

1 Einleitung

In meiner Masterarbeit beschäftigte ich mich mit der Simulation eines Nano Teilchens in einer Laserfalle. Diese Arbeit verbindet damit zwei Teilbereiche der Physik miteinander: Computational Physics und Optische Fallen, die ich beide kurz vorstellen möchte.

Die Computational Physics (oder auch Computergestützte Physik) verwendet numerische Methoden, um physikalische Prozesse auf dem Computer zu simulieren. Ein Meilenstein, der genannt werden sollte, ist die Arbeit von Metropolis et al., die im Jahre 1953 mit Hilfe des Computers MANIAC (Mathematical Analyzer Numerical Integrator And Computer) in Los Alamos die Zustandsgleichung eines Fluids berechneten. Die dort benutzte Methode, der Metropolis Monte Carlo Algorithmus, ist bis heute ein sehr wichtiger Bestandteil der Computational Physics. Seit 1953 hat sich nicht nur die Rechenleistung von Computern enorm verbessert, sondern es wurden auch zahlreiche neue Methoden zur Simulation von physikalischen Prozessen entwickelt, wie zum Beispiel Transition Path Sampling, Finite-Elemente-Methode und Molekulardynamik-Simulation. Letztere wurde in dieser Arbeit verwendet und wird später etwas detaillierter beschrieben.

Laserfallen, auch Optische Pinzette (englisch *optical tweezers* genannt) ist eine experimentelle Methode, bei der Objekte durch die Gradientenkraft eines fokussierten Laserstrahls lokalisiert werden. Die Größe der Objekte reicht von der subatomaren (Kühlung einzelner Atome) bis zur Mikrometer-Skala (Zellen). Die Idee für diese Methode entstand schon zu Beginn des 20. Jahrhunderts, als Lebedev und Nichols und Hull die Existenz von Strahlungsdruck experimentell nachweisen konnten. Da die Technik zu der Zeit noch nicht so ausgereift war, wurde die Idee erst 1970 wieder durch Ashkin aufgegriffen. Dieser verwendete Laser, um die Bewegung von Atomen und Mikrometergroßen Objekten zu beeinflussen.

2 Motivation

Die Motivation für diese Arbeit ist ein Optical Tweezer Experiment, das von Jan Gieseler, Romain Quidant, Christoph Dellago und Lukas Novotny durchgeführt wurde. Ziel des Experiments war der Nachweis des Fluktuationstheorems.

Im Experiment befindet sich eine Nanokugel mit einem Durchmesser von etwa 75 Nanometer und einer Masse von 3×10^{-18} kg in einer Laserfalle in einer Vakuumkammer. Die Kugel wird durch die Gradientenkraft des Lasers lokalisiert. In der Laserfalle fluktuiert die Position der Kugel in alle 3 Raumrichtungen. Die Fluktuation in jede Richtung ist von den anderen Richtungen entkoppelt und kann daher in einer eindimensionalen Bewegungsgleichung, der Langevin-Gleichung, beschrieben

werden:

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

Auf der linken Seite: x bezeichnet den Ort des Teilchens, \dot{x} und \ddot{x} die Geschwindigkeit und Beschleunigung, Γ_0 ist der Reibungskoeffizient und Ω_0 ist die Winkelfrequenz, die die Fluktuation entlang der gewählten Raumrichtung beschreibt. Auf der rechten Seite befinden sich zwei Kräfte. Die erste, F_{fluct} beschreibt die stochastische Kraft, die durch die Stöße mit dem umgebenden Gas verursacht wird. Diese Kraft ist gegeben durch:

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

Hier ist T_0 die Temperatur des Wärmereservoirs, also des umgebenden Gases, k_B ist die Boltzmann-Konstante und $\xi(t)$ ist weißes Rauschen für das gilt $\langle \xi(t) \rangle = 0$ und $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$, d.h. es handelt sich um eine randomisierte Kraft. Der Term Γ_0 taucht in der Formel wegen des Fluktuations-Dissipations-Theorems auf, das die Dämpfungsrate und die stochastische Kraft verbindet.

Die andere Kraft, F_{ext} ist eine externe, zeitabhängige Kraft, die das Teilchen in einen stationären Nichtgleichgewichtszustand zu bringen. Die Kraft wird zum Zeitpunkt $t = t_{\text{off}}$ deaktiviert und die Relaxation des Teilchens wird gemessen. Diese Messung wird durchgeführt, um das Fluktuationstheorem zu untersuchen, das geschrieben werden kann als:

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

wobei ΔS die relative Entropieänderung ist, gegeben durch:

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

Q bezeichnet die vom Wärmereservoir absorbierte Wärme, β ist die reziproke Temperatur bei der die Wärme absorbiert wird und $\Delta\phi$ ist die Differenz der trajektoriebasierten Entropie. Das Fluktuationstheorem beschreibt die Wahrscheinlichkeit für Verletzung des 2. Hauptsatzes für finite (kleine) Zeitintervalle. Das ist ein statistischer Effekt und steht nicht im Widerspruch zum 2. Hauptsatz.

Die Untersuchung des Fluktuationstheorems wird bei Relaxationsprozessen von zwei unterschiedlichen stationären Nichtgleichgewichtszuständen durchgeführt. Der erste wird durch einen Feedback-Mechanismus erzeugt und der zweite durch eine Kombination des Feedback-Mechanismus und einem zusätzlichen Feedback-Drives. Die Ergebnisse zeigen, dass beide Zustände beim Relaxationsprozess dem Fluktuationstheorem genügen, wodurch das Theorem für diesen Fall experimentell bestätigt wird.

J. Millen, T. Deesuwana, P. Barker und J. Anders führten ein ähnliches Experiment

durch (ohne den Feedback Mechanismus), wo sie die Temperatur des umgebenden Gases untersuchten.

Während in dem Modell von Gieseler et al. nur eine Temperatur T_0 verwendet wird, stellen Millen et al. ein Modell mit vier unterschiedlichen Temperaturen auf: die Temperatur des einströmenden und ausströmenden Gases, der Oberfläche und des Schwerpunkts des Teilchens.

Das Nanoteilchen in der Falle absorbiert Wärme vom Laser, was zu einer erhöhten Oberflächentemperatur führt, die im Allgemeinen höher ist als die Temperatur des einströmenden Gases. Die einströmenden Gastteilchen wechselwirken mit dem Teilchen in der Falle, nehmen dabei Energie auf und verlassen das Teilchen mit einer höheren Temperatur. Im Modell wird angenommen, dass die Gastteilchen nur mit dem Nanopartikel in der Falle und nicht untereinander interagieren, was zu der Entstehung von zwei Wärmereservoirs mit unterschiedlicher Temperatur führt.

Diese Unterschiedlichen Temperaturen führen zu einer Modifikation der eindimensionalen 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 , \dot{x} und \ddot{x} sind Position, Geschwindigkeit und Beschleunigung des Nanoteilchens, M ist die Masse des Nanopartikels, ω ist die Frequenz der Falle, Γ^{imp} und Γ^{em} sind die Dämpfungsterme für das ein- und ausgehende Gas und F^{imp} und F^{em} sind die zugehörigen Noise-Terme.

Im Experiment zeigen Millen et al., dass die Laserintensität und Teilchengröße einen Einfluss auf die Temperatur der ausgehenden Gastteilchen hat.

Man sieht also, dass im Modell für die Bewegung des Teilchens in der Falle mehr Temperaturen als nur die Temperatur des umgebenden Gases berücksichtigt werden sollen. In dieser Masterarbeit beschäftigte ich mich daher mit der Frage: Welchen Einfluss haben Laserintensität und die Temperatur des eingehenden Gases auf die Bewegung des Nanoteilchens in der Falle?

3 Simulation

Um das Experiment zu simulieren, müssen die einzelnen Bestandteile des Experiments modelliert werden. Das Nanoteilchen in der Falle wird durch ein System aus Atomen in einem FCC Gitter approximiert, die Gradientenkraft des Lasers durch ein harmonisches Potential, die Absorption der Laserenergie im Teilchen durch den eHEX Algorithmus und das umgebende Gas durch einen Thermostaten mit einem idealen Gas als Druckmedium. Die Dynamik des Systems wird mit Hilfe der Methode der Molekulardynamik-Simulation berechnet.

3.1 Molekulardynamik - Die Idee

Molekulardynamik Simulationen werden verwendet um die Dynamik klassischer atomarer oder molekularer Vielteilchensysteme zu berechnen. Klassisch in diesem Sinne bedeutet, dass die Trajektorien mit Hilfe von Modellen der klassischen Physik und nicht der Quantenmechanik berechnet werden. Für große Systeme liefert das sehr gute Ergebnisse. Für kleine Systeme wie Wasserstoff oder Helium sind quantenmechanische Effekte nicht mehr vernachlässigbar und daher sollten andere Methoden dafür verwendet werden.

3.2 Velocity-Verlet Algorithmus

Mikroskopisch gesehen beschreitet das System eine Trajektorie im Phasenraum, wo jeder Punkt einem Set von Positionen und Impulsen entspricht. Die Verbindung zwischen zwei Punkten entspricht der Entwicklung von einem Zustand zum anderen. Diese Entwicklung gilt es zu simulieren. Dazu wird die Methode der finiten Differenzen gewählt. Die Trajektorie im Phasenraum wird in Abschnitte mit Länge Δt geteilt und die Bewegungsgleichungen für jedes segment werden berechnet. Der Algorithmus, der hier verwendet wird und eine sehr zuverlässige Wahl ist, ist der Velocity Verlet Algorithmus. Er basiert auf der Taylorreihenentwicklung der Koordinaten und Geschwindigkeiten. Der Algorithmus kann durch 2 simple Formeln dargestellt werden:

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

Wo r_i die Position des Teilchens i ist, v_i ist seine Geschwindigkeit und F_i ist die auf das Teilchen wirkende Kraft, Δt ist der benützte Zeitschritt. Umgesetzt wird der Algorithmus durch folgende Schritte

1. Berechne die Kräfte zwischen den Teilchen (nur erster Schritt)
2. Berechne neue Positionen
3. Berechne neue Geschwindigkeiten
4. Berechne Kräfte mit neuen Positionen
5. Berechne neue Geschwindigkeit mit neuen Kräften -> benütze diese für Schritt 2 und setze dort fort

3.3 Das Nanoteilchen

Um das Nanoteilchen in der Falle zu modellieren wird ein System aus N Teilchen verwendet, die durch das Lennard-Jones Potential wechselwirken:

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

hier ist ε die Potentialtiefe, σ die Distanz bei der das Potential gleich Null ist und r ist der intermolekulare Abstand.

Um Rechnungen zu vereinfachen werden so genannte reduzierte Einheiten verwendet: σ als Einheit der Länge, ε als Einheit der Energie und die molekulare Masse m als Masse. Üblicherweise werden reduzierte Variablen mit einem Stern versehen. Da aber hier reduzierte Einheiten ständig verwendet werden, wird der Stern weggelassen. Das Lennard Jones Potential kann damit geschrieben werden als:

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

Die zugehörige Kraft, die für den Velocity Verlet Algorithmus gebraucht wird, wird durch den negativen Gradienten des Potentials berechnet. Als Beispiel die Kraft in x -Richtung:

$$\begin{aligned} F_x &= -\frac{\partial}{\partial x} U(r) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} 4 [r^{-12} - r^{-6}] \\ &= 48 [r^{-14} - 0.5 r^{-8}] x \end{aligned} \quad (9)$$

(y,z analog).

Ein wichtiger Schritt in der Simulation ist die Initialisierung der Teilchen. Für diese Arbeit wurde als Startkonfiguration ein kubisch flächenzentriertes Gitter (FCC, face centered cubic) gewählt. Die Anzahl der Teilchen in einer Elementarzelle eines FCC Gitters ist 4 (1/8 an jeder Ecke und 1/2 auf jeder der 6 Seitenflächen). Um einen Würfel aus solchen Einheitszelle zu erzeugen, werden M^3 solcher Zellen benötigt und damit $4M^3$ Teilchen. Die Bedingung $N = 4M^3 = 4, 32, 108, 256, \dots$ führt zu den so genannten magic numbers. Um Zeit und Rechenaufwand zu sparen wurden in dieser Arbeit $N = 32$ Teilchen verwendet.

Die Erzeugung des Gitters wird mit Hilfe von 4 eindeutigen Punkten durchgeführt:

$$\begin{aligned} p_1 &= \{0, 0, 0\} \\ p_2 &= \{0.5 a, 0.5 a, 0\} \\ p_3 &= \{0.5 a, 0, 0.5 a\} \\ p_4 &= \{0, 0.5 a, 0.5 a\} \end{aligned}$$

wobei a die Gitterkonstante des FCC Gitters ist, gegeben durch From the particle number N and the number of FCC unit cells per edge M the *lattice constant* a can be calculated

$$a = \frac{L}{M} \quad (10)$$

wobei M die Anzahl der FCC Einheitszellen entlang einer Kante ist und L die Seitenlänge des gesamten Systems, gegeben durch

$$L = \sqrt[3]{\frac{N}{\rho}} \quad (11)$$

ρ ist die Dichte des Systems.

3.4 Laserstrahl - Wärmequelle

Das Teilchen in der Falle wird durch den Laserstrahl gefangen. Während die Schwerpunktsbewegung dabei lokalisiert ist, absorbieren die einzelnen Atome des Nanoteilchens Wärme vom Laser und bekommen damit eine hohe interne Temperatur.

Um dieses Verhalten zu simulieren wird anstatt eines Thermostaten ein Algorithmus verwendet, der Wärmeaustausch als Grundlage hat. Dieser Algorithmus heißt eHEX.

Der grundsätzliche Aufbau sieht folgendermaßen aus: Im Gesamtsystem werden Regionen festgelegt, die entweder als Wärmequelle oder Wärmesenken dienen. Diese Regionen werden mit Γ_k bezeichnet und haben korrespondierende Mengen von ausgetauschter Wärme ΔQ_k . Negatives ΔQ_k bedeutet, dass die Region Wärme von der Umgebung aufnimmt und positives ΔQ_k bedeutet, dass die Region Wärme an die Umgebung abgibt. Die Teilchen in der Simulationsbox Γ und in den „Wärme“-Regionen besitzen Schwerpunktschwindigkeiten v_Ω und v_{Γ_k} . Die Änderung der Energie in den Regionen wird vorgenommen durch das Reskalieren der Geschwindigkeiten mit einem Faktor ξ_k und einem Shift:

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i = \xi_k \mathbf{v}_i + (1 - \xi_k) \mathbf{v}_{\Gamma_k} \quad (12)$$

$$\xi_k = \sqrt{1 + \frac{\Delta Q_{\Gamma_k}}{\mathcal{K}_{\Gamma_k}}} \quad (13)$$

wobei ΔQ_{Γ_k} die ausgetauschte Wärme in der Region ist und \mathcal{K}_{Γ_k} die kinetische (Ruhe)-Energie der Region:

$$\mathcal{K}_{\Gamma_k} = \sum_{i \in \Gamma_k} \frac{m_i v_i^2}{2} - \frac{m_{\Gamma_k} v_{\Gamma_k}^2}{2} \quad (14)$$

Um den Algorithmus durchzuführen werden noch einige Variablen benötigt, auf die ich hier nicht im Detail eingehen möchte.

Die Situation für die Masterarbeit ist etwas einfacher: es gibt nur eine Region, die als Wärmequelle agiert und die Schwerpunktsgeschwindigkeit gleich Null.

Der Algorithmus basiert auf einem Velocity-Verlet Algorithmus mit einem Halbschritt in der Geschwindigkeit, ist jedoch etwas komplizierter. Deswegen werde ich nicht alle Formeln aufschreiben, sondern die Einzelnen Schritte beschreiben:

1. Berechnung aller intermolekularen Kräfte (Initialisierung)
2. Reskalierung der Geschwindigkeiten $\rightarrow \bar{v}^n$
3. Halbschritt der skalierten Geschwindigkeit durch addieren der Kraft $\rightarrow \bar{v}^{n+1/2}$
4. Berechnung der skalierten Positionen mit dem Halbschritt der Geschwindigkeiten $\rightarrow \bar{r}^{n+1}$
5. Berechnung der Kräfte basierend auf den neuen Positionen
6. Halbschritt der skalierten Geschwindigkeit mit vorigem Halbschritt und neuen Kräften $\rightarrow \bar{v}^{n+1}$
7. Berechnung der Geschwindigkeit durch erneute skalierung mit aktualisiertem ξ
8. Berechnung der neuen Positionen und Korrektur

Der Korrekturterm im letzten Schritt ist das Herzstück des eHEX Algorithmus. Er sorgt dafür, dass der Algorithmus keinen Drift in der Energie im Langzeitverhalten aufweist.

3.5 Laserstrahl - Lokalisierung

Die Lokalisierung des Teilchens wird durch ein harmonisches Potential simuliert. Kraft und Potential können geschrieben werden als

$$\mathbf{F} = -k \left[\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0 \right] \quad (15)$$

$$U = \frac{1}{2} k \left[\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0 \right]^2 \quad (16)$$

wobei r_{COM} die Position des Schwerpunkts, x_0 die Position des Minimums des Potentials und k die Federkonstante ist. Die Schwerpunktsposition wird berechnet durch

$$\mathbf{r}_{\text{COM}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \quad (17)$$

Um das Potential in die Bewegungsgleichung einfließen zu lassen wird die Kraft auf den Schwerpunkt berechnet und zu den intermolekularen Kräften hinzugefügt.

3.6 Umgebendes Gas - Thermostat

Im Experiment ist Teilchen von einem Gas in einer Vakuumkammer umgeben. Dieses Gas wird durch einen Thermostaten/Barostaten simuliert, der ein ideales Gas als Druckmedium verwendet.

Die Gasteilchen strömen dabei in die Simulationsbox, interagieren mit dem Teilchen in der Falle und verlassen das System wieder (mit einer höheren Temperatur). Die Gasteilchen interagieren also nur mit dem Teilchen in der Falle, nicht untereinander. Dadurch ist dieses Modell der Situation im Experiment sehr ähnlich.

Dazu wird das simulierte Teilchen mit einem Volumen umgeben, das auf der Geometrie des Systems basiert. Der Algorithmus ist so gestaltet, dass sich dieses Volumen im Laufe der Simulation der Geometrie des Systems anpasst. Ich habe mich entschlossen, eine simple, sich nicht ändernde Geometrie zu wählen: einen Würfel mit Seitenlänge L , der eine Seitenlänge des LJ-Systems vom Teilchen in der Falle entfernt ist. Damit gilt $L = 3s$. Das verwendete Potential für die Interaktion zwischen Gas und Nanoteilchen ist ein Soft-Sphere Potential

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \quad (18)$$

wo ε die Interaktionsstärke ist, σ die Interaktionslänge und r die Distanz zwischen Gasteilchen und Atom im Nanoteilchen.

Der Algorithmus kann für die vorliegende Situation folgendermaßen zusammengefasst werden:

1. Erzeuge Zufallszahl an Teilchen, die an einer Seite des umgebenden Volumens einströmen soll aus einer Poisson-Verteilung mit Erwartungswert

$$\langle N_{\text{fac}} \rangle = \Delta t L^2 P \sqrt{\frac{1}{2\pi m k_B T}} \quad (19)$$

wobei Δt der Zeitschritt, L Seitenlänge des Umgebenden Volumens, P eingestellter Druck, m Masse, k_B Boltzmann Konstante und T die Temperatur. Die Positionen der Teilchen werden über entsprechende Fläche gleichmäßig verteilt. Die Geschwindigkeiten werden aus zwei unterschiedlichen Verteilungen gewürfelt. Die Komponente, die normal auf die gewählte Fläche des Volumens ist, wird aus einer Rayleigh Verteilung gewählt

$$p(v_i) = \frac{m}{k_B T} v_i e^{-\frac{m v_i^2}{2 k_B T}} \quad (20)$$

Die restlichen Komponenten werden aus einer Maxwell-Boltzmann Verteilung gezogen.

2. Führe den ersten Velocity Verlet Schritt aus, um neue Positionen zu berechnen
3. Wenn Gasteilchen das umgebende Volumen verlassen habe, entferne sie
4. Berechne die Kräfte
5. Führe den zweiten Schritt des Velocity Verlet Algorithmus aus

4 Ergebnisse

Da ich alle Modelle selbst umgesetzt habe, sollten alle Bestandteile auf Korrektheit untersucht werden.

4.1 Nanoteilchen

Um zu verifizieren, dass es sich um einen FCC Kristall handelt wird die Darstellung so gewählt, dass man das für den FCC Kristall typische ABC-Muster der close packed structure sieht.

4.2 Velocity Verlet

Simulationen mit der Molekulardynamik Methode finden im mikrokanonischen Ensemble statt, d.h. Volumen, Teilchenzahl und Gesamtenergie sind konstant. Die Geschwindigkeiten der Teilchen werden bei der Initialisierung aus einer Maxwell-Boltzmann Verteilung gewürfelt. Danach müssen zwei Anpassungen vorgenommen werden.

Um zu verhindern, dass das System sich bewegt, wird die Schwerpunktsgeschwindigkeit berechnet und von allen Teilchen subtrahiert.

$$\mathbf{v}_{\text{COM}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \quad (21)$$

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{\text{COM}} \quad (22)$$

Da es für die Teilchen kein sehr natürlicher Zustand ist sich genau auf den Punkten in einem FCC Gitter zu befinden benötigt das System einige Zeitschritte zur Equilibrierung, was dazu führen kann, dass sich eine andere Temperatur einstellt,

als die, die gewünscht ist. Um zu versichern, dass die Temperatur der gewünschten entspricht, müssen die Geschwindigkeiten der Teilchen reskaliert werden:

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{v}_i^2}{2} \quad (23)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{3(N-1)T}{2E}} \quad (24)$$

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \lambda \mathbf{v}_i \quad (25)$$

Diese Reskalierung wird einige Male vorgenommen, bis das System die gewünschte Temperatur erreicht hat. Da diese Reskalierung keinem natürlichen internen Prozess entspricht, kann man einen Sprung in der Kurve der Gesamtenergie sehen.

4.3 eHEX

Der eHEX Algorithmus besteht aus vielen Schritten und vielen Variablen, was ihn sehr fehleranfällig macht. Weiters sollte der Effekt von verschiedenen Werten von ΔQ untersucht werden. Was wir erwarten ist eine kontinuierliche Erhöhung der internen Temperatur des Systems. Die Rate der Erhöhung sollte mit steigendem ΔQ steigen und die Temperatur sollte sich für $\Delta Q = 0$ nicht verändern. Weiters sollte mit steigender interner Temperatur auch die Gesamtenergie des Systems steigen. Diese zwei Erwartungen werden erfüllt, wie die beiden Bilder zeigen.

4.4 Thermostat

Der Thermostat hält das System davon ab sich zu überhitzen. Durch Interaktion von Gasteilchen mit dem Nanoteilchen in der Falle wird Energie auf die Gasteilchen übertragen und somit stellt sich eine neue, höhere konstante Temperatur ein. Diese höhere Temperatur ist die Basis für die Messungen.

4.5 Simulation des Experiments

Da wir jetzt festgestellt haben, dass alle Teile individuell funktionieren, ist es Zeit sie zusammenzuführen, um das Experiment zu simulieren, um die Frage zu beantworten: Welchen Einfluss hat die Laserintensität auf die Schwerpunktsbewegung des Gases? Und welche Rolle spielt die Temperatur des Umgebenden Gases? Zunächst müssen wir feststellen, ob die Anwendung des eHEX Algorithmus die Schwerpunktsbewegung des Nanoteilchens beeinflusst. Diese Untersuchung resultiert in einer langweiligen Grafik mit einer konstanten, waagrechten Gerade, die zeigt, dass der eHEX Algorithmus alleine keinen Einfluss auf die Schwerpunktsbewegung hat.

Der nächste Schritt ist eine Art Kalibrierung. Bei Laserintensität $\Delta Q = 0$ und unter Einwirkung des Thermostaten sollte sich das gesamte System auf die selbe Temperatur, nämlich die Temperatur des umgebenden Gases einstellen. Dies ist der Fall, wie in folgenden Grafiken zu sehen ist. Die gewählten Parameter sind: $P = 0.8$, $T_{\text{imp}} = 0.05$, $T = 0.2$, $N = 32$.

Da nun der Algorithmus kalibriert ist, werden die interessanteren Fälle von $\Delta Q > 0$ untersucht. Der eingestellte Druck ist proportional zur Anzahl der erzeugten Teilchen auf jeder Fläche. Höherer Druck bedeutet also mehr Teilchen, die Wärme vom Nanoteilchen abführen können, was zu einem höheren Maximalwert von ΔQ führt. Die Temperatur des Umgebenden Gases fließt ebenfalls in die Anzahl der erzeugten Teilchen ein, deshalb wurden zwei Temperaturen zur Untersuchung gewählt: 0.05 und 0.1 - ein Viertel und die Hälfte der ursprünglichen internen Temperatur des Gasteilchens. Der Druck wird von 0.1 bis 1.2 in Schritten von 0.1 variiert und die zugeführte Wärmemenge von 0 bis 0.5 in Schritten von 0.05 im Allgemeinen (nicht konstant, sondern hängt von den Umständen ab, vor allem bei $P = 0.1$ und $P = 0.2$). Für die Darstellung werden 3 Werte für den Druck gewählt: $P = 0.1$, $P = 0.5$ und $P = 1.0$. Für jeden dieser Druckwerte werden die Graphen für die Schwerpunkttemperatur, die interne Temperatur und die Temperatur des ausgehenden Gases geplottet. Dabei ist auf die Unterschiedliche Skalierung der Achsen zu achten.

Die Erste Beobachtung ist, dass die Schwerpunktsbewegung und die Temperatur des ausgehenden Gases mit steigendem ΔQ ansteigen. Das ist zu erwarten, da bei höherer ins System gempumpter Wärme mehr Energie an die umgebenden Teilchen abgegeben wird. Weiters wird beobachtet, dass die Temperatur schneller für niedrige Drücke ansteigt (was durch die Unterschiedliche Skalierung der Ordinate nicht sofort auffällt). Dieses Verhalten ist ebenfalls zu erwarten, weil das Umgebende Gas als Thermostat wirkt und höherer Druck eine höhere Anzahl an Gasteilchen zur Folge hat, die mehr Wärme vom System abtransportieren.

Die Entwicklung der Temperatur hängt auch von der Temperatur des Umgebenden Gases ab. Die zur Temperatur $T = 0.1$ korrespondierenden (blau) steigen etwas schneller an, als die roten Kurven.

Millen et al. geben eine Formel für die Entwicklung der Schwerpunkttemperatur an. Diese Formel kann mit den Ergebnissen verglichen werden. Man sieht in der Grafik (die als Repräsentation gewählt wurde), dass die gemessene Temperatur schneller ansteigt als die berechnete. Dies kann einige Gründe haben. Ein Grund dafür könnte ein Unterschiedlicher thermischer Akkomodationskoeffizient sein. Dieser ist gegeben durch

$$\alpha = \frac{T_{\text{em}} - T_{\text{imp}}}{T_{\text{sur}} - T_{\text{imp}}} \quad (26)$$

Der Akkomodationskoeffizient ist ein Maß für die Übertragung der Energie vom Nanoteilchen auf das Gas. Der Wert für α im Paper von Millen et al. ist $\alpha = 0.777$, während der berechnete Wert für diese Simulation bei $\alpha = 0.016$. Das bedeutet, dass die Übertragung der Energie von Nanoteilchen auf Gasteilchen nicht auf die gleiche Art und Weise stattfindet.

4.6 Conclusio

Um zusammenzufassen: Für diese Arbeit habe ich ein Optical Tweezer Experiment simuliert, um den Einfluss der Laserintensität auf die Schwerpunktsbewegung zu untersuchen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Laserintensität, die Temperatur des eingehenden Gases und der umgebende Druck die Schwerpunktsbewegung beeinflussen.