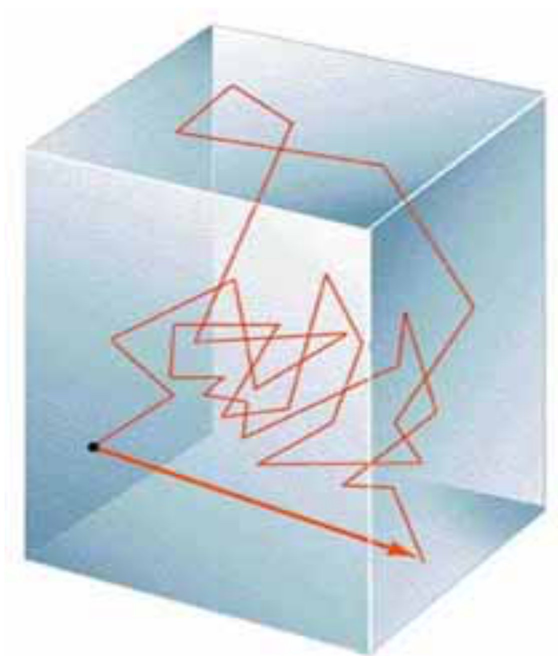
4300259 – Termoestatística

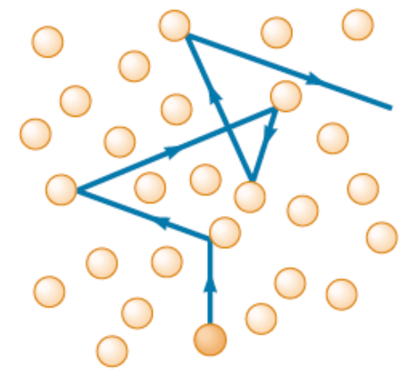
Movimento Browniano - II

Movimento Browniano

– Difusão Molecular

– Livre Caminho Médio (distância média percorrida entre colisões sucessivas)





$$\boxed{L = \frac{1}{\sqrt{2}\, n\, \sigma}}$$

$$\Delta t_c = \frac{L}{\langle v^2 \rangle^{1/2}}$$

$$L = 2.25 \times 10^{-7}\,\mathrm{m}$$

(moléculas do ar, 293 K e 1 atm)

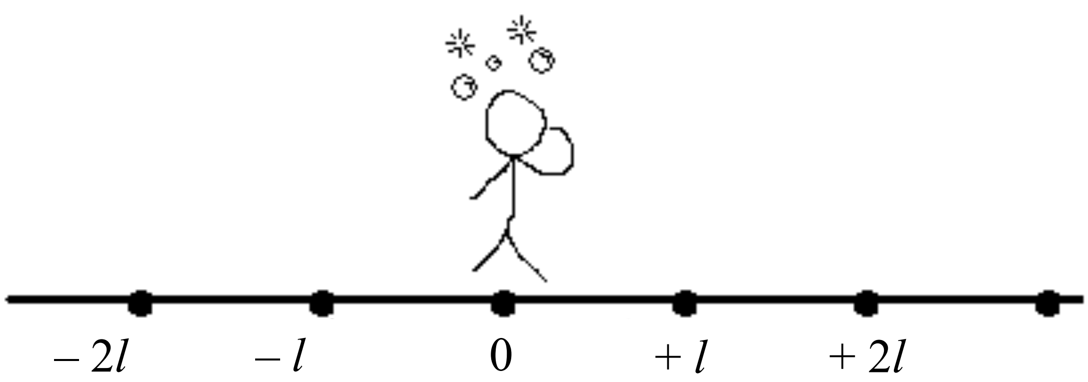
http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/3311/3391331/blb1008.html

Passeio Aleatório (Passeio do Bêbado)

Passeio Aleatório: vamos construir um modelo unidimensional para o movimento difusivo, ao longo do eixo Ox. Uma pessoa parte de $x = 0$ em $t = 0$ e sempre dá passos de comprimento l, para frente ou para trás.

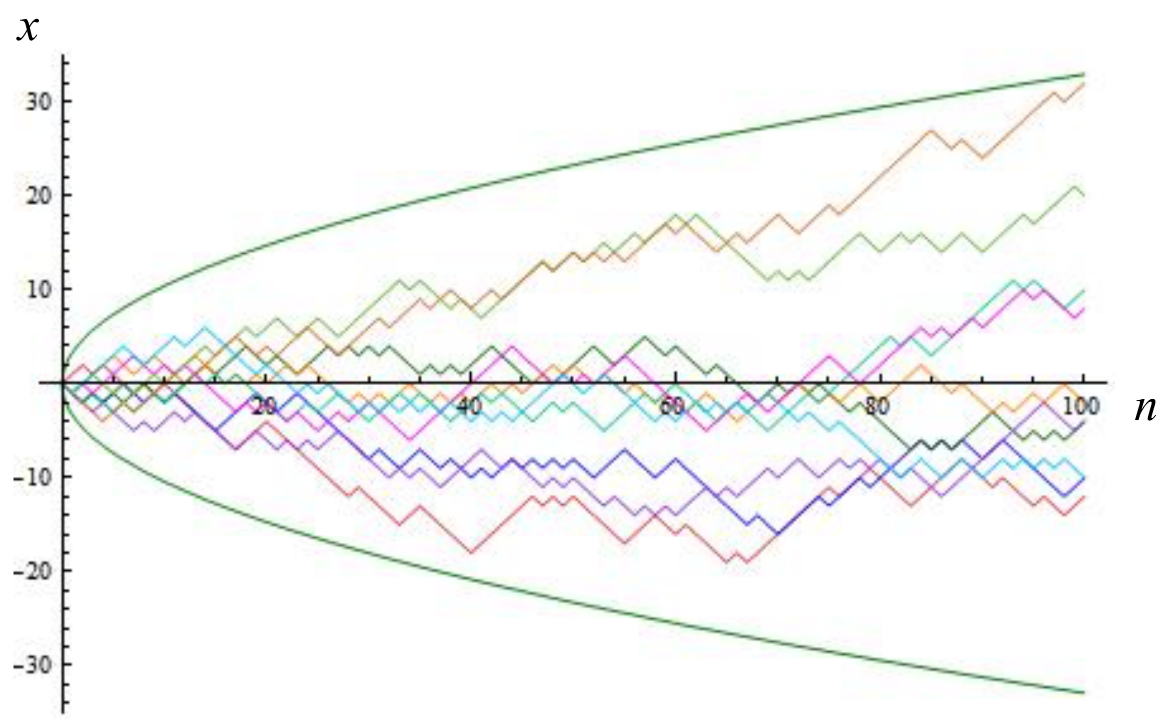
– A pessoa decide que irá sortear o sentido de seus passos utilizando uma moeda: dará um passo para frente ($+l$) se o resultado for "cara", ou um passo para trás ($–l$) ser for "coroa".

– Esse modelo também é denominado caminhada aleatória ou caminhada/passeio do bêbado.



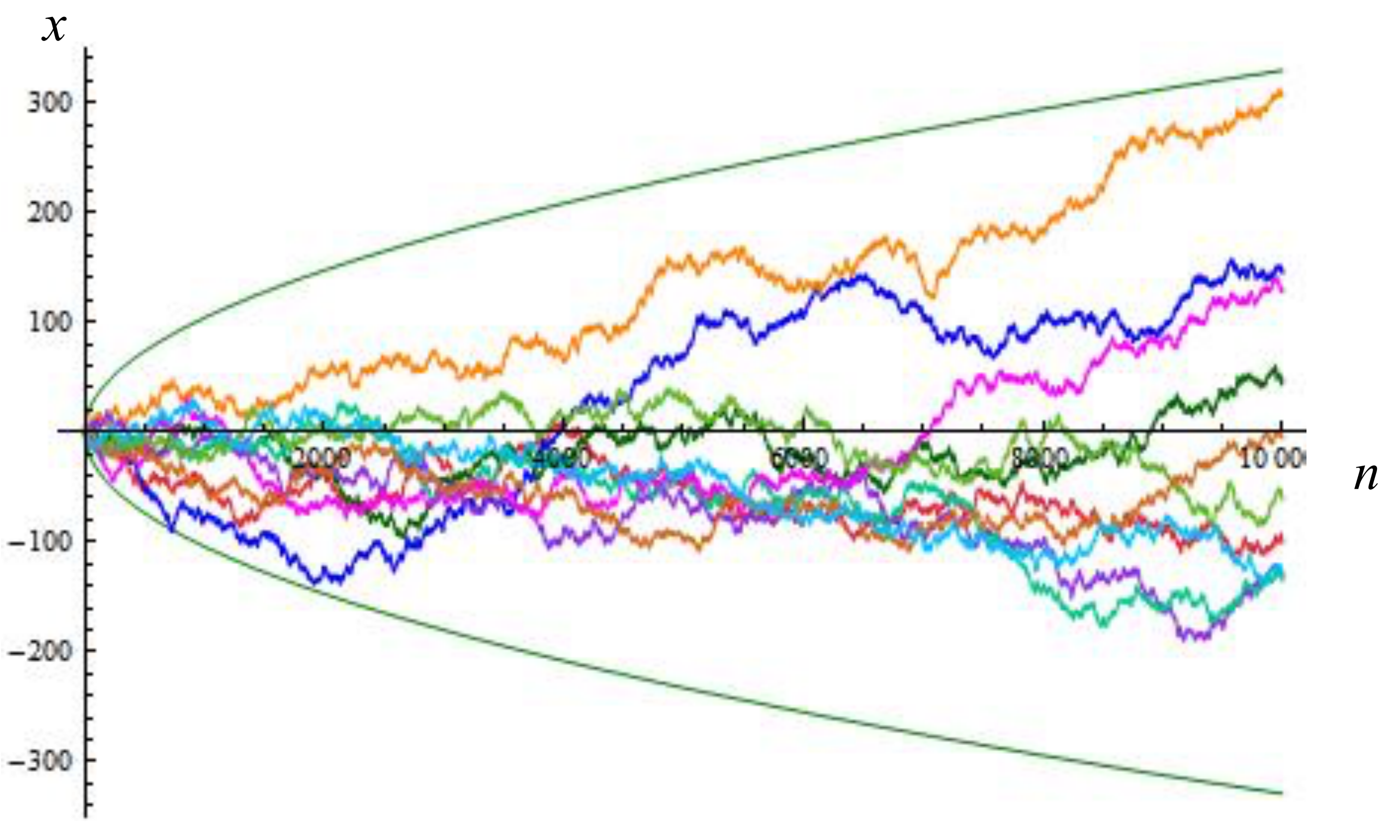
Passeio Aleatório

– A simulação abaixo mostra algumas trajetórias do passeio aleatório em uma dimensão. A curva mostra a posição x em função do número de passos, n. Em unidades arbitrárias, cada passo percorre a distância $l = 1$ (para frente ou para trás), e o número total de passos é $N = 100$.



Passeio Aleatório

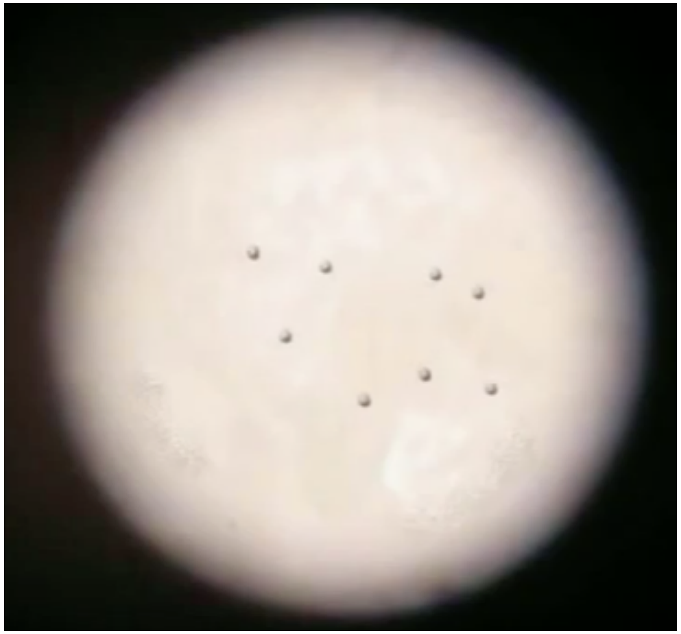
– Abaixo uma simulação semelhante, porém para o número total de passos $N = 10\,000$.

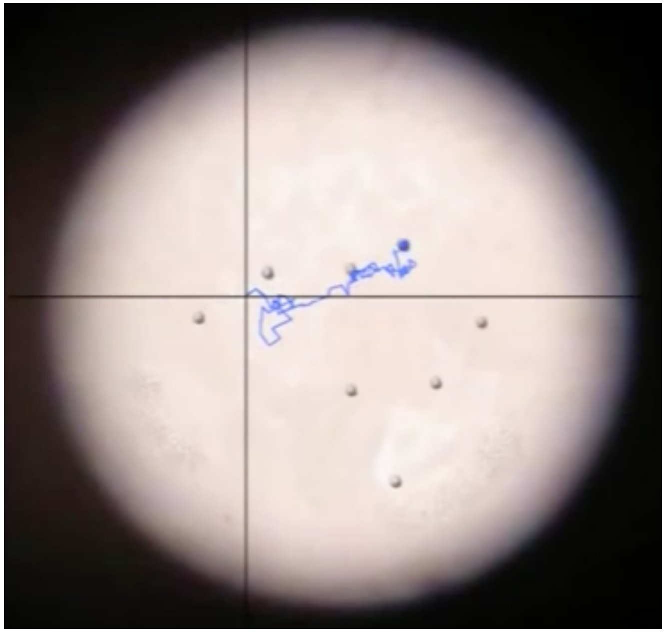


http://demonstrations.wolfram.com/SimulatingTheSimpleRandomWalk/.

Passeio Aleatório e Movimento Browniano

– Para conectar a discussão da aula passada com o Passeio Aleatório, vamos utilizar um vídeo disponível no youtube: *https://www.youtube.com/watch?v=pdz7wFHSLD0*

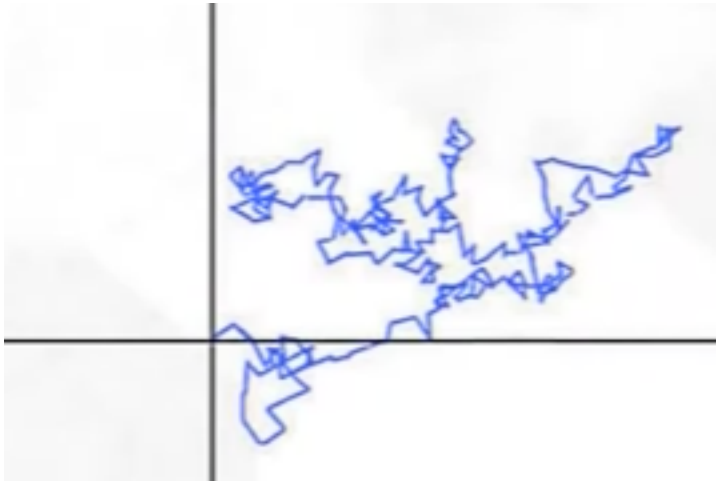




1) O filme mostra uma simulação do movimento dos grãos de pólen suspensos em água (devido ao "bombardeio" das moléculas de água).

2) A trajetória de uma única partícula de pólen é então destacada por um "rastro" na cor azul.

Passeio Aleatório e Movimento Browniano



3) A trajetória é então destacada. Trata-se de um Movimento Browniano Bidimensional, sendo indicados os eixos Cartesianos.

– A seguir, iremos observar a projeção do movimento bidimensional sobre o eixo Ox. Ao invés descrever a coordenada x em função do número de passos, $x(n)$, iremos construir a função $x(t_n)$, onde o tempo é proporcional ao número de passos: $t_n = n\Delta t$.

Em outras palavras, admitimos que um passo é dado a cada intervalo (médio) Δt, de forma que $t_n = n\Delta t$, onde n é o número de passos.

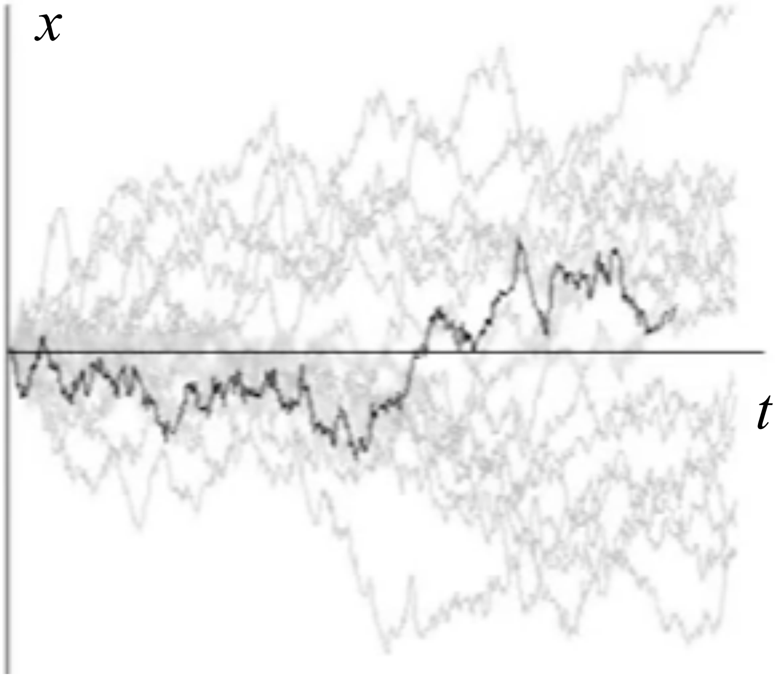
Passeio Aleatório e Movimento Browniano

4) A projeção é exemplificada para três passos, com $\Delta t = 1$ (unidades arbitrárias). Entre $t = 0$ e $t = 1$, a partícula (detalhe em vermelho) tem deslocamentos positivos nas direções *Ox* e *Oy*.

Entre $t = 1$ e $t = 2$ (segundo passo), o deslocamento é positivo na direção *Ox* e negativo na direção *Oy*. O mesmo ocorre no terceiro passo, entre $t = 2$ e $t = 3$.

Note que, no exemplo destacado, os três passos são "para frente" ao longo da direção *Ox*. Isso é mostrado na projeção $x(t)$ mostrada no gráfico inferior. (Há um comentário sobre resolução no vídeo, mas não o considero importante.)

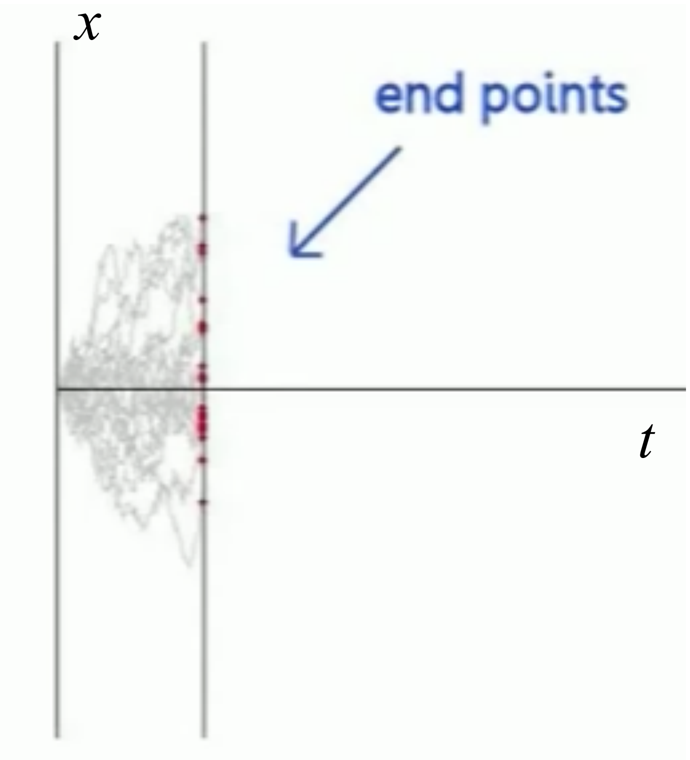
Passeio Aleatório e Movimento Browniano



5) O vídeo mostra então projeções $x(t_n)$ para 20 trajetórias. Você deve ter percebido a semelhança com os passeios aleatórios discutidos no início da aula.

De fato, é possível construir uma simulação como a mostrada no filme (Movimento Browniano 2D) admitindo passeios aleatórios para as componentes Cartesianas do movimento (algo que podemos estender a três dimensões).

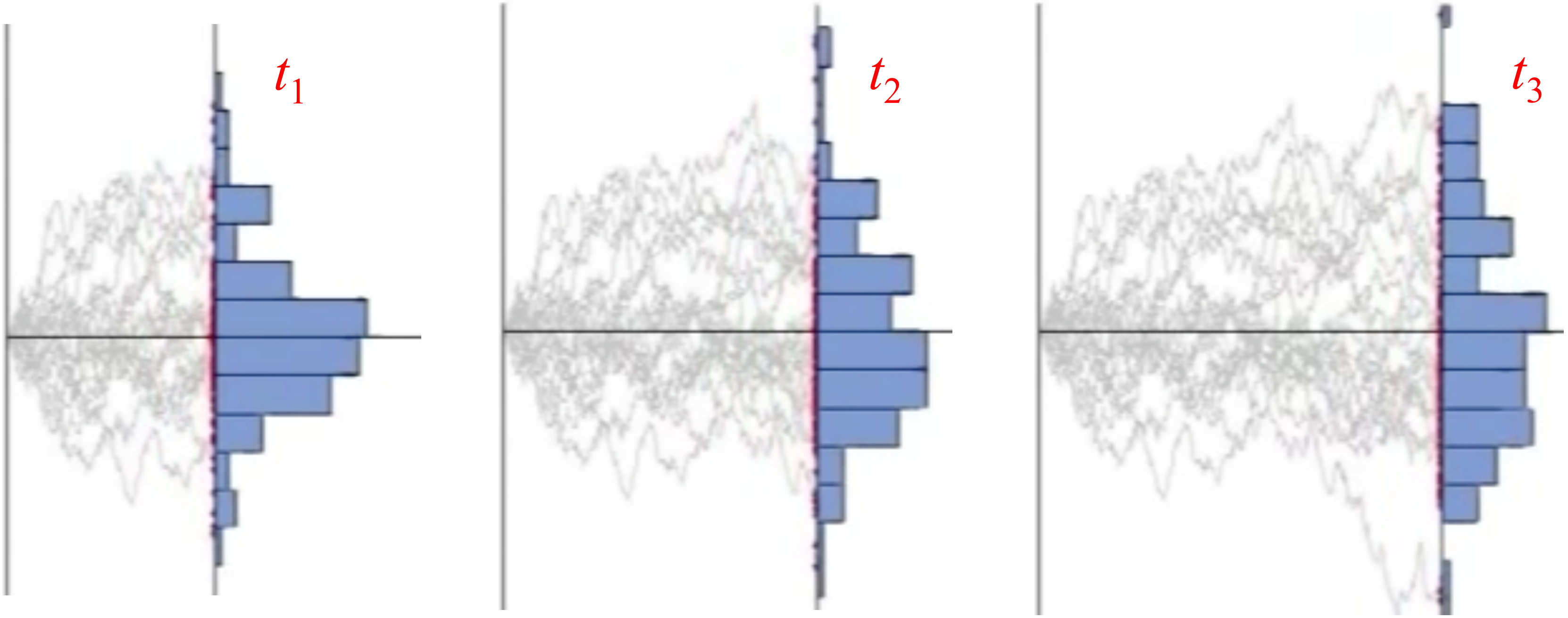
Passeio Aleatório e Movimento Browniano



6) O vídeo então chama atenção para a distribuição dos valores de $x_i(t_n)$ para todas as trajetórias, em um instante t_n qualquer (o índice i distingue as trajetórias). Esses valores de $x_i(t_n)$ são indicados pelos pontos vermelhos e denominados *end points*.

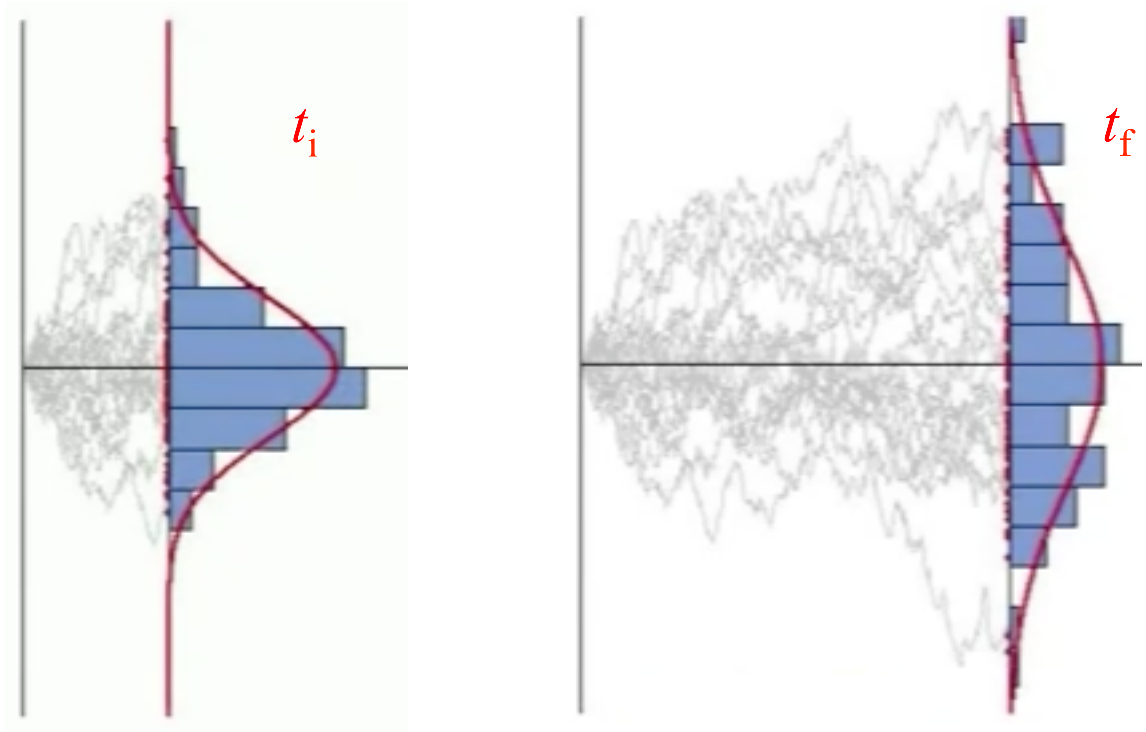
Note que as as posições $x_i(t_n)$ definem uma *Função de Distribuição de Probabilidade*, relacionada à probabilidade de encontrar uma partícula em torno de uma posição x no instante t_n. A seguir, vamos considerar, para 100 trajetórias, como essa Função de Distribuição se comporta.

Passeio Aleatório e Movimento Browniano



7) A Função de Distribuição é mostrada em três instantes, $t_1 < t_2 < t_3$, por meio dos histogramas. Como veremos, trata-se de uma *Distribuição Binomial*, que no limite de um grande número de passos, é aproximadamente igual a uma *Distribuição Normal* (Gaussiana).

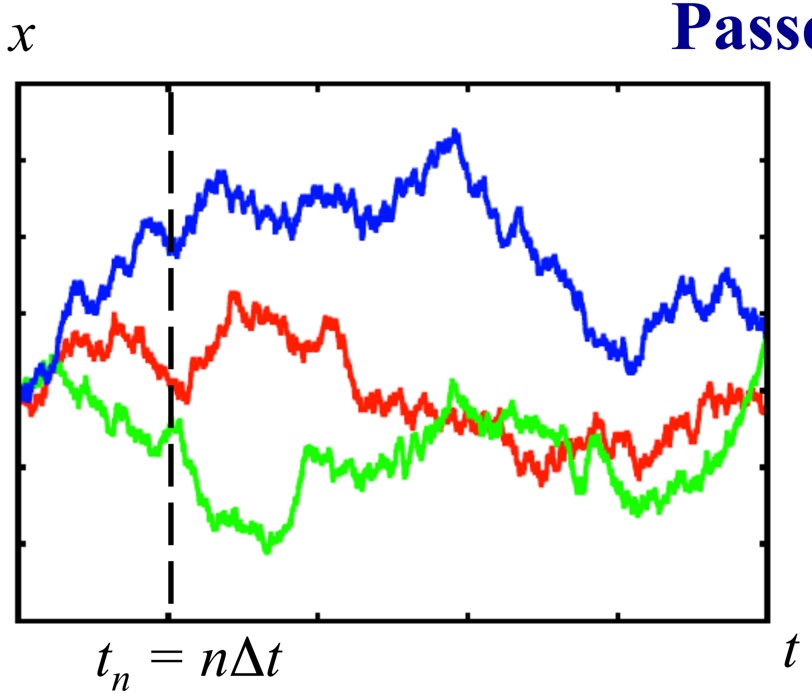
Passeio Aleatório e Movimento Browniano



8) As linhas vermelhas mostram o limite de Distribuição Normal para dois instantes, $t_i < t_f$. Note que, em ambos os casos, o valor médio da distribuição é zero. Entretanto, a distribuição em t_f é mais larga que a distribuição em t_f. Em termos matemáticos:

$$\langle x \rangle_{t_i} = \langle x \rangle_{t_f} = 0 \qquad \sigma^2_{t_i} < \sigma^2_{t_f}$$

Passeio Aleatório



– No que segue, sempre indicaremos médias e probabilidades calculadas sobre uma grande coleção de passeios unidimensionais (são mostrados apenas 3 para que a figura não fique poluída).

– Recordando a notação, passo dos passeios aleatórios é $\pm l$; o número de passos é $0 \leq n \leq N$; o tempo é dado por $t_n = n\Delta t$.

– Para o i-ésimo passeio, denotaremos por $x_{i,n}$ a posição após n passos. Além disso, $<x_n>$ será a posição média (da coleção de passeios) após n passos. Explicitamente, para N passeios aleatórios teremos:

$$\langle x_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{i,n}$$

– Após 1 passo, teremos, necessariamente, $x_{i,1} = \pm l$. Portanto:

$$\langle x_1 \rangle = 0 \qquad \langle x_1^2 \rangle = l^2$$

– Após 2 passos, $x_{i,2} = x_{i,1} \pm l$. Portanto:

$$\langle x_2 \rangle = 0 \qquad \langle x_2^2 \rangle = \underbrace{\langle x_1^2 \rangle}_{= l^2} \pm 2l \underbrace{\langle x_1 \rangle}_{= 0} + \langle l^2 \rangle = 2l^2$$

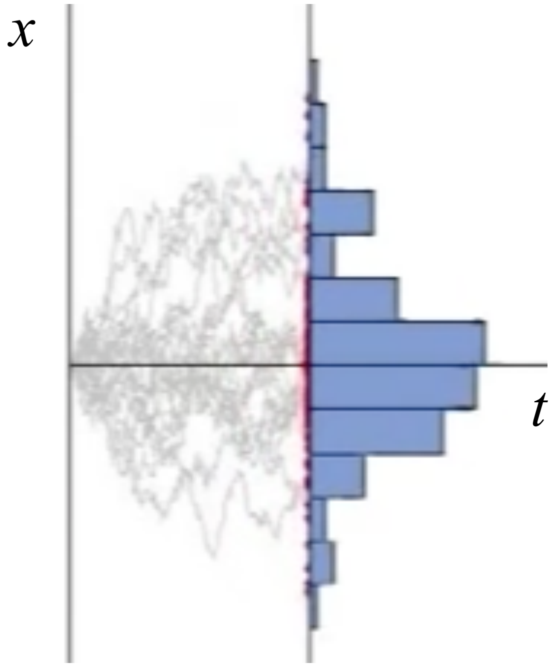
– Após 3 passos, $x_{i,3} = x_{i,2} \pm l$. Portanto:

$$\langle x_3 \rangle = 0 \qquad \langle x_3^2 \rangle = \underbrace{\langle x_2^2 \rangle}_{= 2l^2} \pm 2l \underbrace{\langle x_2 \rangle}_{= 0} + \langle l^2 \rangle = 3l^2$$

– Após n passos:

$$\langle x_n \rangle = 0 \qquad \langle x_n^2 \rangle = nl^2$$

Coeficiente de Difusão



$t_n = n\Delta t$

– Notamos que a distribuição dos passeios após n passos tem média zero, mas sua largura aumenta com o número de passos:

$$\langle x_n \rangle = 0$$

$$\sigma_n^2 = \langle x_n^2 \rangle - \underbrace{\langle x_n \rangle^2}_{=0} = nl^2$$

$$\sigma_n = \langle x_n^2 \rangle^{1/2} = \sqrt{n}\, l$$

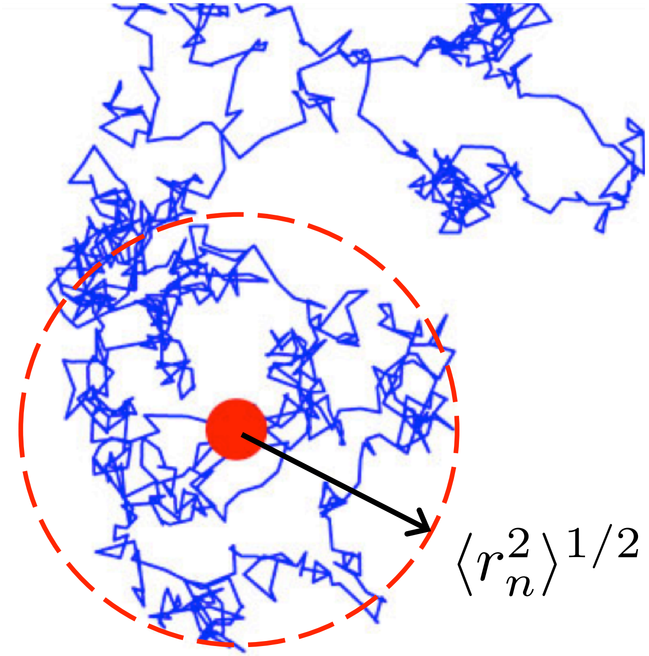
– Uma vez que $<x^2>$ é proporcional ao número de passos e que o tempo também é proporcional a n, iremos definir o *Coeficiente de Difusão* (*D*),

$$\langle x_n^2 \rangle = nl^2 = \frac{l^2}{\Delta t} t_n \equiv 2Dt_n$$

Coeficiente de Difusão

– Lembrando que não há direções preferenciais, será legítimo admitir, em duas dimensões:

$$\langle x_n^2 \rangle = \langle y_n^2 \rangle = \frac{1}{2}\langle r_n^2 \rangle$$
$$\langle r_n^2 \rangle = 4Dt_n$$



– Após n passos, o desvio raiz quadrático médio $\sigma_n = \langle r_n{}^2 \rangle^{1/2}$ caracteriza o quanto uma partícula se afasta, em média, da origem em $t = 0$. Assim, a difusão será tão mais eficiente quanto maior for o coeficiente D.

– Lembre-se: $\langle r_n{}^2 \rangle^{1/2}$ representa uma média sobre os n-ésimos passos dos passeios de muitas partículas.