Licenciatura en Ciencias Biológicas
Sección Biofísica y Biología de Sistemas
Facultad de Ciencias, Universidad de la República
(2022)

Movimiento Browniano

El movimiento browniano fue descrito sistemáticamente por primera vez por el botánico escocés Robert Brown en 1827, mientras analizaba granos de polen de la flor de *Clarkia pulchella* suspendidos en agua. Lo que observó fue un movimiento agitado ('*jittery*') de amiloplastos y esferosomas eyectados de los granos de polen. Buscando una explicación, descubrió que el mismo movimiento se encontraba en partículas inorgánicas (Ej.: diferentes minerales), así como también en materia cadavérica (Ej.: hojas muertas), descartando así una causa animista, que, por aquel entonces, era una hipótesis común. A pesar de no haber proporcionado una explicación física del fenómeno, este movimiento pasó a denominarse Movimiento Browniano (MB) en su honor.

Este movimiento consistía en el desplazamiento aleatorio en diferentes direcciones del espacio de las partículas en suspensión. Las partículas se movían independientemente de las partículas circundantes y a pesar del movimiento del medio que las contiene. El MB, por tanto, no podía deberse a gradientes físicos (i.e.: concentración, velocidad, presión, temperatura, etc.) ya que, de serlo, las partículas deberían moverse con una cierta dirección y/o velocidad general. A su vez, este movimiento no se amortiguaba con el tiempo, es decir, la probabilidad de que una partícula se mueva una cierta distancia no es proporcional a la misma, contrastando con el hecho de que, clásicamente, un cuerpo que se está moviendo por un fluido, experimenta una fuerza de rozamiento proporcional a su velocidad, y que por tanto, su movimiento debería amortiguarse con el tiempo, y eventualmente, frenarlo.

En 1905, Einstein dio con una solución mecánico-estadística al problema, al tiempo que los aportes de Smoluchowski (en 1906) perfeccionaron el modelo. A continuación, se pasa a demostrar las ecuaciones de Einstein para el MB, de acuerdo con las derivaciones de Langevin para partículas esféricas en una dimensión.

Supongamos que una partícula esférica de radio r está siendo sometida a un bombardeo de las partículas de medio en el que se encuentra, experimentando una fuerza F. Esta fuerza, le impone un cierto movimiento, sobre el cual actuará una fuerza de rozamiento contraria en sentido. Esta fuerza de rozamiento se define como:

$$\left|\overrightarrow{F_r}\right| = fv$$

Donde v es la velocidad de la partícula y f es el coeficiente de rozamiento que, para partículas esféricas, obedece la Ley de Stokes:

$$f = 6\pi\eta r$$

Donde η es el coeficiente de viscosidad del medio en el que se encuentra y r el radio de la partícula. Notar que cuanto mayor es el radio de la partícula, mayor es la fuerza de rozamiento que experimenta. Asimismo, un fluido más viscoso, genera una inercia mayor al movimiento causado por el bombardeo térmico de las partículas.

Planteando la 2da Ley de Newton sobre la partícula esférica, se tiene que:

$$m\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right) = F - f\left(\frac{dx}{dt}\right)$$

Multiplicando a ambos lados por x y notando que:

$$x\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{d^2(x^2)}{dt^2}\right) - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2$$

$$x\left(\frac{dx}{dt}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{d(x^2)}{dt}\right)$$

Entonces,

$$mx\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right) = Fx - fx\left(\frac{dx}{dt}\right)$$

$$m\left(\frac{1}{2}\left(\frac{d^2(x^2)}{dt^2}\right) - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2\right) = Fx - \frac{1}{2}f\left(\frac{d(x^2)}{dt}\right)$$

$$\frac{m}{2}\left(\frac{d^2(x^2)}{dt^2}\right) - m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = Fx - \frac{1}{2}f\left(\frac{d(x^2)}{dt}\right)$$

Notar que el sumando $m(dx/dt)^2$ es equivalente a dos veces la energía cinética de la partícula ($2E_c$). Por tanto,

$$\frac{m}{2}\left(\frac{d^2(x^2)}{dt^2}\right) - 2E_c = Fx - \frac{1}{2}f\left(\frac{d(x^2)}{dt}\right)$$

Si promediamos esta expresión sobre un gran número de partículas, lo cual, según la hipótesis ergódica, equivale a promediar esta expresión en el tiempo, la ecuación se vuelve:

$$\frac{m}{2}\left(\frac{d^2\left(\overline{x^2}\right)}{dt^2}\right) - 2\overline{E_c} = \overline{Fx} - \frac{1}{2}f\left(\frac{d\left(\overline{x^2}\right)}{dt}\right)$$

Notar que para un gran número de partículas, o, consecuentemente, para un gran período de tiempo, el desplazamiento promedio en una dimensión tiende a 0, ya que es igualmente probable desplazarse hacia la izquierda como la derecha, por lo que: $\overline{Fx} \approx 0$.

A su vez, un resultado relevante, a partir del Teorema de Equipartición de la Energía, establece que la energía cinética promedio de un conjunto de partículas en un sistema aislado en equilibrio es:

$$\overline{E_c} = \frac{1}{2}k_BT$$

Esta relación surge del hecho de que cada grado de libertad de movimiento aporta $\frac{1}{2}k_BT$ a la energía cinética de la partícula y, puesto que la partícula se mueve en una dimensión y, a partir de la distribución de velocidad de Boltzmann, el promedio de las energías depende de la Constante de Boltzmann y la temperatura absoluta (en Kelvin). A su vez, la constante de Boltzmann es: $k_B = R/N_A$.

Finalmente, si definimos: $d\left(\overline{x^2}\right)/dt \equiv z$

$$\frac{m}{2}\left(\frac{dz}{dt}\right) - k_BT = -\frac{1}{2}fz$$

Esta ecuación es una ecuación diferencial lineal ordinaria que puede resolverse por el método de separación de variables:

$$\frac{m}{2}\left(\frac{dz}{dt}\right) = k_BT - \frac{1}{2}fz$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{2}{m}\left(k_BT - \frac{1}{2}fz\right)$$

$$\left(\frac{1}{k_BT - \frac{1}{2}fz}\right)dz = \frac{2}{m}dt$$

$$\int \left(\frac{1}{k_B T - \frac{1}{2}fz}\right) dz = \int \frac{2}{m} dt$$

$$u = k_B T - \frac{1}{2}fz \Longrightarrow du = -\frac{1}{2}f dz \Longrightarrow dz = -\frac{1}{f}2du$$

$$\int \left(\frac{1}{k_B T - \frac{1}{2}fz}\right) dz = \int \left(\frac{1}{u}\right)\left(-\frac{1}{f}2du\right) = -\frac{1}{f}2\int \frac{1}{u}du = -\frac{1}{f}2\ln(u) = -\frac{1}{f}2\ln\left(k_B T - \frac{1}{2}fz\right)$$

$$-\frac{1}{f}2\ln\left(k_B T - \frac{1}{2}fz\right) = \frac{2}{m}t$$

Despejando para z:

$$\ln\left(k_B T - \frac{1}{2}fz\right) = -\frac{f}{m}t$$

$$k_B T - \frac{1}{2}fz = e^{-\frac{f}{m}t}$$

$$\frac{1}{2}fz = k_B T - e^{-\frac{f}{m}t}$$

$$z(t) = \frac{2}{f}\left(k_B T - e^{-\frac{f}{m}t}\right)$$

En la práctica, para tiempos observacionales (i.e.: $t \to +\infty$) el factor $e^{-\frac{f}{m}t} \approx 0$, entonces:

$$z = \frac{2}{f}k_B T = \frac{2k_B T}{6\pi\eta r} = \frac{k_B T}{3\pi\eta r} = \frac{RT}{3\pi N_A \eta r}$$

Deshaciendo el cambio de variable:

$$\frac{d}{dt}\left(\overline{x^2}\right) = \frac{RT}{3\pi N_A \eta r}$$

$$\overline{x^2} = \frac{RT}{3\pi N_A \eta r}t$$

A la variable $\overline{x^2}$ se le conoce como Desvío Cuadrático Medio, y es el promedio del cuadrado de los desplazamientos. Esta magnitud depende linealmente con el tiempo y la temperatura, y es inversamente proporcional a la viscosidad del medio y el radio de la partícula.

Este resultado también se asocia a los procesos difusivos de un soluto en un medio, a partir de la Ley de Fick:

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right) D = \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)$$

Donde C es la concentración del soluto y D es el coeficiente de difusión. La familia de funciones solución de esta ecuación diferencial en derivadas parciales se corresponde con funciones gaussianas de tipo:

$$f(x) = ae^{-\frac{(x-b)^2}{2c^2}}$$

Donde a, b, c son constantes. Para esta ecuación diferencial:

$$C(x,t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D t}}e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

Donde N es el número de partículas.

En donde,

$$b = 0, a = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}}, c = \sqrt{2Dt}$$

Notar que, para esta familia de soluciones gaussianas, el promedio del desplazamiento es 0 $(b = 0)$ y su varianza es $2Dt$.

Asociando estos resultados con la ecuación de Einstein, obtenemos,

$$\bar{x} = 0$$

$$\overline{x^2} = 2Dt = \frac{RT}{3\pi N_A \eta r} t$$

$$\sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{2Dt}$$

Donde $\sqrt{\overline{x^2}}$ se le conoce como Desplazamiento Cuadrático Medio, una medida de la distancia recorrida por el 67% de la población de partículas, o análogamente por la hipótesis ergódica, la probabilidad de que una partícula haya recorrido el 67% de la distancia máxima para el tiempo dado.

De esta manera, el Coeficiente de Difusión se pude relacionar con como:

$$D = \frac{RT}{3\pi N_A \eta r}$$

A esta relación suele denominarse como 2da Ecuación de Einstein para el Movimiento Browniano.

Es posible generalizar las ecuaciones del MB para las 3 dimensiones del espacio. Asumiendo que una partícula puede moverse con igual probabilidad en las tres dimensiones espaciales, cada dimensión experimentará un desvío cuadrático medio igual a $2Dt$, por lo que, si la distribución de probabilidad espacial en una dimensión es independiente de las demás dimensiones, el desvío cuadrático medio del movimiento total es la suma de las distribuciones probabilísticas independientes:

$$\overline{r^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2} = 2Dt + 2Dt + 2Dt = 6Dt$$

Otra manera de visualizar este resultado es notar que el vector de posición de una partícula en tres dimensiones $\vec{r}$ depende las proyecciones de la posición en los diferentes ejes cartesianos ortogonales x, y, z de acuerdo con la relación de Pitágoras:

$$\|r^2\| = x^2 + y^2 + z^2$$

Tomando promedios,

$$\overline{\|r^2\|} = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2} = 2Dt + 2Dt + 2Dt = 6Dt$$

De esta forma se relacionan la ortogonalidad de los ejes cartesianos con la independencia de las distribuciones de probabilidad.

En la década de 1910, el físico francés Jean Perrin buscó corroborar las hipótesis de Einstein para el MB, midiendo los desplazamientos cuadráticos medios de partículas esféricas con radio conocido mediante un dispositivo de cámara lúcida (o cámara clara). A partir de diferentes mediciones de $\overline{\Delta x^2}, \overline{\Delta y^2}$ para dos dimensiones en el plano en función del tiempo, logró determinar con bastante precisión el número de Avogadro, como parte de la información extraída de la pendiente del gráfico $\overline{\Delta r^2}\ vs. t$. A su vez, logró mediciones precisas de los coeficientes de viscosidad para diferentes fluidos (η). Estos experimentos fueron detalladamente publicados en el libro "*Les Atoms*" (Perrin, 1916), quien sería posteriormente galardonado el Premio Noble de Física en 1926, por su "*contribución al estudio discontinuo de la materia*", dando así fuertes evidencias experimentales contundentes y robustas respecto a la Teoría Atómica.

Adicionalmente, una de las características más notables del MB es la autosimilaridad de su patrón de movimiento: es posible notar una marcha aleatoria de las partículas a diferentes escalas de observación, tanto si tomamos intervalos de tiempo más largos como si tomamos intervalos de tiempo más cortos. Esta propiedad daría lugar al estudio matemático de los fractales, encabezados por Benoit Mandelbrot.

Desde el punto de vista biológico, puesto que el desplazamiento cuadrático medio de las partículas difusivas crece con la raíz cuadrada del tiempo $\left(\sqrt{\overline{x^2}} \propto t\right)$, la difusión por agitación térmica de las partículas no resulta un mecanismo eficiente de transporte de solutos, particularmente para organismos pluricelulares (no así para microorganismos unicelulares), por lo que, evolutivamente, la subsecuente aparición de los organismos pluricelulares viene de la mano con la aparición de mecanismos de transporte más eficiente que permiten entregar solutos en menor tiempo y a mayores distancias. Puesto que estos mecanismos de transporte no son pasivos (i.e.: espontáneos), requieren, por tanto, aportes de energía externa (i.e.: hidrólisis de ATP, poder reductor, transducción de energía, etc.).