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 Compuational 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:

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

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:

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

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:

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

wobei ΔS die relative Entropieänderung ist, gegeben durch:

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

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. Deesuwan, 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 Allgmeinen höher ist als die Temperatur des einströmenden Gases. Die eiströmenden Gasteilchen 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 Gasteilchen 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:

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

x, $\dot{x}$ 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

4 Ergebnisse