

---

Optical trapping bezeichnet eine experimentelle Methode, bei der Objekte mit einer Größe, die von einer subatomaren bis zur Mikrometer-Skala reicht, durch die Gradientenkraft eines Lasers lokalisiert werden. In dieser Arbeit benutzen wir Methoden aus dem Feld der Computational Physics, um das Verhalten eines Nanoteilchens in so einer Laserfalle und seine Interaktionen mit dem Laser und dem umgebenden Gas zu simulieren.

Gieseler et al. führten ein sogenanntes „Optical Tweezer“-Experiment durch, um das Fluktuationstheorem zu untersuchen. In diesem Experiment verwenden sie die Lagevin-Gleichung, um das Verhalten einer Nanokugel aus Siliciumdioxid in einer Laserfalle zu modellieren, wobei die Temperatur des Umgebungsgases als Wärmereservoir in dem Modell verwendet wird, um die stochastische Kraft auf das Nanoteilchen zu beschreiben. Millen et al. führen ein ähnliches Experiment durch und zeigten auf, dass zwischen vier Temperaturen unterschieden werden muss: die Temperatur des eingehenden Gases, des ausgehenden Gases, der Schwerpunktsbewegung und der Oberfläche des Nanoteilchens. Mit Augenmerk auf diese verschiedenen Temperaturen wird das Experiment mit Molecular Dynamics Methoden simuliert, um den Einfluss der Stärke des Lasers und des Umgebungsgases auf die Schwerpunktstemperatur des Nanoteilchens zu untersuchen.

Um das Experiment zu simulieren, müssen die einzelnen Bestandteile modelliert werden. Das Nanoteilchen wird durch ein System aus Atomen dargestellt, die über ein Lennard-Jones Potential miteinander wechselwirken. Die Gradientenkraft des Lasers, die das Nanoteilchen lokalisiert, wird durch ein harmonisches Potential approximiert. Da die Energie des Lasers vom Nanoteilchen absorbiert wird, erhöht sich die interne Temperatur des Nanoteilchens, was durch Anwendung des eHEX Algorithmus erreicht wird. Das umgebende Gas hat die Funktion eines Barostaten und die eines Thermostaten und wird in der Simulation durch einen Algorithmus repräsentiert, der ein ideales Gas als Druckmedium verwendet.

Die Simulation zeigt, dass die Schwerpunktstemperatur von der Lasertemperatur und der Temperatur des einströmenden Gases abhängt.