



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE LA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE
POZO DE POTENCIAL

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Jaime Donlucas Pérez

DIRECTOR DEL TRABAJO:

Dra. Karen Patricia Volke Sepúlveda



Ciudad Universitaria, CD. MX. 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno
Donlucas
Pérez
Jaime
55 22 58 49 99
Universidad Nacional Autónoma de
México
Facultad de Ciencias
Física
309009463
2. Datos del tutor
Dra.
Karen Patricia
Volke
Sepúlveda
3. Datos del sinodal 1
Dr.
Neil Charles
Bruce
Davidson
4. Datos del sinodal 2
Dr.
Juan Arnaldo
Hernández
Cordero
5. Datos del sinodal 3
Dr.
Raúl Josué
Hernández
Hernández
6. Datos del sinodal 4
Dr.
David Philip
Sanders
7. Datos del trabajo escrito
Estudio de la trampa óptica de doble pozo de potencial
77 p
2018

Agradecimientos

A mis padres, por apoyarme en tantos años de estudio. Mis hermanas por escucharme siempre. A Sofía por estar siempre a mi lado. A todos en el laboratorio de micromanipulación óptica, por haber sido un increíble grupo de trabajo y amigos. A mi asesora y amiga Karen, por su tiempo y ayuda a lo largo de todo el trabajo de esta tesis. Y al proyecto PAPIIT IN114517 y la beca de ayudante de investigador SNI.

Índice general

1	Introducción	IV
2	Aspectos teóricos	1
2.1	Trampas ópticas	1
2.1.1	Descripción cualitativa de las fuerzas ópticas	2
2.1.2	Aspectos experimentales de una pinza óptica simple	3
2.1.3	Casos límites en el cálculo de las fuerzas ópticas	7
2.1.4	Teoría electromagnética de las fuerzas ópticas	8
2.2	Dinámica estocástica	9
2.2.1	Movimiento browniano	9
2.2.2	Ecuación de Langevin	10
2.2.3	Ecuación de Fokker-Planck	11
2.3	El problema del doble pozo de potencial	12
2.3.1	El problema de Kramers	13
2.3.2	La ecuación de Kramers	14
2.3.3	El doble pozo de potencial	15
2.3.4	Descripción de la fuerza estocástica $\xi(t)$	17
3	Estudio numérico de la trampa de doble pozo	19
3.1	Solución numérica de ecuaciones estocásticas	20
3.2	Dinámica de una partícula en un doble pozo de potencial	22
3.2.1	Reconstrucción del potencial a partir de la dinámica de una partícula	24
3.2.2	La forma del potencial	28
3.2.3	La tasa de transiciones	32
4	Montaje experimental de una trampa óptica de doble pozo	35
4.1	Arreglo experimental de doble trampa	35
4.2	Caracterización preliminar de parámetros	37
4.2.1	Estimación del coeficiente de viscosidad cinemática	37
4.2.2	Determinación de la constante de restitución en una pinza óptica	40
4.3	Reconstrucción del potencial óptico a partir de la dinámica de la partícula	43

ÍNDICE GENERAL

5 Conclusiones	51
Apéndices	53
Apéndice A El método de Ziggurat	55
Apéndice B Tracker	57

Capítulo 1

Introducción

El problema que se presenta en este trabajo es una partícula microscópica confinada en dos trampas ópticas (las cuales representan un doble pozo) sujeta a fluctuaciones debido al movimiento Browniano, lo que constituye una buena aproximación al problema de Kramers, en el cual, para el doble pozo, se estudia la transición de estados de una partícula de un pozo a otro. Los pozos representan entonces un estado meta-estable. Los estados meta-estables son estados excitados de un sistema que presentan tiempos de permanencia mayores a un estado excitado normal; este tiempo de permanencia puede ser muy largo, pero no mayor al estado base del sistema en el cual eventualmente decaen. Este tipo de estados han sido un tema de estudio muy útil para el desarrollo de modelos que buscan explicar un proceso real ocurrente en la naturaleza. Una de las primeras aproximaciones al estudio de este tema fue dada por H. A. Kramers en 1940 [17], trabajo en el que propone su teoría sobre la tasa de transición entre estos estados. El trabajo que presenta lo realiza pensando en reacciones químicas, sin embargo en la época que lo propone, la química no tenía aplicaciones directas de estas predicciones que da Kramers. Su teoría tuvo que esperar un progreso experimental hasta finales de la década de los 70 para ser más apreciado[12].

Posterior al trabajo de Kramers mucho se ha hecho en lo que respecta a su teoría de transición de estados [12]. Principalmente, a partir de la década de 1990, gracias al gran avance experimental, su teoría empezó a ser tomada más en cuenta, ya que conforma un buen modelo para entender y explicar la transición de estados. El interés particular en la aplicación de su teoría es la predicción del comportamiento de sistemas metaestables, debido a sus muchas aplicaciones en diversos campos, por ejemplo: en la biología, donde se presentan procesos como el doblamiento y desdoblamiento de moléculas [34, 40]; en la química, tal como el mismo Kramers propuso en un principio; y en específico en la física los ejemplos son muy vastos como el funcionamiento de un láser por ejemplo. También su teoría se ha llegado a aplicar en temas de matemáticas financieras y la bolsa de valores [5].

Una aproximación experimental, utilizada para verificar los resultados de Kramers sobre la tasa de transición en el doble pozo, fue realizada por McCann *et al.* [25] y Libchaber *et al.* [36]. En éstos trabajos el problema del doble pozo se aborda utilizando arreglos de pinzas ópticas, las cuales son generadas por medio de láseres enfocados a través de un objetivo de microscopio [2]. En el trabajo de McCann *et al.* se genera un doble pozo de potencial mediante un arreglo de pinzas ópticas con los haces de dos láseres. En este arreglo se confina una partícula y por la dinámica que ésta presenta dentro del doble pozo se logra reconstruir el potencial generado por este arreglo y estudiar con ello el problema de la tasa de transición dada por Kramers. Libchaber *et al.*[36] generan también un doble pozo con pinzas ópticas, en el cual confinan a su vez una partícula y estudian los tiempos de residencia estudiados también por la teoría de Kramers; estos tiempos de residencia obtenidos experimentalmente se utilizan para obtener la tasa de transición.

En este trabajo se revisará lo realizado por Kramers en lo que concierne a la teoría de transición de estados, y se abordará este problema tanto numéricamente como experimentalmente, basándose en los trabajos de McCann *et al.* y Libchaber *et al.* para esta última parte. Como objetivos principales de esta tesis se tienen los siguientes:

- Realizar un estudio numérico sobre la predicción de la tasa de transición en un sistema de doble pozo basado en la teoría de Kramers.
- Reproducir experimentalmente un doble pozo de potencial como el obtenido por McCann *et al.*, y estudiar en éste la tasa de transición de una partícula.

Entre los objetivos particulares se plantea analizar las implicaciones y retos experimentales en un arreglo de este tipo y realizar un estudio numérico del problema experimental para obtener resultados similares. También se tiene como objetivo el hacer un estudio breve de la precisión entre los métodos numéricos utilizados para resolver la ecuación de Langevin, la cual es una ecuación estocástica que describe el movimiento browniano en un potencial, y analizar el tratamiento del ruido térmico en las soluciones numéricas de esta ecuación.

En el Capítulo 2 de ésta tesis se introducirá sobre la teoría de las pinzas ópticas, herramienta que utilizaremos para realizar nuestro montaje experimental del doble pozo. También en este capítulo se explicará a detalle el problema de Kramers, abordando desde el movimiento browniano para una partícula libre hasta el movimiento en el doble pozo. En el Capítulo 3, a partir de la solución numérica a la ecuación de Langevin, se calculará la posición como función del tiempo de la partícula en el doble pozo y se reconstruye el potencial, obteniéndose la tasa de transición de la partícula de un pozo a otro. La parte experimental de este trabajo se abordará en el Capítulo 4 y consiste en el montaje de un arreglo de pinzas ópticas que genera un doble pozo de potencial para confinar una partícula de poliestireno de $2 \mu m$ inmersa en agua. Como en la parte numérica,

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

se reconstruye el potencial en base a la dinámica de la partícula y se obtiene la tasa de transición para cada pozo. Previamente se realiza una caracterización de las constantes de difusión de la partícula a atrapar y una caracterización de la constante de restitución de una pinza individual.

Capítulo 2

Aspectos teóricos

Como se mencionó en la introducción, una de las maneras de abordar el problema de Kramers experimentalmente es mediante un arreglo de pinzas ópticas que generen un doble pozo de potencial en el cual se confina una partícula. Por esta razón es necesario analizar primero las implicaciones teóricas de una pinza óptica, que abarcan desde las fuerzas ópticas involucradas en el confinamiento de una partícula en una trampa de este tipo hasta el problema del montaje experimental. Una vez aclarada la teoría que involucra una pinza óptica se procede a analizar el problema de Kramers, analizando previamente la matemática del movimiento browniano, el cual es esencial en este problema. Por lo tanto en este capítulo los aspectos teóricos constan de dos partes. En la primera hablaremos sobre lo que es una pinza óptica y los fundamentos físicos que involucra este sistema, y en la segunda parte se hablará sobre la dinámica estocástica, la cual describe el movimiento la partícula en el sistema de doble pozo que se estudia en esta tesis.

2.1. Trampas ópticas

Las pinzas o trampas ópticas constituyen una buena herramienta para la manipulación de objetos microscópicos. Éstas fueron desarrolladas por A. Ashkin[2] en la década de los 70. En sus trabajos, Ashkin *et al.* demostraron que las fuerzas ópticas podían levitar partículas dieléctricas micro-métricas, desarrollando una trampa tridimensional estable al contra propagar dos haces láser. Estos estudios derivaron en el descubrimiento de la fuerza de gradiente y el desarrollo de la primera pinza óptica de un solo haz. En las siguientes secciones se explica el origen de las fuerzas ópticas presentes en una pinza óptica, y la implementación de una pinza óptica simple.

2.1.1. Descripción cualitativa de las fuerzas ópticas

Cuando se habla de fuerzas ópticas, la más intuitiva es la fuerza de esparcimiento (*scattering*) o presión de radiación debido a los fotones que inciden sobre las partículas del medio que se está iluminando. Sin embargo, existe también otra fuerza que ocurre cuando se trabaja con luz cuyo perfil de intensidad no es plano, como los láseres, los cuales poseen un perfil Gaussiano. Esta otra fuerza debida al gradiente de intensidad juega un papel importante., y se le conoce como fuerza de gradiente[3]. Cuando se trabaja en micromanipulación óptica, más específicamente, cuando se atrapa una partícula con una pinza óptica, la combinación de estas dos fuerzas constituyen las herramientas para el confinamiento. Tomaremos como ejemplo para explicar estas fuerzas que se quiere atrapar una partícula dieléctrica sumergida en un medio con un índice de refracción n_m tal que $n_p > n_m$, con n_p el índice de refracción de la partícula.

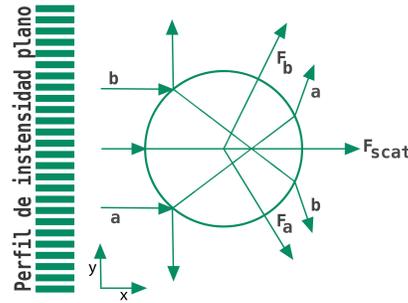


Figura 2.1: Fuerza de esparcimiento producida por un perfil de intensidad plano incidiendo sobre una partícula.

Como se observa en la Fig. 2.1, un rayo b que incide a un costado de la partícula, generado por un perfil de intensidad plano, se refleja y a su vez refracta dentro de la misma y se refracta nuevamente al salir de la partícula, presentando un cambio de momento lineal de la luz $\Delta p_b = p_{b_i} - p_{b_f}$, siendo p_{b_i} y p_{b_f} el momento lineal del rayo b en la Fig. 2.1 a la entrada y salida de la partícula respectivamente. De la tercera ley de Newton se tiene que $\Delta p_b = -\Delta p_{part}$, con Δp_{part} el cambio en el momento lineal de la partícula. Entonces, este cambio en el momento debido al rayo b genera una fuerza contraria a la dirección de Δp_b , a la cual denotaremos F_b . Esto mismo sucede para el rayo a , simétricamente localizado al rayo b . Como estas fuerzas son de la misma magnitud, la componente transversal se anula y tan sólo queda la componente paralela a la dirección de propagación de la luz incidente, lo que da origen a la fuerza de esparcimiento F_{scat} . La contribución de la luz reflejada esta presente también en la dirección $+z$, saliendo de la hoja en la dirección ortogonal al plano de la figura.

Cuando el perfil de intensidad de la luz no es plano y presenta un gradiente, como en el caso de un láser, y la partícula no está centrada respecto al máximo de intensidad, una de las componentes laterales de la fuerza se verá afectada

2.1. TRAMPAS ÓPTICAS

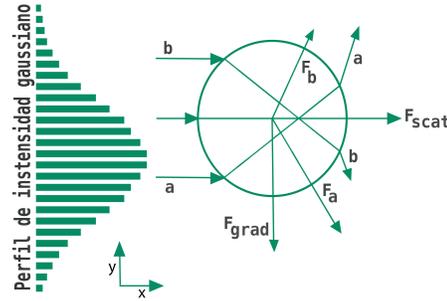


Figura 2.2: Fuerza de esparramiento y gradiente producida por un perfil de intensidad Gaussiano incidiendo sobre una partícula.

con una magnitud mayor respecto a la componente contraria. En la figura 2.2 se observa a la partícula desplazada ligeramente hacia arriba con respecto a la región de mayor intensidad del haz, dando como consecuencia una mayor magnitud de la fuerza F_a con respecto a la fuerza F_b . Entonces la fuerza neta apunta en la dirección de F_a en su componente transversal al eje de propagación, y empuja a la partícula hacia el máximo de intensidad del haz. Esta fuerza la llamamos fuerza de gradiente F_{grad} . Si la partícula se encuentra centrada respecto al haz, la fuerza neta es cero, por lo tanto la fuerza de gradiente actúa como la fuerza restauradora de un resorte.

2.1.2. Aspectos experimentales de una pinza óptica simple

En conjunto, con la fuerza de esparramiento y la fuerza de gradiente se puede confinar a una partícula en una región del espacio. Si se contra-propagan dos haces similares en intensidad, la fuerza de esparramiento de ambos sería suficiente para mantener a la partícula estable en el eje de propagación de los haces y la fuerza de gradiente sería suficiente para limitar el movimiento de la partícula en los ejes transversales[2]. Sin embargo, existe una forma más conveniente de generar una pinza óptica, y es enfocando fuertemente un solo láser a través de un objetivo de microscopio.

Para generar este tipo de arreglo de pinza óptica, el objetivo de microscopio a usarse debe tener una alta apertura numérica. La apertura numérica es un número adimensional que caracteriza el rango en ángulo de aceptación de luz de un sistema, y está definida por $AN = n \sin \theta$, con n el índice de refracción y θ la mitad del ángulo máximo del cono de luz que puede entrar o salir de la lente. Este número se relaciona con la distancia focal de la lente, y esta relación para una lente delgada enfocando un objeto en el infinito es $f = \frac{1}{2AN}$, por lo tanto cuando se habla de una amplia apertura numérica se refiere típicamente a una f de 0,85 – 1,5. En la Fig. 2.3 se muestra un ejemplo de un arreglo de pinza simple.

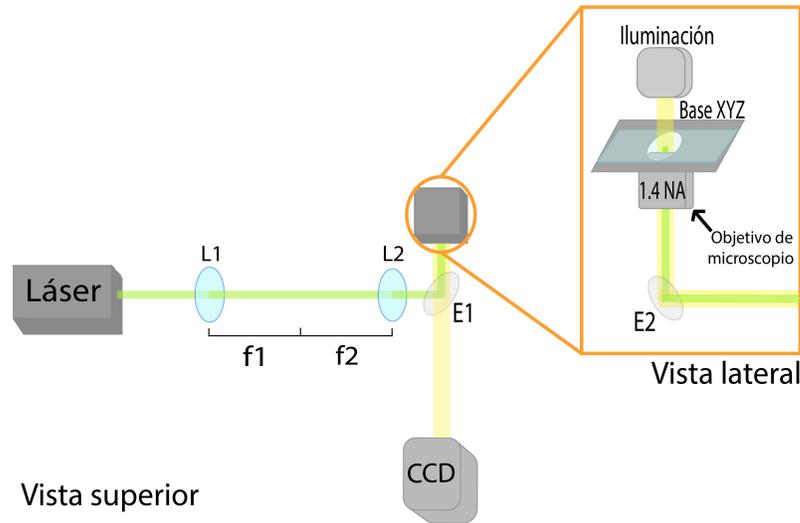


Figura 2.3: Arreglo pinza óptica simple. $L1$ y $L2$ representan un arreglo de lentes tipo telescopio para agrandar el haz que los atraviesa, y $E1$ y $E2$ son espejos. $E1$ es un espejo dichroico que permite pasar a la luz de la lámpara que ilumina la muestra hasta llegar a la cámara CCD, pero refleja la luz del láser para que ésta llegue al objetivo de microscopio.

El haz que pasa a través del objetivo de microscopio es fuertemente enfocado por éste, generando una “cintura” en el camino óptico, tal como se puede apreciar en la figura 2.4. Como el haz se encuentra fuertemente enfocado en la cintura, esta región presenta la mayor intensidad en el eje de propagación del haz (que a partir de ahora llamaremos eje z), lo que conlleva a que la fuerza de gradiente empuje a la partícula hacia la cintura. Sabemos que la fuerza de esparcimiento está empujando a la partícula en la dirección de propagación del haz, pero ahora tenemos una componente más de la fuerza en el eje z debido a la fuerza de gradiente, que es de magnitud similar a la fuerza de *scattering* ($\sim pN$). Cabe aclarar que la fuerza de gradiente depende de la posición de la partícula dentro de la región del haz, al ser proporcional al gradiente de intensidad, esta fuerza actúa como una fuerza restauradora. Con esto, la partícula queda atrapada en el eje z , y como habíamos visto antes, en el plano xy la fuerza de gradiente confina a la partícula en la región donde se encuentra el máximo de intensidad transversal del láser. Por todo esto, enfocando un láser a través de un objetivo

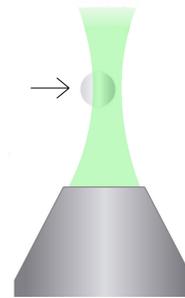


Figura 2.4: Ampliación del láser a la salida del microscopio. En el diagrama se aprecia la cintura del haz que se forma por el enfocamiento del láser.

2.1. TRAMPAS ÓPTICAS

de microscopio, se puede lograr un atrapamiento en las 3 dimensiones espaciales con un solo haz, obteniendo la pinza óptica.

A pesar de que el arreglo mostrado en la figura 2.3 es muy simple, no es la configuración más simple. El arreglo más simple de una pinza óptica se obtendría removiendo el telescopio, formado por el arreglo de lentes L1 y L2, y dejando que el láser llegara directamente a la apertura posterior del objetivo de microscopio. La razón de utilizar un telescopio en este sistema es porque generalmente el ancho del haz de láser no llena completamente la apertura posterior del objetivo de microscopio y, por lo tanto, no se aprovecha la alta apertura numérica de éste. Entonces, utilizando el telescopio se expande el haz hasta llenar toda la apertura posterior del objetivo [27].

En el montaje experimental mostrado en la figura 2.3, si quisiéramos mover una partícula atrapada por la trampa en el plano xy , tendríamos que mover la muestra (mediante la base de traslación XYZ). Sin embargo, existe también una forma alternativa de mover a la partícula, dejando la muestra fija y moviendo el láser. Es preciso tener cuidado al mover el láser, ya que podríamos provocar una desalineación de todo nuestro arreglo. Para evitar tal problema, se puede colocar un espejo a una distancia f_1 de la primera lente, como en la

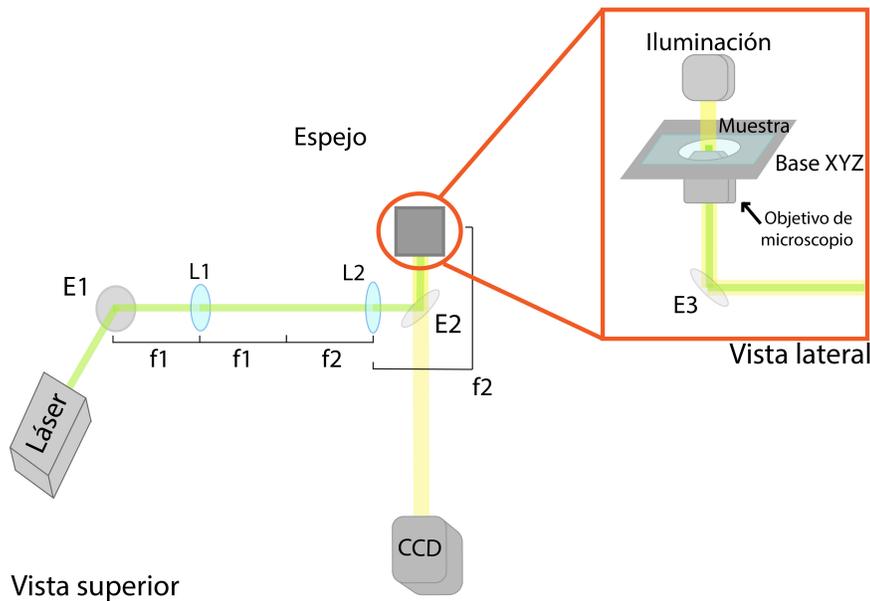


Figura 2.5: Arreglo pinza óptica simple con sistema $4f$. Se monta un espejo posterior E1 a la salida del láser, típicamente montado en una montura Gimbal para pivotar el haz y con ello mover la partícula sin mover la muestra. La distancia que separa a la lente L2 de la parte posterior del objetivo de microscopio es justamente la distancia focal de la lente.

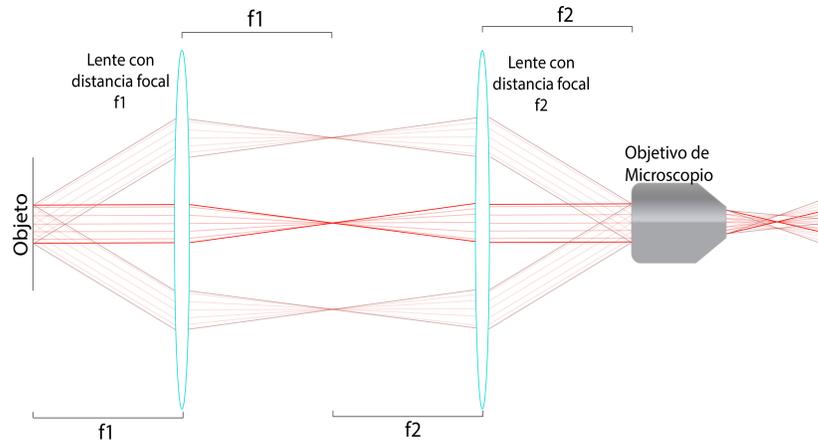


Figura 2.6: Diagrama de un sistema $4f$ en óptica de rayos. El objeto corresponde a el espejo E1 de la Fig. 2.5

Fig. 2.5, que esté en una montura que nos permita pivotar libremente el láser, sin perder la alineación.

Esta configuración, si bien no es algo indispensable, nos ayuda bastante en el arreglo, ya que asegura que el camino óptico del láser llegará siempre correcto a la apertura posterior del objetivo de microscopio, llenándola en su totalidad y sin perder la alineación. Esto es por que en la configuración $4f$ la distancia que existe entre el espejo E1 y el objetivo de microscopio es exactamente la distancia de 2 veces la distancia de ambos focos, de ahí el nombre $4f$. En la figura 2.6 se puede apreciar un diagrama en óptica de rayos que ejemplifica el sistema $4f$. Como se observa en la figura, aún si los rayos no inciden de manera normal en la superficie de la primera lente, debido al arreglo, sí llegan a la apertura posterior del objetivo de microscopio con una ligera inclinación. Esta ligera inclinación produce que a la salida del microscopio la cintura del haz esté ligeramente desplazada en el plano transversal, lo que será bastante útil como se explicará en el capítulo 3. El espejo E2 es un espejo dicróico, específico para la longitud de onda del láser, ya que éste debe dejar pasar la luz proveniente del sistema de iluminación y reflejar el láser.

La longitud de onda del láser utilizado para atrapar a las partículas puede ser cualquiera (desde la región visible del espectro electromagnético hasta el rango del infrarrojo) que no dañe a las mismas. Si se trabaja con partículas de poliestireno, como en el caso de este trabajo, uno puede usar longitudes de onda que vayan desde el infrarrojo cercano, hasta longitudes de onda más pequeñas ($\lambda \sim 532 \text{ nm}$) en el visible. Si lo que se quiere atrapar son partículas vivas, como el caso de bacterias, es preferible utilizar una λ cercana al infrarrojo para no dañarlas, ya que la materia viva absorbe la luz en el infrarrojo produciendo que se calienten. Las partículas que típicamente se llegan a atrapar en un arreglo de

2.1. TRAMPAS ÓPTICAS

pinza óptica, por ejemplo, con un láser $\lambda = 532$ nm, se encuentran en el rango de 0.2 - 5 μm de diámetro[16]. Esto último permite desarrollar casos límite en el tratamiento de las fuerzas que actúan en una pinza óptica.

2.1.3. Casos límites en el cálculo de las fuerzas ópticas

Anteriormente se realizó un análisis cualitativo de las fuerzas que actúan en una pinza óptica desde el régimen de rayos. Este tratamiento para las fuerzas se puede aplicar cuando las condiciones para el esparcimiento de Mie (*Mie scattering*) se satisfacen, y esto sucede cuando el radio R de la partícula es mucho mas grande que la longitud de onda del láser ($R \gg \lambda$).

En el caso contrario ($R \ll \lambda$) se satisfacen las condiciones del esparcimiento de Rayleigh (*Rayleigh scattering*), por lo que resulta mejor tratar a la partícula como un dipolo puntual. Para esta aproximación la fuerza de esparcimiento se expresa en términos de la intensidad de la luz incidente (I_0), el índice de refracción del medio (n_m), la sección transversal de esparcimiento (σ) y la velocidad de la luz:

$$F_{\text{scatt}} = \frac{I_0 \sigma n_m}{c}, \quad (2.1)$$

donde σ es

$$\sigma = \frac{128\pi^5 R^6}{3\lambda^4} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right), \quad m = n_p/n_m. \quad (2.2)$$

La fuerza de gradiente proviene de la interacción de los dipolos inducidos con el campo inhomogéneo

$$F_{\text{grad}} = \frac{2\pi\alpha}{cn_m^2} \nabla I_0, \quad (2.3)$$

la cual depende de la polarizabilidad de la partícula, α , que está expresada como

$$\alpha = n_m^2 R^3 \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right). \quad (2.4)$$

La fuerza de esparcimiento, tal como se vio en el régimen de rayos, apunta en la dirección de propagación del láser, mientras que la fuerza de gradiente apunta en la dirección del gradiente de intensidad cuando $m > 1$.

Al final de la sección anterior se mencionó que el rango de tamaño del diámetro de las partículas típicamente atrapadas está entre 0.2 - 5 μm . Esto tomando una longitud de onda de $\lambda = 1064$ nm, que es una de las que se usó en este trabajo, representa un rango de 0.1λ a 10λ , por lo que ninguno de los dos casos límites anteriores aplican, y más bien nos encontramos en el caso $R \sim \lambda$. A continuación se explica este caso.

2.1.4. Teoría electromagnética de las fuerzas ópticas

Para entender mejor la física del atrapamiento de una partícula con radio $R \sim \lambda$ es necesaria una teoría electromagnética más completa que brinde una mejor descripción de las fuerzas de radiación y torque que actúan sobre una partícula [14]. Lo primero que se debe atender con esta teoría es un estudio de los campos eléctricos y magnéticos esparcidos por la partícula cuando es iluminada por una onda electromagnética incidente. Supongamos que la magnitud del campo eléctrico incidente es $E_i(r)$ y el campo eléctrico esparcido es entonces $E_s(r)$, por lo que el campo eléctrico total fuera de la partícula es $E_t(r) = E_i(r) + E_s(r)$. Se puede considerar el esparcimiento producido por una sola onda plana incidente linealmente polarizada, ya que cualquier campo electromagnético puede ser descrito por la superposición de ondas planas. Entonces

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = E_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \hat{e}_i, \quad (2.5)$$

siendo $\mathbf{k}_i = k_m \hat{\mathbf{k}}_i$ el vector de onda en la dirección de propagación incidente y \hat{e}_i el vector unitario que indica la dirección de polarización.

Como el campo eléctrico esparcido $\mathbf{E}_s(\mathbf{r}) = [E_{s,x}(r), E_{s,y}(r), E_{s,z}(r)]$ satisface la ecuación de Helmholtz, los componentes cartesianos deben también satisfacer la ecuación escalar de Helmholtz. La solución a esta ecuación que satisface las condiciones de radiación al infinito está dada por[39]:

$$E_{s,x}(r) = E_{s,x}(r, \hat{\mathbf{k}}_s) = \sum_{l=0}^{+\infty} h_l(k_m r) \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm,x}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}_s). \quad (2.6)$$

En este caso $\hat{\mathbf{k}}_s$ es el vector radial unitario que indica la dirección de esparcimiento de la onda, $h_l(k_m r)$ es una función de Hankel esférica, $Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}_s)$ los armónicos esféricos, y las amplitudes $C_{lm,x}(\hat{\mathbf{k}}_i)$, están determinadas por las condiciones de frontera de la superficie de la partícula. Usando las propiedades asintóticas de $h_l(k_m r)$ para $k_m r \rightarrow \infty$, la forma asintótica de $E_{s,x}(r)$ es

$$E_{s,x}(r) = E_i \frac{e^{ik_m r}}{r} f_x(\hat{\mathbf{k}}_s, \hat{\mathbf{k}}_i), \quad (2.7)$$

con $f_x(\hat{\mathbf{k}}_s, \hat{\mathbf{k}}_i)$ la amplitud de esparcimiento normalizada de la componente x , que definimos como

$$f_x(\hat{\mathbf{k}}_s, \hat{\mathbf{k}}_i) = k_m^{-1} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (-i)^{l+1} C_{lm,x}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}_s). \quad (2.8)$$

Al hacer lo mismo para los componentes y y z , se obtiene la amplitud normalizada de esparcimiento $\mathbf{f}(\hat{\mathbf{k}}_s, \hat{\mathbf{k}}_i)$, y la forma asintótica del campo de esparcimiento

$$\mathbf{E}_s(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_s(r, \hat{\mathbf{k}}_s) = E_i \mathbf{f}(\hat{\mathbf{k}}_s, \hat{\mathbf{k}}_i) \frac{e^{ik_m r}}{r}. \quad (2.9)$$

2.2. DINÁMICA ESTOCÁSTICA

Con esta última ecuación conocemos ya el campo eléctrico total $E_t(r)$. Los campos magnéticos de inducción correspondientes están dados por:

$$\begin{cases} \mathbf{B}_i(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}_i(\mathbf{r}), \\ \mathbf{B}_s(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}_s(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (2.10)$$

La fuerza que actúa sobre una partícula iluminada por una onda electromagnética se puede calcular por medio del tensor de Maxwell. Para un campo armónico, e integrando el tensor de Maxwell sobre una superficie esférica de radio r que contiene a la partícula, el tensor está dado por[39]

$$\mathbf{F}_{rad} = \frac{1}{2} \epsilon_m r^2 Re \left\{ \oint_{\Omega} \left[\mathbf{E}_t \otimes \mathbf{E}_t^* + \frac{c^2}{n_m^2} \mathbf{B}_t \otimes \mathbf{B}_t^* - \frac{1}{2} \left(|\mathbf{E}_t|^2 + \frac{c^2}{n_m^2} |\mathbf{B}_t|^2 \right) \cdot \hat{\mathbf{r}} d\Omega \right] \right\}, \quad (2.11)$$

con ϵ_m la permitividad dieléctrica del medio y n_m el índice de refracción de la partícula. \otimes denota el producto tensorial. A partir de esta ecuación se puede calcular directamente la fuerza óptica que actúa sobre la partícula al integrar la parte que se obtiene de los campos ópticos en una superficie que encierran a la partícula en campo cercano.

2.2. Dinámica estocástica

El término estocástico se refiere a un proceso o sistema cuyo comportamiento es no determinista [30]. También se puede ver como un objeto matemático el cual está definido por una colección de variables aleatorias. En física, el movimiento de una partícula micro-métrica en agua representa un proceso estocástico, ya que el movimiento que presenta es debido a las interacciones de ésta con las moléculas del medio, y esto deriva en pasos completamente aleatorios. A este tipo de movimiento aleatorio se le conoce como movimiento browniano, y debido a la presencia de este tipo de proceso es que una partícula micro-métrica inmersa en agua puede moverse y escapar del confinamiento de un potencial. En esta sección se explicará las ecuaciones que describen el movimiento browniano, tanto para una partícula libre, como para el movimiento de ésta en presencia de un potencial, y más adelante en la sección 2.3 se explicará como este tipo de dinámica influye en el problema del doble pozo.

2.2.1. Movimiento browniano

En las secciones anteriores se mencionó que el tamaño de las partículas típicamente atrapadas por una pinza óptica se encuentran en el rango $\leq 10 \mu\text{m}$. A este nivel, el movimiento browniano se vuelve un factor importante a considerar, ya que al ser un fenómeno de transporte a escala microscópica aporta de manera notoria al movimiento de la partícula atrapada.

CAPÍTULO 2. ASPECTOS TEÓRICOS

El movimiento browniano se observa como un movimiento aleatorio, no correlacionado. Esto para partículas coloidales inmersas en un líquido en equilibrio térmico. Los movimientos irregulares que presenta este tipo de partículas son causados por el movimiento térmico de las moléculas del líquido [10], es decir, por las fluctuaciones de las colisiones con las moléculas del líquido que las rodea. Este fenómeno fue descubierto por Robert Brown en 1827, y el primer acercamiento teórico lo realizó Albert Einstein en 1905 [10], trabajo en el cual no se tomaba en cuenta el papel de la inercia. Poco después, en 1908, Paul Langevin realizó una nueva teoría sobre el movimiento browniano, en la cual sí se tomaba a consideración el papel que juega la inercia en el movimiento de una partícula Browniana. Posteriormente, se realizó un estudio del movimiento browniano en presencia de un potencial [17], tomando como base la ecuación de Fokker-Planck, pero que también puede ser descrito desde la perspectiva de la ecuación de Langevin, dada su equivalencia. Este nuevo estudio deriva en la ecuación de Kramers y se abordará en la sección siguiente. A continuación se describe brevemente el desarrollo de las ecuaciones de Langevin y Fokker-Planck.

2.2.2. Ecuación de Langevin

El modelo desarrollado por Langevin [20] considera partículas “pesadas” (con masa mucho mayor que la de las moléculas del fluido) inmersas en un fluido, que sienten la colisión de las moléculas del fluido. Dos fuerzas actúan sobre la partícula: la fuerza de fricción viscosa, caracterizada por el coeficiente de fricción, $\gamma = 6\pi\eta R$

$$-\gamma\left(\frac{dx}{dt}\right), \quad \gamma > 0 \quad (2.12)$$

y la fuerza debida a las fluctuaciones $\xi(t)$, provenientes de las interacciones de la partícula con las moléculas del medio. Donde R es el radio de la partícula y η representa la viscosidad del medio.

En ausencia de un potencial, la ecuación de Langevin para una partícula libre en el caso unidimensional es

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} + \xi(t), \quad (2.13)$$

donde m es la masa de la partícula.

El modelo de Langevin toma algunas consideraciones respecto a $\xi(t)$:

1. $\xi(t)$ es independiente de la velocidad y su valor promedio es $\langle \xi(t) \rangle = 0$.
2. $\xi(t)$ cambia demasiado rápido respecto a la velocidad.

Si suponemos que el tiempo necesario para que $\xi(t)$ cambie considerablemente es τ_c , al cual llamamos el tiempo de correlación, entonces el promedio del

2.2. DINÁMICA ESTOCÁSTICA

producto de $\xi(t)$ con $\xi(t')$ se hace cero para $|t - t'| > \tau_c$. Entonces la función de autocorrelación de esta fuerza tiene su máximo en $t = t'$ y se hace cero en $|t - t'| = \tau_c$. Si este tiempo τ_c , es mucho más pequeño que los demás tiempos característicos, podemos escribir la función de autocorrelación como

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\mathcal{D}\delta(t - t'), \quad (2.14)$$

\mathcal{D} representa al coeficiente de difusión en el espacio de velocidades y δ es la función delta. Normalmente se asume por conveniencia que $\xi(t)$ es un proceso Gaussiano, el cual es un proceso estocástico que cumple que cada colección finita de sus variables aleatorias tiene una distribución normal.

2.2.3. Ecuación de Fokker-Planck

En el trabajo que presenta Einstein [10], analiza el movimiento Browniano en el espacio de coordenadas, y establece que la evolución de la distribución de las partículas suspendidas está dado para el caso unidimensional por

$$f(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x + x', t)\phi(x')dx' \quad (2.15)$$

con $x' = \Delta x$, y donde $\phi(x')$ es la probabilidad de salto de una posición $x + x'$ a x . Tomando la forma diferencial de la ecuación anterior, se obtiene la ecuación de difusión [35]:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.16)$$

con $D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x'^2}{2} \phi(x')dx'$ el coeficiente de difusión en el espacio de coordenadas.

Volviendo al caso de Langevin, en el que se aborda el problema del movimiento Browniano desde el espacio de velocidades, se puede tomar la Ec. (2.15), y reformularla para el caso de la evolución temporal de la distribución de probabilidad de velocidad [35]:

$$f(v, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(v - v', t)\phi(v - v', v')dv', \quad (2.17)$$

siendo en este caso $\phi(v - v', v')$ la probabilidad de un paso v' , para una partícula con velocidad $v - v'$. Si se expande $f(v, t + \tau)$ alrededor de t y $f(v - v', t)\phi(v - v', v')$ alrededor de v , se introduce lo que resulta en la Ec. (2.17) y se toma

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{drift}(v) &= \frac{\langle v'(v) \rangle}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} v' \phi(v, v') dv' \\ \mathcal{D}_{diff}(v) &= \frac{\langle v'^2(v) \rangle}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{v'^2}{2} \phi(v, v') dv' \end{aligned} \quad (2.18)$$

CAPÍTULO 2. ASPECTOS TEÓRICOS

como los coeficientes de deriva (*drift*) y difusión, la ecuación 2.17 se puede reescribir como

$$\frac{\partial f(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} \mathcal{D}_{drift}(v) f(v, t) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \mathcal{D}_{diff}(v) f(v, t). \quad (2.19)$$

Esta es la ecuación de Fokker-Planck. Para entender completamente la ecuación, uno puede hacer el calculo de $\mathcal{D}_{drift}(v)$ y $\mathcal{D}_{diff}(v)$, obteniendo [35]

$$\mathcal{D}_{drift}(v) = \frac{\langle v' \rangle}{\tau} = -\gamma v \quad (2.20)$$

$$\mathcal{D}_{diff}(v) = \frac{\langle v'^2 \rangle}{2\tau} = \mathcal{D}, \quad (2.21)$$

siendo γ la constante de disipación o amortiguamiento y \mathcal{D} la constante de difusión en el espacio de velocidades, la cual se obtiene que es[35]

$$\mathcal{D} = \gamma k_B T / m. \quad (2.22)$$

Aquí k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura. Con esto la ecuación de Fokker-Planck (ec. 2.19) queda

$$\frac{\partial f(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [\gamma v] f(v, t) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[\frac{\gamma k_B T}{m} \right] f(v, t) \quad (2.23)$$

Con lo cual termina el análisis del movimiento Browniano, habiendo abarcado la descripción en el espacio de velocidad por la aproximación de Langevin y Fokker-Planck. Queda por resolver la descripción en el espacio fase, con lo que se llega a obtener la ecuación de Kramers para una partícula Browniana en un campo de fuerza.

2.3. El problema del doble pozo de potencial

El problema del doble pozo de potencial que se presenta en este trabajo es un problema de estados metaestables y transición de estados. Empezaremos describiendo el problema de Kramers, que fue la primera aproximación al problema de transición de estados, descrito por Hendrik Anthony Kramers en 1940, en su trabajo [17]. En aquel trabajo, presenta un modelo para calcular la tasa de reacciones químicas. El modelo presenta lo siguiente: una partícula que se mueve en un campo de fuerza externo, pero que siente también las fuerzas irregulares del medio que la rodea, se encuentra inicialmente atrapada en un pozo de potencial, pero puede escapar eventualmente, saltando una barrera de potencial, gracias al movimiento Browniano. Lo que se busca calcular es la probabilidad de escape, considerando la temperatura y la viscosidad del medio.

2.3. EL PROBLEMA DEL DOBLE POZO DE POTENCIAL

2.3.1. El problema de Kramers

Consideremos que la forma del potencial es como la mostrada en la Fig. 2.7. Supongamos que las partículas que se encuentran en x_0 y x_1 se encuentran en estados ligados ¹, pero las que se encuentran en x_1 tienen menor energía. Si el sistema se encontrara en equilibrio térmico, la densidad de probabilidad espacial sería $e^{-E(r)/k_B T}$, donde E representa la energía en el potencial, y r la posición; entonces el número neto de partículas que pasan la barrera se haría cero. Sin embargo, si el número de partículas en x_0 es mucho mayor de las que corresponderían a un equilibrio térmico con x_1 , iniciaría un proceso de difusión que tendería al equilibrio. Si se asume que la barrera ΔU es bastante grande comparada con $k_B T$, el proceso de difusión sería bastante lento, con lo que podríamos pensarlo como un proceso estacionario [17].

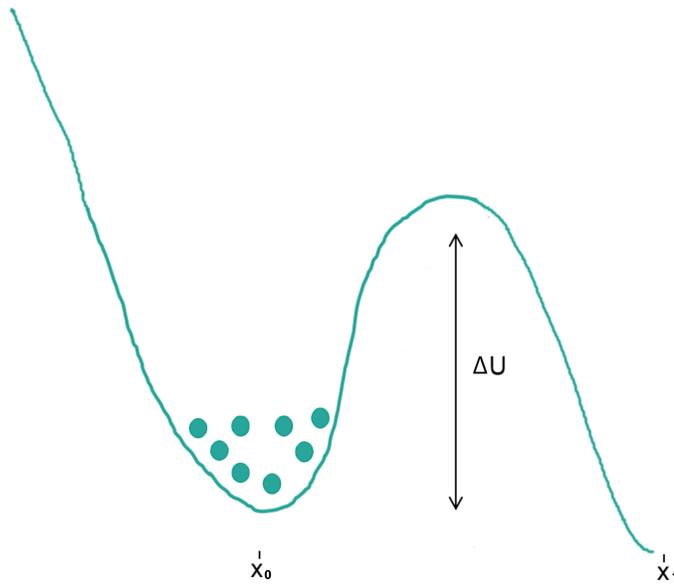


Figura 2.7: Partículas Brownianas en el fondo de un pozo de potencial con una barrera de potencial ΔU . En la figura, x_0 representa la posición de las partículas atrapadas en el pozo y x_1 su posición al escapar de éste.

Kramers resolvió el problema de esta difusión cuasi-estacionaria (que llamaremos ahora metaestable) en el espacio fase para los casos límites de valores grandes y pequeños de la viscosidad, dejando abierto el problema para valores arbitrarios.

¹La combinación lineal de los estados estacionarios del sistema corresponden a valores de la energía del hamiltoniano

Para continuar ahora con la revisión de este problema, se reescribirá la ecuación de Fokker-Planck para el caso de movimiento en un campo de fuerza y llamaremos a esta nueva ecuación, la ecuación de Kramers. Finalmente se estudiará el problema que concierne a este trabajo: el problema del doble pozo de potencial, el cual es una extensión del problema de Kramers.

2.3.2. La ecuación de Kramers

La ecuación de Kramers que obtendremos en esta sección, así como la ecuación de Fokker-Planck, es una función de distribución de densidad de probabilidad. Lo que la hace distinta de la ecuación de Fokker-Planck obtenida antes (Ec. 2.23) es que ésta la desarrollaremos en el espacio fase. La ecuación que describe la evolución en la distribución está dada como[35]

$$f(p', q', t') = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p - \mathcal{P}, q, t) \phi(p - \mathcal{P}, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P}, \quad (2.24)$$

donde (p, q) representan el par de momento a tiempo t , (p', q') el par de momento a tiempo $t' = t + \tau$ y \mathcal{P} es la magnitud de salto (en unidades de momento), debido a la fuerza Browniana a la que está sujeta la partícula, con función de probabilidad $\phi(p - \mathcal{P}, q, \mathcal{P})$.

En ausencia de movimiento Browniano, el movimiento sería determinista, entonces $\dot{q} = p$ y $\dot{p} = \mathcal{K}(q)$, siendo $\mathcal{K}(q)$ la fuerza que actúa sobre la partícula, por lo que para un tiempo τ , (p', q') quedarían

$$q' = q + p\tau, \quad (2.25)$$

$$p' = p + \mathcal{K}\tau. \quad (2.26)$$

Sustituyendo esto en la Ec. (2.24), obtenemos

$$f(p + \mathcal{K}\tau, q + p\tau, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p - \mathcal{P}, q, t) \phi(p - \mathcal{P}, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} \quad (2.27)$$

y expandiendo el lado izquierdo y el integrando del lado derecho de Ec. 2.27 en series de Taylor obtenemos, respectivamente,¹

$$f(p + \mathcal{K}\tau, q + p\tau, t + \tau) = f(p, q, t) + \frac{\partial f}{\partial p} \mathcal{K}\tau + \frac{\partial f}{\partial q} p\tau + \frac{\partial f}{\partial t} \tau + \dots \quad (2.28)$$

$$f(p - \mathcal{P}, q, t) \phi(p - \mathcal{P}, q, \mathcal{P}) = f(p, q, t) \phi(p, q, \mathcal{P}) - \frac{\partial(f\phi)}{\partial p} \mathcal{P} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2(f\phi)}{\partial p^2} \mathcal{P}^2 + \dots \quad (2.29)$$

Integrando la Ec. 2.29 con respecto a \mathcal{P} obtenemos

$$f \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} - \frac{\partial}{\partial p} f \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} + \frac{\partial^2}{\partial p^2} f \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{P}^2}{2} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P}. \quad (2.30)$$

¹En esta sección, cuando se utiliza f en el texto se refiere a $f(p, q, t)$

2.3. EL PROBLEMA DEL DOBLE POZO DE POTENCIAL

Estableciendo las equivalencias entre Ec. 2.29 y Ec. 2.30, tenemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} = 1 \quad (2.31)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}} \quad (2.32)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{P}^2}{2} \phi(p, q, \mathcal{P}) d\mathcal{P} = \frac{\bar{\mathcal{P}}^2}{2} \quad (2.33)$$

y sustituyendo todo esto en la Ec. 2.27, obtenemos

$$\frac{\partial f}{\partial p} \mathcal{K} \tau + \frac{\partial f}{\partial q} p \tau + \frac{\partial f}{\partial t} \tau = -\frac{\partial}{\partial p} f \bar{\mathcal{P}} + \frac{\partial^2}{\partial p^2} f \bar{\mathcal{P}}^2. \quad (2.34)$$

Arreglando esta ecuación, pasando las parciales temporales a la izquierda y las de momento al lado derecho, y dividiendo por τ toda la expresión, obtenemos

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial p} \mathcal{K} - \frac{\partial f}{\partial q} p - \frac{\partial}{\partial p} \frac{f \bar{\mathcal{P}}}{\tau} + \frac{\partial^2}{\partial p^2} \frac{f \bar{\mathcal{P}}^2}{\tau} \quad (2.35)$$

Ahora, retomando la Ec. 2.23 de la sección anterior, y reescribiéndola en el espacio de momento, tomando $p = mv$ y tomando $P \rightarrow f$ se obtiene

$$\frac{\partial P(p, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} [\gamma p] P(p, t) + \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left[\frac{\gamma k_B T}{m} \right] P(p, t). \quad (2.36)$$

Identificamos entonces en la Ec. 2.35 que $\mathcal{D}_{drift} = \bar{\mathcal{P}}/\tau$ y $\mathcal{D}_{diff} = \bar{\mathcal{P}}^2/\tau$. Y de lo obtenido para el movimiento browniano, recordando el teorema de la equipartición $\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$, se sabe que

$$\mathcal{D}_{drift} = -\alpha p = -\alpha m v \quad (2.37)$$

$$\mathcal{D}_{diff} = \mathcal{D} = m \alpha k_B T, \quad (2.38)$$

y como $\mathcal{K}(q)$ se deriva de un potencial, podemos establecer la relación $\mathcal{K}(q) = -U'(q)$. Tomando $m = 1$, $\alpha = \gamma$, $q = x$ y $p = v$, la Ec. 2.35 queda

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial v} [U'(x)] - \frac{\partial f}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} [\gamma v] f + \gamma k_B T \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \quad (2.39)$$

la cual es la ecuación de Kramers[12]. Los primeros dos términos del lado derecho de la ecuación describen un movimiento determinista, mientras que los últimos son característicos del movimiento Browniano.

2.3.3. El doble pozo de potencial

Como extensión al problema de Kramers está el problema del doble pozo de potencial, que a diferencia del problema que propuso Kramers donde existían

CAPÍTULO 2. ASPECTOS TEÓRICOS

partículas atrapadas en un solo pozo, en este caso se agrega un estado metaestable igual al pozo inicial, obteniendo un doble pozo separado por una barrera de potencial de altura ΔU como el mostrado en la figura 2.8. Este problema del doble pozo da un modelo para el estudio de la transición de estados metaestables muy comunes en la naturaleza.

Se ha hecho investigación ya en lo que refiere al doble pozo [25, 14] y los estados metaestables. La motivación de estos estudios recae en la aparición de estos estados en muchos procesos biológicos [34, 40, 7], químicos [38] y físicos [37, 13], así como también en finanzas [5]. Estos ejemplos se refieren a procesos estocásticos en los que se puede aplicar el modelo del doble pozo.

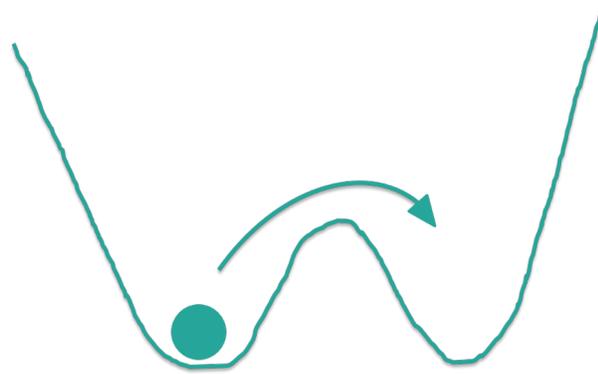


Figura 2.8: El problema del doble pozo de potencial toma como modelo la tasa de transiciones que sufre una partícula Browniana entre un pozo y otro.

El problema que se presenta en este trabajo es una partícula microscópica confinada en dos trampas ópticas, sujeta a fluctuaciones debido al movimiento Browniano, lo que constituye una buena aproximación al problema de Kramers. Se realizó un análisis numérico del problema usando la ecuación de Langevin (Ec. 2.40), ya que resulta así más sencillo de resolver, esto porque si la velocidad de una partícula Browniana es pequeña comparada con la de las partículas del fluido, el modelo más simple para el problema es cuando la fuerza de fricción es proporcional a la velocidad

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, \\ \frac{dv}{dt} &= -U'(x) - \gamma v + \xi(t). \end{aligned} \tag{2.40}$$

Esta es una manera alternativa más intuitiva que la aproximación de Fokker-Planck, para estudiar procesos estocásticos.

2.3. EL PROBLEMA DEL DOBLE POZO DE POTENCIAL

2.3.4. Descripción de la fuerza estocástica $\xi(t)$

Se mencionó en la sección 2.2.2 que $\xi(t)$ se toma como un proceso gaussiano, esto proviene del modelo de la caminata aleatoria, el cual es la descripción más simple del movimiento de una partícula Browniana en agua. Dado que $\xi(t)$ tiene su origen de múltiples colisiones individuales es necesario considerar la intensidad de la influencia molecular sobre la partícula. Si suponemos una partícula Browniana en agua con posición inicial x_0 , que experimenta cambios aleatorios Gaussianos en su posición a medida que t aumenta un número de pasos $t_j = j\Delta t$, y cada cambio tiene la misma volatilidad σ , entonces x es igual a la suma de todos los cambios en posición

$$x_t = x_0 + \sigma \sum_{i=1}^t \epsilon_i, \quad (2.41)$$

donde ϵ_i son números Gaussianos con promedio 0 y varianza 1. La suma de ϵ_i la definimos como una variable de Wiener discreta

$$W_t = \sum_{i=1}^t \epsilon_i = \epsilon\sqrt{t}. \quad (2.42)$$

Si consideramos N pasos, tal que $t = N\Delta t$, esta igualdad refleja que la suma de t números Gaussianos es otro número Gaussiano con volatilidad \sqrt{t} . Con esto la ecuación 2.41 queda

$$x_t = x_0 + \sigma W_t, \quad (2.43)$$

ahora falta encontrar el significado físico de σ . Recordemos la sección anterior donde se introdujo la ecuación de Langevin. Particularmente, en la ecuación 2.14, se había definido que la función de autocorrelación de la fuerza $\xi(t)$ es [29]

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\mathcal{D}\delta(t-t'), \quad (2.44)$$

tomando por ahora $\sigma^2 = 2\mathcal{D}$. En la Ec. 2.40, $v(t)$ se refiere un proceso estocástico con valor inicial v_0 y puede ser resuelta explícitamente [6]:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt' \quad (2.45)$$

Ahora, si elevamos al cuadrado la Ec. 2.45 y tomamos promedio obtenemos

$$\langle v(t)^2 \rangle_{v_0} = v_0^2 e^{-2\gamma t} + e^{-2\gamma t} \int_0^t \int_0^t e^{\gamma(t'+t'')} \langle \xi(t')\xi(t'') \rangle dt' dt'' \quad (2.46)$$

usando 2.44 y por la propiedad *sifting* de la delta $\int f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)$ se tiene que

$$\begin{aligned} \langle v(t)^2 \rangle_{v_0} &= v_0^2 e^{-2\gamma t} + e^{-2\gamma t} \int_0^t \int_0^t e^{\gamma(t'+t'')} \sigma^2 \delta(t'-t'') dt' dt'' \\ &= v_0^2 e^{-2\gamma t} + e^{-2\gamma t} \int_0^t dt' e^{\gamma(t'+t'')} \sigma^2 \\ &= v_0^2 e^{-2\gamma t} + \sigma^2 e^{-2\gamma t} \left[\frac{e^{\gamma(2t)}}{2\gamma} - \frac{e^0}{2\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (2.47)$$

CAPÍTULO 2. ASPECTOS TEÓRICOS

Finalmente se llega a

$$\langle v(t)^2 \rangle_{v_0} = v_0^2 e^{-2\gamma t} + \frac{\sigma^2}{2\gamma} (1 - e^{-\gamma(2t)}), \quad (2.48)$$

de aquí se puede entonces identificar el valor del parámetro σ , si hacemos $t \rightarrow \infty$. Como el valor de $\langle v(\infty)^2 \rangle_{v_0}$ debe ser kT , por el teorema de equipartición de la energía, entonces

$$\langle v(\infty)^2 \rangle_{v_0} = \frac{\sigma^2}{2\gamma} = kT \quad (2.49)$$

$$\Rightarrow \sigma = \sqrt{2kT\gamma} \quad (2.50)$$

con lo que la ecuación de Langevin queda

$$m \frac{dv}{dt} = -U'(x) - \gamma v + \sqrt{2kT\gamma} W_t \quad (2.51)$$

Esta es la ecuación que usaremos, con un potencial adecuado, para el estudio numérico del problema del doble pozo en este trabajo.

Posterior al estudio numérico se realizó un montaje experimental del problema del doble pozo, usando como base trabajos anteriores [25] ligando los resultados obtenidos con la teoría.

Capítulo 3

Estudio numérico de la trampa de doble pozo

Para realizar un estudio numérico de la trampa de doble pozo se necesita realizar una revisión a los métodos numéricos para resolver ecuaciones estocásticas, ya que la dinámica de una partícula en un doble pozo está sujeta a fluctuaciones térmicas. Esto conlleva la aparición de la componente de ruido térmico en las ecuaciones de movimiento, lo que le da el carácter estocástico a la ecuación, tal como vimos en el capítulo anterior. En este capítulo se mostrarán los resultados obtenidos numéricamente por dos diferentes métodos, así como los resultados para la tasa de transición de estados de la partícula en el doble pozo, que es uno de los objetivos de esta tesis.

Como se ha ido mencionando, para estudiar la dinámica de una partícula sujeta a movimiento browniano, en presencia de un potencial, utilizaremos la ecuación de Langevin. El potencial $U(x)$ que se escogió para este caso es un potencial de la forma

$$U(x) = a \left(\frac{x^4}{4} - \frac{bx^2}{2} \right). \quad (3.1)$$

Ya que representa un potencial doble simétrico, el cual es el que esperamos obtener experimentalmente. Tomando $F(x) = -dU(x)/dx$, la ecuación ec. 2.51 queda

$$m \frac{dv}{dt} = a(-x^3 + bx) - \gamma v + \sqrt{2kT\gamma} W_t \quad (3.2)$$

Donde $T = 298,15 \text{ K}$, $\gamma = 6\pi\eta R$ y η es $3,4 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Este valor para la viscosidad se obtuvo experimentalmente determinando la difusión de una partícula en agua. El montaje experimental, los resultados obtenidos y el análisis de datos se explican en el capítulo siguiente.

3.1. Solución numérica de ecuaciones estocásticas

Una ecuación diferencial estocástica o SDE (*stochastic differential equation*) puede describirse por la forma general de la fórmula de Itô [30]

$$dX_t = a(X_t)dt + b(X_t)dW_t. \tag{3.3}$$

Para realizar la integración de esta ecuación uno no puede simplemente recurrir a los métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE, por sus siglas en inglés). Debido a la presencia del término de ruido $dW(t)$ es necesario hacer una integración distinta para este tipo de ecuaciones.

En el capítulo anterior se realizó un corto análisis del término $dW(t)$, donde se mencionó que se refiere a un proceso de Wiener estándar (también llamado movimiento Browniano). Las características principales de un proceso de Wiener son las siguientes [19]:

1. $W_0 = 0$.
2. W_t es continua en t , con probabilidad 1.
3. W_t tienen incrementos independientes y estacionarios, y los incrementos $W_{s+t} - W_s$ tiene una distribución normal $N(0, 1)$.

Dado que los incrementos tienen una distribución normal, se refiere al proceso como Gaussiano.

Para la discretización de esta variable, utilizamos el tamaño de paso del tiempo dt como

$$dW \sim \sqrt{dt}N(0, 1) \tag{3.4}$$

Para generar una distribución normal o Gaussiana, se recurre generalmente al algoritmo de Ziggurat propuesto por G. Marsaglia[23], el cual nos da una distribución de números pseudo-aleatorios, con varianza 1 y promedio 0, con un periodo en el orden de 2^{64} [26]. Un estudio más detallado se encuentra en el Apéndice A.

Se puede encontrar la solución a ecuaciones estocásticas introduciendo el término de ruido (usando la variable de Wiener), en variaciones de métodos numéricos utilizados para ODE, o métodos creados específicamente para resolver SDE. En esta tesis se recurrió a los métodos de Euler–Maruyama y el método de punto medio implícito para encontrar la solución a la ecuación de Langevin .

Euler–Maruyama

El método de Euler-Maruyama, es la integración de Euler para ecuaciones diferenciales, aplicada a procesos estocásticos. Éste considera inicialmente la ecuación de Itô (Ec. 3.3), y se toma como valor inicial $X_0 = x_0$ en un intervalo

3.1. SOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES ESTOCÁSTICAS

$[0, T]$. Euler–Maruyama propone como solución la cadena de Markov definida como

$$Y_{n+1} = Y_n + a(Y_n)\Delta t + b(Y_n)\Delta W_n \quad (3.5)$$

tomando $Y_0 = x_0$, siendo Δt el tamaño de las particiones N del intervalo de tiempo $[0, T]$, es decir $\Delta t = T/N$, y

$$\Delta W_n = W_{\tau_{n+1}} - W_{\tau_n} \quad (3.6)$$

con τ_i las particiones del intervalo $[0, T]$. ΔW_n es un proceso de Wiener estándar, y será introducido en el algoritmo como se menciona en el Apéndice A. Para fines prácticos, nos referimos a la discretización de este proceso en el algoritmo con la notación $dW(t)$.

Para implementarlo primero observaremos una de las ventajas de nuestro sistema. Una partícula inmersa en un medio viscoso (como el agua), describe un buen ejemplo de un movimiento sobre amortiguado. En el experimento numérico, simularemos la trayectoria de una partícula de poliestireno en agua, confinada en un arreglo óptico de doble pozo, por lo que podemos desprejir el término inercial de la Ec. 2.51, ya que $m\ddot{x} \ll 1$, con lo que la ecuación queda [39] como

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\gamma}f(x) + \sqrt{2D}W(t), \quad (3.7)$$

con D el coeficiente de difusión, el cual se relaciona con la energía cinética promedio por medio de la relación de Einstein $\gamma D = k_B T$. E implementando el método de Euler–Maruyama resulta en

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{\gamma}f(x_n)\Delta t + \sqrt{2D\Delta t}w_n. \quad (3.8)$$

$f(x_n)$ representa una fuerza que actúa sobre la partícula y w_n el ruido gaussiano para el paso n . La expresión de esta fuerza será discutida en la sección 3.2.

Método de punto medio implícito

Si consideramos un caso más general, en el que no necesariamente nos encontremos en un caso de sobre amortiguamiento [15], y por lo tanto no podamos hacer a un lado el término de la masa, se tendría que tomar completa la ecuación de Langevin (Ec. 2.51). Si suponemos que $f(x) = -gx$, la ecuación de Langevin toma la forma de una ecuación lineal de segundo orden, y puede resolverse con diversos métodos numéricos. Uno de estos métodos que resulta bastante preciso para este tipo de ecuación es el método de punto medio implícito [8].

El método de punto medio implícito, es de segundo orden, en contraste con el de Euler, el cual es de primer orden. Para obtener éste, se recurre en principio

al método de Euler–Maruyama para obtener los valores intermedios, tomando como tamaño de paso $\frac{\Delta t}{2}$:

$$\begin{aligned}\hat{X}_{n+1} &= X_n + \frac{1}{2}\hat{V}_n\Delta t, \\ \hat{V}_{n+1} &= V_n - \frac{1}{2}\gamma\hat{V}_n\Delta t + \frac{1}{2}f(\hat{X}_{n+1})\Delta t + \frac{1}{2}\sigma w_n,\end{aligned}\tag{3.9}$$

junto con

$$\begin{aligned}X_{n+1} &= X_n + \hat{V}_{n+1}\Delta t, \\ V_{n+1} &= V_n - \gamma\hat{V}_{n+1}\Delta t + f(\hat{X}_{n+1})\Delta t + \sigma w_n.\end{aligned}\tag{3.10}$$

σ representa $\sqrt{2D\Delta t}$. En el caso de nuestra simulación, la fuerza está dada por $f(x) = a(bx - x^3)$, por lo que la Ec. 2.51, se convierte en una ecuación un tanto más compleja, permitiendo analizar el caso de ruido aditivo. Más adelante en la sección 3.2 se discute la forma del potencial y la razón de los parámetros a y b . Generalmente en los métodos implícitos, aplicados a ecuaciones no lineales, se requiere aplicar un proceso iterativo a cada intervalo de tiempo, aunque, la estructura de sistemas de segundo orden hace posible una iteración sencilla. El valor intermedio de \hat{X} en este caso se obtiene de una evaluación repetitiva de [8]

$$\hat{X}_{n+1} = X_n + \left(1 + \frac{1}{2}\gamma\Delta t\right)^{-1} \frac{1}{2}\Delta t \left(V_n + \frac{1}{2}\Delta t f(\hat{X}_n) + \frac{1}{2}\sigma w_n\right),\tag{3.11}$$

tomando como valor inicial $\hat{X}_n = X_n$, con el resto del algoritmo de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\hat{V}_{n+1} &= \left(1 + \frac{1}{2}\gamma\Delta t\right)^{-1} \left(V_n + \frac{1}{2}f(\hat{X}_{n+1})\Delta t + \frac{1}{2}\sigma w_n\right), \\ X_{n+1} &= X_n + \hat{V}_{n+1}\Delta t, \\ V_{n+1} &= V_n - \gamma\hat{V}_{n+1}\Delta t + f(\hat{X}_{n+1})\Delta t + \sigma w_n.\end{aligned}\tag{3.12}$$

El número de iteraciones por paso usado en la Ec. 3.11 que se utilizó en las simulaciones fue de 10 pasos.

3.2. Dinámica de una partícula en un doble pozo de potencial

Para estudiar la dinámica de una partícula, sujeta a fluctuaciones térmicas (movimiento browniano), confinada en un doble pozo de potencial, recurrimos a la ecuación de Langevin (Ec. 2.51). El potencial es el mostrado en la Ec. 3.1. En la ecuación, las constantes a y b toman los valores 1×10^7 N/m^3 , 1×10^{-13} m^2

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

respectivamente. Éstos fueron escogidos después de una serie de simulaciones con distintos valores, ya que con ellos se construye un potencial que permite que el número de saltos de la partícula sea ideal. Con esto nos referimos a que no son tan frecuentes, pero hay suficientes para poder reconstruir el potencial. Una discusión de la obtención de éstos valores y su relación con las variables del ruido térmico es mostrada en la sección 3.2.2.

Para el tratamiento de este problema se utilizaron los dos métodos explicados en la sección anterior, para cada uno de los casos, el caso sobre amortiguado y el caso general. Ejemplos de los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 3.1. Lo que se observa en estas gráficas es la posición que tiene la partícula dentro del doble pozo, a lo largo del tiempo. Algo importante que se debe hacer notar, y que se ha mencionado implícitamente a lo largo de todo esta tesis, es que el movimiento de la partícula se debe en gran medida al ruido térmico, provocado por las interacciones de la partícula con las moléculas del medio.

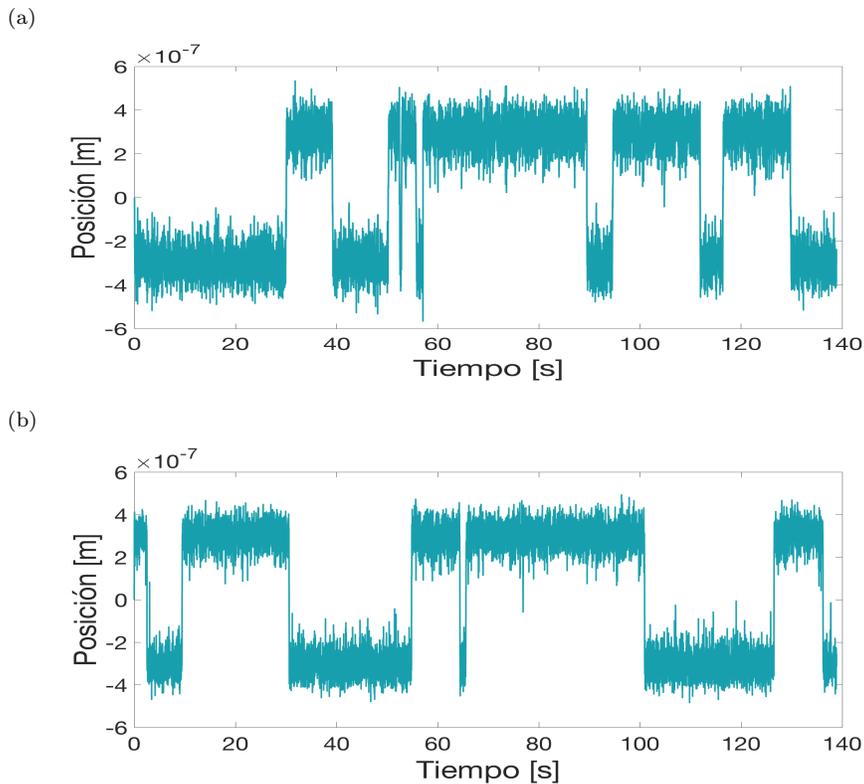


Figura 3.1: Gráficas de posición vs tiempo para una partícula en un doble pozo. Estas gráficas muestran los resultados para la dinámica de la partícula en el doble pozo obtenido con: (a) Método de Euler-Maruyama y (b) Método de punto medio implícito.

Si tuviéramos un sistema determinista, la ausencia del ruido provocaría que el movimiento de la partícula dependiera enteramente de su velocidad y posición iniciales. Para los resultados mostrados en la Fig. 3.1 la velocidad y posición inicial son cero, si usáramos estos valores iniciales en un sistema determinista, la posición de la partícula no cambiaría a lo largo del tiempo, esto quiere decir que al colocar a la partícula en la cima de la barrera de potencial, en ausencia de ruido térmico, la partícula permanecería en esa posición. En esto es que recae la importancia de conocer que nuestro problema está tratando un caso estocástico.

3.2.1. Reconstrucción del potencial a partir de la dinámica de una partícula

A partir de las gráficas ilustradas en la Fig. 3.1, se obtuvo en cada caso el histograma de posición, con ello se pudo verificar la preferencia de posición de la partícula en los pozos. Los datos del histograma corresponden a la densidad de probabilidad $\rho(r)$ de que la partícula se encuentre en una posición determinada. Utilizando esto es posible reconstruir la forma del potencial [25] recordando que la densidad de probabilidad espacial está dada por

$$\rho(r) = Z^{-1} \exp(-U(r)/k_B T), \quad (3.13)$$

con Z una constante de normalización. En nuestro caso, el problema fue abordado en una sola dimensión, por lo que tomamos solo $\rho(x)$ y $U(x)$.

Los resultados para la reconstrucción del pozo, junto con los histogramas de posición se muestran en la Fig. 3.2.

Se realizó un cálculo de error para los métodos, utilizando la forma del potencial invariante [28]

$$\rho(x)_{inv} = e^{-\beta U(x)}, \quad (3.14)$$

con $\rho(x)$ normalizada y con la expresión analítica del potencial.

El error ϵ_x , obtenido con respecto al potencial invariante, se calcula como

$$\epsilon_x = \|\rho(x)_{hist} - \rho(x)_{inv}\| \quad (3.15)$$

que, por desigualdad del triángulo inversa, satisface

$$\|\rho(x)_{hist} - \rho(x)_{inv}\| \leq \|\rho(x)_{hist}\| + \|\rho(x)_{inv}\| = 2, \quad (3.16)$$

ya que las $\rho(x)$ están normalizadas.

El error fue estimado repitiendo el experimento numérico 200 veces obteniendo los resultados mostrados en el Cuadro 3.1.

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

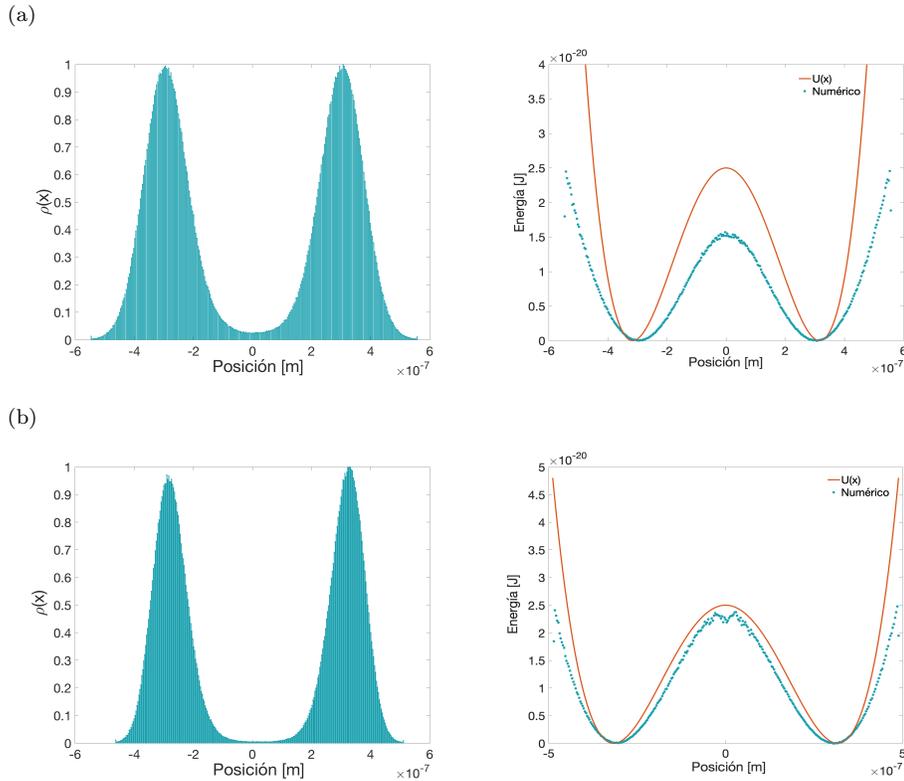


Figura 3.2: Histogramas de posición representando $\rho(x)$ (la densidad de probabilidad espacial) junto con la reconstrucción del potencial a la derecha. En la reconstrucción se muestra también la comparación del potencial teórico con el potencial numérico. $U(x)$ representa el potencial que se mostró en la Ec. 3.1. (a) Método de Euler-Maruyama, (b) Método de punto medio implícito.

Método	ϵ_x	Tiempo de cómputo
Euler-Maruyama	0.1369	9.94 seg
Punto medio implícito	0.0899	144.3 min

Cuadro 3.1: Error ϵ_x y tiempos de cómputo de las simulaciones, realizadas con una computadora con un procesador intel i5 3.2 GHz quad-core con 8 GB en RAM para cada método. El Δt es de 0.01.

El error en la estimación del potencial surge de la manera en la que estamos planteando el problema. En nuestro caso nosotros ya conocemos la forma del potencial, con base en éste realizamos las simulaciones para obtener así la reconstrucción del mismo, por lo que esta reconstrucción debe tener la misma forma del potencial que propusimos. El error en este caso, surge entonces de la

CAPÍTULO 3. ESTUDIO NUMÉRICO DE LA TRAMPA DE DOBLE POZO

diferencia entre el potencial numérico y el teórico propuesto. Aquí cabe mencionar el por qué de este proceso de alguna manera cíclico. En la naturaleza muchas veces nos encontramos con potenciales de los cuales desconocemos su forma, tomemos el caso que nos concierne. Si tenemos dos pinzas ópticas muy próximas entre sí, esperaríamos con ésto estar formando un doble pozo de potencial, sin embargo, si la potencia no es la misma en ambos, obtenemos una asimetría en el doble pozo. Saber si en nuestro arreglo experimental se nos presenta una asimetría es muy difícil tomando sólo como base la intensidad de los haces, además de que la forma también depende de la separación de los pozos (la cual afecta directamente la altura de la barrera que los separa). Es por ello que se recurre a la reconstrucción con base en la posición de la partícula.

Volviendo a la estimación del error, del Cuadro 3.1 podemos notar que en Punto medio, ϵ_x es menor en comparación al otro método. Estos resultados se pueden comparar con las gráficas mostradas en la Fig. 3.2, y es aquí donde podemos hablar de la estimación del error comparativo con el potencial teórico. En la gráfica que corresponde a la reconstrucción del potencial obtenida con el método de Euler-Maruyama, se observa que los puntos obtenidos con el experimento numérico caen sobre la curva teórica en la región cercana al centro de los pozos. Sin embargo, para el resto de la forma del potencial, los puntos de la reconstrucción numérica caen bastante alejados y la altura de la barrera es menor que en el caso teórico. En el caso de punto medio al contrario, es mejor la reconstrucción del potencial, ya que podemos observar que al igual que en Euler-Maruyama, los puntos de la reconstrucción que caen en la región cercana a los pozos son lo esperado por la teoría, y así lo siguen siendo salvo en la región más cercana a la cima de la barrera. Al igual que en Euler la altura de la barrera es más baja que el caso teórico, sin embargo en este caso se acerca más a lo esperado teóricamente. Este análisis complementa a la estimación del error ϵ_x , concluyendo la precisión de punto medio implícito con respecto a Euler-Maruyama.

Estos resultados, nos motivan a inclinarnos por el método de punto medio para resolver este problema. Sin embargo, cabe recordar que el método de punto medio se utilizó para resolver el caso general (es decir, sin considerar sobre amortiguamiento), y Euler-Maruyama fue utilizado para el caso en cuestión considerando sobre amortiguamiento. Además es importante considerar que los tiempos de cómputo para ambos casos son bastante discrepantes, siendo mucho mayor en el caso del punto medio. Es por ello que por eficiencia, el método del punto medio es preferible, además de que si se trabaja con un caso que no presenta sobre amortiguamiento, este es el caso a utilizar y el método que presenta mejores resultados [8], pero si se conoce que el caso con el que se trabaja presenta sobre amortiguamiento, se puede utilizar el método de Euler-Maruyama, el cual es rápido y eficiente.

La reconstrucción del potencial depende mucho de la estadística del muestreo, es por ello que el número de repeticiones del experimento es de 200. Cada

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

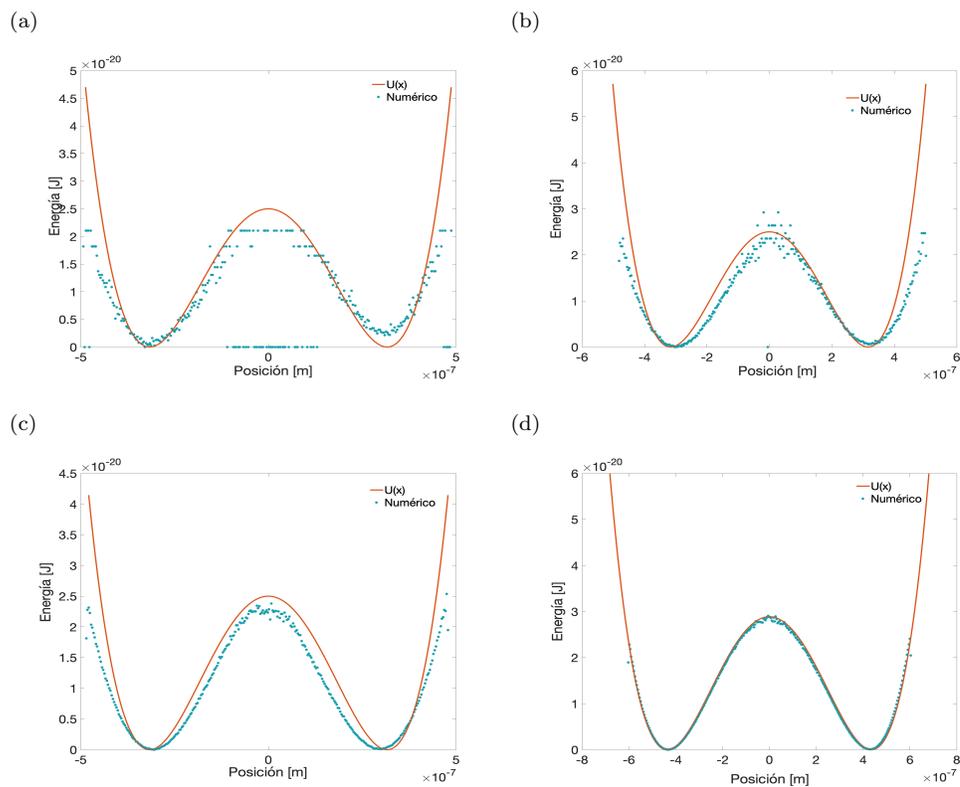


Figura 3.3: Reconstrucción del potencial con (a) 1 realización, (b) 10 realizaciones, (c) 100 realizaciones y (d) 1000 realizaciones. Simulaciones realizadas por el método de punto medio implícito. $U(x)$ representa el potencial que se mostró en la Ec. 3.1.

uno de éstos recaba 10000 datos de posición, a partir de los cuales se genera un histograma, obteniendo al final del experimento 200 histogramas. Después de promediar éstos se reconstruye el potencial. Este tratamiento en la estadística es lo que genera una mayor precisión en la reconstrucción del pozo. En la Fig. 3.3 se puede apreciar el como varía la precisión en la reconstrucción del potencial en función del número de realizaciones. Podemos notar también que al aumentar el número de realizaciones la dispersión en la cima de la barrera va decreciendo. Si tomamos, como la Fig. 3.3d 1000 realizaciones la dispersión decrece notablemente, sin embargo ya con 200 realizaciones el tiempo de cómputo es de 144 minutos, con 1000 realizaciones fue alrededor de 12 horas, y el cambio además no es tan significativo, por ello fue más eficiente utilizar 200 realizaciones para este trabajo.

3.2.2. La forma del potencial

El potencial propuesto para nuestro problema esta dado por la Ec. 3.1, donde a y b , son los parámetros a modificar para obtener distancias distintas en la separación en los pozos, como también una profundidad mayor en ellos. Si la separación entre los pozos se modifica, la altura de la barrera en el potencial

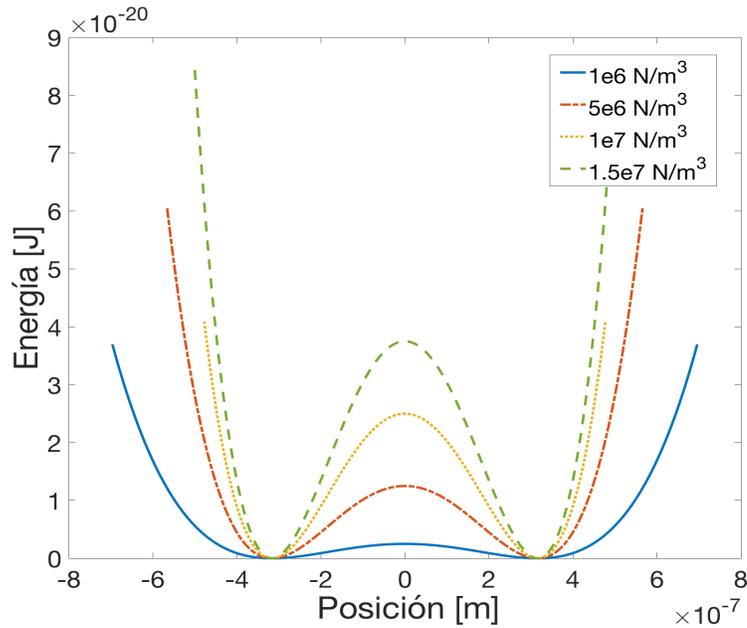


Figura 3.4: Forma del potencial teórico para diferentes valores de a , con $b = 1 \times 10^{-13} \text{ m}^2$.

se modifica a su vez, haciéndose más pequeña si se juntan, y más grande si se separan. Si en cambio, la separación entre pozos es constante, pero aumentamos

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

la profundidad de los pozos, la altura de la barrera aumenta si incrementa la profundidad, y disminuye si decrece la misma. Este parámetro en el experimento se controla con el valor de la potencia del láser. En el caso de nuestra simulación si reescribimos al potencial de la Ec. 3.1 de la forma

$$U(x) = a \left(\frac{x^2}{2} - \sqrt{\frac{b}{2}}x \right) \left(\frac{x^2}{2} + \sqrt{\frac{b}{2}}x \right), \quad (3.17)$$

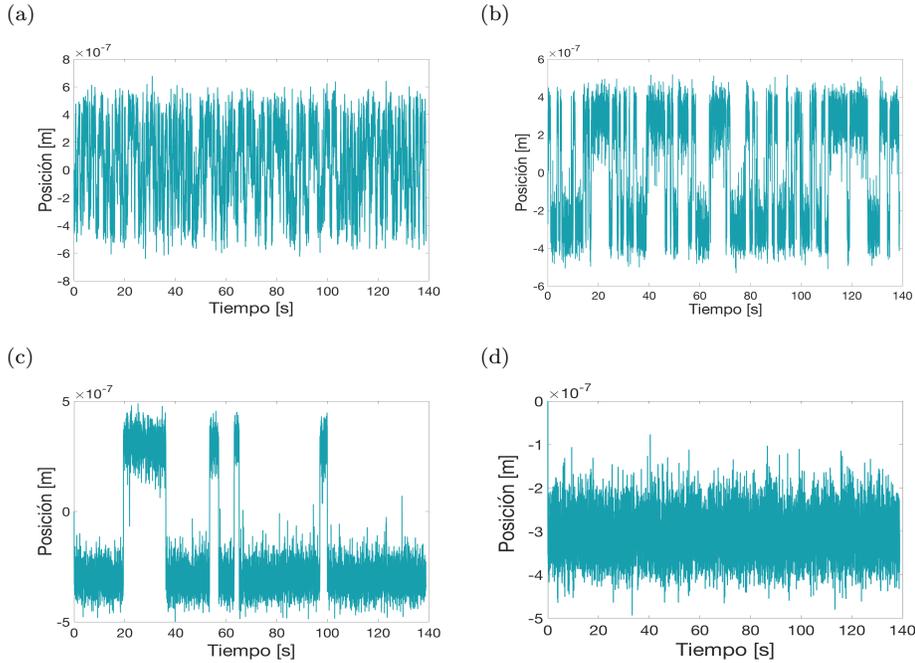


Figura 3.5: Gráficas de posición vs. tiempo para distintos valores de a , con $b = 1 \times 10^{-13} \text{m}^2$. (a) $a = 1 \times 10^6 \text{N/m}^3$, (b) $a = 5 \times 10^6 \text{N/m}^3$, (c) $a = 1 \times 10^7 \text{N/m}^3$ y (d) $a = 1,5 \times 10^7 \text{N/m}^3$.

vemos que al variar independientemente las variables a y b , se puede llegar a obtener diferentes formas del potencial, cambiando la distancia que separa a los pozos y la profundidad de los mismos con respecto a la barrera. El aumento y disminución de la altura de la barrera produce un cambio en la razón de salto de la partícula entre los pozos. Esta variación se presenta en los resultados mostrados a continuación.

Comenzaremos este análisis observando cual es el papel de cada una de éstas variables en la forma del potencial, analizando primero la repercusión de modificar el parámetro a . Para este caso b es constante, y usaremos el valor que hemos estado usando para nuestras simulaciones hasta ahora.

CAPÍTULO 3. ESTUDIO NUMÉRICO DE LA TRAMPA DE DOBLE
POZO

En la Fig. 3.4 se puede ver que al modificar el parámetro a de nuestra ecuación se modifica la altura de la barrera, y la posición en los pozos permanece constante. Lo importante en este análisis, es que lo único que se modifica al variar este parámetro es la altura de la barrera y la curvatura de los pozos. En el experimento, cuando aumentamos la intensidad del láser, aumentamos las fuerzas que atrapan a la partícula y con ello la barrera entre los pozos es más grande, por esto el parámetro a de nuestra ecuación podríamos relacionarlo con la intensidad del láser en el experimento. Ahora bien, ya que conocemos mejor como modifica el parámetro a la forma del potencial, la siguiente cuestión sería saber cómo repercute ésto en la razón de salto de la partícula.

En la Fig. 3.5a podemos observar que para un valor de $a = 1 \times 10^6 N/m^3$, la partícula salta muy frecuentemente entre los pozos. Ésto es por que la barrera es lo suficientemente baja como se puede apreciar en la Fig. 3.4 con la línea continua, lo cual permite que la partícula salte sin mayor problema de un pozo a otro. Para valores entre $5 \times 10^6 N/m^3$ y $1 \times 10^7 N/m^3$ la altura de la barrera permite que la partícula salte moderadamente en un intervalo de tiempo largo. Conforme la profundidad de los pozos va aumentando, los saltos de la partícula se vuelven menos frecuentes, al punto en el que la partícula pueda quedarse atrapada en

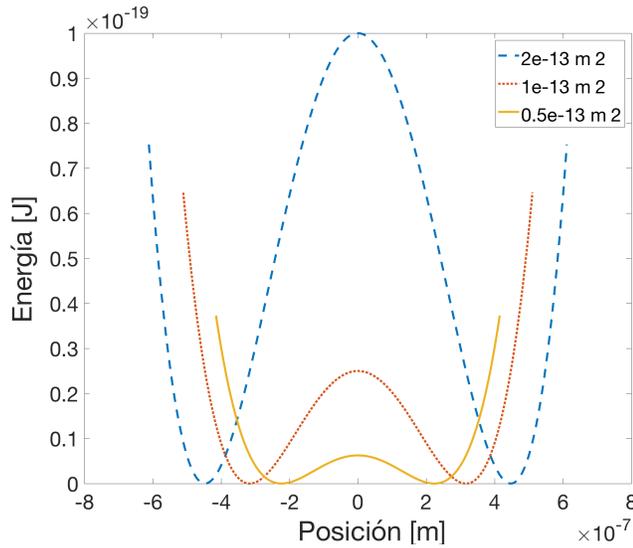


Figura 3.6: Forma del potencial teórico para diferentes valores de b , con $a = 1 \times 10^7 N/m^3$.

un sólo pozo o perderse en el salto, que es lo que sucede en el experimento real. La Fig. 3.5d muestra el rastreo de posición de la partícula a lo largo del tiempo para un valor de $a = 1,5 \times 10^7 N/m^3$, aquí se puede apreciar que la partícula se queda atrapada en uno de los pozos sin posibilidad de escapar. Esto es lo que sucede en el caso de una sola trampa óptica.

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

Veamos ahora el caso en el que a es constante y toma el valor de $1 \times 10^7 N/m^3$, con b es el parámetro a modificar. La Fig. 3.6 muestra la variación de la forma del potencial con respecto al cambio de b . Algo muy importante que se hace notar al comparar los resultados de la Fig. 3.4 y la Fig. 3.6 es que el aumentar o disminuir b se modifica la separación entre los pozos, además de la altura de la barrera. Si volvemos a relacionar este parámetro con lo que sucede en el experimento real, podemos pensar que esto es lo mismo que sucedería al separar los pozos, un parámetro que si se puede controlar en el laboratorio como se verá en el capítulo siguiente. Este cambio como se espera, se ve reflejado también en la dinámica de la partícula. En la Fig. 3.7a vemos que la partícula presenta saltos muy frecuentes, algo similar a lo que observamos cuando variamos con a la altura de la barrera a niveles bajos. En la Fig. 3.7b tenemos un valor de dos

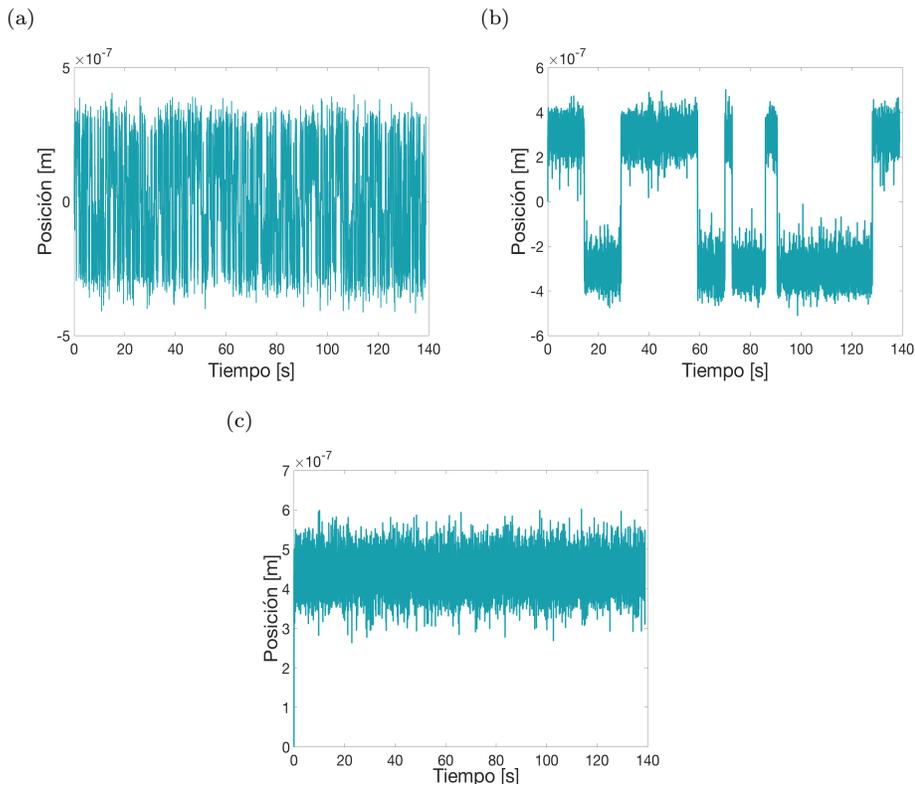


Figura 3.7: Gráficas de posición vs. tiempo para distintos valores de b , con $a = 1 \times 10^7 N/m^3$. (a) $b = 0,5 \times 10^{-13} m^2$, (b) $b = 1 \times 10^{-13} m^2$ y (c) $b = 2 \times 10^{-13} m^2$.

veces b del valor anterior, y el comportamiento de la partícula cambia bastante, ya que aquí los saltos de ésta se vuelven menos frecuentes, teniendo con ésto una permanencia mayor en cada uno de los pozos. En la Fig. 3.7c se ve como es que

el rastreo de la posición de la partícula se asemeja mucho al comportamiento que tendría si estuviera atrapada en un sólo pozo, esto por que la altura de la barrera es muy alta, y los pozos tienen una separación bastante grande entre sí.

3.2.3. La tasa de transiciones

Continuando con el problema del doble pozo, es necesario calcular la tasa de transiciones de la partícula entre los pozos para acercarnos a la solución del problema de Kramers.

Para una partícula browniana sobreamortiguada en un potencial $U(x)$, la tasa de transición propuesta por Kramers[25] es

$$W^K = W_0^K \exp\left(-\frac{\Delta U}{k_B T}\right) \quad (3.18)$$

con W_0^K el prefactor de Kramers y ΔU la altura de la barrera, que para el caso 3-dimensional está dado por [25]

$$W_0^K = \frac{|\omega_s^{(1)}| \omega^{(1)} \omega^{(2)} \omega^{(3)}}{2\pi\gamma \omega_s^{(2)} \omega_s^{(3)}} \quad (3.19)$$

siendo $\omega_s^{(i)}$ y $\omega^{(i)}$ las frecuencias características de la barrera y los pozos respectivamente, e $i = 1, 2, 3$ las dimensiones. En la ecuación γ es $6\pi\eta R$, con R el radio de la partícula y η la viscosidad. En nuestro caso, sólo consideramos una dimensión, por lo que el prefactor se reduce a[9]

$$W_0^K = \frac{|\omega_s| \omega}{\gamma} \quad (3.20)$$

además consideramos que nuestro potencial es simétrico y ω es la misma para ambos pozos. Con esto, uno puede calcular la tasa de transición de un pozo en una dimensión. Experimentalmente, la tasa de transición se obtiene a partir de un histograma de tiempos de residencia y ajustando por mínimos cuadrados ¹ una distribución de Poisson. Se espera que una distribución de tiempos de residencia tenga la forma

$$\rho(\tau_r) = \lambda e^{-\lambda\tau_r} \quad (3.21)$$

donde τ_r es el tiempo de residencia, $\lambda = 1/\bar{\tau}$, con $\bar{\tau}$ el tiempo medio de residencia. Por lo tanto λ corresponde a la tasa de transición medida, que llamaremos a partir de ahora W_{meas}^k , por usar la misma notación que [25]. Para la obtención de esta variable se utiliza un histograma de los tiempos de residencia, contabilizando a su vez el número de saltos de la partícula. A este histograma se le realiza un ajuste exponencial de la forma $\rho(\tau) = A \exp(-\lambda\tau)$. Donde el error de este ajuste viene directamente de los intervalos de confianza del mismo.

¹Para el ajuste se utilizó la función de mínimos cuadrados de matlab *lqcurvefit*.

3.2. DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA EN UN DOBLE POZO DE POTENCIAL

Las frecuencias características para los pozos se obtuvieron mediante la relación $\omega^2 = U''(x_e)/m$, con m la masa de la partícula y x_e representa el punto metaestable del potencial. Para la barrera se ocupa la misma relación cambiando $U''(x_e)$ por $|U''(x_s)|$, con x_s la posición de la barrera. Esto cambia la expresión de la ecuación 3.20 a

$$W_0^k = \frac{\sqrt{U''(x_e)U''(x_s)}}{\gamma}. \quad (3.22)$$

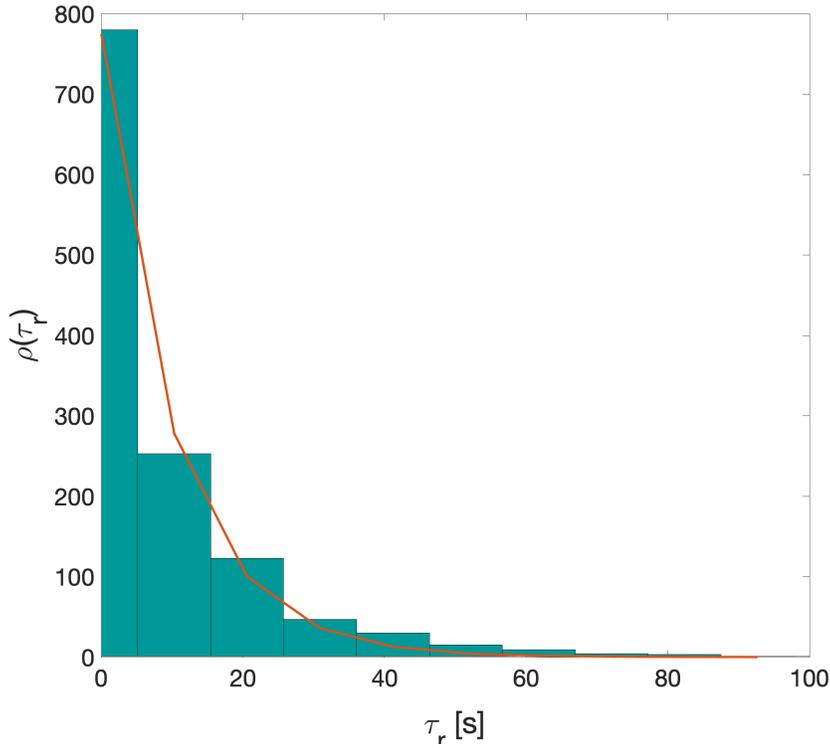


Figura 3.8: Histograma de tiempo de residencia con un número de eventos (saltos) de $N = 1527$ y un intervalo de bin de $\frac{1}{10}$. La curva representa el ajuste exponencial realizado.

Utilizando el método de punto medio, y tomando $R = 1 \times 10^{-6}m$ y $\eta = 3,4 \times 10^{-3}Pa.s$, se obtuvieron los resultados mostrados en el Cuadro 3.2 para la tasa de transición, esto para la separación establecida con los parámetros a y b definidos en las secciones anteriores. Los valores de $U''(x_e)$ y $U''(x_s)$ varían con respecto a la forma del potencial. Estos resultados, como ya se mencionó, se obtuvieron por medio de un ajuste exponencial al histograma de tiempos de residencia mostrado en la Fig. 3.8. Para este caso se contabilizaron 301 saltos de la partícula, que llamaremos número de eventos y lo representaremos con la

CAPÍTULO 3. ESTUDIO NUMÉRICO DE LA TRAMPA DE DOBLE
POZO

letra N. El intervalo de tiempo en el que se evalúa el histograma lo llamaremos bin, y el tamaño de este bin afecta a la estadística ya que a bins más grandes el ajuste se vuelve menos preciso.

W^k [s^{-1}]	W_{meas}^K [s^{-1}]	ΔW_{meas}^K
0.0803	0.0995	0.01

Cuadro 3.2: Tasa de transiciones teórica y numérica para un potencial de la forma $U(x) = a(x^4/4 - bx^2/2)$, con $a = 1 \times 10^7$ N/m³ y $b = 1 \times 10^{-13}$ m².

Vamos ahora a cambiar la altura de la barrera variando el parámetro a , ya que como vimos en la sección 3.2.2, es el que produce un cambio en la altura de la barrera sin modificar la posición de los pozos. La Fig. 3.9a muestra el cambio en la tasa de transición con respecto a la altura de la barrera y la Fig. 3.9b muestra la correspondencia entre los valores teóricos y numéricos.

En la Fig. 3.9.b la línea representa la coincidencia de la teoría con los datos numéricos, con esto podemos ver que los resultados obtenidos caen muy cercanos a esta línea, por lo que esto confirma la teoría de Kramers de transición de estados. La relación que muestra la Fig. 3.9.a confirma la idea intuitiva de que a barreras más grandes, la razón de salto es menor.

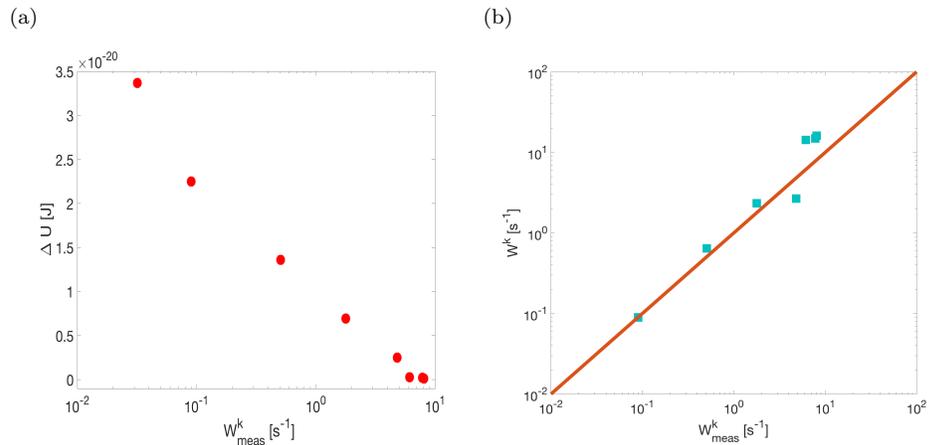


Figura 3.9: (a) Relación de la altura de la barrera de potencial ΔU con la tasa de transición numérica W_{meas}^k . (b) Relación de la tasa de transición obtenida numéricamente W_{meas}^k , con la teórica W^k . La línea representa lo esperado si los resultados numéricos coincidieran con la teoría.

Capítulo 4

Montaje experimental de una trampa óptica de doble pozo

Una vez realizados los experimentos numéricos se prosiguió a realizar la parte experimental de este trabajo. Uno de los primeros pasos a tomar en esta parte experimental fue la caracterización de los parámetros de la viscosidad y constante de restitución, que utilizaríamos en el experimento y, en el caso de la viscosidad, también en la parte numérica. Utilizando el arreglo experimental de doble pozo se obtuvieron las tasas de transición de cada uno de los pozos al otro, con las trampas generadas por un láser de 1064 nm y después se realizó de nuevo el experimento con un láser de 532 nm, el por qué de esto se explicará más adelante en el capítulo. Como primer punto a abordar, se explicará como fue realizado el montaje experimental, ya que éste fue utilizado para cada parte del trabajo, desde la caracterización de los parámetros hasta el experimento del doble pozo en sí.

4.1. Arreglo experimental de doble trampa

Para generar experimentalmente una doble trampa óptica, se usó un láser con longitud de onda $\lambda = 1064 \text{ nm}$ marca Ekspla, con él se atraparon partículas de $1,99 \mu\text{m}$ de poliestireno, inmersas en agua. El arreglo experimental es el mostrado en la Fig. 4.1. Para el experimento se utilizó un espejo a la salida del haz para asegurar que la alineación del camino óptico del láser fuera paralela a la superficie de la mesa donde fue montado el experimento. Posterior a este espejo se colocó un arreglo de lentes ($L_1 + L_2$) el cual se utilizó para colimar el haz, ya que el láser utilizado en el experimento no estaba colimado. En seguida de estos lentes de colimación se colocó una placa $\lambda/2$ y un interferómetro Mach-Zender montado con dos cubos polarizadores, por lo cual obtuvimos dos haces

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

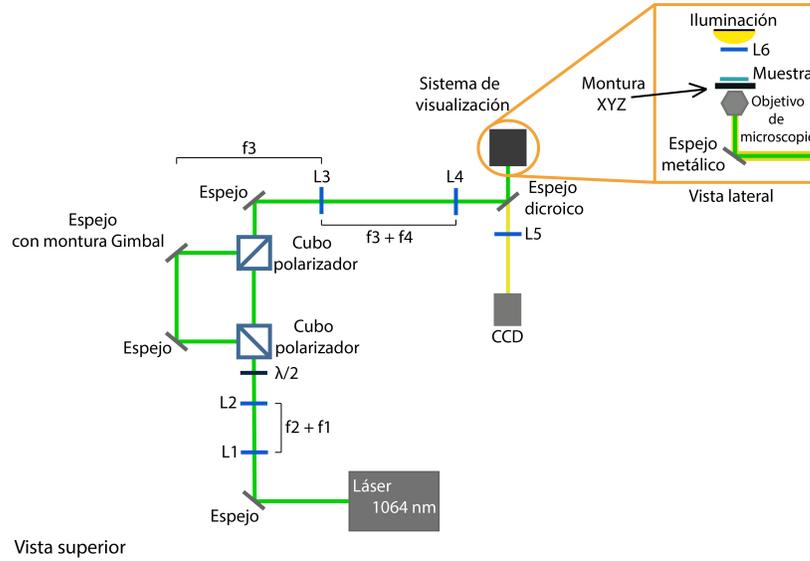


Figura 4.1: Arreglo experimental para la generación del doble pozo. La distancia que separa la lente L_4 de la apertura posterior del objetivo es la distancia focal f_4 . Las distancias focales de cada uno de los lentes son $f_1 = 2,5 \text{ cm}$, $f_2 = 5 \text{ cm}$, $f_3 = 10 \text{ cm}$, $f_4 = 17,5 \text{ cm}$, $f_5 = 20 \text{ cm}$, $f_6 = 2,5 \text{ cm}$.

con polarizaciones perpendiculares, con la placa $\lambda/2$ se rotaba la polarización del haz antes del interferómetro y con ello se obtuvo una potencia del 50% del haz original en cada uno de los dos haces nuevos. En el interferómetro se colocó una montura Gimbal para el espejo más próximo al lente L_3 para con ella mover la posición del haz en la muestra y asegurar la alineación. El camino óptico del láser que pasa por la montura Gimbal formará la trampa que nombraremos r2 y el camino óptico que pasa por la montura que dejaremos fija la nombraremos r1. Se utilizó un segundo arreglo de lentes ($L_3 + L_4$) que se colocó posterior a la generación de los dos haces y se utilizó para ensanchar los haces y con ello asegurarnos de que éstos llenaran en su totalidad la apertura posterior del objetivo de microscopio. Este arreglo de lentes hacia el objetivo de microscopio forma un sistema 4f, como se discutió en el capítulo 2. El arreglo 4f se utilizó para no perder la alineación en el experimento y poder mover uno de los haces para modificar la separación entre los pozos.

En el interferómetro tipo Mach-Zender, uno de los caminos ópticos del láser es 2 cm más largo que el otro, para deshacernos de la coherencia temporal del láser, y esto, junto con la polarización ortogonal de los dos haces generados, aseguran la no interferencia de ambos en el objetivo de microscopio. Cabe destacar que en principio los dos haces no interfieren debido que la polarización de uno es ortogonal a la polarización del otro, como se mencionó, pero esta configuración

4.2. CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DE PARÁMETROS

utilizada en el arreglo es una precaución más para evitar cualquier tipo de interferencia remanente debido a componentes no paraxiales en el foco del objetivo de microscopio, por la alta apertura numérica la cual es de 1.4.

Finalmente, para el sistema de visualización, y la generación de la pinza, se utilizó un objetivo de inmersión en aceite, de amplificación 100x, con apertura numérica de 1.4, marca Edmund Optics. La orientación de este sistema en donde fue montado el objetivo se escogió hacia arriba, de forma perpendicular a como había estado viajando el haz en el arreglo. Posterior al objetivo se colocó la muestra, la cual iba montada en una base de traslación XYZ. Por encima de la muestra se colocó la iluminación, la cual consistió en una luz led enfocada con una lente con distancia focal de 2.5 cm que sirve como condensador. El espejo dicroico mostrado en la Fig. 4.1 se utilizó para reflejar el haz del láser hacia la muestra y permite pasar la imagen de lo que se observa con el microscopio a una CCD marca Thorlabs modelo DCU223C. Con ella se registró en video la dinámica de la partícula. Esta parte del sistema de visualización, que corresponde a la $CCD + L5$, tuvo una orientación paralela al plano de la mesa donde fue montado el experimento, al contrario de la parte donde estaba montado el objetivo.

Antes del experimento, fue necesaria una caracterización de los parámetros involucrados en el fenómeno, como la constante de fricción, cuyo valor experimental fue utilizado también para las simulaciones del capítulo anterior, y la determinación de la constante de restitución de la pinza. Estas caracterizaciones, así como su montaje experimental, se explican detalladamente en las siguientes secciones.

4.2. Caracterización preliminar de parámetros

4.2.1. Estimación del coeficiente de viscosidad cinemática

Una de las maneras de conocer el coeficiente de viscosidad cinemática de una partícula es determinando la difusión de la misma en el medio. Ésto se hace midiendo el desplazamiento cuadrático medio (MSD). Para una mejor estadística, se utilizó el método descrito en [31]. El MSD se calcula generalmente con la ecuación

$$\overline{\Delta \vec{r}^2} = \overline{(x_i - x_0)^2} + \overline{(y_i - y_0)^2}, \quad (4.1)$$

es decir, se obtiene el promedio de las diferencias entre el paso inicial y los i -pasos que dio la partícula en el experimento. El refinamiento para éste propone que para cada valor de t se obtenga el promedio (sobre $n - k$ valores):

$$\overline{\Delta \vec{r}^2} = \overline{(x_{i+1} - x_i)^2} + \overline{(y_{i+1} - y_i)^2}, \quad (4.2)$$

con $i = 1, 2, \dots, n - k$, para $t = \Delta t$. Esto es posible por que el movimiento que presenta la partícula es browniano, por ello representa un proceso markoviano, es decir, cumple la propiedad de que la distribución de probabilidad del valor

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

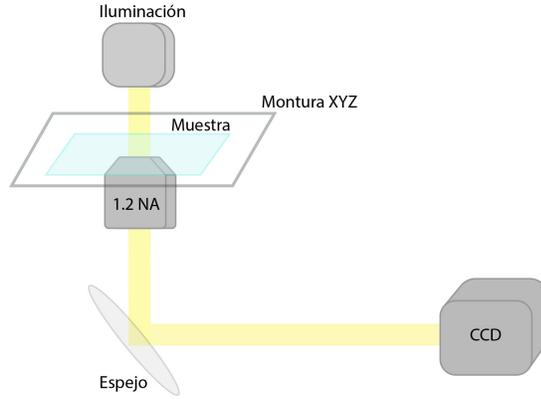


Figura 4.2: Arreglo óptico utilizado para la determinación del coeficiente de fricción efectivo.

futuro de la posición (la cual es aleatoria en este caso) depende únicamente de su valor presente, y no de la historia de esta variable. Con ésto, la estadística para $t = \Delta t$ es muy grande, pero mientras $t = k\Delta t$ es más grande, la estadística es más pobre. Por ello tomamos

$$\Delta \vec{r}_2^2 = (x_{i+2} - x_i)^2 + (y_{i+2} - y_i)^2 \text{ para } t = 2\Delta t \quad (4.3)$$

...

$$\Delta \vec{r}_k^2 = (x_{i+k} - x_i)^2 + (y_{i+k} - y_i)^2 \text{ para } t = k\Delta t \quad (4.4)$$

Los k valores de $\Delta \vec{r}^2$ se promedian con ello obteniendo el MSD refinado.

El montaje experimental utilizado para la determinación de este coeficiente es el mostrado en la Fig. 4.2. Éste es parte del arreglo que se utilizó más adelante en la caracterización de la constante de restitución de la pinza y en el experimento del doble pozo. Los datos fueron obtenidos mediante el rastreo de la posición de la partícula en un vídeo grabado por una cámara Thorlabs DCU223C. El rastreo se realizó por medio del programa `trackvideos.m`, hecho para `Matlab` (véase Apéndice B).

En la Fig. 4.3 se observa la comparación del MSD calculado con la Ec. 4.1 (izquierda) con el refinamiento (derecha) para el mismo experimento. Este refinamiento permite hacer un ajuste lineal más preciso. Para éste se tuvo una estadística del promedio de 1100 datos por cada punto. Este experimento fue repetido para varias partículas para mejorar aún más la estadística. Pensando solamente en el MSD, lo anterior es lo que se realiza normalmente, pero en el caso del MSD refinado, el repetir el experimento incrementa enormemente la estadística, especialmente para valores pequeños de t .

4.2. CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DE PARÁMETROS

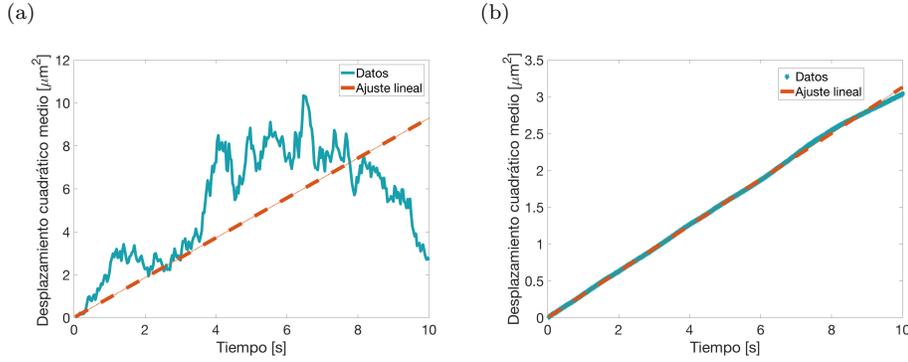


Figura 4.3: Gráficas de MSD con y sin refinamiento, del desplazamiento de una partícula de $2 \mu\text{m}$ de poliestireno en agua, ambas gráficas fueron obtenidas para el mismo experimento. (a) MSD sin refinamiento en función del tiempo con un ajuste lineal por el origen. (b) MSD con refinamiento en la estadística en función del tiempo con un ajuste lineal por el origen.

Una vez realizado lo anterior se procede a calcular el coeficiente de difusión. Para esto recordamos que la ecuación de difusión está dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho \quad (4.5)$$

cuya solución, suponiendo que las partículas se encuentran adyacentes ($\rho = \delta(x - x_0)$, para $t = 0$) es

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}, \quad (4.6)$$

este resultado representa la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición x a un tiempo dado t . Como $\bar{x} = 0$, la varianza es $\overline{(x - x_0)^2} = 2Dt$. Ésto para el caso unidimensional, en dos dimensiones σ está dada por $4Dt$. Por ésto, un cuarto de la pendiente del ajuste lineal que realizamos en la estadística representa el valor de la constante de difusión, es decir

$$D = \frac{\overline{\Delta r^2}}{4t}. \quad (4.7)$$

Finalmente, de la ecuación de Stokes-Einstein, la viscosidad cinemática está dada por

$$\eta = \frac{kT}{6\pi DR}. \quad (4.8)$$

Los resultados obtenidos siguiendo esta lógica se muestran en el Cuadro 4.1. Éste valor de η concuerda con lo reportado en la bibliografía [31] y es utilizado en todos los siguientes cálculos de cada experimento, así como en las simulaciones del capítulo anterior.

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA
DE DOBLE POZO

r [μm]	Δr	T [K]	D [$\frac{\mu\text{m}^2}{\text{s}}$]	ΔD	η [Pa.s]	$\Delta\eta$
1.0	0.03	298.15	0.0647	0.00065	0.0034	0.00011

Cuadro 4.1: Coeficiente de difusión y viscosidad obtenida por la relación de Stokes-Einstein para una partícula de diámetro de $2 \mu\text{m}$ inmersa en agua.

4.2.2. Determinación de la constante de restitución en una pinza óptica

Para obtener la constante de restitución de una pinza óptica uno puede optar por varios métodos. Uno de ellos es el atrapar una partícula y moverla continuamente en una dirección a una velocidad constante (moviendo la muestra en la que está inmersa), con esto se desplaza a la partícula una distancia Δx de su posición de equilibrio en la pinza. Como la fuerza de la pinza es una fuerza restitutiva se puede analizar por la ley de Hooke

$$F_H = -k\Delta x, \quad (4.9)$$

donde k representa la constante de restitución de la pinza. Ahora, observando el diagrama de la Fig. 4.4 se puede observar que el desplazamiento de la partícula en la dirección contraria al movimiento de la muestra se debe a la fuerza de arrastre. Para estudiar esta fuerza uno recurre a la ley de Stokes

$$F_S = 6\pi\eta Rv \quad (4.10)$$

con R el radio de la partícula y v su velocidad. La fuerza F_S y F_H son iguales, por lo tanto, igualando la Ec. 4.9 con Ec. 4.10 y despejando para k se obtiene

$$k = \frac{6\pi\eta Rv}{\Delta x} \quad (4.11)$$

con esta relación es que obtendremos la constante de restitución de la pinza. Cabe mencionar que en nuestro caso tenemos una doble trampa óptica, por lo cual habría que obtener una constante para cada pinza. En el experimento buscamos tener un doble pozo simétrico, por ello las constantes en principio deberían ser las mismas, sin embargo esto no siempre es posible debido a variaciones en la potencia producidas por los componentes ópticos utilizados en el arreglo, debido a esto fue importante obtener la constante para cada pinza y verificar que fueran similares. También cabe aclarar que una vez obtenida la doble trampa, las constantes se modifican por que el nuevo potencial no corresponde a los potenciales individuales, sin embargo esta caracterización sirve como referencia para tener un poco más de control en la forma del potencial. Las constantes k del doble potencial se calcularán en la siguiente sección para con ellas conocer la tasa de transición de la partícula. Las constantes fueron caracterizadas para el arreglo mostrado en la Fig. 4.1, que fue el utilizado en el experimento del doble

4.2. CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR DE PARÁMETROS

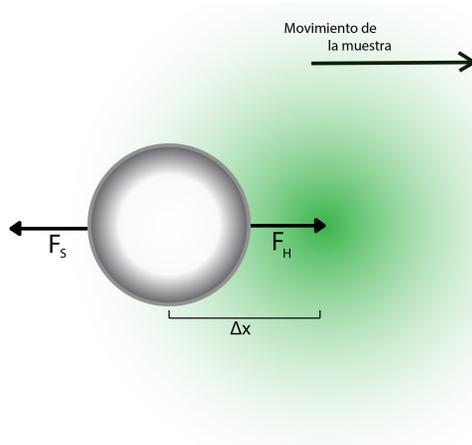


Figura 4.4: Diagrama de las fuerzas presentes en el desplazamiento de la partícula al mover la muestra en una dirección a velocidad constante. F_S representa la fuerza de Stokes y F_H la fuerza de Hooke. Δx representa el desplazamiento de la partícula de su posición de equilibrio con respecto al centro del haz gaussiano.

pozo. En la montura de traslación XYZ se colocó un motor en uno de los ejes paralelo al plano de la mesa, marca Newport, para mover la muestra de manera controlada en esa dirección.

Los resultados obtenidos son como la gráfica ilustrada en la Fig. 4.5a. Ésta representa el desplazamiento de la partícula en función del tiempo con la muestra moviéndose a una velocidad de $0,08 \text{ mm/s}$ y teniendo una potencia del láser medida a la salida del objetivo de microscopio de $3,807 \text{ mW}$. El movimiento que tiene la muestra en el experimento es periódico con respecto a su posición inicial, esto se hace para mejorar la estadística. Para tomar el desplazamiento con respecto a la posición $x = 0$, la de equilibrio de la partícula, se toman las distancias a ambos lados y se obtiene el promedio para todas éstas. Este experimento fue repetido para distintas velocidades con 5 diferentes potencias. El resultado de esto son gráficas como la mostrada en la Fig. 4.5b donde la pendiente es la constante de restitución de la pinza para esa determinada potencia.

Como se mencionó anteriormente, este experimento se realizó en ambos brazos del láser, para poder lograr un doble pozo simétrico. En la Fig. 4.5c y 4.5d se puede ver la comparación de las potencias de cada trampa en función de la constante de restitución determinada. La Fig. 4.5c corresponde a la trampa r1 (la que no moveremos en el experimento) y la Fig. 4.5d a la trampa r2, que pasa por la montura Gimbal. Podemos observar que el comportamiento en ambos es lineal y muy parecido. En el experimento manejamos una potencia de 4 mW , por lo que estos resultados nos comprueban que estamos trabajando en la región lineal de la trampa, esto nos asegura que estamos trabajando en el

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

régimen lineal de la fuerza de confinamiento, lo que nos permite aproximar la fuerza óptica por 4.9.

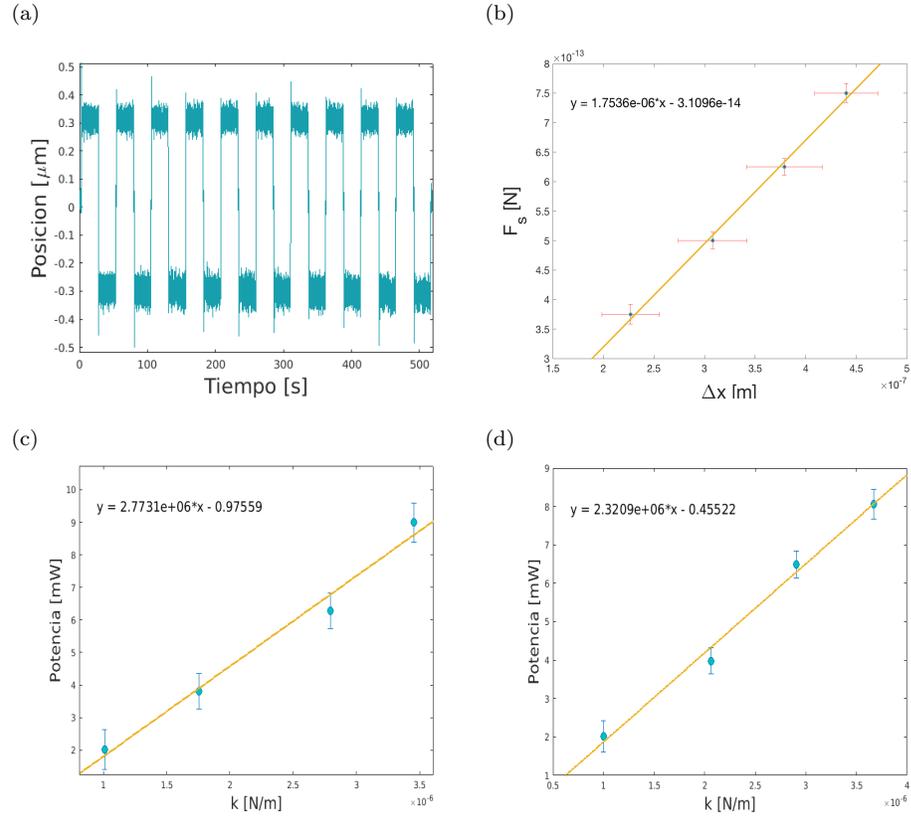


Figura 4.5: (a) Rastreo de la posición de la partícula confinada en r2 en función del tiempo, moviéndose la muestra, con un movimiento periódico, a una rapidez de 0.08 mm/s alternando de dirección, y teniendo una potencia del láser de 3.807 mW. (b) Fuerza de Stokes F_s en función del desplazamiento de la partícula confinada en r2 de su región de equilibrio en la pinza. La caracterización de la constante para cada potencia se realizó determinando el desplazamiento para cuatro distintas velocidades. Se muestra también la potencia de la trampa en función de la constante de restitución para la (c) trampa r1, y (d) trampa r2

4.3. Reconstrucción del potencial óptico a partir de la dinámica de la partícula

Se ha ido mencionando a lo largo de este capítulo lo que se utilizó para obtener la dinámica de la partícula en el doble pozo. Uno de los componentes fundamentales fue todo el sistema de visualización montado en el arreglo que se muestra en la Fig. 4.1, incluyendo la CCD. Los vídeos recopilados por la cámara fueron analizados por el programa *trackvideos*, del cual se habla en el Apéndice B, y finalmente los datos obtenidos con éste son las posiciones en pixeles de la partícula. La conversión a micras se realizó utilizando un portaobjetos graduado, lo que dio como factor de conversión la equivalencia $1 \text{ pixel} = 0.045 \text{ micras}$.

Hemos estado mencionando que el objetivo es obtener un doble pozo simétrico, como el que se obtuvo en las simulaciones, sin embargo, esto en la práctica es más complicado y se deben cuidar muchos detalles para conseguirlo. En nuestro caso, se logró la generación del doble pozo, pero la simetría resultó más complicada de obtener.

En la Fig. 4.6 se presenta lo obtenido con una separación entre los pozos mínima. Con esto se puede comprobar que sucede lo mismo que en el caso numérico y la partícula parece confinada en un solo pozo de potencial. Para este caso la potencia medida del láser en la muestra es de 4.079 mW en el brazo con montura Gimbal y de 4.404 mW en el brazo con el haz fijo. Ésta variación en la potencia es lo que nos llevará a un problema en la simetría del doble pozo, sin embargo, corregir esta asimetría resultó bastante complicado debido a las limitaciones en el instrumental utilizado. Con ésto nos referimos a que la montura de la placa retardadora tenía una graduación mínima de 2 grados, por ello el modificar la posición de la placa para conseguir la misma potencia en los dos brazos del haz resultaba muy complicado.

Después de modificar la separación entre los haces (algo también complicado debido a que esto se realizaba manualmente moviendo uno de los tornillos de la montura Gimbal) se obtuvieron las gráficas mostradas en la Fig. 4.7. Con ésto podemos ver los saltos que da la partícula de un pozo a otro. Ésta gráfica es similar a las obtenidas en el caso numérico, salvo por la frecuencia de salto. En la reconstrucción del potencial (Fig. 4.7c) se puede apreciar que la forma de éste no representa un pozo simétrico, y más bien uno de los pozos tiene una profundidad mayor con respecto al otro.

Una de las razones por la cual buscábamos una simetría en el doble pozo es el estudio de los estados metaestables. En un potencial simétrico la estabilidad de la partícula en un pozo se ve afectada por la presencia del otro, por lo que en ambos pozos la partícula presenta una estabilidad temporal y es por ello que los llamamos metaestables. En nuestro caso, debido a que uno de los pozos tiene una potencia mayor que el otro, la estabilidad en este sistema estaría presente

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

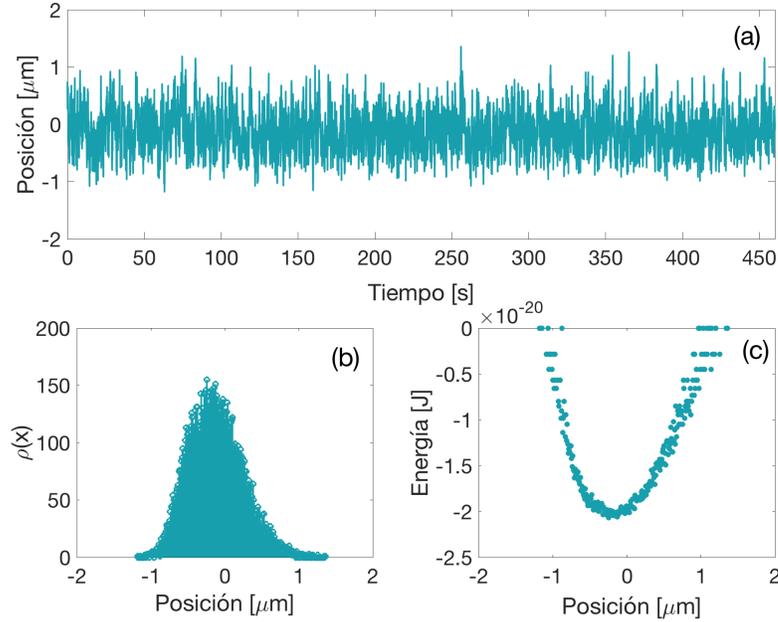


Figura 4.6: (a) Rastreo de la posición de la dinámica de la partícula en el doble pozo en función del tiempo. La separación entre los pozos para este caso es mínima. (b) Densidad de probabilidad de posición de la partícula, con esto se puede observar que la partícula ve sólo un pozo. (c) Reconstrucción del potencial a partir de la dinámica de la partícula.

en el pozo más profundo.

A pesar de esta asimetría, se obtuvo satisfactoriamente un arreglo de doble pozo, por lo que éstos datos se pueden analizar para hacer un estudio del problema de Kramers. Lo que se espera obtener en este caso es que la tasa de transición para el pozo con potencia 4.079 mW sea mucho mayor que la trampa con una potencia de 4.404 mW, ya que habrá más saltos del estado metaestable al estable. El estudio de la tasa de transición sí se hará entonces para cada uno de los pozos, en contraste con el caso numérico del capítulo 2, ya que ahora la tasa de transición no será la misma para ambos pozos.

La tasa de transición de Kramers para este caso se muestra en el Cuadro 4.2. En él se puede ver lo que mencionamos antes, la tasa de transición del pozo r1 (llamaremos así al pozo más profundo a partir de ahora) es mucho mayor que la del pozo r2 (usamos la notación representada en la Fig. 4.7). En este cuadro se muestran los valores de la tasa de transición, tanto para los valores teóricos como los experimentales de cada uno de los pozos.

4.3. RECONSTRUCCIÓN DEL POTENCIAL ÓPTICO A PARTIR DE LA DINÁMICA DE LA PARTÍCULA

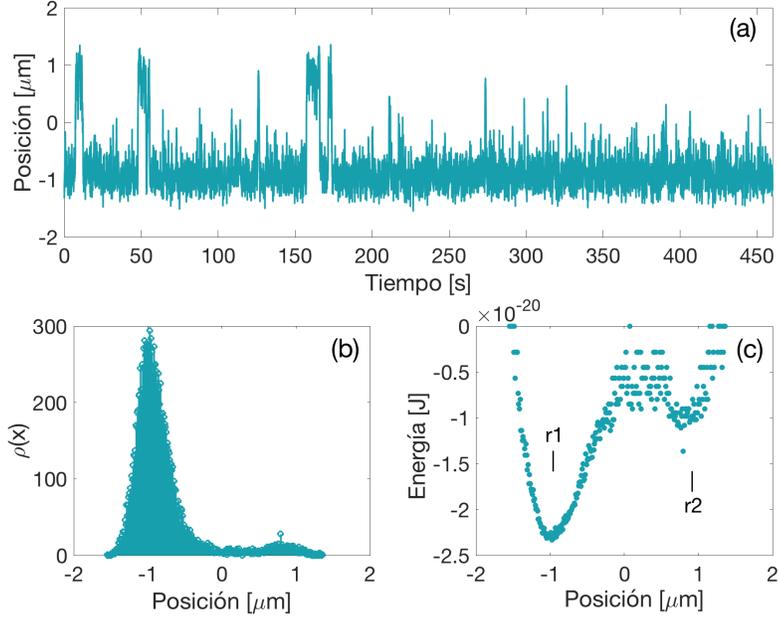


Figura 4.7: Segunda posición entre los haces del doble pozo. Las gráficas mostradas representan lo mismo que en la figura anterior. (a) Rastreo de la posición de la dinámica de la partícula en el doble pozo en función del tiempo. (b) Densidad de probabilidad de posición de la partícula. (c) Reconstrucción del potencial a partir de la dinámica de la partícula.

	W^K [s^{-1}]	ΔW^K	W_{meas}^K [s^{-1}]	ΔW_{meas}^K
r1	0.1571	0.1244	0.2624	0.0790
r2	3.199	2.84	3.9559	1.709

Cuadro 4.2: Tasa de transiciones para el doble pozo. En este caso $r1$ y $r2$ representan a cada uno de los pozos, la simbología es la usada en la Fig. 4.7. W^K representa la tasa teórica y W_{meas}^K la tasa medida experimentalmente

En las gráficas de la Fig. 4.8 se muestra el histograma de los tiempos de residencia de la partícula en cada pozo, con el ajuste exponencial que se hizo para cada una, a partir del cual se obtuvo la tasa de transición. Este ajuste no es bueno, por que el muestreo estadístico es pobre, si se hubiera aumentado el número de experimentos realizados, resultaría un ajuste mejor con respecto a lo obtenido.

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

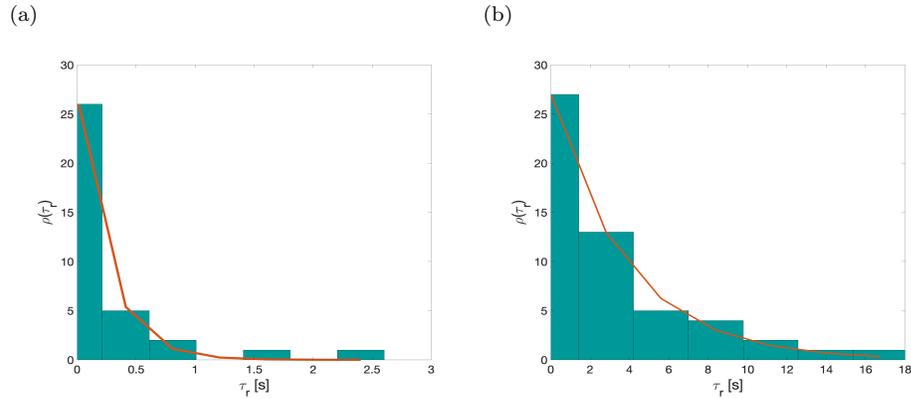


Figura 4.8: Histograma de tiempos de residencia de las partículas en cada pozo, para el caso del láser de 1064 nm. (a) pozo r1, (b) pozo r2.

Como se mencionó antes, el manipular la potencia en los pozos para lograr la simetría fue algo muy complicado. Se realizaron otros experimentos con este mismo arreglo para lograrlo, sin embargo, el mostrado fue uno de los que dio mejores resultados. Durante la realización de esta tesis, se montó otro sistema de pinzas ópticas que generaban un doble pozo, pero con mucho más control sobre las variables que lo componían y con un láser de longitud de onda de 532 nm. Entre éstas se encuentra la separación entre los pozos, que en el primer arreglo modificábamos manualmente moviendo uno de los tornillos de la montura Gimbal. En el nuevo sistema se utilizó un motor a pasos, con un desplazamiento en nanómetros. Otra variable muy importante es la graduación de la montura de la placa retardadora, que en el caso anterior era de 2 grados, mientras que en este nuevo caso la resolución era de 0.05 grados, lo que nos dio mayor control en la potencia de ambos brazos. También se monitoreó la temperatura del laboratorio durante el experimento y se utilizó un objetivo inmersión en agua con apertura numérica de 1.2. En el caso del láser infrarrojo la temperatura del agua incrementaba con la presencia de éste, debido a que el agua absorbe la luz en esta longitud de onda, lo que crear corrientes de convección afectando la dinámica de la partícula. Con el láser de 532 nm esto no ocurre ya que no se absorbe por lo que también representa una mejora en el arreglo. En esta nueva versión del experimento se utilizaron partículas de poliestireno, pero de 1.5 μm de diámetro.

La dinámica de la partícula en esta nueva trampa de doble pozo se muestra en la Fig. 4.9. Haciendo un comparativo de esta gráfica con la mostrada en la Fig. 4.7a podemos observar que la partícula presenta una mayor cantidad de saltos entre los pozos, y además no se aprecia una preferencia notable de la partícula en alguno de los pozos, lo que lleva a pensar que en este caso se logró una simetría del potencial, sin embargo se tiene que reconstruir el potencial para poder afirmar esto último.

4.3. RECONSTRUCCIÓN DEL POTENCIAL ÓPTICO A PARTIR DE LA DINÁMICA DE LA PARTÍCULA

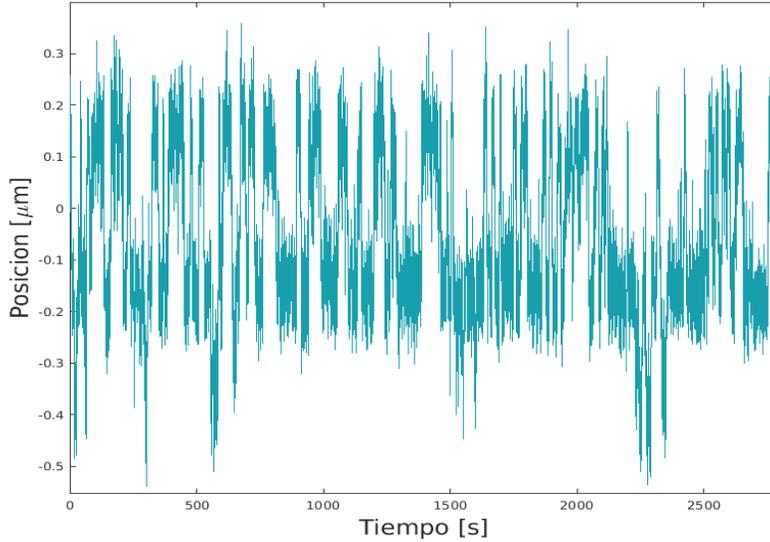


Figura 4.9: Gráfica de la dinámica de la partícula en el doble pozo generado por un láser verde de 532 nm en función del tiempo.

	$W^K [s^{-1}]$	ΔW^K	$W_{meas}^K [s^{-1}]$	ΔW_{meas}^K
r1	3.923	1.851	4.238	0.87
r2	4.672	2.296	6.775	0.1505

Cuadro 4.3: Tasa de transición para el doble pozo generado con un láser verde de 532 nm. r1 y r2 representan a cada uno de los pozos.

La reconstrucción del potencial se obtuvo del análisis de alrededor de 20 videos y promediando los potenciales resultantes de la dinámica de la partícula para cada uno de éstos. El haber contado con una cantidad de videos mucho mayor que en el experimento anterior para la pinza infrarroja resultó en una mejor estadística que contribuyó para una mejor reconstrucción del potencial. El potencial obtenido se muestra en la Fig. 4.11. Podemos ver que, aunque la asimetría sigue presente, la estadística mejoró considerablemente, lo que dio lugar a una mejor reconstrucción del potencial.

Los resultados para la tasa de transición de cada pozo se muestran en el Cuadro 4.3 y el ajuste exponencial al histograma obtenido para los tiempos de residencia para cada pozo se muestran en la Fig. 4.10. Hagamos de nuevo una comparativa de los resultados obtenidos para este potencial y el anterior, pero

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

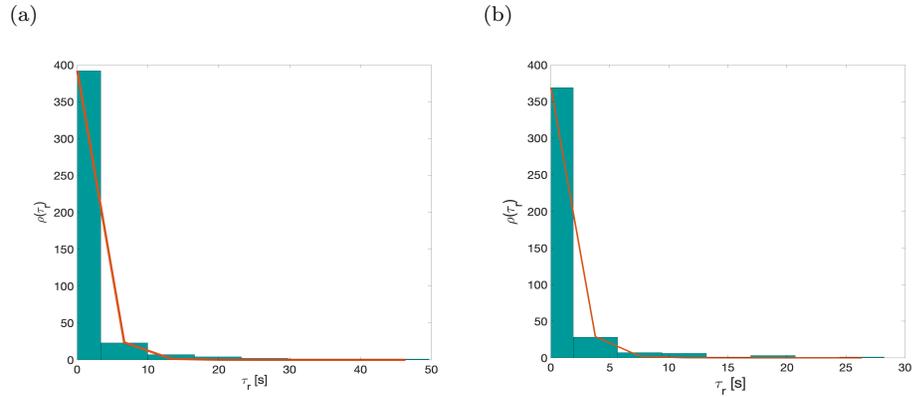


Figura 4.10: Histograma de tiempos de residencia de las partículas en cada pozo, para el caso del láser de 532 nm. (a) pozo r1, (b) pozo r2.

esta vez analizando un poco más la forma del potencial obtenido.

Llamemos ΔU_i , $i = 1, 2$, a la altura del fondo de cada uno de los pozos a la cima de la barrera. En el Cuadro 4.4 se muestran estas diferentes alturas del potencial. Podemos observar que la diferencia $\Delta U_r = \Delta U_1 - \Delta U_2$ es mucho más grande en el infrarrojo, mientras que en la pinza del láser verde sólo difiere en 2×10^{-21} J. Debido a esta asimetría, a la partícula le resulta más complicado escapar del pozo r2 de la trampa infrarroja, y es por ello que la tasa de transición es más pequeña comparada con la del pozo r1.

Ahora, del Cuadro 4.3 vemos que la diferencia de la tasa de transición para los pozos obtenidos con el láser con $\lambda = 532$ nm, varía en sólo 1 s^{-1} , en contraste con la diferencia del infrarrojo, la cual es mucho mayor. Con esta comparación y la anterior referente a la forma del potencial podemos concluir que a pesar de no haber obtenido un doble pozo simétrico con este nuevo arreglo, sí se disminuyó la asimetría del doble pozo.

	ΔU_1 [J]	ΔU_2 [J]	ΔU_r [J]
Infrarrojo	$1,72 \times 10^{-20}$	$4,26 \times 10^{-21}$	$1,3 \times 10^{-20}$
Verde	$6,58 \times 10^{-21}$	$4,74 \times 10^{-21}$	$1,84 \times 10^{-21}$

Cuadro 4.4: Alturas del fondo de cada uno de los pozos a la cima de la barrera y su comparación entre ambos.

En la Fig. 4.11 del lado izquierdo se puede notar un “hombro” en la forma del potencial, algo que no se esperaba que apareciera. La aparición de esta anomalía se puede deber a posiblemente un reflejo del haz de la pinza que generaba

4.3. RECONSTRUCCIÓN DEL POTENCIAL ÓPTICO A PARTIR DE LA DINÁMICA DE LA PARTÍCULA

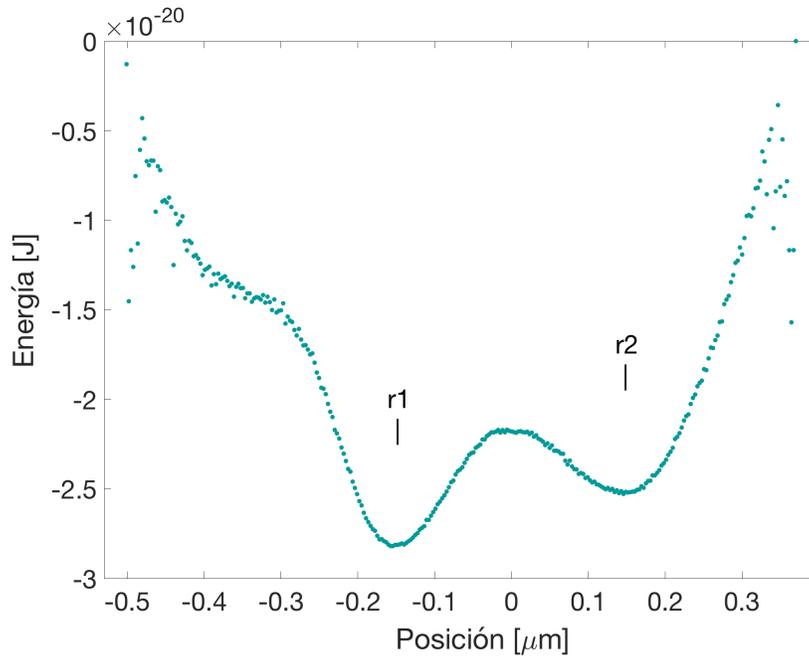


Figura 4.11: Potencial obtenido de un promedio de los potenciales reconstruidos a partir de la dinámica de la partícula en 20 videos.

una trampa “fantasma”, con una potencia menor a la de las trampas del doble pozo. En los videos que se obtuvieron de la dinámica de la partícula, se puede notar que, entre los saltos que da en cada uno de los pozos, ésta sale eventualmente de estas posiciones dando un salto a una tercera posición. Estos saltos eran ocasionales y no se presentaban en todos los videos, por lo que al hacer la estadística del total de los videos este tercer pozo prácticamente desaparece dejando solo entrever una especie de hombro en el potencial. El reflejo que se menciona como hipótesis de la aparición de este pozo pudiera ser producido por el espejo anterior al objetivo de microscopio. Dado que el espejo tiene un cierto espesor y el recubrimiento reflejante se encuentra en la parte posterior, el primer contacto del láser es con la primer superficie de éste, al ser una superficie de vidrio pudiera estar generando este reflejo fantasma que produce un tercer pozo.

Algo bastante curioso al reconstruir el doble pozo, tanto con el láser infrarrojo y el de 532 nm es que la asimetría prevalece, y no sólo esto, sino que además el pozo de la izquierda en ambos casos resulta ser más prominente que el de la derecha. Esto pudiera deberse al reflejo mencionado antes que se generaba debido al espejo. En el caso de IR (infrarrojo), no hubo tanta estadística en el experimento por lo que la reconstrucción del pozo fue muy pobre, por ello no se pudo llegar a observar si había o no presencia de este hombro, como en el caso

CAPÍTULO 4. MONTAJE EXPERIMENTAL DE UNA TRAMPA ÓPTICA DE DOBLE POZO

del láser verde. Sin embargo, la magnitud del pozo izquierdo con respecto al derecho pudiera sugerir que sí, ya que una hipótesis sería que el reflejo del doble pozo se esta superponiendo con el pozo izquierdo, generando un incremento en la potencia del láser en esa zona.

También, otra de las razones del bajo muestreo y del por qué fue complicado seguir realizando experimentos con estos arreglos fue que la partícula fácilmente escapaba del doble pozo, por ello a pesar de grabar un buen número de videos, muchos eran desechados debido al escape de la partícula, o también por que la partícula subía en el plano de propagación del láser, debido a la intensidad del mismo, y al subir ésta se desenrocaba en el video y ya no era posible seguir realizando el rastreo de posición. La razón de todo esto puede deberse en gran medida la composición de las partículas utilizadas. En la literatura [36][25] se reporta que las partículas utilizadas son de sílice, mientras que las partículas que empleadas en estos experimentos fueron de poliestireno. Las partículas de sílice son considerablemente más “pesadas” que las de poliestireno (densidad óxido de sílice: $2,65 \text{ g/cm}^3$, densidad poliestireno: $1,04 \text{ g/cm}^3$) lo que provoca que la fuerza de esparcimiento del láser, a las potencias utilizadas, no logre empujar a las partículas fuera de la región de atrapamiento, y la fuerza de gradiente logre confinarlas.

Estas consideraciones finales serían muy necesarias a tomar en cuenta para futuros experimentos de este tipo, para con ello obtener un buen muestreo y poder reconstruir, a partir de la dinámica de la partícula, el potencial al cual se encuentra sujeta esta misma.

Capítulo 5

Conclusiones

El objetivo de esta tesis, fue el de investigar de forma teórica y experimental los resultados de Kramers sobre la tasa de transición en estados metaestables, lo cual se logró satisfactoriamente. Ésta se calculó de forma numérica, ligando los resultados con la teoría, y lo mismo se hizo para la parte experimental. En lo que corresponde a los objetivos particulares, se hace una breve discusión sobre cada uno a continuación:

- Se resolvió numéricamente la ecuación de Langevin para una partícula en presencia de un potencial de doble pozo, de la forma $U(x) = a(x^4/4 + bx^2/2)$. Las soluciones numéricas se obtuvieron por medio de dos métodos distintos, y se evaluó la precisión de cada uno de éstos por medio del error ϵ_x , calculado en base a la densidad de probabilidad espacial invariante y el error comparativo del potencial teórico con el potencial numérico.
- Se analizaron dos casos para las simulaciones: tomando en cuenta el caso sobre amortiguado y el caso general.
- Se reconstruyó satisfactoriamente la forma del potencial usando la dinámica de la partícula en función del tiempo, y se hizo un estudio de la forma que debe tener el potencial para observar el comportamiento deseado, tomando en cuenta la altura de la barrera que separa los dos pozos y la distancia entre ellos.
- Utilizando el estudio numérico se obtuvo la tasa de transición de la partícula en el doble pozo, comparando el resultado obtenido con la teoría establecida por Kramers. Con esto se realizó una gráfica que se ajusta a una recta $y = x$, siendo x y y , la tasa de transición numérica y la teórica respectivamente, ésto para diferentes formas del potencial, lo que nos indica que los resultados obtenidos se corresponden de buena forma con la teoría. Ésto permite corroborar que es un buen sistema modelo para verificar los resultados realizados por Kramers.

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES

- Se obtuvieron los coeficientes de difusión de las partículas de poliestireno de $2 \mu m$ inmersas en agua que se utilizaron en el experimento, y este resultado fue utilizado para los cálculos numéricos y el análisis de los resultados obtenidos experimentalmente.
- Se obtuvieron las constantes de restitución de una pinza óptica para diferentes potencias del láser, obteniendo con esto una gráfica lineal de la potencia en función de la constante, lo que confirma que se trabajó en el régimen lineal de la fuerza de atrapamiento.
- Se realizó un montaje experimental de una trampa óptica de doble pozo con un láser de $1064 nm$, atrapándose con ella una partícula de poliestireno de $2 \mu m$, y se rastreó la posición de la misma en función del tiempo. Con base en este rastreo se reconstruyó el potencial óptico satisfactoriamente. Un objetivo que se buscaba lograr en este punto era generar un doble pozo simétrico con las pinzas ópticas. Sin embargo, la complejidad de este objetivo recayó principalmente en las limitantes del instrumental utilizado para el montaje, por lo que en la reconstrucción del potencial se observó que era muy difícil lograr la simetría de los pozos con este arreglo. Se optó entonces por montar un nuevo arreglo que permitiera una mayor precisión en el control de la potencia del láser en cada uno de los brazos de la pinza, así como también mayor control en la temperatura, la alineación y las vibraciones en el ambiente que afectaban seriamente al experimento.
- Un segundo montaje experimental fue realizado utilizando un láser de $532 nm$ y partículas también de poliestireno, pero de $1,5 \mu m$. Al reconstruir el potencial en base a la dinámica de la partícula se obtuvo que la asimetría en el doble pozo seguía presente. Sin embargo, ésta disminuyó considerablemente respecto a la obtenida con el experimento anterior. Al reproducir el experimento dos veces saltó a la vista un detalle en el montaje experimental que condujo a la obtención de un doble pozo asimétrico, el cual es el tipo de partículas. En la bibliografía[25, 36] se menciona que las partículas que se atrapan para arreglos de doble pozo son partículas de sílice, las cuales tienen una densidad mayor que las partículas de poliestireno, y a su vez un peso relativo mayor dentro del fluido. El problema que presentan las partículas de poliestireno es que al pasar por el punto silla entre los dos pozos se escapan fácilmente ya que se ven más afectadas por la fuerza de esparcimiento debido a la baja densidad que poseen.
- La tasa de transición fue calculada satisfactoriamente en ambos experimentos, obteniéndose valores consistentes con los obtenidos en el caso numérico.

Apéndices

Apéndice A

El método de Ziggurat

En general, es fácil recurrir al algoritmo generado por G. Marsaglia comúnmente conocido como el método polar[22], ya que es un método superior al de Box-Muller[11] y tiene una fácil implementación, sin embargo un algoritmo un tanto más complejo, pero con una mayor eficiencia es el algoritmo de Ziggurat, también creado por G. Marsaglia et al.[23]. Éste algoritmo lo llaman de rechazo de muestreo. El funcionamiento de éste es básicamente generar un punto en una distribución ligeramente más grande que la distribución deseada. Esta distribución un tanto más grande de la cual el algoritmo escoge valores, está formada por n regiones de igual área. La región superior esta formada por $n - 1$ rectángulos que cubren la parte superior de la distribución deseada, y la parte inferior es la base de los $n - 1$ rectángulos junto con la cola (*tail*) de la distribución. Una vez generado este punto, prueba si se encuentra dentro de la distribución deseada, si no es así, vuelve a intentar generando otro punto. Dado finalmente un punto aleatorio que se encuentre debajo de la curva de la densidad de probabilidad, la coordenada x de éste, es el número aleatorio con la distribución deseada.

La función de densidad de probabilidad, de la distribución normal está dada por

$$f(x) = ce^{-\frac{x^2}{2}} \tag{A.1}$$

donde $c = 1/(2\pi)^{1/2}$ es una constante de normalización.

Los lados derechos de los $n - 1$ rectángulos se encuentran en los puntos z_k , para $k = 2, \dots, n$. Teniendo $f(z_1) = 1$ y $f(z_{n+1}) = 0$, la altura de la k -ésima sección es $f(z_k) - f(z_{k+1})$. Marsaglia propone en su artículo $n=256$ secciones, sin embargo comenta que es válido utilizar también $n=128, 64, \dots$ etc., el cambiar el número de secciones afecta la velocidad del algoritmo, pero no la precisión.

La base del algoritmo es la siguiente:

1. Se escoge una capa de números aleatorios i tal que $0 \leq i < n$.

APÉNDICE A. EL MÉTODO DE ZIGGURAT

2. Para $x = U_0 x_i$ si $x < x_{i+1}$ devuelve x .
3. Si $x = 0$ regresa un valor de la cola.
4. Si $[f(x_{i-1}) - f(x_i)]U_1 < f(x) - f(x_i)$ devuelve x .
5. De otra manera se escogen nuevos valores aleatorios y se regresa al paso 1.

U_0 y U_1 son variables aleatorias uniformes tal que $U_0, U_1 \in [0, 1)$.

Para los valores de la cola se utiliza el siguiente algoritmo:

1. Sea $x = -\ln(U_1)/x_1$.
2. Si $-2\ln(U_2) > x^2$, devuelve $x + x_1$.
3. De otra forma regresa al paso 1.

En este trabajo se utilizó la función `randn` de Matlab, la cual hace uso de este algoritmo. El código implementado en Matlab para esta función luce parecido al siguiente[26]

```
j = randi(256);
u = 2*rand-1;
if abs(u) < sigma(j)
    r = u*z(j);
    r = tip_computation
end
```

donde `randi` regresa una distribución uniforme de enteros pseudo-aleatorios y `sigma()` una función que calcula valores singulares de la respuesta en frecuencia de un sistema dinámico (véase [18]). En el código, `tip_computation` hace referencia al algoritmo para calcular la cola, éste itera de la manera que se explicó anteriormente.

Apéndice B

Tracker

El programa *tracker* es un programa escrito para Matlab, proporcionado por Alejandro V. Arzola, el cual procesa imágenes identificando a las partículas del video y calculando los centroides para cada una de éstas, y a partir de la posición del centroide obtiene las coordenadas de la posición de la partícula en función del tiempo. El programa primero requiere una introducción a los parámetros de la partícula antes del rastreo de la posición.

```
%
close all
clear all
addpath tracker_matlab
parametros.dir =pwd;
parametros.fps=32; % frames del video
parametros.namevideo='0.72_2'; % nombre del video
parametros.nframe=2; % cuadro de prueba
parametros.lo=86; %(valor bajo de grises actual, valor de la dona)
parametros.hi=107; %(valor alto en grises actual, valor del fondo)
parametros.gc=155; %(valor en grises del centro)
parametros.D1=65; %diametro aprox. exterior de la partícula
parametros.D2=29; %diametro del hueco en la partícula
parametros.w=4; %nos dice que tan rapido caen las colas que definen
a la partícula

parametros.trs=2.5; %valor minimo de pico
rect=tracking_prueba_video_v3_h(parametros, 'full');
%rect=tracking_prueba_video_v3_h(parametros);
parametros.rect=rect;
save(['param_' parametros.namevideo '.mat'], 'parametros');

%%
close all
```

APÉNDICE B. TRACKER

```
clear all
parametros='0.72_2';
video='0.72_2';
track_v3_h(video,['param_' parametros],video,'on');%

function track_v3_h(namesave,parametros,namevideo,varargin)
% Encuentra los centroides de las particulas, con lo que obtiene las
% trayectorias para cada una de las particulas.
%
% videofile: nombre del video sin .avi
% parametros: Archivo de parametros (p.ej. 'parametros.mat')
% generados con track_prueba_video.m
% namesave: nombre base con que se guardan los datos
% varargin{1}: 'off' no muestra los cuadros del tracking
% como se va dando (es mas rapido)
% varargin{2}: fps
% varargin{3}: number of frames
%
% =====Salidas=====
% c-namesave.txt: son los centroides ordenados a la secuencia de cuadro
% r-namesave.txt: son los centroides ordenados de acuerdo al numero de
% particula
% #-namesave.txt: los centroides para cada # de particula. La primera
% columna es el numero de cuadro, la segunda x y la tercera y.
% p-namesave.txt: parametros utilizados en el rastreo
% namesave.fig: figura de las trayectorias (x,y)
param=load(['parametros','.mat']);
pardata=param.parametros;
dir=pwd;
videofile=namevideo
xyloObj=VideoReader([dir filesep videofile '.avi']);
fps=1;%xyloObj.FrameRate;
nframes = xyloObj.NumberOfFrames;
vidHeight = xyloObj.Height;
vidWidth = xyloObj.Width;

optshow='on';

disp(['num_of_frames: ' num2str(nframes) 'fps: ' num2str(fps)])

frameinicial=2;
framefinal=nframes;
nVarargs = length(varargin);
```

```

if ~(nVarargs==0)
if nVarargs==1
optshow=varargin{1};
else
optshow=varargin{1};
frameinicial=varargin{2};
framefinal=varargin{3};
end
end
dirread=[dir filesep videofile 'track_' num2str(frameinicial)
'-' num2str(framefinal) filesep];
mkdir(dirread);
delete([dirread 'r-' namesave '.txt'])
delete([dirread 'c-' namesave '.txt'])
delete([dirread 'error-' namesave '.txt'])

```

```

paso=1;
%%%%%%%%%%
D1=pardata.D1;
D2=pardata.D2;
w=pardata.w;
trs=pardata.trs;
hi=pardata.hi;
lo=pardata.lo;
gc=pardata.gc;
kc=(gc-hi)/(hi-lo)+1;
%disp(kc);
rect=pardata.rect;
frame0=read(xyloObj, framefinal);
%rect=[1,1,vidHeight,vidWidth];
indcrop1=round(rect(2):(rect(2)+rect(4)));
indcrop2=round(rect(1):(rect(1)+rect(3)));

```

```

ls=size(frame0);
% use the whole area
%full=0; %in other case ~(full==0)
%if ls(1)>rect(2)+rect(4)||ls(2)>rect(1)+rect(3)||full==1
%   indcrop1=1:ls(1);
%   indcrop2=1:ls(2);
%end

```

```

%=====
%centroids
%=====

```

APÉNDICE B. TRACKER

```

for j=frameinicial:paso:framefinal
disp([num2str(j) ', ' num2str(nframes)]);
cri = read(xyloObj,j);
frame=cri(indcrop1,indcrop2);
im0=double(frame);
imin0=double(hi-im0)/(hi-lo);%figura con el contraste invertido
invframe=imin0;
cri=invframe;

[c1,c2,~,res]=centroid_hhole(cri,D1,D2,w,trs,kc,j,namevideo);
% find maxima

if size(c1)

datos=[c2,c1,ones(size(c1,1),1).*(j-1)];
% y agrega una columna con el numero de cuadro
dlmwrite([dirread 'c-' namesave '.txt'],datos,'-append','delimiter',
'\t','precision','%5f','newline','unix')
% crea los archivos con al informacion
end

if strcmp(optshow,'on')
figure(1)
%subplot(2,1,1);imagesc(res);axis equal;axis tight;
%subplot(2,1,2);
imagesc(frame);axis equal;axis tight;hold on;
plot(c2,c1,'*k','MarkerSize',10);
for l1l=1:length(c2)
rectangle('Position',[c2(l1l)-D1/2,c1(l1l)-D1/2,D1,D1],'Curvature',1)
end
title(num2str(j))
hold off
end

end

clear mov c1 c2
%=====
%tracking particles
%=====
dat=dlmread([dirread 'c-' namesave '.txt']);
%=====
param.dim=2; %number of dimensions
param.good=round(0.25*(framefinal-frameinicial));

```

```

% minimum number of frames to consider for good particle
param.mem=3; %minimum number of frames to lose a particle
param.quiet=1; %1: if you dont require any text
diffusion=29;%round(D1/1.2);
% maximum number of pixels to be diffused beteewen frames
tr=track(dat ,diffusion ,param);

%=====
dlmwrite([dirread 'r-' namesave '.txt'],tr,'delimiter',
'\t', 'precision', '%.6f');
%=====
%plots the result of the tracking and save the tracking of every
% particle in a file
%=====
%
cri=frame0(indcrop1 ,indcrop2);
hh=figure(2);set(hh,'visible','off')
imagesc(cri);axis equal;axis tight;axis xy %plot the last frame
hold on
nmax=tr(end,4);
for j=1:nmax;
indn=find(tr(:,4)==j);
clr=rand(1,3);
plot(tr(indn,1),tr(indn,2),'color',clr,'LineWidth',1);
time=tr(indn,3)*1/fps;
dlmwrite([dirread num2str(j) '-' namesave '.txt'],[time, tr(indn,[1,2])],
'delimiter', '\t', 'precision', '%.6f');
data(j).t=time;
data(j).x=tr(indn,1);
data(j).y=tr(indn,2);
end
save([namesave '_' num2str(frameinicial) '-' num2str(framefinal)
'.mat'],'data');

%%% hold off
saveas(hh,[dirread 'fig-' namesave '.png'])
saveas(hh,[dirread 'fig-' namesave '.fig'])

```

Bibliografía

- [1] A. Brünger, C. L. Brooks III, and M. Karplus. (1984). *Stochastic boundary conditions for molecular dynamics simulations of st2 water*, Chem. Phys. Lett., 105, pp. 495–500.
- [2] Ashkin, A. (1970). *Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure*. Physical Review Letters, 24(4), pp.156-159.
- [3] Ashkin, A. (1992). *Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime*. Biophysical Journal, 61(2), pp.569-582.
- [4] Ashkin, A. and Dziedzic, J. (1975). *Optical Levitation of Liquid Drops by Radiation Pressure*. Science, 187(4181), pp.1073-1075.
- [5] Bouchaud, J. and Cont, R. (1998). *A Langevin approach to stock market fluctuations and crashes*. The European Physical Journal B, 6(4), pp.543-550.
- [6] Brenig, W. (1989). *Brownian motion: Langevin equation, in Statistical Theory of Heat: Nonequilibrium Phenomena*, ed. W. Brenig (Springer, Berlin, Heidelberg, Berlin), pp. 69–72.
- [7] Bressloff, P.C. (2010). *Metastable states and quasicycles in a stochastic Wilson-Cowan model of neuronal population dynamics*. Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics, 82 5 Pt 1, 051903.
- [8] Burrage, K., Lenane, I. and Lythe, G. (2007). Numerical methods for second-order stochastic differential equations. *siam j. sci. comput.*, 29(1), pp.245-264.
- [9] Curran, A., Lee, M., Padgett, M., Cooper, J. and Di Leonardo, R. (2012). *Partial Synchronization of Stochastic Oscillators through Hydrodynamic Coupling*. Physical Review Letters, 108(24).
- [10] Einstein, Albert. (1956) *Investigations on the theory of the Brownian movement* . Ed. Dover. N.Y. reimpresión.
- [11] G. E. P. Box and Mervin E. Muller. (1958). *A Note on the Generation of Random Normal Deviates*. The Annals of Mathematical Statistics, 29(2), pp. 610–611.

BIBLIOGRAFÍA

- [12] Hänggi, P., Talkner, P. and Borkovec, M. (1990). *Reaction-rate theory: fifty years after Kramers*. Reviews of Modern Physics, 62(2), pp.251-341.
- [13] J. Q. Toledo-Marín and G. G. Naumis. (2017). *Short time dynamics determine glass forming ability in a glass transition two-level model: A stochastic approach using Kramers' escape formula*. The Journal of Chemical Physics, 146(9) 094506.
- [14] Jones, P., Maragò, O. and Volpe, G. (2015) *Optical Tweezers Principles and Applications*. 1st ed. United Kingdom: Cambridge University Press, pp.19 - 65, 92 - 100, 146- 151.
- [15] Kappler, J., Daldrop, J., Brünig, F., Boehle, M. and Netz, R. (2018). *Memory-induced acceleration and slowdown of barrier crossing*. The Journal of Chemical Physics, 148(1), p.014903.
- [16] K. C. Newman, S. M. Block, (2004) *Optical Trapping*, Review Article, Review of scientific instruments, vol. 57, num. 9.
- [17] Kramers, H. A. (1940) *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions*. Physica 7, 284–304.
- [18] La.mathworks.com. (2018). *Singular values plot of dynamic system - MATLAB sigma- MathWorks United Kingdom*. [online] Disponible en: https://la.mathworks.com/help/control/ref/sigma.html?searchHighlight=sigma&s_tid=doc_srchttitle [Accedido el 19 Mar. 2018].
- [19] Lalley, S. (2018). *Brownian Motion*. [online] Stat.uchicago.edu. Disponible en: <http://www.stat.uchicago.edu/~lalley/Courses/385/01d/BrownianMotionCurrent.pdf> [Accedido el 18 Mar. 2018].
- [20] Lemons, D. and Langevin, P. (2002). *An introduction to stochastic processes in physics*. Baltimore: Johns Hopkins University Press.
- [21] Li, T., Kheifets, S., Medellin, D. and Raizen, M. (2010). *Measurement of the Instantaneous Velocity of a Brownian Particle*. Science, 328(5986), pp.1673-1675.
- [22] Marsaglia, G., Bray, T. (1964). *A Convenient Method for Generating Normal Variables*. SIAM Review, 6(3), 260-264. Retrieved from <http://www.jstor.org/stable/2027592>
- [23] Marsaglia, G. and Tsang, W. (2000). *The Ziggurat Method for Generating Random Variables*. Journal of Statistical Software, 5(8).
- [24] Marsden, J. and West, M. (2001). *Discrete mechanics and variational integrators*. Acta Numerica 2001, 10, pp.357-514.

- [25] McCann, L., Dykman, M. and Golding, B. (1999). *Thermally activated transitions in a bistable three-dimensional optical trap*. *Nature*, 402(6763), pp.785-787.
- [26] Moler, C. (2018). *The Ziggurat Random Normal Generator*. [online] Cleve's Corner: Cleve Moler on Mathematics and Computing. Disponible en: <https://blogs.mathworks.com/cleve/2015/05/18/the-ziggurat-random-normal-generator/> [Accedido el 19 Mar. 2018].
- [27] Neuman, K. and Block, S. (2004). *Optical trapping*. *Review of Scientific Instruments*, 75(9), pp.2787-2809.
- [28] N. Vercauteren. (2006), *Numerical investigation of solutions of Langevin equations*, Master thesis, Freie Universität Berlin, pp. 9-20.
- [29] Orlandini, E. (2011). *Langevin*. [online] Available at: https://userswww.pd.infn.it/~orlandin/fisica_sis_comp/langevin.pdf [Accessed 31 Jan. 2018].
- [30] Øksendal, B. (2003). *Stochastic Differential Equations*. 6th ed. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, pp.63-65.
- [31] Palacios Álvarez, S. (2010). El movimiento browniano matemático y el tangible (Licenciatura). Universidad Nacional Autónoma de México.
- [32] Protter, P. (1995). *Stochastic integration and differential equations*. Berlin: Springer-Verlag.
- [33] R. W. Pastor, B. P. Brooks, and A. Szabo. (1988). *An analysis of the accuracy of Langevin and molecular dynamics algorithms*, *Mol. Phys.*, 65, pp. 1409–1419.
- [34] Sali, A., Shakhnovich, E. and Karplus, M. (1994). *How does a protein fold?*. *Nature*, 369(6477), pp.248-251.
- [35] Shankar Ray, D. (1999) *Notes on Brownian motion and related phenomena*. ArXiv Physics e-prints arXiv:physics/9903033.
- [36] Simon, A. and Libchaber, A. (1992). *Escape and synchronization of a Brownian particle*. *Physical Review Letters*, 68(23), pp.3375-3378.
- [37] Stroescu, Ion and Hume, David B. and Oberthaler, Markus K. (2016). *Dissipative Double-Well Potential for Cold Atoms: Kramers Rate and Stochastic Resonance*. *Phys. Rev. Lett.*, 117(24), 243005.
- [38] van Rossum, S., Tena-Solsona, M., van Esch, J., Eelkema, R. and Boekhoven, J. (2017). *Dissipative out-of-equilibrium assembly of man-made supramolecular materials*. *Chemical Society Reviews*, 46(18), pp.5519-5535.
- [39] Volpe, G. and Volpe, G. (2013). *Simulation of a Brownian particle in an optical trap*. *American Journal of Physics*, 81(3), pp.224-230.

BIBLIOGRAFÍA

- [40] White, S. and Wimley, W. (1999). *Membrane protein folding and stability: Physical Principles*. Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure, 28(1), pp.319-365.
- [41] Young, P. (2018). *The leapfrog method and other “symplectic” algorithms for integrating Newton’s laws of motion*. [online] Young.physics.ucsc.edu. Disponible en: <http://young.physics.ucsc.edu/115/leapfrog.pdf> [Accedido el 19 Mar. 2018].