

Dinámica anómala de una partícula libre

Daniel Viñales Gabriel Paissan

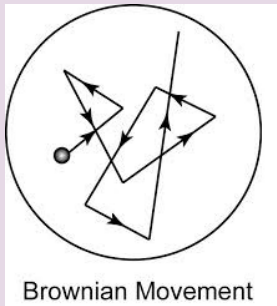
MECOM, Centro Atómico Bariloche

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas Técnicas, Centro Atómico Bariloche, y Centro Regional Universitario Bariloche-UNCo

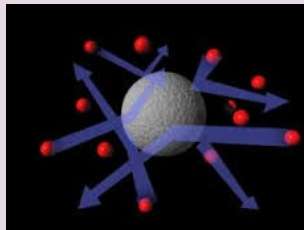
6° *BIOMAT La Falda-Córdoba*

Agosto 6, 2014

Difusión: un mecanismo de transporte de materia



Robert Brown (1827)



Teoría del movimiento Browniano.

La ecuación de Langevin

$$m\dot{v} = -\gamma v + \xi(t) \quad \text{Langevin (1908)}$$

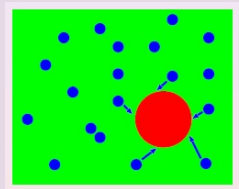
Suponemos:

- $\langle \xi(t) \rangle = 0$
- $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2B\delta(t - t')$

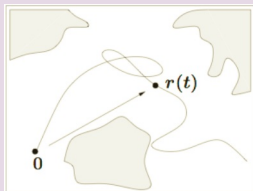
$$(B = \gamma KT)$$

partícula:

- granos de polen, polvo y otras partículas coloidales
- iones, dipolos moleculares, concentración de un químico
- células, gránulos, bacterias, etc



Difusión anómala



Desplazamiento cuadrático medio(DCM)

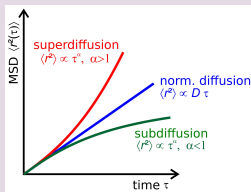
$$\langle r^2(t) \rangle = 2 \frac{kT}{\gamma} t \quad D = \frac{kT}{\gamma}$$

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^\lambda$$

$\lambda < 1$ **Subdifusión**

$\lambda = 1$ **Difusión Normal**

$\lambda > 1$ **Superdifusión**



Difusión anómala en sistemas biológicos

Eur. Phys. J. E (2012) 35: 63

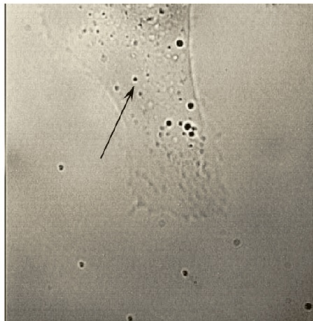


Fig. 1. HCV29 cell during the microrheology measurement. The arrow shows the position of the trapped lipid granule. The $0.4 \mu\text{m}$ calibration beads stuck on the chamber surface are out of focus (and distorted with astigmatism) as well as the cell edges adherent to the substrate.

(Bertseva et al., EPJ E 35, 2012)

(Dieterich et al., PNAS 105, 2008)

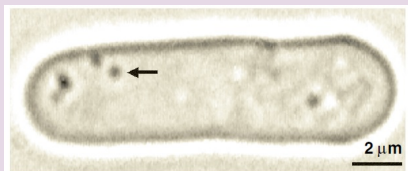
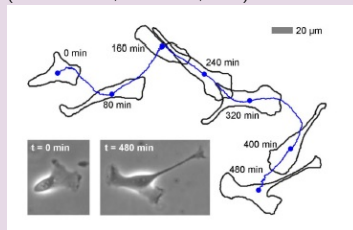


FIG. 1. Image of a fission yeast cell. Small black spheres are lipid granules in the cytoplasm (arrow).

(Nørrelykke et al., PRL 93, 2004)

Núcleo de memoria

La ec. de Langevin $m\dot{v} = -\gamma v + \xi(t)$ es Markoviana

Significa que γ a tiempo t es proporcional a v en el mismo tiempo t y que el ruido ξ es delta correlacionado.

Los problemas reales a menudo son No- Markovianos. La fricción γ a tiempo t puede depender de la historia de la velocidad $v(t')$ para tiempos t' anteriores a t .

Los efectos de memoria pueden incorporarse dentro de la aproximación de Langevin a través de la **ecuación generalizada de Langevin (GLE)**

Ecuación generalizada de Langevin (GLE)

$m \dot{v}$ = memoria friccional + fuerza aleatoria

$$\dot{v}(t) + \int_0^t dt' \gamma(t-t') v(t') = \xi(t) \quad (1)$$

Y el correspondiente teorema fluctuación-disipación que relaciona las fuerzas aleatorias con las fuerzas de fricción es:

Teorema fluctuación-disipación

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = C(|t - t'|) = k_B T \gamma(|t - t'|) \quad (2)$$

$\xi(t)$ es modelada como un ruido coloreado gaussiano. Es una fuerza aleatoria gaussiana y estacionaria, con valor medio cero $\langle \xi(t) \rangle = 0$

Ruido de Mittag Leffler

(Viñales and Despósito, PRE E 75, 2007)

Suponemos que el núcleo de memoria $\gamma(t)$ es una Mittag-Leffler

$$\gamma(t) = \frac{\gamma}{\tau^\lambda} E_\lambda(-(|t|/\tau)^\lambda) \quad (3)$$

función de Mittag Leffler(de un parámetro)

$$E_\alpha(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + 1)}, \quad \alpha > 0 \quad (4)$$

Una GLE para la VACF

Un observable: la función normalizada de autocorrelación de la velocidad VACF

$$C_v(t) = \frac{\langle v(t)v(0) \rangle}{\langle v(0)^2 \rangle}$$

Construimos una GLE para la VACF

$$\dot{C}_v(t) + \int_0^t dt' \gamma(t-t') C_v(t') = 0 \quad (5)$$

Consideramos que el núcleo de memoria γ satisface una GLE con un núcleo de memoria η : **Núcleo de memoria de segundo orden**

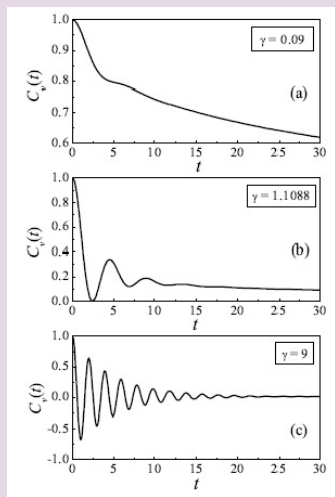
$$\dot{\gamma}(t) + \int_0^t dt' \eta(t-t') \gamma(t') = 0 \quad (6)$$

Mittag Leffler tiene un power law

Si ML satisface una GLE el núcleo de memoria de segundo orden es: Power-Law

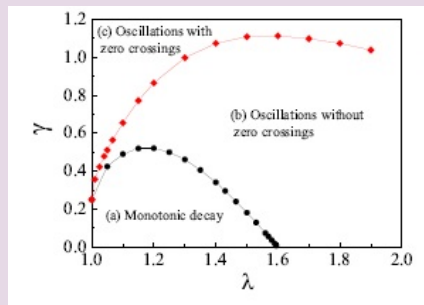
$$\eta(t) = \frac{t^{\lambda-2}\tau^{-\lambda}}{\Gamma(\lambda-1)} \quad (7)$$

Resultados



$$\lambda = 1.5$$

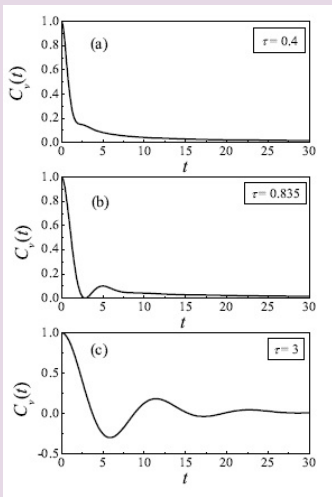
$$\tau = 1$$



$$\lambda_c \simeq 1.598$$

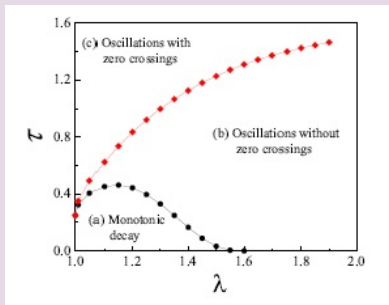
$$\gamma_c = 0.25$$

Resultados



$$\lambda = 1.2$$

$$\gamma = 1$$



$$\lambda_c \simeq 1.598 \quad \tau_c = 0.25$$

Conclusiones

- Se describió con la VACF la dinámica superdifusiva de una partícula libre manejada por un ruido de Mittag-Leffler.
 - Se encontraron tres comportamientos dinámicos diferentes.
 - Se encontraron dos curvas críticas que separan tres regiones dinámicas y un valor crítico $\lambda_c \approx 1.598$ para el cual $\lambda > \lambda_c$ no hay movimiento monótonico.
- El formalismo de kernels de memoria jerárquico utilizados permite establecer una correspondencia entre el problema de un oscilador manejado por un ruido de ley de potencias y el de una partícula libre manejada por un ruido ML (La FLE de la VACF para la partícula libre manejada por un ruido ML es formalmente idéntica a la FLE de la función de correlación de la posición de una partícula ligada armónicamente).
- La VACF de la partícula libre siempre es positiva para kernels *power-law* mientras puede tomar valores positivos y negativos con un kernel ML.

Preguntas?
Comentarios?

VACF con núcleo de memoria de segundo orden

En el dominio de Laplace

$$\widehat{C}_v(s) = \frac{1}{s + \widehat{\gamma}(s)} \quad (8)$$

$$\widehat{\gamma}(s) = \frac{\gamma(0)}{s + \widehat{\eta}(s)} \quad (9)$$

Reemplazando

$$\widehat{C}_v(s) = \frac{1}{s + \frac{\gamma(0)}{s + \widehat{\eta}(s)}} = \frac{s + \widehat{\eta}(s)}{s^2 + s\widehat{\eta}(s) + \omega^2}, \quad (10)$$

donde $\omega^2 = \gamma(0)$.

Fuerza restauradora del medio

Invirtiendo Laplace. Considerando $C_v(0) = 1$ y $\dot{C}_v(0) = 0$

$$\ddot{C}_v(t) + \int_0^t dt' \eta(t-t') \dot{C}_v(t') + \omega^2 C_v(t) = 0 \quad (11)$$

(J. P. Bonn & S. Yip, *Molecular Hydrodynamics*, 1991) Una fuerza restauradora del entorno!

$C_v(t)$ está influenciado por la competencia entre el término friccional y el armónico.

Ruido de Mittag Leffler

Suponemos que el núcleo de memoria $\gamma(t)$ es una Mittag-Leffler

$$\gamma(t) = \frac{\gamma}{\tau^\lambda} E_\lambda(-(|t|/\tau)^\lambda), \quad \gamma(0) = \frac{\gamma}{\tau^\lambda}. \quad (12)$$

función de Mittag Leffler(de un parámetro)

$$E_\alpha(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + 1)}, \quad \alpha > 0 \quad (13)$$

Transformada de Laplace el ruido Mittag-Leffler

$$\hat{\gamma}(s) = \frac{\gamma s^{\lambda-1}}{1 + s^\lambda \tau^\lambda} = \frac{\gamma(0)}{s + s^{1-\lambda} \tau^{-\lambda}} \quad (14)$$

Ruido de Mittag Leffler

Comparando (14) con (9)

$$\hat{\gamma}(s) = \frac{\gamma(0)}{s + s^{1-\lambda}\tau^{-\lambda}} \iff \hat{\gamma}(s) = \frac{\gamma(0)}{s + \hat{\eta}(s)} \quad (15)$$

$$\hat{\eta}(s) = s^{1-\lambda}\tau^{-\lambda}$$

Memoria de segundo orden: Power-Law

$$\eta(t) = \frac{t^{\lambda-2}\tau^{-\lambda}}{\Gamma(\lambda-1)} \quad (16)$$

FLE para la VACF

Reemplazando (16) en (11) y usando la derivada fraccional (Caputo)

$$\ddot{C}_v(t) + \frac{1}{\tau^\lambda} \frac{d^{2-\lambda}}{dt^{2-\lambda}}(C_v(t)) + \omega^2 C_v(t) = 0, \quad \omega^2 = \gamma/\tau^\lambda. \quad (17)$$

Llamando $\eta = \frac{1}{\tau^\lambda}$ y $\alpha = 2 - \lambda$, reescribimos (17)

$$\ddot{C}_v(t) + \eta \frac{d^\alpha C_v(t)}{dt^\alpha} + \omega^2 C_v(t) = 0. \quad (18)$$

La ecuación (18) resulta ser la misma que la correspondiente que para la función de autocorrelación de la posición $C_x(t)$ obtenida (por Burov&Barkai, 2008) para el problema de una partícula bajo un potencial armónico.

Digresión ? Qué es una derivada fraccional?

En una carta a L'Hôpital, Leibniz se preguntaba (1695): $\frac{d^{\frac{1}{2}}x}{dx^{\frac{1}{2}}} = ?$

Una forma de proceder: sabemos que para m, n enteros

$$\frac{d^m}{dx^m} x^n = \frac{n!}{(n-m)! x^{n-m}} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-m+1)} x^{n-m}$$

Consideremos que es válida para $m = 1/2$ y $n = 1$, entonces

$$\frac{d^{\frac{1}{2}}}{dx^{\frac{1}{2}}} x = \frac{\Gamma(2)}{\Gamma(3/2)} x^{1/2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x^{1/2}$$

$$\Rightarrow \frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x^{1/2}$$