Deducción de la ecuación de Einstein modelando el Movimiento Browniano como una marcha aleatoria unidimensional

Como mencioné en clase, la ecuación de Einstein para el desvío cuadrático medio de una partícula browniana se puede deducir modelando el Movimiento Browniano como una marcha aleatoria.

La deducción que presentaré sigue la que aparece en la sección 4.1.2 del libro *Biological Physics: Enegry, Information, Life* de Philip Nelson. Una deducción parecida aparece en la sección 3.4 Polímeros Globulares: El caminante Aleatorio del libro *Temas de Biofísica* de Buceta, Koroutcheva y Pastor, disponible en la bibliografía del curso.

Pensando en una marcha aleatoria en una dimensión, supongamos que los pasos de la misma tienen una longitud L. El desplazamiento en el paso número j va a ser:

$$despl._j = k_j L$$

Donde k_j es 1 o -1, con igual probabilidad, e indicará la dirección de los desplazamientos de longitud L sobre el eje.

Por lo tanto, si nuestro punto de partida es $x_0 = 0$, la posición después de un paso será:

$$x_1 = k_1 L$$

Así, la posición de la partícula después de j pasos va a ser:

$$x_j = x_{j-1} + k_j L$$

Es decir, que la posición actual va a ser la posición en el paso anterior más la distancia L multiplicada por 1 o -1.

No podemos hacer ninguna afirmación definitiva sobre la posición que ocupará la partícula en el paso j, más que calcular la probabilidad de que alcance un determinado lugar en ese número de pasos. Sin embargo, podemos intentar obtener una medida promedio del desplazamiento de la partícula:

$$\langle x_N \rangle = \frac{k_1 L + k_2 L + ... + k_N L}{N} = \frac{(\sum_{i=1}^{N} k_i) L}{N} = 0$$

Donde N es el número de pasos. Como k_i es con igual probabilidad 1 o -1 la media tiende a 0 al crecer N. Por lo tanto no es una buena medida del desplazamiento de la partícula.

En cambio, podemos intentar medir el promedio de los cuadrados de los desplazamientos, lo que conocemos como desvío cuadrático medio.

Para el paso N, el desvío cuadrático medio será:

$$\langle x_N^2 \rangle = \langle (x_{N-1} + k_N L)^2 \rangle = \langle x_{N-1}^2 \rangle + 2L \langle x_{N-1} k_N \rangle + L^2 \langle (k_N)^2 \rangle$$

Ahora, observemos que $\langle x_{N-1} k_N \rangle$ es igual 0, ya que k vale, para cualquier paso, 1 o -1 con igual probabilidad. Además, por la misma razón, $(k_N)^2$ es siempre 1.

Es así que podemos reescribir la ecuación como:

$$\langle x_N^2 \rangle = \langle x_{N-1}^2 \rangle + L^2$$

Notar que al utilizar promedios estamos perdiendo información; pasamos de intentar conocer la posición concreta de la partícula a tener una medida del desplazamiento de la misma.

Si observamos esta ecuación y retrocedemos sobre nuestros pasos en la marcha, veremos que cada paso añadirá L^2 al desvío cuadrático medio, ya que:

$$\langle x_{N-1}^2 \rangle = \langle x_{N-2}^2 \rangle + L^2$$

$$\langle x_N^2 \rangle = \langle x_{N-2}^2 \rangle + L^2 + L^2$$

Por lo que podemos escribir:

$$\langle x^2{}_N \rangle = NL^2$$

Por otro lado, si dar cada paso demora un tiempo Δt, el tiempo total transcurrido al dar N pasos será:

$$t = \Delta t\, N$$

Y por lo tanto,

$$N = \frac{t}{\Delta t}$$

Sustituyendo en la ecuación anterior:

$$\langle x^2{}_N \rangle = \frac{L^2}{\Delta t} t$$

Con esto ya casi terminamos, obtuvimos una expresión que relaciona el desvío cuadrático medio con el tiempo transcurrido durante la marcha. Ahora definimos la constante de proporcionalidad:

$$D = \frac{L^2}{2 \Delta t}$$

Entonces,

$$\langle x_N^2 \rangle = 2\, Dt$$

Notar que esta deducción no dice nada acerca de la relación de D con los parámetros físicos con los que vimos que está relacionada. En el contexto de esta deducción, 2D es una constante que definimos de manera conveniente para expresar la relación del desvío cuadrático medio con el tiempo.

Expresar la ecuación de esta manera $\langle x_N^2 \rangle = 2\, Dt$ o de esta, $\langle x^2{}_N \rangle = \frac{L^2}{\Delta t} t$ no cambia la información que la ecuación posee, la lección fundamental es que el desvío cuadrático medio es directamente proporcional al tiempo de observación. Por lo tanto, esta deducción permite obtener la ecuación de Einstein para el Movimiento Browniano, modelando el mismo como una marcha aleatoria.