

# Simulation of Nano Particles in a Laser Trap

Mathias Höld, BSc

23.03.2017

## Einleitung

### Motivation

- Experiment – Gieseler et al.
- Temperaturmodell

### Simulation

- Velocity Verlet
- Nanoteilchen
- Laserstrahl – Wärmequelle
- Laserstrahl – Lokalisierung
- Umgebendes Gas – Thermostat

### Ergebnisse

## Einleitung

## Einleitung

Verbindung von zwei Teilbereichen der Physik:

- Computational Physics
- Optische Fallen

## Computational Physics

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

## 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

## Motivation

## Experiment – Gieseler et al.

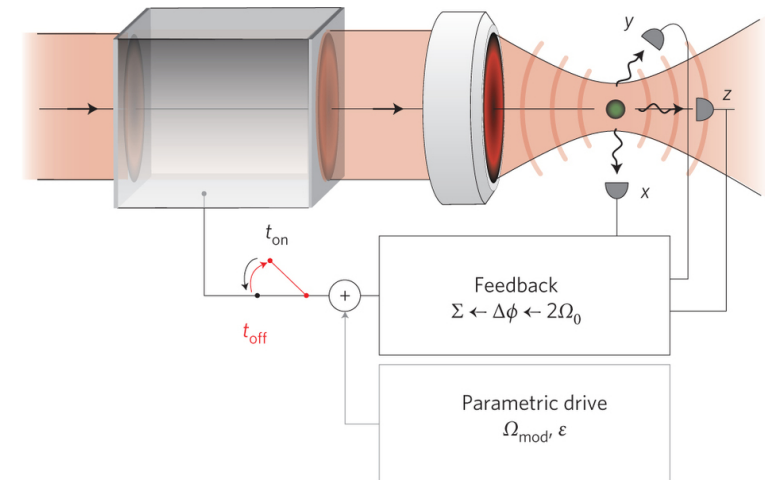


Abbildung: Experimenteller Aufbau [1]

## 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
$\Gamma_0$	Reibungskoeffizient
$\Omega_0$	Winkelfrequenz (Fluktuation)
$F_{\text{fluct}}$	stochastische Kraft
$F_{\text{ext}}$	externe Kraft

## Stochastische Kraft

Stochastische Kraft:

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

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

## Fluktuationstheorem

Fluktuationstheorem für diese Situation:

$$\frac{p(-\Delta S)}{\Delta S} = e^{-\Delta S} \quad (3)$$

$\Delta S$ : relative Entropieänderung

$$\Delta S = \beta_0 Q + \Delta\phi \quad (4)$$

$Q$	absorbierte Wärme
$\beta$	reziproke Temperatur
$\Delta\phi$	Differenz der trajektoriebasierten Entropie
Untersucht für 2 externe Kräfte: Feedback-Mechanismus ohne und mit Parametrischem Drive	

## Experiment – Millen et al.

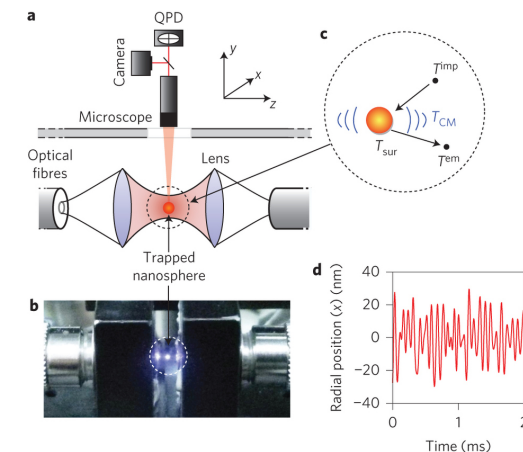


Abbildung: Experimenteller Aufbau [2]

## Temperaturen

4 unterschiedliche Temperaturen:

- Schwerpunkttemperatur  $T_{\text{COM}}$
- Oberflächentemperatur  $T_{\text{sur}}$
- Temperatur eingehendes Gas  $T_{\text{imp}}$
- Temperatur ausgehendes Gas  $T_{\text{em}}$

## Wärmereservoir des umgebenden Gases

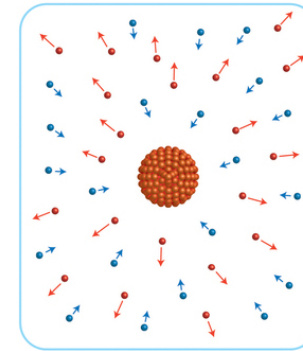


Abbildung: Wärmereservoir des umgebenden Gases [3]

## Modifizierte Bewegungsgleichung

Modifizierte 1-D Langevin-Gleichung:

$$M\ddot{x}(t) + M(\Gamma^{\text{imp}} + \Gamma^{\text{em}})\dot{x}(t) + M\omega^2x(t) = F^{\text{imp}} + F^{\text{em}} \quad (5)$$

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

## Velocity Verlet

Integration der Newton'schen Bewegungsgleichungen durch Velocity Verlet Algorithmus:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2m}\mathbf{F}_i(t)\Delta t^2 \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2m}\left[\mathbf{F}_i(t) + \mathbf{F}_i(t + \Delta t)\right]\Delta t \end{aligned} \quad (6)$$

$\mathbf{r}_i$  Position Teilchen  $i$   
 $\mathbf{v}_i$  Geschwindigkeit Teilchen  $i$   
 $\mathbf{F}_i$  Kraft auf Teilchen  $i$   
 $\Delta t$  Zeitschritt

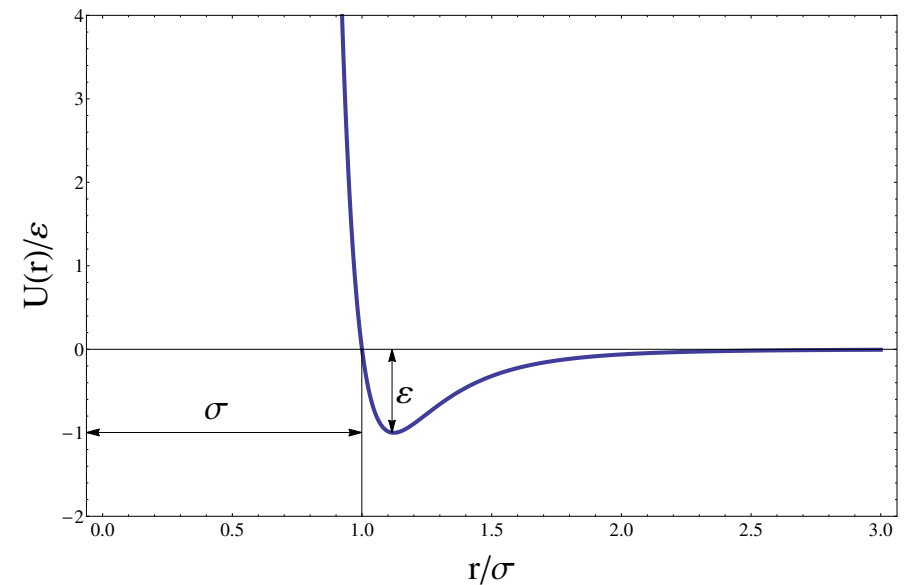
## Nanoteilchen

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

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (7)$$

$\varepsilon$  Potentialtiefe  
 $\sigma$  Abstand, wo Potential Null ist  
 $r$  Inter molekularer 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:

$$U(r) = 4 [r^{-12} - r^{-6}] \quad (8)$$

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} U(r) = 48 [r^{-14} - 0.5 r^{-8}] x \quad (9)$$

## Laserstrahl – Wärmequelle

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

Idee: sukzessive Reskalierung der Geschwindigkeiten

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i = \xi_k \mathbf{v}_i \quad (10)$$

kombiniert mit Velocity Verlet

## Laserstrahl – Lokalisierung

Lokalisierung des Teilchens durch Laserstrahl: Harmonisches Potential

$$\mathbf{F} = -k [\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0] \quad (11)$$

$$U = \frac{1}{2} k [\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0]^2 \quad (12)$$

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

## Umgebendes Gas – Thermostat

Ideales Gas als Druckmedium mit Interaktionspotential

$$U(r) = \varepsilon \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \quad (13)$$

$\varepsilon$  Interaktionsstärke  
 $\sigma$  Interaktionslänge

# Algorithmus

Wichtige Elemente des Algorithmus:

- Nanoteilchen umgeben von Volumen
- Eingefügte Teilchenanzahl pro Fläche:

$$\langle N_{\text{fac}} \rangle = \Delta t L^2 P \sqrt{\frac{1}{2\pi m k_B T}} \quad (14)$$

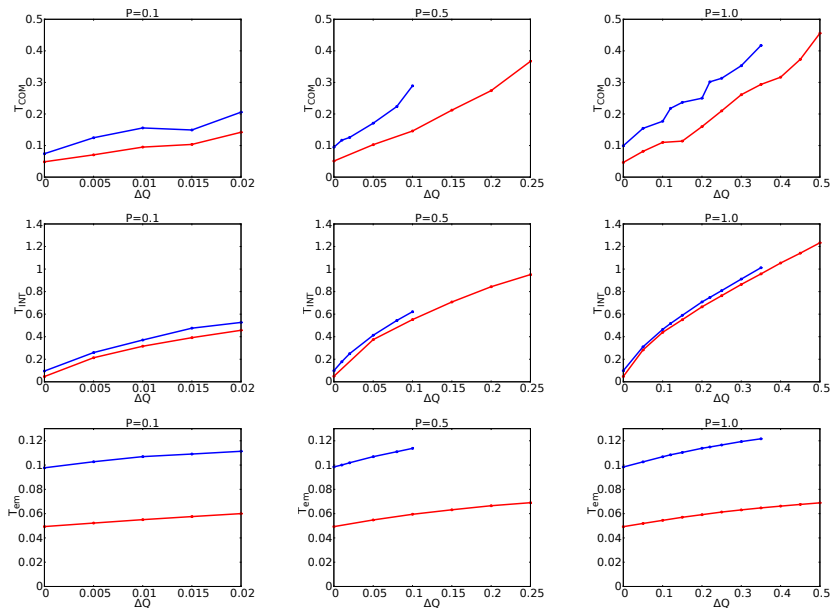
- Geschwindigkeitskomponente Normal zur Fläche

$$p(v_i) = \frac{m}{k_B T} v_i e^{-\frac{mv_i^2}{2k_B T}} \quad (15)$$

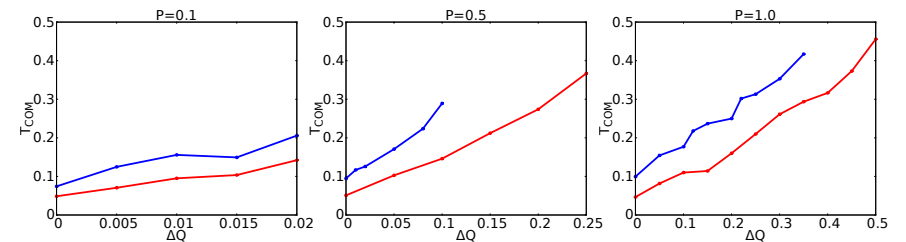
- Andere Komponenten: Maxwell-Boltzmann

## Ergebnisse

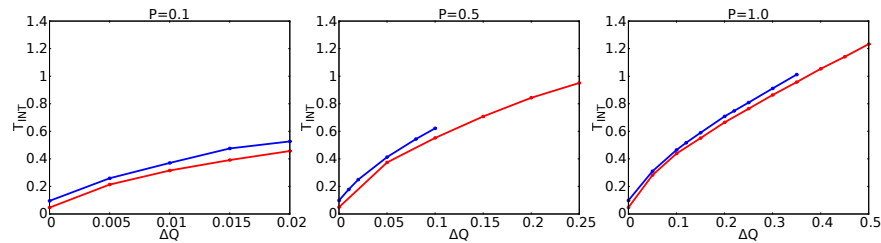
## Ergebnisse – Überblick



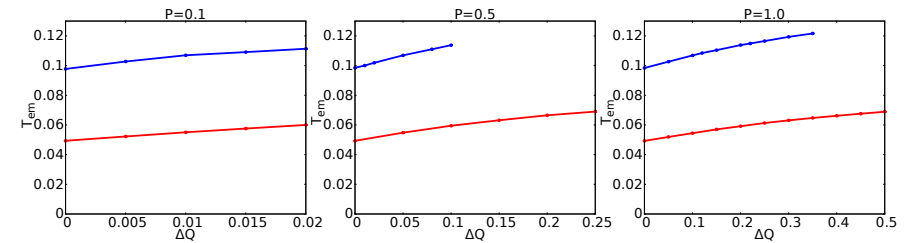
## Ergebnisse – Schwerpunktsbewegung



## Ergebnisse – Interne Temperatur






## Ergebnisse – Temperatur des ausgehenden Gases



## Conclusio

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

-  Jan Gieseler, Romain Quidant, Christoph Dellago, and Lukas Novotny.  
Dynamic relaxation of a levitated nanoparticle from a non-equilibrium steady state.  
*Nat Nano*, 9(5):358–364, May 2014.
-  Millen J., Deesuwan T., Barker P., and Anders J.  
Nanoscale temperature measurements using non-equilibrium brownian dynamics of a levitated nanosphere.  
*Nat Nano*, 9(6):425–429, June 2014.
-  Klaus Kroy.  
Levitating nanoparticles: Non-equilibrium nano-thermometry.  
*Nat Nano*, 9(6):415–417, June 2014.