

線形ポールトラップイオン源からの選択的イオン取出しに関する研究

STUDY ON THE SELECTIVE ION EXTRACTION FROM A LINEAR PAUL TRAP ION SOURCE

宮脇信正^{#, A)}, 石井保行^{A)}, 百合庸介^{A)}, 鳴海一雅^{A)}, 室尾健人^{B)}, 伊藤清一^{B)}, 岡本宏己^{B)}
Nobumasa Miyawaki^{#, A)}, Yasuyuki Ishii^{A)}, Yosuke Yuri^{A)}, Kazumasa Narumi^{A)}, Kento Muroo^{B)}, Kiyokazu Ito^{B)},
Hiromi Okamoto^{B)}

^{A)} Takasaki Advanced Radiation Research Institute, National Institutes for Quantum Science and Technology

^{B)} Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University

Abstract

The selective extraction of a single molecule nitrogen ion (N_2^+) with very low temperature from a linear Paul trap (LPT) as an ion source for a single-ion implantation system has been studied by three-dimensional multiparticle simulations. To extract the single N_2^+ , the control of the alignment and number of N_2^+ is required at a string-like Coulomb crystal formed by sympathetic cooling with calcium ions (Ca^+) in the LPT. The N_2^+ in the mixed crystal of Ca^+ and N_2^+ could be discriminated by the timing of the voltage applied to the electrode for the extraction from the LPT, and there was no effect on the emittance of N_2^+ at the extraction.

1. はじめに

ダイヤモンド中の点欠陥の一つである窒素原子(N)-炭素原子空孔(V)の対 (NVC)は、室温で動作する量子ビットとして注目され、これを用いた超並列計算が可能な量子コンピュータや解読不可能な量子暗号通信、超高感度量子センサ等への応用が期待されている[1]。たった1つのNVCでも様々な応用ができるが、複数個を近接して配列させることによって、新たな量子情報素子の開発が期待されている[2]。この配列の製作には、ダイヤモンド中の狙った場所に数十ナノメートルスケールの位置精度で1個の窒素イオン(N^+)または窒素分子イオン(N_2^+)を確実に注入することが求められる[3]。

QST 高崎では、この位置精度で注入するためにイオンビームの加速と集束を同時に行うことにより高い縮小率が得られる静電加速レンズ[4]を使用する検討を行い、数十ナノメートルの領域にイオンを集束するには、超低エミッタンスのイオンを必要とした。一般的なイオン源では、プラズマ状態からイオン取り出すため、低エミッタンス化は難しく、さらにイオンを1個ずつ制御することは困難である。そこで、電場中に閉じ込めたイオンをレーザーでmK程度のドップラー冷却限界まで超低温化できるリニアポールトラップ(LPT)をイオン源として使用方法[5]を採用した。

LPT から冷却したイオンの取り出しは、広島大学においてmK程度まで冷却した数個のカルシウムイオン(Ca^+)の紐状結晶を等時間間隔で取り出すことに成功している[6]。さらに、この結果を基にした数値シミュレーションから、 Ca^+ の紐状結晶から単一の Ca^+ をLPTから高い精度で取り出せることを示した[7]。しかし、 Ca^+ の冷却に使用するドップラーレーザー冷却法は適用できるイオン種が限定され、 N^+ や N_2^+ を直接冷却できない。そのため、レーザー冷却可能な $^{40}Ca^+$ でクーロン相互作用を介して間接的に他のイオン種を冷却する共同冷却法[8]を使用する。し

かしながら、共同冷却で Ca^+ と N^+ または N_2^+ が混合した紐状結晶を生成しても、このままではLPTから Ca^+ も一緒に取り出すことになる。これを解決するため、LPTの後段でマスフィルターによるイオンを選別するシミュレーションを実施した。しかし、取り出された N_2^+ は加熱され、エミッタンスは増大した[9]。そのため、LPTからエミッタンスを増大させずに紐状結晶から N^+ または N_2^+ を選択的に取り出す方法が必要とされた。

そこで本研究では、広島大学で開発された多粒子シミュレーションコード[6]を用いて、LPTで生成した N_2^+ と Ca^+ の混合結晶から N_2^+ を低エミッタンスで弁別して取り出す方法について検討した。

2. LPTからのイオン取り出し手順

検討に使用したLPTの電極は、Fig. 1に示すように、4本のロッド電極と2つの端板電極によって構成される。ロッド電極は、z軸から直径6mmの円に外接するように平行に設置され、電極に印加するRF電圧によって生じる四重極電場で、イオンのx-y平面内の閉じ込めを行う。一方、z方向に原点から対称に3mmの位置に配置した2つの端板電極は、z方向に長さ12mmのブロックにx-y平面に対してz軸を中心とする直径6mmの開口と4

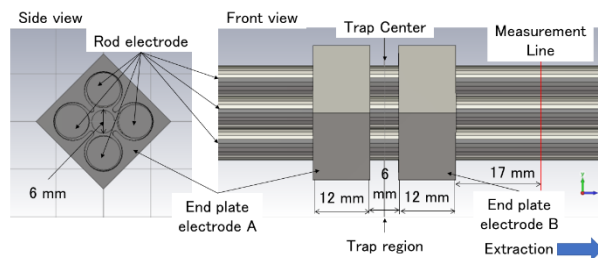


Figure 1: Schematic view of the LPT. The main components are four cylindrical rods and two end plates with a hole. The end plates are electrically isolated from the quadrupole rods.

[#] miyawaki.nobumasa@qst.go.jp

本のロッド電極が貫通する開口を有し、DC 電圧を印加して生じる静電場によって、 z 軸方向のイオンの閉じ込めを行う。実際の実験では、ロッド電極と端板電極で囲まれる領域に Ca と N_2 を外部から導入し、電子銃等でイオン化することで、LPT 内にトラップされる。トラップしたイオンの冷却は、外部からこの領域に向けて冷却用レーザー (397 nm) の照射によって実施され、 $^{40}\text{Ca}^+$ のドップラー限界温度 (0.54 mK) まで理論上冷却できる。十分に冷却が進むと、イオンは閉じ込めポテンシャルとクーロンポテンシャルによって平衡を保つ位置で並ぶ「クーロン結晶」状態となる。この時、イオンの配列は LPT に印加する電圧とイオンの数に依存する。特定の紐状結晶構造にするためには、LPT の電場等の調整によって適切なイオンの数に減らす必要があり、各電極への印可電圧の操作によって行われる。紐状結晶構造にしたイオンの取り出しは、軸方向のイオンの閉じ込めに使用する端板電極に印加する電圧を操作することで実現される。

3. LPT からの取り出しのシミュレーション

3.1 シミュレーションの概要

LPT の電極形状によっては生成されるポテンシャルの 3 次元分布は CST STUDIO SUITE® [10] によって計算され、そのデータをシミュレーションに取り込み、イオンの挙動を計算する。シミュレーションにおけるレーザー冷却では、簡単のため線形の散逸力をイオンに与えるとともに、設定した冷却限界温度に依存したランダムなキックによってイオンの温度が限界温度で平衡となるよう自然放出による拡散の効果を取り込んだ。なお、本計算では、時間短縮のため N_2^+ についても Ca^+ と同じ限界温度まで直接冷却を行っている。レーザー冷却後の紐状結晶状態における Ca^+ と N_2^+ の個数と配列が取り出し後のイオンの特性に及ぼす影響を調べるため、初期条件として LPT 内でトラップするイオン種や数、それらの位置と運動量を設定した。

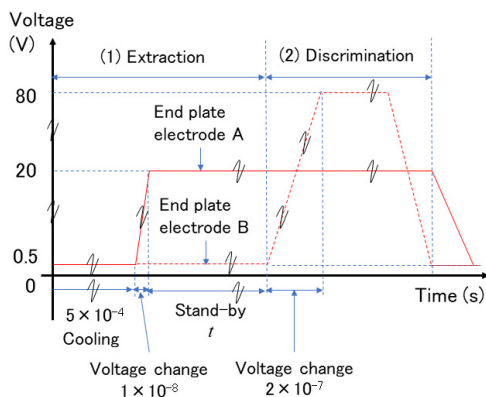


Figure 2: Timing diagram of voltage applied to electrodes for the extraction of a string-like Coulomb crystal from the LPT (1) and discrimination of N_2^+ (2).

LPT で冷却した N_2^+ と Ca^+ から N_2^+ を弁別して低エミッタンスで LPT から取り出すために、(1): 冷却終了時の Ca^+ と N_2^+ の紐状結晶の配列による LPT から取り出し後の

N_2^+ のエミッタンスへの影響と(2): 取り出し側の端板電極の電圧の操作による N_2^+ と Ca^+ の弁別の 2 つに分けて計算した。計算は、統計誤差の低減と計算時間の観点から 1 条件当たり独立した 100 回のシミュレーションを実施した。Figure 2 は(1)と(2)の計算における端板電極の電圧操作のタイミングチャートを示す。(1)では、両方の端板電極の電圧が 0.5 V でイオンがトラップされている状態から、端板電極 A の電圧を 20 V にして端板電極 B の方向に紐状結晶のイオンを加速する。その後、端板電極 B から 17 mm の位置にイオンが到達すると計算結果を終了し、次の計算に移るために両方の端板電極の電圧を 0.5V にして最初の状態に戻る。(2)では、(1)の端板電極 A 昇圧後から時間 t 秒後に端板電極 B に 80 V の電圧を印加する操作を加える。その後、(1)と同じように端板電極 B から 17 mm の位置にイオンが到達すると計算を終了し、次の計算に移り、最初の状態に戻る。

3.2 低エミッタンスの N_2^+ の取り出し

冷却後の紐状結晶中の Ca^+ と N_2^+ の配列が、LPT から取り出した N_2^+ のエミッタンスに与える影響をシミュレーションにより調べた。一例として 3 個の Ca^+ と 1 個の N_2^+ の 4 粒子の紐状結晶について、4 通りの配列 1:(N_2^+ , Ca^+ , Ca^+ , Ca^+), 2:(Ca^+ , N_2^+ , Ca^+ , Ca^+), 3:(Ca^+ , Ca^+ , N_2^+ , Ca^+), 4:(Ca^+ , Ca^+ , Ca^+ , N_2^+) で、Fig. 2 の(1)のタイミングで電圧操作を行い、中心から 32 mm の位置 (端板電極 B から 17 mm) における N_2^+ の規格化 RMS エミッタンス (ϵ_n) と光速度で規格化した速度 β ($= v/c$) を求めた。その結果を Fig. 3 に示す。配列 1 の N_2^+ の位置は加速に用いる端板電極 A に最も近く、配列 4 の N_2^+ の位置は取り出し方向の端板電極 B に最も近い。 Ca^+ の質量は N_2^+ より重いため、端板電極 A によって加速された Ca^+ の速度は N_2^+ より遅くなり、 N_2^+ が先頭の配列 4 以外では N_2^+ が前方の Ca^+ と衝突して加熱される。そのため、配列 4 の N_2^+ の ϵ_n が他の配列より最も小さくなった。従って、紐状結晶中の Ca^+ と N_2^+ の配列から低エミッタンスの N_2^+ を取り出すためには、 N_2^+ が先頭に配置する必要がある。

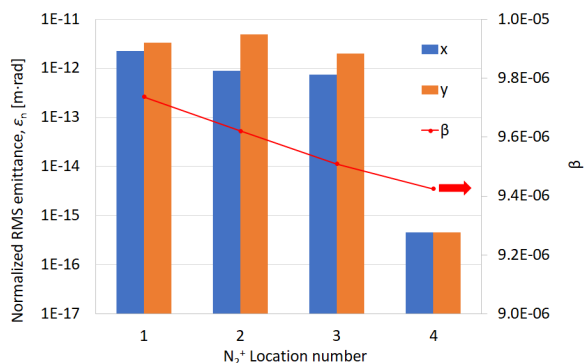


Figure 3: Normalized RMS emittance and β with respect to the position of N_2^+ in the array of 4 ions extracted from LPT.

一方で、配列 4 の N_2^+ の β が最も小さいため、紐状結晶中に N_2^+ が 2 つ以上あった場合、 N_2^+ 同士で衝突する可能性がある。そこで、2 個の Ca^+ と 2 個の N_2^+ の 4 粒子の紐状結晶で先頭に N_2^+ 、その次も β の差が最も小さく

なるように N_2^+ を配置した配列 (Ca^+, Ca^+, N_2^+, N_2^+) でシミュレーションを行い、 N_2^+ 同士の衝突の有無と N_2^+ の ϵ_n を求めた。Figure 4 は、先頭の N_2^+ に対するすぐ後の N_2^+ のエネルギー差および距離について、冷却終了後からの時間変化を示す。端板電極 A による加速によって、先頭の N_2^+ よりその後の N_2^+ のエネルギーが高いため、両者の距離が縮まり、加速開始から約 $1\mu s$ 後に衝突し始めた。その後、先頭の N_2^+ は後の N_2^+ からエネルギーが付与されて、両者のエネルギーの差は正になった。これにより先頭の N_2^+ が加速され、両者の距離は開き始めた。この結果、中心から 32 mm の位置における先頭とその後ろの N_2^+ の ϵ_n は、それぞれ $4.5E-15$ 、 $3.3E-15\text{ m}\cdot\text{rad}$ であった。これは単一の N_2^+ の配列 4 の場合の $4.6E-16\text{ m}\cdot\text{rad}$ に比べて、約 1 桁悪化した。従って、低エミッタンスの N_2^+ の取り出しは、LPT での冷却後のイオンの配列を先頭に N_2^+ のみを配置する必要がある。

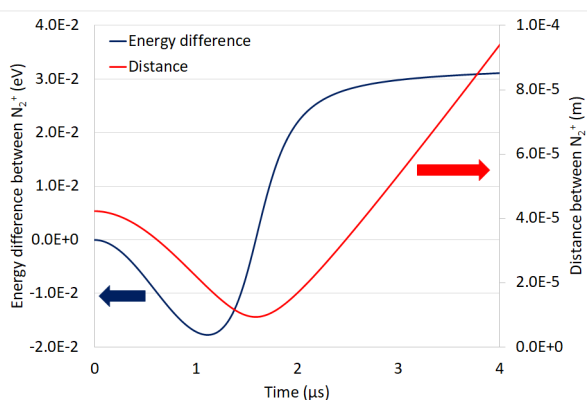


Figure 4: Energy difference and distance between N_2^+ in the array of (Ca^+, Ca^+, N_2^+, N_2^+) extracted from LPT. The horizontal axis is the time from the end of cooling in Fig. 2. The leading N_2^+ was pushed by the subsequent N_2^+ .

3.3 N_2^+ と Ca^+ の弁別

N_2^+ と Ca^+ の弁別の方法として、端板電極 A によって加速された N_2^+ と Ca^+ が端板電極 B を通過中に端板電極 B の電圧を瞬間的に増加することで、先行する N_2^+ をさらに加速し、一方で後の Ca^+ を減速 (逆方向に加速) することを検討した。前節の N_2^+ の低エミッタンスでの取り出し条件から、先頭に N_2^+ を 1 個とその後共同冷却に用いる Ca^+ を 1 個の配列 (Ca^+, N_2^+) について、端板電極の電圧の操作 (1) と (2) によるシミュレーションを実施した。

端板電極 B に印加する電圧は、 Ca^+ を減速して逆方向に加速するため、端板電極 A より高い電圧の設定が必要である。そこで、端板電極 B に印加する電圧を一例として 80 V とし、その電圧への変更時間を 200 ns と仮定した。端板電極 B に電圧を印加するまでの時間 (t) を 100 ns 毎に変えて、 N_2^+ が通過できて Ca^+ が通過できない時間範囲を調べた。その結果、冷却終了後から $3.1\sim 3.5\mu s$ の間で端板電極 B に電圧を印加した時に N_2^+ と Ca^+ の弁別に成功した。Figure 5 は、冷却終了後から $3.5\mu s$ 後に端板電極 B に電圧を印加した時のシミュレーションから、 N_2^+ と Ca^+ の z 軸上の位置の時間変化を示す。

端板電極 A による加速で Ca^+ の速度は N_2^+ より遅いため両者の位置の差は開き、電圧を印加する $3.5\mu s$ には

両者の位置は端板電極 B の中心より手前であった。電圧を印加後、 N_2^+ は端板電極 B の中心を越えて、さらに加速されたが、 Ca^+ は電極の中心より手前で減速されて、その後逆方向に加速された。イオンの通過の可否は、端板電極 B への電圧印加によって電極中心部に生じるポテンシャルの極大値によって決まり、印加電圧の時間が早いとイオンの通過時にこの値が大きくなっているため両方のイオンとも減速して逆方向に加速し、逆に印加電圧の時間が遅いとこの値がまだ小さいため両方のイオンとも通過できてしまう。そのため、適切なタイミングの電圧操作が必要である。この条件で LPT から取り出された N_2^+ の規格化 RMS エミッタンス ϵ_n は $4.7E-16\text{ m}\cdot\text{rad}$ であり、前節の弁別のない単一の N_2^+ の配列 4 の場合とほぼ同じであった。従って、端板電極による弁別で N_2^+ のエミッタンスへの影響がないことを確認できた。

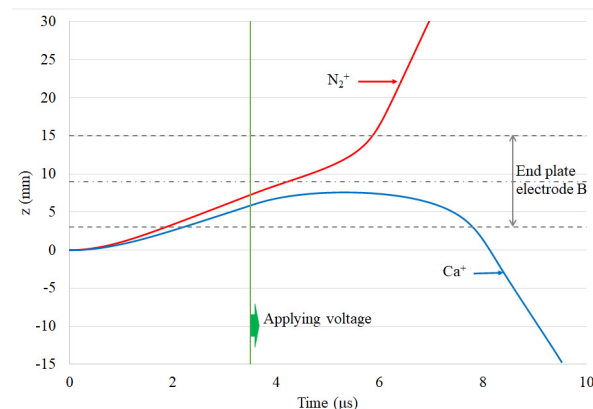


Figure 5: The z position of N_2^+ and Ca^+ with respect to time. The horizontal axis is the time from the end of cooling in Fig. 2. The N_2^+ can be discriminated from the string Coulomb crystal of Ca^+ and N_2^+ by electing the time for applying voltage to the end plate electrode B.

4. まとめと今後について

LPT で Ca^+ との共同冷却によって低エミッタンスで単一の N_2^+ を取り出す方法について、多粒子シミュレーションによる検討で明らかにした。LPT から低エミッタンスの N_2^+ を取り出しの条件は、冷却後の結晶中の Ca^+ との相互作用によるエミッタンスの増大を避けるため、冷却時の紐状結晶の配列で N_2^+ が取り出し方向に対して先頭の位置にあること、さらに N_2^+ が複数個あるとそれらが衝突してエミッタンスが悪化するため、結晶中に N_2^+ が 1 個だけであることがわかった。また、配列 (Ca^+, N_2^+) に対する弁別では、端板電極 B への電圧の印加を適切なタイミングで行うことによって、LPT から N_2^+ のみを選択的に取り出すことができ、そのエミッタンスは弁別による影響をほとんど受けないことが分かった。これらによって、NVC の配列の作製を目的とした静電加速レンズに低エミッタンスの単一の N_2^+ を供給できる見通しが得られた。

今後、静電加速レンズの設計を実施し、これを取り入れたシミュレーションにより、集束後の単一の N_2^+ の広がりや評価する予定である。

謝辞

本研究は、JSPS 科研費 JP20H00145JST およびムー
ンショット型研究開発事業 JPMJMS2062 の支援を受け
て実施しました。

参考文献

- [1] Sébastien Pezzagna and Jan Meijer, "Quantum computer based on color centers in diamond", *Applied Physics Reviews* 8, 011308 (2021).
- [2] M. Haruyama *et al.*, "Triple nitrogen-vacancy centre fabrication by C5N4Hn ion implantation", *Nature Communications* 10 (2019) 2664.
- [3] Karin Groot-Berning *et al.*, "Fabrication of $^{15}\text{NV}^-$ centers in diamond using a deterministic single ion implanter", *New J. Phys.* 23 (2021) 063067.
- [4] Y. Ishii and T. Kojima, "Reduction of the divergence angle of an incident beam to enhance the demagnification factor of a two-stage acceleration lens in a gas ion nanobeam system of several tens of keV", *Nucl. Instrum. Methods B* 420 (2018) 12-17.
- [5] M. Kano *et al.*, "Ultra-low emittance beam generator using coulomb crystals", *J. Phys. Soc. Jpn.* 73 (2004) 760-761.
- [6] K. Izawa *et al.*, "Controlled extraction of ultracold ions from a linear Paul trap for nanobeam production", *J. Phys. Soc. Jpn.* 79 (2010) 124502.
- [7] 室尾健人 他, "線形ポルトラップからの単一カルシウムイオンの超高精度射出に関する研究", 日本物理学会第 76 回年次大会, 2021.
- [8] K. Okada *et al.*, "Cold ion-polar-molecule reactions studied with a combined Stark-velocity-filter-ion-trap apparatus", *Phys. Rev. A* 87 (2013) 043427.
- [9] 室尾健人 他, "共同冷却された単一イオンの超高精度射出に関する研究", 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022.
- [10] <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/cst-studio-suite/>