Irrflug-Prozesse mit korrelierten Sprungwahrscheinlichkeiten I

J. U. KELLER

Institut für Theoretische Physik der R.W.T.H. Aachen

(Z. Naturforsch. **26 a**, 1539—1553 [1971]; eingegangen am 8. Februar 1971)

Random walk processes often can serve as models for statistical processes like Brownian motion, heat conduction, diffusion and polymerisation of atoms and molecules. Using this model one generally assumes the jumps of the random walk particle to form a set of statistically independent events. In fact the jumps of the random walk particle are correlated to each other, so this assumption only holds as an approximation. In this paper a theory of the most simple type of the one-dimensional random walk process with correlated jump-probabilities is developed. The results are demonstrated with two simple examples.

Einleitung

Der klassische Irrflug-Prozeß [1–3] hat sich als mathematisches Modell zur Beschreibung einer Reihe von statistischen Vorgängen und Erscheinungen in der Physik und Chemie wohl bewährt. Beispiele für solche Vorgänge sind die Brownsche Bewegung [4, 4a], die Wärmeleitung, die Diffusion von Fremdatomen oder Gitterdefekten in Festkörpern [5]. Ferner die statistische Bewegung von Elektronen in Halbleitern [6], chemische Reaktionen und speziell die Polymerisation anorganischer oder organischer Substanzen [7]. Darüber hinaus hat sich gezeigt, daß manche anderen Probleme der statistischen Physik, z.B. die Dynamik eines Ising-Spin-Systems, unter gewissen Voraussetzungen mathematisch äquivalent mit Problemen des Irrflug-Prozesses sind [8].

Dabei wird zumeist angenommen, daß die einzelnen Sprüge, welche das sogenannte Irrflug-Teilchen (IT) auf dem ihm zugewiesenen Gitter ausführt, statistisch voneinander unabhängig sind. In mathematischer Hinsicht kann dann der Irrflug-Prozeß als spezielle skalare oder vektorwertige *Markoff-Kette 1. Stufe* [9] angesehen werden, je nachdem das Gitter ein- oder mehrdimensional ist. Diese Annahme bedarf aber in jedem Einzelfall der physikalischen Rechtfertigung und kann streng genommen nur als Approximation verstanden werden. In vielen Fällen zeigt nämlich eine genauere Analyse des vorliegenden statistischen Prozesses, daß die einzelnen Sprünge des IT nicht voneinander unabhängig, sondern stark miteinander korreliert sind.

Beispiele für solche Prozesse sind: die Brownsche Bewegung eines Teilchens mit Trägheit (z.B. Poly-

Sonderdruckanforderungen an Dr. J. U. KELLER, Institut für Theoretische Physik, Rhein.-Westf. Techn. Hochschule, *D-5100 Aachen*, Templergraben 55.

1 K. PEARSON, The Problem of Random Walk, Nature London **72**, 602 [1905]. — D. R. COX u. H. D. MILLER, The Theory of Stochastic Processes, J. Wiley & Sons, New York 1965. — G. POLYA, Math. Ann. **84**, 149 [1921]. — E. W. MONTROLL, J. Soc. Indust. Appl. Math. **4**, 241 [1956]. — S. KARLIN u. J. MCGREGOR, Illinois J. of Math. **3**, 66 [1959]. — G. H. VINEYARD, J. Math. Phys. **4**, 1191 [1963]. — E. W. MONTROLL et al., J. Math. Phys. **6**, 167 [1965]. — F. SPITZER, Principles of Random Walk, D. van Norstrand, Princeton 1964. — M. N. BARBER u. B. W. NINHAM, Random and Restricted Walks, Gordon & Breach, New York 1970.

1a S. CHANDRASEKHAR, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 [1943].

2 E. W. MONTROLL, Proc. of Symposia in Applied Mathematics **16**, 193 [1964], USA.

3 W. FELLER, An Introduction to Probability Theory and its Application, 3rd Ed., J. Wiley & Sons, New York 1952.

4 M. SMOLUCHOWSKI, Ann. d. Physik **21**, 756 [1906], **25**, 205 [1908]; Phys. Z. **16**, 321 [1915], **17**, 557, 585 [1916]. — LORD RAYLEIGH, Scientific Papers **6**, 604; Phil. Mag. **37**, 321 [1919]. — G. KLEIN, Proc. Roy. Soc. Edinburgh A **63**, 286 [1952].

4a M. KAC, Am. Mathem. Monthly **54**, 369 [1947].

5 A. C. DAMASK u. C. J. DIENES, Point defects in metals, Gordon & Breach, New York 1963. — P. G. SHEWMON, Diffusion in Solids, McGraw Hill 1963. — R. E. HOWARD, Artikel in "5th Int. Symp. on the Reactivity of Solids", Munich 1964, Elsevier Publ. Co. 1965, Amsterdam.

6 S. W. DUCKETT, Phys. Rev. **166**, 302 [1968]. — E. K. KUDINOV u. Y. A. FIRSOV, JETP **22**, [1966], **49**, 867 [1965].

7 G. M. WHITE, J. Chem. Phys. **50**, 4672 [1969]. — P. WHITTLE, Proc. Camb. Phil. Soc. **61**, 475 [1965]. — R. J. RUBIN, J. Chem. Phys. **44**, 2130 [1966]. — D. A. MCQUARRIE, J. Appl. Prob. **4**, 413—478 [1967]. — J. MAZUR, J. Chem. Phys. **41**, 2256 [1964]. — A. C. ALBRECHT, J. Chem. Phys. **27**, 1002 [1957]. — V. D. GUPTA et al., Proc. Phys. Soc. Ser. 2, **2**, 442 [1969].

8 F. J. DYSON, Phys. Rev. **102**, 1217 [1956].

9 Vgl COX and MILLER, FELLER.

vinylpyrolidon in Wasser[10], die Diffusion von speziellen Leerstellen in Kristallgittern[11]. Beim letzten dieser Prozesse können die Korrelationen zwischen den einzelnen Sprüngen der Leerstelle so stark sein, daß sich meßbare Abweichungen von der dem unkorrelierten Prozeß zugeordneten Einstein-Relation ergeben!

Ferner Wachstumsprozesse von Hochpolymeren: die Wahrscheinlichkeit für die Anlagerung eines weiteren Atoms oder Moleküls hängt im allgemeinen nicht nur von der Struktur des letzten Kettengliedes, sondern auch von der Struktur der davor liegenden Glieder ab. Außerdem scheinen Irrflug-Prozesse ohne Korrelation zwischen den einzelnen Sprüngen des IT ungeeignet zu sein, die Diffusionsprozesse in Protonen-Halbleiter und Ionen-Austauscher-Membranen[12] sowie die Wachstumsprozesse an Kristallen richtig zu beschreiben. Nimmt man an, daß jeder noch so komplizierte diskret in Raum und Zeit erfolgende Irrflug-Prozeß durch eine Markoff-Kette genügend hoher Stufe approximiert werden kann, so liegt es nahe zu versuchen, auch diese Vorgänge durch Irrflug-Prozesse mit korrelierten Sprungwahrscheinlichkeiten zu beschreiben.

Der einfachste dieser Prozesse ist der, bei welchem die Sprungwahrscheinlichkeiten des IT nur von Richtung und Größe des zuletzt ausgeführten Sprunges, nicht aber von den noch davor ausgeführten Sprüngen abhängig sind. Ein solcher Prozeß läßt sich in mathematischer Hinsicht als Markoff-Kette 2. Stufe auffassen[13]. Einzelne spezielle bei solchen Irrflug-Prozessen auftretende Probleme sind bereits in der Literatur behandelt worden[14]. Wir wollen in dieser und in zwei folgenden Arbeiten versuchen, eine systematische Theorie dieser Prozesse für das eindimensionale, das ebene quadratische und das kubisch primitive Gitter zu entwickeln. Insbesondere wollen wir folgende Fragen untersuchen:

1) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich das IT zu einer vorgegebenen Zeit an einem vorgegebenen Ort des Gitters befindet, wenn man die Dynamik des Irrflug-Prozesses und die Anfangsverteilung kennt?

2) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß das IT irgendwann im Laufe der Zeit, ausgehend von irgendeinem Gitterpunkt, einen anderen vorgegebenen Gitterpunkt erreicht? *(Problem of the walking drunkard).*

3) Wieviele Schritte braucht das IT im Mittel, um von einem gegebenen Anfangspunkt aus einen vorgegebenen Gitterpunkt zu erreichen?

4) Wie groß ist die mittlere Anzahl von verschiedenen Gitterpunkten, welche das IT bei seiner Wanderung innerhalb einer vorgegebenen Anzahl von Schritten besucht?

5) Wie groß ist die mittlere Anzahl von Schritten, welche das IT bei seiner Wanderung in gleicher (oder alternierender) Richtung hintereinander ausführt?

Die Fragen 3) und 4) treten z.B. bei der Berechnung der mittleren Lebensdauer von Fehlstellen in Kristallen auf. Frage 5) ist z.B. für die Größe der sich in einer eindimensionalen Atomkette mit Spin-Wechselwirkung ausbildenden Weißschen Bezirke (bzw. Blochschen Wände) von Bedeutung.

Wir betrachten in der vorliegenden Arbeit nur den *eindimensionalen* Irrflug-Prozeß 2. Markoff-Stufe. Im Abschnitt (A) werden die oben angeführten Fragen für diesen Prozeß untersucht. In einem 2. Abschnitt (B) sollen die Ergebnisse an zwei einfachen Beispielen für derartige Irrflug-Prozesse, nämlich dem Wachstumsprozeß eines Hochpolymers und dem einer linearen Atomkette mit Austauschwechselwirkung erläutert werden.

A. Der eindimensionale Irrflug-Prozeß 2. Markoff-Stufe

Wir betrachten ein unbeschränktes eindimensionales Gitter mit den Gitterpunkten $a\,n$ $(-\infty < n < \infty$, $a > 0)$, auf welchem ein Teilchen, das sogenannte Irrflug-Teilchen (IT), jeweils zu den Zeiten $t = N\tau + \delta$ $(N = 0, 1, 2, \ldots, \tau > 0$, $\delta \to +0)$ statistisch verteilte Sprünge ausführt.

[10] J. KELLER, Ann. Phys. 7. Folge, **24**, 47 [1969].

[11] K. KOMPAAN u. Y. HAVEN, Trans. Faraday-Soc. **52**, 786 [1956].

[12] B. N. LASKORIN, N. M. SMIRNOVA u. M. N. GANTMANN, Ionenaustauscher-Membranen und ihre Anwendung, Akademie-Verlag, Berlin 1966.

[13] J. L. DOOB, Stochastic Processes, J. Wiley & Sons, New York 1953, S. 171, 185ff. — J. KELLER, Z. Physik **204**. 47 [1967], **210**, 142 [1968].

[14] S. GOLDSTEIN, Quart. J. Mech. a. Appl. Math. IV, PT 2, 129 [1950]. — A. SETH, J. of Roy. Stat. Soc. Ser. B **25**, 394 [1963]. — H. C. GUPTA u. A. SETH, Proc. Nat. Inst. Sci. India A **32**, 472 [1966]. — W. A. O'NWAUGH, Biometrika **45**, 241 [1958]. — C. M. TCHEN, J. Chem. Phys. **20**, 214 [1952]. — J. GILLIS, Proc. Camb. Phil. Soc. **51**, 639 [1955].

Die Simultanwahrscheinlichkeit (SW) dafür, daß sich das IT zu den Zeiten $N_k < N_{k-1}, \ldots, < N_1$ in den Gitterpunkten $n_k, n_{k-1}, \ldots, n_1$ befindet, bezeichnen wir mit

$$p\begin{pmatrix} n_k & n_{k-1}, \ldots, & n_1 \\ N_k & N_{k-1} & N_1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{l} n_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \\ N_l = 0, 1, 2, \ldots, \\ l = 1, 2, \ldots, k. \end{array}$$

Die bedingte Wahrscheinlichkeit (BW) dafür, daß sich das IT zu den Zeiten $M_1 < M_2 <, \ldots, < M_l$ in den Gitterpunkten $m_1, m_2, \ldots, m_l$ befindet, wenn es sich zu den Zeiten $N_k < N_{k-1}, \ldots, < N_1$ in den Gitterpunkten $n_k, n_{k-1}, \ldots, n_1$ befunden hat, bezeichnen wir mit

$$p\left(\begin{matrix} n_k & n_{k-1}, \ldots, n_1 \\ N_k & N_{k-1}, \ldots, N_1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} m_1, \ldots, m_l \\ M_1, \ldots, M_l \end{matrix}\right) \qquad \begin{array}{l} n_i, m_j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \\ N_i, M_j = 0, 1, 2, \ldots, \\ i = 1, \ldots, k, j = 1, \ldots, l, \\ N_1 < M_1. \end{array}$$

Es gelten die Normierungen

$$\sum_{n_k=-\infty}^{\infty}, \ldots, \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} p\begin{pmatrix} n_k, \ldots, n_1 \\ N_k & N_1 \end{pmatrix} = 1 \qquad \ldots \text{ alle } N_k, \ldots, N_1 \tag{1}$$

$$\sum_{m_1=-\infty}^{\infty}, \ldots, \sum_{m_l=-\infty}^{\infty} p\left(\begin{matrix} n_k, \ldots, n_1 \\ N_k, \ldots, N_1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} m_1, \ldots, m_l \\ M_1, \ldots, M_l \end{matrix}\right) = 1 \qquad \ldots \text{ alle } \begin{matrix} n_k, \ldots, n_1 \\ N_k, \ldots, N_1. \end{matrix} \tag{2}$$

Wir betrachten hier nur Irrflug-Prozesse, welche folgende Bedingungen erfüllen:

1) Das IT kann auf seinem momentanen Gitterplatz nicht verweilen; es verläßt ihn nach jeweils τ Sekunden:

$$p\left(\begin{matrix} n_k, \ldots, n_1 \\ N_k, \ldots, N_1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n_1 \\ N \end{matrix}\right) = 0 \qquad \ldots \text{ alle } N > N_1. \tag{3}$$

2) Das IT kann von seinem momentanen Gitterplatz nur zu einem seiner beiden unmittelbaren Nachbarplätze, nicht aber zu anderen Gitterplätzen springen:

$$p\left(\begin{matrix} n_k, \ldots, n_1 \\ N_k, \ldots, N_1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ N_1 + 1 \end{matrix}\right) = 0 \qquad \ldots \text{ alle } n \neq n_1 \pm 1. \tag{4}$$

3) Die Richtung eines Sprunges hängt höchstens von der Richtung des vorhergehenden Sprunges, nicht aber von der Richtung der noch früher ausgeführten Sprünge ab.

Die Dynamik des Prozesses kann also durch eine Markoff-Kette 2. Stufe beschrieben werden[13].

$$p\left(\begin{matrix} n_k, \ldots, n_2 & n_1 \\ N_k, \ldots, N-2 & N-1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right) = p\left(\begin{matrix} n_2 & n_1 \\ N-2 & N-1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right) \qquad \ldots \text{ alle } k \geq 2. \tag{5}$$

4) Die Sprungwahrscheinlichkeit seien homogen in Ort und Zeit.

$$p\left(\begin{matrix} n_2 + m & n_1 + m \\ N - 2 + M & N - 1 + M \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n + m \\ N + M \end{matrix}\right) = p\left(\begin{matrix} n_2 & n_1 \\ N-2 & N-1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right)$$
$$\ldots \text{ alle } M \geq 0, \; -\infty < m < \infty. \tag{6}$$

Die Dynamik des Irrflug-Prozesses wird also durch die 4 Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p\left(\begin{matrix} n \pm 1 & n \\ N-1 & N \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \pm 1 \\ N+1 \end{matrix}\right) = p^{\mp\pm}$$

bestimmt. Wegen (2) enthalten diese Wahrscheinlichkeiten nurmehr 2 freie Parameter. Man kann daher folgenden Ansatz machen:

$$p\left(\begin{matrix} n \pm 1 & n \\ N-1 & N \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \pm 1 \\ N+1 \end{matrix}\right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} + r - s \cdots & + + \\ \frac{1}{2} - r + s & + - \\ \frac{1}{2} + r + s & - + \\ \frac{1}{2} - r - s & - - . \end{bmatrix} \tag{7}$$

Die Parameter r und s lönnen noch von a und τ, aber nicht mehr von n oder N abhängen. Wegen (2), angewandt auf (7) gilt

$$|r| + |s| \leq \tfrac{1}{2}\,.$$

Ist $s = 0$, so geht die Kette 2. Stufe in eine Markoff-Kette 1. Stufe über. Das IT wählt dann die Richtung des nächsten Sprunges unabhängig von der Richtung des vorhergehenden Sprunges. Ist $s > 0$, so neigt das IT dazu, eine einmal eingeschlagene Richtung beizubehalten. Ist $s < 0$, so neigt das IT dazu, die Richtung seiner Sprünge dauernd zu wechseln. Ist $r = 0$, so sind die bedingten Wahrscheinlichkeiten von spiegelsymmetrischen Sprungfolgen einander gleich. Ist $r > 0$ bzw. $r < 0$, so bevorzugt das IT systematisch Sprünge nach rechts bzw. links. Daher kann r als Parameter einer äußeren Kraft angesehen werden.

Zur Vereinfachung der Rechnungen setzen wir im folgenden stets voraus, daß der Irrflug-Prozeß kräftefrei, also $r = 0$, ist.

a) *Die Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des IT* $p\begin{pmatrix} n \\ N \end{pmatrix}$ aus vorgegebener Anfangsverteilung $p\begin{pmatrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ und (7) gelingt mit Hilfe des Satzes von der totalen Wahrscheinlichkeit: ([3] S. 20)

$$p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n-1 & n \\ N & N+1 \end{matrix}\right) = (\tfrac{1}{2}+s)\,p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n-2 & n-1 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) + (\tfrac{1}{2}-s)\,p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n & n-1 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \tag{8a}$$

$$p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n+1 & n \\ N & N+1 \end{matrix}\right) = (\tfrac{1}{2}-s)\,p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n & n+1 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) + (\tfrac{1}{2}+s)\,p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n+2 & n+1 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \tag{8b}$$

$$\cdot = \begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix}\,,\quad N = 1, 2, \ldots;\ -\infty < n, \mu, \nu < \infty\,.$$

Nun gilt

$$p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n-1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) + p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n+1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) = p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right), \tag{9a}$$

$$p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n & n+1 \\ N & N+1 \end{matrix}\right) + p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n & n-1 \\ N & N+1 \end{matrix}\right) = p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right). \tag{9b}$$

Addiert man die Gl. (8a, b), so folgt mit (9a, b):

$$p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N+1 \end{matrix}\right) = (\tfrac{1}{2}+s)\left[p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n-1 \\ N \end{matrix}\right) + p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n+1 \\ N \end{matrix}\right)\right] - 2s\,p\left(\cdot\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N-1 \end{matrix}\right). \tag{10}$$

Dies ist eine Differenzengleichung für die doppelt bedingten einfachen Aufenthaltswahrscheinlichektein. Im folgenden verwenden wir stets die Anfangsbedingung

$$p\begin{pmatrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\,\delta_{\nu 0}(\delta_{\mu,-1} + \delta_{\mu,1})\,,\quad p\begin{pmatrix} \nu \\ 0 \end{pmatrix} = \delta_{\nu 0}\,. \tag{11}$$

Das IT befindet sich also zu Beginn des Prozesses im Ursprung. Multiplikation von (10) mit (11) gibt nach Summation über μ

$$p\left(\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N+1 \end{matrix}\right) = (\tfrac{1}{2}+s)\left[p\left(\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} n-1 \\ N \end{matrix}\right) + p\left(\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} n+1 \\ N \end{matrix}\right)\right] - 2s\,p\left(\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N+1 \end{matrix}\right). \tag{12}$$

Diese Differenzengleichung für die einfach bedingte einfache Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat für $|n| \leq N$, $|n| + N = 2n'$, $N = 1, 2, 3, \ldots$, $n' = 0, \pm 1, \ldots$ die Lösung[15]

$$\begin{aligned} p\left(\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\,\middle|\,\begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right) = {} & 2s\,(1-2s)\,(\tfrac{1}{2}+s)^{N-1}\,F\left(1 - \frac{N-n}{2},\ 1 - \frac{N+n}{2},\ 1; \left(\frac{1-2s}{1+2s}\right)^2\right) \\ & + (1-2s)^2\,(\tfrac{1}{2}+s)^{N-1}\,\frac{N}{2}\,F\left(1 - \frac{N-n}{2},\ 1 - \frac{N+n}{2},\ 2; \left(\frac{1-2s}{1+2s}\right)^2\right). \end{aligned} \tag{13}$$

[15] N. E. Nörlund, Differenzenrechnung, Berlin, Springer 1924.

Hierbei ist

$$F(\alpha,\beta,\gamma;x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{x^2}{2!} + \cdots.$$

die allgemeine hypergeometrische Funktion. Da bei den in (13) auftretenden hypergeometrischen Funktionen einer der Parameter α oder β stets eine negative ganze Zahl oder Null ist, brechen die entsprechenden Reihenentwicklungen ab und reduzieren sich auf Jacobi-Polynome[16].

Im Fall $s = 0$ reduziert sich (13) auf die wohlbekannten Übergangswahrscheinlichkeiten des symmetrischen (d.h. $r = 0$) einfachen Irrflug-Prozesses[17]

$$p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix} = \begin{cases} 2^{-N}\dbinom{N}{\frac{1}{2}(N+n)} & \ldots N+n = 2n', \quad |n| \le N, \\ 0 & \ldots \text{sonst}. \end{cases}$$

Eine Diskussion von (13) ist in [14] (GOLDSTEIN) enthalten.

b) Das asymptotische Verhalten von $p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix}$ für $N \to \infty, n \to \infty$

Dieses Verhalten kann z.B. mit Hilfe eines Satzes von A. MARKOFF[18] bestimmt werden. Um diesen Satz anwenden zu können, ist aber zunächst eine Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der Momente von $p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix}$ notwendig. Wir definieren.:

$$Q\begin{pmatrix}0 & u\\ 0 & N\end{pmatrix} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inu}\, p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix}. \tag{14}$$

Nach (2) gilt

$$Q\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & N\end{pmatrix} = 1.$$

Aus (12) folgt eine Differenzengleichung für Q:

$$Q\begin{pmatrix}0 & u\\ 0 & N+1\end{pmatrix} = (1+2s)\, Q\begin{pmatrix}0 & u\\ 0 & N\end{pmatrix}\cos u - 2s\, Q\begin{pmatrix}0 & u\\ 0 & N-1\end{pmatrix}. \tag{15}$$

Sie hat die Lösung

$$Q\begin{pmatrix}0 & u\\ 0 & N\end{pmatrix} = A_1 a_1^N + A_2 a_2^N \tag{16}$$

mit

$$a_{1,2} = (\tfrac{1}{2}+s)\cos u \pm \sqrt{(\tfrac{1}{2}+s)^2\cos^2 u - 2s}, \tag{17}$$

$$A_1 = \frac{a_2 - \cos u}{a_2 - a_1}, \quad A_2 = \frac{a_1 - \cos u}{a_1 - a_2}. \tag{18}$$

Aus (14) folgt mit (16) eine Integraldarstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

$$p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} du\,(A_1 a_1^N + A_2 a_2^N)\, e^{-inu}, \quad N = 1, 2, \ldots. \tag{19}$$

Für die erzeugende Funktion $P\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & z\end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty} p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix} z^N, \ldots, |z| < 1$

folgt aus (19)

$$P\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & z\end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left(\frac{A_1}{1-a_1 z} + \frac{A_2}{1-a_2 z}\right) e^{-inu}\, du = \begin{cases} \dfrac{2}{1+2s}\cdot\dfrac{1-(a+b)sz}{(a-b)z}\, b^{|n|} & \ldots, |n| \ge 1 \\ \dfrac{2}{1+2s}\cdot\dfrac{1-2sbz}{(a-b)z} & \ldots, n = 0. \end{cases} \tag{20}$$

[16] A. ERDELYI (Ed.), Higher Transcendental Functions, McGraw Hill, New York 1953. — E. MADELUNG, Grundlehren Bd. 4, Springer 1964, 7. Aufl., S. 64, 99.

[17] Vgl. [1a], S. 4, s. [4a], S. 271.

[18] M. FRECHET u. J. SHOHAT, Trans. Amer. Math. Soc. **33**, 533 [1931].

Hierbei sind $a(s, z)$, $b(s, z)$ die Wurzeln der Gleichung

$$x^2 - 2y(s,z)\,x + 1 = 0\,, \qquad y(s,z) = (1 + 2sz^2)/(1+2s)\,z\,.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} y(s,z) &\geq 1 & &\text{für} \quad |s| \leq \tfrac{1}{2}, \quad 0 \leq z \leq 1\,, \\ a &= y + \sqrt{y^2-1} \geq 1 & & \\ b &= y - \sqrt{y^2-1} < 1\,, & & ab = 1\,. \end{aligned}$$

Wir führen nun noch die erzeugende Funktion der Momente

$$\mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^l\, p\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & N\end{pmatrix}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{21}$$

ein:

$$M\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & z\end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty} \mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} z^N = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^l\, P\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & z\end{pmatrix}. \tag{22}$$

Aus (20) folgt

$$M\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & z\end{pmatrix} = \frac{4}{1+2s}\,\frac{1-(a+b)sz}{(a-b)z}\,\nu_l(b)\,, \quad \nu_l(b) = \sum_{n=1}^{\infty} n^e b^n\,. \tag{23}$$

Das asymptotische Verhalten der Momente μ für $N \to \infty$ läßt sich aus $M\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & z\end{pmatrix}$ mit Hilfe eines Satzes von Tauber ermitteln[19]: *

V_1: $M\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & e^{-y}\end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty} \mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} e^{-y}$ existiert für alle $y > 0$.

V_2: $\mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} > 0 \ldots$ alle $l = 2l'$, $l' = 0, 1, 2, \ldots, N = 0, 1, 2, \ldots,$

$$V_3\text{: Für } y \to 0 \text{ divergiere } M\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & e^{-y}\end{pmatrix} \to y^{-\varrho} L(y) \quad \text{mit} \quad \varrho > 0, \quad \lim_{y\to 0} L(y) = \text{const}\,. \tag{24}$$

A: Für $N \to \infty$ gilt: $\mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} = \left[N^\varrho L\left(\frac{1}{N}\right) - (N-1)^\varrho L\left(\frac{1}{N-1}\right)\right] \Big/ \Gamma(\varrho+1)\,.$

Aus (23) folgt

$$\varrho = l/2 + 1\,, \quad L(y) = \frac{l!}{\left(2\,\frac{1-2s}{1+2s}\right)^{l/2}} = \text{const}\,.$$

Daher gilt nach (24) für $N \to \infty$

$$\mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} = \frac{l!}{\left(2\,\frac{1-2s}{1+2s}\right)^{l/2}}\,\frac{N^{l/2}}{(l/2)!} + O(N^{l/2-1})\,, \qquad l = 0, 2, 4, \ldots. \tag{25}$$

Für ungerade Werte von l gilt wegen (13) bzw. (20) für alle N

$$\mu\begin{pmatrix}0 & l\\ 0 & N\end{pmatrix} = 0\,.$$

Für $l = 2$ folgt aus (25) ein asymptotischer Ausdruck für die Streuung des Prozesses

$$\mu\begin{pmatrix}0 & 2\\ 0 & N\end{pmatrix} = \frac{1+2s}{1-2s}\,N + O(1)\,.$$

Wir verwenden nun den oben bereits erwähnten Grenzwertsatz von A. Markoff für eine Folge $\{x_N\}$ $(N = 1, 2, 3, \ldots)$ von *abhängigen* Zufallsvariablen mit den integralen Verteilungsfunktionen $F_N(x)$

[19] G. H. Hardy, Divergent Series, Oxford, Clarendon Press, Reprint of 1. Ed. 1967, S. 148ff, 166.

* V: Voraussetzung, A: Aussage.

$(-\infty < x < \infty)$:

$$V_1: \int_{-\infty}^{\infty} x^l \, \mathrm{d}F_N(x) = \mu \binom{l}{N} < \infty \quad \ldots \text{ alle } l = 0, 1, 2, \ldots; \; N = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$V_2: \lim_{N\to\infty} \mu \binom{l}{N} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x^l \, e^{-x^2/2\sigma^2} \, \mathrm{d}x = \frac{l!}{2^l (l/2)!} (2\,\sigma^2)^{l/2} \quad \ldots. \text{ alle } l = 0, 1, 2, \ldots,. \tag{26}$$

$$A: \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{x_0} \mathrm{d}F_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \int_{-\infty}^{x_0} e^{-x^2/2\sigma^2} \, \mathrm{d}x \quad \ldots \text{ alle } x_0. \tag{27}$$

Wir wenden diesen Satz auf eine Folge von stochastischen Variablen $\{x_N\}$ mit den möglichen Werten

$$x_N = \frac{n}{\sqrt{N}} \quad \cdots \; -\infty < n < \infty, \quad N = 1, 2, 3, \ldots$$

und den unstetigen Verteilungfsunktionen

$$F_N(x) = \sum_{n=-\infty}^{[x\sqrt{N}]} p \begin{pmatrix} 0 & n \\ 0 & N \end{pmatrix}$$

an. $[\alpha]$ bedeutet jene größte ganze Zahl, welche kleiner oder gleich α ist. Ferner gilt

$$\mu \binom{l}{N} = N^{-l/2} \mu \begin{pmatrix} 0 & l \\ 0 & N \end{pmatrix}. \tag{28}$$

Die Aussage (27) lautet nun wegen (25), (28):

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to\infty}} \sum_{-\infty}^{n_0} p \begin{pmatrix} 0 & n \\ 0 & N \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \int_{-\infty}^{x_0} e^{-x^2/2\sigma^2} \, \mathrm{d}x \quad \ldots \text{ alle } x_0, \quad \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to\infty}} \frac{n_0}{\sqrt{N}} = x_0, \quad \sigma^2 = \frac{1+2s}{1-2s}. \tag{29}$$

Die bedingten einfachen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten streben also für große Zeiten einer Normalverteilung zu.

Die Streuung σ^2 dieser Verteilung ist um so größer, je größer die Neigung des IT, die Richtung seiner Bewegung beizubehalten $(s > 0)$; sie ist um so kleiner, je stärker das IT zu Oszillationen neigt $(s < 0)$.

c) Bestimmung der erzeugenden Funktionen der doppelt bedingten zweier SW

Zur Beantwortung der in der Einleitung unter 2)—4) gestellten Fragen muß man die erzeugenden Funktionen der bedingten Wahrscheinlichkeiten

$$p \begin{pmatrix} \mu & \nu & n \pm 1 & n \\ -1 & 0 & N-1 & N \end{pmatrix}$$

kennen. Wir wollen diese Funktionen in diesem Abschnitt bestimmen. Wir definieren

$$P^{\pm}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = \sum_{N=0}^{\infty} p \left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \mp 1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) z^N \quad \ldots |z| < 1, \tag{30}$$

$$P^{\pm}\left(\begin{matrix} \nu \\ 0 \end{matrix} \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} p \begin{pmatrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{pmatrix} P^{\pm}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) \tag{30a}$$

$$P^{\pm}\begin{pmatrix} n \\ z \end{pmatrix} = \sum_{\mu,\nu=-\infty}^{\infty} p \begin{pmatrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{pmatrix} P^{\pm}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) \qquad = \begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix}. \tag{30b}$$

Aus (8) folgt:

$$P^{+}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = p \left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n-1 & n \\ -1 & 0 \end{matrix}\right) + z \left[\left(\tfrac{1}{2} + s\right) P^{+}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n-1 \\ z \end{matrix}\right) + \left(\tfrac{1}{2} - s\right) \bar{P}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n-1 \\ z \end{matrix}\right) \right],$$

$$P^{-}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = p \left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n+1 & n \\ -1 & 0 \end{matrix}\right) + z \left[\left(\tfrac{1}{2} - s\right) P^{+}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n+1 \\ z \end{matrix}\right) + \left(\tfrac{1}{2} + s\right) \bar{P}\left(\cdot \,\middle|\, \begin{matrix} n+1 \\ z \end{matrix}\right) \right]. \tag{31}$$

Wir lösen dieses System von Differenzengleichungen mit Hilfe einer Fouriertransformation:

$$\Phi^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) e^{inu} . \tag{32}$$

Umgekehrt gilt

$$P^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Phi^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) e^{-inu}\, du . \tag{33}$$

Nach (2) und (30) gilt

$$\left| \Phi^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) \right| \leq \frac{1}{1-|z|} \qquad \ldots\ |z| < 1 .$$

Aus (31) folgt

$$\begin{pmatrix} 1-(\frac{1}{2}+s)\, z\, e^{iu} & -(\frac{1}{2}-s)\, z\, e^{iu} \\ -(\frac{1}{2}-s)\, z\, e^{-iu} & 1-(\frac{1}{2}+s)\, z\, e^{-iu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^{+}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) \\ \Phi^{-}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi^{+}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ 0 \end{matrix}\right) \\ \Phi^{-}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} u \\ 0 \end{matrix}\right) \end{pmatrix} . \tag{34}$$

Nach (11) gilt

$$\Phi^{+}\left(\begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} u \\ 0 \end{matrix}\right) = \delta_{\mu,\nu-1}\, e^{i\nu u}, \qquad \Phi^{-}\left(\begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} u \\ 0 \end{matrix}\right) = \delta_{\mu,\nu+1}\, e^{i\nu u} .$$

Somit folgt aus (34)

$$\begin{aligned} \Phi^{+}\left(\begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) &= \frac{1}{D} \{[1-(\tfrac{1}{2}+s)\, z\, e^{-iu}]\, \delta_{\mu,\nu-1} + (\tfrac{1}{2}-s)\, z\, e^{iu}\, \delta_{\mu,\nu+1}\}\, e^{i\nu u} , \\ \Phi^{-}\left(\begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) &= \frac{1}{D} \{(\tfrac{1}{2}-s)\, z\, e^{-iu}\, \delta_{\mu,\nu-1} + [1-(\tfrac{1}{2}+s)\, z\, e^{iu}]\, \delta_{\mu,\nu+1}\}\, e^{i\nu u} , \\ D &= 1-(1+2s)\, z \cos u + 2 s z^2 . \end{aligned} \tag{35}$$

Wir notieren noch die Funktionen

$$\Phi^{\pm}\begin{pmatrix} u \\ z \end{pmatrix} = \sum_{\mu,\nu=-\infty}^{\infty} p\begin{pmatrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Phi^{\pm}\left(\begin{matrix} \mu & \nu \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} u \\ z \end{matrix}\right) . \tag{36}$$

Mit den speziellen Anfangsbedingungen (11) folgt aus (35)

$$2\,\Phi^{\pm}\begin{pmatrix} 0 \\ z \end{pmatrix} = \frac{1-2sz}{1-(1+2s)z+2sz^2} . \tag{37}$$

Für einen Irrflug-Prozeß 1. Stufe ($s = 0$) reduziert sich dieser Ausdruck auf

$$2\,\Phi\begin{pmatrix} 0 \\ z \end{pmatrix} = 1/(1-z) \tag{37a}$$

[vgl. [2], S. 199, Formel (7)].

Aus (33) folgt mit (35) ein expliziter Ausdruck für die gesuchten erzeugenden Funktionen $P^{\pm}\left(\cdot \middle| \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right)$. Im Hinblick auf (6) und (11) genügt es, sie für die Anfangslagen $\nu = 0$, $\mu = \pm 1$ anzuführen:

$$P^{\pm}\left(\begin{matrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = P^{\pm}\left(\begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} -n \\ z \end{matrix}\right) = \frac{2\, b^{|n|}}{(1+2s)\, z(a-b)} \begin{cases} 1-(\frac{1}{2}+s)\, z\, b, \ldots, + \\ (\frac{1}{2}-s)\, z\, b, \ldots, -, \end{cases} \quad n \geq 1, \tag{38a}$$

$$P^{\pm}\left(\begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} n \\ z \end{matrix}\right) = P^{\pm}\left(\begin{matrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} -n \\ z \end{matrix}\right) = \frac{2\, b^{|n|}}{(1+2s)\, z(a-b)} \begin{cases} (\frac{1}{2}-s)\, z\, a, \ldots, + \\ 1-(\frac{1}{2}+s)\, z\, a, \ldots, -, \end{cases} \tag{38b}$$

$$\begin{aligned} P^{\pm}\left(\begin{matrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 0 \\ z \end{matrix}\right) &= P^{-}\left(\begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 0 \\ z \end{matrix}\right) = \frac{2}{(1+2s)(a-b)\, z} [1-(\tfrac{1}{2}+s)\, z\, b], \ldots, n = 0 , \\ P^{-}\left(\begin{matrix} -1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 0 \\ z \end{matrix}\right) &= P^{+}\left(\begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 0 \\ z \end{matrix}\right) = \frac{(1-2s)}{(1+2s)(a-b)}\, b . \end{aligned} \tag{38c}$$

Die Größen $a(s, z)$, $b(s, z)$ sind nach Gl. (20) definiert worden. Aus (38a—c) und (11) folgt natürlich wieder (20).

d) Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten für erstmaliges Erreichen eines beliebigen Gitterpunktes

Wir bezeichnen die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das IT den Gitterpunkt na zum 1. Mal zur Zeit $N\tau$ betritt und zur Zeit $(N-1)\tau$ im Punkt am gewesen ist, wenn es seine Wanderung mit $\begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ begonnen hat, mit

$$\pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right).$$

Da der Irrflug-Prozeß eindimensional ist und (4) gilt, ist

$$\pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) = \begin{cases} \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n-1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right)\delta_{m,\,n-1}, \ldots, n > 0 \\ \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} -1 & 0 \\ N-1 & N \end{matrix}\right)\delta_{m,-1} + \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} 1 & 0 \\ N-1 & N \end{matrix}\right)\delta_{m,1} \quad \ldots n = 0 \\ \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n+1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right)\delta_{m,\,n+1} \quad \ldots n < 0\,. \end{cases} \tag{39}$$

Ferner gilt:

$$\pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) = p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \text{für} \quad N = 0, 1, 2, . \qquad m, n = 0, \pm 1\,. \tag{40}$$

Die Größe

$$\pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \tag{41}$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das IT den Gitterpunkt an zum 1. Mal zur Zeit N_τ erreicht, wenn es seine Reise mit $\begin{pmatrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ begonnen hat. Aus (39), (41) folgt

$$\pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n \\ N \end{matrix}\right) = \begin{cases} \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n-1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \quad \ldots n > 0\,. \\ \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} -1 & 0 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) + \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} 1 & 0 \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \ldots n = 0\,. \\ \pi\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n+1 & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) \quad \ldots n < 0\,. \end{cases} \tag{42}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten lassen sich stets als Summen über höhere SW — sogenannte Bahnwahrscheinlichkeiten — darstellen:

$$p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) = \sum_{\substack{n_i=-\infty \\ i=1,\ldots,N-2}}^{\infty} p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n_1 \\ 1 \end{matrix}, \ldots, \begin{matrix} n_{N-2} & m & n \\ N-2 & N-1 & N \end{matrix}\right). \tag{43}$$

Im folgenden sei stets $m \neq n$. Wir spalten die Summe in (43) nach den Zeiten j, zu denen der Gitterpunkt n zum 1. Mal in der Bahn $\begin{pmatrix} n_1, \ldots, & m \\ 1\;, \ldots, & N-1 \end{pmatrix}$ erscheint, auf:

$$\begin{aligned} p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} m & n \\ N-1 & N \end{matrix}\right) &= \sum_{\substack{n_i=-\infty \\ i=1,\ldots,N-2}}^{\infty} (\neq n)\, p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n_1, \ldots, n_{N-2} & m & n \\ 1 \qquad N-2 & N-1 & N \end{matrix}\right) \\ &+ \sum_{j=1}^{N-2} \sum_{\substack{n_i=-\infty \\ i=j+1,\ldots,N-2}}^{\infty} \sum_{\substack{n_i=-\infty \\ i=1,\ldots,j-1}}^{\infty} (\neq n)\, p\left(\begin{matrix} \pm 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix}\middle|\begin{matrix} n_1, \ldots, n_{j-1} & n & n_{j+1}, \ldots, n_N \\ 1 \qquad j-1 & j & j+1, \ldots, N \end{matrix}\right) \ldots N > 2\,. \end{aligned} \tag{44}$$

$\sum \neq n$ bedeutet, daß der Index n bei der Summierung ausgelassen wird. Wegen (5) und (6) läßt sich (44) in folgender Form schreiben:

$$p\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} = \pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix}$$
$$+\sum_{j=1}^{N-2}\sum_{\substack{n_i=-\infty\\ i=j+1,\dots,N-2}}^{\infty}\sum_{\substack{n_i=-\infty\\ i=1,\dots,j-1}}^{\infty}(\neq n)\, p\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & n_1,\dots,n_{j-1} & n\\ -1 & 0 & 1,\dots,j-1 & j\end{pmatrix}\cdot p\begin{pmatrix}n_{j-1} & n & n_{j+1},\dots,n\\ j-1 & j & j+1 \quad N\end{pmatrix}.$$

Somit gilt wegen (4) und (39):

$n \neq 0$:

$$p\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} = \pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} + \sum_{j=1}^{N-2}\pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & j-1 & j\end{pmatrix} p\begin{pmatrix}m & n & m & n\\ -1 & 0 & N-j-1 & N-j\end{pmatrix}$$
$$n>0:\quad m=n-1;\quad n<0:\quad m=n+1;\quad N\geq 3. \tag{45a}$$

$n = 0$:

$$p\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & 0\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} = \pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & 0\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix}$$
$$+\sum_{j=1}^{N-2}\left\{\pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & -1 & 0\\ -1 & 0 & j-1 & j\end{pmatrix} p\begin{pmatrix}-1 & 0 & m & 0\\ -1 & 0 & N-j-1 & N-j\end{pmatrix} + \pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & j-1 & j\end{pmatrix} p\begin{pmatrix}1 & 0 & m & 0\\ -1 & 0 & N-j-1 & N-j\end{pmatrix}\right\}.$$

Für $N = 2$ fallen die Summen rechter Hand weg und (45) geht in (40) über. Aus (45a, b) lassen sich die Erreichwahrscheinlichkeiten $\pi(|)$ bei bekannten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $p(|)$ prinzipiell berechnen. Wir führen die erzeugenden Funktionen der Wahrscheinlichkeiten $\pi(|)$ ein:

$$n \neq 0:\qquad \Pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & n\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty}\pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & m & n\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} z^N, \qquad \text{a)}$$
$$n>0,\dots,m=n-1,\quad n<0,\dots,m=n+1,$$
$$\Pi\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & z\end{pmatrix} = p\begin{pmatrix}-1 & 0\\ -1 & 0\end{pmatrix}\Pi\begin{pmatrix}-1 & 0 & n\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix} + p\begin{pmatrix}1 & 0\\ -1 & 0\end{pmatrix}\Pi\begin{pmatrix}1 & 0 & n\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}, \qquad \text{b)}$$
$$n = 0:\qquad \Pi^{\pm}\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty}\pi\begin{pmatrix}\pm 1 & 0 & \mp 1 & 0\\ -1 & 0 & N-1 & N\end{pmatrix} z^N, \qquad \text{c)} \tag{46}$$
$$\Pi^{\pm}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix} = p\begin{pmatrix}-1 & 0\\ -1 & 0\end{pmatrix}\Pi^{\pm}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix} + p\begin{pmatrix}1 & 0\\ -1 & 0\end{pmatrix}\Pi^{\pm}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}, \qquad \text{d)}$$
$$\Pi\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix} = \Pi^{+}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix} + \Pi^{-}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix}.$$

Die Größen

$$\Pi\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & 1\end{pmatrix} \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

sind offenbar die Wahrscheinlichkeiten dafür, daß das IT den Gitterpunkt n bzw. 0 *irgendwann* einmal erreicht, wenn es seine Wanderung zur Zeit 0 im Ursprung begonnen hat.

Dies wird evident, wenn man bedenkt, daß die Ereignisse „das IT erreicht den Gitterpunkt an zum 1. Mal zur Zeit N'' für einen festen Wert von n und $N = 1, 2, 3, \dots$ statistisch voneinander unabhängig sind.

Aus (45a, b) folgt mit (30), (46a, b) und der Anfangsverteilung (11):

$$n \neq 0:\qquad \Pi\begin{pmatrix}0 & n\\ 0 & z\end{pmatrix} = \Pi\begin{pmatrix}0 & -n\\ 0 & z\end{pmatrix} = \frac{P^{+}\begin{pmatrix}0 & |n|\\ 0 & z\end{pmatrix}}{1+P^{+}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}}, \qquad \text{a)}$$
$$N = 0:\qquad \Pi\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix} = 2\,\frac{\left(P^{-}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & z\end{pmatrix} - \frac{1}{2}\right)\left(P^{+}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix} - P^{+}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}\right)}{\left[P^{+}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}\right]^2 - \left[P^{+}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & z\end{pmatrix}\right]^2}. \qquad \text{b)} \tag{47}$$

Dabei sind die wegen (11) geltenden Symmetrie-Beziehungen

$$P^{+}\left(\begin{matrix}\pm 1 & 0\\ -1 & 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ z\end{matrix}\right)=P^{-}\left(\begin{matrix}\mp 1 & 0\\ -1 & 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ z\end{matrix}\right),\quad P^{+}\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ z\end{matrix}\right)=P^{-}\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ z\end{matrix}\right)$$

verwendet worden. Setzt man (38) in (47) ein, so folgt

$$\Pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ z\end{matrix}\right)=\frac{1+[(\frac{1}{2}-s)\,a-(\frac{1}{2}+s)\,b]\,z}{2+(1+2s)(a-2b)\,z}\,b^{|n|}\ldots\text{alle } n\neq 0\,. \tag{48}$$

$$\Pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ z\end{matrix}\right)=\frac{(1-bz)\,[1+((\frac{1}{2}-s)\,b-(\frac{1}{2}+s)\,a)\,z]}{1-(1+2s)\,bz+2s\,b^2z^2}\,.$$

Somit gilt

$$\Pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ 1\end{matrix}\right)=\begin{cases}\left.\begin{matrix}1\ldots n=\pm 1\\ 0\ldots |n|>1\end{matrix}\right\}s=-\frac{1}{2}\,,\\ 1\ldots\text{alle } n\neq 0,\ s>-\frac{1}{2}\,.\end{cases} \tag{49a}$$

$$\Pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}0\\ 1\end{matrix}\right)=\begin{cases}1\ldots s\neq\frac{1}{2}\,,\\ 0\ldots s=\frac{1}{2}.\end{cases} \tag{49b}$$

Das Ergebnis (49) besagt: Ist $s=-\frac{1}{2}$, kann das IT also nur zwischen 2 Gitterpunkten oszillieren, so erreicht es außer den Punkten 0, ± 1 keine anderen Gitterpunkte. Ist $s>-\frac{1}{2}$, so erreicht das IT irgendwann einmal jeden auch noch so weit vom Ursprung entfernten Punkt des Gitters mit Wahrscheinlichkeit 1. (49b) besagt: Ist $s=\frac{1}{2}$, wandert das IT also dauernd in einer Richtung, so kehrt es nie mehr zum Ursprung zurück. Ist $s\neq\frac{1}{2}$, so kehrt das IT mit Wahrscheinlichkeit 1 irgendwann einmal zum Ausgangspunkt seiner Wanderung zurück. Für $s=0$ gehen (49a, b) in die wohlbekannten Ergebnisse für den gewöhnlichen Irrflug-Prozeß über (s. [2], S. 205, [3], S. 297).

e) Bestimmung der mittleren Anzahl von Schritten, welche das IT braucht, um einen vorgegebenen Gitterpunkt an vom Ursprung aus zu erreichen. Diese mittlere Anzahl M ist für die Anfangsbedingungen (11) offenbar gegeben durch

$$M\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\,n\right)=\sum_{N=1}^{\infty}N\,\pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ N\end{matrix}\right)=\frac{\partial}{\partial z}\,\Pi\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ z\end{matrix}\right)\bigg|_{z=1}\ldots n=0,\pm 1,\pm 12,\ldots. \tag{50}$$

Aus (48) folgt

$$M\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\,n\right)=\begin{cases}\infty\ \ldots\ n=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ldots s\neq-\frac{1}{2}\,,\\ 2\ \ \ldots\ n=0,\ s=-\frac{1}{2}\,,\\ \infty\ \ldots\ n\neq 0,\ s=-\frac{1}{2}\,.\end{cases}$$

Ist $s\neq-\frac{1}{2}$, so braucht das IT also im statistischen Mittel beim Irrflug-Prozeß 2. Stufe genauso wie beim gewöhnlichen Irrflug-Prozeß unendlich viele Schritte, um einen vorgegebenen Punkt im Gitter zu erreichen oder um zum Ursprung zurückzukehren. Die 2. Markoff-Stufe erzwingt zumindest für die Anfangsbedingungen (11) nicht die Endlichkeit dieses Mittelwertes.

f) Bestimmung der mittleren Anzahl $S\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\,N\right)$ von lauter *verschiedenen* Gitterpunkten, welche das IT, ausgehend vom Ursprung, mit der Anfangsverteilung (11) innerhalb einer vorgegebenen Anzahl $N\geq 1$ von Schritten besucht. Wir bezeichnen mit

$$\varrho\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ N\end{matrix}\right)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das IT den Gitterpunkt an innerhalb des Zeitintervalls $(0, N)$ mindestens einmal besucht, wenn es zum Zeitpunkt 0 seine Wanderung im Ursprung beginnt. Nun gilt

$$S\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\,N\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\varrho\left(\begin{matrix}0\\ 0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}n\\ N\end{matrix}\right). \tag{51}$$

Ferner läßt sich mit Hilfe der in (42) bereits verwendeten „Bahnwahrscheinlichkeiten“ die Beziehung

$$\varrho\left(\begin{array}{c|c}0 & n\\ 0 & N\end{array}\right)=\sum_{j=1}^{N}\pi\left(\begin{array}{c|c}0 & n\\ 0 & j\end{array}\right)\qquad N\geq 1 \tag{52}$$

beweisen. Dieser Zusammenhang von $\varrho(\,|\,)$ und $\pi(\,|\,)$ gilt für Irrflug-Prozesse der 2. Stufe und der 1. Stufe in gleicher Weise (vgl. [2], S. 211). Wir wollen hier nicht die Größe $S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)$ selbst berechnen, sondern nur ihr asymptotisches Verhalten für $N\to\infty$ untersuchen. Dazu führen wir die Zuwachsraten

$$\begin{aligned}\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)&=S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)-S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N-1\right)\qquad N\geq 1\,,\\ \Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,0\right)&=S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,0\right)=0\end{aligned} \tag{53}$$

ein. Nach (51), (52) gilt

$$\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\pi\left(\begin{array}{c|c}0 & n\\ 0 & N\end{array}\right)\qquad\ldots\ N\geq 0\,. \tag{54}$$

Die erzeugende Funktion dieser Zuwachsraten

$$\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,z\right)=\sum_{N=0}^{\infty}\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)z^N \tag{55}$$

ist nach (46), (48), (54) bestimmt durch

$$\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,z\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Pi\left(\begin{array}{c|c}0 & n\\ 0 & z\end{array}\right)=\frac{(1-bz)[1+((\frac{1}{2}-s)b-(\frac{1}{2}+s)a)z]}{1-(1+2s)bz+2sb^2z^2}+2\,\frac{1+[(\frac{1}{2}-s)a-(\frac{1}{2}+s)b]z}{2+(1+2s)(a-2b)z}\,\frac{b}{1-b}\,. \tag{56}$$

Aus dem Verhalten von $\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,z\right)$ für $z\to 1$ kann nun mit Hilfe des in Abschnitt a) zitierten Tauberschen Satzes das asymptotische Verhalten von $S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)$ für $N\to\infty$ bestimmt werden:

V_1: $\quad\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,e^{-y}\right)=\sum_{N=0}^{\infty}\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)e^{-Ny}\quad\ldots$ existiert nach (55) für alle $y>0$

V_2: $\quad\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)>0\qquad\ldots\ N=1,2,3,\ldots$

V_3: $\quad$Für $y\to 0$ divergiere $\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,e^{-y}\right)\to y^{-\varrho}L(y)$ mit $\varrho>0$ $\qquad\lim\limits_{y\to 0}L(y)=\text{const}$,

A: $\quad$Für $N\to\infty$ gilt $S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)=\sum_{N_1=0}^{N}\Delta S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N_1\right)=N^{\varrho}L\left(\frac{1}{N}\right)/\Gamma(\varrho+1)\,.$

Aus (56) folgt

$$\varrho=\tfrac{1}{2}\,,\quad L(y)=2\sqrt{\frac{1+2s}{1-2s}}=\text{const}\,.$$

Daher gilt für $N\to\infty$

$$S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)=2\left(\frac{2(1+2s)}{\pi(1-2s)}\right)^{1/2}\sqrt{N}+P(1)\,. \tag{57}$$

Für den Irrflug-Prozeß 1. Stufe folgt daraus

$$S\left(\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\,\middle|\,N\right)\cong 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{N}\,. \tag{57a}$$

(vgl. [2], S. 212, Formel 1). Die Korrelation der einzelnen Schritte des IT, bedingt also gemäß (57) je nachdem, ob $s > 0$ oder $s < 0$ ist, ein gegenüber (57a) rascheres bzw. langsameres Anwachsen der Anzahl der verschiedenen im Laufe der Zeit vom IT besuchten Gitterplätze.

g) Berechnung der mittleren Anzahl $G \geq 0$ von Schritten, die das IT bei seiner Wanderung hintereinander in ein und derselben Richtung entweder nach links oder nach rechts ausführt. Die Größe G läßt sich wegen (4) und (6) mit Hilfe der Bahnwahrscheinlichkeiten des Prozesses leicht darstellen:

$$G = \sum_{j=-1}^{1} p\begin{pmatrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\nu=2}^{\infty} \nu \left[p\left(\begin{matrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1, & 2 \ldots \nu \\ 1 & 2 \ldots \nu \end{matrix}\right) + p\left(\begin{matrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} -1 & -2 \ldots -\nu \\ 1 & 2 \ldots \quad \nu \end{matrix}\right)\right]. \tag{58}$$

Mit (5), (7) ($r = 0$) folgt

$$G = 2 \sum_{j=-1}^{1} p\begin{pmatrix} j & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sum_{\nu=2}^{\infty} \nu \left(\tfrac{1}{2} + s\right)^{\nu-1}$$

bzw. bei Verwendung der Anfangsverteilung (11)

$$G = -1 + \frac{4}{(1-2s)^2}\,. \tag{59}$$

Hat das IT die Neigung, seine einmal eingeschlagene Richtung beizubehalten, ist also $s = \frac{1}{2} - \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$, so divergiert $G \sim \varepsilon^{-2}$. Neigt das IT zum Oszillieren, ist also $s = -\frac{1}{2} + \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$, so ist $G \sim 2\varepsilon$. Für den Irrflug-Prozeß ohne Korrelation ($s = 0$) ist $G = 3$. In analoger Weise läßt sich die mittlere Anzahl $\tilde{G} \geq 0$ von alternierenden Schritten berechnen, die das IT bei seiner Wanderung hintereinander ausführt. Wegen (4) und (6) gilt

$$\tilde{G} = \sum_{j=-1}^{1} p\begin{pmatrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \sum_{r=2}^{\infty} \nu \left[p\left(\begin{matrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 & -1 \ldots \pm 1 \\ 1 & 2 \ldots \quad \nu \end{matrix}\right) + p\left(\begin{matrix} j & 0 \\ -1 & 0 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} -1 & 1 \ldots \pm 1 \\ 1 & 2 \ldots \quad \nu \end{matrix}\right)\right]. \tag{60}$$

Mit (5), (7), (11) ergibt sich

$$\tilde{G} = -1 + 4/(1+2s)^2\,. \tag{61}$$

Neigt das IT zum Oszillieren, ist also $s = -\frac{1}{2} + \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$, so divergiert $\tilde{G} \sim \varepsilon^{-2}$. Ist das IT sehr träge, ist also $s = \frac{1}{2} - \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$, so ist $\tilde{G} = 2\varepsilon$. Für den Irrflug-Prozeß ohne Korrelation ($s = 0$) ist $\tilde{G} = 3$.

B. Zwei einfache Beispiele für eindimensionale Irrflug-Prozesse 2. Markoff-Stufe

1) *Phänomenologisch statistische Theorie der Länge von speziellen Polymeren-Ketten*

Wir betrachten eine aus lauter gleichen Molekülen bestehende Kette, an deren einem Ende sich statistisch im Laufe der Zeit weitere Moleküle anlagern mögen. Je drei in der Kette aufeinander folgende Moleküle bilden einen für die Kette charakteristischen Winkel α (oder $\pi + \alpha$). Ein neu zur Kette hinzukommendes Molekül hat also im allgemeinen die Möglichkeit, relativ zu den drei letzten Kettenmolekülen eine Zis- oder eine Transstellung einzunehmen. Im 1. Fall können die 3 letzten Moleküle der Kette zusammen mit dem neu hinzukommenden als Ecken eines konvexen Polygons, im 2. Fall als Ecken einer Meanderkurve aufgefaßt werden. Beispiele für so polymerisierende Stoffe sind in [20] angegeben.

Wir nehmen an, die Polymerisation erfolgt bei der Temperatur T. *Die Energiedifferenz* zwischen einer Zis- und Transstellung des letzten Kettengliedes sei $E_c - E_t = \varepsilon$.

Wie groß ist die zu erwartende mittlere Länge L der Molekülkette? Wir können diese Frage hier nicht exakt beantworten. Dazu müßte man eine Theorie der Markoff-Ketten unbeschränkter Ordnung entwickeln, da es sich hier um einen sich nicht kreuzenden Irrflug-Prozeß (selfavoiding walk) handelt[21].

[20] P. J. Flory, Principles of Polymer Chemistry, Cornell, New York 1953.

[21] [4a] S. 402ff., C. Domb, J. Chem. Phys. **38**, 2957 [1963]. Proc. Phys. Soc. London **85**, 625 [1965]. — H. K. Frensdorff u. R. Pariser, J. Chem. Phys. **39**, 2303 [1963]. — E. W. Montroll, J. Chem. Phys. **18**, 734 [1950]. — J. Mazur, J. Chem. Phys. **41**, 2256 [1964].

Man kann aber mit Hilfe der Ergebnisse von Abschnitt A) einige Aussagen über L machen. Stellen wir zunächst die Korrespondenz zwischen dem Wachstumsprozeß der Molekülkette und dem Irrflug-Prozeß 2. Stufe her:

Einem Sprung des IT nach links oder rechts entspricht die Anlagerung eines Moleküls in Zis- bzw. Transstellung relativ zu seinen 3 vorhergehenden Nachbarn. Der Zeitparameter N des Irrflug-Prozesses spielt die Rolle der Platznummer der Moleküle in der Kette. (Wir nehmen an, die Länge der Kette könne nur zu-, aber nicht abnehmen.) Kommen Zis- und Transstellungen in der Kette entsprechend ihrer thermodynamischen Gleichgewichtsverteilung vor, so besteht nach (7) ($r = 0$) folgender Zusammenhang zwischen dem Korrelationsparameter s, ε und T:

$$(1 + 2s)/(1 - 2s) = e^{-\varepsilon/kT}\,.$$

Umgekehrt gilt

$$s = (e^{-\varepsilon/kT} - 1)/2\,(e^{-\varepsilon/kT} + 1)\,.$$

Für $\varepsilon \to 0$ gilt $s \to 0$. Zis- und Transstellungen kommen gleich häufig vor. Für $\varepsilon \to \pm\infty$ gilt $s \mp 1/2$: In der Kette überwiegen die Zis- bzw. die Transstellungen. Für die mittlere Anzahl G bzw. $\tilde{G}$ der in der Kette aufeinander folgenden Zis- bzw. Transstellungen gilt nach (59), (61):

$$G = e^{-\varepsilon/kT}\,(2 + e^{-\varepsilon/kT}) \quad \ldots (\text{Zis})\,,$$
$$\tilde{G} = e^{\varepsilon/kT}\,(2 + e^{\varepsilon/kT}) \quad \ldots (\text{Trans})\,.$$

Ist die mittlere Anzahl der in der Kette hintereinander auftretenden Zisstellungen G viel größer als die Anzahl

$$\mu = 2\pi/(\pi - \alpha) \geq 3$$

von Zisstellungen, die hintereinander angeordnet ein regelmäßiges Vieleck mit Innenwinkel α ergeben, so wird sich eine Kette praktisch nicht ausbilden können, da sie sich nach kurzer Zeit „in den Schwanz beißt". Große mittlere Kettenlängen sind nur zu erwarten, wenn $G \ll \mu$, d.h.

$$e^{-\varepsilon/kT} \ll \pi/(\pi - \alpha)$$

ist. Bei fest vorgegebenen Parametern ε und α folgt aus dieser Ungleichung: die Ausbildung langer Molekülketten wird durch tiefe Temperaturen begünstigt, durch hohe Temperaturen erschwert. Mit Hilfe des Prinzips der vorurteilsfreien Schätzung [22] lassen sich leicht folgende Abschätzungen für die mittlere Kettenlänge L begründen:

$$G < \mu:\ \tilde{G} < L < \tilde{G}G + \tfrac{1}{2}G(G+1)\,,$$
$$G \sim \mu:\ \tilde{G} < L < \mu\tilde{G}\,.$$

Diese Abschätzungen lassen sich für eine Reihe von organischen Hochpolymeren qualitativ bestätigen [20].

7) *Phänomenologische Theorie des statistischen Aufbaues einer linearen Spin-Kette*

Wir betrachten eine lineare Atomkette. Jedes Atom besitze ein Leuchtelektron. Die Bindung zweier Nachbaratome erfolge durch die Spin-Wechselwirkung der Leuchtelektronen [23]. An ein Ende der Kette mögen sich statistisch im Laufe der Zeit weitere Atome anlagern. Der Spin des sich anlagernden Elektrons kann parallel oder antiparallel zum Spin des letzten Leuchtelektrons in der Kette sein. Wir fragen nach der mittleren Größe der ferro- bzw. antiferromagnetischen Bezirke in der Kette, d.h. nach der mittleren Größe der Gebiete mit lauter parallelen bzw. lauter antiparallelen Spins.

Diese Frage läßt sich leicht beantworten, wenn man den Wachstumsprozeß der Atomkette als Irrflug-Prozeß 2. Ordnung interpretiert: Einem Sprung des IT nach links bzw. rechts entspricht die Anlagerung eines Atoms, dessen Spin nach „oben„ bzw. nach „unten" zeigt. Der Zeitparameter N des Irrflug-Prozesses spielt nun die Rolle der Platznummer der Moleküle in der Kette. (Wir nehmen an, die Länge der Kette könne nur zu-, aber nicht abnehmen.) Die Parameter r bzw. s der Übergangswahrscheinlichkeiten des Irrflug-Prozesses hängen physikalisch mit einem auf die Kette wirkenden äußeren Magnetfeld bzw. mit der Bindungsenergie der Atome zusammen. Kommen parallele bzw. antiparallele Spinpaare in der Kette entsprechend ihrer thermodynamischen Gleichgewichts-Verteilung (T) vor, und ist ε die Differenz zwischen den zur Bindung in Antiparallel- bzw. Parallelstellung erforderlichen Energien: $\varepsilon = E_a - E_p$, so besteht nach (7) ($r = 0$) folgender Zusammenhang zwischen s, ε und T:

$$\frac{1 + 2s}{1 - 2s} = e^{\varepsilon/kT} \quad \text{bzw.} \quad s = \frac{e^{\varepsilon/kT} - 1}{2\,(e^{\varepsilon/kT} + 1)}\,.$$

[22] E. T. Jaynes, Phys. Rev. **106**, 620 [1957], **108**, 171 [1957].

[23] Vgl. A. Sommerfeld u. H. P. Bethe, Elektronentheorie der Metalle. Hd. d. Physik (Geiger u. Scheel), Bd. XXIV, S. 333 (S. 604), Springer-Verlag, Berlin 1933.

Aus diesen Beziehungen folgt:

Für $\varepsilon > 0$ bzw. $\varepsilon < 0$ neigt die Kette mehr zur Bildung ferro- bzw. antiferromagnetischer Bezirke. Die Ausbildung dieser Bezirke wird durch tiefe Temperaturen begünstigt. Die mittlere Größe G bzw. $\tilde{G}$ der ferro- bzw. antiferromagnetischen Bereiche ist nach (59), (61)

$$G = e^{\varepsilon/kT}(2 + e^{\varepsilon/kT}),$$
$$\tilde{G} = e^{-\varepsilon/kT}(2 + e^{-\varepsilon/kT}).$$

Für $(\varepsilon/k\,T) \gg 1$ wächst also die mittlere Länge der Weisschen Bezirke wie $\exp(2\,\varepsilon/k\,T)$ an. Aus (29) folgt, daß das gesamte magnetische Moment der Kette für $N \to \infty$ durch eine Gauß-Verteilung mit verschwindendem Mittelwert und der Streuung $\sigma^2 = \exp(\varepsilon/k\,T)$ beschrieben werden kann.

Verf. dankt seinem Institutskollegen, Herrn Dr. D. v. Borries, und Herrn Dozent Dr. J. Walter für Diskussion.

Functional Quantum Theory of Free Relativistic Scalar Fields

W. Bauhoff

Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen

(Z. Naturforsch. **26 a**, 1553—1558 [1971]; received 12 June 1971)

Dynamics of quantum field theory can be formulated by functional equations. Starting with the Schwinger functionals of the free scalar field, functional equations and corresponding many particle functionals are derived. To establish a complete functional quantum theory, a scalar product in functional space has to be defined as an isometric mapping of physical Hilbert space into the functional space.

The operator equations of quantum field theory can be replaced by functional equations of the corresponding Schwinger functionals [1–3]. Using this representation of quantum dynamics it is conclusive to develop a functional quantum theory with appropriate functional spaces where the complete physical information can be obtained by operations in functional spaces only [4, 5]. The most simple physical systems are the free fields. In this case the functional equations can be solved exactly as in ordinary quantum field theory and the corresponding functional space can be constructed explicitly. For the free Dirac field this has been done in [6]. In this paper the same problem is discussed for the free Klein-Gordon-field. The functional equation is solved and the space of the Schwinger functionals is equipped with a scalar product in order to reproduce the orthonormality relations of ordinary quantum field theory.

1. Fundamentals

The free scalar field is described by the Klein-Gordon-equation:

$$(\Box + m^2)\,\varphi(x) = 0\,. \tag{1.1}$$

As discussed in Appendix I, without loss of generality a neutral field can be assumed, i. e. $\varphi(x)$ is a Hermitean operator. For the quantized field $\varphi(x)$ and its derivatives $\partial^\mu \varphi(x)$ we have the following commutation relations where n denotes a timelike four vector with $n^2 = 1$ and $n^0 > 0$

$$\delta\big(n_\lambda(x^\lambda - y^\lambda)\big)[\varphi(x), \varphi(y)]_- = 0\,, \tag{1.2}$$
$$\delta\big(n_\lambda(x^\lambda - y^\lambda)\big)n_\mu[\partial^\mu \varphi(x), \varphi(y)]_- = \delta(x-y)\,.$$

Equation (1.2) are the relativistic invariant generalisations of the well known equal time commutators to the case of spacelike hypersurfaces. A derivation of (1.2) is given in Appendix I.

Reprints request to Prof. Dr. H. Stumpf, Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen, *D-7400 Tübingen*, Wächterstraße 67.

[1] J. Schwinger, Proc. Nat. Acad. Sci. **37**, 452 [1951].

[2] D. Lurié, Particles and Fields, Intersci. Publ., New York 1968.

[3] J. Rzewuski, Field Theory, Vol. 2, Iliffe Books, London 1969.

[4] H. Stumpf, Z. Naturforsch. **24 a**, 188 [1969].

[5] H. Stumpf, Funktionale Quantentheorie, Heisenberg-Festschrift, Verlag Vieweg, Braunschweig 1971.

[6] H. Stumpf, Z. Naturforsch. **25 a**, 575 [1970].