Physik hinter modernen Technologien
Musterlösung 1

Aufgabe 1.1 Diffusion und Drift im random hopping Modell

a) Die Auswahl der Hüpfrichtung bei der eindimensionalen Zufallsbewegung ist vergleichbar mit dem Wurf einer Münze bei jedem Schritt, wobei Kopf nach rechts und Zahl nach links bedeutet. Die Position x_n hat die Bedeutung einer Zufallsvariable, deren Veränderung $r_n = x_{n+1} - x_n$ den Wert ± 1 annehmen kann, mit jeweiliger Wahrscheinlichkeit $p_\pm = p[r_n = \pm 1]$, die zu Beginn gleich $\Gamma = 0.5$ sein soll. Abb.1 zeigt typische random walks mit $x_0 = 0$. Der Erwartungswert nach n Schritten ist:

$$\langle x_n \rangle = n(+1 \cdot p_+ + (-1) \cdot p_-) = 0. \tag{1}$$

In Übereinstimmung finden wir in unserer Simulation, dass der nach n Schritten im Mittel zurückgelegte Weg $\langle x_n - x_0 \rangle = 0$, d.h. ein Teilchen bewegt sich im Mittel nicht von seiner Ausgangsposition weg. Beachte, dass in der Simulation über verschiedene runs gemittelt wird. Die Verteilungsfunktion für die Position ist eine Normalverteilung, Abb.1 zeigt die entsprechenden Histogramme für die verschiedenen runs.

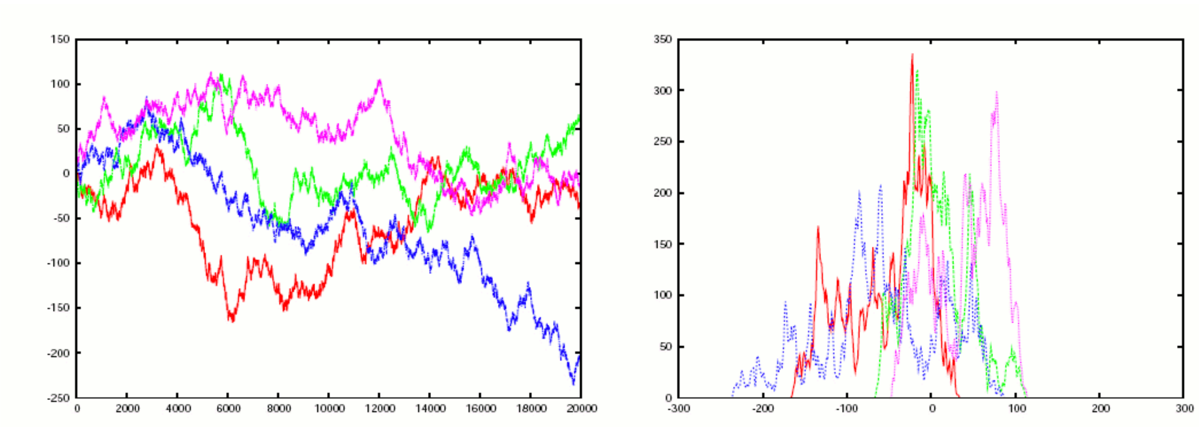

Abbildung 1: Random walks und die entsprechenden Positions-Histogramme.

b) Die Distanz nach m Schritten hat den Erwartungswert:

$$\langle r_n(m) \rangle \equiv \langle x_{n+m} - x_n \rangle = \langle r_{n+m-1} + r_{n+m-2} + \cdots + r_n \rangle \tag{2}$$

$$= \langle r_{m+n-1} \rangle + \langle r_{n+m-2} \rangle + \cdots + \langle r_n \rangle = 0, \tag{3}$$

wobei verwendet wurde, dass es sich bei den einzelnen Schritten um unabhängige Zufallsereignisse handelt. Verteilungsfunktion $P_m(x) \equiv P[r(m) = x]$: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung kann z.B. durch ein Galton'sches Brett dargestellt werden. Man findet die Rekursionsrelation

$$P_m(x) = \frac{1}{2} \left[P_{m-1}(x-1) + P_{m-1}(x+1) \right], \tag{4}$$

woraus als diskrete Verteilungsfunktion die Binomialverteilung

$$P_m(x) = \frac{1}{2^m} \begin{pmatrix} m \\ \frac{x+m}{2} \end{pmatrix} \tag{5}$$

deren Kontinuumslimes die Gauss'sche Normalverteilung

$$P_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{6}$$

als Kontinuumslimes (Satz von DeMoivre-Laplace, Spezialfall des zentralen Grenzwertsatzes) mit $\sigma^2 = \frac{m}{4}$ ergibt.
Der mittlere Abstand zur mittleren Position, d.h. die mittlere Abweichung vom Erwartungswert der Position entspricht der statistischen Standardabweichung

$$\delta r(m) = \sqrt{\langle(\langle x_{n+m} - x_n - \langle r_n(m)\rangle)^2\rangle}. \tag{7}$$

Für den von uns betrachteten Fall finden wir:

$$(\delta r(m))^2 = \langle (x_{n+m} - x_n)^2 \rangle = \langle \left(\sum_{j=0}^{m-1} r_{n+j} \right)^2 \rangle \tag{8}$$

$$= \langle \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} r_{n+i} r_{n+j} \rangle = \sum_{i,j=0}^{m-1} \underbrace{\langle r_{n+i} r_{n+j} \rangle}_{=\delta_{ij}} = m \tag{9}$$

$$\Rightarrow \delta r(m) = \sqrt{m}. \tag{10}$$

c) Die Breite σ der Normalverteilung in Gl. (6) ist proportional zu $\sigma \propto \sqrt{m}$, demnach zu $\delta r(m)$. Mit zunehmender Anzahl Schritte verbreitert sich also die Verteilungsfunktion. Setzt man die Zahl der Schritte mit dem Verlauf einer entsprechenden Anzahl von Zeitintervallen gleich, so erhält man eine Verbreiterung linear in der Zeit, mit $\sigma^2 = 2Dt$, wobei D ein Mass für die Verbreiterung ist und deshalb als Diffusionskonstante bezeichnet wird.

d) Die Teilchendichte am Ort i zur Zeit m sei $n_i^{(m)}$. Für die Veränderung in einem Zeitschritt gilt folgende diskrete Ratengleichung:

$$n_i^{(m+1)} - n_i^{(m)} = \Gamma \left(n_{i+1}^{(m)} + n_{i-1}^{(m)} \right) - 2\Gamma n_i^{(m)}. \tag{11}$$

Mit

$$n_i^{m+1} - n_i^m \quad \rightarrow \quad \tau \frac{\partial n}{\partial t}, \tag{12}$$

$$n_{i+1}^{(m)} - 2n_i^{(m)} + n_{i-1}^{(m)} \quad \rightarrow \quad a^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \tag{13}$$

folgt die kontinuierliche Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad D = \frac{a^2 \Gamma}{\tau}. \tag{14}$$

Aus der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot J_D \tag{15}$$

folgt schliesslich das Fick'sche Gesetz für die Diffusionsstromdichte,

$$J_D = -D \vec{\nabla} n. \tag{16}$$

Die Lösung der Diffusionsgleichung zu einem gegebenen Anfangsprofil $n(x,0) = n_0(x)$ kann mittels der Greensfunktion $G(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$ gefunden werden als die Konvolution

$$n(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(y-x,t) n_0(y) dy. \tag{17}$$

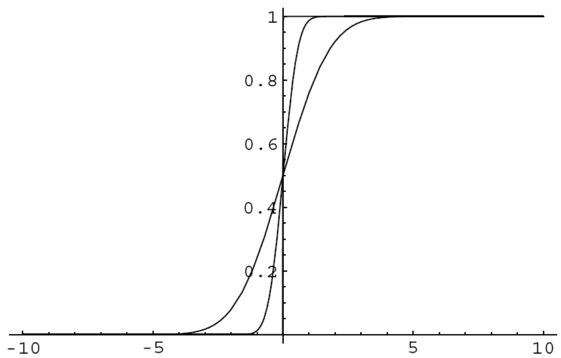

Abbildung 2: Lösung der Diffusionsgleichung für stufenförmiges Anfangsprofil.

Für ein stufenförmiges Anfangsprofil $n_0(x) = \theta(x)$ findet man die Lösung

$$n(x,t) = \left(1 + \mathrm{Erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right]\right)/2. \tag{18}$$

Abb.2 zeigt die Lösung zu verschiedenen Zeiten.

e) Aus Gl. (1) folgt direkt, dass

$$\langle x_n \rangle \neq 0 \Leftrightarrow p[r_n = +1] \neq p[r_n = -1]. \tag{19}$$

Es sei nun $p[r_n = \pm 1] = \frac{1 \pm w}{2}$, mit $w \in (0,1)$. Der Erwartungswert nach n Schritten ist:

$$\langle x_n \rangle = n(+1 \cdot p_+ + (-1) \cdot p_-) = n(\frac{1+w}{2} - \frac{1-w}{2}) = nw \tag{20}$$

Damit ist der Erwartungswert der Distanz nach m Schritten:

$$\langle r_n(m) \rangle = mw. \tag{21}$$

Die Standardabweichung folgt aus

$$\begin{aligned}
(\delta r(m))^2 &= \langle (x_{n+m} - x_n - \langle r_n(m) \rangle)^2 \rangle = \langle (x_{n+m} - x_n)^2 \rangle - \langle r_n(m) \rangle^2 && (22)\\
&= \sum_{i=0}^{m-1} \langle r_{n+i}^2 \rangle + \sum_{i,j=0; i\neq j}^{m-1} \langle r_{n+i} r_{n+j} \rangle - \langle r_n(m) \rangle^2; && (23)\\
\langle r_{n+i}^2 \rangle &= 1, && (24)\\
\langle r_{n+i} r_{n+j} \rangle &= +1 \left[\left(\frac{1+w}{2}\right)^2 + \left(\frac{1-w}{2}\right)^2\right] + (-1) \cdot 2 \left(\frac{1+w}{2}\right)\left(\frac{1-w}{2}\right) && (25)\\
&= w^2 && (26)\\
&\Rightarrow \delta r(m) = \sqrt{m + m(m-1)w^2 - m^2 w^2} = \sqrt{m(1-w^2)}. && (27)
\end{aligned}$$

Ein numerisches Beispiel mit $w = 0.01$ ist in Abb. 3 dargestellt.

f) Mit $\Gamma_\pm = \frac{1 \pm w}{2}$ wird die diskrete Ratengleichung

$$\begin{aligned}
n_i^{(m+1)} - n_i^{(m)} &= \Gamma_- n_{i+1}^{(m)} + \Gamma_+ n_{i-1}^{(m)} - (\Gamma_+ + \Gamma_-) n_i^{(m)} && (28)\\
&= \frac{\Gamma_+ + \Gamma_-}{2}\left(n_{i+1}^{(m)} + n_{i-1}^{(m)}\right) - (\Gamma_+ + \Gamma_-) n_i^{(m)} && (29)\\
&- \frac{\Gamma_+ - \Gamma_-}{2}\left(n_{i+1}^{(m)} - n_{i-1}^{(m)}\right) && (30)\\
&= \Gamma\left(n_{i+1}^{(m)} - 2n_i^{(m)} + n_{i-1}^{(m)}\right) - \frac{w}{2}\left(n_{i+1}^{(m)} - n_{i-1}^{(m)}\right). && (31)
\end{aligned}$$

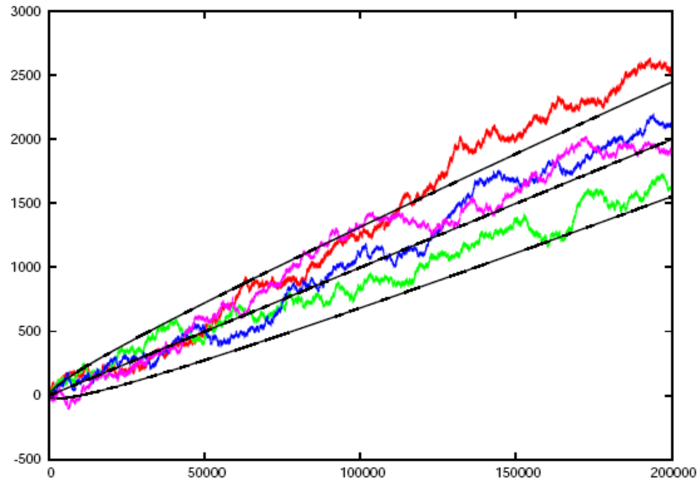

Abbildung 3: Random walk mit Drift aufgrund unterschiedlicher Hüpfwahrscheinlichkeiten, mit mittlerer Position sowie Standardabweichung.

Der zweite Term auf der rechten Seite beschreibt den Beitrag des Driftstroms und hat den Kontinuumslimes

$$-\frac{w}{2}\left(n_{i+1}^{(m)} - n_{i-1}^{(m)}\right) \quad \rightarrow \quad -wa\frac{\partial n}{\partial x}, \tag{32}$$

was einem Driftstrom $J_{drift} = \frac{wa}{\tau} n$ entspricht.