

Simulation of Nano Particles in a Laser Trap

Mathias Höld, BSc

23.03.2017

Einleitung

Einleitung

Verbindung von zwei Teilbereichen der Physik:

- Computational Physics
- Optische Fallen

Computational Physics

- Meilenstein: Entwicklung des Metropolis Monte Carlo Algoithmus (1953)
- Seit dem enorme Verbesserung der Rechenleistung von Computern
- Neue Methoden entwickelt (Transition Path Sampling, Finite-Elemente,...)
- In dieser Arbeit verwendet: Molekulardynamik-Simulation

Motivation

Optische Fallen

- Lokalisierung von Objekten durch Gradientenkraft eines Laserstrahls
- Objekte von subatomarer bis Mikrometer-Skala
- Erste Idee zu Beginn des 20. Jahrhunderts (Lebedev, Nichols, Hull)
- Realisierung 1970 durch Ashkin

Experiment – Gieseler et al.

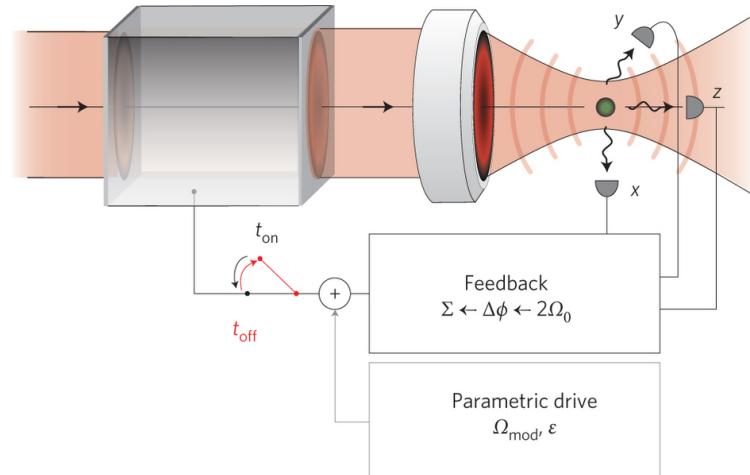


Abbildung: Experimenteller Aufbau [?]

Bewegungsgleichung

1-D Langevin-Gleichung:

$$\ddot{x} + \Gamma_0 \dot{x} + \Omega_0^2 x = \frac{1}{m} (F_{\text{fluct}} + F_{\text{ext}}) \quad (1)$$

- x Ort des Teilchens
 \dot{x} Geschwindigkeit des Teilchens
 \ddot{x} Beschleunigung des Teilchens
 m Masse des Teilchens
 Γ_0 Reibungskoeffizient
 Ω_0 Winkelfrequenz (Fluktuation)
 F_{fluct} stochastische Kraft
 F_{ext} externe Kraft

Stochastische Kraft

Stochastische Kraft:

$$F_{\text{fluct}} = \sqrt{2m\Gamma_0 k_B T_0} \xi(t) \quad (2)$$

- T_0 Temperatur Wärmereservoir
 k_B Boltzmann-Konstante
 $\xi(t)$ Weißes Rauschen

Experiment – Millen et al.

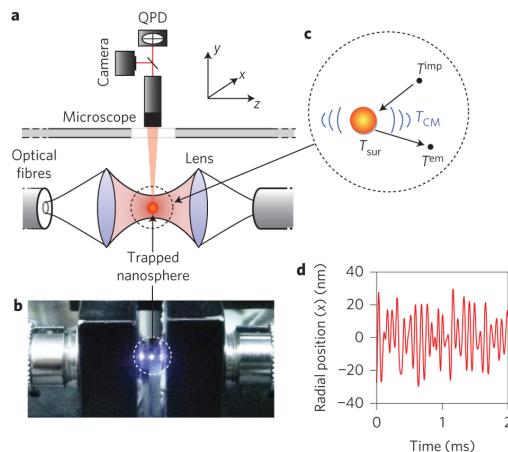


Abbildung: Experimenteller Aufbau [?]

Temperaturen

4 unterschiedliche Temperaturen:

- Schwerpunktstemperatur T_{COM}
- Oberflächentemperatur T_{sur}
- Temperatur eingehendes Gas T_{imp}
- Temperatur ausgehendes Gas T_{em}

Wärmereservoir des umgebenden Gases

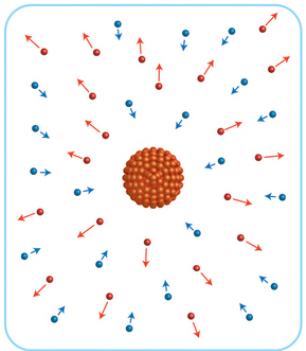


Abbildung: Wärmereservoir des umgebenden Gases [?]

Modifizierte Bewegungsgleichung

Modifizierte 1-D Langevin-Gleichung:

$$M\ddot{x}(t) + M(\Gamma^{\text{imp}} + \Gamma^{\text{em}})\dot{x}(t) + M\omega^2 x(t) = F^{\text{imp}} + F^{\text{em}} \quad (3)$$

x	Ort des Teilchens
\dot{x}	Geschwindigkeit des Teilchens
\ddot{x}	Beschleunigung des Teilchens
M	Masse des Teilchens
$\Gamma^{\text{imp}}/\text{em}$	Reibungskoeffizient eingehendes/ausgehendes Gas
ω	Winkelfrequenz (Fluktuation)
F^{imp}/em	Noise-Term eingehendes/ausgehendes Gas

Fragestellung

Mit Einführung der unterschiedlichen Temperaturen stellen sich folgende Fragen:

- Welchen Einfluss hat die Laserintensität auf die Schwerpunktsbewegung des Teilchens in der Falle?
- Welchen Einfluss hat die Temperatur des Umgebenden Gases?

Simulation

Molekulardynamik

Simulation der Entwicklung des Systems mit Molekulardynamik.
Zentraler Bestandteil: Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichungen

Velocity Verlet

Integration der Newton'schen Bewegungsgleichungen durch Velocity Verlet Algorithmus:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2m}\mathbf{F}_i(t)\Delta t^2 \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2m}[\mathbf{F}_i(t) + \mathbf{F}_i(t + \Delta t)]\Delta t\end{aligned}\quad (4)$$

\mathbf{r}_i Position Teilchen i

\mathbf{v}_i Geschwindigkeit Teilchen i

\mathbf{F}_i Kraft auf Teilchen i

Δt Zeitschritt

Nanoteilchen

Nanoteilchen dargestellt durch System aus N Teilchen auf FCC Gitter, die über Lennard-Jones Potential wechselwirken:

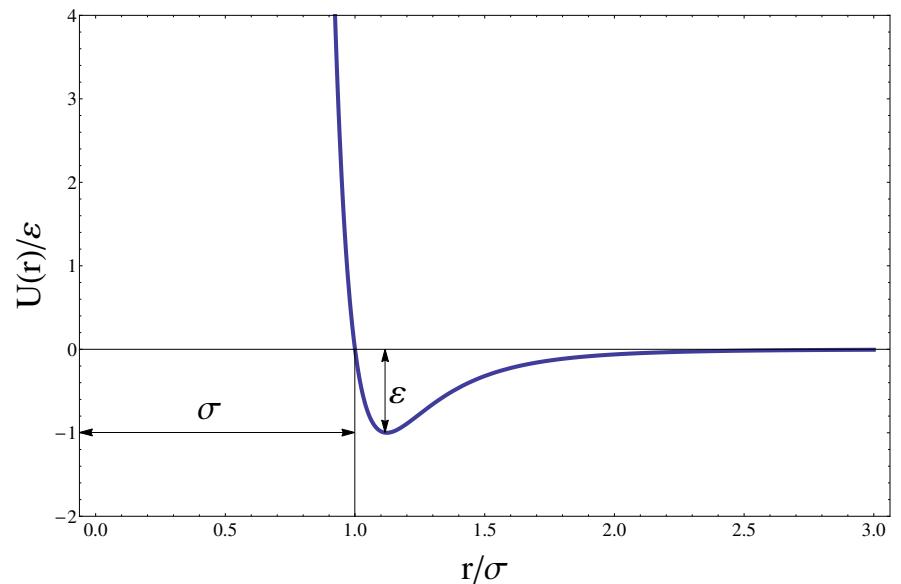
$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (5)$$

ε Potentialtiefe

σ Abstand, wo Potential Null ist

r Intermolekularer Abstand

Lennard-Jones Potential



Reduzierte Einheiten

Um Rechnung zu vereinfachen, werden reduzierte Einheiten verwendet:

- Länge: $\sigma \rightarrow r^* = r/\sigma$
- Energie: $\varepsilon \rightarrow U^* = U/\varepsilon$
- Masse: m

Lennard-Jones Potential und zugehörige Kraft in reduzierten Einheiten:

$$U(r) = 4 [r^{-12} - r^{-6}] \quad (6)$$

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} U(r) = 48 [r^{-14} - 0.5 r^{-8}] x \quad (7)$$

Laserstrahl – Wärmequelle

Simulation der Aufnahme von Wärme des Lasers: eHEX (enhanced Heat Exchange Algorithm)

Idee: sukzessive Reskalierung der Geschwindigkeiten

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i = \xi \mathbf{v}_i \quad (8)$$

wobei

$$\xi = \sqrt{1 + \frac{\Delta Q}{K}} \quad (9)$$

ΔQ ... Wärmemenge

K ... gesamte kinetische Energie

Laserstrahl – Lokalisierung

Lokalisierung des Teilchens durch Laserstrahl: Harmonisches Potential

$$\mathbf{F} = -k [\mathbf{r}_{COM} - \mathbf{x}_0] \quad (10)$$

$$U = \frac{1}{2} k [\mathbf{r}_{COM} - \mathbf{x}_0]^2 \quad (11)$$

- \mathbf{r}_{COM} Schwerpunktsposition
 \mathbf{x}_0 Minimum des Potentials
 k Federkonstante

Umgebendes Gas – Thermostat

Ideales Gas als Druckmedium mit Interaktionspotential

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \quad (12)$$

- ε Interaktionsstärke
 σ Interaktionslänge

Algorithmus

Wichtige Elemente des Algorithmus:

- Nanoteilchen umgeben von Volumen
- Eingefügte Teilchenanzahl pro Fläche:

$$\langle N_{\text{fac}} \rangle = \Delta t L^2 P \sqrt{\frac{1}{2\pi m k_B T}} \quad (13)$$

- Geschwindigkeitskomponente Normal zur Fläche

$$p(v_i) = \frac{m}{k_B T} v_i e^{-\frac{mv_i^2}{2k_B T}} \quad (14)$$

- Andere Komponenten: Maxwell-Boltzmann

Ergebnisse

Zusammenfassung

- System aus N Teilchen wird Initialisiert (Nanopartikel)
- Nanopartikel wird mit eHEX Algorithmus aufgeheizt
- Lokalisierung durch harmonisches Potential
- Gasteilchen strömen von umgebendem Volumen ein, interagieren mit Teilchen und verlassen die Simulationsbox (Thermostat)

Messung

Verwendete Parameter:

- $N = 32$
- $T_{\text{sur}} = 0.2$
- $P = 0.1, P = 0.5, P = 1.0$
- $T_{\text{imp}} = 0.05, T_{\text{imp}} = 0.1,$
- $\Delta Q = 0 \dots 0.5$

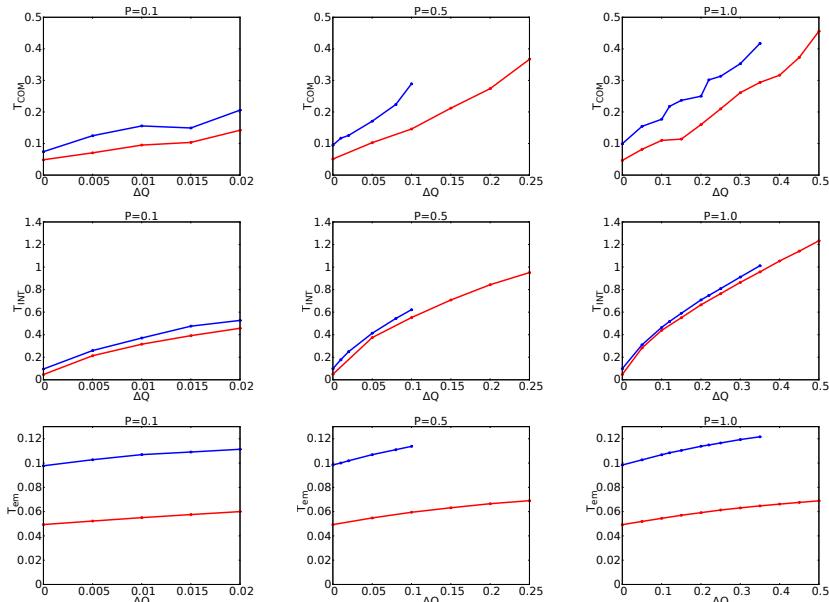
Gemessene Größen:

- Schwerpunktstemperatur T_{COM}
- Interne Temperatur T_{Sur}
- Temperatur des ausgehenden Gases T_{em}

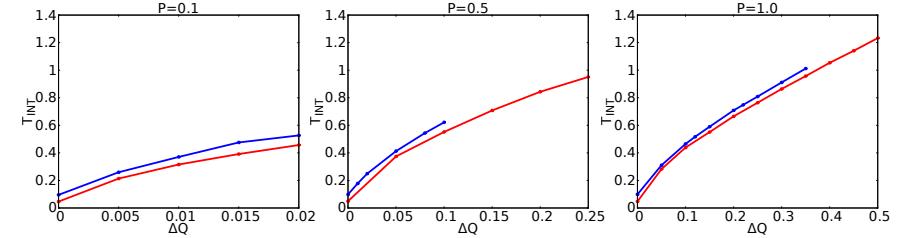
Instantane Temperatur:

$$T = \frac{1}{3k_B N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^2 \quad (15)$$

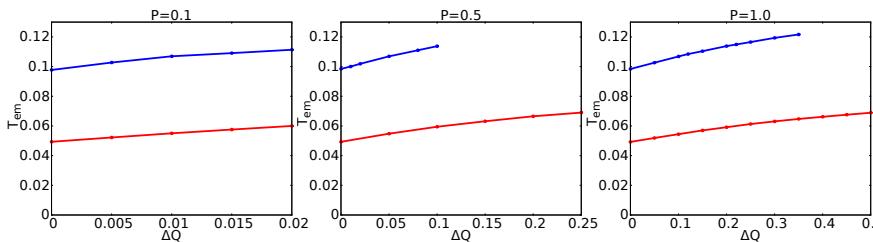
Ergebnisse – Überblick



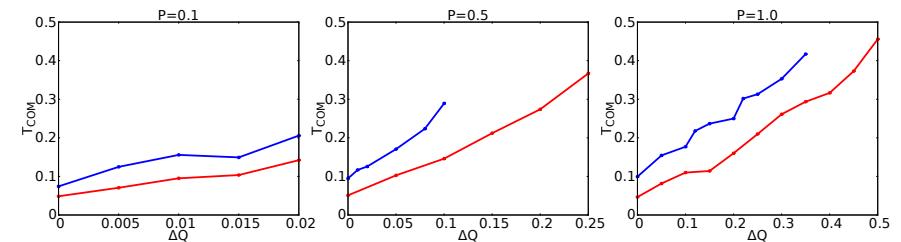
Ergebnisse – Interne Temperatur



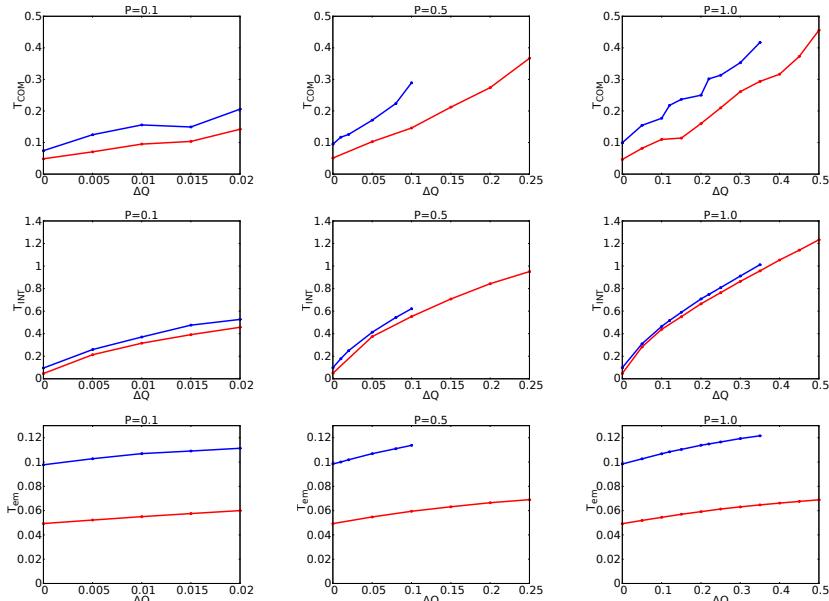
Ergebnisse – Temperatur des ausgehenden Gases



Ergebnisse – Schwerpunktsbewegung



Ergebnisse – Überblick



Conclusio

- Laserleistung beeinflusst die Schwerpunktstemperatur
- Laserleistung beeinflusst die Temperatur der ausgehenden Gasteilchen
- Temperatur der einfallenden Gasteilchen beeinflusst andere Temperaturen

Fluktuationstheorem

Fluktuationstheorem für diese Situation:

$$\frac{p(-\Delta S)}{p(\Delta S)} = e^{-\Delta S} \quad (16)$$

ΔS : relative Entropieänderung

$$\Delta S = \beta_0 Q + \Delta \phi \quad (17)$$

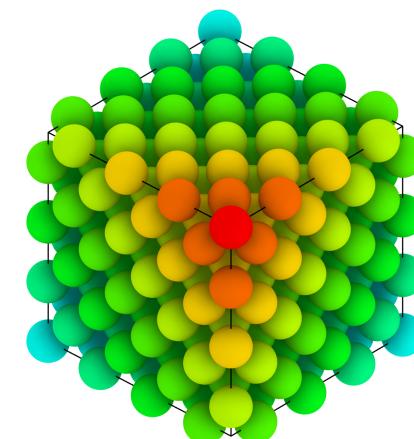
Q absorbierte Wärme

β reziproke Temperatur

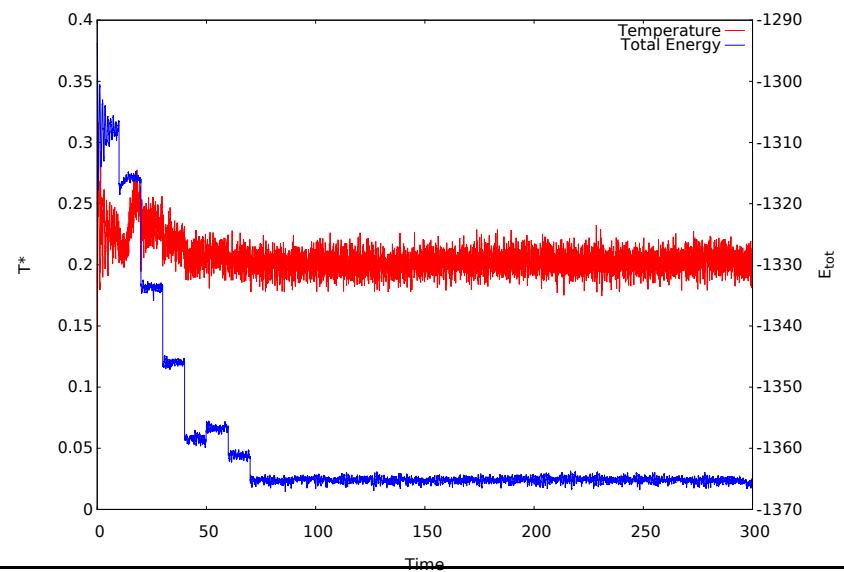
$\Delta \phi$ Differenz der trajektoriebasierten Entropie

Untersucht für 2 externe Kräfte: Feedback-Mechanismus ohne und mit Parametrischem Drive

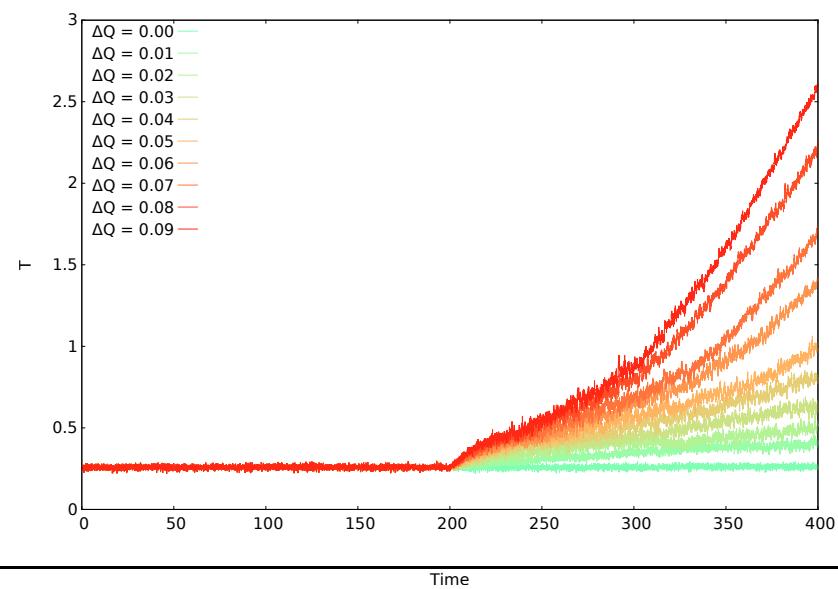
Nanopartikel



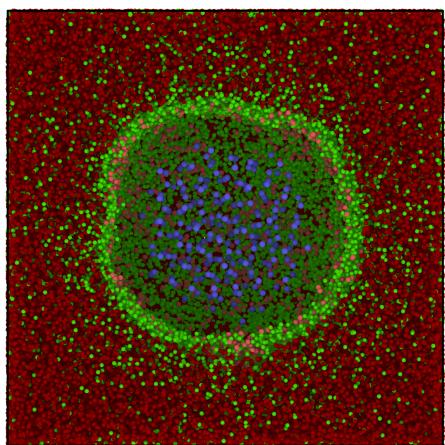
Initialisierung



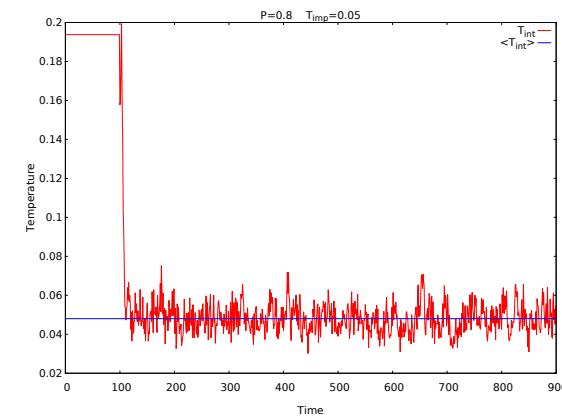
eHEX



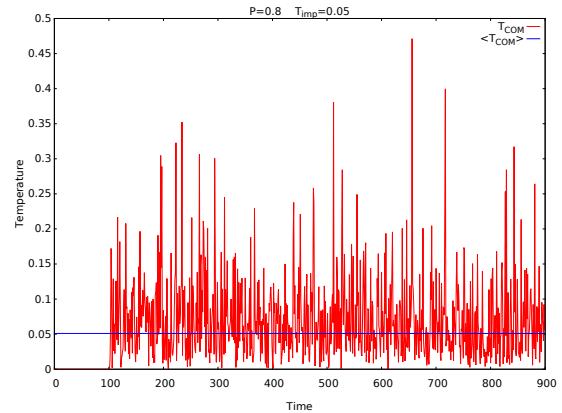
Gesamtsystem



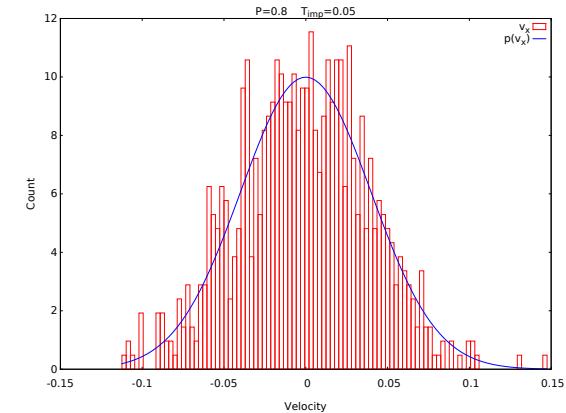
Kalibrierung



Kalibrierung



Kalibrierung

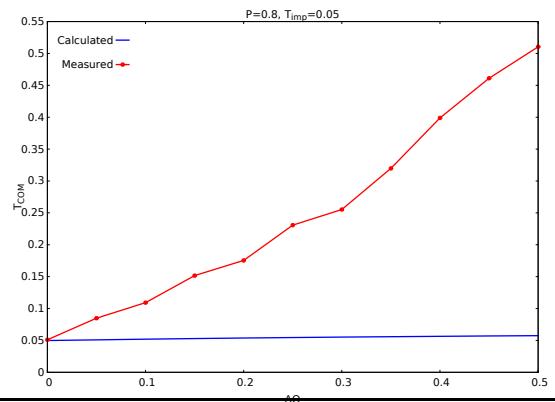


Vergleich mit Modell

Modell für T_{COM} von Millen et al.:

$$T_{\text{COM}} = \frac{T_{\text{imp}}^{3/2} + \frac{\pi}{8} T_{\text{em}}^{3/2}}{T_{\text{imp}}^{1/2} + \frac{\pi}{8} T_{\text{em}}^{1/2}} \quad (18)$$

Vergleich mit Simulation bei $P = 0.8$:



Thermischer Akkomodationskoeffizient

Thermischer Akkomodationskoeffizient

$$\alpha = \frac{T_{\text{em}} - T_{\text{imp}}}{T_{\text{sur}} - T_{\text{imp}}} \quad (19)$$

Im Paper: $\alpha = 0.777$

Simulation: $\alpha = 0.016$