

# Kurzfassung der Ableitung der Gauss Verteilung

## Random Walk, Gauß Verteilung und die Einstein - Smoluchowski Beziehung -

### Vom Würfeln zur Gaußverteilung

Advanced

In diesem Modul werden wesentliche statistische Funktionen unmittelbar vom Würfeln abgeleitet - und zwar *in Kurzform*, ohne ausführliche Herleitung der Formeln.

- Die ausführliche Herleitung mit einer eingehenden Diskussion aller Herleitungen, Tricks und Fallstricke, findet sich in einem [anderen Modul](#).
- Aus Gründen der Schreibökonomie (und der besseren Lesbarkeit) wird hier auf die *Kursiv*schreibung der Variablen verzichtet.

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit  $w_N(x)$ , mit  $N$  Würfeln, die alle binär sind, d. h. nur  $+1$  oder  $-1$  als Augenzahl haben, mit einem Wurf eine Summe  $x$  zwischen  $-N$  und  $+N$  zu würfeln. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit ist

- $w_N(x) = (\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}) / (\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}) = P_x / P_N$ .
- Nach relativ länglichen Überlegungen bei denen man sich [mit Leichtigkeit vertut](#), erhält man

$$w_N(x) = \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (x + N)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

- Diese Formel liefert, und das ist wichtig, nur Antworten falls  $N$  und  $x$  beide geradzahlig *oder* beide ungeradzahlig sind.

Mit der Langversion der [Stirlingschen Formel](#) für Fakultäten

$$\ln N! \approx (N + 1/2) \ln N - N + \ln(2\pi)^{1/2}$$

- [erhält man](#) als Antwort (und als Näherung) die **Gaußsche Normalverteilung**

$$w_N(x) \approx \left( \frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$$

Dabei hat sich aber eine subtile qualitative Änderung eingeschlichen:

- In der ursprünglichen Frage waren nur *ganzzahlige positive*  $N$  und ganzzahlige  $x$  zugelassen (es gibt keine  $N = -3,7$  Würfel, und man kann auch nicht  $x = 2,8$  würfeln); alle möglichen Antworten  $w_N(x)$  waren unmittelbare **absolute Wahrscheinlichkeiten** (d.h. eine Zahl zwischen  $0$  und  $1$ ).
- Das  $w_N(x)$  in der Gaußsche Normalverteilung ist aber auch für *beliebige*  $N$  und  $x$  eine wohldefinierte Funktion!
- $w_N(x)$  ist damit keine *absolute* Wahrscheinlichkeit mehr, sondern eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** (und deswegen jetzt kleingeschrieben).

Die absolute Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Ereignisses, erhält man indem man  $w_N(x)$  über das betrachtete Intervall integriert. Für  $w_N(x = 7)$  erhält man zum Beispiel

$$w_N(x = 7) \approx \int_{6,5}^{7,5} \left( \frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dx$$

- Für kleine Intervalle  $\Delta x$ , in denen sich  $w_N(x)$  nicht nennenswert ändert, gilt dann für die *absolute* Wahrscheinlichkeit  $W_N(x)$  des Auftretens des gesuchten Ereignisses

$$W_N(x) = w(x) \cdot \Delta x$$

Die Gaussverteilung liefert im übrigen auch Werte für beliebige Kombination für  $N$  und  $x$ , z.B.  $N$  geradzahlig und  $x$  ungeradzahlig - was die Ausgangsformel nicht tut.

Das muß bei der Herleitung gebührend berücksichtigt werden.

Der Bezug vom Würfeln zur *ein*dimensionalen Diffusion ist einfach:

Für  $+1$  rücken wir  $a$   $cm$  nach rechts, für  $-1$ ,  $a$   $cm$  nach links.  $a$  ist die Schrittweite, und wir müssen in den obigen Formel nur  $x$  durch  $x-a$  ersetzen um sofort die Lösung des *ein*dimensionalen Diffusionsproblems zu haben

*Zwei*- und *drei*dimensionale Diffusion erhält man durch Kombination, da die Bewegung auf jeder Achse unabhängig von den anderen ist. Wir haben

- *Zwei*dimensional:  $w_N(x, y) = w_N(x) \cdot w_N(y)$
- *Drei*dimensional:  $w_N(x, y, z) = w_N(x) \cdot w_N(y) \cdot w_N(z)$

Die ausgeschriebenen Gaußverteilungen finden sich im Link

Wir sind nun in der Lage einige Fragen zu stellen und zu beantworten

## Gaußverteilung und Diffusionsparameter

**Erste Frage:** Was ist der Mittelwert  $\langle r \rangle$  aller *Abstände*  $\underline{r} = (x, y, z)$  die wir (bei punktförmiger Quelle) nach  $N$  Schritten finden?

Das heißt wir fragen nach dem *Mittelwert der Vektoren*, die den Startpunkt  $(= (0, 0, 0))$  mit dem Endpunkt  $(x, y, z)$  verbinden, wenn wir ein "Würfelldiffusionsexperiment" genügend oft wiederholen um einen sinnvollen Mittelwert definieren zu können.

Die Antwort ist einfach:

$$\langle \underline{r} \rangle = \mathbf{0},$$

denn für jeden beliebigen Vektor  $\underline{r}$  der irgendwo endet werden wir mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch den entgegengesetzten Vektor  $-\underline{r}$  finden - die *Summe aller Vektoren* wird damit  $= \mathbf{0}$ .

**Zweite Frage:** Was ist der Mittelwert  $\langle |\underline{r}| \rangle$  der *Beträge* aller Abstandsvektoren, die wir nach genügend viel Versuchen finden. Diesen Mittelwert nennen wir die *Diffusionslänge*  $L$ . Ein feiner, aber *essentieller* Unterschied zur ersten Frage.

Die Frage ist gleichbedeutend zu der Frage nach dem **mittleren Verschiebungsquadrat**

$$\langle r^2 \rangle = \langle |\underline{r}|^2 \rangle = \langle r^2 \rangle = L^2,$$

da wir aus diesem Ergebnis nur die (positive) Wurzel ziehen müssen um unsere Frage zu beantworten

Die Antwort folgt aus den Gaußverteilungen für die diversen Dimensionen; wir haben Integrale der Form

$$\langle r^2 \rangle = L^2 = \int_0^{\infty} \left( \frac{1}{2\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dV$$

zu lösen;  $dV$  ist dabei das betrachtete *Volumenelement*.

Dieses Volumenelement hat es in sich. Da wir für den Betrag des Vektors  $\underline{r}$  immer schreiben können  $\underline{r} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ , werden die Volumenelemente

- *Ein*dimensional:  $dV = dr = 2dx$  - der Abstand nach links *und* nach rechts.
- *Zwei*dimensional:  $dV = 2\pi r \cdot dr$  - das Kreissegment der Dicke  $dr$  im Abstand  $r$ .
- *Drei*dimensional:  $dV = 4\pi r^2 \cdot dr$  - die "Zwiebelschale" der Dicke  $dr$  im Abstand  $r$ .

Multipliziert man die *Wahrscheinlichkeitsdichte*  $w_N(x)$  mit diesen Volumenelementen, erhält man eine neue *radiale Wahrscheinlichkeitsdichte*  $W'(r)$ , die nur noch  $|\underline{r}| = r$  als Variable hat, über  $w_N(x, y, z) \cdot dV = W'(r) \cdot dr$

Die Integrale werden etwas anstrengend, das Ergebnis aber ist einfach:

- *Ein*dimensional:  $L = a \cdot (N)^{1/2}$
- *Zwei*dimensional:  $L = a \cdot (2N)^{1/2}$
- *Drei*dimensional:  $L = a \cdot (3N)^{1/2}$

▶ **Dritte Frage:** Was ist der *wahrscheinlichste* Wert  $|r|_{\text{wahr}}$  den wir nach genügend viel Versuchen finden werden - in welchem Abstand  $|r|_{\text{wahr}}$  finden wir die meisten Teilchen? Das ist die Frage nach dem *Maximum* der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte (und eine ganz andere Frage als die Frage nach dem Mittelwert).

- Wir müssen dazu das Maximum der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte  $W'(r)$  bestimmen, d.h. die Gleichung  $dW'(r)/dr = 0$  lösen.
- Das Ergebnis ist
  - *Eindimensional:*  $|r|_{\text{wahr}} = 0$
  - *Zweidimensional:*  $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (N)^{1/2}$
  - *Dreidimensional:*  $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (2N)^{1/2}$

▶ Man sollte also  $L$  und  $|r|_{\text{wahr}}$  bei eindimensionaler Diffusion nicht verwechseln, während es bei dreidimensionaler Diffusion fast egal ist.

### Diffusionskoeffizient und Random Walk

▶ Die Betrachtung des Random walks als Diffusionsproblem führt auf eine Konzentrationsverteilung der diffundierenden Teilchen als Funktion der Schrittzahl  $N$  und Schrittweite  $a$  für den Fall einer in einen homogenen Körper eingeschlossenen Punktquelle.

- Diese Konzentrationsverteilung muß identisch sein zu der Konzentrationsverteilung die sich aus der entsprechenden Lösung der Fickschen Gesetze ergibt. Der Vergleich führt sofort auf
  - *Eindimensional:*  $D = L^2/2t$
  - *Zweidimensional:*  $D = L^2/4t$
  - *Dreidimensional:*  $D = L^2/6t$
- Vorausgesetzt, der Diffusionskoeffizient  $D$  ist ein Skalar, und nicht wie im allgemeinsten Fall, ein *Tensor 2 Stufe*.

▶ Hier kann eine kleine Konfusion auftreten: Die obigen Gleichungen gelten völlig losgelöst von den Hüpfmechanismen - wir setzen nur isotropes Verhalten voraus, aber nicht wie viele Möglichkeiten eine Leerstelle tatsächlich hat, um von ihrer Position aus auf eine Nachbarposition zu springen.

- Aber aus so einer Betrachtung heraus haben wir auch schon, und ganz unabhängig von Random walk Betrachtungen, den Diffusionskoeffizienten abgeleitet - in [Kapitel 6.2.3](#). Ist hier etwas überbestimmt?
- *Nein* - nicht solange die Hüpferei isotrop erfolgt. Und fall sie das *nicht* tut - z.B. in nicht-kubischen Kristallen, ist  $D$  kein Skalar mehr und die Kristallgeometrie gibt die Vorgabe für die differenzierte Betrachtung