# 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 = $2\sigma$ | | $\sigma_x = N_x^{1/2}$ | $\sigma_x = N_x^{1/2}$<br>$\sigma_y = N_y^{1/2}$ | $\sigma_x = N_x^{1/2}$<br>$\sigma_y = N_y^{1/2}$<br>$\sigma_z = N_z^{1/2}$ |
| (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* $\Delta V$ bei Übergang zu *Abständen* **r** | $\Delta V$ = | $2\Delta r$<br>***(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 +** $\Delta$**r** zu finden mit *dimensionsloser Sprungweite "1"* **W'(r)** ist die Wahrscheinlichkeitdichte bezogen auf Abstände | **W(r) = w(r)** $\Delta$**V =W'(r)** $\Delta$**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 +** $\Delta$**r** zu finden mit *Sprungweite* ***$a_0$ cm*** | **W(r,$a_0$) = w(r,$a_0$)** $\Delta$**V = W'(r)** $\Delta$**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** | **<r²> =** | $N\cdot a_0^2$ | $2N\cdot a_0^2$ | $3N\cdot a_0^2$ |
| (6a) | **Diffusionlänge L =** $\{\langle r^2\rangle\}^{1/2}$ | **L =** | $a_0N^{1/2}$ | $a_0(2N)^{1/2}$ | $a_0(3N)^{1/2}$ |
| (7) | Mittleres Verschiebungsquadrat *mit dimensionloser 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 | $a_0\cdot N^{1/2}$ | $a_0(2N)^{1/2}$<br>siehe auch den Link |

## Erklärungen und Mathematik

### 1. Sprungweiten

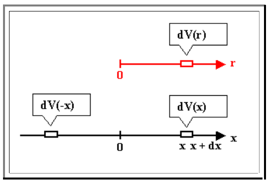
- Solange wir nur Würfelspiele betrachten, gibt es keine Sprungweiten. Assoziieren wir das gewürfelte Ergebnis mit der Bewegung von irgendetwas ("bei **+1** *eins* nach rechts, bei **-1** *eins* nach links"), haben wir die dimensionlose Spurngweite *"1"*
- Ist die Sprungweite jedoch eine physikalische 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**$\sigma$, hat einen besonders einfachen Wert (und markiert die Wendepunkte der Kurve).
- Häufig benutzt man den numerischen Wert für $\sigma$ als ein Maß für die Streuung eines Parameters, z.B. bei Meßwerten, die einer Gaußverteilung gehorchen.
- Unter Benutzung von $\sigma$ 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/ 2N**$a_0^2$ 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 $r_{wahr}$ 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.
- $r_{wahr}$ 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.