



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ

INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

VÝPOČET PRŮBĚHU POTENCIÁLŮ A SIMULACE CHOVÁNÍ IONTŮ VÁPNIKU V PAULOVĚ ELEKTRICKÉ PASTI

CALCULATION OF POTENTIALS AND SIMULATION OF THE BEHAVIOR OF CALCIUM IONS IN PAUL'S
ELECTRICAL TRAP

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Daniel Vadlejch

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Ondřej Číp, Ph.D.

BRNO 2018

Zadání bakalářské práce

Ústav: Ústav fyzikálního inženýrství
Student: **Daniel Vadlejch**
Studijní program: Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: Fyzikální inženýrství a nanotechnologie
Vedoucí práce: **Ing. Ondřej Číp, Ph.D.**
Akademický rok: 2017/18

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Výpočet průběhu potenciálů a simulace chování iontů vápníku v Paulově elektrické pasti

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Zachytávání atomárních iontů a následné laserové chlazení takto zachyceného iontu či obláčku iontů v elektrické pasti Paulova typu patří mezi klíčové postupy k dosažení tzv. základního stavu atomu. V případě zachycení více iontů v Paulově pasti s cílem laserového chlazení a následného vytvoření tzv. Coulombova krystalu hraje velkou roli linearita průběhu elektrického pole této pasti zejména v axiálním směru. Nejlepších výsledků lze dosáhnout v co možná nejvíce symetrickém uspořádání buzení elektrod této elektrické pasti.

Práce je součástí běžícího projektu laserového chlazení a excitace vápníkových iontů v Paulově pasti řešeného na pracovišti Ústavu přístrojové techniky AV ČR v Brně.

Cíle bakalářské práce:

Cílem práce bude odvození průběhů potenciálu lineární Paulovy pasti pro zachytávání iontů vápníku pro experiment laserového chlazení. V rámci práce bude provedeno odvození rovnic pro případ symetrického a asymetrického buzení elektrické pasti. Následovat bude výpočet sekulárních pohybových frekvencí iontu vápníku a porovnání těchto hodnot s experimentálně změřenými hodnotami. V rámci práce pak proběhne porovnání linearity pseudopotenciálu především v axiálním směru, tzn. vlivu na mikropohyb, mezi symetrickým a asymetrickým buzením elektrické pasti.

Seznam doporučené literatury:

PAUL, W. Electromagnetic traps for charged and neutral particles, Rev. Mod. Phys. 62, 531, 1990.

BERKELAND, D. et al. : Minimization of ion micromotion in a Paul trap, J. Appl. Phys. 83, 5025, 1998.

KNOOP, M. , MADSEN, N. , THOMPSON, R. C. et al. Trapped Charged Particles A Graduate Textbook with Problems and Solutions, World Scientific Publishing Europe Ltd, ISSN: 2059-7711, 2016.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2017/18

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Tomáš Šíkola, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Tato práce se zabývá srovnáním vlastností pohybu zachyceného iontu vápníku v Paulově radiofrekvenční lineární kvadrupólové pasti mezi symetrickým a asymetrickým buzením pasti pomocí numerické simulace. Tyto dva způsoby buzení pasti porovnává zejména z hlediska minimalizace mikropohybu vykonávaného iontem. Detailně analyzuje také sekulární pohyb zachyceného iontu. Společně s vlastnostmi pohybu iontu podrobně ukazuje výsledné průběhy potenciálů v iontové pasti. Pomocí měření sekulárních frekvencí pohybu zachyceného iontu vápníku je ověřena shoda reálného chování iontu s numerickým modelem. Práce také shrnuje a využívá teoretický popis obecných vlastností radiofrekvenčních kvadrupólových pastí.

Summary

This thesis deals with comparison of motional properties of calcium ion confined in Paul's radiofrequency linear quadrupole trap between symmetrical and asymmetrical driving modes of the trap by numerical simulation. It compares these two modes especially with respect to minimization of ion's micromotion. It also provides detailed analysis of trapped ion's secular motion. Together with ion's motional properties it shows obtained shapes of potential in ion trap in detail. Agreement of real behavior of trapped Calcium ion with numerical model is verified via experimental measurement of trapped ion's secular frequencies. Thesis also summarizes and uses theoretical description of general features of radiofrequency quadrupole ion traps.

Klíčová slova

radiofrekvenční lineární iontová past, mikropohyb, sekulární frekvence, kvadrupólový potenciál, pseudopotenciál

Keywords

radiofrequency linear ion trap, micromotion, secular frequency, quadrupole potential, pseudopotential

VADLEJCH, D. *Výpočet průběhu potenciálů a simulace chování iontů vápníku v Paulově elektrické pasti*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2018. 46 s. Vedoucí Ing. Ondřej Číp, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci *Výpočet průběhu potenciálů a simulace chování iontů vápníku v Paulově elektrické pasti* vypracoval samostatně pod vedením Ing. Ondřeje Čípa, Ph.D. s použitím informačních zdrojů, které jsou uvedeny v seznamu použité literatury a zdrojů.

Daniel Vadlejš

Děkuji svému vedoucímu Ing. Ondřeji Čípovi, Ph.D. za trpělivé vedení mé bakalářské práce. Dále děkuji Mgr. Martinu Oralovi, Ph.D. za velmi cenné detailní poznámky k výpočtům a fyzikální stránce mé práce. Děkuji také Mgr. Adamu Lešundákovi za nezbytnou pomoc s provedením experimentu. Dále děkuji Mgr. Martinu Šilerovi, Ph.D. a Mgr. Vítězslavu Karáskovi, Ph.D. za pohotovou pomoc při řešení problémů s výpočetní technikou. Dále chci poděkovat Ing. Jakubovi Zlámalovi, Ph.D. za velmi užitečné poznámky ke tvorbě numerického modelu. V neposlední řadě děkuji rodině a přátelům za podporu při studiu.

Daniel Vadlejch

Obsah

Úvod	1
1 Teorie	3
1.1 Zachycení nabité částice v prostoru (typy pastí)	3
1.1.1 Penningova past	4
1.1.2 Radiofrekvenční past	5
1.2 Paulova RF lineární kvadrupólová past	5
1.2.1 Potenciál	6
1.2.2 Pohybová rovnice a její řešení	8
1.2.3 Srovnání statické (Penningovy) a RF pasti	11
1.2.4 Pseudopotenciálová aproximace	11
1.2.5 Sekulární pohybové frekvence částice	13
1.2.6 Mikropohyb	14
1.3 Použité numerické metody	17
2 Numerická simulace	19
2.1 Použitý software pro simulace	19
2.2 Numerický model potenciálu pasti	20
2.2.1 Vytvoření modelu pasti	20
2.2.2 Výpočet a výsledné potenciály	25
2.3 Numerická integrace pohybové rovnice	26
2.3.1 Nastavení výpočtu a definice Hamiltonovy funkce	27
2.3.2 Nastavení řešiče	27
2.4 Analýza výsledků	27
2.4.1 Sekulární frekvence a charakteristika potenciálu pasti	28
2.4.2 Výpočet závislosti míry mikropohybu na axiální poloze iontu	30
2.4.3 Srovnání numerického výpočtu s teorií	33
3 Experimentální část	35
3.1 Měření sekulárních frekvencí	35
3.1.1 Způsob měření	35
3.1.2 Výsledná závislost a porovnání s numerickým modelem	37
Závěr	41
Seznam použité literatury a zdrojů	44
Seznam použitých symbolů a zkratk	45

Úvod

Rozvoj technologie a atomové fyziky v první polovině 20. století nevyhnutelně vedl k myšlence částicových pastí. Před vynálezem iontové pasti bylo možné zkoumat chování atomů pouze v rámci relativně velkých systémů. Iontová past je moderní a velmi mocný nástroj, který umožňuje lidem manipulovat s malým počtem iontů. Díky této technologii jsou experimenty prováděné s jediným zachyceným iontem již běžnou praxí. Výhodou těchto experimentů není pouze možnost zkoumat chování základního stavebního prvku hmoty odděleně od okolního prostředí, ale i extrémně vysoká přesnost měřených veličin. Nobelova cena za vývoj iontových pastí byla udělena roku 1989 W. Paulovi a H. Dehmeltovi společně s cenou za rozvoj přesné spektroskopie v oblasti atomových hodin, kterou obdržel N. F. Ramsey. [1]

Tato práce se zabývá Paulovou radiofrekvenční lineární kvadrupólovou pastí (dále jen Paulova lineární past) umístěnou v Ústavu přístrojové techniky Akademie věd České republiky v Brně (dále ÚPT). Past v ÚPT je určena pro zachytávání vápníkových iontů. Tento typ iontové pasti je vhodný pro laserové chlazení zachycených iontů na velmi nízké energie (až do základního stavu). Takto zchlazený iont vápníku díky své struktuře energetických hladin umožňuje realizaci optického frekvenčního standardu, který se vyznačuje vyšší přesností a frekvenční stabilitou oproti mikrovlnnému frekvenčnímu standardu. Více informací o optických frekvenčních standardech na bázi zchlazených iontů lze nalézt v úvodu článku [2]. Pro získání vyššího poměru signál/šum je výhodné použít více zachycených a zchlazených iontů vápníku, neboť tímto způsobem lze získat více fotonů při fluorescenční spektroskopii. Při zachycení více iontů v Paulově lineární pasti a dostatečným laserovým chlazením dochází k vytvoření tzv. *Coulombova krystalu*. Technická realizace optického frekvenčního standardu v ÚPT je v první fázi založena na spektroskopii s jedním zachyceným iontem, avšak další výzkumný směr je orientován již na spektroskopii se stabilním Coulombovým krystalem ze zachycených iontů vápníku [3]. Podmínkou stabilního Coulombova krystalu je však teoretická charakterizace parametrů pasti s následným experimentálním ověřením vypočtených hodnot. Předložená práce tak představuje detailní rozbor této problematiky a představuje zásadní odrazový můstek k budoucím optickým frekvenčním standardům na bázi Coulombovských krystalů.

Práce je rozdělena do tří kapitol. V první kapitole jsou představeny teoretické principy zachycení iontů pomocí elektromagnetického pole (zejména Paulovou lineární pastí). Jsou zde podrobněji rozebrány základní vlastnosti Paulovy lineární pasti. Tato kapitola obsahuje teoretické poznatky využívané v dalších částech práce. Také jsou zde

uvedeny základní myšlenky, nezbytné k provedení numerického výpočtu.

Ve druhé kapitole je uveden podrobný popis vytvoření numerického modelu pro výpočet potenciálu i trajektorií zachyceného iontu $^{40}\text{Ca}^+$ v reálné Paulově lineární pasti v ÚPT. Výsledky numerického výpočtu jsou použity k charakteristice potenciálu pasti v okolí jejího středu. Pomocí numerického výpočtu je také analyzováno chování zachyceného iontu vápníku z hlediska amplitudy buzeného pohybu. Je zde kladen důraz na srovnání dvou módů buzení elektrod pasti (tzv. *symetrické* a *asymetrické*), což je hlavním cílem práce.

Poslední kapitola zahrnuje experimentální část práce. Pomocí experimentálního měření parametru jedné ze simulovaných charakteristik pasti je ověřena korespondence numerického modelu a reálné sestavy. Jedná se o měření pohybových frekvencí zachyceného iontu v závislosti na nastavení elektrických potenciálů pasti.

V závěru práce jsou pak shrnuty veškeré dosažené výsledky.

1. Teorie

Tato kapitola se zabývá teoretickými principy zachycení elektricky nabitě částice v definovaném prostoru. Jsou zde podrobněji popsány obecné vlastnosti Paulovy lineární pasti a chování v ní zachyceného iontu. Vybrané aspekty teoretického chování jsou v kapitole 2 porovnávány s numerickým výpočtem. V poslední části této kapitoly jsou pak následně popsány základní principy numerického výpočtu.

1.1 Zachycení nabitě částice v prostoru (typy pastí)

Z klasické Maxwellovy teorie elektromagnetismu plyne, že skalární potenciál elektrostatického pole $\Phi(\mathbf{r})$, kde \mathbf{r} označuje prostorové souřadnice, splňuje v prázdném prostoru Laplaceovu rovnici $\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = 0$. Lze dokázat, že řešení této rovnice nemůže nabývat lokálních extrémů na oblasti bez nábojů. Není tedy možné zachytit nabitou částici čistě elektrostatickým polem, což tvrdí tzv. *Earnshawův teorém*, který je bezprostředním důsledkem platnosti Laplaceovy rovnice pro elektrostatický potenciál [4].

Velmi jednoduchý průběh potenciálu s existujícím minimem je kvadratický potenciál ve tvaru $\Phi(x,y,z) = \Phi_0(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2)$. Aby tento tvar potenciálu splňoval Laplaceovu rovnici, musí platit podmínka

$$\alpha + \beta + \gamma = 0. \quad (1.1)$$

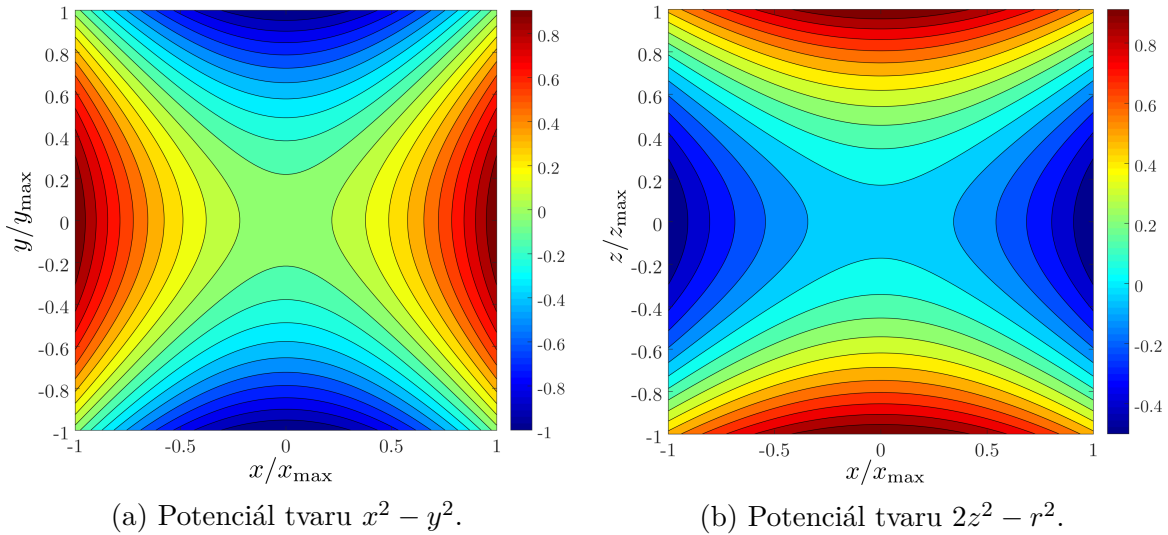
Množina řešení lineární rovnice (1.1) tvoří dvoudimenzionální prostor, lze tedy nalézt dvě nezávislá řešení. Tato dvě nezávislá řešení vedou na potenciály ve tvarech

$$\Phi_1(x,y) = \varphi_{01}(x^2 - y^2) \quad (1.2)$$

$$\Phi_2(z,r) = \varphi_{02}(2z^2 - r^2), \quad (1.3)$$

kde $r^2 = x^2 + y^2$. Tvar Φ_1 odpovídá kvadrupólovému potenciálu v rovině xy . Řešení Φ_2 odpovídá kvadrupólovému potenciálu, který je symetrický vzhledem k rotaci kolem osy z . Celkový kvadrupólový potenciál je dán lineární kombinací těchto tvarů. Zachycení nabitě částice ve všech třech rozměrech je realizováno vhodným využitím kvadrupólového tvaru potenciálu [1]. Ekvipotenciální křivky kvadrupólového potenciálu jsou hyperboly. Příklad je na obr. 1.1 a slouží k vytvoření představy o průběhu kvadrupólového potenciálu a tvaru ideálních elektrod, které by tento potenciál tvořily.

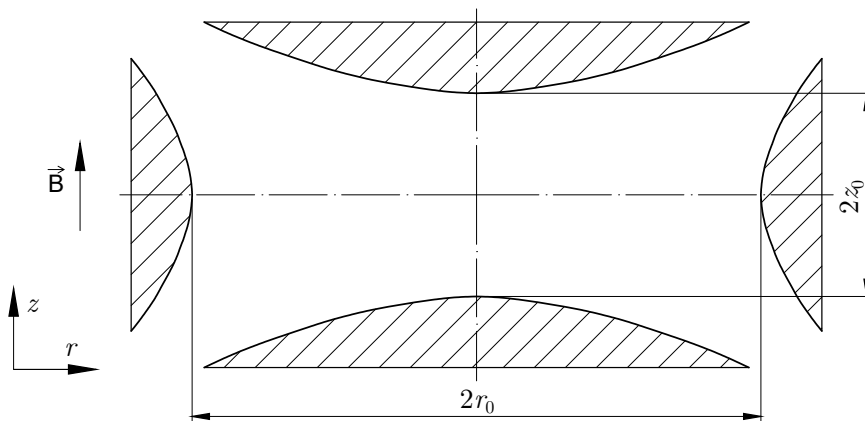
1.1. Zachycení nabité částice v prostoru (typy pastí)



Obrázek 1.1: Na obrázcích jsou barevně vyobrazeny tvary a oblasti ekvipotenciál, které jsou dány tvarem potenciálů (1.2) a (1.3). Souřadnice x_{\max} , y_{\max} a z_{\max} určují prostorový rozsah vykreslení.

1.1.1 Penningova past

Prvním příkladem je tzv. *Penningova* past, ve které je zachycení iontu realizováno využitím elektrostatického potenciálu daného vztahem (1.3). Na obr. 1.2 je možno vidět řez geometrií elektrod, které jsou třeba k vytvoření potenciálu tvaru $\Phi_2(z,r)$. Tento potenciál umožňuje zachycení částice pouze ve směru osy z . Zachycení částice vzhledem k radiální ose r je umožněno s pomocí homogenního magnetického pole ve směru osy z . Vlivem Lorentzovy síly jsou částice nuceny obíhat kolem magnetických indukčních čar. Lorentzova síla tedy vyrovnává účinky elektrické síly, která působí směrem od radiální osy, je tedy možné dosáhnout stability. Přesnější popis pohybu částic v Penningově pasti lze najít v první kapitole knihy [4].

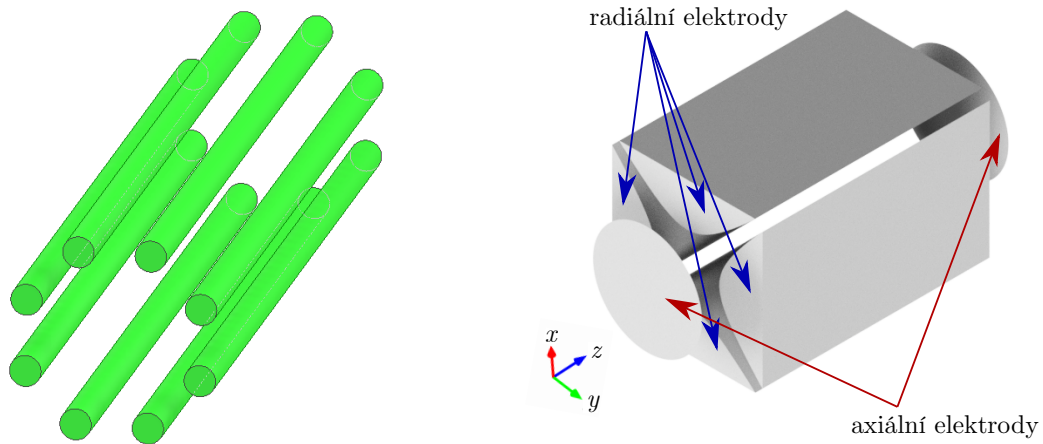


Obrázek 1.2: Schématické znázornění řezu geometrií elektrod Penningovy pasti. Tyto elektrody jsou rotačně symetrické kolem osy z . Homogenní magnetické pole míří ve směru osy z . Elektrody jsou drženy na statickém potenciálu, jedná se tedy o statickou past.

1.1.2 Radiofrekvenční past

Dalším příkladem je radiofrekvenční (dále jen RF) past, ve které je částice zachycena v rovině xy pomocí harmonicky oscilujícího (RF) elektrického pole. Obecně může mít RF potenciál tvar multipólu ve válcových souřadnicích n -tého řádu, kde n je sudé a zároveň $n \geq 4$. Tento řád je určen počtem radiálních elektrod pasti [4, s. 44]. Příklad geometrie elektrod pasti vyššího řádu je možno vidět na obr. 1.3a.

Dále je popisována pouze Paulova lineární kvadrupólová past, kde zachycující harmonicky oscilující potenciál, v blízkosti středu pasti, v rovině xy odpovídá tvaru, který je dán vztahem (1.2). Geometrie lineární pasti umožňuje zachycení částice nejen ve svém středu, ale poskytuje jistou volnost v manipulaci s iontem podél osy z (více informací lze nalézt v [4, s. 43]). V ose z je zachycení realizováno statickým elektrickým polem, které je přibližně dané potenciálem, který je dán vztahem (1.3). Princip zachycení částice v Paulově lineární pasti je popsán podrobně v podkapitole 1.2.



(a) Příklad tvaru elektrod, které tvoří oktupólový potenciál ve válcových souřadnicích.

(b) Příklad geometrie Paulovy lineární pasti. Elektrody kvadrupólu mají ideálně hyperbolický průřez.

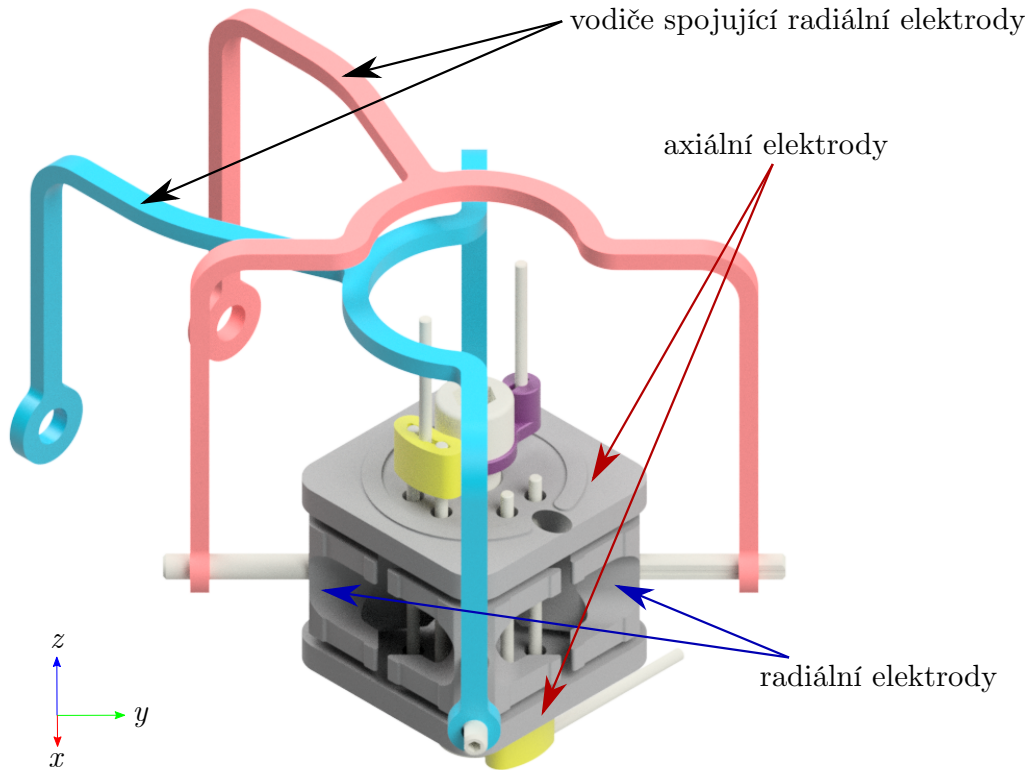
Obrázek 1.3: Vlevo (a) lze vidět válcové elektrody tvořící oktupólový potenciál v blízkosti osy z . Na obrázku vpravo (b) je zobrazen jednoduchý příklad Paulovy lineární pasti.

1.2 Paulova RF lineární kvadrupólová past

V této podkapitole jsou podrobněji popsány teoretické vlastnosti Paulovy lineární pasti. Geometrie Paulovy lineární pasti je založena na základě kvadrupólového hmotnostního spektrometru [1]. Lineární kvadrupólová past může být tvořena čtyřmi elektrodami v rovině xy , které probíhají podél osy z . Tyto tzv. *radiální* elektrody určují RF potenciál, který v blízkosti středu pasti odpovídá tvaru (1.2). Zachycení částice podél osy z je umožněno dvěma elektrodami, které jsou umístěny v blízkosti konců radiálních elektrod. Tyto tzv. *axiální* elektrody určují potenciál, který v blízkosti středu pasti odpovídá

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past

tvaru dle vztahu (1.3). Příklad tohoto uspořádání lze vidět na obr. 1.3b. Na obr. 1.4 je zobrazena konstrukce Paulovy lineární pasti nacházející se v ÚPT.



Obrázek 1.4: Vizualizace konstrukce Paulovy lineární pasti v ÚPT. Lze vidět i vodiče spojující jednotlivé elektrody.

1.2.1 Potenciál

Relativně malé frekvence¹ buzení RF pasti umožňují využít kvazistatickou aproximaci při výpočtu elektrického pole v prostoru pasti. Může být zanedbáno indukované magnetické pole.² Indukce elektrického pole je rovněž zanedbána. Celkové elektrické pole lze popsat pouze skalárním potenciálem, ke kterému je dodatečně přidána časová závislost [5].

Nejvýznamnější multipólová složka potenciálu v blízkosti středu Paulovy lineární pasti je, jak název napovídá, kvadrupól. V teoretickém rozboru je uvažována pouze tato složka potenciálu.

Harmonicky oscilující kvadrupólový potenciál v Paulově lineární pasti je možno zapsat ve tvaru $\Phi_{\text{rf}} = \varphi_{\text{rf0}}(x^2 - y^2) \cos(\Omega t)$, kde Ω je budící úhlová frekvence pasti. Statický kvadrupólový potenciál má tvar $\Phi_{\text{dc}} = \varphi_{01}(x^2 - y^2) + \varphi_{02}(2z^2 - x^2 - y^2)$. Celkový kvadrupólový potenciál Paulovy lineární pasti je dán součtem RF a statického

¹Používané frekvence jsou řádově 10 MHz.

²Poměr mezi velikostí Lorentzovy síly indukovaného magnetického pole působící na nabitou částici a elektrickou silou je přibližně v/c , kde v je rychlost částice vzhledem k laboratorní soustavě a c je rychlost světla ve vakuu.

potenciálu, tedy

$$\Phi(t, x, y, z) = [\varphi_{01} + \varphi_{\text{rf0}} \cos(\Omega t)](x^2 - y^2) + \varphi_{02}(2z^2 - x^2 - y^2). \quad (1.4)$$

Konstanty φ_{rf0} , φ_{01} a φ_{02} jsou určeny napětími na elektrodách a konkrétní geometrií pasti, jejich význam je uveden níže.

Radiální elektrody lineární pasti lze zapojit buď symetricky a nebo asymetricky. Schéma těchto zapojení je možno vidět na obr. 1.5. Pro symetrické buzení radiálních elektrod lze zapsat, po aplikaci okrajových podmínek ve vztahu (1.4), potenciál v blízkosti středu ve tvaru

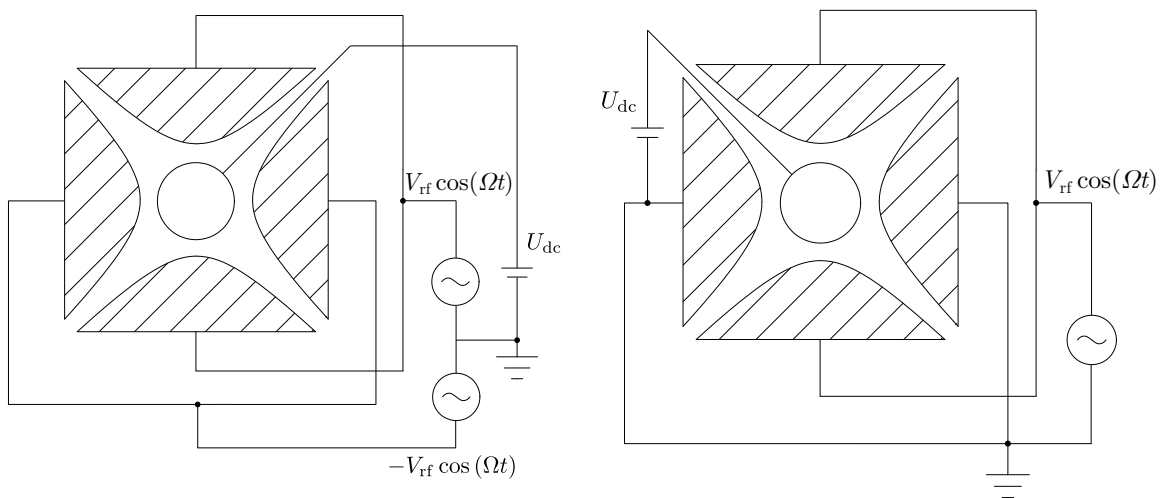
$$\Phi_{\text{sym}}(t, x, y, z) = V_{\text{rf}} \frac{y^2 - x^2}{r_0^2} \cos(\Omega t) + U_{\text{dc}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{2z_0^2}, \quad (1.5)$$

kde V_{rf} je amplituda RF buzení radiálních elektrod a U_{dc} je potenciál na axiálních elektrodách. Parametr r_0 (resp. z_0) označuje vzdálenost radiálních (resp. axiálních) elektrod od středu pasti. Použité značení je inspirováno prací [6] a články [7, 1]. Při odvození vztahu (1.5) bylo předpokládáno, že obě axiální elektrody jsou na stejném potenciálu. Nastavením různých potenciálů na axiálních elektrodách lze „posouvat“ minimum potenciálu (tedy i zachycenou částicí) v axiálním směru (využito v podkapitole 2.4.2).

U asymetrického zapojení je jeden pár protějších radiálních elektrod uzemněn, druhý pár je připojen na RF buzení. Aplikací okrajových podmínek v rovnici (1.4) se dostane vyjádření potenciálu

$$\Phi_{\text{asym}}(t, x, y, z) = V_{\text{rf}} \frac{y^2 - x^2 + r_0^2}{2r_0^2} \cos(\Omega t) + U_{\text{dc}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{2z_0^2}, \quad (1.6)$$

kde význam jednotlivých parametrů je analogický rovnici (1.5).



(a) U symetrického zapojení jsou všechny radiální elektrody na RF potenciálu. Na obou párech elektrod je harmonický potenciál v protifázi.

(b) Radiální elektrody buzené asymetricky mají jeden pár elektrod uzemněný. Druhý pár je na harmonickém potenciálu.

Obrázek 1.5: Schématické zobrazení zapojení elektrod (a) symetrického a (b) asymetrického buzení RF kvadrupólové pasti. Na obrázku je zobrazen řez rovinou xy .

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past

U reálných pastí není geometrie elektrod hyperbolická a většinou se radiální elektrody nahrazují jednoduššími tvary, např. válcovými (viz obr. 1.3a). Důvodem je snadnější a ekonomičtější výroba při přibližném³ zachování kvadrupólového tvaru potenciálu. Také hodnoty parametrů r_0 a z_0 ve vztahu pro potenciál v blízkosti středu pasti již neodpovídají vzdálenostem elektrod od středu pasti, ale jsou modifikované v závislosti na konkrétní geometrii pasti. Tyto parametry jsou využity jako hledané charakteristiky kvadrupólového potenciálu v blízkosti středu pasti v ÚPT.

1.2.2 Pohybová rovnice a její řešení

Klasickou pohybovou rovnicí nabitě částice o hmotnosti m a náboji q ve kvazistatickém elektrickém poli lze zapsat jako $m\ddot{\mathbf{r}} = q(-\nabla\Phi)$, kde \mathbf{r} označuje polohový vektor částice a Φ je skalární potenciál. Dosazením potenciálu dle rovnice (1.5) pro symetrické buzení radiálních elektrod do pohybové rovnice pro nabitou částici a zavedením označení

$$a_x = -\frac{8qU_{dc}}{m2z_0^2\Omega^2}, \quad a_y = -\frac{8qU_{dc}}{m2z_0^2\Omega^2}, \quad a_z = \frac{16qU_{dc}}{m2z_0^2\Omega^2}, \quad (1.7a)$$

$$q_x = \frac{4qV_{rf}}{mr_0^2\Omega^2}, \quad q_y = -\frac{4qV_{rf}}{mr_0^2\Omega^2}, \quad q_z = 0, \quad (1.7b)$$

$$\xi = \frac{\Omega t}{2}, \quad (1.7c)$$

se dostanou pohybové rovnice částice, které je možno zapsat v kompaktním tvaru

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + [a_u - 2q_u \cos(2\xi)]u = 0, \quad (1.8)$$

kde u reprezentuje souřadnice x, y, z [6]. Vyjádření parametrů a_u a q_u pro potenciál asymetrického buzení (1.6) se dostane tak, že všechny členy v a_u a q_u obsahující V_{rf} jsou násobeny faktorem $1/2$. Toto tvrzení si lze ověřit porovnáním vztahů (1.5) a (1.6). Poté je tvar pohybové rovnice pro částici v potenciálu odpovídajícím asymetrickému buzení pasti shodný s rovnicí (1.8). Ukazuje se tedy, že kvadrupólové potenciály symetrického i asymetrického buzení jsou ekvivalentní.

Diferenciální rovnice (1.8) má tvar tzv. *Mathieuovy* rovnice, kterou řešil již v 19. století E. Mathieu [4, s. 37].⁴ Přesné řešení rovnice (1.8) ve tvaru fourierovy řady je uvedeno zde [4, s. 38]. V prvním přiblížení lze řešení zapsat ve tvaru

$$u(t) = u_0 \cos(\omega_u t + \varphi) \left(1 + \frac{q_u}{2} \cos(\Omega t) \right), \quad (1.9)$$

kde $\omega_u = \Omega/2\sqrt{a_u + q_u^2/2}$. Konstanty u_0 a φ jsou určeny počátečními podmínkami. Je vidět, že řešení (1.9) je složením dvou pohybů. Pro názornou představu je řešení vykresleno na obr. 1.6. První složka pohybu má amplitudu u_0 a kmitá s úhlovou frekvencí ω_u . Tento pohyb je tzv. *sekulární* pohyb se *sekulární frekvencí* ω_u . Za předpokladu, že je frekvence buzení pasti výrazně vyšší než sekulární frekvence částice, tedy $\Omega \gg \omega_u$, je možno říci, že druhá složka pohybu má amplitudu $1/2 u_0 q_u$, která je modulovaná

³V oblasti středu pasti se v tomto případě objevují i vyšší multipólové složky potenciálu.

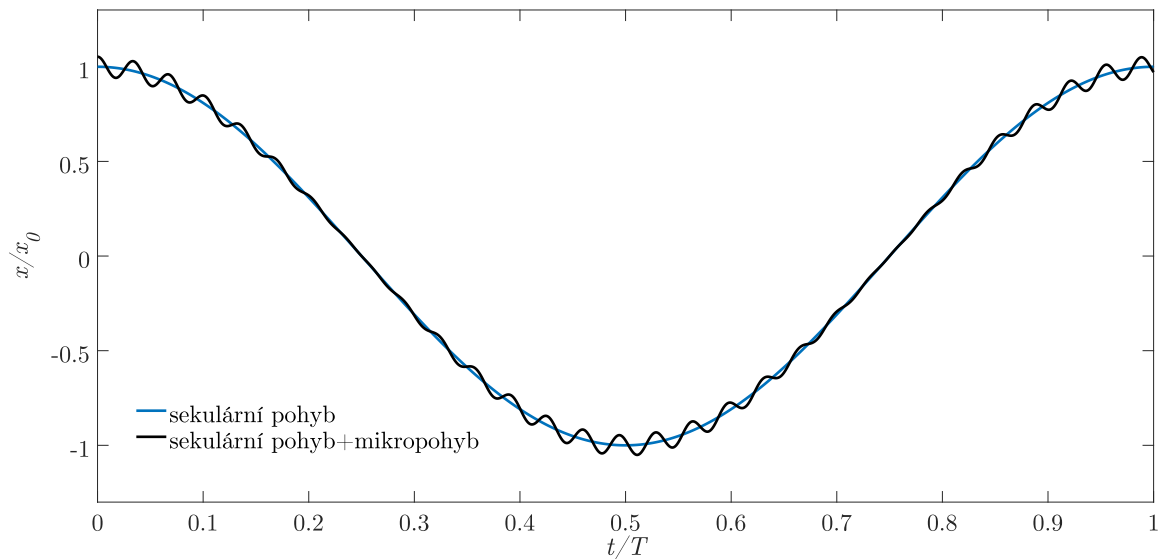
⁴Émile Léonard Mathieu řešil problém vibrující eliptické membrány.

sekulární frekvencí a kmitá s budící úhlovou frekvencí pasti Ω . Tento člen odpovídá tzv. *mikropohybu*. Vlastnosti mikropohybu jsou podrobněji popsány v podkapitole 1.2.6. Podle (1.7) platí, že $q_z = 0$, dle využitého přiblížení tedy v ose z není vykonáván mikropohyb. Ze vztahů (1.9) a (1.7) je patrné, že amplituda mikropohybu v osách x a y je úměrná V_{rf}/Ω^2 a závisí na vychýlení od osy z ,⁵ což patří mezi významné vlastnosti RF pastí [6].

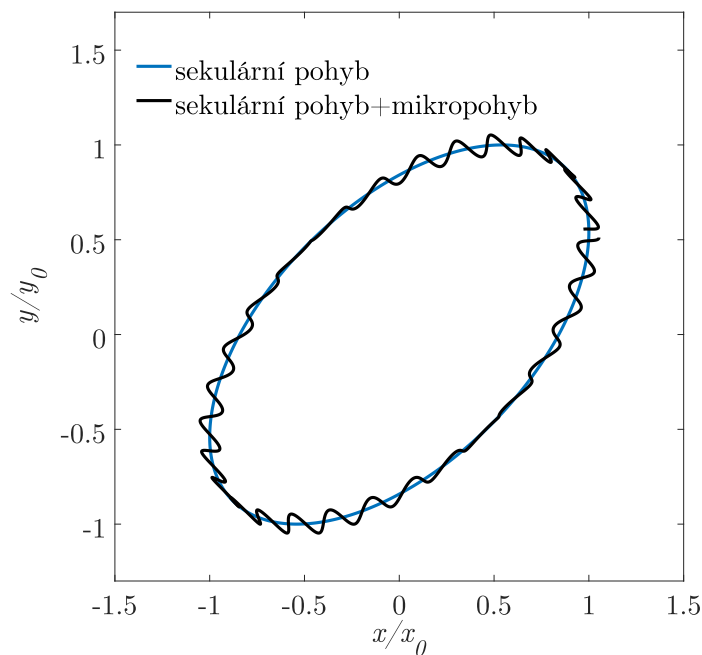
Nastavení parametrů a napětí pro vykreslení řešení pohybové rovnice, které je dané vztahem (1.9), na obr. 1.6 odpovídá reálným hodnotám. Parametry byly nastaveny následovně, $V_{\text{rf}} = 150$ V, $U_{\text{dc}} = 300$ V a $\Omega = 2\pi \cdot 30$ MHz. Vzdálenosti elektrod byly zvoleny $2r_0 = 1,2$ mm a $2z_0 = 18,1$ mm. Hmotnost a náboj odpovídá $^{40}\text{Ca}^+$. Sekulární frekvence odpovídající těmto parametrům jsou $f_{xy} = 1,03$ MHz a $f_z = 670$ kHz.

⁵Amplituda mikropohybu je v rovině xy nulová pouze na ose z .

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past



(a) Porovnání řešení odpovídající sekulárnímu pohybu a celkovému pohybu (včetně mikropohybu) v průběhu času jedné periody sekulárního pohybu v ose x .



(b) Srovnání trajektorie částice v rovině xy odpovídající pouze sekulárnímu pohybu a trajektorie včetně mikropohybu. Tvar této trajektorie závisí na počátečních podmínkách, které byly zvoleny s přihlédnutím k větší názornosti obrázku.

Obrázek 1.6: Porovnání čistě sekulárního pohybu s celkovým pohybem daným přibližným řešením Mathieuových rovnic (1.9) pro částici v symetricky buzené pasti: (a) časový průběh, (b) trajektorie v rovině xy .

1.2.3 Srovnání statické (Penningovy) a RF pasti

Jednou z hlavních výhod Penningovy pasti je to, že zachycující elektromagnetické pole je statické. Částici tedy, zjednodušeně řečeno, „nezmítá“ RF elektrické pole. Tato past umožňuje stabilní zachycení velkého počtu částic bez výrazného zahřívání způsobeného RF polem, čehož se využívá např. při experimentech s plasmatickým plynem. [4, s. 8]

Využitím přítomnosti silného magnetického pole v Penningově pasti lze velmi přesně měřit hmotnost a magnetický moment zachycených částic. Penningova past se také využívá k vytváření a zachycení antivodíku v Evropské organizaci pro jaderný výzkum (CERN). [4, s. 9]

Jedna z nevýhod Penningovy pasti je potřeba vytvoření silného magnetického pole. Pořízení a údržba supravodivého magnetu je finančně náročná. Magnet navíc ztěžuje přístupnost záchytného prostoru pasti, což může být při mnohých experimentech problémem. Pro stabilitu Penningovy pasti je také potřeba vysokého vakua, což může způsobovat technické komplikace. Nevýhodou Penningovy pasti je také relativně pomalé a obtížné laserové chlazení zachycených částic díky rozdílné struktuře pohybových stranických pásem v absorpčním spektru v porovnání s RF pastí. Řez geometrií elektrod Penningovy pasti je vidět na obr. 1.2. [4, s. 15]

RF past je charakteristická možností stabilního zachycení a zchlazení jediné částice na velmi dlouhou dobu. V důsledku toho je RF past vhodným nástrojem nejen ve velmi přesné metrologii (zejména frekvenční), ale i pro experimenty s kvantovými stavy iontu.

Za výhodu RF pastí se dá považovat⁶ přítomnost jen velmi slabého magnetického pole, což má za následek významně menší Zeemanovské rozštěpení spektrálních čar atomu než u Penningovy pasti. Konkrétně u Paulovy lineární pasti je velkou výhodou přístupnost zachyceného iontu laserům a možnost stabilního zachycení více iontů podél axiální osy. [4, s. 43]

Hlavní nevýhodou RF pastí je přítomnost oscilujícího elektrického pole a z ní plynoucí mikropohyb. Mikropohyb způsobuje nežádoucí zahřívání zachyceného iontu. Míra mikropohybu je závislá na poloze zachyceného iontu, což je podstatné při experimentech s více ionty. Amplituda mikropohybu je také citlivá na nedokonalosti pasti, což je zmíněno v podkapitole 1.2.6. Geometrie Paulovy lineární pasti je zobrazena na obr. 1.3. Základní informace o aplikacích iontových pastí jsou uvedeny v knize [4].

1.2.4 Pseudopotenciálová aproximace

Analýzu pohybu částice v harmonicky oscilujícím elektrickém poli lze usnadnit zavedením tzv. *pseudopotenciálu*. Pseudopotenciál, zjednodušeně řečeno, vyjadřuje „průměrný efekt“ harmonicky oscilujícího elektrického pole na částici v tomto poli. Gradient tohoto pseudopotenciálu odpovídá průměrnému elektrickému poli, které působí na částici v prostoru s harmonicky oscilujícím elektrickým polem. Je nutno zdůraznit, že tento přístup je pouze aproximací, které je možno využít za předpokladu, že frekvence oscilujícího pole je dostatečně vysoká ve srovnání s vlastní frekvencí oscilací nabitě částice. Odvození vztahu pro pseudopotenciál je převzato z [6]. Účelem tohoto odvození je utvoření lepší představy o jeho fyzikálním smyslu.

⁶Vždy záleží na konkrétní aplikaci.

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past

Celkový potenciál v pasti lze zapsat jako součet statického a harmonicky oscilujícího potenciálu. Tedy $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi_{\text{dc}}(\mathbf{r}) + \Phi_{\text{rf0}}(\mathbf{r}) \cos(\Omega t)$, kde $\Phi_{\text{rf0}}(\mathbf{r})$ označuje amplitudu oscilujícího potenciálu. Dosazením celkového potenciálu do pohybové rovnice pro nabitou částici je možno dostat

$$\frac{m}{q} \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{E}_{\text{dc}}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{r}) \cos(\Omega t), \quad (1.10)$$

kde $\mathbf{E}_{\text{dc}}(\mathbf{r})$ je intenzita statického elektrického pole a $\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{r})$ označuje amplitudu harmonicky oscilující intenzity elektrického pole. Pokud je budící frekvence Ω dostatečně „velká“ vzhledem k rychlosti pohybu částice, pak lze celkový pohyb rozložit na dvě části. První část odpovídá „průměrnému“ pohybu částice (sekulárnímu pohybu) a druhá modulaci tohoto pohybu na úhlové frekvenci Ω (mikropohyb). Oprávněnost těchto předpokladů lze vidět na obr. 1.6. Celková trajektorie je tedy dána $\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \boldsymbol{\xi}(t)$, přičemž $\boldsymbol{\xi}(t)$ nabývá jen „malých“ hodnot vzhledem k $\mathbf{R}(t)$. Po dosazení do vztahu (1.10) se dostane pohybová rovnice ve tvaru

$$\frac{m}{q} \ddot{\mathbf{R}} + \frac{m}{q} \ddot{\boldsymbol{\xi}} \approx \mathbf{E}_{\text{dc}}(\mathbf{R}) + \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) \cos(\Omega t), \quad (1.11)$$

kde je využito předpokladu, že $\boldsymbol{\xi}(t) \ll \mathbf{R}(t)$. Jak je výše uvedeno, člen $m/q \ddot{\boldsymbol{\xi}}$ odpovídá pohybu oscilujícímu s úhlovou frekvencí Ω . Lze tedy předpokládat, že v rovnici (1.11) spolu korespondují oscilující členy, což dává přibližnou rovnost $m/q \ddot{\boldsymbol{\xi}} \approx \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) \cos(\Omega t)$. Integrací této rovnosti se dostane přibližný vztah pro mikropohyb

$$\boldsymbol{\xi}(t) \approx -\frac{q}{m\Omega^2} \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) \cos(\Omega t). \quad (1.12)$$

Pro rozvoj vektoru elektrické intenzity v blízkosti \mathbf{R} platí

$$\mathbf{E}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\xi}) \approx \mathbf{E}(\mathbf{R}) + (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) \mathbf{E}(\mathbf{R}). \quad (1.13)$$

Po doplnění rovnice (1.11) o členy lineární ve $\boldsymbol{\xi}(t)$ a po dosazení přibližného řešení pro $\boldsymbol{\xi}(t)$, tedy (1.12), lze psát pohybovou rovnici pouze pro sekulární pohyb ve tvaru

$$\frac{m}{q} \ddot{\mathbf{R}} \approx \mathbf{E}_{\text{dc}}(\mathbf{R}) - \frac{q}{m\Omega^2} \cos^2(\Omega t) [\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) \cdot \nabla] \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}), \quad (1.14)$$

přičemž byl vynechán člen obsahující $\cos(\Omega t)$ v první mocnině, který vymizí po zprůměrování přes periodu $2\pi/\Omega$. Rovnice (1.14) po zprůměrování přes periodu oscilace RF potenciálu, využití vztahu $\nabla(\mathbf{E}_{\text{rf}}^2) = 2[\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) \cdot \nabla] \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R})$, který platí za předpokladu, že $\nabla \times \mathbf{E}_{\text{rf}} = 0$, a uvážení, že $\langle \cos^2(\Omega t) \rangle_{2\pi/\Omega} = 1/2$, nabývá tvaru

$$\frac{m}{q} \ddot{\mathbf{R}} \approx \mathbf{E}_{\text{dc}}(\mathbf{R}) - \frac{q}{4m\Omega^2} \nabla[\mathbf{E}_{\text{rf}}^2(\mathbf{R})], \quad (1.15)$$

zde je třeba zdůraznit, že při průměrování přes periodu oscilace RF potenciálu byla zanedbána změna $\mathbf{R}(t)$ v průběhu této jedné periody, oscilace RF pole musí tedy být „dostatečně rychlá“. Rovnice (1.15) má tvar pohybové rovnice pro sekulární pohyb. Využitím této rovnice lze získat vztah pro tzv. *sekulární potenciál*, který má tvar součtu

statického potenciálu a právě hledaného pseudopotenciálu

$$\Phi_{\text{sec}} = \Phi_{\text{dc}}(\mathbf{R}) + \frac{q}{4m\Omega^2} [\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R})]^2. \quad (1.16)$$

Sekulární potenciál tedy určuje přibližné působení celkového elektrického pole na částici po zprůměrování přes periodu oscilace RF elektrického pole. Pro pseudopotenciál platí vztah

$$\Phi_{\text{PS}}(\mathbf{R}) = \frac{q}{4m\Omega^2} [\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R})]^2. \quad (1.17)$$

Gradient pseudopotenciálu nahrazuje oscilující elektrické pole statickým polem. V pseudopotenciálové aproximaci (dále jen PA) je sekulární pohyb určen pomocí sekulárního potenciálu dle vztahu (1.16). Mikropohyb je odseparován od sekulárního pohybu a z rovnice (1.12) plyne, že amplituda mikropohybu je úměrná E_{rf}/Ω^2 , kde E_{rf} je velikost amplitudy RF oscilujícího elektrického pole. Tento výsledek souhlasí s řešením Mathieuovy rovnice v podkapitole 1.2.2. V podkapitole 2.4.3 lze vidět srovnání numerického řešení pohybových rovnic a řešení pomocí PA.

1.2.5 Sekulární pohybové frekvence částice

Využitím PA je zde ukázáno odvození vztahů pro sekulární frekvence částice zachycené v Paulově lineární pasti. Vztah (1.17) pro pseudopotenciál lze upravit do tvaru

$$\Phi_{\text{PS}} = \frac{q}{4m\Omega^2} (\nabla\Phi_{\text{rf0}})^2, \quad (1.18)$$

přičemž Φ_{rf0} označuje amplitudu harmonicky oscilujícího potenciálu. Pro případ symetricky buzené pasti je tato amplituda $\Phi_{\text{rf0}} = V_{\text{rf}}/r_0^2(y^2 - x^2)$. Po dosazení této amplitudy do vztahu (1.18) pro pseudopotenciál se dostane vztah pro pseudopotenciál symetrického buzení radiálních elektrod ve tvaru

$$\Phi_{\text{PS}}^{(\text{sym})} = \frac{q}{m\Omega^2} \left(\frac{V_{\text{rf}}}{r_0^2} \right)^2 (x^2 + y^2). \quad (1.19)$$

Lze vidět, že tento pseudopotenciál má minimum, což napovídá tomu, že částice může být harmonicky oscilujícím polem zachycena v rovině xy . Přičtením statického potenciálu symetricky buzené pasti dle rovnice (1.5) k pseudopotenciálu dle vztahu (1.19) lze obdržet dle rovnice (1.16) vyjádření celkového sekulárního potenciálu. Celkový sekulární potenciál má tvar potenciálu harmonického oscilátoru ve třech dimenzích, tedy lze přepsat jako

$$\Phi_{\text{sec}} = \frac{1}{q} \left(\frac{1}{2} m\omega_{xy}^2 (x^2 + y^2) + \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2 \right), \quad (1.20)$$

kde ω_u jsou sekulární úhlové frekvence částice. Podle známého vztahu mezi úhlovou frekvencí a frekvencí platí, že $f_u = \omega_u/2\pi$. Odpovídající vztahy pro sekulární frekvence v radiálním f_{xy} a axiálním směru f_z jsou

$$f_{xy}^{(\text{sym})} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 \left(\frac{q}{mr_0^2} \right)^2 \left(\frac{V_{\text{rf}}}{\Omega} \right)^2 - \frac{q}{mz_0^2} U_{\text{dc}}}, \quad f_z^{(\text{sym})} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 \frac{q}{mz_0^2} U_{\text{dc}}}. \quad (1.21)$$

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past

Tyto vztahy platí pro symetricky buzené radiální elektrody. Analogickým postupem se dostanou vztahy platící pro asymetricky buzené elektrody pasti. Následně platí

$$f_{xy}^{(\text{asym})} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{q}{mr_0^2} \right)^2 \left(\frac{V_{\text{rf}}}{\Omega} \right)^2 - \frac{q}{mz_0^2} U_{\text{dc}}}, \quad f_z^{(\text{asym})} = f_z^{(\text{sym})}. \quad (1.22)$$

Vztahy pro sekulární frekvence souhlasí s přibližným řešením, viz vztah (1.9), pohybové rovnice (1.8). Měřením nebo výpočtem sekulárních pohybových frekvencí lze určit geometrické parametry charakterizující potenciál v blízkosti osy pasti r_0 a z_0 . Tyto parametry vystupují ve vztazích pro kvadrupólový potenciál symetrického, viz rovnici (1.5), i asymetrického, viz rovnici (1.6), buzení. Ze znalosti těchto parametrů lze tedy určit potenciál v blízkosti středu reálné pasti. Tyto parametry jsou pro reálnou past provozovanou v ÚPT určeny numerickou simulací v podkapitole 2.4. Také experimentálně je určen parametr z_0 (podkapitola 3.1.2).

1.2.6 Mikropohyb

V podkapitole 1.2.2 je ukázáno, že řešení pohybové rovnice nabité částice v pasti dané vztahem (1.9) se rozpadá na sekulární pohyb a mikropohyb. Totéž ukazuje PA, což je obsahem podkapitoly 1.2.4. Rovnice (1.12) určuje mikropohyb pro PA.

Mikropohyb je rychle oscilující buzený pohyb na frekvenci buzení pasti, což lze vidět na obr. 1.6. Jedná se o nežádoucí jev při snahách o vytvoření frekvenčního standardu. Jeho důsledkem je např. změna tvaru atomových spektrálních čar, významný Dopplerovský posuv čar a může vést i ke ztrátě zachyceného iontu. RF elektrické pole přítomné v prostoru zachyceného iontu může také způsobovat nezanedbatelný Starkův efekt. Starkův efekt je jev, kdy jsou energetické hladiny atomu rozštěpeny do více hladin v důsledku přítomnosti elektrického pole. Jedná se o analogii Zeemanovského rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli. Níže jsou rozebrány a shrnuty základní vlastnosti mikropohybu [7].

Amplituda mikropohybu, jak je patrné z rovnice (1.12), je nepřímo úměrná druhé mocnině budící frekvence pasti Ω a úměrná amplitudě intenzity RF elektrického pole v místě, kde se částice právě nachází. Lze tedy říci, že velikost mikropohybu závisí na budící frekvenci, potenciálu na RF buzených elektrodách, geometrii elektrod, poloze vzhledem k elektrodám a samozřejmě také na hmotnosti a náboji částice.

Pro střední hodnotu kinetické energie částice v pasti, spojenou s pohybem v jedné ose, platí vztah

$$E_{ku} = \frac{1}{4} m u_0^2 \omega_u^2 \left(1 + \frac{q_u^2}{q_u^2 + 2a_u} \right), \quad (1.23)$$

kde index u reprezentuje prostorové osy a parametry q_u a a_u mají význam daný vztahy (1.7). Člen závisející na parametrech q_u a a_u přísluší kinetické energii mikropohybu. Pro používaná nastavení pasti většinou platí, že $q_u^2 \gg |a_u|$. Z toho vyplývá, že kinetická energie částice odpovídající sekulárnímu pohybu bývá přibližně stejně velká, jako energie odpovídající mikropohybu. Je tedy patrný velký význam mikropohybu z hlediska chlazení iontu. V ideálním případě lze technikou laserového chlazení snížit energii sekulárního pohybu a tím i energii odpovídající mikropohybu. V rovnici (1.23) jde o zmenšení amplitudy sekulárního pohybu u_0 . [6]

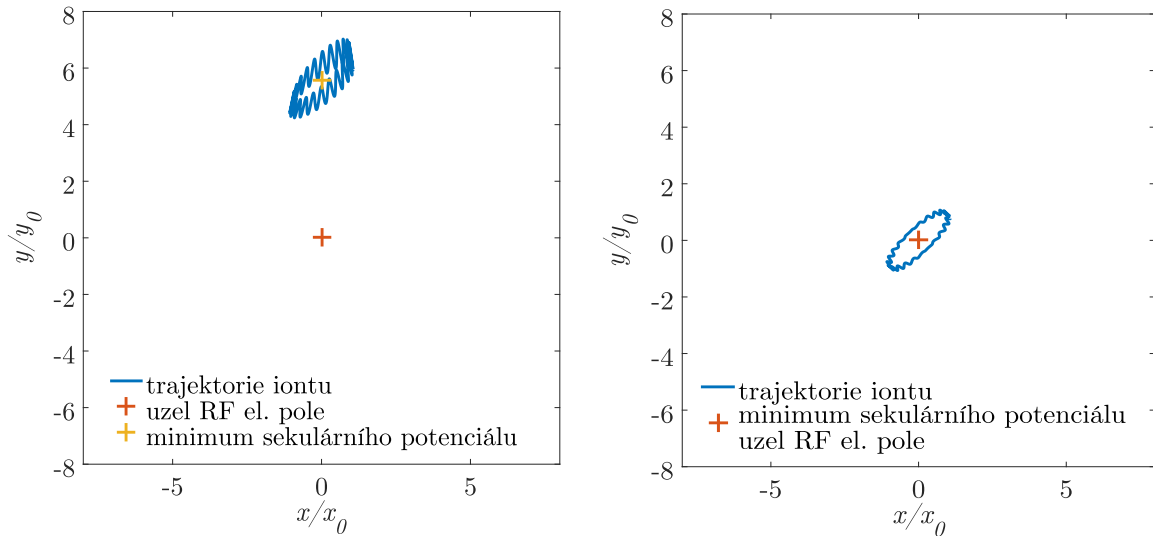
V reálných situacích nemusí splývat minimum sekulárního potenciálu a bod, pro který platí, že $\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{R}) = 0$. Tento bod je dále nazýván *uzlovým* bodem RF elektrického pole. Jinými slovy, iont nacházející se ve stabilní poloze z hlediska sekulárního pohybu se nemusí nacházet v místě, kde je nulová amplituda RF elektrického pole, což odpovídá bodu, kde iont nevykonává mikropohyb. Tento jev může být způsoben např. parazitním statickým elektrickým polem v této oblasti pasti. Řešení pohybové rovnice nabitě částice v RF pasti obsahující člen určující toto parazitní pole má tvar

$$u(t) = [u_s + u_0 \cos(\omega_u t)] \left(1 - \frac{q_u}{2} \cos(\Omega t)\right). \quad (1.24)$$

Poloha u_s je určena parazitním elektrickým polem \mathbf{E}_{ex} takto:

$$u_s = \frac{Q}{m\omega_u^2} \mathbf{E}_{\text{ex}} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \quad (1.25)$$

kde $\hat{\mathbf{u}}$ je jednotkový vektor ve směru příslušné prostorové osy a je dobré zdůraznit, že Q označuje náboj částice. Význam vychýlení minima sekulárního potenciálu u_s je ukázán graficky na obr. 1.7.



(a) Trajektorie iontu při významném odchýlení minima sekulárního potenciálu a uzlového bodu RF elektrického pole. V tomto případě i relativně dobře zchlazený iont vykonává významný mikropohyb.

(b) Trajektorie iontu v případě splývajícího minima sekulárního potenciálu a uzlového bodu RF elektrického pole.

Obrázek 1.7: Srovnání míry mikropohybu v případě vychýlení (a) a nevychýlení (b) uzlu RF elektrického pole a minima sekulárního potenciálu. Jde o vykreslení přibližného řešení pohybové rovnice tvaru (1.24). Míra zchlazení iontů je na obou obrázcích stejná.

V případě významné odchylky minima sekulárního potenciálu a uzlového bodu RF elektrického pole je iont nucen vykonávat mikropohyb s relativně velkou amplitudou i přes to, že je maximálně zchlazen. Jedná se o tzv. *excess* mikropohyb [7]. Tento efekt má velmi nepříznivý vliv na proces chlazení iontu. V praxi se využívá tzv. *kompensačních* elektrod, které vytváří statické pole, které je schopno dodatečně posouvat minimum

1.2. Paulova RF lineární kvadrupólová past

sekulárního potenciálu a tím minimalizovat *excess* mikropohyb. Jinak řečeno, nastavením kompenzačních elektrod je možno „posouvat“ chlazeným iontem do místa, kde vykonává nejmenší mikropohyb.

Velmi podobný efekt může být způsoben také rozdílem fází potenciálů na RF elektrodách. V případě fázového rozdílu mezi protějšími elektrodami lze zapsat potenciál na jedné z radiálních elektrod ve tvaru $V_{\text{rf}} \cos(\Omega t + 1/2\varphi_{\text{rf}})$, kde φ_{rf} označuje fázový rozdíl buzení elektrod. Pro malý fázový rozdíl lze potenciál na této elektrodě napsat jako $V_{\text{rf}} \cos(\Omega t) - 1/2V_{\text{rf}}\varphi_{\text{rf}} \sin(\Omega t)$. Podobně lze zapsat potenciál na protější elektrodě. Ve výsledném potenciálu tedy přibude člen oscilující jako $\sin(\Omega t)$, který se projeví i ve výsledném řešení trajektorie částice, viz [7]. Tento oscilující člen odpovídá mikropohybu, nezávisí na poloze částice a je vykonáván jen ve směru spojnice mezi uvažovanými protějšími elektrodami.

1.3 Použité numerické metody

Zde jsou popsány hlavní myšlenky a principy numerických metod využívaných při simulaci řešené RF pasti. Numerické simulace byly prováděny s využitím programového prostředí COMSOL Multiphysics® (dále jen COMSOL). Níže jsou uvedeny základní postupy výpočtu a metod, které jsou v rámci tohoto softwaru využívány.

Hlavním cílem této práce je numericky modelovat pohyb iontu v Paulově lineární pasti nacházející se na ÚPT. Konstrukci pasti na ÚPT je možno vidět na obr. 1.4. Problém výpočtu pohybu zachyceného iontu se rozpadá na dvě části. Nejdříve je třeba nalézt řešení pro elektrostatický potenciál v oblasti, kde se zachycený iont pohybuje. Ve druhé části se již může přistoupit přímo k řešení pohybových rovnic iontu v zadaném poli.

V rámci kvazistatické aproximace jsou řešeny rovnice pro elektrostatický problém, což zahrnuje řešení Laplaceovy rovnice $\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = 0$ v prostoru pasti. Jedná se o řešení parciální diferenciální rovnice druhého řádu s Dirichletovými a Neumannovými okrajovými podmínkami. Dirichletovy okrajové podmínky jsou dány elektrodami, které jsou drženy na zadaných potenciálech nebo např. rovinami antisymetrie problému. Neumannovy okrajové podmínky mohou být určeny např. symetrií pole nebo geometrie. Pro nalezení numerického řešení pro potenciál (v rámci COMSOLu) v oblasti středu pasti je využita metoda konečných prvků, jejíž základní princip je popsán v této podkapitole.

Pohybové rovnice nabitě částice v elektrickém poli jsou formulovány pomocí Hamiltonova formalismu. Hamiltonovy pohybové rovnice mají tvar

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad (1.26)$$

kde \mathbf{p} je vektor hybnosti částice, \mathbf{r} označuje polohový vektor částice a H je Hamiltonova funkce částice. Pro jednu částici dávají rovnice (1.26) soustavu šesti diferenciálních rovnic prvního řádu. Řešení této soustavy dává časový vývoj polohy a hybnosti částice, tedy $\mathbf{r}(t)$ a $\mathbf{p}(t)$. Hamiltonova funkce pro částici ve kvazistatickém elektrickém poli má tvar $H(t, \mathbf{r}) = (\mathbf{p})^2/2m + q\Phi(t, \mathbf{r})$, kde potenciál $\Phi(t, \mathbf{r})$ je již znám z první části řešení.

Metoda konečných prvků

Metoda konečných prvků (dále jen MKP) je numerická metoda vhodná k řešení parciálních diferenciálních rovnic s okrajovými podmínkami na určité oblasti. Její rozšíření proběhlo souběžně s rozšířením výpočetní techniky ke konci padesátých let. V dnešní době se MKP stala často používanou výpočetní metodou nejen přírodovědeckých, ale i inženýrských problémů. MKP je velmi obsáhlá disciplína, proto zde jsou uvedeny jen základní využívané postupy s ohledem na aplikaci v této práci.

Řešení parciálních diferenciálních rovnic pomocí MKP je založeno na nalezení přibližného řešení okrajového problému. Oblast, ve které je problém řešen, je rozdělena na konečný počet geometricky jednodušších podoblastí. Tyto podoblasti jsou tzv. *konečné prvky*. Procesu rozdělení celkové oblasti na konečné prvky se říká *diskretizace*. Na konečných prvcích se hledá přibližné řešení pomocí lineární kombinace tzv. *tvarových funkcí*.

1.3. Použité numerické metody

Jako tvarové funkce jsou voleny polynomy nepříliš vysokých stupňů. Celý problém řešení diferenciální rovnice je převeden na řešení soustavy lineárních rovnic, kde hledané koeficienty určují lineární kombinaci tvarových funkcí a zároveň hodnoty hledané funkce v uzlových bodech. Matice této soustavy je řídká.

K řešení řídké soustavy rovnic je vhodná a využívaná metoda konjugovaných gradientů. Pro 3D problémy jde o řešení statisíců až milionů rovnic.

Z hlediska přesnosti numerického řešení je výhodnější volit hustější diskretizaci při zachování nízkého stupně tvarových funkcí. V případě programového prostředí COM-SOL jsou v základním nastavení používány tvarové funkce druhého řádu.

Velkou výhodou MKP je, že hustota diskretizace může být při vhodném tvaru prvků v různých částech oblasti, na které je problém řešen, různá. Takovým tvarem je např. čtyřstěn. Tam, kde je třeba přesného řešení a nebo je zde očekávána prudká změna hledané funkce je vhodné volit hustější síť než v méně zajímavých⁷ místech. To umožňuje ekonomičtěji nakládat s dostupnou výpočetní kapacitou. V této podkapitole bylo čerpáno z [5, 8, 9, 10].

⁷Samozřejmě, že zajímavé jevy mohou nastávat i v oblastech, kde se hledané řešení prudce nemění.

2. Numerická simulace

V této kapitole je popsána numerická simulace potenciálu a pohybu iontu vápníku v Paulově lineární pasti nacházející se v ÚPT v Brně. Jsou zde uvedeny kroky při tvorbě numerického modelu a popsány důležité parametry nastavení výpočtu. V celé kapitole je kladen důraz na srovnání mezi symetrickým a asymetrickým buzením pasti (viz obr. 1.5).

Výsledky simulace jsou srovnány s teoretickými poznatky, které jsou uvedeny v kapitole 1. Také je uvedena vypočtená závislost sekulárních pohybových frekvencí iontu vápníku na hodnotách potenciálu v pasti. Pomocí této závislosti jsou určeny geometrické parametry charakterizující kvadrupólový potenciál pasti (teoretický popis lze najít v podkapitole 1.2.5).

V rámci analýzy výsledků je provedeno srovnání mezi symetrickým a asymetrickým buzením radiálních elektrod pasti z hlediska mikropohybu v axiálním směru.

2.1 Použitý software pro simulace

K numerické simulaci byl použit software COMSOL Multiphysics[®] verze 4.2a. Jedná se o velmi komplexní nástroj pro modelování inženýrských a přírodovědných problémů. COMSOL je schopen řešit mnoho různých druhů parciálních i obyčejných diferenciálních rovnic.

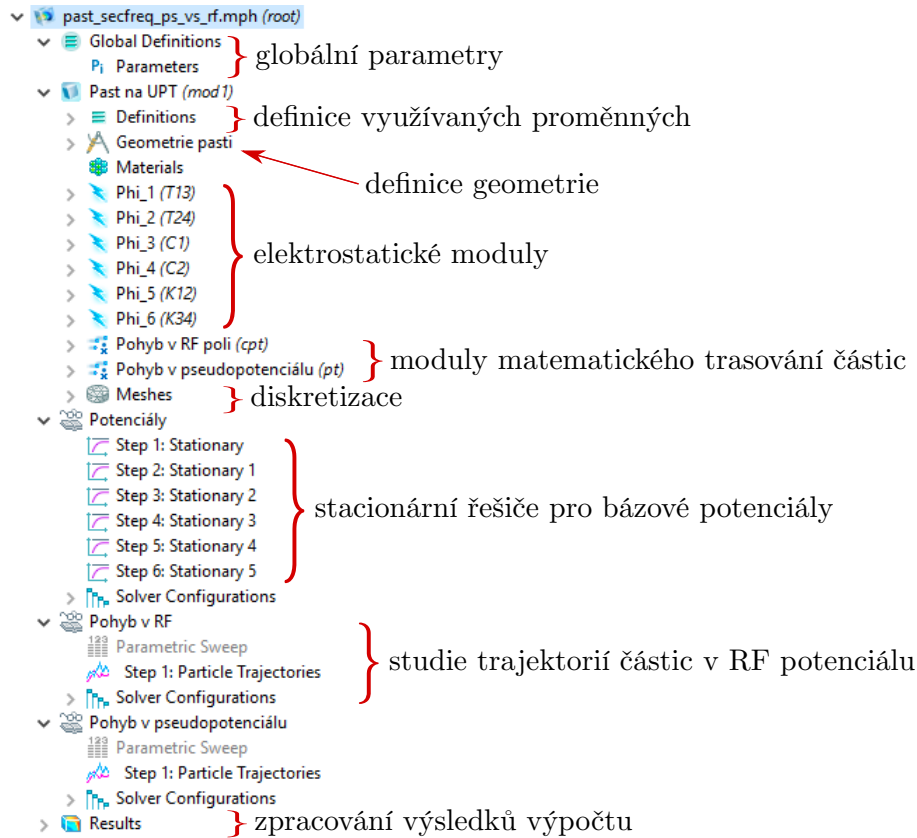
Uživatel může využívat tzv. *moduly*, kde je již přednastaveno uživatelské rozhraní, které zjednodušuje nastavení fyzikálních vlastností při řešení vybraných problémů. V modulech jsou přednastaveny řešené rovnice.

COMSOL využívá k řešení diferenciálních rovnic MKP, viz podkapitolu 1.3. Základní kostra numerického výpočtu se skládá z definice geometrie oblasti, na které je řešení hledáno. Poté je třeba definovat řešené rovnice a podmínky. K tomuto kroku je vhodné využít některé z dostupných fyzikálních modulů. Tvorba modelu je zakončena diskretizací oblasti.

Parametry numerického řešení jsou nastavovány v rámci tzv. *řešiče*. V rámci řešiče je možno definovat použité numerické metody. Lze zde také nastavovat požadovanou přesnost a jiné. V poslední fázi přichází na řadu zpracování výsledků. Jedná se o vykreslení požadovaných závislostí, výpočet dalších odvozených veličin a další zpracování vypočtených veličin. [11]

2.2 Numerický model potenciálu pasti

V této podkapitole je popsáno nastavení a realizace numerického výpočtu potenciálu v pasti. Jedná se o definici použitých parametrů, vytvoření geometrie pasti, nastavení okrajových podmínek a diskretizace. Následně jsou ukázány výsledky výpočtu. Výpočtený potenciál je využit při řešení Hamiltonových rovnic pro iont $^{40}\text{Ca}^+$, což je popsáno v následující podkapitole 2.3. Stromová struktura celého vytvořeného modelu v COMSOLu je zobrazena na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Stromová struktura vytvoření numerického výpočtu potenciálu a trajektorií iontu $^{40}\text{Ca}^+$ v Paulově lineární pasti použité v ÚPT.

2.2.1 Vytvoření modelu pasti

Základní myšlenka výpočtu potenciálu je konstruovat celkový potenciál v pasti pro libovolné nastavení potenciálů na elektrodách pomocí *bázových* potenciálů. Bázové potenciály $\Phi_k(\mathbf{r})$ odpovídají řešení Laplaceovy rovnice pro jednotkové potenciály na elektrodách určených indexem k a nulové potenciály na zbylých elektrodách, viz obr. 2.7. Celkový časově proměnný průběh potenciálu je dán lineární kombinací potenciálů $\Phi_k(\mathbf{r})$, tedy

$$\Phi(t, \mathbf{r}) = \sum_{k=1}^6 V_k(t) \Phi_k(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

kde hodnota $V_k(t)$ odpovídá potenciálu na elektrodách, které jsou určeny indexem k .¹

¹Koeficient V_k je bezrozměrný, rozměr potenciálu mají bázové potenciály $\Phi_k(\mathbf{r})$.

Celkový počet báзовých funkcí $\Phi_k(\mathbf{r})$ je v případě modelu pasti šest. Dvě funkce odpovídají radiálním, dvě axiálním a dvě kompenzačním elektrodám.² Indexování elektrod je možno vidět na obr. 2.2 a obr. 2.3.

Výhodou tohoto postupu je, že při změně potenciálů na elektrodách není třeba přepočítávat potenciály $\Phi_k(\mathbf{r})$, ale stačí jen změnit koeficienty V_k , které jsou definovány v rámci globálních parametrů. Ke konstrukci libovolného možného potenciálu v pasti tedy stačí znát báзовé potenciály $\Phi_k(\mathbf{r})$.

Vytvoření modelu je popisováno sledováním stromové struktury, kterou je možno vidět na obr. 2.1. Nejdříve se zde nachází definice globálních parametrů. Globální parametry jsou využívány v celém modelu výpočtu potenciálu i trajektorií. Jedná se o nastavení frekvence buzení radiálních elektrod, hmotnosti a náboje zachycené částice, pomocných veličin, počátečních rychlostí částice a také potenciálů na elektrodách pasti. Vybrané parametry jsou v tab. 2.1.

označení	hodnota	význam
Ω	$2\pi \times 30,171$ MHz	frekvence buzení pasti
T	$3,3144 \times 10^{-8}$ s	perioda buzení pasti
m	$6,6422 \times 10^{-26}$ kg	hmotnost iontu $^{40}\text{Ca}^+$
q	$1,6022 \times 10^{-19}$ C	náboj iontu $^{40}\text{Ca}^+$

Tabulka 2.1: Vybrané hodnoty globálních parametrů. Tyto hodnoty jsou pro všechny výpočty neměnné, odpovídají hodnotám pro Paulovu lineární past v laboratoři ÚPT.

Následuje vytvoření samotného modelu, což zahrnuje nejprve pomocné definice využívaných proměnných, názvů domén a hranic. V rámci nastavení využívaných proměnných je definována Hamiltonova funkce částice v prostoru pasti. Popis definice Hamiltonových funkcí iontu vápníku v pasti je uveden v následující podkapitole 2.3.

Poté přichází na řadu definice geometrie elektrod pasti a oblasti výpočtu. V modelu je využit výřez elektrod v okolí středu pasti o průměru 23,5 mm. Geometrie tohoto výřezu již přímo v COMSOLu byla převzata z dřívější práce, kterou vypracoval Mgr. Martin Oral, Ph.D. Rozměry elektrod pasti, dle konstrukčního modelu, lze vidět na obr. 2.2 a 2.3. Modelovaný výřez geometrie je v těchto řezech naznačen červenou čarou. Geometrie elektrod vytvořená pro výpočet v COMSOLu je mírně zjednodušená, viz obr. 2.4.

Geometrie elektrod je vložena do cylindrické oblasti o průměru 25 mm a výšce 17 mm. Řešení je hledáno pouze v prostoru, který odpovídá rozdílu tohoto válce a geometrie elektrod pasti³, jak je patrné z obr. 2.7.

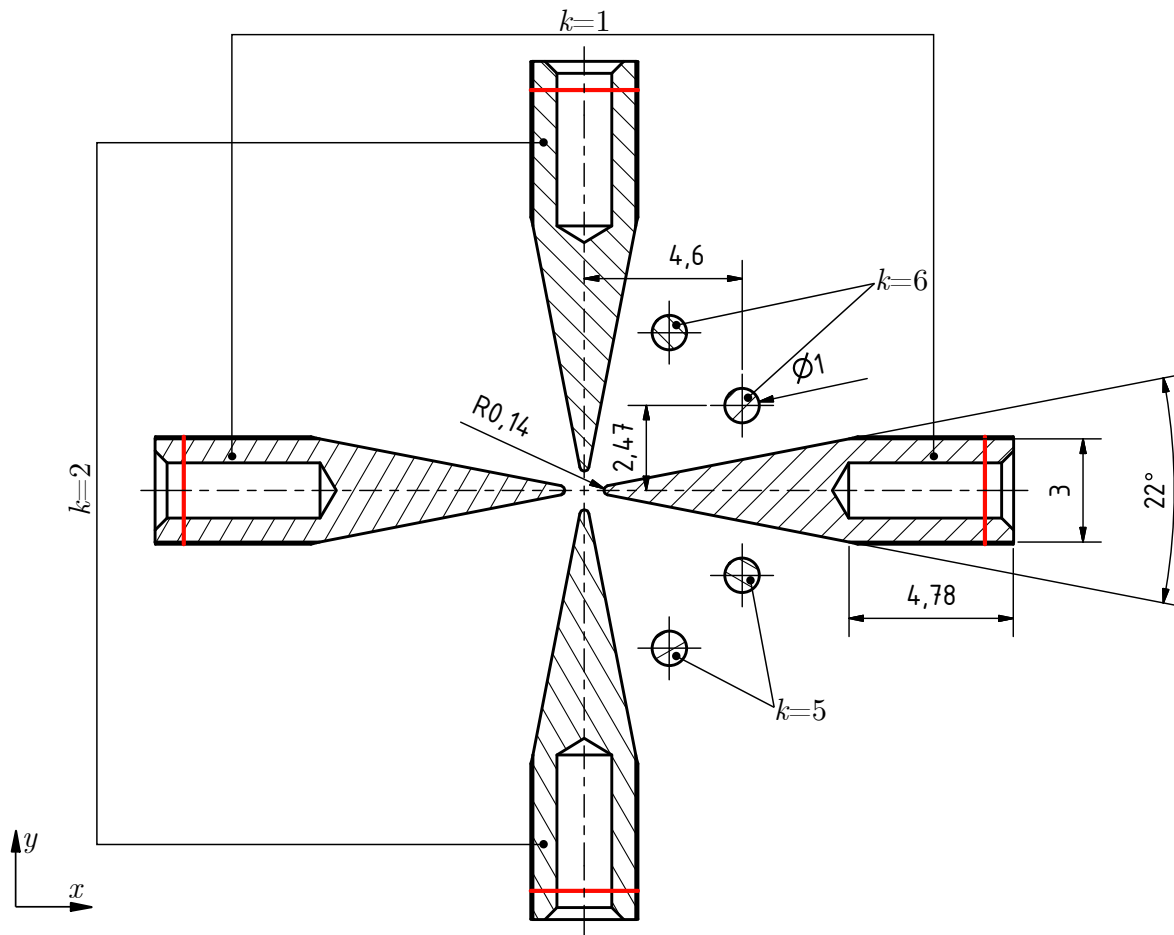
Jediná materiálová konstanta vstupující do výpočtu je permitivita, která je nastavena přímo v elektrostatickém modulu. Z tohoto důvodu není třeba přidávat jakýkoli materiál.

Nyní je možno přistoupit k definici řešených fyzikálních rovnic. K tomuto účelu byl využit modul AC/DC. V rámci tohoto modulu lze nalézt elektrostatický modul.

²Zmínku o kompenzačních elektrodách lze najít v podkapitole 1.2.6.

³Což odpovídá volnému prostoru mezi elektrodami.

2.2. Numerický model potenciálu pasti



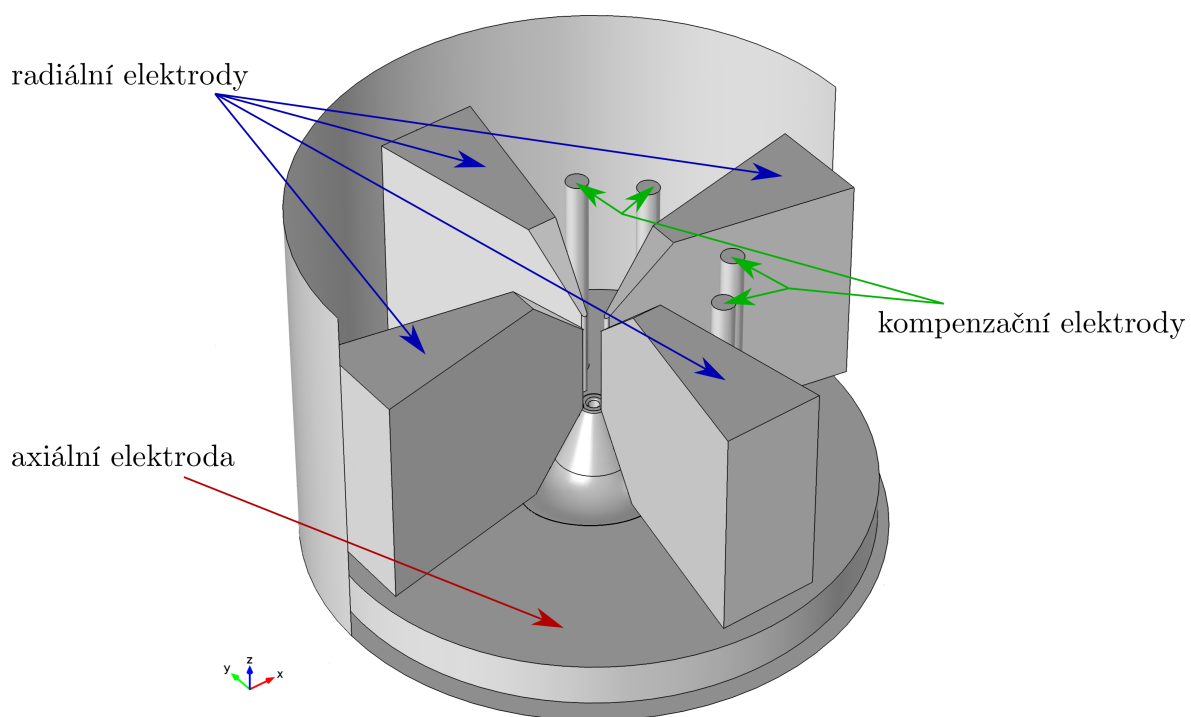
Obrázek 2.2: Řez konstrukčním návrhem pasti používané v ÚPT v rovině xy . Na schématu jsou vidět čtyři radiální a dvě kompenzační elektrody. Indexy k odpovídající bázovým potenciálům $\Phi_k(\mathbf{r})$ jsou voleny s ohledem na to, že oba páry protějších radiálních elektrod jsou vždy na stejném potenciálu (lze vidět na obr. 1.4). Totéž platí pro obě vedlejší kompenzační elektrody. Červenou čarou je naznačena hranice výřezu geometrie pro model v COMSOLu.

Hledaná veličina elektrostatického modulu je elektrostatický potenciál. V tomto modulu jsou přednastaveny rovnice pro elektrostatické pole. V případě částice v pasti jde o Laplaceovu rovnici. Pomocí elektrostatického modulu byly definovány potenciály na hraničních plochách elektrod. Byla nastavena jednotková relativní permitivita v oblasti mezi elektrodami pasti.

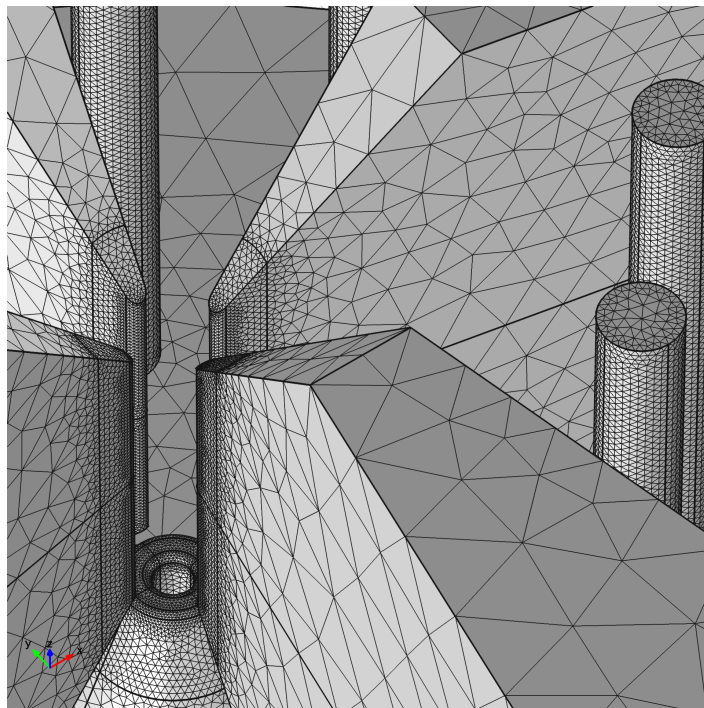
Výstupem jednoho elektrostatického modulu je potenciál pro konkrétně definované potenciály na elektrodách. S ohledem na výše uvedený princip využití bázových potenciálů $\Phi_k(\mathbf{r})$ bylo použito šesti elektrostatických modulů. V každém z těchto elektrostatických modulů byl nastaven jednotkový potenciál na elektrody odpovídající výslednému bázovému potenciálu a nulový potenciál na zbývající elektrody. Na vnější hranici válce ohraničující celý model byla aplikována Neumanova okrajová podmínka, která zajišťovala kolmost ekvipotenciál k této vnější hranici modelu. Pole v okolí hranice modelu se díky této podmínce chová reálněji a zároveň řešená soustava lépe konverguje.

Využití symetrie problému při výpočtu potenciálů bohužel možné nebylo. Definice Hamiltoniánu zadávaného do pohybových rovnic vyžadovala kompletní řešení potenciálů v celé oblasti pasti.

2.2. Numerický model potenciálu pasti



Obrázek 2.4: Trojrozměrný model geometrie pasti v ÚPT použitý pro numerický výpočet. Pro přehlednost zde není zobrazena druhá axiální elektroda. Schéma skutečné konstrukční geometrie lze pak vidět na obr. 2.2 a 2.3.



Obrázek 2.5: Detail diskretizace středu pasti a kompenzačních elektrod. V okolí středu pasti je patrná silnější čára, která ohraničuje oblast jemnější diskretizace.

2.2.2 Výpočet a výsledné potenciály

Po nastavení parametrů, geometrie a okrajových podmínek hledaných řešení $\Phi_k(\mathbf{r})$ je již možno přistoupit k nastavení a provedení výpočtu. Výpočet potenciálů byl proveden v rámci jedné tzv. *studie*.

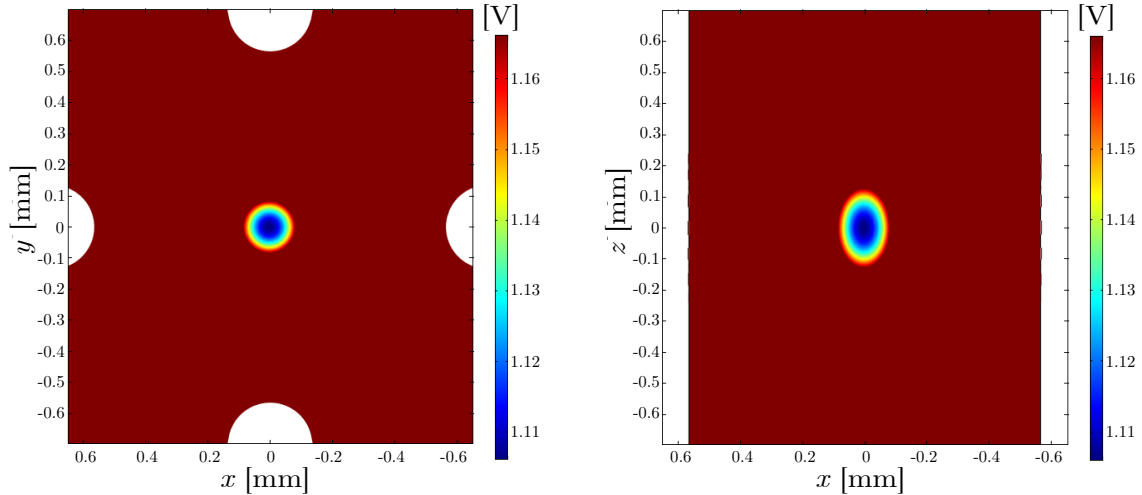
V rámci studie je možno definovat několik kroků výpočtu. Každý krok využívá požadovaný typ řešiče a používá požadovaný fyzikální modul. Byla tedy vytvořena studie, která obsahovala šest tzv. *stacionárních* řešičů. Výstupem každého řešiče byl jeden potenciál $\Phi_k(\mathbf{r})$. Výhodou tohoto nastavení je, že všechny báze potenciály jsou vypočítány v rámci jedné studie, což zahrnuje jedině spuštění výpočtu.

Relativní tolerance výpočtu potenciálu byla nastavena na hodnotu 10^{-8} . Ostatní nastavení stacionárních řešičů pro jednotlivé potenciály $\Phi_k(\mathbf{r})$ byly ponechány na výchozích hodnotách. Počet neznámých uzlových potenciálů byl pro každý potenciál $\Phi_k(\mathbf{r})$ roven 1 464 400.

Přesnost řešení byla ověřena porovnáním s výpočtem za použití jemnější diskretizace, kde počet uzlových bodů byl 2 885 528. Relativní nejistota potenciálu v okolí středu pasti byla tímto způsobem odhadnuta řádově na 10^{-5} .

Dle zavedeného označení lze vidět tvar potenciálu $\Phi_1(\mathbf{r})$ (resp. $\Phi_2(\mathbf{r})$) v rovině xy na obr. 2.7a (resp. obr. 2.7b). Potenciál $\Phi_3(\mathbf{r})$ odpovídající jedné z axiálních elektrod na jednotkovém potenciálu lze vidět na obr. 2.7c. Na obr. 2.7d je zobrazen tvar potenciálu $\Phi_5(\mathbf{r})$, který přísluší jednomu páru kompenzačních elektrod. Potenciál $\Phi_4(\mathbf{r})$ (resp. $\Phi_6(\mathbf{r})$) má vzhledem k symetrii stejný tvar jako $\Phi_3(\mathbf{r})$ (resp. $\Phi_5(\mathbf{r})$).

Na obr. 2.6 je ukázka průběhu sekulárního potenciálu dle vztahu (1.16) pro iont $^{40}\text{Ca}^+$ a běžné nastavení potenciálů v pasti.

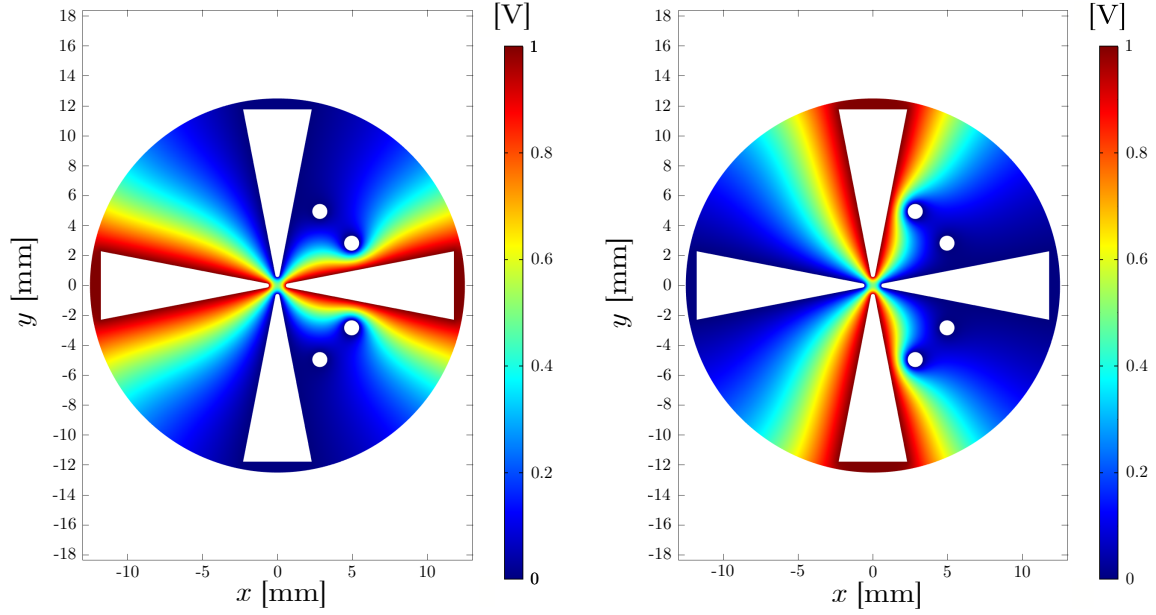


(a) Pohled na minimum v rovině xy .

(b) Pohled na minimum v rovině xz .

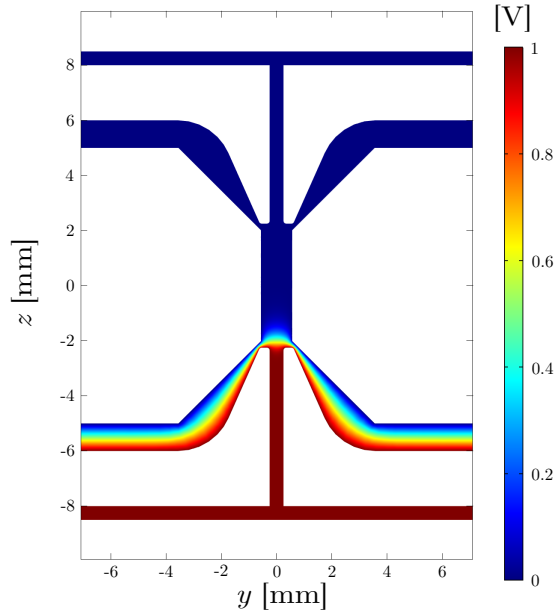
Obrázek 2.6: Sekulární potenciál v okolí středu pasti. Nastavení potenciálů odpovídá asymetrickému buzení, $V_{\text{rf}} = 300 \text{ V}$, $U_{\text{dc}} = 300 \text{ V}$. V barevném rozsahu je vykreslena hloubka $0,06 \text{ V}$. V barevném rozsahu je tedy vidět oblast, ve které je zachycen iont $^{40}\text{Ca}^+$ o tepelné energii odpovídající 60 meV . Této energii pro jeden stupeň volnosti odpovídá teplota přibližně 1400 K . Srovnatelnou energii mají odpařené ionty vápníku, které nalétávají do pasti v laboratoři ÚPT. Rozměry oblasti zachycení jsou přibližně $170 \times 170 \times 260 \mu\text{m}^3$. Sekulární potenciál pro symetrické buzení pasti pro $V_{\text{rf}} = 150 \text{ V}$, $U_{\text{dc}} = 300 \text{ V}$ má stejný průběh.

2.3. Numerická integrace pohybové rovnice

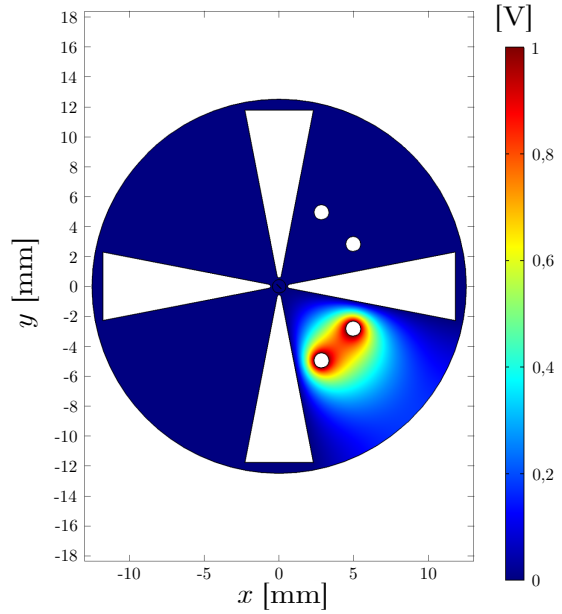


(a) Potenciál $\Phi_1(\mathbf{r})$ v rovině xy .

(b) Potenciál $\Phi_2(\mathbf{r})$ v rovině xy .



(c) Potenciál $\Phi_3(\mathbf{r})$ v rovině yz . Tvar potenciálu $\Phi_4(\mathbf{r})$ je rovinně symetrický vzhledem k rovině xy .



(d) Potenciál $\Phi_5(\mathbf{r})$ v rovině xy . Tvar potenciálu $\Phi_6(\mathbf{r})$ je rovinně symetrický vzhledem k rovině xz .

Obrázek 2.7: Tvary numericky vypočtených bazových potenciálů.

2.3 Numerická integrace pohybové rovnice

Trajektorie zachyceného iontu $^{40}\text{Ca}^+$ v prostoru pasti byly počítány pomocí Hamiltonových pohybových rovnic (1.26). Níže je popsáno nastavení výpočtu trajektorií s využitím PA i v RF oscilujícím potenciálu.

Pomocí výpočtu trajektorií v PA byla zjištěna závislost sekulárních frekvencí iontu na nastavení potenciálů pasti (viz podkapitulu 2.4.1). S využitím výpočtu trajektorií iontu v RF oscilujícím potenciálu byl ověřen vztah pro mikropohyb, který je dle PA

dán rovnicí (1.12), což je uvedeno v podkapitole 2.4.2.

2.3.1 Nastavení výpočtu a definice Hamiltonovy funkce

K výpočtu trajektorií byl v rámci programového prostředí COMSOL využit modul matematického trasování částic. V rámci tohoto modulu byly řešeny Hamiltonovy pohybové rovnice. V prvním (resp. druhém) modulu matematického trasování (viz obr. 2.1) byl nastaven Hamiltonián pro částici v RF potenciálu (resp. sekulárním potenciálu). V nastavení obou modulů byl zadáván náboj a hmotnost částice odpovídající iontu $^{40}\text{Ca}^+$ (viz tab. 2.1). V tomto nastavení byly také nastavovány počáteční polohy a rychlosti iontu.

Jak je již výše zmíněno, Hamiltonovy funkce pro PA a RF potenciál byly definovány v rámci proměnných (definice využívaných proměnných na obr. 2.1). Hamiltonián pro iont v RF potenciálu byl definován jako

$$H(t, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q[\Phi_{\text{dc}}(\mathbf{r}) + \Phi_{\text{rf}}(t, \mathbf{r})], \quad (2.2)$$

přičemž $\Phi_{\text{dc}}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^6 U_{\text{dc}}^{(k)} \Phi_k(\mathbf{r})$, kde $U_{\text{dc}}^{(k)}$ jsou nastavené statické potenciály na elektrodách odpovídajících indexům k , a $\Phi_{\text{rf}}(t, \mathbf{r}) = \cos(\Omega t) \sum_{k=1}^6 V_{\text{rf}}^{(k)} \Phi_k(\mathbf{r})$. Koeficienty $V_{\text{rf}}^{(k)}$ odpovídají amplitudám RF potenciálu na elektrodách. Součet těchto dvou potenciálů koresponduje podle vztahu (2.1) s celkovým časově proměnným potenciálem v pasti.

Hamiltonián odpovídající pohybu iontu v PA byl definován analogicky, tedy

$$H(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q[\Phi_{\text{dc}}(\mathbf{r}) + \Phi_{\text{PS}}(\mathbf{r})], \quad (2.3)$$

kde $\Phi_{\text{PS}}(\mathbf{r})$ odpovídá pseudopotenciálu, který je definován vztahem (1.17). Amplituda RF elektrického pole byla vyjádřena jako $\mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^6 V_{\text{rf}}^{(k)} [-\nabla \Phi_k(\mathbf{r})]$.

Hodnoty parametrů určujících potenciál v pasti používané při výpočtech jsou vidět v tab. 2.2. Potenciál symetrického buzení je dán nastavením hodnot $V_{\text{rf}}^{(1)} = -V_{\text{rf}}^{(2)}$. U asymetrického buzení platí, že $V_{\text{rf}}^{(1)} = 0$.

2.3.2 Nastavení řešiče

Výpočet trajektorií byl nastavován za pomoci řešičů trajektorií částic, kde byl definován časový interval, ve kterém bylo řešení hledáno. Absolutní tolerance řešení byla nastavována na 10^{-10} v příslušných jednotkách. Ostatní parametry řešiče byly opět ponechány na výchozích hodnotách. Nejistota určení sekulárních frekvencí byla odhadnuta pomocí srovnání výsledků vypočtených pro zhuštěnou diskretizaci (viz podkapitolu 2.2.2). Tato nejistota byla odhadnuta na 2 kHz, což odpovídá nejistotě pod 1 %.

2.4 Analýza výsledků

Tato podkapitola obsahuje rozbor hlavních výsledků provedených numerických výpočtů. Je zde uvedena vypočtená závislost sekulárních pohybových frekvencí iontu na

2.4. Analýza výsledků

k	$U_{\text{dc}}^{(k)}$	$V_{\text{rf}}^{(k)}$	k	$U_{\text{dc}}^{(k)}$	$V_{\text{rf}}^{(k)}$
1	0	0	1	0	$-V_{\text{rf}}$
2	0	V_{rf}	2	0	V_{rf}
3	U_{dc}	0	3	U_{dc}	0
4	U_{dc}	0	4	U_{dc}	0
5	U_{komp}	0	5	U_{komp}	0
6	U_{komp}	0	6	U_{komp}	0

(a) Parametry odpovídající asymetrickému buzení. (b) Parametry odpovídající symetrickému buzení.

Tabulka 2.2: Používané nastavení potenciálů na elektrodách pro (a) asymetrické a (b) symetrické buzení pasti. Hodnoty U_{dc} a V_{rf} mají význam odpovídající vztahům (1.5) a (1.6), hodnoty $U_{\text{dc}}^{(k)}$ a $V_{\text{rf}}^{(k)}$ odpovídají koeficientům lineární kombinace (2.1). Hodnota potenciálů na kompenzačních elektrodách U_{komp} byla vždy volena tak, aby iont byl zachycen v požadované poloze.

nastavení potenciálů pasti. Dále se tato podkapitola věnuje srovnání symetrického a asymetrického buzení pasti z hlediska mikropohybu v axiálním směru, což patří mezi hlavní cíle práce. Nakonec je zde srovnána trajektorie zachyceného iontu vypočtená pomocí PA s trajektorií iontu v RF oscilujícím potenciálu a teoretický kvadrupólový tvar potenciálu s numericky určeným potenciálem pasti.

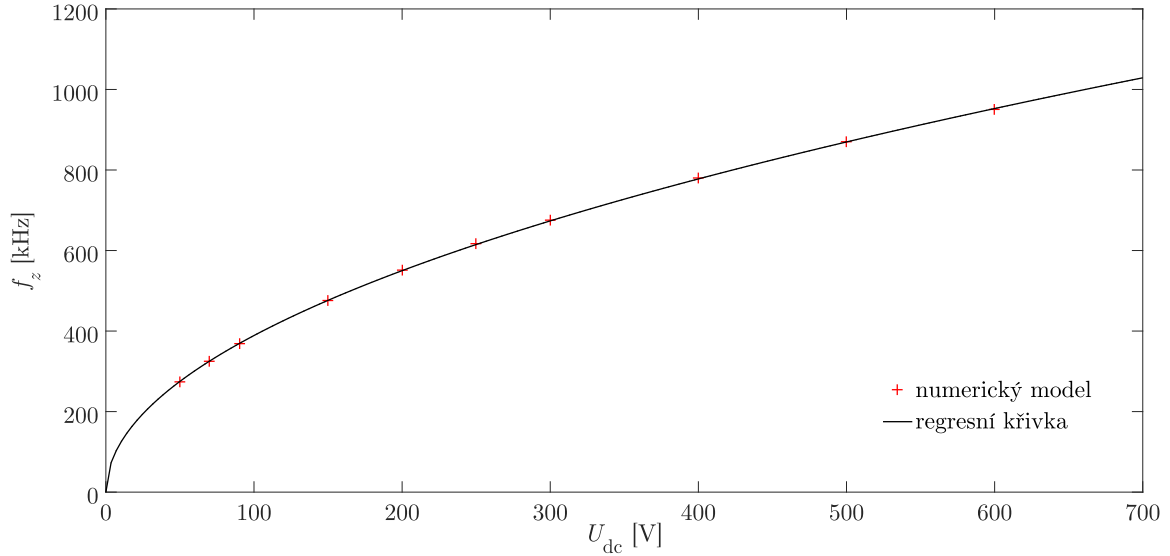
2.4.1 Sekulární frekvence a charakteristika potenciálu pasti

V rámci výpočtu byly určeny závislosti sekulárních pohybových frekvencí iontu na potenciálech elektrod pasti. Sekulární frekvence byly určovány pomocí výpočtu v PA. Počáteční rychlost iontu byla nastavována přibližně na 30 m s^{-1} , což odpovídá energii⁴ $250 \mu\text{eV}$. Iont je pro tuto energii zachycen v dostatečně blízkém okolí středu pasti.

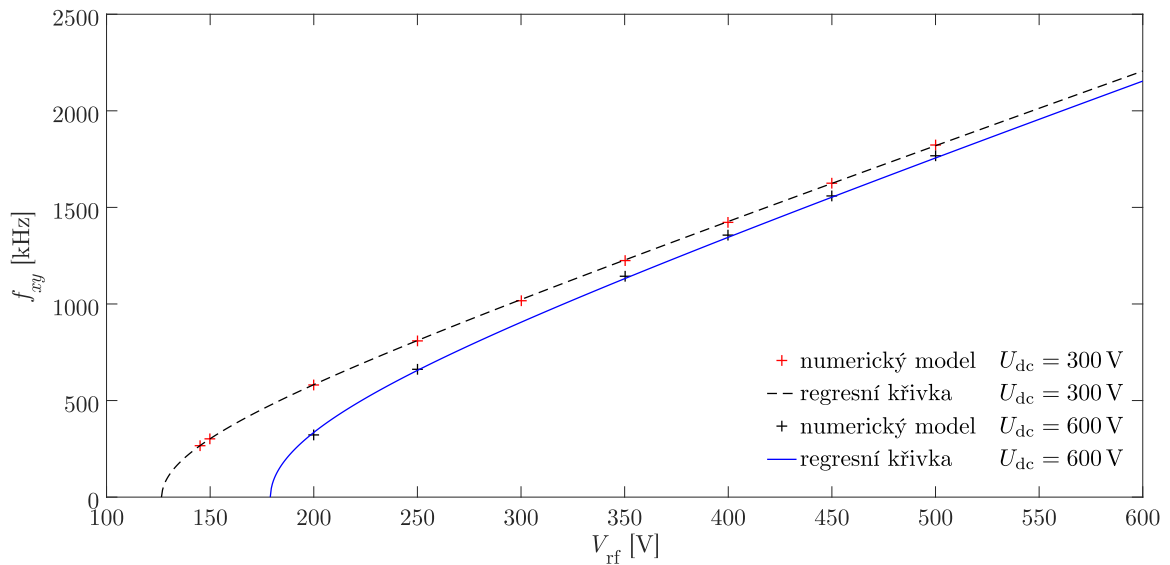
Reálné rozměry r_0 a z_0 ve vztazích pro sekulární frekvence (1.21), (1.22) a pro kvadrupólové potenciály (1.5), (1.6) byly nahrazeny hledanými modifikovanými rozměry r'_0 a z'_0 . Pomocí proložení vypočtené závislosti $f_z^{(\text{asym})}(U_{\text{dc}})$ teoretickým vztahem (1.22) byl určen parametr z'_0 . Parametr r'_0 byl určen proložением vypočtené závislosti $f_{xy}^{(\text{asym})}(V_{\text{rf}}, U_{\text{dc}})$, přičemž bylo využito znalosti z'_0 z předchozího výpočtu.

Numericky určené závislosti i s proložением lze vidět na obr. 2.8. Vypočtené hodnoty jsou $z'_0 = (8,99 \pm 0,02) \text{ mm}$ a $r'_0 = (0,6167 \pm 0,0005) \text{ mm}$. Nejistoty jsou převzaty z použitého algoritmu nelineární regrese v prostředí MATLAB. Jedná se o funkce `nlinfit` a `nlparci`. Dle dokumentace k prostředí MATLAB jde o odhad na hladině věrohodnosti odpovídající 95 % [12]. [13]

⁴Tato energie přísluší řádově 10^5 násobku energie základního stavu iontu ve kvadratickém potenciálu, pohyb iontu tedy lze popisovat klasicky.



(a) Vypočtená závislost $f_z^{(\text{asym})}(U_{dc})$ pro axiální směr a asymetrické buzení pasti. Proložení vypočtených hodnot byla určena hodnota z'_0 . Závislost odpovídající symetrickému buzení pasti má teoreticky dle vztahu (1.22) stejný průběh.



(b) Numericky určená závislost $f_{xy}^{(\text{asym})}(V_{rf}, U_{dc} = 300 \text{ V})$ a $f_{xy}^{(\text{asym})}(V_{rf}, U_{dc} = 600 \text{ V})$ pro radiální směr a asymetrické buzení pasti. Proložení závislosti $f_{xy}^{(\text{asym})}(V_{rf}, U_{dc} = 300 \text{ V})$ byla určena hodnota parametru r'_0 . Podle teoretických vztahů (1.21) a (1.22) má závislost $f_{xy}^{(\text{sym})}(V_{rf}, U_{dc})$ pro symetrické buzení pasti stejný tvar za předpokladu, že hodnoty V_{rf} jsou násobeny faktorem 1/2.

Obrázek 2.8: Numericky určené závislosti sekulárních frekvencí na potenciálech elektrod pasti. Regresní křivky odpovídají teoretickým vztahům (1.22).

2.4.2 Výpočet závislosti míry mikropohybu na axiální poloze iontu

Axiální poloha zachyceného iontu (poloha na ose z) je určena statickými potenciály na axiálních elektrodách $U_{\text{dc}}^{(3)}$ a $U_{\text{dc}}^{(4)}$. Numerický výpočet naznačuje, že poloha zachyceného iontu na ose z (ozn. z_{min}) je funkcí výhradně poměru $\alpha \equiv (U_{\text{dc}}^{(3)} - U_{\text{dc}}^{(4)}) / (U_{\text{dc}}^{(3)} + U_{\text{dc}}^{(4)})$. Axiální poloha zachyceného iontu z_{min} by tedy měla teoreticky být určena hodnotou parametru α , což lze experimentálně ověřit a případně i využít.⁵

Míru mikropohybu je možno experimentálně pozorovat s využitím laserové fluorescenční spektroskopie se zachyceným iontem [7]. V případě iontu vápníku se využívá laser o vlnové délce 729 nm a dochází tak k excitaci iontu na tzv. *zakázaném přechodu*, který má extrémně úzkou šířku čáry. Charakteristika mikropohybu je v tomto případě parametr $\beta = |\mathbf{k}_{729} \cdot \mathbf{v}_{\text{amp}}| / \Omega$, tedy průmět amplitudy vektoru rychlosti mikropohybu částice \mathbf{v}_{amp} do směru vlnového vektoru laseru \mathbf{k}_{729} [7]. Pro sestavu v ÚPT platí, že $\mathbf{k}_{729} \doteq (8,614\,805 \times 10^6 \hat{\mathbf{z}}) \text{m}^{-1}$, kde $\hat{\mathbf{z}}$ označuje jednotkový vektor ve směru osy z . Parametr β lze určit přímo numerickým řešením pohybových rovnic a nepřímo pomocí PA.

Nejprve proběhl přímý výpočet s využitím Hamiltoniánu dle vztahu (2.2). V rámci separace sekulárního pohybu a mikropohybu byla nastavována nulová počáteční rychlost částice a počáteční poloha co nejbližší minima sekulárního potenciálu. Toto nastavení počátečních podmínek se projeví téměř úplným odstraněním sekulárního pohybu ve výsledné trajektorii, tímto je možno jednodušeji odečítat amplitudu rychlosti mikropohybu.

Potenciály kompenzačních elektrod U_{komp} byly nastaveny tak, aby iont zachycený v poloze $z_{\text{min}} = 0$ vykonával co nejmenší mikropohyb. Tato hodnota U_{komp} nebyla v průběhu výpočtu měněna. Při změně parametru α , který určuje axiální polohu zachyceného iontu, nebylo pozorováno vychýlení minima sekulárního potenciálu v radiálním směru (tedy směrem od osy z). Pseudopotenciál ve výpočtu tedy nevykazoval výrazné nelineární chování. Tento výsledek se shodoval pro symetrické i asymetrické buzení pasti. Body závislosti míry mikropohybu β na axiální poloze iontu z_{min} pro asymetrické buzení určené přímým výpočtem trajektorií je možno vidět na obr. 2.9.

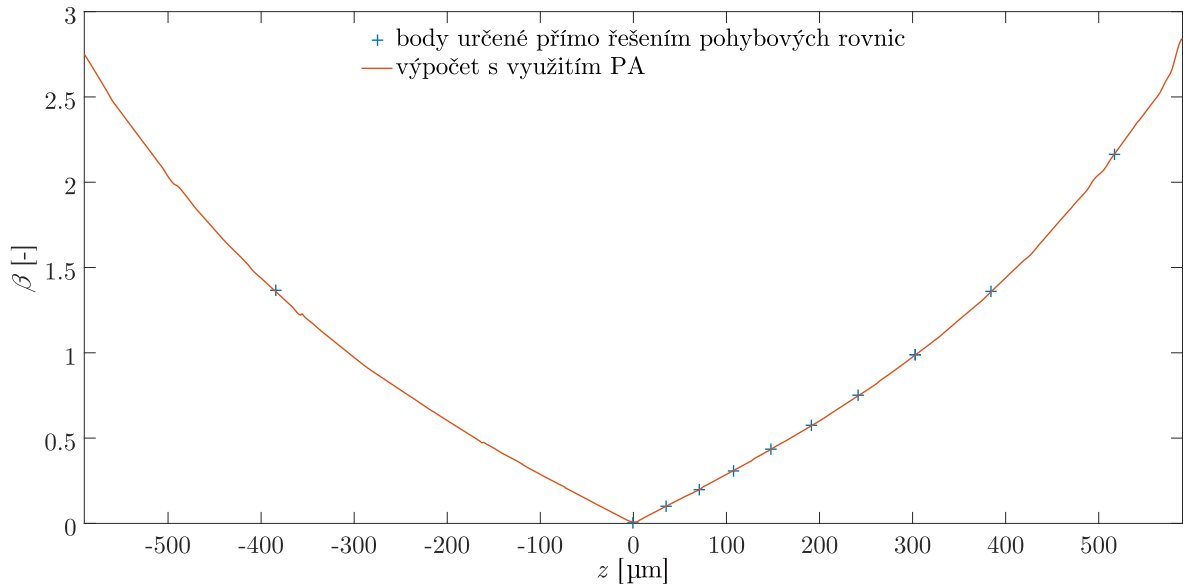
Amplitudu mikropohybu lze v PA vyjádřit vztahem (1.12). Pro odpovídající amplitudu rychlosti platí, že $\mathbf{v}_{\text{amp}} = q / (m\Omega) \mathbf{E}_{\text{rf}}$. Podle PA je tedy možno vyjádřit parametr β jako

$$\beta_{\text{PA}}(\mathbf{r}) = \frac{q}{m\Omega^2} |\mathbf{k}_{729} \cdot \mathbf{E}_{\text{rf}}(\mathbf{r})|. \quad (2.4)$$

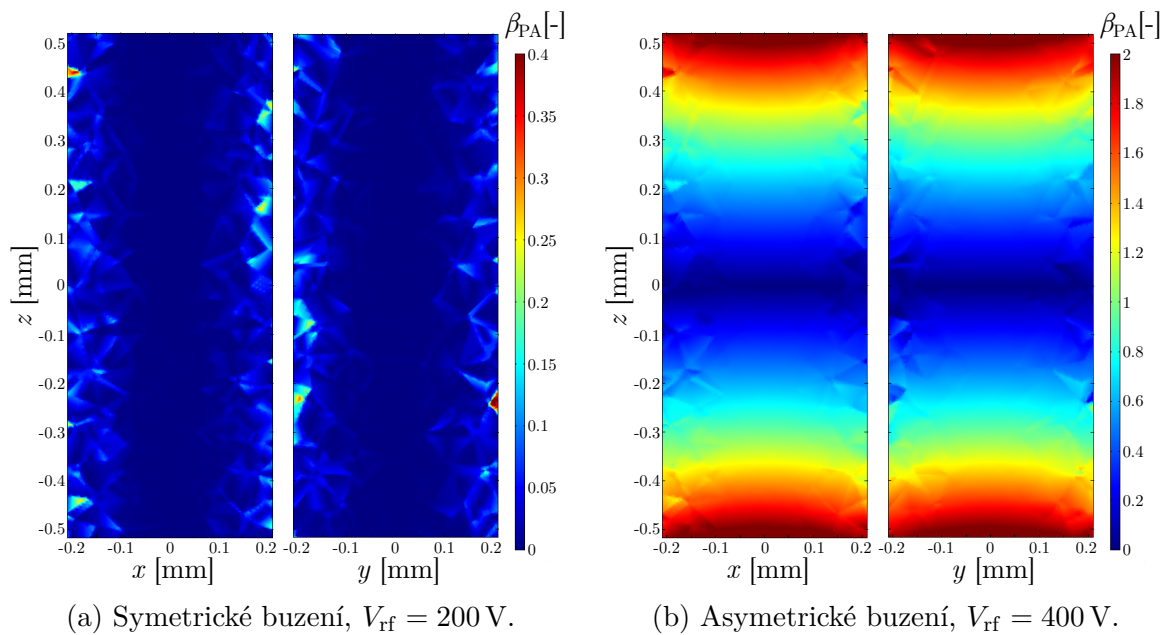
Na obr. 2.9 je také vykreslena závislost $\beta_{\text{PA}}(x = y = 0, z)$ určená numerickým výpočtem. Je patrné, že míra mikropohybu určená amplitudou RF pole dle rovnice (2.4) souhlasí s numerickým řešením Hamiltonových rovnic.

Srovnání míry mikropohybu dle vztahu (2.4) mezi symetrickým a asymetrickým buzením pasti je na obr. 2.10. Významných hodnot v okolí středu pasti nabývá axiální složka RF pole pouze pro asymetrické buzení (viz obr. 2.11). Výpočet tedy ukazuje, že míra mikropohybu iontu vápníku v axiálním směru by měla v případě symetrického buzení pasti dosahovat výrazně nižších hodnot při manipulaci s iontem v axiální ose.

⁵Ve výpočtu se nejnápadněji projevil závislost na parametru α , poloha z_{min} jistě může být v menší míře závislá i na jiných veličinách.

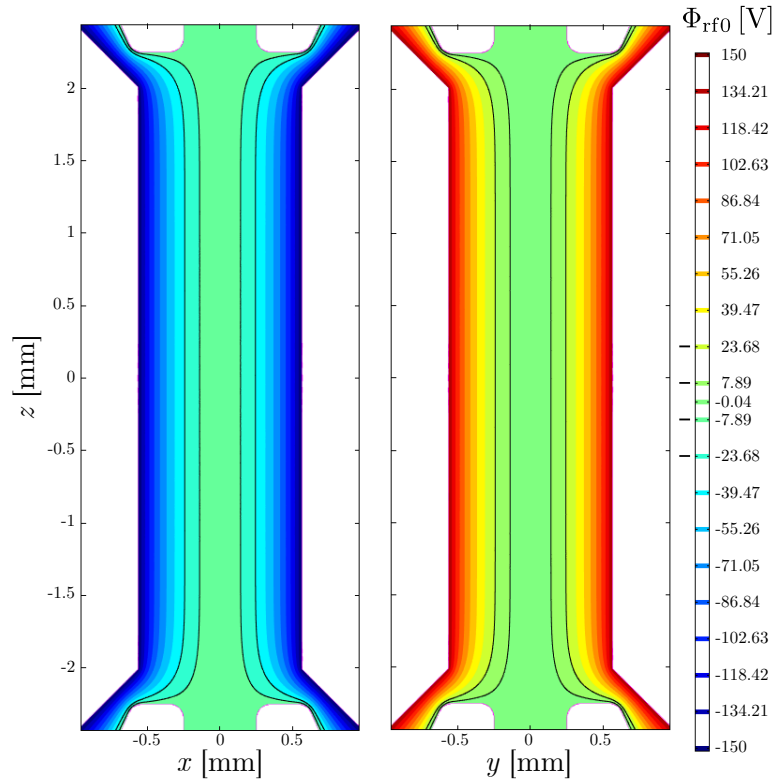


Obrázek 2.9: Závislost parametru β , který určuje míru mikropohybu vykonávaného v axiálním směru, na souřadnici z zachyceného iontu pro asymetrické buzení. Amplituda RF potenciálu na radiálních elektrodách odpovídá $V_{\text{rf}} = 400$ V. Na tomto obrázku lze vidět, že parametry β určené numerickým řešením pohybových rovnic odpovídají hodnotám získaným ze vztahu (2.4).

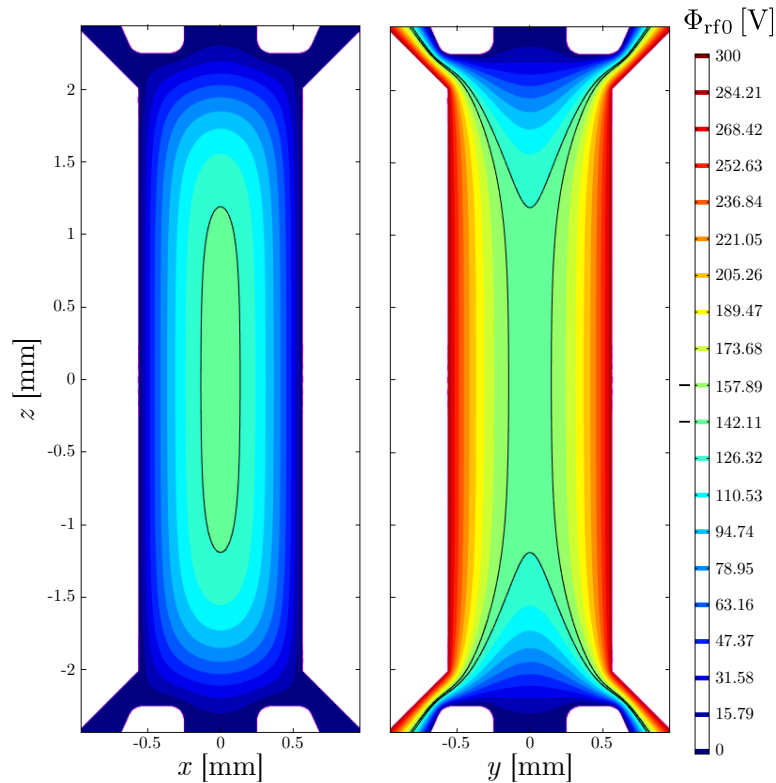


Obrázek 2.10: Numericky vypočtené hodnoty $\beta_{\text{PA}}(\mathbf{r})$ v rovinách xz a yz v okolí středu pasti. Je vidět, že pro (a) symetrické buzení pasti je hodnota β_{PA} výrazně nižší ve srovnání s (b) asymetrickým buzením.

2.4. Analýza výsledků



(a) Symetrické buzení, $V_{\text{rf}} = 150$ V

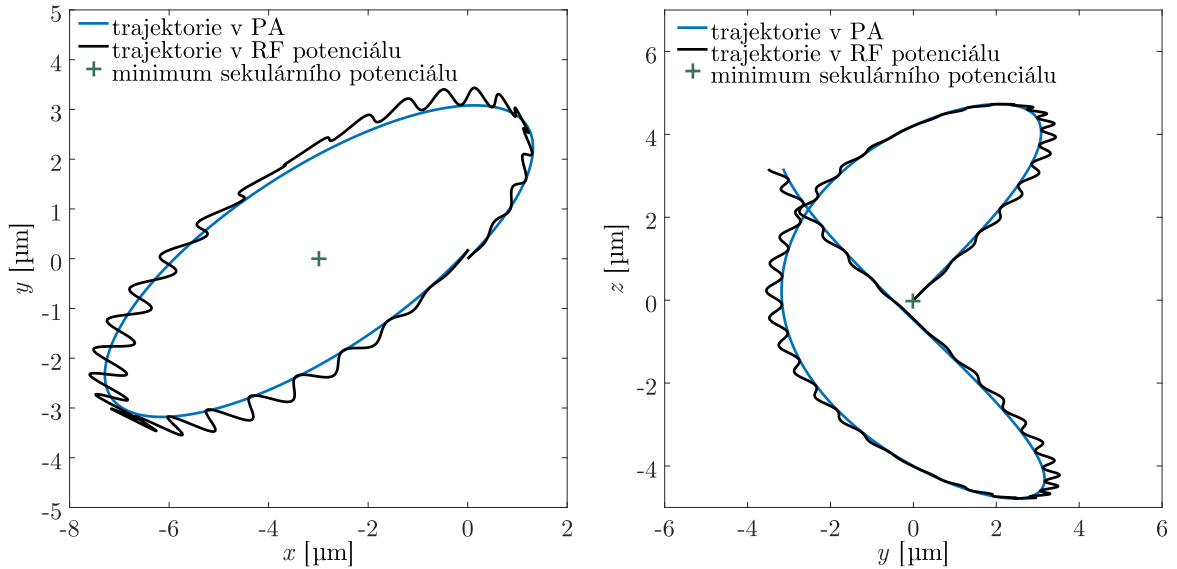


(b) Asymetrické buzení, $V_{\text{rf}} = 300$ V.

Obrázek 2.11: Srovnání tvaru amplitudy RF potenciálu $\Phi_{\text{rf}0}$ pro (a) symetrické a (b) asymetrické buzení pasti. V případě symetrického buzení (a) jsou ekvipotenciály téměř ideálně rovnoběžné s osou z . U asymetrického buzení (b) tomu tak není. Důsledkem toho je výrazně odlišné chování zachyceného iontu z hlediska mikropohybu v axiálním směru pro symetrické a asymetrické buzení pasti.

2.4.3 Srovnání numerického výpočtu s teorií

Na obr. 2.12 je srovnána výsledná trajektorie iontu $^{40}\text{Ca}^+$ pohybujícího se v RF potenciálu pasti s trajektorií určenou sekulárním potenciálem. Ze srovnání je vidět, že pomocí PA lze dostatečně přesně určit sekulární pohyb iontu. Obr. 1.6 ukazuje teoretický tvar trajektorie i vztah sekulárního pohybu a mikropohybu. Lze vidět, že vypočtená trajektorie odpovídá tomuto tvaru.



(a) Trajektorie v rovině xy . Lze srovnat s teoretickým průběhem na obr. 1.6b.

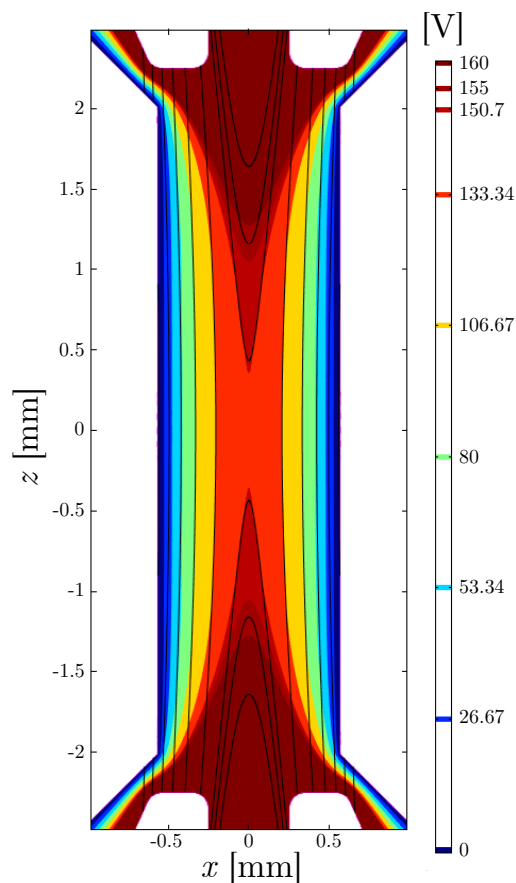
(b) Průmět trajektorií do roviny yz . V ose z není vykonáván mikropohyb.

Obrázek 2.12: Srovnání trajektorie iontu vypočtené pro časově závislé RF pole a trajektorie dané sekulárním potenciálem. Je patrné, že pohyb iontu v RF poli je dán součtem sekulárního pohybu a mikropohybu. Tento výsledek odpovídá teoretickému řešení pohybových rovnic (1.9). Sekulární pohyb je dán sekulárním potenciálem, při jehož výpočtu byl RF potenciál nahrazen pseudopotenciálem, bylo tedy využito PA, viz vztah (1.16).

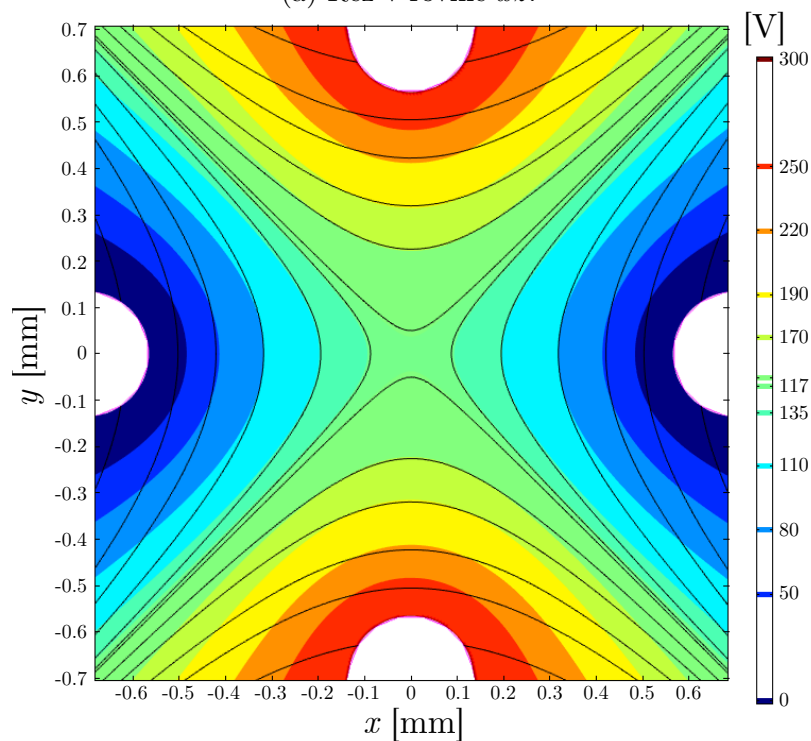
Porovnání tvaru kvadrupólového potenciálu dle teoretického vztahu pro asymetrické buzení (1.6), kde byly využity numericky určené modifikované rozměry r'_0 a z'_0 , a numericky určeného potenciálu pro reálnou past v laboratoři ÚPT je možno vidět na obr. 2.13. Je zde vidět, že v blízkosti středu pasti se tyto tvary liší jen velmi málo. Naopak v blízkosti elektrod je tvar numericky vypočteného potenciálu výrazně jiný. To je dáno neideálním tvarem elektrod pasti.

Tvar kvadrupólového potenciálu pro symetrické buzení (1.5) odpovídá numericky vypočtenému potenciálu ve stejné míře jako je ukázáno na obr. 2.13 pro asymetrické buzení pasti.

2.4. Analýza výsledků



(a) Řez v rovině xz .



(b) Řez v rovině xy .

Obrázek 2.13: Srovnání teoretického tvaru kvadrupólového potenciálu pro asymetrické buzení v rovině xy (podle vztahu (1.6)) v čase $t = 0$ a potenciálu určeného numerickým výpočtem (také pro $t = 0$). Použité nastavení pasti odpovídá asymetrickému buzení, kde $V_{\text{rf}} = U_{\text{dc}} = 300 \text{ V}$. Ekvipotenciály určené vztahem (1.6) jsou vykresleny černě.

3. Experimentální část

V této kapitole je uveden způsob a výsledky měření závislosti axiálních sekulárních frekvencí $f_z^{(\text{asym})}$ na potenciálu axiálních elektrod U_{dc} pro asymetrické buzení reálné pasti na ÚPT. Cílem je srovnání výsledné naměřené závislosti s numerickým výpočtem, který je uveden v podkapitole 2.4.1.

3.1 Měření sekulárních frekvencí

V rámci porovnání numerického modelu a reálné pasti v ÚPT byly měřeny sekulární pohybové frekvence přímo pro zachycený iont $^{40}\text{Ca}^+$. Pomocí tohoto měření je určena hodnota z'_0 experimentální cestou. Tuto hodnotu je možno porovnat s numerickým výpočtem (viz podkapitolu 2.4.1).

3.1.1 Způsob měření

Sekulární frekvence zachyceného iontu $^{40}\text{Ca}^+$ lze pozorovat při proměření absorpčního spektra přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$. Tomuto přechodu odpovídá vlnová délka 729 nm.

Na obr. 3.1 jsou zobrazeny energetické hladiny iontu $^{40}\text{Ca}^+$. Lze zde také vidět Zeemanovské rozštěpení přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$ na celkem 10 subkomponent [14]. Jednotlivé subkomponenty tohoto rozštěpení mají menší šířku spektrální čáry než nerozštěpený přechod, což vede k lepšímu spektrálnímu rozlišení při měření na libovolné subkomponentě.

Pokud je zachycený iont dostatečně laserově zchlazený a nachází se tedy v tzv. *Lamb-Dicke* režimu [15], lze u jednotlivých subkomponent Zeemanovského rozštěpení přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$ pozorovat postranní pásma, tzv. *sidebandy*. Jedná se o postranní pásma ve spektru, které jsou rozmístěny kolem frekvence přechodu – nosné frekvence (tzv. *carrier*). Jedno z naměřených spekter v okolí některé¹ ze subkomponent je uvedeno na obr. 3.3.

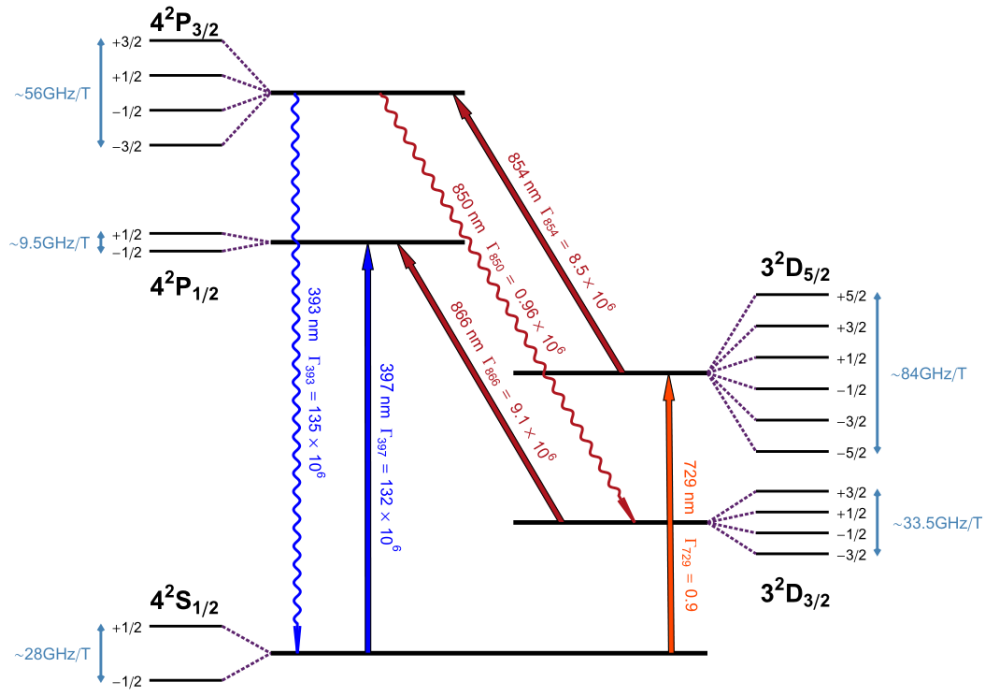
Sidebandy jsou vzdáleny o celočíselné násobky sekulární frekvence od rezonančních frekvencí jednotlivých subkomponent přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$. Toto chování je dáno energiovým žebříčkem pohybových stavů iontu v zachycujícím potenciálu. Zjednodušeně řečeno, při interakci fotonu o jiné než rezonanční frekvenci s iontem se přebytečná (resp. chybějící) energie kompenzuje změnou vibračního kvantového stavu iontu. K tomuto jevu může dojít pouze tehdy, liší-li se frekvence laseru a rezonanční frekvence

¹Měření probíhalo na jediném Zeemanovském přechodu přičemž identifikace tohoto přechodu není pro určení sekulárních frekvencí podstatná.

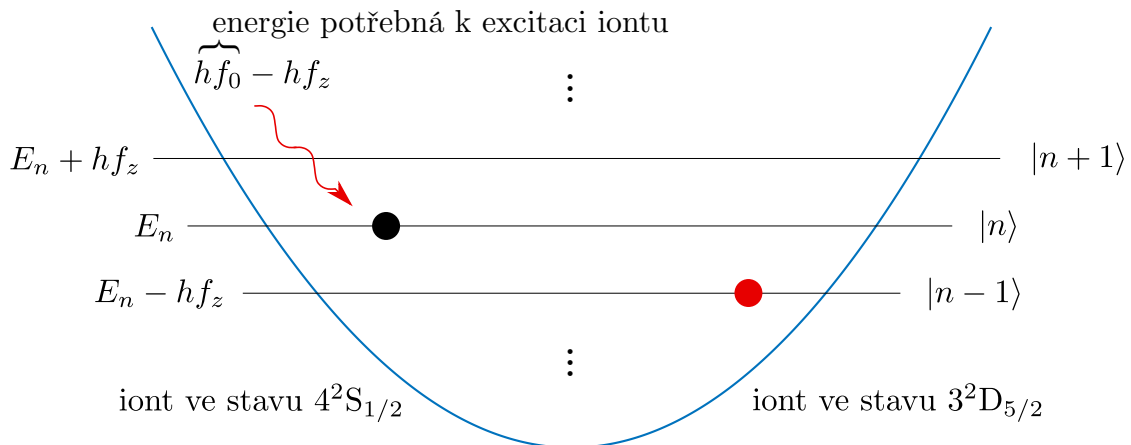
3.1. Měření sekulárních frekvencí

přechodu o celočíselné násobky pohybové frekvence iontu. Příklad takového procesu pro první *sideband* s nižší frekvencí (tzv. *červený*) je schématicky zakreslen na obr. 3.2.

Sekulární frekvence byly určeny pomocí měření míry excitace iontu do stavu $3^2D_{5/2}$ v závislosti na frekvenčním posuvu interagujících fotonů s iontem. Tento frekvenční posuv byl kontrolován tzv. *akusto-optickým modulátorem*.



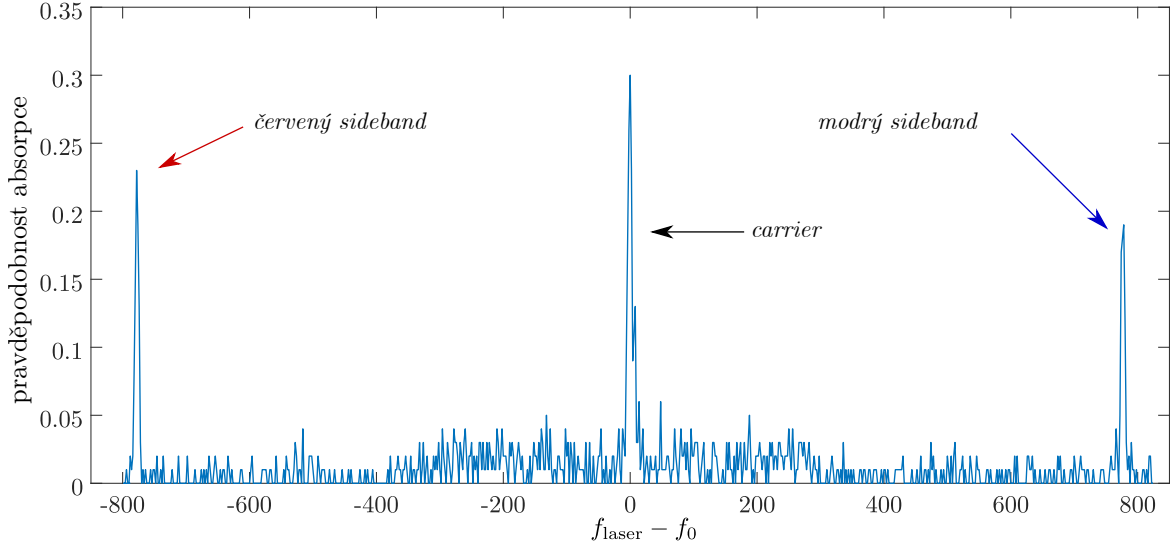
Obrázek 3.1: Energetické hladiny iontu $^{40}\text{Ca}^+$. Je zde uveden i přechod $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$ na vlnové délce 729 nm, který je využit k měření sekulárních frekvencí. Ve schématu jsou uvedeny vlnové délky odpovídající jednotlivým přechodům i jejich „reciproké doby života“. Převzato a upraveno z [4, s. 21].



Obrázek 3.2: Schématické znázornění procesu absorpce fotonu o nižší energii než odpovídá přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$. To je možné pouze pokud se chybějící energie „doplní“ přeskokem iontu do nižšího vibračního stavu. Stejný princip platí i pro přeskok iontu do vyššího vibračního stavu.

3.1.2 Výsledná závislost a porovnání s numerickým modelem

Na obr. 3.3 je příklad naměřeného spektra iontu $^{40}\text{Ca}^+$ na vlnové délce 729 nm. Axiální sekulární frekvence byly určovány pomocí rozdílu frekvencí *červeného sidebandu* a *carrieru*.



Obrázek 3.3: Příklad naměřeného absorpčního spektra v okolí jedné z frekvencí f_0 Zeemanovského spektra přechodu $4^2S_{1/2} \rightarrow 3^2D_{5/2}$ iontu vápníku. V okolí rezonanční frekvence přechodu (tzv. *carrier*) jsou postranní absorpční čáry (tzv. *červený* a *modrý sideband*), jejichž poloha vypovídá o sekulární frekvenci zachyceného iontu. Je patrné, že takto určená sekulární frekvence iontu je přibližně 800 kHz.

Měření závislosti sekulární frekvence iontu v axiálním směru v závislosti na změně potenciálu na axiálních elektrodách

Měření probíhalo tak, že bylo postupně měněno napětí na axiálních elektrodách. Pro každé nastavení bylo pořízeno spektrum obdobné obr. 3.3. Ze zachycených spekter pak byla odečtena frekvence pohybového postranního pásma a tato hodnota tabelována.

Bylo zjištěno, že napětí U_{dc} nastavované v ovládacím softwaru neodpovídalo přesně skutečnému napětí vstupujícímu do pasti. Měřením napětí voltmetrem na kabeláži vedoucí do pasti se ukázalo, že poměr mezi tímto napětím a nastavovaným napětím pomocí softwaru odpovídá hodnotě 0,834. Naměřené hodnoty kalibračního měření na kabeláži jsou uvedeny v tab. 3.1.

$U_{\text{dc}}^{\text{PC}}$ [V]	$U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ [V]	$\Delta U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ [V]	$U_{\text{dc}}^{\text{ef}}/U_{\text{dc}}^{\text{PC}}$	$\Delta(U_{\text{dc}}^{\text{ef}}/U_{\text{dc}}^{\text{PC}})$
10	8,35	0,077	0,835	0,007
50	41,71	0,434	0,834	0,009
100	83,40	0,767	0,834	0,008
200	166,80	1,434	0,834	0,007

Tabulka 3.1: Provedené měření napětí na kabeláži vedoucí k axiálním elektrodám pasti. Nejistoty měření napětí $\Delta U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ jsou určeny dle dokumentace použitého voltmetru [16].

3.1. Měření sekulárních frekvencí

Pro měření sekulárních frekvencí iontu v axiálním směru tak byly použity hodnoty napětí na axiálních elektrodách, které byly dodatečně vypočteny podle kalibračního měření. Naměřené hodnoty axiálních sekulárních frekvencí $f_z^{(\text{asym})}$ v závislosti na potenciálu na axiálních elektrodách U_{dc} jsou zapsány v tab. 3.2.

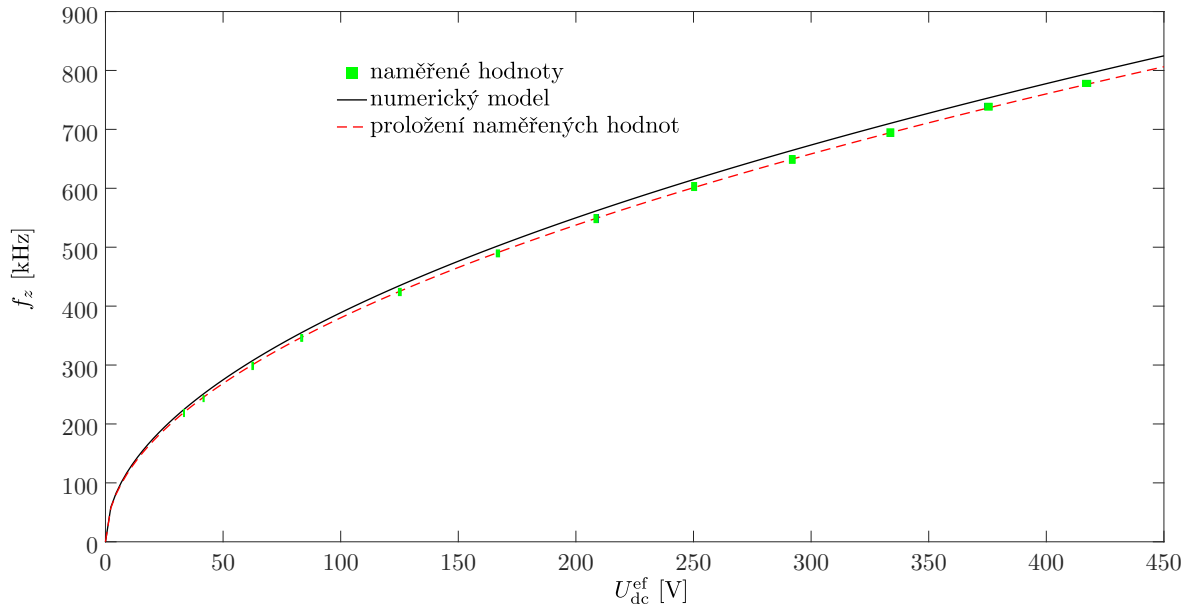
$U_{\text{dc}}^{\text{PC}}$ [V]	$U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ [V]	$\Delta U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ [V]	$f_z^{(\text{asym})}$ [kHz]	Δf_z [kHz]
40	33,37	0,3	218,5	11
50	41,71	0,4	243,0	10
75	62,57	0,5	298,5	12
100	83,43	0,7	346,0	11
150	125,14	1,1	424,0	12
200	166,85	1,4	489,5	12
250	208,56	1,8	548,5	14
300	250,28	2,1	603,0	14
350	291,99	2,5	649,0	13
400	333,70	2,8	694,5	12
450	375,41	3,2	738,5	12
500	417,13	3,5	778,0	10

Tabulka 3.2: Naměřené hodnoty axiálních sekulárních frekvencí i s odhadem nejistot. Nejistoty sekulárních frekvencí byly odhadnuty podle šířky jednotlivých spektrálních čar. Hodnota $U_{\text{dc}}^{\text{PC}}$ odpovídá nastavovanému napětí na axiálních elektrodách pomocí ovládacího softwaru, korigovaná hodnota napětí na axiálních elektrodách je označena jako $U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$. Nejistoty $\Delta U_{\text{dc}}^{\text{ef}}$ [V] odpovídají hodnotám dle dokumentace voltmetru použitého při kalibračním měření [16].

Obr. 3.4 ukazuje srovnání naměřené a numericky vypočtené závislosti $f_z^{(\text{asym})}(U_{\text{dc}})$, přičemž byla provedena výše zmíněná korekce napětí na axiálních elektrodách. Proložení naměřených hodnot axiálních sekulárních frekvencí $f_z^{(\text{asym})}$ závislostí danou teoretickým vztahem (1.22) byl opět určen modifikovaný rozměr z'_0 . Výsledná hodnota určena experimentem je $z'_0 = (9,21 \pm 0,02)$ mm. Nejistota byla také převzata z použitého algoritmu nelineární regrese v prostředí MATLAB. Přehled modifikovaných rozměrů z'_0 a r'_0 určených v rámci práce je v tab. 3.3.

	z'_0 [mm]	$\Delta z'_0$ [mm]	r'_0 [mm]	$\Delta r'_0$ [mm]
numerický model	8,99	0,02	0,6167	0,0005
experiment	9,20	0,02		

Tabulka 3.3: Přehled určených modifikovaných geometrických parametrů pasti z'_0 a r'_0 . Experimentální měření parametru r'_0 nebylo provedeno.



Obrázek 3.4: Naměřená závislost axiálních sekulárních frekvencí f_z^{asym} na potenciálu na axiálních elektrodách U_{dc}^{ef} . Bylo nutné provést korekci mezi nastavovanými a skutečnými potenciály (napětím na axiálních elektrodách). Odhad nejistot napětí (resp. frekvencí) u naměřených hodnot je vyjádřen šířkami (resp. výškami) vykreslených obdélníků.

Je vidět, že parametr z'_0 určený experimentálně se mírně liší od numericky vypočtené hodnoty. Tento rozdíl odpovídá přibližně 2%. Lze zvážit několik vlivů, které mohou tento rozdíl způsobit. Jedním z nich může být nedostatečná přesnost numerického výpočtu. Konvergenci numericky určené hodnoty parametru z'_0 je možné ověřit např. výpočtem pro větší hustotu diskretizace modelu pasti. Dalším významným vlivem je geometrická nepřesnost výroby pasti. Je velmi pravděpodobné, že geometrická nepřesnost, která může způsobovat uvedený rozdíl parametrů z'_0 , leží v rozsahu výrobních tolerancí testované Paulovy lineární pasti v laboratoři ÚPT. Naměřené výsledky a výsledky získané simulací jsou tak ve vysoké shodě a potvrzují správnost postupů numerické simulace i teoretických analytických výpočtů.

3.1. Měření sekulárních frekvencí

Závěr

Cílem práce bylo uvést odvození průběhů potenciálu Paulovy radiofrekvenční lineární kvadrupólové iontové pasti pro symetrické a asymetrické buzení pasti, vypočítat sekulární frekvence zachyceného iontu vápníku a tento výpočet porovnat s experimentem. Dále bylo cílem provést srovnání vlivu na mikropohyb zachyceného iontu mezi symetrickým a asymetrickým buzením pasti.

V rámci práce byly uvedeny teoretické principy funkce iontových pastí, zejména pak Paulovy lineární pasti. Pro tuto past byly uvedeny tvary potenciálu, které zajišťují zachycení nabitě částice, pro symetrické i asymetrické buzení radiálních elektrod. Proběhl teoretický popis pohybu zachyceného iontu, který byl dále využit při numerické simulaci. Také byl krátce uveden základní princip metody konečných prvků, které bylo využito při numerickém výpočtu potenciálu pasti.

Byla podrobně popsána tvorba numerického modelu Paulovy lineární iontové pasti nacházející se v laboratoři Ústavu přístrojové techniky Akademie věd České republiky. Tento model byl vytvořen v prostředí COMSOL Multiphysics.

Následovalo uvedení vypočtených závislostí sekulárních frekvencí pohybu iontu na nastavení potenciálů pasti. Pomocí vypočtených sekulárních frekvencí byly určeny parametry charakterizující kvadrupólový potenciál v blízkosti středu pasti. Proběhlo také měření sekulárních frekvencí v axiálním směru, které bylo porovnáno s výsledkem numerické simulace. Naměřené hodnoty vykazovaly velmi dobrou shodu s numericky určenými hodnotami. S využitím naměřených hodnot sekulárních frekvencí bylo možné porovnat jeden z parametrů charakterizujících kvadrupólový potenciál mezi numerickým modelem a experimentem. Hodnoty tohoto parametru se liší přibližně o 2 %. Tímto způsobem byla zhodnocena věrohodnost numerické simulace.

Pomocí numerického výpočtu bylo srovnáno symetrické a asymetrické buzení radiálních elektrod pasti z hlediska míry mikropohybu v axiálním směru zachyceného iontu. Výpočet ukázal, že pro symetrické buzení pasti zachycený iont vykonává výrazně nižší (téměř žádný) mikropohyb v axiálním směru. Z tohoto důvodu by podle numerického výpočtu mělo být symetrické buzení radiálních elektrod pasti výhodnější pro efektivitu laserového chlazení iontu v různých polohách na axiální ose. Tato vlastnost je důležitá pro tvorbu co nejefektivněji zchlazeného lineárního Coulombova krystalu tvořeného několika ionty vápníku, které jsou zachyceny na axiální ose pasti.

Seznam použité literatury a zdrojů

- [1] PAUL, Wolfgang. Electromagnetic traps for charged and neutral particles. *Reviews of Modern Physics*. 1990, **62**(3), 531–540. ISSN 0034-6861. Dostupné z DOI: 10.1103/RevModPhys.62.531.
- [2] STERR, U.; DEGENHARDT, C.; STOEHR, H. et al. The optical calcium frequency standards of PTB and NIST. *Comptes Rendus Physique*. 2004, **5**(8), 845–855. ISSN 16310705. Dostupné z DOI: 10.1016/j.crhy.2004.08.005.
- [3] HERSCHBACH, N.; PYKA, K.; KELLER, J.; MEHLSTÄUBLER, T. E. Linear Paul trap design for an optical clock with Coulomb crystals. *Applied Physics B*. 2012, **107**(4), 891–906. ISSN 0946-2171. Dostupné z DOI: 10.1007/s00340-011-4790-y.
- [4] THOMPSON, Richard; MADSEN, Niels; KNOOP, Martina. *Trapped charged particles: a graduate textbook with problems and solutions*. New Jersey: World Scientific Publishing Europe, 2016. ISBN 978-1-78634-011-5.
- [5] DĚDEK, Libor; DĚDKOVÁ, Jarmila. *Elektromagnetismus*. Vyd. 2. V Brně: VUTUM, 2000. ISBN 80-214-1548-7.
- [6] LITTICH, Gebhard. *Electrostatic Control and Transport of Ions on a Planar Trap for Quantum Information Processing* [online]. Berkeley, 2011 [cit. 2018-04-05]. Dostupné z: <http://research.physics.berkeley.edu/haeffner/publications/littich-thesis.pdf>. Disertační práce. Spolková vysoká technická škola v Curychu a Kalifornská univerzita v Berkeley. online.
- [7] BERKELAND, D. J.; MILLER, J. D.; BERGQUIST, J. C. et al. Minimization of ion micromotion in a Paul trap. *Journal of Applied Physics*. 1998, **83**(10), 5025–5033. ISSN 0021-8979. Dostupné z DOI: 10.1063/1.367318.
- [8] REKTORYS, Karel. *Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky*. Vyd. 1. Praha: SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1974.
- [9] ZIENKIEWICZ, O.C; TAYLOR, R.L. *The Finite Element Method: Volume 1*. 4 ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. ISBN 0-7506-5049-4.
- [10] The Finite Element Method. *COMSOL* [online]. 2018 [cit. 2018-02-23]. Dostupné z: <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>.
- [11] *COMSOL Multiphysics* [online]. COMSOL, 2018 [cit. 2018-03-10]. Dostupné z: <https://www.comsol.com/>.
- [12] Documentation. *Mathworks* [online]. 2018 [cit. 2018-05-03]. Dostupné z: <https://www.mathworks.com/help/stats/nlparci.html>.

- [13] HUMLÍČEK, Josef. *Statistické zpracování výsledků měření*. 1. vyd. Brno: Univerzita J.E. Purkyně, 1984.
- [14] BIN, Guo; HUA, Guan; QU, Liu et al. Measurement of Secular Motion Frequency in Miniature Paul Trap to Ascertain the Stability Parameters. *Chinese Physics Letters*. 2010, **27**(1), 013202-1-4. ISSN 0256-307X. Dostupné z DOI: 10.1088/0256-307X/27/1/013202.
- [15] ROSS, Christian Felix. *Controlling the quantum state of trapped ions*. Innsbruck, 2000. Disertační práce. Univerzita Innsbruck.
- [16] *MULTIMETR MODEL UT70B: Operační manuál* [online]. GM ELECTRONIC [cit. 2018-05-03]. Dostupné z: http://macgyver.siliconhill.cz/wiki/_media/vybaveni/unit-ut70b.pdf.

Seznam použitých symbolů a zkratk

\mathbf{E}_{dc}	vektor statické elektrické intenzity [V m^{-1}]
\mathbf{E}_{rf}	amplituda oscilujícího vektoru elektrické intenzity [V m^{-1}]
f_{xy}	radiální sekulární frekvence pohybu částice [Hz]
f_z	axiální sekulární frekvence pohybu částice [Hz]
$H(\mathbf{r})$	Hamiltonova funkce částice v sekulárním potenciálu [J]
$H(t, \mathbf{r})$	Hamiltonova funkce částice v časově proměnném potenciálu [J]
\mathbf{k}_{729}	vlnový vektor odpovídající laseru o vlnové délce 729 nm [m^{-1}]
MKP	Metoda konečných prvků
m	hmotnost částice [kg]
PA	pseudopotenciálová aproximace
\mathbf{p}	vektor hybnosti částice [kg m s^{-1}]
Q	náboj částice [C]
q	náboj částice [C]
RF	radiofrekvenční
$\mathbf{R}(t)$	část celkového pohybu částice odpovídající sekulárnímu pohybu [m]
r_0	vzdálenost radiálních elektrod od středu pasti [m]
r'_0	modifikovaná vzdálenost radiálních elektrod od středu pasti [m]
T	perioda buzení pasti [s]
U_{dc}	potenciál na obou axiálních elektrodách pasti [V]
$U_{\text{dc}}^{(k)}$	koeficient určující statický potenciál na k -té elektrodě [-]
U_{komp}	potenciál na kompenzačních elektrodách [V]
ÚPT	Ústav přístrojové techniky

u	zástupný symbol prostorových souřadnic x, y, z [m]
$V_k(t)$	koeficient určující celkový potenciál na k -té elektrodě [-]
V_{rf}	amplituda buzení radiálních elektrod pasti [V]
$V_{\text{rf}}^{(k)}$	amplituda harmonicky oscilujícího potenciálu na k -té elektrodě [-]
\mathbf{v}_{amp}	amplituda rychlosti mikropohybu částice [m s^{-1}]
z_0	vzdálenost axiálních elektrod od středu pasti [m]
z'_0	modifikovaná vzdálenost axiálních elektrod od středu pasti [m]
β	parametr vyjadřující míru mikropohybu [-]
β_{PA}	parametr vyjadřující míru mikropohybu vypočtený dle PA [-]
$\boldsymbol{\xi}(t)$	část celkového pohybu částice odpovídající mikropohybu [m]
$\Phi(t, \mathbf{r})$	elektrostatický (skalární) potenciál v čase t a místě \mathbf{r} [V]
Φ_{asym}	kvadrupólový potenciál v blízkosti středu asymetricky buzené pasti [V]
Φ_{dc}	statický potenciál [V]
Φ_k	bázový potenciál náležící k -té elektrodě [V]
Φ_{PS}	pseudopotenciál [V]
Φ_{rf}	harmonicky oscilující potenciál [V]
$\Phi_{\text{rf}0}$	amplituda harmonicky oscilujícího potenciálu [V]
Φ_{sec}	sekulární potenciál [V]
Φ_{sym}	kvadrupólový potenciál v blízkosti středu symetricky buzené pasti [V]
φ_{rf}	fázový rozdíl buzení protějšších radiálních elektrod [rad]
Ω	budící úhlová frekvence pasti [rad s^{-1}]
ω_u	úhlová sekulární frekvence pohybu částice ve směru osy u [rad s^{-1}]