

Exposé - Simulation of Nano Particles in a Laser Trap

Mathias Höld, BSc.

January 27, 2017

1 Konzept

In dieser Masterarbeit wird mit Hilfe von Methoden der Computational Physics ein Experiment simuliert, in dem Nanopartikel in einer Laserfalle gefangen werden. Das Hauptaugenmerk dabei liegt auf der Interaktion des Nanopartikels mit dem umgebenden Gas und dem Einfluss des Lasers auf die Bewegung des Nanopartikels in der Falle. Die benutzte Technik in dieser Simulation nennt sich „molecular dynamics“ und wird dazu verwendet, um die zeitliche Entwicklung des Zustandes des Nanopartikels und des Gases zu berechnen.

Das Experiment besteht aus einem Nanopartikel, in diesem Fall eine Siliziumdioxid-Kugel mit einem Durchmesser von $r \approx 75nm$, das in von einem Laser durch Gradientenkraft lokalisiert wird. Das Nanopartikel befindet sich in einer Vakuumkammer mit variablem Druck.

Die Gasteilchen, die das Nanopartikel umgeben, interagieren nicht miteinander, wenn die mittlere freie Weglänge der Gasteilchen viel größer ist als der Radius des Nanopartikels. Das bedeutet, dass die Interaktion nur zwischen den Gas Teilchen und dem Nanopartikel in der Falle stattfindet. Dadurch entstehen zwei Wärmereservoirs des umgebenden – ein „kaltes“, bestehend aus Teilchen vor der Interaktion mit dem Nanopartikel und ein „heißes“, bestehend aus Teilchen nach der Interaktion mit dem Nanopartikel.

Dem Nanopartikel selbst sind auch zwei Temperaturen zuzuweisen. Da es sich in einer Laserfalle befindet, absorbiert das Nanopartikel die Energie des Lasers in Form von Wärme, die an die innere Energie der Atome, aus dem das Nanopartikel besteht, abgegeben wird. Die Temperatur, die aus dieser inneren Energie abzuleiten ist, wird „Oberflächentemperatur“ genannt. Die zweite Temperatur, die dem Nanopartikel zuzuordnen ist, ist seine Schwerpunktstemperatur – jene Temperatur, die aus der Geschwindigkeit der Schwerpunktbewegung berechnet

wird. Durch die Lokalisierung in der Laserfalle ist wird diese Bewegung minimiert.

Die Simulation dieses Experiments wird durch Modellierung der Einzelnen Bestandteile durchgeführt. Das Nanopartikel wird durch einen FCC Kristall approximiert, in dem die Teilchen miteinander über ein Lennard-Jones Potential miteinander wechselwirken. Der Laser wird durch zwei unterschiedliche Teile modelliert. Zum einen wird die durch den Laser abgegebene und das Nanopartikel aufgenommene Energie durch den so genannten „eHEX“ – enhanced heat exchange algorithm – modelliert. Die Lokalisierung des Nanopartikels durch den Laser wird durch ein harmonisches Potential modelliert, das auf den Schwerpunkt wirkt. Das umgebende Gas wird durch einen Barostat modelliert, der in diesem Fall eher eine Funktion als Thermostat einnimmt. Die Bewegung der einzelnen Atome wird durch den velocity Verlet Algorithmus berechnet.

Die Fragestellung, der in dieser Arbeit nachgegangen wird ist: Hat die erhöhte Temperatur der inneren Freiheitsgrade des Nanopartikels einen Einfluss auf dessen Schwerpunktsbewegung?

2 Vorläufiges Inhaltsverzeichnis

Die Arbeit wird in folgende Kapitel unterteilt sein:

- Introduction
- Motivation
- Simulation
- Results
- Conclusion

3 Auswahlbibliographie

References

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, New York, NY, USA, 1989.
- [2] Hans C. Andersen. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of Chemical Physics*, 72(4):2384–2393, 1980.

-
- [3] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *The Journal of Chemical Physics*, 81(8):3684–3690, 1984.
- [4] Gavin E. Crooks. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Phys. Rev. E*, 60:2721–2726, Sep 1999.
- [5] C. Dellago. Lecture notes - computational physics ii: Simulation. 2016.
- [6] John Eargle, Dan Wright, and Zaida Luthey-Schulten. Multiple Alignment of protein structures and sequences for VMD. *Bioinformatics*, 22(4):504–506, Feb 2006.
- [7] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Computational science series. Elsevier Science, 2001.
- [8] D. Frishman and P. Argos. Knowledge-based secondary structure assignment. *Proteins: structure, function and genetics*, 23:566–579, 1995.
- [9] 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.
- [10] M. Grünwald and C. Dellago. Ideal gas pressure bath: a method for applying hydrostatic pressure in the computer simulation of nanoparticles. *Molecular Physics*, 104(22-24):3709–3715, 2006.
- [11] Philippe H. Hünenberger. *Thermostat Algorithms for Molecular Dynamics Simulations*, pages 105–149. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005.
- [12] B. Hafskjold, T. Ikeshoji, and S. Kjelstrup Ratkje. On the molecular mechanism of thermal diffusion in liquids. *Molecular Physics*, 80:1389–1412, December 1993.
- [13] William G. Hoover. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A*, 31:1695–1697, Mar 1985.
- [14] William Humphrey, Andrew Dalke, and Klaus Schulten. VMD – Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14:33–38, 1996.
- [15] 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.

-
- [16] Klaus Kroy. Levitating nanoparticles: Non-equilibrium nano-thermometry. *Nat Nano*, 9(6):415–417, June 2014.
- [17] Shuichi Nosé. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, 81(1):511–519, 1984.
- [18] Michel Sanner, Arthur Olsen, and Jean-Claude Spehner. Fast and robust computation of molecular surfaces. In *Proceedings of the 11th ACM Symposium on Computational Geometry*, pages C6–C7, New York, 1995. ACM.
- [19] Rajeev Sharma, Michael Zeller, Vladimir I. Pavlovic, Thomas S. Huang, Zion Lo, Stephen Chu, Yunxin Zhao, James C. Phillips, and Klaus Schulten. Speech/gesture interface to a visual-computing environment. 20:29–37, 2000.
- [20] John Stone. *An Efficient Library for Parallel Ray Tracing and Animation*. Master’s thesis, Computer Science Department, University of Missouri-Rolla, April 1998.
- [21] John Stone, Justin Gullingsrud, Paul Grayson, and Klaus Schulten. A system for interactive molecular dynamics simulation. In John F. Hughes and Carlo H. Séquin, editors, *2001 ACM Symposium on Interactive 3D Graphics*, pages 191–194, New York, 2001. ACM SIGGRAPH.
- [22] Alexander Stukowski. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1):015012, 2010.
- [23] William C. Swope, Hans C. Andersen, Peter H. Berens, and Kent R. Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *The Journal of Chemical Physics*, 76(1):637–649, 1982.
- [24] A. Varshney, F. P. Brooks, and W. V. Wright. Linearly scalable computation of smooth molecular surfaces. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 14:19–25, 1994.
- [25] Loup Verlet. Computer ”experiments” on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.*, 159:98–103, Jul 1967.
- [26] P. Wirnsberger, D. Frenkel, and C. Dellago. An enhanced version of the heat exchange algorithm with excellent energy conservation properties. *The Journal of Chemical Physics*, 143(12), 2015.

-
- [27] Idea taken from the Molecular Dynamics part of this lecture: <http://www.physics.buffalo.edu/phy411-506/>.
- [28] Image taken from https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/27/Elementarzelle_einer_kubisch-raumzentrierten_Elementarzelle.png.