Eigenschaften des Random Walks in ein- zwei- und drei Dimensionen

Advanced

			Eindimensional	Zweidimensional	Dreidimensional
(1)	*Wahrscheinlichkeitsdichte* Teilchen nach **N** Sprüngen bei **(x,y,z)** zu finden *mit Sprungweite "1"*.	**w(x,y,z) =**	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{x^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right) \cdot \exp -\frac{x^2+y^2}{2N}$	$\left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{3/2} \cdot \exp -\frac{x^2+y^2+z^2}{2N}$
(2)	*Breite* auf **0,607** facher (= $e^{-1/2}$) Höhe = 2σ		$\sigma_x = N_x^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$	$\sigma_x = N_x^{1/2}$ $\sigma_y = N_y^{1/2}$ $\sigma_z = N_z^{1/2}$
(2a)	Damit: "*Normaldarstellung* " von (1)	**w(x,y,z) =**	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{x^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right) \cdot \exp -\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}$	$\left(\frac{1}{2\sigma^2\pi}\right)^{3/2} \cdot \exp -\frac{x^2+y^2+z^2}{2\sigma^2}$
(3)	*Volumenelement* Δ**V** bei Übergang zu *Abständen* **r**	$\Delta V =$	$2\Delta r$ ***(der Faktor 2 ist wichtig!)***	$2\pi r\Delta r$	$4\pi r^2\Delta r$
(4)	*Absolute* Wahrscheinlichkeit **W(r)**, Teilchen im *Abstandsintervall* **r, r +** Δ**r** zu finden mit *dimensionsloser Sprungweite "1"* **W'(r)** ist die Wahrscheinlichkeitdichte bezogen auf Abstände	**W(r) = w(r)**Δ**V =W'(r)**Δ**r**	$\left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{N}\right) \cdot \exp -\frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{r^2}{2N} \cdot \Delta r$
(5)	Absolute Wahrscheinlichkeit Teilchen im *Abstandsintervall* **r, r +** Δ**r** zu finden mit *Sprungweite* ***a_0 cm***	**W(r,a_0) = w(r,a_0)**Δ**V = W'(r)**Δ**r**	$\left(\frac{2}{a_0^2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\left(\frac{r}{Na_0^2}\right) \cdot \exp -\frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$	$\frac{2r^2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi N}\right)^{1/2} \cdot \exp -\frac{r^2}{2Na_0^2} \cdot \Delta r$
(6)	Mittleres Verschiebungsquadrat $\langle r^2 \rangle = \int r^2 W'(r,a_0)dr$ (mit Sprungweite **a_0** cm) = **Diffusionlänge L**	$\langle r^2 \rangle =$	$N \cdot a_0^2$	$2N \cdot a_0^2$	$3N \cdot a_0^2$
(6a)	**Diffusionlänge L =** $\{\langle r^2 \rangle\}^{1/2}$	**L =**	$a_0 N^{1/2}$	$a_0(2N)^{1/2}$	$a_0(3N)^{1/2}$
(7)	Mittleres Verschiebungsquadrat *mit dimensionsloser Sprungweite "1"*	$\langle r^2 \rangle =$	**N**	**2N**	**3N**
(8)	Wahrscheinlichstes r_{wahr} aus **dW'/dr(r_{wahr}) = 0** (mit Sprungweite "**a_0**")	$r_{wahr} =$	**0**	$a_0 \cdot N^{1/2}$	$a_0(2N)^{1/2}$ **siehe auch den Link**

Erklärungen und Mathematik

1. Sprungweiten

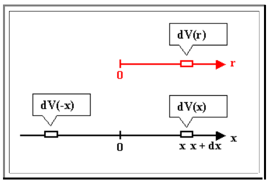
- Solange wir nur Würfelspiele betrachten, gibt es keine Sprungweiten. Assoziieren wir das gewürfelte Ergebnis mit der Bewegung von irgendetwas ("bei **+1** *eins* nach rechts, bei **-1** *eins* nach links"), haben wir die dimensionlose Spurngweite *"1"*
- Ist die Sprungweite jedoch eine physikalische Größe, d.h. zum Beispiel **a_0 cm** , müssen wir **a_0** wie folgt in die Formel einbauen
  - **r [Zahl] wird ersetzt durch r /a_0**
  - **dr [Zahl] wird ersetzt durch 1/a_0 · dr**
- Es ist erkennbar sehr wichtig, auch beim **dr** das **1/a_0** nicht zu vergessen!

2. "Halb"wertsbreite

- Die Breite der Gaußkurve auf "ungefähr" halber Höhe heißt **2**σ, hat einen besonders einfachen Wert (und markiert die Wendepunkte der Kurve).
- Häufig benutzt man den numerischen Wert für σ als ein Maß für die Streuung eines Parameters, z.B. bei Meßwerten, die einer Gaußverteilung gehorchen.
- Unter Benutzung von σ lassen sich die Funktionen einfacher schreiben, man spricht von der Normalform der Gaußverteilung.

3. Volumenelement

- Wir beziehen uns nur auf *Abstände*. Die Volumenelemente sind dann
  - *Eindimensional*: Das Intervall **r, + dr** auf der Abstandsachse **r**
  - Zweidimensional: Die Fläche zwischen den Kreisen mit Radius **r** und **r + dr** -ein Ringsegment
  - *Dreidimensional*: Das Volumen zwischen den Kugeln mit mit Radius **r** und **r + dr** - ein Kugelsegment oder eine "**Zwiebelschale**"
- Ein beliebter Fehler beim Übergang von cartesischen Koordinaten zu Polarkoordinaten für den *ein*dimensionalen Fall liegt im Übersehen des Faktors "**2**" in der Beziehung
  dV = 2 dr, den *ein* Wert für **r = |x|** deckt sowohl den Wert **+x** als auch **-x** ab, wie die nachfolgende Zeichnung klar macht.



- Es gibt keine negativen Abstände und damit keine negativen **r**. Teilchen die sich im "Volumen"element bei **x** oder bei **-x** befinden, sind alle im Volumenelement bei **r = |x|**.

Der hier eventuell einfließende Fehler mag sich kompensieren (oder verstärken?), wenn man einen anderen Faktor 2 Fehler macht, indem man Standardlösungen der Fickschen Diffusiongleichungen, die fast immer für einen Halbraum gegeben werden (d.h. aus der Quelle diffundieren die Teilchen nur nach links *oder* nur nach rechts; die Quelle sitzt auf der Oberfläche), mit den Random walk Ergebnissen vergleicht, bei denen die Teilchen nach rechts *und* nach links diffundieren können (die Quelle sitzt im Inneren).

4. und 5. Absolute Wahrscheinlichkeit und Wahrscheinlichkeitsdichten

- Die *absolute* Wahrscheinlichkeit für irgendetwas muß sich immer auf ein endliches (wenn auch differentiell kleines) Volumen beziehen. Denn die absolute Wahrscheinlichkeit, eine *endliche* Anzahl von irgendwas bei einem von *unendlich* viel mathematischen Punkten zu finden ist immer **= 0**.
- Sind die Variablen in Wahrheit diskret (z.B. beim Würfelspiel, wo man schlicht keine **3,27** oder **7,005** würfeln kann), muß man immer die *Wahrscheinlichkeitsdichte* über das Intervall um die diskrete Variable herum integrieren. Die Wahrscheinlichkeit eine **7** zu würfeln ist dann beispielsweise

$$w(7) = \int_{6,5}^{7,5} w(r) \cdot dV$$

- Die angegebene Formel erhält man also einfach durch Multiplikation der Formeln in Reihe **1** mit den Formeln in Reihe **3**.

Nach der Umrechnung auf Wahrscheinlichkeiten für *Abstände* übernimmt **W'(r) = W(r)/Δr** die Rolle der Wahrscheinlichkeitsdichte - es ist jetzt eine **radiale Wahrscheinlichkeitsdichte**.

6. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite a_0

- Diese Integrale können leicht berechnet werden indem man sie auf eine Form bringt, die in Tabellen zu finden ist. Der jeweilige Wert des Integrals ist in der Formel durch *rote Schrift* immer getrennt ausgewiesen.

Eindimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \pi N}\right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty r^2 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot \frac{\pi^{1/2}}{2k^{3/2}}$$

- Mit $k = 1/\,2Na_0^2$ erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{2}{a_0^2 \cdot \pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot N \cdot a_0^3 \cdot \left(2\pi \cdot N\right)^{1/2} = N \cdot a_0^2$$

Zweidimensional

- Wir haben für das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2}\right) \cdot \int_0^\infty r^3 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr = \left(\frac{1}{N \cdot a_0^2}\right) \frac{1}{2k^2}$$

- Mit

$$k = \frac{1}{2 \cdot N \cdot a_0^2} \; ; \quad \frac{1}{2k^2} = \frac{4 \cdot N^2 \cdot a_0^4}{2} = 2 \cdot N^2 \cdot a_0^4$$

- Damit ergibt sich

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N \cdot a_0^2} \cdot 2N^2 \cdot a_0^4 = 2N \cdot a_0^2$$

Dreidimensional

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2}{a_0^3 \cdot N} \cdot \left(\frac{1}{2\pi \cdot N}\right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty r^4 \cdot \exp - k \cdot r^2 \cdot dr$$

- Mit

$$k = \frac{1}{2N \cdot a_0^2} \quad \text{und} \quad \int_0^\infty = \frac{3\pi^{1/2}}{8 \cdot k^{5/2}} = \frac{3\pi^{1/2} \cdot (2N \cdot a_0^2)^{5/2}}{8}$$

- erhalten wir

$$\langle r^2 \rangle = 3 \cdot a_0^2 \cdot N$$

Es ist immer gut, mal die Integration zu üben, *aber das ganze hätte man natürlich auch einfacher haben können*:

- Da die Hüpfe in ***x***-, ***y***- and ***z***-Richtung unabhängig voneinander sind, und deshalb $N_x = N_y$ sein muß, gilt

$$\begin{aligned} \langle r^2(x,y) \rangle &= \langle r^2(x) \rangle^2 + \langle r^2(y) \rangle^2 \\ &= (N_x a_0^2) + (N_y a_0^2) \\ &= 2Na_0^2 \end{aligned}$$

- Für den dreidimensionalen Fall folgt entsprechend

$$\langle r^2(x,y) \rangle = 3 \cdot N \cdot a_0^2$$

Unnötige Arbeit gemacht? Nein - nur dadurch läßt sich prüfen, ob die Ausgangsformeln stimmen (so wurden die diversen Fehler in Büchern entdeckt).

*7. Mittleres Verschiebungsquadrat mit Sprungweite "**1**"*

- Das ist jetzt einfach: Ersetzen wir $\mathbf{N \cdot a_o^2}$ in den Formeln in **6.** durch **N**, ist die Mathematik identisch - d.h. wir müssen bei $\langle r^2 \rangle$ nur **N** statt $\mathbf{N \cdot a_o^2}$ einsetzen.

*8. Wahrscheinlichstes **r***

- Der wahrscheinlichste Abstand $\mathbf{r_{wahr}}$ ist der Abstand, bei dem wir erwarten können die *meisten* Teilchen zu finden. Daß das nicht derselbe Abstand ist wie der *mittlere* Abstand
$\langle r \rangle = \{\langle r^2 \rangle\}^{1/2}$ wurde schon anderweitig klargemacht.
- $\mathbf{r_{wahr}}$ ergibt sich offensichtlich aus dem Maximum der Verteilungskurve, d.h. wir haben

$$\frac{dw}{dr}(r = r_{wahr}) = 0$$

- Wir bekommen:

Eindimensional:

$$\left(\frac{2}{a_0^2\cdot\pi\cdot N}\right)^{1/2}\cdot\frac{d}{dr}\left(\exp-\frac{r^2}{2Na_0^2}\right)=\left(\frac{2}{a_0^2\cdot\pi\cdot N}\right)^{1/2}\cdot-\left(\frac{r}{Na_0^2}\right)\cdot\exp-\frac{r^2}{2\cdot N\cdot a_0^2}=0$$

- Und damit ganz schnell

$$r_{wahr} = 0$$

Zweidimensional

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{r}{N\cdot a_0^2}\cdot\exp-\frac{r^2}{2\cdot N\cdot a_0^2}\right)=0$$

.

- Und damit

$$r_{wahr} = a_0\cdot N^{1/2}$$

Dreidimensional

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{2r^2}{a_0^3\cdot N}\left(\frac{1}{2\pi\cdot N}\right)^{1/2}\cdot\exp-\frac{r^2}{2\cdot N\cdot a_0^2}\right)=0$$

- Und damit

$$r_{wahr} = a_0\cdot(2N)^{1/2}$$

Während $\mathbf{r_{wahr}}$ und der Mittelwert von **r**, also die Diffusionlänge **L**, bei eindimensionaler Diffusion fundamental verschieden sind, ist der Unterschied für dreidimensionale Diffusion vernachlässigbar. Für Diffusion in hohen Dimensionen - was immer das sein mag - wird der Unterschied offenbar immer kleiner.