

# Caracterização de propriedades materiais através da análise do movimento browniano

Luiz Fernando Oliveira Corte Real

Orientador: Prof. Dr. Marcel Parolin Jackowski

Instituto de Matemática e Estatística,  
Universidade de São Paulo



IME - Instituto de  
Matemática e Estatística

## Introdução

- Movimento browniano é o tipo de movimento realizado por uma partícula imersa num fluido, desconsiderando-se as correntes deste.
  - É composto de translações e rotações;
  - Seu caminho, teoricamente, não tem tangente em nenhum ponto;
  - A cada instante de tempo, a direção de deslocamento muda.
- Atualmente, a ressonância magnética (RM) de difusão [1] possibilita a determinação do coeficiente de difusão de materiais, mas não suas propriedades físicas.
- Com base no coeficiente de difusão e com dados da simulação do movimento browniano em um certo meio, é possível estimar as propriedades físicas do material em análise na ressonância de forma não-invasiva.

## Tecnologias utilizadas

O *software* para simular o movimento browniano está sendo desenvolvido em C++ utilizando as bibliotecas:

- GTK [2], para a interface gráfica;
- VTK [3], para a renderização da simulação em três dimensões;
- gtkmm [4], para tornar a biblioteca GTK orientada a objetos;
- ODE [5], para a simulação da dinâmica molecular.

No desenvolvimento do *software*, foi utilizado o paradigma de orientação a objetos.

## Equações de difusão

Partindo da simulação da movimentação molecular, pode-se utilizar a primeira lei de Fick e a equação para o deslocamento quadrático médio de Einstein para estimar o coeficiente de difusão numa certa região.

A primeira lei de Fick relaciona o fluxo de partículas  $J$  com o gradiente molar de concentração  $\nabla\phi$ :

$$J = -D\nabla\phi \quad (1)$$

onde  $D$  representa o coeficiente de difusão.

Já a equação de Einstein relaciona o deslocamento quadrático médio  $\langle x^2 \rangle$  com o coeficiente de difusão  $D$  e o tempo  $t$  decorrido desde o estado inicial do sistema:

$$\langle x^2 \rangle = 6Dt \quad (2)$$

Com base nos dados obtidos e no coeficiente de difusão calculado, é possível aplicar a lei de Stokes-Einstein para derivar a viscosidade do material. Esta lei, juntamente com a primeira lei de Fick, permite derivar a seguinte relação entre o coeficiente de difusão e a viscosidade  $\eta$  do meio:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta a} \quad (3)$$

onde  $T$  é a temperatura e  $k$  é a constante de Boltzmann.

## Resultados e produtos obtidos

O modelo da simulação desenvolvido até o momento considera as moléculas como esferas rígidas, regidas apenas pelas leis da mecânica. Ainda não foram consideradas forças de origem elétrica e magnética.

A Figura 1 mostra o resultado da simulação do movimento browniano em ambientes diferentes. É possível notar que no cubo a difusividade não segue um padrão claro, enquanto que, no cilindro, é possível notar que a difusividade foi maior no sentido da altura. Também é possível perceber que a densidade de moléculas no cilindro é bem maior que no cubo pelo nível de preenchimento do ambiente de difusão pelas trajetórias.

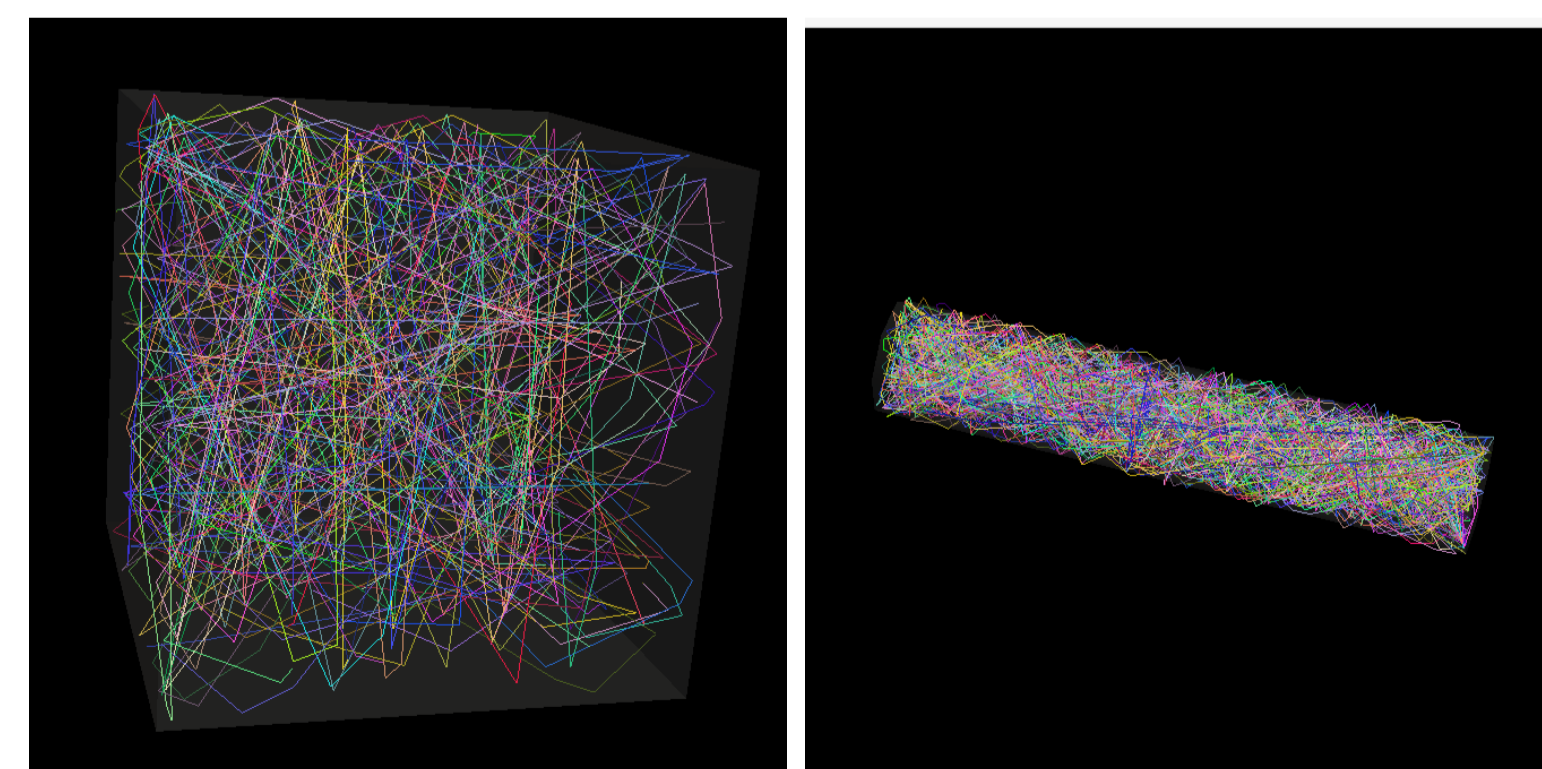


Figura 1: Comparativo de difusividade num cubo de lado  $1000\text{\AA}$  e num cilindro de raio  $100\text{\AA}$  e altura  $1000\text{\AA}$  por meio das trajetórias descritas por 100 moléculas em 5ns de simulação a 273K.

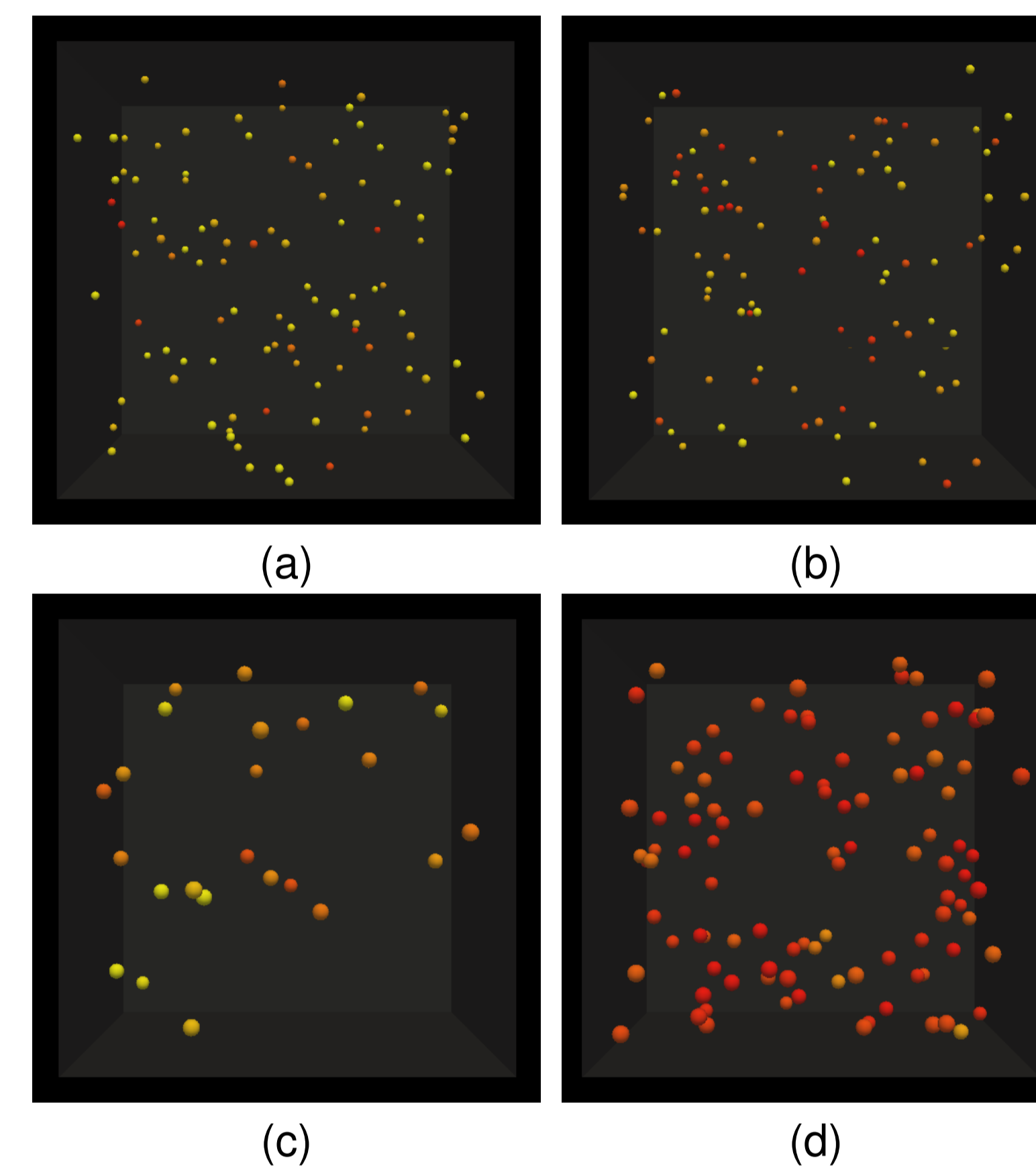


Figura 2: Comparativo da difusividade sob diferentes condições de temperatura e pressão. Em (a) e (b), 100 moléculas estão num cubo de lado igual a  $1000\text{\AA}$  mas, em (a), a temperatura é de 73K enquanto que, em (b), a temperatura é de 273K. Em (c) e (d), o ambiente de difusão é um cubo de  $150\text{\AA}$  de lado a 273K mas, no primeiro, temos apenas 25 moléculas, contra 100 do último.

A Figura 2 mostra o resultado da simulação para diferentes condições de temperatura e pressão (número de moléculas no volume). A variação de cor indica há quanto tempo uma molécula colidiu pela última vez, dando uma idéia do coeficiente de difusão; quanto mais vermelha a molécula, mais recentemente ela colidiu. Assim, é possível notar que, nas figuras 2(a) e 2(c), a difusão é mais rápida (poucas colisões), devido à baixa temperatura em (a) e à baixa pressão em (c).

## Discussão

Como a simulação ainda é bastante simples, não foi possível validar os valores de difusão obtidos por meio

da simulação com a equação de Einstein para a difusão (2). Mas já é possível notar que conceitos mais básicos, como a relação entre pressão, temperatura e volume, são perceptíveis.

Com a validação do coeficiente de difusão calculado para a água, será possível partir para a simulação da difusão de água sob restrições físicas mais complexas e para a difusão de outras substâncias, como cloreto de sódio. Também será possível estimar outras propriedades materiais das substâncias modeladas, como viscosidade, utilizando a equação 3.

## Agradecimentos

Renato Borges  
Instituto de Física, USP

Choukri Mekkaoui  
Yale University, EUA

## Referências

- [1] LE BIHAN, D. *et al.* Imaging of diffusion and microcirculation with gradient sensitization: design, strategy, and significance. *J Magn Reson Imaging*, 1:7-28, 1991.
- [2] KRAUSE, A. *Foundations of GTK+ Development: Expert's Voice in Open Source*. Berkeley: Apress, 2007.
- [3] KITWARE INC. *The VTK's User's Guide, Version 4.4*. New York, 2004.
- [4] CUMMING, M. *et al.* *Programming with gtkmm*. 20026. Disponível em: <<http://gtkmm.org/docs/gtkmm-2.4/docs/tutorial/pdf/programming-with-gtkmm.pdf>>. Acesso em: 6 março 2008.
- [5] SMITH, R. *Open Dynamics Engine: v0.5 User Guide*. 2006. Disponível em: <<http://ode.org/ode-latest-userguide.pdf>>. Acesso em: 6 março 2008.
- [6] GAMMA, E. *et al.* *Design Patterns: Elements of Reusable Object-Oriented Software*. Addison-Wesley, 1995.