Simulation of Nano Particles in a Laser Trap

Mathias Höld, BSc

23.03.2017

Einleitung

Verbindung von zwei Teilbereichen der Physik:

- Computational Physics
- Optische Fallen

Computational Physics

- Meilenstein: Entwicklung des Metropolis Monte Calro Algoithmus (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

Experiment – Gieseler et al.

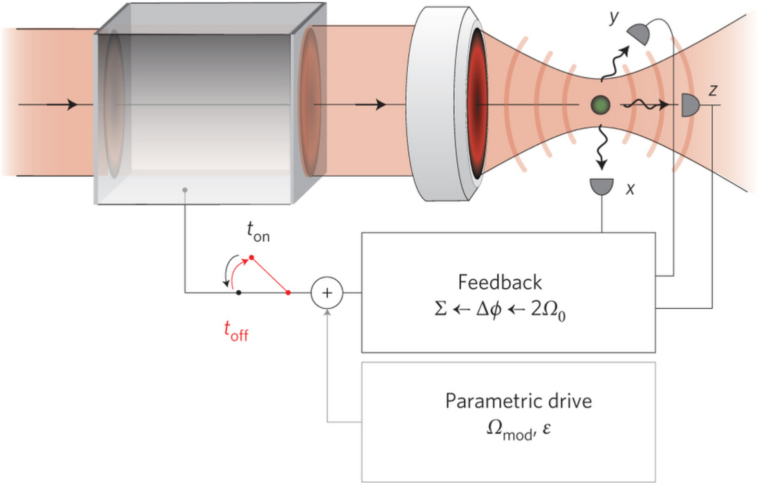


Abbildung: Experimenteller Aufbau [1]

Bewegungsgleichung

1-D Langevin-Gleichung:

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

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:

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

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

Fluktuationstheorem

Fluktuationstheorem für diese Situation:

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

ΔS: relative Entropieänderung

$$\Delta S = \beta_0 Q + \Delta\phi \tag{4}$$

Q	absorbierte Wärme
β	reziproke Temperatur
$\Delta\phi$	Differenz der trajektoriebasierten Entropie

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

Experiment – Millen et al.

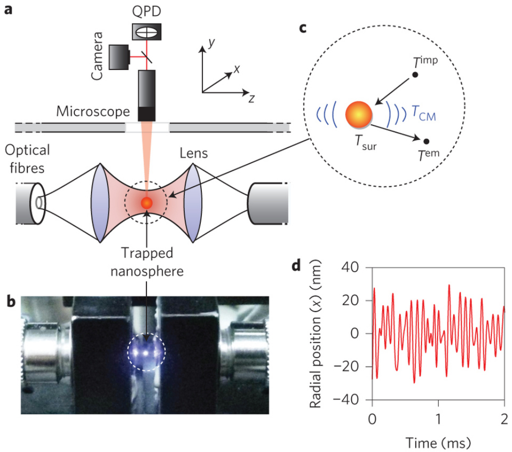


Abbildung: Experimenteller Aufbau [2]

Temperaturen

4 unterschiedliche Temperaturen:

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

Wärmereservoire des umgebenden Gases

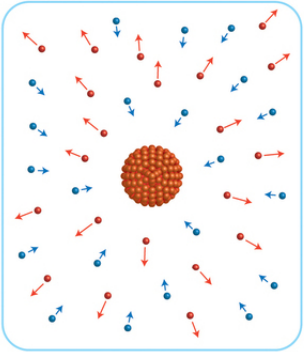


Abbildung: Wärmereservoire des umgebenden Gases [3]

Modifizierte Bewegungsgleichung

Modifizierte 1-D Langevin-Gleichung:

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

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
ω	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?

Velocity Verlet

Integration der Newton'schen Bewegungsgleichungen durch Velocity Verlet Algorithmus:

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

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

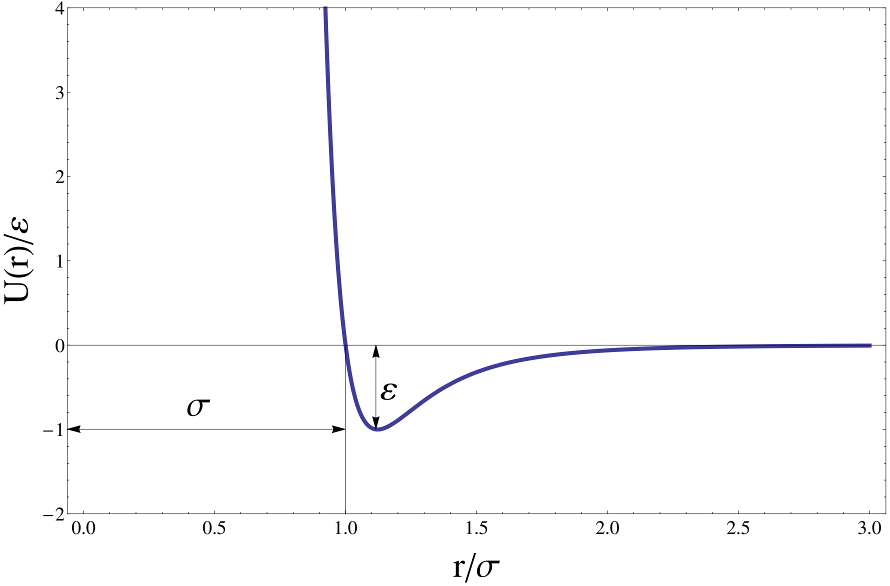
Nanoteilchen

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

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

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

Lennard-Jones Potential und zugehörige Kraft in reduzierten Einheiten:

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

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

Laserstrahl – Wärmequelle

Simulation der Aufnahme von Wärme des Lasers: eHEX (enhanced Heat Exchange Algorithm)
Idee: sukzessive Reskalierung der Geschwindigkeiten

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i = \xi_k \mathbf{v}_i \tag{10}$$

kombiniert mit Velocity Verlet

Laserstrahl – Lokalisierung

Lokalisierung des Teilchens durch Laserstrahl: Harmonisches Potential

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

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

$\mathbf{r}_{\mathrm{COM}}$	Schwerpunktsposition
$\mathbf{x_0}$	Minimum des Potentials
k	Federkonstante

Umgebendes Gas – Thermostat

Ideales Gas als Druckmedium mit Interaktionspotential

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

ε	Interaktionsstärke
σ	Interaktionslänge

Algorithmus

Wichtige Elemente des Algorithmus:

- Teilchen umgeben von Volumen
- Eingefügte Teilchenanzahl pro Fläche:

$$\langle N_{\mathrm{fac}} \rangle = \Delta t L^2 P \sqrt{\frac{1}{2\pi m k_B T}} \tag{14}$$

- Geschwindigkeitskomponente Normal zur Fläche

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

- Andere Komponenten: Maxwell-Boltzmann

Test1

Test

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.