Wahrscheinlichster Abstand beim dreidimensionalen "Random Walk"

Advanced

- Wenn wir nicht wie bei der Ableitung der Einstein - Smoluchowski Beziehung nach <$\mathbf{r^2}$>, oder eindimensional nach <$\mathbf{x^2}$>, fragen, sondern nach dem *wahrscheinlichsten* ***r***, müssen wir eine andere Betrachtung anstellen.
- Wir kennen die (absolute) Wahrscheinlichkeit **W(x,y,z) = w(x,y,z) · ΔV**, das Teilchen im Volumenelement **ΔV** bei **(x,y,z)** zu finden; **w(x,y,z)** ist die Wahrscheinlichkeitsdichte.Wir wollen aber *nur* die Wahrscheinlichkeit als Funktion des Abstandes **|r|** vom Ursprung.
  - Das heißt, wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in dem Volumen einer Kugelschale mit der Dicke Δ**r** im Abstand **r** zu finden; wir müssen für Δ**V** das Volumen also das Volumen der differentiell dünnen Kugelschale einsetzen und entsprechend zu Polarkoordinaten übergehen. Im Exponent von **w(x,y,z)** ist das einfach; dort steht schon $\mathbf{r^2 = (x^2 + y^2 + z^2)}$.
  - Es bleibt noch Δ**V** in Polarkoordinaten auszudrücken; wir haben das bei Wellenfunktionen schon mal betrachtet. Für die gewünschte Kugelschale gilt:
    Δ**V =** Oberfläche der Kugel mit Radius **r** multipliziert mit Δ**r** , der Dicke der Schicht (für Δ**r** gegen **0**) oder
    $\Delta \mathbf{V} = 4\pi \cdot r^2 \cdot \Delta r$
  - Damit erhalten wir zunächst für die absolute Wahrscheinlichkeit des radialsymmetrischen *dreidimensionalen* "Random Walks" **W(r) = W'(r) · Δr** mit **W'(r) =** Wahrscheinlichkeitsdichte für den radialsymmetrischen Fall. Ausgeschrieben haben wir:

$$W(r) = W'(r)\cdot\Delta r = 4\pi\cdot r^2\cdot\left(\frac{1}{2\pi\cdot N}\right)^{3/2}\cdot\exp-\frac{r^2}{2N}\cdot\Delta r$$

oder

$$W'(r)\cdot\Delta r = \frac{2r^2}{N}\cdot\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2}\cdot\exp-\frac{r^2}{2N}\cdot\Delta r$$

- Was ist nun der *wahrscheinlichste* Abstand? Offenbar der spezielle Wert $\mathbf{r_{wahr}}$, für den **W'(r)** ein Maximum hat, d.h. **dW'/dr = 0** gilt.
  - $\mathbf{r_{wahr}}$ ist nun schnell berechnet . Es gilt (mit $\mathbf{(1/2\pi N)^{½} = b}$) um Schreibarbeit zu sparen

$$\frac{dW'(r)}{dr} = \left(\frac{4b\cdot r}{N}\cdot\exp-\frac{r^2}{2N}\right) - \left(\frac{2b\cdot r^3}{N^2}\cdot\exp-\frac{r^2}{2N}\right) = 0$$

- Daraus ergibt sich

$$r_{wahr} = (2N)^{1/2}$$

- Ein, nach der langen Rechnerei, *erstaulich simples Ergebnis* für den dreidimensionalen Fall. Wir können $\mathbf{r_{wahr}}$ wie gehabt jetzt auch sofort als Funktion der physikalischen Sprungweite **a** und/oder der Sprungfrequenz **ν** ansetzen.
  - Zunächst zur Sprungweite **a**. Bei unserer Betrachtung haben wir einen Sprung der Einheit "**1**" angenommen, springt das Teilchen stattdessen **a cm**, müssen wir mit **a** multiplizieren und erhalten

$$r_{wahr} = a\cdot(2N)^{1/2}$$

  - Die Zahl der Sprünge ist gegeben durch **N** = Sprünge pro Sekunde mal Zeit **= ν · t**. Damit erhalten wir für als Funktion der Sprungfrequenz **ν** und der verstrichenen Zeit **t**

$$r_{wahr} = a\cdot(2\nu\cdot t)^{1/2}$$

- Wir haben in anderem Zusammenhang bereits die Diffusionslänge **L**, d.h. den *mittleren* Abstand <r> nach **N** Sprüngen berechnet; das Ergebnis war (für *drei*dimensionale Diffusion)

$$\boxed{\langle r \rangle = \mathbf{L} \quad \mathbf{a \cdot (3N)^{1/2}}}$$

- Die Diffusionlänge **L** und der wahrscheinlichste Abstand $\mathbf{r_{wahr}}$ sind sich im dreidimensionalen also recht ähnlich und werden oft nicht mehr deutlich unterschieden.
- Das gilt aber überhaupt nicht für eindimensionale Diffusion! Man muß also immer aufpassen, welche Fälle man betrachtet.