



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Tesi di Laurea

Caratterizzazione dello spettro di potenza di una particella in una trappola ottica

Relatore

Prof. Marco Baiesi

Laureando

Giovanni Battista Carollo

Anno Accademico 2017/2018

A tutte le difficoltà che ho incontrato: una volta superate, so che mi hanno reso migliore.

Indice

Introduzione	vii
Formulazione del problema	1
1.1 Optical tweezers	1
1.2 Termine viscoso	6
1.3 Termine stocastico	10
Approccio di Langevin	13
2.1 Regime <i>overdamped</i>	13
2.2 Spettro nel caso <i>overdamped</i>	15
2.3 Spettro nel caso generale	18
Approccio di Fokker-Planck	21
3.1 Equazione di Smoluchowski	22
3.2 Spettro della posizione	24
Confronto coi dati sperimentali	31
4.1 Costante elastica	31
4.2 Spettri	33
Appendici	35
5.1 Moto Browniano in matematica	35
5.2 Processi di Markov	40
5.3 Da Langevin a Fokker-Planck	41
Bibliografia	41

Introduzione

Quando nel 1827 il botanico inglese Robert Brown vide che piccolissime particelle all'interno dei vacuoli nei grani di polline eseguivano un moto continuo e pressoché perpetuo, la spiegazione immediata fu il fatto che il polline fosse materia vivente (cfr. [1]). Egli stesso si rese conto però che la stessa cosa accadeva con particelle di polvere, materiale inorganico, pertanto la spiegazione, che Brown non diede mai, doveva essere diversa. Il mondo scientifico dovette aspettare ben 78 anni per trovare una spiegazione fisicamente soddisfacente del fenomeno, quando Albert Einstein, nel 1905, suo *annus mirabilis*, scrisse un'equazione di diffusione in grado di predire la deriva di queste particelle in moto costante (cfr. [2]). A partire dal suo lavoro si innestò subito dopo quello di Langevin (cfr. [3]), che con un diverso approccio riuscì a spiegare ugualmente il fenomeno. Nell'ultimo secolo, a partire dai lavori di questi due scienziati, lo studio dei processi stocastici ha visto un'enorme espansione: il moto Browniano stesso, infatti, è un classico sistema fisico che può essere descritto tramite un processo stocastico, ovvero una famiglia di variabili aleatorie parametrizzate da un solo parametro (che fisicamente deve rappresentare il tempo). Proprio questi studi diedero un forte impulso allo sviluppo di molte branche della fisica ma anche della matematica. Ai tempi di Einstein la teoria dei processi stocastici era ancora agli inizi: la definizione e la prova dell'esistenza del "moto Browniano" come processo stocastico definito da ben precisi postulati, basati sul fatto che esso debba riprodurre il fenomeno fisico, ma sconnessi dalla fisica del problema, è dovuto a Wiener, che nel 1923 riuscì a portare una non banale dimostrazione del fatto che i postulati stabiliti per riprodurre matematicamente il fenomeno fisico portassero a qualcosa di matematicamente sensato. Ci si rese subito conto che però il processo stocastico "inventato" da Wiener presentava alcune stranezze, ad esempio il fatto che non fosse differenziabile in alcun punto. Pertanto, per poter analizzarlo tramite l'analisi matematica, in particolare per rendere le precedenti teorie di Langevin matematicamente ineccepibili, si dovette sviluppare un nuovo settore della matematica, l'analisi stocastica: la definizione di derivazione e differenziazione fino ad allora usate non erano consistenti per descrivere i fenomeni fisici con moto Browniano, per cui si dovette ridefinirle. Questo lavoro fu frutto degli studi di principalmente due matematici, Itô e Stratonovich (cfr. [23]).

Precedentemente ai lavori sul moto Browniano, a partire dal XVII secolo l'uomo aveva iniziato lo studio della cosiddetta *pressione di radiazione*: le onde elettromagnetiche, come la luce, trasportano quantità di moto e pertanto sono in grado di esercitare una pressione non nulla sulle superficie su cui incidono. L'effetto più evidente di questo fenomeno è la formazione delle code nelle comete. Tuttavia nel XX secolo ci si rese conto che tale pressione, per quanto possa risultare trascurabile su scala umana, risulta invece in grado di generare forze molto intense su scale microscopiche, ad esempio su particelle mesoscopiche, le stesse sottoposte agli urti casuali che generano il moto Browniano. Questa idea risulterà alla base dello sviluppo della tecnologia delle cosiddetti *optical tweezers* (*trappole ottiche*), apparati sperimentali funzionanti a luce laser (di alta intensità, quindi) in grado di "intrappolare" particelle mesoscopiche con un fenomeno a prima vista poco intuitivo, che verrà illustrato all'inizio della tesi.

L'importanza dell'uso dell'*optical tweezers* ai fini di questa tesi sta nel fatto che a Padova nel 2017 è stato acquistato un *mini-Optical Tweezers* per mezzo di una collaborazione interdipartimentale dell'Università di Padova, in cui il Dipartimento di Fisica e Astronomia Galileo Galilei ha giocato un ruolo chiave (cfr. [5]). Utilizzando dunque i dati raccolti da questo strumento, è possibile dunque fare una stima delle grandezze in gioco.

In questo lavoro di tesi, utilizzando varie applicazioni dell'analisi stocastica sopra citate, si studia

il comportamento di una particella mesoscopica sottoposta sostanzialmente ad un potenziale di tipo armonico. Tale potenziale, già di per sé importante in ogni ambito della fisica in quanto approssimazione al secondo ordine di un minimo di potenziale differenziabile almeno due volte, può essere ottenuto sperimentalmente tramite una cosiddetta trappola ottica. Più specificamente, si studierà la risposta in frequenza del moto di questa particella, trovando risultati simili a quelli che si otterrebbero in circuiti elettrici. A dispetto della semplicità del potenziale inserito nelle equazioni che governano la dinamica, le soluzioni risulteranno già sufficientemente non banali da dover assumere, lecitamente, il cosiddetto regime *overdamped* (*sovrasmorzato*), che si ottiene per tempi lunghi e per alte viscosità del fluido in cui è immersa la particella. Brevi cenni al caso generale saranno inseriti per completezza. Per caratterizzare completamente la dinamica della particella, ci si focalizzerà sullo spettro di Fourier, di cui verrà data una definizione ben precisa, della posizione e delle velocità che sono significative per mostrare come la particella si muove al variare della frequenza.

Al fine di risolvere dunque il problema, si utilizzeranno i due approcci sviluppati nella teoria del moto Browniano, il primo basato sull'equazione di Langevin e il secondo sull'equazione di Fokker-Planck (che si può applicare al solo caso *overdamped*). Nonostante i due approcci siano equivalenti, nel senso che producono le stesse previsioni da confrontare poi con le osservabili fisiche, la matematica utilizzata per descrivere il problema è diversa: l'approccio di Langevin consiste sostanzialmente nell'aggiungere una forzante stocastica all'equazione del moto, che riassume tutte le interazioni casuali non controllate; si ottiene quindi un'equazione differenziale stocastica, il cui studio si può affrontare attraverso l'analisi stocastica, che permette di calcolare agilmente i valori medi, la varianza e la correlazione dei processi in gioco. L'approccio di Fokker-Planck, invece, si basa sul fatto che la probabilità di trovare la particella in un certo punto è una costante del moto: si può quindi scrivere un'equazione differenziale alle derivate parziali la cui soluzione è la probabilità in un dato punto dello spazio in funzione del tempo; nota questa, si possono calcolare i valori medi.

Risulta interessante far notare come il problema studiato in questa tesi utilizzi nozioni di fisica e matematica che trovano applicazione negli ambiti più diversi. Lo studio delle equazioni di Navier-Stokes, lo studio delle cui soluzioni è ancora un problema aperto della matematica moderna, è usato in meccanica dei fluidi e meteorologia. Il teorema di Wiener-Khintchine, che verrà ampiamente usato in questo lavoro, ha utilizzi molto vasti, che spaziano ben oltre la teoria dei segnali nei circuiti nella quale era stato concepito. Per citare un esempio fra tutti, è oggi utilizzato nell'analisi delle perturbazioni cosmologiche, come è ampiamente discusso in [6], capitolo 13. Varie equazioni alle derivate parziali che verranno illustrate sono alla base della descrizione fisica di svariati processi di diffusione. Altri processi molto comuni in cui risulta necessario tenere conto del rumore sono i circuiti elettrici (a cui si accennerà, poiché gli spettri che si otterranno risulteranno simili a quelli dei circuiti RC e RCL), con l'annessa teoria dei segnali.

Organizzazione dell'elaborato

Il lavoro è stato diviso in cinque capitoli.

Il primo capitolo è dedicato alla formulazione del problema, a partire da leggi fisiche note, fino a scrivere un'equazione del moto per la particella mesoscopica nella buca di potenziale. Si accennerà al modo in cui è possibile intrappolare una particella in una buca di potenziale, utilizzando un modello di *optical tweezer* molto semplificato. Si ricaverà a partire dalle generali equazioni di Navier-Stokes la forza viscosa agente sulle particelle. Si mostrerà infine che, attraverso l'approccio di Langevin, è possibile includere il contributo degli urti casuali delle molecole del fluido in un unico termine di *rumore bianco*, di cui si indagheranno le proprietà.

Nel secondo capitolo si introdurrà matematicamente il regime sovrasmorzato, mostrando a cosa corrisponda in termini di variabili fisiche. Si studierà poi in tale regime lo spettro della particella Browniana e si concluderà trovando lo spettro nel caso generale.

Il terzo capitolo è dedicato allo studio dello spettro tramite l'approccio di Fokker-Planck. Dopo una breve introduzione a questo diverso modo di descrivere il moto della particella, mostrando come sia possibile farlo solo in regime sovrasmorzato, si riporteranno tutti i calcoli formali al fine di ricavare lo spettro con questo approccio. Risulterà da subito evidente che i calcoli saranno molto più complicati: in particolare implicheranno l'uso di funzioni speciali, dette *paraboliche del cilindro*, di cui si appron-

dondiranno le proprietà.

Nel quarto capitolo i dati sperimentali raccolti dal tweezer saranno utilizzati per disegnare gli spettri calcolati per via teorica al capitolo 2.

Il quinto capitolo è invece costituito dagli appendici: in particolare, nel primo si presenterà una breve introduzione alla matematica sviluppata a partire dallo studio del moto Browniano, l'analisi stocastica, illustrando alcuni risultati tralasciati in precedenza e mostrando come i conti svolti nei capitoli precedenti in modo euristico risultino comunque formalmente corretti. Si porterà anche un accenno ai processi di Markov, fondamentali in fisica e matematica. La terza sezione sarà dedicata a mostrare come gli approcci di Langevin e Fokker-Planck risultino equivalenti.

Conoscenze preliminari richieste per la lettura di questo elaborato

Nella stesura di questo elaborato si sono ovviamente dovute assumere alcune conoscenze come note nel lettore.

Per quanto riguarda le conoscenze di matematica necessarie, saranno pertanto assunte come note l'analisi matematica e l'algebra lineare di base, il calcolo vettoriale, la teoria delle equazioni differenziali, la teoria delle distribuzioni, la teoria della trasformata di Fourier e Laplace, la teoria della probabilità, il calcolo tensoriale. Altre nozioni di ambiti più specifici e direttamente riguardanti il lavoro di tesi, ovvero l'analisi stocastica e la teoria delle derivate parziali, saranno introdotte più specificamente e approfondite, ma sempre a partire dal modello fisico e quasi mai per via assiomatica.

Per ciò che concerne le conoscenze di fisica, risulta sufficiente una conoscenza approfondita della meccanica classica del punto materiale e dei continui (in particolare dei fluidi) e della meccanica statistica classica. Tutte le nozioni riguardanti la fisica del sistema complesso studiato saranno costruite a partire da queste teorie.

Notazioni utilizzate

In ogni paragrafo ci si atterrà sempre alla notazione più semplice e comune nei testi di fisica, badando comunque a mantenere la stessa fra i diversi capitoli per evitare incongruenze e contraddizioni. I vettori saranno indicati col simbolo di vettore posto sopra la lettera (es. $\vec{A}$), i versori con l'accento circonflesso (es. $\hat{u}$). Le medie temporali saranno indicate con parentesi angolari ($\langle \rangle$), i valori medi delle variabili casuali con $\mathbb{E}$. Gli operatori differenziali quali gradiente, divergenza e rotore saranno indicati attraverso il simbolo nabla (∇). Le derivate saranno indicate coi simboli $\frac{d}{dx}$ oppure con l'apice ' (qualora la funzione sia di una variabile), mentre si userà il simbolo $\frac{\partial}{\partial x}$ per le derivate parziali; la derivata rispetto al tempo sarà indicata con il punto sovrapposto (es. $\dot{x}$). Altri simboli più specifici saranno sempre definiti nel corso della tesi. Le equazioni differenziali saranno indicate con le abbreviazioni ODE (*ordinary differential equation*), PDE (*partial differential equation*) e SDE (*stochastic differential equation*).

Formulazione del problema

In questo capitolo si formula il problema oggetto di studio, partendo da principi fisici noti fino alla formulazione di un'equazione che lo descriva. Specificamente, si vuole scrivere la seconda legge di Newton per una particella immersa in un fluido e sottoposta ad una forza di richiamo dovuta alla presenza di una trappola ottica. Tuttavia, essendo la particella in questione molto piccola, è cruciale tenere in considerazione anche gli effetti del cosiddetto moto Browniano su di essa. Il moto Browniano è osservabile in particelle mesoscopiche (di dimensione dell'ordine del micrometro) in sospensione in un fluido: osservate al microscopio si osserva come esse siano perennemente in moto casuale, senza una fissa posizione di equilibrio. Il termine deriva invece dal primo osservatore, il biologo Robert Brown che nel 1827 notò il fenomeno in granuli di polline in sospensione in acqua. La prima spiegazione fisica di tale fenomeno fu data molto tempo più tardi, nel 1905 da Albert Einstein. Nel seguito, non si userà l'approccio utilizzato da Einstein, ma il cosiddetto approccio di Langevin, che fornì una spiegazione del moto Browniano poco tempo dopo Einstein, che ha il vantaggio di essere più vicino alla meccanica classica e che ha il merito di aver aperto la strada all'analisi stocastica. Secondo l'approccio di Langevin il contributo di tutti questi urti può essere riassunto in una forza detta "stocastica" (ovvero avente la proprietà di essere essa stessa un processo stocastico) da sommare nell'equazione del moto alle forze deterministiche. Risolvendo poi formalmente l'equazione ottenuta, note le proprietà di questa forzante stocastica che dovranno essere assunte in modo da essere fisicamente sensate, si potranno ricavare informazioni sul moto della particella, senza determinarne esplicitamente la traiettoria: infatti, essendo stata aggiunta la forzante stocastica, essa stessa diviene un processo stocastico, per cui ricercarne una traiettoria in senso deterministico risulta privo di senso.

Pertanto, nelle assunzioni fatte, la dinamica della particella sarà descritta da una forza totale del tipo:

$$\vec{F}_{TOT} = \vec{F}_{ottica} + \vec{F}_{viscosa} + \vec{F}_{stocastica} \quad (1.1)$$

In seguito, si vedrà che la dinamica è in realtà disaccoppiata lungo le tre direzioni, pertanto si può studiare il moto di una particella semplicemente lungo una delle tre direzioni e la dinamica risulta unidimensionale.

Lo scopo di questo primo capitolo si può riassumere nella ricerca dell'espressione esplicita per i tre termini della 1.1.

1.1 Optical tweezers

Le onde elettromagnetiche (e quindi anche la luce) hanno la capacità di esercitare forze, in quanto trasportano energia e quantità di moto: questa proprietà fu osservata per esempio già nel 1619 da Keplero nel suo trattato *De Cometis* (1619) e fu spiegata eccellentemente dall'elettromagnetismo classico, come verrà ora illustrato (si veda [7]).

Si abbia un'onda elettromagnetica propagantesi lungo l'asse x e una superficie carica densità di carica superficiale σ : partendo dall'espressione della forza per unità di superficie perfettamente assorbente esercitata dai campi elettrico $\vec{E}$ e $\vec{B}$ dell'onda:

$$\vec{F}_{\Sigma} = \sigma(\vec{E} + \vec{v}_{\sigma} \times \vec{B}) \quad (1.2)$$

dove $\vec{v}_{\sigma}$ è la velocità comunicata alle cariche dalla forza elettrica. L'unità di superficie assorbe quindi la potenza per unità di superficie (ovvero l'intensità) $P = \vec{F}_{\Sigma} \cdot \vec{v}_{\sigma} = \sigma v_{\sigma} E$; poiché però il campo elettrico

è parallelo alla superficie, così come la forza elettrica, questo effetto non è meccanico (non deforma la superficie), ma ne fa variare solo la tensione interna. La forza magnetica, al contrario, crea un effetto meccanico evidente, senza assorbire energia, poiché il campo magnetico è sempre perpendicolare a quello elettrico. Infatti, considerando il secondo addendo relativo alla forza di Lorenz si trova la densità superficiale di forza (il cui modulo è la pressione):

$$\vec{F}_\Sigma = \sigma(\vec{v}_\sigma \times \vec{B}) = \sigma v_\sigma B \hat{u}_x = \sigma v_\sigma \frac{E}{c} \hat{u}_x \quad (1.3)$$

dove $\hat{u}_x$ è il versore dell'asse x. Passando ai valori medi, si ha che $\sigma \langle v_\sigma E \rangle = I$ intensità trasportata dall'onda, pertanto, si trova che la pressione è:

$$P_{rad} = \frac{I}{c} \quad (1.4)$$

Qualora la superficie fosse riflettente si deve considerare il moto relativo fra le due onde incidenti e riflessa, con l'effetto di dover moltiplicare il risultato per 2:

$$P_{rad} = \frac{2I}{c} \quad (1.5)$$

Qualora infine l'onda non fosse perpendicolare alla superficie, si può facilmente dimostrare che le formule appena ricavate risultano moltiplicate per un fattore $\cos^2(\theta)$, con θ angolo di incidenza dell'onda.

A partire dall'inizio del XX secolo, furono compiuti molti sforzi per utilizzare queste forze dal punto di vista sperimentale (per approfondire, vedere [8], pag. 2): il risultato più importante fu ottenuto da Arthur Ashkin negli anni '70 (cfr. [9]), che mostrò come fosse possibile usare la pressione di radiazione di un fascio laser per ottenere effetti significativi sulla dinamica di particelle mesoscopiche (dell'ordine di micrometri).

In quest'ottica si può ricavare il risultato ottenuto sopra con una via alternativa basata sulla teoria dei campi quantistica: essendo il momento di un fotone $\vec{p} = \frac{\hbar\omega}{c} \hat{u}$. Il numero fotoni al secondo del fascio sarà $N = \frac{P}{\hbar\omega}$, dove P è la potenza del fascio. Se tutti i fotoni sono riflessi all'indietro, il momento della luce per secondo, cioè la forza, varia di $F = 2pN = 2 \frac{\hbar\omega}{c} \frac{P}{\hbar\omega} = 2 \frac{P}{c}$. Per la legge della conservazione del momento della luce e della superficie riflettente, si ha che quest'ultima subisce una forza opposta nella direzione di propagazione della luce, dunque $P = \frac{F}{A} = \frac{2I}{c}$, ottenendo il risultato precedente.

A questo punto, per avere un'idea di come si possa sfruttare la luce laser in pratica per esercitare forze su varie particelle, si può calcolare l'ordine di grandezza dell'accelerazione di una particella di dimensioni e massa verosimili. Si assuma di utilizzare un fascio laser di intensità 1 kW/m^2 su particelle di polvere (densità $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) sferiche di raggio $r = 1 \text{ }\mu\text{m}$. L'accelerazione vale

$$a = \frac{F}{m} = \frac{I}{\rho V} = \frac{3I}{4\pi c \rho r^3} \approx 10^{10} \text{ m/s}^2 \quad (1.6)$$

Si vede quindi in modo chiarissimo, nonostante il rozzo ragionamento, che già per via teorica è assolutamente lecito poter utilizzare fasci laser per esercitare forze su particelle mesoscopiche. A partire dal lavoro di Ashkin la tecnica della manipolazione ottica si è enormemente sviluppata. Gli apparati sperimentali maggiormente utilizzati sono *optical tweezers*: nella più semplice configurazione, tali apparati strumentali sono costituiti da un fascio laser che viene fortemente focalizzato da un sistema di lenti attorno ad un punto ben preciso dello spazio. Il fascio presenterà ovviamente un profilo d'intensità (funzione di due variabili spaziali x e y del piano ortogonale al fascio stesso) ben lungi dall'essere costante, ma presenterà ovviamente un profilo "smussato", che in molti casi è approssimabile da un profilo gaussiano.

In realtà il moto delle particelle all'interno di una trappola ottica è molto più complicato da descrivere di come è stato presentato finora poiché alle scale micrometriche compaiono altre forze di confinamento dovute alla polarizzazione degli atomi che compongono le particelle, che sono rilevanti. Per particelle

mesoscopiche sufficientemente grandi, i raggi luminosi interagiscono con la materia attraverso le normali leggi dell'ottica, come riflessione e la rifrazione. Tuttavia, al diminuire della dimensione delle particelle in questione, a parità di luce incidente, emergono fenomeni di assorbimento, scattering e riemissione. Per dare una stima della soglia di separazione fra i due regimi si può utilizzare il rapporto $r = \frac{R}{\lambda}$, dove R è il raggio della particella e λ la lunghezza d'onda della luce: si dovranno distinguere dunque i due casi $r \gg 1$ e $r \ll 1$; il caso in cui $r \sim 1$ è molto difficile da trattare teoricamente poiché entrambi i fenomeni dominano e in questa sede viene tralasciato.

Nel caso $r \gg 1$ le particelle si comportano come oggetti macroscopici e si può utilizzare un modello minimalista, seguendo il ragionamento di [8], considerando una particella di indice rifrazione n_i maggiore rispetto all'esterno (è ciò che succede alle particelle mesoscopiche in sospensione), colpita da un singolo raggio di luce. La forza esercitata sulla particella sarà data da:

$$\vec{F} = \frac{n_i P_i}{c} \hat{r}_i - \frac{n_i P_r}{c} \hat{r}_{r,0} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n_i P_{t,n}}{c} \hat{r}_{t,n} \quad (1.7)$$

Questa equazione si ottiene considerando che il fascio (lungo la direzione $\hat{r}_i$), ogni volta che incide sulla superficie della particella si suddivide (secondo le relazioni di Fresnel) in una componente riflessa (lungo la direzione $\hat{r}_{r,0}$) e una diffratta; a sua volta la componente diffratta (lungo la direzione $\hat{r}_{t,0}$), che si trova all'interno della particella, incontrerà una parete suddividendosi ulteriormente e così via. Pertanto si ha che il primo addendo è relativo al fascio incidente, il secondo a quello riflesso ed il terzo a quello trasmesso.

Ora, in una trappola ottica, un fascio piano di luce è focalizzato attorno ad un singolo punto da una lente (trascurando le aberrazioni) ed esso è una composizione di raggi: in [8] è presente una dimostrazione del fatto che un fascio di luce possa essere decomposto in un set di raggi paralleli all'asse ottico, ciascuno di opportuna intensità e polarizzazione. Si può quindi calcolare la forza ottica totale esercitata dal fascio come:

$$\vec{F}_{opt} = \sum_m \vec{F}^{(m)} = \sum_m \left(\frac{n_i P_i^{(m)}}{c} \hat{r}_i^{(m)} - \frac{n_i P_r^{(m)}}{c} \hat{r}_{r,0}^{(m)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n_i P_{t,n}^{(m)}}{c} \hat{r}_{t,n}^{(m)} \right) \quad (1.8)$$

Risulta però evidente come in questo caso alle particelle possa essere comunicato un certo impulso, ma non esista una posizione di equilibrio stabile per esse, in quanto vengono "spinte via" dalla pressione di radiazione. Al fine di confinare in una buca di potenziale le particelle, occorre ricorrere alle cosiddette *trappole ottiche* il cui funzionamento si basa sulle forze che risultano rilevanti a r piccoli.

Nel caso $r \ll 1$ bisogna invece tenere conto della polarizzazione indotta dal campo elettrico (la luce stessa) sulle particelle: infatti in una particella immersa in un campo elettrico $\vec{E}$ si crea un momento di dipolo pari a

$$\vec{p}(\vec{r}_d) = \alpha \vec{E}(\vec{r}_d) \quad (1.9)$$

dove α è detta polarizzazione ed è generalmente un tensore, tuttavia in questo caso si assumerà essere uno scalare; in generale si potrebbero anche presentare termini di ordine superiore nel campo elettrico, ma in questo caso si trascurano perché il campo elettrico è sufficientemente debole.

Una volta polarizzato, il materiale che costituisce la particella subisce una forza che ora dovrà essere stimata. Si considerino due particelle di massa m di carica $\pm q$, poste in $\vec{r}_{\pm}$, separate dalla distanza $\Delta\vec{r} = \vec{r}_{+} - \vec{r}_{-}$, così da formare il dipolo $\vec{p} = q\Delta\vec{r}$; le equazioni del moto sono:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \vec{r}_{+}}{dt^2} = +q[\vec{E}(\vec{r}_{+}, t) + \frac{d\vec{r}_{+}}{dt} \times \vec{B}(\vec{r}_{+}, t)] - \vec{\nabla} U_{int}(\Delta\vec{r}, t) \\ m \frac{d^2 \vec{r}_{-}}{dt^2} = -q[\vec{E}(\vec{r}_{-}, t) + \frac{d\vec{r}_{-}}{dt} \times \vec{B}(\vec{r}_{-}, t)] + \vec{\nabla} U_{int}(\Delta\vec{r}, t) \end{cases} \quad (1.10)$$

dove i termini nelle parentesi quadre costituiscono la forza di Lorenz e U_{int} è l'energia potenziale d'interazione che tiene unite le particelle. Si vogliono ora sviluppare in serie di Taylor i campi $\vec{E}$ e $\vec{B}$ attorno al centro di massa del dipolo ($\vec{r}_d = (\vec{r}_{+} + \vec{r}_{-})/2$), ottenendo:

$$\begin{cases} \vec{E}(\vec{r}_{\pm}, t) \simeq \vec{E}(\vec{r}_d, t) + ((\vec{r}_{\pm} - \vec{r}_d) \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}(\vec{r}_d, t) \\ \vec{B}(\vec{r}_{\pm}, t) \simeq \vec{B}(\vec{r}_d, t) + ((\vec{r}_{\pm} - \vec{r}_d) \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}(\vec{r}_d, t) \end{cases} \quad (1.11)$$

Sostituendo queste espressioni nelle equazioni 1.10 si trova e sommando i membri di sinistra si trova la forza netta agente sul dipolo:

$$\vec{F}_{DA}(\vec{r}_d, t) \simeq (\vec{p}_d \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}(\vec{r}_d, t) + \frac{d\vec{p}_d}{dt} \times \vec{B}(\vec{r}_d, t) + \frac{d\vec{r}_d}{dt} \times (\vec{p}_d \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}(\vec{r}_d, t) \quad (1.12)$$

Il secondo termine può essere riscritto come segue:

$$\frac{d\vec{p}_d}{dt} \times \vec{B} = \frac{d}{dt}(\vec{p}_d \times \vec{B}) - \vec{p}_d \times \frac{d\vec{B}}{dt} \simeq \frac{d}{dt}(\vec{p}_d \times \vec{B}) + \vec{p}_d \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \quad (1.13)$$

dove nel secondo passaggio si è utilizzata l'equazione di Maxwell per il rotore del campo elettrico e l'approssimazione, giustificata per dipoli non relativistici, che $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \simeq \frac{d\vec{B}}{dt}$. Il terzo termine di 1.12 in regime non relativistico è molto più piccolo degli altri due e si trascura. Pertanto si ha:

$$\vec{F}_{DA}(\vec{r}_d, t) \simeq (\vec{p}_d \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}(\vec{r}_d, t) + \vec{p}_d \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}_d, t)) + \frac{d}{dt}(\vec{p}_d \times \vec{B}(\vec{r}_d, t)) \quad (1.14)$$

Nella pratica si è interessati al medio nel tempo poiché i campi generalmente oscillano con una frequenza dell'ordine di $\omega \simeq 10^{15}$ Hz:

$$\langle \vec{F}_{DA} \rangle \simeq \langle (\vec{p}_d \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}(\vec{r}_d, t) \rangle + \langle \vec{p}_d \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}_d, t)) \rangle \quad (1.15)$$

Poiché il terzo termine ha media temporale nulla. Per un raggio laser monocromatico alla frequenza ω , il campo elettrico può essere riscritto come un fasore:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}[\vec{E}(\vec{r})e^{i\omega t}] \quad (1.16)$$

Ricordando la 1.9, si può riscrivere la 1.15 come:

$$\langle \vec{F}_{DA} \rangle \simeq \frac{1}{2}\alpha_1 \text{Re}[(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}^* + \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}^*)] - \frac{1}{2}\alpha_2 \text{Im}[(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}^* + \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}^*)] \quad (1.17)$$

dove con $*$ si intende il complesso coniugato, $\alpha_1 = \text{Re}[\alpha]$ e $\alpha_2 = \text{Im}[\alpha]$. Usando le identità vettoriali

$$\begin{cases} \vec{\nabla}(\vec{A} \cdot \vec{A}^*) = (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A}^* + \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}^*) + (\vec{A}^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} + \vec{A}^* \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \\ \vec{\nabla} \times (\vec{A} \times \vec{A}^*) = \vec{A}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}^*) - \vec{A}^*(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + (\vec{A}^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} - (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A}^* \end{cases} \quad (1.18)$$

si trova che

$$\text{Re}[(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}^* + \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}^*)] = \frac{1}{2} \vec{\nabla}(\vec{E} \cdot \vec{E}^*) = \frac{1}{2} \vec{\nabla}|\vec{E}|^2 \quad (1.19)$$

e che

$$\text{Im}[(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}^*] = \frac{i}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{E} \times \vec{E}^*) \quad (1.20)$$

Usando queste relazioni e ricordando che, per la legge di Maxwell,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = i\omega \vec{B} \quad (1.21)$$

si può riscrivere la 1.15 come:

$$\langle \vec{F}_{DA} \rangle \simeq \frac{1}{4}\alpha_1 \vec{\nabla}|\vec{E}|^2 - \frac{1}{2}\alpha_2 \text{Im}[\vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}^*)] - \frac{i}{4}\alpha_2 \vec{\nabla} \times (\vec{E} \times \vec{E}^*) \quad (1.22)$$

Usando l'equazione di Maxwell per il rotore del campo elettrico, definendo l'*extinction cross-section* come

$$\sigma_{ext,d} = \frac{k_0 \alpha_2}{\epsilon_0} \quad (1.23)$$

(con k_0 costante dielettrica relativa del mezzo), ricordando la definizione del vettore di Poynting

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \text{Re}[\vec{E} \times H^*] \quad (1.24)$$

(dove $H = \frac{B}{\mu}$) e definendo la *spin density* media come

$$\vec{s}_d = i \frac{\epsilon_0}{2\omega} \vec{E} \times \vec{E}^* \quad (1.25)$$

l'equazione 1.17 si può riscrivere come:

$$\vec{F}_{DA} \simeq \frac{1}{4} \alpha_1 \vec{\nabla} |\vec{E}|^2 + \frac{\sigma_{ext,d}}{c} \vec{S} - \frac{1}{2} \sigma_{ext,d} c \vec{\nabla} \times \vec{s}_d \quad (1.26)$$

Questa equazione è costituita da tre addendi:

- il primo termine è detto *gradient force*;
- il secondo termine è detto *scattering force*;
- il terzo termine è detto *spin-curl force*.

Il primo termine è evidentemente conservativo, il secondo ed il terzo invece non lo sono. La *gradient force* è responsabile del confinamento della particella nel tweezer. Siccome l'intensità dell'onda vale $I_i = \frac{1}{2} c \epsilon_0 |\vec{E}|^2$ essa può essere riscritta come:

$$\vec{F}_{DA,grad} = \frac{1}{2} \frac{\alpha_1}{c \epsilon_0} \vec{\nabla} I_i(\vec{r}_d) \quad (1.27)$$

In prima approssimazione il fascio di luce laser ha un profilo d'intensità radiale gaussiano:

$$I_i(r) = I_0 e^{-\frac{2r^2}{w_0^2}} \quad (1.28)$$

dove I_0 e w_0 sono parametri che ne modellano il profilo. Allora per un piccolo spostamento dall'asse si può sviluppare ottenendo:

$$I_i(r) \simeq I_0 \left(1 - 2 \frac{r^2}{w_0^2} \right) \quad (1.29)$$

pertanto inserendo l'approssimazione in 1.28, si trova:

$$\vec{F}_{DA,grad} = -\kappa_d \vec{r} \quad (1.30)$$

con:

$$\kappa_d = \frac{2\alpha_1 I_0}{c \epsilon_0 w_0^2} \quad (1.31)$$

Quando la particella viene spostata dalla sua posizione di equilibrio, su di essa agisce una forza di richiamo: pertanto il fascio di luce si comporta come una buca di potenziale e risulta pertanto possibile approssimare la forza esercitata sulle particelle come un potenziale armonico. La *scattering force*, essendo non conservativa, ha invece l'effetto di spostare il punto di equilibrio dal centro del fascio; la *spin-curl force*, infine, è molto debole e si può trascurare nella maggior parte dei casi. Gli effetti di entrambe, in questa trattazione, saranno trascurati, o meglio, saranno comunque inclusi all'interno della costante elastica. Pertanto si potranno scrivere le componenti della forza come:

$$\begin{aligned} F_x &\approx -\kappa_x (x - x_{eq}) \\ F_y &\approx -\kappa_y (y - y_{eq}) \\ F_z &\approx -\kappa_z (z - z_{eq}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

il cui punto di equilibrio stabile è leggermente diverso dal centro del fascio per via delle altre due forze. La buca di potenziale può quindi essere approssimata con tre oscillatori armonici indipendenti, pertanto la dinamica si disaccoppia nelle tre direzioni.

Nel modello che verrà in seguito studiato, poichè la dinamica è appunto disaccoppiata nelle tre direzioni, si lavorerà sempre in una dimensione, ponendo il minimo di potenziale all'origine. Pertanto la forza esterna esercitata dal più semplice modello di trappola ottica è una forza di tipo elastico della forma:

$$F_{ottica} = -\kappa x \quad (1.33)$$

In realtà la κ (detta anche *trap stiffness*) non è ancora direttamente calcolabile perché nel tweezer è ignoto il profilo del fascio, e comunque anche cercando di misurarlo si otterrebbero valori troppo inaccurati. Nella sezione 4.1, quando si accennerà a procedure per analizzare i dati sperimentali, sarà spiegato un metodo per trovarne il valore numerico.

1.2 Termine viscoso

In questa sezione si vuole mostrare che è ragionevole ipotizzare che la forza esercitata dal fluido in cui la particella è immersa è principalmente una forza di attrito viscoso, in buonissima approssimazione data dall'equazione di Stokes:

$$F_{viscosa} = -\gamma v \quad (1.34)$$

dove v è il modulo della velocità della particella e $\gamma = 6\pi\mu r$, con μ viscosità del liquido e r raggio della particella (si noti che se il fluido è non viscoso, ovvero $\mu = 0$, la forza si annulla).

L'approccio più generale¹ per ricavare questa espressione si basa sull'equazione che descrive i sistemi continui fluidi incomprimibili, ovvero mezzi continui il cui sforzo di taglio è nullo, detta equazione di Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{\nabla} U - \vec{\nabla} P + \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (1.35)$$

dove col simbolo $\frac{D}{Dt}$ si intende l'operatore di derivata materiale (detta anche molecolare), definito come $\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})$. Questa equazione descrive il campo di velocità $\vec{u}$ di un fluido, una volta noto il potenziale esterno U , la sua viscosità μ e densità ρ , e le dovute condizioni al contorno. Il campo scalare di pressione P è invece un'incognita del problema. Questa equazione tuttavia non è sufficiente per descrivere univocamente i campi di velocità e pressione, ma ad essa va aggiunta l'equazione di continuità che esprime la conservazione della massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.36)$$

Essendo però il fluido incomprimibile, per ipotesi ρ è costante e l'equazione si semplifica in:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (1.37)$$

Il procedimento per ricavare la legge di Stokes è quindi il seguente: si risolve l'equazione di Navier-Stokes con le condizioni al contorno corrispondenti al flusso attorno ad una sfera ottenendo i campi di velocità e di pressione; si calcola il tensore degli sforzi da cui infine si calcola l'espressione esplicita della forza esercitata dal fluido sulla sfera. Nella trattazione seguente di questo paragrafo si assumeranno inoltre assenti le forze esterne ($U = 0$). Si cercherà inoltre una soluzione nel caso di regime stazionario (ovvero $\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = 0$), non vorticoso e di strisciamento (in inglese *creeping motion*), ovvero un regime in cui il numero di Reynolds $Re = \frac{|F_{inerziale}|}{|F_{viscosa}|} \ll 1$. Risulta evidente come queste tre ipotesi non siano perfettamente rispettate dalla particella nel tweezer, in quanto: è presente la forza di gravità sul fluido, ma la si trascura; il campo di velocità del fluido non risulta perfettamente stazionario, ma lo è per tempi brevi; potrebbero essere presenti vortici e questa evenienza viene accennata all'appendice 5.2. Tuttavia si vedrà che queste tre ipotesi, che portano alla 1.34 tramite la soluzione delle 1.39, risultano fisicamente sensate.

¹Si veda [10].

In questo modo, essendo $\vec{F}_{inerziale} = \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \cdot \vec{u}$ e $\vec{F}_{viscosa} = \mu \nabla^2 \vec{u}$ si ha che il termine inerziale nell'equazione di Navier-Stokes si può trascurare ottenendo nelle ipotesi fatte:

$$\vec{\nabla} P = \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (1.38)$$

Pertanto il problema si riduce alla ricerca delle soluzioni del seguente sistema di PDE, con le dovute condizioni al contorno causate dalla presenza della sfera:

$$\begin{cases} \vec{\nabla} P = \mu \nabla^2 \vec{u} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \end{cases} \quad (1.39)$$

Si definisce quindi il campo di vorticità:

$$\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{u} \quad (1.40)$$

L'equazione 1.38 si può riarrangiare nel seguente modo:

$$\vec{\nabla} \frac{P - P_0}{\mu} = \nabla^2 \vec{u} \quad (1.41)$$

dove P_0 è un termine costante con le dimensioni di una pressione. Ricordando la formula $\nabla^2 \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A})$, si trova:

$$\vec{\nabla} \frac{P - P_0}{\mu} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{u}) = \vec{\nabla}(0) - \vec{\nabla} \times \vec{\omega} = -\vec{\nabla} \times \vec{\omega} \quad (1.42)$$

dove nel secondo passaggio si è utilizzato il fatto che il fluido è incomprimibile (1.37) e la definizione di vorticità 1.40. Prendendo ora la divergenza di entrambi i membri si ha:

$$\nabla^2 \frac{P - P_0}{\mu} = 0 \quad (1.43)$$

poiché la divergenza di un rotore è nulla. Allo stesso modo prendendo il rotore di entrambi i membri si trova:

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \frac{P - P_0}{\mu} = -\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\omega}) \quad (1.44)$$

Ma il primo membro è nullo poiché è il rotore di un gradiente, mentre il secondo membro diviene, ricordando che $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$:

$$0 = -(\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\omega}) - \nabla^2 \vec{\omega}) = -\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{u})) + \nabla^2 \vec{\omega} = -(\vec{\nabla}(0) - \nabla^2 \vec{\omega}) = \nabla^2 \vec{\omega} \quad (1.45)$$

dove si è usata la definizione di vorticità 1.40 ed il fatto che la divergenza di un rotore è nulla. Si ottiene quindi che il sistema 1.39 è equivalente al sistema di equazioni armoniche:

$$\begin{cases} \nabla^2 \frac{P - P_0}{\mu} = 0 \\ \nabla^2 \vec{\omega} = 0 \end{cases} \quad (1.46)$$

Al fine di risolvere questo sistema con le condizioni al contorno corrispondenti ad una sfera, è utile porsi in un sistema tridimensionale di coordinate sferiche di versori $\hat{u}_r$, $\hat{u}_\theta$ e $\hat{u}_\phi$. Essendo il sistema è invariante per rotazioni attorno all'asse passante per il centro della sfera e parallelo alla velocità relativa fra la sfera ed il fluido, la vorticità diviene:

$$\omega_\phi = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r\hat{u}_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial\hat{u}_r}{\partial \theta} \right) \quad (1.47)$$

Si introduce poi il campo scalare $\vec{\Psi} = (0, 0, \psi)$ detta funzione corrente (in inglese *stream function*), che corrisponde al potenziale vettore del campo di velocità (che deve esistere poichè, per la 1.37, la divergenza del campo è nulla), dunque $\vec{u} = \vec{\nabla} \times \vec{\Psi}$ (le componenti cartesiane qui usate si riferiscono

ad un sistema di riferimento ortonormale centrato sulla sfera, in cui l'asse x è diretto nella direzione del campo di velocità all'infinito):

$$\begin{cases} u_1 = \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ u_2 = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \\ u_3 = 0 \end{cases} \quad (1.48)$$

che diventa in coordinate sferiche

$$\begin{cases} u_r = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \\ u_\theta = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ u_\phi \end{cases} \quad (1.49)$$

Il valore di u_ϕ non è utile da calcolare, pertanto si omette. In questo modo si può risolvere l'equazione per ψ al posto di quella per $\vec{u}$. Pertanto la 1.47 diviene

$$\omega_\phi = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 r} - \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) = -\frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right) = -\frac{1}{r \sin \theta} E^2 \psi \quad (1.50)$$

dove E è l'operatore differenziale definito nel modo seguente:

$$E = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \quad (1.51)$$

Ricordando ora l'equazione di Navier-Stokes 1.38, se si esprimono in coordinate sferiche i due membri e si sottrae ancora una volta la costante P_0 , si trova:

$$\vec{\nabla}(P - P_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial(P-P_0)}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial(P-P_0)}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(P-P_0)}{\partial \phi} \end{pmatrix} \quad (1.52)$$

$$\mu \nabla^2 \vec{\omega} = -\mu \vec{\nabla} \times \vec{\omega} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(-\frac{1}{r} E^2 \psi \right) \\ \frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{1}{\sin \theta} E^2 \psi \right) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mu}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \\ -\frac{\mu}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2 \psi) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.53)$$

Pertanto eguagliando le prime due componenti si trova che:

$$\begin{cases} \frac{\partial(P-P_0)}{\partial r} = \frac{\mu}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \\ \frac{\partial(P-P_0)}{\partial \theta} = -\frac{\mu}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2 \psi) \end{cases} \quad (1.54)$$

Derivando i membri della prima rispetto a θ e quelli della seconda rispetto a r , ricordando il teorema di Schwartz sull'uguaglianza delle derivate miste si trova che

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} (E^2 \psi) + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \right) = 0 \rightarrow E^2 \psi = 0 \quad (1.55)$$

ovvero

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right)^2 \psi = 0 \quad (1.56)$$

Si devono ora imporre le condizioni al contorno corrispondenti al flusso attorno ad una sfera, che sono le seguenti:

- campo di velocità nullo sulle pareti della sfera (nel seguito considerata di raggio a), ovvero

$$\vec{u}|_{r=a} = 0 \quad (1.57)$$

che in termini di funzione corrente diviene:

$$\begin{aligned} u_r(a) = 0 &\rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial \theta}|_{r=a} = 0 \\ u_\theta(a) = 0 &\rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial r}|_{r=a} = 0 \end{aligned} \quad (1.58)$$

- velocità del flusso all'infinito costante, infatti è come se la sfera non ci fosse:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \vec{u} = \vec{U} \quad (1.59)$$

e prendendo la proiezione sulla direzione radiale:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_r = U_r \rightarrow \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = U \cos \theta \quad (1.60)$$

- condizione di *far field*, ovvero andamento asintotico all'infinito quadratico in r per u_r :

$$u_r \sim r^2 \quad (1.61)$$

Si cerca ora una soluzione della 1.56 della forma $\psi(r, \theta) = f(r) \sin^2 \theta$. Sostituendo nell'equazione si trova l'ODE in $f(r)$:

$$f^{(IV)} - \frac{4f''}{r^2} + \frac{8f'}{r^3} - \frac{8f}{r^4} = 0 \quad (1.62)$$

Quest'equazione ha integrale generale

$$f(r) = Ar^4 + Br^2 + Cr + D/r \quad (1.63)$$

con A, B, C, D numeri reali da ricavare dalle condizioni al contorno sopra. Imponendole (si omettono i conti banali), si trova:

$$\psi = Ur^2 \sin^2 \theta \left(\frac{1}{2} - \frac{3a}{4r} + \frac{a^3}{4r^3} \right) \quad (1.64)$$

da cui si ricava immediatamente il campo di velocità tramite le 1.49:

$$\begin{cases} u_r = U \cos \theta \left(1 - \frac{3a}{2r} + \frac{a^3}{2r^3} \right) \\ u_\theta = -U \sin \theta \left(1 - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{4r^3} \right) \end{cases} \quad (1.65)$$

Si deve infine calcolare il campo scalare di pressione: le 1.54, una volta inserito il campo ψ trovato, divengono un sistema di equazioni da risolvere per trovare $P - P_0$, il cui risultato compatibile con le condizioni al contorno del problema è:

$$P = P_0 - \frac{3\mu U a}{2r^2} \cos \theta \quad (1.66)$$

A questo punto, seguendo il ragionamento sopra descritto, si deve calcolare il tensore degli sforzi:

$$\tau = \begin{vmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{vmatrix} - P \mathbb{1}_{3 \times 3} \quad (1.67)$$

che diviene in coordinate polari (ancora una volta, le derivate di u_ϕ e rispetto a ϕ sono inutili e non sono riportate, pertanto il tensore si riduce ad una matrice 2×2):

$$\tau = \begin{vmatrix} 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} & \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) \right) \\ \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) \right) & \mu \left(2 \left(\frac{1}{r} \right) \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{u_\theta}{r} \right) \end{vmatrix} - P \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (1.68)$$

In realtà, al fine del calcolo della forza agente sulla sfera risulta interessante calcolare solo gli elementi della prima riga, valutati in $r = a$, usando l'espressione sopra di $\vec{u}$ in coordinate polari:

$$\begin{cases} \tau_{rr}|_{r=a} = -P \\ \tau_{r\theta}|_{r=a} = -\frac{3\mu U \sin \theta}{2a} \end{cases} \quad (1.69)$$

Infatti le due componenti della forza risultano (con $\hat{r}$ versore radiale):

$$\begin{cases} F_r = \int \tau_{rr} \cdot \hat{x} dS \\ F_\theta = \int \tau_{r\theta} \cdot \hat{x} dS \end{cases} \quad (1.70)$$

Per cui la forza totale agente sulla sfera lungo x è finalmente:

$$\begin{aligned} F_{TOT} &= F_r + F_\theta = \int_S (\tau_{rr} \cdot \hat{r} + \tau_{r\theta} \cdot \hat{r}) dS = \int_S (\tau_{rr} \cos\theta - \tau_{r\theta} \sin\theta) dS = \\ &= \int_S \left(-P \cos\theta + \frac{3\mu U \sin\theta}{2a} \sin\theta \right) dS = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi a^2 d\theta \sin\theta \left(-P \cos\theta + \frac{3\mu U \sin\theta}{2a} \sin\theta \right) = \\ &= 2\pi a^2 \left(-\int_0^\pi d\theta P \sin\theta \cos\theta + \frac{3\mu U}{2r} \int_0^\pi d\theta \sin^3\theta \right) \end{aligned} \quad (1.71)$$

Inserendo il valore della pressione, $P = P_0 - \frac{3\mu U a}{2r^2} \cos\theta$, si trova:

$$\begin{aligned} F_{TOT} &= 2\pi a^2 \left(-\int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta + \frac{3\mu U}{2a} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos^2\theta + \frac{3\mu U}{2a} \int_0^\pi d\theta \sin^3\theta \right) = \\ &= 2\pi a^2 \left(0 + \frac{\mu U}{a} + 2\frac{\mu U}{a} \right) = 6\pi\mu U a \end{aligned} \quad (1.72)$$

che è la legge di Stokes. Questa legge, in base ai calcoli numerici, è valida con ottima approssimazione per flussi con numeri di Reynolds minori di 0.5. Ciò implica che le particelle debbano avere raggio dell'ordine della decina di micrometri o inferiore per entrare in tale regime, esattamente quello che accade alle particelle nel tweezer.

1.3 Termine stocastico

In tutta questo capitolo si è finora ragionato in modo deterministico, introducendo due forze di natura classica dovute alla presenza della trappola ottica e del fluido. Essendo la particella mesoscopica, si deve ora introdurre il terzo termine dovuto agli urti causali delle particelle delle molecole di fluido in cui è immersa. Il modo più semplice di introdurre questo termine è quello di procedere alla Langevin sommando all'equazione differenziale un termine di rumore, interpretabile come un processo stocastico con ben determinate proprietà, seguendo l'approccio di [11]. Il procedimento che segue non è totalmente rigoroso in quanto l'operazione di differenziazione con processi stocastici richiede cautele: in questa sezione si procederà in modo intuitivo, mentre nell'appendice 5.1 si accennerà a come ci si approcci a tutto ciò in modo matematicamente rigoroso, mostrando che i ragionamenti euristici fatti sono comunque corretti.

Per semplificare al massimo il ragionamento ed avvicinarsi inoltre ad un approccio il più rigoroso possibile, si considererà un'equazione differenziale del primo ordine invece che del secondo. Infatti, l'equazione del moto che verrà scritta in complessivo presenta sia derivate prime (nel termine viscoso) che seconde (poichè $F = m\ddot{x}$). Si può quindi considerare un'equazione del moto del primo ordine sostituendo allo spazio la velocità:

$$m\dot{v} = F_d \quad (1.73)$$

Con F_d si intendono tutte le forze deterministiche agenti sul punto materiale. Nel capitolo seguente, si vedrà che comunque tutti i ragionamenti fatti ora si potranno comunque applicare al secondo ordine una volta posti in regime sovrasmorzato (*overdamped*), che verrà ampiamente approfondito e resta una delle ipotesi cruciali per lo studio dello spettro di potenza della particella. Seguendo l'idea di Langevin, si aggiunge quindi alle forze deterministiche un termine stocastico $F_s(t)$, dipendente dal tempo, che riassume tutte le interazioni non controllate:

$$m\dot{v} = F_d + F_s \quad (1.74)$$

Per motivi che saranno in seguito chiari, si porranno le forze deterministiche pari ad un attrito viscoso:

$$m\dot{v} = -\gamma v + F_s \quad (1.75)$$

Si devono prima di tutto imporre delle condizioni su F_s : esse andranno ovviamente imposte sul suo valor medio e sulla sua funzione di correlazione, essendo un processo stocastico. La scelta opportuna è²:

- $\langle F_s(t) \rangle = 0$, ovvero il valor medio di tale processo è nullo. Ciò è intuitivo poiché gli urti delle molecole sulla particella costituiscono un processo simmetrico nello spazio.
- $\langle F_s(t)F_s(s) \rangle = \sigma^2\delta(t-s)$, ovvero la probabilità del processo al tempo t è scorrelata da quella in ogni altro istante e σ scarto quadratico medio di $F_s(t)$. Ciò deriva dal fatto che il tempo in cui avvengono le collisioni è molto più piccolo del tempo caratteristico di evoluzione della velocità.

Le due proprietà sopra descrivono un processo detto *rumore bianco*.

Secondo il metodo di integrazione di Ornstein-Uhlenbeck si cerca una soluzione formale della 1.75:

$$v(t) = v_0 e^{-\alpha t} + \int_0^t e^{-\alpha(t-s)} A_s(s) ds \quad (1.76)$$

con $\alpha = \gamma/m$ e $A(t) = F_s(t)/m$. Prendendo formalmente la media temporale della soluzione $\langle v(t) \rangle = \lim_{2T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T v(t) dt$, si trova (poiché la media commuta con l'integrale):

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\alpha t} \quad (1.77)$$

Si può con lo stesso procedimento calcolare la correlazione fra le velocità (utilizzando la seconda proprietà del rumore bianco):

$$\begin{aligned} \langle v(t_1)v(t_2) \rangle &= v_0^2 e^{-\alpha(t_1+t_2)} + \int_0^{t_1} ds_1 \int_0^{t_2} ds_2 e^{-\alpha(t_1-s_1)} e^{-\alpha(t_2-s_2)} \langle A_s(s_1)A_s(s_2) \rangle = \\ &= v_0^2 e^{-\alpha(t_1+t_2)} + \int_0^{t_1} ds_1 \int_0^{t_2} ds_2 e^{-\alpha(t_1-s_1)} e^{-\alpha(t_2-s_2)} \frac{\sigma^2}{m^2} \delta(s_1 - s_2) \\ &= v_0^2 e^{-\alpha(t_1+t_2)} + \frac{\sigma^2}{2m^2\alpha} \left(e^{-\alpha|t_1-t_2|} - e^{-\alpha(t_1+t_2)} \right) \end{aligned} \quad (1.78)$$

da cui si può anche subito ricavare la velocità quadratica media ponendo $t_1 = t_2 = t$:

$$\langle v^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-2\alpha t} + \frac{\sigma^2}{2m^2\alpha} (1 - e^{-2\alpha t}) \quad (1.79)$$

Si noti che per tempi brevi la soluzione non è stazionaria poiché la sua funzione di correlazione non è una semplice funzione di $t_1 - t_2$. Tuttavia per scale temporali lunghe si ritorna in regime stazionario:

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{2m^2\alpha} \left(e^{-\alpha|t_1-t_2|} \right) \quad (1.80)$$

Nel caso particolare già visto in cui $t_1 = t_2 = t$ si ha:

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle v(t)^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{2m^2\alpha} \quad (1.81)$$

Inoltre, nel regime di tempi lunghi, quando la particella raggiunge lo stato stazionario, la sua energia cinetica media è data da

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2}m \langle v^2(t) \rangle = \frac{1}{2}m \frac{\sigma^2}{2m^2\alpha} = \frac{\sigma^2}{4m\alpha} \quad (1.82)$$

²Per ora queste proprietà vanno accettate così come sono, notando che sono fisicamente consistenti. Per una derivazione matematica formale, si veda l'appendice 5.1.

che per il teorema di equipartizione è anche uguale a:

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (1.83)$$

Pertanto uguagliando le due espressioni si trova che:

$$\sigma^2 = 2m\alpha k_B T = 2\gamma k_B T \quad (1.84)$$

e quindi l'equazione iniziale può essere riscritta come

$$m\dot{v} = -\gamma v + \sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) \quad (1.85)$$

oppure

$$\dot{v} = -\alpha v + \sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) = -\alpha v + \sqrt{2\alpha m k_B T}\xi(t) \quad (1.86)$$

dove $\xi(t)$ è un processo tale che $\langle \xi(t) \rangle = 0$ e $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s)$.

Tornando al problema iniziale, si può quindi ipotizzare di sommare ai due contributi alla forza già trovati (forzante del tweezer e attrito viscoso) il contributo:

$$F_{stocastica} = \sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) \quad (1.87)$$

Approccio di Langevin

Nella sezione precedente è stato formulato il problema, mostrando che la dinamica di una particella nel tweezer è con ottima approssimazione governata dall'equazione differenziale stocastica:

$$m\ddot{x} = -\kappa x - \gamma\dot{x} + \sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) \quad (2.1)$$

In questo capitolo, utilizzando l'approccio di Langevin finora utilizzato, si cercherà di ricavare informazioni sullo spettro della posizione e della velocità di questa particella. In particolare, verrà innanzitutto definito il caso sovrasmorzato (detto anche *overdamped*), mostrando come questa ipotesi sia ragionevole: se in questa sezione apparirà un'approssimazione finalizzata semplicemente a finalizzare i calcoli, nel prossimo capitolo si vedrà come essa sia fondamentale per affrontare il problema con l'equazione di Fokker-Planck. Dopo aver ricordato le definizioni di trasformata e antitrasformata di Fourier, si enunceranno vari risultati legati ad essa, quindi si definirà lo spettro di una grandezza fisica. Infine, si calcoleranno gli spettri nel caso *overdamped* e generale, commentandone i risultati.

2.1 Regime *overdamped*

Per esemplificare il fenomeno del *large damping* nelle equazioni di Newton si proporrà ora un esempio tratto da [12]. Si consideri un oscillatore armonico classico smorzato da una forza di attrito viscoso, la cui dinamica è descritta dall'equazione:

$$m\ddot{x} = -hx - k\dot{x} \quad (2.2)$$

con $m, h, k > 0$. Si ha che il discriminante dell'ODE è:

$$\Delta = k^2 - 4mh \quad (2.3)$$

e le radici dell'equazione associata sono:

$$\lambda_{1/2} = \frac{-k \pm \sqrt{k^2 - 4mh}}{2m} \quad (2.4)$$

Una generica soluzione nel piano delle fasi è allora:

$$x(t) = Ae^{\lambda_1 t} + Be^{\lambda_2 t} \quad (2.5)$$

con A e B costanti reali arbitrarie, che ha derivata

$$\dot{x}(t) = A\lambda_1 e^{\lambda_1 t} + B\lambda_2 e^{\lambda_2 t} \quad (2.6)$$

Nel caso che anche $k \gg m, h$, si ha che $\lambda_2 < \lambda_1 < 0$, e quindi:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\dot{x}(t)}{x(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{A\lambda_1 e^{\lambda_1 t} + B\lambda_2 e^{\lambda_2 t}}{Ae^{\lambda_1 t} + Be^{\lambda_2 t}} = \lambda_1 \quad (2.7)$$

ovvero la radice maggiore. Inoltre se k cresce, questo valore tende a 0, poichè:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1 = 0 \quad (2.8)$$

Inoltre, per $k \rightarrow \infty$, si ha che $\lambda_1(k) \sim -\frac{h}{k}$. Questo risultato asintotico giustifica il procedimento di riduzione detto di *large damping*. In pratica, si introduce un cosiddetto *tempo lento*:

$$\tau := \frac{t}{k} \quad (2.9)$$

e si trova che, posto $y(\tau) = x(k\tau)$,

$$\begin{aligned} y &= x \\ y' &= k\dot{x} \\ y'' &= k^2\ddot{x} \end{aligned} \quad (2.10)$$

in modo che l'equazione 2.2 diviene:

$$\frac{m}{k^2}y'' = -hy - y' \quad (2.11)$$

Se ora k cresce, il membro di destra è trascurabile per cui si può studiare l'equazione approssimata in regime di *large damping*:

$$y' = -\frac{h}{k}x \quad (2.12)$$

che è equivalente a:

$$\dot{x} = -\frac{h}{k}x \quad (2.13)$$

Si vede che nel caso lineare tale approssimazione ha senso per grandi tempi e grande viscosità. Ciò in realtà si può generalizzare al caso non lineare, ma qui non è utile.

Ripetendo il ragionamento per l'equazione 2.1 si trova che il regime *overdamped* si ha ponendo a 0 l'accelerazione:

$$0 = -\kappa x - \gamma \dot{x} + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t) \quad (2.14)$$

Ritrovando un'ODE del primo ordine che può essere riscritta come:

$$\dot{x} = -\frac{\kappa}{\gamma}x + \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}} \xi(t) \quad (2.15)$$

Si vede che questa è un'equazione esattamente equivalente alla 1.75 a meno di effettuare la sostituzione $v \rightarrow x$ e $\alpha \rightarrow \frac{\kappa}{\gamma}$. Procedendo allo stesso modo si possono calcolare il valor medio di $x(t)$, $x^2(t)$ e la funzione di autocorrelazione, trovando:

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\frac{\kappa}{\gamma}t} \quad (2.16)$$

$$\langle x^2(t) \rangle = x_0^2 e^{-\frac{2\kappa t}{\gamma}} + \frac{k_B T}{\kappa} \left(1 - e^{-\frac{2\kappa}{\gamma}t}\right) \quad (2.17)$$

$$\langle x(t)x(s) \rangle = x_0^2 e^{-\frac{\kappa}{\gamma}(t_1+t_2)} + \frac{k_B T}{\kappa} \left(e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|t_1-t_2|} - e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|t_1+t_2|}\right) \quad (2.18)$$

D'ora in poi, inoltre, il coefficiente davanti al termine di rumore bianco verrà sempre indicato così:

$$A := \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}} \quad (2.19)$$

Si noti che $\frac{k_B T}{\gamma}$ ha le dimensioni di un coefficiente di diffusione e d'ora in poi verrà indicato con D , ottenendo:

$$A = \sqrt{2D} \quad (2.20)$$

Il ruolo di questo coefficiente di diffusione, che per ora resta una curiosità, sarà fondamentale nel capitolo 3.1, quando verrà calcolato lo spettro con l'approccio di Fokker-Planck.

2.2 Spettro nel caso *overdamped*

In questa sezione si vogliono calcolare analiticamente gli spettri della posizione e delle velocità per una particella con dinamica descritta dall'equazione 2.15 in regime *overdamped*: a tal fine, sarà cruciale lavorare nello spazio di Fourier. Risulta infatti evidente come il calcolo esplicito della soluzione di un'equazione differenziale stocastica si possa trovare in un numero molto ristretto di casi; inoltre, risulta evidente, come verrà spiegato nell'appendice 5.1, che una sua soluzione non sia unica, nemmeno dopo aver fissato un preciso dato iniziale (infatti il termine stocastico per definizione produce diverse realizzazioni della soluzione). Perciò, è più utile focalizzarsi sulla risposta in frequenza di determinate variabili del sistema, piuttosto che ricercare una soluzione complessiva.

Innanzitutto, verranno qui ridefiniti alcuni concetti fondamentali per l'analisi seguente. Data una funzione $f \in L^2([-\infty, \infty])$, $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ si definisce la sua trasformata di Fourier come la funzione:

$$\hat{f}(\omega) = F[f](\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (2.21)$$

e la rispettiva antitrasformata:

$$\check{f}(\omega) = F^{-1}[f](\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{i\omega x} dx \quad (2.22)$$

Si ricorda inoltre che per il teorema di Fourier, trasformata ed antitrasformata sono l'una l'operazione inversa dell'altra (ovvero $F[F^{-1}] = F^{-1}[F] = 1$) e che la trasformata di Fourier è in realtà il prodotto scalare nello spazio L^2 fra la generica funzione $f(x)$ e $e^{i\omega x}$. Una proprietà cruciale della trasformata di Fourier che verrà ampiamente usata in seguito è il fatto di trasformare le derivate in prodotti:

$$\frac{d}{dx} \hat{f}(\omega) = \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-i\omega x} dx \right] = -i\omega \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-i\omega x} dx = -i\omega \hat{f}(\omega) \quad (2.23)$$

Si definisce poi la densità spettrale come:

$$S_f(\omega) := \hat{f}^*(\omega) \hat{f}(\omega) = |\hat{f}(\omega)|^2 \quad (2.24)$$

dove con $*$ si intende l'operazione di coniugio. Si noti che nel caso di un processo stocastico si dovrà scrivere:

$$S_f(\omega) = \langle |\hat{f}(\omega)|^2 \rangle \quad (2.25)$$

Si ricorda infine il fondamentale teorema di Wiener-Khintchine:

Teorema 2.2.1 (Wiener-Khintchine).

Sia $f \in L^2([-\infty, \infty])$, $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$; allora la densità spettrale $S_f(\omega)$ si calcola come segue:

$$S_f(\omega) = \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) C(f(\tau)) d\tau \quad (2.26)$$

dove $C(f(\tau))$ è la funzione di autocorrelazione rispetto al tempo nullo, ovvero:

$$C(f(\tau)) = \langle f(\tau) f(0) \rangle \quad (2.27)$$

Questo è un risultato classico della teoria dei segnali, una cui dimostrazione si può trovare ad esempio in [11], pag. 59.

Risulta innanzitutto utile calcolare lo spettro della velocità per un segnale di puro rumore bianco, descritto dall'equazione:

$$\dot{x} = A\xi(t) \quad (2.28)$$

con A coefficiente opportuno, ad esempio quello definito in 3.11. Tramite il teorema di Wiener-Khintchine questo è immediato, infatti:

$$\begin{aligned} S_{\dot{x}}(\omega) &= \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) C(\dot{x}(\tau)) d\tau = \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) C(A\xi(\tau)) d\tau = \\ &= \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) A^2 \delta(\tau - 0) d\tau = A^2 \cos(\omega 0) = A^2 \end{aligned} \quad (2.29)$$

dove nel secondo passaggio si è utilizzata la definizione stessa di rumore bianco. Dunque lo spettro del rumore bianco è una costante, ovvero è piatto. Ciò può essere utile per confrontare gli andamenti a diversi regimi di altre variabili.

Nel caso dell'equazione oggetto di studio, nel caso *overdamped*, si può ripetere il ragionamento, ma il calcolo di $C(f(\tau))$ è più complicato. Si può partire calcolando la funzione di autocorrelazione della coordinata spaziale in due generici istanti di tempo, utilizzando la soluzione formale 2.18: nei limiti di lunghe scale temporali essa diviene

$$\langle x(t)x(s) \rangle = \frac{k_B T}{\kappa} e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|t-s|} \quad (2.30)$$

In questo limite $x(t)$ è un processo stazionario ma non è correlato tramite una δ , poiché la correlazione decade in modo esponenziale: questo comportamento è un esempio di *rumore colorato*. A questo punto si riesce a calcolare una stima dello spettro nel limite di lunghi tempi tramite Wiener-Khintchine, infatti

$$C(x(\tau)) = \langle x(\tau)x(0) \rangle = \frac{k_B T}{\kappa} e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|\tau|} \quad (2.31)$$

quindi

$$S_x(\omega) = \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) \frac{k_B T}{\kappa} e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|\tau|} d\tau = \frac{k_B T}{\kappa} \int_{\mathbb{R}} \cos(\omega\tau) e^{-\frac{\kappa}{\gamma}|\tau|} d\tau = \frac{2k_B \gamma T}{(\gamma^2 \omega^2 + \kappa^2)} \quad (2.32)$$

Senza usare invece Wiener-Khintchine, si utilizza un procedimento basato sul passaggio allo spazio delle frequenze. Si considera allora l'equazione 2.15, che nel seguito per semplicità sarà riscritta come:

$$\dot{x}(t) = -\beta x(t) + A\xi(t) \quad (2.33)$$

dove $\beta = \frac{\kappa}{\gamma}$ e A è stato definito in 3.11. Passando allo spazio di Fourier (ovvero prendendo la trasformata (2.21) ad entrambi i membri), si trova, ricordando le proprietà evidenziate all'inizio di questa sezione:

$$-i\omega \hat{x}(\omega) = -\beta \hat{x}(\omega) + A\hat{\xi}(\omega) \quad (2.34)$$

da cui si può ricavare la trasformata della posizione della particella:

$$\hat{x}(\omega) = \frac{A}{-i\omega + \beta} \hat{\xi}(\omega) \quad (2.35)$$

Da ciò si deduce che lo spettro della posizione della particella, per definizione, è:

$$S_x(\omega) = \langle |\hat{x}(\omega)|^2 \rangle = \frac{A^2}{\omega^2 + \beta^2} \langle |\hat{\xi}(\omega)|^2 \rangle \quad (2.36)$$

Quindi, ricordando la proprietà del rumore bianco si trova:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\xi}^*(\omega) \hat{\xi}(\omega') \rangle &= \frac{1}{2\pi} \langle \int_{\mathbb{R}} dt e^{i\omega t} \int_{\mathbb{R}} dt' e^{-i\omega' t'} \xi(t) \xi(t') \rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dt e^{i\omega t} \int_{\mathbb{R}} dt' e^{-i\omega' t'} \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dt e^{i\omega t} \int_{\mathbb{R}} dt' e^{-i\omega' t'} \delta(t - t') = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dt e^{i\omega t} e^{-i\omega' t} = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dt e^{i(\omega - \omega')t} = \delta(\omega - \omega') \end{aligned} \quad (2.37)$$

Ma allora:

$$\langle |\hat{\xi}(\omega)|^2 \rangle = \langle \hat{\xi}^*(\omega) \hat{\xi}(\omega) \rangle = \delta(\omega - \omega) = \delta(0) = 1 \quad (2.38)$$

Pertanto lo spettro è:

$$S_x(\omega) = \frac{A^2}{\omega^2 + \beta^2} \quad (2.39)$$

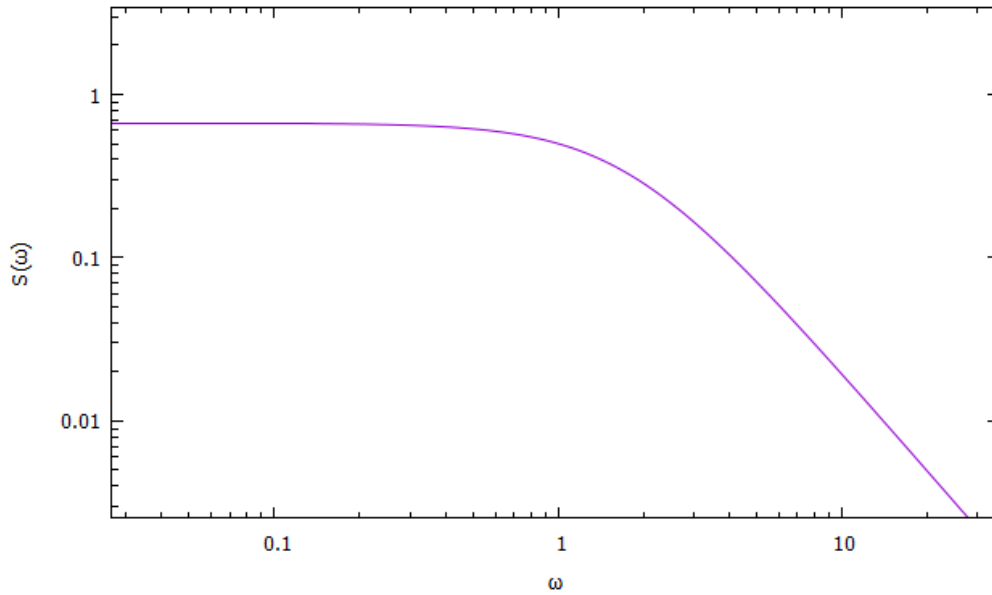


Figura 2.1: Andamento dello spettro della posizione nel caso sovrasmorzato.

Ricordando che $A = \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}}$ e $\beta = \frac{\kappa}{\gamma}$ si può confrontare questo risultato con 2.32, e si trova che è lo stesso. In particolare lo spettro della posizione è una Lorentziana.

Il calcolo dello spettro delle velocità risulta semplificato se si ricorda la proprietà 2.23:

$$S_{\dot{x}}(\omega) = |\hat{x}(\omega)|^2 = |-i\omega \hat{x}(\omega)|^2 = \omega^2 |\hat{x}(\omega)|^2 \quad (2.40)$$

Sostituendo l'espressione sopra trovata per $\hat{x}(\omega)$ il risultato segue subito:

$$S_{\dot{x}}(\omega) = \frac{A^2 \omega^2}{\omega^2 + \beta^2} \quad (2.41)$$

Si noti come non fosse possibile applicare direttamente il teorema di Wiener-Khintchine, in quanto risulterebbe necessario il calcolo esplicito di $\dot{x}(t)$, non banale.

Alle figure 2.1 e 2.2 sono stati graficati gli andamenti di $S_x(\omega)$ e $S_{\dot{x}}(\omega)$, in scala logaritmica; sono stati utilizzati valori a caso di ω e A , in quanto tutti i grafici di questo capitolo sono finalizzati esclusivamente al graficare l'andamento qualitativo degli spettri: veri valori sperimentali saranno inseriti al capitolo 4. Si noti come per ω grandi, ovvero ad alte frequenze, lo spettro di $\dot{x}$ tenda ad uno spettro piatto, tipico del rumore bianco. Ciò è intuitivo, poiché man mano che le frequenze salgono esse tendono a sovrapporsi al rumore stesso, con andamento simile. Lo spettro di x , invece, tende allo spettro piatto per basse frequenze: infatti a basse frequenze la particella deve assumere un moto simile a quello del rumore bianco.

Risulta parimenti utile notare come gli spettri graficati siano in effetti due diagrammi di Bode, che risultano identici a quelli di un circuito RC in scarica. Infatti, l'equazione che descrive tale tipo di circuito è proprio:

$$\dot{q}(t) = -\frac{1}{RC}q(t) \quad (2.42)$$

pertanto si può identificare $\beta \rightarrow 1/RC$. In questo caso $x(t)$ corrisponde alla carica $q(t)$ mentre la sua derivata $\dot{x}(t)$ corrisponde alla corrente circolante, $I(t)$. Aggiungendo il termine $A\xi(t)$ di rumore bianco la risposta in frequenza del circuito non deve variare in media (per la stessa proprietà del rumore bianco), pertanto si devono ritrovare gli stessi andamenti sopra. Questo parallelo fra circuito RC e particella Browniana in un fluido mostra come molti sistemi descritti in modo deterministico possano essere trattati con tecniche di analisi stocastica includendo le fluttuazioni: ad esempio Nyquist nel 1928

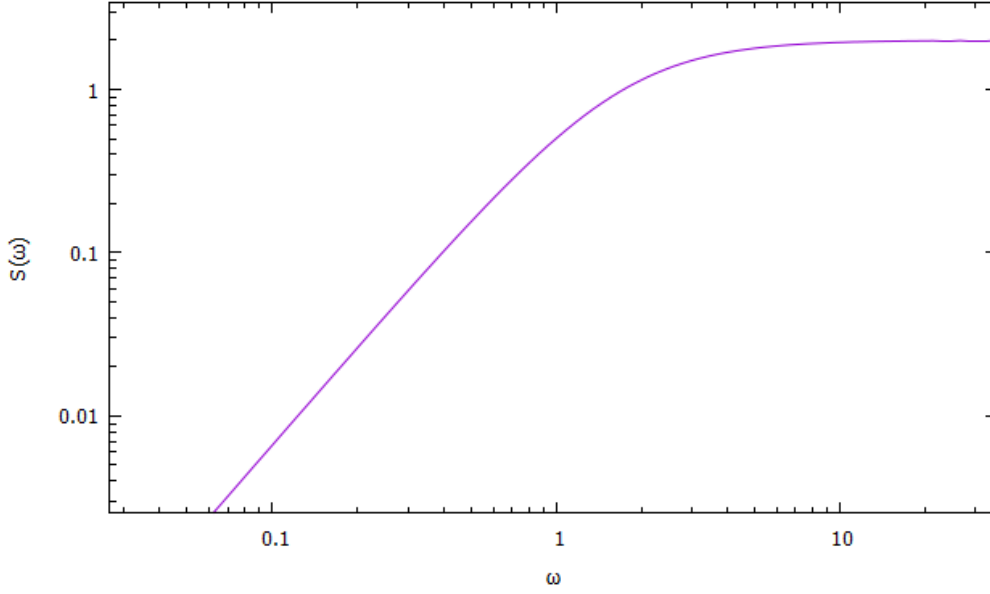


Figura 2.2: Andamento dello spettro della velocità nel caso sovrasmorzato.

ha ricavato una formula che descrive le fluttuazioni del potenziale in un circuito elettrico (cfr. [13]). Si deve infine sottolineare il fatto che lo spettro della posizione di fatto è lo spettro della potenza, a meno di un riscaldamento. Infatti, per la definizione di potenza:

$$P = F\dot{x} \rightarrow \langle P \rangle = \langle F\dot{x} \rangle \quad (2.43)$$

Ma allora, usando l'equazione in regime sovrasmorzato si ha

$$\langle P \rangle = \langle -\kappa x (-\beta x + A\xi(t)) \rangle = \langle \kappa\beta x^2 \rangle + A\kappa \langle x\xi(t) \rangle = \langle \kappa\beta x^2 \rangle + 0 = \kappa\beta \langle x^2 \rangle \quad (2.44)$$

e osservando come la potenza sia proporzionale al valor medio di x^2 , si vede che anche il suo spettro lo è.

2.3 Spettro nel caso generale

Nel caso generale non sovrasmorzato, l'equazione della dinamica della particella è la 2.1:

$$m\ddot{x}(t) = -\kappa x(t) - \gamma\dot{x}(t) + m\sqrt{2\gamma k_B T}\xi(t) \quad (2.45)$$

che si può riscrivere come:

$$\ddot{x}(t) = -\Omega^2 x(t) - \alpha\dot{x}(t) + A\xi(t) \quad (2.46)$$

con $\Omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ e $\alpha = \frac{\gamma}{m}$. Si può ripetere il ragionamento euristico di Langevin proposto nella sezione 1.3 e ovviamente i calcoli risulteranno più laboriosi. In particolare la soluzione formale della 2.1, ottenuta tramite la variazione delle costanti, è:

$$x(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} + e^{\lambda_1 t} \int_1^t \frac{A\xi(\tau)}{(\lambda_1 - \lambda_2)e^{\lambda_1 \tau}} d\tau + e^{\lambda_2 t} \int_1^t \frac{A\xi(\tau)}{(\lambda_2 - \lambda_1)e^{\lambda_2 \tau}} d\tau \quad (2.47)$$

dove C_1 e C_2 sono costanti d'integrazione determinabili a partire dal dato iniziale, mentre $\lambda_1 = \frac{1}{2}(-\sqrt{\alpha^2 - 4\Omega^2} - \alpha)$, $\lambda_2 = \frac{1}{2}(\sqrt{\alpha^2 - 4\Omega^2} + \alpha)$ sono le radici caratteristiche. Da questa soluzione si vede subito che il valor medio della posizione della particella è:

$$\langle x(t) \rangle = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \quad (2.48)$$

che è ovvio, poiché è la posizione che la particella assumerebbe senza forzante stocastica, che ha valor medio nullo. Si può anche immediatamente calcolare la velocità:

$$\dot{x}(t) = C_1 \lambda_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 \lambda_2 e^{\lambda_2 t} + \lambda_1 e^{\lambda_1 t} \int_1^t \frac{A \xi(\tau)}{(\lambda_1 - \lambda_2) e^{\lambda_1 \tau}} d\tau + \lambda_2 e^{\lambda_2 t} \int_1^t \frac{A \xi(\tau)}{(\lambda_2 - \lambda_1) e^{\lambda_2 \tau}} d\tau \quad (2.49)$$

il cui valor medio è ancora la velocità che assumerebbe la particella senza forzante stocastica:

$$\langle \dot{x}(t) \rangle = C_1 \lambda_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 \lambda_2 e^{\lambda_2 t} \quad (2.50)$$

A partire dalla 2.47, procedendo come visto in precedenza, si possono calcolare anche la media quadratica della posizione $\langle x^2(t) \rangle$, della velocità $\langle v^2(t) \rangle$ e la funzione di correlazione $\langle x(t)x(s) \rangle$, ma i calcoli risultano lunghi e, di per sé, inutili al fine di continuare la trattazione, pertanto non verranno svolti.

Si può ora svolgere nuovamente il ragionamento visto in 2.2 per ricavare gli spettri della 2.1 nel caso generale: nello spazio di Fourier essa diviene:

$$-\omega^2 \hat{x}(\omega) = -\Omega^2 \hat{x}(\omega) + i\omega\alpha \hat{x}(\omega) + A \hat{\xi}(\omega) \quad (2.51)$$

dunque la trasformata della posizione è

$$\hat{x}(\omega) = \frac{A}{\Omega^2 - i\omega\alpha - \omega^2} \hat{\xi}(\omega) \quad (2.52)$$

e lo spettro quindi

$$S_x(\omega) = \left| \frac{A}{\Omega^2 - i\omega\alpha - \omega^2} \hat{\xi}(\omega) \right|^2 = \frac{A^2}{\omega^2\alpha^2 + (\Omega^2 - \omega^2)^2} |\hat{\xi}(\omega)|^2 = \frac{A^2}{\omega^2\alpha^2 + (\Omega^2 - \omega^2)^2} \quad (2.53)$$

dove nell'ultimo passaggio è stata utilizzata, come in precedenza, la proprietà del rumore bianco. Parimenti, lo spettro della velocità è:

$$S_{\dot{x}}(\omega) = \omega^2 |\hat{x}(\omega)|^2 = \frac{A^2 \omega^2}{\omega^2\alpha^2 + (\Omega^2 - \omega^2)^2} \quad (2.54)$$

La 2.53 e la 2.54 si possono graficare in funzione della pulsazione in assi logaritmici, ottenendo i risultati alle figure 2.3 e 2.4. Si noti ancora come per piccole frequenze gli spettri tendano a quelli del caso *overdamped*; per grandi frequenze, al contrario, si presenta una caduta di 20 dB/decade.

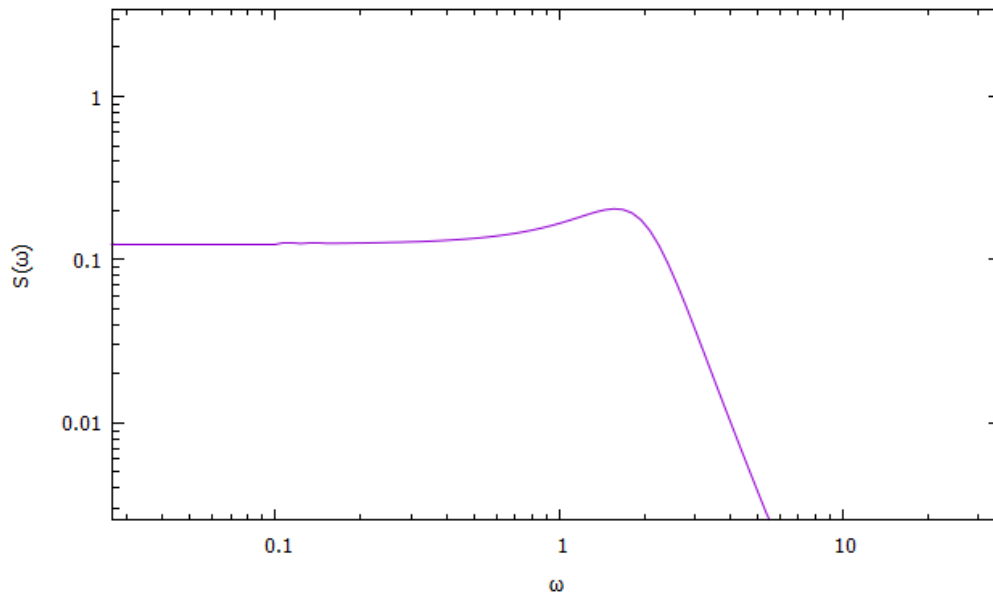


Figura 2.3: Andamento dello spettro della posizione nel caso generale.

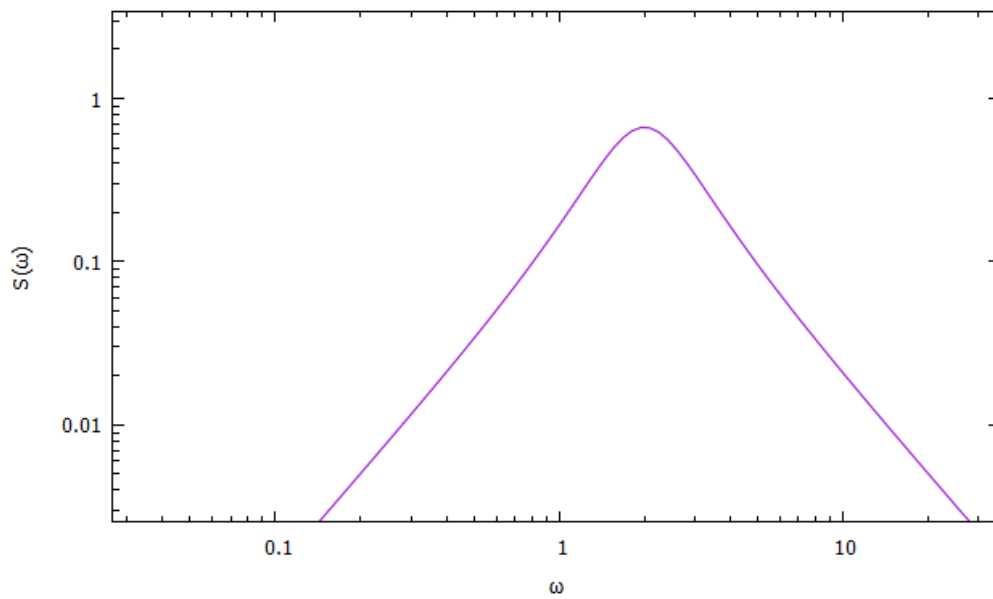


Figura 2.4: Andamento dello spettro della velocità nel caso generale.

Approccio di Fokker-Planck

Nel capitolo precedente si è visto che lo spettro della posizione di una particella in un tweezer, in regime sovrasmorzato, la cui dinamica è descritta dall'equazione 2.15

$$\dot{x} = -\beta x + A\xi(t) \quad (3.1)$$

è dato dalla 2.39:

$$S_x(\omega) = \frac{A^2}{\omega^2 + \beta^2} \quad (3.2)$$

Vi è però una formulazione alternativa del problema, basata su un'equazione simile ad un'equazione di diffusione, l'equazione di Fokker-Planck³, che nella sua formulazione più generale ad una dimensione è:

$$\frac{\partial p}{\partial t}(x, t|x_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial x}(D^{(1)}(x, t)p(x, t|x_0, t_0)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}(D^{(2)}(x, t)p(x, t|x_0, t_0)) \quad (3.3)$$

dove $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ hanno il significato di coefficienti di *drift* ($D^{(1)}$) e di *diffusione* ($D^{(2)}$)⁴. L'idea alla base di quest'approccio è che la probabilità, essendo normalizzata ad 1, è una costante del moto. Pertanto si potrà definire un'equazione di continuità e una "corrente di probabilità" (simile, ad esempio, a quella risultante dall'equazione di Schrödinger in meccanica quantistica). La soluzione dell'equazione di Fokker-Planck fornisce la probabilità $p(x, t)$ in un dato punto dello spazio ad un certo istante di tempo. In questo modo si possono definire le medie di ensemble:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx f(x) p(x, t) \quad (3.4)$$

In particolare si avranno le definizioni analoghe di 2.16, 2.17 e 2.18 :

$$\langle x(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x p(x, t) \quad (3.5)$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x^2 p(x, t) \quad (3.6)$$

$$\langle x(t)x(s) \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dx x x' p(x, t|x', s) p(x', s) \quad (3.7)$$

L'equazione di Fokker-Planck ammette ovviamente anche una naturale generalizzazione a più dimensioni, ma essendo la dinamica disaccoppiata in questa trattazione non risulta necessario introdurla. Lo scopo di questo capitolo è quindi quello di formulare l'equazione di Fokker-Planck per la particella con la dinamica studiata finora, e riottenere il suo spettro 2.39.

³In tutta la prima parte di questo capitolo si seguirà l'approccio di [14].

⁴Si tratta dei primi due coefficienti di Kramers-Moyal, vedere 5.3.

3.1 Equazione di Smoluchowski

Data una particella descritta dall'equazione di Langevin:

$$\dot{x}(t) = F_d(t, x(t)) + F_s(t) \quad (3.8)$$

con $F_d(x(t), t)$ forze deterministiche⁵ e $F_s(t)$ contributo delle forze stocastiche tale che $\langle F_s(t)F_d(t) \rangle = \Gamma\delta(t-s)$ (Γ coefficiente da determinare in base alla fisica del problema), i coefficienti $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ sono dati da:

$$\begin{cases} D^{(1)}(x, t) = F(t, x) \\ D^{(2)}(x, t) = \frac{\Gamma}{2} \end{cases} \quad (3.9)$$

Questo risultato non è ovvio, ma in questa sezione non è opportuno dimostrarlo, per cui la dimostrazione delle 3.11 è rimandata all'appendice 5.3.

Per un processo di Ornstein-Uhlenbeck descritto dall'equazione 1.75

$$\dot{v}(t) = -\alpha v(t) + A\xi(t) \quad (3.10)$$

usando le 3.11

$$\begin{cases} D^{(1)}(x, t) = -\alpha v \\ D^{(2)}(x, t) = \frac{\sigma^2}{2m^2} \end{cases} \quad (3.11)$$

la 3.19 diviene:

$$\frac{\partial p}{\partial t}(v, t|v_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial v}((- \alpha v)p(v, t|v_0, t_0)) + \frac{\sigma^2}{2m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2}(p(v, t|v_0, t_0)) \quad (3.12)$$

Tramite il solito ragionamento di confronto, presa l'equazione 2.15 che descrive la particella in regime sovrasmorzato:

$$\dot{x} = \frac{F(x)}{\gamma} + A\xi(t) \quad (3.13)$$

con $F(x)$ forze esterne, si giunge all'equazione:

$$\frac{\partial p}{\partial t}(x, t|x_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{F(x)}{\gamma} p(x, t|x_0, t_0) \right) + \frac{\sigma^2}{2\gamma^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(p(x, t|x_0, t_0)) \quad (3.14)$$

Questa equazione è detta *equazione di Smoluchowski*. Nel caso oggetto di studio si ha che $F(x) = -\kappa x$, pertanto essa diviene:

$$\frac{\partial p}{\partial t}(x, t|x_0, t_0) = \beta \frac{\partial}{\partial x}(xp(x, t|x_0, t_0)) + \frac{\sigma^2}{2\gamma^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(p(x, t|x_0, t_0)) \quad (3.15)$$

Si noti che, essendo $\sigma^2 = 2\gamma k_B T$, il coefficiente di diffusione vale $D^{(2)} = \frac{\sigma^2}{2\gamma^2} = \frac{k_B T}{\gamma} = D$, ovvero il coefficiente di diffusione introdotto in 2.20. Pertanto, il significato di tale coefficiente è proprio quello di governare la diffusione della probabilità di trovare la una particella in una certa posizione: nel caso di forze esterne nulle infatti $D^{(1)}$ è zero e l'equazione si riduce ad una semplice equazione di diffusione, con D coefficiente di diffusione.

Tutto il resto di questo capitolo sarà focalizzato sulla ricerca dello spettro della x in 3.15. Si noti come l'equazione di Smoluchowski per il sistema in questione sia una PDE nonlineare, la cui soluzione analitica è solitamente estremamente difficile da calcolare con procedimenti standard, quali la separazione delle variabili, il metodo delle caratteristiche, il passaggio allo spazio di Fourier e simili. Si noti altresì come risulti fondamentale essere passati in regime *overdamped*: il fatto che ciò sia possibile risulta cruciale, poiché per un'equazione del secondo ordine non si dispone di formule che svolgano il ruolo di

⁵Dimensionalmente entrambe le forze andrebbero divise per la massa, che è una costante, ma qui la notazione non è ambigua.

3.11.

Si può mostrare come nel caso stazionario la probabilità sia proprio la distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$p_s(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{v^2 m}{2k_B T}} \quad (3.16)$$

con la sostituzione $x \rightarrow v$ e riarrangiando i coefficienti: infatti, sempre per la solita sostituzione, si potrà risolvere il calcolo in v , ottenendo la distribuzione probabilistica delle velocità nel caso stazionario, che deve proprio essere quella di Maxwell-Boltzmann.

Nel caso stazionario, si ha

$$\frac{\partial p_s}{\partial t} = 0 \quad (3.17)$$

pertanto la 3.19 diviene l'ODE:

$$\frac{\partial}{\partial x}(D^{(1)}(x, t)p_s(x, t|x_0, t_0)) - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(D^{(2)}(x, t)p_s(x, t|x_0, t_0)) = 0 \quad (3.18)$$

e si vede per sostituzione diretta che la seguente è una famiglia di soluzioni (dove, per semplicità, si sono considerati i coefficienti $D^{(1)}$ e $D^{(2)}$ indipendenti dal tempo, come in ogni situazione qui trattata):

$$p_s(x) = \frac{N_0}{D^{(2)}(x)} e^{\int_a^x \frac{D^{(1)}(x')}{D^{(2)}(x')} dx'} \quad (3.19)$$

con N_0 coefficiente da calcolare in modo che la probabilità sia normalizzata ad 1. Adattando questi risultati alla 3.14 si ritrova la distribuzione di Maxwell-Boltzmann 3.16, mentre la soluzione della 3.15 in regime stazionario è:

$$p_s(x) = \frac{2\gamma^2 N_0}{\sigma^2} e^{\int_a^x -\frac{\beta x 2\gamma^2}{\sigma^2} dx'} = \frac{2\gamma^2 N_0}{\sigma^2} e^{-\frac{\beta \gamma^2}{\sigma^2}(x^2 - a^2)} = \frac{N_0}{2D} e^{-\frac{\beta}{2D}(x^2 - a^2)} \quad (3.20)$$

con a costante d'integrazione. La condizione di normalizzazione fornisce il seguente risultato:

$$\frac{1}{N_0} = \sqrt{\frac{\pi \beta}{2D}} \frac{e^{\frac{a^2 \beta}{2D}}}{\beta} \quad (3.21)$$

Perciò la probabilità nel caso stazionario diviene:

$$p_s(x) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi D}} e^{-\frac{\beta}{2D}x^2} \quad (3.22)$$

Si noti come risulti correttamente indipendente dalla costante d'integrazione a .

Anche nel caso evolutivo la soluzione può essere determinata analiticamente, se la condizione iniziale è una probabilità deltiforme (ciò è un caso molto comune, poiché al tempo iniziale si conosce spesso la posizione della particella, che in questo caso viene indicata con x_0):

$$p(x, 0) = \delta(x - x_0) \quad (3.23)$$

e la soluzione (verificabile per sostituzione diretta, oppure usando il metodo delle caratteristiche) è una gaussiana la cui deviazione standard si allarga nel tempo:

$$p(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t)}} e^{-\frac{(x - x_0 e^{-\beta t})^2}{2\alpha(t)}} \quad (3.24)$$

con $\alpha(t) = \frac{D}{\beta}(1 - e^{-2\beta t})$. Il fatto che la deviazione standard aumenti nel tempo è ovvio, poiché al trascorrere del tempo si ha uno sparpagliamento della probabilità attorno al punto in cui si trovava inizialmente la particella, che aumenta col tempo: questo sparpagliamento è governato dal coefficiente di diffusione.

Si possono ora ricalcolare i valori medi 2.16 e 2.17 secondo l'approccio di Fokker-Planck, verificando

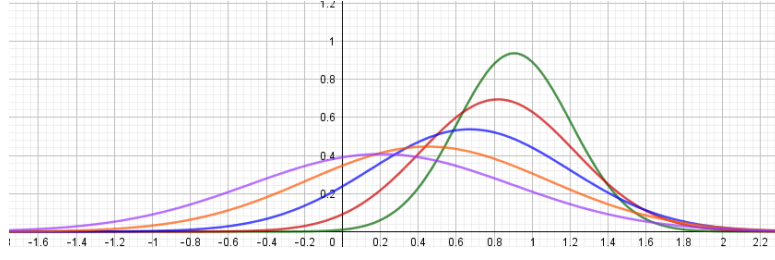


Figura 3.5: Andamento della probabilità da una distribuzione deltiforme a $t = 0$ in $x_0 = 1$, $D=1$: sono stati graficati 5 diversi istanti di tempo, in successione esponenziale. Si noti come la probabilità tenda ad una gaussiana centrata in 0 per $t \rightarrow \infty$: infatti il minimo del potenziale è l'origine.

che i risultati siano gli stessi.

$$\langle x(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x p(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t)}} \int_{\mathbb{R}} dx x e^{-\frac{(x-x_0 e^{-\beta t})^2}{2\alpha(t)}} = x_0 e^{-\beta t} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx x^2 p(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t)}} \int_{\mathbb{R}} dx x^2 e^{-\frac{(x-x_0 e^{-\beta t})^2}{2\alpha(t)}} = \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t)}} \sqrt{2\pi\alpha(t)} (x_0^2 e^{-2\beta t} + \alpha(t)) = x_0^2 e^{-2\beta t} + \frac{D}{\beta} (1 - e^{-2\beta t}) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Ricordando che $\beta = \frac{\kappa}{\gamma}$ e $D = \frac{k_B T}{\sigma}$, si ritrovano i valori calcolati con l'approccio di Langevin. Per quel che riguarda la funzione di correlazione 2.18, essa è più complicata da calcolare perché è necessario calcolare la probabilità condizionata $p(x, t|x', s)$, che si ottiene risolvendo l'equazione di Fokker Planck imponendo la 3.24 come dato iniziale. Esso tuttavia risulta la 3.24 stessa con dato iniziale (x', s) , perché risulta evidente che se si blocca ad un istante successivo $t > s$ la soluzione, per unicità della soluzione dell'equazione differenziale, evolverà sempre allo stesso modo, a meno di una traslazione temporale:

$$p(x, t|x', s) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t-s)}} e^{-\frac{(x-x' e^{-\beta(t-s)})^2}{2\alpha(t-s)}} \quad (3.27)$$

Per cui usando la 3.7 si trova:

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(s) \rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dx x x' \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t-s)}} e^{-\frac{(x-x' e^{-\beta(t-s)})^2}{2\alpha(t-s)}} \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(s)}} e^{-\frac{(x'-x_0 e^{-\beta s})^2}{2\alpha(s)}} = \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx' x' \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(s)}} e^{-\frac{(x'-x_0 e^{-\beta s})^2}{2\alpha(s)}} \int_{\mathbb{R}} dx x \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(t-s)}} e^{-\frac{(x-x' e^{-\beta(t-s)})^2}{2\alpha(t-s)}} = \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx' x' \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(s)}} e^{-\frac{(x'-x_0 e^{-\beta s})^2}{2\alpha(s)}} (x' e^{-\beta(t-s)}) = e^{-\beta(t-s)} \int_{\mathbb{R}} dx' x'^2 \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha(s)}} e^{-\frac{(x'-x_0 e^{-\beta s})^2}{2\alpha(s)}} = \\ &= e^{-\beta(t-s)} \left(x_0^2 e^{-2\beta t} + \frac{D}{\beta} (1 - e^{-2\beta t}) \right) = x_0^2 e^{-\beta(s+t)} + \frac{D}{\beta} (e^{-\beta(t-s)} - e^{-\beta(s+t)}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

ovvero la 2.18.

3.2 Spettro della posizione

A causa del fatto che l'equazione di Smoluchowski 3.15 è una PDE, il calcolo dello spettro è molto complicato. Nel 2012, Touchette, Prellberg e Just hanno calcolato esattamente questo spettro per una particella stocastica con attrito dinamico (v. [15]): il loro risultato, che parte da un'equazione

di Langevin nella velocità, può essere agilmente adattato al caso oggetto di studio; questo paragrafo pertanto adatta il loro ragionamento nel caso dell'equazione 2.15.

Si inizia riscaldando questa equazione di Langevin in variabili adimensionali, secondo il riscaldamento

$$\begin{cases} X = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\gamma^2\beta}}x \\ T = \beta t \end{cases} \quad (3.29)$$

In questo modo l'equazione di Fokker-Planck che governa il processo diffusivo diviene:

$$\frac{\partial p}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X}(Xp) + \frac{\partial^2}{\partial X^2}p \quad (3.30)$$

Per semplicità, nel seguito, le X e le T verranno indicate ancora con x e t e gli argomenti di P non saranno indicati dove non vi siano ambiguità (si noti che con questo riscaldamento $D = 1$). Si ricorda ora la definizione di trasformata di Laplace:

$$L[f(t)](s) = \tilde{f}(s) := \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt \quad (3.31)$$

con s variabile complessa. Al pari della trasformata di Fourier, quella di Laplace è estremamente utile nella soluzione di equazioni differenziali perché trasforma le derivate in prodotti:

$$L\left[\frac{df(t)}{dt}\right](s) = sL[f(t)](s) - f(0^+) \quad (3.32)$$

Considerando quindi l'equazione 3.30, si applica la trasformata di Laplace ad entrambi i membri, trovando (l'apice indica la derivata rispetto ad x):

$$\begin{aligned} s\tilde{p}(x, s|x', 0) - \delta(x - x') &= \frac{d}{dx}(x\tilde{p}(x, s|x', 0)) + \frac{d^2}{dx^2}\tilde{p}(x, s|x', 0) \rightarrow \\ \tilde{p}'' + x\tilde{p}' + (1 - s)\tilde{p} &= -\delta(x - x') \end{aligned} \quad (3.33)$$

Pertanto la PDE è diventata un'ODE, più facilmente risolvibile. Tuttavia, la 3.33 non ha soluzioni esprimibili in termini di funzioni elementari, ma di una classe di funzioni speciali, le *funzioni paraboliche del cilindro*, definite come:

$$D_\nu(x) := 2^{\frac{\nu}{2}} e^{-x^2/4} F_1\left(-\frac{\nu}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}z^2\right) \quad (3.34)$$

dove F_1 è la *funzione ipergeometrica confluyente di prima specie*, definita dalla serie:

$$F_1(a, b, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \frac{a^{(k)}}{b^{(k)}} \quad (3.35)$$

con x variabile indipendente e a e b parametri; il simbolo $x^{(n)}$ è detto *simbolo di Pochhammer* ed è definito nel modo seguente:

$$x^{(n)} = \begin{cases} 1 & \text{se } n = 0 \\ a(a+1)\dots(a+n-1) & \text{se } n > 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

Per vedere il grafico di alcune paraboliche del cilindro si veda la figura 3.6. Alcune proprietà rilevanti delle D_ν sono⁶:

$$D_{\nu+1}(x) - xD_\nu(x) + \nu D_{\nu-1}(x) = 0 \quad (3.37)$$

$$D'_\nu(x) + \frac{x}{2}D_\nu(x) - \nu D_{\nu-1}(x) = 0 \quad (3.38)$$

⁶Per approfondire tutte le proprietà delle funzioni paraboliche del cilindro si veda [16].

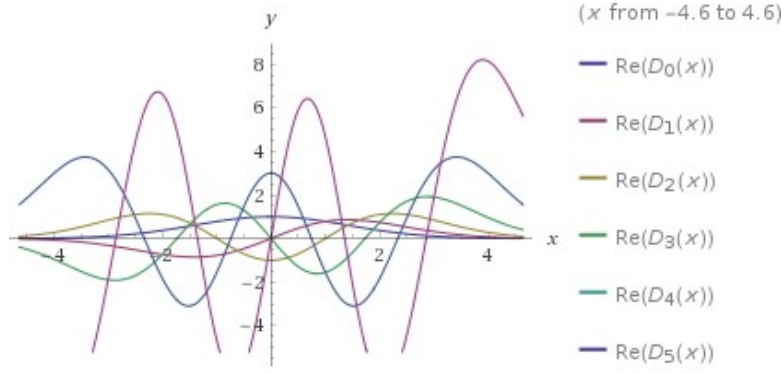


Figura 3.6: Paraboliche del cilindro per indici ν naturali da 0 a 5. Si noti come risultino alternativamente pari e dispari, fatto che non accade se ν non è intero.

$$D_\nu(x)D_{\nu-1}(-x) + D_\nu(-x)D_{\nu-1}(x) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu+1)} \quad (3.39)$$

con Γ funzione gamma di Eulero. Una relazione che sarà utile in seguito, ricavabile dalle predenti, è la derivata di $e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)$:

$$\begin{aligned} \left(e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)\right)' &= \frac{x}{2}e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x) + e^{-\frac{x^2}{4}}D'_\nu(x) = \left(\frac{x}{2} + \frac{x}{2}\right)e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x) + \nu e^{-\frac{x^2}{4}}D_{\nu-1}(x) = \\ &= xe^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x) + \nu e^{-\frac{x^2}{4}}D_{\nu-1}(x) \end{aligned} \quad (3.40)$$

dove si è usata la regola di Leibniz e nel secondo passaggio la 3.38. Questa relazione può anche essere scritta nel seguente, modo, usando la 3.37:

$$xe^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x) + \left(e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)\right)' = \nu e^{-\frac{x^2}{4}}D_{\nu-1}(x) = e^{-\frac{x^2}{4}}(xD_\nu(x) - D_{\nu+1}(x)) \quad (3.41)$$

da cui si ricava la relazione, utile in seguito:

$$\left(e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)\right)' = -D_{\nu+1}(x)e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (3.42)$$

Una soluzione particolare della 3.33 è:

$$\tilde{p}_1(x) = e^{-\frac{x^2}{4}}D_{-s}(x) \quad (3.43)$$

Infatti, usando ancora le regole di derivazione e la 3.40:

$$\left(e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)\right)' = -se^{-\frac{x^2}{4}}D_{-s-1}(x) + xe^{-\frac{x^2}{4}}D_{-s}(x) \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \left(e^{-\frac{x^2}{4}}D_\nu(x)\right)'' &= \\ &= \frac{sx}{2}e^{-\frac{x^2}{4}}D_{-s-1}(x) - se^{-\frac{x^2}{4}}D'_{-s-1}(x) - e^{-\frac{x^2}{4}}D'_{-s}(x) + \frac{x^2}{2}e^{-\frac{x^2}{4}}D_{-s}(x) - xe^{-\frac{x^2}{4}}D'_{-s}(x) = \\ &= e^{-\frac{x^2}{4}}\left(\frac{sx}{2}D_{-s-1}(x) + \frac{sx}{2}D_{-s-1}(x) + s(s+1)D_{-s-2}(x) + \left(\frac{x^2}{2} - 1\right)D_{-s}(x) + \frac{x^2}{2}D_{-s}(x) + sxD_{-s-1}(x)\right) = \\ &= e^{-\frac{x^2}{4}}((x^2 - 1)D_{-s}(x) + s(s+1)D_{-s-2}(x) + 2sxD_{-s-1}(x)) \end{aligned} \quad (3.45)$$

dove nella formula per la derivata seconda si sono usate le seguenti relazioni per ricorrenza derivanti da 3.38:

$$\begin{aligned} D'_{-s} &= -\frac{x}{2}D_{-s} - sD_{-s-1} \\ D'_{-s-1} &= -\frac{x}{2}D_{-s-1} - (s+1)D_{-s-2} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Sostituendo direttamente nella 3.33, si trova:

$$(x^2 - 1)D_{-s}(x) + s(s+1)D_{-s-2}(x) + 2sx D_{-s-1}(x) - xs D_{-s-1}(x) - x^2 D_{-s}(x) + (1-s)D_{-s}(x) = -sD_{-s}(x) + sx D_{-s-1}(x) + s(s+1)D_{-s-2}(x) = -s(D_{-s}(x) - x D_{-s-1}(x) - (s+1)D_{-s-2}(x)) = 0 \quad (3.47)$$

dove nell'ultimo passaggio si è usata la 3.37. Quindi la 3.43 è sua soluzione. Inoltre, $\tilde{p}_2(x) = \tilde{p}_1(-x) = e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(-x)$ è sempre una soluzione della 3.33 (ed è linearmente indipendente da 3.43), infatti per sostituzione diretta nella 3.33 si vede che se $f(x)$ è soluzione anche $f(-x)$ lo è. Dunque l'integrale generale della 3.33 è:

$$\tilde{p}(x) = A\tilde{p}_1(x) + B\tilde{p}_2(x) = Ae^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) + Be^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(-x) \quad (3.48)$$

con A e B coefficienti reali. Si devono ora imporre le condizioni al contorno corrispondenti alla delta di Dirac a primo membro della 3.33. Questa è equivalente all'equazione:

$$\tilde{p}'' + x\tilde{p}' + (1-s)\tilde{p} = 0 \quad (3.49)$$

con le condizioni al contorno sulla trasformata della probabilità (che è la soluzione):

$$\begin{cases} \tilde{p}(x'^-, s|x', 0) = \tilde{p}(x'^+, s|x', 0) \\ -1 = \frac{d\tilde{p}}{dx}(x'^-, s|x', 0) - \frac{d\tilde{p}}{dx}(x'^+, s|x', 0) \end{cases} \quad (3.50)$$

Si deve quindi cercare una soluzione del tipo (3.48), della 3.49:

$$\tilde{p}(x) = B_+(x', s)e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) + B_-(x', s)e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(-x) \quad (3.51)$$

Imponendo le condizioni 3.50 risulta un sistema di equazioni lineari, che per essere risolto richiede l'utilizzo delle proprietà 3.39 e 3.40. Il risultato (si omettono ulteriori calcoli), che è la soluzione particolare della 3.33, è:

$$\tilde{p}(x, s|x', 0) = \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{\frac{x'^2}{4}} D_{-s}(x') e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(-x) & x < x' \\ e^{\frac{x'^2}{4}} D_{-s}(-x') e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) & x > x' \end{cases} \quad (3.52)$$

A questo punto si può calcolare la funzione di autocorrelazione con il tempo t (v. 3.7); prendendone la trasformata di Laplace, ricordando che commuta con gli integrali, si trova

$$\tilde{C}(s) = \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dx x x' \tilde{p}(x, s|x', 0) \rho_f(x') = \int_{\mathbb{R}} dx' x' \rho_f(x') \int_{\mathbb{R}} dx x \tilde{p}(x, s|x', 0) \quad (3.53)$$

e $\rho_f(x') = \frac{1}{Z} e^{-\frac{x'^2}{2}}$, data dalla distribuzione di Boltzmann ($Z = \sqrt{2\pi}$ è la costante di normalizzazione). Per completezza qui si pone come condizione iniziale una gaussiana e non una distribuzione di probabilità deltiforme.

Si procede ora a valutare l'integrale doppio nella 3.53. Dalla 3.40 e dalla 3.42, integrando e ponendo $\nu = -s$ si trova che:

$$\int x e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) = -e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) + s e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s-2}(x) = -e^{-\frac{x^2}{4}} (D_{-s}(x) - s D_{-s-2}(x)) \quad (3.54)$$

Usando questa relazione si può allora valutare l'integrale in x . Inserendo l'espressione esplicita di $\tilde{p}$ (3.52), si ha che:

$$\int_{\mathbb{R}} dx x \tilde{p}(x, s|x', 0) = \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x'^2}{4}} \left(D_{-s}(x') \int_{-\infty}^{x'} x e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(-x) dx + D_{-s}(-x') \int_{x'}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) dx \right) \quad (3.55)$$

Effettuando la sostituzione $-x \rightarrow x$ nel primo integrale, si trova:

$$\int_{\mathbb{R}} dx x \tilde{p}(x, s | x', 0) = \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{x'^2}{4}} \left(D_{-s}(x') \int_{-\infty}^{-x'} x e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) dx + D_{-s}(-x') \int_{x'}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x) dx \right) \quad (3.56)$$

A questo punto per valutare i due integrali definiti si usa la 3.54 ed il fatto che $e^{-\frac{x^2}{4}} D_{-s}(x)$ è infinitesima all'infinito. Il risultato è:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx x \tilde{p}(x, s | x', 0) &= \\ &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{x'^2}{4}} \left(-D_{-s}(x') e^{-\frac{x'^2}{4}} (D_{-s}(-x') - s D_{-s-2}(-x')) + D_{-s}(-x') e^{-\frac{x'^2}{4}} (D_{-s}(x') - s D_{-s-2}(x')) \right) = \\ &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{x'^2}{4}} e^{-\frac{x'^2}{4}} (-D_{-s}(x') (D_{-s}(-x') - s D_{-s-2}(-x')) + D_{-s}(-x') (D_{-s}(x') - s D_{-s-2}(x'))) = \\ &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} (-D_{-s}(x') (D_{-s}(-x') - s D_{-s-2}(-x')) + D_{-s}(-x') (D_{-s}(x') - s D_{-s-2}(x'))) = \\ &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} ((-D_{-s}(x') (D_{-s}(-x') - (s+1) D_{-s-2}(-x')) + D_{-s}(-x') (D_{-s}(x') - (s+1) D_{-s-2}(x'))) + \\ &+ \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} (-D_{-s-2}(-x') D_{-s}(x') + D_{-s}(-x') D_{-s-2}(x')) = \\ &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} ((D_{-s}(x') D_{-s-1}(-x') x' + D_{-s}(-x') D_{-s-1}(x') x') + (-D_{-s-2}(-x') D_{-s}(x') + D_{-s}(-x') D_{-s-2}(x'))) \end{aligned} \quad (3.57)$$

Si procede ora a valutare separatamente gli integrali in x' di questi ultimi due addendi. Per quanto riguarda il primo:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx x \tilde{p}(x, s | x', 0) &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} (x' D_{-s}(x') D_{-s-1}(-x') + x' D_{-s}(-x') D_{-s-1}(x')) = \\ \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} x' (D_{-s}(x') D_{-s-1}(-x') + D_{-s}(-x') D_{-s-1}(x')) &= \frac{\Gamma(s)}{\sqrt{2\pi}} x' \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(s+1)} = \frac{x'}{s+1} \end{aligned} \quad (3.58)$$

dove nel secondo passaggio si è utilizzata la proprietà 3.40 e nell'ultimo la proprietà della funzione gamma di Eulero. Quindi:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx' x' \left(\frac{x'}{s+1} \right) \rho_f(x') &= \int_{\mathbb{R}} dx' \left(\frac{x'^2}{s+1} \right) \rho_f(x') = \\ \frac{1}{s+1} \int_{\mathbb{R}} dx' x'^2 \rho_f(x') &= \frac{1}{s+1} \end{aligned} \quad (3.59)$$

dove nell'ultimo passaggio si è utilizzato il fatto che $\int_{\mathbb{R}} dx' x'^2 \rho_f(x') = 1$ che viene dalla normalizzazione della probabilità $\rho_f(x')$.

Per quanto riguarda il secondo integrale (si tralascia il coefficiente costante):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dx' x' (-D_{-s-2}(-x') D_{-s}(x') + D_{-s}(-x') D_{-s-2}(x')) \rho_f(x') &= \\ = \int_{\mathbb{R}} dx' x' (-D_{-s-2}(-x') D_{-s}(x')) \rho_f(x') + \int_{\mathbb{R}} dx' x' (D_{-s}(-x') D_{-s-2}(x')) \rho_f(x') &= \\ = - \int_{\mathbb{R}} dx' x' (D_{-s-2}(-x') D_{-s}(x')) \rho_f(x') + \int_{\mathbb{R}} dx'' x'' (D_{-s}(x'') D_{-s-2}(-x'')) \rho_f(x'') &= 0 \end{aligned} \quad (3.60)$$

dove nell'ultimo passaggio si è effettuata la sostituzione $x'' \rightarrow x'$ e si utilizzato il fatto che $\rho_f(x'')$ è una funzione pari. Tornando alla 3.53, dunque:

$$\tilde{C}(s) = \frac{1}{s+1} + 0 = \frac{1}{s+1} \quad (3.61)$$

Pertanto, ricordando il teorema di Wiener-Khintchine e la proprietà della trasformata di Laplace, si ha che:

$$S_x(\omega) = F[C(\tau)](\omega) = \operatorname{Re}[\tilde{C}(s = i\omega)] = \frac{1}{1 + \omega^2} \quad (3.62)$$

Questo è esattamente il risultato 2.41, in cui però sono scomparsi i coefficienti per via dei riscalamanti 3.29 fatti (infatti in questo modo il tempo diviene adimensionale, pertanto diviene adimensionale anche ω^2).

Confronto coi dati sperimentali

Lo scopo di questo capitolo è tracciare gli spettri di potenza calcolati al capitolo 2, utilizzando effettivi dati sperimentali, forniti dal *mini-tweezer* dell'Università di Padova. Questa sezione non ha alcuna pretesa di verifica della teoria con l'esperimento, che richiederebbe un lavoro molto più lungo, ma il semplice scopo è quello di valutare le grandezze fisiche in gioco.

I dati forniti sono un array di 70753 dati sulla forza agente in istanti di tempo campionati regolarmente; a partire da questi si presenterà un metodo in grado di calcolare la costante elastica del potenziale della trappola ottica da considerazioni di meccanica statistica, quindi si procederà a graficare gli spettri. L'errore sulla singola misura della forza è di 0.2 pN .

4.1 Costante elastica

Per prima cosa risulta necessario calcolare la costante elastica κ dell'approssimazione al secondo ordine della buca di potenziale generata dal fascio del tweezer: essendo però ignoto il profilo del fascio, si dovrà partire da assunzioni di meccanica statistica e da dati sperimentali. Trovandosi in una dimensione per l'ipotesi fatta poco sopra, si può applicare l'equipartizione dell'energia, ottenendo:

$$\frac{1}{2}k_B T = \frac{1}{2}\kappa \langle x^2 \rangle \quad (4.1)$$

pertanto:

$$\kappa = \frac{k_B T}{\langle x^2 \rangle} \quad (4.2)$$

La temperatura T risulta ora una grandezza facilmente misurabile, mentre $\langle x^2 \rangle$ verrà stimato dai dati sperimentali. In realtà, si potrebbe avere che la temperatura misurata all'interno dell'apparato sperimentale sia diversa da quella nel fuoco del fascio, ma in questa sede questa eventualità sarà trascurata, tenendo come temperatura ambiente $T = 20^\circ \text{C} = 293 \text{ K}$.

I dati sperimentali raccolti sono le forze agenti istantaneamente sulla particella, per cui risulta necessario ricavare κ dalle forze: poiché non si può direttamente usare il fattore di conversione $F = -\kappa x$, essendo ignota la costante elastica, si procede ricordando che l'energia potenziale vale

$$U = \frac{1}{2}\kappa x^2 = \frac{1}{2} \frac{F^2}{\kappa} \quad (4.3)$$

Ma allora si può ripetere il precedente ragionamento, trovando:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \frac{\langle F^2 \rangle}{\kappa} = \frac{1}{2} k_B T \rightarrow \kappa = \frac{\langle F^2 \rangle}{k_B T} \quad (4.4)$$

Calcolando il valore a partire dai dati sperimentali del tweezer si trova il seguente risultato⁷:

$$\langle F^2 \rangle = 0.0102 \text{ pN}^2 \quad (4.5)$$

Pertanto la costante elastica vale:

$$\kappa = \frac{\langle F^2 \rangle}{k_B T} = (2.5 \pm 0.1) \cdot 10^{-6} \text{ N/m} \quad (4.6)$$

Vengono infine riportate le due serie temporali dei dati raccolti.

⁷L'errore da associare è difficile da stimare. Per vedere la stima dell'errore associato alla costante elastica, si veda [19].

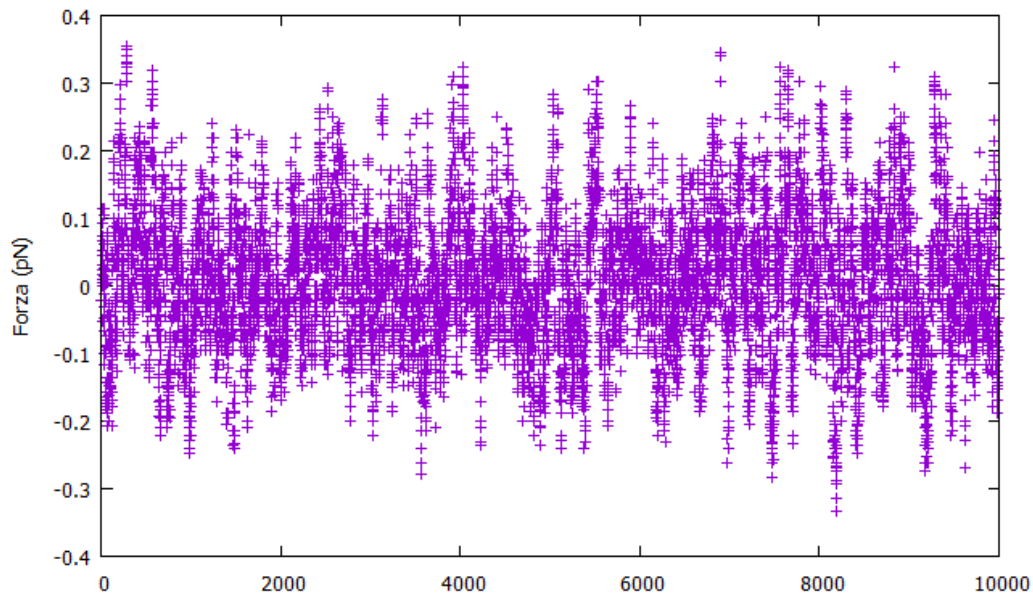


Figura 4.7: Serie temporale della forza: sono stati graficati i primi 10000 dati. Poiché essi sono stati raccolti ad intervalli di tempo regolari, l'asse x corrisponde al numero del dato.

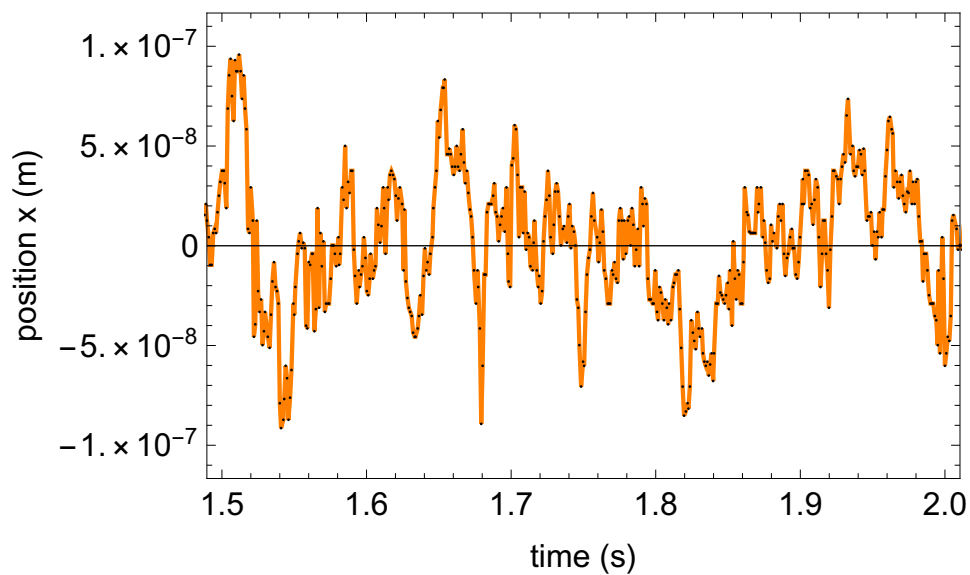


Figura 4.8: Serie temporale della posizione, ottenuta convertendo le forze in posizione tramite la κ calcolata. Si noti l'andamento casuale della posizione, con media nulla.

4.2 Spettri

Per effettuare il confronto con gli spettri si è utilizzata la viscosità dinamica dell'acqua a 20 °C, che vale⁸

$$\mu = 1.0019 \pm 0.0003 \text{ mPa} \cdot \text{s} \quad (4.7)$$

da cui si ricava il coefficiente di attrito viscoso, sapendo che il raggio delle particelle è $r = 1.5 \pm 0.1 \text{ } \mu\text{m}$:

$$\gamma = 6\pi\mu r = (2.8 \pm 0.2) \cdot 10^{-8} \text{ N s/m} \quad (4.8)$$

In realtà si verifica che la viscosità dell'acqua è molto variabile in funzione della temperatura, pertanto, essendo ignote le variazioni locali di temperatura all'interno del bagno termico, si tiene comunque come valore di riferimento quella a 20 °C.

Allora i parametri utili per calcolare lo spettro sono:

$$\beta = \frac{\kappa}{\gamma} = 89 \pm 7 \text{ s}^{-1} \quad (4.9)$$

$$A^2 = \frac{2k_B T}{\gamma} = (2.9 \pm 0.2) \cdot 10^{-13} \text{ N} \quad (4.10)$$

Si riportano quindi i grafici corrispondenti ai valori dei parametri appena calcolati, alle figure 4.9 e 4.10.

Non è invece possibile, coi dati a disposizione, tracciare il grafico degli spettri nel caso generale non sovrasmorzato. Infatti, a tal fine, è necessario conoscere $\Omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ e $\alpha = \frac{\gamma}{m}$, e la massa della particella non è nota.

⁸cfr. [18].

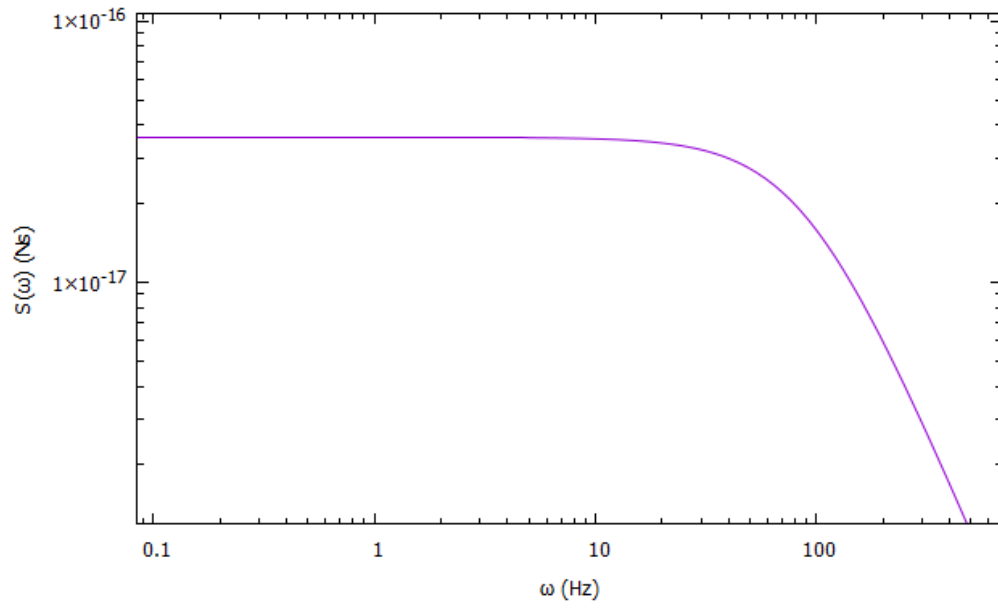


Figura 4.9: Spettro della posizione delle particelle nel tweezer

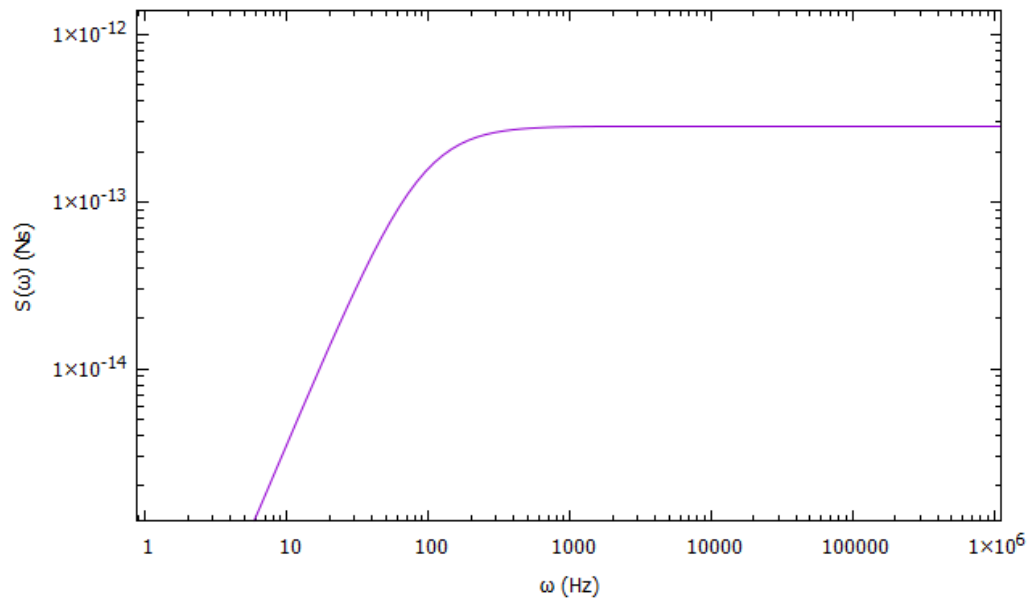


Figura 4.10: Spettro della velocità delle particelle nel tweezer

Appendici

5.1 Moto Browniano in matematica

Nei paragrafi 1.3 e 2.1 il ragionamento fatto per ricavare informazioni dall'equazione differenziale stocastica non è matematicamente rigoroso: in questa appendice si vuole accennare a come si possa approcciarsi a questo tipo di problema in modo non euristico, mostrando come i ragionamenti fatti in precedenza risultino comunque validi. Il settore della matematica che si è sviluppato a partire dall'approccio di Langevin, che ha contribuito a rendere rigorosi i ragionamenti è detto *analisi stocastica*. Risulta evidente come, per approcciarsi a studiare le equazioni differenziali stocastiche (SDE), sia necessario ridefinire i concetti introdotti nell'analisi matematica standard, ovvero la differenziazione e l'integrazione, o quantomeno verificare che essi siano consistenti. Si vedrà che le definizioni standard non sono consistenti nell'ambito dell'analisi stocastica, pertanto andranno ridefinite.

La prima fondamentale definizione, data come intuitiva in tutti i precedenti capitoli, ma che ora è necessario specificare è quella di processo stocastico.

Definizione 5.1 (Processo stocastico). Un processo stocastico è una famiglia di variabili casuali definite nello stesso spazio di probabilità e parametrizzato da un parametro t (che si può fisicamente identificare col tempo):

$$X(\omega, t) : \Omega \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R} \quad (5.1)$$

Occorre anche definire formalmente lo stesso moto Browniano, poiché finora, come si procede in fisica, lo si è fatto per via intuitiva, mentre in matematica si deve procedere per via assiomatica.

Definizione 5.2 (Moto Browniano). Si dice moto Browniano un processo stocastico reale $B = \{B(t)\}_{t \in [0, +\infty]}$ soddisfacente le seguenti proprietà:

- $B(0) = 0$ quasi certamente⁹;
- $B(t)$ ha incrementi indipendenti, ovvero per ogni scelta di $k \geq 2$ e $0 \leq t_0 < \dots < t_k$ le variabili aleatorie $\{B(t_i) - B(t_{i-1})\}$ sono indipendenti;
- $B(t)$ ha incrementi gaussiani, ovvero per ogni scelta di $t > s \geq 0$ si ha che¹⁰ $\{B(t) - B(s)\} = N(0, t - s)$;
- $B(t)$ ha quasi certamente traiettorie continue, ovvero quasi certamente la funzione $t \rightarrow B(t)$ è continua.

Il primo fatto da dimostrare è il seguente:

Teorema 5.1.1 (Wiener).

Il moto Browniano esiste.

A dispetto della sua formulazione molto semplice, non è assolutamente banale dimostrare l'esistenza del moto Browniano a partire dai postulati che lo costruiscono. La dimostrazione va molto oltre lo scopo di questa trattazione: la si può trovare ad esempio in [20]. Essendo tale teorema stato dimostrato

⁹Il termine "quasi certamente" è usato in analisi stocastica ed è calcolato dal "quasi ovunque" della teoria della misura. Infatti la probabilità è solitamente definita come l'integrale della distribuzione di probabilità. La definizione formale di "quasi certamente [...]" è "esiste $A \subset F$ con $p(A) = 1$ tale che per ogni $\omega \in A$ [...]".

¹⁰ $N(\mu, \sigma^2)$ indica la distribuzione normale con media μ e varianza σ^2 .

per la prima volta da Wiener nel 1923, il moto Browniano in matematica è anche indicato col nome di *processo di Wiener* e viene anche indicato col simbolo $W(t)$. Utilizzando gli assiomi della definizione si possono dimostrare una serie di altre proprietà, alcune ovvie in fisica (la cui dimostrazione si può sempre trovare in [20]):

Teorema 5.1.2 (Proprietà del moto Browniano).

Se $B(t)$ è un moto Browniano allora anche i seguenti processi stocastici sono moti Browniani:

- $X(t) = -B(t)$ (riflessione spaziale);
- $X(t) = B(t_0 + t) - B(t_0)$ per ogni t_0 (traslazione temporale);
- $X(t) = B(t_0 - t) - B(t_0)$ per ogni t_0 e per ogni $0 < t < t_0$ (riflessione temporale);
- $X(t) = \frac{1}{\sqrt{c}}B(ct)$ per ogni $c > 0$ (scaling diffusivo);
- $X(t) = tB\left(\frac{1}{t}\right)$ per $t > 0$ e $X(0) = 0$ (inversione temporale).

Dagli assiomi del moto Browniano si possono inoltre ricavare informazioni sulle sue traiettorie (per la cui dimostrazione si veda sempre [20]), in particolare sulla loro irregolarità.

Teorema 5.1.3 (Proprietà delle traiettorie del moto Browniano).

Se $B(t)$ è un moto Browniano allora:

- le sue traiettorie hanno quasi certamente variazione infinita¹¹,
- quasi certamente $B(t)$ non è derivabile in $t = t_0 \geq 0$.

Si può anche calcolare facilmente la funzione di correlazione del moto Browniano.

Teorema 5.1.4 (Funzione di correlazione del moto Browniano).

La funzione di correlazione del moto Browniano $B(t)$ è:

$$\langle B(t)B(s) \rangle = \min(t, s) \quad (5.2)$$

Dimostrazione. Si supponga che $s < t$. Allora per il terzo postulato del moto Browniano l'incremento $B(t) - B(s)$ è una distribuzione normale di media 0 e varianza $t - s$. Inoltre per il secondo postulato è indipendente da $B(s) - B(0)$; ma per il primo postulato $B(0) = 0$, inoltre sempre per il terzo postulato $B(s) - B(0)$ ha varianza s . Dunque:

$$\begin{aligned} \langle B(t)B(s) \rangle &= \langle (B(t) - B(s))B(s) + B^2(s) \rangle = \langle (B(t) - B(s))B(s) \rangle + \langle B^2(s) \rangle = \\ &= \langle (B(t) - B(s)) \rangle \langle B(s) \rangle + \langle B^2(s) \rangle = 0 + s = s \end{aligned} \quad (5.3)$$

Ripetendo il ragionamento per $t < s$ si trova la tesi. $\square$

Facendo uso di questo ultimo risultato si può definire formalmente il rumore bianco introdotto in 1.86: al teorema precedente si è visto come le traiettorie siano di fatto non derivabili ovunque, pertanto non ha senso derivare il processo $B(t)$. Si può tuttavia interpretare questa derivata come una distribuzione singolare, nel senso che verrà ora illustrato. Definito il rapporto incrementale (dove $\Delta t > 0$)

$$\xi_{\Delta t}(t) := \frac{B(t + \Delta t) - B(t)}{\Delta t} \quad (5.4)$$

che ovviamente non esiste per $\Delta t \rightarrow 0$, si può calcolare il valor medio:

$$\langle \xi_{\Delta t}(t) \rangle = \langle \frac{B(t + \Delta t) - B(t)}{\Delta t} \rangle = \frac{\langle B(t + \Delta t) \rangle - \langle B(t) \rangle}{\Delta t} = 0 \quad (5.5)$$

Pertanto, definendo formalmente $\dot{B}(t) := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \xi_{\Delta t}(t) = \xi(t)$, si trova:

$$\langle \xi(t) \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle \xi_{\Delta t}(t) \rangle = 0 \quad (5.6)$$

¹¹Ovvero la quantità $V_{[a,b]}(B(t)) = \sup_{n \in \mathbb{N}, a=t_0 < t_1 < \dots < t_n=b} \sum_{i=1}^n |B(t_i) - B(t_{i-1})|$ non è limitata.

Si può poi calcolare la funzione di correlazione di $\xi_{\Delta t}(t)$ usando la 5.2:

$$\langle \xi_{\Delta t}(t)\xi_{\Delta t}(s) \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \left(1 - \frac{|t-s|}{\Delta t}\right) & |t-s| \leq \Delta t \\ 0 & |t-s| > \Delta t \end{cases} \quad (5.7)$$

Ricordando ora che si può definire la distribuzione delta di Dirac come limite per $n \rightarrow 0$ di una successione di funzioni tali che

$$\lim_{n \rightarrow 0} f(x, n) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ +\infty & x = 0 \end{cases} \quad (5.8)$$

$$\int_{\mathbb{R}} f(x, n) = 1$$

e si vede che la successione di funzioni 5.7, con variabile indipendente $x = t - s$ e parametro $n = \Delta t$, soddisfa queste proprietà. Pertanto il limite del membro di destra per $\Delta t \rightarrow 0$ è la distribuzione delta di Dirac, quindi

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle \xi_{\Delta t}(t)\xi_{\Delta t}(s) \rangle = \delta(t-s) \quad (5.9)$$

ritrovando la proprietà introdotta alla 1.86.

Il problema fondamentale dell'analisi stocastica può essere illustrato come segue. Si consideri una SDE lineare della forma:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) + g(x, t)w(t) \quad (5.10)$$

dove $f(x, t)$ e $g(x, t)$ sono funzioni standard $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, mentre $w(t)$ è un processo stocastico. Provando a risolvere ancora una volta formalmente questa equazione, ammesso che sia definita la differenziazione in ambito stocastico, la soluzione è:

$$x(t) - x_0 = \int_{t_0}^t df(x, t) + \int_{t_0}^t dtg(x, t)w(t) \quad (5.11)$$

Ora, il primo integrale è un integrale dell'analisi standard (può essere definito alla Riemann, alla Darboux, alla Lebesgue, alla Stieltjes...), dunque ben definito, il secondo è problematico, infatti non può essere definito in nessuna delle modalità note. Definendo l'integrale alla Stieltjes, si ha:

$$\int_{t_0}^t dtg(x, t)w(t) = \int_{t_0}^t dB(t)g(x, t) = \lim_{\delta(P) \rightarrow \infty} \sum_{x_i \in P} g(x, c_i)(B(t_{i+1}) - B(t_i)) \quad (5.12)$$

con P partizione $t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$, $t_k^* \in [t_{k+1}, t_k]$, $c_i \in [x_{i+1}, x_i]$ e $\delta(P) = \max_{x_i \in P} |x_{i+1} - x_i|$. In pratica si effettua il cambio di variabile $w(t)dt = dB(t)$; nel caso che $w(t)$ sia proprio il rumore bianco si ha che per quanto visto in precedenza $B(t)$ è il moto Browniano. Poiché $w(t)$ è un processo stocastico generico, non è detto che l'integrale converga; se infatti $w(t)$ è il rumore bianco definito in 1.3, che è proprio il caso interessante, si ha che $w(t_k^*)$ non è limitato e assume valori arbitrariamente piccoli e grandi in ogni intervallo finito, pertanto non converge. Infatti, un teorema di matematica (v. [22], teorema I.56) asserisce che 5.12 converge se $w(t)$ è una funzione continua almeno a destra solo se è a variazione finita, ma per quanto riportato in precedenza non è così.

La questione si risolve definendo in modo ancora diverso l'integrale, con una definizione dovuta ad Itô:

$$\int_{t_0}^t dtg(x, t)w(t) = \int_{t_0}^t dB(t)g(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_k g(x(t_k), t_k)(w(t_{k+1}) - w(t_k)) \quad (5.13)$$

A dispetto della semplicità della modifica apportata alla definizione dell'integrale alle Riemann¹², questa definizione porta ad una diversa definizione di differenziale rispetto all'analisi standard. Infatti,

¹²Si ricordi la definizione di integrale di Riemann:

$$\int_{t_0}^t dtg(x, t)w(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_k g(x(t_k^*), t_k^*)w(t_k^*)(t_{k+1} - t_k) \quad (5.14)$$

con $t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$ e $t_k^* \in [t_{k+1}, t_k]$.

se si decide di integrare il moto Browniano stesso ($g(x(t), t) = B(t)$) si trova :

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dB(t)B(x, t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_k B(t_k)(B(t_{k+1}) - B(t_k)) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_k \left(-\frac{1}{2}(B(t_{k+1}) - B(t_k))^2 + \frac{1}{2}(B^2(t_{k+1}) - B^2(t_k)) \right) = -\frac{1}{2}t + \frac{1}{2}B^2(t) \end{aligned} \quad (5.15)$$

Ma allora:

$$d(B^2(t)) = 2B(t)dB(t) + dt \quad (5.16)$$

e non $d(B^2(t)) = 2B(t)dB(t)$, come nel calcolo standard.

I processi che possono essere scritti come un'integrale rispetto al moto Browniano e un integrale rispetto al tempo sono detti *processi di Itô*:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t \sigma(x(t), t)dB + \int_0^t \mu(x(t), t)ds \quad (5.17)$$

con σ e μ funzioni. Lo stesso Itô ha fornito una formula generale per calcolare i differenziali stocastici nel caso di processi di Itô, che corrisponde alla regola della catena dell'analisi standard:

Teorema 5.1.5 (Formula di Itô).

Si consideri il processo di Itô $x(t)$ e una generica funzione scalare $\phi(x(t), t)$ del processo. Allora il differenziale stocastico di ϕ , ammesso che le derivate parziali in senso standard esistano, è:

$$d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial t}dt + \sum_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}dx_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j}dx_i dx_j \quad (5.18)$$

dove i differenziali misti sono combinati dalle regole:

$$\begin{aligned} dxdt &= 0 \\ dt dB_i &= 0 \\ dB_i dB_j &= \delta_{ij}dt \end{aligned} \quad (5.19)$$

Una dimostrazione di questo risultato e una serie di generalizzazioni si possono trovare in [21].

Le SDE in ambito matematico sono solitamente scritte in forma differenziale, leggermente diversa da quella di Langevin, ricalcata da 5.17:

$$dx(t) = \sigma(x(t), t)dB(t) + \mu(x(t), t)dt \quad (5.20)$$

Assumendo che $\mu(x(t), t) = F(t)x(t)$, si può ricercare una soluzione esplicita. Occorre comunque innanzitutto ben definire il concetto di soluzione, poiché essendo $w(t)$ un processo stocastico, si hanno infinite realizzazioni possibili ed il concetto di esistenza e unicità deve essere diverso da quello dell'analisi standard.

Definizione 5.3 (Soluzione forte di una SDE). Una soluzione dell'equazione 5.20 col dato iniziale $X(0) = X_0$ è detta forte se per un dato moto Browniano $B(t)$ è possibile costruire una soluzione $x(t)$, che è unica per quel dato moto Browniano.

Si consideri una SDE della seguente forma, in cui $\sigma(x(t), t) = g(t)$ e $\mu(x(t), t) = xf(t) + u(t)$:

$$dx(t) = g(t)dB(t) + f(t)xdt + u(t)dt \quad (5.21)$$

Definendo la funzione di transizione $\Psi(x, t)$:

Definizione 5.4 (Funzione di transizione). Data la SDE definita in 5.21, la funzione di transizione $\Psi(\tau, t)$ è l'unica funzione avente le seguenti proprietà:

- $\frac{\partial \Psi(\tau, t)}{\partial \tau} = f(\tau)\Psi(\tau, t);$
- $\frac{\partial \Psi(\tau, t)}{\partial t} = -\Psi(\tau, t)f(t);$

- $\Psi(t, \tau) = \Psi(\tau, s)\Psi(s, t)$;
- $\Psi(t, \tau) = \frac{1}{\Psi(\tau, t)}$;
- $\Psi(t, t) = 1$.

Nel caso in questione si vede che si può scegliere $\Psi(\tau, t) = e^{\int_0^\tau f(x)dx - \int_0^t f(x)dx}$, poiché soddisfa tutte e cinque le proprietà sopra. Moltiplicando la 5.21 per $\Psi(t_0, t)$ e riarrangiando si trova:

$$\Psi(t_0, t)dx - \Psi(t_0, t)f(t)xdt = \Psi(t_0, t)u(t)dt + \Psi(t_0, t)g(t)dB \quad (5.22)$$

Allora la formula di Itô fornisce

$$d[\Psi(t_0, t)x] = -\Psi(t_0, t)f(t)xdt + \Psi(t_0, t)dx \quad (5.23)$$

per cui la SDE si può riscrivere come:

$$d[\Psi(t_0, t)x] = \Psi(t_0, t)u(t)dt + \Psi(t_0, t)g(t)dB \quad (5.24)$$

Integrando alla Itô si trova:

$$\Psi(t_0, t)x(t) - \Psi(t_0, t_0)x(t_0) = \int_{t_0}^t d\tau \Psi(t_0, \tau)u(\tau) + \int_{t_0}^t dB \Psi(t_0, \tau)g(\tau) \quad (5.25)$$

che per la proprietà della $\Psi(t_0, \tau)$ produce la soluzione cercata:

$$x(t) = \Psi(t, t_0)x(t_0) + \int_{t_0}^t d\tau \Psi(t, \tau)u(\tau) + \int_{t_0}^t dB \Psi(t, \tau)g(\tau) \quad (5.26)$$

Il caso oggetto di studio ha SDE che lo descrive, nel caso overdamped (cfr. 3.1):

$$dx = -\beta xdt + AdB \quad (5.27)$$

Dunque la soluzione si ottiene ponendo $g(t) = A$, $f(t) = -\beta$ e $u(t) = 0$:

$$x(t) = \Psi(t, t_0)x(t_0) + \int_{t_0}^t dB \Psi(t, \tau)A \quad (5.28)$$

Usando il fatto che $\Psi(\tau, t) = e^{\int_0^\tau f(x)dx - \int_0^t f(x)dx} = e^{-\beta(\tau-t)}$ si trova:

$$x(t) = e^{-\beta(t-t_0)}x(t_0) + A \int_{t_0}^t dB e^{-\beta(t-\tau)} \quad (5.29)$$

Questa soluzione è equivalente alla 1.76 (dove però la variabile era la velocità e non la posizione, il passaggio è immediato): pertanto i conti svolti in modo euristico in quella sezione trovano conferma svolgendoli in modo matematicamente formale.

Si conclude questa sezione accennando al fatto che esiste un'altra definizione parimenti corretta dell'integrale stocastico, dovuta a Stratonovich:

$$\int_{t_0}^t g(x, t) \circ dw(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{k_n-1} \frac{g(t_i) + g(t_{i+1})}{2} (w(t_{i+1}) - w(t_i)) \quad (5.30)$$

con $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{k_n} = t$. Questa definizione è meno usata di quella di Itô, ma si può dimostrare come essa sia equivalente ad esso (si veda, ad esempio, [23]).

5.2 Processi di Markov

Il processo studiato nella tesi è sostanzialmente (almeno nel limite di sovrasmorzamento) un processo di Ornstein-Uhlenbeck che, come ora verrà spiegato, è un classico esempio di processo di Markov.

Definizione 5.5 (Processo di Markov). Un processo di Markov è un processo stocastico con la proprietà che per ciascun insieme di n istanti di tempo $t_1 < \dots < t_n$ si ha che, indicata con $p(A|B)$ la probabilità che accada l'evento A condizionata a B :

$$p(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = p(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (5.31)$$

In pratica, un processo di Markov, è un processo stocastico che ha memoria solo dell'ultimo tempo considerato. La domanda che sorge spontanea è chiedersi se il moto Browniano, almeno nel limite di sovrasmorzamento, sia un processo markoviano. Essendo il moto Browniano una soluzione della SDE

$$dv = -\alpha v dt + \sqrt{2m\alpha k_B T} dB \quad (5.32)$$

(versione differenziale della 1.86) si può immediatamente affermare che esso sia privo di memoria, ovvero markoviano, poiché il calcolo di $v(t + dt)$ a partire da $v(t)$ non richiede alcuna conoscenza di nessun valore di $v(t')$ con $t' < t$. Questo ragionamento si può immediatamente adattare alla 2.15, concludendo che il processo oggetto di studio sia markoviano¹³.

Il fatto che però questo processo sia privo di memoria dipende sostanzialmente dalle ipotesi fatte per ottenere l'equazione 2.15, ovvero per scrivere le forze agenti sulla particella. Infatti, può accadere che, aggiungendo ipotesi, la dinamica della particella risenta in modo molto più pesante della sua storia. Lo studio del processo descritto come processo non markoviano è interessante ma estremamente complicato dal punto di vista matematico, poiché, come adesso verrà spiegato, quasi tutte le assunzioni fatte per scrivere l'equazione 2.15 vengono meno. La causa più importante di non markovianità del processo è la presenza di regime vorticoso nel fluido in cui la particella fluttua. Infatti, la presenza di vortici fa cadere la proprietà di assenza di memoria del processo, poiché il moto del fluido dipende in modo sostanziale dalla sua storia precedente. In realtà questo è già in parte vero anche in regime laminare, ma nel regime di lavoro della particella in questione questi effetti risultano più che trascurabili. Se il fluido entra invece in un regime vorticoso, può accadere che trascini la particella per via di un'inerzia non trascurabile a lunga memoria: ciò non può essere spiegato nella teoria di Langevin sviluppata in precedenza. Ad esempio, se il fluido dovesse muoversi in una certa direzione, la particella sarebbe trascinata in quella direzione e ovviamente, in media, non sarebbe ferma.

Un modo di trattare questi effetti, è stato ad esempio studiato da Alder e Wainwright (cfr. [24]), che hanno mostrato che la funzione di correlazione della velocità con lo 0 non deve presentare più un decadimento di tipo esponenziale, similmente a 1.80, ma del tipo:

$$C(v(t)) \sim t^{-\frac{d}{2}} \quad (5.33)$$

con d dimensione del sistema. Una semplice spiegazione di questo andamento si ha considerando le particelle di fluido che urtano la particella mesoscopica, generando il moto Browniano: infatti, le particelle mesoscopiche in moto comprimono il fluido davanti e rarefanno il fluido dietro. Ciò causa la formazione di un vortice che circola attorno alla particella, che crea una spinta da dietro in scale temporali lunghe. Il campo di velocità occupa un volume di fluido la cui tipica dimensione cresce diffusivamente, ovvero con un andamento del tipo $t^{\frac{1}{2}}$, pertanto il volume crescerà di $t^{\frac{d}{2}}$. La conservazione della quantità di moto nella regione implica che la forza sulla particella mesoscopica decresca come $t^{-\frac{1}{2}}$. Un altro modo di includere questo contributo è l'uso della cosiddetta *equazione di Stokes-Boussinesq*, il cui approfondimento viene rimandato a testi specifici (per un'introduzione si può vedere [26]).

Si vede quindi come, in generale, la markovianità di un processo sia un'ipotesi non del tutto generale, ma comunque sufficiente a dare una buona capacità predittiva al modello.

¹³Questo è un ragionamento euristico: in realtà questa affermazione si può dimostrare formalmente a partire dai postulati del moto Browniano, si veda [20].

5.3 Da Langevin a Fokker-Planck

In questa sezione si vuole mostrare¹⁴ un ragionamento formale in grado di ricavare le formule 3.11, lasciate in sospeso nella sezione 3.1, ovvero si vuole mostrare come il moto di una particella descritta da un'equazione di Langevin possa essere descritto anche da una equazione di Fokker-Planck del tipo 3.19 e determinare la relazione fra le due. Il punto di partenza è lo sviluppo di Kramers-Moyal per la derivata della probabilità:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x', t | x_0, t_0) = \sum_m (-1)^m \frac{\partial^m}{\partial (x')^m} \left(D^{(m)}(x', t) p(x', t | x_0, t_0) \right) \quad (5.34)$$

Questo sviluppo può essere ricavato a partire dall'equazione di Chapman-Kolmogorov, imponendo che i processi markoviani generino cammini continui. La dimostrazione formale di questo fatto è laboriosa e va oltre lo scopo di questa tesi¹⁵. I coefficienti dello sviluppo sono dati da:

$$D^{(m)}(x', t) = \frac{1}{m!} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int dx (x - x')^m p(x, t + \Delta t | x', t) \quad (5.35)$$

Esiste però un teorema, dovuto a Pawula (v. [27]), che asserisce che per una probabilità di transizione $p(x, t | x_0, t_0) > 0$, si può fermare al primo o al secondo ordine, oppure deve contenere infiniti termini. Se si ferma entro il secondo ordine si trova l'equazione di Fokker-Planck e i primi due coefficienti di Kramers-Moyal sono proprio il coefficienti di drift e di diffusione.

Si consideri ora una particella la cui dinamica è descritta dall'equazione differenziale stocastica di Langevin:

$$\dot{x}(t) = F_d(t, x(t)) + F_s(t) \quad (5.36)$$

con $F_d(x(t), t)$ forze deterministiche e $F_s(t)$ contributo delle forze stocastiche. Si stabilirà già da subito che $\langle F_s(t) F_d(t) \rangle = \Gamma \delta(t - s)$ con Γ coefficiente da determinare in base al problema. Considerando la versione alle differenze finite dell'equazione si può scrivere:

$$x(t + \Delta t) - x(t) = F_d(t, x(t)) \Delta t + \Delta B(t) \Delta t \quad (5.37)$$

dove $\Delta B = B(t + \Delta t) - B(t)$ sono gli incrementi di un processo di Wiener (si veda l'appendice 5.1); per le sue proprietà si ha che $\mathbb{E}[\Delta B(t)] = 0$, $\mathbb{E}[(\Delta B(t))^2] = \Delta t$, da cui:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[F_d(t, x(t)) \Delta t | x(t) = x'] &= \mathbb{E}[F_d(t, x(t)) | x(t) = x'] \Delta t = F_d(t, x') \Delta t \\ \mathbb{E}[\Gamma^{\frac{1}{2}} \Delta B | x(t) = x'] &= \Gamma^{\frac{1}{2}} \mathbb{E}[\Delta B(t) | x(t) = x'] = \Gamma^{\frac{1}{2}} \mathbb{E}[\Delta B(t)] = 0 \\ \mathbb{E}[\Gamma (\Delta B)^2 | x(t) = x'] &= \Gamma \mathbb{E}[(\Delta B(t))^2 | x(t) = x'] = \Gamma \mathbb{E}[(\Delta B(t))^2] = \Gamma \Delta t \end{aligned} \quad (5.38)$$

Usando la 5.37, la linearità del valor medio e queste relazioni si trova subito che:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\Delta x(t) | x(t) = x'] &= \mathbb{E}[x(t + \Delta t) - x(t) | x(t) = x'] = \mathbb{E}[F_d(t, x(t)) \Delta t + \Delta B(t) \Delta t | x(t) = x'] = \\ &= F_d(t, x') \Delta t \end{aligned} \quad (5.39)$$

Allo stesso modo si trova che:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\Delta x^2(t) | x(t) = x'] &= \mathbb{E}[F_d^2(t, x(t)) (\Delta t)^2 + 2F_d(t, x(t)) \Gamma^{\frac{1}{2}} \Delta t \Delta B(t) + \Gamma (\Delta B(t))^2] = \\ &= \Gamma \Delta t + O((\Delta t)^2) \end{aligned} \quad (5.40)$$

Pertanto i due coefficienti di Kramers-Moyal valgono:

$$\begin{cases} D^{(1)}(x', t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dx (x - x') p(x, t + \Delta t | x', t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{E}[F_d(t, x(t)) \Delta t | x(t) = x'] = \\ = F(t, x') \\ D^{(2)}(x', t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{2} \int dx (x - x')^2 p(x, t + \Delta t | x', t) = \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{E}[(\Delta x(t))^2 | x(t) = x'] = \\ = \frac{\Gamma}{2} \end{cases} \quad (5.41)$$

che sono i valori usati nelle 3.11.

¹⁴Usando sempre l'approccio di [14].

¹⁵Si veda sempre [14].

Bibliografia

- [1] Brown, R., *A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*, Philosophical Magazine, 4:161–173, 1828
- [2] Einstein, A., *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*, Annalen der Physik, 17:549–560, 1905
- [3] Langevin, P., *Comptes Rendus*, **146**, 530
- [4] Itô, K., *Stochastic integral*, Proc. Imp. Acad. Tokyo, 20(8), 519-524, 1944
- [5] Zaccaria, C., *Optical mini-Tweezers: un esperimento di singola molecola*, Tesi di Laurea Magistrale, 2018
- [6] Coles, P. Lucchin, F., *Cosmology-The origin and evolution of the cosmic structure*, Second Edition, John Wiley and Sons, Ltd, 2002
- [7] Mazzoldi, P., Nigro, M., Voci C., *Fisica, Volume II*, Seconda Edizione, EdiSES, 1998
- [8] Jones, P. H., Malagò, O. M., Volpe, G., *Optical tweezers: principles and applications*, Cambridge University Press, 2015
- [9] Ashkin, A., *Acceleration and trapping of particles by radiation pressure*, Phys. Rev. Lett. **24**, 156-9, 1970
- [10] Kundu, P. K., Cohen, I. M., *Fluid Mechanics*, Academic Press, 2002
- [11] Van Kampen, N. G., *Stochastic processes in physics and chemistry*, North-Holland Personal Library, 1992
- [12] Cardin, F., Favretti M., *Modelli Fisico Matematici*, Cleup, 2016
- [13] Nyquist, N., *Thermal agitation of electricity in conductors*, Phys. Rev., **32**, 110, 1928
- [14] Risken, H. *The Fokker-Planck equation*, Springer-Verlag, 1984
- [15] Touchette H., Prellberg, T., Just, W., *Exact power spectra of Brownian motion with solid friction*, arXiv:1205.4115v2, 2012
- [16] Olver, F. W., Lozier, D., W., Boisvert, R., F., C., W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge University Press, 2010
- [17] Salsa, S., *Equazioni a derivate parziali, Metodi, modelli e applicazioni*, 2a edizione, Springer, 2010
- [18] Kampmeyer, P., M., *The Temperature Dependence of Viscosity for Water and Mercury*, Journal of Applied Physics 23, 99, 1952
- [19] Huguet i Casades, J., M., *Statistical and thermodynamic properties of DNA unzipping experiments with optical tweezers*, Tesi di dottorato, 2010
- [20] Lawler, G. F., *Stochastic Calculus: An Introduction with Applications*, 2014

- [21] Karatzas, I., Shreve, *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, Second edition, Springer, 1991
- [22] Protter, P., E., *Stochastic integration and differential equations*, Springer, 2004
- [23] Ikeda, N., Watanabe, S., *Stochastic differential equations and diffusion process*, North-Holland Mathematical Library, 1981
- [24] Alder, B. J., Wainwright, T. E., *Velocity Autocorrelations for Hard Spheres*, Phys. Rev. Lett., **18**, 988, 1967
- [25] Clercx, H. J. H., Schram, P., P., J., M., *Brownian particles in a shear and harmonic potentials: a study of long time tails*, Phys. Rev. A 46, 1942,1992
- [26] Anh, V., Leonenko, N., *Fractional Stokes-Boussineq-Langevin equation and Mittag-Leffler correlation decay*, Theory of Probability and Mathematical Statistics file, 2017
- [27] Pawula, R., Phys. Rev. **162**, pag. 186, 1967.