Física Estatística Complementar

<u>Série 1</u>: Movimento Browniano e passeio aleatório

1. Considere uma partícula Browniana esférica de massa m e raio r num fluido de viscosidade η à temperatura T. A respetiva equação de Langevin é:

$$\dot{\vec{v}}(t) = -\gamma\vec{v}(t) + \vec{\xi}(t) \quad , \tag{1}$$

onde $\gamma = 6\pi r\eta/m$ e $\vec{\xi}$ representa a parte rapidamente flutuante da interação com o fluido: $\langle\vec{\xi}(t)\rangle = 0$ e $\langle\xi_i(t)\xi_j(t')\rangle = \Gamma/m\delta_{ij}\delta(t-t')$ para qualquer coordenada i e j, em que $\langle\ldots\rangle$ é a média sobre o ensemble.

1.1. Mostre que, no limite em que $\vec{\xi}(t) = 0$, a solução da Eq. (1) é $\vec{v}(t) = \vec{v}(0)e^{-\gamma t}$.

1.2. Derive a solução formal para a velocidade $\vec{v}(t)$.

1.2.1. Determine $\langle\vec{v}(t)\rangle$, assumindo que a velocidade inicial é a mesma para todo o ensemble de partículas.

1.2.2. Determine $\langle v^2(t)\rangle$. Tendo em atenção o teorema da equipartição de energia mostre que $\Gamma = 2\gamma k_B T$, onde d é a dimensão espacial do sistema.

1.3. Derive agora a solução formal para a posição $\vec{x}(t)$.

1.3.1. Determine $\langle\vec{x}(t)\rangle$, assumindo que a posição e a velocidade iniciais são as mesmas para todo o ensemble de partículas.

1.3.2. Determine $\langle x^2(t)\rangle$. Mostre que para tempos longos $\langle x^2(t)\rangle \sim 2d\left[\frac{k_B T}{m\gamma}\right]t$.

2. Para o mesmo sistema do problema anterior, a versão discretizada da equação das velocidades é:

$$\vec{v}(t) - \vec{v}(0)e^{-\gamma t} = \sum_{j=1}^{t/\Delta t}\vec{\zeta}_j \quad , \qquad \vec{\zeta}_j = e^{-\gamma t}\int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t}\vec{\xi}(t')e^{\gamma t'}dt' \quad . \tag{2}$$

2.1. Aplicando o teorema do limite central, mostre que, para cada direção $i, j \in \{x, y, z\}$, $\langle(v_i(t) - v_i(0)e^{-\gamma t})(v_j(t) - v_j(0)e^{-\gamma t})\rangle = \frac{k_B T}{m}\left[1 - e^{-2\gamma t}\right]\delta_{ij}$.

2.2. Sendo $P(\vec{v}, t|\vec{v}(0))$ a função densidade de probabilidade para a velocidade e tendo em conta que $P(\vec{v}, t|\vec{v}(0)) = P(v_x, t|v_x(0))P(v_y, t|v_y(0))P(v_z, t|v_z(0))$, mostre que:

$$P(\vec{v}, t|\vec{v}(0)) = \left[\frac{m}{2\pi k_B T\left(1 - e^{-2\gamma t}\right)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{m\left(\vec{v} - \vec{v}(0)e^{-\gamma t}\right)^2}{2k_B T\left(1 - e^{-2\gamma t}\right)}\right] \quad . \tag{3}$$

3. Um passeio aleatório discreto numa cadeia unidimensional, a cada passo, salta para a direita com probabilidade p e para a esquerda com probabilidade $q = 1 - p$. Seja $P_N(x)$ a probabilidade da partícula estar na posição x depois de N passos:

3.1. Escreva a equação mestra para a probabilidade $P_N(x)$.

3.2. Para a condição inicial $P_0(x) = \delta_{x,0}$, mostre que a função geradora da transformada de Fourier,

$$P(k,z) = \sum_{N\geq 0} z^N \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{ikx} P_N(x) \quad , \tag{4}$$

é dada por $P(k,z) = [1 - zu(k)]^{-1}$, onde $u(k) = pe^{ik} + qe^{-ik}$ é a transformada de Fourier da probabilidade de um único passo.

3.3. Determine a distribuição de probabilidade do passeio aleatório.

4. Considere o limite contínuo de um passeio aleatório numa cadeia unidimensional que, a cada passo, salta para a direita com probabilidade p e para a esquerda com probabilidade $q = 1 - p$.

4.1. Para o caso simétrico ($p = q = 1/2$), derive a equação de difusão ($D = 1/2$) expandindo em série de Taylor até primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço.

4.2. Generalize o resultado anterior para o caso assimétrico e mostre que no limite contínuo:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + v\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} = D\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \quad . \tag{5}$$

Determine o coeficiente de difusão D e a velocidade v em função dos parâmetros microscópicos p e q.

4.3. Para a condição inicial $P(x,0) = \delta(x)$, mostre que a solução da Eq. (5) é:

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-vt)^2/4Dt} \quad . \tag{6}$$