Wahrscheinlichster Abstand beim dreidimensionalen "Random Walk"

Advanced

- Wenn wir nicht wie bei der Ableitung der Einstein - Smoluchowski Beziehung nach $<r^2>$, oder eindimensional nach $<x^2>$, fragen, sondern nach dem *wahrscheinlichsten* ***r***, müssen wir eine andere Betrachtung anstellen.
- Wir kennen die (absolute) Wahrscheinlichkeit $\mathbf{W(x,y,z) = w(x,y,z) \cdot \Delta V}$, 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 $\Delta \mathbf{r}$ im Abstand **r** zu finden; wir müssen für ΔV 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 ΔV in Polarkoordinaten auszudrücken; wir haben das bei Wellenfunktionen schon mal betrachtet. Für die gewünschte Kugelschale gilt:
    $\Delta \mathbf{V}$ = Oberfläche der Kugel mit Radius **r** multipliziert mit $\Delta \mathbf{r}$, der Dicke der Schicht (für $\Delta \mathbf{r}$ 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" $\mathbf{W(r) = W'(r) \cdot \Delta r}$ 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 r_{wahr}, für den **W'(r)** ein Maximum hat, d.h. $\mathbf{dW'/dr = 0}$ gilt.
  - 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 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 $= \nu \cdot \mathbf{t}$. 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)

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

- Die Diffusionlänge **L** und der wahrscheinlichste Abstand 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.