

# Simulation of Nano Particles in a Laser Trap

Mathias Höld, BSc

23.03.2017

## Einleitung

## Motivation

- Experiment – Gieseler et al.
- Temperaturmodell

## Simulation

- Molekulardynamik
- Velocity Verlet
- Nanoteilchen
- Laserstrahl – Wärmequelle
- Laserstrahl – Lokalisierung
- Umgebendes Gas – Thermostat

## Ergebnisse

# Einleitung

# Einleitung

Verbindung von zwei Teilbereichen der Physik:

- Computational Physics
- Optische Fallen

# Computational Physics

- Meilenstein: Entwicklung des Metropolis Monte Carlo 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

# Motivation

# Experiment – Gieseler et al.

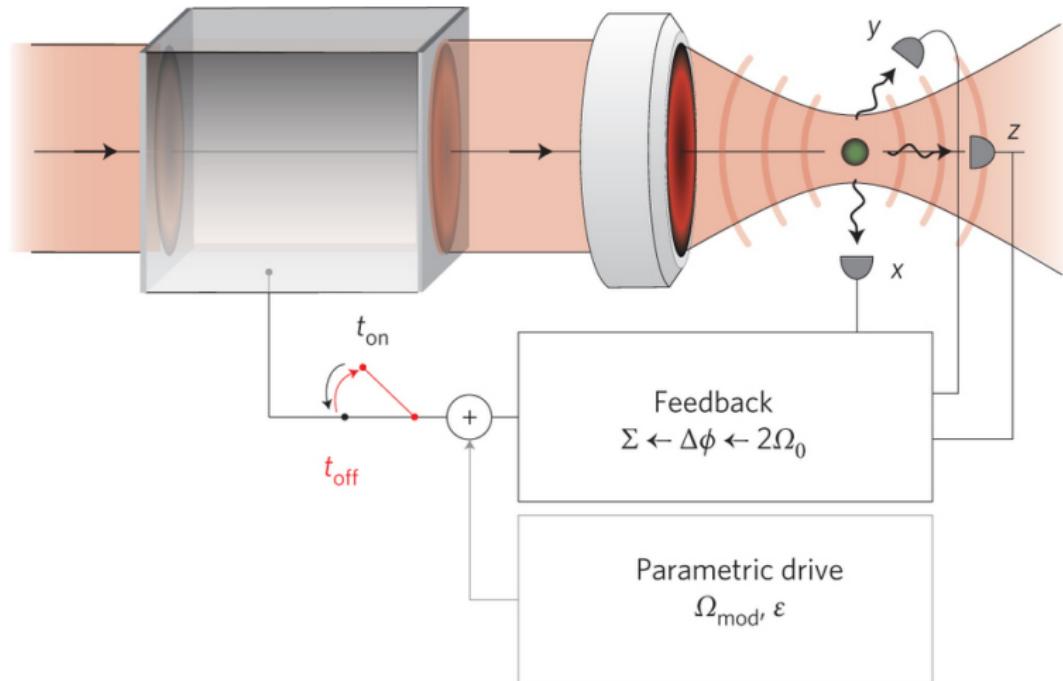


Abbildung: Experimenteller Aufbau [1]

# Bewegungsgleichung

1-D Langevin-Gleichung:

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

- |                    |                               |
|--------------------|-------------------------------|
| $x$                | Ort des Teilchens             |
| $\dot{x}$          | Geschwindigkeit des Teilchens |
| $\ddot{x}$         | Beschleunigung des Teilchens  |
| $m$                | Masse des Teilchens           |
| $\Gamma_0$         | Reibungskoeffizient           |
| $\Omega_0$         | Winkelfrequenz (Fluktuation)  |
| $F_{\text{fluct}}$ | stochastische Kraft           |
| $F_{\text{ext}}$   | externe Kraft                 |

# Stochastische Kraft

Stochastische Kraft:

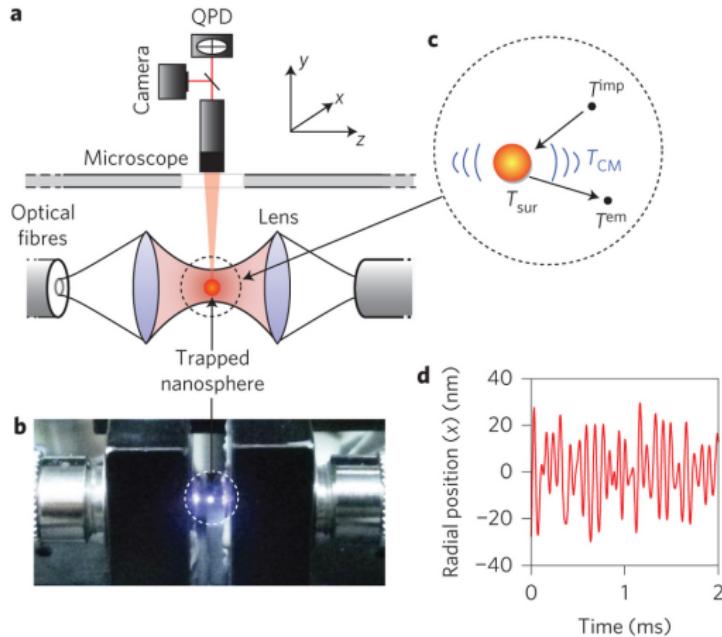
$$F_{\text{fluct}} = \sqrt{2m\Gamma_0 k_B T_0} \xi(t) \quad (2)$$

$T$  Temperatur Wärmereservoir

$k_B$  Boltzmann-Konstante

$\xi(t)$  Weißes Rauschen

# Experiment – Millen et al.



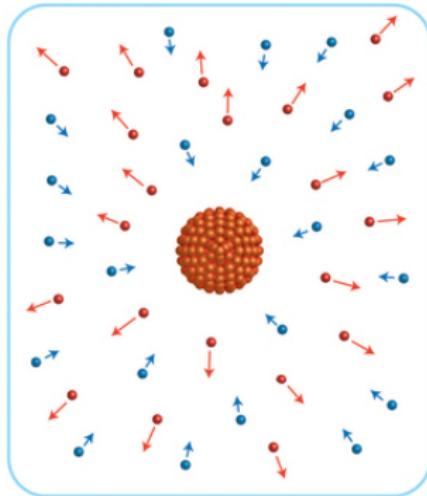
**Abbildung:** Experimenteller Aufbau [2]

# Temperaturen

4 unterschiedliche Temperaturen:

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

# Wärmereservoir des umgebenden Gases



**Abbildung:** Wärmereservoir des umgebenden Gases [3]

# Modifizierte Bewegungsgleichung

Modifizierte 1-D Langevin-Gleichung:

$$M\ddot{x}(t) + M(\Gamma^{\text{imp}} + \Gamma^{\text{em}})\dot{x}(t) + M\omega^2x(t) = F^{\text{imp}} + F^{\text{em}} \quad (3)$$

$x$	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
$\omega$	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?

# Simulation

# Molekulardynamik

Simulation der Entwicklung des Systems mit Molekulardynamik.  
Zentraler Bestandteil: Lösung der Newton'schen Bewegungsgleichungen

# Velocity Verlet

Integration der Newton'schen Bewegungsgleichungen durch Velocity Verlet Algorithmus:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2m}\mathbf{F}_i(t)\Delta t^2 \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2m}[\mathbf{F}_i(t) + \mathbf{F}_i(t + \Delta t)]\Delta t\end{aligned}\quad (4)$$

$\mathbf{r}_i$  Position Teilchen  $i$

$\mathbf{v}_i$  Geschwindigkeit Teilchen  $i$

$\mathbf{F}_i$  Kraft auf Teilchen  $i$

$\Delta t$  Zeitschritt

# Nanoteilchen

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

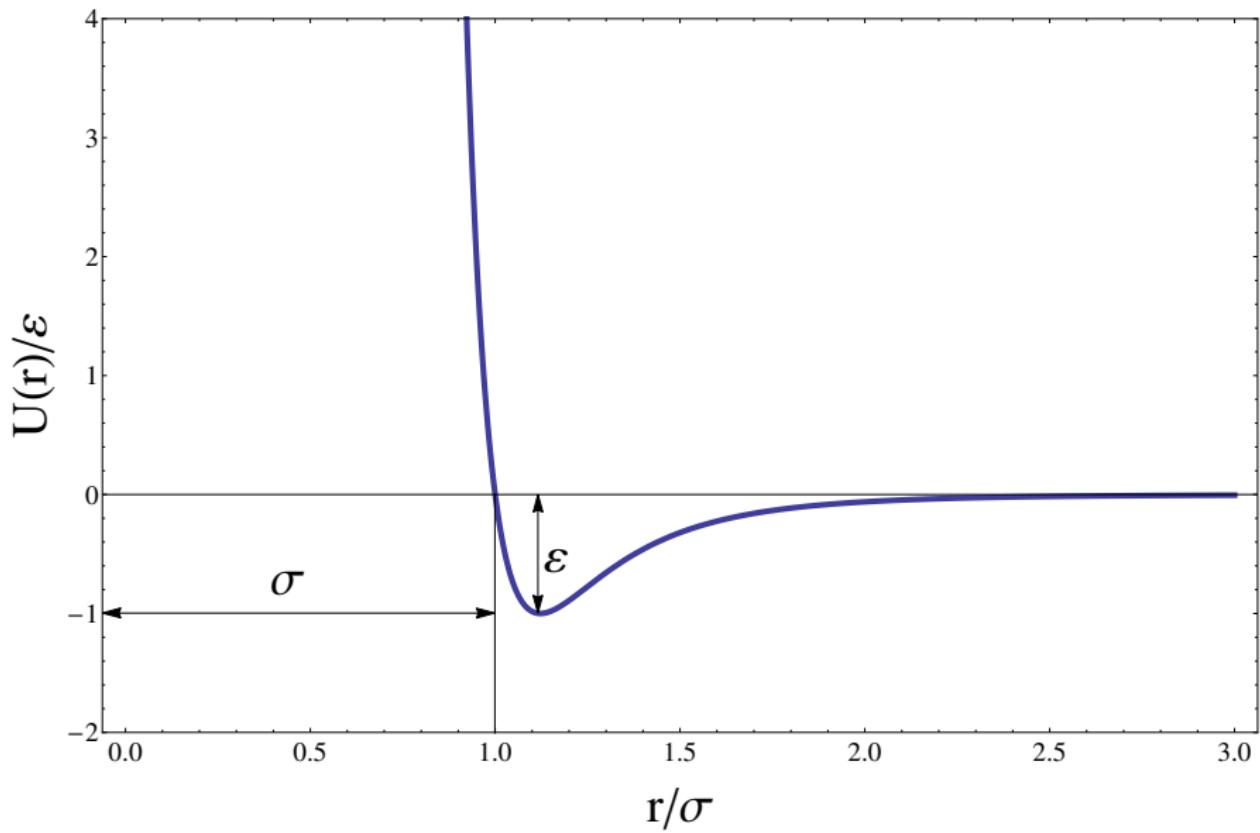
$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (5)$$

$\epsilon$  Potentialtiefe

$\sigma$  Abstand, wo Potential Null ist

$r$  Intermolekularer Abstand

# Lennard-Jones Potential



# Reduzierte Einheiten

Um Rechnung zu vereinfachen, werden reduzierte Einheiten verwendet:

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

Lennard-Jones Potential und zugehörige Kraft in reduzierten Einheiten:

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

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} U(r) = 48 [r^{-14} - 0.5 r^{-8}] x \quad (7)$$

# Laserstrahl – Wärmequelle

Simulation der Aufnahme von Wärme des Lasers: eHEX (enhanced Heat Exchange Algorithm)

Idee: sukzessive Reskalierung der Geschwindigkeiten

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i = \xi \mathbf{v}_i \quad (8)$$

wobei

$$\xi = \sqrt{1 + \frac{\Delta Q}{K}} \quad (9)$$

$\Delta Q$  ... Wärmemenge

K ... gesamte kinetische Energie

# Laserstrahl – Lokalisierung

Lokalisierung des Teilchens durch Laserstrahl: Harmonisches Potential

$$\mathbf{F} = -k [\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0] \quad (10)$$

$$U = \frac{1}{2} k [\mathbf{r}_{\text{COM}} - \mathbf{x}_0]^2 \quad (11)$$

$\mathbf{r}_{\text{COM}}$  Schwerpunktsposition

$\mathbf{x}_0$  Minimum des Potentials

$k$  Federkonstante

# Umgebendes Gas – Thermostat

Ideales Gas als Druckmedium mit Interaktionspotential

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

$\varepsilon$  Interaktionsstärke

$\sigma$  Interaktionslänge

# Algorithmus

Wichtige Elemente des Algorithmus:

- Nanoteilchen umgeben von Volumen
- Eingefügte Teilchenanzahl pro Fläche:

$$\langle N_{\text{fac}} \rangle = \Delta t L^2 P \sqrt{\frac{1}{2\pi m k_B T}} \quad (13)$$

- Geschwindigkeitskomponente Normal zur Fläche

$$p(v_i) = \frac{m}{k_B T} v_i e^{-\frac{mv_i^2}{2k_B T}} \quad (14)$$

- Andere Komponenten: Maxwell-Boltzmann

# Zusammenfassung

- System aus N Teilchen wird Initialisiert (Nanopartikel)
- Nanopartikel wird mit eHEX Algorithmus aufgeheizt
- Lokalisierung durch harmonisches Potential
- Gasteilchen strömen von umgebendem Volumen ein, interagieren mit Teilchen und verlassen die Simulationsbox (Thermostat)

# Ergebnisse

# Messung

Verwendete Parameter:

- $N = 32$
- $T_{\text{sur}} = 0.2$
- $P = 0.1, P = 0.5, P = 1.0$
- $T_{\text{imp}} = 0.05, T_{\text{imp}} = 0.1,$
- $\Delta Q = 0 \dots 0.5$

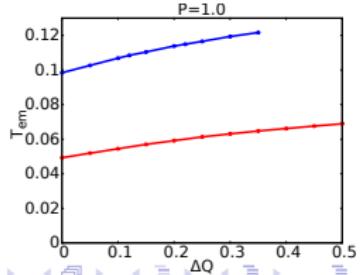
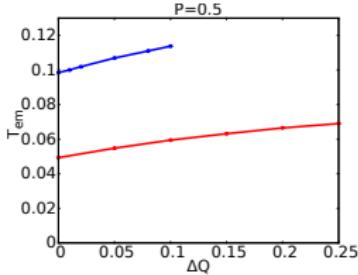
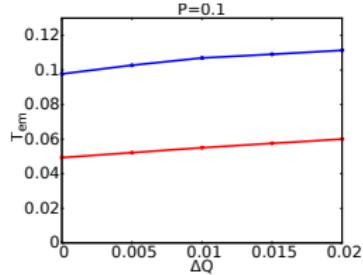
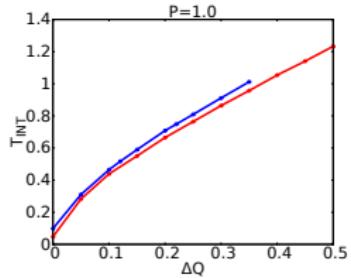
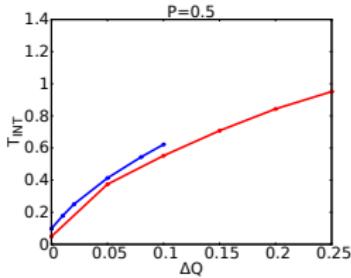
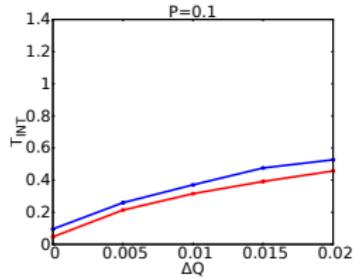
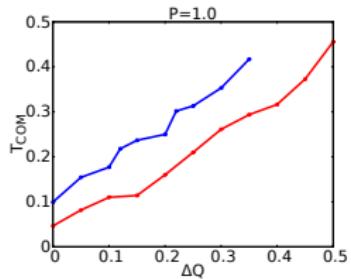
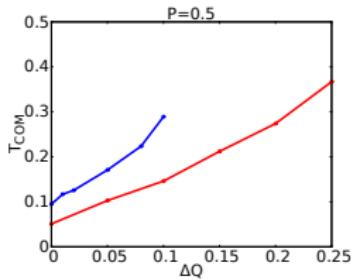
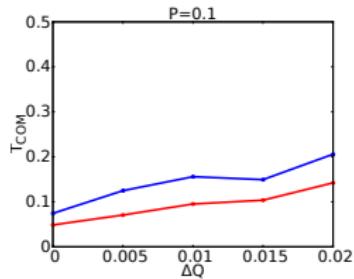
Gemessene Größen:

- Schwerpunktstemperatur  $T_{\text{COM}}$
- Interne Temperatur  $T_{\text{Sur}}$
- Temperatur des ausgehenden Gases  $T_{\text{em}}$

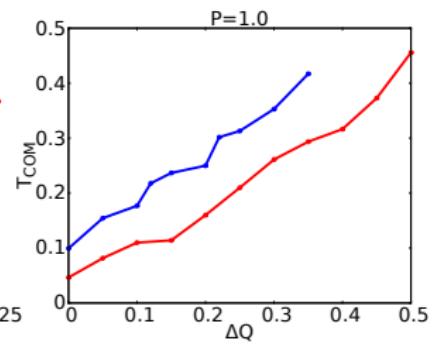
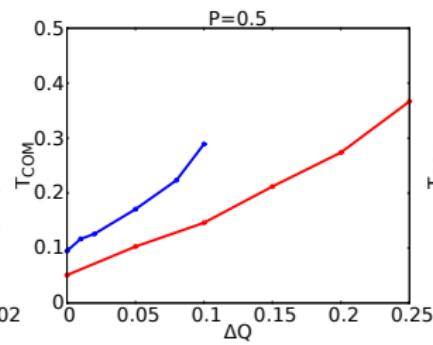
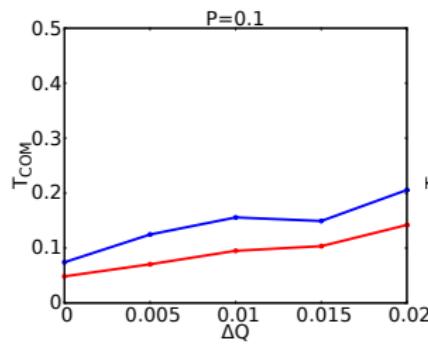
Instantane Temperatur:

$$T = \frac{1}{3k_B N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^2 \quad (15)$$

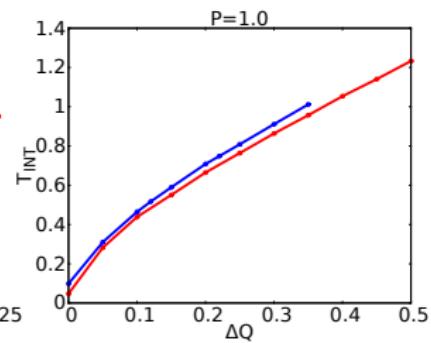
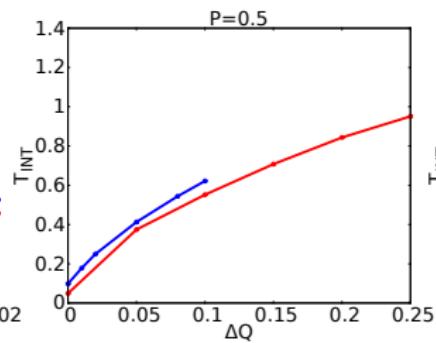
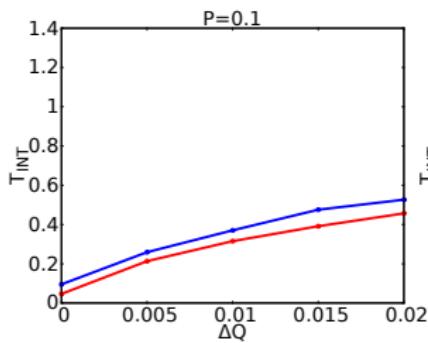
# Ergebnisse – Überblick



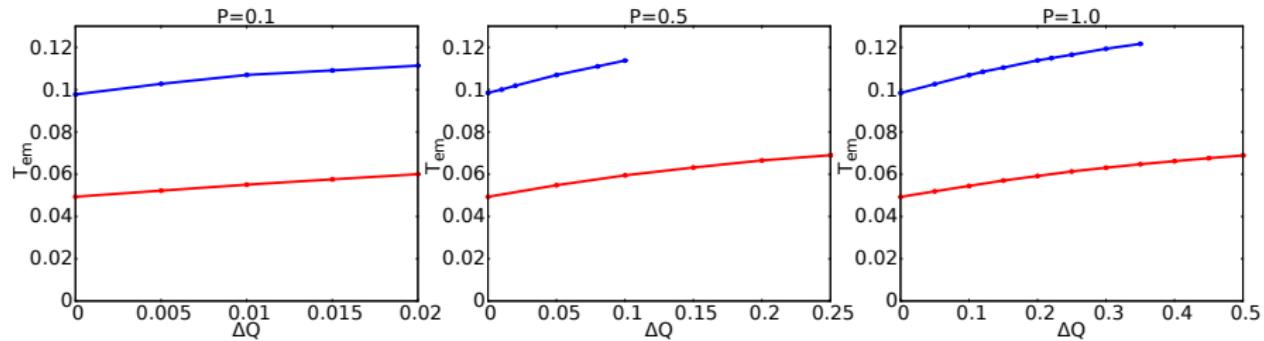
# Ergebnisse – Schwerpunktsbewegung



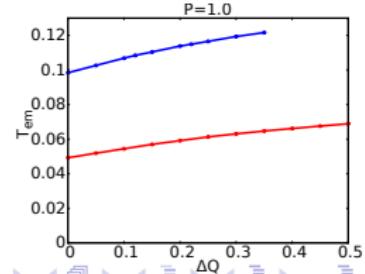
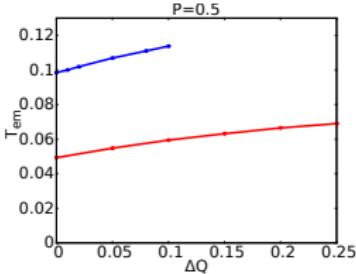
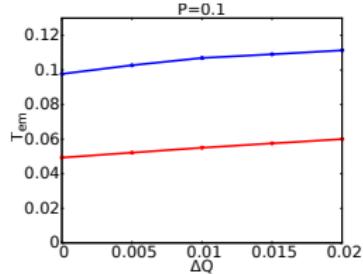
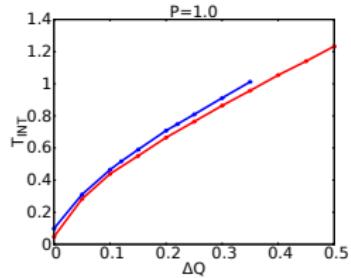
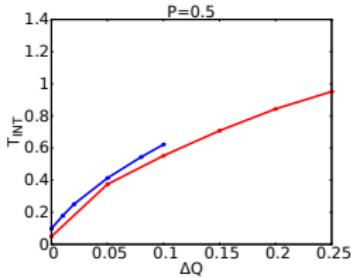
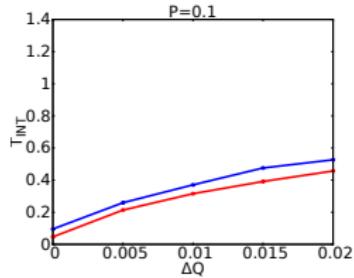
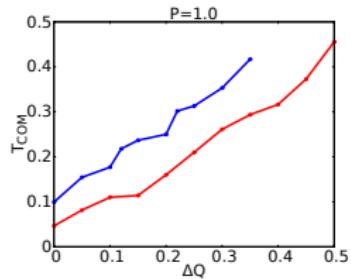
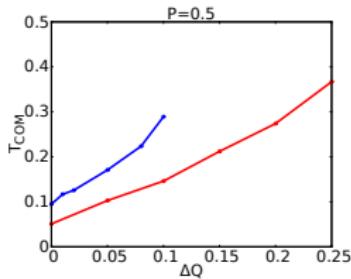
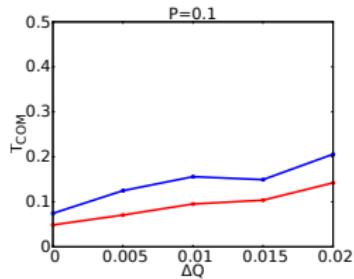
# Ergebnisse – Interne Temperatur



# Ergebnisse – Temperatur des ausgehenden Gases



# Ergebnisse – Überblick



# Conclusio

- Laserleistung beeinflusst die Schwerpunktstemperatur
- Laserleistung beeinflusst die Temperatur der ausgehenden Gasteilchen
- Temperatur der einfallenden Gasteilchen beeinflusst andere Temperaturen



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., Deesawan 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.

# Fluktuationstheorem

Fluktuationstheorem für diese Situation:

$$\frac{p(-\Delta S)}{p(\Delta S)} = e^{-\Delta S} \quad (16)$$

$\Delta S$ : relative Entropieänderung

$$\Delta S = \beta_0 Q + \Delta \phi \quad (17)$$

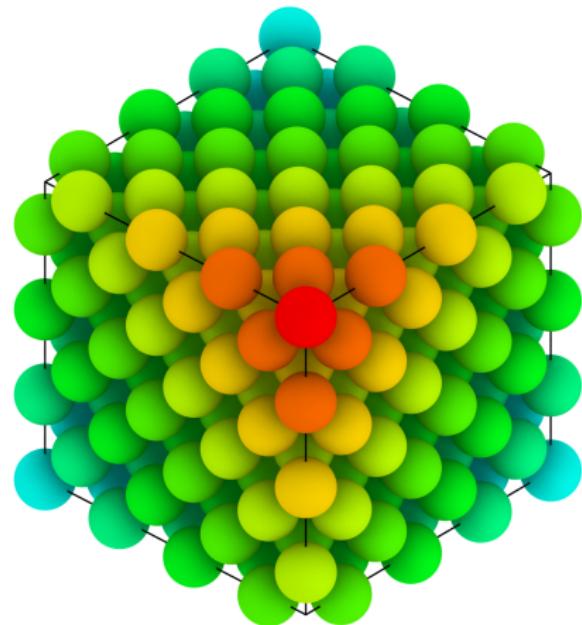
$Q$  absorbierte Wärme

$\beta$  reziproke Temperatur

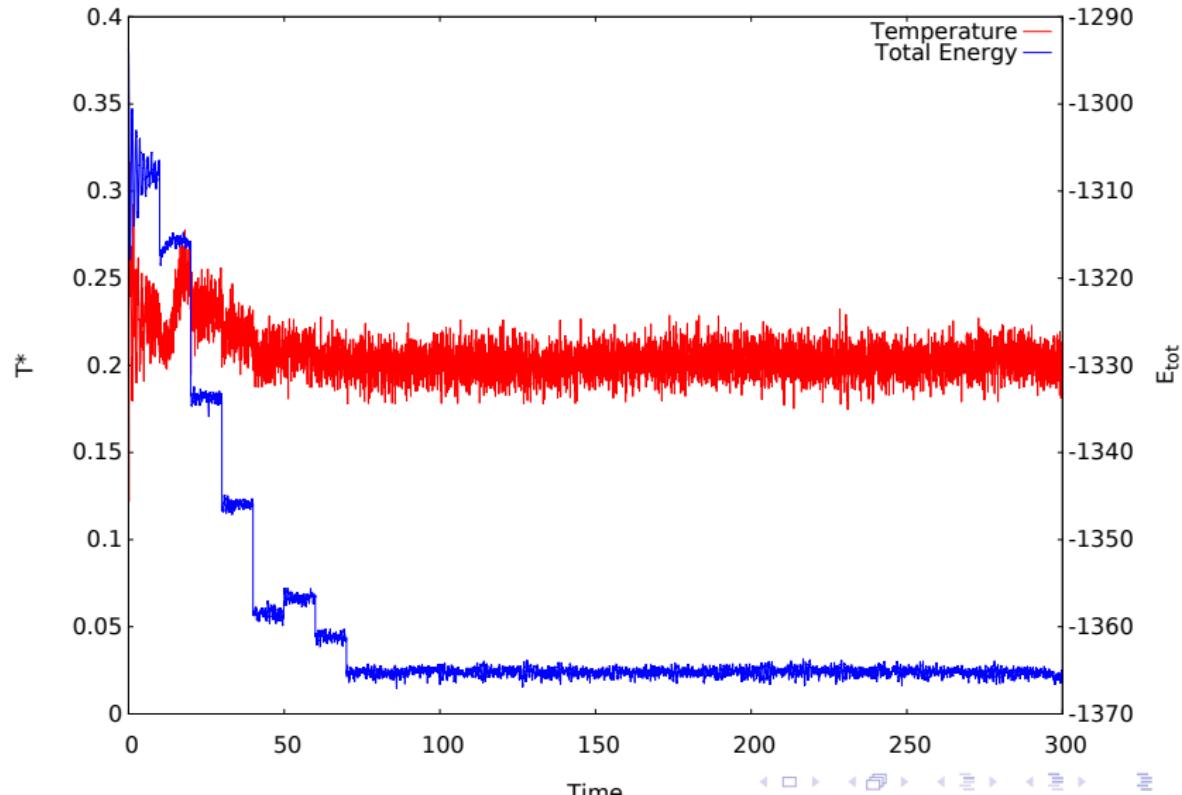
$\Delta \phi$  Differenz der trajektoriebasierten Entropie

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

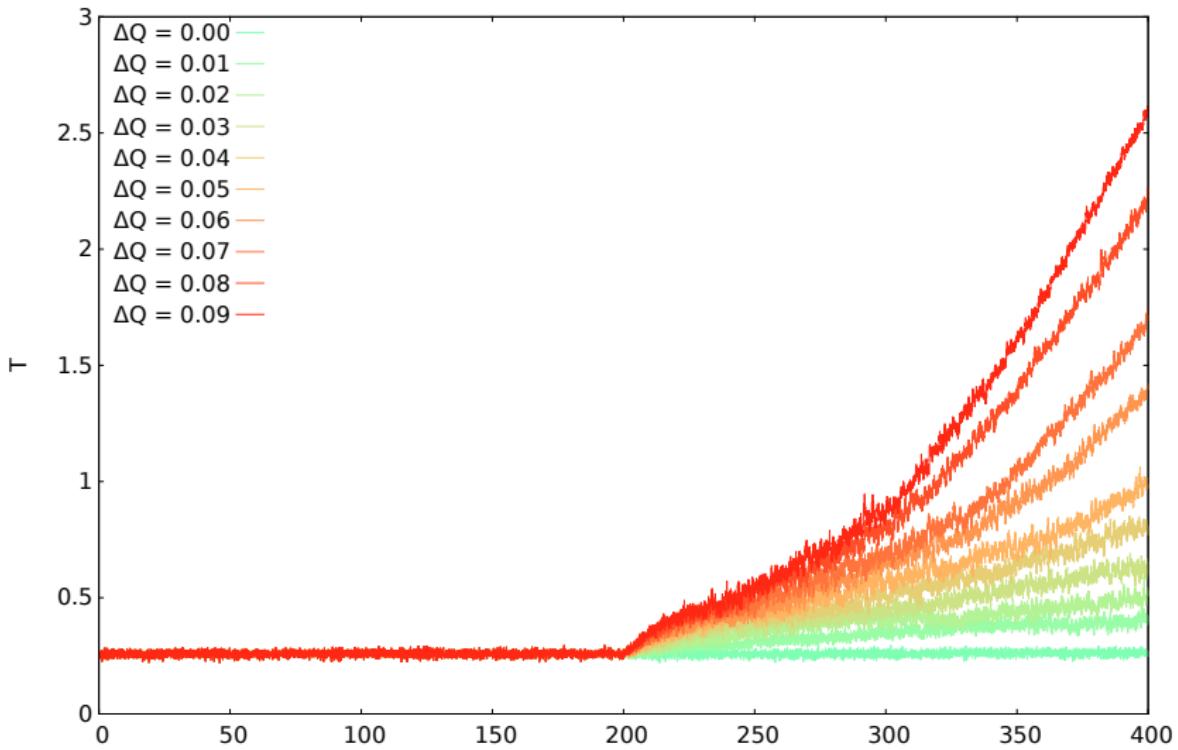
# Nanopartikel



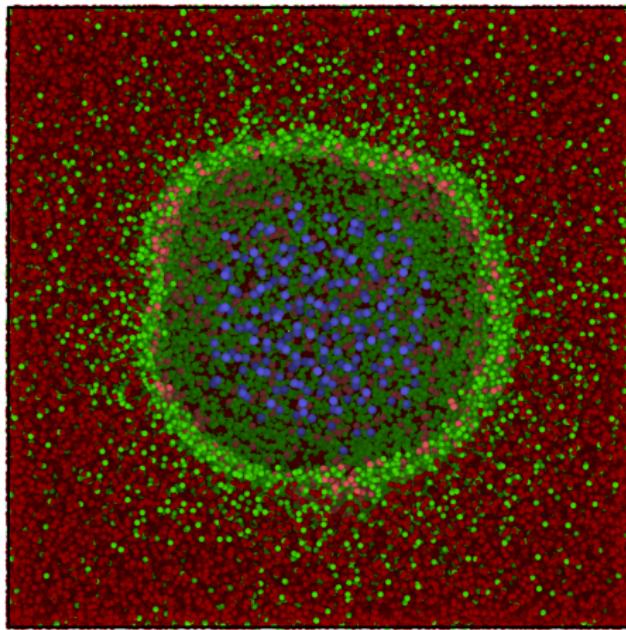
# Initialisierung



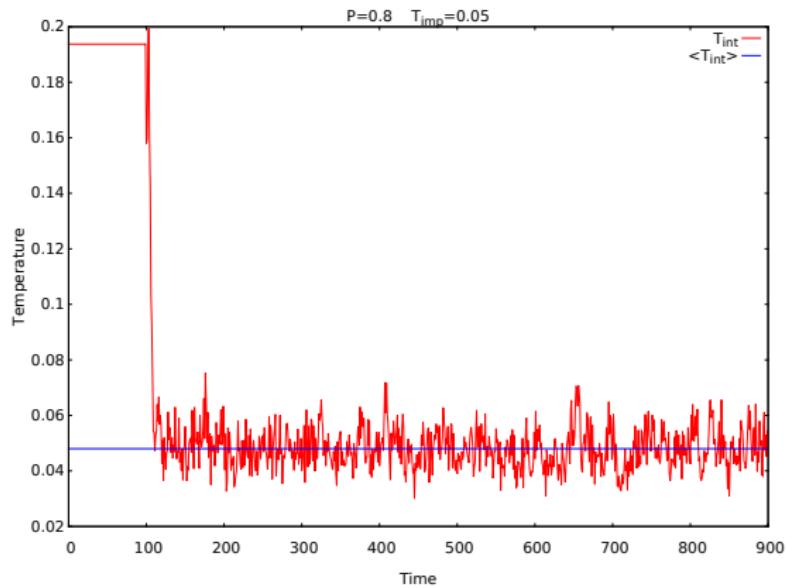
# eHEX



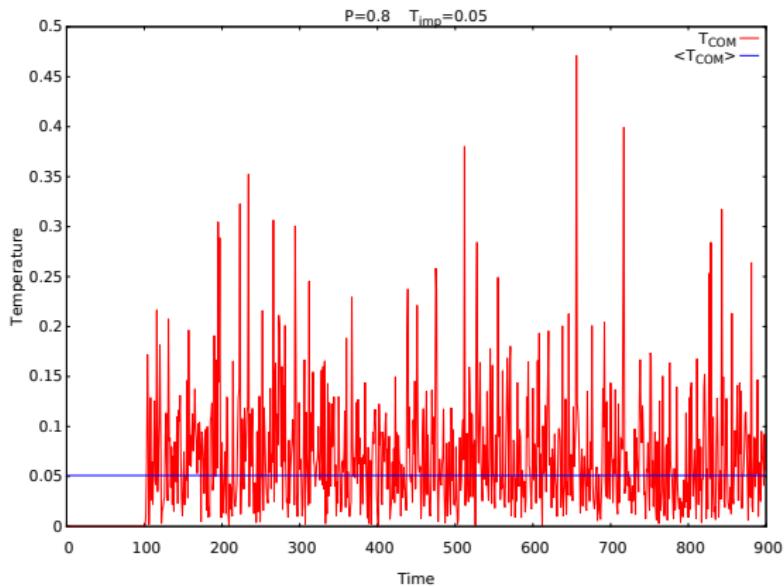
# Gesamtsystem



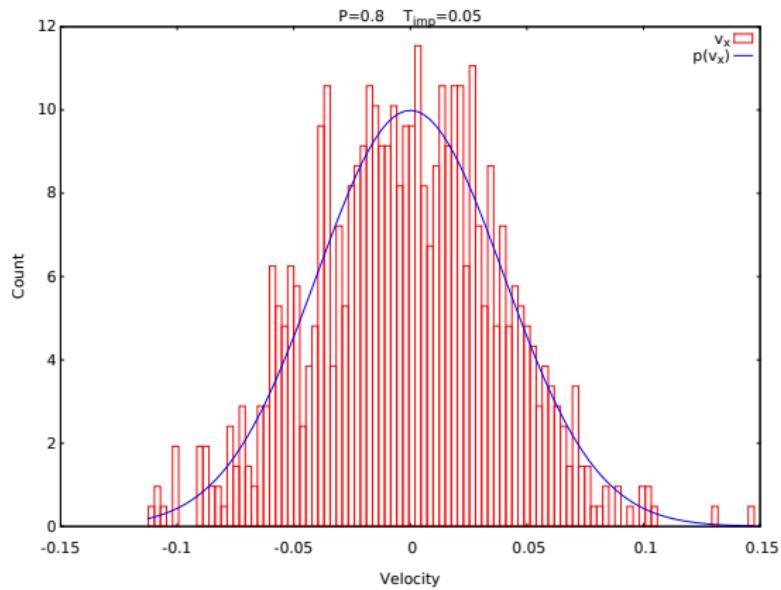
# Kalibrierung



# Kalibrierung



# Kalibrierung

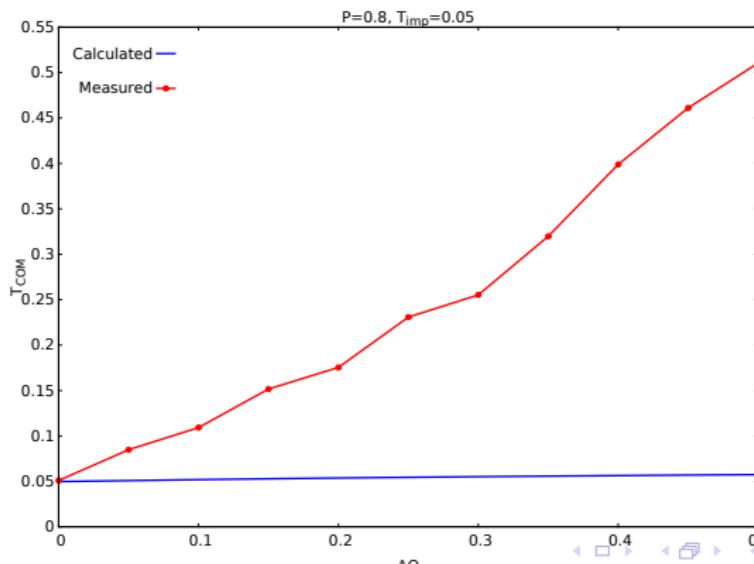


# Vergleich mit Modell

Modell für  $T_{\text{COM}}$  von Millen et al.:

$$T_{\text{COM}} = \frac{T_{\text{imp}}^{3/2} + \frac{\pi}{8} T_{\text{em}}^{3/2}}{T_{\text{imp}}^{1/2} + \frac{\pi}{8} T_{\text{em}}^{1/2}} \quad (18)$$

Vergleich mit Simulation bei  $P = 0.8$ :



# Thermischer Akkomodationskoeffizient

Thermischer Akkomodationskoeffizient

$$\alpha = \frac{T_{\text{em}} - T_{\text{imp}}}{T_{\text{sur}} - T_{\text{imp}}} \quad (19)$$

Im Paper:  $\alpha = 0.777$

Simulation:  $\alpha = 0.016$