



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Dinamica stocastica di atomi raffreddati da laser

Relatore

Prof. Marco Baiesi

Laureanda

Gloria Isotton

Anno Accademico 2021/2022

Abstract

In questo lavoro di tesi si vuole descrivere la dinamica stocastica di atomi confinati armonicamente e raffreddati da laser con il meccanismo di Sisifo. Questi atomi, soggetti all'azione di un campo di laser, possono essere considerati come in contatto con un "bagno ottico", che ha la caratteristica di essere non-termico. Di conseguenza, per sistemi caratterizzati da un particolare termine dissipativo come quello dovuto al raffreddamento Sisifo, la dinamica stocastica sarà governata dalle leggi della meccanica statistica di non equilibrio e verrà modellizzata tramite equazioni di Langevin. Per descrivere il comportamento di un atomo raffreddato da laser nelle equazioni di Langevin occorre considerare un termine di attrito, che ha la caratteristica peculiare di non essere lineare nella posizione, e un termine di forza casuale stocastica, dovuti alle interazioni dell'atomo con i fotoni del campo luminoso. Questo porterà a scrivere una relazione viriale generalizzata, di non equilibrio, e la corrispondente nuova legge di equipartizione per la dinamica degli atomi nel caso di attrito Sisifo. Integrando numericamente le Equazioni di Langevin con termine di attrito Sisifo non lineare e con confinamento armonico, si può simulare l'andamento di posizioni e velocità delle particelle al variare del tempo. In conclusione, a partire da queste simulazioni è possibile verificare la violazione del teorema classico di equipartizione per un sistema di non-equilibrio.

Organizzazione dell'elaborato

Nella prima parte si introduce l'effetto Sisifo in approccio semiclassico, riportando anche la forma della forza d'attrito esercitata dal campo di laser sull'atomo e sottolineando la sua non linearità rispetto alla coordinata della posizione. Si passa poi alla modellizzazione matematica del moto Browniano, il più semplice esempio di processo stocastico, facendo un confronto tra l'approccio di Einstein, Langevin e di Fokker-Planck per la descrizione della dinamica stocastica di atomi. Successivamente si mostra che, attraverso l'approccio di Langevin, è possibile includere il contributo delle interazioni (diffusione, assorbimento ed emissione) con i fotoni del campo luminoso in un unico termine di rumore bianco, di cui si indagheranno le proprietà. Nella terza sezione si ricaverà il teorema del viriale in forma generalizzata per descrivere la dinamica di atomi raffreddati col metodo di Sisifo e confinati da un potenziale armonico. Nell'ultima parte della tesi si supportano gli argomenti teorici presentati con delle simulazioni numeriche: da queste si ottengono grafici che mostrano l'andamento delle traiettorie e delle velocità degli atomi al variare del tempo.

1.1 Introduzione al raffreddamento Sisifo

Il raffreddamento Sisifo è un'avanzata tecnica di raffreddamento in cui i livelli energetici di un atomo vengono perturbati in modo periodico così che, a partire dal sottolivello energetico fondamentale esso risalga fino al massimo di energia potenziale e da qui, tramite pompaggio ottico, ridiscenda allo stato ad energia più bassa perdendo parte della sua energia iniziale. Più in particolare, l'energia cinetica dell'atomo diminuisce quando esso assorbe l'energia del fascio laser nella parte superiore della valle, viene eccitato ad uno stato energetico più alto e subito dopo emette spontaneamente un fotone di frequenza maggiore per ritornare allo stato fondamentale.

Il raffreddamento Sisifo ha permesso di superare i limiti mostrati dai primi metodi di raffreddamento proposti - in particolare il raffreddamento Doppler - e di raggiungere temperature ancora più basse.

Il raffreddamento Doppler ha infatti un limite di temperatura minima raggiungibile, che è detta temperatura Doppler: infatti, a partire dalla relazione tra raffreddamento laser e riscaldamento a diffusione dovuto all'emissione casuale di fotoni, si dimostra che per atomi a due livelli la temperatura più bassa raggiungibile con il Doppler cooling è data da $k_B T_D = \hbar \frac{\Gamma}{2}$, dove Γ è il tasso di decadimento spontaneo ([1]). Ad esempio il limite di temperatura teorico per atomi di sodio raffreddati attraverso questa tecnica ad una frequenza di transizione di 589 nm e $\Gamma/2\pi = 10 \text{ MHz}$ è di $240 \mu\text{K}$ e corrisponde ad una velocità $v_z = 30 \text{ cm/s}$.

Tuttavia, nell'esperimento del 1988, Paul Lett, William Phillips et al., osservarono con stupore degli atomi di sodio raffreddati con la tecnica Doppler a temperature minori di $240 \mu\text{K}$, quindi al di sotto del limite Doppler ([2]). L'anno successivo il fisico francese Claude Cohen-Tannoudji (Nobel nel 1997) spiegò il superamento della temperatura limite Doppler osservata nell'esperimento del 1988 proprio tramite l'effetto Sisifo.

1.1.1 Trattazione semiclassica del raffreddamento Sisifo

Per semplicità si limiterà la trattazione alle transizioni da J_g a $J_e = J_g + 1$, trascurando tutti gli altri possibili livelli iperfini delle transizioni ottiche ([3]). Si considerino pertanto un atomo con due livelli, uno inferiore con momento angolare $J_g = 1/2$ e l'altro superiore con momento angolare $J_e = 3/2$, e una coppia di fasci laser contro-propaganti con polarizzazioni lineari ortogonali ed opposte fra loro. Questa configurazione è chiamata $\text{lin} \perp \text{lin}$. La combinazione dei due fasci dà luogo ad un gradiente di polarizzazione che cambia nello spazio come mostrato in figura (1.1).

I livelli atomici in presenza del campo elettrico si separano in sottolivelli Zeeman, in particolare ci sono due sottolivelli in g (ground state) $g_{1/2}$, $g_{-1/2}$ e quattro in e (excited state), $e_{3/2}$, $e_{1/2}$, $e_{-1/2}$, $e_{-3/2}$ (figura 1.2) modulati dalla polarizzazione del fascio incidente.

I coefficienti di Clebsch-Gordan¹ delle varie transizioni possibili tra g_m e $e_{m'}$ non sono uguali; per esempio i coefficienti relativi alla transizione $g_{1/2} \leftrightarrow e_{-3/2}$ sono 3 volte più grandi rispetto a quelli relativi alla transizione $g_{1/2} \leftrightarrow e_{-1/2}$. Così per la polarizzazione $\sigma-$ lo spostamento dei livelli energetici è tre volte più grande per lo stato $g_{-1/2}$, rispetto allo stato $g_{1/2}$. La situazione si inverte nel caso della polarizzazione $\sigma+$. La dipendenza da z dello spostamento in energia dei livelli atomici è mostrata in figura 1.1.

Consideriamo ora un atomo allo stato fondamentale, con J_g e m_J fissati. Esso si muove lungo delle colline e valli di potenziale accelerando e rallentando mentre energia cinetica e potenziale si interscambiano tra di loro, ma la sua energia totale non cambia finchè esso rimane nello stesso stato (ovvero negli stessi numeri quantici).

Il meccanismo che permette all'atomo di perdere la sua energia è quello dell'assorbimento e dell'emissione spontanea (figura 1.3). Dato che le transizioni per assorbimento dal livello più alto dello stato fondamentale sono più probabili rispetto alle transizioni di assorbimento degli altri livelli, in questa posizione l'atomo assorbe un fotone e passa dallo stato fondamentale a quello eccitato per poi decadere spontaneamente nel livello più basso dello stato fondamentale. Poi, per risalire al livello più alto l'atomo trasforma la sua energia cinetica in potenziale che viene poi dissipata attraverso il decadimento spontaneo successivo. In questo modo l'atomo finisce per muoversi più lentamente, in fondo alla valle.

¹Il quadrato di questi coefficienti fornisce le probabilità di transizione delle transizioni corrispondenti.

Ciò spiega anche il nome dato a questa tecnica di raffreddamento, riferito al mito greco di Sisifo, condannato a far rotolare ripetutamente un masso su per un monte solo per farlo rotolare giù di nuovo, una volta raggiunta la vetta.

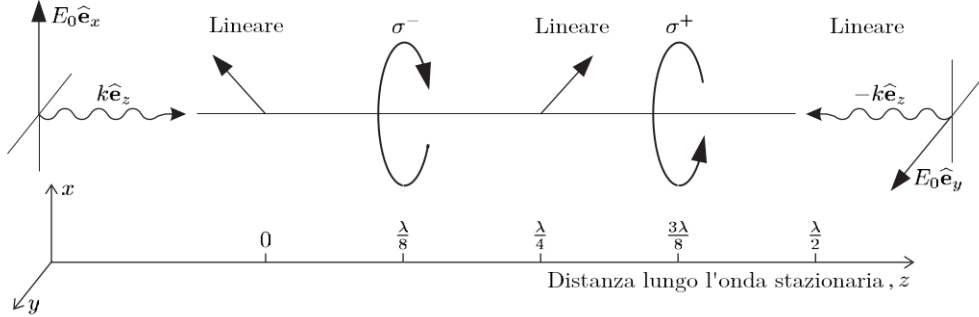


Figura 1.1: Due fasci laser contropropaganti in configurazione $lin \perp lin$, con polarizzazione lungo \hat{e}_x ed \hat{e}_y danno luogo a polarizzazioni circolari, lineari ed ellittiche. Per $z = 0$ si ha una polarizzazione lineare lungo $(e_x + e_y)/\sqrt{2}$, per $z = \lambda/8$ si ha una polarizzazione circolare σ^- , per $z = \lambda/4$ si ha una polarizzazione lineare lungo $(e_x - e_y)/\sqrt{2}$, per $z = 3\lambda/8$ si ha una polarizzazione circolare σ^+ ([3]).

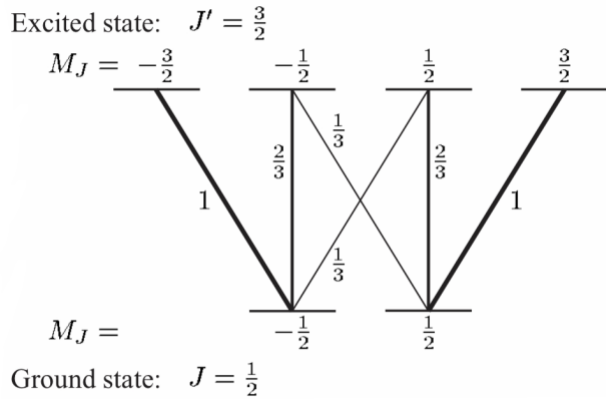


Figura 1.2: Transizione elettronica fra due livelli con momento angolare $J = 1/2$ e $J' = 3/2$. Le transizioni più intense, sono rappresentate da linee più spesse. Accanto ad ogni linea è presente la probabilità di transizione.

1.1.2 Un esempio: polarizzazione σ^+

Si consideri ora un atomo fermo lungo l'asse z in un punto in cui si abbia un'onda con una polarizzazione incidente σ^+ che corrisponde ad una transizione ottica fra stati con $\Delta m_J = +1$.

L'assorbimento della luce con polarizzazione σ^+ eccita un atomo dallo stato $g_{-1/2}$ allo stato $e_{1/2}$. Un atomo in questo stato eccitato può decadere in uno degli stati con M_J inferiore; se ritorna a $g_{-1/2}$ allora il processo ricomincia, ma può accadere che esso decada in uno stato $g_{1/2}$ dal quale non può più tornare (perché in σ^+ il laser eccita il passaggio da uno stato con $m_J = 1/2$ a uno con $m_J = 3/2$ e lo stato eccitato di questa transizione decade solo a $m_J = +1/2$). Ciò si traduce in un trasferimento unidirezionale di atomi dal livello energetico $g_{-1/2}$ a $e_{1/2}$. Il processo appena descritto, in cui l'assorbimento della luce trasferisce la popolazione di atomi considerati in un dato stato, è noto come pompaggio ottico.

Nel raffreddamento Sisifo, il pompaggio ottico per un atomo in polarizzazione σ^+ preleva l'atomo dalla cima della collina, in uno stato con $m_J = -1/2$ e lo trasferisce a valle in uno stato con $m_J = 1/2$. L'atomo continua il suo percorso nello stato $m_J = 1/2$ fino a quando non viene pompato otticamente di nuovo a $m_J = -1/2$, questa volta con una polarizzazione di tipo opposto, σ^- .

In ogni trasferimento l'atomo perde un'energia circa pari all'altezza delle colline $\sim U_0$ (relativamente al fondo delle valli).

1.1.3 Considerazioni energetiche

Dopo aver presentato un quadro fisico semplificato per spiegare il raffreddamento col il metodo di Sisifo, presenterà ora qualche breve considerazione riguardante la perdita media di energia degli atomi per raffreddamento laser, che produce la forza di attrito effettiva $F_f(p)$ ([1]).

Quando l'atomo risale la collina di potenziale il suo impulso passa da p a $p + \delta p$. In questo processo la conservazione dell'energia impone che $p^2/(2M) - U_0 = (p + \delta p)^2/(2M)$. Per p grande, linearizzando si ottiene $\delta p \simeq -U_0 M/p$, dove il segno meno sta a significare che l'atomo, in media, rallenta.

Questo processo si ripete con una certa frequenza $\tilde{\Gamma}$ portando ad una forza d'attrito $F_f \simeq \tilde{\Gamma} \delta p \simeq -\tilde{\Gamma} U_0 M/p$. Un calcolo dettagliato ([1]) dà $F_f \simeq -\Gamma s_0 U_0 M/p$ dove Γs_0 è il prodotto dell'inverso della vita media dello stato eccitato e della saturazione s_0 che è una misura dell'occupazione dello stato eccitato.

In generale si dimostra che il termine di attrito dovuto al raffreddamento Sisifo nella configurazione $\text{lin} \perp \text{lin}$ in approssimazione semiclassica è dato da ([4]):

$$F_f(p) = \frac{-\gamma p}{1 + (p/p_c)^2}, \quad (1.1)$$

dove p_c è la quantità di moto dell'atomo associata alla velocità critica o di cattura v_c (tale che $kv_c = \frac{1}{2}\tau_p$), mentre $\tau_p = \frac{1}{\Gamma'}$ è il tempo di rilassamento definito come l'inverso del tasso di scattering medio dei fotoni incidenti (Γ' può anche essere considerata la larghezza dello stato fondamentale). In sostanza τ_p permette di valutare il tempo impiegato da un atomo a spostarsi di una quantità λ tra le valli e le buche di potenziale del sottolivello energetico in cui si trova. Il range di cattura del raffreddamento Sisifo è l'intervallo di velocità su cui la forza è approssimativamente lineare. Per concludere, la forza d'attrito è massima in questa configurazione ($\text{lin} \perp \text{lin}$) quando $v = v_c$, cioè quando la distanza coperta durante un tempo di pompaggio è dell'ordine del periodo spaziale degli shift dei livelli energetici.

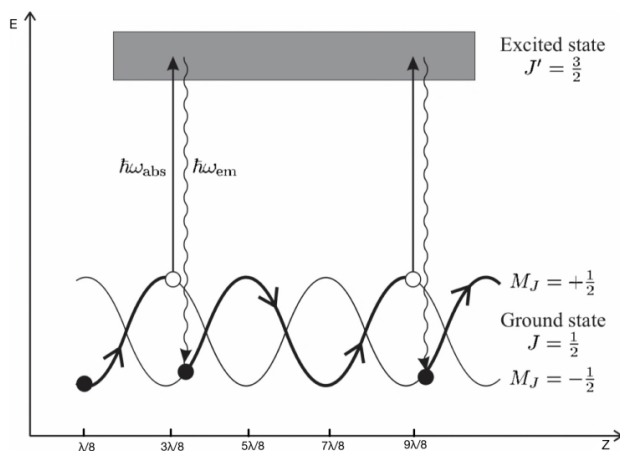


Figura 1.3: Due laser contropropaganti, polarizzati ortogonalmente generano una modulazione spaziale periodica della polarizzazione. I livelli energetici dell'atomo vengono periodicamente perturbati dalla radiazione. Gli atomi si eccitano andando a occupare una banda più alta in energia e poi ricadono in uno stato di bassa energia (cioè dallo stato "blu" nel punto più alto, allo stato "rosso" immediatamente inferiore o viceversa) e in questo modo rallentano.

2.1 Moto Browniano

Si consideri un sistema composto da atomi raffreddati a laser e confinati armonicamente. Come mostrato nella sezione precedente, esso sarà caratterizzato da un termine dissipativo non lineare e dipendente da p dovuto al raffreddamento Sisifo. In più ci sono degli eventi di rinculo casuali degli atomi dovuti all'emissione spontanea di fotoni, modellati come un rumore bianco gaussiano. La dinamica stocastica degli atomi sarà di non equilibrio e verrà modellizzata tramite equazioni di Langevin simili a quelle

per una particella Browniana circondata dal fluido ma con un termine di attrito non lineare in p . In questa sezione si sviluppa dunque la trattazione matematica del moto Browniano. Questo fenomeno prende il nome dal botanico scozzese Robert Brown, che nel 1827 descrisse il movimento frenetico dei granelli di polline in sospensione nell'acqua. La spiegazione immediata fu il fatto che il polline fosse materia vivente ([5]). Lo stesso Brown 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. La prima teoria fisica soddisfacente del moto Browniano fu sviluppata all'inizio del ventesimo secolo indipendentemente da Albert Einstein e dal polacco Marian Smoluchowski. Nel 1905, nel suo *annus mirabilis* ([6]), Einstein fornì una spiegazione fisica del moto casuale, attribuendone la causa agli urti dei mesoscopici granuli di polline con le (molto più piccole) molecole d'acqua, a loro volta mosse dall'agitazione termica. Egli riuscì inoltre a dare una descrizione quantitativa del fenomeno, scrivendo un'equazione di diffusione in grado di predire la deriva di queste particelle in moto costante, che poteva essere sperimentalmente verificata.

A partire dal lavoro di Einstein si innestò subito dopo quello di Langevin ([7]), che con un diverso approccio riuscì a spiegare ugualmente il fenomeno. Nell'ultimo secolo il suo contributo, insieme a quello di M. Smoluchowski, è stato all'origine dell'enorme espansione dello studio matematico dei processi stocastici (ovvero una famiglia di variabili aleatorie parametrizzate da un solo parametro, che fisicamente rappresenta il tempo) e delle equazioni differenziali stocastiche. Queste ultime estendono gli strumenti matematici inizialmente sviluppati per il moto Browniano alla rappresentazione di una vasta classe di fenomeni, che interessano molti ambiti anche al di là di quello fisico (chimica, teoria delle telecomunicazioni, finanza).

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 principalmente frutto degli studi pionieristici di due matematici, Itô e Stratonovich.

2.2 Modellizzazione matematica del moto Browniano

2.2.1 L'approccio di Einstein

La soluzione di Einstein del moto Browniano si basa su due punti principali. Il primo afferma che in una soluzione diluita il moto delle particelle mesoscopiche è dovuto soprattutto alle frequenti collisioni con le molecole del fluido circostante. In altri termini l'ensemble di particelle mesoscopiche non sono interagenti. Il secondo punto precisa che il moto delle molecole del fluido è così complicato che il loro effetto sul moto delle particelle mesoscopiche non può essere descritto in termini di equazioni classiche, ma può solo essere trattato in senso probabilistico, ovvero considerando gli effetti dei collisioni ripetute e statisticamente indipendenti. Limitandosi per semplicità al moto unidimensionale lungo x e indicando con $\rho(x, t)$ la funzione densità di probabilità di avere la particella alla posizione x all'istante t , essa evolve secondo l'equazione di diffusione:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} . \quad (2.1)$$

La soluzione di questa equazione di diffusione è una distribuzione Gaussiana con varianza σ^2 che dipende dal tempo t come $\sigma^2(t) = 2Dt$. Inoltre $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \simeq \sqrt{t}$ dato che la media della distanza al quadrato è:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} x^2 f(x, t) dx = 2Dt . \quad (2.2)$$

In dimensione generica d si può dimostrare che la generalizzazione del risultato precedente è $2dDt$. Inoltre si può mostrare che il moto lungo una direzione x è tale che per $t \gg 1$: $\langle (x_t - x_0)^2 \rangle \sim 2Dt$.

2.2.2 L'approccio di Langevin al moto Browniano

Nel 1908 il fisico francese Paul Langevin propose una riformulazione matematica del lavoro di Einstein, mediante l'utilizzo di equazioni differenziali stocastiche. Per semplicità si illustra come prima il caso in una dimensione. Considerando una particella mesoscopica di massa m sospesa in un fluido, il moto è governato dall'equazione:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_E + \vec{F}_T , \quad (2.2)$$

dove \vec{F}_E è la somma delle forze esterne agenti sulla paricella, mentre \vec{F}_T è la somma delle forze che ciascuna molecola del fluido esercita sulla particella mesoscopica.

Si sottolinea che una descrizione completa dello stato di moto delle particelle considerate si avrebbe considerando le equazioni di evoluzione per tutte le particelle del fluido. In questo modo la soluzione del problema completo corrisponderebbe a risolvere $N + 1$ equazioni differenziali accoppiate con $N \sim N_A$, numero di Avogadro. Chiaramente questo è un numero di equazioni troppo grande per essere gestito da un sistema di calcolo, pertanto per risolvere il problema si deve fare affidamento a delle semplificazioni fisicamente ragionevoli, che passano proprio per la definizione della forza random di Langevin.

Su questo si basa l'approccio di Langevin al problema, un approccio fenomenologico classico, in cui è descritto l'effetto del fluido circostante sul movimento della particella mesoscopica.

Il moto Browniano come processo di Wiener

Si consideri in primo luogo la forza di Langevin $F(t)$ introdotta nella sezione precedente, che può essere vista come un termine fluttuante che rappresenta i contributi delle continue collisioni delle molecole di fluido con la particella mesoscopica nel sistema di riferimento in cui la particella è a riposo. Questa forza è indipendente dalla velocità della particella ma non dal tempo.

Supponendo di avere N differenti realizzazioni della forza $F(t)$, $\{\vec{F}_1(t), \vec{F}_2(t), \dots, \vec{F}_N(t)\}$ e con le stesse condizioni iniziali, $v(t = 0) = v_0$, per ogni realizzazione il problema di Cauchy corrispondente ammette una soluzione unica e per N realizzazioni di $F(t)$ si possono trovare N soluzioni distinte $\vec{v}_1(t), \vec{v}_2(t), \dots, \vec{v}_N(t)$. Questo insieme di soluzioni può essere utilizzato per eseguire medie d'ensemble. La terminologia appena definita permette di spiegare le ipotesi che si assumono per descrivere questa forza random dell'equazione di Langevin. Dal momento che la componente fluttuante della forza $F(t)$ considera solo gli effetti casuali delle collisioni delle molecole del fluido con la particella a riposo, in uno spazio isotropo e omogeneo, la media di $F(t)$ sulle realizzazioni deve essere zero:

$$\langle \vec{F}_i(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \vec{F}_i(t) = 0 \quad \forall t \quad , \quad N \gg 1 . \quad (2.3)$$

Questa ipotesi assicura che all'equilibrio la velocità media della particella è zero, come deve essere nel caso in cui non siano presenti altre forze esterne.

La funzione di correlazione della forza $\vec{F}(t)$ tra i tempi t_1 e t_2 è operativamente definita come:

$$C_F(t_1, t_2) = \langle \vec{F}(t_1) \vec{F}(t_2) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{F}_i(t_1) \vec{F}_i(t_2) . \quad (2.4)$$

Poiché si suppone che il fluido (o bagno termico) sia in uno stato stazionario la media presa in due tempi diversi $\langle \vec{F}(t_1) \vec{F}(t_2) \rangle$ dipende solo dalla differenza $t_1 - t_2$ e si può scrivere

$$C_F(\tau) = \langle \vec{F}(t) \vec{F}(t + \tau) \rangle . \quad (2.5)$$

La funzione $C_F(\tau)$ è pari rispetto a τ e in generale decresce con τ con un tempo caratteristico τ_c (tempo caratteristico di collisione). In generale $C_F(\tau) \sim e^{-\tau/\tau_c}$ dove τ_c è il tempo di correlazione della forza di Langevin relativa alle collisioni con il fluido circostante. In altre parole per $\Delta t \gg \tau_c$, eventi di collisione che si verificano intorno a un tempo t possono essere considerati statisticamente indipendenti da quelli che si verificano intorno a $t + \Delta t$. La seconda ipotesi è infatti chiamata ipotesi delle due scale temporali e consiste nel fatto che i tempi caratteristici di collisione τ_c siano molto più piccoli del tempo di evoluzione della velocità $\sim v$.

La terza e ultima ipotesi sulla forza di Langevin è che $\vec{F}(t)$ sia un processo Gaussiano. Questa ipotesi può essere giustificata a partire dal teorema del limite centrale, se si considera che per via dell'ingente numero di molecole di fluido che circondano le particelle mesoscopiche, la forza $\vec{F}(t)$ può essere vista come la somma di un grande numero di collisioni elementari. Se $\vec{F}(t)$ è un processo gaussiano allora scriveremo che:

$$\langle \vec{F}(t_1)\vec{F}(t_2) \rangle = \sigma^2 \delta(t_1 - t_2). \quad (2.6)$$

Si può anche dire che la forza casuale di Langevin considerata segue la statistica di un rumore bianco. In questo modo, l'equazione di Langevin è storicamente il primo esempio di equazione differenziale stocastica, vale a dire un'equazione differenziale con un termine casuale \vec{F}_T . Per questo motivo la soluzione è a sua volta una funzione casuale del tempo, ovvero un processo stocastico.

La soluzione dell'equazione 2.5 in presenza di puro rumore bianco è detta processo di Wiener (o moto Browniano in matematica) ed l'esempio più importante di processo stocastico a tempo continuo. Esso può essere visto come l'analogo a tempo continuo di una passeggiata aleatoria reale con incrementi gaussiani.

Dal punto di vista matematico, si dimostra ([8]) che il moto Browniano può essere definito come un processo stocastico reale $B = \{B_{t_i}\}$, $t_i \in [0, +\infty)$ che soddisfa le seguenti proprietà:

- $B_0 = 0$;
- B ha incrementi indipendenti, cioè per ogni scelta di $k \geq 2$ e $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_k < +\infty$ le variabili aleatorie $\{B_{t_i} - B_{t_{i-1}}\}_{1 \leq i \leq k}$ sono indipendenti;
- B ha incrementi stazionari Gaussiani centrati: più precisamente, per ogni scelta di $t > s \geq 0$ si ha $B_t - B_s \sim \mathcal{N}(0, t-s)$;
- B ha traiettorie continue, cioè la funzione $t \rightarrow B_t$ è continua.

Equazione di Langevin in presenza di forze esterne

Dal punto di vista fisico, l'idea del Langevin è stata quella di considerare due contributi per \vec{F}_T .

Il primo è il termine stocastico descritto in precedenza. Supponiamo quindi di aver immerso la nostra particella nel fluido: le uniche forze agenti sulla particella saranno quelle esercitate dai continui urti con le molecole del mezzo. Se la particella è in movimento, subirà più urti in direzione opposta al moto (frontalmente), così che l'effetto medio sarà di frenamento. Pertanto al termine precedente va aggiunto un termine di smorzamento deterministico, che ha un tipico andamento² $F \sim -\alpha v$. Con queste ipotesi le equazioni del moto (di Langevin) diventano:

$$\begin{cases} m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_E + \vec{F} \\ \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} \end{cases}, \quad (2.7)$$

dove F segue 2.6 e nella forza esterna F_E si può includere un termine di forza di Stokes. Nella terza sezione si generalizzerà il termine di forza esterna, qui rappresentato dalla forza di Stokes, al caso di atomi confinati da potenziale armonico e raffreddati a laser.

²Nel caso di particelle macroscopiche la legge di Stokes fornisce una stima del coefficiente di smorzamento α che, per una particella sferica di raggio a è dato da $\alpha = 6\pi a \eta$, dove η è la viscosità del fluido

2.2.3 Da Langevin a Fokker-Planck

L'approccio di Fokker-Planck al moto Browniano ([9]) si basa sul fatto che la probabilità di trovare la particella in un certo punto, essendo normalizzata ad 1, 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. Si può dimostrare che l'equazione di Fokker-Planck per il processo descritto dall'equazione di Langevin del paragrafo precedente 2.4 è:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(v, t | v_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial v}(D^{(1)}(v, t)\rho(v, t | v_0, t_0)) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}(D^{(2)}(v, t)\rho(v, t | v_0, t_0)), \quad (2.8)$$

dove, nella notazione introdotta, $D^{(1)} = F_E$ è detto coefficiente di drift e $D^{(2)} = \sigma^2$ coefficiente di diffusione. Notare come per un puro rumore bianco con coefficiente di diffusione costante si ritrovi l'equazione di Einstein 2.1 con $D = \frac{D^{(1)}}{2}$.

Nel caso d -dimensionale l'equazione di Fokker-Planck diventa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(v, t | v_0, t_0) = -\sum_i^d \frac{\partial}{\partial v_i}(D_i^{(1)}(v, t)\rho(v, t | v_0, t_0)) + \frac{1}{2}\sum_i^d \frac{\partial^2}{\partial v_i^2}(D^{(2)}(v, t)\rho(v, t | v_0, t_0)). \quad (2.9)$$

Nel caso in cui la funzione densità di probabilità presenti un dipendenza sia dal punto sia dalla velocità della particella l'equazione che descrive l'andamento della densità di probabilità è detta equazione di Kramers. Infatti il sistema 2.7 può essere visto come un'equazione di Langevin bidimensionale nelle coordinate (x, v) dove i coefficienti di drift e diffusione per le diverse coordinate sono

$$D^{(1)} = \begin{cases} F_E \\ v \end{cases}, \quad D^{(2)} = \begin{cases} D \\ 0 \end{cases}. \quad (2.10)$$

Per cui l'equazione di Kramers è data da:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial \rho}{\partial v}(F_E \rho) + \frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2}(D \rho). \quad (2.11)$$

2.2.4 Nota per gli atomi raffreddati da laser

Nella discussione precedente è stato descritta la dinamica stocastica di una particella immersa in un fluido, descritta da equazioni di Langevin. Occorre però ricordare che lo scopo di questa trattazione è il caso di atomi raffreddati da laser, dunque immersi in un bagno ottico, e confinati armonicamente, i quali possono essere ugualmente descritti da equazioni di Langevin ([10]): l'effetto del bagno ottico è quello di produrre un termine di attrito dissipativo e una forza casuale che provoca la diffusione. La dissipazione e la diffusione descrivono la variazione dell'impulso degli atomi dovuto alle interazioni con i fotoni del campo per diffusione, assorbimento ed emissione. Nella prossima sezione si analizzeranno in dettaglio i vari termini dell'equazione di Langevin che permette di descrivere il moto indotto da un campo di laser su atomi raffreddati, con confinamento armonico. Si ricaverà anche una nuova espressione del teorema del viriale e della legge dell'equipartizione nel caso generale, di non equilibrio. Questa generalizzazione è necessaria dal momento che la forza di attrito Sisifo è non lineare in p .

3.1 Teorema del viriale e legge di equipartizione

Il teorema del viriale fornisce un'equazione generale che mette in relazione la media nel tempo dell'energia cinetica totale di un sistema stabile di particelle discrete, con quella di un termine dipendente dalle forze $C(q)$, denominato *viriale* da Clausius.

Si consideri un sistema di N particelle identiche di massa m_i in d dimensioni e si indichi con $\{q_i, p_i\}$ le coordinate generalizzate dell' i -esimo grado di libertà. Siano f_i la forza agente sull' i -esima particella e sia $C(q) = -\sum_{i=1}^N q_i \dot{f}_i$ il termine viriale. Allora il teorema del viriale, che relaziona l'energia cinetica totale T con il termine viriale di Clausius, afferma che: $\langle T \rangle = \frac{1}{2}\langle C \rangle$ ([11]).

3.1.1 Teorema del viriale per la dinamica di Langevin

Il teorema del viriale può essere sfruttato per rivelare segnali di non equilibrio di un sistema. Di recente infatti, si è dimostrato che esso si può applicare ad un'ampia classe di stati stazionari in forma generalizzata, e che in condizioni di equilibrio si riduce alla formula comunemente nota ([12]). La rilevanza di questi risultati è duplice. Da un lato, la violazione del teorema viriale di equilibrio può essere usata come misura del non equilibrio del sistema. D'altra, la violazione della sua espressione generalizzata (valida fuori dall'equilibrio) può rivelare il venire meno delle condizioni in cui è vera, ovvero la dinamica di Langevin stazionaria con termine di rumore additivo e attrito lineare.

In questa sezione si andrà ad estendere ulteriormente il risultato delle equazioni viriali mesoscopiche (MVEs) derivando un'equazione del viriale generalizzata che governi la partizione dell'energia tra posizione e momenti coniugati dei singoli gradi di libertà del sistema, applicata al caso di stati stazionari di non equilibrio con dinamica di Langevin. Successivamente si specializzeranno i risultati al modello classico di atomi intrappolati da potenziale armonico, raffreddato a laser col Meccanismo di Sisifo.

Si limita la discussione ai casi in cui le forze dipendenti dalla posizione sono conservative e derivate da un potenziale U , mentre tutti gli effetti di non equilibrio appaiono esplicitamente solo nelle forze dipendenti dalla velocità, che associamo al termine di attrito non lineare dovuto al raffreddamento Sisifo. In questo caso le equazioni di Langevin del moto sono date da:

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -U'(q) + F(p) + \sqrt{2D(p)}\xi(t) \\ \dot{q}(t) = \frac{p(t)}{m} \end{cases}, \quad (3.1)$$

dove $U(q)$ è il potenziale esterno, ξ è un termine di rumore (un numero distribuito normalmente, con media nulla, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, e varianza pari a 1 $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s)$) e $D(p) = D_0 + D_1(p)$ è un coefficiente di diffusione che in generale potrebbe avere un termine dipendente dal momento. $F(p(t))$ rappresenta invece una forza dipendente dal momento p e contenente un termine di attrito $F_f(p)$ che è una funzione dispari non lineare in p (che sarà specificata in seguito, dovuta al raffreddamento Sisifo). L'equazione di Kramers 2.11 in questo caso diventa (nelle nuove coordinate $x \rightarrow q$, $v \rightarrow p/m$, con $F_E \rightarrow -U'(q) + F(p)$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \rho}{\partial q} - U'(q) \frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial p^2} [D(p)\rho] - \frac{\partial \rho}{\partial p} [F(p)\rho]. \quad (3.2)$$

Considerando ora il caso stazionario dove ρ è costante in t , moltiplicando l'equazione 3.3 per qp e integrando per parti³ in q e p si ha per il membro di sinistra⁴

$$\begin{aligned} \int pq \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \rho}{\partial q} - U'(q) \frac{\partial \rho}{\partial p} \right) dqdp &= \int \frac{p^2}{m} q \frac{\partial \rho}{\partial q} dqdp - \int pq U'(q) \frac{\partial \rho}{\partial p} dqdp = \\ &= - \int \frac{p^2}{m} \rho dqdp + \int q U'(q) \rho dqdp = - \left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle + \langle q U'(q) \rangle \end{aligned}, \quad (3.3)$$

mentre per quello di destra

$$\int pq \frac{\partial^2 \rho}{\partial p^2} [D(p)\rho] dqdp - \int qp \frac{\partial \rho}{\partial p} [F(p)\rho] dqdp = - \int 1 \cdot q \frac{\partial \rho}{\partial p} [D(p)\rho] dqdp + \int q [F(p)\rho] dqdp = - \langle q F(p) \rangle. \quad (3.4)$$

Si ottiene infine la seguente espressione

$$\left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle - \langle q U'(q) \rangle = - \langle q F(p) \rangle, \quad (3.5)$$

che rappresenta il teorema del viriale generalizzato. In questa equazione $\frac{p^2}{m}$ corrisponde all'energia cinetica, $qU'(q)$ è il termine viriale, mentre $qF(p)$ è un termine dissipativo non lineare in p .

³Con la notazione $\int f(x)h'(x)dx = f(x)h(x) - \int f'(x)h(x)dx$.

⁴I termini di bordo sono assunti nulli poiché la densità di probabilità deve essere nulla all'infinito.

3.1.2 Teorema del viriale generalizzato

In questa sezione si mostrerà come è possibile ricavare, nel caso di sistemi con termine di attrito non lineare in p , una relazione viriale simile a quella appena vista nel caso della dinamica di Langevin in cui $F(p)$ non era stato specificato.

Si consideri quindi una particella raffreddata a laser con il meccanismo di Sisifo. La forza di attrito $F_f(p)$ che agisce sulla particella ha un andamento non lineare in p e può essere rigorosamente derivata nel limite semiclassico, basandosi sul modello generico di raffreddamento laser nella transizione atomica da $J = 1/2$ a $J' = 3/2$, descritto nel primo capitolo di questa trattazione ([4]):

$$F_f(p) = \frac{-\gamma p}{1 + (p/p_c)^2}. \quad (3.1)$$

Con questa particolare scelta di $F_f(p)$, al variare della quantità di moto della particella si osservano principalmente due comportamenti rilevanti della forza per valori estremali di p . Per una particella lenta si avrà $p \ll p_c$ e quindi una forza $F_f(p) \sim -p$, simile alla forza di attrito che agisce su una particella che compie un moto Browniano nel fluido. Una particella molto veloce, ovvero con $p \gg p_c$, sperimenterà invece una forza $F_f(p) \sim -\frac{1}{p}$. Intuitivamente, sotto l'azione di questo particolare termine dissipativo le particelle in rapido movimento tendono a rimanere veloci. Si noti inoltre che la forza $F_f(p)$ tende a 0 per $p \rightarrow \infty$.

Si assume inoltre la tipica condizione sperimentale in cui il potenziale è armonico, ovvero

$$U(q) = \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \quad (3.2)$$

che è pari, $U(q) = U(-q)$, e confinante $\lim_{q \rightarrow \pm\infty} U(q) = \pm\infty$.

Si effettua ora il passaggio ad unità adimensionali, riassunto nella tabella 3.1. L'equazione di Kramers diventa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \Omega v \frac{\partial \rho}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial \rho}{\partial v} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2} [D(v)\rho] - \frac{\partial}{\partial v} [F(v)\rho], \quad (3.3)$$

dove $\Omega = \frac{\omega}{\gamma}$. Scrivendo il sistema di equazioni di Langevin corrispondente a questa equazione di Kramers si trova che la dinamica di atomi raffreddati a laser con confinamento armonico è

$$\begin{cases} \dot{v}(t) = -U'(x) + \frac{\partial D(v)}{\partial v} + \frac{-\gamma p}{1+(p/p_c)^2} + \sqrt{2D(v)}\xi(t) \\ \dot{x}(t) = \Omega v(t) \end{cases}, \quad (3.4)$$

dove è stato inserito il valore di $D(p)$ in unità adimensionali $D(v) = D_0 + D_1(v) = D_0 + \frac{D_1}{1+(p/p_c)^2}$.

quantità		adimensionale
tempo	t	$t \leftarrow \gamma t$
impulso	p	$v = \frac{p}{p_c}$
posizione	x	$x = \frac{m\omega}{p_c} q$
frequenza angolare	ω	$\Omega = \frac{\omega}{\gamma}$
coefficienti di diffusione	D_0	$D_0 = \frac{D_0}{\gamma p_c^2}$
	D_1	$D_1 = \frac{D_1}{\gamma p_c^2}$
	$D_1(p)$	$D_1(v) = \frac{D_1}{1+v^2}$
	$D(p) = D_0 + D_1(p)$	$D(v) = D_0 + D_1(v)$
forza d'attrito	$F_f(p)$	$F_f(v) = -\frac{v}{1+v^2}$
forza armonica	$-U'(q) = -\omega q^2$	$-U'(x) = -\Omega x$

Tabella 3.1

A questo punto, si procede come in precedenza, integrando per parti l'equazione 3.3 dopo averla moltiplicata per un fattore $g(v)$ scelto in modo tale che si abbia un termine $\langle xv \rangle = 0$. Nel caso di

atomi raffreddati a laser si trova a posteriori che deve essere $g(v) = (v + \frac{v^3}{3}) + const$.

Pertanto, moltiplicando l'equazione di Kramers nel caso stazionario per il fattore $xg(v)$, integrando per parti si ottiene al primo membro

$$\begin{aligned} \int xg(v) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \Omega v \frac{\partial \rho}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial \rho}{\partial v} \right) dx dv &= \int \underbrace{\Omega xg(v)v}_{f(x)} \underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial x}}_{h'(x)} dx dv - \int \underbrace{xg(v)U'(x)}_{f(v)} \underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial v}}_{h'(v)} dx dv = \\ &= - \int \Omega v g(v) \rho dx dv + \int xg'(v)U'(x)\rho dx dv = - \langle \Omega v g(v) \rangle + \langle xg'(v)U'(x) \rangle , \end{aligned} \quad (3.5)$$

mentre al secondo membro

$$\begin{aligned} \int xg(v) \frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2} [D(v)\rho] - \frac{\partial}{\partial v} [F(v)\rho] dx dv &= \int \underbrace{xg(v)}_{f(v)} \underbrace{\frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2} [D(v)\rho]}_{h'(v)} dx dv + \int \underbrace{xg(v)}_{f(v)} \underbrace{\frac{\partial}{\partial v} [F_f(v)\rho]}_{h'(v)} dx dv - \\ &- \int \underbrace{xg(v)}_{f(v)} \underbrace{\frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{\partial D(v)}{\partial v} \rho \right]}_{h'(v)} dx dv = \int xg'(v) \frac{\partial \rho}{\partial v} [D(v)\rho] + \langle xg'(v)F(v) \rangle = \\ &= \langle xg''(v)D_0 \rangle + \langle xg''(v)D_1(v) \rangle + \langle xg'(v)F(v) \rangle + \left\langle xg'(v) \frac{\partial D(v)}{\partial v} \right\rangle . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Ora, tenendo conto della relazione di Einstein per cui $D_1(v) = \alpha F_f(v)/v = \alpha/g'(v)$ ⁵ e del fatto che $g'(v)F_f(v) = v$, in quanto $\langle xg'(v)F(v) \rangle = \langle xv \rangle = 0$, si ottiene un'equazione generale:

$$-\Omega \langle vg(v) \rangle + \langle g'(v)xU'(x) \rangle = D_0 \langle xg''(v) \rangle . \quad (3.7)$$

A questo punto considerando il caso di attrito Sisifo, con $g(v) = (v + \frac{v^3}{3})$ si ottiene una nuova legge di equipartizione generalizzata

$$-\Omega \left\langle v \left(v + \frac{v^3}{3} \right) \right\rangle + \langle (1 + v^2)xU'(x) \rangle = D_0 \underbrace{\langle 2vx \rangle}_0 \longrightarrow \Omega \langle v^2 \rangle + \frac{\Omega}{3} \langle v^4 \rangle = \langle xU'(x) \rangle + \langle v^2 xU'(x) \rangle , \quad (3.8)$$

che nel caso di confinamento armonico $U(x) = \frac{1}{2}\Omega x^2$ diviene:

$$\langle v^2 \rangle + \frac{1}{3} \langle v^4 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle v^2 x^2 \rangle . \quad (3.9)$$

4.1 Simulazione della dinamica stocastica di atomi raffreddati a laser

In questa sezione si completa la trattazione della dinamica stocastica degli atomi raffreddati a laser con il meccanismo di Sisifo descritta nelle sezioni precedenti, tramite metodi di simulazione numerica. Si utilizza uno schema di integrazione basato sull'algoritmo di *velocity verlet*, un metodo symplettico che viene spesso utilizzato nelle simulazioni in cui è richiesta la conservazione dell'energia totale del sistema (ad esempio nel calcolo delle traiettorie di particelle in simulazioni di dinamica molecolare). Questo algoritmo verrà opportunamente adattato al caso di forza d'attrito Sisifo F_p non lineare in p . Si presentano infine i risultati delle simulazione numerica in grafici rappresentativi.

4.1.1 Algoritmo d'integrazione

In primo luogo occorre precisare la notazione utilizzata in questo capitolo, ponendosi nel caso più semplice di una singola particella stocastica: si indicherà con x_t e v_t rispettivamente la posizione e la velocità della particella al tempo t e si denoterà con m la massa della particella e con f_n la forza agente su di essa. L'asse temporale sarà discretizzato l'asse temporale in tanti passi discreti di lunghezza dt ;

⁵Si ricordi che dal passaggio a unità adimensionali $D_1(v) = \frac{D_1}{1+v^2}$ e che $F_f(v) = -\frac{v}{1+v^2}$, quindi $D_1(v) = \alpha \frac{F_f(v)}{v}$ con α una certa costante.

si indicherà con $t = t_0 + ndt$ con n intero e $n \geq 0$ il punto n -esimo della griglia temporale.

Si passa ora ad illustrare i dettagli dell'algoritmo. Per la simulazione numerica il punto di partenza è dato dalle equazioni 3.1, che descrivono il moto stocastico di un atomo raffreddato col metodo di Sisifo confinato armonicamente. Consideriamo dapprima il limite di forza di attrito nulla, ponendo $\gamma = 0$ e di rumore nullo, con un'Hamiltoniana indipendente dal tempo, nel quale la dinamica di Langevin si riduce a una dinamica Newtoniana deterministica. Un semplice metodo di integrazione per le equazioni della dinamica newtoniana è l'algoritmo di *velocity verlet*. Si tratta di un integratore del secondo ordine reversibile e simplettico nel tempo ([13]). Precisamente, lo Jacobiano della trasformazione delle posizioni e velocità dal tempo t_0 al tempo t_1 è unitario e quindi nell'evoluzione il volume dello spazio delle fasi si conserva. Nota la posizione e velocità al tempo iniziale, nel primo passo viene calcolata la velocità in $t + dt/2$, a metà del *timestep* temporale. Successivamente si aggiorna la posizione, utilizzando la velocità calcolata al passo precedente. Infine si aggiorna la velocità ottenendo v_{t+1} . L'algoritmo è presentato di seguito:

$$v_t \rightarrow v_{t+\frac{1}{2}} = v_t + \frac{\Delta t}{2} \frac{f_t}{m} + O(\Delta t^2) \quad (4.1)$$

$$x_t \rightarrow x_{t+1} = x_t + v_{t+\frac{1}{2}} \Delta t + O(\Delta t^2) \quad (4.2)$$

$$v_{t+\frac{1}{2}} \rightarrow v_{t+1} = v_{t+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{f_{t+1}}{m} + O(\Delta t^2). \quad (4.3)$$

Il metodo di *velocity verlet* si è dimostrato essere relativamente accurato in tipiche simulazioni di dinamica molecolare specialmente a grandi passi temporali. La semplicità e le buone prestazioni complessive dell'algoritmo *velocity verlet* lo rendono quindi un buon punto di partenza per ulteriori sviluppi ([14]). Si passa ora al caso generale, con rumore e attrito. Per ottenere le traiettorie dei un atomo intrappolato da un potenziale armonico nel caso del raffreddamento di Sisifo, nella configurazione semplificata con $D_1 = 0$, occorre integrare numericamente 3.1 adattando lo schema standard riportato in tabella al caso di forza di attrito non lineare in p ([4]).

A tal fine si indica con $c_t = e^{-\frac{1}{2}dt/(1+v_t^2)}$ il termine dissipativo al tempo t , che si può ottenere integrando la prima riga dell'equazione 3.1, con $B = \sqrt{(1 - e^{-dt})D_0}$ il prefattore dei numeri distribuiti normalmente \mathcal{N} , \mathcal{N}' e con $f_t = -\Omega x_t$ la forza dovuta al potenziale armonico. All'interno di ogni passo temporale dt , il seguente algoritmo genera i nuovi valori di velocità (adimensionale) e posizione (x_{t+dt}, v_{t+dt}) da (x_t, v_t) e forza armonica $f_t = -\Omega x_t$:

$$c_t = e^{-\frac{1}{2}dt/(1+v_t^2)} \quad (4.4)$$

$$v_{t+\frac{dt}{2}} = c_t v_t + \frac{dt}{2} f_t + B \mathcal{N} \quad (4.5)$$

$$x_{t+dt} = x_t + \Omega dt v_{t+\frac{dt}{2}} \quad (4.6)$$

$$f_{t+dt} = -\Omega x_{t+dt} \quad (4.7)$$

$$c_{t+\frac{dt}{2}} = e^{-\frac{1}{2}dt/(1+v_{t+\frac{dt}{2}}^2)} \quad (4.8)$$

$$v_{t+dt} = v_{t+\frac{dt}{2}} c_{t+\frac{dt}{2}} + \frac{dt}{2} f_{t+dt} + B \mathcal{N}'. \quad (4.9)$$

Come si può notare dallo schema sopra riportato, nel caso generale si procede come nello schema base di *velocity verlet*, calcolando $v_{t+dt/2} \rightarrow x_{t+dt} \rightarrow v_{i,t+dt}$, ma aggiungendo anche all'algoritmo i termini di rumore \mathcal{N} , di confinamento armonico f_t e d'attrito c_t .

4.1.2 Dettagli dell'implementazione

In questa sezione si descrivono i dettagli dell'implementazione dell'algoritmo presentato nella sezione precedente, scritto in linguaggio C++.

Sono stati creati dei vettori bidimensionali per le coppie

$$\begin{aligned} y_t &= (x_t, v_t) \\ y_{t+1/2} &= (x_{t+1/2}, v_{t+1/2}) \\ y_{t+1} &= (x_{t+1}, v_{t+1}) \end{aligned} \quad (4.1)$$

che vengono utilizzate per l'implementazione dell'algoritmo, come mostrato in particolare in 4.1, 4.2 e 4.5 . La dinamica stocastica della particella è stata simulata nel modo seguente: sono state fatte evolvere le posizioni e le velocità per un tempo $t \sim 100$, non troppo grande, considerando timesteps di $dt = 10^{-4}$ e campionando nell'ultimo ciclo la posizione e la velocità della particella. Questo processo è stato ripetuto $N = 10^6$ volte per ogni set di parametri (Ω , che però è stata fissata a 0.1 e D_0 che invece variava), per collezionare un campione significativo di punti. I risultati della simulazione, impiegati in un secondo tempo per calcolare le traiettorie della particella (posizioni, velocità e tempi), sono stati immagazzinati in vettori N -dimensionali, con N numero di *timestep* temporali totali.

I metodi utilizzati per generare i termini di rumore \mathcal{N} ed \mathcal{N}' in 4.4-4.9 si basano sul metodo polare di Marsaglia. Questo schema, introdotto da George Marsaglia nel 1964 ([15]), è un conveniente generatore di numeri pseudo-casuali che permette di ottenere coppie di variabili indipendenti distribuite normalmente. Secondo tale metodo, queste variabili si possono generare a partire da numeri pseudo casuali distribuiti uniformemente in $[0, 1)$, a loro volta prodotti da un generatore *LCG* (*Linear Congruential Generator*). Questo metodo è molto più semplice rispetto ad altri metodi di generazione di variabili normali e richiede poco spazio di archiviazione.

Il generatore *LCG* per ottenere variabili con distribuzione uniforme è definito nel seguente modo. Si inizializza $x_0 \in \mathbb{N}$, detto seme o *seed*, si scelgono due parametri $a, c \in \mathbb{N}$ e $m \in \mathbb{N}$ con $m > a, c$. Infine, si itera ricorsivamente il seguente algoritmo:

$$x_{i+1} = (ax_i + c) \text{ mod}(m) . \quad (4.2)$$

I numeri finali sono ottenuti come $r_i = \frac{x_i}{m}$. Di solito i parametri a, c, m sono tenuti costanti mentre il seme x_0 viene cambiato tra un run del programma ed il successivo in maniera tale da non generare la stessa sequenza di numeri. Per questo motivo si è optato per ricavare x_0 dall'orologio di sistema del computer. Invece per a, c, m sono stati scelti i parametri di Park Miller $a = 7^5$, $c = 0$, $m = 2^{31} - 1$ che permettono di generare fino a 2^{31} variabili diverse tra loro ([16]).

Per implementare l'algoritmo di Marsaglia è stato utilizzato un algoritmo *LCG* che genera coppie di numeri pseudo casuali con distribuzione uniforme⁶ in $(-1, 1)$, che denominiamo con u e v . A questo punto definiamo $s = u^2 + v^2$. Se $s = 0$ o $s > 1$, i valori attuali di u e v vengono trascurati e si considera una nuova coppia di valori (u, v) . Si itera la generazione di numeri casuali fino a quando non si trova una coppia con s tale che sia verificata la condizione $0 < s < 1$, ossia $s \in \{(u, v) : u^2 + v^2 < 1\}$ è nel cerchio unitario. Se la condizione è verificata l'algoritmo di Marsaglia genera una coppia di valori con distribuzione normale \mathcal{N} ed \mathcal{N}' tali che:

$$\mathcal{N} = u \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}}, \quad \mathcal{N}' = v \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}} . \quad (4.3)$$

Una semplice dimostrazione del metodo di Marsaglia segue da quella del metodo di Box-Muller, un algoritmo utilizzato per generare coppie di numeri casuali indipendenti e distribuiti normalmente con media nulla e varianza zero ([15]). Si analizzano ora i passi principali di questa dimostrazione. Supponiamo che x_1 e x_2 siano due numeri generati secondo la distribuzione uniforme. Si vuole campionare la distribuzione gaussiana $p_N(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2}$. Si definisca il cambio di variabili:

$$\begin{cases} z_1 = \cos(2\pi x_2) \sqrt{-2 \ln x_1} \\ z_2 = \sin(2\pi x_2) \sqrt{-2 \ln x_1} \end{cases} . \quad (4.4)$$

⁶Siano x_1 e x_2 due numeri pseudo casuali con distribuzione uniforme in $[0, 1)$, allora è semplice notare che $y_1 = 2x_1 - 1$ e $y_2 = 2x_2 - 1$ sono distribuiti uniformemente in $(-1, 1)$.

Si vuole dimostrare che z_1 , z_2 sono campionati dalla distribuzione normale. Dalla conservazione della probabilità segue che $p(z_1, z_2)dz_1dz_2 = p_n(x_1)p_n(x_2)dx_1dx_2$ e otteniamo che il determinante dello Jacobiano della trasformazione è

$$p(z_1, z_2) = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} & \frac{\partial x_1}{\partial z_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial z_1} & \frac{\partial x_2}{\partial z_2} \end{array} \right|. \quad (4.5)$$

Si osserva inoltre che:

$$\begin{aligned} z_1^2 + z_2^2 &= -2 \ln x_1 \rightarrow x_1(z_1, z_2) = e^{-\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}} \\ \frac{z_1}{z_2} &= \tan 2\pi x_2 \rightarrow x_2(z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{z_2}{z_1}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Calcolando dunque le derivate parziali:

$$\frac{\partial x_1}{\partial z_1} = -z_1 x_1 \quad \frac{\partial x_1}{\partial z_2} = -z_2 x_1 \quad \frac{\partial x_2}{\partial z_1} = -\frac{1}{2\pi} \frac{z_2}{z_1^2 + z_2^2} \quad \frac{\partial x_2}{\partial z_2} = \frac{1}{2\pi} \frac{z_1}{z_1^2 + z_2^2}. \quad (4.7)$$

$$p(z_1, z_2) = \left| \frac{\partial x_1}{\partial z_1} \cdot \frac{\partial x_2}{\partial z_2} - \frac{\partial x_1}{\partial z_2} \cdot \frac{\partial x_2}{\partial z_1} \right| = \frac{x_1}{2\pi} = \frac{x_1}{2\pi} e^{-\frac{z_1^2 + z_2^2}{2}} = \frac{x_1}{2\pi} e^{-\frac{z_1^2}{2}} e^{-\frac{z_2^2}{2}} = p(z_1)p(z_2) \quad (4.8)$$

Questo dimostra che z_1 e z_2 seguono una distribuzione Gaussiana.

A questo punto, per completare la dimostrazione, si passa alle coordinate polari. Con la notazione introdotta in precedenza si ha che s , che è distribuita uniformemente in $(0, 1]$ è $s = R^2 = u^2 + v^2$ $s = x_1$. Infine usando che $\cos(\theta) = \frac{u}{\sqrt{s}}$ e che $\sin(\theta) = \frac{v}{\sqrt{s}}$ si ottiene il risultato cercato:

$$z_1 = u \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}}, \quad z_2 = v \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}}. \quad (4.9)$$

4.1.3 Risultati numerici

Si presentano ora i risultati della simulazione numerica discussa nel capitolo precedente. In particolare, sono state effettuate 3 simulazioni con 3 diversi valori del parametro $D_0 = 0.2$, $D_0 = 0.05$ e $D_0 = 1$, mantenendo invece fisso il $\Omega = 0.1$. Da ogni simulazione sono stati ricavate traiettorie, velocità e andamento della forza al variare del tempo. Di seguito si rappresentano questi risultati in tre grafici in figura 4.4, 4.5 e 4.6.

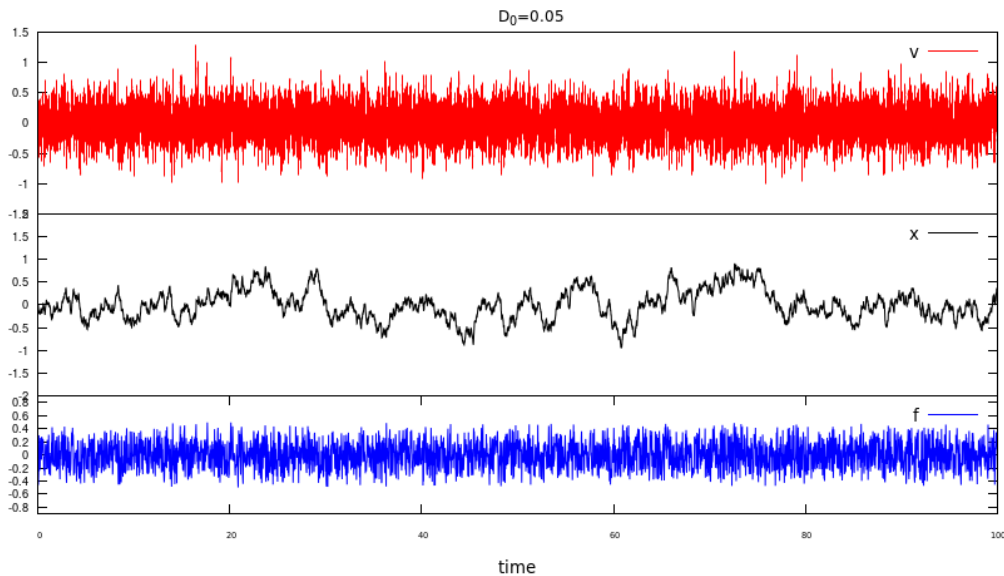


Figura 4.1

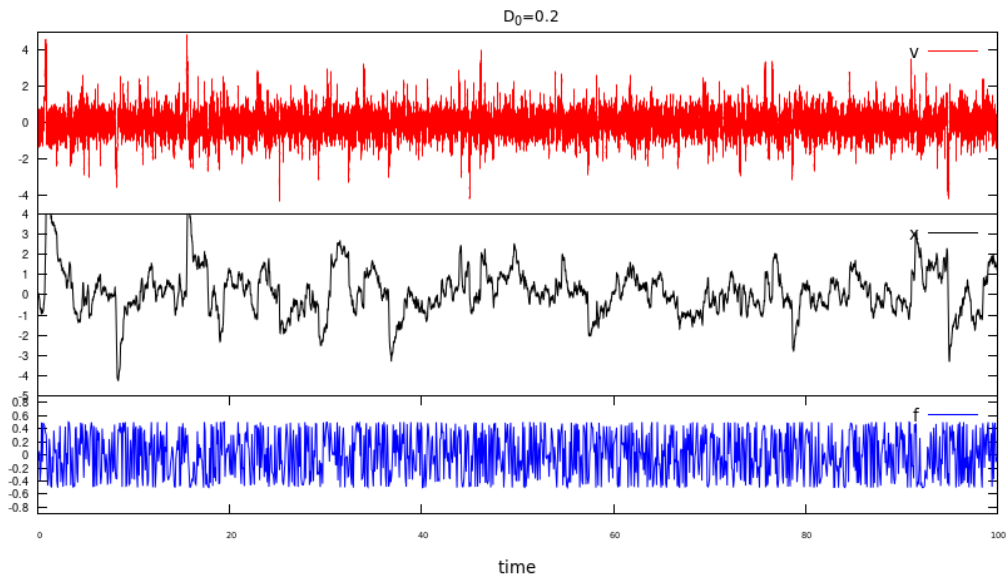


Figura 4.2

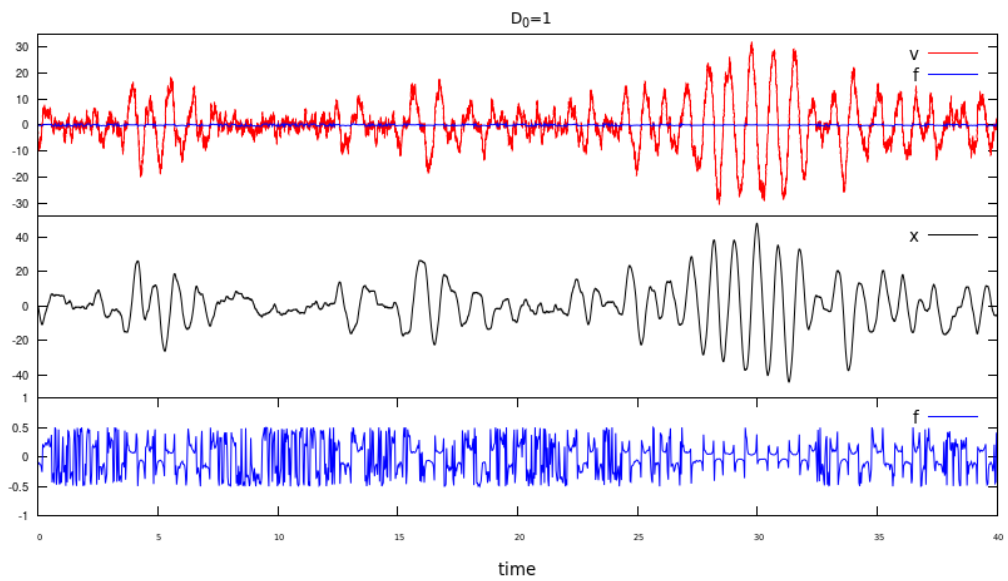


Figura 4.3

Come si può vedere dai grafici, la forza di attrito essenzialmente è uguale (a meno di un segno) alla velocità quando il sistema è caratterizzato da un D_0 piccolo, come in figura 4.1. In questo caso infatti $F_f = -v$. La figura 4.2 mostra invece che per D_0 più grandi si osservano variazioni più ampie della velocità v rispetto a quelle della forza di attrito F_f . Infine, la figura 4.3 mostra ampie fluttuazioni di x e v , a fronte di piccole variazioni di F_f nel regime di grande D_0 . In aggiunta, queste variazioni minimali di F_f si osservano prevalentemente nei punti di inversione dell'andamento di v . Il confronto tra v e F_f è sottolineato dal primo plot in alto nella figura 4.3, in cui il grafico di queste due quantità è stato tracciato nello stesso riquadro.

Considerando il caso esaminato in questa tesi di sistema con attrito impulso-dipendente e non lineare, è possibile verificare la violazione della legge di equipartizione classica andando a riprodurre in un grafico l'andamento di $\frac{\langle x^2 \rangle}{D_0}$ e di $\frac{\langle v^2 \rangle}{D_0}$ in funzione di D_0 , con asse x rappresentato per comodità in scala logaritmica. I risultati mostrano che i due rapporti appena riportati tendono allo stesso valore (~ 1) per piccoli valori di D_0 , dove la legge di equipartizione classica continua a essere valida. Ci sono delle deviazioni invece per $D_0 \geq 0.1$. Tuttavia si osserva che le simulazioni eseguite da $D_0 \geq 1/2$ sono non-stazionarie e pertanto simulando in quel regime si ottengono risultati non rigorosi, dipendenti dal tempo di campionamento. Pertanto tali risultati non possono essere utilizzati per una verifica dell'equazione 3.9 di equipartizione generalizzata. Si riporta di seguito il grafico con i risultati delle simulazioni sopra discussi:

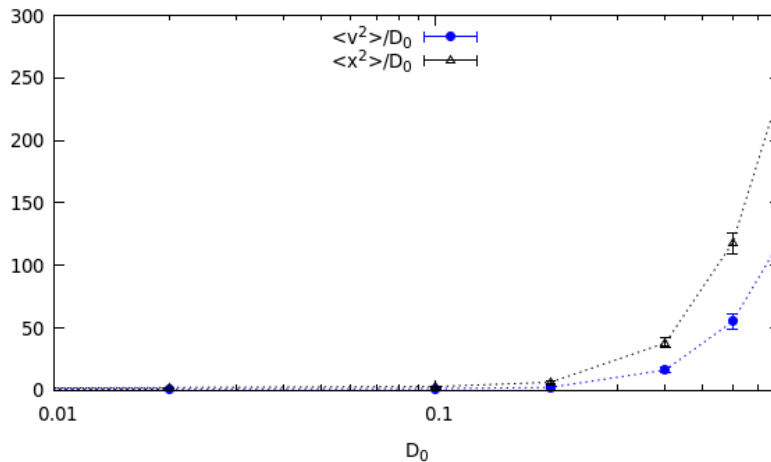


Figura 4.4: Il grafico mostra l'andamento di $\frac{\langle x^2 \rangle}{D_0}$ e di $\frac{\langle v^2 \rangle}{D_0}$ in funzione di D_0 , per un potenziale armonico con $\Omega = 0.1$.

Per visualizzare meglio la deviazione dalla legge di equipartizione classica, calcola il rapporto di equipartizione:

$$\chi = \frac{\langle x^2 \rangle + \langle v^2 x^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle + \frac{1}{3} \langle v^4 \rangle}. \quad (4.1)$$

Per il calcolo delle quantità $\langle x^2 \rangle$, $\langle v^2 \rangle$, $\langle v^2 x^2 \rangle$, $\langle v^4 \rangle$ si procede come in precedenza ma campionando rispettivamente x^2 , v^2 , $v^2 x^2$ e v^4 e poi calcolandone la media e il relativo errore:

$$\langle q \rangle = \sum_{i \leq N} q_i / N \quad \sigma_{\langle q \rangle} = \sqrt{[\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2] / N} \quad (4.2)$$

dove N è il numero totale di realizzazioni. I mezzi tecnici a disposizione non hanno permesso la verifica della legge di equipartizione generalizzata. Infatti i risultati ottenuti presentavano una barra d'errore dell'ordine della grandezza stessa⁷, a causa del numero troppo limitato di realizzazioni N eseguibili. Si mostra di seguito il grafico ([4]) di χ in funzione di D_0 che varia tra 10^{-2} e 10, ottenuto tramite

⁷A titolo di esempio si riporta che per $D_0 = 0.02$ si è ottenuto il seguente risultato $\chi_{gen} = (1 \pm 1)$ compatibile con 1, ma comunque affetto da un errore relativo molto grande.

simulazioni. I calcoli sono stati fatti assumendo un confinamento armonico con parametro $\Omega = 0.1$ (è mostrato anche il caso di potenziale confinante non armonico, che esula dagli obbiettivi di questa tesi), e tracciando i valori di χ sia nel caso classico $\chi = \langle x^2 \rangle / \langle v^2 \rangle$ sia nella sua forma generalizzata 4.1.

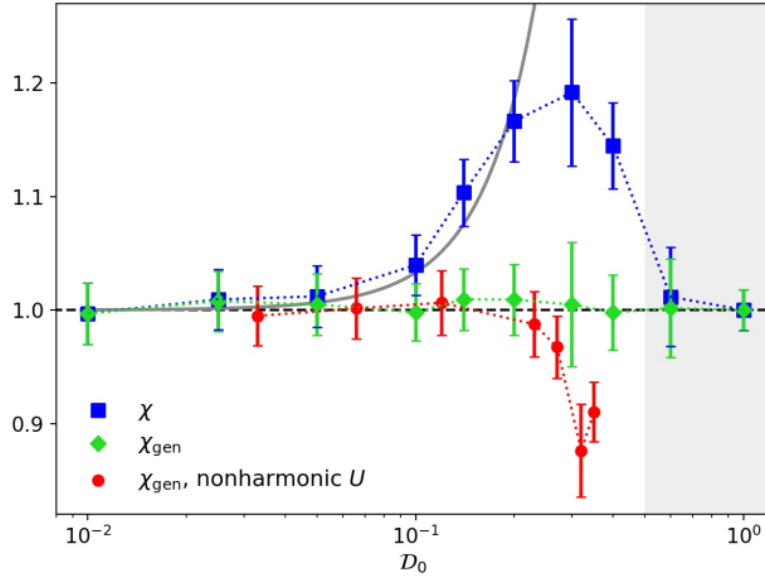


Figura 4.5: Il grafico ([4]) mostra l'andamento di χ , per un potenziale armonico con $\Omega = 0.1$, in funzione di D_0 ($D_1 = 0$). Per $D_0 \rightarrow 0$ la legge di equipartizione classica è approssimativamente valida mentre viene violata per $D_0 \geq 0.1$.

Si osserva che per piccoli valori di D_0 la legge di equipartizione d'equilibrio continua a essere, in buona approssimazione, valida. Questo è dovuto al fatto che la forza d'attrito è lineare in v nel limite di $D_0 \rightarrow 0$ (figura 1a). Al contrario, quando D_0 aumenta ($D_0 \geq 0.1$) la legge di equipartizione classica viene violata. Di più, aumentando ulteriormente D_0 si verifica numericamente che la relazione di equipartizione classica viene violata per valori intermedi di forza d'attrito. Questo può essere spiegato in maniera euristica ricordando che per grandi D_0 gli urti tra atomi e fotoni del bagno ottico sono più forti e spingono le particelle in un regime di forza di attrito Sisifo sostanzialmente nulla ([4]).

Bibliografia

- [1] Gadi Afek et al. *Anomalous statistics of laser-cooled atoms in dissipative optical lattices*. 2021. DOI: 10.48550/ARXIV.2107.09526. URL: <https://arxiv.org/abs/2107.09526>.
- [2] Paul D. Lett et al. “Observation of Atoms Laser Cooled below the Doppler Limit”. In: *Phys. Rev. Lett.* 61 (2 lug. 1988), pp. 169–172. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.169. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.169>.
- [3] J. Dalibard e C. Cohen-Tannoudji. “Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models”. In: *J. Opt. Soc. Am. B* 6.11 (nov. 1989), pp. 2023–2045. DOI: 10.1364/JOSAB.6.002023. URL: <http://opg.optica.org/josab/abstract.cfm?URI=josab-6-11-2023>.
- [4] Gianmaria Falasco, Eli Barkai e Marco Baiesi. “Generalized virial equation for nonlinear multiplicative Langevin dynamics: Application to laser-cooled atoms”. In: *Physical Review E* 105.2 (feb. 2022). DOI: 10.1103/physreve.105.024143. URL: <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.105.024143>.
- [5] Robert Brown F.R.S. Hon. M.R.S.E. R.I. Acad. V.P.L.S. “XXVII. 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”. In: *The Philosophical Magazine* 4.21 (1828), pp. 161–173. DOI: 10.1080/14786442808674769. eprint: <https://doi.org/10.1080/14786442808674769>. URL: <https://doi.org/10.1080/14786442808674769>.
- [6] Albert Einstein. In: *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes Betreffenden Heuristischen Gesichtspunkt ; ÜBER die von Molekularkinetischen Theorie der wärme geforderte bewegung von in Ruhenden flüssigkeiten Suspendierten Teilchen ; Zur Elektrodynamik bewegter körper*. J.A. Barth, 1905, pp. 549–560.
- [7] P. Langevin. “Comptes Rendus de l’Academie des Sciences (Paris)”. In: (1908), pp. 530–533.
- [8] Mörters Peter e Y. Peres. *Brownian motion*. Cambridge University Press, 2012.
- [9] William Coffey e Yuri Kalmykov. *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering, 3rd Edition*. Set. 2012. ISBN: 978-981-4355-66-7. DOI: 10.1142/8195.
- [10] Harold J. Metcalf e Peter van der Straten. *Laser Cooling and Trapping*. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [11] Giovanni Gallavotti. *Statistical mechanics: A short treatise*. Springer, 1999.
- [12] G Falasco et al. “Mesoscopic virial equation for nonequilibrium statistical mechanics”. In: *New Journal of Physics* 18.9 (set. 2016), p. 093043. DOI: 10.1088/1367-2630/18/9/093043. URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/9/093043>.
- [13] David A. Sivak, John D. Chodera e Gavin E. Crooks. “Using Nonequilibrium Fluctuation Theorems to Understand and Correct Errors in Equilibrium and Nonequilibrium Simulations of Discrete Langevin Dynamics”. In: *Physical Review X* 3.1 (gen. 2013). DOI: 10.1103/physrevx.3.011007. URL: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevx.3.011007>.
- [14] P Nikunen, M Karttunen e I Vattulainen. “How would you integrate the equations of motion in dissipative particle dynamics simulations?” In: *Computer Physics Communications* 153.3 (lug. 2003), pp. 407–423. DOI: 10.1016/s0010-4655(03)00202-9. URL: <https://doi.org/10.1016%2Fs0010-4655%2803%2900202-9>.

-
- [15] G. Marsaglia e T. A. Bray. “A Convenient Method for Generating Normal Variables”. In: *SIAM Review* 6.3 (1964), pp. 260–264. DOI: 10.1137/1006063. eprint: <https://doi.org/10.1137/1006063>. URL: <https://doi.org/10.1137/1006063>.
- [16] Susan F. Henssonow Lambert M. Surhone Mariam T. Tennoe. *Park–Miller Random Number Generator*. Betascript Publishing, 2010.