



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**FAKULTA ELEKTROTECHNIKY
A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ**

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION

ÚSTAV BIOMEDICÍNSKÉHO INŽENÝRSTVÍ

DEPARTMENT OF BIOMEDICAL ENGINEERING

**ANALÝZA PŘECHODOVÉHO DĚJE PŘI POHYBU OPTICKY
ZACHYCENÉ ČÁSTICE V POD-TLUMENÉM REŽIMU**

TRANSITIONAL MOTION ANALYSIS OF THE OPTICALLY TRAPPED PARTICLE IN UNDER-DAMPED
REGIME

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Martina Sússerová

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Vratislav Harabiš, Ph.D.

BRNO 2018

Bakalářská práce

bakalářský studijní obor **Biomedicínská technika a bioinformatika**

Ústav biomedicínského inženýrství

Studentka: Martina Süssová

ID: 155604

Ročník: 3

Akademický rok: 2017/18

NÁZEV TÉMATU:

Analýza přechodového děje při pohybu opticky zachycené částice v podtlumeném režimu

POKYNY PRO VYPRACOVÁNÍ:

1) Provedte literární rešerši vyhodnocení vlastností optické pasti pomocí náhodného pohybu částice v podtlumeném režimu za nízkých tlaků. Srovnajte různé přístupy (spektrální hustota energie, auto a kros korelace, histogram). 2) Ze záznamů trajektorie opticky zachycené částice získejte okamžitou rychlost a zkonstruuje fázový diagram zobrazující vývoj průměrné trajektorie, průměrné rychlosti a jejích dalších momentů pro různé počáteční podmínky. 3) Sledujte vliv frekvenčních filtrů na fázové diagramy. 4) Ze závislostí průměrných poloh a rychlostí na čase získejte parametry tlumeného oscilátoru (vlastní frekvence, koeficient tlumení, ...). Zkonstruuje mapy těchto parametrů a srovnajte výsledky s dalšími metodami určení vlastností optické pasti. 5) Z experimentálních nebo simulovaných dat zkonstruuje fázový diagram ve stacionárním stavu (po vymizení přechodového děje). Předpokládáme implementaci v jazyce Matlab.

DOPORUČENÁ LITERATURA:

[1] Jan Gieseler, "Dynamics of optically levitated nanoparticles in high vacuum," PhD Dissertation, ICFO Spain, (2013).

[2] Simon F. Nørrelykke, Henrik Flyvbjerg, "Harmonic oscillator in heat bath:

Exact simulation of time-lapse-recorded data and exact analytical benchmark statistics," Phys. Rev. E 83, 041103 (2011).

Termín zadání: 5.2.2018

Termín odevzdání: 25.5.2018

Vedoucí práce: Ing. Vratislav Harabiš, Ph.D.

Konzultant:

prof. Ing. Ivo Provazník, Ph.D.
předseda oborové rady

UPOZORNĚNÍ:

Autor bakalářské práce nesmí při vytváření bakalářské práce porušit autorská práva třetích osob, zejména nesmí zasahovat nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a musí si být plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

Abstrakt

Tato bakalářská práce se zabývá analýzou přechodového děje, který vzniká při vstupu nanočástice na paprsku laseru. Poté dochází k ukotvení částice kolem místa ohniska tohoto paprsku. Hlavními cíli práce bylo vyobrazení závislosti pozic trajektorie v závislosti na jejích okamžitých hodnotách a získání parametrů tlumeného harmonického oscilátoru, jehož charakter je pro vstup částice do paprsku charakteristický. Dalšími cíli práce byla aplikace frekvenčních filtrů na signálová data a pozorování jejich vlivu na fázové diagramy a také samotné vyobrazení chování částice v okolí ohniska ve stacionárním stavu.

Klíčová slova

Laser, Brownův pohyb, optické kleště, tlumený režim, vakuum, harmonický oscilátor.

Abstract

This bachelor thesis deals with the analysis of the transition phenomenon, which occurs when the nanoparticles enter the laser beam. Thereafter the particle is anchored around the point of focus of this beam. The main objectives of the thesis were to illustrate the dependence of the trajectory positions in relation to its instantaneous values and to obtain the parameters of the attenuated harmonic oscillator whose character is characteristic for the particle inserting the beam. Another objective of the thesis was to apply frequency filters to signal data and to observe their effects on phase diagrams and also to visualize the behavior of the particle in the vicinity of the focus in the stationary state.

Keywords

Laser, Brownian movement, optical tweezers, underdamped mode, vacuum, harmonic oscillator.

Bibliografická citace:

SŮSSEROVÁ, M. *Analýza přechodového děje při pohybu opticky zachycené částice v podtlumeném režimu*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, 2018. 41 stran. Vedoucí práce: Ing. Vratislav Harabiš, PhD.

Prohlášení

„Prohlašuji, že svou závěrečnou práci na téma Analýza přechodového děje při pohybu opticky zachycené částice v pod-tlumeném režimu jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího bakalářské práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené závěrečné práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této závěrečné práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

V Brně dne 4. ledna 2018

.....

podpis autora

Poděkování

Děkuji vedoucímu bakalářské práce Ing. Vratislavu Harabiši, PhD. a Mgr. Martinu Šilerovi, PhD. za účinnou metodickou, pedagogickou a odbornou pomoc a další cenné rady při zpracování mé bakalářské práce. Dále děkuji mé rodině a mým přátelům.

V Brně dne 25. května 2018

.....
podpis autorky

Obsah

1. Úvod	9
2. Optické zachycování	10
2.1 Laser	10
2.1.1 Einsteinovy zákony záření.....	11
2.1.2 Vlastnosti laserového světla	13
2.2 Optické kleště, optická pinzeta	13
3. Brownův pohyb	14
3.1 Matematické modely.....	15
3.1.1 Náhodná procházka	16
3.1.2 Langevinova rovnice.....	17
3.1.3 Difúzní rovnice.....	17
3.2 Metody analýzy	18
3.2.1 Potenciálová analýza – histogramy.....	18
3.3.2 Střední rozložení MSD.....	19
3.2.3 Autokorelace a vzájemná korelace.....	20
3.2.4 Spektrální hustota energie	23
4. Praktická část	25
4.1 Simulace dat a jejich grafická reprezentace	26
4.1.1 Zisk průměrných hodnoty pro analýzu	27
4.1.2 Data.....	28
4.1.3 Fázové diagramy	29
4.2 Vliv frekvenční filtrace na fázové diagramy	30
4.3 Parametry tlumeného oscilátoru	31
4.3.1 Program parametry.m.....	31
4.3.1 Hodnoty parametrů a jejich grafické reprezentace	34
4.4 Fázové diagramy ve stacionárním stavu.....	36
5. Závěr	38

Seznam literatury	39
Seznam symbolů, veličin a zkratk.....	41

Seznam obrázků

Obrázek 1 - Dvouladinový systém.....	11
Obrázek 2 - Obsazení energetických hladin.....	12
Obrázek 3 – Vyobrazení Brownova pohybu.....	14
Obrázek 4 - Teorie Brownova pohybu: trajektorie a pravděpodobnostní distribuce	15
Obrázek 5 - Sekvence "hodu mincí"	16
Obrázek 6 - Náhodná procházka jako výsledek sumarizace náhodných čísel.....	16
Obrázek 7 - a) Pravděpodobnostní distribuce; b) Potenciály pasti.....	19
Obrázek 8 - MSD pro různé výkony laseru	20
Obrázek 9 - ACF pro různé výkony	21
Obrázek 10 – a) ACF a CCF způsobené překrytím signálů, b) Znázornění mizivého CCF po úpravě.....	22
Obrázek 11 - PSD pro různé výkony	24
Obrázek 12 – Průběh simulované trajektorie	25
Obrázek 13 – Fázový digram zachycené částice.....	26
Obrázek 14 – Průběh sta simulovaných trajektorií.....	27
Obrázek 15 – Průběh trajektorie po průměrování sta trajektorií.....	27
Obrázek 16 – Příklad trajektorie neodpovídajícímu žádanému charakteru průběhu	28
Obrázek 17 – Trajektorie pro pět různých trvání nanočástice o průměru 300 μm	29
Obrázek 18 – Fázové diagramy pro pět různých trvání nanočástice o průměru 300 μm	29
Obrázek 19 – Filtrovaný signál pomocí pásmové propsuti.....	30
Obrázek 20 – Tlumený harmonický oscilátor [17].....	31
Obrázek 21 – Vykreslení obálky po celé délce signálu	32
Obrázek 22 – Vyznačení hranice přechodového děje a stacionárního stavu	32
Obrázek 23 – Zobrazení křivky útlumu získané pomocí koeficientu útlumu	33
Obrázek 24 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice průměru 150 μm	34
Obrázek 25 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice o průměru 225 μm	35
Obrázek 26 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice o průměru 300 μm	35
Obrázek 27 – Fázové diagramy: průměr částice 150 μm , doba simulace 0,01 s	36
Obrázek 28 – Fázové diagramy: průměr částice 150 μm , doba simulace 0,03 s	36
Obrázek 29 – Fázové diagramy: průměr částice 150 μm , doba simulace 0,05 s	37

1. ÚVOD

Tato bakalářská práce se ve své teoretické části zabývá problematikou optického zachycování pomocí laserové aparatury, která umožňuje experimentální činnost, které se říká optické zachycování. Myšlenka za touto metodou je využití schopnosti světla působit sílu na hmotu. Jelikož je ale působení optickými silami pohybuje znatelně jedině v oblasti mikrosvěta, je třeba toto působení detekovat na velmi malých objektech – jako například na nanočásticích. Tato práce se zabývá analýzou dat získaných z takového měření. Existují již ověřené metody této analýzy, přičemž každá má očekávaně své určité výhody i nevýhody. Tato problematika je dále rozebrána v teoretické rešerši.

Praktická část práce spočívá v zobrazení dat metodou fázových diagramů a následně pozorování jejich změn v závislosti na filtraci signálu pomocí frekvenčních filtrů. Další částí je analýza samotného přechodového děje, který je parametry tlumeného harmonického oscilátoru charakterizován. Do skončení tohoto děje dochází ke zklidnění pohybu částice takovým způsobem, že detekovaný pohyb v dalších časech odpovídá interakci s okolními molekulami – interakce známá jako Brownův pohyb. Toto „uklidněné“ období po přechodovém jevu se nazývá stacionární stav a je následně zobrazen opět pomocí fázových diagramů.

2. OPTICKÉ ZACHYCOVÁNÍ

O schopnosti světla, vyvíjet sílu na předměty jím osvětlené, existují zmínky již ze 17. století. Byl to J. Kepler, kdo v roce 1619 vypožoroval při studiu tvaru ocasu komety, že vznikají díky silám vyvíjeným slunečními paprsky na částice obklopující tělo komety. [1] Stejný úkaz inspiroval roku 1746 také například L. Eulera k přisuzování tlakových sil paprskům světla. Tehdy se pokusil tento předpoklad obhájit teoreticky tak, že se díval na světelné vlnění jako na podélné oscilace. [2]

K matematickému popisu a hlavně předpovědi schopnosti světla tlakově působit na předměty došlo roku 1862, kdy J. C. Maxwell zveřejnil teorii elektromagnetismu. Ta mimo jiné předpovídá existenci hybného toku světla, který by mohl být úměrný intenzitě světla a měl by být schopen přenosu na osvětlený objekt. Tento jev se nazývá radiační tlak, který tlačí objekt ve směru šíření paprsku. Na počátku 20. století došlo k prvnímu experimentálnímu ověření radiačního tlaku na makroskopických objektech P. Lebeděvem, a téměř současně také výzkumem E. F. Nicholse a G. F. Hulla. Nicméně optické síly jsou extrémně malé. Roku 1905 se k tomuto faktu vyjádřil J.H. Poynting následovně: “Již velice krátká zkušenost s pokusy měřit tyto síly se jeví jako dostačující k tomu, aby si člověk uvědomil jejich extrémní mírnost - mírnost, která se jeví jako dostačující ke zvažování zanechání dalších experimentů.” Studium radiačního tlaku bylo považováno v té době za vzrušující odvětví fyziky, nicméně s mizivou šancí praktického uplatnění.[3] Tento přístup se k dnešnímu dni radikálně změnil, díky příchodu kvantové teorie, jež umožnila vznik oboru nazývaný kvantová elektronika a potažmo vynalezení laseru. [4]

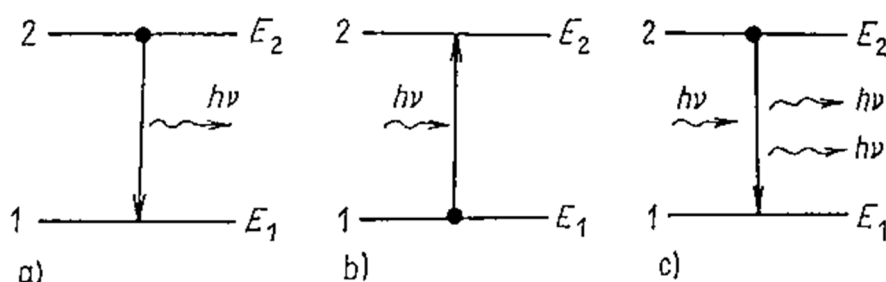
2.1 Laser

Slovo Laser je akronymem. Jedná se o zkratku slov Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation, tedy zesilování světla stimulovanou emisí záření. Dnes se všeobecně jako laser označují jakékoli generátory elektromagnetického vlnění, fungující na principu stimulované emise, i přestože působí v širší oblasti elektromagnetického spektra než pouze ve světelné. Jeho předchůdcem byl maser, jež byl zdrojem záření v mikrovlnné oblasti. I přestože princip byl teoreticky objasněn již ve 20. letech 20. století, k sestavení jeho prototypu došlo až v roce 1960 (maser v roce 1953). Roku 1964 byla udělena Nobelova cena za fyziku za základní práce v oblasti kvantové elektroniky, které vedly ke konstrukci maseru a laseru. Laureáty byli Ch. H. Townes, N. G. Basov a A. M. Prochorov.[4]

2.1.1 Einsteinovy zákony záření

Jak bylo výše při vysvětlení názvu laseru uvedeno, tento přístroj funguje na základě principu zvaný stimulovaná emise. Tento jev se opírá o principy kvantové mechaniky, a tudíž bez objevení kvantové podstaty světa by náš svět byl o poznání jiný. V roce 1900 se M. Planck zabýval objasněním nesouladu teoretického vysvětlení záření absolutně černého tělesa klasickou fyzikou a experimentálních výsledků měření tohoto záření. O rok později M. Planck našel matematické řešení odpovídající experimentálním výsledkům, když přišel s hypotézou, že vysílaná energie není spojitá, ale je vyzařována v kvantech. V té době taková myšlenka byla naprosto revoluční a začalo se jí zabývat čím dál více vědců, mezi něž patřil i Albert Einstein. Byl to právě on, kdo v roce 1917 předpověděl zákony záření. [5]

Předpokládejme, že atom se může nacházet ve stavu základním (s nejnižší možnou energií E_0) a ve stavu excitovaném (s vyšší energií E_x). Mezi těmito stavy jsou možné přechody, ke kterým dochází při přijmutí či vydání energie v podobě kvanta elektromagnetického záření - fotonu. Tyto přechody jsou popsány níže a znázorněny na Obrázku 1.[6]



Obrázek 1 - Dvouhladinový systém

Absorpce

Absorpcí se myslí jev, kdy atom přijme foton, a tím ze základního stavu přejde do stavu excitovaného, čímž se celkově zvýší energie atomu. Ze zákona zachování energie plyne:

$$hf = E_x - E_0$$

kde h je Planckova konstanta a f je frekvence absorbovaného atomu.[4]

Spontánní emise

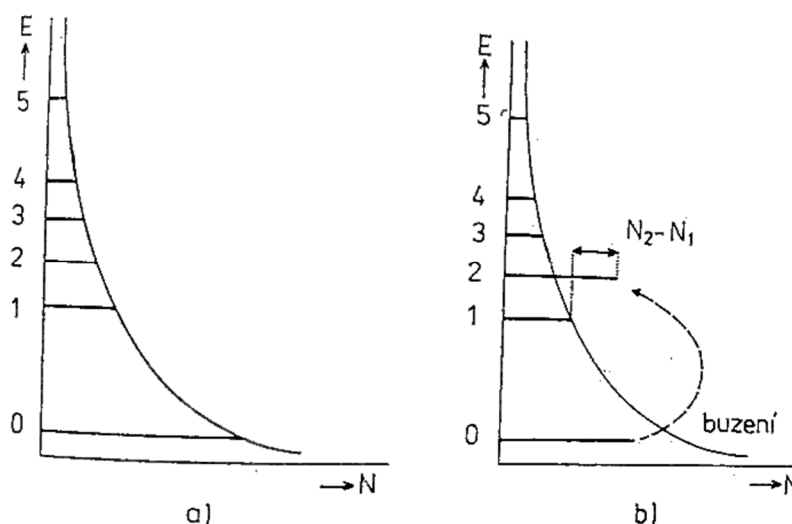
Ke spontánní emisi dochází v případě, že máme atom v excitovaném stavu - tedy s vyšší energií než je energie jeho základního stavu. Jelikož má systém vždy tendenci se vrátit

do stavu s nižší energií, po určité velice krátké době ($\approx 10^{-8}$ s) dochází k uvolnění nadbytečné energie a atom přechází do základního stavu vyzářením fotonu energeticky (a tudíž i frekvenčně) odpovídajícímu rozdílu mezi tímto stavem a stavem excitovaným. Jelikož k této emisi dochází samovolně, je nazývána spontánní. [4]

Stimulovaná emise

Již z názvu vyplývá, že ke stimulované emisi může docházet vlivem působení na excitovaný atom z vnějšího prostředí. Aby výsledkem této stimulace bylo vyzářením fotonu odpovídajícímu přechodu do základního stavu atomu a tím dovození této změny stavu, je třeba stimulovat atom v excitovaném stavu fotonem o frekvenci odpovídajícímu rozdílu daných dvou stavů. Stimulující foton je následně vyzářen společně s emitovaným fotonem, a jejich fyzikální vlastnosti se shodují. K těmto vlastnostem patří například fáze, frekvence, směr a polarizace. [5]

Stimulovanou emisí je tak možné dosáhnout řetězové reakce za předpokladu, že se v daném optickém prostředí nachází větší množství atomů excitovaných na energetickou hladinu E_x , než atomů v základním stavu. Také tak dochází k významnému zesílení intenzity světla. Takového prostředí ale není jednoduché dosáhnout, vzhledem k Boltzmannově rozdělení energetických hladin (Obrázek 2a), které značí, že bude docházet k většímu počtu excitací než stimulovaných emisí. Na Obrázku 2b je znázorněn žádaný stav, který se nazývá inverzní obsazení či inverzní populace, kterého se dosahuje pomocí systému s třemi a více hladinami. Například první laser - rubínový - fungoval na principu systému s třemi hladinami.[7]



Obrázek 2 - Obsazení energetických hladin

2.1.2 Vlastnosti laserového světla

Laserové světlo se od světél z klasických zdrojů zásadně liší několika způsoby. První vlastností je vysoká *monochromaticklost*. U klasického zdroje, jakým může být například žárovka, světlo pokrývá spojitou oblast spektra, a tudíž není monochromatické. [5] Dodatečně se monochromatickostí dá dosahovat například vhodným filtrem, ale za cenu znatelného snížení vyzařovaného výkonu. [4] Monochromaticklost laserového paprsku v oboru viditelného světla je pak $\Delta\nu/\nu \approx 10^{-15}$. [7]

Další charakteristickou vlastností je *koherence* laserového paprsku. I při použití filtrů pro získání monochmatizovaného záření u klasických zdrojů pro docílení toho, že se světlo bude skládat z fotonů o přibližně stejné frekvenci, stále není dosaženo, aby se všechny fotony shodovaly svojí fází. V případě laserového paprsku je ale dosaženo koherence, jelikož fotony ze stimulované emise jsou shodné a jednotlivá vlnová klubka mohou být i několik set kilometrů dlouhé, zatímco u obyčejné žárovky dosahují délky zhruba jednoho metru. [5] [8]

Dále se emitované fotony shodují ve směru, z čehož vyplývá i vysoká směrovost, a tudíž i nízká rozbíhavost laserového paprsku. Naproti tomu třeba žárovka je tepelným zdrojem záření, jež záření emituje z rozžhaveného vlákna. Směrovosti se pak dá dosahovat pomocí vnější optické soustavy a kolimátorů. [4]

2.2 Optické kleště, optická pinzeta

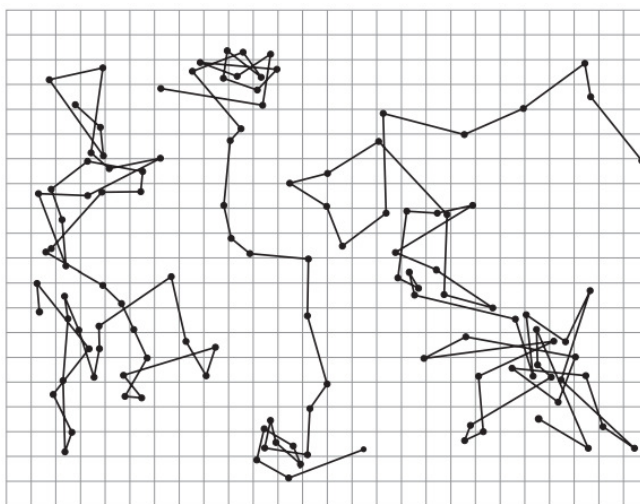
Na začátku 70. let 20. století se A. Ashkin zabýval využitím optických sil laseru k ovlivňování pohybu mikroskopických částic či neutrálních atomů. Jednou z předních prací A. Ashkina byla práce popisující ovlivňování dynamiky průhledných křemíkových částic, jejichž rozměry byly v řádech mikrometrů, za pomoci dvou základních světelných sil - *síly rozptylové* (působící ve směru šíření laserového paprsku) a *síly gradientní* (působící podél intenzity gradientu kolmého vůči paprsku). Poprvé A. Ashkin pozoroval to, čemu dnes již všeobecně říkáme optické kleště, optická pinzeta či optická past v roce 1986. Toho roku tento jev definoval jako “schopnost silně zaostřeného světelného paprsku zachytit mikroskopické částice v prostoru.”. Oblast, ve které dochází k tomuto zachycení, je místem s vysokou intenzitou záření a jedná se o ohnisko paprsku. [1]

3. BROWNŮV POHYB

Velice důležitým aspektem optického zachytávání je všudypřítomný Brownův pohyb, který nese jméno po Robertu Brownovi, který roku 1828 sledoval pohyb zrněk pylu v tekutině. V tehdejších dobách lidstvo již tento pohyb pozorovalo, ale přisoudili tomuto pohybu nesprávný důvod a to že zrnka jsou živá. Pan Brown toto finálně vyvrátil prokázáním stejného pohybu i u částecek popela rozpuštěných v tekutině. Dále také vzal kus křemene, ve kterém byla voda zachycena miliony let a spatřil v ní stejný pohyb. [1] [9]

Později se ukázalo, že jde o jeden z molekulárních pohybů - tedy že jde o výsledek kolizí s molekulami tekutiny, ve které je mikroskopická částice pozorována.

Vlastnosti tohoto pohybu, který je velmi chaotický a složený z pohybu translačního i rotačního, jsou závislé na následujících veličinách: čím je částice menší, teplota a tudíž i energie vyšší a viskozita obklopující tekutiny nižší, tím větší rychlosti pohyb nabývá. [1] Pro příklad při dostatečné hustotě plynu (za atmosferického tlaku a teploty okolí) dosahují molekuly rychlosti i 500 m.s^{-1} . Na druhou stranu jejich přímočarý pohyb odpovídá přesunu zhruba 10^{-7} m , jelikož počet srážek za daných podmínek je 10^9 za sekundu. [10] Plošné vyobrazení Brownova pohybu je ukázáno na Obrázku 3, přičemž v reálné situaci jde ovšem o pohyb prostorový. Jelikož k neustálým srážkám molekul dochází i na stěnách nádoby, je Brownův pohyb i příčinou tlaku působícího na tuto nádobu. [10]



Obrázek 3 – Vyobrazení Brownova pohybu

Pohyb zachycené částice je výsledkem souhry náhodného pohybu a deterministických optických sil. Následně dochází k postupnému usazování částice poblíž rovnovážné pozice v

ohnisku laserového paprsku, ale i přesto se nikdy úplně nezastaví a "vrtí" se v tomto místě díky Brownově pohybu. [1]

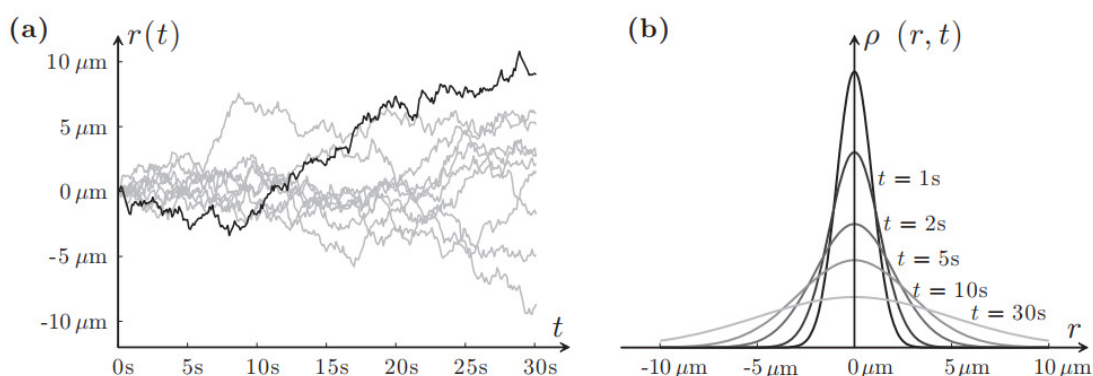
3.1 Matematické modely

I přestože pro pohyb jednotlivých částic by bylo možné vykonstruovat model Brownova pohybu pomocí Newtonových rovnic, je toto řešení nepraktické vzhledem k obrovskému počtu molekul v reálné situaci.[1]

K přiblížení reálné situace se využívá dvou principů, které spolu nevyhnutelně úzce souvisejí. Obě metody jsou vyobrazeny na Obrázku 4a, b.

- 1) $r(t)$ = *stochastická trajektorie* jediné částice, která je namodelována pomocí diferenciální rovnice se stochastickou silou, která zastupuje vliv okolí.
 - metoda náhodné procházky
 - Langevinova rovnice
- 2) $\rho(r, t)$ = *pravděpodobnostní hustota distribuce*, která zastupuje shluk částic, jehož deterministický vývoj je modelován také diferenciálními rovnicemi.
 - difúzní rovnice

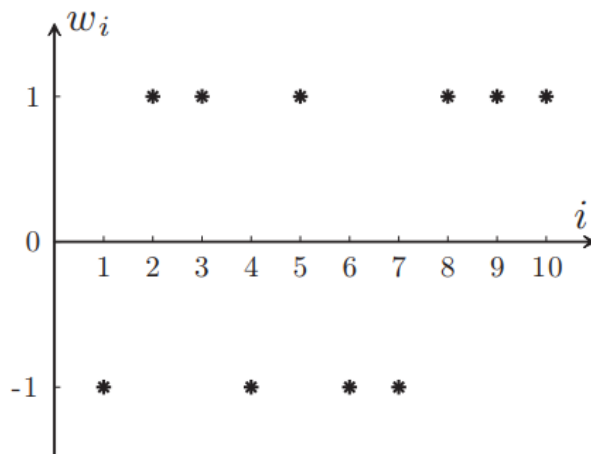
Jak bylo výše zmíněno, tyto metody jsou vzájemně propojené. Pravděpodobnostní hustota distribuce může být získána pomocí průměrování většího počtu jednotlivých trajektorií a naopak statistické vlastnosti náhodných sil se užívá k výpočtu jednotlivé trajektorie v závislosti na pravděpodobnostní hustotě distribuce.[1]



Obrázek 4 - Teorie Brownova pohybu: trajektorie a pravděpodobnostní distribuce

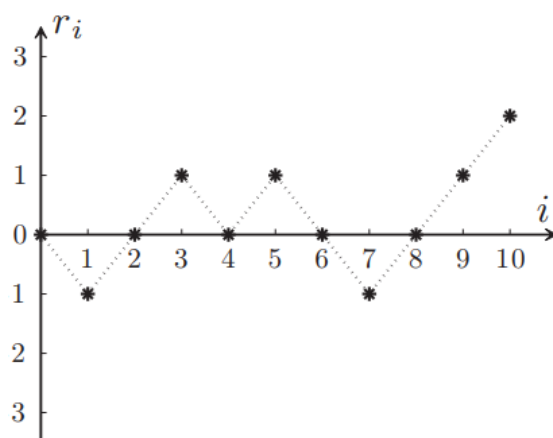
3.1.1 Náhodná procházka

Náhodná čísla se dají snadno generovat pomocí principu hodu mincí. Výsledky jsou pak možné pouze dva. Řekněme, že dovolíme hodnoty $+1$ a -1 . Házení mincí opakovaně proto generuje sekvenci těchto čísel jako na Obrázku 5.[1]



Obrázek 5 - Sekvence "hodu mincí"

Po sečtení těchto hodnot ale získáváme sekvenci obsahující různé hodnoty, které při dostatečně velkém vzorku nabývají vlastností, které nezávisí na pravděpodobnostní distribuci. Náhodná procházka získána sumarizací náhodných hodů je zobrazena na Obrázku 6. [1]



Obrázek 6 - Náhodná procházka jako výsledek sumarizace náhodných čísel

Na druhou stranu analýzou Brownova pohybu několika částic byly nalezeny průměrné vlastnosti, které jsou deterministické. Jednou z hlavních vlastností je pak *střední rozložení* MSD (mean squared-dispalcement), které značí, jak po h krocích se částice pohybuje od své počáteční pozice.[1]

$$MSD(h) = \langle (x_h - x_0)^2 \rangle = \overline{(x_{i+h} - x_i)^2} = 2Dt$$

kde $t = h\Delta t$ a D je difúzní konstanta.

3.1.2 Langevinova rovnice

Langevinova rovnice se získá pomocí součtu Newtonovy rovnice a flukтуаční síly.

$$m \frac{d^2}{dt^2} r(t) = -\gamma \frac{d}{dt} r(t) + \mathfrak{N}(t)$$

kde γ je třecí koeficient částice, který může být vyjádřen Stokovým zákonem,

$$\gamma = 6\pi\eta a$$

kde a je průměrem sférické částice a η je viskozita v níž je částice rozpuštěna. [1]

Dále poslední část Langevinovy rovnice $\mathfrak{N}(t)$ zastupuje náhodnou sílu s nulovým průměrem.

$$\mathfrak{N}(t) = \sqrt{2S}W(t)$$

kde $W(t)$ je bílý šum.

V přítomnosti potenciálu $U(r)$, a tudíž i síly $F(r)$ působící na částici získáváme rovnici:

$$m \frac{d^2}{dt^2} r(t) = -\frac{d}{dr} U(r) - \gamma \frac{d}{dt} r(t) + \mathfrak{N}(t)$$

3.1.3 Difúzní rovnice

Nyní už se dostáváme k výpočtu pravděpodobnostní distribuci hustoty $\rho(r, t)$ pomocí shluku částic.[1] Cílem je dosáhnout výpočtu $\rho(r, t + \Delta t)$ jako funkce Δt . Difúzní rovnice pak vypadá následovně:

$$\frac{\delta \rho(r, t)}{\delta t} = D \frac{\delta^2 \rho(r, t)}{\delta r^2}$$

Pokud počáteční pozice všech částice je $r = 0$ v čase $t = 0$, pak řešením předešlé rovnice je Gaussian a nulovým průměrem a rozptylem $2Dt$, tudíž:

$$\rho(r, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$

3.2 Metody analýzy

Kalibrováním optické pasti se získává nejdůležitější charakteristika optické pasti, kterou je tuhost κ_x , jež je úměrná výkonu laseru. Mezi nejběžnější pasivní techniky kalibrace patří *potenciálová analýza*, *MSD* (*mean squared displacement*), *ACF* (*autokorelace*), *CCF* (*krozkorelace*) a *PSD* (*power spectrum density*).

V následujícím textu budeme uvažovat pouze kulatou částici o poloměru a rozpuštěnou v tekutině o viskozitě η o absolutní teplotě T . Z těchto údajů získáváme koeficient tření $\gamma = 6\pi\eta a$ a následně objemový difúzní koeficient $D = k_B T / \gamma$. [1]

3.2.1 Potenciálová analýza – histogramy

Tato metoda jako jediná z uvedených nepředpokládá, že potenciál optické pasti je harmonický, což je také právě důvodem, proč se této metody může využít k ověření či vyvrácení této hypotézy.

Trajektorie $x(t)$ Brownovy částice je vyjádřena pomocí Langevinovy rovnice:

$$\frac{d}{dt}x(t) = -\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dx}U(x) + \sqrt{2D}W_x(t) \quad (3.1)$$

kde $U(x)$ je potenciál a $W_t(t)$ je bílý šum. Na Obrázku 9a je zobrazen histogram, který je výsledkem závislosti pozic a poziční pravděpodobnostní distribuce $\rho(x)$. Tato distribuce odpovídá Maxwell-Boltzmannově distribuci.

$$\rho(x) = \rho_0 \exp\left[-\frac{U(x)}{k_B T}\right] \quad (3.2)$$

Kde ρ_0 je normalizační faktor. Řešením rovnice pro $U(x)$ získáváme:

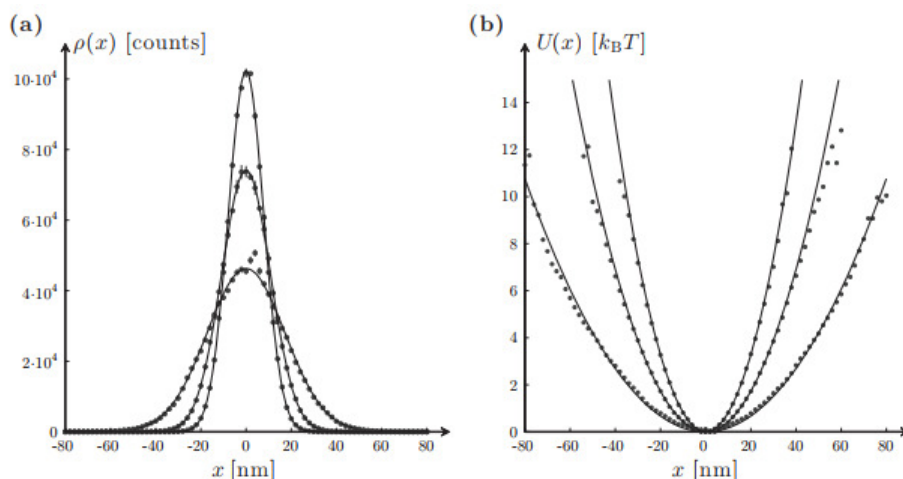
$$U(x) = -k_B T \log[\rho(x)] + U_0 \quad (3.3)$$

kde U_0 je konstanta.

Tato metoda nepředpokládá, že potenciál je harmonický, a proto se užívá k ověření této charakteristiky a navíc je použitelná i pro komplikovanější potenciály. V praxi je třeba nezávislých vzorků x_l v časech t_l pro celkovou dobu měření T_s . Poziční hodnoty jsou dále seřazeny do série stejně velkých shluků podél x-ové osy tak, že c_m odpovídá počtu pozic

spadajících do m -tého shluku. Výsledný histogram $\{c_m\}$ je aproximací poziční pravděpodobnostní distribuci $\rho(x)$. Tento proces může být opakován pro získání průměrných hodnot a standartní odchylky. Z hodnot c_m je konečně možný výpočet U_m :

$$U_m = -k_B T \log(c_m) \quad (3.4)$$



Obrázek 7 - a) Pravděpodobnostní distribuce; b) Potenciály pasti

Na Obrázku 7a jsou vyobrazeny tři pravděpodobnostní distribuce a na Obrázku 7b je vyobrazen vypočtený potenciál. Pro oba případy jsou data proložena teoretickou aproximací pro tři různé výkony laseru.

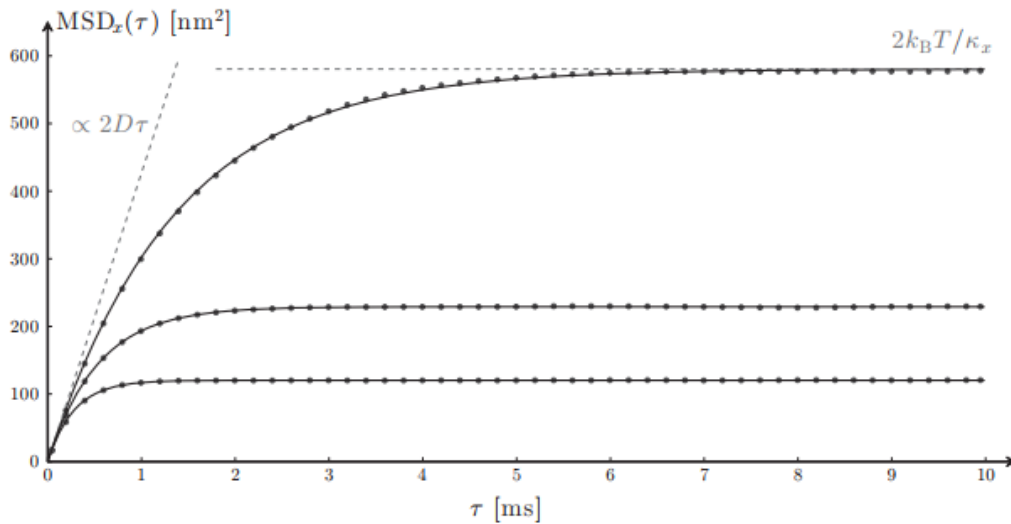
Určení potenciálu touto metodou je subjektem určitých systematických chyb jako například nekorelovaný šum (mechanické vibrace o nízké frekvenci) a detekční chyby. Také pokud data jsou korelovaná, přítomnost dolní propusti v záznamovém zařízení systému může mít také vliv na skreslení. [1]

3.3.2 Střední rozložení MSD

Přesnější charakterizace optické pasti podává MSD opticky zachycené částice. Podstatou MSD je kvantifikace pohybu částice od své počáteční pozice. Pro příklad pro balistický pohyb je MSD úměrné druhé mocnině času, pro difúzní pohyb je času přímo úměrné, ale pro zachycenou částici saturuje na konstantní hodnotě. [1]

$$MSD_x(\tau) = \overline{[x(t + \tau) - x(t)]^2} = 2 \frac{k_B T}{\kappa_x} \left[1 - e^{-\frac{|\tau|}{\tau_{ot,x}}} \right] \quad (3.5)$$

kde $\tau_{ot,x} = \frac{\gamma}{\kappa_x}$ je charakteristický čas tuhosti pasti.



Obrázek 8 - MSD pro různé výkony laseru

Na rozdíl od volné difúze, MSD neroste do nekonečna, ale dosáhne plató fáze, kvůli omezení způsobeném pastí. To je také vyobrazeno na Obrázku 8, kde je možné pozorovat tři MSD pro různé výkony laseru. Na rozdíl od potenciálové analýzy potřebujeme časovou posloupnost korelovaných pozic částice v běžných časových intervalech $x_j = x(t_x)$, kde vzorkovací čas je $t_j = j\Delta t$. MSD může být spočteno z trajektorie v diskrétních časových zpožděních $\tau_k = k\Delta t$ jako

$$MSD_{x,k} = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^{N-k} [x_{j+k} - x_j]^2 \quad (3.6)$$

Experimentální tuhost $\kappa_x^{(ex)}$ lze získat pomocí metody nejmenších čtverců z rovnic 3.5 a 3.6. Tento proces může být opakován pro získání průměrných hodnot a standardní odchylky tuhosti pasti $\kappa_x^{(ex)}$ i $MSD_{x,k}$. V praxi se běžně data nezískávají v jednotkách délky, nýbrž ve voltech či pixelech. Proto je užitečné provést konverzi jednotek aplikací experimentálně naměřeného koeficientu tření $\gamma^{(ex)}$. Převod je dán rovnicí

$$S_x^{(ex)} = \sqrt{\frac{\gamma}{\gamma^{(ex)}}} \quad (3.7)$$

3.2.3 Autokorelace a vzájemná korelace

Autokorelační metoda se užívá v časové oblasti pro dekonvoluci více komplexní dynamiky zachycené částice. Poziční autokorelace poskytuje měření času, který částici zabere

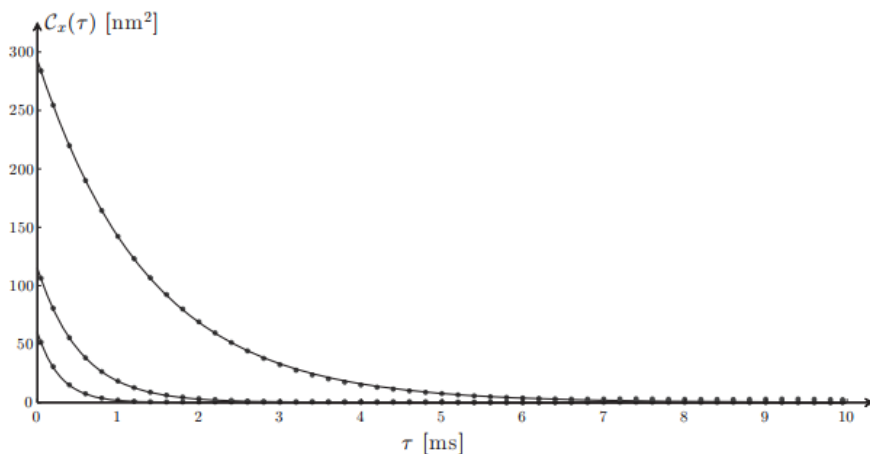
„zapomenout“ svojí původní polohu. Interval $\tau_{ot,x}$ charakterizuje, jak částice vpadá do pasti: čím více vzrůstá tuhost, částice podstupuje působení silnější obnovovací síly a $\tau_{ot,x}$ se zmenšuje. Pozice autokorelace je dána rovnicí

$$C_x(\tau) = \frac{k_B T}{\kappa_x} e^{-\frac{|\tau|}{\tau_{ot,x}}} \quad (3.8)$$

V praxi musejí být časová posloupnost korelovány korelována s pozicemi částice v pravidelných časových intervalech. Z této trajektorie může být autokorelace vypočtena v diskrétních časových zpožděních $\tau_k = k\Delta t$ následně:

$$C_{x,k} = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^{N-k} x_{j+k} x_j \quad (3.9)$$

Podobně jako u MSD může být experimentální tuhost $\kappa_x^{(ex)}$ získána pomocí metody nejmenších čtverců z rovnic 3.8 a 3.9. A stejně tak může být tento proces opakován pro získání průměrných hodnot a standardní odchylky jak tuhosti pasti $\kappa_x^{(ex)}$ tak i $C_{x,k}$. Převod jednotek je dán opět rovnicí 3.7.



Obrázek 9 - ACF pro různé výkony

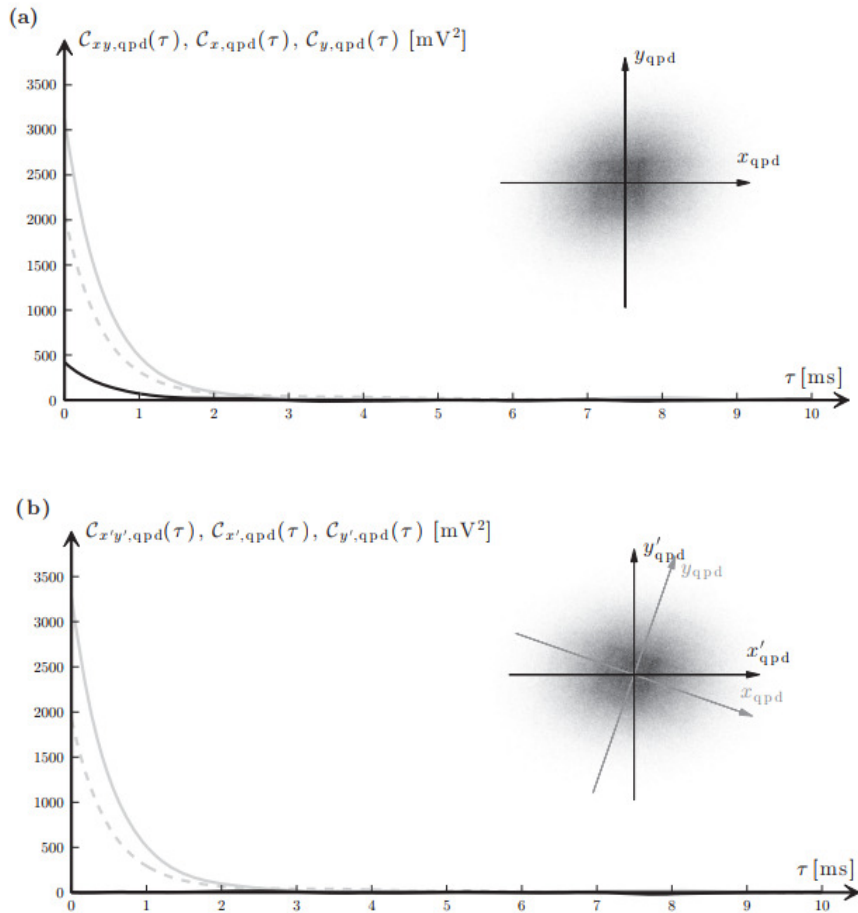
Obrázek 9 opět zobrazuje charakteristiku různých výkonů laseru. Tentokrát jde o jejich autokorelace. Čím rychlejší rozpad ACF tím vyšší výkon laseru. [1]

3.2.3.1 Vzájemná korelace

Je možné také vyjádřit crosstalk mezi dvěma různými pozičními signály pomocí kroskorelační funkce (CCF).

$$C_{xy,qpd,k} = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^{N-k} x_{qdp,j+k} y_{qdp,j} \quad (3.10)$$

kde x_{qdp} a y_{qdp} jsou transversní signály jako funkce času tj. $x_{qdp,j}$ a $y_{qdp,j}$. Na Obrázku 10a je zřetelná černá čára, která kroskorlace znázorňuje. Její přítomnost oznamuje přítomnost crosstalku mezi dvěma signály. Pomocí PCA transformace (principal component analysis transform) je možné tento crosstalk redukovat. Jde o ortogonální transformace koordinací – čili rotaci, jak je zřetelné v Obrázku 10b. .[1]



Obrázek 10 – a) ACF a CCF způsobené překrytím signálů,
b) Znázornění mizivého CCF po úpravě

3.2.4 Spektrální hustota energie

Analýza spektrální hustoty energie je nejspolehlivější metodou pokud bereme v úvahu kulaté částice. Největší výhodou této metody je práce ve frekvenční oblasti, což dovoluje odstranění běžných rušivých šumů jako například drift signálu nebo sinusoidální šum (způsobený elektrickou sítí). Opět se vychází z trajektorie částice vyjádřenou Langevinovou rovnicí

$$\frac{d}{dt}x(t) + 2\pi f_{c,x}x(t) = \sqrt{2D}W_x(t) \quad (3.11)$$

kde D je difúzní koeficient, $W_x(t)$ je bílý šum a $f_{c,x}$ je mezní frekvence, která je vyjádřena

$$f_{c,x} = \frac{\kappa_x}{2\pi\gamma} \quad (3.12)$$

kde κ_x je tuhost pasti a γ je koeficientem tření. Fourierovou transformací rovnice 3.11 je

$$2\pi(f_{c,x} - if)\check{X}(f) = \sqrt{2D}\check{W}_x(f) \quad (3.13)$$

kde $\check{X}(f)$ a $\check{W}_x(f)$ jsou Fourierovy transformacemi $x(t)$ a $W_x(t)$. Po umocnění dostáváme PSD pohybu částice

$$P_x(f) = |\check{X}(f)|^2 = \frac{D/(2\pi^2)}{f_{c,x}^2 + f^2} \quad (3.14)$$

V praxi je trajektorie vzorkována frekvencí f_s . Konečnou diferenciální rovnici popisující trajektorii je

$$x_{j+1} = (1 - 2\pi f_{c,x}\Delta t)x_j + \sqrt{2D\Delta t}w_{j,x} \quad (3.15)$$

Z této posloupnosti dat je možné konečně spočítat diskrétní Fourierovu transformaci, která je vhodnou aproximací

$$\check{X}_k = \Delta t \sum_{j=1}^N e^{i2\pi f_k t_j} x_j = \Delta t \sum_{j=1}^N e^{i2\pi jk/N} x_j \quad (3.16)$$

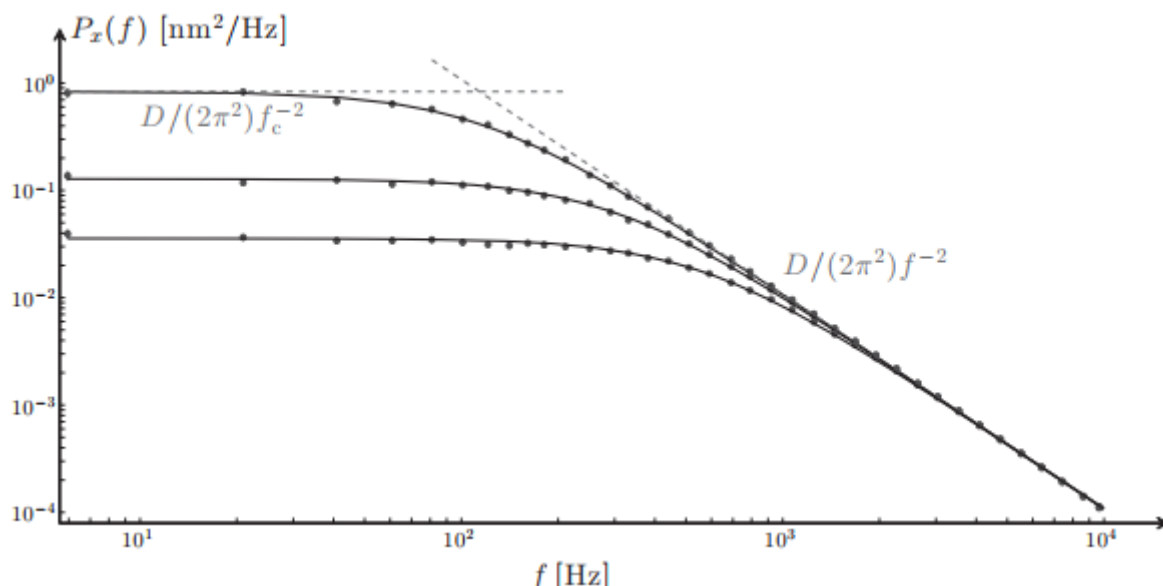
Výsledným experimentálním výkonovým spektrem pak je

$$P_k = \frac{|\check{X}_k|^2}{\sqrt{T_s}} = \frac{D/(2\pi^2 \Delta T_s)}{f_{c,x}^2 + f_k^2} |\check{W}_{k,x}|^2 \quad (3.17)$$

Opět použitím metody nejmenších čtverců získáváme průměrné hodnoty a standardní odchylky $f_{c,x}$ a P_k . Převod jednotek je v tomto případě dán opět rovnicí

$$S_x^{(ex)} = \sqrt{\frac{D^{(ex)}}{D}} \quad (3.18)$$

kde $D^{(ex)}$ je experimentální difúzní koeficient.[1]

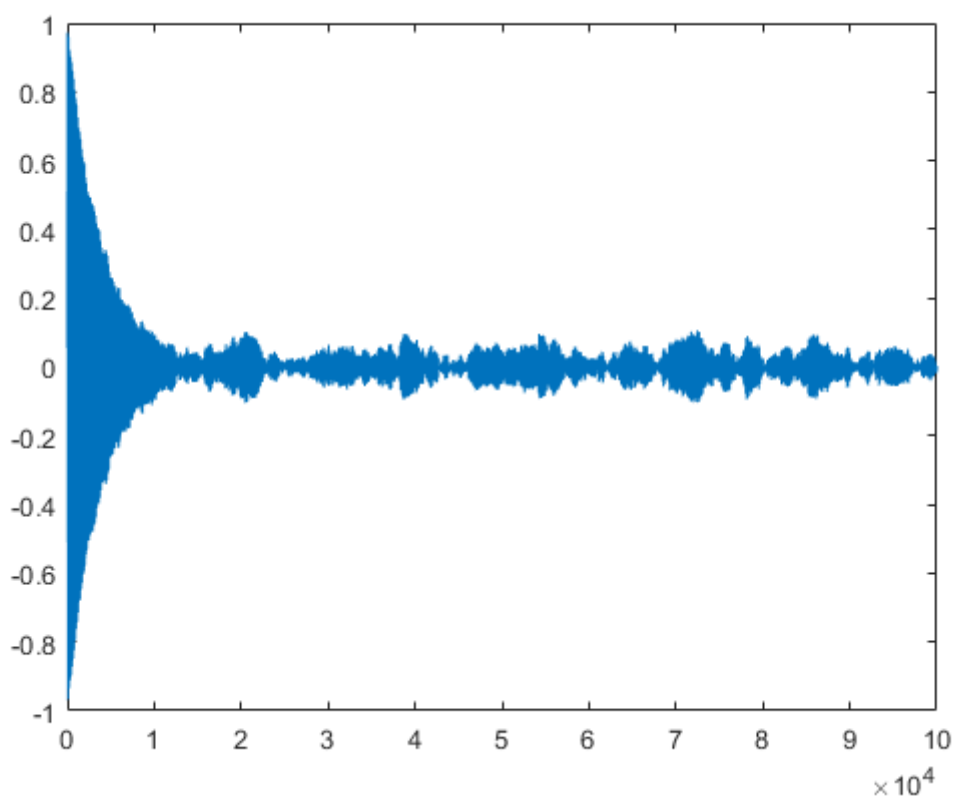


Obrázek 11 - PSD pro různé výkony

Obrázek 11 vyobrazuje charakteristiku různých výkonů laseru pomocí PSD analýzy.

4. PRAKTICKÁ ČÁST

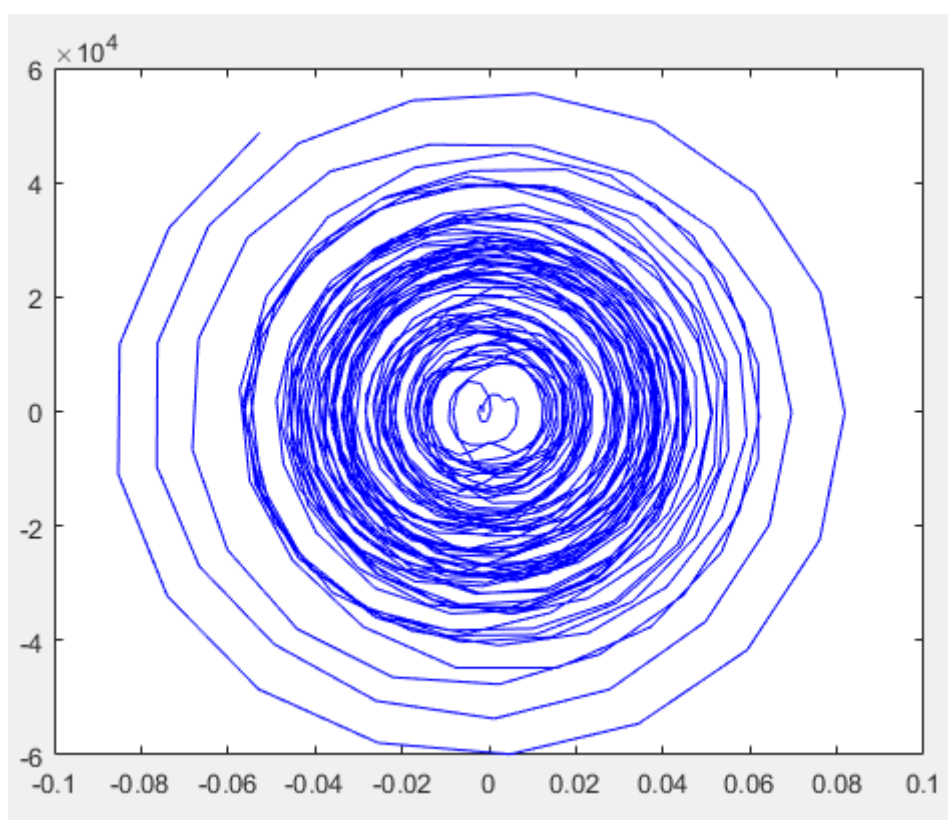
Pro účely této bakalářské práce bylo třeba nejprve získat data průběhu chování zachycené částice. Pro tyto účely bylo užito souboru poskytnutých skriptů a funkcí, jež slouží k výpočtu mnoha dalších hodnot. Tímto způsobem byly také nasimulovány hodnoty pro odpovídající okamžité rychlosti. Pro získání prvotních dat bylo třeba určit počáteční podmínky jako například (absolutní teplota, poloměr částice, kinematická viskozita, doba simulace). Potřeba těchto hodnot vyplývá z teoretické části této práce. Pro jejich analýzu bylo následně třeba vytvořit soubor funkcí, které by byly schopny vykreslit fázové diagramy těchto hodnot, filtrovat jejich rušivé složky a určit parametry tlumeného oscilátoru, jehož průběh se nachází na začátku signálu. V reálném měření odpovídá charakter tlumeného oscilátoru vniknutí nanočástice do laserového paprsku. Po dostatečně dlouhém čase dochází k „ukotvení“ částice poblíž ohniska paprsku, kde je vystavena Brownově prohybu, který způsobuje následný pohyb okolo ohniska. Toto stádium je stacionární a jeho vyobrazení je poslední částí bakalářské práce.



Obrázek 12 – Průběh simulované trajektorie

4.1 Simulace dat a jejich grafická reprezentace

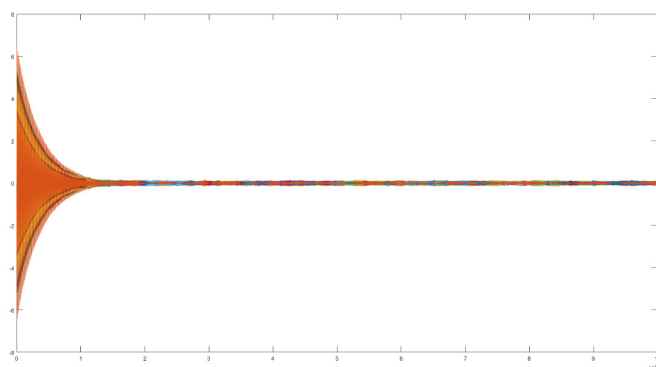
Po nasimulování či experimentálním naměření dat je možné dále přejít k jejich analýze podle metod uvedených výše. Jedním z prvních ověření získaných dat je jejich vyobrazení pomocí fázových diagramů. Fázový diagram je závislost pozic částice na jejich okamžité rychlosti. Částice zachycená laserovým paprskem má tendenci se pohybovat k ohnisku paprsku, a tudíž postupně snižovat vzdálenost pozic v čase – tedy snižovat svojí rychlost. Tím se snižuje i její kinetická energie. Toto snížení energie je pak na fázovém diagramu vyobrazeno vývojem trajektorie ke středu, jak je zobrazeno na Obrázku 13



Obrázek 13 – Fázový digram zachycené částice

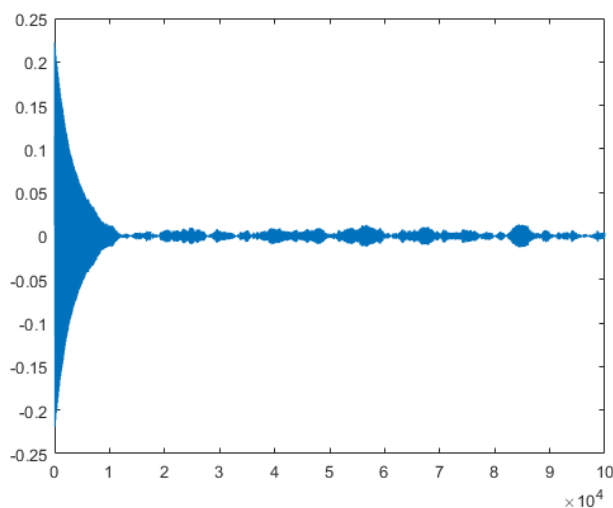
4.1.1 Získání průměrných hodnoty pro analýzu

Pro každý set podmínek bylo nasimulováno celkem sto trajektorií, které byly zaneseny do matice o sto sloupcích. Počet řádků se v mnoha případech liší, jelikož délka trvání simulace, a tudíž počet vzorků, byl jedním z parametrů, k jejichž změně docházelo při simulaci. Simulace dat byla výpočetně a potažmo časově náročná. Největší problém nicméně spočíval ve velkých kapacitních hodnotách proměnných, což je důvodem, proč tyto hodnoty nejsou součástí přílohy. Příklad vykreslení sta trajektorií v závislosti na čase je na Obrázku 14.



Obrázek 14 – Průběh sta simulovaných trajektorií

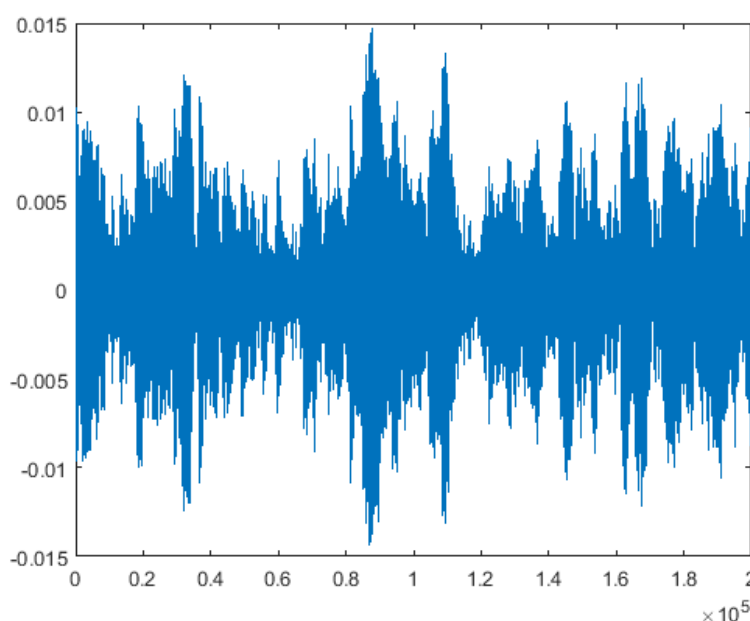
K získání průměrné trajektorie a průměrných okamžitých hodnot rychlosti bylo využito příkazu *mean* (např.: `x01 = mean(as.pres.x,2)`). Reprezentativní průměrná trajektorie je zobrazena na Obrázku 15.



Obrázek 15 – Průběh trajektorie po průměrování sta trajektorií

4.1.2 Data

Z celkového počtu 2000 trajektorií bylo průměrováním získáno 20 reprezentativních trajektorií pro různé podmínky, které se lišily celkovou dobou simulace a poloměrem nanočástice. Některé výsledky nicméně nevykazovali odpovídající charakter tlumeného oscilátoru na počátku signálu. Obrázek 15 zobrazuje vhodný příklad průběhu, se kterým bylo dále možné pracovat. Oproti tomu Obrázek 16 je příkladem simulace dat nevhodné k použití pro následnou analýzu.



Obrázek 16 – Příklad trajektorie neodpovídajícímu žádanému charakteru průběhu

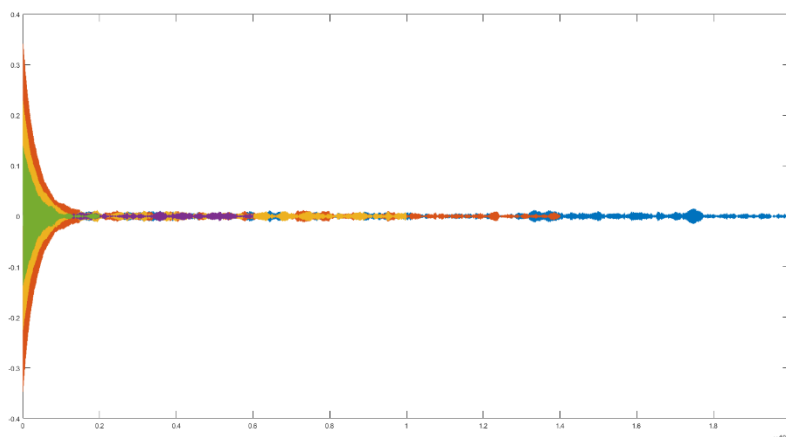
Tato trajektorie postrádá vyobrazení počátečního útlumu odpovídající vpádu do laserového paprsku a následného ukotvení u ohniska paprsku. Pro omezení zkreslení následujících výsledků a závěru byly všechny trajektorie ohodnoceny podle toho, zda odpovídaly žádanému tvaru. Ohodnocení je zobrazeno Tabulkou 01.

Tabulka 01.: Tabulka ohodnocující validitu získaných dat (0 – nevyhovuje).

		VALIDITA SIGNÁLU			
	průměr částice [μm]	85	150	225	300
doba simulace [s]	0,01	0	1	0	1
	0,03	0	1	0	1
	0,05	0	1	1	1
	0,07	0	0	1	1
	0,10	0	0	0	1

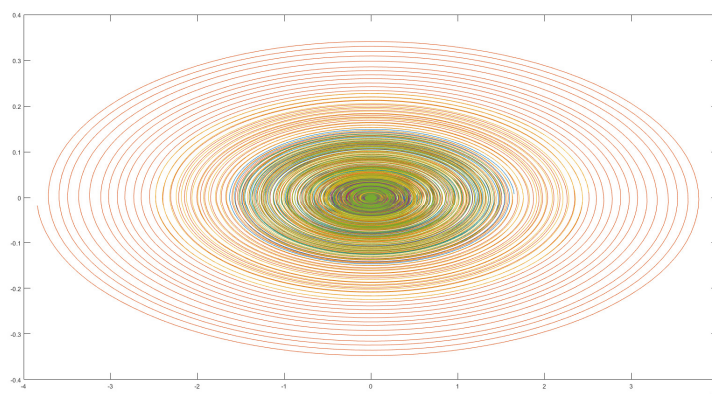
4.1.3 Fázové diagramy

V tuto chvíli je možné přistoupit k finální části druhého bodu zadání bakalářské práce. Jak již bylo zmíněno výše, fázové diagramy jsou závislosti poloh na okamžité rychlosti. K vykreslení těchto diagramů v tuto chvíli přistupujeme hlavně proto, že jedním z následujících kroků je určení místa signálu, kde přechodový děj končí a začíná stacionární stav. Tento jen se na úrovni fázového diagramu jeví jako homogenní spirálovitý průběh, jelikož jak je na Obrázku 15 zobrazeno – částice osciluje kolem ohniska a vzdaluje se od něj jen do určité hraniční vzdálenosti. Z následujících dat a obrázků je zřejmé, že hodnoty nasimulované, a jejich výsledný rozsah nijak lineárně nesouvisí s hodnotami délky trvání simulace či poloměrem částice.



Obrázek 17 – Trajektorie pro pět různých trvání nanočástice o průměru $300\ \mu\text{m}$

Na obrázku 17 je možné pozorovat, že nejvyšší amplitudu vstupních hodnot má částice s dobou simulace 0,07 s (oranžová), následně 0,05 s (žlutá).

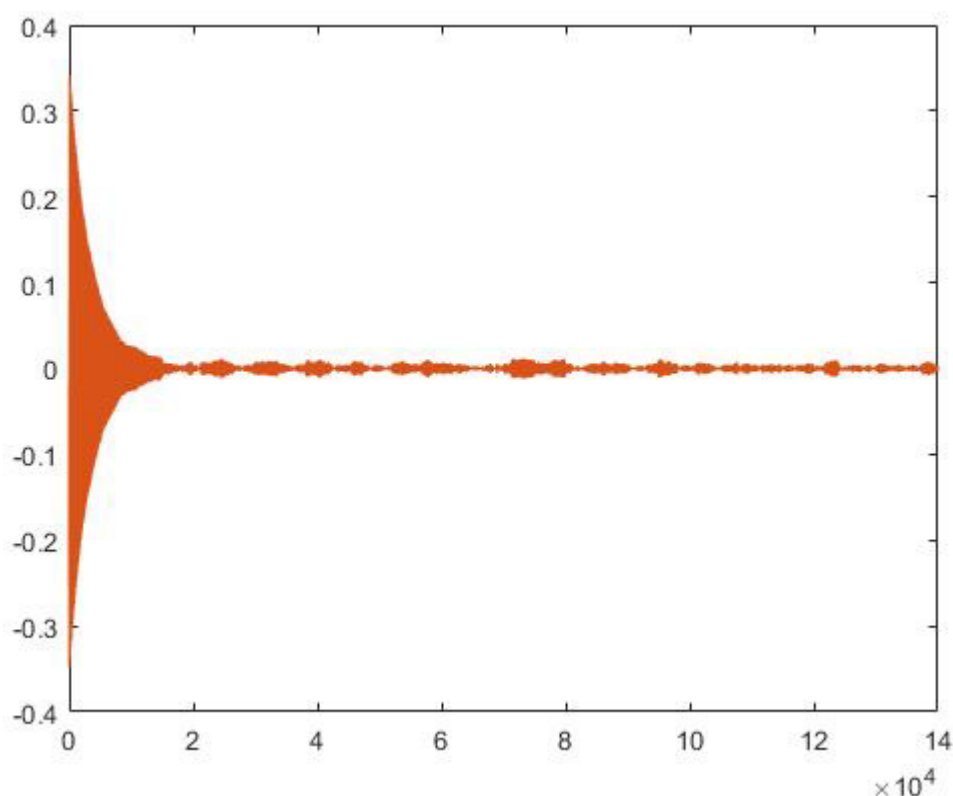


Obrázek 18 – Fázové diagramy pro pět různých trvání nanočástice o průměru $300\ \mu\text{m}$

Částice pro dobu simulace 0,01 s (zelená), 0,1 s (modrá) a 0,03 (fialová) jsou podle fázového diagramu na Obrázku 18 nejvíce si navzájem odpovídající. Tyto příklady byly proloženy do jednoho grafu pro ilustrační účely, aby si čtenář mohl udělat představu o variabilitě dat. V části této bakalářské práce zabývající se pouze stacionárním stavem zachycené částice budou rozebrány konkrétní případy fázových diagramů jejich porovnáním za přítomnosti a vymizení přechodového děje.

4.2 Vliv frekvenční filtrace na fázové diagramy

Pro úpravu signálů mohou být aplikovány frekvenční filtry. Součástí přílohy bakalářské práce je program `FREQFIL.m`, ve kterém se nacházejí funkce možných filtrací. Nicméně k účelům filtrace dat pro tuto bakalářskou práci se osvědčil FIR filtru typu dolní propust. Jednotlivé signály je třeba nejdříve spektrálně analyzovat pomocí Fourierovy transformace, aby bylo možné určit mezní hodnoty pásmové propusti.



Obrázek 19 – Filtrovaný signál pomocí pásmové propusti

4.3 Parametry tlumeného oscilátoru

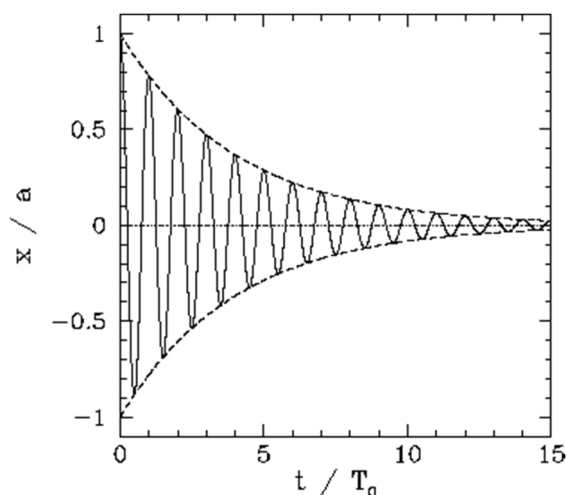
Tato část práce se zabývá čtvrtým bodem zadání, jež stanovuje úkol nalézt dva charakteristické parametry tlumeného oscilátoru, přičemž prvním z nich je koeficient útlumu a druhým je vlastní frekvence[9] . Obrázek 20 zobrazuje průběh tlumeného harmonického oscilátoru, který je popsán rovnicí

$$x_0 = e^{-\frac{\gamma t}{2}} \cdot \cos(\omega_0 t)$$

kde e je Eulerovo číslo, γ je koeficient útlumu, $t/2$ je čas a ω_0 je vlastní frekvence.

Vzhledem k tomu, že tato rovnice je o celkem dvou neznámých (hledané parametry), je třeba jeden z nich definovat z jiné závislosti. [9] K tomu poslouží definovaný průběh útlumu, který je na Obrázku 20 zobrazen přerušovanou čarou. Tato křivka je definována rovnicí:

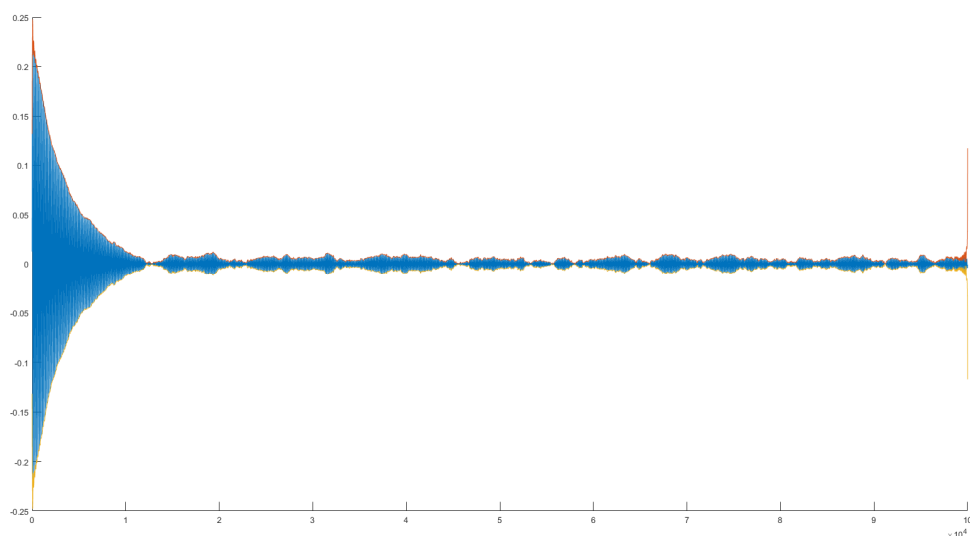
$$x = e^{-\frac{\gamma t}{2}}$$



Obrázek 20 – Tlumený harmonický oscilátor [17]

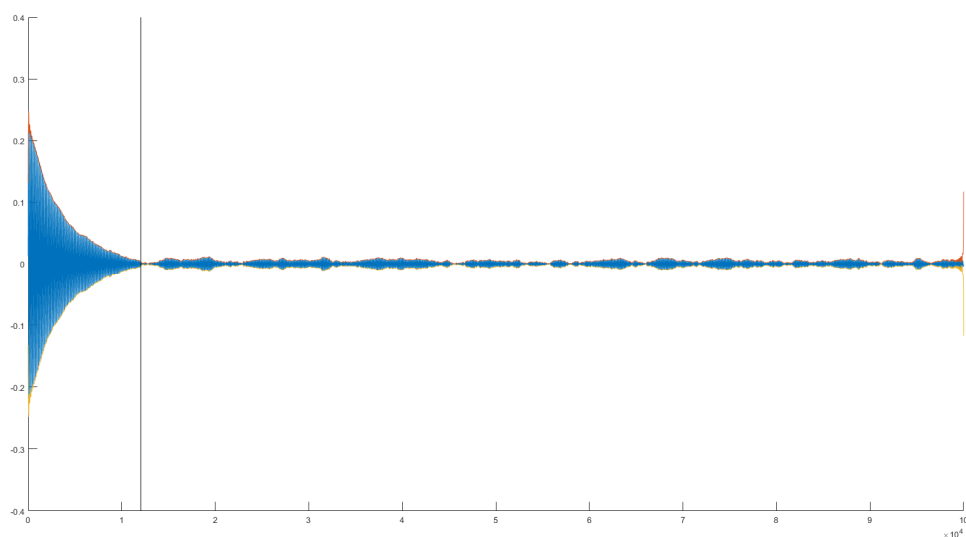
4.3.1 Program parametry.m

Pro získání výše uvedených parametrů z vektoru pozičních dat bylo nejdříve třeba získat obálku signálu, která by fungovala jako referenční křivka pro dále zjišťované hodnoty koeficientu útlumu. K tomu slouží funkce v Matlabu s názvem `hilbert`.



Obrázek 21 – Vykreslení obálky po celé délce signálu

Pro získání koeficientu útlumu je třeba se zaměřit na část signálu, která je vyobrazením přechodového děje – nikoli stacionárního stavu. Z tohoto důvodu bylo třeba určit hranici těchto dvou částí signálu. Pro tento účel byla vytvořena funkce `hops`, do níž vstupuje společně se signálem také prahová hodnota. Výstupem je hodnota `k` odpovídající `x`-ové hodnotě. Tato hodnota je poté vykreslena do signálu (viz Obrázek 22).



Obrázek 22 – Vyznačení hranice přechodového děje a stacionárního stavu

Nyní je možné získat samotný signál přechodového děje a samotný signál stacionárního stavu. V této části se budeme dále zabývat pouze přechodovým dějem, jelikož právě zde dochází k získu parametrů. Pro tento účel je programem volaná funkce `aproxgama.m`.

Funkce `aproxgama.m`

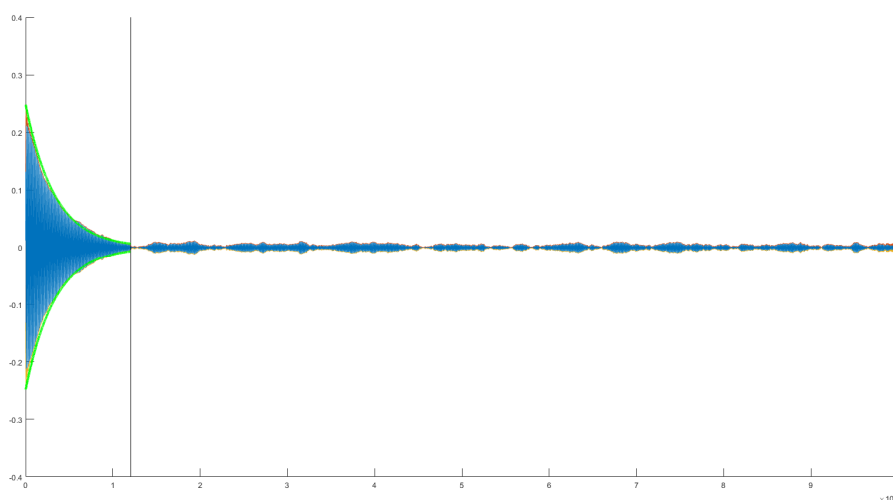
Vstupními hodnotami této funkce je část signálu obsahující přechodový děj (`prechod`), obálka vygenerovaná pouze na této části signálu, hodnota 0,5 určující maximální hodnotu koeficientu útlumu (určeno experimentálně), krokování (určeno experimentálně) a perioda vzorkování odpovídající vzorkování signálu. Podle vzorce pro přerušovanou čáru z Obrázku 20 jsou dále experimentálně zjišťovány hodnoty koeficientu útlumu, přičemž jeho výsledná hodnota je určena porovnáním odchylek od obálky signálu. Výsledná hodnota pak dále slouží k vykreslení křivky (zelená na Obrázku 23). Poslední hodnotou spočtenou touto funkcí je hodnota ω , který ale není samotnou vlastní frekvencí tlumeného oscilátoru. Pro výpočet mezní frekvence se užívá vztahu:

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$$

Z čehož plyne vztah pro vlastní frekvenci ω_0 :

$$\omega_0 = \sqrt{\omega^2 + \gamma^2}$$

Výpočet hodnot mezní frekvence je opět součástí programu `parametry.m`.



Obrázek 23 – Zobrazení křivky útlumu získané pomocí koeficientu útlumu

4.3.1 Hodnoty parametrů a jejich grafické reprezentace

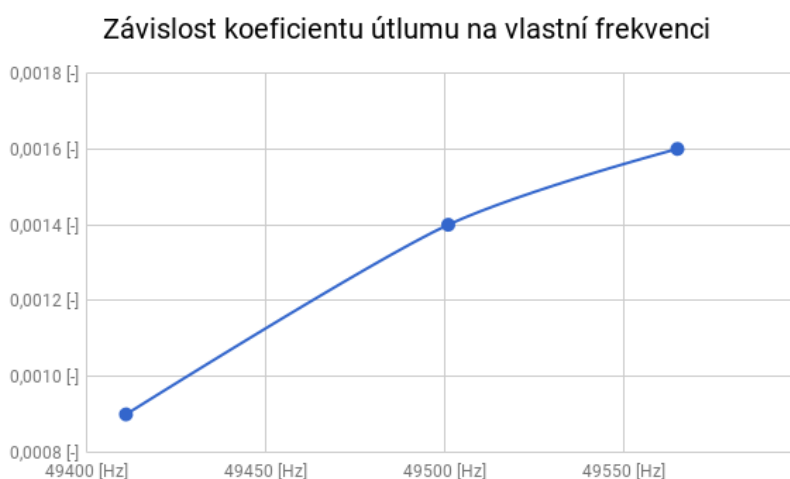
Hodnoty parametrů vypočtené pomocí funkcí v předešlé kapitole byly zaznamenány a dále zaneseny do tabulek. Místa s chybějícími hodnotami jsou vyřazené záznamy trajektorií z analýzy z důvodů uvedených v kapitole 4.1.2.

Tabulka 02.: Tabulka hodnot koeficientu útlumu.

		koeficient útlumu - gamma			
	průměr částice [μm]	85	150	225	300
doba simulace [s]	0,01	-	0,0009	-	0,0006
	0,03	-	0,0016	-	0,0007
	0,05	-	0,0014	0,0008	0,0006
	0,07	-	-	0,0008	0,0007
	0,10	-	-	-	0,0006

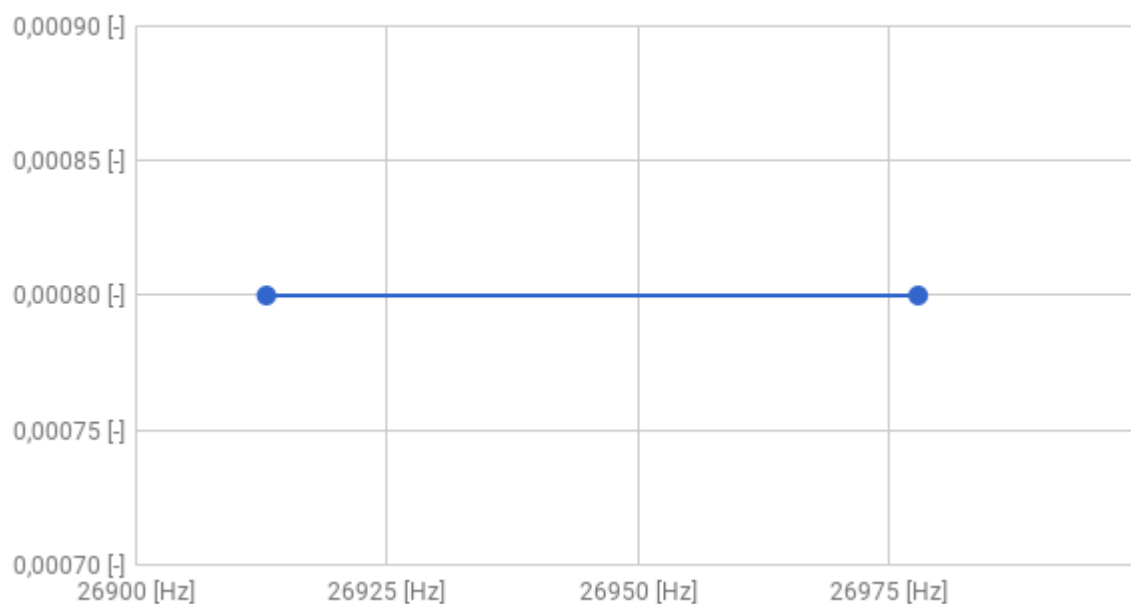
Tabulka 03.: Tabulka hodnot mezní frekvence.

		vlastní frekvence - omega0			
	průměr částice [μm]	85	150	225	300
doba simulace [s]	0,01	-	49411	-	17563
	0,03	-	49565	-	17405
	0,05	-	49501	26913	17440
	0,07	-	-	26978	17441
	0,10	-	-	-	17539



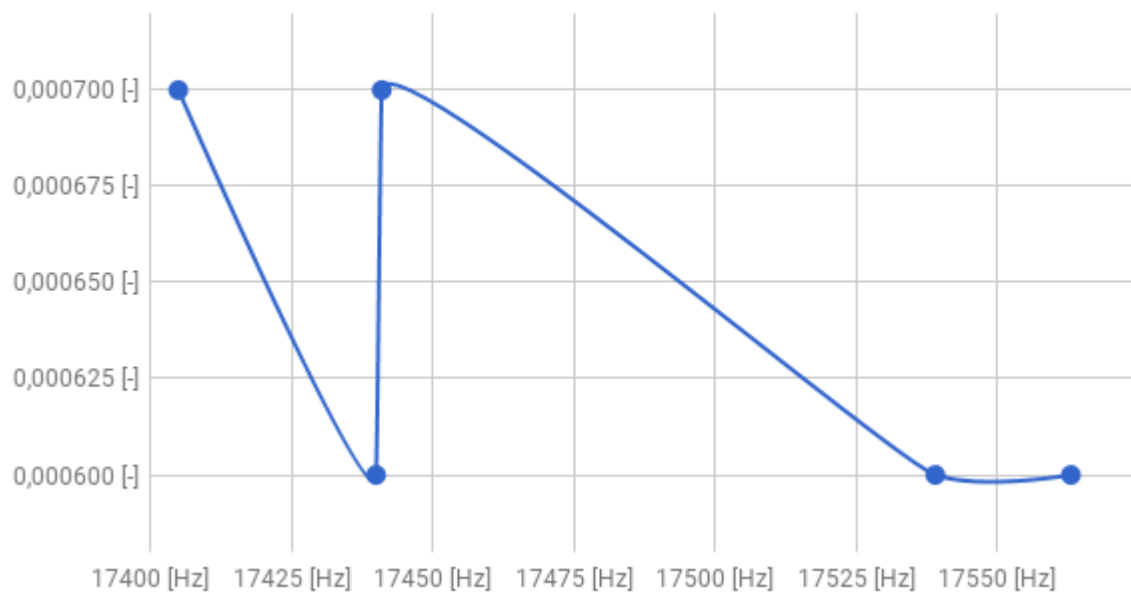
Obrázek 24 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice průměru 150 μm

Závislost koeficientu útlumu na vlastní frekvenci



Obrázek 25 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice o průměru 225 μm

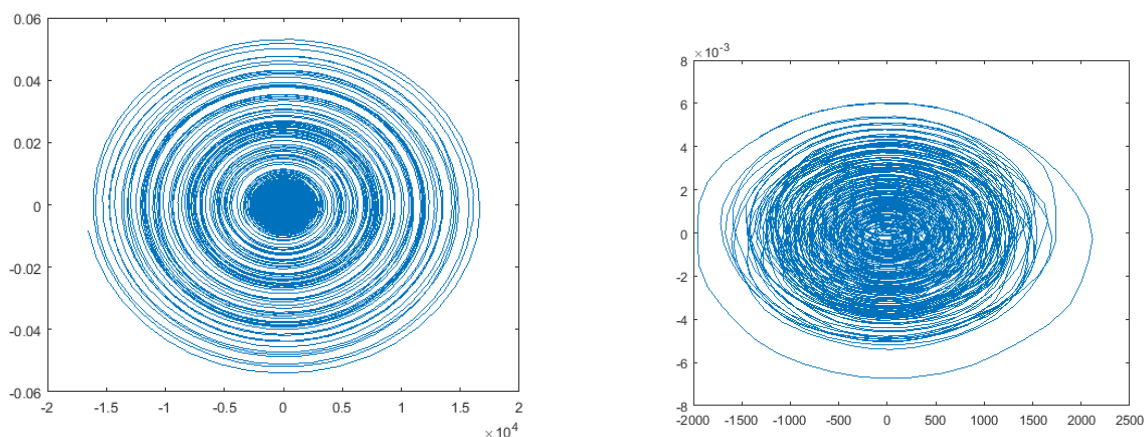
Závislost koeficientu útlumu na vlastní frekvenci



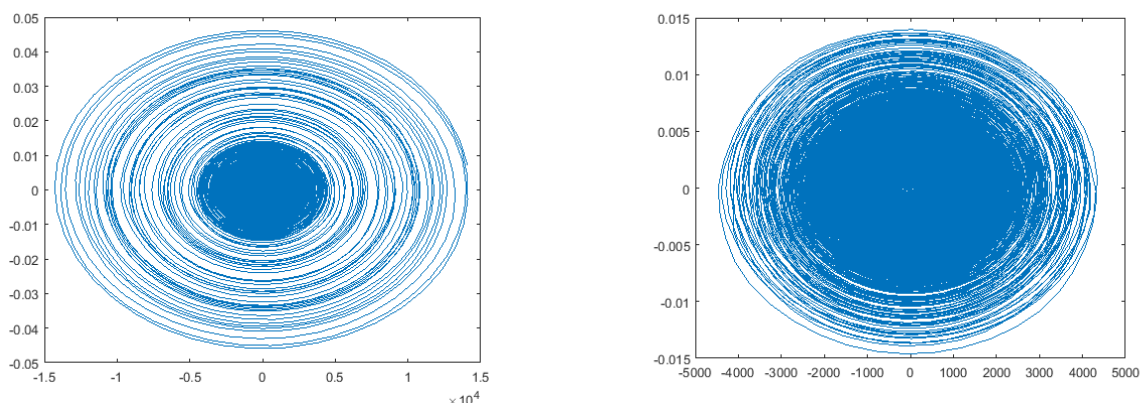
Obrázek 26 – Zobrazení závislosti získaných parametrů hodnot částice o průměru 300 μm

4.4 Fázové diagramy ve stacionárním stavu

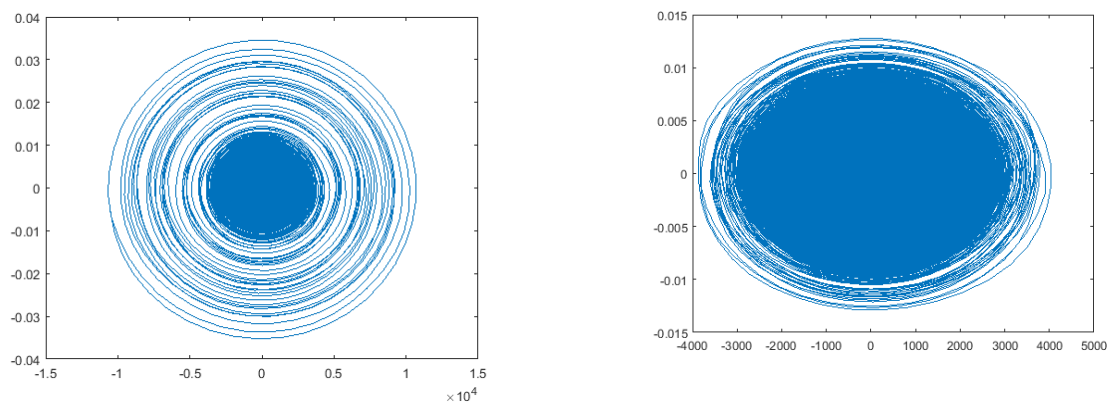
V kapitole 4.3 došlo pomocí detekce hraniční hodnoty mezi přechodovým dějem a stacionárním stavem signálu k rozdělení na tyto části. K rozdělení došlo ale pouze pro x-ové souřadnice. K vytvoření fázových diagramů musí stejným pozičním hodnotám odpovídat také vykreslované hodnoty z vektoru okamžitých rychlostí. Pro tento účel byl napsán krátký skript `stacface.m`, který toto zajišťuje. Následně již je možné přikročit k vykreslení fázových diagramů pro chování částice v laserovém paprsku po vymizení přechodového děje. Následující obrázky jsou vyobrazením signálu včetně přechodového děje a následně bez něj. Jsou zde vyobrazeny pouze exemplární příklady. Všechny vyobrazení jsou součástí přílohy bakalářské práce a to i pro signály vyloučené z analýzy (pro demonstrační účely).



Obrázek 27 – Fázové diagramy: průměr částice $150\ \mu\text{m}$, doba simulace $0,01\ \text{s}$



Obrázek 28 – Fázové diagramy: průměr částice $150\ \mu\text{m}$, doba simulace $0,03\ \text{s}$



Obrázek 299 – Fázové diagramy: průměr částice $150\ \mu\text{m}$, doba simulace $0,05\ \text{s}$

Z měřítek fázových diagramů je dobře znatelný rozdíl mezi rozsahem přechodového děje způsobeným vnikem částic „vymrštěné“ do paprsku pomocí rázové vlny v porovnání s přirozeným chováním částice při optickém zachycování. V příloze bakalářské práce jsou kromě vyobrazená fázových diagramů také záznamy trajektorií, které jsou tak nápomocny při analýze délky přechodového děje a strmosti jeho útlumu.

5. ZÁVĚR

První částí této bakalářské práce bylo seznámit se s metodami vyhodnocování vlastností optické pasti pomocí náhodného pohybu částice v pod-tlumeném režimu. První částí teoretické rešerše bylo seznámení s problematikou optického zachycování a Brownova pohybu. Dále se teoretická rešerše zaměřuje na analytické metody typu spektrální hustota energie, auto a kros korelace a histogramy.

Druhá část se zaměřuje na práci s daty opticky zastavené částice. Konkrétně jde o data simulovaná pomocí souboru poskytnutých funkcí, jejichž výstupem byly mimo jiné vektory s daty pozic trajektorie v jednotlivých časech společně s okamžitými rychlostmi těchto okamžiků. Pomocí těchto dat je možné zkonstruovat fázové diagramy, které charakteristicky nastiňují chování částice při zachycení. Celkem bylo nasimulováno 2000 trajektorií o různých délkách/časech trvání a pro různé rozměry částic (0,085 μm , 0,15 μm , 0,225 μm a 0,300 μm). Pro každou podmínku bylo nasimulováno celkem sto trajektorií, ze kterých byla následně získána jedna průměrná trajektorie. Vykreslení všech těchto průměrných trajektorií je součástí přílohy této bakalářské práce, a to hlavně z důvodu ověření, že bylo nutné některá data eliminovat vzhledem k tomu, že nevykazovaly potřebné charakteristiky signálu pro aplikaci postupů vytvořených v následující části práce. Po seznámení s fázovými diagramy bylo na řadě zjistit vliv frekvenčních filtrů na tyto diagramy. Bohužel tato část ve finální části práce nemohla být dostatečně zakomponována do výsledného dokumentu z většího počtu důvodů, které jednoduše nemohou posloužit jako odůvodnění, a proto tu nebudou zbytečně vypsány. Nicméně v době obhajoby tato část práce nebude v pozadí za ostatními problematikami. Po filtraci přichází konečně na řadu analýza přechodového děje, který se objevuje na začátku každého signálu (každého, který nebyl vyřazen). Tento přechodový děj může být popsán kromě pozičních a časových hodnot dále pomocí dvou parametrů – mezní frekvence a koeficient útlumu. Tato problematika je vysvětlena v kapitole 4.3, kam je zařazeno seznámení s problematikou a metodami, které se na jejím řešení podílely. Tato část práce mimo jiné nachází rozhraní v signálu mezi přechodovým dějem a stacionárním stavem, který ho následuje. Takto bylo možné určit tento rozsah signálu a následně ho opět vyobrazit pomocí fázových diagramů, které jsou zobrazeny jak v původní tak finální podobě z části přímo v dokumentu bakalářské práce a v plném rozsahu v příloze práce.

Součástí práce mělo být také zmapování parametrů. Přestože získané parametry byly získány a vypsány do tabulky, jejich množství není statisticky významné. Hodnoty z tabulky sice byly vyneseny do grafu, ale jako mapy by je autorka sama neklasifikovala.

Další částí, ke které se autorka plánuje detailněji (ale přesto stručně) vyjádřit v okamžiku obhajoby je problematika zachycování ve vakuu v kontrastu s metodami zachytávání ve vodních prostředích.

SEZNAM LITERATURY

- [1] MISHCHENKO, M., P.H. Jones, O.M. Maragò, G. Volpe. *Optical Tweezers: Principles and Applications*, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2015, ISBN: 978-1-107-05116-4. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. . 10.1016/j.jqsrt.2016.03.013.
- [2] Lebedev, P. (2017). Experimental examination of light pressure. Ann Der Physik. 6.
- [3] Ashkin, A. 2000. History of optical trapping and manipulation of small-neutral particles, atoms, and molecules. IEEE J. Sel. Top. Quant. El., 6, 841–56.
- [4] ENGST, Pavel a Milan HORÁK. *Aplikace laserů*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1989. Populární přednášky o fyzice.
- [5] HALLIDAY, David, Robert RESNICK a Jearl WALKER. *Fyzika: vysokoškolská učebnice obecné fyziky*. Brno: VUTIUM, 2000. Překlady vysokoškolských učebnic. ISBN 80-214-1868-0.
- [6] MIŠEK, Ján, KUČERA Ladislav, KORTÁN Josef. *Polovodičové zdroje optického záření*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1988. Polovodičová technika. Sv. 38.
- [7] ÚLEHLA, Ivan, Zbyšek TRKA a Michal SUK. *Atomy, jádra, částice: celostátní vysokoškolská učebnice pro stud. matematicko-fyzikálních a přírodovědných fakult*. Praha: Academia, 1990. ISBN 80-200-0135-2.
- [8] LANDSHOFF, Peter, Allen METHERELL a Gareth REES. *Essential quantum physics*. New ed. New York: Cambridge University Press, 1997. ISBN 0-521-62993-4.
- [9] FEYNMAN, Richard Phillips, Matthew SANDS a Robert B. LEIGHTON. *Feynmanovy přednášky z fyziky s řešenými příklady*. Havlíčkův Brod: Fragment, 2002. ISBN 80-7200-421-2.
- [10] FIKES, Ladislav. *Fyzika nízkých tlaků pro 3. ročník SPŠ elektrotechnických: učebnice pro předmět vyučovaný na SPŠ elektro oboru 26-67-6 Technologie výroby mikroelektronických prvků*. Praha: SNTL-Nakladatelství technické literatury, 1991. ISBN 80-03-00409-8.
- [11] J. E. *Fundamentals of quantum mechanics*. San Diego: Academic Press, c1998. ISBN 0-12-356775-0.
- [12] SVOBODA, Emanuel. *Molekulová fyzika*. Praha: Academia, 1992. ISBN 80-200-0025-9.
- [13] BERG-SØRENSEN, K., H. FLYVBJERG, *Power spectrum analysis for optical tweezers*. Review of Scientific Instruments 75, 594 (2004). [DOI: 10.1063/1.1645654]
- [14] NØRRELYKKE, S., F., H. FLYVBJERG, *Power spectrum analysis with least-squares fitting: Amplitude bias and its elimination, with application to optical tweezers and atomic force microscope cantilevers*. Review of Scientific Instruments 81, 075109 (2010). [DOI: 10.1063/1.3455217]

- [15] NØRRELYKKE, S., F., H. FLYVBJERG. *Harmonic oscillator in heat bath: Exact simulation of time-lapse-recorded data and exact analytical benchmark statistics*. Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. 83. (2011). 041103. [DOI: 10.1103/PhysRevE.83.041103.]
- [16] GEISLER, J., *Dynamics of optically levitated nanoarticles in high vakuum*. GRIN Publishing, 2015. ISBN-10: 365697361X
- [17] FITZPATRICK, Richard. *Damped Harmonic Oscillation* [online]. [cit. 25.5.2018]. Dostupný na WWW: <http://farside.ph.utexas.edu/teaching/315/Waves/node10.html>

SEZNAM SYMBOLŮ, VELIČIN A ZKRATEK

MSD	-	Mean Squared Displacement
PSD	-	Power spectral density
ACF	-	Autocorrelation function
CCF	-	Correlation function