

Petite Classe n° 2
Vendredi 23 Septembre 2016

Diffusion brownienne

1 Particule dans un puits de potentiel

On considère le mouvement unidimensionnel d'une particule de coefficient de diffusion D dans un puits de potentiel $U(x)$. On note $P(x, t)$ la densité probabilité de trouver la particule en x à t .

1. Ecrire l'équation de conservation de la probabilité P reliant son évolution temporelle au courant $J(x, t)$. Ecrire ce dernier si on considère que la particule évolue sous l'effet de la force $F = -dU/dx$ et de l'agitation thermique.
2. Quelle est la distribution de probabilité $P_{\text{eq}}(x)$ à l'équilibre? Que vaut le courant $J_{\text{eq}}(x)$ à l'équilibre.

On considère dorénavant que le potentiel est harmonique $U(x) = Kx^2/2$.

3. On lâche la particule en $x = x_0$ à $t = t_0$ et on note $P_0(x, t) = P(x, t|x_0, t_0)$ la solution des équations correspondant à cette condition initiale. La position moyenne de la particule est alors $\langle x \rangle_0(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_0(x, t)x dx$ pour $t > 0$.
Calculer $d\langle x \rangle_0(t)/dt$ puis $\langle x \rangle_0(t)$. Montrez qu'intervient un temps caractéristique $\tau_p = k_B T/DK$, qui est le temps que met la particule pour diffuser sur une longueur l_p que vous interprétez.
4. Calculer $\langle x^2 \rangle_0(t)$. Interprétez les limites $K \rightarrow 0$ et $t \rightarrow \infty$.
5. Calculer, à l'équilibre thermodynamique, la fonction de corrélation temporelle

$$C(\tau) = \langle x(t_0)x(t_0 + \tau) \rangle_{\text{eq}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx(x_0 \cdot x) P_{\text{eq}}(x_0) P(x, t_0 + \tau | x_0, t_0)$$

Interprétez le résultat obtenu.

6. *Facultatif* : On peut calculer l'expression complète du propagateur $P(x, t_0 + t | x_0, t_0)$. Pour cela, cherche une solution de forme gaussienne :

$$P(x, t_0 + t | x_0, t_0) = [2\pi B(t)]^{-1/2} \exp \left[-\frac{(x - A(t))^2}{2B(t)} \right]$$

En utilisant l'équation de Langevin, calculer A et B et montrer que l'on a :

$$P(x, t_0 + t | x_0, t_0) = \left[\frac{2\pi k_B T}{k} (1 - \exp(-2t/\tau_p)) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{k[x - x_0 \exp(-t/\tau_p)]^2}{2k_B T [1 - \exp(-2t/\tau_p)]} \right]$$

Interprétez les limites $t \ll \tau_p$ et $t \gg \tau_p$.

2 Calibration d'un piège optique

Dans un piège optique, c'est la focalisation d'un faisceau laser qui génère $U(x)$. On peut de plus mesurer le déplacement en utilisant le piège lui-même, en réalisant celui-ci à partir de deux faisceaux légèrement décalés (~ 200 nm). On mesure alors la différence de phase entre les deux faisceaux après

le piège (la bille modifie le chemin optique). Cette différence donne lieu à un signal expérimental $\Delta V(t)$ dont on s'attend à ce qu'il soit proportionnel à $x(t)$ pour de petits déplacements.

On a donc $\Delta V(t) = \alpha x(t)$ avec α un coefficient que l'on veut estimer. Pour cela, on peut laisser la bille dans le piège pendant un temps long (équilibre thermodynamique), et mesurer $\Delta V(t)$ qui va fluctuer puisque $x(t)$ fluctue. Il est souvent commode de tracer la quantité suivante :

$$S(f) = \int_0^\infty d\tau \cos(2\pi f\tau) \langle \Delta V(t_0) \Delta V(t_0 + \tau) \rangle_{t_0}$$

en fonction de la fréquence f (voir figure 1 à gauche). Si l'on est à l'équilibre thermodynamique, et que la série de données est assez grande, le moyennage sur t_0 devrait être équivalent à la moyenne thermodynamique effectuée à la question 4.

7. Montrer qu'on attend alors une forme Lorentzienne :

$$S(f) = S_0 \frac{f_c^2}{f_c^2 + f^2}$$

où f_c est une fréquence de coupure et S_0 que vous déterminerez.

8. Vérifier que les expériences de la figure 1 confirment la prédiction précédente. Pouvez vous déterminer les paramètres K et α caractérisant le piège ?
9. Les données sur la courbe de gauche correspondent à une bille de 500 nm dans de l'eau à température ambiante. Déterminez la raideur K du piège. Sur quelle longueur typique l_p gigote la bille piégée sous l'effet de l'agitation thermique ?

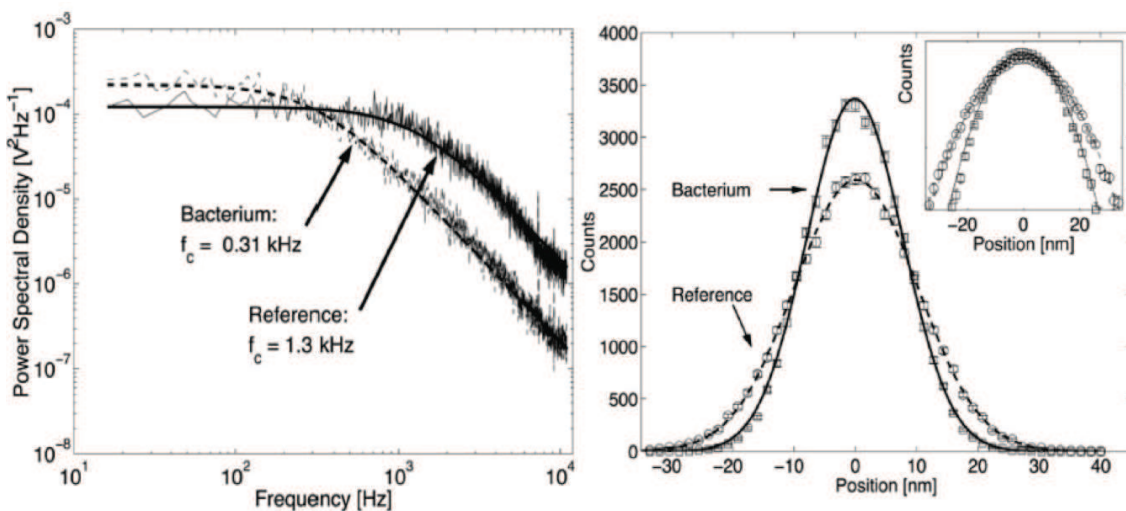


FIGURE 1 – Spectre de puissance $S(f)$ et histogrammes des déplacements de la bille dans le piège en l'absence (référence) et en présence (bactérium) du complexe protéique. Extrait de Oddershede et al. *Biophys. Journal* 83, 3152 (2002). "The motion of a Single Molecule, the λ -Receptor, in the Bacterial Outer Membrane".