand mindestens eines Qubits sein muss. In den bisherigen Vorschlägen zur Umsetzung eines Ionen-Quantencomputers wird diese mit der Hilfe der externen Freiheitsgrade umgesetzt, so dass eine Untersuchung der Bewegungsmoden der gefangenen Moden notwendig ist.

Paulfallen vs. Penningfallen

Während in Paulfallen eine erste experimentelle Realisierung einzelner Bausteine eines Quantencomputers bereits erfolgreich umgesetzt wurde, einschließlich der Demonstration eines Zwei-Qubit-Gatters [Leibfried u. a., 2003b; Schmidt-Kaler u. a., 2003], bleibt die Frage nach der Skalierung des Systems bis jetzt noch ungelöst. So gibt es zwar Vorschläge zur Vergrößerung des Systems wie etwa die Verwendung von Arrays aus Mikrofallen [Cirac und Zoller, 2000] oder die Auftrennung des Quantencomputers in eine Prozessor- und eine Speicherregion [Kielpinski u. a., 2002], jedoch treten dadurch andere Probleme auf wie etwa das schnelle, kohärente Transportes eines Ions von einer in eine andere Region des Quantencomputers [Reichle u. a., 2006; Huber u. a., 2008].

Eine Möglichkeit, um eine größere Anzahl an Ionen für Quanteninformationsverarbeitung zu nutzen, wäre die Ausweitung der bisherigen Konzepte und Techniken auf höhere Dimensionen. So lassen sich zweidimensionale Ionenkristalle in Paulfallen beobachten [Diedrich u. a., 1987; Walther, 1994], man stellt aber fest, dass die Stabilität größerer Kristalle durch ein Aufheizen der Ionen aufgrund der von der Radiofrequenz (RF) getriebenen Mikrobewegung limitiert ist [Blümel u. a., 1988]. So konnte beispielsweise im Inneren eines Plasmas aus 40 000 $^{40}\text{Ca}^+$ -Ionen keine kristalline Struktur nachgewiesen werden [Hornekær und Drewsen, 2002]. Zudem sind durch Ladungsfluktuationen hervorgerufene, zeitlich veränderliche Potentiale auf den Elektrodenoberflächen eine Ursache für Dekohärenzeffekte. Zwar sind diese bei den bisherigen Fallen noch in einer vertretbaren Größenordnung, jedoch skaliert die Stärke dieser Dekohärenzeffekte sehr stark mit der Fallengröße [Deslauriers u. a., 2006; Turchette u. a., 2000], die ja zur besseren Kontrolle der Ionen immer weiter verringert wird.

Im Gegensatz zu Paulfallen benutzen Penningfallen nur *statische* elektrische und magnetische Felder für den Teilcheneinschluß. Deshalb können in Penningfallen einfach sehr große Ionenkristalle ($N > 10^6$) gefangen und gekühlt werden, da die Ionen nicht durch RF-Felder aufgeheizt werden. Entlang der Magnetfeldachse ist die Bewegung von Ionen in einer Penningfalle eine einfach harmonische Schwingung, die Bewegung in der dazu senkrechten radialen Ebene ist jedoch komplizierter (bei der Paulfalle ist die Bewegung in alle drei Raumrichtungen näherungsweise harmonisch). Dadurch werden kompliziertere Aufbauten für die Laserkühlung erforderlich, welche zudem aufgrund der großen Zeeman-Aufspaltung der atomaren Energieniveaus in den hohen Magnetfeldern (etwa 1 bis 5 Tesla) der Falle eine sorgfältigere Untersuchung benötigen, so dass es bisher kaum Experimente im Rahmen der Quanteninformationsverarbeitung mit Penningfallen gibt.

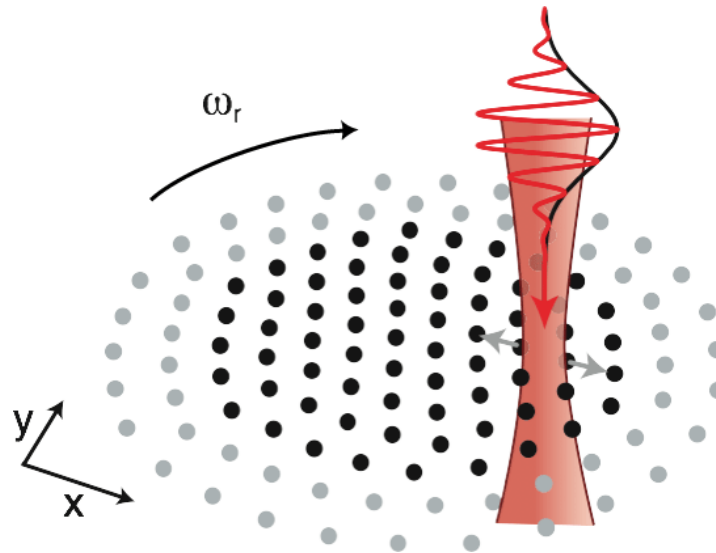


Abbildung 1.2: Planarer Ionenkristall mit hexagonaler Gitterstruktur in einer Penningfalle. Der Kristall rotiert mit der Frequenz ω_r . Ein Zwei-Qubit-Gatter soll nun mit Hilfe eines amplitudenmodulierten Lasers implementiert werden, welcher zwischen zwei Ionen senkrecht zur radialen Ebene fokussiert wird. Die Abbildung wurde aus [Taylor und Calarco, 2007] entnommen.

So gibt es einen Vorschlag zu miniaturisierten, planaren Penningfallen [Ciaramicoli u. a., 2003; Stahl u. a., 2005; Bushev u. a., 2008], und auch theoretische Vorschläge zur Verwendung von großen Ionenkristallen in Penningfallen für Quantensimulation und Quanteninformationsverarbeitung [Porras und Cirac, 2006; Taylor und Calarco, 2007], sowie neuere experimentelle Untersuchungen von Zwei-Ionen-Kristallen in einer Penningfalle [Crick u. a., 2008].

Quanteninformationsverarbeitung mit Ionenkristallen in einer Penningfalle

Wir wollen im Folgenden beruhend auf den Vorschlägen von Porras und Cirac sowie Taylor und Calarco skizzieren, wie sich zweidimensionale Ionenkristalle für die Quanteninformationsverarbeitung verwenden lassen. Ein in einer Penningfalle gefangenes Plasma aus Ionen rotiert im Magnetfeld der Falle. Mit Hilfe eines Kühllasers sowie mit zusätzlichen rotierenden asymmetrischen elektrischen Wechselfeldern kann die Rotation des Plasmas reduziert und kontrolliert werden [Huang u. a., 1998]. Mittels Laserkühlung erreicht man den Bereich weniger Millikelvin, so dass das Plasma sich zu einem Ionenkristall formiert, welcher bei geeignet gewählter Elektrodenspannung und Rotationsfrequenz ein zweidimensionales Gitter mit hexagonaler Struktur bildet. Typische Gitterabstände sind in der Größenordnung von $10 \mu m$, so dass mit Hilfe eines senkrecht zur Kristallebene eingestrahlten Lasers eine Einzeladressierung von Ionen möglich ist. Damit lassen sich

die für Quanteninformationsverarbeitung benötigten Prozesse wie Zustandspräparation, Auslesen sowie Ein-Qubit-Operationen durchführen.

Problematisch ist dagegen die Umsetzung eines Zwei-Qubit-Gatters. Wir benötigen dazu eine zustandsabhängige Wechselwirkung, die wir mit Hilfe eines zwischen zwei Ionen fokussierten, nicht-resonanten Laserstrahls umsetzen wollen. Da der Kristall aber bei den erreichbaren Temperaturen immer noch viele Gitterschwingungen hat, benötigen wir eine Konzeption eines Zwei-Qubit-Gatters, welche robust gegenüber der Anwesenheit von Phononen ist. Dazu benötigen wir eine Untersuchung der Schwingungsmoden des Ionenkristalls. Wichtig ist davor aber die Untersuchung, wie Ionenkristalle in einer Penningfalle entstehen, und welchen physikalischen Randbedingungen diese unterworfen sind, und wie diese zu den Anforderungen des Gatters passen. So benötigt beispielsweise der Laserstrahl eine gewisse Zeit zur Wechselwirkung mit den Ionen, um die gewünschten Gatteroperationen durchführen zu können. Da dieser aber nicht mit den rotierenden Ionen mitgeführt werden soll, muss die Gatterzeit viel kürzer sein als das Inverse der Rotationsfrequenz, $\tau_{gate} \ll \omega_r^{-1}$, so dass folglich eine möglichst geringe Rotationsgeschwindigkeit des Kristalls wünschenswert ist.

Ionenkristalle in einer Penningfalle

2.1. Funktionsweise der Penningfalle

Aus der Elektrodynamik ist bekannt, dass keine stabile Gleichgewichtsposition für geladene Teilchen in einem statischen elektrischen Feld existiert [Earnshaw, 1842]. Dies lässt sich einfach aus der Laplace-Gleichung $\nabla^2\phi = 0$ ansehen, deren Lösungen keine lokalen Minima und Maxima annehmen dürfen. Um ein geladenes Teilchen in einer Raumregion zu fangen, benötigen wir also mehr als nur ein elektrostatisches Feld. Dazu kann man ein zusätzliches elektrisches Wechselfeld anlegen wie bei der Paulfalle, oder ein zusätzliches statisches Magnetfeld wie bei der Penningfalle, mit deren Aufbau wir uns im folgenden beschäftigen wollen.

2.1.1. Aufbau

Die Penningfalle hat ähnlich wie die Paulfalle einen Aufbau aus drei Elektroden, bestehend aus zwei Endkappen und einer Ringelektrode. Im Gegensatz zur Paulfalle verwendet die Penningfalle aber kein elektromagnetisches Wechselfeld im Radiofrequenzbereich, sondern ein starkes homogenes Magnetfeld für den Einschluß in radialer Richtung.

Eine *ideale Penningfalle* hat unendlich ausgedehnte Hyperboloiden als Elektroden, wodurch die mathematische Beschreibung des elektrischen Feldes relativ einfach ist. Eine *reale Penningfalle* unterscheidet sich dagegen von der idealen Penningfalle aufgrund der endlichen Ausdehnung, der abweichenden Fallengeometrie, Fehler in der Konstruktion der Elektroden, Ausrichtungsfehler im magnetischen Feld, oder anderen Störungen wie Restgasatome, Bildladungen auf den Elektroden oder äußere Störfelder. Der Einfluß all dieser zusätzlichen Terme ist Gegenstand zahlreicher Untersuchungen [Brown und Gabrielse, 1986; Gosh, 1995].

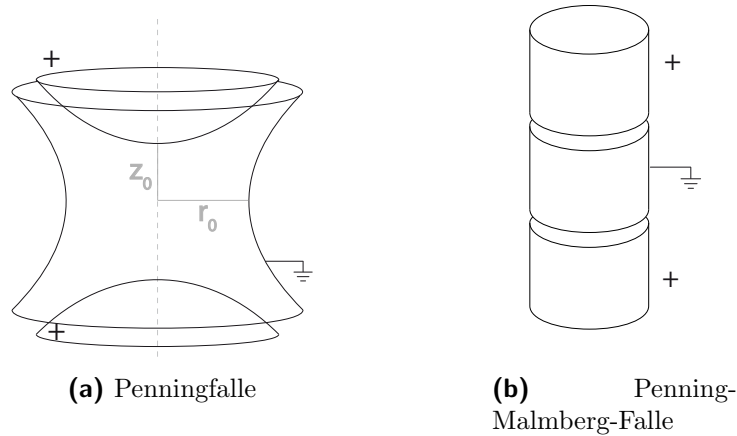


Abbildung 2.1: Links eine Penningfalle mit hyperbolischen Elektroden. Diese hat dadurch ein fast ideales Quadrupolpotential, lediglich die endliche Ausdehnung der Elektroden trägt einen Fehler bei. Rechts eine Penning-Malmberg-Falle mit Elektroden in Zylindermantelform. Das Potential ist dadurch nur in einem kleinen Bereich in der Fallenmitte ein beinahe perfektes Quadrupolpotential, dieses genügt aber für die meisten experimentellen Zwecke. Dafür hat man einen sehr guten optischen Zugriff von Seiten der offenen Zylinderdeckel.

So finden zwei verschiedene Arten von Penningfallen Verwendung im Experiment, die beide in Abbildung 2.1 dargestellt sind. In Teilabbildung 2.1a ist eine Penningfalle mit hyperbolischen Elektroden dargestellt, deren tatsächliches Feld dem einer idealen Penningfalle sehr nahe kommt. Die Abweichungen kommen hier hauptsächlich von der endlichen Größe der Elektroden. Eine andere Möglichkeit der Realisierung ist die sogenannte *Penning-Malmberg-Falle* (Abbildung 2.1b), bei der die Elektroden Zylindermäntel sind. Hier treten natürlich größere Abweichungen aufgrund der von den Hyperboloiden abweichenden Geometrie auf. Andererseits hat diese Fallenkonstruktion andere Vorteile wie beispielsweise eine einfachere Konstruktion, einen sehr guten Zugriff von den offenen Zylinderdeckelflächen, was das Laden der Falle mit Ionen oder anderen elektrisch geladenen Teilchen sowie die optische Manipulation und Detektion wesentlich vereinfacht. Des weiteren ermöglicht die zylindrische Geometrie eine analytische Berechnung der elektrostatischen Potentiale und damit der benötigten Kompensation der Anharmonizitäten im Falleninneren mit Hilfe zusätzlicher Elektroden (diese sind in Abbildung 2.1b nicht dargestellt). Wir wollen also im folgenden im Falleninneren perfekt harmonische elektrostatische Potentiale und ein perfekt homogenes Magnetfeld annehmen, und uns daher nur mit dem Modell der idealen Penningfalle beschäftigen.

Die ideale Penningfalle hat unendlich ausgedehnte Elektroden in Form von Rotations-

hyperboloiden, deren Gleichungen gegeben sind durch:

$$\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{z^2}{z_0^2} = 1, \quad \frac{z^2}{z_0^2} - \frac{r^2}{r_0^2} = 1. \quad (2.1)$$

Dabei haben wir wie im folgenden angenommen, dass die z -Achse mit der Rotationsachse der Falle zusammenfällt. Die linke Gleichung gilt dabei für die Ringelektrode, die rechte für die Endkappen. r_0 ist der Radius der Ringelektrode, und z_0 ist der halbe Abstand zwischen den Endkappen, wobei $r_0 = \sqrt{2}z_0$ gilt. Um positiv geladene Ionen zu fangen, legen wir eine positive Spannung U zwischen den Endkappen und der Ringelektrode an. Dadurch erhalten folgendes elektrostatisches Quadrupolpotential:

$$\phi = \frac{U}{2z_0^2 + r_0^2}(2z^2 - r^2) \quad (2.2)$$

Die Ionen erfahren dabei in z -Richtung eine elektrische Kraft zur Fallenmitte hin, welche proportional zum Abstand von der Fallenmitte ist. Dies führt zu einer harmonischen Oszillation der Ionen in axialer Richtung. Gleichzeitig aber führt dies zu einer nach außen drückenden Kraft in radialer Richtung, die Teilchen wollen aus der Falle entkommen. Zum Fangen der Teilchen benötigen wir also noch einen radialen Einschluß. Diesen wollen wir durch ein starkes homogenes Magnetfeld in z -Richtung gewährleisten, das wir mit Hilfe des Vektorpotentials (siehe z.B. [Jackson, 2002]) schreiben als

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}, \quad (2.3)$$

wobei das Magnetfeld \vec{B} gegeben ist durch $\vec{B} = B\hat{e}_z$. Das Magnetfeld allein bewirkt ein Festhalten der Teilchen auf Kreisbahnen, den sogenannten *Zyklotronbahnen*. Damit ist keine freie Bewegung mehr möglich, ein Teilchen mit einer endlichen Geschwindigkeit kann nicht aus der Falle entkommen. Jedoch gilt es noch, das nach außen drückende elektrische Feld zu beachten. Dann erhält man den Fall von gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern, und wir bekommen eine $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift, also eine Bewegung in der radialen Ebene um die z -Achse herum, was zu der sogenannten *Magnetronbewegung* führt. Durch diese Drift wird gleichzeitig auch die Frequenz der Zyklotronbewegung vermindert. Insgesamt haben wir also eine Überlagerung von Zyklotronbewegung und der Magnetronbewegung in der radialen Ebene, was in einer Bewegung in epizyklischen Bahnen resultiert. Die Einzelteilchenbewegung wollen wir im folgenden Abschnitt genauer untersuchen.

2.1.2. Einzelteilchendynamik

Wir wollen in diesem Abschnitt die klassische Einzelteilchendynamik untersuchen. Der Lagrange-Operator für ein einfach geladenes Teilchen¹ mit der Masse m in einer idealen

¹Die folgenden Untersuchungen lassen sich einfach auf mehrfach geladene Teilchen verallgemeinern, indem man e mit Ze ersetzt, wobei Z die Ladungszahl ist. Wir beschränken uns aber der Einfachheit halber auf den Fall $Z = 1$.

Penning-Falle ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 + e(\dot{\mathbf{r}} \times (\nabla \times \vec{A})) \cdot \vec{r} - e\phi \\ &= \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{eB}{2}(xy - yx) - \frac{eU}{d_0^2}(2z^2 - x^2 - y^2)\end{aligned}\quad (2.4)$$

Hierbei haben wir die Parameter z_0 und r_0 zu $d_0 = \sqrt{2z_0^2 + r_0^2}$ zusammengefasst. Mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichungen [Landau und Lifschitz, 1997,2007] erhalten wir folgende Bewegungsgleichungen:

$$\ddot{x} = \omega_c \dot{y} + \frac{1}{2}\omega_z^2 x \quad (2.5a)$$

$$\ddot{y} = -\omega_c \dot{x} + \frac{1}{2}\omega_z^2 y \quad (2.5b)$$

$$\ddot{z} = -\omega_z^2 z \quad (2.5c)$$

Dabei sind die *axiale Frequenz* ω_z und die *Zyklotronfrequenz* ω_c wie folgt definiert:

$$\omega_z = \sqrt{\frac{4eU}{md_0^2}}, \quad \omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (2.6)$$

Die axiale Bewegungsgleichung (2.5c) ist entkoppelt von den anderen Bewegungsgleichungen, und wir können diese einfach lösen (es handelt sich um eine einfache harmonische Schwingung). Die Lösung lässt sich also schreiben als:

$$z(t) = A_z \cos(\omega_z t + \phi_z) \quad (2.7)$$

Die Bewegungsgleichungen in der radialen Ebene (2.5a,2.5b) sind dagegen gekoppelt und müssen auf andere Weise gelöst werden. Dazu definieren wir eine neue Variable $u = x + iy$ und erhalten folgende Gleichung für die radiale Bewegung:

$$\ddot{u} = -i\omega_c \dot{u} + \frac{1}{2}\omega_z^2 u \quad (2.8)$$

Wählen wir den Ansatz $u = Ae^{-i\omega t}$, und setzen diesen in (2.8) ein, so finden wir zwei Lösungen mit den beiden Frequenzen:

$$\omega_+ = \frac{\omega_c}{2} + \omega_1 \quad (2.9)$$

welche als *modifizierte Zyklotronfrequenz*² bezeichnet wird, und

$$\omega_- = \frac{\omega_c}{2} - \omega_1, \quad (2.10)$$

²Die entsprechende Bewegung wird oft nur mit Zyklotronbewegung bezeichnet, da klar ist, dass eine Bewegung mit der „freien“ Zyklotronfrequenz aufgrund des elektrischen Feldes nicht möglich ist.

welche als *Magnetronfrequenz* bezeichnet wird. Hierbei haben wir folgende Ersetzung gewählt:

$$\omega_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\omega_c^2 - 2\omega_z^2} \quad (2.11)$$

Die allgemeine Lösung schreibt sich also als:

$$u(t) = A_+ e^{-i\omega_+ t} + A_- e^{-i\omega_- t}. \quad (2.12)$$

Aus (2.11) erhalten wir unmittelbar eine Bedingung dafür, dass die Bewegung gebunden ist. Die Frequenzen müssen reell bleiben, da sonst ein exponentielles Wachstum in der Lösung auftritt. Dies ist aber gerade gleichbedeutend mit der Bedingung

$$\omega_c > \sqrt{2} \omega_z \quad (2.13)$$

Die allgemeine Lösung können wir mit $A_{\pm} = R_{\pm} e^{i\phi_{\pm}}$, $R_{\pm} \in \mathbb{R}$ noch umschreiben, indem wir einfach Real- und Imaginärteil bilden und erhalten somit die allgemeine Lösung für die Koordinaten:

$$x(t) = R_+ \cos(-\omega_+ t + \phi_+) + R_- \cos(-\omega_- t + \phi_-) \quad (2.14a)$$

$$y(t) = R_+ \sin(-\omega_+ t + \phi_+) + R_- \sin(-\omega_- t + \phi_-) \quad (2.14b)$$

R_+ ist dabei der *Radius der Zyklotronbewegung*, und R_- ist der *Radius der Magnetronbewegung*. Unter üblichen experimentellen Bedingungen findet man häufig: $R_- > R_+$.

Alle drei Bewegungen, axiale Bewegung, Zyklotron- und Magnetronbewegung, sind voneinander unabhängig, die resultierende Bewegung ist also eine Überlagerung von Epizyklen in der radialen Ebene mit einer harmonischen axialen Schwingung. Ein Beispiel einer berechneten Trajektorie mit typischen Parametern ist in Abbildung 2.2 gegeben.

Wir wollen nun noch den Hamiltonoperator des Systems bestimmen, da dieser für spätere Überlegungen unser Ausgangspunkt sein wird. Dazu bestimmen wir die kanonischen Impulse \vec{p} mit

$$\vec{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m \dot{\mathbf{r}} + e \vec{A} \quad (2.15)$$

und erhalten somit folgenden Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} H = \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \mathcal{L} &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - e \vec{A})^2 + e\phi \\ &= \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{\omega_c}{2} (xp_y - yp_x) + \frac{m}{2} \omega_1^2 (x^2 + y^2) + \frac{m}{2} \omega_z^2 z^2 \end{aligned} \quad (2.16)$$

An dem quadratischen Potentialterm in x und y können wir nun einfach erkennen, dass das Magnetfeld einen bindenden Charakter für die Bewegung in der radialen Ebene hat,

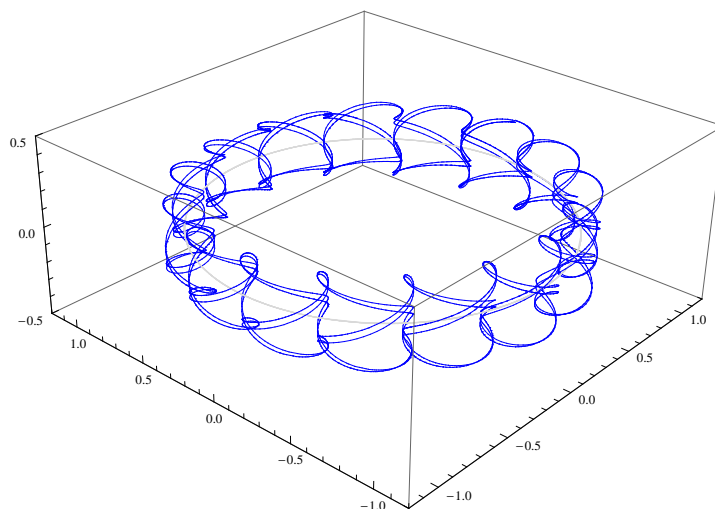


Abbildung 2.2: Berechnete Trajektorie eines einzelnen Teilchens in einer idealen Penningfalle. Die Bewegung ist eine Überlagerung zwischen axialer harmonischer Schwingung und radialen Epizyklen, die sich aus der Überlagerung von Magnetron- und Zyklotronbewegung ergeben. Siehe dazu auch Abbildung 2.3.

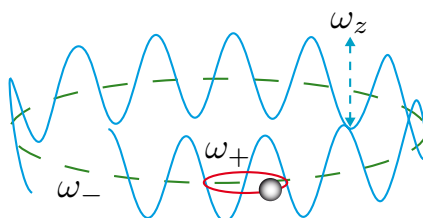


Abbildung 2.3: Die Bewegung lässt sich als Überlagerung einer harmonischen Schwingung in axialer Richtung mit Frequenz ω_z sowie der radialen Bewegung darstellen. Die Bewegung in der radialen Ebene ist eine Überlagerung zwischen zwei Kreisbewegungen, der Magnetronbewegung mit Rotationsfrequenz ω_- , sowie der Zyklotronbewegung mit Frequenz ω_+ . Hier ist der übliche Fall dargestellt, bei dem der Radius der Magnetronbewegung größer ist als der der Zyklotronbewegung.

einzig vorausgesetzt natürlich dass ω_1 reel bleibt, also das Magnetfeld hinreichend stark ist im Vergleich zum elektrischen Feld.

Der Hamiltonoperator (2.16) enthält noch Terme, in denen Koordinaten und Impulse gekoppelt sind. Wir wollen diese mit Hilfe einer kanonischen Transformation gegeben durch

$$q_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha x - p_y/\alpha) \quad p_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha y + p_x/\alpha) \quad (2.17a)$$

$$q_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha x + p_y/\alpha) \quad p_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\alpha y + p_x/\alpha) \quad (2.17b)$$

entkoppeln, wobei wir $\alpha = \sqrt{m\omega_1/2}$ gewählt haben. Die z -Komponente haben wir unverändert gelassen, da die Bewegung in axialer Richtung von der in der radialen Ebene entkoppelt. Der Hamiltonoperator für die radiale Bewegung ist dann gegeben durch:

$$H_{rad} = \frac{\omega_+}{2}(p_+^2 + q_+^2) - \frac{\omega_-}{2}(p_-^2 + q_-^2) \quad (2.18)$$

Hierbei ist deutlich hervorzuheben, dass die Magnetronbewegung einen *negativen Energiebeitrag* hat. Entzieht man also der Magnetronbewegung Energie, so vergrößert das Teilchen den Bahnradius und damit auch die Teilchengeschwindigkeit. Das Teilchen kann dann durch äußere Störungen eine Umverteilung der Energie von der Magnetron- in die anderen Freiheitsgrade der Bewegung erfahren, oder durch dissipative Effekte, wie zum Beispiel Stöße mit Restgasatomen oder Abstrahlung von Photonen, Energie aus der Magnetronbewegung verlieren. Es entfernt sich also durch solche Prozesse weiter vom Fallenzentrum, ist also instabil bezüglich solcher dissipativer Prozesse. Jedoch ist die Kopplung mit der Umgebung ausreichend schwach, so dass Dämpfungszeiten in der Größenordnung von Jahren bestehen [Brown und Gabrielse, 1986]. Der negative Energiebeitrag der Magnetronbewegung wird aber später noch bei der Untersuchung der Kühlung (Kapitel 2.2.3) eine wichtige Rolle spielen.

Die Bewegung eines geladenen Teilchens in einer Penningfalle kann also durch drei ungekoppelte harmonische Oszillatoren beschrieben werden.

Es bleibt die Frage, welche der Bewegungen quantisiert beschrieben werden müssen. Dies hängt von der mittleren Besetzung der Moden der drei harmonischen Oszillatoren ab, und wie diese mit der thermischen Hohlraumstrahlung in der Falle koppeln. Zudem hängt es davon ab, ob eine Kopplung mit externen Resonatoren vorliegt. So werden beispielsweise in Experimenten mit Elektronen (oder Positronen) oft die Bewegungsmoden über eine externe Kopplung getrieben, so dass die Moden sehr hohe Besetzungszahlen aufweisen und eine klassische Beschreibung ausreicht. Die Zyklotronbewegung hat bei niedrigen Temperaturen jedoch immer nur geringe Besetzungszahlen³, so dass hier

³Für Messungen der Besetzungszahl der Zyklotronbewegung bei Positronen siehe z.B. Schwinberg u. a. [1981]

eine quantisierte Beschreibung notwendig wird. Die Magnetronbewegung ist aufgrund der langen Lebensdauer nur äußerst schwach mit der Hintergrundstrahlung gekoppelt und kann deswegen ausreichend mit den klassischen Bewegungsgleichungen beschrieben werden.

Jedoch ist nicht klar, wie sich dies auf den Mehrteilchenfall überträgt, so dass dies ebenfalls eine gründlichere Untersuchung der Bewegungsmoden für mehrere Ionen motiviert.

2.2. Ionenplasmen

Wir wollen uns nun der Beschreibung von mehreren Teilchen in einer Penningfalle zuwenden. Hat man ein statistisches Ensemble mehrerer geladener Teilchen, die sich frei relativ zueinander bewegen können, so wird dieses als *Plasma* bezeichnet. Bei höheren Temperaturen wird also eine Ionenwolke durch die thermodynamischen Eigenschaften eines *ein-komponentigen Plasmas*, eines sogenannten *OCP* (vom Englischen *one-component plasma*), beschrieben. Bei tieferen Temperaturen gibt es allerdings Phasenübergänge zu einer fluiden und bei noch tieferen Temperaturen zu einer kristallinen Phase, worauf wir in Abschnitt 2.3 eingehen werden.

Doch zuvor sollen in Tabelle 2.2 noch einige Beispiele für stark gekoppelte Plasmen aus verschiedenen Gebieten der Physik angegeben werden, ohne jedoch auf die Details der Beschreibung eingehen zu können. Die Werte sind aus Ichimaru u. a. [1987] entnommen, und es wird für eine detaillierte Diskussion hierauf sowie auf die dortigen Literaturangaben verwiesen.

2.2.1. Rotation und Dichte des Plasmas

Erhaltung des Gesamtdrehimpulses

Der Hamiltonoperator für N Ionen in Zylinderkoordinaten (r, θ, z) ist gegeben durch:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_{r_i}^2}{2m} + \frac{(p_{\theta_i} - eA_\theta(r_i)r_i)^2}{2mr_i^2} + \frac{p_{z_i}^2}{2m} \right) + \frac{eU}{d_0^2} \sum_{i=1}^N (2z_i^2 - r_i^2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.19)$$

Beispiel	Massendichte ρ in g/cm^3	Temperatur in K	Kopplungs- konstante Γ
Kruste von Neutronen- sternen	$> 10^4$	$10^7 - 10^8$	$10 - 10^3$
Innere von sonnenähnli- chen Sternen	10^2	10^7	0.1
Elektronen auf flüssigem Helium	-	$0.1 - 1$	Kristallisation bei 137
Elektron-/Ionenplasmen in Penningfallen	$10^{-21} - 10^{-12}$	$10^{-3} - 1$	Kristallisation bei 174

Tabelle 2.1: Beispiele von stark gekoppelten Plasmen in verschiedenen physikalischen Systemen. Die Untersuchung der Eigenschaften des Plasmas in den jeweiligen astronomischen Objekten ist dabei wesentlich für das Verständnis der Physik dieser Objekte. Elektronen auf flüssigem Helium befinden sich in Oberflächenzuständen, haben deswegen eine eingeschränkte Dimensionalität, wodurch sich die niedrigere Phasengrenze erklärt.

wobei $\mathbf{A} = A_\theta(r)\hat{\theta}$ das Vektorpotential in Zylinderkoordinaten ist, mit $A_\theta(r) = Br/2$. In Gleichung (2.19) haben wir alle Fehlereffekte wie Fallengeometrie, Bildladungen etc. vernachlässigt. Wir stellen fest, dass keiner der Terme in Gleichung (2.19) explizit von der Zeit abhängig ist, der Hamiltonoperator selbst ist also invariant gegenüber Translationen in der Zeit und damit eine Erhaltungsgröße. Die Energie der Teilchen ist also erhalten. Es sei bemerkt, dass die Energie, die benötigt wird, um die externen Felder aufrechtzuerhalten, nicht im Hamiltonoperator (2.19) enthalten ist. Diese ist im allgemeinen nicht erhalten, da die Felder der Bildladungen auf den Elektroden sowie der im Plasma induzierten magnetischen Momente den äußeren Feldern entgegen wirken, so dass Arbeit verrichtet werden muss, um die Felder aufrechtzuerhalten.

Die ersten beiden Terme sind nicht von der θ -Koordinate abhängig, und auch der Coulombterm hängt nur von den Winkeldifferenzen $\theta_i - \theta_j$, wie wir leicht feststellen können, wenn wir den Term $1/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ explizit in Zylinderkoordinaten ausschreiben:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{1}{\sqrt{r_i^2 + r_j^2 - 2r_i r_j \cos(\theta_i - \theta_j) + (z_i - z_j)^2}} \quad (2.20)$$

Folglich ist H unabhängig von Translationen in θ ,

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial \theta_i} = 0, \quad (2.21)$$

und der kanonische Gesamtdrehimpuls ist erhalten:

$$\sum_{i=1}^N p_{\theta_i} =: L = \text{const.} \quad (2.22)$$

Dies ist natürlich nur gültig, wenn die Wechselwirkung mit der Umgebung vernachlässigbar klein ist. Die Zeitskala, mit der Energie und Impuls an die Umgebung abgegeben wird, ist jedoch wesentlich länger als wie die Zeit, in der das Plasma das thermische Gleichgewicht erreicht, und die Energie und der Gesamtdrehimpuls sind näherungsweise auf der betrachteten Zeitskala erhalten.

Ist das Plasma hinreichend heiß, so dass Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigt werden können, lässt sich der thermische Gleichgewichtszustand mit Hilfe einer Boltzmann-Verteilung beschreiben [Dubin und O’Neil, 1999]. Daraus lässt sich herleiten, dass die Geschwindigkeitsverteilung einer Maxwell-Verteilung in einem rotierenden Bezugssystem entspricht, welches mit dem Plasma rotiert. Die Rotation im thermischen Gleichgewicht ist also scherungsfrei. Denn Scherkräfte würden wie im Falle viskoser Flüssigkeiten die Entropie erhöhen. Das thermische Gleichgewicht ist aber gerade der Zustand höchster Entropie, so dass also keine Erhöhung der Entropie durch Scherkräfte mehr auftreten darf und die Rotation des Plasmas scherungsfrei verläuft. Dies wird auch durch Messungen der Rotationsgeschwindigkeit (über die Messung der Dopplerverschiebung eines resonanten Überganges) eines Plasmas in Abhängigkeit vom Abstand der Rotationsachse bestätigt [Brewer u. a., 1988].

Rotierendes Bezugssystem

Drehimpulserhaltung sowie die starre Rotation des Plasmas motivieren den Wechsel in ein Bezugssystem \mathcal{K}_r , welches mit der Frequenz $-\omega$ gegen das Laborsystem \mathcal{K} rotiert⁴. Da der Gesamtdrehimpuls erhalten ist, erhalten wir den Hamiltonoperator des Systems im rotierenden Bezugssystem \mathcal{K}_r mit Hilfe einer kanonischen Transformation

$$H_r = H + \omega L \quad (2.23)$$

Mit Gleichung (2.19) und (2.22) erhalten wir

$$\begin{aligned} H_r &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_{r_i}^2}{2m} + \frac{(p_{\theta_i} - eA_\theta(r_i)r_i)^2}{2mr_i^2} + \frac{p_{z_i}^2}{2m} \right) + \sum_{i=1}^N e\phi_{\text{trap}} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N e\phi_{\text{coul}} + \omega L \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_{r_i}^2}{2m} + \frac{(p_{\theta_i} - m(\omega_c - 2\omega)r_i^2/2)^2}{2mr_i^2} + \frac{p_{z_i}^2}{2m} \right) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left[e\phi_{\text{trap}} + m\omega(\omega_c - \omega)r^2/2 \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N e\phi_{\text{coul}}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

⁴Das Minuszeichen wurde dabei explizit herausgezogen, damit für positive Ionen das Plasma eine positive Rotationsfrequenz erhält.

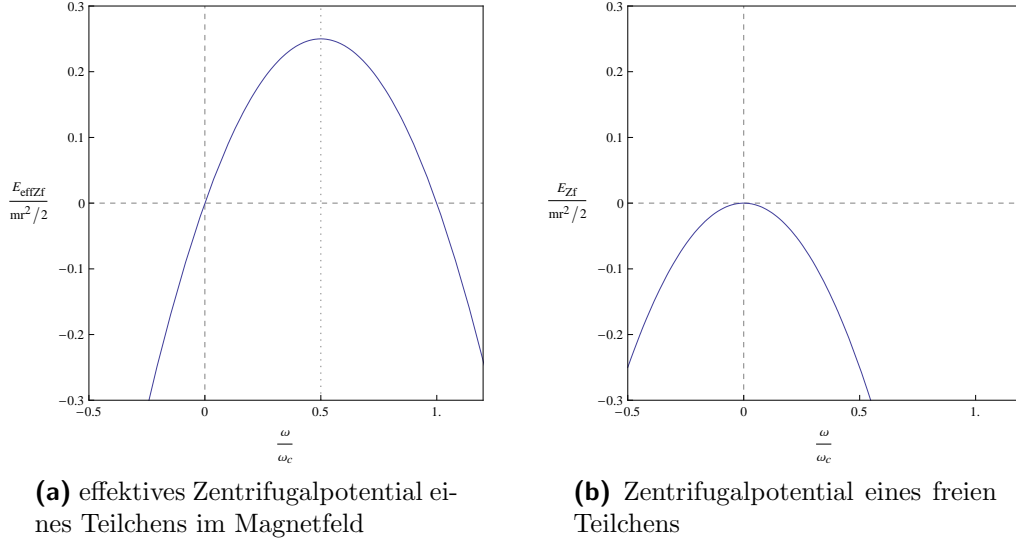


Abbildung 2.4: Zentrifugalpotential E_{Zf} und effektives Zentrifugalpotential E_{effZf} im Vergleich. Das effektive Zentrifugalpotential eines Teilchens in einer Penningfalle ist für $0 < \omega < \omega_c$ positiv und weist ein Maximum bei $\omega_c/2$ auf. Das Zentrifugalpotential eines freien Teilchens ist immer negativ und maximal für $\omega = 0$.

wobei wir den Drehimpulsterm quadratisch ergänzt sowie Definition (2.6) verwendet haben. Das *effektive Fallenpotential* im rotierenden Bezugssystem ist gegeben durch

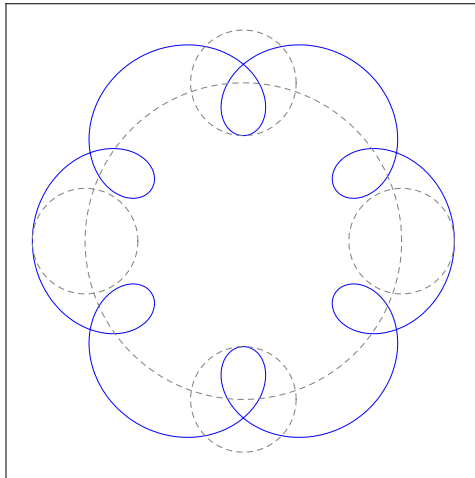
$$e\phi_{\text{eff}} = e\phi_{\text{trap}} + m\omega(\omega_c - \omega)r^2/2 =: e\phi_{\text{trap}} + \phi_r, \quad (2.25)$$

wobei wir den zweiten Term ϕ_r im folgenden als effektives Zentrifugalpotential bezeichnen wollen. Weiter ist die *effektive Zyklotronfrequenz* gegeben durch

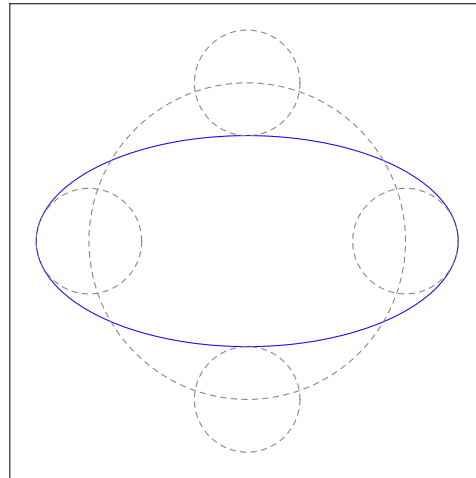
$$\omega'_c = (\omega_c - 2\omega). \quad (2.26)$$

Es ist dabei zu betonen, dass ω im allgemeinen *ungleich* der Rotationsfrequenz des Plasmas ist. Wir sehen, dass es dadurch ein besonders ausgezeichnetes Bezugssystem gibt, nämlich für $\omega = \omega_c/2$ ist gerade das effektive Zentrifugalpotential maximal und die effektive Zyklotronfrequenz verschwindet, da sich der Zyklotronterm mit der Corioliskraft weghebt. Betrachten wir die Abhängigkeit des effektiven Zentrifugalpotentials von der Rotationsfrequenz (Abbildung 2.4a), so finden wir, dass dieses einen ähnlichen Verlauf hat wie das gewöhnliche Zentrifugalpotential eines freien Teilchens (Abbildung 2.4b), nur dass der Scheitelpunkt der Parabel verschoben ist. Also können wir das mit $\omega_c/2$ rotierende Bezugssystem als *effektives Ruhesystem* auffassen.

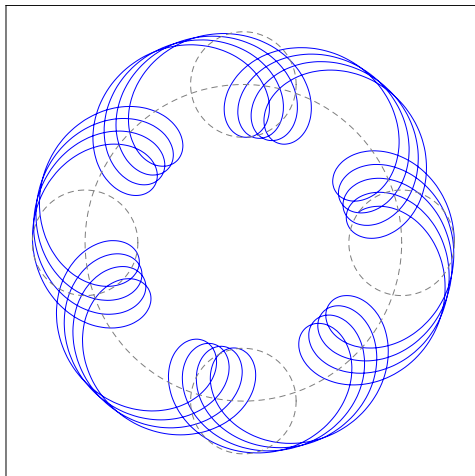
In der Tat, betrachten wir die Bewegung eines einzelnen Teilchens erneut, aber diesmal aus dem effektiven Ruhesystem heraus betrachtet, so stellen wir fest, dass es dort durch eine einfach harmonische Bewegung durchführt. Die Bewegung ist beschrieben als Über-



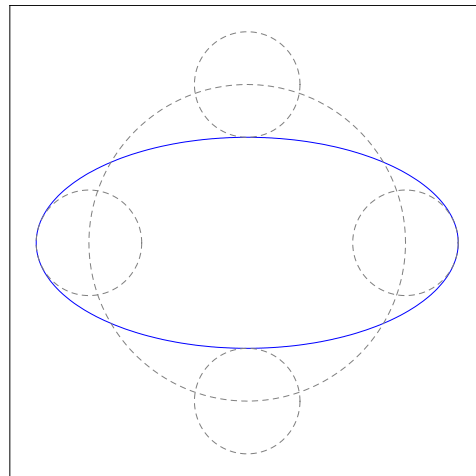
(a) Geschlossene Bewegung eines Teilchens im Laborsystem



(b) Bewegung im rotierenden Bezugssystem



(c) Ungeschlossene Bewegung eines Teilchens im Laborsystem



(d) Bewegung im rotierenden Bezugssystem

Abbildung 2.5: Betrachtet man die Bewegung im Laborsystem, so durchlaufen die Teilchen Epizyklen, also eine Überlagerung zweier Kreisbewegungen mit unterschiedlicher Frequenz. Von einem mit $\omega_c/2$ rotierenden Bezugssystem stellt sich die Bewegung dagegen einfach als geschlossene Ellipse dar. Dies lässt sich auch als Überlagerung zweier Kreisbewegungen mit gleichen Radien wie zuvor darstellen, allerdings beide mit gleicher, aber gegensinniger Rotationsfrequenz, was gerade eine Ellipse ergibt. Dies gilt auch für ungeschlossene Bewegungen (siehe unten).

lagerung zweier harmonischer Schwingungen mit der Frequenz ω_1 . Wir wollen diese in einer zirkularen Basis darstellen, und erhalten folglich zwei Rotationen, einmal mit $+\omega_1$ und einmal mit $-\omega_1$. Die Vorgehensweise ist dabei analog zur Polarisation des Lichtes, wo der Basiswechsel zwischen linearer und zirkularer Polarisation wohlbekannt ist. Wir erhalten also je nach Amplitude der beiden Schwingungen eine lineare Bahn (beide Amplituden gleich), eine kreisförmige Bahn (eine der Amplituden ist Null) oder allgemein eine elliptische Bahnkurve. Für die Rücktransformation ins Laborsystem müssen wir zu beiden Frequenzen zusätzlich $\omega_c/2$ addieren, so dass die beiden Schwingungen im Laborsystem die Frequenzen $\omega_c/2 + \omega_1$ und $\omega_c/2 - \omega_1$ annehmen. Dies sind aber gerade die modifizierte Zyklotronfrequenz (2.9) sowie die Magnetronfrequenz (2.10). Wir haben also eine tiefere Einsicht in die Art der Bewegung erhalten, da beide Bewegungen im effektiven Ruhesystem die gleiche Form haben.

Wir wollen nun im folgenden annehmen, das Plasma rotiere mit genau der halben Zyklotronfrequenz $\omega_r = \omega_c/2$, und wählen das Bezugssystem, in welchem das Plasma ruht, es gilt also $\omega = \omega_r$. Wir sehen, dass die kanonischen (Dreh-)Impuls $p_{\theta i}$ gerade verschwinden, wenn wir $\dot{\theta}_i = -\omega_r = -\omega_c/2$ sowie $A_\theta(r_i) = Br_i/2$ einsetzen, sowie die Definition (2.6) verwenden:

$$p_{\theta i} = mr_i^2 \dot{\theta}_i + eA_\theta(r_i)r_i = -mr_i^2 \omega_r + eBr_i^2/2 = 0 \quad (2.27)$$

Also verschwindet für $\omega_r = \omega_c/2$ gerade der Gesamtdrehimpuls, was weiter die Bezeichnung des mit dieser Frequenz rotierenden Bezugssystems als effektives Ruhesystem untermauert.

Dichte des Plasmas

Wir wollen uns nun der Berechnung der Plasmadichte zuwenden. Dazu wählen wir das Bezugssystem, das mit dem Plasma rotiert. Wir lösen die Poissonsche Gleichung

$$\nabla^2 \phi(r_i, z_i) = -en(r_i, z_i)/\epsilon_0 \quad (2.28)$$

unter der Randbedingung, dass das Potential auf den Elektroden verschwindet. Dabei setzt sich das elektrostatische Potential $\phi(r_i, z_i)$ aus dem äußeren Fallenpotential $\phi_{\text{trap}}(r_i, z_i)$ und dem Potential der Punktladungen $\phi_p(r_i, z_i)$ zusammen. Die Ionen ordnen sich so an, dass im Inneren des Plasmas das elektrische Feld des äußeren Potentials durch die elektrischen Felder der Ionenladungen abgeschirmt wird, was als *Debye-Abschirmung* bezeichnet wird. Die Abschirmung findet dabei über die *Debye-Länge* statt, welche definiert ist als

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{ne^2}}. \quad (2.29)$$

Das Innere des Plasmas ist, ähnlich wie das Innere eines metallischen Leiters, näherungsweise feldfrei, da die Ladungsträger sich frei bewegen können, und sich dann derart

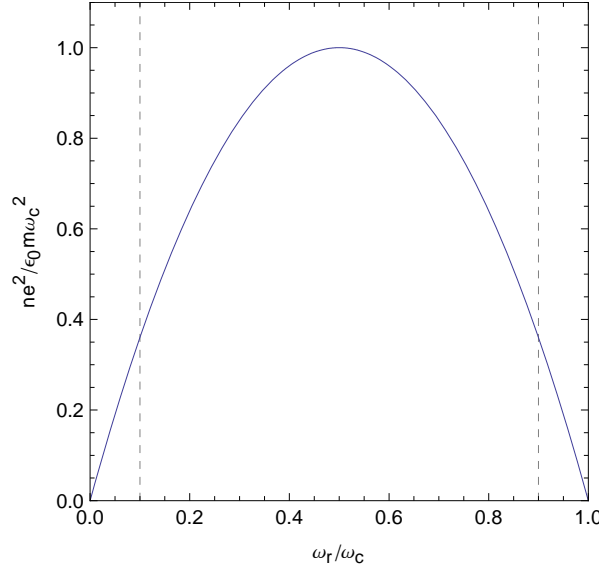


Abbildung 2.6: Dichte des Plasmas als Funktion der Rotationsfrequenz normiert durch die Zyklotronfrequenz. Man sieht, dass die Dichte gerade für die Rotationsfrequenz $\omega_r = \omega_c/2$ ihr Maximum annimmt. Der Bereich erlaubter Rotation erstreckt sich hier von $0.1\omega_c$ bis $0.9\omega_c$ (axiale Frequenz wurde gewählt zu $\omega_z = \sqrt{18}/10\omega_c$)

entlang der Feldlinien ausrichten, bis sie das Feld mit ihrem eigenen Feld neutralisieren. Folglich können wir im Innern des Plasmas annehmen, dass

$$\phi_p(r_i, z_i) + \phi_{\text{eff}}(r_i, z_i) \simeq \text{const} \quad (2.30)$$

gilt. Hieraus folgt mit den Gleichungen (2.28) und (2.25), sowie daraus, dass $\phi_{\text{trap}}(r_i, z_i)$ der Laplacegleichung $\nabla^2 \phi_{\text{trap}}(r_i, z_i) = 0$ genügen muss:

$$\begin{aligned} e^2 n(r_i, z_i) / \epsilon_0 &= -\nabla^2 e\phi(r_i, z_i) = -\nabla^2 (e\phi_{\text{trap}}(r_i, z_i) + e\phi_p(r, z)) \\ &= -\nabla^2 (e\phi_p(r_i, z_i)) = -\nabla^2 (-e\phi_{\text{eff}}) = 2m\omega_r(\omega_c - \omega_r) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Also ist die Dichte des Plasmas nahezu konstant im Innern und abhängig von der Rotationsgeschwindigkeit. In der Randschicht des Plasmas fällt die Dichte des Plasma auf der Größenordnung der Debye-Länge ($\propto 10^{-3}$ m) auf Null. In Abbildung 2.6 ist die Dichte $n(r_i, z_i)$ als Funktion der Rotationsfrequenz dargestellt. Die Dichte nimmt ihr Maximum für eine Rotation mit $\omega_r = \omega_c/2$, was auch als *Brillouin-Limit* bezeichnet wird.

Jedoch sind nicht alle Zustände in Abbildung 2.6 erlaubt. Dazu betrachten wir das effektive Fallenpotential im rotierenden Bezugssystem, welches quadratisch in r_i und z_i ist, und schreiben dieses als:

$$e\phi_{\text{eff}}(r_i, z_i) = \frac{1}{2} m \omega_z^2 (z_i^2 + \beta r_i^2) \quad (2.32)$$

Hierbei ist der *Anisotropieparameter* β definiert als

$$\beta = \frac{\omega_r(\omega_c - \omega_r)}{\omega_z^2} - \frac{1}{2} \quad (2.33)$$

Der Term $-1/2$ kommt dabei vom Quadrupolpotential, der erste Term aus dem effektiven Zentrifugalpotential. Es kann in radialer Richtung nur dann ein bindendes Potential geben, wenn $\beta > 0$ gilt. Damit können wir mit (2.33) und (2.11) sofort die minimale und maximale Rotationsgeschwindigkeit des Plasmas bestimmen, es muss gelten:

$$\frac{\omega_c}{2} - \omega_1 < \omega_r < \frac{\omega_c}{2} + \omega_1 \quad (2.34)$$

Wir erwarten, dass die Dichte an diesen Rändern gegen Null strebt. Daraus können wir umgekehrt folgern, dass der mittlere Teilchenabstand als Funktion der Rotationsfrequenz an den Rändern des erlaubten Bereiches divergiert.

Der Anisotropieparameter β bestimmt in Gleichung (2.32) die Form des Potentials und damit auch die des Plasmas. Für $\beta = 1$ erwarten wir ein kugelsymmetrisches Plasma, für $\beta > 1$ ein prolates Sphäroid, welches sich für $\beta \gg 1$ zu einer linearen Kette entlang der z -Achse formiert. Für $\beta < 1$ erwarten wir ein oblates Sphäroid, welches im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ sich zu einem flachen, zweidimensionalen „Pfannkuchen“ in der x - y -Ebene verteilt.

Diamagnetische Effekte

Die rotierenden Ionen erzeugen selbst ein Magnetfeld, das entgegen dem äußeren Magnetfeld gerichtet ist. Da die Geschwindigkeiten trotz sehr hoher Rotationsfrequenzen jedoch noch wesentlich unterhalb der Lichtgeschwindigkeit liegen, können wir dieses zusätzlich induzierte Magnetfeld vernachlässigen. Mit einer Abschätzung, bei der die rotierenden Ionen als Kreisströme angenommen werden, und alle Größen großzügig abgeschätzt wurden, kann das induzierte Magnetfeld auf etwa 10^{-10} des Wertes des angelegten Magnetfeldes abgeschätzt werden.

2.2.2. Eigenschaften des Ionenplasmas bei höheren Temperaturen

Wir geben zunächst noch einige qualitative Bemerkungen zum Verhalten der Einzelteilchenfrequenzen für ein heißes Plasma an [Gosh, 1995].

Modell unabhängiger Teilchen

Das Modell unabhängiger Teilchen ist gegeben, wenn die Teilchendichte hinreichend gering ist, so dass die Wechselwirkung durch die Coulomb-Abstoßung keinen Einfluß auf

die Bewegung der Teilchen hat. Alle Ionen genügen dann den selben Bewegungsgleichungen, nämlich denjenigen des einzelnen Teilchens, und haben ähnliche Lösungen, die ausschließlich von den Anfangsbedingungen abhängig sind. Das Plasma aus nicht-wechselwirkenden Ionen hat also eindeutige und scharfe Eigenfrequenzen, nämlich die der Axial-, (modifizierten) Zyklotron- und der Magnetronfrequenz. Für das Plasma erwartet man also scharfe Resonanzlinien. Aus den thermodynamischen Eigenschaften lässt sich zudem ableiten, dass die statistische Verteilung der Zyklotronradien im Gleichgewicht einer Gauß-Verteilung entspricht [Gosh, 1995].

Modell wechselwirkender Teilchen

Durch die Wechselwirkung zwischen den Ionen werden die Ionen nicht mehr die Frequenzen des Einteilchenfalls aufweisen, sondern eine Linienverbreiterung erfahren, wie wir im folgenden qualitativ besprechen wollen.

Die Magnetronfrequenz hängt im wesentlichen nur von dem Gesamtfeld ab, das auf das jeweilige Ion wirkt. Im Falle unabhängiger Teilchen hängt dieses nicht von der Position der geladenen Teilchen ab, so dass das elektrische Feld und damit auch die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift linear in r sind. Durch die Coulomb-Wechselwirkung wird das elektrische Feld nichtlinear und der Drift-Term dadurch abhängig von den Positionen der anderen Teilchen. Dies führt zu einer räumlichen ungleichförmigen Verteilung der Magnetronfrequenz, und damit zu einer erwarteten Linienverbreiterung des Resonanzpeaks der Magnetronfrequenz gegenüber dem Einzelionenfall. Kollisionen spielen keine Rolle bei der Linienverbreiterung, denn alle infinitesimalen Volumenelemente der Ionenwolke bewegen sich mit der gleichen Rotationsfrequenz um ein gemeinsames Rotationszentrum, so dass die Volumenelemente nicht miteinander kollidieren. Es gibt also keine durch die Magnetrondrift verursachten Stöße⁵. Diese Verbreiterung ist also gut durch ein gemitteltes Feld zu beschreiben, da die Verbreiterung nicht durch Stöße - oder anders formuliert paarweise Wechselwirkung zweier Ionen - verursacht wird, sondern eben allein durch die Ortsabhängigkeit des gemittelten elektrischen Feldes.

Anders als bei der Magnetronbewegung kollidieren oder durchdringen sich die infinitesimalen Volumenelemente bei der Zyklotronbewegung, so dass hier die Wechselwirkung zwischen den Teilchen die Hauptursache der Linienverbreiterung ist [Wineland u. a., 1983]. Zusätzlich kann eine Linienverbreiterung bei der Magnetron- und Zyklotronfrequenz natürlich auch aufgrund von Inhomogenitäten des Magnetfelds auftreten.

Die Axialfrequenz erfährt eine Linienverbreiterung, da das Potential durch die Coulomb-Wechselwirkung anharmonische Zusatzterme erhält. Dadurch erfährt die Axialfrequenz auch zusätzlich eine Verschiebung, da die Entwicklung des Coulomb-Potentials natürlich

⁵Unter Stöße bzw. Kollisionen sind hier natürlich nicht Stöße wie im Modell harter Kugeln gemeint, sondern Impuls- und Energieübertrag durch die Coulomb-Wechselwirkung

auch quadratische Terme enthält, die eben diese Verschiebung der axialen Fallenfrequenz bewirken.

2.2.3. Kühlen des Plasmas

Um aus dem heißen Plasma Ionenkristalle zu erhalten, muss das Plasma bis auf wenige Millikelvin gekühlt werden. Während die thermische Energie der Axial- und die Zyklotronbewegung mit Hilfe der Standardmethode des Dopplerkühlens reduziert werden, muss für die Magnetronbewegung aufgrund des negativen Energiebeitrags eine gesonderte Kühlmethode eingeführt werden. Des weiteren wird auch eine Kühlmethode benötigt, die während der Durchführung von Operationen zur Quanteninformationsverarbeitung anwendbar ist. Wir wollen diese im Folgenden gesondert betrachten.

Laserkühlen der axialen Bewegung und der Zyklotronbewegung

Die Grundidee des Dopplerkühlens lässt sich wie folgt darstellen [Hänsch und Schawlow, 1975; Wineland und Dehmelt, 1975]. Ein Laserstrahl wird rotverstimmt gegenüber der Resonanzfrequenz eines atomaren Übergangs durch das Plasma gestrahlt. Ionen mit Geschwindigkeitskomponenten in Richtung des Strahls befinden sich aufgrund des Doppler-Effekts noch weiter aus der Resonanz und absorbieren deswegen Photonen nur mit geringerer Wahrscheinlichkeit. Ionen mit Geschwindigkeitskomponenten gegen die Richtung des Strahls werden dagegen durch den Doppler-Effekt in Resonanz gebracht und absorbieren häufiger Photonen aufgrund der höheren Übergangswahrscheinlichkeit. Wird ein Photon absorbiert, so ändert sich der Impuls des Ions aufgrund des Photonenrückstoßes. Das Ion emittiert aber Photonen durch spontane Emission symmetrisch in alle Raumrichtungen, so dass das Ion im Mittel durch die Emission keine Impulsänderung erfährt. Da im Mittel bei der Bewegung gegen die Richtung des Strahles mehr Photonen absorbiert werden als in Richtung des Strahles, erfährt das Ion also insgesamt eine Änderung des Impulses entgegen der Bewegungsrichtung. Die hier aufgeführte Begründung gilt für freie Atome, kann aber einfach auf Atome oder Ionen in einem harmonischen Potential verallgemeinert werden, falls der resonante Streuprozess der Absorption und Reemission eines Photons viel schneller verläuft als die Schwingungsdauer. Die Dauer eines solchen Streuprozesses ist gegeben durch das Inverse der Linienbreite des Überganges γ^{-1} .

Wir kühlen also die Zyklotronbewegung, indem wir den Laserstrahl rotverstimmt zum atomaren Übergang parallel zur radialen Ebene einstrahlen. Da die Zyklotronbewegung zirkular in der radialen Ebene verläuft, hat sie während eines Umlaufes immer Geschwindigkeitskomponenten entgegen dem Laserstrahl, d.h. die Bewegung wird automatisch gekühlt, und der Zyklotronradius wird verringert. Zum Kühlen der axialen Bewegung

müssen wir den Laser in axialer Richtung ausrichten, da die axiale Bewegung keine radiale Komponente besitzt. Wir können beide Bewegungen gleichzeitig kühlen [Itano und Wineland, 1982; Wineland u. a., 1985], indem wir den Laserstrahl schief zwischen radialer Ebene und der z -Achse ausrichten.

Kühlen der Magnetronbewegung

Das Kühlen der Magnetronbewegung ist dagegen schwieriger, denn die Magnetronbewegung hat einen negativen Energiebeitrag (Gleichung 2.18). Dies bedeutet aber gerade, dass man der Magnetronbewegung Energie *zuführen* muss, um den Radius - und damit die Geschwindigkeit - der Bewegung zu verringern, also zu kühlen. Dies wird mit einem nicht-homogenen Strahlprofil umgesetzt [Itano und Wineland, 1982], so dass die Intensität auf der Seite, auf der die Magnetronbewegung in Richtung des Strahles verläuft, höher ist als auf der Seite, auf der die Magnetronbewegung entgegen der Strahlrichtung verläuft. Dadurch erhält das Ion im Mittel einen zusätzlichen Impuls durch die Absorption von Photonen, und die Energie wird erhöht, der Magnetronradius und die damit verbundene Teilchengeschwindigkeit reduziert.

Sympathetisches Kühlen

Neben den gewünschten Ionen befinden sich eine Vielzahl an anderen Ionen in der Falle, die sich zumeist durch Stöße mit Restgasatomen oder -molekülen bilden. So befinden sich beispielsweise in einem Plasma aus ${}^9\text{Be}^+$ -Plasma zusätzlich Ionen größerer Masse wie etwa BeH^+ und BeOH^+ , die durch die Reaktion mit neutralen Molekülen entstanden sind. Typischerweise besteht das Plasma zu ungefähr 20 bis 50 % aus diesen schwereren Ionen. Diese Ionen werden *sympathetisch gekühlt*, d.h. durch Stöße mit den kälteren, lasergeköhlten Be^+ -Ionen gleichen beide Ionensorten ihre Temperaturen an. Durch die Rotation werden die schwereren Ionen wie in einer Zentrifuge von den leichteren Ionen getrennt, die im Inneren verbleiben [Bollinger u. a., 2003].

Dieser Prozess des sympathetischen Kühlens kann auch umgekehrt zum Kühlen der inneren Ionen genutzt werden. Bringt man eine zweite, schwerere Ionensorte ein, so werden diese zentrifugal von den leichteren Ionen getrennt. Jetzt kann man die schwereren Ionen laserkühlen, die leichteren inneren Ionen werden über Dissipation der thermischen Energie von innen nach außen sympathetisch mitgeköhlt. Dies wurde so schon für eine Mischung aus ${}^9\text{Be}^+$ - und ${}^{198}\text{Hg}^+$ -Ionen realisiert [Larson u. a., 1986]. Mit Hilfe dieser Methode will man eine stetige Kühlung während der Durchführung von quantenlogischen Operationen ermöglichen [Kielpinski u. a., 2000], da eine direkte Laserkühlung der Ionen nicht möglich ist. Die Quanteninformation ist in den internen Zuständen der Ionen gespeichert, diese würden jedoch durch den Kühlübergang gerade verändert werden.

2.3. Phasenübergänge des Ionenplasmas

2.3.1. Thermodynamische Phasenübergänge

Durch hinreichende Laserkühlung erreichen wir schließlich das Regime, bei dem die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ionen nicht mehr nur als eine kleine Störung betrachtet werden kann, wir benötigen also eine quantitative Beschreibung des Systems. Dazu definieren wir die *Kopplungskonstante* Γ des Plasmas als das Verhältnis zwischen der mittleren elektrostatischen Energie und der mittleren kinetischen Energie. Die Coulomb-Energie können wir abschätzen mit

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}, \quad (2.35)$$

wobei der *Wigner-Seitz-Radius* a definiert ist durch

$$\frac{4}{3}\pi a^3 n = 1. \quad (2.36)$$

Dabei ist n die Teilchenzahldichte des Ionenplasmas. Für ein Ensemble klassischer Teilchen ist die kinetische Energie näherungsweise durch $k_B T$ gegeben, wobei k_B die Boltzmannkonstante ist. Die Kopplungskonstante Γ ist also definiert als

$$\Gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a k_B T} \quad (2.37)$$

Für $\Gamma \ll 1$ befinden wir uns im Bereich schwacher Kopplung und damit kann man sehr gut auf die Beschreibung unabhängiger Teilchen zurückgreifen. Für $\Gamma > 1$ befinden wir uns im Bereich der starken Kopplung, und wir erwarten bei weiterer Erhöhung von Γ Übergänge zur flüssigen und festen Phase.

Der Übergang vom Plasma zur fluiden Phase lässt sich mit Hilfe der *radialen Verteilungsfunktion* $g(r)$ charakterisieren. Diese ist definiert als das Verhältnis der korrelierten Dichteverteilung zur mittleren Dichteverteilung [Brush u. a., 1966], und entspricht gerade der Wahrscheinlichkeit, ein anderes Teilchen im Abstand r zu finden [Ichimaru, 1982]. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung ist normiert, so dass für $r \rightarrow \infty$ die radiale Verteilungsfunktion $g(r) \rightarrow 1$ geht. Treten in der Verteilungsfunktion Maxima auf, so ist dies ein Hinweis auf räumliche Korrelationen bei einem bestimmten Teilchenabstand, was charakteristisch für ein System in der fluiden Phase ist.

In Abbildung 2.7 (entnommen aus Brush u. a. [1966]) ist die radiale Verteilungsfunktion für verschiedene Werte des Kopplungsparameters Γ aufgetragen. Für Werte von $\Gamma > 2$ treten Oszillationen in der radialen Verteilungsfunktion auf, also räumliche Korrelationen für bestimmte Teilchenabstände. Also tritt gerade dort das System in die fluide Phase

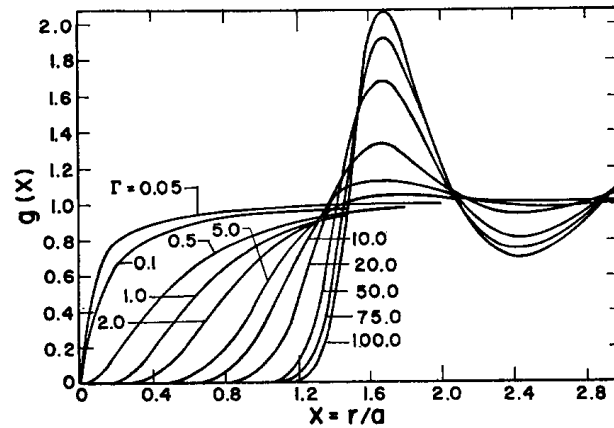


Abbildung 2.7: Radiale Verteilungsfunktion für verschiedene Kopplungsparameter Γ als Funktion des Teilchenabstandes normiert durch den Wigner-Seitz-Radius. Für $\Gamma > 2$ sieht man das Auftreten von Oszillationen in der radialen Verteilungsfunktion $g(r)$, was ein Anzeichen für räumliche Korrelationen zwischen den Teilchen ist. Dies ist charakteristisch für eine fluide Phase. Abbildung entnommen aus [Brush u. a., 1966].

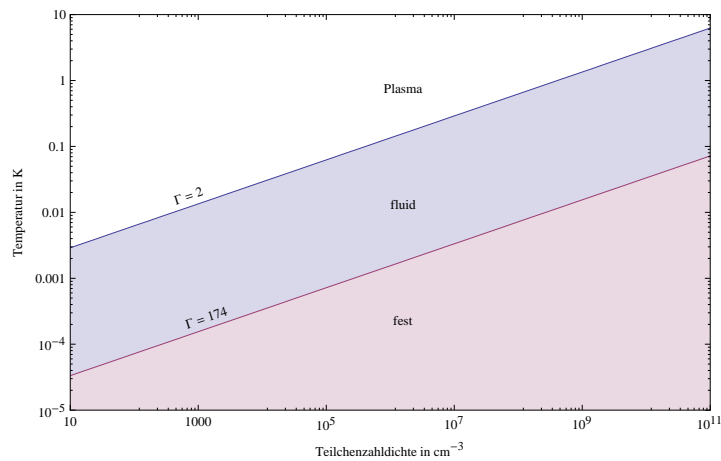


Abbildung 2.8: Phasendiagramm des Plasmas mit den Phasengrenzen $\Gamma = 2$ und $\Gamma = 174$. Aufgetragen die Teilchenzahldichte gegen die Temperatur.

über. Diese Berechnungen mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen wurden durch weitere Publikationen bestätigt und präzisiert [Hansen, 1973; Slattery u. a., 1980],

Jedoch tritt kein scharf definierter Phasenübergang flüssig-fest auf, sondern die Kristallisation tritt über einen weiten Bereich der Kopplungskonstanten Γ auf. Die Ionen kristallisieren dabei in einer Schalenstruktur [Bollinger u. a., 1994]. Die Schalen selbst haben dabei feste und näherungsweise gleich große Abstände zueinander, während die Positionen der Ionen innerhalb einer Schale sehr stark von der Wahl der Parameter abhängt.

In den letzten Jahrzehnten wurden bereits zahlreiche Untersuchungen sowohl des Überganges von der Plasma- in die fluide Phase als auch von der fluiden in die kristalline Phase durchgeführt. So wurde auch ein Phasendiagramm für Elektronen erstellt [Malmberg und O'Neil, 1977]. Dies ist jedoch analog für Ionen gültig, da die Phasenübergänge durch den Kopplungsparameter Γ und die Teilchenzahldichte beschrieben werden, welche unabhängig von der Teilchenmasse sind (Abbildung 2.8).

2.3.2. Strukturelle Phasenübergänge

Je nach gewählten Fallenparametern können verschiedene kristalline Phasen eingenommen werden. Da sich die Positionen der Ionen kontinuierlich ändern, und nur die Kristallstruktur eine diskontinuierliche Änderung erfährt, sind dies Phasenübergänge zweiter Ordnung [Landau und Lifschitz, 1980]. Wir wollen dies mit Hilfe des Anisotropieparameters β (Gleichung 2.33) beschreiben, der ja das Verhältnis des effektiven Potentials in radialer Richtung zum Potential in axialer Richtung enthält. Bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung erfährt die Ableitung eines Ordnungsparameters - wie beispielsweise der mittlere axiale Abstand der Ionen - einen diskontinuierlichen Sprung (bei einem Phasenübergang erster Ordnung erfährt der Ordnungsparameter selbst einen diskontinuierlichen Sprung. Die Übergänge zwischen Plasma, flüssig und fest in Unterabschnitt 2.3.1 sind Phasenübergänge erster Ordnung). Wir können also β verändern entweder durch Veränderung der angelegten Elektrodenspannung, oder durch Anpassung der Rotationsfrequenz durch zusätzlich angelegte rotierende elektrische Felder, mit denen sogar eine Stabilisierung [Huang u. a., 1998] möglich ist.

In Abbildung 2.9 ist ein Phasendiagramm für verschiedene kristalline Strukturen dargestellt. Die Abbildung ist entnommen aus [Dubin und O'Neil, 1999], und sie fasst Ergebnisse aus verschiedenen theoretischen Untersuchungen zusammen [Schiffer, 1993; Dubin, 1993]. Für große Werte von β bilden die Ionen eine eindimensionale Coulomb-Kette entlang der z -Achse. Verringert man den Wert von β , so gibt es einen Phasenübergang zu einer Zick-Zack-Anordnung und schließlich zu einer Helixstruktur [Schiffer, 1993; Fishman u. a., 2008]. Für mittlere Werte von β gibt es einen Übergang zu einer Phase mit konzentrischen Schalen [Gilbert u. a., 1988].

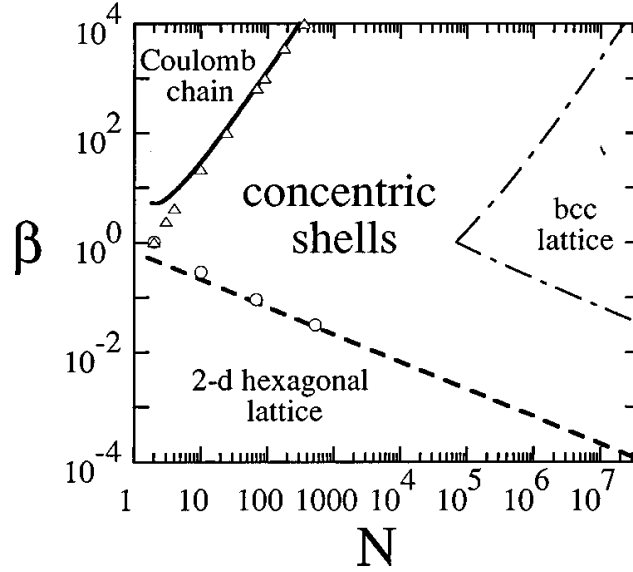


Abbildung 2.9: Phasenübergänge zwischen verschiedenen Kristallstrukturen. Der Ordnungsparameter für eine gegebene Anzahl an Ionen ist gegeben durch den Anisotropieparameter β . Die Abbildung ist entnommen aus [Dubin und O’Neil, 1999]

Für uns ist der Fall sehr kleiner β wichtig, für die sich eine planare hexagonale Gitterstruktur ergibt. Die auftretenden Gitterstrukturen wurden dabei in Experimenten beobachtet [Mitchell u. a., 1998], bei denen die Rotationsfrequenz ω_r des Plasmas und damit der Anisotropieparameter β schrittweise erhöht wurden. Ab einem bestimmten Wert von β ist es energetisch günstiger, dass sich die Ionen in zwei versetzte Ebenen mit quadratischer oder rhombischer Gitterstruktur anordnen. Eine weitere Erhöhung der Rotationsfrequenz überführt diese dann wieder in eine hexagonale Struktur. Schließlich treten drei rhombische Ebenen auf usw. Analytisch lässt sich auch die Phasengrenze der zweidimensionalen hexagonalen Gitterstruktur bestimmen, diese ist gegeben durch [Dubin, 1993; Dubin und O’Neil, 1999]:

$$\beta_{crit}(N) = \frac{0.665}{\sqrt{N}} \quad (2.38)$$

Wir können die Gleichung invertieren, um für gegebenes β die kritische Kristallgröße bestimmen:

$$N_{crit}(\beta) = \left(\frac{0.665}{\beta} \right)^2 \quad (2.39)$$

N_{crit} ist dabei natürlich nicht ganzzahlig. Die maximale Kristallgröße ergibt sich dann durch abrunden auf die nächste ganze Zahl. Dabei ist $N_{crit}(\beta)$ bei festgehaltener Zyklotronfrequenz genauer eine Funktion der Rotationsfrequenz ω_r und der axialen Frequenz ω_z , so dass für jede Kristallgröße und gewählte Rotationsgeschwindigkeit die

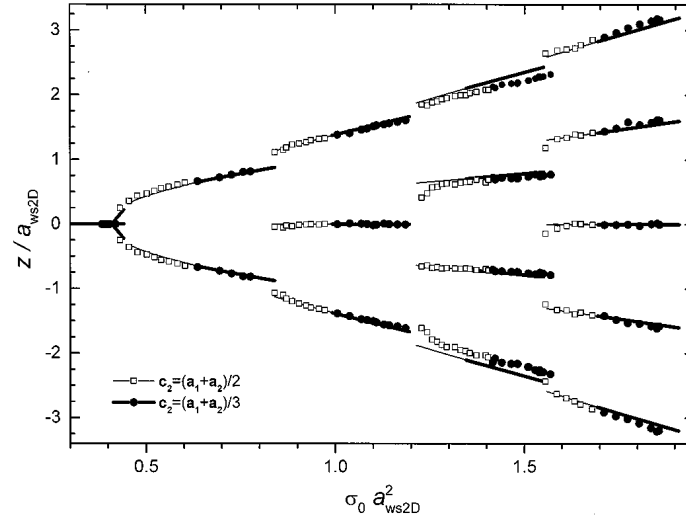


Abbildung 2.10: Verschiedene planare Phasen. Aufgetragen ist die axiale Position der Ebenen als Funktion der Teilchendichte im Inneren des Plasmas (normiert mit dem Wigner-Seitz-Radius in 2D a_{WS2D}). Die hexagonale Phase ist angegeben durch die schwarzen Kreise, während die quadratischen und rhombischen Phasen durch weiße Quadrate bezeichnet sind. Abbildung entnommen aus [Mitchell u. a., 1998]

Struktur des Kristalls immer noch mit dem freien Parameter der axialen Frequenz einstellen können.

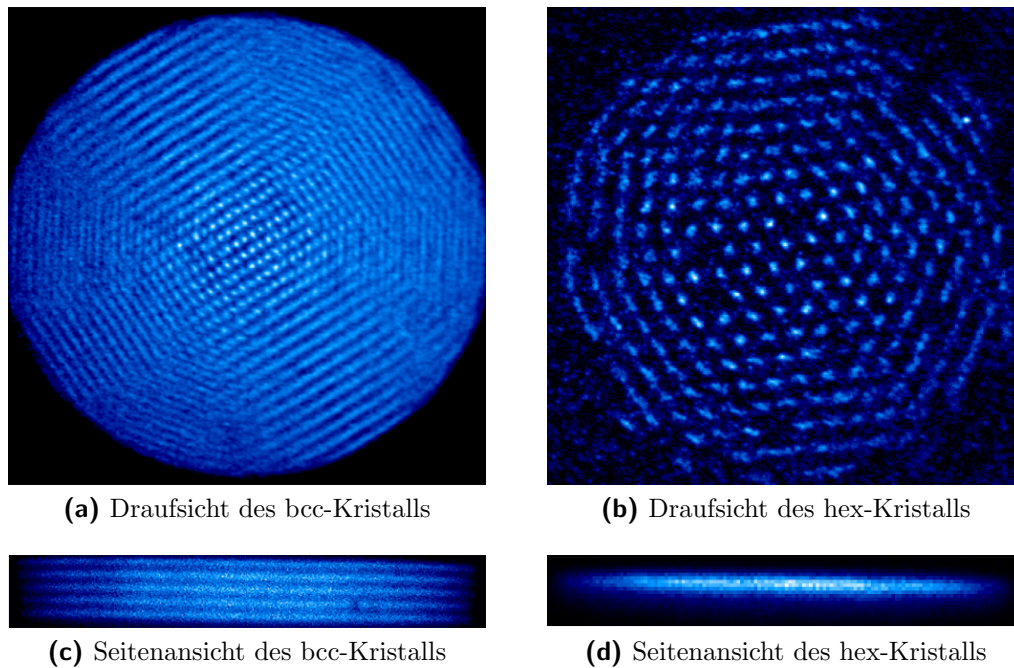


Abbildung 2.11: Experimentelle Bilder von Ionenkristallen in einer Penningfalle. Dargestellt ist dabei die Kristallstruktur in Drauf- und Seitenansicht. (a) und (c): Der Kristall kristallisiert in einer bcc-Struktur und hat fünf Schichten. (b) und (d): Der Kristall kristallisiert in einer hexagonalen Gitterstruktur in einer Ebene. Nicht alle Ionen befinden sich in einem fluoreszierenden Zustand, weswegen es scheinbare Fehlstellen im Kristall gibt. Beide Abbildungen haben einen verschiedenen Größenmaßstab, weswegen der Ionenabstand verschieden erscheint. Abbildung entnommen aus [Mitchell u. a., 1998]

Bestimmung der Normalmoden

Wir wenden uns nun der numerischen Bestimmung der Normalmoden eines Ionenkristalls in einer Penningfalle zu. Wie in Kapitel 2 gezeigt, vollzieht der Kristall eine starre Rotation um die z -Achse. Wir wollen dies jedoch nicht als Ausgangspunkt für unsere Überlegungen nehmen, sondern diese Eigenschaft durch Berechnungen überprüfen. Für die numerische Berechnung geben wir nur die Konstanten der Bewegung vor, also Gesamtenergie und Gesamtdrehimpuls der Teilchen. Wir bestimmen die Positionen und Impulse für Temperatur $T = 0$ K durch Minimierung der Energie mit einem vorgegebenen Gesamtdrehimpuls als Nebenbedingung, und überprüfen dann, ob die Lösungen eine starre Rotation durchführen, anstatt dies über die Vorgabe einer Winkelgeschwindigkeit implizit anzunehmen. Je nach Wahl der Parameter können bei Änderung des Gesamtdrehimpulses Übergänge zwischen verschiedenen strukturellen Phasen durchlaufen werden.

Der nächste Schritt ist dann die Entwicklung des Hamiltonoperators um die Gleichgewichtspositionen bis in quadratischer Ordnung. Wir wechseln dabei ins Koordinatensystem, das mit dem Kristall rotiert, so dass wir nur kleine Auslenkungen weg von der Gleichgewichtskonfiguration der Ionen im rotierenden Bezugssystem betrachten.

Anschließend führen wir eine kanonische Transformation der Koordinaten und Impulse durch, so dass der entwickelte Hamiltonoperator in den transformierten Koordinaten - den *Normalkoordinaten* - diagonal ist. Dabei gilt es dann zwei Fälle zu unterscheiden: Für einen Ionenkristall, der gerade mit halber Zyklotronfrequenz $\omega_c/2$ rotiert, also bei maximaler Dichte, ist die Bestimmung der Normalkoordinaten einfach und gleichartig für alle Teilchenzahlen N . Für andere Rotationsgeschwindigkeiten bleibt die Kopplung zwischen den Ortskoordinaten und den Impulsen erhalten, und eine direkte Transformation ist nicht möglich. Für geringe Teilchenzahlen lassen sich analytisch kanonische Transformationen zur Entkopplung von Koordinaten und Impulse bestimmen, jedoch ist eine Verallgemeinerung dieses Schemas nicht generell möglich, wie eine genauere Analyse der mathematischen Struktur der kanonischen Transformationen zeigt. Wir beschränken

uns in diesem Kapitel also auf die Diskussion der Normalmoden für kleine Ionenzahlen. Abschließend skizzieren wir, wie sich ein allgemeines Lösungsschema für beliebige Teilchenzahlen finden lässt.

3.1. Bestimmung der Gleichgewichtskonfiguration

Zuerst bestimmen wir die Koordinaten und Impulse der Gleichgewichtskonfiguration von N Ionen unter der Nebenbedingung eines gegebenen Gesamtdrehimpulses. Wir wollen diese Nebenbedingung im folgenden dann variieren, um die Gleichgewichtspositionen und die Rotationsgeschwindigkeiten der Teilchen als Funktion des Gesamtdrehimpulses zu erhalten. Daraus erhalten wir implizit die Gleichgewichtspositionen als Funktion der Rotationsgeschwindigkeiten, die in den Berechnungen der folgenden Abschnitte benötigt werden.

Wie wir in Abschnitt 2.3 gesehen haben, kann es bei Veränderung der Rotationsfrequenz je nach Wahl der restlichen Parameter zu strukturellen Phasenübergängen kommen. Deshalb müssen wir im folgenden zwei Bereiche unterscheiden, die durch den Maximalwert des Anisotropieparameters β charakterisiert sind. β wird gerade bei einer Rotationsfrequenz von $\omega_c/2$ maximal.

- a) $\beta_{max} \ll 1$: Hier sind die Zyklotronfrequenz ω_c und die Axialfrequenz ω_z so gewählt, dass für alle Rotationsfrequenzen die zweidimensional hexagonal kristallisierte Phase vorliegt.
- b) $\beta_{max} > 1$: Hier sind die Parameter so gewählt, dass der Kristall sich für niedrige (bzw. sehr hohe) Rotationsgeschwindigkeiten, in der zweidimensional hexagonalen Phase befindet, aber für mittlere Rotationsgeschwindigkeiten, also größere β , aber Übergänge zu anderen strukturellen Phasen möglich sind.

3.1.1. Bereich ohne Phasenübergang

Die Bedingung für $\beta_{max} \ll 1$ ist gegeben durch:

$$\frac{\omega_c^2/4}{\omega_z^2} - \frac{1}{2} \ll 1$$

$$\omega_c/\sqrt{6} \ll \omega_z \stackrel{(2.13)}{<} \omega_c/\sqrt{2} \quad (3.1)$$

Wir beschränken uns also auf einen Parameterbereich, welcher näherungsweise gegeben ist durch $0.408 < \omega_z/\omega_c < 0.707$. In Abbildung 3.1 ist für verschieden gewählte Axialfrequenzen der maximale Wert des Anisotropieparameters sowie die kritische Kristallgröße

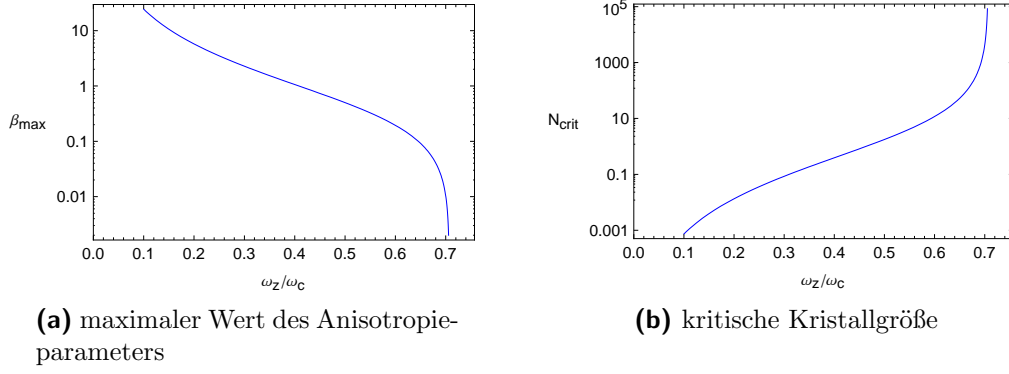


Abbildung 3.1: Anisotropieparameter und kritische Kristallgröße (bei einer Kristallrotation mit $\omega_c/2$) als Funktion der axialen Frequenz

(bei Rotation mit $\omega_c/2$) aufgetragen. Wir sehen, dass nur für Werte der Axialfrequenz sehr nahe an der Stabilitätsgrenze $\omega_z = 1/\sqrt{2}\omega_c$ der Kristall für alle Rotationsfrequenzen in der zweidimensional hexagonalen Phase bleibt.

Wir wählen für die folgenden Berechnungen also $\omega_z/\omega_c = 0.7$, um möglichst große Kristalle berechnen zu können, ohne dass dabei ein Phasenübergang durchschritten wird. Damit ist $\omega_1/\omega_c = \sqrt{2}/20 \approx 0.0707$, wodurch der Bereich erlaubter Rotationsgeschwindigkeiten sehr eingeschränkt wird:

$$0.4293 < \omega_r < 0.5707 \quad (3.2)$$

Das maximale β ergibt sich dann zu $\beta_{max} = 1/98 \approx 0.0102$. Damit bleiben wir nach Gleichung (2.39) bei Kristallen bis zu einer Größe von 4247 Ionen für alle Rotationsfrequenzen in der planaren hexagonalen Phase, da der Maximalwert von β immer unter dem für den Phasenübergang kritischen Wert bleibt.

Energieminimierung für zwei Ionen

Wir werden zunächst den Fall von zwei Ionen ausführlicher behandeln, um die grundsätzliche Vorgehensweise zu erläutern. Die Überlegungen für größere N sind identisch, und werden im nächsten Unterabschnitt summarisch präsentiert.

Wir minimieren dabei den Hamiltonoperator (2.19) unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Gesamtdrehimpulses. Die Minimierung führen wir dabei im mit $\omega_c/2$ rotierenden Bezugssystem durch, da in diesem die Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen verschwindet, wodurch auch die numerischen Berechnungen stabiler und schneller werden. Die bei der Minimierung erhaltene Energie ist in Abbildung 3.2a aufgetragen.

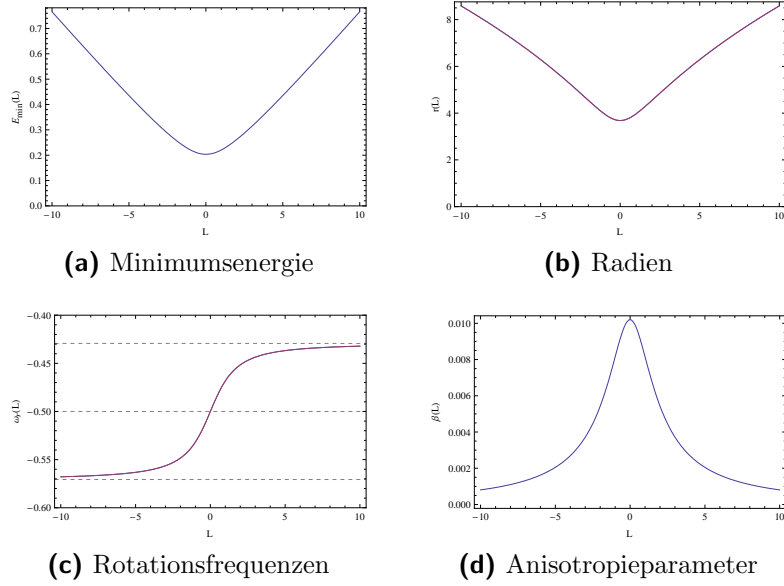


Abbildung 3.2: Ergebnisse der Minimierung für zwei Ionen.

Sie hat für kleine Drehimpulse näherungsweise ein quadratisches Verhalten, für größere Drehimpulse nähert sie sich an eine lineare Funktion an (dieses Verhalten kann insbesondere durch Vergrößerung bzw. Verkleinerung des Wertebereiches des Gesamtdrehimpulses genauer beobachtet werden). Schaut man sich die Rotationsenergie eines Systems von Massenpunkten gegeben durch $E_{rot} = \frac{1}{2} \sum_i m r_i^2 \omega_i^2$ an, so kann man dieses Verhalten qualitativ so deuten, dass für kleine Werte des Gesamtdrehimpulses vor allem die Rotationsfrequenz erhöht, für größere Werte vor allem nur noch das Massenträgheitsmoment durch Erhöhung der radialen Abstände wächst¹.

Als weiteres Ergebnis der Energieminimierung erhalten wir die Koordinaten und Impulse der Ionen. Beide Teilchen nehmen dabei den gleichen radialen Gleichgewichtsabstand ein, in Teilabbildung 3.2b sind beide Positionen direkt übereinander aufgetragen, so dass ein Unterscheid nicht sichtbar ist. Dies wird bei einer genaueren Untersuchung der Varianz der Radien der einzelnen Teilchen deutlich, die im Rahmen der numerischen Genauigkeit Null ist.

Weiter ordnen sich die Ionen nur in der radialen Ebene an, sie befinden sich also in Übereinstimmung mit den Überlegungen in Unterabschnitt 2.3.2 nur in der planaren Phase. Des weiteren wurde überprüft, ob die Lösung tatsächlich eine starre Rotation liefert. Dafür müssen die radialen und axialen Impulse verschwinden, und nur die Drehimpulse dürfen endliche Werte annehmen. Für die Darstellung der tatsächlichen Win-

¹Man kann daraus sogar schließen, dass die radialen Abstände der Teilchen für große Gesamtdrehimpulse näherungsweise mit der Wurzel des Gesamtdrehimpulses zunehmen.

Winkelgeschwindigkeiten der Ionen benötigen wir die Umrechnung zwischen den kanonischen Drehimpulsen p_{θ_i} und den Winkelgeschwindigkeiten $\dot{\theta}_i$, welche gegeben ist durch

$$p_{\theta_i} = mr_i^2 \dot{\theta}_i + eA_{\theta}(r_i)r_i = mr_i^2 \dot{\theta}_i + \frac{m}{2}\omega_c r_i^2. \quad (3.3)$$

Damit können dann die Winkelgeschwindigkeiten bestimmt werden, welche wir in Abbildung 3.2c aufgetragen haben. Wir sehen auch hier nur eine Kurve, da alle Winkelgeschwindigkeiten im Rahmen der numerischen Fehlergenauigkeit identisch sind. Auch hier ist die Varianz der Winkelgeschwindigkeiten der einzelnen Teilchen nicht von Null zu unterscheiden.

Weiter wollen wir uns den Anisotropieparameter als Funktion des Gesamtdrehimpulses anschauen (Abbildung 3.2d). Das einzige Maximum wird dabei für $\omega_c/2$ angenommen. Weiter sind der Anisotropieparameter und seine erste Ableitung stetig, dies gilt ebenso für die Koordinaten und Winkelgeschwindigkeiten der Teilchen. Daraus folgt implizit, dass es keine Phasenübergänge erster oder zweiter Ordnung gibt [Landau und Lifschitz, 1980].

Größere Ionenzahlen

Für ein System aus drei oder vier Ionen (Abbildung 3.3) sind die Ergebnisse vergleichbar, wie man den Abbildungen 3.3 und 3.4 entnehmen kann. So erhöhen sich natürlich die Minimalenergie und die radialen Abstände für alle durchlaufenen Werte des Gesamtdrehimpulses, und die Funktion für die Rotationsfrequenz hat einen weniger steilen Übergang bei $L = 0$. Dadurch verändert sich natürlich auch der Verlauf des Anisotropieparameter, da dieser direkt von der Rotationsgeschwindigkeit abhängt. Weiter haben wir die Koordinaten und Impulse und ihre Varianzen als Funktion des Gesamtdrehimpulses berechnet. Die Ergebnisse sind aber vergleichbar mit denen in Abbildung ??, die entsprechende Koordinaten und Impulse sind identisch Null, weshalb auf eine explizite Darstellung hier verzichtet wurde.

In Abbildungen 3.5 und 3.6 sind die erhaltenen Gleichgewichtspositionen für verschiedene Teilchenzahlen abgebildet. Wir haben dies hier nur für den Wert einer Rotationsfrequenz dargestellt, da die Struktur als Funktion der Rotationsgeschwindigkeit nur kontinuierlich ändern kann, da kein Phasenübergang durchlaufen wird. Der Größenmaßstab der Abbildungen ist dabei in dimensionslosen Einheiten angegeben, also $m = 1, e = 1, \epsilon_0 = 1/4\pi, \omega_c = 1$.

Jedoch erhöht sich mit zunehmender Teilchenzahl die Wahrscheinlichkeit, dass die numerische Bestimmung des Energieminimums nur ein lokales anstelle des globalen Minimums findet. Dies führt jedoch unter Umständen zu einer Veränderung der berechneten Kristallstruktur, weshalb der Algorithmus noch weiteren Verbesserungen bedarf.

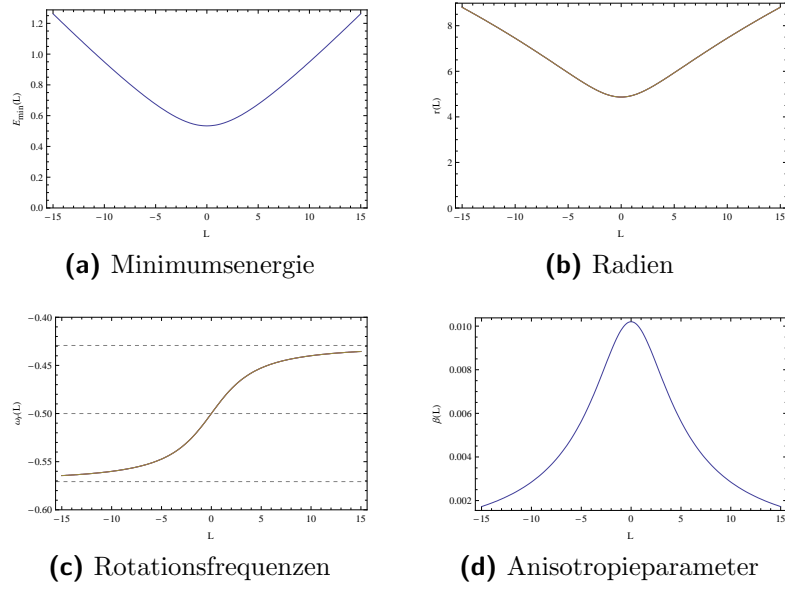


Abbildung 3.3: Ergebnisse der Minimierung für drei Ionen

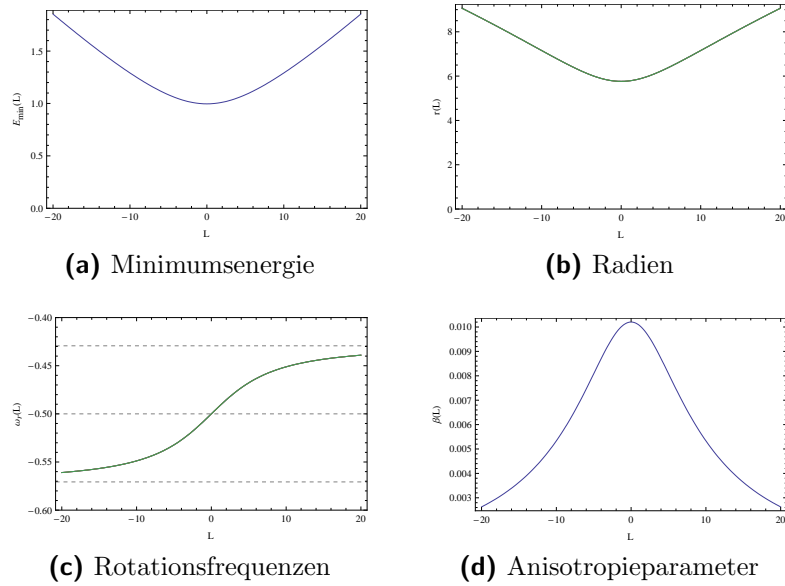


Abbildung 3.4: Ergebnisse der Minimierung für vier Ionen

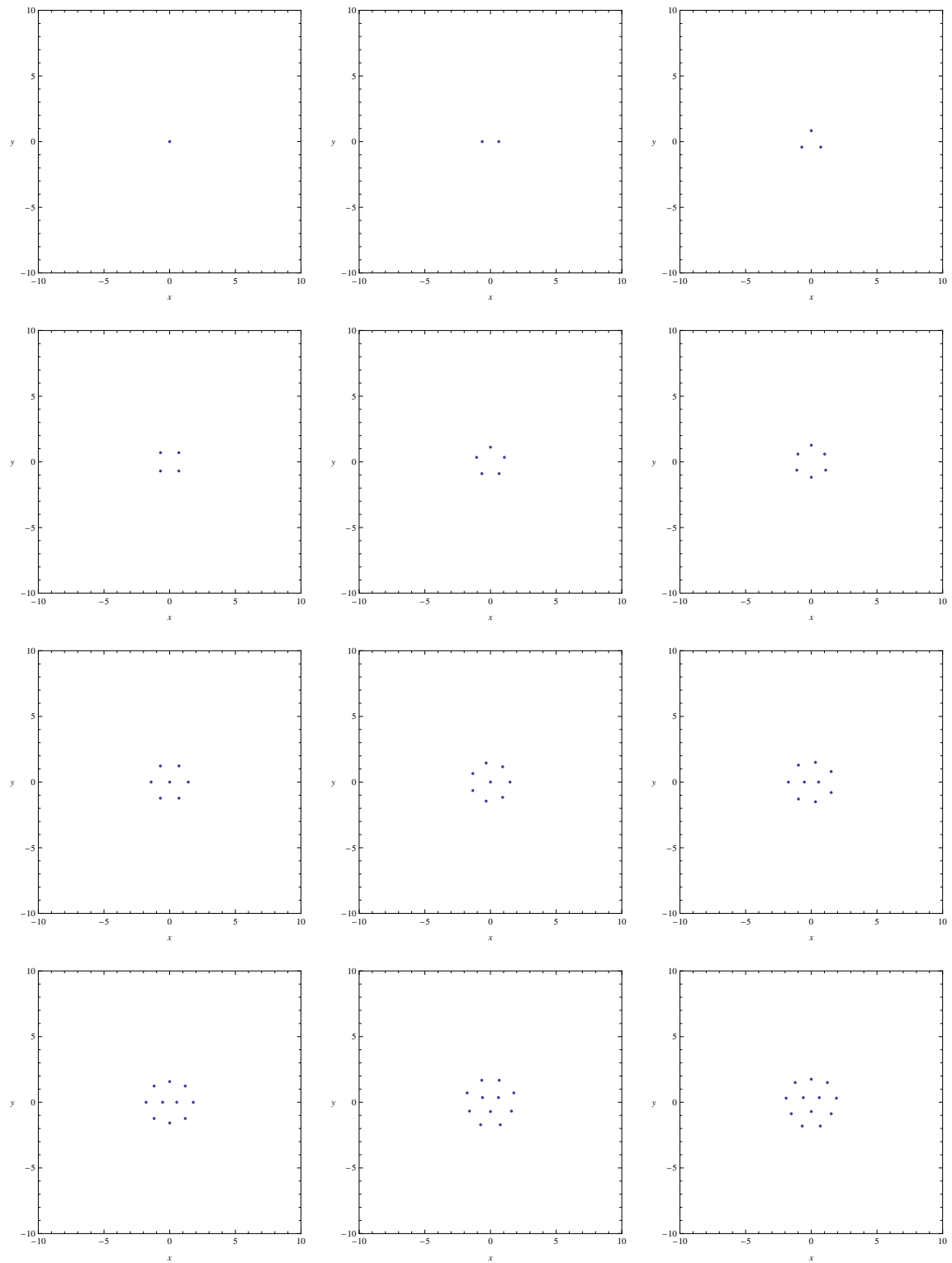


Abbildung 3.5: Gleichgewichtspositionen für 1 bis 12 Ionen. Der Größenmaßstab ist dabei in dimensionslosen Einheiten.

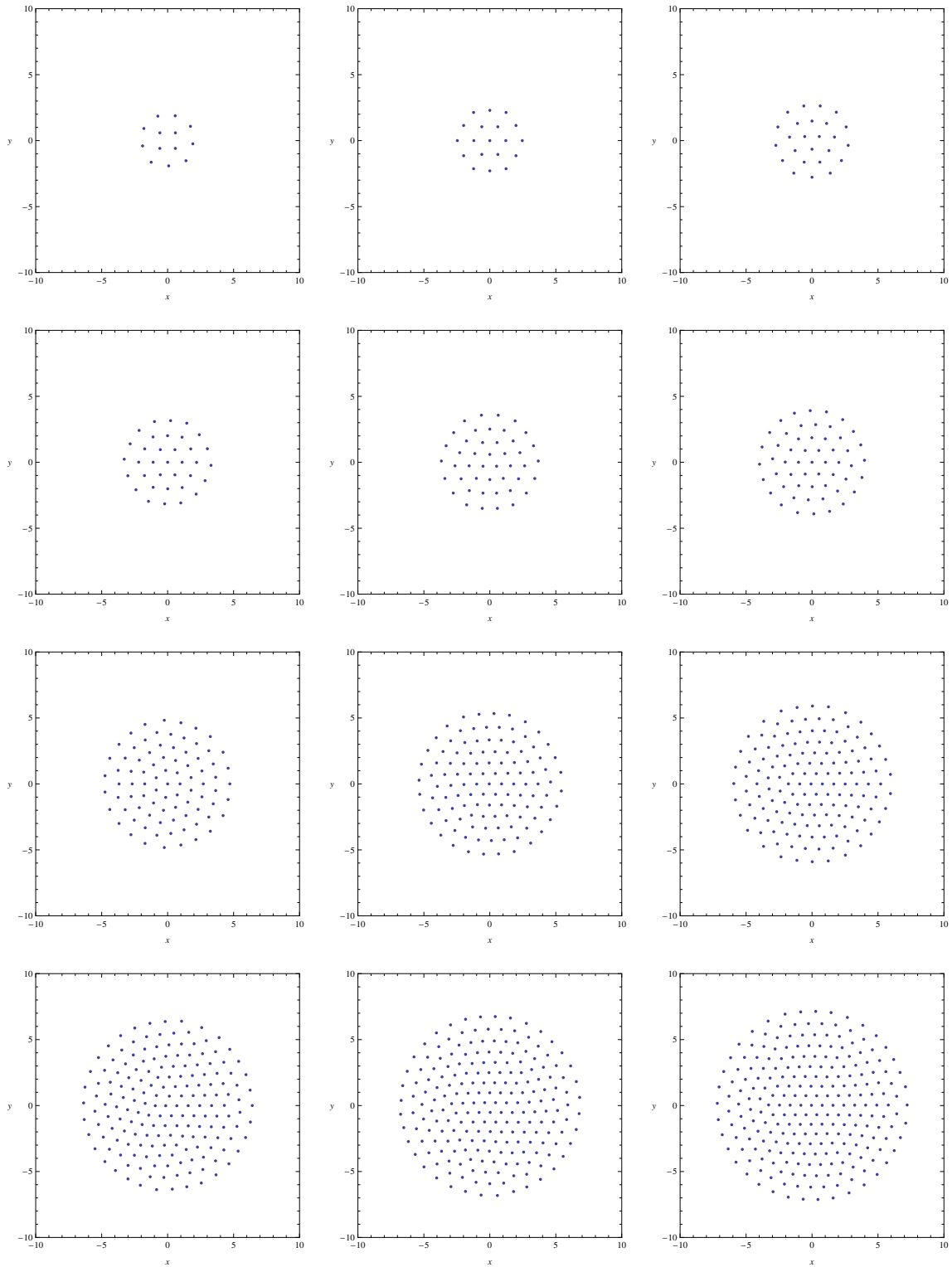


Abbildung 3.6: Gleichgewichtspositionen für 13, 19, 25, 35, 45, 55, 85, 115, 145, 175, 205, 235 Ionen. Der Größenmaßstab ist dabei in dimensionslosen Einheiten.

3.1.2. Bereich mit Phasenübergang

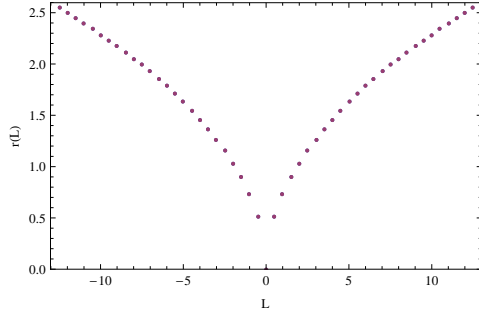
Da wir im Experiment möglichst geringe Rotationsfrequenzen erreichen wollen, müssen wir den Bereich der erlaubten Rotationsgeschwindigkeiten ausdehnen. Dies erreichen wir, indem wir ω_z erniedrigen. Dadurch befinden wir uns aber nicht mehr für alle Rotationsfrequenzen in der selben strukturellen Phase, sondern es treten für mittlere Rotationsgeschwindigkeiten Phasenübergänge auf.

ω_r/ω_c	ω_1/ω_c	ω_z/ω_c
0.1	0.4	0.424
0.01	0.49	0.141
0.001	0.499	0.0447

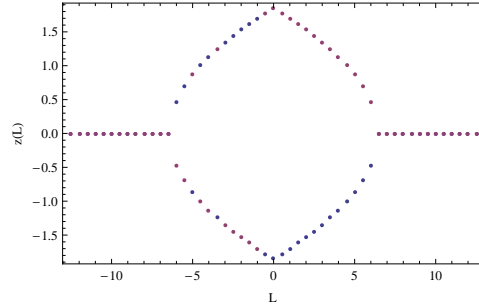
Tabelle 3.1: Axialfrequenzen für verschiedene Rotationsfrequenzen

Wir wollen die Parameter derart wählen, dass wir eine minimale Rotationsfrequenz bis zu 1% der Zyklotronfrequenz erreichen können, also $\omega_1 = 0.49 \omega_c$. Daraus folgt, dass wir die Axialfrequenz zu $\omega_z = (3\sqrt{11})/(50\sqrt{2}) \omega_c \approx 0.141 \omega_c$ wählen müssen. Wir haben für diese Parameter die Energieminimierung für verschiedene Rotationsfrequenzen durchgeführt, und werden im folgenden die Ergebnisse für die erhaltenen Gleichgewichtspositionen, Rotationsgeschwindigkeiten sowie strukturellen Phasen mit dem vorherigen Abschnitt vergleichen.

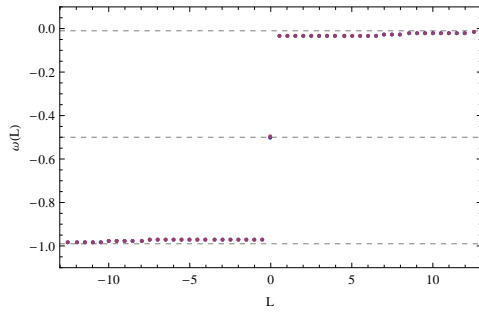
Wie in Abbildung 3.7 zu sehen ist, befindet sich der Kristall bei Gesamtdrehimpuls Null gerade in der Phase, in der sich die Ionen entlang der z-Achse ausrichten. Wird der Gesamtdrehimpuls erhöht, erfahren die Ionen eine Verschiebung von der z-Achse weg, so dass sie sich in einer Zick-Zack-Konfiguration befinden. Bei einer weiteren Erhöhung des Gesamtdrehimpulses erhöhen sich die radialen Abstände, während die axialen Abstände so weit sinken, bis sie schließlich Null werden, und der Kristall tatsächlich in die planare Phase übergeht. Die Phasenübergänge lassen sich sehr gut an den axialen Abständen (Teilabbildung 3.7b), der Rotationsgeschwindigkeit (Teilabbildung 3.7d) sowie dem Anisotropieparameter (Teilabbildung 3.7f) ablesen.



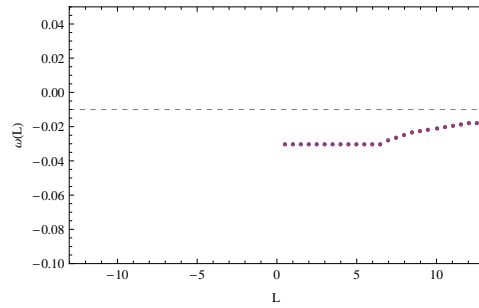
(a) radialer Abstand vom Nullpunkt



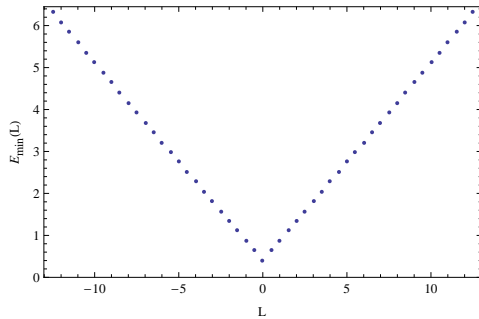
(b) axialer Abstand vom Nullpunkt



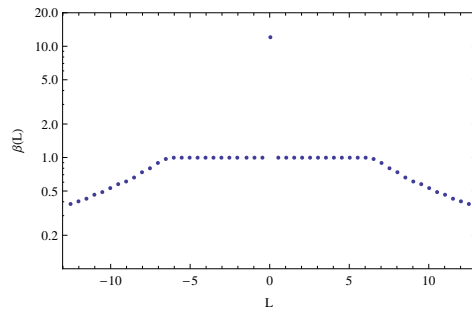
(c) Rotationsfrequenz



(d) Rotationsfrequenz



(e) Minimumsenergie



(f) Anisotropieparameter

Abbildung 3.7: Energieminimierung für zwei Ionen im Phasenübergangsbereich. Der Phasenübergang lässt sich deutlich an den axialen Abständen 3.7b, an der Rotationsfrequenz 3.7d, sowie am Anisotropieparameter ablesen 3.7f.

3.2. Quadratische Entwicklung des Hamiltonoperators

Im letzten Abschnitt haben wir die Koordinaten und Impulse im Gleichgewicht des Energieminimums bestimmt. Wir wollen die Koordinaten und Impulse der Teilchen nun schreiben als:

$$p_k(t) = p_{0k} + \delta p_k(t) \qquad q_k(t) = q_{0k} + \delta q_k(t) \qquad (3.4)$$

wobei mit $p_k(t), q_k(t)$ die Koordinaten und Impulse der Teilchen bezeichnet sind, mit p_{0k}, q_{0k} die Koordinaten und Impulse des Gleichgewichts, und durch $\delta p_k(t), \delta q_k(t)$ Auslenkungen aus dem Gleichgewicht beschrieben werden. Zudem führen wir eine neue, kompaktere Indexschreibweise $k = \{i, \nu\}$ ein, wobei k von 1 bis $3N$ läuft. Wir wollen jedoch im Folgenden auf beide Indexschreibweisen zurückgreifen, aus dem Kontext der Verwendung ist dabei leicht ersichtlich, welche der beiden Schreibweisen gewählt wurde.

Für die Bestimmung der Normalkoordinaten müssen wir den Hamiltonoperator in seine Taylorreihe um die Gleichgewichtspositionen entwickeln. Dazu wechseln wir in das mit Koordinatensystem, das mit dem Kristall rotiert. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \approx & H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) + \sum_{k=1}^{3N} \frac{\partial H}{\partial p_k}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \delta p_k + \sum_{k=1}^{3N} \frac{\partial H}{\partial q_k}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \delta q_k \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{3N} \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial p_l}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \delta p_k \delta p_l + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{3N} \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial q_l}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \delta q_k \delta q_l \\ & + \sum_{k,l=1}^{3N} \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_l}(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \delta p_k \delta q_l + \mathcal{O}(\delta \mathbf{q}^3) \end{aligned} \qquad (3.5)$$

Dabei haben wir die Entwicklung nach der zweiten Ordnung abgebrochen. Die höheren Ordnungen sind natürlich nur noch vom Coulombpotential, also nur noch von den Koordinaten, abhängig, da die Impulse nur quadratisch, oder in linear in den Kopp-
lungstermen vorkommen. Die Entwicklung ist dabei nur für kleine Auslenkungen um die Gleichgewichtspositionen herum gültig, da sonst die höheren Terme der Entwicklung des Coulombpotentials nicht mehr vernachlässigbar sind.

Der konstante Term $H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ in der Entwicklung hat keinen Einfluß auf die Form der Bewegungsgleichungen, und kann deswegen im Folgenden vernachlässigt werden. Weiter überprüfen wir, ob die ersten Ableitungen ausgewertet an den Gleichgewichtspositionen identisch Null sind, also die erste Ordnung der Entwicklung verschwindet. Eine nicht-verschwindende Lösung würde bedeuten, dass wir nicht die korrekten Gleichgewichtspositionen bestimmt haben.

In der Entwicklung (3.5) haben wir Terme, in denen sowohl Impulse als auch Koordinaten vorkommen. Diese sind gegeben durch:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p_{i,x} \partial q_{i,y}} = +\frac{\omega'_c}{2} \quad \frac{\partial^2 H}{\partial p_{i,y} \partial q_{i,x}} = -\frac{\omega'_c}{2} \quad (3.6)$$

Hier steht die effektive Zyklotronfrequenz, da die Stärke der Kopplung von der Wahl des Bezugssystems abhängt. Wir können den entwickelten Hamiltonoperator als Matrix darstellen, da die Entwicklung rein quadratisch in Koordinaten und Impulsen ist.

Da p_{0k} und q_{0k} konstant sind, gilt für die Differentiale:

$$d(\delta p_k) = dp_k \quad d(\delta q_k) = dq_k \quad (3.7)$$

Wir können dies in die Entwicklung (3.5) einsetzen. Um dann im Folgenden nicht immer δp_k und δq_k schreiben zu müssen, wollen wir diese der Einfachheit halber mit p_k und q_k bezeichnen, aber im Hinterkopf behalten, dass dadurch nur die Auslenkungen aus den Gleichgewichtspositionen beschrieben werden

Wir wollen die Impulse und Koordinaten als Spalten- bzw. Zeilenvektoren schreiben:

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_{1,x} \\ p_{1,y} \\ \vdots \\ p_{N,x} \\ p_{N,y} \end{pmatrix} \quad \mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_{1,x} \\ q_{1,y} \\ \vdots \\ q_{N,x} \\ q_{N,y} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Wir können damit den Hamiltonoperator darstellen als $6N \times 6N$ -Matrix

$$H = (\mathbf{p}^t \quad \mathbf{q}^t) \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp} & \mathcal{H}_{pq} \\ \mathcal{H}_{qp} & \mathcal{H}_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

wobei die $3N \times 3N$ -Submatrizen gegeben sind durch:

$$\mathcal{H}_{pp} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial p_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial p_2} & \cdots \\ \frac{\partial^2 H}{\partial p_2 \partial p_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_2^2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \mathcal{H}_{pq} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_2} & \cdots \\ \frac{\partial^2 H}{\partial p_2 \partial q_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_2 \partial q_2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$\mathcal{H}_{qp} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial p_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial p_2} & \cdots \\ \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial p_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial p_2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \mathcal{H}_{qq} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial q_2} & \cdots \\ \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial q_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_2^2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Da die partiellen Ableitungen vertauschen, gilt $\mathcal{H}_{pq}^t = \mathcal{H}_{qp}$. Weiter sind \mathcal{H}_{pp} und \mathcal{H}_{qq} symmetrisch, $\mathcal{H}_{pp}^t = \mathcal{H}_{pp}$ bzw. $\mathcal{H}_{qq}^t = \mathcal{H}_{qq}$ (\mathcal{H}_{pq} und \mathcal{H}_{qp} sind jedoch nicht symmetrisch). Folglich ist der Hamiltonoperator \mathcal{H} erwartungsgemäß symmetrisch:

$$\mathcal{H}^t = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp}^t & \mathcal{H}_{qp}^t \\ \mathcal{H}_{pq}^t & \mathcal{H}_{qq}^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp} & \mathcal{H}_{pq} \\ \mathcal{H}_{qp} & \mathcal{H}_{qq} \end{pmatrix} = \mathcal{H} \quad (3.12)$$

\mathcal{H}_{pp} ist dabei zudem diagonal, sogar proportional zur Einheitsmatrix²: $\mathcal{H}_{pp} = \frac{1}{2m} \mathbf{1}$. Also

$$\mathcal{H}_{pp} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{2m} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Für die Kopplungsmatrizen \mathcal{H}_{pq} bzw. \mathcal{H}_{qp} gilt:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p_{i,\sigma} \partial q_{j,\tau}} = \delta_{ij} \epsilon_{\sigma\tau z} \frac{\omega'_c}{2}, \quad (3.14)$$

also ist \mathcal{H}_{pq} blockdiagonal in den Blöcken zugehörig zum gleichen Ion

$$\mathcal{H}_{pq} = \begin{pmatrix} \mathcal{C} & 0 & \dots \\ 0 & \mathcal{C} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

mit den Unterblöcken

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} 0 & +\frac{\omega'_c}{2} & 0 \\ -\frac{\omega'_c}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Die gemischten Ableitungen in \mathcal{H}_{qq} verschwinden im Allgemeinen nicht, weswegen dies nicht vereinfacht werden kann.

3.3. Normalmodentransformation

Wir suchen eine Basis für unsere kanonischen Variablen derart, dass der Hamiltonoperator sich in ihr diagonal darstellen lässt. Dazu können wir aber den Hamiltonoperator nicht einfach diagonalisieren, indem wir eine orthogonale Transformation T über die Bestimmung der Eigenvektoren des Hamiltonoperators H ermitteln, so dass THT^T diagonal ist. Denn die Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \quad (3.17)$$

dürfen bei der Transformation der Koordinaten und Impulse nicht ihre Form ändern. Die Transformation muss *kanonisch* sein, d.h. für eine Transformation $T : \mathbf{p}, \mathbf{q} \mapsto \mathbf{P}, \mathbf{Q}$ zu neuen Koordinaten und Impulsen P_k, Q_k muss gelten:

$$\{P_i, Q_j\} = \delta_{ij} \quad \{P_i, P_j\} = 0 \quad \{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (3.18)$$

²Im Falle ohne Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen wird bei der Bestimmung der Normalkoordinaten die Aufmerksamkeit auf die Entwicklung des Potentials nach den Koordinaten gerichtet, da eben die Entwicklung der gemischten Teile \mathcal{H}_{pq} bzw. \mathcal{H}_{qp} verschwindet und der Impulsteil der Entwicklung eben proportional zur Einheitsmatrix ist.

Dabei sind die *Poissonschen Klammern* für zwei Größen u und v wie folgt definiert:

$$\{u, v\} = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q_k} - \frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} \right) \quad (3.19)$$

Wir können dann die Bewegungsgleichungen des transformierten Hamiltonoperators in den neuen Koordianten einfach lösen, da dieser diagonal ist und die Bewegungsgleichungen somit entkoppeln. Die Lösung ist dann in den transformierten Koordinaten und Impulsen gegeben, so dass wir durch Rücktransformation die Lösung in den ursprünglichen Koordinaten und Impulse erhalten.

3.3.1. Kanonische Transformationen

Bevor wir uns der eigentlichen Untersuchung zuwenden, ist es lehrreich, den Fall einer kanonischen Koordinatentransformation für den Fall ohne Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen zu untersuchen.

Kanonische Koordiantentransformation - Fall ohne Kopplung

Enthält der Hamiltonoperator keine Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen, so lässt er sich nach einer Entwicklung in quadratischer Ordnung schreiben als

$$\bar{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T \bar{\mathcal{H}}_{pp} \mathbf{p} + \mathbf{q}^T \bar{\mathcal{H}}_{qq} \mathbf{q}, \quad (3.20)$$

mit symmetrischen Matrizen $\bar{\mathcal{H}}_{pp}$ und $\bar{\mathcal{H}}_{qq}$. Wir bestimmen nun das Eigensystem zu $\bar{\mathcal{H}}_{qq}$, und erhalten dadurch eine orthogonale lineare Abbildung V mit $V^T V = \mathbb{1}$. Deren Spalten sind gegeben durch die normierten Eigenvektoren von $\bar{\mathcal{H}}_{qq}$, sowie eine Diagonalmatrix Ω , welche über folgende Gleichung miteinander verknüpft sind:

$$\bar{\mathcal{H}}_{qq} = V^T \Omega V \quad (3.21)$$

Wir setzen wir dies in Gleichung (3.20) ein, und erhalten

$$\begin{aligned} \bar{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \mathbf{p}^T \bar{\mathcal{H}}_{pp} \mathbf{p} + \mathbf{q}^T \bar{\mathcal{H}}_{qq} \mathbf{q} \\ &= \frac{1}{2m} \mathbf{p}^T \mathbf{p} + \mathbf{q}^T V^T \Omega V \mathbf{q} \\ &= \frac{1}{2m} \mathbf{p}^T \overbrace{V^T V}^{\mathbb{1}} \mathbf{p} + \mathbf{q}^T V^T \Omega V \mathbf{q} \\ &= \frac{1}{2m} (V \mathbf{p})^T (V \mathbf{p}) + (V \mathbf{q})^T \Omega (V \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Führen wir jetzt eine Koordinatentransformation durch,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V\mathbf{p} \\ V\mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

so sehen wir, dass der Hamiltonoperator in den neuen Koordinaten diagonal ist:

$$\bar{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \bar{H}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^T \mathbf{P} + \mathbf{Q}^T \Omega \mathbf{Q} \quad (3.24)$$

Wir müssen aber noch überprüfen, ob diese Transformation tatsächlich kanonisch ist. Dazu betrachten wir die Poissonschen Klammern zwischen den neuen Koordinaten:

$$\begin{aligned} \{P_i, Q_k\} &= \{V_{ij}p_j, V_{kl}q_l\} = V_{ij}V_{kl} \{p_j, q_l\} = V_{ij}V_{kl}\delta_{jl} \\ &= V_{ij}V_{kj} = V_{ij}(V^T)_{jk} = (VV^T)_{ik} = \delta_{ik} \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\{P_i, P_k\} = \{V_{ij}p_j, V_{kl}p_k\} = V_{ij}V_{kl} \{p_j, p_l\} = 0 \quad (3.26)$$

$$\{Q_i, Q_k\} = \{V_{ij}q_j, V_{kl}q_k\} = V_{ij}V_{kl} \{q_j, q_l\} = 0 \quad (3.27)$$

Somit ist die Transformation kanonisch, wenn V orthogonal ist. Dies ist aber eine *hinreichende* Bedingung, wie wir im folgenden sehen werden.

Allgemeine Anforderungen an eine Koordinatentransformation

Wir wollen nun genauer die Anforderungen an eine kanonische Koordinatentransformation untersuchen. Eine allgemeine lineare Transformation $T : \mathbf{p}, \mathbf{q} \mapsto \mathbf{P}, \mathbf{Q}$ der Koordinaten und Impulse lässt sich in der Basis bestehend aus \mathbf{p}, \mathbf{q} darstellen als $6N \times 6N$ -Matrix, die wir wie folgt in vier $3N \times 3N$ -Blöcke zerlegen:

$$T = \begin{pmatrix} T_{Pp} & T_{Pq} \\ T_{Qp} & T_{Qq} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Wir wenden nun T auf die ursprünglichen Koordinaten und Impulse an:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{Pp} & T_{Pq} \\ T_{Qp} & T_{Qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{Pp}\mathbf{p} + T_{Pq}\mathbf{q} \\ T_{Qp}\mathbf{p} + T_{Qq}\mathbf{q} \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

Die Poissonschen Klammern zwischen den neuen Koordinaten und Impulsen ergeben sich damit zu:

$$\begin{aligned} \{P_i, Q_k\} &= \left\{ (T_{Pp})_{ij} p_j + (T_{Pq})_{ij} q_j, (T_{Qp})_{kl} p_l + (T_{Qq})_{kl} q_l \right\} \\ &= (T_{Pp})_{ij} (T_{Qq})_{kl} \{p_j, q_l\} + (T_{Pq})_{ij} (T_{Qp})_{kl} \{q_j, p_l\} \\ &= (T_{Pp})_{ij} (T_{Qq})_{kl} \delta_{jl} - (T_{Pq})_{ij} (T_{Qp})_{kl} \delta_{jl} \\ &= (T_{Pp})_{ij} (T_{Qq})_{kj} - (T_{Pq})_{ij} (T_{Qp})_{kj} \\ &= (T_{Pp})_{ij} (T_{Qq}^T)_{jk} - (T_{Pq})_{ij} (T_{Qp}^T)_{jk} \\ &= (T_{Pp} T_{Qq}^T)_{ik} - (T_{Pq} T_{Qp}^T)_{ik} \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned}
\{P_i, P_k\} &= \left\{ (T_{Pp})_{ij} p_j + (T_{Pq})_{ij} q_j, (T_{Pp})_{kl} p_l + (T_{Pq})_{kl} q_l \right\} \\
&= (T_{Pp})_{ij} (T_{Pq})_{kl} \{p_j, q_l\} + (T_{Pq})_{ij} (T_{Pp})_{kl} \{q_j, p_l\} \\
&= (T_{Pp})_{ij} (T_{Pq})_{kj} - (T_{Pq})_{ij} (T_{Pp})_{kj} \\
&= (T_{Pp})_{ij} (T_{Pq}^T)_{jk} - (T_{Pq})_{ij} (T_{Pp}^T)_{jk} \\
&= (T_{Pp} T_{Pq}^T)_{ik} - (T_{Pq} T_{Pp}^T)_{ik} \\
&= (T_{Pp} T_{Pq}^T - T_{Pq} T_{Pp}^T)_{ik}
\end{aligned} \tag{3.31}$$

$$\begin{aligned}
\{Q_i, Q_k\} &= \left\{ (T_{Qp})_{ij} p_j + (T_{Qq})_{ij} q_j, (T_{Qp})_{kl} p_l + (T_{Qq})_{kl} q_l \right\} \\
&= (T_{Qp})_{ij} (T_{Qq})_{kl} \{p_j, q_l\} + (T_{Qq})_{ij} (T_{Qp})_{kl} \{q_j, p_l\} \\
&= (T_{Qp})_{ij} (T_{Qq})_{kj} - (T_{Qq})_{ij} (T_{Qp})_{kj} \\
&= (T_{Qp})_{ij} (T_{Qq}^T)_{jk} - (T_{Qq})_{ij} (T_{Qp}^T)_{jk} \\
&= (T_{Qp} T_{Qq}^T)_{ik} - (T_{Qq} T_{Qp}^T)_{ik} \\
&= (T_{Qp} T_{Qq}^T - T_{Qq} T_{Qp}^T)_{ik}
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Es gelten die Bedingungen

$$\{P_i, Q_k\} = \delta_{ik} \quad \{P_i, P_k\} = 0 \quad \{Q_i, Q_k\} = 0, \tag{3.33}$$

also

$$T_{Pp} T_{Qq}^T - T_{Pq} T_{Qp}^T = \mathbb{1} \tag{3.34}$$

$$T_{Pp} T_{Pq}^T = (T_{Pp} T_{Pq}^T)^T \tag{3.35}$$

$$T_{Qp} T_{Qq}^T = (T_{Qp} T_{Qq}^T)^T \tag{3.36}$$

Die obigen Gleichungen sind also die Bedingungen, die sich an eine Koordinatentransformation stellen.

Bei der anfangs beschriebenen direkten Diagonalisierung erhalten wir die korrekten Eigenwerte, die Transformation ist aber im allgemeinen nicht kanonisch. Die Eigenvektoren sind zwar im $6N \times 6N$ -Phasenraum zueinander orthogonal sind, dies ist aber nicht hinreichend für eine kanonische Transformation. Vielmehr müssen für eine kanonische Koordiantentransformation die Bedingungen (3.34-3.36) erfüllt sein, was aufgrund der allgemeinen Uneindeutigkeit der Eigenvektoren kein Widerspruch ist.

Einfache Fälle kanonischer Transformationen

Wir wollen nun einige einfache Beispiele für kanonische Koordinatentransformationen angeben.

1. Reskalierung der Koordinaten und Impulse in der Form $p_k \mapsto \alpha_k p_k$, $q_k \mapsto \alpha_k^{-1} q_k$
2. Vertauschung zwischen Koordinaten und Impulsen: $p_k \mapsto q_j$, $q_k \mapsto -p_j$. Ein einfacher Spezialfall ist: $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
3. $\begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$ mit $MM^T = \mathbb{1}$: Dies ist der sehr einfache Fall, der uns aus dem vorherigen Unterabschnitt bekannt ist. Bedingungen (3.35) und (3.36) sind dadurch erfüllt, dass die Nebendiagonalblöcke identisch Null sind, und Bedingung (3.34) dadurch dass die Matrix M orthogonal ist.
4. $\begin{pmatrix} 0 & M \\ -M & 0 \end{pmatrix}$ mit $MM^T = \mathbb{1}$: Dies lässt sich auf den vorherigen Fall mit einer zusätzlichen Vertauschung der Koordinaten und Impulsen zurückführen.
5. $\begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & N \end{pmatrix}$ mit $MN^T = \mathbb{1}$: Auch hier sind die Bedingungen (3.35) und (3.36) erfüllt, da die Nebendiagonalblöcke identisch Null sind. Bedingung (3.34) ist weniger strikt als im Fall zuvor. $MN^T = \mathbb{1}$ kann einfach erfüllt werden, nämlich für $N^T = M^{-1}$.
6. $\begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}$ mit $MM^T = \alpha \mathbb{1}$, $NN^T = \beta \mathbb{1}$ und $\alpha + \beta = 1$: Dies ist der einfachste Fall, bei dem die Nebendiagonalblöcke nicht verschwinden. Dieser Fall lässt sich noch verallgemeinern, da die Unterblöcke nicht diese Bedingungen erfüllen müssen, es muss nur $MM^T + NN^T = \mathbb{1}$ gelten.

3.3.2. Schema der Diagonalisierung

Wir zerlegen die Transformation in vier Schritte, die jeweils für sich kanonisch sind. Zunächst wird die Kopplung zwischen den Koordinaten entfernt, so dass nur noch zwei Diagonalblöcke vorhanden. Danach wird der obere Block mit Hilfe einer orthogonalen Transformation diagonalisiert. Dann werden die Koordinaten reskaliert, damit der obere Block, ähnlich wie im Fall ohne Kopplung, proportional zur Identität ist, und mit der vierten Transformation dann der untere Block diagonalisiert. Wir wollen die einzelnen Schritte im folgenden besprechen.

Die Matrix, die den Hamiltonoperator beschreibt, ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \boxed{\mathcal{H}_{pp}} & \boxed{\mathcal{H}_{pq}} \\ \boxed{\mathcal{H}_{qp}} & \boxed{\mathcal{H}_{qq}} \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

wobei $\mathcal{H}_{pq} = \mathcal{H}_{qp}^T = -\mathcal{H}_{qp}$ gilt. In einem ersten Schritt entfernen wir die Kopplung zwischen Koordinaten und Impulse. Dies kann nicht mit kanonischen Transformationen durchgeführt werden, die nur blockdiagonal sind, oder nur nebendiagonale Blöcke haben, wie äquivalent zu zeigen ist. Denn betrachten wir

$$\begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp} & \mathcal{H}_{pq} \\ \mathcal{H}_{qp} & \mathcal{H}_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M^T & 0 \\ 0 & N^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M\mathcal{H}_{pp}M^T & M\mathcal{H}_{pq}N^T \\ N\mathcal{H}_{qp}M^T & M\mathcal{H}_{qq}N^T \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

so muss

$$M\mathcal{H}_{pq}N^T = 0 \quad \text{und} \quad N\mathcal{H}_{qp}M^T = 0 \quad (3.39)$$

gelten, damit die erhaltene Matrix blockdiagonal ist. Ist dies erfüllt, so gilt auch

$$\det(M\mathcal{H}_{pq}N^T) = 0 \quad \text{und} \quad \det(N\mathcal{H}_{qp}M^T) = 0. \quad (3.40)$$

Jedoch ist die Transformation nach Voraussetzung kanonisch, also gilt

$$MN^T = \mathbb{1} \quad \text{und damit} \quad \det(MN^T) \neq 0, \quad (3.41)$$

so dass nach der Multiplikationsregel für Determinanten

$$\det M \neq 0 \quad \text{und} \quad \det N \neq 0, \quad (3.42)$$

folgt. Die Determinante der Kopplung verschwindet jedoch nicht,

$$\det \mathcal{H}_{pq} = \det \mathcal{H}_{qp} \neq 0, \quad (3.43)$$

so dass wieder nach der Multiplikationsregel für Determinanten

$$\det(M\mathcal{H}_{pq}N^T) \neq 0 \quad \text{bzw.} \quad \det(N\mathcal{H}_{qp}M^T) \neq 0 \quad (3.44)$$

folgt, was im Widerspruch zur Bedingung (3.40) steht. D.h. die Transformation kann nicht blockdiagonal sein, sondern muss von der Form

$$\begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}$$

oder komplizierter sein. Für kleine Teilchenzahlen ist diese noch analytisch zu bestimmen, für größere Teilchenzahlen muss eine andere Methode gefunden werden, die wir am Schluß dieses Kapitels vorstellen.

Wir nehmen also zunächst an, wir haben diese Transformation T_1 bestimmt, so dass wir nach der Transformation ein neuen Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 erhalten, der nur noch blockdiagonal ist, also keine Kopplung mehr zwischen Koordinaten und Impulsen enthält. Dabei erhalten wir Diagonalblöcke, die natürlich im allgemeinen verschieden von den

ursprünglichen sind, $\mathcal{H}_{pp}^1 \neq \mathcal{H}_{pp}$ und $\mathcal{H}_{qq}^1 \neq \mathcal{H}_{qq}$

$$T_1^T \mathcal{H} T_1 = \begin{pmatrix} \boxed{\mathcal{H}_{pp}^1} & 0 \\ 0 & \boxed{\mathcal{H}_{qq}^1} \end{pmatrix} =: \mathcal{H}_1 \quad (3.45)$$

Da der Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 blockdiagonal ist, können wir sofort aus der Gruppeneigenschaft blockdiagonaler Matrizen schließen, dass ausreicht, alle weiteren Transformationen blockdiagonal zu wählen. $\mathcal{H}_1 = T_1^T \mathcal{H} T_1$ ist symmetrisch, da \mathcal{H} symmetrisch ist. Daraus folgt unmittelbar, dass auch \mathcal{H}_{pp}^1 und \mathcal{H}_{qq}^1 symmetrisch sind.

In einem zweiten Schritt wollen wir den oberen Block \mathcal{H}_{pp}^1 diagonalisieren. Da \mathcal{H}_{pp}^1 symmetrisch ist, finden wir über die Bestimmung des Eigensystems eine orthogonale Transformation \mathcal{M} , so dass $\mathcal{M}_2^T \mathcal{H}_{pp}^1 \mathcal{M}_2$ diagonal ist. Wir setzen also T_2 wie folgt zusammen:

$$T_2 = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_2 & 0 \\ 0 & \mathcal{M}_2 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

Damit ist nach Gleichung (3.34) T_2 kanonisch (siehe Fall 3 im letzten Unterabschnitt, \mathcal{M}_2 ist orthogonal), und der Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 transformiert wie folgt:

$$T_2^T \mathcal{H}_1 T_2 = \begin{pmatrix} \Pi_1 & & 0 & \\ & \Pi_2 & & 0 \\ 0 & & \ddots & \\ & & & \boxed{\mathcal{H}_{qq}^2} \\ & 0 & & \end{pmatrix} =: \mathcal{H}_2 \quad (3.47)$$

$\mathcal{H}_{qq}^2 = \mathcal{M}_2^T \mathcal{H}_{qq}^1 \mathcal{M}_2$ ist symmetrisch, da \mathcal{H}_{qq}^1 symmetrisch ist. Dabei gilt im allgemeinen $\mathcal{H}_{qq}^2 \neq \mathcal{H}_{qq}^1$. Wir reskalieren die erhaltene Matrix derart mit einer Transformation T_3 , dass alle Einträge identisch sind, sie also proportional zur Identität ist. Dabei können wir diesen Eintrag auch zu $1/2m$ reskalieren:

$$\alpha_1 \Pi_1 = \alpha_2 \Pi_2 = \dots = \alpha_{3N} \Pi_{3N} \equiv \frac{1}{2m} \quad (3.48)$$

Damit erhalten wir folgende Matrix:

$$T_3^T \mathcal{H}^2 T_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m} & 0 & & \\ & \frac{1}{2m} & & 0 \\ 0 & & \ddots & \\ & 0 & & \boxed{\mathcal{H}_{qq}^3} \end{pmatrix} =: \mathcal{H}_3 \quad (3.49)$$

Die Reskalierung ist natürlich kanonisch, wie wir ja bereits im vorherigen Unterabschnitt untersucht haben (Fall 1). Die neue Matrix \mathcal{H}_{qq}^3 ist zudem symmetrisch, da \mathcal{H}_{qq}^2 symmetrisch ist.

Nun können wir den unteren Block über eine orthogonale Transformation \mathcal{M}_4 diagonalisieren, indem das Eigensystem zu \mathcal{H}_{qq}^3 bestimmen.

$$T_4^T \mathcal{H}^3 T_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m} & 0 & & & \\ & \frac{1}{2m} & & & 0 \\ 0 & & \ddots & & \\ & & & \Omega_1 & 0 \\ 0 & & & & \Omega_2 \\ & & & 0 & \ddots \end{pmatrix} =: \mathcal{H}_4 \quad (3.50)$$

Bevor wir uns der Bestimmung und Darstellung der Normalmoden für zwei Ionen ausführlich widmen, wollen wir zunächst erneut auf den Einteilchenfall zurückkommen, um die Überlegungen des vorherigen Abschnitts zu überprüfen und zu verdeutlichen

Rückblick auf das Einteilchenproblem

Wie wir in Unterabschnitt 2.1.2 gesehen hatten, war die kanonische Transformation für ein Teilchen gegeben durch Gleichung (2.17a) auf Seite 15 gegeben. Sie lautet in Matrixschreibweise wie folgt:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

mit $\alpha = \sqrt{m\omega_1/2}$. Wir sehen, dass zuerst (rechte Matrix) eine Reskalierung erfolgt, welche natürlich kanonisch ist. Die zweite Transformation (linke Matrix) ist dann vom

Typ $\begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}$, und damit kanonsich, wie wir einfach durch Nachrechnen feststellen können. Wir erhalten natürlich die selben Lösungen wie in Unterabschnitt 2.1.2 für die Bewegungsmoden.

3.4. Normalmoden für zwei Ionen

Wir gehen bei der Bestimmung der Normalkoordinaten genau vor wie in Unterabschnitt 3.3.2 beschrieben. Die quadratische Entwicklung liefert für \mathcal{H}_{qq} die Matrix

$$\begin{pmatrix} \mathcal{Q}_1 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_7 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}_2 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_8 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{Q}_3 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_9 \\ \mathcal{Q}_7 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_4 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}_8 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_5 & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{Q}_9 & 0 & 0 & \mathcal{Q}_6 \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Es gibt hier also nur eine Kopplung zwischen $q_{1,x}$ und $q_{2,x}$, $q_{1,y}$ und $q_{2,y}$ usw., jedoch keine Kopplung zwischen $q_{1,x}$ und $q_{2,y}$, $q_{2,x}$ und $q_{2,y}$ usw. Dies ist, wie wir sehen werden, für mehr Teilchen nicht mehr so gegeben. Die restlichen Blöcke von \mathcal{H} lassen sich trivial bestimmen.

Der kritische Teil bei der Transformation ist die Entkopplung der Koordinaten von den Impulsen, also die Blockdiagonalisierung. Wir wenden dazu eine Transformation der selben Form wie im Einteilchenfall an, zusammengesetzt aus einer Reskalierung sowie der Matrix

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

die der Form $\begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}$ und damit kanonisch ist, wie man auch leicht durch Überprüfung der Bedingungen (3.34-3.36) feststellen kann. Die restlichen Schritte zur Bestimmung

der Normalmoden sind unproblematisch, so dass hier nicht weiter darauf eingegangen werden soll.

Es soll jedoch bemerkt werden, dass die Blockdiagonalisierung mit dieser Transformation nur deswegen erfolgreich durchgeführt werden kann, da in der quadratischen Entwicklung nicht alle Koordinaten miteinander gekoppelt sind. Würde z.B. noch ein Kopplungsterm zwischen $q_{1,x}$ und $q_{2,y}$ stehen, so würde dieser nach der Transformation in den neben-diagonalen Blöcken auftauchen. Die Transformation zieht hier also einen Vorteil daraus, dass im \mathcal{H}_{qq} Block hinreichend viele Nullen stehen. Dies ist im Allgemeinen nicht möglich, so dass dies keine Transformation ist, die generell die Impulse und Koordinaten entkoppelt.

Wir wollen nun die Normalmoden für zwei verschiedene Rotationsgeschwindigkeiten des Kristalls darstellen, einmal bei einer Rotation mit halber Zyklotronfrequenz, sowie einmal mit einer niedrigeren Frequenz. Beide Untersuchungen finden aber für eine Axialfrequenz ω_z statt, für die kein Phasenübergang möglich ist. Für andere Bereiche ist die Energieminimierung numerisch noch zu unstabil, um systematische Untersuchungen der Normalmoden durchzuführen.

3.4.1. Normalmoden bei Rotation mit halber Zyklotronfrequenz

Wir erhalten $3N = 6$ Normalmoden, die sich in 3 Schwerpunktsmoden und $3(N - 1)$ relative Moden aufteilen, dargestellt jeweils in den Abbildungen 3.8 und 3.9. Man sieht, dass bei allen Moden die Impulse und Koordinaten gleichgerichtet sind, die Bewegung der einzelnen Ionen verläuft also bei allen Moden eindimensional. Für die Normalmoden erhalten wir die in Tabelle 3.2 angegebenen Eigenfrequenzen. Die Schwerpunktsmode in z-Richtung (Teilabbildung 3.8a) hat dabei wie erwartet gerade die Axialfrequenz als Eigenfrequenz, die Schwerpunktsbewegungen in x- und y-Richtung (Teilabbildungen 3.8b und 3.8c) haben jeweils $\omega_1/\omega_c = \sqrt{2}/20$ als Eigenfrequenz. Da die Schwerpunktsbewegung sich wie die Bewegung eines einzelnen Teilchens betrachten lässt, kann die radiale Schwerpunktsbewegung entweder wie hier in einer linearen Basis, oder in einer zirkularen Basis dargestellt werden, vergleiche dazu auch Abschnitt 2.2.1. Die sogenannte „rocking“-Mode hat eine etwas geringere Frequenz als die axiale Schwerpunktsmode, während die Vibrationsmode (Teilabbildung 3.9a) eine Eigenfrequenz von $\sqrt{3}$ mal der Frequenz der radialen Schwerpunktsbewegung, also $\sqrt{3}\omega_1/\omega_c \approx 0.1225$. Die Rotationsmode schließlich (Teilabbildung 3.9c) hat eine Eigenfrequenz identisch zu Null, es findet also im mit dem Kristall rotierenden Bezugssystem keine Bewegung statt.

Mode	Richtung	Frequenz
Schwerpunktsmode	axial	0.7
rocking-Mode	axial	0.6964
Vibrationsmode	radial	0.1225
x-Schwerpunktsmode	radial	0.0707
y-Schwerpunktsmode	radial	0.0707
Rotationsmode	radial	0

Tabelle 3.2: Eigenfrequenzen der Normalmoden bei Rotation mit halber Zyklotronfrequenz. Die Frequenzen sind dabei mit der Zyklotronfrequenz normiert.

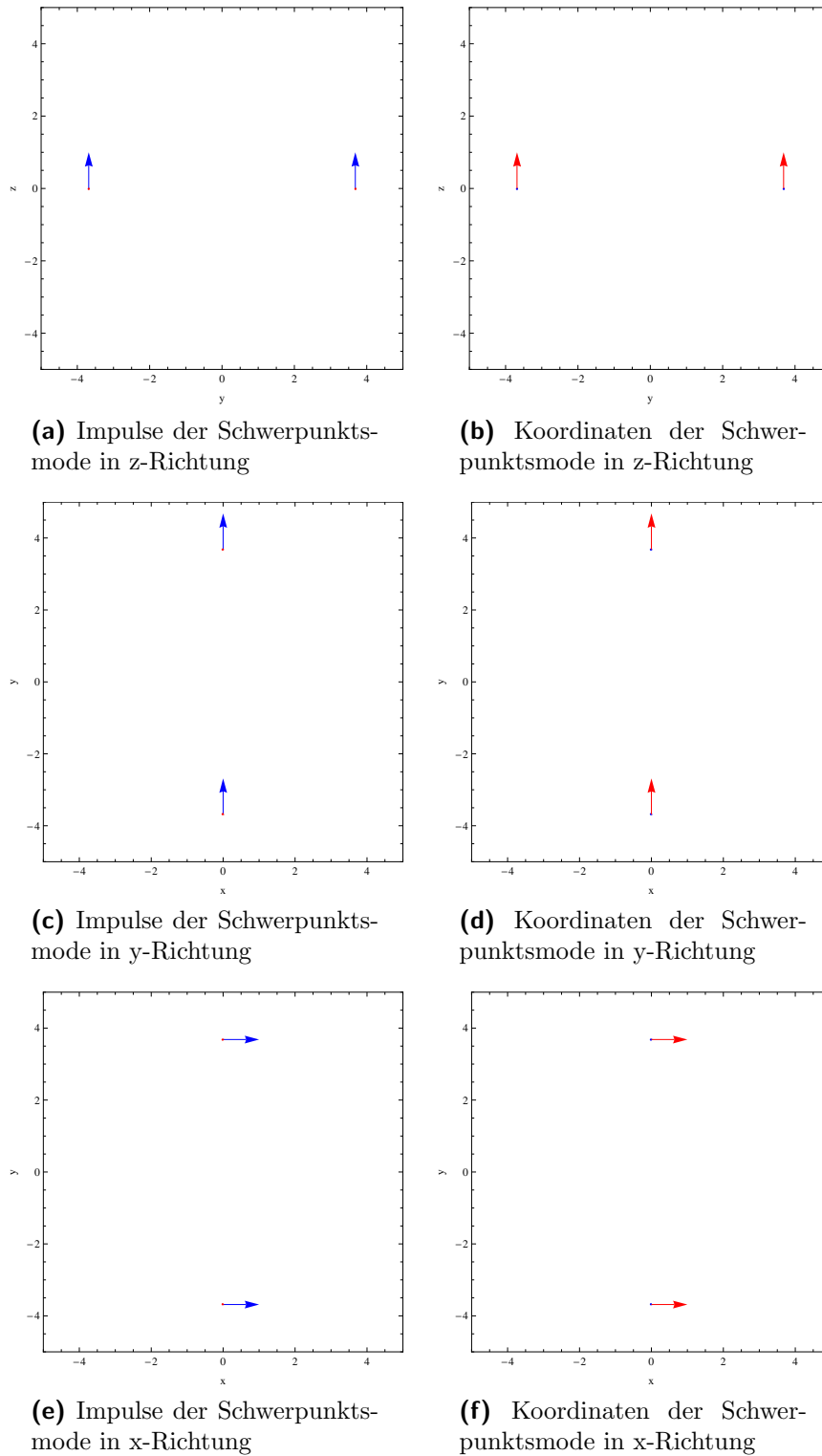


Abbildung 3.8: Schwerpunktsmoden für zwei Ionen bei Rotation mit $\omega_c/2$. Links die Impulskomponente (blaue Pfeile), rechts die Ortskomponente (rote Pfeile). Beide sind bei allen drei Moden gleich gerichtet und in Phase. (a) und (b) stellen die Schwerpunktsmode in z-Richtung dar, (c) und (d) diejenige in y-Richtung, und (e) sowie (f) diejenige in x-Richtung.

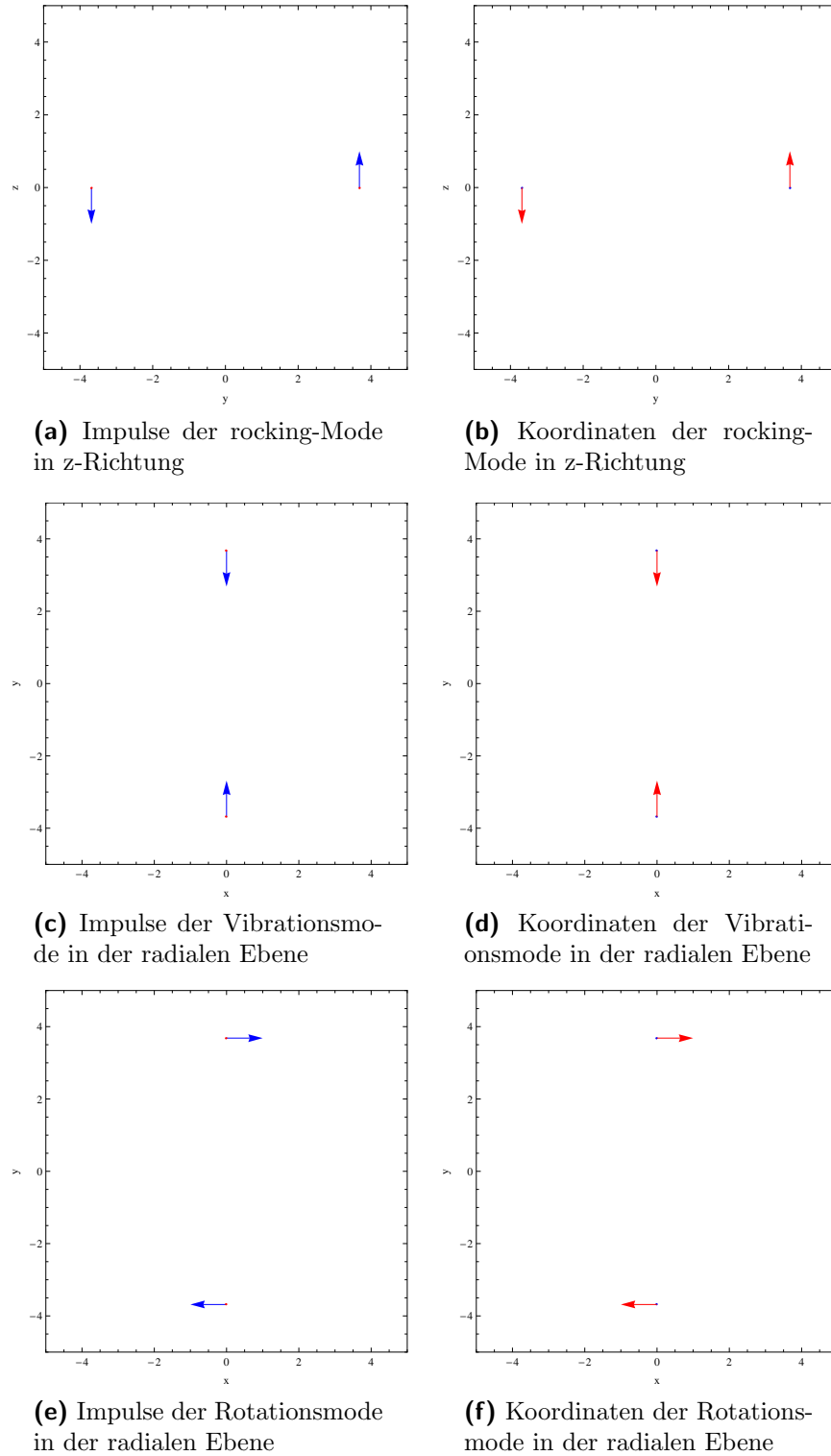


Abbildung 3.9: Moden der internen Freiheitsgrade für zwei Ionen bei Rotation mit $\omega_c/2$. Links die Impulskomponente (blau), rechts die Ortskomponente (rot), die ebenfalls bei jedem Ion in Phase und gleichgerichtet sind. Die Bewegung der Ionen zueinander ist aber jeweils gegenphasig. (a) und (b) stellen dabei die sogenannte „rocking“ Mode dar, bei denen sich beide Ionen gerade gegenphasig zueinander in z-Richtung bewegen. (c) und (d) zeigen die Vibrationsmode, bei denen die Ionen gegeneinander in der radialen Ebene schwingen. (e) sowie (f) zeigen die Rotationsmode.

3.4.2. Normalmoden bei Rotation nahe der halben Zyklotronfrequenz

Wir betrachten zwei Ionen bei einer Rotation nahe der halben Zyklotronfrequenz. Wir wählen dazu die Rotationsfrequenz zu $0.4824\omega_c$. Wir erhalten dann die in Tabelle 3.3 angegebenen Eigenfrequenzen.

Die axialen Eigenmoden sind gegeben wie im Falle zuvor, jedoch erhöht sich die Eigenfrequenz der rocking-Mode etwas, da die Ionen durch die Rotation nicht mehr den minimalen Abstand zueinander einnehmen. Die Frequenz der axialen Schwerpunktsmode bleibt dabei natürlich invariant. Die Frequenzen der radialen Moden verschieben sich dabei in unterschiedlicher Richtung: Die Vibrationsmode erhält dabei eine höhere Frequenz, ebenso eine der radialen Schwerpunktsmoden, nämlich diejenige in Richtung der Rotation der beiden Ionen. Die andere Schwerpunktsmode, entgegen der Rotation der Ionen, verringert ihre Frequenz etwas. Die Frequenz der Rotationsmode bleibt weiter Null.

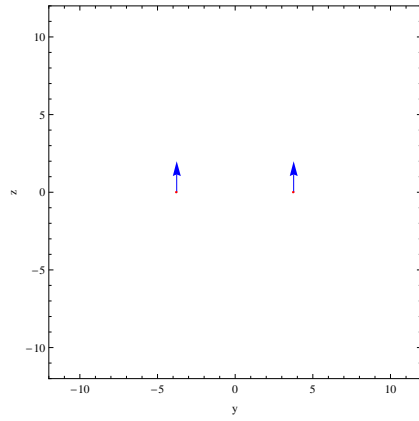
Bei den radialen Eigenmoden sind jetzt die Orts- und Impulskomponenten nicht mehr gleichgerichtet, so dass die Bewegung der Ionen in jeder Mode im Allgemeinen nicht mehr eindimensional, sondern ellipsenförmig sind. Wir wollen deswegen hier auch die Trajektorien der Ionen in diesen Moden aufzeichnen (Abbildung 3.12), um die Form der Bewegung zu verdeutlichen.

Insbesondere sehen wir in Teilabbildung 3.12a, dass die Vibrationsmode nun nicht mehr durch eine eindimensionale Schwingung gegeben ist, sondern eine ellipsenförmige Bahnkurve beschreibt.

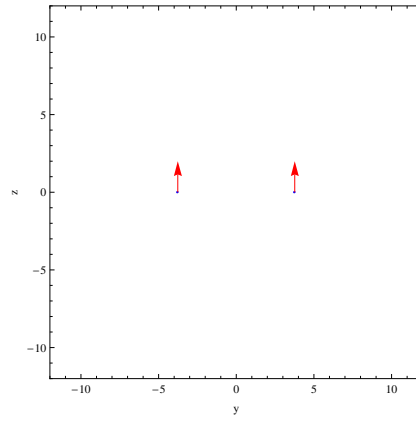
Die radialen Schwerpunktsmoden konnten ja schon im Fall zuvor als Superposition zirkularer Bewegungen dargestellt werden; nun ist aufgrund der verschiedenen Frequenzen der Moden nur eine solche Beschreibung möglich. Jedoch ist eine Darstellung der Schwingungen in einer linearen Basis nicht mehr möglich. Die Trajektorien beschreiben also Kreisbahnen mit unterschiedlicher Frequenz und entgegengesetztem Drehsinn.

Mode	Richtung	Frequenz
Schwerpunktsmode	axial	0.7
rocking-Mode	axial	0.6967
Vibrationsmode	radial	0.1237
Schwerpunktsmode 1	radial	0.0883
Schwerpunktsmode 2	radial	0.0530
Rotationsmode	radial	0

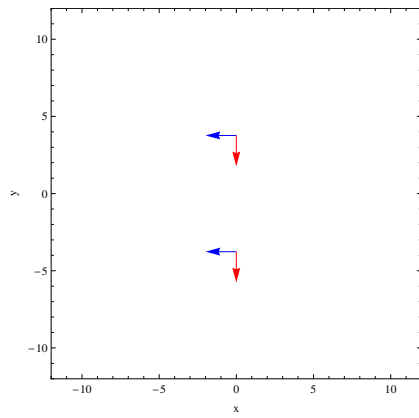
Tabelle 3.3: Eigenfrequenzen der Normalmoden für zwei Ionen bei Rotationsfrequenz ($0.4824\omega_c$), also nahe der halben Zyklotronfrequenz. Die Frequenzen sind dabei mit der Zyklotronfrequenz normiert.



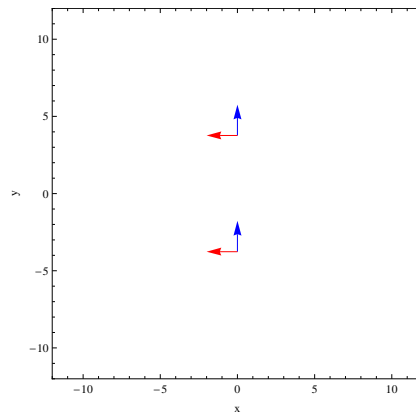
(a) Impulse der Schwerpunktsmode in z-Richtung



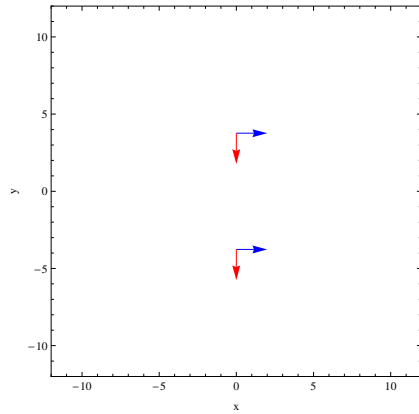
(b) Koordinaten der Schwerpunktsmode in z-Richtung



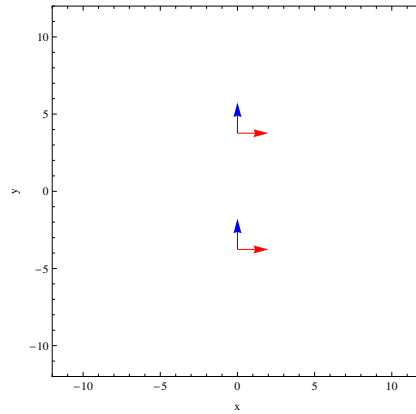
(c) Radiale Schwerpunktsmode 1



(d) Radiale Schwerpunktsmode 1



(e) Radiale Schwerpunktsmode 2



(f) Radiale Schwerpunktsmode 2

Abbildung 3.10: Schwerpunktsmoden für zwei Ionen bei Rotation nahe $\omega_c/2$. (c)-(f): In der radialen Ebene sind nun Impuls- und Ortskomponenten der Moden nicht mehr gleichgerichtet, so dass die Bewegung der Ionen nicht mehr eindimensional, sondern im Allgemeinen ellipsenförmig verläuft. Zu jeder Mode gehören je zwei Basen in Impulsen (blau) und Koordinaten (rot); durch diese sind dann Amplitude und Phase der Mode eindeutig bestimmt.

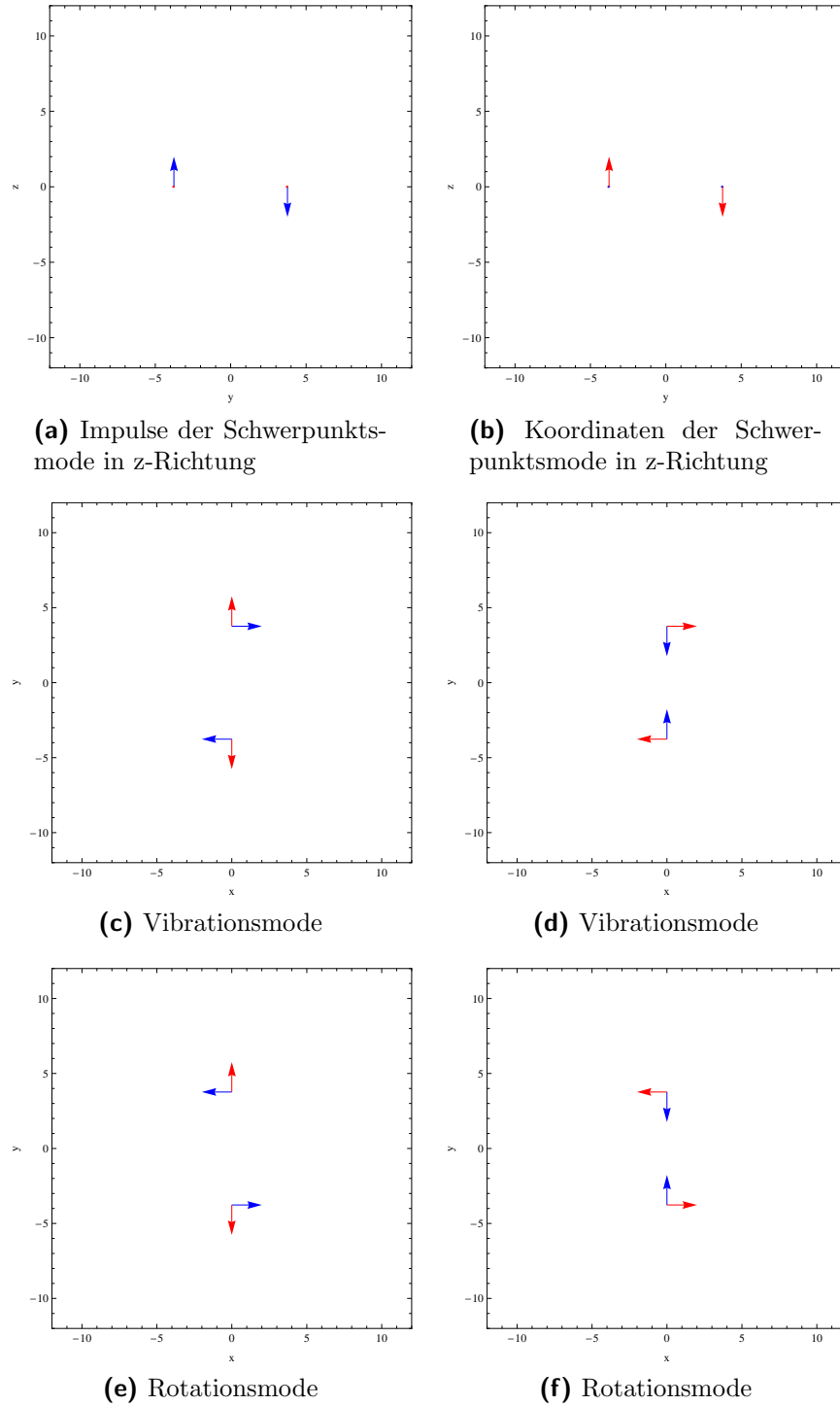


Abbildung 3.11: Moden der internen Freiheitsgrade für zwei Ionen bei Rotation nahe $\omega_c/2$. (c)-(f): In der radialen Ebene sind nun Impuls- und Ortskomponenten der Moden nicht mehr gleichgerichtet, so dass auch die internen Bewegungsmode der Ionen nicht mehr eindimensional, sondern im Allgemeinen ellipsenförmig verlaufen. Auch hier gehören zu jeder Mode zwei Basen mit jeweils Impuls- (blau) und Ortskomponenten (rot), um Amplitude und Phase festzulegen.

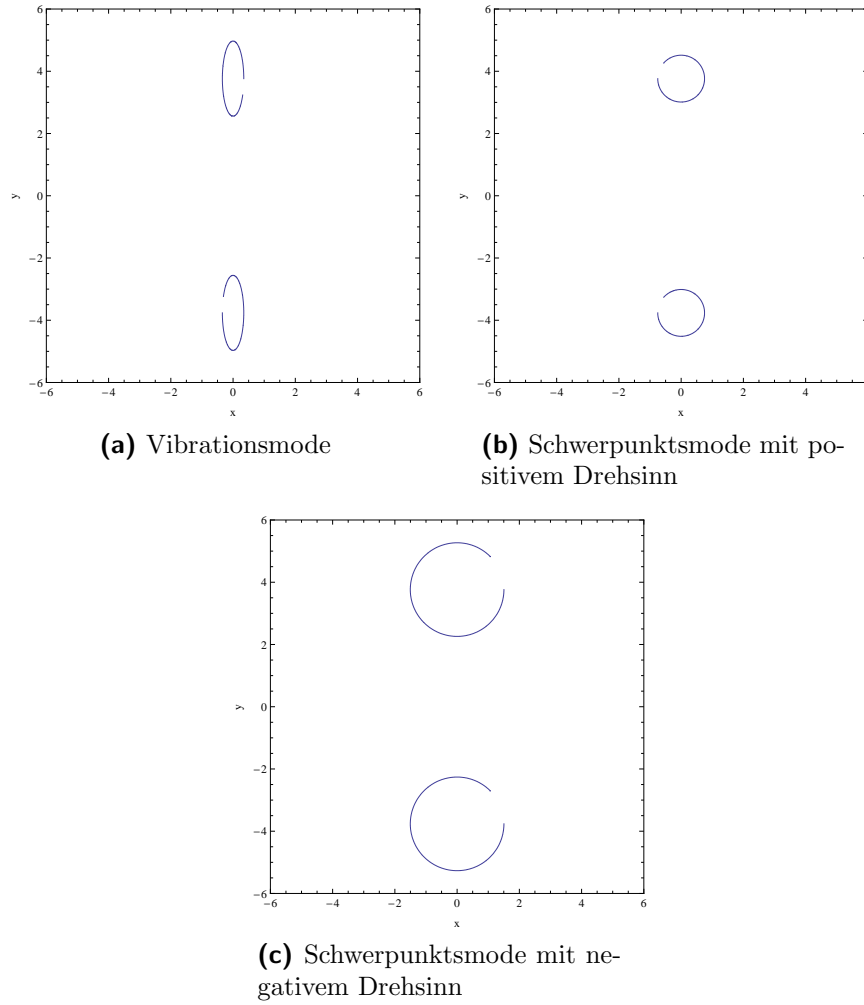


Abbildung 3.12: Trajektorien der radialen Moden für zwei Ionen bei Rotation nahe der Zyklotronfrequenz. (a) zeigt die Vibrationsmode, bei der die Ionen sich phasenversetzt zueinander auf Ellipsen entgegen dem Uhrzeigersinn bewegen. (b) zeigt die radiale Schwerpunktsmode, bei der die Ionen sich phasengleich auf Kreisbahnen entgegen dem Uhrzeigersinn bewegen. (c) zeigt die radiale Schwerpunktsmode, bei der die Ionen sich phasengleich auf Kreisbahnen im Uhrzeigersinn bewegen.

3.4.3. Normalmoden bei Rotation nahe der minimalen Rotationsfrequenz

Wir betrachten zwei Ionen relativ nahe an der minimalen Rotationsfrequenz untersuchen. Diese ist für die gewählten Parameter gegeben durch $0.4293\omega_c$. Für die Berechnungen wählen wir die Rotationsfrequenz $0.4323\omega_c$, und erhalten dabei Eigenfrequenzen, die in Tabelle 3.4 dargestellt sind. Die Frequenz der axiale Schwerpunktsmode bleibt dabei invariant, die der rocking-Mode ändert sich aufgrund des größeren Ionenabstands. Die Impuls- und Ortskomponenten der radialen Moden sind analog wie im Fall zuvor nicht mehr gleichgerichtet. Die Trajektorien wurden berechnet und in Abbildung 3.13 dargestellt. Wir stellen fest, dass jetzt alle drei Bewegungen näherungsweise kreisförmig sind. Die Vibrationsmode 3.13a geht dabei in eine zirkuläre Bewegung beider Ionen entgegen dem Uhrzeigersinn über, wobei beide Ionen sich gegenphasig zueinander bewegen.

Die nächste Mode bezeichnen wir im Folgenden als modifizierte Zyklotronmode 3.13b. Denn beide Ionen bewegen sich gleichphasig auf Kreisbahnen entgegen dem Uhrzeigersinn, sie ist also eine Schwerpunktsmode. Transformiert man die Frequenz zurück ins Laborsystem, so ist sie von der maximalen Rotationsfrequenz $0.5707\omega_c$ nicht zu unterscheiden. Die maximale Rotationsfrequenz ist aber gleich der modifizierten Zyklotronfrequenz.

Dann haben wir (neben der vernachlässigten Rotationsmode, die wieder Frequenz Null aufweist) noch eine im Uhrzeigersinn rotierende Mode 3.13c, die wir im Folgenden als Magnetronmode bezeichnen wollen. Betrachtet man diese ebenfalls wieder aus dem Laborsystem, so ist sie sehr nahe bei der minimalen Rotationsfrequenz $\omega_c/2 - \omega_1$, die ja der Magnetronfrequenz entspricht.

Zusammenfassend können wir die erhaltenen Ergebnisse mit den Überlegungen in Unterabschnitt 2.2.2 in Einklang bringen. Bei niedriger Dichte des Plasmas ist die Magnetronbewegung analog zum Einteilchenfall, und es findet keine Verbreiterung durch Wechselwirkung der Ionen statt. Die modifizierte Zyklotronfrequenz dagegen hat zwei

Mode	Richtung	Frequenz
Schwerpunktsmode	axial	0.7
rocking-Mode	axial	0.6997
Vibrationsmode	radial	0.1399
mod. Zyklotronmode	radial	0.1384
Magnetronmode	radial	0.0031
Rotationsmode	radial	0

Tabelle 3.4: Eigenfrequenzen der Normalmoden für zwei Ionen bei Rotationsfrequenz ($0.4323\omega_c$), also sehr nahe an der minimalen Rotationsfrequenz. Die angegebenen Frequenzen sind dabei mit der Zyklotronfrequenz normiert.

Teile: Einen Teil, bei dem die Ionen sich gleichphasig bewegen, und einen Teil, bei dem die Ionen sich gegenphasig zueinander bewegen. Der gleichphasige Teil ist dabei die Schwerpunktsbewegung, und hat keine Wechselwirkung zwischen den Ionen, der gegenphasige Teil stellt die Relativbewegung dar, bei der die Ionen miteinander wechselwirken. Beide Frequenzen liegen sehr nahe, was einer Linienverbreiterung der modifizierten Zyklotronfrequenz entspricht.

Alle erhaltenen Resultate stimmen dabei mit den Ergebnissen von Thompson und Wilson [1997] überein. Dort wurde die Lösung der Bewegungsgleichungen unter heuristischen Annahmen bestimmt, so dass zwar die Eigenfrequenzen und Trajektorien der Ionen bestimmt wurden, jedoch nicht die Transformation zu den Normalkoordinaten. Diese benötigen aber wir für die Simulation des Gatters, wie wir im folgenden Kapitel sehen werden.

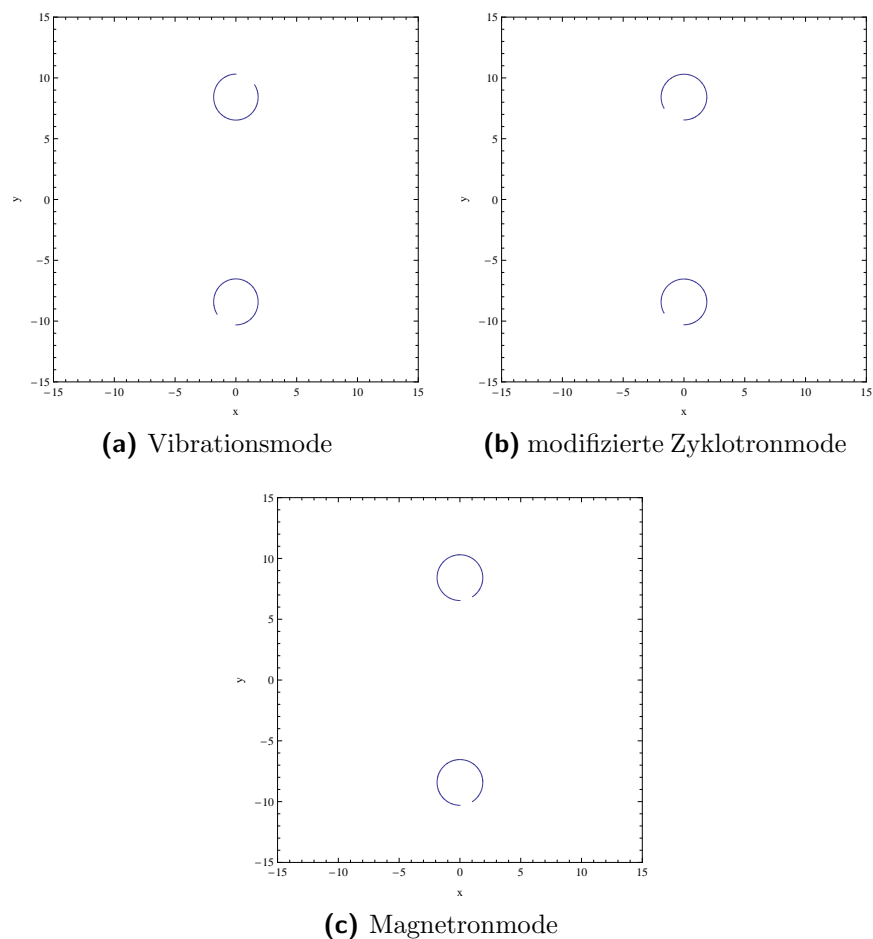


Abbildung 3.13: Trajektorien der radialen Moden für zwei Ionen bei niedriger Rotation. (a) zeigt die Vibrationsmode, bei der die Ionen sich phasenversetzt zueinander entgegen dem Uhrzeigersinn bewegen. (b) zeigt die Mode der modifizierten Zyklotronfrequenz, bei der die Ionen sich phasengleich entgegen dem Uhrzeigersinn bewegen. (c) zeigt die Magnetronmode, bei der die Ionen sich phasengleich im Uhrzeigersinn bewegen.

3.5. Normalmodentransformation für größere Ionenzahlen

Die zu Beginn von 3.4 vorgestellte Transformation konnte nur deswegen Koordinaten und Impulse entkoppeln, da die Entwicklung des Coulombpotentials für zwei Teilchen nur wenig Kopplungsterme zwischen den Koordinaten enthält. Für größere Ionenzahlen treten in der Entwicklung diese Kopplungsterme auf, und eine analoge Transformation ist nicht mehr anwendbar. So haben wir zwar auch Transformationen für drei und vier Ionen gefunden, diese basieren aber jeweils auf unterschiedlichen Konzepten. Für drei Ionen wurde zuerst eine Diagonalisierung des Koordinatenblocks vorgenommen. Die Form dieser Transformation ist für drei Ionen noch hinreichend einfach, so dass die Kopplungsblöcke ihre einfache Form behalten, und wir dann analog zum Fall zweier Ionen vorgehen können. Dieser Ansatz kann jedoch schon bei vier Ionen nicht mehr angewendet werden. Für vier Ionen wurde die Entkopplung durch eine Kombination kanonischer und nichtkanonischer Teiltransformationen bewerkstelligt, so dass die gesamte Transformation kanonisch bleibt. Jedoch ist diese Transformation auch nicht auf größere N anwendbar.

Eine kanonische Transformation für beliebige N ist somit nicht einfach zu bestimmen. Dies kann man sich folgender Weise klarmachen, indem man die einfachste Transformation, die Koordinaten und Impulse entkoppelt, auf einen allgemeinen Hamiltonoperator anwendet

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp}^1 & \mathcal{H}_{pq}^1 \\ \mathcal{H}_{qp}^1 & \mathcal{H}_{qq}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^T & -N^T \\ N^T & M^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{pp} & \mathcal{H}_{pq} \\ \mathcal{H}_{qp} & \mathcal{H}_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

und die Matrixelemente genauer betrachtet:

$$\mathcal{H}_{pp}^1 = M^T \mathcal{H}_{pp} M - N^T \mathcal{H}_{qp} M - M^T \mathcal{H}_{pq} N + N^T \mathcal{H}_{qq} N \quad (3.55)$$

$$\mathcal{H}_{pq}^1 = M^T \mathcal{H}_{pp} N - N^T \mathcal{H}_{qp} N - M^T \mathcal{H}_{pq} M - N^T \mathcal{H}_{qq} M \quad (3.56)$$

$$\mathcal{H}_{qp}^1 = N^T \mathcal{H}_{pp} M + M^T \mathcal{H}_{qp} M - N^T \mathcal{H}_{pq} N - M^T \mathcal{H}_{qq} N \quad (3.57)$$

$$\mathcal{H}_{qq}^1 = N^T \mathcal{H}_{pp} N + M^T \mathcal{H}_{qp} N + N^T \mathcal{H}_{pq} M + M^T \mathcal{H}_{qq} M \quad (3.58)$$

Damit die Nebendiagonalblöcke verschwinden, muss

$$M^T \mathcal{H}_{pp} N - N^T \mathcal{H}_{qp} N - M^T \mathcal{H}_{pq} M - N^T \mathcal{H}_{qq} M = 0 \quad (3.59)$$

erfüllt sein. Die Transformation müssen wir dann durch Invertieren dieser Gleichung bei Beachtung der Bedingungen (3.34) bis (3.36) für eine kanonische Transformation bestimmen. Jedoch ist dieses in der Praxis sehr schwierig, da die $(6N)^2$ Koeffizienten der Transformationsmatrix bestimmt werden müssen.

Wir suchen deshalb nach einem anderen, einfacheren Ansatz, die Koeffizienten der kanonischen Transformationsmatrix zu bestimmen. Dies wollen wir im Folgenden skizzieren.

Der Hamiltonoperator sei gegeben als $H = H_0 + V$, wobei wir annehmen, dass H_0 blockdiagonale Gestalt hat und sich in kanonischer Weise diagonalisieren lässt. V ist ein Potential, das in Matrixschreibweise eine block-nebendiagonale Form hat, also die beiden Blöcke miteinander koppelt. Wir können beide Blöcke mit Hilfe einer *Schrieffer-Wolf-Transformation* entkoppeln [Kohn, 1964; Schrieffer und Wolff, 1966], die wir im Folgenden kurz skizzieren möchten.

Wir wenden dazu eine Transformation e^S auf H an, die die folgenden Bedingungen erfüllen soll:

(i) S ist antisymmetrisch, also $S^T = -S$.

(ii) Der transformierte Hamiltonoperator $\tilde{H} = e^{-S} H e^S$ ist blockdiagonal.

Aus (i) folgt dann, dass $(e^S)^T = e^{-S}$ gilt. Weiter gilt

$$e^S = \begin{pmatrix} \cos S & \sin S \\ -\sin S & \cos S \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

so dass die Transformation von der Struktur $\begin{pmatrix} M & N \\ -N & M \end{pmatrix}$ ist. Weiter gilt

$$\begin{aligned} & (\cos S)(\cos S)^T - (\sin S)(\sin S)^T \\ &= \cos S \cos(-S) - \sin S \sin(-S) \\ &= \cos S \cos S + \sin S \sin S = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Wir entwickeln dann die Transformation e^S in ihre Potenzreihe, $e^S = 1 + S + S^2/2! + \dots$, und erhalten damit folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= [1 - S + S^2/2! - \dots] H [1 + S + S^2/2! + \dots] \\ &= H + HS - SH + \frac{HS^2}{2} - SHS - \frac{S^2H}{2} + \dots \\ &= H + [H, S] + \frac{1}{2} (HSS - SHS) + \frac{1}{2} (SSH - SHS) + \dots \\ &= H + [H, S] + \frac{1}{2} ([H, S]S + S[S, H]) + \dots \\ &= H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] + \dots, \end{aligned} \quad (3.62)$$

wobei $[A, B] = AB - BA$ der Kommutator zwischen A und B ist³. Dazu verfolgen wir einen störungstheoretischen Lösungsansatz, und führen den Parameter λ ein, der im Folgenden formal als klein angenommen wird. Damit erhalten wir

$$H = H_0 + \lambda V, \quad S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots. \quad (3.63)$$

³Dies ist ein Beispiel für die Verwendung des Kommutators in der klassischen Mechanik

Damit erhalten wir

$$\tilde{H} = H_0 + \lambda(V + [H_0, S_1]) + \lambda^2 \left([H_0, S_2] + [V, S_1] + \frac{1}{2} [[H_0, S_1], S_1] \right) + \dots \quad (3.64)$$

Wir untersuchen dann die Matrixelemente der Nebendiagonalblöcke von \tilde{H} , und fordern, dass diese in erster Ordnung in λ verschwinden. Ebenso nehmen wir dann an, dass S in erster Ordnung in λ ist. Daraus erhalten wir dann eine Gleichung, die wir nach S auflösen können. Beispielsweise erhält man im Fall des von Schrieffer und Wolff untersuchten Problem die Gleichung $[H_0, S] = V$, die einfach zu lösen ist.

Es bleibt die Frage nach der Gültigkeit des verwendeten Störungsansatzes. So muss die erhaltene Matrix S eine konvergente Lösung für \tilde{H} liefern. Dies stellt dann eine Anforderung an die Stärke der Kopplung verglichen mit der Größe der Eigenwerte von H_0 . Gibt es eine Energielücke Δ zwischen den Eigenwerten der Koordinaten und denen der Impulse⁴, so muss gelten, dass die Stärke der Kopplung $\|V\|$ kleiner sein muss als diese Energielücke, $\|V\| < \Delta/2$ [Reed und Simon, 1972]. So haben wir zuerst diese Eigenschaft zu überprüfen, bevor wir diesen Ansatz für die Entkopplung zwischen Koordinaten und Impulsen anwenden können.

⁴Die Eigenwerte der Impulse sind einfach $1/2m$.

Realisierung des Gatters

Wie bereits in Kapitel 1 erwähnt, ist die Umsetzung eines Zwei-Qubit-Gatter derzeit wohl die schwierigste Herausforderung bei Entwicklung eines skalierbaren Quantencomputers. In Ionenfallen ist eine Umsetzung des Zwei-Qubit-Gatter deswegen so schwierig, da eine Wechselwirkung zwischen zwei Qubits erwünscht ist, jedoch jede andere Wechselwirkung mit der Umgebung und den anderen Qubits beispielsweise durch Phononen die Funktionsweise des Gatters nicht stören darf. Folglich wird einen Vorschlag zu einer robusten Umsetzung eines Zwei-Qubit-Gatters bei höheren Temperaturen benötigt, also bei hohen Besetzungszahlen der Phononenmoden des Ionenkristalls. Wir wollen dabei das *controlled-phase gate* (aus dem Englischen) implementieren, welches wir im folgenden einfach nur als Phasengatter¹ bezeichnen wollen. Dazu werden wir dies erst vom Gesichtspunkt der Quanteninformation besprechen, und zeigen, wie dies in Gegenwart von Phononen umgesetzt werden kann. Anschließend wenden wir uns in den folgenden Abschnitten spezielleren Fragestellungen der Umsetzung zu.

¹Es ist dabei klar, dass dies nicht mit einem Ein-Qubit-Phasengatter zu verwechseln ist.

4.1. Schema eines Phasengatters in Gegenwart von Phononen

4.1.1. Das Phasengatter - Funktionsweise

Das Phasengatter ist allgemein definiert als eine Qubitwechselwirkung, welche genau dann eine Phase erzeugt, wenn sich beide Qubits im Zustand $|1\rangle$ befinden:

$$\begin{aligned} |0\rangle |0\rangle &\rightarrow |0\rangle |0\rangle \\ |0\rangle |1\rangle &\rightarrow |0\rangle |1\rangle \\ |1\rangle |0\rangle &\rightarrow |1\rangle |0\rangle \\ |1\rangle |1\rangle &\rightarrow e^{i\theta} |1\rangle |1\rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

Für $\theta = \pi$ ist dies zusammen mit weiteren Einzel-Qubit-Operationen gerade eine Menge universeller Quantengatter, also hinreichend für die Durchführung beliebiger Quantenalgorithmen (siehe auch Kapitel 1).

Wir wollen nun zeigen, wie sich diese Operation mit Hilfe einer zustandsabhängigen Wechselwirkung umsetzen lässt [Calarco u. a., 2001]. Dazu nehmen wir an, wir haben eine Gatteroperation G , die einem Qubit-Paar zunächst nur eine zustandsabhängige Phase aufprägt:

$$\begin{aligned} |0\rangle |0\rangle &\xrightarrow{G} e^{i\Theta_{00}} |0\rangle |0\rangle \\ |0\rangle |1\rangle &\xrightarrow{G} e^{i\Theta_{01}} |0\rangle |1\rangle \\ |1\rangle |0\rangle &\xrightarrow{G} e^{i\Theta_{10}} |1\rangle |0\rangle \\ |1\rangle |1\rangle &\xrightarrow{G} e^{i\Theta_{11}} |1\rangle |1\rangle \end{aligned} \quad (4.2)$$

Danach wenden wir auf beide Qubits Einzel-Qubit-Operationen an. Diese können anschaulich als Drehungen auf der *Bloch-Kugel* dargestellt werden (siehe z.B. Nielsen und Chuang [2000]). Wir rotieren das erste Qubit mit dem Winkel $\Theta_{10} - \Theta_{00}$ um die z-Achse auf der Bloch-Kugel, während wir das zweite Qubit um den Winkel $\Theta_{01} - \Theta_{00}$ drehen. Die beiden Rotationen S_1, S_2 sind also gegeben durch:

$$S_1 = |0\rangle_1\langle 0| e^{i(\Theta_{10}-\Theta_{00})/2} + |1\rangle_1\langle 1| e^{-i(\Theta_{10}-\Theta_{00})/2} \quad (4.3)$$

$$S_2 = |0\rangle_2\langle 0| e^{i(\Theta_{01}-\Theta_{00})/2} + |1\rangle_2\langle 1| e^{-i(\Theta_{01}-\Theta_{00})/2} \quad (4.4)$$

Wenden wir also die Operation $S = S_1 \otimes S_2$ auf beide Qubits an, so ergeben sich folgende, mögliche Zustände:

$$S e^{i\Theta_{00}} |0\rangle |0\rangle = e^{i(\Theta_{10}/2 - \Theta_{00}/2 + \Theta_{01}/2 - \Theta_{00}/2 + \Theta_{00})} |0\rangle |0\rangle \quad (4.5a)$$

$$S e^{i\Theta_{01}} |0\rangle |1\rangle = e^{i(\Theta_{10}/2 - \Theta_{00}/2 - \Theta_{01}/2 + \Theta_{00}/2 + \Theta_{01})} |0\rangle |1\rangle \quad (4.5b)$$

$$S e^{i\Theta_{10}} |1\rangle |0\rangle = e^{i(-\Theta_{10}/2 + \Theta_{00}/2 + \Theta_{01}/2 - \Theta_{00}/2 + \Theta_{10})} |1\rangle |0\rangle \quad (4.5c)$$

$$S e^{i\Theta_{11}} |1\rangle |1\rangle = e^{i(-\Theta_{10}/2 + \Theta_{00}/2 - \Theta_{01}/2 + \Theta_{00}/2 + \Theta_{11})} |1\rangle |1\rangle \quad (4.5d)$$

Des weiteren vernachlässigen wir eine globale Phase von $(\Theta_{01} + \Theta_{10})/2$ und erhalten damit das gewünschte Phasengatter 4.1 mit Winkel θ gegeben durch:

$$\theta = \Theta_{00} - \Theta_{01} - \Theta_{10} + \Theta_{11} \quad (4.6)$$

Somit ist es für ein Phasengatter hinreichend, eine Wechselwirkung zwischen zwei Ionen derart zu erzeugen, dass die betreffenden Qubits eine Phase abhängig vom Zustand beider Qubits erhalten.

4.1.2. Ein robustes Phasengatter - push gate

Die Ideen für ein gegenüber thermischen Phononen robustes Phasengatter basieren auf der Umsetzung in Mikrofallen [Calarco u. a., 2001; Cirac und Zoller, 2000], in denen die Ionen in separaten Potentialen sitzen. Jedoch wurden die dort präsentierten Konzepte in der Folge aufgegriffen [Šašura und Steane, 2003], und auf Ionenkristalle ausgeweitet [García-Ripoll u. a., 2003, 2005].

Schema des Gatters

Die Umsetzung des Phasengatters soll mit Hilfe der externen Freiheitsgrade als „Informationsbus“ von statten gehen. Wir wollen dies in folgendem zusammenfassend beschreiben:

Zunächst sei die gesamte Wellenfunktion gegeben als ein Produktzustand der internen und externen Freiheitsgrade, wobei α den internen Zustand des ersten Ions, β den internen Zustand des zweiten Ions und Ψ den gemeinsamen externen Zustand beider Ionen bezeichnet. Unser Ausgangszustand ist also gegeben durch:

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\Psi\rangle \quad (4.7)$$

Dann wollen wir eine zustandsabhängige Wechselwirkung über eine Zeit T anwenden, so dass sich der externe Zustand in Abhängigkeit der ursprünglichen internen Zustände verändert. Dabei können nach dem Ende der Wechselwirkung im allgemeinen auch die internen Freiheitsgrade eine Änderung erfahren haben. Der Gesamtzustand erfährt durch die Zeitentwicklung im Allgemeinen eine Phase, die abhängig ist von den ursprünglichen internen Zuständen:

$$e^{i\Theta_{\alpha\beta}} |\alpha\rangle' \otimes |\beta\rangle' \otimes |\Psi\rangle'_{\alpha\beta} \quad (4.8)$$

Mit einer weiteren zustandsabhängigen Wechselwirkung wollen wir die Verschränkung zwischen internen und externen Freiheitsgraden wieder aufheben. Wichtig ist dabei, dass

der externe Bewegungszustand nach Ende der Gatteroperation unverändert ist², und die Phase nur von den anfänglichen internen Zuständen abhängt. Wir erhalten nach dem Gatter also idealerweise folgenden Endzustand:

$$e^{i\Theta_{\alpha\beta}} |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\Psi\rangle \quad (4.9)$$

Entscheidend ist, dass der externe Bewegungszustand nach der Gatteroperation unverändert ist - insbesondere dass keine Verschränkung mehr zwischen internen und externen Freiheitsgraden besteht.

Zustandsabhängige Kraft

Wir wollen nun eine zustandsabhängige Kraft \mathbf{F} auf zwei Qubits anwenden, um eine zustandsabhängige Phase zu erhalten. Diese wollen wir durch folgendes Potential beschreiben:

$$V_k = -(\mathbf{q}_k \cdot \mathbf{F}_k) \otimes \rho_k, \quad (4.10)$$

wobei wir die Abhängigkeit der Kraft vom internen Zustand des k -ten Ions durch die 2×2 -Matrix ρ_k beschreiben wollen, die auf dem Hilbertraum der internen Zustände des Ions definiert ist. Später werden wir dann ρ_k gleich der Pauli-z-Matrix σ_k^z setzen. Die Kraft soll dabei nur über einen Zeitraum von $t = 0$ bis $t = T$ wirken, so dass die Kraft dem Zustand der Ionen eine zustandsabhängige Phase aufprägt. Weiter soll nach dem Ende des Gatters ($t > T$) der ursprüngliche Bewegungszustand wieder eingenommen wird.

Zunächst besprechen wir den Fall mit zwei Ionen, die sich in zwei voneinander getrennten harmonischen Potentialen befinden [Calarco u. a., 2001; Cirac und Zoller, 2000]. Wir beschränken uns dabei auf den eindimensionalen Fall. Der Abstand der Ionen in den Gleichgewichtspositionen sei gegeben durch d . Wir lassen dann eine zustandsabhängige Kraft auf beide Ionen wirken. Diese soll jeweils nur dann eine Kraft auf ein Ion ausüben, wenn sich dieses im Zustand $|1\rangle$ befindet. Durch die Kraft wird das Ion dann um den Wert Δx aus der Gleichgewichtsposition ausgelenkt (siehe Abbildung 4.1), wobei $\Delta x \ll d$ gelten soll. Dadurch erhalten die Ionen abhängig von beiden internen Zuständen einen unterschiedlichen Abstand. Die Coulomb-Energie der beiden Ionen ist dann ebenfalls

²Ein veränderter Bewegungszustand nach Ende des Gatters führt bei dem hier besprochenen Gatter zu einem Fehler. Im Allgemeinen muss dies nicht der Fall sein. Vielmehr ist es hinreichend, dass der externe Zustand nach Durchführung des Gatters nicht von den anfänglichen internen Zuständen der Ionen abhängt.

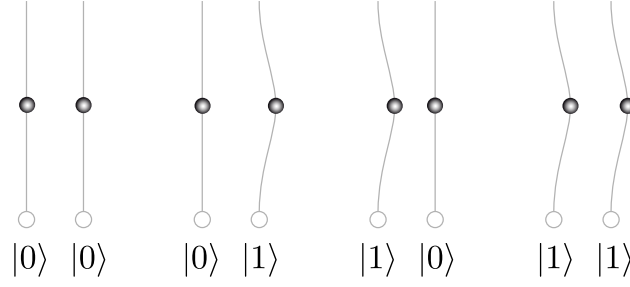


Abbildung 4.1: Teilchentrajektorien für zwei Ionen in Abhängigkeit der internen Zustände. Befindet sich ein Ion im Zustand $|1\rangle$, so erfährt es eine Auslenkung, im Zustand $|0\rangle$ bleibt es in seiner Gleichgewichtsposition. Dadurch sind die Abstände der Ionen ebenfalls zustandsabhängig.

unterschiedlich und gegeben durch

$$E_{\text{coul}}^{|00\rangle} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d} \quad (4.11)$$

$$E_{\text{coul}}^{|01\rangle} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d + \Delta x} \quad (4.12)$$

$$E_{\text{coul}}^{|10\rangle} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d - \Delta x} \quad (4.13)$$

$$E_{\text{coul}}^{|11\rangle} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d}. \quad (4.14)$$

Durch diese Energieverschiebung sammeln die Ionen auf den unterschiedlichen Trajektorien verschiedene Phasen abhängig von ihrem internen Zustand auf. Wir können dies auch in den Normalkoordinaten dieses „Ionenkristalls“ darstellen. Befinden sich beide Ionen im gleichen Zustand, so ist die Auslenkung durch die Schwerpunktskoordinate gegeben, befinden sie sich in unterschiedlichen Zuständen, so wird die Relativkoordinate ausgelenkt. Die Relativkoordinate wird dabei abhängig von den internen Zuständen vergrößert oder verringert. Dies lässt sich auch elegant durch die Transformationmatrizen für die Normalkoordinaten darstellen. Für die Schwerpunktskoordinate ist diese gegeben durch $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, für die Relativkoordinate durch $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Diese Beschreibung in Normalkoordinaten wenden wir jetzt für einen größeren Ionenkristall an. In Kapitel 3 haben wir die kanonische Transformation zu den Normalkoordinaten bestimmt. Die Transformation der Koordinaten und Impulse ist dabei gegeben durch

$$P_i = (T_{Pp})_{ij} p_j + (T_{Pq})_{ij} q_j \quad (4.15a)$$

$$Q_i = (T_{Qp})_{ij} p_j + (T_{Qq})_{ij} q_j. \quad (4.15b)$$

Um die Beziehung für die ursprünglichen Koordinaten zu erhalten, müssen wir T invertieren, $T^{-1} =: S$. Anschließend zerlegen wir S in die entsprechenden Blöcke nach Koordinaten und Impulsen, so dass folgende Beziehungen gelten:

$$p_i = (S_{pP})_{ij}P_j + (S_{pQ})_{ij}Q_j \quad (4.16a)$$

$$q_i = (S_{qP})_{ij}P_j + (S_{qQ})_{ij}Q_j. \quad (4.16b)$$

Der Hamiltonoperator mit einer zustandsabhängigen Kraft ist damit also in der Basis der Normalkoordinaten gegeben durch den Hamiltonoperator von $3N$ getriebenen harmonischen Oszillatoren, welcher sich wie folgt schreibt:

$$H = \sum_{k=1}^{3N} \left[\frac{1}{2m} P_k^2 + \frac{1}{2} m \omega_k^2 Q_k^2 - \sum_{i=1}^{3N} F_i (S_{qP})_{ik} P_k - \sum_{i=1}^{3N} F_i (S_{qQ})_{ik} Q_k \right] \quad (4.17)$$

Wir erhalten gegenüber der Herleitung in Referenz [García-Ripoll u. a., 2005] einen zusätzlichen Term im Hamiltonoperator des getriebenen harmonischen Oszillators, nämlich den Term mit der Summe über alle Normalmodenimpulse P_k , der aufgrund der Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen mit einbezogen werden muss. Durch Umschreiben auf eine dimensionslose Form mit Hilfe der Transformation $\bar{P}_k = \alpha_{0k} P_k / \hbar$, $\bar{Q}_k = Q_k / \alpha_{0k}$ sowie $(\bar{S}_{qP})_{ik} = (S_{qP})_{ik} / \alpha_{0k}$ und $(\bar{S}_{qQ})_{ik} = \alpha_{0k} (S_{qQ})_{ik}$ erhalten wir:

$$H = \sum_{k=1}^{3N} \left[\frac{1}{2} \hbar \omega_k (\bar{P}_k^2 + \bar{Q}_k^2) - \sum_{i=1}^{3N} F_i (\bar{S}_{qP})_{ik} \bar{P}_k - \sum_{i=1}^{3N} F_i (\bar{S}_{qQ})_{ik} \bar{Q}_k \right], \quad (4.18)$$

wobei $\alpha_{0k} = (\hbar / m \omega_k)^{1/2}$ die Grundzustandsbreite der harmonischen Oszillatoren der jeweiligen Normalmoden ist. Dies können wir wiederum mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{Q}_k + i \bar{P}_k) \quad (4.19a)$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{Q}_k - i \bar{P}_k) \quad (4.19b)$$

des harmonischen Oszillators umschreiben zu:

$$H = \sum_{k=1}^{3N} \left[\hbar \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) - \sum_{i=1}^{3N} \frac{i F_i (\bar{S}_{qP})_{ik}}{\sqrt{2}} (a_k^\dagger - a_k) - \sum_{i=1}^{3N} \frac{F_i (\bar{S}_{qQ})_{ik}}{\sqrt{2}} (a_k^\dagger + a_k) \right] \quad (4.20)$$

Der Hamiltonoperator (4.20) ist der von $3N$ getriebenen harmonischen Oszillatoren, wir wollen im Folgenden nur eine Mode betrachten, die Überlegungen lassen sich dann auf den Fall mehrerer Moden verallgemeinern. Im Fall nur einer Mode reduziert sich der Hamiltonoperator (4.20) zu:

$$H = \hbar \omega a^\dagger a + \frac{F_1(t)}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) + \frac{i F_1(t)}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger) \quad (4.21)$$

Im Folgenden stellen wir die Anregungen dieser Mode in der übervollständigen Basis der kohärenten Zustände dar [Schrödinger, 1926; Glauber, 1963a,b]:

$$e^{i\phi(t)} |\alpha(t)\rangle = e^{i\phi(t)} e^{-\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n(t)}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (4.22)$$

4.1.3. Adiabatisches Gatter

Im Ionenkristall gibt es viele „weiche“ Phononenmoden, die sehr dicht beieinander sitzen. Wir wollen im Folgenden nach einer Umsetzung eines Gatters in einem solchen Ionenkristall suchen, die zunächst mit Hilfe eines Gatters im adiabatischen Limit [Calarco u. a., 2001] ermöglicht werden soll. Also mit einem Gatter, dessen Dynamik wesentlich langsamer ist als die ungestörte Zeitentwicklung des Systems, also $\tau_{\text{Gatter}}\omega \gg 1$.

Dazu wollen wir die Diskussion wieder vereinfachen, und den harmonischen Oszillator über eine Kraft treiben, die nur an den Ort der Ionen gekoppelt ist. Wir lassen den letzten Term in Gleichung 4.21 wegfällen, so dass wir folgenden Hamiltonoperator erhalten:

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{F_1(t)}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad (4.23)$$

In diesem Fall gelten die folgenden Differentialgleichungen für $\alpha(t)$ und $\phi(t)$ [García-Ripoll u. a., 2005]:

$$\frac{d\alpha}{dt} = -i\omega\alpha(t) + \frac{i}{\sqrt{2}\hbar}f(t) \quad (4.24)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{f(t)}{2\sqrt{2}}(\alpha(t) + \alpha^*(t)), \quad (4.25)$$

$$(4.26)$$

wobei wir diese jetzt wieder im Schrödingerbild dargestellt haben, was auch die triviale Zeitentwicklung des Zustandes einschließt.

Diese Gleichungen lösen wir nun mit Hilfe der sogenannten *adiabatischen Elimination*. Dazu setzen wir in Gleichungen (4.24) und (4.25) $\dot{\alpha}(t) \rightarrow 0$. Wir erhalten damit:

$$\alpha(t) \approx \frac{f(t)}{\sqrt{2}\hbar\omega} \quad (4.27)$$

$$\phi(t) \approx \frac{f^2(t)}{2\hbar^2\omega}. \quad (4.28)$$

Die durch die Kraft bewirkte Verschiebung des kohärenten Zustand $\alpha(t)$ - und damit die Auslenkung der Mode - ist also proportional zur Kraft selbst. Wir lassen nun die Kraft zu

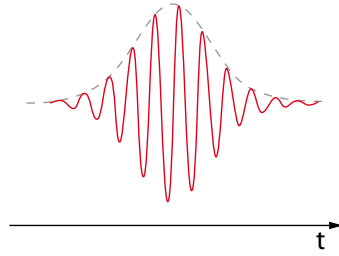


Abbildung 4.2: Schnelle Modulation der Kraft

Beginn und Ende des Gatters gegen Null gehen, und erhalten damit als Endzustand nach der Durchführung des Gatters wieder den Anfangszustand. Dies gilt dabei unabhängig vom Anfangszustand!

Weiter hängt die Phase $\phi(t)$ auch nicht vom Ausgangszustand ab. Im adiabatischen Limit kann das Gatter also ohne eine Kenntnis des Anfangszustandes durchgeführt werden kann.

4.1.4. Schnell-moduliertes Gatter

Da die adiabatische Durchführung des Gatters im Allgemeinen zu langsam ist, um sinnvoll in einem Quantencomputer implementiert zu werden, wollen wir nun nach einer Umsetzung suchen, die nicht auf das adiabatische Limit zurückgreift. Dazu werfen wir einen Blick auf die Lösung der Gleichung (4.24), die gegeben ist durch (García-Ripoll u. a. [2005])

$$\alpha(t) = e^{a\omega t} \left(\alpha(0) + \frac{i}{\sqrt{2}\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega t'} f(t') \right) \quad (4.29)$$

Wir sehen sofort, dass wir nach Ende des Gatters $t > T$ zum Ausgangszustand zurückkehren, falls

$$\int_0^T dt' e^{i\omega t'} f(t') = 0 \quad (4.30)$$

erfüllt ist. Wir wollen dies nun mit Hilfe einer schnellen, sinusförmigen Modulation $f(t) \cos \nu t$ der Kraft erreichen, wobei die Frequenz ν der Modulation viel größer als die Phononenfrequenzen ω sein soll, so dass

$$\int_0^T dt' e^{i\omega t'} f(t') \cos(\nu t') \rightarrow 0 \quad (4.31)$$

gilt. Diese Anforderung kann dadurch veranschaulicht werden, dass die Ionen durch die Kraft zu schnell hin und her bewegt werden, als dass Phononen angeregt werden können,

sowie dass sie im zeitlichen Mittel keine Verschiebung aus der Gleichgewichtsposition erfahren. Bleibt weiter die Einhüllende der Kraft langsam veränderlich gegenüber der Modulation, aber ohne Einschränkung in Bezug auf die Frequenzen der Phononenmoden, so wird das Integral 4.30 beliebig klein. Damit erhalten wir die gewünschten Eigenschaften des Gatters, wie durch folgende Rechnung gezeigt werden kann.

Wir wollen dies erneut mit adiabatischer Eliminierung lösen, wobei wir aber den Ansatz $\alpha(t) = \alpha_+(t)e^{i\nu t} + \alpha_-(t)e^{-i\nu t}$ wählen. Setzen wir den Ansatz in Gleichung (4.24) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & \dot{\alpha}_+ e^{i\nu t} + i\nu \alpha_+ e^{i\nu t} + \dot{\alpha}_- e^{-i\nu t} - i\nu \alpha_- e^{-i\nu t} \\ &= -i\omega \alpha_+ e^{i\nu t} - i\omega \alpha_- e^{-i\nu t} + \frac{i}{2\sqrt{2}\hbar} f(t) (e^{i\nu t} + e^{-i\nu t}), \end{aligned} \quad (4.32)$$

was wir wie folgt umformen können:

$$\dot{\alpha}_+ e^{i\nu t} + \dot{\alpha}_- e^{-i\nu t} = i \left[\frac{f(t)}{2\sqrt{2}\hbar} - \alpha_+(\omega + \nu) \right] e^{i\nu t} + i \left[\frac{f(t)}{2\sqrt{2}\hbar} - \alpha_-(\omega - \nu) \right] e^{-i\nu t} \quad (4.33)$$

Wir betrachten nun die Teile der Gleichung, die jeweils proportional zu $e^{i\nu t}$ bzw. $e^{-i\nu t}$ sind, getrennt, und führen jeweils eine adiabatische Eliminierung der beiden Amplituden, $\dot{\alpha}_+ \rightarrow 0$ und $\dot{\alpha}_- \rightarrow 0$, durch. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \alpha_+(t) &= \frac{f(t)}{2\sqrt{2}(\omega + \nu)} \\ \alpha_-(t) &= \frac{f(t)}{2\sqrt{2}(\omega - \nu)} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Wie im adiabatischen Fall zuvor ist also die Auslenkung der Normalmode proportional zur angelegten Kraft. Die Phase ist dann gegeben durch [Taylor und Calarco, 2007]:

$$\dot{\phi}(t) = \frac{f^2(t)}{2\hbar^2} \frac{\omega}{(\omega^2 - \nu^2)} \cos^2(\nu t), \quad (4.35)$$

wobei wir die schnell variierende Komponente $\cos^2(\nu t)$ noch durch den Mittelwert $1/2$ ersetzen.

Für weitere Berechnungen wie beispielsweise möchten wir auf die entsprechende Veröffentlichung von Taylor und Calarco verweisen. Die in diesem Unterabschnitt erhaltenen Formeln müssen bei Beachtung einer Kopplung zwischen den Koordinaten und Impulsen entsprechend angepasst werden.

4.2. Umsetzung des Gatters

Weiter untersuchen wir nun genauer das im letzten Abschnitt vorgestellte Konzept des Phasengatters wie auch die restlichen Anforderungen, um Quanteninformationsverar-

beutung mit großen Ionenkristallen zu realisieren, und diskutieren Möglichkeiten einer Realisierung.

Bis jetzt haben wir weder das genaue Isotop der Ionen interne Zustände der Ionen den logischen Qubitzuständen zugeordnet. Da wir ein möglichst einfaches Energietermschema haben möchten, wählen wir für die weiteren Untersuchungen ein Element mit zwei äußeren Elektronen, wie dies zum Beispiel für Elemente der zweiten Hauptgruppe wie Beryllium, Magnesium, Calcium, Barium etc. gegeben ist. Das einfach positiv geladene Ion hat dann eine Wasserstoff-ähnliche Konfiguration, und damit ein relativ einfaches Termschema.

Die Ionen befinden sich in der Penningfalle in einem starken Magnetfeld, welches mit den magnetischen Momenten des Elektrons wechselwirkt, so dass die Spinentartung des Grundzustands aufgehoben ist. Wir können also die beiden verschiedenen Spinzustände des Grundzustands als Qubit-Zustände wählen. Wir wählen dabei den Zustand mit Spin entgegen dem Magnetfeld als Qubitzustand $|0\rangle$, und den Zustand mit Spin in Richtung des Magnetfeldes als Qubitzustand $|1\rangle$. Ein Übergang von $|1\rangle$ nach $|0\rangle$ ist wegen der optischen Auswahlregel $\Delta s = 0$ nicht erlaubt [Haken und Wolf, 2004], so dass keine unerwünschten Flips in unserem Qubit auftreten können, und die Dekohärenzzeiten (Sekunden bis Minuten) sehr viele Größenordnungen länger sind als alle Gatteroperationen (zwischen $10^{-6}s$ und $10^{-3}s$).

Die anderen Anforderungen wie Initialisierung, Auslesen oder Ein-Qubit-Operationen haben wir bereits in der Einführung (Kapitel 1) besprochen, wir wollen im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht detaillierter darauf eingehen, sondern uns der Besprechung des Zwei-Qubit-Gatters zuwenden.

4.2.1. Schema der Umsetzung

Für die Umsetzung des Phasengatters benötigen wir eine zustandsabhängige Kraft, so dass wir unterschiedliche Phasen für verschiedene Kombinationen der beiden Qubits aufsammeln. Als möglicher Kandidat für eine zustandsabhängige Kraft wurde die *Dipolkraft* vorgeschlagen [Šašura und Steane, 2003]. Die Dipolkraft wirkt auf ein Atom, das sich in einem Intensitätsgradienten eines Lasers befindet, welcher stark gegenüber einem atomaren Übergang verstimmt ist, so dass eine Anregung des Übergangs sehr unwahrscheinlich ist. Die entsprechenden atomaren Energieniveaus werden durch das Laserfeld mittels Stark-Effekt verschoben, so dass das Atom ein zusätzliches Potential spürt. Die Richtung der Kraft - also attraktiv oder repulsiv - hängt dabei von der Verstimmung ab. Ist der Laser gegenüber dem betreffenden Übergang rot verstimmt, so wird das Atom in Richtung der höheren Intensität gezogen; ist der Laser dagegen blau verstimmt, so wird das Atom in Richtung der niedrigeren Intensität gedrückt.

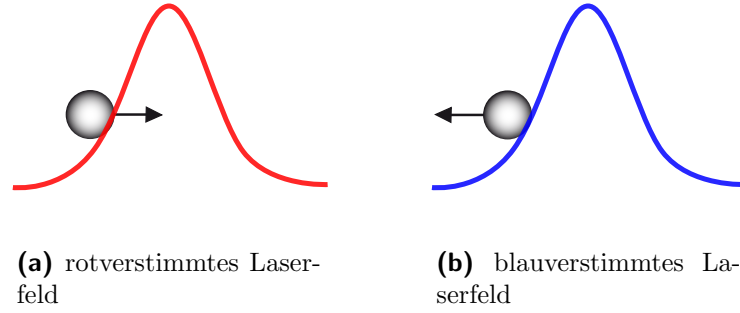


Abbildung 4.3: Ein Atom in einem Intensitätsgradienten eines Laserfeldes, welches eine rot gegenüber einem atomaren Übergang verstimnte Frequenz besitzt, erfährt eine Kraft in Richtung der Gradienten, es wird also in Richtung höherer Intensität gezogen. Hat das Laserfeld dagegen eine Frequenz, die gegenüber dem Übergang blauverstimmt ist, so wirkt die Dipolkraft entgegen dem Intensitätsgradienten, und das Atom wird aus dem Lichtfeld gedrückt.

Die mittlere Dipolkraft aufgrund eines Intensitätsgradienten ist im Fall großer Verstimmung $|\delta| \gg \Omega$ gegeben durch:

$$\mathbf{F}_{dip} = -\frac{\hbar}{4\delta} \nabla |\Omega(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (4.36)$$

Hierbei ist δ die Verstimmung des Lasers gegenüber dem atomaren Übergang, und $\Omega(\mathbf{r})$ ist die Rabi-Frequenz des Übergangs, die durch das Dipolmatrixelement \mathbf{d}_{ab} des atomaren Übergangs und dem elektrischen Feld $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ gegeben ist:

$$\Omega = -\frac{\mathbf{d}_{ab} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \quad (4.37)$$

Wir wollen zur Umsetzung des Gatters verschiedene Laserpulse auf die Ionen einstrahlen. Durch geeignete Wahl der Intensität, Polarisation und Verstimmung des Lasers wollen wir erreichen, dass die Kraft aufgrund des Lichtfeldes auf den Qubit-Zustand $|0\rangle$ sich von der auf den Zustand $|1\rangle$ unterscheidet. Über die Einstellung der Intensität sowie der Verstimmung können wir dann die Stärke der Kräfte genau festlegen.

Allerdings müssen die Qubit-Zustände zusätzlich noch unsymmetrisch bezüglich der möglichen Übergänge sein, d.h. es muss Übergänge geben, die nur für einen der beiden Qubit-Zustände erlaubt sind. Dies ist aber abhängig von der Magnetfeldverschiebung der Energieniveaus im Magnetfeld, die wir deshalb im folgenden genauer untersuchen wollen.

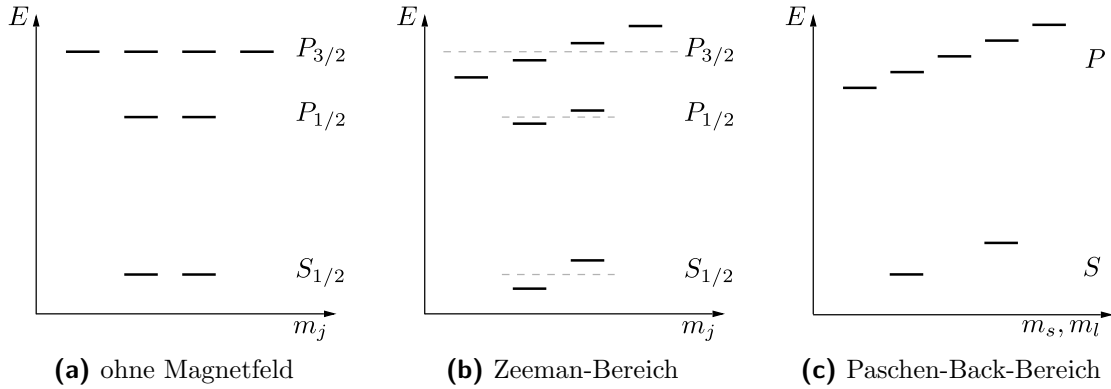


Abbildung 4.4: Atomare Energieniveaus bei verschiedenen Magnetfeldstärken. Die Abstände der Energieniveaus sind nicht maßstabsgetreu wiedergegeben. (a): Ohne Magnetfeld sind die Zustände mit gleichem Gesamtdrehimpuls j entartet. (b): Bei schwachen Magnetfeldstärken spalten die Niveaus mit gleichem Drehimpuls j in $2j + 1$ Subniveaus auf, die durch die magnetische Quantenzahl m_j charakterisiert sind. (c): Bei sehr starken Magnetfeldstärken entkoppeln Spin und Bahndrehimpuls. Die Energieverschiebungen sind jetzt proportional zu $2m_s + m_l$.

4.2.2. Magnetfeldaufspaltung

Für die Zustandsabhängigkeit der Kraft benötigen wir also eine gebrochene Symmetrie bezüglich der möglichen Übergänge ausgehend von den verschiedenen Spineinstellungen des Grundzustandes. Je nach Stärke des Magnetfeldes kann es zu verschiedenen Fällen der Magnetfeldaufspaltung kommen [Haken und Wolf, 2004]. Im sogenannten *Zeeman-Bereich* ist das externe Magnetfeld noch schwach im Vergleich zur Spin-Bahn-Wechselwirkung, so dass die Kopplung zwischen Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons stärker ist als die Kopplung zum externen Feld. Folglich erfahren Spins, die parallel zum Bahndrehimpuls ausgerichtet sind, eine andere Energieverschiebung als Spins, die entgegen dem Bahndrehimpuls stehen. Bei stärkeren Magnetfeldern entkoppeln dann Spin und Bahndrehimpuls, so dass beide in Richtung des Magnetfeldes ausgerichtet werden, was zu einer anderen Aufspaltung der Energieniveaus führt. Dies ist der sogenannte *Paschen-Back-Bereich*. Diese beiden Grenzfälle sind relativ einfach zu beschreiben. Dazwischen gibt es noch den *intermediären Bereich*, in dem die Spin-Bahn-Wechselwirkung und das äußere Magnetfeld ähnlich stark sind. Dort werden allerdings die Berechnungen für Dipolübergangselemente zu kompliziert, um sie im Rahmen dieser Arbeit zu behandeln. Wir wollen also im folgenden diesen Bereich bei unseren Überlegungen nicht berücksichtigen, sondern die beiden anderen Bereiche bezüglich der Umsetzung des Gatters untersuchen.

Zeeman-Bereich

Zunächst untersuchen wir den Grenzfall schwacher Magnetfelder. Hier koppeln zuerst Bahndrehimpuls und Spin miteinander zu einem Gesamtdrehimpuls. Dabei können sich der Bahndrehimpuls und der Spin des Elektrons in gleicher oder in entgegengesetzter Richtung zueinander ausrichten. So gibt es beispielsweise für die Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 1$ und für ein Elektron mit $s = 1/2$ zwei mögliche Gesamtdrehimpulse, $j = 1/2$ oder $j = 3/2$. Die Energieniveaus zum Bahndrehimpuls $l = 1$ sind also auf zwei Mannigfaltigkeiten verteilt, die mit $P_{1/2}$ und mit $P_{3/2}$ benannt sind. Für den Grundzustand $l = 0$ gibt es natürlich keine entsprechende Aufspaltung, wir haben also nur eine Mannigfaltigkeit, die mit $S_{1/2}$ benannt ist.

Ohne Magnetfeld sind diese Mannigfaltigkeiten energetisch bezüglich der magnetischen Quantenzahl m_s entartet (Abbildung 4.4a). Legt man ein externes Magnetfeld an, wird diese Entartung aufgehoben, d.h. die zuvor entarteten Niveaus spalten in $2j + 1$ energetisch verschiedene Subniveaus auf, wobei die Niveaus mit niedrigerer magnetischer Quantenzahl m_s energetisch niedriger liegen. Die Art der Aufspaltung ist in Abbildung 4.4b dargestellt.

Die Übergangsfrequenzen sind alle unterschiedlich verschoben. Ein Laser einer bestimmten Frequenz sieht also unterschiedliche Verstimmungen, je nachdem in welchem der beiden Spinzustände sich das Ion befindet. Die Verstimmungen sind also zustandsabhängig, und damit auch wie gewünscht die Kräfte. Der Zeeman-Bereich scheint also uns für unsere Zwecke dienlich, muss aber noch genauer untersucht werden.

Paschen-Back-Bereich

Im Grenzfall starker Magnetfelder entkoppeln Spin und Bahndrehimpuls, und beide richten sich unabhängig voneinander im externen Magnetfeld aus. Im Magnetfeld gibt es für den Drehimpuls $l = 1$ also drei mögliche Einstellungen $\{-1, 0, 1\}$, und für den Spin die beiden Einstellungen $-1/2$ und $+1/2$. Beide addieren sich dann zu einem Gesamtdrehimpuls $j = l + 2s$, so dass wir folgende Werte für j erhalten: $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$. Die P -Mannigfaltigkeit spaltet also in fünf Unterniveaus auf, wie auch in Abbildung 4.4c dargestellt ist. Die Verschiebung der Niveaus ist in diesem Fall proportional zu $2s + l$.

Für jedes der beiden Grundzustandsniveaus ergeben sich also drei mögliche Übergänge zu den Energieniveaus der P -Mannigfaltigkeit mit jeweils verschiedener Polarisierung. Die Frequenzen für Übergänge gleicher Polarisierung sind aber für beide Grundzustandsniveaus identisch. Strahlt man also Licht einer bestimmten Polarisierung und Frequenz ein, so werden beide Übergänge mit identischer Wahrscheinlichkeit angeregt, unabhängig davon, in welchem der beiden Spinzustände das Atom sich befindet. Anders ausgedrückt,

Atom/Ion	$\Delta E/\hbar$ (THz)	B_{Zeeman} (T)	$B_{P.-Back}$ (T)
Be II	0.198	1.124	4.498
Mg II	2.75	15.617	62.470
H I	0.011	0.0625	0.250
Li I	0.010	0.0568	0.227
Na I	0.516	2.930	11.722

Tabelle 4.1: Art der Magnetfeldaufspaltung in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke. Energieaufspaltung zwischen den $P_{1/2}$ und $P_{3/2}$ Niveaus [NIST, 2008] umgerechnet auf das maximale magnetische Feld B_{Zeeman} , bei dem man sich noch im Zeeman-Limit befindet sowie das minimale Magnetfeld $B_{P.-Back}$, in dem man sich schon im Paschen-Back-Limit befindet. Zum Vergleich sind darunter noch Werte für Isotope angegeben, für die der Paschen-Back-Effekt der Feinstruktur experimentell zugänglich ist.

hebt das Magnetfeld die Symmetriebrechung bezüglich der magnetischen Quantenzahl auf. Folglich erhalten wir im Paschen-Back-Bereich auch keine Zustandsabhängigkeit der Dipolkraft, können diesen also auch nicht für die Implementierung nutzen. Wir müssen also im folgenden untersuchen, wie sich das Paschen-Back-Limit vermeiden lässt.

Gültigkeit der unterschiedlichen Bereiche

Wir möchten die Gültigkeitsbereiche der jeweiligen Bereiche untersuchen. Als Maß dazu wollen wir die Kopplungsstärke zwischen den magnetischen Momenten von Spin und Bahnbewegung vergleichen mit der Kopplungsstärke zwischen dem magnetischen Moment des Elektrons und dem externen magnetischen Feld. Ersteres lässt sich mittels der Energieaufspaltung ΔE zwischen den beiden P -Manningfaltigkeiten in Abwesenheit eines externen Magnetfeldes abschätzen, während letzteres gegeben ist durch das Magnetfeld B mal dem magnetischen Moment des Elektrons μ_B (dem Bohrschen Magneton gegeben durch $\mu_B = e\hbar/2m_e$). Für ein Verhältnis $\mu_B B/\Delta E$ von etwa 0 bis 0.5 befinden man sich noch im Zeeman-Limit, dagegen befindet man sich für Werte von $\mu_B B/\Delta E$ über 2 im Paschen-Back-Limit [Otter und Honecker, 1993].

Wie wir Tabelle 4.1 entnehmen können, befinden wir uns für typische Magnetfelder einer Penningfalle ($\sim 1 - 5$ Tesla) für beinahe alle Ionen im Zeeman-Limit, mit Ausnahme von Beryllium. Wir sehen, dass für schwerere Ionen innerhalb der Erdalkalimetalle die Energieaufspaltung wächst, und damit auch die Grenzen der beiden Bereiche. Nur für Beryllium können beide Grenzwerte experimentell erreicht werden. Deswegen müssen wir die experimentellen Rahmenbedingungen so anpassen, dass wir nicht den Paschen-Back-Bereich erreichen.

Im folgenden wollen wir zudem die Diskussion möglichst allgemein unabhängig von der Ionensorte durchführen. Folglich wollen wir annehmen, dass wir für alle Ionen im

Zeeman-Bereich bleiben, also dass das Magnetfeld nicht stärker als 1 Tesla ist.

4.3. Berechnung der Dipolkräfte

4.3.1. Anforderungen an die Dipolkraft

Entgegengesetzte Kräfte für unterschiedliche Qubit-Zustände

Wir betrachten eine zustandsabhängige Kraft gegeben durch ein Potential der Form (4.10). Für die Phase zweier Ionen gilt dann, dass diese abhängig ist von dem Integral über eine Funktion, die proportional zum Produkt beider Kräfte und einem Faktor $\mathcal{G}_{12}(t)$, der unabhängig von der Form und Richtung der Kräfte ist.

$$\phi = \int_0^T dt' \int_0^T dt'' F_1(t') F_2(t'') \mathcal{G}_{12}(t' - t''), \quad (4.38)$$

In (4.38) haben wir dabei angenommen, dass die Kräfte parallel zueinander wirken. $\mathcal{G}_{12}(t)$ ist wie folgt gegeben,

$$\mathcal{G}_{12}(t) = \sum_k \frac{M_{1k} M_{2k}}{2m\omega_k \hbar} \sin(|t|), \quad (4.39)$$

wobei ω_k jeweils die Frequenzen der Moden sind. M_{ij} sind die Koeffizienten der Transformationsmatrix zwischen den Teilchenkoordinaten und den Normalkoordinaten im Falle ohne einer Kopplung zwischen Koordinaten und Impulsen. Diese ist dann gegeben durch $\begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$ (siehe Kapitel 3).

Wir wollen das Gatter nun so umsetzen, dass wir eine vorgegebene Phase mit möglichst wenig Kraft (oder äquivalent in möglichst kurzer Zeit) erreichen. D.h. wir wollen also nach Gleichung (4.6) eine maximale Phase erzielen, indem die verschiedenen Phasen $\Theta_{00}, \Theta_{01}, \dots$ sich maximal addieren. Dies ist aber gerade dann der Fall, wenn Θ_{01} und Θ_{10} gerade entgegengesetzte Vorzeichen haben wie Θ_{00} und Θ_{11} . Betrachten wir die Kräfte auf die Ionen, $\rho_1 F_1$ und $\rho_2 F_2$, die wir auch der Einfachheit halber parallel zueinander annehmen, so stellen wir fest, dass dies gerade gegeben ist, wenn die Kräfte gerade abhängig sind von den *Pauli-z-Matrizen* σ_k^z , also die Form $\sigma_k^z F_2$ haben. Dann ist die Kraft auf das k -te Ion im Zustand $|0\rangle$ gegeben durch $F_k^{(0)} = -F_k$, und die Kraft auf das k -te Ion im Zustand $|1\rangle$ ist gegeben durch $F_k^{(1)} = +F_k$. Es soll also gelten, dass die Kraft proportional zur Pauli-z-Matrix ist:

$$V_k = -(\mathbf{q}_k \cdot \mathbf{F}_k) \otimes \sigma_k, \quad (4.40)$$

Folglich haben wir die Bedingung an die Kraft, dass sie je nach internem Zustand des Atoms entgegengesetztes Vorzeichen aufweist:

$$F^{|0\rangle} = -F^{|1\rangle} \quad (4.41)$$

Kraft auf einen Qubit-Zustand soll im Mittel Null sein

Für die Umsetzung des schnell-modulierten Gatters benötigen wir eine sinusförmige Modulation der Kraft derart, dass

$$\int_0^T dt' e^{i\omega t'} F(t') \cos(\nu t') \rightarrow 0 \quad (4.42)$$

gilt. Die Modulation kann experimentell beispielsweise durch akustooptische Modulatoren (AOMs) umgesetzt werden, mit denen die Frequenz des Laserlichtes sehr schnell variiert werden kann, oder auch durch Pockels-Zellen, mit denen die Polarisierung und Phase des Lichtes manipuliert werden kann. Jedoch muss sichergestellt werden, dass dadurch die gewünschte sinusförmige Modulation der Kraft erreicht wird. Dies wollen wir durch die Bedingung

$$\int_0^\tau F^{|i\rangle} dt = 0 \quad (4.43)$$

sicherstellen, wobei $\tau = 2\pi/\nu$ gerade eine Modulationsperiode beschreibt.

Im Folgenden überprüfen wir also, ob diese beiden Bedingungen mit der Dipolkraft über die Modulation der Frequenz, der Intensität und der Polarisierung erfüllt werden können. Damit käme die Dipolkraft für eine Umsetzung des schnell-modulierten Gatters in Frage.

4.3.2. Berechnung der Energieverschiebungen

Dazu berechnen wir zunächst die Verschiebungen der atomaren Energieniveaus im Magnetfeld, woraus wir die Übergangsfrequenzen erhalten, die für die weiteren Rechnungen gebraucht werden.

Die Energieverschiebung auf den Zustand $|l, j, m_j\rangle$ im Magnetfeld B aufgrund des Zeeman-Effekts ist gegeben durch [Cohen-Tannoudji u. a., 1999]

$$\Delta E_{l,j,m_j} = g_j m_j \mu_B B \quad (4.44)$$

Dabei gibt der *Landéfaktor* g_j das Verhältnis zwischen dem magnetischen Moment (in Einheit des Bohrschen Magnetons) zum Drehimpuls (in der Einheit von \hbar) an, m_j ist

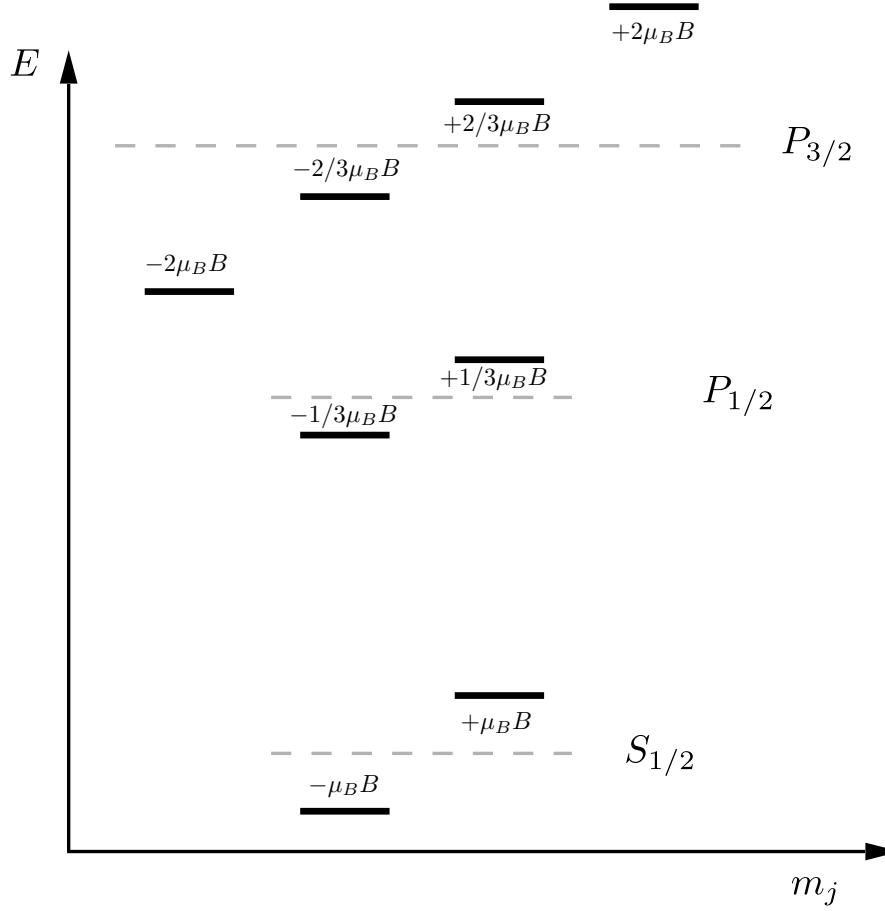


Abbildung 4.5: Energieverschiebungen der atomaren Übergänge im Magnetfeld B . Die Abstände der Energieniveaus sind nicht maßstabsgetreu wiedergegeben.

die magnetische Quantenzahl des jeweiligen Energieniveaus, μ_B ist das Bohrsche Magneton und B ist das angelegte Magnetfeld. Zur Berechnung der Energieverschiebungen benötigen wir also zunächst eine Bestimmung der jeweiligen g -Faktoren. Der g -Faktor ist allgemein definiert als [Haken und Wolf, 2004]:

$$g_j = \frac{3j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (4.45)$$

Für ein Teilchen mit Spin $s = 1/2$ vereinfacht sich dieser Ausdruck zu:

$$g_j = \frac{j + 1/2}{l + 1/2} \quad (4.46)$$

Damit lassen sich die g -Faktoren einfach berechnen (siehe Tabelle 4.2). Somit können wir alle Energieverschiebungen bestimmen. Diese sind in Tabelle 4.2 angegeben. Als

Niveau	g -Faktor	ΔE in $\mu_B B$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	2	-1
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	2	+1
$P_{1/2} \quad m_j = -1/2$	2/3	-1/3
$P_{1/2} \quad m_j = +1/2$	2/3	+1/3
$P_{3/2} \quad m_j = -3/2$	4/3	-2
$P_{3/2} \quad m_j = -1/2$	4/3	-2/3
$P_{3/2} \quad m_j = +1/2$	4/3	+2/3
$P_{3/2} \quad m_j = +3/2$	4/3	+2

Tabelle 4.2: Verschiebungen der einzelnen Energieniveaus im Magnetfeld B

unteres Niveau	oberes Niveau	Polarisation des Übergangs	Verschiebung in $\mu_B B$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = -1/2$	π	+2/3
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = +1/2$	σ^+	+4/3
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = -1/2$	σ^-	-4/3
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = +1/2$	π	-2/3
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -3/2$	σ^-	-1
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -1/2$	π	+1/3
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +1/2$	σ^+	+5/3
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -1/2$	σ^-	-5/3
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +1/2$	π	-1/3
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +3/2$	σ^+	+1

Tabelle 4.3: Verschiebungen der untersuchten Übergänge im Magnetfeld B

nächsten Schritt berechnen wir daraus die Verschiebungen der atomaren Übergänge, die gegeben ist durch die Differenz aus der Verschiebung des oberen und des unteren Energieniveaus. diese sind in Tabelle 4.3 dargestellt..

4.3.3. Berechnung der Kopplungsstärken

Die Dipolkräfte hängen neben den Verstimmungen gegenüber den atomaren Übergängen auch von Kopplungsstärken des atomaren Dipolmomentes an das elektrische Feld ab. Diese sind für einen Übergang von Niveau a nach Niveau b gegeben durch:

$$\begin{aligned}\hbar\Omega_0 &= -\mathbf{d}_{ab} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \\ &= -|\mathbf{d}_{ab}| |\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)| \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{d}_{ab}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)} \\ &= -|\mathbf{d}_{ab}| \mathcal{E}_0 \chi(\mathbf{r}, t)\end{aligned}\tag{4.47}$$

\mathbf{d}_{ab} ist hierbei das Dipolübergangsmoment, das wir im nächsten Unterabschnitt genauer berechnen. \mathcal{E}_0 die elektrische Feldstärke projiziert auf die Richtung des atomaren Dipols, und ist somit nur abhängig vom räumlichen Aufbau des Experiments. $\chi(\mathbf{r}, t)$ ist die räumliche und zeitliche Pulsform und somit auch abhängig von der experimentellen Durchführung.

Berechnung der Dipolübergangsmomente

Die Dipolübergangsmomente lassen sich mit Hilfe des Wigner-Eckart-Theorems (siehe z.B. Sakurai [1994]) berechnen. Dieses lässt uns die Berechnung der Dipolmatrixelemente reduzieren auf die Berechnung der *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* und der Berechnung von der magnetischen Quantenzahl unabhängiger Faktoren.

Wir berechnen zunächst die Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Im Allgemeinen werden Drehimpulsoperatoren aus verschiedenen Unterräumen des Hilbertraumes addiert.

$\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ kommutieren alle miteinander, daher ist eine Angabe einer gemeinsamen Basis von Eigenvektoren möglich. Dann ist eine mögliche Basis des Hilbert-Raumes gegeben durch die gemeinsamen Eigenvektoren von $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle.\tag{4.48}$$

Eine andere mögliche Basis ist gegeben durch die gemeinsamen Eigenvektoren von $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_z$ ³:

$$|j_1, j_2; j, m\rangle.\tag{4.49}$$

³Auch $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_z$ kommutieren miteinander.

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind dann gerade die Matrixelemente der Transformationsmatrix des Basiswechsels und haben allgemein die Form:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \quad (4.50)$$

In unserem Fall ist der Ausgangsdrehimpuls gegeben durch die Drehimpulsquantenzahlen des atomaren Energieniveaus. Dazu addieren wir den Drehimpuls des Lichtphotons, das bei einem atomaren Übergang absorbiert wird. $j_1 = 1/2$ ist also gerade der Drehimpuls unseres Grundzustandes, und $j_2 = 1$ ist der Drehimpuls des Photons. m_1 und m_2 sind jeweils dann die z-Komponenten der beiden Drehimpulse gegeben durch die magnetische Quantenzahl des Energieniveaus bzw. durch die Polarisation des Photons. j ist der Drehimpuls unseres angeregten Niveaus und ist entweder $1/2$ oder $3/2$, und m ist die z-Komponente des Drehimpulses gegeben durch die magnetische Quantenzahl. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Dipolübergänge nehmen also die folgende Form an:

$$\langle 1/2, 1; m_1, m_2 | 1/2, 1; j, m \rangle. \quad (4.51)$$

In Tabelle 4.4 sind die entsprechenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten angegeben.

Die Dipolmatrixelemente der jeweiligen Übergänge sind dann gegeben durch das Produkt der Clebsch-Gordan-Koeffizienten mit einem von der magnetischen Quantenzahl unabhängigen Faktor $B_{l,j}$, der sich aus der spontanen Emissionsrate Γ des atomaren Übergangs berechnen lässt:

$$|\mathbf{d}_{ab}| = |\langle 1/2, 1; m_a, m_{\text{Photon}} | 1/2, 1; j_b, m_b \rangle|^2 B_{j_b}^2. \quad (4.52)$$

4.3.4. Dipolkräfte in Abhängigkeit des eingestrahltten Lichtes

Wir berechnen die auftretenden Dipolkräfte allgemein als Funktion der eingestrahltten Intensität und Frequenz abhängig davon, in welchem der beiden Spin-Zustände des Grundzustandes das Atom sich befindet. Zur Berechnung geben wir aber zuerst eine genauere Definition der Verstimmung an.

Sei mit ω_{r_0} die Übergangsfrequenz vom Zustand $S_{1/2}$ in den Zustand $P_{1/2}$ gegeben, und mit ω_{b_0} die Übergangsfrequenz vom Zustand $S_{1/2}$ in den Zustand $P_{3/2}$. Und sei weiter mit ω_{r_L} die gegenüber dem Übergang r_0 verstimmte Frequenz des Lasers gegeben, sowie mit ω_{b_L} die Frequenz des Lasers der bezüglich des Übergangs b_0 verstimmt ist, dann ist die Verstimmung ohne Magnetfeld jeweils definiert durch:

$$\delta_r = \omega_{r_{aL}} - \omega_{r_0}, \quad \delta_b = \omega_{b_L} - \omega_{b_0} \quad (4.53)$$

unteres Niveau	oberes Niveau	Polarisation des Übergangs	Clebsch- Gordan- Koeffizient
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = -1/2$	π	$+\sqrt{1/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = +1/2$	σ^+	$+\sqrt{2/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = -1/2$	σ^-	$-\sqrt{2/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{1/2} \quad m_j = +1/2$	π	$-\sqrt{1/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -3/2$	σ^-	$+1$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -1/2$	π	$+\sqrt{2/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = -1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +1/2$	σ^+	$+\sqrt{1/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = -1/2$	σ^-	$+\sqrt{1/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +1/2$	π	$+\sqrt{2/3}$
$S_{1/2} \quad m_j = +1/2$	$P_{3/2} \quad m_j = +3/2$	σ^+	$+1$

Tabelle 4.4: Clebsch-Gordan-Koeffizienten der atomaren Dipolmomente [Condon und Shortley, 1970; Yao, 2006]

Berücksichtigt man die Energieverschiebung aufgrund eines externen Magnetfeldes, so ergibt sich Die tatsächlichen Verstimmungen ergeben sich dann einfach aus diesen durch Subtraktion der Verschiebung aufgrund des Magnetfeldes (siehe Tabelle 4.3):

$$\delta_{r_1} = \delta_r - 2/3\mu_B B \quad \delta_{r_2} = \delta_r - 4/3\mu_B B \quad \dots \quad (4.54)$$

$$\delta_{b_1} = \delta_b + 1\mu_B B \quad \delta_{b_2} = \delta_b - 1/3\mu_B B \quad \dots \quad (4.55)$$

Die Verstimmungen der Laserstrahlen sollen dabei deutlich größer sein als die Zeeman-Aufspaltung, so dass die Absorbtion von Photonen vernachlässigt werden kann. Es soll also

$$|\mu_B B| \ll |\delta_r| \ll \Delta E \quad |\mu_B B| \ll |\delta_b| \ll \Delta E \quad (4.56)$$

gelten

Rotes Laserlicht

Wir strahlen Laserlicht einer Frequenz ein, die nahe zum atomaren Übergang von $S_{1/2}$ nach $P_{1/2}$ verstimmt ist. Diese wollen wir im Folgenden als rotes Laserlicht bezeichnen.

Hat das Licht σ^- -Polarisation, so wirkt es nur auf einen Übergang, da alle anderen Energieniveaus zu weit entfernt sind. Folglich wirkt eine Dipolkraft nur auf das Atom, wenn

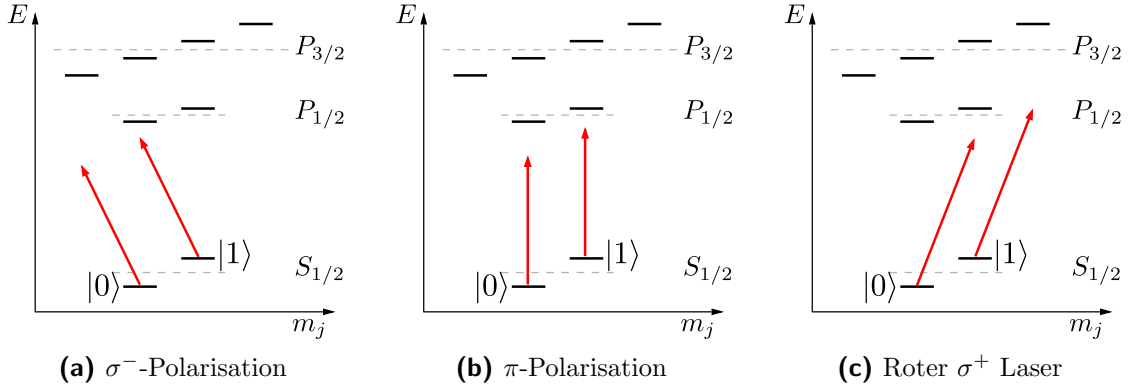


Abbildung 4.6: Roter Laser mit Polarisation σ^- , π und σ^+

dieses sich im Zustand mit $m_j = +1/2$ befindet. Die Dipolkräfte auf die Qubit Zustände sind also gegeben durch:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = 0 \quad (4.57)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{2/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r + 4/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.58)$$

Strahlen wir Licht mit der π -Polarisation ein, so gibt es für beide Spinzustände Übergänge und damit eine Dipolkraft. Das Dipolmatrixelement der beiden Übergänge ist identisch, wie man auch aus Symmetrieüberlegungen erwarten würde, so dass hier eine unterschiedliche Kraft nur aufgrund der unterschiedlichen Verstimmung gegenüber den Energieniveaus auftritt.

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{1/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r + 2/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.59)$$

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{1/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r - 2/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.60)$$

Beide Kräfte sind also gleich gerichtet und zeigen in Richtung des Intensitätsgradienten. Der Unterschied zwischen den Kräften ist dabei aber sehr gering.

Wählt man dagegen für Polarisation des eingestrahnten Lichts σ^+ , so gibt es wieder nur einen Übergang in der Nähe. Folglich wirkt eine Dipolkraft nur auf das Atom, wenn dieses sich im Zustand mit $m_j = -1/2$ befindet. Die Dipolkräfte sind in diesem Fall gegeben durch:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{2/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r - 4/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.61)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = 0 \quad (4.62)$$

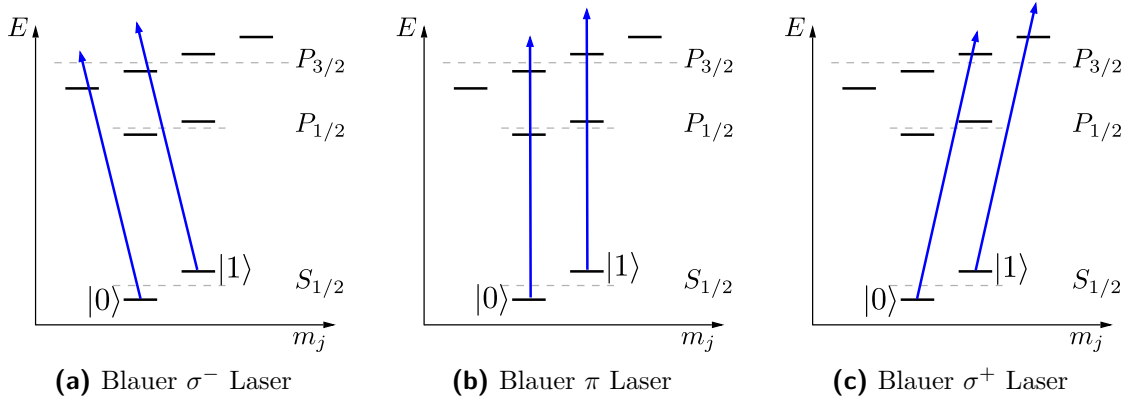


Abbildung 4.7: Blauer Laser mit allen möglichen Polarisierungen

Blaues Laserlicht

Wir strahlen jetzt Laserlicht einer Frequenz nahe dem atomaren Übergang von $S_{1/2}$ nach $P_{3/2}$ verstimmt ist, das wir als blaues Laserlicht bezeichnen wollen. Für beide Spinzustände gibt es unterschiedliche Dipolkräfte, abhängig von der Polarisation des eingestrahnten Lichtes.

Strahlen wir mit σ^- -polarisiertem Licht ein, so gibt es für beide Spinzustände einen Übergang in die Nähe. Der Unterschied in den Dipolkräften ist hier also durch die verschiedenen Verstimmungen aber auch durch unterschiedliche Clebsch-Gordan-Koeffizienten gegeben. Die Dipolkräfte auf die Qubit Zustände sind:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + \mu_B B / \hbar} \quad (4.63)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{1/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + 5/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.64)$$

Strahlen wir Licht mit der π -Polarisation ein, so die Dipolmatrixelemente der beiden Übergänge wieder identisch, so dass hier eine unterschiedliche Kraft nur aufgrund der unterschiedlichen Verstimmung gegenüber den Energieniveaus auftritt. Die Kräfte lauten:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{2/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b - 1/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.65)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{2/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + 1/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.66)$$

Beide Kräfte sind gleich gerichtet und zeigen in Richtung des Intensitätsgradienten. Der Unterschied zwischen den Kräften ist dabei in der Regel sehr gering, da die Verstimmung größer als die Magnetfeldaufspaltung sein soll. $\delta_b \gg \mu_B B$.

Für σ^+ -polarisiertes Licht erhalten wir folgende Dipolkräfte:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{1/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b - 5/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.67)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b - \mu_B B / \hbar} \quad (4.68)$$

4.4. Mögliche Gatterausführungen

Für die Umsetzung des schnell-modulierten Gatters aus Unterabschnitt 4.1.4 müssen die beiden Bedingungen (4.41) und (4.43) erfüllt sein. Die Kräfte müssen betragsmäßig gleich groß und entgegengesetzt gerichtet sein, sowie im zeitlichen Mittel verschwinden. Es gibt verschiedene Varianten, die diese Bedingungen erfüllen. Bei allen werden jeweils zwei Pulse hintereinander eingestrahlt (Abbildung 4.8), die sich in ihren Frequenzen, Intensitäten und Polarisierungen unterscheiden. Damit versuchen wir, die Anforderungen an die Kräfte zu erfüllen.

4.4.1. Gatter mit gleichgerichteter Polarisation

Wir wollen dazu zwei Laserstrahlen mit unterschiedlicher Frequenz einstrahlen, einen roten Strahl der gegenüber dem Übergang $S_{1/2} \rightarrow P_{1/2}$ verstimmt ist, und einen blauen

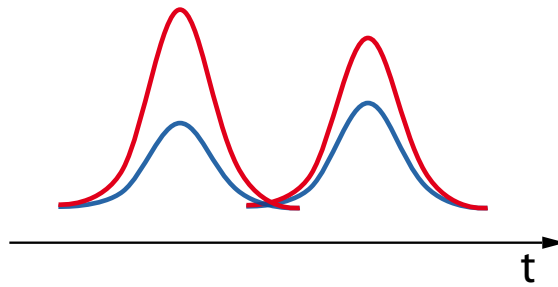


Abbildung 4.8: Pulssequenz des Gatters

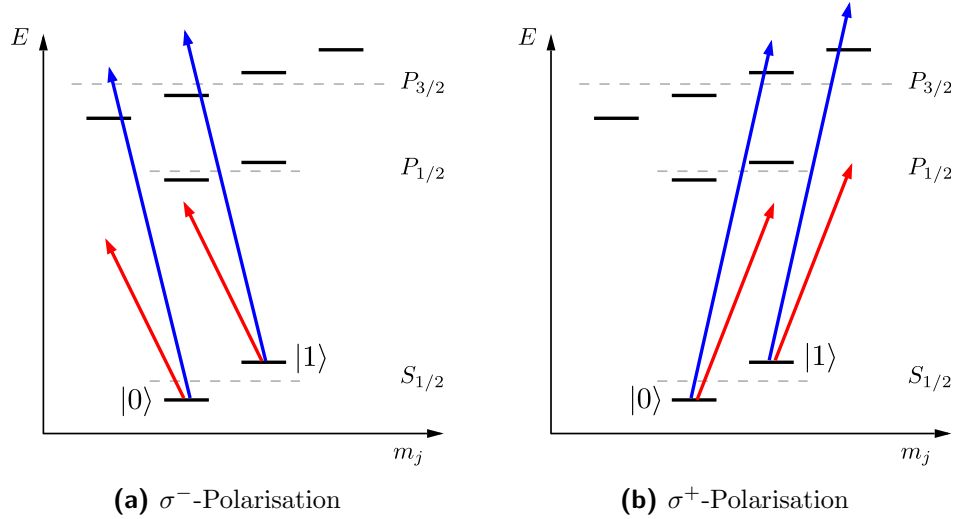


Abbildung 4.9: Gatter mit gleichgerichteter Polarisation

Strahl, der gegenüber dem Übergang $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$ verstimmt ist.

Zunächst strahlen wir einen Puls mit σ^- -polarisiertem Licht ein (Abbildung 4.9a), d.h. wir erhalten Kräfte gemäß Gleichungen (4.57), (4.58), (4.63) und (4.64). Es wirken dann folgende Kräfte, die abhängig vom internen Zustand des Ions sind:

$$\mathbf{F}^{|0\rangle} = \frac{B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + \mu_B B / \hbar} \quad (4.69)$$

$$\mathbf{F}^{|1\rangle} = \frac{1/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + 5/3 \mu_B B / \hbar} + \frac{2/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r + 4/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.70)$$

Zur Vereinfachung der Notation machen wir die Ersetzungen $\mathcal{X}_{3/2} = B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)$, $\mathcal{X}_{1/2} = B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)$ und $\mathcal{B} = \mu_B B / \hbar$, so dass Lösungen der Gleichung

$$\frac{\mathcal{X}_{3/2}}{\delta_b + \mathcal{B}} + \frac{1/3 \mathcal{X}_{3/2}}{\delta_b + 5/3 \mathcal{B}} + \frac{2/3 \mathcal{X}_{1/2}}{\delta_r + 4/3 \mathcal{B}} = 0 \quad (4.71)$$

bestimmen müssen. Diese kann einfach nach den Intensitäten oder den Verstimmungen aufgelöst werden, so dass wir für entweder die Intensitäten oder die Verstimmungen vorgeben können, und dies nach den anderen Variablen auflösen können. Analog finden wir eine solche Gleichung für die andere Wahl der Polarisation:

$$\frac{\mathcal{X}_{3/2}}{\delta_b - \mathcal{B}} + \frac{1/3 \mathcal{X}_{3/2}}{\delta_b - 5/3 \mathcal{B}} + \frac{2/3 \mathcal{X}_{1/2}}{\delta_r - 4/3 \mathcal{B}} = 0 \quad (4.72)$$

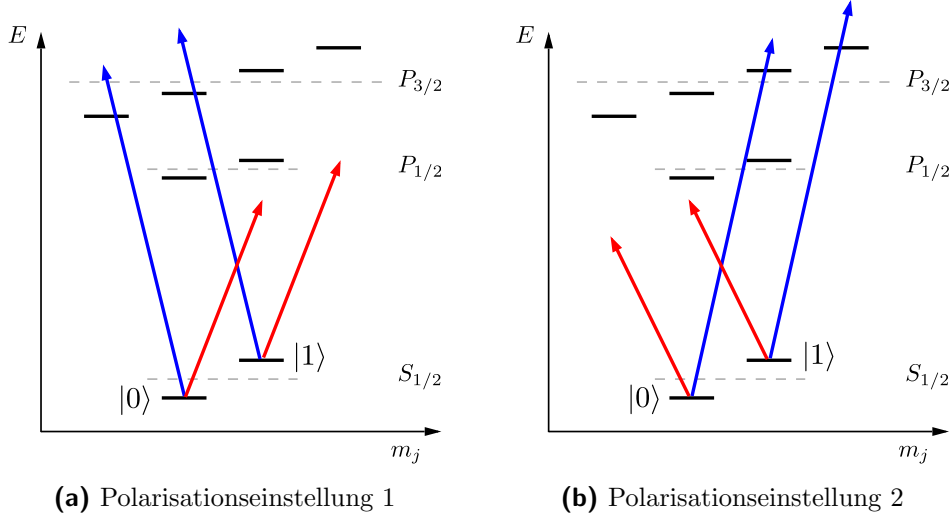


Abbildung 4.10: Gatter mit entgegengesetzter Polarisation

Wir lösen diese Gleichung dabei exemplarisch nach den Intensitäten auf, und erhalten

$$\frac{\mathcal{X}_{1/2}}{\mathcal{X}_{3/2}} = -\frac{3}{2} \frac{(\delta_r - 4/3\mathcal{B}) [(\delta_b - 5/3\mathcal{B}) + (\delta_b - \mathcal{B})/3]}{(\delta_b - \mathcal{B})(\delta_b - 5/3\mathcal{B})}. \quad (4.73)$$

Dann strahlen wir einen zweiten Puls ein, jedoch mit anderen Intensitäten (bzw. Verstimmungen), aber mit der gleichen Orts- und Zeitabhängigkeit in $\chi(\mathbf{r}, t)$. Für diesen können wir wieder ein Verhältnis aus Intensitäten (bzw. Verstimmungen) bestimmen, das aber im Allgemeinen verschieden von dem des ersten Pulses ist. Wir können dann Bedingung (4.43) erfüllen, indem wir das Verhältnis der Intensitäten (Verstimmungen) zwischen beiden Pulsen anpassen.

4.4.2. Gatter mit entgegengesetzter Polarisation

Dazu strahlen wir wie zuvor rotes Licht, das gegenüber dem Übergang $S_{1/2} \rightarrow P_{1/2}$ verstimmt ist, und blaues Licht, das gegenüber dem Übergang $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$ verstimmt ist, ein.

Erst strahlen wir einen Puls mit σ^- -polarisiertem Licht roter Frequenz ein und σ^+ -polarisiertem Licht blauer Frequenz ein (Abbildung 4.10a). Wir erhalten die folgenden

Kräfte auf die Ionen:

$$\mathbf{F}^{(0)} = \frac{2/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r - 4/3 \mu_B B / \hbar} + \frac{B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + \mu_B B / \hbar} \quad (4.74)$$

$$\mathbf{F}^{(1)} = \frac{1/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b + 5/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.75)$$

Dies lässt sich analog zum vorherigen Fall nach dem Verhältnis der Intensitäten bzw. der Verstimmungen auflösen.

Der zweite Puls ist jetzt mit umgekehrter Polarisierung, aber gleichen Frequenzen. Wir erhalten die Kräfte:

$$\mathbf{F}^{(0)} = \frac{1/3 B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b - 5/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.76)$$

$$\mathbf{F}^{(1)} = \frac{B_{P_{3/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_b - \mu_B B / \hbar} + \frac{2/3 B_{P_{1/2}} \mathcal{E}_0^2 \nabla \chi^2(\mathbf{r}, t)}{\delta_r + 4/3 \mu_B B / \hbar} \quad (4.77)$$

4.4.3. Variante des Gatters mit entgegengesetzter Polarisierung

Der Vorschlag im vorherigen Unterabschnitt hat den Nachteil, dass alle Übergänge zwischen den Grundzustandsniveaus und den Subniveaus des $P_{3/2}$ -Zustands erlaubt sind. Dadurch wirkt immer eine Kraft auf beide Spinzustände des Grundzustandes, und diese Kraft ist auch immer gleich gerichtet, so dass diese durch einen zusätzlichen Laser kompensiert werden müssen, der die Qubit Zustände mit den $P_{1/2}$ -Zuständen koppelt.

Wir wollen nun nach einer anderen Schema der Gatterumsetzung suchen, bei dem wir diese zusätzliche Kompensation vermeiden, da dies unnötige Intensität benötigt, was die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons erhöht. Dadurch wird das Ion aber aus dem einen Qubit Zustand in einen der oberen Zustände angeregt, von wo es schließlich durch die spontane Emission eines Photons wieder in einen der beiden Grundzustände zerfällt⁴. Dabei kann es natürlich in einem anderen Qubit Zustand enden, was einen möglichen Fehler des Gatters darstellt.

Die Grundidee ist in Abbildung 4.11 dargestellt. Die oberen Energieniveaus der $P_{3/2}$ -Mannigfaltigkeit werden bei der Umsetzung des Gatters nicht mehr in Betracht gezogen, da wir ja eben die zusätzliche Kompensation vermeiden wollen. Stattdessen wollen wir die gebrochene Symmetrie für Übergänge vom Grundzustand in die $P_{1/2}$ -Mannigfaltigkeit stärker ausnutzen.

⁴Das Ion kann auch in einen anderen, metastabilen Zustand zerfallen, falls dieser energetisch tiefer liegt als die P -Zustände, wie dies beispielsweise für die D -Zustände in Calcium-Ionen der Fall ist. Dann ist es aber nicht mehr für die Verarbeitung der Quanteninformation nutzbar.

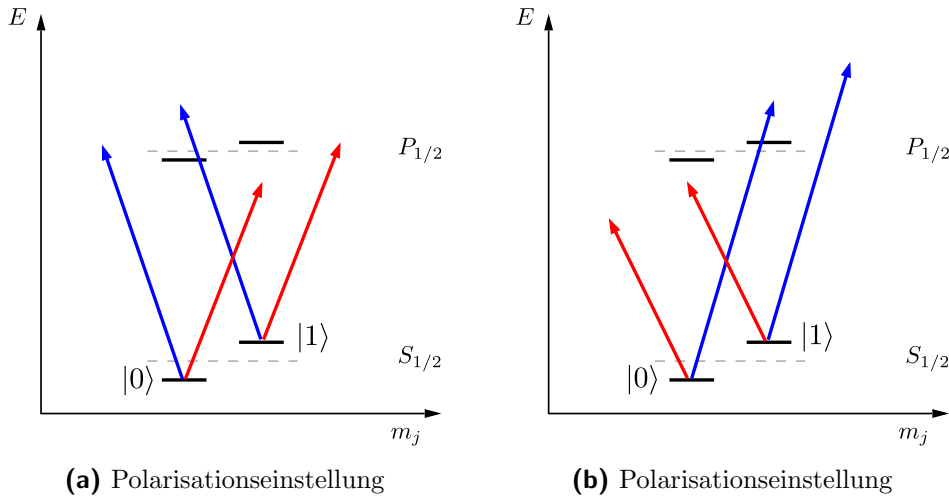


Abbildung 4.11: Variante des Gatters mit entgegengesetzter Polarisation

Da wir mit dem blauen Laser zwischen beiden Energiemannigfaltigkeiten anregen, müssen wir die Größe der Verstimmung beachten, dass diese immer wesentlich kleiner ist als die Energieaufspaltung ΔE zwischen dem $P_{3/2}$ und dem $P_{1/2}$ -Niveau ist: $\delta \ll \Delta E$.

Wir strahlen zunächst zwei Laserpulse mit entgegengesetzter Polarisation und Verstimmung gegenüber dem Übergang zum $P_{1/2}$ -Niveau ein, um Bedingung (4.41) zu erfüllen. Durch geeignete Wahl der Verstimmungen und der Intensitäten ist dies immer möglich, wobei die Verstimmungen auch hier größer als die Magnetfeldaufspaltung sein sollten.

Für die Erfüllung der zweiten Bedingung (4.43) strahlen wir nach dem ersten Puls einen weiteren Puls bestehend aus zwei verschiedenen Laserstrahlen ein, diesmal aber mit der umgekehrten Kombination von Verstimmungen und Polarisationen wie zuvor. Im Schema von Abbildung 4.11 wurden die Laserfrequenzen dabei unverändert gelassen, was aber nicht zwingend notwendig für die Umsetzung des Gatters ist.

Der Nachteil dieser Umsetzung liegt darin, dass der blau verstimmte Laser zwischen dem $P_{1/2}$ und dem $P_{3/2}$ Niveau liegt. Eine vernünftige Umsetzung, wie oben beschrieben, ist daher nur dann möglich, wenn $\mu_B B \ll \delta \ll \Delta E$ gilt, also nur bei hinreichend schwacher Magnetfeldaufspaltung.

Verschiedene Umsetzungen

Prinzipiell gibt es zwei mögliche Umsetzungen des Gatters:

Frequenzen konstant Man lässt bei der Umsetzung die Frequenzen der Laser unverändert zwischen den beiden Pulsen, und gleicht die Kräfte durch Anpassung der Intensitäten an.

Intensitäten konstant Man lässt die Intensitäten unverändert und passt stattdessen die Kräfte mit Hilfe der Laserfrequenzen an.

Natürlich kann man auch eine Mischform nutzen, in der keine der Größen unverändert bleibt, jedoch sind diese Randbedingungen den experimentellen Anforderungen genauer anzupassen.

In jedem Fall muss die Polarisierung schnell umgeschaltet werden. Dies kann experimentell mit Hilfe von Pockels-Zelle umgesetzt werden. Die Modulation der Frequenz oder Intensität kann mit Hilfe von akustooptischen Modulatoren (AOMs) umgesetzt werden.

Ausblick

Diese Arbeit befasst sich mit der Fragestellung, wie Ionenkristalle in Penningfallen sich für Zwecke der Quanteninformationsverarbeitung nutzen lassen. Das Ziel ist dabei eine möglichst umfassende und vollständige Untersuchung der Implementierung eines Zwei-Qubit-Gatters, angefangen von den physikalischen Randbedingungen bis hin zu einer Simulation des Gatters in großen Ionenkristallen bei endlicher Temperatur.

Ausgangspunkt ist eine detaillierte Diskussion der Physik der in der Penningfalle gefangenen Ionen. So wurde insbesondere dargelegt, wie die Rotationsgeschwindigkeit eines Ionenkristalls von den übrigen Fallenparametern abhängt. Die Durchführung der Gatteroperationen benötigt dabei eine bestimmte Zeit, die jedoch viel kleiner sein muss als das Inverse der Rotationsfrequenz. Folglich ist eine möglichst geringe Rotationsgeschwindigkeit des Ionenkristalls erwünscht. Ein wichtiger Punkt zum Verständnis der Eigenschaften der Ionenkristalle ist die Erkenntnis, dass das mit halber Zyklotronfrequenz rotierende Bezugssystem gerade als effektives Ruhesystem aufgefasst werden kann. Der Gesamtdrehimpuls ist dort gerade Null, und die Kräfte des Magnetfeldes auf die Teilchen werden durch die Corioliskräfte aufgehoben, so dass sich die Diskussion in diesem Bezugssystem wesentlich vereinfacht.

Der Hauptteil der Arbeit widmet sich der Bestimmung der Normalmoden eines solchen Ionenkristalls. Dazu wurden die Gleichgewichtspositionen der Ionen im Energieminimum bestimmt. Diese Energieminimierung wurde unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Gesamtdrehimpulses durchgeführt. Die erhaltenen Ergebnisse stimmen dabei mit den zuvor gemachten theoretischen Überlegungen überein. Allerdings ist die Energieminimierung durch diese zusätzliche Nebenbedingung numerisch sehr instabil, so dass diese nur für kleine Ionenzahlen durchgeführt wurde. Für größere Ionenzahlen wurde die Minimierung exemplarisch bei der Rotationsfrequenz $\omega_c/2$ durchgeführt. Die Bestimmung der Normalmoden nimmt bei der Simulation des Gatters eine Schlüsselstellung ein. Jedoch sind die Koordinaten und Impulse der Ionen durch das Magnetfeld der Penningfalle miteinander gekoppelt. Eine direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators mit

einer orthogonalen Transformation ist nicht möglich, da diese nicht kanonisch ist. Um die benötigte Form der Koordinatentransformation zu erhalten, wurden zunächst die Eigenschaften kanonischer Koordinatentransformationen genauer untersucht, wodurch ein besseres Verständnis der Struktur kanonischer Koordinatentransformationen erlangt wurde. So wird insbesondere deutlich, warum im Fall, in dem die Koordinaten und Impulsen ungekoppelt sind, eine orthogonale Transformation ausreichend ist, und warum im Falle mit einer Kopplung eine andere Form der Transformation benötigt wird. Für kleine Ionenzahlen konnte diese Transformation explizit für beliebige Rotationsfrequenzen des Ionenkristalls bestimmt werden. In diesem Fall konnten dann auch die Bewegungsmoden direkt identifiziert, sowie die Teilchentrajektorien dieser Moden berechnet und dargestellt werden. Für größere Ionenzahlen ist die Bestimmung der Transformation für beliebige Rotationsfrequenzen jedoch nicht auf eine analoge Weise möglich. Wir haben die Berechnung jedoch für einen mit halber Zyklotronfrequenz rotierenden Ionenkristall durchgeführt.

Der zweite Teil der Arbeit befasst sich mit der Umsetzung eines Quantengatters in Ionenkristallen mittels einer schnellmodulierten, zustandsabhängigen Kraft. Dazu wurde die Dipolkraft, die auf Ionen in einem Intensitätsgradienten eines verstimmten Laserfeldes wirkt, genauer untersucht. So wurden die Kräfte für verschiedene Übergänge abhängig von Magnetfeld berechnet, und daraus verschiedene Ausführungen für die Umsetzung eines Gatters vorgeschlagen.

Jedoch ist damit die Untersuchung der Implementierung des Gatters noch nicht abgeschlossen. Ein wichtiger Punkt ist dabei Bestimmung der Normalmoden für größere Ionenzahlen und beliebige Rotationsfrequenzen. Dazu muss zunächst der Algorithmus zur Bestimmung der Gleichgewichtspositionen in Abhängigkeit des Gesamtdrehimpulses verbessert werden. So ist ein vielversprechender Ansatz, eine starre Rotation der Ionen anzunehmen, anstatt die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses vorzugeben. Die Positionen der Ionen im Energieminimum werden dann mit Hilfe des effektiven Fallenpotentials bestimmt (vergleiche Abschnitt 2.2.1). Bei der Rechnung setzt man dann die Impulse identisch Null, so dass man nur noch das Energieminimum in einem $3N$ -dimensionalen Phasenraum bestimmen muss, statt wie zuvor in einem $6N$ -dimensionalen. Dadurch erwarten wir, dass sich die numerische Bestimmung der Energieminima erheblich vereinfacht und stabiler wird.

Die Bestimmung der Normalkoordinaten mittels einer kanonischen Koordinatentransformation ist dann aber der wichtigste fehlende Baustein. In Abschnitt 3.5 wurde ein möglicher Ansatz zur Bestimmung dieser Transformation mit Hilfe eines störungstheoretischen Ansatzes vorgestellt. So ist zu überprüfen, unter welchen Bedingungen dieser Ansatz eine konvergierende Lösung liefert. Eine eventuelle Lösung für kleine Ionenzahlen kann mit den bereits erhaltenen Ergebnissen verglichen werden.

Abschließend wollen wir das in Abschnitt 4.1.4 vorgestellte schnell modulierte Gatter in einem Ionenkristall mit mehr als hundert Ionen numerisch simulieren und dabei die

Fehlerwahrscheinlichkeit des Gatters bestimmen. Dazu muss zunächst die Bestimmung der Gatterphase angepasst werden, da aufgrund des Magnetfeldes die Koordinaten und Impulse der Ionen gekoppelt sind. Die Simulation des Gatters sowie die Bestimmung seiner Fehlerwahrscheinlichkeit sind dann für verschiedene Ionenzahlen und Rotationsgeschwindigkeiten durchzuführen. Schließlich wollen wir noch das Verhalten des Gatters in Abhängigkeit der Temperatur des Ionenkristalls untersuchen.

Literaturverzeichnis

- [Barenco u. a. 1995] BARENCO, A. ; BENNETT, C. H. ; CLEVE, R. ; DIVINCENZO, D. P. ; MARGOLUS, N. ; SHOR, P. ; SLEATOR, T. ; SMOLIN, J. A. ; WEINFURTER, H.: Elementary gates for quantum computation. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 52 (1995), Nr. 5, S. 3457–3467
- [Blatt u. a. 1992] BLATT, R. ; GILL, P. ; THOMPSON, R. C.: Current perspectives on the physics of trapped ions. In: *Journal of Modern Optics* 39 (1992), Nr. 2, S. 193
- [Blümel u. a. 1988] BLÜMEL, R. ; CHEN, J. M. ; PEIK, E. ; QUINT, W. ; SCHLEICH, W. ; SHEN, Y. R. ; WALTHER, H.: Phase transitions of stored laser-cooled ions. In: *Nature* 334 (1988), Nr. 6180, S. 309
- [Bollinger u. a. 2003] BOLLINGER, J. J. ; KRIESEL, J. M. ; MITCHELL, T. B. ; KING, L. B. ; JENSEN, M. J. ; ITANO, W. M. ; DUBIN, D. H. E.: Laser-cooled ion plasmas in Penning traps. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 36 (2003), S. 499–510
- [Bollinger u. a. 1994] BOLLINGER, J. J. ; WINELAND, D. J. ; DUBIN, D. H. E.: Non-neutral ion plasmas and crystals, laser cooling, and atomic clocks. In: *Physics of Plasmas* 1 (1994), Nr. 5, S. 1403
- [Brewer u. a. 1988] BREWER, L. R. ; PRESTAGE, J. D. ; BOLLINGER, J. J. ; ITANO, W. M. ; LARSON, D. J. ; WINELAND, D. J.: Static properties of a non-neutral ${}^9\text{Be}^+$ -ion plasma. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 38 (1988), Nr. 2, S. 859
- [Brown und Gabrielse 1986] BROWN, L. S. ; GABRIELSE, G.: Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap. In: *Reviews of Modern Physics* 58 (1986), Nr. 1, S. 233
- [Brush u. a. 1966] BRUSH, S.G. ; SAHLIN, H.L. ; TELLER, E.: Monte Carlo Study of

- a One-Component Plasma. In: *The Journal of Chemical Physics* 45 (1966), Nr. 6, S. 2102
- [Bushev u. a. 2008] BUSHEV, P. ; STAHL, S. ; NATALI, R. ; MARX, G. ; STACHOWSKA, E. ; WERTH, G. ; HELLWIG, M. ; SCHMIDT-KALER, F.: Electrons in a cryogenic planar Penning trap and experimental challenges for quantum processing. In: *The European Physical Journal D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* (2008)
- [Calarco u. a. 2001] CALARCO, T. ; CIRAC, J. I. ; ZOLLER, P.: Entangling ions in arrays of microscopic traps. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 63 (2001), S. 062304
- [Ciaramicoli u. a. 2003] CIARAMICOLI, G. ; MARZOLI, I. ; TOMBESI, P.: Scalable Quantum Processor with Trapped Electrons. In: *Physical Review Letters* 91 (2003), Nr. 1, S. 017901
- [Cirac und Zoller 1995] CIRAC, J. I. ; ZOLLER, P.: Quantum Computation with Cold Trapped Ions. In: *Physical Review Letters* 74 (1995), Nr. 20, S. 4091–4094
- [Cirac und Zoller 2000] CIRAC, J. I. ; ZOLLER, P.: A scalable quantum computer with ions in an array of microtraps. In: *Nature* 404 (2000), S. 579–581
- [Cohen-Tannoudji u. a. 1999] COHEN-TANNOUDJI, C. ; DIU, B. ; LALOË, F.: *Quantenmechanik*. De Gruyter, 1999
- [Condon und Shortley 1970] CONDON, E. U. ; SHORTLEY, G. H.: *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge University Press, 1970
- [Crick u. a. 2008] CRICK, D. R. ; OHADI, H. ; BHATTI, I. ; THOMPSON, R. C. ; SEGAL, D. M.: Two-ion Coulomb crystals of Ca in a Penning Trap. In: *Optics Express* 16 (2008), Nr. 4, S. 2351–2362
- [Deslauriers u. a. 2006] DESLAURIERS, L. ; OLMSCHENK, S. ; STICK, D. ; HENSINGER, W. K. ; STERK, J. ; MONROE, C.: Scaling and Suppression of Anomalous Heating in Ion Traps. In: *Physical Review Letters* 97 (2006), S. 103007
- [Deutsch 1985] DEUTSCH, D.: Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. In: *Proceedings of the Royal Society of London A* 400 (1985), S. 97–117
- [Diedrich u. a. 1987] DIEDRICH, F. ; PEIK, E. ; CHEN, J.M. ; QUINT, W. ; WALTHER, H.: Observation of a Phase Transition of Stored Laser-Cooled Ions. In: *Physical Review Letters* 59 (1987), Nr. 26, S. 2931

- [DiVincenzo 2000] DiVINCENZO, D. P.: The Physical Implementation of Quantum computation. In: *Fortschritte der Physik* 48 (2000), S. 771–783
- [Dubin 1993] DUBIN, D. H. E.: Theory of Structural Phase Transitions in a Trapped Coulomb Crystal. In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 17, S. 2753–2756
- [Dubin und O’Neil 1999] DUBIN, D. H. E. ; O’NEIL, T. M.: Trapped nonneutral plasmas, liquids, and crystals (the thermal equilibrium states). In: *Reviews of Modern Physics* 71 (1999), Nr. 1, S. 87–172
- [Earnshaw 1842] EARNSHAW, S.: On the Nature of the Molecular Forces which Regulate the Constitution of the Luminiferous Ether. In: *Transactions of the Cambridge Philosophical Society* 7 (1842), S. 97–112
- [Feynman 1982] FEYNMAN, R. P.: Simulating Physics with Computers. In: *International Journal of Theoretical Physics* 21 (1982), Nr. 6/7, S. 467–488
- [Fishman u. a. 2008] FISHMAN, S. ; DE CHIARA, G. ; CALARCO, T. ; MORIGI, G.: Structural phase transitions in low-dimensional ion crystals. In: *Physical Review B Condensed Matter and Material Physics* 77 (2008), S. 064111
- [García-Ripoll u. a. 2003] GARCÍA-RIPOLL, J. J. ; ZOLLER, P. ; CIRAC, J. I.: Speed Optimized Two-Qubit Gates with Laser Coherent Control Techniques for Ion Trap Quantum Computing. In: *Physical Review Letters* 91 (2003), Nr. 15, S. 157901
- [García-Ripoll u. a. 2005] GARCÍA-RIPOLL, J. J. ; ZOLLER, P. ; CIRAC, J. I.: Coherent control of trapped ions using off-resonant lasers. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 71 (2005), S. 062309
- [Gilbert u. a. 1988] GILBERT, S. L. ; BOLLINGER, J. J. ; WINELAND, D. J.: Shell-Structure Phase of Magnetically Confined Strongly Coupled Plasmas. In: *Physical Review Letters* 60 (1988), Nr. 20, S. 2022–2025
- [Glauber 1963a] GLAUBER, R. J.: Coherent and Incoherent States of the Radiation Field. In: *Physical Review* 131 (1963), Nr. 6, S. 2766
- [Glauber 1963b] GLAUBER, R. J.: Photon Correlations. In: *Physical Review Letters* 10 (1963), Nr. 3, S. 84
- [Gosh 1995] GOSH, P. K.: *Ion Traps*. Claredon Press, Oxford, 1995
- [Grover 1996] GROVER, L. K.: A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: *28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC)* (1996)

- [Haken und Wolf 2004] HAKEN, H. ; WOLF, H. C.: *Atom- und Quantenphysik*. 8. Auflage. Springer, 2004
- [Hänsch und Schawlow 1975] HÄNSCH, T. W. ; SCHAWLOW, A. L.: Cooling of gases by laser radiation. In: *Optics Communications* 13 (1975), Nr. 1, S. 68–69
- [Hansen 1973] HANSEN, J. P.: Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-Component Plasma. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 8 (1973), Nr. 6, S. 3096
- [Hornekær und Drewsen 2002] HORNEKÆR, L. ; DREWSSEN, M.: Formation process of large ion Coulomb crystals in linear Paul traps. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 66 (2002), S. 013412
- [Huang u. a. 1998] HUANG, X.-P. ; BOLLINGER, J. J. ; MITCHELL, T. B. ; ITANO, W. M. ; DUBIN, D. H. E.: Precise control of the global rotation of strongly coupled ion plasmas in a Penning trap. In: *Physics of Plasmas* 5 (1998), Nr. 5, S. 1656
- [Huber u. a. 2008] HUBER, G. ; DEUSCHLE, T. ; SCHNITZLER, W. ; REICHLE, R. ; SINGER, K. ; SCHMIDT-KALER, F.: Transport of ions in a segmented linear Paul trap in printed-circuit-board technology. In: *New Journal of Physics* 10 (2008), S. 013004
- [Ichimaru 1982] ICHIMARU, S.: Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids. In: *Reviews of Modern Physics* 54 (1982), Nr. 4, S. 1018
- [Ichimaru u. a. 1987] ICHIMARU, S. ; IYETOMI, H. ; TANAKA, S.: Statistical physics of dense plasmas: Thermodynamics, transport coefficients and dynamic correlations. In: *Physics Reports* 149 (1987), Nr. 2-3, S. 91
- [Itano und Wineland 1982] ITANO, W. M. ; WINELAND, D. J.: Laser cooling of ions stored in harmonic and Penning traps. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 25 (1982), Nr. 1, S. 35–54
- [Jackson 2002] JACKSON, J. D.: *Klassische Elektrodynamik*. 3. überarbeitete Auflage. De Gruyter, 2002
- [Kielpinski u. a. 2000] KIELPINSKI, D. ; KING, B. E. ; MYATT, C. J. ; SACKETT, C. A. ; TURCHETTE, A. ; ITANO, W. M. ; MONROE, C. ; WINELAND, D. J. ; ZUREK, W. H.: Sympathetic cooling of trapped ions for quantum logic. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 61 (2000), S. 032310
- [Kielpinski u. a. 2002] KIELPINSKI, D. ; MONROE, C. ; WINELAND, D. J.: Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer. In: *Nature* 417 (2002), S. 709

- [Kohn 1964] KOHN, W.: Theory of the Insulating State. In: *Physical Review* 133 (1964), Nr. 1A, S. A171–A181
- [Landau und Lifschitz 1980] LANDAU, L. D. ; LIFSCHITZ, J. M.: *Course of Theoretical Physics*. Bd. Volume 5: *Statistical Physics*. Third edition. Pergamon Press, 1980
- [Landau und Lifschitz 1997,2007] LANDAU, L. D. ; LIFSCHITZ, J. M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*. Bd. I: *Mechanik*. 14. Verlag Harri Deutsch, 1997,2007
- [Larson u. a. 1986] LARSON, D. J. ; BERGQUIST, J. C. ; BOLLINGER, J. J. ; ITANO, W. M. ; WINELAND, D. J.: Sympathetic Cooling of Trapped Ions: A Laser-Cooled Two-Species Nonneutral Ion Plasma. In: *Physical Review Letters* 57 (1986), Nr. 1, S. 70–73
- [Leibfried u. a. 2003a] LEIBFRIED, D. ; BLATT, R. ; MONROE, C. ; WINELAND, D. J.: Quantum dynamics of single trapped ions. In: *Reviews of Modern Physics* 75 (2003), S. 281–324
- [Leibfried u. a. 2003b] LEIBFRIED, D. ; DEMARCO, B. ; MEYER, V. ; LUCAS, D. ; BARRETT, M. ; BRITTON, J. ; ITANO, W. M. ; JELENKOVIĆ, B. ; LANGER, C. ; ROSEN BAND, T. ; WINELAND, D. J.: Experimental demonstration of a robust, high-fidelity geometric two ion-qubit phase gate. In: *Nature* 422 (2003), S. 412
- [Malmberg und O’Neil 1977] MALMBERG, J. H. ; O’NEIL, T. M.: Pure Electron Plasma, Liquid, and Crystal. In: *Physical Review Letters* 39 (1977), S. 1333
- [Mitchell u. a. 1998] MITCHELL, T. B. ; BOLLINGER, J. J. ; DUBIN, D. H. E. ; HUANG, X.-P. ; ITANO, W. M. ; BAUGHMAN, R. H.: Direct Observations of Structural Phase Transitions in Planar Crystallized Ion Plasmas. In: *Science* 282 (1998), S. 1290
- [Nielsen und Chuang 2000] NIELSEN, M. ; CHUANG, I.: *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000
- [NIST 2008] : *NIST Atomic Spectra Data Base*. 2008. – URL http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html. – Zugriffsdatum: 02.02.2008
- [Otter und Honecker 1993] OTTER ; HONECKER: *Atome - Moleküle - Kerne*. Bd. 1: *Atomphysik*. Teubner Stuttgart, 1993
- [Porras und Cirac 2006] PORRAS, D. ; CIRAC, J. I.: Quantum Manipulation of Trapped Ions in Two Dimensional Coulomb Clusters. In: *Physical Review Letters* 96 (2006), S. 250501

- [Reed und Simon 1972] REED, M. ; SIMON, B.: *Methods of Modern Mathematical Physics*. Bd. IV: *Analysis of Operators*. Academic Press, Inc., 1972
- [Reichle u. a. 2006] REICHLE, R. ; LEIBFRIED, D. ; BLAKESTAD, R.B. ; BRITTON, J. ; JOST, J. D. ; KNILL, E. ; LANGER, C. ; OZERI, R. ; SEIDELIN, S. ; WINELAND, D. J.: Transport dynamics of single ions in segmented microstructured Paul trap arrays. In: *Fortschritte der Physik* 54 (2006), Nr. 8-10, S. 666–685
- [Sakurai 1994] SAKURAI, J. J. ; TUAN, S. F. (Hrsg.): *Modern Quantum Mechanics*. Revised Edition. Addison-Wesley, 1994
- [Šašura und Steane 2003] ŠAŠURA, M. ; STEANE, A. M.: Fast quantum logic by selective displacement of hot trapped ions. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 67 (2003), S. 062318
- [Schiffer 1993] SCHIFFER, J. P.: Phase Transitions in Anisotropically Confined Ionic Crystals. In: *Physical Review Letters* 70 (1993), Nr. 6, S. 818–821
- [Schmidt-Kaler u. a. 2003] SCHMIDT-KALER, F. ; HÄFFNER, H. ; RIEBE, M. ; GULDE, S. ; LANCASTER, G. P. T. ; DEUSCHLE, T. ; BECHER, C. ; ROOS, C. F. ; ESCHNER, J. ; BLATT, R.: Realization of the Cirac-Zoller controlled-NOT quantum gate. In: *Nature* 422 (2003), S. 408
- [Schrieffer und Wolff 1966] SCHRIEFFER, J. R. ; WOLFF, P. A.: Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. In: *Physical Review* 149 (1966), Nr. 2, S. 491–492
- [Schrödinger 1926] SCHRÖDINGER, E.: Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik. In: *Naturwissenschaften* 14 (1926), Nr. 28, S. 664–666
- [Schwinberg u. a. 1981] SCHWINBERG, P. B. ; VAN DYCK, Jr. ; DEHMELT, H. G.: New Comparison of the Positron and Electron g Factors. In: *Physical Review Letters* 47 (1981), Nr. 24, S. 1679–1682
- [Shor 1994] SHOR, P.: Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. In: *35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, Santa Fe, NM* (1994)
- [Shor 1995] SHOR, P.: Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 52 (1995), Nr. 4, S. R2493
- [Slattery u. a. 1980] SLATTERY, W. L. ; DOOLEN, G. D. ; DEWITT, H. E.: Improved equation of state for the classical one-component plasma. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 21 (1980), Nr. 6, S. 2087

- [Stahl u. a. 2005] STAHL, S. ; GALVE, F. ; ALONSO, J. ; DJEKIC, S. ; QUINT, W. ; VALENZUELA, T. ; VERDÚ, J. ; VOGEL, M. ; WERTH, G.: A planar Penning trap. In: *The European Physical Journal D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* 32 (2005), S. 139–146
- [Steane 1996] STEANE, A. M.: Error Correcting Codes in Quantum Theory. In: *Physical Review Letters* 77 (1996), Nr. 5, S. 793
- [Taylor und Calarco 2007] TAYLOR, J. M. ; CALARCO, T.: *Wigner crystals of ions as quantum hard drives*. 2007
- [Thompson u. a. 1997] THOMPSON, R. C. ; DHOLAKIA, K. ; HERNANDEZ-POZOS, J.-L. ; HORVATH, G. Zs. K. ; RINK, J. ; SEGAL, D. M.: Spectroscopy and Quantum Optics with Ion Traps. In: *Physica Scripta* T72 (1997), S. 24–33
- [Thompson und Wilson 1997] THOMPSON, R. C. ; WILSON, D. C.: The motion of small numbers of ions in a Penning trap. In: *Zeitschrift für Physik D* 42 (1997), S. 271–277
- [Turchette u. a. 2000] TURCHETTE, Q. A. ; KIELPINSKI, D. ; KING, B. E. ; LEIBFRIED, D. ; MEEKHOF, D. M. ; MYATT, C. J. ; ROWE, M. A. ; SACKETT, C. A. ; WOOD, C. S. ; ITANO, W. M. ; MONROE, C. ; WINELAND, D. J.: Heating of trapped ions from the quantum ground state. In: *Physical Review A Atomic, Molecular, and Optical Physics* 61 (2000), S. 063418
- [Walther 1994] WALTHER, H.: Spectroscopy of Trapped Ions. In: *Physica Scripta* T51 (1994), S. 11–19
- [Wineland u. a. 1985] WINELAND, D. J. ; BOLLINGER, J. J. ; ITANO, W. M. ; PRESTAGE, J. D.: Angular momentum of trapped atomic particles. In: *Journal of the Optical Society of America B* 2 (1985), Nr. 11, S. 1721–1730
- [Wineland und Dehmelt 1975] WINELAND, D. J. ; DEHMELT, H. G.: Proposed 10^{14} Frequency Resolution Laser Fluorescence Spectroscopy on Tl^+ Mono-Ion Oscillator III. In: *Bulletin of the American Physical Society* 20 (1975), S. 637
- [Wineland u. a. 1983] WINELAND, D. J. ; DUBIN, D. H. E. ; VAN DYCK, Jr.: High-resolution spectroscopy of stored ions. In: *Advances in Atomic and Molecular Physics* 19 (1983), S. 135
- [Yao 2006] YAO, W. M.: Review of Particle Physics. In: *Journal of Physics G* 33 (2006), S. 1. – URL <http://pdg.lbl.gov>

Abbildungsverzeichnis

1.1	Initialisieren, Auslesen und Einzel-Qubit-Operationen	5
1.2	Quanteninformationsverarbeitung mit 2D-Ionenkristallen	7
2.1	Verschiedene Penningfallen	10
2.2	Einteilchentrajektorie in der Penningfalle	14
2.3	Bewegungsmoden eines Teilchens	14
2.4	Zentrifugalpotential und effektives Zentrifugalpotential im Vergleich . . .	19
2.5	Bewegung im Labor- und im rotierenden Bezugssystem	20
2.6	Plasmadichte als Funktion der Rotationsfrequenz	22
2.7	Radiale Verteilungsfunktion für verschiedene Kopplungsparameter Γ . . .	28
2.8	Phasendiagramm eines Plasmas	28
2.9	Phasenübergänge zwischen verschiedenen Kristallstrukturen	30
2.10	Verschiedene planare Phasen	31
2.11	Experimentelle Bilder von Ionenkristalle	32
3.1	Anisotropieparameter und kritische Kristallgröße	35
3.2	Minimierung für 2 Ionen	36
3.3	Minimierung für 3 Ionen	38
3.4	Minimierung für 4 Ionen	38
3.5	Gleichgewichtspositionen für 1 bis 12 Ionen	39
3.6	Gleichgewichtspositionen für größere Ionenzahlen	40
3.7	Energieminimierung für 2 Ionen im Phasenübergangsbereich	42
3.8	Schwerpunktsmoden für 2 Ionen bei $\omega_c/2$)	56
3.9	Moden der internen Freiheitsgrade für 2 Ionen bei $\omega_c/2$)	57
3.10	Schwerpunktsmoden für 2 Ionen nahe $\omega_c/2$)	60
3.11	Moden der internen Freiheitsgrade für 2 Ionen nahe $\omega_c/2$)	61
3.12	Trajektorien der radialen Moden für 2 Ionen nahe der Zyklotronfrequenz)	62
3.13	Trajektorien der radialen Moden für 2 Ionen bei niedriger Rotation) . . .	65
4.1	Zustandsabhängige Teilchentrajektorien für 2 Ionen	73
4.2	Modulierte Kraft	76
4.3	Dipolkraft bei unterschiedlicher Verstimmung	79
4.4	Atomare Energieniveaus bei verschiedenen Magnetfeldern	80

4.5	Energieverschiebungen der atomaren Übergänge im Magnetfeld B	85
4.6	Übergänge des roten Lasers mit verschiedener Polarisation	90
4.7	Übergänge des blauen Lasers mit verschiedener Polarisation	91
4.8	Pulssequenz des Gatters	92
4.9	Gatter mit gleichgerichteter Polarisation	93
4.10	Gatter mit entgegengesetzter Polarisation	94
4.11	Variante des Gatters mit entgegengesetzter Polarisation	96

Tabellenverzeichnis

2.1	Plasmen in verschiedenen physikalischen Systemen	17
3.1	Axialfrequenzen für verschiedene Rotationsfrequenzen	41
3.2	Eigenfrequenzen für 2 Ionen bei Rotation mit der halben Zyklotronfrequenz	55
3.3	Eigenfrequenzen für 2 Ionen bei Rotationsfrequenz nahe der halben Zy- klotronfrequenz	59
3.4	Eigenfrequenzen für 2 Ionen nahe der minimalen Rotationsfrequenz . . .	63
4.1	Art der Magnetfeldaufspaltung in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke . .	82
4.2	Energieverschiebungen der atomaren Übergänge im Magnetfeld B	86
4.3	Verschiebungen der untersuchten Übergänge im Magnetfeld B	86
4.4	Clebsch-Gordan-Koeffizienten der atomaren Dipolmomente	89

Danksagung

Prof. Dr. Tommaso Calarco Für sein Vertrauen und seine Bereitschaft, mir eine Diplomarbeit anzubieten und die Betreuung zu garantieren.

Prof. Dr. Matthias Freyberger Für die Übernahme des Zweitgutachten und der damit verbundenen Bemühungen.

Prof. Dr. Ferdinand Schmidt-Kaler Für ein ständig offenes Ohr für Fragen, seiner Freude an der Physik und daran, darüber zu diskutieren.

Dr. Jake Taylor Für seine Geduld während unseren gemeinsamen physikalischen Diskussionen, die er trotz meiner ständigen Nachfragen nie verloren hat.

Dr. Rainer Reichle Für sein offenes Ohr während der Zeit, die wir gemeinsam im Büro verbringen durften.

Michael Murphy Für seine Hilfe Bei Sprachproblemen und seine kollegiale Unterstützung.

Michael Hellwig Seine Hilfe zu allem möglichen, wovon wir Normalsterbliche Computernutzer keine Ahnung haben, und sein unendliches Geek-Wissen, das immer zu einem Schmunzler oder Augenrunzler gut ist. Dann natürlich für Frederik.

Wolfgang Schnitzler Für die Durchsicht und Anmerkungen zum Manuskript. Und dafür, dass wir immer wissen, wenn wir das Gleiche denken.

Brigitte Rein, Alexandra Widmann und Dr. Robert Tammer Ohne deren tatkräftige und immer freundliche Unterstützung ich mich im Bürokratie-Dschungel hoffnungslos verirrt hätte.

Jan Glückert Für seine zahlreichen nützlichen Anmerkungen zum Manuskript.

Hauke Doerk-Bendig Für Kaffee, Tee, Schokolade, und allem anderen für Leib und

Seele. Aber vor allem dafür, dass wir uns gegenseitig ein Ohr zum Ausheulen geschenkt haben, falls es mal nicht so gut lief.

Amado Bautista Für die heiteren Momente, die er mir jeden Tag im Büro beschert hat. Fenomenal!

QiQi Für all die Unterstützung in den letzten Wochen und Monaten. Du bist was Besonderes!

Meri und Frank Für all die Unterstützung!