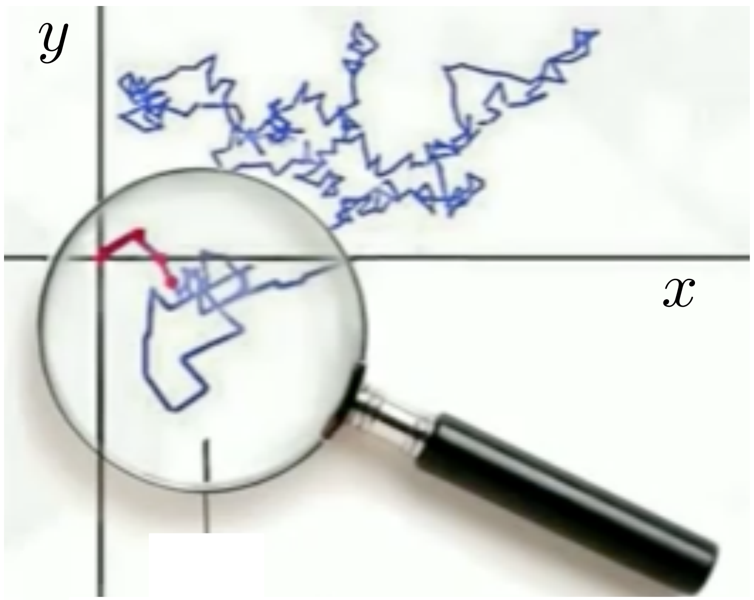
4302401 – Mecânica Estatística

Movimento Difusivo

Passeio Aleatório

–**Movimento Browniano (Difusivo) unidimensional** (projeção):



Posição após N passos:

$$x_N = (n_1 - n_2)l = ml$$

– Passos de comprimento l (fixo)

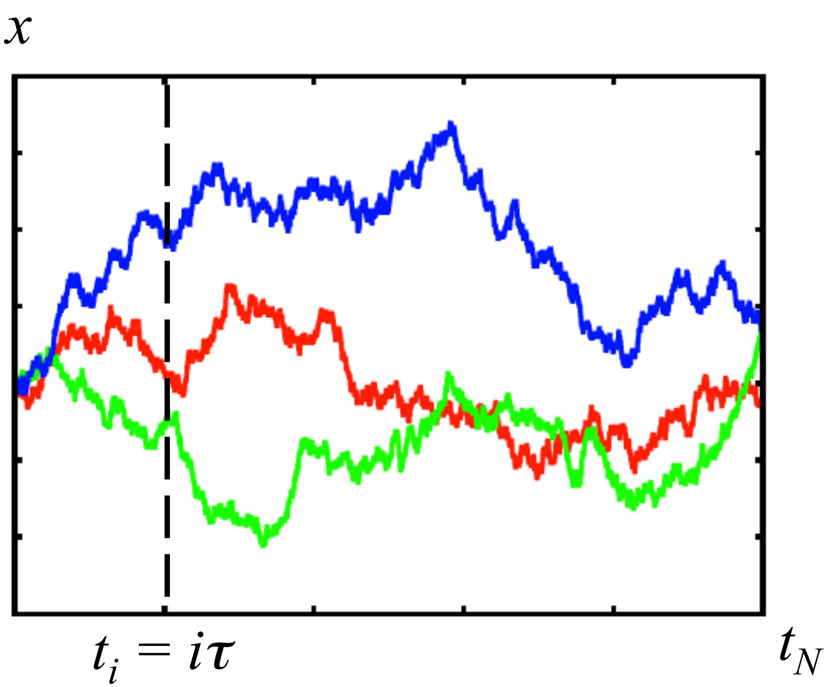
– Prob. de um passo para frente: p

– Prob. de um passo para trás: $q = (1 - p)$

– n_1 = no. de passos para frente

– n_2 = no. de passos para trás

– $N = (n_1 + n_2)$ = no. de passos



– Projeções de três trajetórias (deslocamentos em relação à origem).

– Passos com intervalo de tempo τ característico (fixo), $t_i = i\tau$.

– Notação: $q = (1 - p)$

– Em uma grande coleção de passeios aleatórios com N passos, a probabilidade de ocorrência de n passos adiante será:

$$W_N(n_1) = \frac{N!}{n_1!\,(N-n_1)!}\,p^{n_1}\,q^{N-n_1} = \begin{pmatrix} N \\ n_1 \end{pmatrix} p^{n_1}\,q^{N-n_1}$$

– Resultados da última aula:

$$\langle n_1 \rangle = Np \qquad \langle n_1^2 \rangle = (Np)^2 + Npq \qquad \sigma_{n_1}^2 = Npq$$

Exercício: (a) Explorando as relações $x_N = (n_1 - n_2)l = (2n_1 - N)l$, obtenha $<x_N>$, $<x_N^2>$ e σ_x^2 em função de N, p, q, l.

(b) Obtenha também a relação entre σ_{n1}^2 e σ_x^2.

– Valor esperado do deslocamento:

$$\langle x_N \rangle = \langle (2n_1 - N)\, l \rangle = 2l\langle n_1 \rangle - Nl = Nl(2p-1) =$$

$$= Nl(p-q)$$

– $<x_N^2>$ e variância:

$$\langle x_N^2 \rangle = \langle (2n_1 - N)^2\, l^2 \rangle = (4\langle n_1^2 \rangle - 4\langle n_1 \rangle N + N^2)l^2 =$$

$$= 4l^2\, [(N^2p^2 + Npq) - N^2p + \frac{1}{4}N^2\,] =$$

$$= 4l^2\, [N^2p(1-q) + Npq - N^2p + \frac{1}{4}N^2(p+q)^2] =$$

$$= N^2l^2(p-q)^2 + 4Nl^2pq$$

$$\sigma_x^2 = \langle x_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 = 4Nl^2pq = 4l^2\sigma_{n_1}^2$$

Limite Gaussiano ($N \to \infty$)

$$\boxed{p(n_1) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{n_1}^2}} \exp\left[-\frac{(n_1 - \langle n_1\rangle)^2}{2\sigma_{n_1}^2}\right]}$$

– Para um dado número de passos (N), há uma relação biunívoca $n_1(x)$. Porém, expressar a probabilidade $p(x)dx$ envolve também a "densidade de estados" dn_1/dx, além de $(n_1 - \langle n_1 \rangle) = (x - \langle x \rangle)/(2l)$ e $\sigma_x^2 = 4l^2\, \sigma_{n1}^2$.

$$p(n_1)\, dn_1 \;=\; p(n_1(x))\frac{dn_1}{dx}dx \;=$$

$$= \;\frac{2l}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left[-\frac{4l^2}{2\sigma_x^2}\frac{1}{4l^2}(x - \langle x\rangle)^2\right]\frac{dx}{2l}$$

$$\boxed{p(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left[-\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{2\sigma_x^2}\right]}$$

Equação de Difusão

– Retomando o problema do movimento Browniano, iremos estabelecer relação entre variância e tempo:

$$t_N = N\tau$$

$$\sigma_x^2 = 4Nl^2pq = 4pq\left(\frac{l^2}{\tau}\right)t$$

– Admitindo movimento isotrópico, $p = q = ½$, donde $\langle x \rangle = 0$, iremos definir o *Coeficiente de Difusão* (*D*):

$$D \equiv \frac{l^2}{2\tau} \qquad p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

Equação de Difusão

– **Exercício:** Derive a densidade de probabilidade

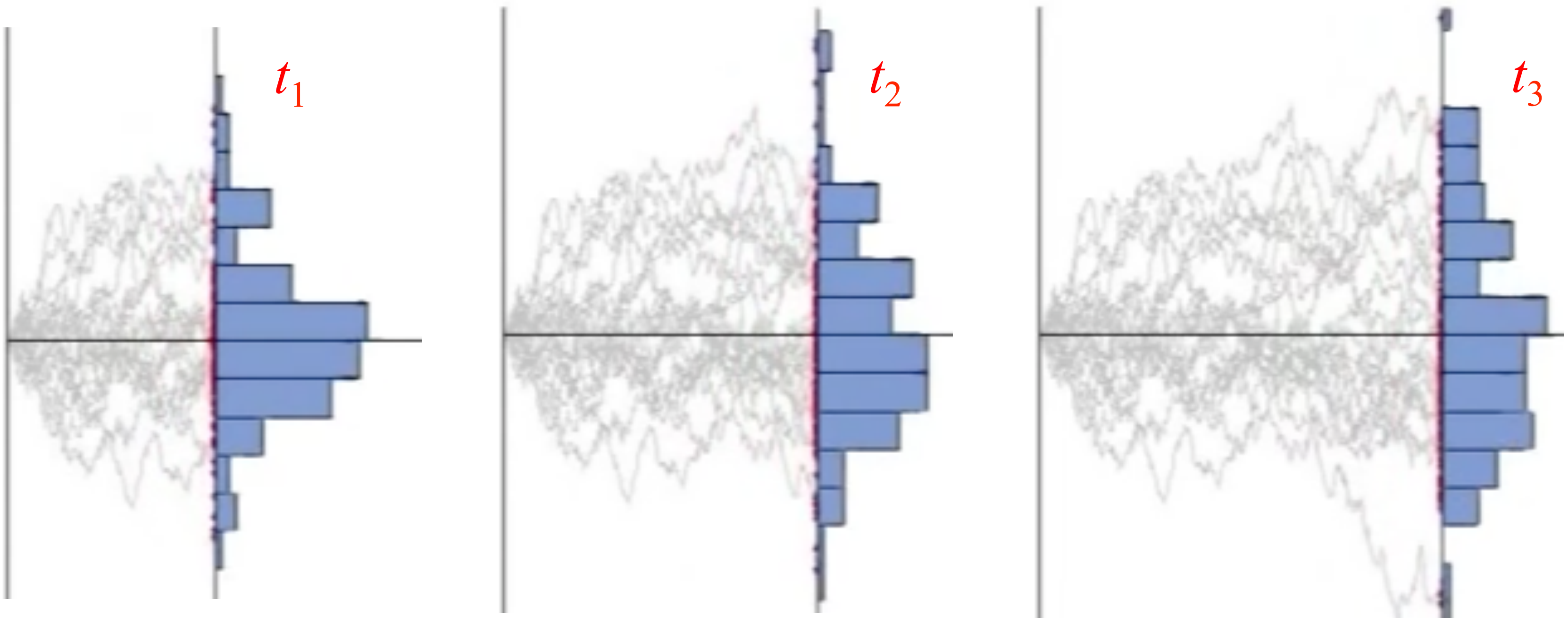
$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

e mostre que

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \frac{1}{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x,t)}$$

O resultado acima é conhecido como *equação de difusão*.

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$



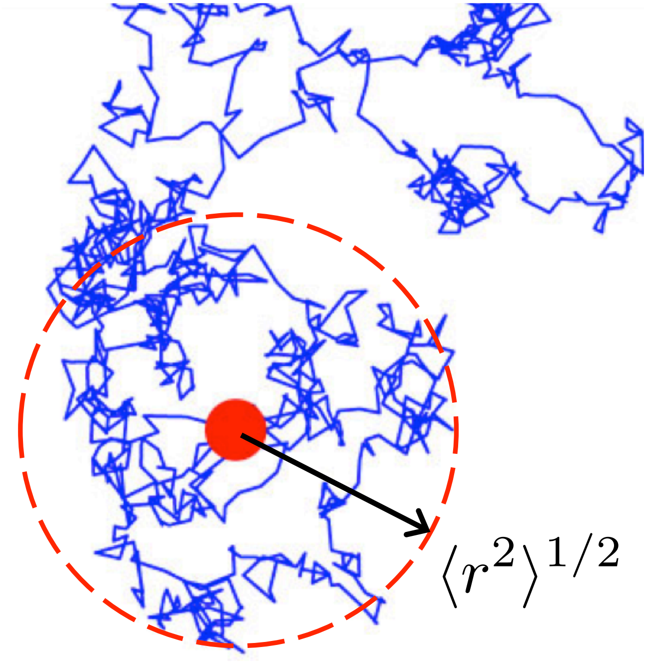
– A simulação foi realizada com poucas (20) trajetórias, não havendo convergência estatística. Porém, três fatos relevantes são evidentes: <x> ≈ 0, histogramas com forma aproximadamente Gaussiana, e σ_x^2 aumentando com o tempo. Filme ilustrativo disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=pdz7wFHSLD0

– Sendo o movimento é bidimensional e isotrópico ($\langle x \rangle = 0$):

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle = \left(\frac{l^2}{\tau}\right) t = 2Dt$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2}\langle r^2 \rangle$$

$$\langle r^2 \rangle = 4Dt$$



– O raio $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ caracteriza o quanto as partículas se afastam da posição inicial, após N passos.

– $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ representa uma média sobre os passeios aleatórios (N passos) de uma grande coleção de partículas.