



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

**Spindepolarisation durch Diffusion
auf Gittern**

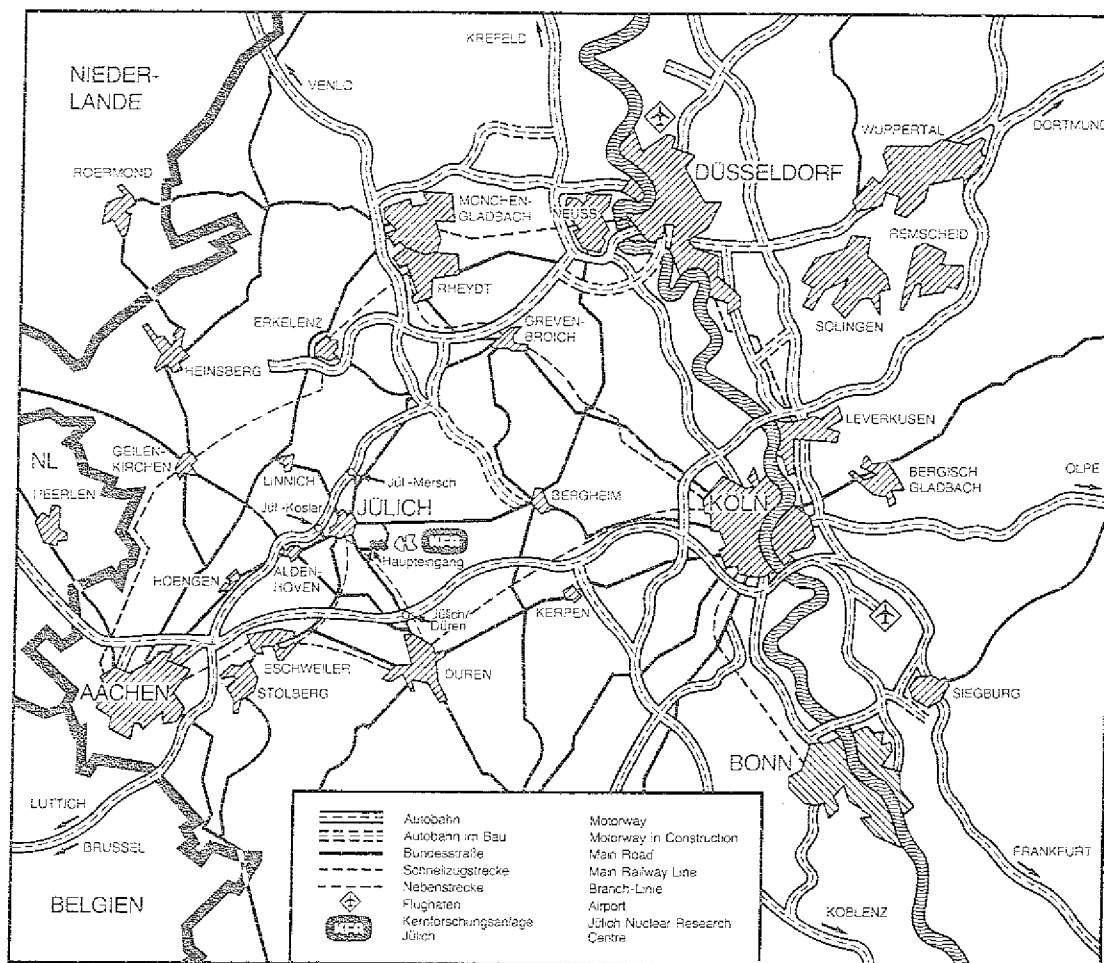
von

Rainer Czech

Jül - 2190

März 1988

ISSN 0366-0885



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 2190

Institut für Festkörperforschung Jülich - 2190

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d



THE UNIVERSITY OF CHICAGO

PH.D. THESIS

IN THE FIELD OF



Spindepolarisation durch Diffusion auf Gittern

von

Rainer Czech

D 38 (Diss. Uni. Köln)

Summary

The decay of the polarization $P(t)$ of an initially polarized ensemble of spins due to random walk processes is investigated. In contrast to previous work, where the stochastic process acting on the individual rotating spins is assumed to be Gaussian, in this work the stochastic processes resulting from actual random walks on d -dimensional lattices are considered. Random local rotation frequencies are assigned to the vertices of the lattices; the frequencies are typically chosen from a Gaussian probability distribution with zero mean and width σ . For simplicity mainly the case of *transverse* spin rotation is studied.

An exponential polarization decay $\propto \exp(-\lambda t)$ is found for large times t in all dimensions d when the spins perform a simple random walk on the lattice. In contrast, the Gaussian-process theory predicts a faster time decay in $d=1$ and 2. The dependence of the decay constant λ on σ and τ , the average waiting time of the random walk, is determined by the dimensionality d . In $d=1$ the effective exponent β in the expression $\lambda = \text{const} \cdot \sigma^\beta \tau^{\beta-1}$ is given by $\beta = \frac{4}{3}$ in the limit of fast frequency modulation $\sigma\tau \ll 1$. In $d=2$, an effective-medium theory for the decay constant λ yields an exponent $\beta = 2$ in the limit $\sigma\tau \rightarrow 0$, but with logarithmic corrections. This result is in qualitative agreement with numerical simulations. In $d \geq 3$ the exponential polarization decay can be deduced directly from the transient nature of the walks. The Gaussian theory is appropriate, at least for small $\sigma\tau$: $\lambda = a_0 \sigma^2 \tau$, where a_0 depends on the structure of the lattice. This result is corroborated by the results obtained in the effective-medium theory and by simulations.

Other distributions of the rotation frequencies are also considered in $d=1$. It is found that the asymptotic polarization decay depends strongly on the particular form of the distribution. E.g., a "stretched exponential" decay proportional to $\exp[-\text{const } n^{1/3} \ln^{2/3}(n)]$ is found for a symmetric exponential distribution. In the case of small $\sigma\tau$, there is a certain range of times t for which each distribution yields exponential decay similar to that found in the case of the Gaussian distribution. With decreasing $\sigma\tau$, the actual (non-exponential) decay is shifted to extremely small values of P .

Depolarization effects due to the interaction of an immobile spin with a single diffusing "impurity" are also investigated. The "impurity" is characterized by a random rotation-frequency vector $\underline{\omega}$ with distribution $g(\underline{\omega})$, i.e., the discussion is not restricted

to the case of purely transverse spin rotation. The problem of calculating the average polarization $P(t)$ is solved for two different cases: i) the rotation frequency of an impurity is constant in time, and ii) with each new visit of the impurity at the site of the spin the latter experiences a new frequency taken independently from $g(\omega)$ (strong-collision model). As a particular example, a three-dimensional Gaussian distribution g is considered (i.e., the Kubo-Toyabe model). The results allow for the explicit calculation of the zero-field, resp. longitudinal, depolarization for each random walk process for which the probability of return to the origin is known.

Finally, the model of transverse spin depolarization is discussed for the case that the spins are tracer particles in a noninteracting lattice gas of diffusing particles of concentration c . Simulations of the average number $S(t)$ of distinct sites visited by the tracer particle and of the depolarization $P(t)$ have been performed in $d=1, 2, 3$. In $d=1$, where the tracer diffusion is anomalous ($\Delta r^2 \propto t^{1/2}$), the distribution $W(s, t)$ of the number of sites visited is also investigated. A scaling ansatz for $W(s, t)$ yields an expression for $P(t)$, which yields a good description of the observed dependence of the polarization decay on σ and c . In contrast to $d=2$ and 3 , the decay is no longer exponential in $d=1$; we find $P(t) \propto \exp(-\text{const} \cdot t^\alpha)$, with an exponent α between 1.3 and 1.4. In $d=2$ and $d=3$, the simulations show that for all values of σ and τ the behavior of the decay constant λ can be described by a simple scaling law involving the tracer-diffusion correlation factor $f(c)$. In contrast, $S(t)$ does not scale with $f(c)$ in both $d=2$ and $d=3$. This behavior can be explained in terms of a simple correlated random walk model, which also yields a good quantitative description of the results of the simulations of $S(t)$.

This work was motivated by the muon spin rotation (μ SR) method, where the polarization decay $P(t)$ is directly observed. The results also apply to the free induction decay in NMR. The first portion of this work would be relevant to diffusion in low-dimensional systems. However, the characteristic effects we obtained appear at values of $P(t)$ that are at present unmeasurable. The second portion of this thesis may find application, e.g., for the description of depolarization of muons attached to polymer chains. The third portion is related to μ SR-experiments in metal hydrides. Here, the interesting effects are expected on linear chains, which are difficult to realize experimentally.

INHALTSVERZEICHNIS

I. Einleitung	1
II. Depolarisation der transversalen Spinrotation durch Random Walk auf Gittern	12
II.1. Definition und grundlegende Eigenschaften des Modells	13
II.2. Spindepolarisation in $d = 1$ (gaußsche Frequenzverteilung)	21
II.2.1. Kumulantenentwicklung für $P(t)$	21
II.2.2. Asymptotisches Verhalten der Depolarisation	25
II.2.3. Vergleich mit numerischen Simulationen	28
II.2.4. Zusammenhang zwischen kontinuierlicher und diskreter Depolarisation	31
II.3. Verschiedene Frequenzverteilungen	33
II.3.1. Symmetrische Exponentialverteilung	34
II.3.2. Rechteck- und dichotomische Frequenzverteilung	40
II.3.3. Vergleich mit numerischen Simulationen	42
II.4. Effektive-Medium-Theorie für die Zerfallskonstante im kontinuierlichen Modell	46
II.5. Depolarisation des diskreten Random Walks in höheren Dimensionen	51
III. Depolarisation durch Random Walk von bzw. zu Störstellen	55
III.1. Depolarisation im statischen Fall	57
III.2. Modell mit zeitlich konstantem Störstellenfeld	59
III.2.1. Null-Feld-Depolarisation	62
III.2.2. Depolarisation durch Random Walk auf Halbstrahl	65
III.3. Strong-Collision-Modell	69
III.3.1. Longitudinale und Null-Feld-Depolarisation	75
III.3.2. Depolarisation durch Random Walk auf Halbstrahl	76

IV. Depolarisation durch Diffusion im Gittergas	80
IV.1. Modell des nichtwechselwirkenden Gittergases	84
IV.1.1. Tracerdiffusion in höheren Dimensionen	85
IV.1.2. Anomale Tracerdiffusion in einer Dimension	87
IV.2. Eindimensionales Gittergas	88
IV.2.1. Mittlerer Span und Spanverteilung	89
1. Ein einfaches Modell mit anomaler Teilchendiffusion: Random Walk auf einem Random Walk	93
2. Resultate numerischer Simulationen	98
IV.2.2. Depolarisation	106
IV.3. Gittergas in höheren Dimensionen	115
IV.3.1. Mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze	116
IV.3.2. Resultate für die Depolarisation	122
V. Zusammenfassung	129

Anhänge:

A. Depolarisation durch Störstellen: Frequenzmittelung	133
B. Numerische Simulationen (Gittergas)	137
B.1. Diffusion im Gittergas	137
B.2. Simulation der Spanverteilung ($d = 1$)	139
B.3. Simulation der Depolarisation	140
B.3.1. Streuspeicherverfahren (Hash Coding)	143

Literaturverzeichnis	152
-----------------------------	------------

I. Einleitung

In der Physik haben Experimente, die auf dem Prinzip der magnetischen Spinresonanz bzw. Spinrotation basieren, seit langem eine große Bedeutung erlangt, wobei nicht unerwähnt bleiben soll, daß sich derartige Methoden auch in anderen naturwissenschaftlichen Disziplinen, so insbesondere in der Chemie, aber auch in der Biologie und Medizin, erfolgreich etabliert haben.

Der Beginn der systematischen Untersuchung von Spinresonanzphänomenen läßt sich auf die Mitte der vierziger Jahre dieses Jahrhunderts zurückdatieren: Im Jahr 1945 führte Zavoisky [1] zum ersten Mal ein magnetisches Resonanzexperiment an einem Festkörper durch (Elektronenspinresonanz (ESR) bei paramagnetischen Salzen); erste, unabhängig voneinander durchgeführte Messungen zur Kernspinresonanz (NMR) in Flüssigkeiten und Festkörpern wurden im Jahr darauf von zwei Forschergruppen (Purcell *et. al.* [2], Bloch *et. al.* [3]) veröffentlicht.

Das Interesse an diesen Experimenten ging schnell über ihre erste und offensichtlichste Anwendung, die Bestimmung der magnetischen Momente der jeweils untersuchten (Kern- bzw. elektronischen) Spins, hinaus. Der Grund ist — und damit wird gleichzeitig das Grundprinzip aller Spinresonanz- bzw. Spinrotationsexperimente deutlich —, daß über die magnetischen Wechselwirkungen der Spins in einer Probe viele Erkenntnisse über physikalische und chemische Vorgänge in Materie gewonnen werden können, wenn man versteht, wie sich diese in charakteristischen Merkmalen der gemessenen Signale (z.B. Lage, Breite und Feinstruktur einer Resonanzlinie) äußern. Es würde an dieser Stelle zu weit führen, auf die Vielzahl an Fragestellungen einzugehen, mit denen sich in der Folgezeit Experimentatoren wie Theoretiker beschäftigt haben; einen gewissen Überblick bietet die einführende Literatur [4–6], auf die an dieser Stelle verwiesen werden soll.

Neben NMR und ESR soll auch die Myonenspinrotation (μ SR) erwähnt werden, die — erstmals nachgewiesen 1957 [7] — seit Anfang der siebziger Jahre als festkörperphysikalische Meßmethode Anwendung gefunden hat (siehe z.B. Ref. [8]). Bei Myonenspinrotationsexperimenten werden spinpolarisierte Myonen (μ^+) in eine Probe implantiert; gemessen wird die Zahl der Zerfallspositronen der instabilen Myonen ($\mu^+ \rightarrow e^+ + \bar{\nu}_\mu + \nu_e$, mittlere Lebensdauer $\tau_\mu \simeq 2 \cdot 10^{-6}$ s), die zu bestimmten Zeiten in eine bestimmte Richtung emittiert werden. Da die räumliche Verteilung der Zer-

fallspositronen anisotrop hinsichtlich der Spinrichtung des Myons ist, lassen sich somit Rückschlüsse auf die zeitliche Dynamik der μ^+ -Spins ziehen. Hervorzuheben ist, daß im Vergleich zur NMR oder ESR, wo oftmals Wechselwirkungen zwischen den betrachteten Spins eine besondere Rolle spielen, bei der μ SR die Wechselwirkungen einzelner μ^+ -Spins in der Wirtssubstanz beobachtet werden; jedes Myon agiert sozusagen als lokale Sonde. Auch die μ SR besitzt heute einen weiten Anwendungsbereich; zu empfehlen ist neben einem Übersichtsartikel [8] von Schenck insbesondere ein Buch des gleichen Autors, das neben einer Darstellung der grundsätzlichen Konzepte dieser Methode auch einen aktuellen Überblick gibt [9]. Zu nennen ist schließlich ein Review-Artikel von Cox, der im vergangenen Jahr erschienen ist [10].

Von besonderer Bedeutung im Zusammenhang mit Spinresonanz- bzw. Spinrotationsuntersuchungen ist das Studium von inneren Bewegungen in Materie. Die Frage, wie sich z.B. Diffusionsprozesse der Spinteilchen — oder anderer Teilchen, mit denen die Spins wechselwirken — in den gemessenen Signalen bemerkbar machen, ist dabei in zweierlei Hinsicht von Interesse: Zum einen hinsichtlich der richtigen Interpretation von experimentellen Ergebnissen, wenn andere physikalische Fragestellungen im Vordergrund stehen, zum anderen aber insbesondere deshalb, weil Spinrotationsexperimente umgekehrt in vielen Fällen ein geeignetes Mittel zum Studium von Diffusionsvorgängen selbst sein können. Zwei Beispiele, die stellvertretend genannt sein sollen:

- Spin-Echo-Messungen an Proben, die sich in räumlich inhomogenen Magnetfeldern befinden (siehe die klassischen Arbeiten von Hahn [11] und Carr [12]), erlauben in vielen Fällen sehr genaue Bestimmungen von Diffusionskoeffizienten [5].
- Mit μ SR-Experimenten läßt sich die Zwischengitterdiffusion positiver Myonen in Metallen untersuchen. Da man das Myon in gewisser Hinsicht als leichtes Wasserstoff-Isotop ansehen kann, sind solche Untersuchungen (auf die an späterer Stelle noch einmal Bezug genommen werden wird, vgl. Kapitel IV) auch im Zusammenhang mit dem Themenkomplex "Wasserstoff in Metallen" (siehe z.B. [13]) von Bedeutung, der nur als eins von vielen Beispielen für das aktuelle Interesse an Diffusionsprozessen genannt sein soll.

Die experimentelle wie auch theoretische Beschäftigung mit dieser Fragestellung hat ihren Ursprung in den späten vierziger Jahren, als erstmals beobachtet wurde, daß

die Breite von NMR-Absorptionslinien mit zunehmender Beweglichkeit der Kerne unter Umständen drastisch abnimmt (siehe dazu die klassische Arbeit von Bloembergen, Purcell und Pound von 1948 [14]). Während das Problem der *statischen* Linienbreite (d.h. der Verbreiterung einer im Idealfall unendlichen scharfen Resonanzlinie), die ihren Ursprung in den magnetischen Wechselwirkungen der (ortsfesten) Spins untereinander und mit dem Gitter hat, zumindest grundsätzlich verstanden und — wie z.B. von van Vleck im Fall von magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkungen [15] — zum Teil auch recht detailliert behandelt worden war, mußten nun auch zusätzlich die durch die Bewegungen der Spins bedingten zeitlichen Fluktuationen der magnetischen Wechselwirkungen Berücksichtigung finden. Der Effekt der Linienverengung („*motional narrowing*“) ließ sich anschaulich so erklären, daß diese Fluktuationen, wenn sie hinreichend schnell sind (s.u.), zu einer zeitlichen Ausmittelung der linienverbreiternden Mechanismen führen; Bloembergen *et. al.* erhielten so eine Abschätzung für die Breite der verengten Linie [14].

Zu erwähnen ist, daß Linienverengung nicht *nur* durch Bewegungen der Spinteilchen hervorgerufen werden kann, sondern vielmehr immer dann zu erwarten ist, wenn Wechselwirkungen auftreten, die zu Fluktuationen der im engeren Sinn für die Breite einer Resonanzlinie verantwortlichen Wechselwirkungen führen. Hervorzuheben ist hier die Austauschverengung („*exchange narrowing*“) als Folge von Austauschwechselwirkungen zwischen (insbesondere elektronischen) Spins (tatsächlich wurde diese, obwohl komplexer, zuerst diskutiert [15, 16]).

Diese grundsätzlichen Ideen der Linienverengung wurden in den fünfziger Jahren von verschiedenen Autoren (Anderson, Weiss, Kubo und Tomita [17–20]) diskutiert, die die sog. „Stochastische Theorie der Linienform“ entwickelten, bei der nicht die mikroskopischen Details der Wechselwirkungen, sondern der stochastische Aspekt der Fluktuationen im Vordergrund stehen. Die Vorgehensweise läßt sich so charakterisieren, daß anstelle des kollektiven Gesamtsystems mit dem dazugehörigen Energiespektrum ein Ensemble von voneinander unabhängigen Spins mit zeitlich fluktuierenden Larmorfrequenzen $\omega(t)$ betrachtet wird, mit denen in einem Resonanzexperiment Strahlung absorbiert oder emittiert werden kann. Im klassischen Bild der Spinpräzession entspricht dies formal der Vorstellung, daß die magnetischen Wechselwirkungen eines Spins durch ein effektives lokales Magnetfeld modelliert werden, in dem dieser präzessiert.

Zentrale Größe in der stochastischen Theorie der Linienform ist die Autokorrelationsfunktion $\phi(t)$ des "resonanten" magnetischen Moments, deren Fouriertransformierte das Absorptionsspektrum $I(\omega)$ ist. $\phi(t)$ und damit auch die *Linienform* $I(\omega)$ lassen sich berechnen, wenn vereinfachende Annahmen hinsichtlich der stochastischen Eigenschaften der Frequenzfluktuationen $\omega(t)$ gemacht werden.

Die Phänomenologie dieser Theorie läßt sich unmittelbar übertragen auf Experimente, wo nicht die frequenzabhängige Resonanzabsorption $I(\omega)$ eines Spinsystems gemessen wird, sondern wo das zeitliche Verhalten der Magnetisierung bzw. der Polarisation der Spins der Messung direkt zugänglich ist:

- Bei den sog. *Transienten*-Methoden (NMR oder ESR) wird der zeitliche Zerfall einer anfänglich nicht im Gleichgewicht befindlichen Magnetisierung gemessen. Ein typisches Experiment besteht in der Messung des sog. "Free-Induction-Decay" (FID) nach einem 90° -Puls, mit dem die zuvor in einem externen Magnetfeld B_0 ausgerichteten Spins bzw. magnetischen Momente in die zu B_0 senkrechte Ebene geklappt werden. Der Zerfall der transversalen Magnetisierung wird als das von allen präzessierenden Spins in einer Spule induzierte Signal gemessen.
- Bei der bereits erwähnten Myonenspinrotation liefert die Detektion der Zerfallspositronen die *Depolarisation* $P(t)$, die den zeitlichen Zerfall der anfänglich vorhandenen Spin-Polarisation der Myonen beschreibt. Diese liegt im Fall der sog. *transversalen* μ SR in der zu einem externen Magnetfeld B_0 senkrechten Ebene.

Im Prinzip wird also in beiden Beispielen die gleiche Größe gemessen. Der Zusammenhang zur Spinresonanz ergibt sich daraus, daß sich bei vergleichbarer Geometrie — das heißt hier, daß die Resonanz mit einem zu B_0 senkrechten Wechselfeld $B_1 \cos(\omega t)$ "durchgefahren" wird — die Korrelationsfunktion ϕ auch als Zerfall einer — allerdings hypothetischen — transversalen Magnetisierung interpretieren läßt [5, 6]. Im folgenden soll die Diskussion im wesentlichen auf die der zeitabhängigen Depolarisation $P(t)$ beschränkt werden.

In dieser Arbeit werden verschiedene Modelle für die Spindepolarisation infolge von Diffusionsprozessen auf Gittern untersucht werden. Im Vordergrund wird dabei die Untersuchung der transversalen Spinrotation voneinander unabhängiger Spins stehen, d.h., es werden Spins betrachtet, die — vgl. die obigen Beispiele — in einem transversalen

magnetischen Feld rotieren, welches sich zusammensetzt aus einem externen Magnetfeld B_0 , entsprechend einer Rotationsfrequenz ω_0 , und dem momentanen lokalen Feld, in dem sich der Spin befindet, entsprechend einer Frequenz $\omega(t)$. Beschreibt man diese Rotation formal in der komplexen Ebene, wobei alle Spins anfänglich in x-Richtung (reelle Achse) polarisiert sind, ergibt sich die Depolarisation (im mit ω_0 mitrotierenden System) zu

$$P(t) = \left\langle \exp \left[-i \int_0^t dt' \omega(t') \right] \right\rangle. \quad (I.1)$$

Die spitzen Klammern bedeuten den Ensemble-Mittelwert über alle Spins; dieser kann gleichermaßen auch als Mittelwert über alle möglichen Frequenzmodulationen $\omega(t)$ angesehen werden, die die Fluktuationen der magnetischen Wechselwirkungen der einzelnen Spins modellieren. Es sei angemerkt, daß stets angenommen werden soll, daß diese keine systematischen Anteile enthalten, d.h., daß $\omega(t)$ im Mittel null ist.

In der stochastischen Theorie der Linienform ist $P(t)$ unter verschiedenen vereinfachenden Annahmen hinsichtlich der stochastischen Natur von $\omega(t)$ diskutiert worden. In der Theorie [17–20], die hier als “Standard-Theorie” bezeichnet werden soll, wird die Annahme gemacht, daß $\omega(t)$ ein stationärer gaußscher Prozeß mit Mittelwert null und Varianz σ ist — eine Annahme, die z.B. dann gerechtfertigt ist, wenn $\omega(t)$ das Resultat vieler (schwacher) unkorrelierter Störungen ist. Der Prozeß ist dann eindeutig durch seine zweite Kumulante $\langle \omega(t)\omega(0) \rangle$ charakterisiert, die den Zerfall von Frequenzkorrelationen beschreibt. Weiter wird angenommen, daß diese hinreichend schnell, d.h. mit einer endlichen Korrelationszeit τ_c , zerfallen. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn $\omega(t)$ gleichzeitig ein Markov-Prozeß ist, da dann nach einem Theorem von Doob (siehe z.B. [21]) Frequenzkorrelationen notwendigerweise exponentiell zerfallen müssen. In Abhängigkeit von den Parametern σ und τ_c liefert Gl. (I.1) zwei verschiedene Grenzfälle, die die grundsätzliche Phänomenologie der Linienverengung widerspiegeln:

1. *Langsame Frequenzfluktuationen*, $\sigma\tau_c \gg 1$:

Der Polarisationszerfall wird vom Verhalten bei Zeiten $t \ll \tau_c$ dominiert, d.h.

$$P(t) \approx \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma^2 t^2\right). \quad (I.2)$$

In diesem *statischen* Grenzfall spielen die Fluktuationen keine Rolle. Fouriertransformation liefert eine gaußförmige Resonanzabsorptionskurve $I(\omega)$ mit (statischer) Linienbreite σ .

2. Schnelle Frequenzfluktuationen, $\sigma\tau_c \ll 1$:

Der Polarisationszerfall wird vom Verhalten bei Zeiten $t \gg \tau_c$ dominiert:

$$P(t) \approx \exp(-\sigma^2\tau_c t). \quad (I.3)$$

Der langsamere Zerfall gegenüber dem statischen Fall verdeutlicht den Ausmittelungseffekt schneller Fluktuationen. Der exponentielle Polarisationszerfall entspricht einer Resonanzlinie $I(\omega)$ mit Lorentz-Profil und reduzierter Breite $\sigma^2\tau_c$.

Neben diesem Standard-Modell sind verschiedene andere Modelle für die stochastische Frequenzmodulation $\omega(t)$ untersucht worden [18–20, 22]. Als Beispiele für nicht-gaußsche Prozesse sind Modelle zu nennen, bei denen $\omega(t)$ durch instantane Übergänge zwischen zwei oder mehreren Frequenzen $\omega_1, \dots, \omega_r$ definiert wird, wobei diese Übergänge selbst durch einen Markov-Prozeß mit konstanten Übergangsraten beschrieben werden. Besonders hervorzuheben ist darüberhinaus das sog. "Strong-Collision"-Modell, bei dem in einem Poisson-Prozeß mit Sprungrate τ_c^{-1} ebenfalls instantane Übergänge erfolgen, wobei jedoch jede neue Frequenz statistisch unabhängig von den vorherigen einer (gaußschen) Verteilung entnommen wird [20]. Dieses Modell, dessen Lösung im Laplace-Raum exakt angegeben werden kann, liefert in den Grenzfällen langsamer bzw. schneller Frequenzmodulation ebenfalls das asymptotische Verhalten der Gleichungen (I.2) und (I.3); das intermediäre Verhalten ist zudem sehr ähnlich dem des Gauß-Markov-Modells für $\omega(t)$ [23]. Der Grund dafür ist darin zu sehen, daß auch in diesem Modell, das einem Random-Walk-Prozeß schon mehr ähnelt als ein gaußsches Modell, Frequenzkorrelationen sehr schnell, d.h. exponentiell, zerfallen.

Während die Resultate der Standard-Theorie vielfach in sehr befriedigender Weise zur Beschreibung experimenteller Ergebnisse herangezogen wurden, so z.B. insbesondere bei Linienverengung durch Bewegung in Gasen und Flüssigkeiten, so stellt sich dennoch die Frage, inwieweit diese Resultate Situationen richtig beschreiben können, wo die zeitlichen Frequenzmodulationen ihren Ursprung in Diffusions- bzw. Random-Walk-Prozessen auf Gittern haben. Die Untersuchung dieser Frage ist das zentrale Anliegen dieser Arbeit.

Ein einfaches Beispiel ist das eines Myons, das — infolge dipolarer Wechselwirkungen mit den Kernspins des Wirtsgitters — verschiedene Rotationsfrequenzen ω_L auf den interstitiellen Plätzen r des Gitters wahrnimmt. Führt das Myon einen Random Walk

auf dem interstitiellen Gitter aus, so ergibt sich eine Frequenzmodulation $\omega(t) = \omega_{\mathbf{r}(t)}$, wobei $\mathbf{r}(t)$ den momentanen Platz des Teilchens bezeichnet. Ein vergleichbares Modell läßt sich auch für paramagnetische Anregungen in elektronischen Spinsystemen aufstellen, die auf einem zugrundeliegenden Gitter wandern, wobei die $\omega_{\mathbf{r}}$ die verschiedenen Hyperfeinfelder repräsentieren, denen die Anregung auf den verschiedenen Plätzen ausgesetzt ist; Beispiele dafür sind sog. Triplet-Exzitonen in verschiedenen organischen Kristallen mit freien Radikalen [24].

Typisch für stochastische Frequenzmodulationen durch Random-Walk-Prozesse ist ein *langsamer* Zerfall von Frequenzkorrelationen durch Rücksprung- bzw. Rückkehr-effekte. Diese sind umso bedeutender, je niedriger die Dimensionalität d des zugrundeliegenden Gitters ist. Obwohl ein wie oben definierter Prozeß $\omega(t)$ offensichtlich kein gaußscher Prozeß ist, ist es nichtsdestoweniger instruktiv, eine solche vereinfachende Annahme zu machen und die daraus resultierende Depolarisation zu diskutieren.

Verschiedene Autoren diskutierten Anfang der Siebziger Jahre den Effekt des langsamen Zerfalls von Frequenzkorrelationen in niedrigdimensionalen Systemen, indem sie von der gaußschen Näherung ausgingen [25–28]. Diese Arbeiten befaßten sich mit dem Problem der Austauschverengung von ESR-Linien quasi-ein- bzw. zweidimensionaler Substanzen. Anzumerken ist, daß die durch die Austauschwechselwirkung zwischen den Spins bedingte "Spindiffusion" ein komplizierteres Phänomen darstellt, d.h., daß die entsprechenden Frequenzfluktuationen $\omega(t)$ zwar diffusiven Charakter haben, sich aber nicht in einem so einfachen Bild wie in den obigen Beispielen veranschaulichen lassen. Unter der Annahme, daß sich die Korrelationsfunktion $\langle \omega(t)\omega(0) \rangle$ aus der einfachen Random-Walk-Theorie ableiten läßt, d.h. $\langle \omega(t)\omega(0) \rangle \sim t^{-d/2}$, liefert die gaußsche Annahme für $\omega(t)$ in $d = 1$ und $d = 2$ einen asymptotischen Polarisationszerfall, der schneller als einfach-exponentiell [Gl. (I.3)] ist; speziell für $d = 1$ ergibt sich

$$P(t) \sim \exp \left[-\frac{4}{3}(2\pi)^{1/2} \sigma^2 \tau_c^{1/2} t^{3/2} \right] . \quad (I.4)$$

Daß die starken Korrelationen im eindimensionalen Fall hier zu einem Verhalten führen, das qualitativ zwischen (I.2) und (I.3) liegt, macht dieses Resultat physikalisch ansprechend; tatsächlich ließen sich Messungen an eindimensionalen Systemen damit relativ gut beschreiben [25, 27].

Auch Soos, der sich knapp zehn Jahre vorher mit der Depolarisation von Triplet-

Exzitonen eindimensionaler organischer Kristalle (s.o.) beschäftigt hatte, hatte bereits die besondere Bedeutung des langsamen Zerfalls von Frequenzkorrelationen betont. Auch er diskutierte das Problem im Rahmen der gaußschen Näherung; zusätzlich berücksichtigte er jedoch pauschal auch noch alle anderen (langsameren) Fluktuationen im System, die auf großen Zeitskalen aber stets die Korrelationen des diffusiven Anteils exponentiell abschwächen sollten — was zur Folge hat, daß im Langzeitlimit letztlich doch wieder einfach-exponentieller Polarisationszerfall auftritt [24].

Diese Überlegungen von Soos machen folgende Anmerkung notwendig: Da mit dieser Arbeit versucht werden soll, den Einfluß von Diffusionsprozessen möglichst detailliert zu verstehen, werden alle Fluktuationen anderen Ursprungs der Einfachheit halber von vornherein nicht berücksichtigt. In diesem eingeschränkten Sinne sind also auch Begriffe wie „asymptotisch“ zu interpretieren; erst der Vergleich *aller* relevanten Zeitskalen im System kann im konkreten Einzelfall Aufschluß darüber geben, was unter dem Gültigkeitsbereich dieser Asymptotik im realen System zu verstehen ist.

Trotz der Vorzüge, die die Resultate der gaußschen Näherung offenkundig aufweisen, bleibt deren Anwendbarkeit dennoch fraglich, da der Random Walk einen nicht-gaußschen Prozeß $\omega(t)$ erzeugt. Aus diesem Grund habe ich in Zusammenarbeit mit Kehr [29, 30] eingehend das Modell untersucht, bei dem einzelne Spinteilchen auf einem Gitter mit zufälligen (gaußverteilten) Rotationsfrequenzen ω_L Random Walk ausführen. Im Vordergrund stand dabei zuerst ein genaues Verständnis des eindimensionalen Falls; zum einen, weil hier der Einfluß der durch den Random Walk bedingten Korrelationen am wichtigsten ist, zum anderen bietet der eindimensionale Fall aber auch den Vorteil der einfacheren analytischen Zugänglichkeit. Die wesentlichen Ergebnisse sind :

- Es konnte durch analytische Argumente gezeigt werden, daß die Polarisation asymptotisch einfach-exponentiell zerfällt, d.h. proportional zu $\exp(-\lambda t)$ für Zeiten $t \gg \tau$ (τ : mittlere Wartezeit zwischen zwei Sprüngen). Dieses Ergebnis wurde durch numerische Simulationen bestätigt. Hieraus folgt zwangsläufig ein ebenfalls einfach-exponentieller Zerfall in Dimensionen $d > 1$.
- Die durch den Random Walk der Spins bedingte Frequenzmodulation führt zu einer im Vergleich zur Standard-Theorie anomalen Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ des exponentiellen Zerfalls von der Breite σ der Frequenzverteilung: $\lambda \propto \sigma^\beta \tau^{\beta-1}$, mit $\beta \approx \frac{4}{3}$ in $d = 1$, während die Standard-Theorie $\lambda = \sigma^2 \tau_c$

liefert, s. Gl. (I.3). Der Wert für β ergab sich aus einer Näherung für den asymptotischen Polarisationszerfall, die die Verteilung der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze des eindimensionalen Random Walks berücksichtigt, sowie ebenfalls in einer "Effektiven-Medium-Theorie" für die Zerfallskonstante — in guter Übereinstimmung mit den numerischen Simulationen, die in dem betrachteten Parameterbereich einen Wert von $1,30 \pm 0,02$ lieferten.

- Die Bedeutung der gaußsche Näherung für $\omega(t)$ wurde im Rahmen der Untersuchung der Kumulantenentwicklung für $P(t)$ deutlich. Sie kann als Näherung für kurze bis mittlere Zeitskalen angesehen werden; für das asymptotische Verhalten sind jedoch die Kumulanten aller Ordnungen von Bedeutung.

Anzumerken ist, daß in diesem Modell der Polarisationszerfall voneinander unabhängiger Spins betrachtet wird. Ein solches Modell ist gerechtfertigt, wenn z.B. die Depolarisation diffundierender Myonen diskutiert wird; es kann aber im Fall vieler wechselwirkender Spins nur als Näherung verstanden werden. Eine detaillierte Theorie für die Spinkorrelationsfunktion ϕ austauschgekoppelter Spins in $d = 1$ und $d = 2$ wurde von Reiter und Boucher [31] entwickelt; ihre selbstkonsistente Theorie lieferte ebenfalls exponentiellen Zerfall der Spinkorrelationsfunktionen, wobei dieser auf die dipolaren Wechselwirkungen der Spins zurückgeführt werden konnte. Im Kontrast dazu ist zu betonen, daß im dem von uns diskutierten Modell die zufälligen Rotationsfrequenzen Wechselwirkungen des jeweils betrachteten Spins mit dem Wirtsgitter repräsentieren, im Falle des Myons z.B. die dipolaren Wechselwirkungen mit den Kernspins der Wirtsatome.

Eine weitere Annahme, die diesem Modell zugrundeliegt, ist, daß jeder diffundierende Spin einen einfachen, in keiner Weise eingeschränkten Random Walk auf dem Gitter ausführt. Bei realen Diffusionsprozessen liegt jedoch oft die Situation vor, daß die Bewegungen diffundierender Teilchen miteinander korreliert sind. Beispiele sind die Selbstdiffusion über thermische Leerstellen in Metallen, Ionenbewegungen in sog. superionischen Leitern, die Diffusion von Wasserstoff in Metallhydriden, usw., ... Ein einfaches Modell für derartige Diffusionsprozesse ist das der Diffusion im "Gittergas", bei dem Teilchen betrachtet werden, die in endlicher Konzentration c auf einem Gitter diffundieren, wobei Plätze nicht doppelt besetzt werden können. Von Interesse ist hierbei nicht die kollektive Diffusion, sondern die einzelner "Tracer"-Teilchen, deren

Bewegung durch die Anwesenheit der anderen Teilchen eingeschränkt wird. In einer Dimension hat dieser Effekt besonders drastische Konsequenzen; er führt zu anomaler Diffusion des Tracer-Teilchens, d.h. $\Delta r^2 \propto t^{1/2}$ [32–38]. Eine interessante Frage ist, wie sich dies auf den Spinpolarisationszerfall auswirkt. Zu denken ist hier z.B. an die Depolarisation von Myonen, die in Metall-Wasserstoff-Systemen implantiert sind und dort als Tracer Aufschlüsse über die Diffusion der Wasserstoffs geben könnten, vgl. [39].

Diese Arbeit, in der verschiedene Modelle für die Spindepolarisation diffundierender Teilchen untersucht werden sollen, wird aus zwei Hauptabschnitten bestehen:

- Im ersten Teil der Arbeit wird die Depolarisation infolge einfacher Random Walks untersucht werden. Im Mittelpunkt steht dabei das bereits vorgestellte Modell, bei dem einzelne Spins Random Walk auf einem Gitter mit zufälligen Rotationsfrequenzen ω_L ausführen (Kapitel II). Nach einer Zusammenfassung der grundlegenden Eigenschaften des Modells und der Überlegungen für den eindimensionalen Fall wird der Polarisationszerfall in $d = 2$ und $d = 3$ untersucht. So werden z.B. die Resultate diskutiert, die die Effektive-Medium-Theorie in diesen Dimensionen liefert. Weiterhin wird der Frage nachgegangen werden, inwieweit die Resultate für $P(t)$ von der speziellen Wahl einer gaußschen Frequenzverteilung abhängen. Im Anschluß daran (Kapitel III) werden einige Modelle diskutiert, die sich auf andere mögliche Mechanismen für Spindepolarisation beziehen; so können Depolarisationseffekte durch Diffusion eines Spins zu einer ortsfesten "Störstelle" verursacht werden, wie auch umgekehrt durch Diffusion einer Störung zu einem ortsfesten Spin.

Ein Teil der Resultate dieses Kapitels ist bereits veröffentlicht worden [40].

- Im zweiten Teil wird die Depolarisation der transversalen Spinrotation durch Diffusion im Gittergas untersucht werden (Kapitel IV). Der Schwerpunkt der Diskussion wird dabei auf dem eindimensionalen Fall liegen. Zentrale Größen im Hinblick auf ein analytisches Verständnis der Depolarisation sind die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze und die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung (s.o.); diese sind in der Theorie der Tracer-Diffusion in Gittergasen bisher kaum behandelt worden. Ihrer Diskussion wird in diesem Teil der Arbeit entsprechend viel Platz eingeräumt werden.

Zum Abschluß dieser Einleitung sollen noch folgende Bemerkungen gemacht werden:

Die hier behandelten Depolarisationsprobleme sind — neben ihrer Bedeutung im Rahmen der Theorie der Linieform für Spinresonanzexperimente — auch aus der Sicht der Random-Walk-Theorie von Interesse; im übertragenen Sinn werden diffundierende Teilchen betrachtet, die einen zusätzlichen inneren Freiheitsgrad aufweisen, der an die Unordnung des zugrundeliegenden Gitters ankoppelt. Insofern ergeben sich auch Anknüpfungspunkte zu Problemen, die im Rahmen der Theorie von Diffusionsvorgängen in ungeordneten Medien von Bedeutung sind. So ist das Depolarisationsproblem in gewissem Sinne komplementär [29, 30] zum sog. Trapping-Problem, bei dem die Überlebenswahrscheinlichkeit von Teilchen untersucht wird, die auf einem Gitter mit zufällig verteilten Haftstellen ("traps") diffundieren [41–45].

Nur erwähnt werden soll hier, daß es auch eine interessante Querverbindung zur Theorie der statischen Eigenschaften von Polymeren gibt: Das Problem der Berechnung der Polarisation im Modell mit gaußverteilten Rotationsfrequenzen entspricht formal bis auf einen trivialen Faktor dem der Berechnung der Zustandssumme eines Polymers im Domb-Joyce-Modell [46, 47].

Zum Abschluß soll angemerkt werden, daß die in dieser Arbeit behandelten Fragen unter Umständen auch für die Deutung von Relaxationseffekten bei sog. PAC-Experimenten von Interesse [48] sein könnten (PAC = Perturbed Angular Correlation). Bei diesen Experimenten wird die Photonen-Emission radioaktiver Kerne gemessen, die in einer Probe implantiert sind. Da die Wahrscheinlichkeit für die Photonen-Emission bei einem bestimmten Kern von dem Winkel zwischen der Richtung des Kernspins und der Emissionsrichtung abhängt, lassen sich unter geeigneten experimentellen Bedingungen aus gemessenen räumlichen Anisotropien wiederum Rückschlüsse auf Wechselwirkungen des Sondenatoms mit lokalen Feldern ziehen. Im Zusammenhang mit den Überlegungen in dieser Arbeit wäre z.B. an Spinrelaxationseffekte zu denken, die dadurch bedingt sind, daß eine Störung, z.B. ein Gitterdefekt, diffundiert, während das Sondenatom selbst fest sitzt. Die eventuelle Möglichkeit, auch hier vergleichbare stochastische Modelle anwenden zu können, ist sicherlich ein interessanter Aspekt im Rahmen weiterer Untersuchungen von Spindepolarisations- und verwandten Problemen.

II. Depolarisation der transversalen Spinrotation durch Random Walk auf Gittern

In diesem Teil der Arbeit wird das bereits in der Einleitung erwähnte Modell für die transversale Spindepolarisation von Spinteilchen diskutiert, die unabhängig voneinander in einer Probe diffundieren, wobei sie — in Abhängigkeit von ihrem momentanen Aufenthaltsort r — unterschiedliche lokale Felder B_r^{lok} wahrnehmen, die die magnetischen Wechselwirkungen der Spins mit ihrer jeweiligen Umgebung repräsentieren. Vor der konkreten Definition des Modells sollen einige allgemeine Anmerkungen zu den Annahmen gemacht werden, auf denen das Modell beruht.

Betrachtet wird als Beispiel die Situation, wie sie bei einem typischen Myonenspinrotationsexperiment vorliegt, mit dem die Zwischengitterdiffusion der positiven Myonen in einem Wirtskristall untersucht werden soll. Die Myonen werden spinpolarisiert im Zwischengitter der Probe implantiert, wobei die Richtung der anfänglichen Polarisation im Fall der transversalen μSR in der zu einem externen Magnetfeld B_0 senkrechten Ebene liegt. Im klassischen Bild präzessiert der Spin eines Myons unter dem Einfluß des gesamten magnetischen Feldes, das sich aus B_0 und dem lokalen Feld B_r^{lok} am jeweiligen Zwischengitterplatz r zusammensetzt.

Das Feld B^{lok} kann im allgemeinen Fall verschiedenste Wechselwirkungen repräsentieren; hier soll insbesondere an Situationen gedacht werden, in denen dipolare Wechselwirkungen mit den (nichtverschwindenden) magnetischen Kernmomenten der Atome des Wirtsgitters die Dynamik der μ^+ -Spins dominieren. In diesem Fall läßt sich zeigen, daß bei hinreichend starkem Feld B_0 der Einfluß dieser Wechselwirkungen durch ein lokales Feld in der durch B_0 gegebenen Vorzugsrichtung beschrieben werden kann (siehe z.B. Kapitel IV im Buch von Abragam [5]). Für die präzessierenden Spins bedeutet das, daß ihre Bewegung auf die zu B_0 senkrechte Ebene beschränkt bleibt, in der sie mit einer Rotationsfrequenz $\omega_0 + \omega^{lok}$ proportional zu $B_0 + B^{lok}$ rotieren. In diesem Sinne wird im hier betrachteten Modell das lokale Feld auf einem Platz r durch eine zufällige statische Rotationsfrequenz ω_r beschrieben. Die Annahme der zeitlichen Konstanz entspricht dabei der weitergehenden Annahme, daß die Relaxationszeiten der Kernspins (die ihren Ursprung in den Wechselwirkungen im Wirtsgitter haben) vernachlässigbar groß sind. Der Einfachheit halber soll in dieser Arbeit nachfolgend auf Vektornotation bezüglich der Ortskoordinate verzichtet werden (r statt $\underline{r}$).

Zu betonen ist, daß die Beschreibung der Wechselwirkungen der Spins durch lokale Felder in Vorzugsrichtung — und damit das hier betrachtete Modell — nur im *transversalen* Fall gerechtfertigt ist. So ist unmittelbar einleuchtend, daß für den Zerfall einer anfänglich zum externen Feld parallelen Polarisation, wie er bei der sog. *longitudinalen* μSR gemessen wird (vgl. [8, 9]), gerade die zu B_0 senkrechten Komponenten der lokalen Felder verantwortlich sind. In diesem Fall, wie insbesondere auch bei Abwesenheit eines externen Feldes ("Null-Feld-Messungen"), muß ein vergleichbares (klassisches) stochastisches Modell zumindest alle Komponenten des lokalen Feldes gleichermaßen berücksichtigen. Ein entsprechendes Modell wurde von Kubo und Toyabe diskutiert, die die Präzession von Spins in lokalen Feldern mit zufälligen Komponenten B_x^{lok} , B_y^{lok} und B_z^{lok} betrachteten [49], s. auch Kapitel III. Modelle mit einer zufälligen Rotationsfrequenz $\omega(t)$ sind — von einigen wenigen Ausnahmen abgesehen — für sich gesehen so schwer, daß der Einschluß von Random-Walk-Effekten hoffnungslos schwierig würde.

Für die Verteilung der statischen lokalen Dipol-Felder — und damit für die Rotationsfrequenzen ω_r — kann im allgemeinen in guter Näherung eine Gaußverteilung um null angenommen werden; das zweite Moment bzw. die Breite dieser Verteilung läßt sich dabei mit der Theorie von van Vleck [15] berechnen. Der Zusammenhang zwischen der Feldverteilung und der Depolarisation $P(t)$ ist im Fall, in dem die Spin-Teilchen nicht diffundieren, einfach, da die Depolarisation im wesentlichen die zeitliche Fouriertransformierte dieser Verteilung ist [s. Gl. (II.3)]. Für diffundierende Spins, die zu verschiedenen Zeiten verschiedene lokale Felder wahrnehmen, d.h. mit einer zeitabhängigen Rotationsfrequenz $\omega(t) = \omega_{r(t)}$ rotieren, bleibt die Frage nach dem Einfluß der konkreten Form der Frequenzverteilung aber von Interesse. Dieser Frage wird in einem Teil dieses Kapitels (Abschnitt II.3) nachgegangen werden. Zuvor wird jedoch das Modell mit gaußverteilten Frequenzen im Mittelpunkt stehen.

II.1. DEFINITION UND GRUNDLEGENDE EIGENSCHAFTEN DES MODELLS

Zur Beschreibung der Depolarisation diffundierender Spin-Teilchen wird das folgende Modell gewählt: Jeder Platz r eines (unendlich ausgedehnten) d -dimensionalen Gitters ist durch eine zufällige Rotationsfrequenz ω_r charakterisiert, die jeweils unabhängig von den anderen Gitterplätzen aus einer Verteilung $g(\omega_r)$ gezogen wird (siehe Bild II.1).

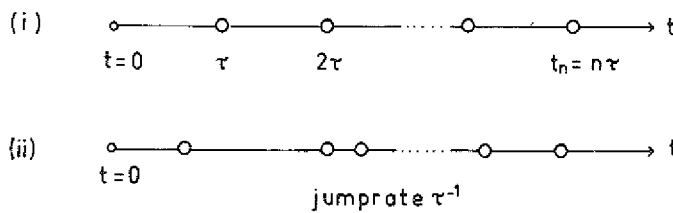
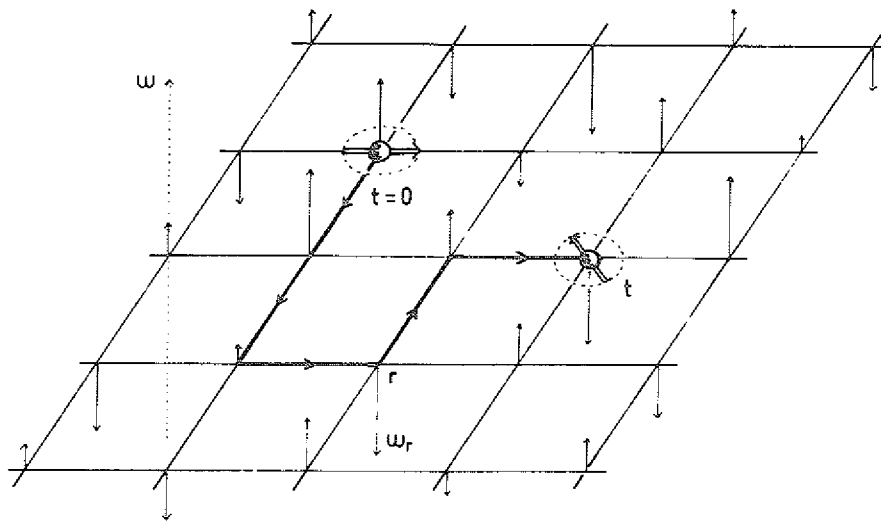


Bild II.1: Gitter mit zufälligen Rotationsfrequenzen ω_r ($d = 2$), Random Walk des Spin-Teilchens.

(a) diskreter Random Walk

(b) kontinuierlicher Random Walk

Die Annahme, daß die Frequenzen ω_r auf verschiedenen Plätzen unkorreliert sind, stellt natürlich eine gewisse Idealisierung dar. Korrelationen zumindest zwischen benachbarten Plätzen sind in der Realität durchaus zu erwarten, z.B. dann, wenn (s.o.) die Dipolfelder der Kernspins eines Wirtsgitters durch die ω_r repräsentiert werden sollen. Es sei an dieser Stelle nur erwähnt, daß derartige Korrelationen in einer ersten Näherung dadurch berücksichtigt werden können, daß man die (mittleren) Aufenthaltszeiten des diffundierenden Teilchens auf den Gitterplätzen in geeigneter Weise "renormiert". Numerische Simulationen [50] haben gezeigt, daß eine solche Vorgehensweise im dreidimensionalen Fall gerechtfertigt zu sein scheint. Die Behandlung dieser Frage bei niedrigdimensionalen Gittern, also insbesondere im Fall $d = 1$, bedarf jedoch sicherlich noch eingehenderer Untersuchungen.

Während an späterer Stelle auch andere Frequenzverteilungen betrachtet werden sollen, wollen wir uns zunächst hauptsächlich auf den Fall einer Gaußverteilung mit Mittelwert $\langle \omega \rangle = 0$ und Breite $\sigma = \langle \omega^2 \rangle^{1/2}$ konzentrieren:

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{1}{2}(\omega/\sigma)^2 \right] . \quad (II.1)$$

Das Spinteilchen, das zur Zeit $t = 0$ auf einen zufällig gewählten Platz gesetzt wird, vollführt danach einen einfachen, symmetrischen Random Walk (RW) auf dem Gitter (siehe Bild II.1); dieser ist dadurch definiert, daß mit jeweils gleicher Wahrscheinlichkeit $(1/z)$ nur Sprünge zu den z nächsten Nachbarplätzen erfolgen ($z = 2d$ für d -dimensionale "kubische" Gitter, auf deren Untersuchung ich mich in dieser Arbeit beschränken werde). Es werden zwei verschiedene Modelle betrachtet:

- Beim *kontinuierlichen* Random Walk (nachfolgend auch als "kontinuierliches Modell" bezeichnet) erfolgen die Sprünge des Teilchens in einem Poisson-Prozeß mit Sprungrate γ bzw. mittlerer Wartezeit $\tau = \gamma^{-1}$, siehe Bild II.1a.
- Beim *diskreten* Random Walk erfolgen die Sprünge in festen zeitlichen Abständen, d.h. mit konstanter Wartezeit τ ("diskretes Modell"), Bild II.1b.

Da τ in natürlicher Weise eine Zeitskala für beide Prozesse definiert, werden Zeiten in der Regel dimensionslos in Vielfachen von τ und Frequenzen in Vielfachen von γ gemessen werden.

Im *statischen* Fall, bei dem jedes Spin-Teilchen für alle Zeiten auf seinem anfänglichen Gitterplatz bleibt, hängt der Polarisationszerfall (I.1) nur von der Art der Frequenzverteilung $g(\omega)$ ab [$\omega(t) = \omega_{\tau(t=0)}$ für alle Zeiten t]. Führen wir die sog. *charakteristische Funktion* $\hat{g}$ von g ein,

$$\hat{g}(x) = \langle e^{i\omega x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega x} g(\omega) d\omega , \quad (II.2)$$

so ist die Depolarisation offenbar gegeben durch

$$P^{stat}(t) = \hat{g}(t) . \quad (II.3)$$

Im Fall der Gaußverteilung (II.1) erhält man sofort die Beziehung (I.2) wieder.

Für diffundierende Spinteilchen läßt sich der Ensemble-Mittelwert in Gl. (I.1) als doppelter Mittelwert interpretieren: Zum einen als Mittelwert über alle denkbaren Realisationen des Random Walks, zum anderen als Mittelung über alle Frequenzkonfigurationen $\{\omega_r\}$:

$$P(t) = \left\langle \left\langle \exp[-i \int_0^t dt' \omega(t')] \right\rangle_{RW} \right\rangle_{\{\omega_r\}}. \quad (II.4)$$

Da die Frequenzen auf verschiedenen Plätzen unkorreliert sind, kann der zweite Mittelwert exakt ausgeführt werden, wenn man die gesamte Zeit t in die Zeiten $t_r(t)$ zerlegt, die das Teilchen bis t jeweils auf den verschiedenen Plätzen r zugebracht hat. Die akkumulierte Phase φ der Spinrotation, $\varphi(t) \equiv \int_0^t \omega(t') dt'$, läßt sich dann schreiben als $\sum_r \omega_r t_r(t)$; damit ergibt sich:

$$P(t) = \left\langle \left\langle \exp[-i \sum_r \omega_r t_r(t)] \right\rangle \right\rangle \quad (II.5)$$

$$= \left\langle \prod_r \hat{g}[t_r(t)] \right\rangle_{RW}. \quad (II.6)$$

Speziell für die Gaußverteilung (II.1) erhält man somit:

$$P(t) = \left\langle \exp[-\frac{\sigma^2}{2} \sum_r t_r^2(t)] \right\rangle. \quad (II.7)$$

Im diskreten Modell erfolgen die Sprünge des Teilchens nur zu ganzzahligen Zeiten $t_n = n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), wobei auch die Depolarisation nur zu diesen Zeiten betrachtet werden soll. Die obigen Gleichungen lassen sich in der folgenden Form schreiben:

$$P_n \equiv P(t_n) = \left\langle \left\langle \exp[-i \sum_r \omega_r h_r(n)] \right\rangle \right\rangle \quad (II.8)$$

$$= \left\langle \exp[-\frac{\sigma^2}{2} \sum_r h_r^2(n)] \right\rangle_{RW}, \quad (II.9)$$

wobei $h_r(n)$ die Anzahl der Besuche des Teilchens auf dem Gitterplatz r bezeichnet. Zur Vereinfachung soll im folgenden stets davon ausgegangen werden, daß Random Walks am Ursprung $r = 0$ beginnen. [Es sei darauf hingewiesen, daß in die Größen $h_r(n)$, so wie sie hier eingeführt worden sind, der n -te Sprung des Teilchens nicht mehr eingeht.]†

†Anzumerken ist, daß (II.9) (bis auf einen trivialen Faktor) der Zustandssumme eines Polymers im Domb-Joyce-Modell entspricht. In diesem Modell wechselwirkt jedes der n Monomere des Polymers, das einem n -Schritt-RW entspricht,

Die Gln. (II.7,9) für $P(t)$ bzw. P_n sind die grundlegenden Beziehungen für die analytische (wie auch numerische) Behandlung des Depolarisationsproblems mit gaußverteilten Rotationsfrequenzen. Bevor die Schwierigkeiten, die mit der Ausführung der entsprechenden Random-Walk-Mittelwerte verbunden sind, diskutiert werden, sollen zuerst einige allgemeine Bemerkungen zu den Eigenschaften des Modells gemacht werden.

Ein wesentliches Charakteristikum der durch den Random Walk der Spins definierten Frequenzmodulation $\omega(t)$ ist, daß gewisse Rotationsfrequenzen im Laufe der Zeit mehrfach von einem Spin wahrgenommen werden können, wenn dieser zu bereits vorher besuchten Gitterplätzen zurückkehrt — im Gegensatz zur Situation beim “Strong-Collision”-Modell, bei dem mit jedem Sprung eine neue Frequenz angenommen wird. Da durch die Rückkehreffekte die Zahl der tatsächlich besuchten Frequenzen gegenüber der Zahl der Sprünge herabgesetzt wird — das Teilchen in diesem Sinne also weniger “mobil” ist —, erwartet man qualitativ ein reduziertes motional-narrowing, d.h. einen schnelleren Polarisationszerfall. Dieser Effekt sollte bei Random Walks auf niedrigdimensionalen Gittern besonders ausgeprägt sein, da mit abnehmender Dimensionalität d Rücksprünge immer wahrscheinlicher werden. Das Strong-Collision-Modell kann als Grenzfall “ $d = \infty$ ” betrachtet werden; festzuhalten ist, daß es eine (triviale) obere Schranke für den Polarisationszerfall bei Random Walk auf Gittern liefert, d.h.:

$$P(t) < P^{sc}(t) \underset{t \gg \tau \approx 1, \sigma \ll 1}{\sim} \exp(-\sigma^2 t), \quad (II.10a)$$

[vgl. Gl. (I.3)], bzw.

$$P_n < P_n^{sc} = \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 n) \quad (II.10b)$$

im diskreten Fall.

nur mit den Monomeren, die sich in seiner “unmittelbaren Nachbarschaft” (d.h. am gleichen Platz r) befinden, so daß die Gesamtenergie ϵ_n des Polymers durch $\epsilon_n = (\epsilon_0/2) \sum_r h_r(h_r - 1) = (\epsilon_0/2) [\sum_r h_r^2 - n]$ gegeben ist (h_r = Zahl der Monomere am Platz r , $\epsilon_0 > 0$: (abstoßende) Paar-Wechselwirkungsenergie). Der Zusammenhang zwischen der Zustandssumme $Z_n = \langle \exp(-\epsilon_n/k_B T) \rangle_{RW}$ und P_n ist mit (II.9) offensichtlich:

$$Z_n \underset{\sigma = (\epsilon_0/k_B T)^{1/2}}{\leftrightarrow} P_n \exp(\frac{1}{2}\sigma^2 n).$$

Die bereits in der Einleitung erwähnte gaußsche Theorie für $\omega(t)$ führt zu Resultaten, die in Übereinstimmung mit den anschaulichen Erwartungen eine charakteristische Abhängigkeit des Polarisationszerfalls von der Dimension d zeigen. Obwohl der durch den Random Walk definierte stochastische Prozeß $\omega(t)$ kein gaußscher Prozeß ist, ist die Diskussion dieser Resultate nichtsdestoweniger aufschlußreich:

Charakteristisch für einen gaußschen Prozeß $\omega(t)$ ist das Verschwinden von Kumulanten von höherer als zweiter Ordnung [d.h. $\langle \omega(t_1) \cdots \omega(t_n) \rangle_c = 0$ für $n > 2$]. Bei Prozessen mit verschwindendem ersten Moment, d.h. $\langle \omega(t) \rangle = 0$ für alle t , ergibt sich dann für die Depolarisation (I.1):

$$P(t) = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \langle \omega(t_1) \omega(t_2) \rangle \right]. \quad (II.11)$$

Ist $\omega(t)$ zudem *stationär* (was für den durch den markov'schen Random Walk definierten Prozeß der Fall ist), so läßt sich diese Beziehung auch folgendermaßen schreiben:

$$P(t) = \exp \left[- \int_0^t \langle \omega(t') \omega(0) \rangle (t - t') dt' \right]. \quad (II.12)$$

Das asymptotische Verhalten der Frequenzkorrelationsfunktion determiniert den asymptotischen Polarisationszerfall für Zeiten $t \gg 1$. Wie sich leicht zeigen läßt, ist im Fall des kontinuierlichen Random Walks

$$\langle \omega(t) \omega(0) \rangle = \sigma^2 P(0, t) \underset{t \gg 1}{\sim} \text{const} \times \sigma^2 t^{-d/2}, \quad (II.13)$$

wobei $P(0, t)$ die Wahrscheinlichkeit ist, daß das (zur Zeit $t = 0$ am Ursprung $r = 0$ startende) Teilchen sich zur Zeit t auf dem Platz $r = 0$ befindet. Somit folgt für das asymptotische Verhalten von $P(t)$ in $d = 1$ [vgl. (I.4)] und $d = 2$:

$$P(t) = \exp(-\text{const} \times \sigma^2 t^{3/2}) \quad (d = 1), \quad (II.14)$$

$$P(t) = \exp[-\text{const} \times \sigma^2 t \ln(t)] \quad (d = 2). \quad (II.15)$$

Die gaußsche Annahme führt stets zu einem einfach-exponentiellen Zerfall, wenn Frequenzkorrelationen so schnell zerfallen, daß eine endliche Korrelationszeit τ_c definiert werden kann, d.h., wenn

$$\tau_c \equiv \frac{1}{\langle \omega(0)^2 \rangle} \int_0^\infty \langle \omega(t) \omega(0) \rangle dt < \infty. \quad (II.16)$$

In diesem Fall ist $P(t) \sim \exp(-\sigma^2 \tau_c t)$ [“Standard-Theorie” der Linienverengung, vgl. Einleitung (I.3)].

Die zu (II.16) äquivalente Bedingung $\int_0^\infty P(0, t) dt < \infty$ ist in der RW-Theorie für die — bereits 1921 von Pólya [51] untersuchte — Frage entscheidend, ob ein Teilchen mit Sicherheit irgendwann zu seinem Startplatz zurückkommt (sog. “wiederkehrender” Random Walk) oder andernfalls mit endlicher Wahrscheinlichkeit “im Unendlichen verschwindet” (“transienter” Walk), siehe z.B. [52]. Beim einfachen Random Walk in $d = 2$ und $d = 2$ divergiert das Integral (d.h., die Walks sind wiederkehrend); die gaußsche Näherung liefert einen schnelleren als einfach-exponentiellen Polarisationszerfall. In $d \geq 3$ — d.h. allgemein bei transienten Random Walks — existiert demgegenüber das Integral in (II.16), so daß die Polarisation in dieser Näherung einfach-exponentiell zerfällt. Die Größe τ_c ist dimensionslos durch $\int_0^t P(0, t) dt \equiv a_0$ gegeben, eine Konstante, die beim hier betrachteten einfachen Random Walk für verschiedene Gittertypen bekannt ist, beispielsweise $a_0 = 1,516 \dots$ beim dreidimensionalen einfach-kubischen Gitter [siehe z.B. Gl. (D3) in Ref. 53]. Die gaußsche Annahme liefert also:

$$P(t) \sim \exp(-a_0 \sigma^2 t) \quad (d \geq 3). \quad (II.17)$$

Wenngleich die gaußsche Annahme für $\omega(t)$ mithin physikalisch ansprechende Resultate liefert, so stellt sich dennoch die Frage, ob bzw. inwieweit diese Näherung überhaupt zur Beschreibung des tatsächlichen Depolarisationszerfalls herangezogen werden kann. Diese Frage ist — insbesondere für den eindimensionalen Fall — eingehend untersucht worden ([29], siehe auch Ref. 40); die entsprechenden Resultate werden weiter unten diskutiert. An dieser Stelle soll vorerst betont werden, daß aus den Resultaten der gaußschen Näherung eine mathematisch-strenge Aussage über das Verhalten der tatsächlichen Depolarisation abgeleitet werden kann:

Den Hollander [54] hat darauf hingewiesen, daß die Ungleichung von Jensen für konvexe Funktionen —

$$\langle f(x) \rangle \geq f(\langle x \rangle), \quad (II.18)$$

wenn f eine stetige, konvexe Funktion der reellen (Zufalls-)Variablen x ist (s. z.B. [55]) — auf das Depolarisationsproblem angewandt werden kann. Deutlich wird dies in Gl. (II.7), in der $P(t)$ als Mittelwert einer konvexen Funktion der Variablen

$\sum_r t_r^2(t)$ gegeben ist; somit folgt:

$$P(t) \geq \exp \left(-\frac{\sigma^2}{2} \langle \sum_r t_r^2(t) \rangle \right). \quad (II.19)$$

Nun ist aber, wie sich leicht zeigen läßt, der Ausdruck auf der rechten Seite dieser Ungleichung nur eine andere Form des Ausdrucks in Gl. (II.11), d.h. der Depolarisation, die man unter der gaußschen Annahme für $\omega(t)$ erhält. Die gaußsche Näherung liefert somit bei *allen* Zeiten t eine untere Grenze für den tatsächlichen Polarisationszerfall; die asymptotischen Ausdrücke (II.14, 15, 17) sind dementsprechend als untere Grenzen für den asymptotischen Zerfall von $P(t)$ aufzufassen. Die Konsequenzen, die sich hieraus für transiente Walks (also $d \geq 3$) ergeben, sind offensichtlich: Zusammen mit der durch das Strong-Collision-Modell (für alle d) gegebenen oberen Grenze (II.10a) folgt unmittelbar, daß $P(t)$ asymptotisch einfach-exponentiell zerfallen muß. Die Frage nach dem Zerfall in $d = 1$ und $d = 2$ bleibt demgegenüber aber weiterhin offen.

Im nächsten Abschnitt sollen die bereits in der Einleitung erwähnten Resultate für den eindimensionalen Fall zusammengefaßt und diskutiert werden. Die wesentlichen Ideen und Methoden, mit denen diese Resultate hergeleitet wurden, sollen dabei, obwohl bereits an anderer Stelle dargelegt, ([29, 30], vgl. auch [40]), im Interesse der inhaltlichen Geschlossenheit dieser Arbeit erläutert werden — zum einen, weil sie zum prinzipiellen Verständnis des Depolarisationsproblems beitragen können, zum anderen aber auch deshalb, weil an späterer Stelle Bezug auf sie genommen werden wird (z.B. bei der Untersuchung der Depolarisation im Gittergas, siehe Kapitel IV). Zuvor soll jedoch ein kurzer Kommentar bezüglich der Schwierigkeiten gemacht werden, die mit dem Versuch einer exakten Behandlung des Depolarisationsproblems bei Random Walk auf Gittern verbunden sind.

Wie Gl. (II.9) für den diskreten Fall verdeutlicht, reduziert sich das Problem der Random-Walk-Mittelung im Prinzip zunächst darauf, die Wahrscheinlichkeiten $p_n(\{h_r\})$ dafür zu bestimmen, daß in einem n -Schritt Random-Walk die Plätze r jeweils h_r -mal besucht werden. Es soll hier nur erwähnt werden, daß die Kenntnis dieser Wahrscheinlichkeiten auch für die Berechnung der Depolarisation $P(t)$ im kontinuierlichen Fall von Nutzen wäre [29]. Die Random-Walk-Theorie liefert zu diesem Problem folgende Resultate: Rubin und Weiss [56] haben für beliebige Dimension d eine formale Berechnungsvorschrift für die erzeugende Funktion der Wahrscheinlichkeiten

$p_n(\{h_{r_1}, h_{r_2}, \dots, h_{r_m}\})$ einer *endlichen* Menge von Gitterplätzen $\{r_1, \dots, r_m\}$ angegeben. Ihr Resultat ist von praktischem Nutzen, wenn nur wenige Plätze von Interesse sind, aber nicht geeignet für das Depolarisationsproblem (sieht man von einer Beschreibung des Kurzzeitverhaltens einmal ab). Die einfache Topologie in $d = 1$ erlaubt es demgegenüber, in Anlehnung an Arbeiten von van Beijeren und Spohn, die ein verwandtes Problem untersucht haben [57, 58], alle Walks mit vorgegeben Besuchszahlen $\{h_r\}$ abzuzählen. Die entsprechenden Ausdrücke sind jedoch relativ kompliziert, so daß die Summation über alle möglichen Konfigurationen $\{h_r\}$ in den Ausdrücken für die Depolarisation nicht durchgeführt werden konnte. [Wie in anderem Zusammenhang deutlich gemacht wurde, kann diese Methode allerdings hilfreich sein für numerische Berechnungen, z.B. von Ausdrücken der Form (II.9) für nicht allzu große Schrittzahlen n [59].]

II.2. SPINDEPOLARISATION IN $d = 1$ (GAUSSISCHE FREQUENZVERTEILUNG)

Die transversale Depolarisation von Spins, die Random Walk auf einer linearen Kette mit gaußverteilten Frequenzen ausführen, ist in Zusammenarbeit mit Kehr eingehend untersucht worden [29, 30, 40]. Als wesentlichstes Resultat ergab sich, daß im Gegensatz zu einem Verhalten der Form $P(t) \sim \exp(-\text{const} \times t^{3/2})$, das sich unter der gaußschen Annahme für $\omega(t)$ ergibt, die Depolarisation sowohl im kontinuierlichen wie auch im diskreten Modell asymptotisch einfach-exponentiell zerfällt. Zuerst soll die Bedeutung der gaußschen Näherung als niedrigste Ordnung einer systematischen Kumulantenentwicklung für $P(t)$ diskutiert werden; anschließend wird sich die Diskussion der eigentlichen Asymptotik des Polarisationszerfalls, wobei die analytischen Resultate denen numerischer Simulationen gegenübergestellt werden.

II.2.1. KUMULANTENENTWICKLUNG FÜR $P(t)$

Die Untersuchungen in diesem Abschnitt sind durch die bereits angesprochene Fragestellung motiviert worden, ob bzw. inwieweit die gaußsche Behandlung — oder allgemeiner eine systematische Kumulantenentwicklung — zumindest als näherungsweise Beschreibung des tatsächlichen Polarisationszerfalls von Nutzen sein kann. Die Diskussion beschränkt sich dabei der Einfachheit halber auf das kontinuierliche Modell, in dem die Depolarisation $P(t)$ nach Ausmittlung der zufälligen Rotationsfrequenzen durch den (exakten) Ausdruck (II.7) gegeben ist. Betrachtet man die Verteilung der

durch den Random Walk generierten Zufallsvariablen $\Sigma \equiv \sum_r t_r^2(t)$, so entspricht die gaußsche Näherung — vgl. die Anmerkung nach Gl. (II.19) — der Approximation dieser Verteilung durch eine einfache δ -Funktion, d.h. durch $\delta(\Sigma - \langle \Sigma \rangle)$. Die Möglichkeit, systematisch auch höhere Momente dieser Verteilung zu berücksichtigen, liefert die Kumulantenentwicklung von (II.7); sie ist durch

$$P(t) = \lim_{m \rightarrow \infty} P_{(m)}(t),$$

$$P_{(m)}(t) \equiv \exp \left[\sum_{k=1}^m \left(\frac{-\sigma^2}{2} \right)^k \frac{1}{k!} \langle \Sigma^k(t) \rangle_c \right], \quad (II.20)$$

gegeben, wobei sich die Größen $\langle \Sigma^k(t) \rangle_c$, die Kumulanten k -ter Ordnung, in bekannter Weise (s. z.B. [21]) durch die ersten k Momente

$$M_1(t) \equiv \langle \Sigma(t) \rangle, \dots, M_k(t) \equiv \langle \Sigma^k(t) \rangle$$

ausdrücken lassen. Die gaußsche Näherung entspricht in dieser Schreibweise also gerade der Approximation von P durch $P_{(1)}$.†

Die Momente $M_k(t)$, bzw. deren Laplace-Transformierte $\tilde{M}_k(u)$, lassen sich in einem ersten Schritt, in dem nur von der Markov-Eigenschaft und Translationsinvarianz des zugrundeliegenden Random-Walk-Prozesses Gebrauch gemacht wird, auf (von der Dimension d unabhängige) Ausdrücke zurückführen, die nur noch die Laplace-Transformierten $\tilde{P}(r, u)$ der RW-Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $P(r, t)$ enthalten. Wie dies — im Prinzip für beliebige Ordnungen k , wobei allerdings der Aufwand mit wachsendem k erheblich zunimmt — konkret durchzuführen ist, soll hier nicht erläutert werden (siehe [40] sowie Ref. 29, in der eine detaillierte Beschreibung zu finden

†In der Literatur zur Theorie stochastischer Prozesse wird die Kumulantenentwicklung üblicherweise in der folgenden Form diskutiert [60, 61]:

$$\left\langle \exp \left[i \int_0^t \omega(t') dt' \right] \right\rangle = \exp \left[\sum_{l=1}^{\infty} \frac{i^l}{l!} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_l \langle \omega(t_1) \cdots \omega(t_l) \rangle_c \right],$$

vgl. Gl. (II.11) für gaußsches $\omega(t)$. Im vorliegenden Fall, in dem $\omega(t)$ durch den Random Walk auf einem Gitter mit gaußverteilten Frequenzen definiert ist, ist es jedoch sinnvoller, die — natürlich vollkommen äquivalente — Entwicklung (II.20) zu benutzen, da bei der Berechnung der Kumulanten nur noch Random-Walk-Mittelwerte auszuführen sind.

ist). Betrachten wir beispielhaft nur die entsprechenden Ergebnisse für die ersten beiden Momente:

$$\tilde{M}_1(u) = \frac{2}{u^2} \tilde{P}(0, u), \quad (II.21)$$

$$\tilde{M}_2(u) = \frac{8}{u^2} \left[\frac{1}{u} \tilde{P}^2(0, u) + \tilde{P}(0, u) \sum_r \tilde{P}^2(r, u) + \sum_r \tilde{P}^3(r, u) \right]. \quad (II.22)$$

Im Fall des hier betrachteten einfachen Random Walks in $d = 1$ ist die Laplace-Transformierte von $P(r, t)$ durch

$$\tilde{P}(r, u) = \frac{[u + 1 - \sqrt{u(u+2)}]^{|r|}}{\sqrt{u(u+2)}} \equiv \frac{[A(u)]^{|r|}}{C(u)} \quad (II.23)$$

gegeben [52]. Die im Ausdruck für $\tilde{M}_2(u)$ auftretenden Gittersummen können mit (II.23) explizit ausgeführt werden: $\sum_r \tilde{P}^j(r, u) = C^{-j}(u)[1 + A^j(u)]/[1 - A^j(u)]$ ($j \geq 2$). Durch inverse Laplace-Transformation können nun sowohl $M_1(t)$ als auch $M_2(t)$ und damit auch die entsprechenden Kumulanten numerisch für *alle* Zeiten t berechnet werden.

Das asymptotische Verhalten für $t \rightarrow \infty$ erhält man aus der Entwicklung von $\tilde{M}_k(u)$ für kleine Argumente u . Für $M_1(t) = \langle \Sigma(t) \rangle$ findet man auf diese Weise natürlich das (I.4) bzw. (II.14) entsprechende Verhalten wieder; für $M_2(t)$ erhält man $M_2(t) \sim \frac{11}{9}t^3$. Beide asymptotischen Formen sind spezielle Fälle des allgemeineren Resultats $M_k(t) \sim \text{const} \times t^{3k/2}$ ($t \rightarrow \infty$), dessen Gültigkeit für alle k gezeigt werden kann [29]. Unter Vernachlässigung numerischer Faktoren findet man für die zweite Kumulanten-Näherung das asymptotische Verhalten

$$P_{(2)}(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-\text{const} \times t^3),$$

das, da die Konstante im Exponenten positiv ist, für das tatsächliche asymptotische Verhalten offensichtlich irrelevant ist. Nichtsdestoweniger liefert $P_{(2)}(t)$ aber einen wichtigen Beitrag bei intermediären Zeiten. Bild II.2 zeigt beispielhaft das Verhalten von $P_{(1)}(t)$ und $P_{(2)}(t)$ bei einem typischen Wert von σ . Der Vergleich mit der numerischen Simulation zeigt, daß sich der tatsächliche Polarisationszerfall mit $P_{(1)}(t)$ bis zu Werten $P(t) \approx 10^{-1}$ und mit $P_{(2)}(t)$ bis zu Werten $P(t) \approx 10^{-2}$ relativ gut approximieren läßt. Diese Beobachtung mag erklären, daß sich die in der Einleitung erwähnten experimentellen Resultate [25] recht gut mit der gaußschen Theorie beschreiben ließen. So liefert

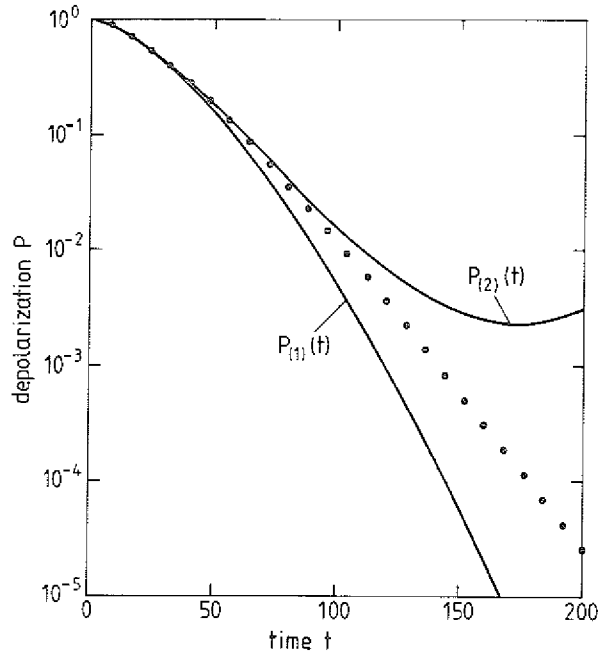


Bild II.2: Depolarisation des kontinuierlichen Random Walks in $d = 1$ ($\sigma = 0,1$). Vergleich der ersten und zweiten Kumulanten-Näherung $P_{(1)}(t)$ bzw. $P_{(2)}(t)$ mit dem Resultat der numerischen Simulation ($\bullet$).

bereits der asymptotische Ausdruck (I.4) als grobe Näherung Zeiten für den Zerfall auf $\frac{1}{e}$, die nur um ca. 30% von den simulierten Werten abweichen. Dies legt den Schluß nahe, daß aus der gaußschen Näherung abgeleitete Linienbreiten die richtigen Werte recht gut beschreiben sollten (siehe [25]). Anzumerken ist, daß Reiter und Boucher zu einem ähnlichen Schluß für das Modell wechselwirkender Spins gelangt sind [31].

Die Kumulantenentwicklung (II.20) ist offensichtlich eine Entwicklung für kurze Zeiten t . Der zeitliche Bereich, in dem der Polarisationszerfall mit einer bestimmten Ordnung k noch gut beschrieben wird, wird dabei mit abnehmendem Parameter σ , den man als Maß für die Unordnung des Gitters auffassen kann, größer. Je größer die Unordnung, d.h. σ , ist, desto früher werden feinere Details des Random-Walk-Prozesses und die dadurch bedingten Frequenzkorrelationen wichtig. Während in der gaußschen Näherung nur Korrelationen durch einfache Rückkehreffekte zu einzelnen Gitterplätzen berücksichtigt werden, vgl. Gl. (II.13) bzw. (II.21), gehen in die höheren Kumulanten der Ordnung k sowohl Korrelationen durch einfache Rückkehr zu k ver-

schiedenen Plätzen als auch solche durch mehrfache ($2k$ -fache) Besuche auf einzelnen Plätzen ein (allgemeiner alle Korrelationen, die durch $2k$ Besuche des Teilchens auf beliebigen Plätzen entstehen). Zumindest in $d = 1$ können Korrelationen durch Besuche von *endlich* vielen Plätzen aber nicht der Situation im asymptotischen Bereich gerecht werden, in dem beliebig viele Plätze beliebig oft besucht werden können. Festzuhalten ist aber, daß die Kumulantenmethode die zumindest prinzipielle Möglichkeit bietet, durch sukzessive Entwicklung den anfänglichen Zerfall soweit wie gewünscht zu beschreiben. Abschließend soll angemerkt werden, daß im Fall $\sigma \gg 1$ der gaußförmige Zerfall (I.2) eine adäquate Beschreibung der Depolarisation darstellt, da dann die Details der Frequenzmodulation $\omega(t)$ praktisch irrelevant sind (das "wahre" asymptotische Verhalten ist nicht mehr beobachtbar).

II.2.2. ASYMPTOTISCHES VERHALTEN DER DEPOLARISATION

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Überlegungen und Resultate bezüglich des Verhaltens der Depolarisation bei großen Zeiten t bzw. Schrittzahlen n zusammengefaßt. Im Vordergrund wird dabei eine Näherung für das asymptotische Verhalten der Depolarisation P_n des diskreten Modells stehen. Die Bedeutung dieser Näherung ergibt sich daraus, daß sie zu Resultaten führt, die sich in guter Übereinstimmung mit denen numerischer Simulationen befinden, darüberhinaus aber auch in besonders anschaulicher Weise ein grundsätzliches Verständnis der charakteristischen Eigenschaften der durch den Random Walk der Spins bedingten Depolarisation ermöglicht.

Wie die Überlegungen des vorhergehenden Abschnitts bereits deutlich gemacht haben, sollte eine Theorie für das asymptotische Verhalten der Tatsache Rechnung tragen, daß mit zunehmender Zeit t immer mehr Plätze unter Umständen mehrfach besucht werden können. Als Ausgangspunkt betrachten wir die Zahl s der verschiedenen Plätze, die von einem Teilchen in einem diskreten n -Schritt-RW besucht werden (diese Größe wird in einer Dimension auch als Ausdehnung oder "Span" des Walks bezeichnet). Anhand der beiden bei gegebenem n möglichen Extremfälle, $s = 2$ bzw. $s = n$, läßt sich unmittelbar das unterschiedliche Verhalten "kontrahierter" (kleines s) bzw. "ausgedehnter" Walks (großes s) verdeutlichen: Ihr individueller Beitrag zur Depolarisation ist einerseits ein gaußförmiger Zerfall, $\exp(-\sigma^2 n^2/4)$, für $s = 2$, andererseits ein einfach-exponentieller, $\exp(-\sigma^2 n/2)$, für $s = n$ [entsprechend dem diskreten Strong-Collision-Modell (II.10b)]. Für beliebige Werte von s erhält man eine näherungsweise

Beschreibung, wenn man vereinfacht annimmt, daß jeder der s verschiedenen besuchten Plätze gleich oft, d.h. $\frac{n}{s}$ -mal, besucht worden ist. Gl. (II.9) reduziert sich damit zu

$$P_n \approx \langle C_n(s) \rangle, \quad C_n(s) \equiv \exp\left(-\frac{\sigma^2 n^2}{2s}\right), \quad (II.24)$$

wobei sich die Mittelung nun über alle möglichen Werte von s erstreckt. Ein interessanter Zusammenhang mit der bereits diskutierten gaußschen Näherung ergibt sich, wenn man weiterhin annimmt, daß jeder n -Schritt-RW gerade $\langle s \rangle$ verschiedene Plätze besucht. Mit dem asymptotischen Verhalten [53]

$$\langle s \rangle \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} (8n/\pi)^{1/2} \quad (II.25)$$

in $d = 1$ führt (II.24) dann zu $P_n \sim \exp[-\frac{1}{2}\sigma^2(\pi/8)^{1/2}n^{3/2}]$, einem qualitativ (II.14) entsprechenden Verhalten. In höheren Dimensionen verhält sich die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze asymptotisch wie [53]

$$\langle s \rangle \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \text{const} \times n / \ln(n) & (d = 2) \\ \text{const} \times n & (d \geq 3) \end{cases} \quad (II.26)$$

$$(II.27)$$

Die Polarisationszerfälle, die diese Näherung für $d = 2$ und $d = 3$ liefert, sind somit wiederum analog zu den Resultaten (II.15, 17) der gaußschen Näherung für $P(t)$. Die gaußsche Näherung läßt sich also anschaulich so interpretieren, daß sie nur die Eigenschaften "mittlerer" Walks (d.h. solcher mit mittlerer Ausdehnung) berücksichtigt.

Um in der Näherung (II.24) die Beiträge von Walks beliebiger Ausdehnung zu berücksichtigen, bedarf es der Kenntnis der Verteilung $W_n(s)$ der Zahl s der in einem n -Schritt-RW besuchten Plätze. In $d = 1$ ist diese exakt bekannt [62]. Da hier das asymptotische Verhalten der Depolarisation im Vordergrund steht und darüberhinaus ausgedehnte Walks die größten individuellen Beiträge $C_n(s)$ liefern [s. (II.24)], wird direkt ein von Weiss und Rubin [62] – in der Form einer unendlichen Reihe – gegebener asymptotischer Ausdruck für die Spanverteilung benutzt, der auf der rechten Flanke der Verteilung, d.h. bei grossen Werten von s , schnell konvergiert:

$$W_n(s) = \frac{8}{\sqrt{2\pi n}} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} j^2 \exp\left(-\frac{1}{2}j^2 s^2/n\right). \quad (II.28)$$

In Bild II.3 sind $W_n(s)$ und $C_n(s)$ sowie das Produkt $f_n(s) \equiv W_n(s)C_n(s)$, das den effektiven Beitrag *aller* Walks mit Span s zur Depolarisation beschreibt, für typische Werte

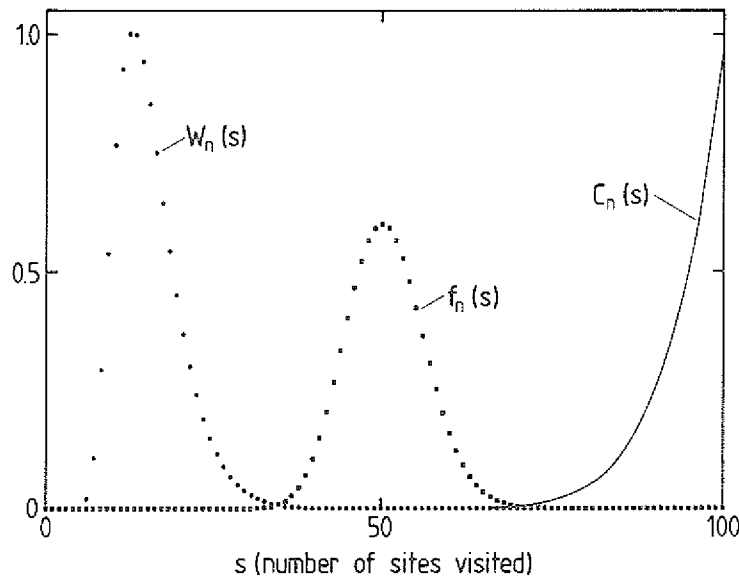


Bild II.3: Spanverteilung $W_n(s)$ ($d = 1$), individueller Beitrag $C_n(s)$ eines Walks mit Span s zur Depolarisation, Gl. (II.24), und $f_n(s) = W_n(s)C_n(s)$ für $n = 100$ und $\sigma = 0,5$. [Die Maxima von W_n und C_n sind auf 1 normiert, das von f_n auf 0.6.]

von n und σ dargestellt. Bei hinreichend großem n genügt es, bei der Ausführung des Mittelwertes in (II.24) nur den ersten Summanden der Summe (II.28) mitzunehmen (die anderen Summanden liefern exponentiell verschwindende Beiträge). Die Summation über $f_n(s)$ läßt sich mittels Sattelpunktsintegration ausführen. Der Sattelpunkt bzw. das Maximum von f_n liegt bei $s_m \simeq 2^{-1/3}\sigma^{2/3}n$, wobei die relative Breite von der Größenordnung $n^{-1/2}$ ist. Da $f_n(s)$ nicht für Argumente $s > n$ definiert ist, ist die Sattelpunktmethode somit nur für solche Werte von σ legitim, bei denen s_m kleiner als n ist, d.h. grob gesprochen für Werte von σ kleiner als 1. Als Resultat für das asymptotische Verhalten der Depolarisation ergibt sich

$$P_n \sim \frac{8}{\sqrt{3}} \exp\left(-3 \times 2^{-5/3} \sigma^{4/3} n\right), \quad (\text{II.29})$$

also ein einfach-exponentieller Polarisationszerfall. Bevor auf den Vergleich dieses Resultats mit numerischen Simulationen eingegangen wird, soll eine weitere Anmerkung gemacht werden.

Da für jeden einzelnen Walk die Ungleichung $\sum_r t_r^2(t) \geq n^2/s$ in Strenge erfüllt ist, liefert die Näherung (II.24) eine obere Schranke für die Depolarisation P_n . Die dement-

sprechende Bedeutung von (II.29) als einfach-exponentielle obere Schranke für den asymptotischen Polarisationszerfall ist vom theoretischen Standpunkt aus aber nicht befriedigend, da dadurch — ebensowenig wie durch die triviale obere Schranke (II.10b) — natürlich nicht die Möglichkeit eines Zerfalls $P_n \sim \exp(-\text{const} \times n^\alpha)$ mit einem Exponenten $\alpha > 1$ ausgeschlossen werden kann. Der Beweis, daß die Depolarisation tatsächlich einfach-exponentiell zerfällt, konnte aber durch geeignete Konstruktion einer *unteren* Schranke erbracht werden, die ebenfalls asymptotisch einfach-exponentiell zerfällt [29].

Die obigen Resultate sind für das diskrete Modell hergeleitet worden. Inwieweit sich diese auch auf das Modell des kontinuierlichen Random Walks übertragen lassen, wird in den nächsten beiden Abschnitten im Zusammenhang mit den Resultaten numerischer Simulationen diskutiert.

II.2.3. VERGLEICH MIT NUMERISCHEN SIMULATIONEN

Dazu, wie die Simulationen, deren Ergebnisse hier zusammengefaßt diskutiert werden sollen, durchgeführt wurden, sollen nur einige allgemeinere Anmerkungen gemacht werden. Details sind in [29] zu finden (vgl. auch Anhang B, in dem auf die numerischen Simulationen der Depolarisation im Gittergas eingegangen wird).

Simulationen zum Depolarisationsproblem können im Prinzip auf verschiedenste Weisen realisiert werden, je nachdem, wie die zur Berechnung von P durchzuführenden Mittelungen — die Frequenzkonfigurations- und die Random-Walk-Mittelung — in der Simulation ihre Berücksichtigung finden. Eine Methode, die der Simulation von (II.5) bzw. (II.8) entspricht und sich am unmittelbarsten an der ursprünglichen Problemstellung orientiert, besteht im Kern darin, auf einem hinreichend großen Gitter mit zufällig erzeugter Frequenzenkonfiguration $\{\omega_r\}$ viele Random Walks mit zufälligen Startplätzen zu simulieren, wobei man die Spinrotationsphase aller "Teilchen" mitverfolgt. Diese Methode erwies sich jedoch als relativ zeitaufwendig und nicht sehr genau, da große statistische Streuungen der Daten bereits bei Werten von P (typischerweise der Größenordnung $10^{-2} - 10^{-3}$) auftraten, bei denen der asymptotische Bereich i.a. noch nicht erreicht war. Vorteilhafter erweist sich, von vorneherein auf die Simulation der Konfigurationsmittelung zu verzichten[†], d.h. direkt die Gln. (II.7, 9) zugrunde zu legen.

[†]Umgekehrt sind Methoden denkbar, bei denen auf die Simulation des Random Walks verzichtet werden kann. Im kontinuierlichen Fall z.B. läßt sich das Depo-

Diese Methode, bei der nur noch über viele Walks gemittelt werden muß, erlaubte es, den Depolarisationszerfall in einem weitem Parameterbereich (Werte von σ zwischen 2 und 10^{-3} im diskreten Modell) bis hinab zu Werten der Größenordnung 10^{-8} (und teilweise noch weiter) zu verfolgen. Simulationen des kontinuierlichen Modells wurden nicht in gleichem Umfang durchgeführt, da mit der Simulation der zufälligen Wartezeiten zusätzlicher Aufwand verbunden ist.

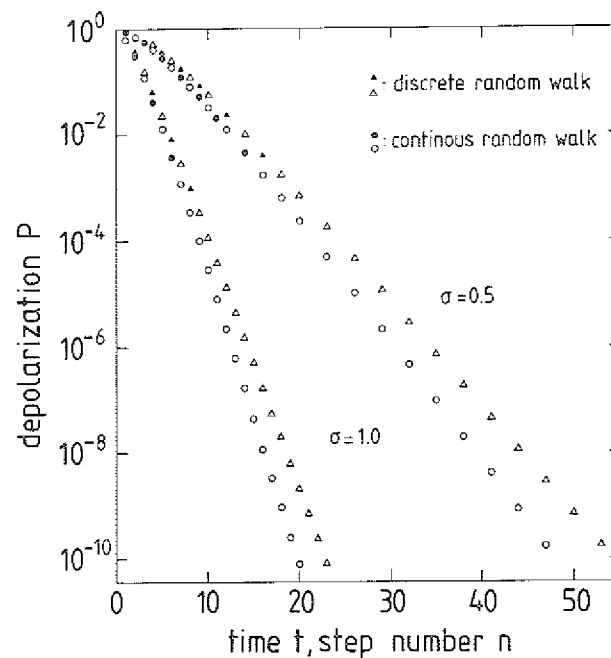


Bild II.4: Depolarisation des kontinuierlichen bzw. diskreten Random Walks [$d = 1$, Frequenzverteilung (II.1)] für zwei typische Werte von σ , Simulationen. Gefüllte Symbole: Simulation mittels erster im Text beschriebener Methode, offene Symbole: zweite Methode.

Die Simulationen zeigen, daß sich sowohl die diskrete wie auch die kontinuierliche

larisationsproblem über ein Differentialgleichungssystem formulieren (in Analogie zur Beschreibung des RW's mit der Master-Gleichung), das für vorgegebene ω_r numerisch gelöst werden kann; allerdings erwies sich auch diese Methode als nicht allzu effizient [29]. Im diskreten Fall wäre in Analogie dazu daran zu denken, die RW-Mittelung durch Multiplikation $\{\omega_r\}$ -abhängiger Transfermatrizen exakt durchzuführen. Obwohl keine eigenen Erfahrungen hierzu vorliegen, ist zu vermuten, daß auch in diesem Fall die Simulation der ω_r problematisch ist.

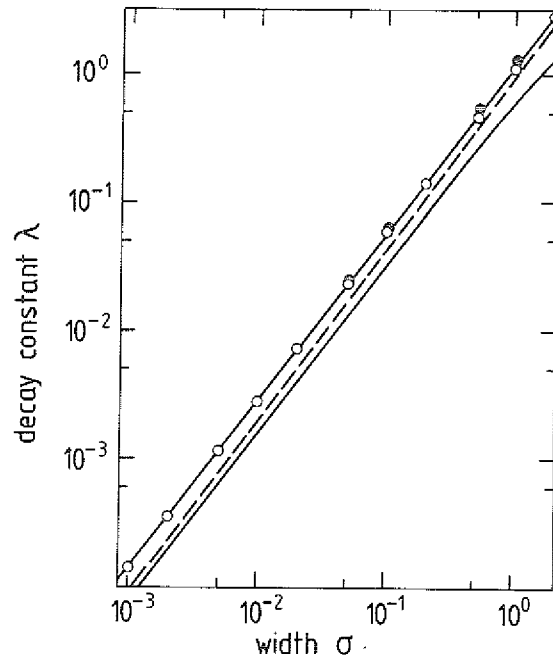


Bild II.5: Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ des asymptotisch einfach-exponentiellen Polarisationszerfalls von der Breite σ . $\circ$ (diskretes Modell) und $\square$ (kontinuierliches Modell): Resultate numerischer Simulationen. Gestrichelte Linie: Gl. (II.30) [durchgezogene Linie: Resultat der Effektive-Medium-Theorie].

Depolarisation bei allen Werten von σ asymptotisch einem einfach-exponentiellen Zerfall annähert, vgl. Bild II.4, in dem die Resultate für P_n und $P(t)$ bei zwei typischen Werten von σ gezeigt sind. Zum Vergleich sind einige Datenpunkte miteingezeichnet, die nach der ersten oben erwähnten Methode gewonnen wurden.

Gl. (II.29) beschreibt das asymptotisch führende Verhalten der Depolarisation in der Näherung (II.24). Die für den Vergleich mit den Simulationen sinnvolle Größe ist daher die Zerfallskonstante

$$\lambda = 3 \times 2^{-5/3} \sigma^{4/3} \quad (II.30)$$

des einfach-exponentiellen Zerfalls dieses Ausdrucks. Bild II.5 zeigt in doppelt-logarithmischer Auftragung die Abhängigkeit der Zerfallskonstanten von der Breite σ der Frequenzverteilung. Die Steigung der Geraden durch die Datenpunkte der numerischen Simulation beträgt $1,30 \pm 0,02$ und liegt damit nah bei dem theoretischen Wert von $\frac{4}{3}$ in Gl. (II.30).

II.2.4. ZUSAMMENHANG ZWISCHEN KONTINUIERLICHER UND DISKRETER DEPOLARISATION

Es stellt sich die Frage, inwieweit sich die Ergebnisse für die Depolarisation P_n des diskreten Random Walks auf das kontinuierliche Modell übertragen lassen, in dem die Sprünge nicht in zeitlich konstanten Abständen $\tau (\equiv 1)$, sondern in einem Poisson-Prozeß mit Sprungrate τ^{-1} bzw. mittlerer Wartezeit τ erfolgen. Eine naheliegende Annahme wäre, daß — wie dies z.B. für typische RW-Größen wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten oder die mittlere Zahl der besuchten Plätze entsprechend der Fall ist — P_n und $P(t)$ bei großen Schrittzahlen n bzw. Zeiten t übereinstimmen, wenn man die Umrechnung $t \leftrightarrow n\tau$ zugrundelegt. Bereits der Vergleich der Ergebnisse des Strong-Collision-Modells (II.10a, b) zeigt jedoch, daß diese Annahme nicht gerechtfertigt ist; auch die Resultate der Simulationen, siehe Bild II.4 und Bild II.5, machen dies deutlich. Der Grund liegt darin, daß beim Depolarisationsproblem die für die Mittelung entscheidende Größe, die akkumulierte Phase φ der Spinrotation, nicht nur davon abhängt, wieviele Frequenzen wieoft besucht werden, sondern auch davon, wie *lange* jeder einzelne Besuch dauert. Daß Fluktuationen in den Wartezeiten zu einem schnelleren Zerfall führen, kann beim Strong-Collision-Modell unmittelbar, beim Random-Walk-Modell (wiederum) unter der Annahme, daß alle Plätze gleichoft besucht werden, einsichtig gemacht werden [29, 40]. Der Einfluß dieser Fluktuationen kann unter dieser Annahme (die beim Strong-Collision-Modell trivialerweise erfüllt ist) auch quantitativ abgeschätzt werden; man findet:

$$P(t) \approx P_n \exp \left[-\frac{1}{2}(\sigma\tau)^2 n \right] \quad (\sigma\tau \ll 1, n = t/\tau \gg 1) \quad (II.31)$$

[vgl. (II.10a, b)]. Die Depolarisation $P(t)$ des kontinuierlichen Random Walks zerfällt im Rahmen dieser Näherung also exponentiell mit der Zerfallskonstanten $\lambda + \sigma^2/2$ ($\tau \equiv 1$), wobei λ durch (II.30) gegeben ist. Daß die Zerfallskonstante somit proportional zu

$$\sigma^{4/3}(1 + \text{const} \times \sigma^{2/3})$$

sein sollte, liefert eine zumindest plausible Erklärung dafür, daß sich die Zerfallskonstanten des kontinuierlichen Modells denen des diskreten Modells mit kleiner werdendem σ immer mehr annähern (Bild II.5). Bei hinreichend kleinem σ erwartet man also auch im kontinuierlichen Modell die Abhängigkeit

$$\lambda = \text{const} \times \sigma^\beta \quad (II.32)$$

mit $\beta \approx \frac{4}{3}$. Anzumerken ist, daß die Effektive-Medium-Theorie (vgl. Abschnitt II.4), die in Bild II.5 miteingezeichnet ist, im Grenzfall $\sigma \ll 1$ ebenso wie Gl. (II.30) im diskreten Fall einen Wert von exakt $\frac{4}{3}$ liefert. Dieser Exponent β unterscheidet sich deutlich vom Wert $\beta = 2$, der im gaußschen Standard-Modell, Gl. (I.3), wie auch im Strong-Collision-Modell auftritt. Beschreibt man den Polarisationszerfall auf der realen (unskalierten) Zeitachse, so schreibt sich die (II.32) entsprechende Zerfallskonstante als $\lambda = \text{const} \times \sigma(\sigma\tau)^{\beta-1}$, d.h., daß der Parameter τ mit einem Exponenten von $\approx \frac{1}{3}$ eingeht. Die experimentelle Relevanz ist prinzipiell die folgende: Kennt man die Temperaturabhängigkeit von τ , z.B. aus unabhängigen Messungen der Diffusionskonstanten, so ergibt sich die Möglichkeit, durch Variation der Temperatur die Abhängigkeit der Zerfallskonstanten von der Breite σ , d.h. β , zu bestimmen. Anzumerken ist, daß die dimensionslose Kombination $(\sigma\tau)^{1/3}$ auch im Resultat der gaußschen Näherung (s. Ref. 26) identifiziert werden kann; sie tritt zudem auch in der Theorie von Reiter und Boucher auf [31].

Erwähnt werden sollen an dieser Stelle noch Arbeiten, in denen die Depolarisation von Spins untersucht worden ist, die auf einem *endlichen* Gitter der Länge L — ebenfalls mit gaußverteilten Frequenzen — Random Walk ausführen. Mazo und Van den Broeck [63] fanden einen asymptotisch exakten Ausdruck für die Depolarisation dieses Modells, der Korrekturen zum führenden Verhalten — das durch einen gaußschen Zerfall mit reduzierter Breite $\sigma/\sqrt{L}$ gegeben ist — beinhaltet. Eine für die analytische Behandlung bedeutsame Eigenschaft dieses Modells ist, daß der Prozeß $\omega(t)$ im asymptotischen Bereich, d.h. bei Zeiten $t \gg L^2\tau$, gaußisch wird. Ihre numerischen Simulationen bestätigen unsere Resultate insoweit, als daß sie (bei geeigneten Parametern) den von uns gefundenen einfach-exponentiellen Zerfall in einem intermediären Zeitbereich $\tau \ll t \ll L^2\tau$, in dem die Teilchen die Endlichkeit des Gitters noch nicht bemerken, beobachtet haben. Während sich die o.g. Arbeit auf den kontinuierlichen Random Walk beschränkt, haben Maes und Van den Broeck [64] das Modell insoweit verallgemeinert, als daß sie dieses für eine ganze Klasse von möglichen Sprungprozessen diskutieren, die den diskreten wie auch den kontinuierlichen Random Walk als Grenzfälle beinhalten. In Übereinstimmung mit unseren Resultaten zeigt diese Arbeit in besonders schöner Weise, wie die Depolarisation mit zunehmendem Grad an kontinuierlichem Verhalten immer schneller zerfällt.

II.3. VERSCHIEDENE FREQUENZVERTEILUNGEN

Die bisherigen Resultate für die Depolarisation sind unter der Annahme hergeleitet worden, daß die lokalen Rotationsfrequenzen ω_r gaußverteilt sind. Es ist bereits erwähnt worden, daß eine solche Näherung im allgemeinen eine gute Beschreibung der tatsächlichen Verteilung der lokalen magnetischen Felder in Kristallen liefert, wenn diese auf Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zurückgeführt werden können (van Vleck [15]). Da hier jedoch der Depolarisationszerfall in sehr detaillierter Weise diskutiert wird (z.B. Zerfälle bis zur Größenordnung 10^{-9}), stellt sich die Frage, inwieweit dieses Verhalten von der expliziten Annahme einer Gaußverteilung abhängt. In der vorliegenden Arbeit soll dieser Frage in der Weise nachgegangen werden, daß — speziell für den eindimensionalen Fall — andere Typen von Verteilungen betrachtet und die entsprechenden Polarisationszerfälle im Vergleich mit dem im gaußschen Fall diskutiert werden.

Ein Beispiel dafür, daß in Abhängigkeit von der Frequenzverteilung ein Verhalten der Depolarisation möglich ist, das sich in drastischer Weise von dem üblicherweise zu erwartenden (Stichwort "motional narrowing") unterscheidet, ist das der Cauchy- oder Lorentzverteilung

$$g(\omega) = \frac{\delta}{\pi} (\delta^2 + \omega^2)^{-1} \quad (\delta > 0) .$$

Im Fall dieser Verteilung ist der Polarisationszerfall vollkommen unabhängig davon, ob oder wieviele verschiedene Frequenzen im Laufe der Zeit angenommen werden [65]; er ist stets, ob die rotierenden Spins diffundieren oder nicht, durch

$$P(t) = \exp(-\delta t)$$

gegeben. (In der Spinresonanztheorie ist dieser Effekt als "total absence of motional narrowing" bekannt.) Die Frage nach dem Einfluß von Random-Walk-Prozessen auf die Depolarisation ist somit für die Cauchy-Verteilung völlig irrelevant.

Nachfolgend werden drei verschiedene Beispiele von Verteilungen betrachtet, die mit der Gaußverteilung (II.1) in Mittelwert $\langle \omega \rangle = 0$ und Varianz σ übereinstimmen, sich aber bezüglich ihrer (nichtverschwindenden, endlichen) höheren Momente unterscheiden. Als erstes Beispiel wird die symmetrische Exponentialverteilung

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma} \exp(-\sqrt{2}|\omega|/\sigma) \quad (II.33)$$

diskutiert, wobei die resultierende Depolarisation detaillierter untersucht werden soll als im Fall der anderen Beispiele (konstante bzw. Rechteck-Verteilung, dichotomische Verteilung) [66].

II.3.1. SYMMETRISCHE EXPONENTIALVERTEILUNG

Der statische Polarisationszerfall ortsfester Spins ergibt sich unmittelbar über die Berechnung der charakteristischen Funktion $\hat{g}$ der Verteilung (II.33), vgl. Gl. (II.3):

$$P^{stat}(t) = \hat{g}(t) = (1 + \frac{1}{2}\sigma^2 t^2)^{-1}. \quad (II.34)$$

Hervorzuheben ist, daß der *asymptotische* Zerfall nun algebraisch ist, d.h. bedeutend langsamer als im Fall einer gaußschen Verteilung. Der *anfängliche* Zerfall von $P(t)$, d.h. das Verhalten für Zeiten $t \ll \sigma^{-1}$, ist durch $1 - \frac{1}{2}\sigma^2 t^2$ gegeben und unterscheidet sich somit nicht vom Kurzzeitverhalten bei gaußscher Verteilung mit gleichem σ .

Allgemein läßt sich leicht einsehen, daß jede beliebige Frequenzverteilung mit Mittelwert $\langle \omega \rangle = 0$ und Varianz σ^2 einen anfänglichen Polarisationszerfall $P(t) \approx 1 - \frac{1}{2}\sigma^2 t^2$ für $t \ll \sigma^{-1}$ zur Folge hat. Deutlich wird dies an der Kumulantenentwicklung der charakteristischen Funktion $\hat{g}$, die sich unter diesen beiden Bedingungen in der folgenden Form schreiben läßt:

$$\ln \hat{g}(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} K_{2m}(\sigma x)^{2m} = -\frac{1}{2}\sigma^2 x^2 + \frac{1}{4!}K_4(\sigma x)^4 - + \dots \quad (II.35)$$

mit (dimensionslosen) $K_{2m} \equiv \langle \omega^{2m} \rangle_c / \sigma^{2m}$ ($m = 1, \dots, \infty$). Diese Entwicklung kann für Näherungen für $\hat{g}(x)$ herangezogen werden, wenn $\sigma x \ll 1$, und damit für das anfängliche Verhalten der statischen Depolarisation $P(t) = \hat{g}(t)$.

Wie Gl. (II.34) beispielhaft verdeutlicht, hängt der asymptotische Polarisationszerfall im statischen Fall explizit von der Form der jeweiligen Verteilung ab. Die Frage ist, inwieweit sich dies auch in der Depolarisation von Spinteilchen widerspiegelt, die Random Walk ausführen. Die Diskussion dieser Frage wird sich der Einfachheit halber auf das Modell des diskreten Random Walks beschränken, in dem die Depolarisation beim n -ten Schritt durch

$$P_n = \left\langle \prod_r \hat{g}(h_r) \right\rangle$$

gegeben ist [vgl. (II.6)].

Das Verhalten von P_n soll im Rahmen der Näherung untersucht werden, die bereits im gaußschen Fall, Gl. (II.24), eingeführt wurde und darin besteht, daß die Besuchszahlen $h_r(n)$ aller s verschiedenen besuchten Plätze durch $\frac{n}{s}$ ersetzt werden. Ausgangspunkt ist somit

$$P_n \approx \sum_{s=2}^n W_n(s) C_n(s), \quad (II.36)$$

wobei wie zuvor $W_n(s)$ die Spanverteilung des n -Schritt Random Walks bezeichnet und $C_n(s)$ den sich in dieser Näherung ergebenden Beitrag eines Walks mit Span s . Allgemein gilt:

$$C_n(s) = [\hat{g}(n/s)]^s = \exp\{-s \ln \hat{g}(n/s)\}. \quad (II.37)$$

Im Fall der Gaußverteilung ist $C_n(s) = \exp[-\sigma^2 n^2 / (2n)]$ eine monoton steigende Funktion von s , was die Tendenz widerspiegelt, daß zunehmende "Mobilität" einen langsameren Polarisationszerfall zur Folge hat. Für beliebige Verteilungen g soll zum Vergleich Gl. (II.35) herangezogen werden, die eine Näherung für $\sigma n / s \ll 1$ liefert:

$$C_n(s) \approx \exp \left[-\frac{1}{2} \sigma^2 \frac{n^2}{s} + \frac{1}{4!} K_4 \sigma^4 \frac{n^4}{s^3} + s \cdot O[(\sigma \frac{n}{s})^6] \right]. \quad (II.38)$$

Nur für $\sigma \ll 1$ gibt es einen gewissen Bereich von s -Werten ($\sigma n \ll s \leq n$), in dem sich $C_n(s)$ ähnlich wie im gaußschen Fall verhält. Wenn $\sigma \gg 1$ ist — dann ist $s \ll \sigma n$ für alle s -Werte —, wird das Verhalten von C_n von dem von $\hat{g}(x)$ für große x bestimmt. Betrachten wir dazu explizit die Exponentialverteilung (II.33) mit der charakteristischen Funktion (II.34); es folgt:

$$C_n(s) = \exp \left[-s \ln \left(1 + \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{n^2}{s^2} \right) \right]. \quad (II.39)$$

Zuerst soll folgende Eigenschaft von C_n festgehalten werden: $C_n(s)$ hat ein (einziges) Minimum bei $s_0 = k\sigma n$; die Konstante k kann numerisch berechnet werden und ist durch $k \approx 0,357$ gegeben. Es gibt also zwei unterschiedliche Bereiche; C_n wächst (wie im gaußschen Fall) monoton mit s , wenn $s > s_0$, aber fällt monoton mit s , wenn $s < s_0$. Die Frage, welcher dieser beiden Bereiche letztlich für das Verhalten von P_n relevant ist, erfordert eine detaillierte Betrachtung verschiedener Fälle.

(a) $\sigma \gg 1$

In diesem Fall (d.h. präziser ausgedrückt, wenn $\sigma \geq k^{-1}$, so daß $s_0 \geq n$) ist C_n auf dem ganzen Bereich möglicher s -Werte monoton fallend. Im Gegensatz zum Fall der gaußschen Verteilung liefern nun "kontrahierte" Walks die größten individuellen Beiträge. Da C_n auf $\{2, \dots, n\}$ zudem konvex ist, kann die Ungleichung von Jensen, Gl. (II.18), benutzt werden, um eine untere Schranke für P_n zu erhalten: $P_n = \langle C_n(s) \rangle \geq C_n(\langle s \rangle)$. Mit dem asymptotischen Resultat $\langle s \rangle \sim (8n/\pi)^{1/2}$ für die mittlere Zahl der besuchten Plätze in $d = 1$ [Gl. (II.25)] schreibt sich diese Ungleichung in der Form

$$P_n \geq \exp \left[- \left(\frac{8n}{\pi} \right)^{1/2} \ln \left(1 + \frac{\pi \sigma^2}{16} n \right) \right] \\ \underset{n \gg 1}{\approx} \exp \left[- \text{const} \times n^{1/2} \ln(\sigma^2 n) \right], \quad n \gg 1. \quad (\text{II.40})$$

Man findet somit als bemerkenswertes Resultat, daß die symmetrische Exponentialverteilung eine Depolarisation zur Folge hat, die — zumindest in der Näherung (II.36) — *langsamer* als exponentiell zerfällt. Um zu einer Aussage über den tatsächlichen Polarisationszerfall in dieser Näherung zu gelangen, soll ausgenutzt werden, daß das führende Verhalten dieses Zerfalls von der Lage s_m des Maximums des Produkts $f_n = W_n C_n$ abhängt. Da hier kontrahierte Walks besonders wichtig sind, wird ein Ausdruck für $W_n(s)$ benutzt, der speziell für die Beschreibung der Spanverteilung auf der linken Flanke, d.h. für Werte $s \lesssim \langle s \rangle$, geeignet ist; für unsere Zwecke genügt es, nur den ersten Term der Summe, durch die dieser Ausdruck gegeben ist (Gl. (23) in Ref. [62]), mitzunehmen:

$$W_n(s) \sim \frac{8n}{s^3} \left(\frac{\pi^2 n}{s^2} - 1 \right) \exp \left(- \frac{\pi^2 n}{2s^2} \right). \quad (\text{II.41})$$

Um das Maximum s_m von f_n zu bestimmen, schreiben wir f_n formal in der Form $f_n(s) = \exp[-\varphi(s)]$; die Bedingung $\varphi'(s_m) = 0$ liefert dann die gesuchte Größe. Indem man nur die Beiträge berücksichtigt, die für das führende Verhalten im Grenzfall $n \rightarrow \infty$ relevant sind, erhält man:

$$\varphi(s) \approx \frac{\pi^2 n}{2s^2} + s \ln \left(\frac{\sigma^2 n^2}{2s^2} \right), \\ \frac{\pi^2}{s_m^3} \approx \ln \left(\frac{\sigma^2 n^2}{2s_m^2} \right). \quad (\text{II.42})$$

Sattelpunkts-Integration liefert $P_n \sim f_n(s_m) = \exp[-\varphi(s_m)]$ in führender Ordnung in n . Mit der Definition $x \equiv n/s_m^2$ kann $\varphi(s_m)$ als $(3\pi^2/2)x$ geschrieben werden; die Größe x wird durch

$$\pi^2 x^{3/2} = n^{1/2} \ln(\frac{1}{2} \sigma^2 n x) \quad (II.43)$$

bestimmt. Diese Gleichung reduziert sich mit dem Ansatz $x = \pi^{-4/3} n^{1/3} h(y)$, wobei $y \equiv \sigma^{3/2} n$, zu

$$h^{3/2}(y) = \ln[\frac{1}{2} y^{4/3} h(y)] , \quad (II.44)$$

woraus sich für das führende Verhalten von h ergibt:

$$h(y) \sim \left(\frac{4}{3}\right)^{2/3} \ln^{2/3}(y) . \quad (II.45)$$

Somit erhält man im Grenzfall $n \rightarrow \infty$

$$P_n \sim \exp \left[-(6\pi^2)^{1/3} n^{1/3} \ln^{2/3}(\sigma^{3/2} n) \right] , \quad (II.46)$$

d.h. einen im Vergleich zu einem Verhalten der Form $P_n \sim \exp(-\lambda n)$ extrem langsamen Polarisationszerfall bei großen Schrittzahlen n . Allerdings ist die Polarisation P_n bei den Schrittzahlen, für die die zu Gl. (II.46) führende Näherung gerechtfertigt ist, schon extrem klein, so daß kaum erwartet werden kann, daß dieses Verhalten in numerischen Simulationen beobachtet werden kann. Nichtsdestoweniger sollte aber eine entsprechende qualitative Tendenz deutlich werden.

(b) $\sigma \ll 1$

In diesem Fall ist die Behandlung nicht so einfach wie für $\sigma \gg 1$, da nun das Minimum $s_0 = k\sigma n$ von C_n im Bereich $\{2, 3, \dots, n\}$ der für einen n -Schritt Random Walk möglichen s -Werte liegt, so daß im Prinzip beide Flanken von C_n , d.h. die monoton fallende wie die monoton steigende, von Bedeutung sein können. In Abhängigkeit von der Lage von s_0 relativ zur Lage des Maximums von $W_n(s)$, das sich ungefähr bei $\langle s \rangle \sim (8n/\pi)^{1/2}$ befindet, lassen sich zwei verschiedene Fälle unterscheiden; n^* sei die Schrittzahl, bei der beide Größen zusammenfallen, d.h. bei der $s_0 \approx \langle s \rangle$:

$$n^* = \frac{8}{\pi k^2} \sigma^{-2} \approx 20 \sigma^{-2} . \quad (II.47)$$

(i) Ist $n \ll n^*$, also dementsprechend $s_0 \ll \langle s \rangle$, so dominiert die monoton steigende Flanke von C_n das Verhalten der Depolarisation P_n . Die Funktion f_n hat (vergleichbar zur Situation im Fall der Gaußverteilung) ein ausgeprägtes Maximum s_m jenseits des Maximums von W_n ; Bild II.6a zeigt diese Situation für die Parameter $\sigma = 0,2$ und $n = 200$ ($n^* \approx 500$). Um die Größe von f_n an diesem Maximum, d.h. $f_n(s_m)$, zu bestimmen, wird in Analogie zur entsprechenden Behandlung im gaußschen Fall der Näherungsausdruck

$$W_n(s) \sim \frac{8}{\sqrt{2\pi n}} \exp(-s^2/n)$$

benutzt, der das Verhalten der Spanverteilung auf der rechten Flanke beschreibt, vgl. Gl. (II.28). Wenn die hier relevanten s -Werte (s größer als $\langle s \rangle$) zudem der Bedingung $\sigma n/s \ll 1$ genügen, kann die Berechnung von $f_n(s_m)$ durch Zuhilfenahme der Entwicklung (II.38) vereinfacht werden [— diese Bedingung ist z.B. dann erfüllt, wenn bereits $\sigma n/\langle s \rangle \ll 1$ gilt]. In niedrigster Ordnung, in der $C_n(s)$ durch $\exp[-\sigma^2 n^2/(2s)]$ approximiert wird, erhält man offensichtlich die Resultate, die bereits, vgl. (II.29), für die Gaußverteilung hergeleitet wurden:

$$\begin{aligned} s_m &\approx 2^{-1/3} \sigma^{2/3} n, \\ P_n &\sim \exp(-\lambda n), \quad \lambda = 3 \times 2^{-5/3} \sigma^{4/3}. \end{aligned} \quad (II.48)$$

Der Einfluß der nächsthöheren Ordnung in (II.38) kann zumindest näherungsweise behandelt werden; hier sollen die Korrekturen zu (II.48) betrachtet werden, wie sie sich in niedrigster Ordnung in σ ergeben. Als Resultat für die Lage des Maximums ergibt sich

$$s'_m \approx s_m \left(1 - \frac{1}{4!} K_4 2^{5/3} \sigma^{2/3}\right). \quad (II.49)$$

Konkret ist für die Verteilung (II.33) die Größe $K_4 = \langle \omega^4 \rangle^c / \sigma^4 = 3$ positiv, vgl. Bild II.6. Analog erhält man für die Zerfallskonstante

$$\lambda' = \lambda \left(1 - \frac{1}{9} K_4 2^{-1/3} \sigma^{2/3}\right). \quad (II.50)$$

Die hier betrachtete Näherung läßt somit für die Zerfallskonstante, die den exponentiellen Zerfall in einem gewissen Schrittzahlbereich $n \ll n^*$ beschreibt, einen Wert erwarten, der etwas kleiner ist als der im Fall einer Gaußverteilung mit gleicher Breite σ .

(ii) Betrachten wir nun das Verhalten bei größeren Schrittzahlen n . Bei Schrittzahlen $n \gtrsim n^*$ bildet f_n ein zweites Maximum links vom Maximum von $W_n(s)$ aus, das mit

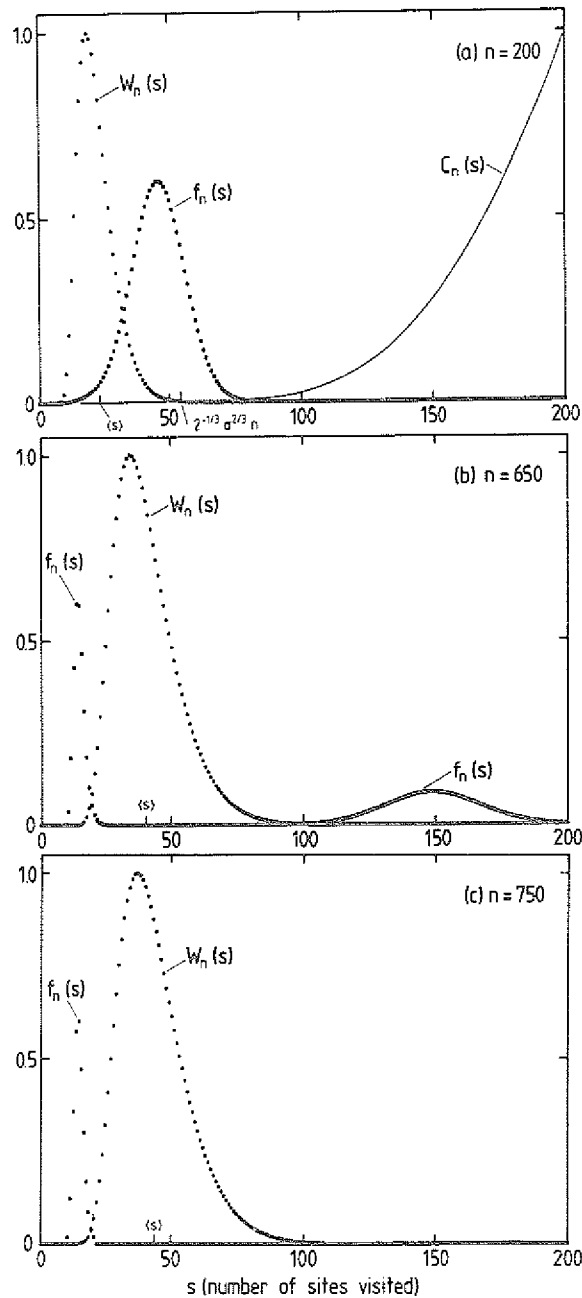


Bild II.6: Verteilung $W_n(s)$ der Zahl s der verschiedenen Plätze, die in einem n -Schritt Random Walk besucht werden ($d = 1$), Beitrag $C_n(s)$ eines Walks zur Depolarisation [Gl. (II.39), nur in (a)], und $f_n(s) = W_n(s)C_n(s)$ für die symmetrische Exponentialverteilung (II.33) mit Breite $\sigma = 0,2$ (willkürliche Einheiten).
(a)–(c): Darstellung für verschiedene Schrittzahlen n .

wachsendem n immer mehr ausgeprägt wird, während das erste langsam verschwindet, vgl. Bild II.6(b) — was bedeutet, daß nun die Walks für die Depolarisation bedeutsam werden, die im Vergleich zu den typischen Walks mit $s \approx \langle s \rangle$ kontrahiert

sind. Bei noch größeren Schrittzahlen $n \gg n^*$, bei denen sich das Minimum von C_n weit jenseits des Maximums von W_n befindet, sind es nur noch diese Walks, die effektiv zur Depolarisation beitragen, vgl. Bild II.6. Diese Situation entspricht gerade der, die bereits für $\sigma \gg 1$ diskutiert wurde, und man erwartet dementsprechend auch jetzt, d.h. bei kleinen Werten von σ , einen asymptotischen Polarisationszerfall der Form $\exp[-\text{const} \times n^{1/3} \ln^{1/3}(\sigma^{3/2} n)]$, vgl. Gl. (II.46).

Es soll darauf hingewiesen werden, daß die Schrittzahl n^* natürlich nur eine ungefähre Abschätzung für die tatsächliche Schrittzahl ist, bei der [in der Näherung (II.36)] der Übergang zum nicht-einfach-exponentiellen Zerfall einsetzt. Nichtsdestoweniger kann n^* dazu dienen, eine grobe Abschätzung für die Größe von P_n in diesem Übergangsbereich und deren Abhängigkeit von σ anzugeben. In diesem Sinne liefert die Kombination von (II.48) mit (II.47)

$$P_n \approx \exp(-3 \times 2^{1/3} \pi^{-1} k^{-2} \sigma^{-2/3}) . \quad (\text{II.51})$$

Es ist also zu erwarten, daß mit immer kleiner werdendem σ der Übergang schließlich bei unmeßbar kleinen Werten von P_n auftritt, so daß man dann nur noch den einfach-exponentiellen Zerfall beobachtet.

II.3.2. RECHTECK- UND DICHOTOMISCHE FREQUENZVERTEILUNG

In diesem Abschnitt sollen kurz zwei weitere Beispiele für Frequenzverteilungen diskutiert werden. Das erste Beispiel ist das der konstanten oder Rechteck-Verteilung, die folgendermaßen definiert ist:

$$g_R(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2}(\sqrt{3}\sigma)^{-1} & \text{für } -\sqrt{3}\sigma \leq \omega \leq \sqrt{3}\sigma , \\ 0 & \text{sonst .} \end{cases} \quad (\text{II.52})$$

[Beachte: Die Kombination $\sqrt{3}\sigma$ ist Folge der Forderung $\langle \omega^2 \rangle = \sigma^2$.] Ihre charakteristische Funktion ist

$$\hat{g}_R(x) = \frac{\sin(\sqrt{3}\sigma x)}{\sqrt{3}\sigma x} . \quad (\text{II.53})$$

Als zweites Beispiel beschreibt die dichotomische Verteilung die Situation, in der die lokalen Rotationsfrequenzen nur die beiden möglichen Werte $\omega = \pm\sigma$ annehmen können:

$$g_D(\omega) = \frac{1}{2}[\delta(\omega + \sigma) + \delta(\omega - \sigma)] , \quad (\text{II.54})$$

$$\hat{g}_D(x) = \cos(\sigma x) . \quad (\text{II.55})$$

Eine charakteristische Eigenschaft beider Verteilungen ist, daß sie zu Oszillationen der statischen Depolarisation $P(t) = \hat{g}(t)$ führen. Der Konvergenzbereich der Kumulantenentwicklung (II.35) für $\hat{g}$, die nur für Argumente x mit $\hat{g}(x) > 0$ wohldefiniert ist, ist in beiden Fällen eingeschränkt; er ist gegeben durch $|x| < x_c$, mit $x_c = \pi(\sqrt{3}\sigma)^{-1}$ für g_R bzw. $x_c = \pi(2\sigma)^{-1}$ für g_D . Weiterhin zeigt ein Vergleich mit (II.34), daß der Zerfall der Amplituden von $\hat{g}(t)$ für $t \rightarrow \infty$ noch langsamer ist als der im Fall der Exponentialverteilung (II.33); bei der dichotomischen Verteilung tritt sogar überhaupt kein Amplitudenzerfall auf. Hieraus läßt sich bereits schließen, daß auch bei diesen beiden Verteilungen solche Walks für die Depolarisation besonders wichtig sind, die nur wenige verschiedene Plätze besuchen.

Für die Diskussion des Polarisationszerfalls durch Random Walk ist bedeutsam, daß der individuelle Beitrag eines einzelnen Walks mit s verschiedenen besuchten Plätzen, $C_n(s) = [\hat{g}(n/s)]^s$, ebenfalls negative wie positive Werte annehmen kann. Es lassen sich zwei Bereiche unterscheiden: Bei Werten von s mit $s > s_c \equiv nx_c^{-1}$ bestimmt das Verhalten von $\hat{g}(x)$ für $x < x_c$ das Verhalten von C_n ; die Funktion C_n ist in diesem Bereich positiv und steigt monoton mit s von $C_n(s_c) = 0$ bis $C_n(n) = [\hat{g}(1)]^n$ an. Im Bereich $s < s_c$ wird das Verhalten von C_n im wesentlichen von "Oszillationen" bestimmt, die — anschaulich ausgedrückt — mit kleiner werdendem s immer schneller werden. In Analogie zur Diskussion im Fall der Exponentialverteilung sind nun wiederum zwei unterschiedliche Situationen für das Verhalten von P_n von Bedeutung, wobei sich diese nun auf die relative Lage von s_c und $\langle s \rangle$ beziehen. In Entsprechung zur Definition von n^* im vorhergehenden Abschnitt führen wir die Schrittzahl n_c ein, bei der gerade $s_c = \langle s \rangle$ gilt; n_c ist durch $(8\pi/3)\sigma^{-2}$ (g_R) bzw. $2\pi\sigma^{-2}$ (g_D) gegeben. Die Situation, in der $s_c \gg \langle s \rangle$ ist, also $n \gg n_c$, ist für den asymptotischen Polarisationszerfall bei beliebigen Werten von σ (insbesondere natürlich für den bei $\sigma \gg 1$) relevant. Da hier die Oszillationen von C_n eine wesentliche Rolle spielen, können einfache Sattelpunktsargumente allerdings nicht angewandt werden; die Depolarisation nimmt sowohl positive wie negative Werte an. Auf jeden Fall läßt sich aber annehmen, daß der Zerfall der Amplituden von P_n langsamer als der asymptotische Polarisationszerfall der Exponentialverteilung sein sollte.

Für $\sigma \ll 1$ und $n \ll n_c$ (also $s_c \ll \langle s \rangle$) entspricht die Situation im wesentlichen der oben diskutierten für $\sigma \ll 1$ und $n \ll n^*$; tatsächlich können die gleichen Argumente angewandt werden. Wenn zusätzlich $\sigma n / \langle s \rangle \ll 1$ erfüllt ist, kann wiederum die Ent-

wicklung (II.35) für C_n benutzt werden. Hier soll direkt auf das Resultat (II.50) Bezug genommen werden, in dem — in niedrigster Ordnung in σ — Unterschiede zwischen den verschiedenen Verteilungen in der Zerfallskonstanten des resultierenden exponentiellen Zerfalls $P_n \sim \exp(-\lambda' n)$ deutlich werden: $\lambda' = \lambda(1 - \text{const} \times K_4 \sigma^{2/3})$. K_4 ist im Fall der Rechteckverteilung g_R (II.52) durch $-\frac{6}{5}$, in dem der dichotomischen g_D (II.54) durch -2 gegeben. Somit sind im Gegensatz zur Exponentialverteilung Zerfallskonstanten zu erwarten, die etwas größer sind als die, die den exponentiellen Polarisationszerfall bei gaußverteilten Frequenzen beschreibt.

II.3.3. VERGLEICH MIT NUMERISCHEN SIMULATIONEN

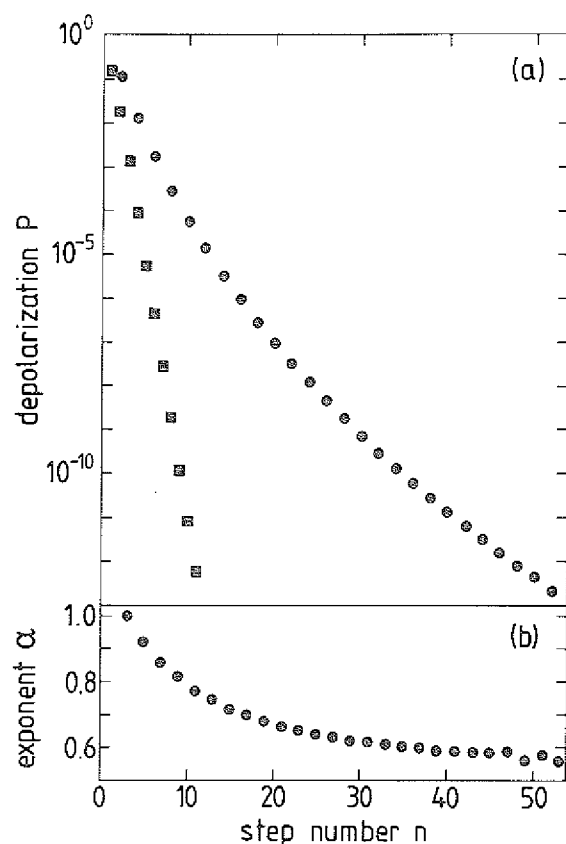


Bild II.7: (a) Depolarisation durch Random Walk auf eindimensionaler Kette mit exponentiell verteilten Frequenzen [vgl. (II.33)], Breite $\sigma = 2,0$ (•, Simulation). Zum Vergleich: Depolarisation bei gaußverteilten Frequenzen (■, Simulation).

(b) Effektiver Exponent α , definiert durch $P_n = \exp(-\text{const} \times n^\alpha)$.

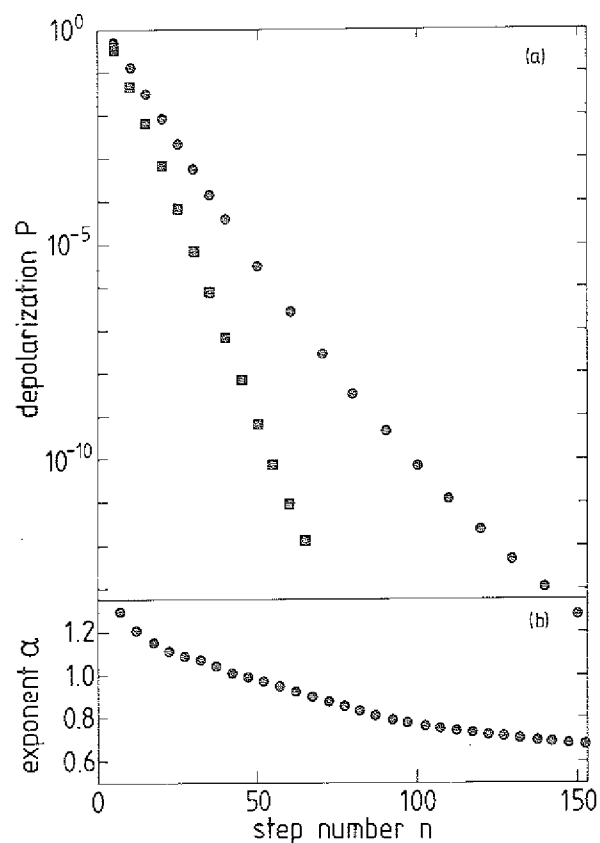


Bild II.8: Vgl. Bild II.7. Die Breite σ ist hier 0,5.

Die vorhergehenden Betrachtungen und Resultate basieren auf der Näherung (II.36), die im Fall der gaußschen Frequenzverteilung eine wenn auch nicht quantitativ, so doch qualitativ richtige Beschreibung der Depolarisation lieferte. Die Frage bleibt, inwieweit das auch für die drei anderen hier untersuchten Verteilungen gilt. Aus diesem Grund wurde für diese Verteilungen die Depolarisation P_n des diskreten Random Walks mittels numerischer Simulationen untersucht — wobei jedoch nicht beabsichtigt war, diese ebenso detailliert durchzuführen wie im Fall der Gaußverteilung, da hier das hauptsächliche Interesse auf eine qualitative Verifizierung der Vorhersagen in den vorigen Abschnitten gerichtet sein soll.

Bild II.7(a) zeigt die Depolarisation P_n der exponentiellen Verteilung mit Breite $\sigma = 2,0$ im Vergleich zu der im gaußschen Fall. Bereits bei kleinen Schrittzahlen n ist deutlich erkennbar, daß der Zerfall langsamer als einfach-exponentiell ist; der in

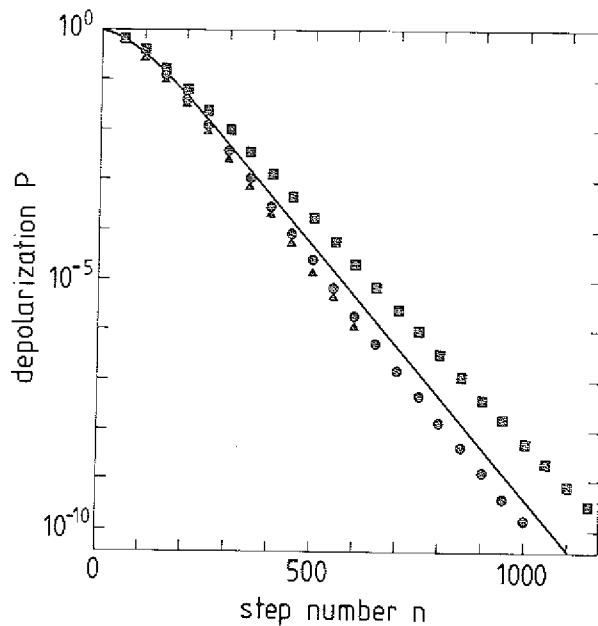


Bild II.9: Depolarisation durch diskreten Random Walk auf eindimensionaler Kette mit exponentieller ($\square$), konstanter ($\circ$) und dichotomischer ($\triangle$) Frequenzverteilung, zum Vergleich: Gaußverteilung (—), jeweils mit Breite $\sigma = 0,02$ (Simulationen).

Bild II.7(b) dargestellte effektive Exponent α , definiert durch $\ln P_n = \text{const} \times n^\alpha$, verdeutlicht dieses Verhalten in besonderer Weise. Der erwartete asymptotische Zerfall, Gl. (II.46), entspricht einem asymptotischen Wert von $\alpha = \frac{1}{3}$. Bild II.7(b) macht beispielhaft die Schwierigkeit deutlich, dieses Verhalten in Simulationen zu sehen bzw. zu verifizieren. Bild II.8 zeigt die entsprechenden Resultate für $\sigma = 0,5$. Bei diesem Wert von σ gibt es nur einen kleinen Schrittzahl-Bereich, in dem der Polarisationszerfall durch eine einfache Exponentialfunktion approximiert werden kann [$\alpha(n) \approx 1,0$ bei $n = 45$; beachte, daß $n^* = 80$]. Demgegenüber zeigt das Ergebnis für $\sigma = 0,02$ (Bild II.9) einen annähernd einfach-exponentiellen Zerfall über mehrere Dekaden; in Übereinstimmung mit den Erwartungen setzt der Übergang zu nicht-exponentiellem Zerfall erst bei sehr kleinen Werten von P_n ein. Für einige Werte von σ sind die Zerfallskonstanten λ des Bereichs des exponentiellen Zerfalls bestimmt worden. Wie Bild II.10 zeigt, sind diese — in qualitativer Übereinstimmung mit Gl. (II.50) und positivem K_4 — kleiner als die entsprechenden Zerfallskonstanten in Fall einer gaußschen Frequenzverteilung; der Unterschied verringert sich mit kleiner werdendem σ .

Im Fall der beiden anderen Verteilungen (II.52, 54) zeigen die Resultate der Simula-

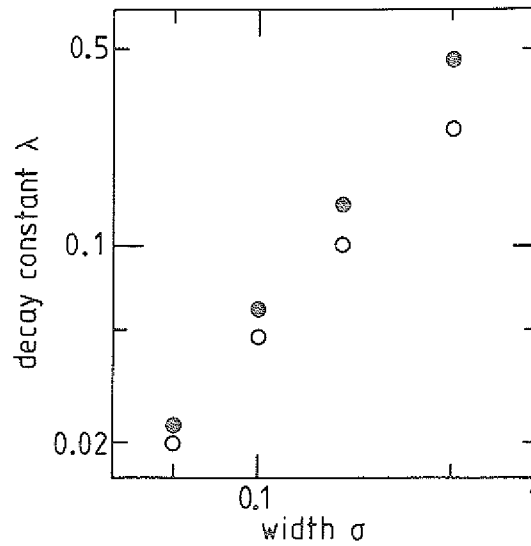


Bild II.10: Zerfallskonstante λ im Bereich des exponentiellen Polarisationszerfalls, $P_n \approx \exp(-\lambda n)$, bei diskretem Random Walk auf linearer Kette mit exponentieller Frequenzverteilung (II.33) der Breite σ (●, Simulationen). Zum Vergleich: Gaußverteilung (○, Simulationen).

tionen qualitativ das Verhalten, das sich aufgrund der Überlegungen im vorhergehenden Abschnitt erwarten läßt. Ist n größer als eine bestimmte "crossover"-Schrittzahl, die mit kleiner werdendem σ zunimmt, überlagern sich Oszillationen dem Polarisationszerfall, und P_n nimmt schließlich sowohl negative wie positive Werte an. Verglichen mit dem Zerfall im vorigen Beispiel zerfallen die Amplituden dieser Oszillationen relativ langsam. Bei hinreichend kleinem σ kann der (noch nicht durch Oszillationen gestörte) Zerfall in der Tat durch eine einfache Exponentialfunktion approximiert werden, vgl. Bild II.9. Wiederum in Übereinstimmung mit (II.50) ist der Zerfall im Fall der dichotomischen Verteilung ($K_4 = -2$) schneller als in dem der konstanten ($K_4 = -\frac{6}{5}$); in beiden Fällen erfolgt er schneller als bei der gaußschen Verteilung.

Wie die Ergebnisse dieses Abschnitts deutlich gemacht haben, ist es eine *spezielle* Eigenschaft der gaußschen Frequenzverteilung, daß sie einen *asymptotisch* einfach-exponentiellen Polarisationszerfall zur Folge hat. Während sich im Fall der anderen Verteilungen ein vergleichbares Verhalten in einem bestimmten Schrittzahlbereich ergibt, wenn σ hinreichend klein ist, so hängt des wahre asymptotische Verhalten stets von der konkreten Form der jeweiligen Verteilung ab. Die hier betrachteten Beispiele, die

alle durch einen langsamen Zerfall der statischen Depolarisation gekennzeichnet sind, liefern einen asymptotischen Zerfall, der langsamer als einfach-exponentiell ist.

II.4. EFFEKTIVE-MEDIUM-THEORIE FÜR DIE ZERFALLSKONSTANTE IM KONTINUIERLICHEN MODELL

Da im Modell mit gaußscher Frequenzverteilung die Depolarisation bereits in $d = 1$ asymptotisch einfach-exponentiell zerfällt, folgt unmittelbar, daß dies ebenso in höheren Dimensionen der Fall sein muß. Diese Aussage ist speziell für den Fall $d = 2$ von Bedeutung, da für $d \geq 3$ eine entsprechende Folgerung bereits aus der Ungleichung von Jensen, Gl. (II.19), gezogen werden konnte. Vor dem Hintergrund der Resultate für den eindimensionalen Fall stellt sich nunmehr die Frage, inwieweit sich die Eigenschaften von Random-Walk-Prozessen in höheren Dimensionen in einer jeweils charakteristischen Abhängigkeit der Zerfallskonstanten von der Breite σ der Frequenzverteilung bemerkbar machen.

In diesem Kapitel wird eine Effektive-Medium-Theorie (kurz EM-Theorie) für die Zerfallskonstante λ des exponentiellen Polarisationszerfalls

$$P(t) \sim \exp(-\lambda t) \quad (t \rightarrow \infty) \quad (II.56)$$

im kontinuierlichen Modell diskutiert. Ein besonderer Vorteil dieser Theorie besteht darin, daß Resultate für höhere Dimensionen fast ebenso einfach wie für den eindimensionalen Fall (s. [29]) gewonnen werden können. Da der mit der Theorie verbundene Formalismus bereits an anderer Stelle beschrieben worden ist [29, 40], sollen hier die grundlegenden Ideen nur soweit skizziert werden, wie für ein prinzipielles Verständnis der Theorie notwendig ist.

Ausgangspunkt der Theorie ist, daß der asymptotische Polarisationszerfall (II.56) formal so beschrieben werden kann, daß er seinen Ursprung in einem Random-Walk-Prozeß auf einem homogenen Gitter — dem "effektiven Medium" — hat, auf dessen Plätzen die lokalen Depolarisationsamplituden jeweils eine exponentielle Dämpfung der Stärke λ erfahren; unter einer lokalen Depolarisationsamplitude ist hier der Beitrag aller Teilchen zur Depolarisation zu verstehen, die sich gerade am jeweils betrachteten Ort befinden. Die Möglichkeit, eine Näherung für die unbekannte Größe λ zu bekommen, ergibt sich in der folgenden Weise: Anstelle des ursprünglichen, vollständig ungeordneten Gitters mit Frequenzkonfiguration $\{\omega_r\}$ betrachtet man ein weniger ungeordnetes

Gitter, das dadurch gekennzeichnet ist, daß nur ein Platz — der Ursprung $r = 0$ — seine zufällige lokale Rotationsfrequenz ω_0 behält, während alle anderen Plätze als dem effektiven Medium zugehörig betrachtet werden. Die entsprechenden Depolarisationsamplituden können exakt berechnet werden. Die Bedingung, daß der Zerfall der gesamten Depolarisation — nach Mittelung über alle möglichen Werte von ω_0 — wiederum durch (II.56) gegeben ist, führt schließlich zu einer Selbstkonsistenz-Gleichung für λ , die die folgende Gestalt hat [40]:

$$\frac{\pi^{1/2}}{\sqrt{2}\sigma} \exp[B^2(\lambda)] \operatorname{erfc}[B(\lambda)] = \tilde{P}(0, \lambda), \quad (II.57)$$

$$B(\lambda) \equiv [\tilde{P}^{-1}(0, \lambda) - \lambda]/(\sqrt{2}\sigma).$$

Da die Eigenschaften des Random Walks nur über die Wahrscheinlichkeit $P(0, t)$ eingehen — die Rückkehrwahrscheinlichkeit zum Ursprung —, läßt sich die Zerfallskonstante also im Prinzip für jeden Gittertyp berechnen, für den diese Größe [bzw. deren Laplace-Transformierte $\tilde{P}(0, u)$] bekannt ist.

In $d = 1$ ist $\tilde{P}(0, u)$ durch $[u(u + 2)]^{-1/2}$ gegeben, vgl. Gl. (II.23). Im Fall des quadratischen Gitters ($d = 2$) läßt sich diese Größe ebenfalls in geschlossener Form angeben [67]:

$$\tilde{P}(0, u) = (1 + u)^{-1} \frac{2}{\pi} K \left[(1 + u)^{-2} \right],$$

wobei K das vollständige elliptische Integral erster Art ist; für numerische Berechnungen geeignete Approximationen bzw. Entwicklungen sind in Ref. 68 zu finden. Grundlage für die Berechnung von $\tilde{P}(0, u)$ in $d = 3$ ist die Beziehung

$$\tilde{P}(0, u) = 3 G_0 [3(u + 1)]$$

zwischen dieser Größe und der Greenschen Funktion

$$G_0(z) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3}{z - (\cos \phi_1 + \cos \phi_2 + \cos \phi_3)}$$

des einfach-kubischen Gitters, die von verschiedenen Autoren eingehend untersucht worden ist [69, 70]. Mit Hilfe zweier verschiedener Reihenentwicklungen für G_0 [Gl. (5.24) in Ref. 69 bzw. Gl. (7) in Ref. 70] läßt sich $\tilde{P}(0, u)$ für alle Werte $u \geq 0$ mit hinreichender Genauigkeit berechnen, so daß Gl. (II.57) für alle interessierenden Werte von σ gelöst werden kann.

Betrachten wir zuerst den Fall $d = 1$, für den die Zerfallskonstante λ in Bild II.5 miteingezeichnet ist (siehe auch Bild II.11). Der Vergleich mit den Werten der Simulation des kontinuierlichen Modells zeigt, daß die Zerfallskonstante dieser Theorie bei den vorliegenden Parameterwerten um ca. einen Faktor 2 zu klein ist; von der Tendenz her ist dies plausibel, wenn man berücksichtigt, daß — im Vergleich zum vollständigen Depolarisationsproblem, bei dem Mehrfachbesuche auf *allen* Gitterplätzen einen relativ schnellen Polarisationszerfall zur Folge haben — in der EM-Theorie nur Korrelationen durch wiederholte Rückkehr zum Ursprung berücksichtigt werden.

Die Lösung $\lambda(\sigma)$ der Gl. (II.57) läßt sich im Grenzfall $\sigma \ll 1$ exakt angeben:

$$\lambda^{EM} \rightarrow 2^{-1/3} \sigma^{4/3} \quad (\sigma \ll 1). \quad (II.58)$$

Die EM-Theorie liefert also ebenso wie die Näherung (II.24) für den diskreten Random Walk, vgl. Gl. (II.30), eine Abhängigkeit der Form $\lambda = \text{const} \times \sigma^\beta$ mit einem Exponenten $\beta = \frac{4}{3}$. Dieser entspricht in der doppelt-logarithmischen Auftragung in Bild II.5 bzw. Bild II.11 der Steigung der Kurve $\lambda(\sigma)$ bei kleinen Werten von σ . Die in Tab. II.1 aufgeführten Werte von β bei $\sigma = 0,1$ und $\sigma = 0,01$ geben einen Eindruck von der Annäherung an den asymptotischen Wert $\frac{4}{3}$.

Die Resultate der EM-Theorie für $d = 2$ (quadratisches Gitter) und $d = 3$ (einfach-kubisches Gitter) sind in Bild II.11 den Ergebnissen numerischer Simulationen gegenübergestellt; das Resultat für $d = 1$ ist zum Vergleich miteingezeichnet. Zuerst ist anzumerken, daß die Zerfallskonstanten in Entsprechung zur abnehmenden Bedeutung von Rückkehreffekten mit zunehmender Dimension deutlich kleiner werden. Wie bereits im Fall $d = 1$ stützt auch in $d = 2$ und $d = 3$ der Vergleich mit der Simulation die oben plausibel gemachte Erwartung, daß die EM-Theorie eine untere Grenze für die tatsächlichen Zerfallskonstanten liefern sollte.

Wenngleich in $d = 2$ bei den Werten von σ , für die Simulationen durchgeführt wurden, immer noch eine deutliche Differenz zwischen theoretischen und simulierten Werten von λ festzustellen ist (Faktor von typischerweise $\approx 1,3$), so liefert diese Theorie dennoch wiederum ein qualitativ richtiges Bild von der Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ von σ . Beispielhafte Werte für den Exponenten β sind in Tab. II.1 zu finden. Als Ergebnis der EM-Theorie zeigt sich, daß — wie auch bei den Simulationen — β mit abnehmendem σ langsam zunimmt. Zur Verdeutlichung betrachten wir das Verhalten

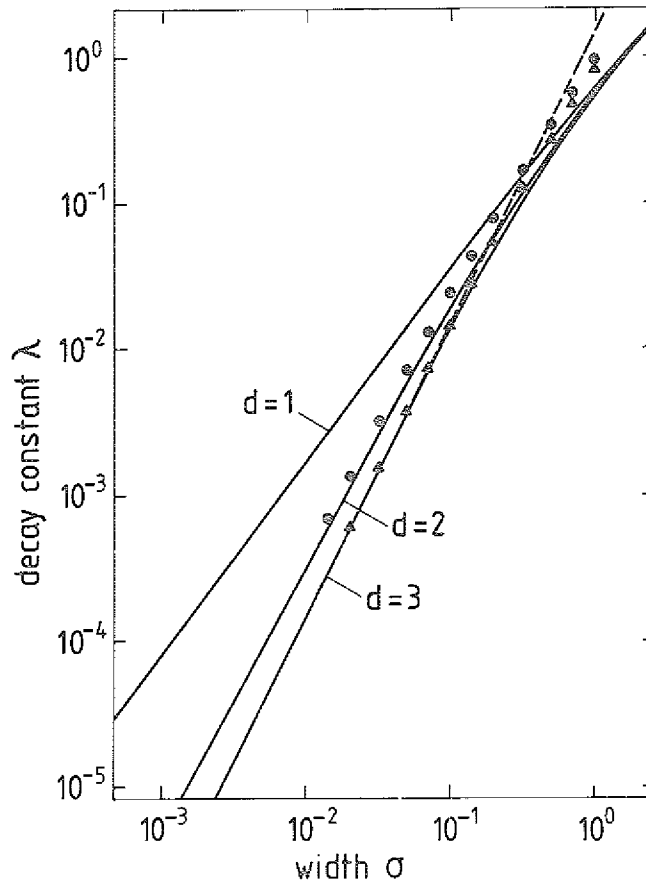


Bild II.11 : Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ in $P(t) \sim \exp(-\lambda t)$ von der Breite σ der Gaußverteilung. Die durchgezogenen Linien sind die Resultate der Effektive-Medium-Theorie, d.h. die Lösungen von Gl. (II.57) für $d = 1, 2, 3$. Zum Vergleich: Resultate numerischer Simulationen in $d = 2$ (◉) und $d = 3$ (▲). Gestrichelte Linie: Resultat der gaußschen Näherung für $d = 3$, siehe Gl. (II.17).

der Zerfallskonstanten, das die Theorie im Grenzfall $\sigma \ll 1$ liefert; es läßt sich zeigen, daß sich (II.57) in diesem Grenzfall auf die folgende implizite Gleichung für λ reduziert:

$$\lambda \approx \frac{1}{\pi} \sigma^2 \ln(1/\lambda) \quad (\sigma \ll 1). \quad (II.59)$$

Hieraus erhält man für den Exponenten $\beta = d \ln \lambda / d \ln \sigma$:

$$\beta \underset{\sigma \ll 1}{\approx} \frac{2}{1 - 1/\ln \lambda} \xrightarrow{\sigma \rightarrow 0} 2. \quad (II.60)$$

Die in (II.59) auftretende "logarithmische Korrektur", d.h. der Faktor $\ln(1/\lambda)$, ist eine Folge der für $d = 2$ charakteristischen logarithmischen Singularität der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\tilde{P}(0, u)$ für $u \rightarrow 0$. Sie ist, wie Gl. (II.60) verdeutlicht, für die — im

Vergleich zum Fall $d = 3$, s.u. — *langsame* Annäherung von β an den asymptotischen Wert von $\beta = 2$ verantwortlich. So ergibt sich z.B. bei $\sigma = 10^{-5}$, dem kleinsten Wert, für den λ explizit nach Gl. (II.57) berechnet wurde, ein Wert von $\beta \approx 1,92$, der damit immer noch deutlich von 2 verschieden ist.

σ	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$
0.1	1.29	1.66	1.86
0.01	1.32	1.82	1.99
$\sigma \rightarrow 0$	$\frac{4}{3}$	2(*)	2

Tab. II.1 Exponent β in
 $\lambda = \text{const} \times \sigma^\beta$
 (Effektive-Medium-
 Theorie)

(*) : logarithmische Annäherung, vgl. Text

Die Resultate für $d = 3$ zeigen, daß bei Werten $\sigma \lesssim 0,1$ kaum noch ein Unterschied zwischen Theorie und Simulation festzustellen ist — was bedeutet, daß in diesem Fall die der EM-Theorie zugrundeliegende Näherung, nur Rückkehreffekte bezüglich des Ursprungs mitzunehmen, den Einfluß der durch den Random Walk bedingten Korrelationen auf den Polarisationszerfall im wesentlichen bereits richtig erfaßt. Wie im Fall $d = 1$ läßt sich auch für $d = 3$ die Selbstkonsistenz-Gleichung (II.57) im Grenzfall $\sigma \ll 1$ exakt lösen; man findet

$$\lambda^{EM} \rightarrow a_0 \sigma^2 \quad (\sigma \ll 1) \quad (II.61)$$

mit $a_0 = 1.516\dots$, d.h. gerade die Zerfallskonstante, die sich unter der gaußschen Annahme für $\omega(t)$ ergibt, vgl. (II.17). Sie ist in Bild II.11 als gestrichelte Linie eingezeichnet. Da diese wie gezeigt [Gl. (II.19)] eine *obere* Grenze für die tatsächliche Zerfallskonstante ist, man andererseits aber erwartet, daß die EM-Theorie eine *untere* Grenze liefert, liegt der Schluß auf der Hand, daß auch die tatsächliche Zerfallskonstante für $\sigma \ll 1$ den Wert $a_0 \sigma^2$ annimmt. Wie Bild II.11 deutlich macht, wird diese Annahme durch die vorliegenden Resultate numerischer Simulationen deutlich bestätigt. Tab. II.1 gibt wiederum einen Eindruck von der Annäherung des Exponenten β an den Wert $\beta = 2$ im Grenzfall $\sigma \ll 1$.

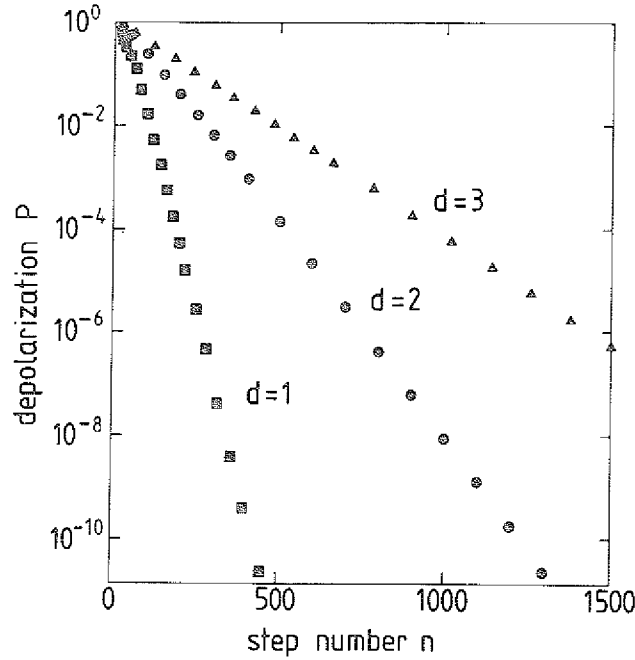


Bild II.12: Depolarisation P vs. Schrittzahl n bei Random Walk auf linearer Kette ($d = 1$), quadratischem ($d = 2$) und einfach-kubischem Gitter ($d = 3$) mit gaußverteilten Rotationsfrequenzen (Breite $\sigma = 0,1$). Resultate numerischer Simulationen.

II.5. DEPOLARISATION DES DISKRETEN RANDOM WALKS IN HÖHEREN DIMENSIONEN

In diesem Abschnitt soll die Depolarisation von Spins diskutiert werden, die diskreten Random Walk auf einem quadratischen bzw. einfach-kubischen Gitter ausführen. Die numerischen Simulationen, auf deren Ergebnisse hier Bezug genommen wird, sind in Analogie zu der in Abschnitt II.2.3 erwähnten zweiten Methode durchgeführt worden, d.h. der Ausdruck (II.9),

$$P_n = \left\langle \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} \sum_r h_r^2(n) \right] \right\rangle,$$

wurde durch Mittelung über viele n -Schritt-Random Walks abgeschätzt. Entsprechendes gilt für die in $d = 2$ und $d = 3$ durchgeführten Simulationen des kontinuierlichen Random Walks, deren Ergebnisse im vorhergehenden Kapitel bereits diskutiert wurden [Simulation von Gl. (II.7), vgl. auch Anhang B]. Bild II.12 zeigt für einen typischen Wert von σ den Zerfall von P_n in einer, zwei und drei Dimensionen; es soll beispielhaft einen Eindruck davon geben, wie der mit zunehmender Dimension schneller werdende Polarisationszerfall konkret aussieht.

Im eindimensionalen Fall lieferte die analytische Behandlung, die auf der Näherung beruhte [Gl. (II.24)], daß alle s besuchten Plätze gleichoft besucht werden, eine qualitativ gute Beschreibung der Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ von der Breite σ der Frequenzverteilung. Ein entsprechendes Vorgehen für höhere Dimensionen scheint aber kaum möglich zu sein, da der Kenntnisstand bezüglich der Verteilung $W_n(s)$ der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze bedeutend geringer ist[†]. Für das Depolarisationsproblem ist das Verhalten dieser Verteilung auf der rechten Flanke, d.h. bei großen Werten von s , entscheidend; soweit mir bekannt ist, liegen insbesondere hierüber weder für $d = 2$ noch für $d = 3$ konkrete Ergebnisse vor.

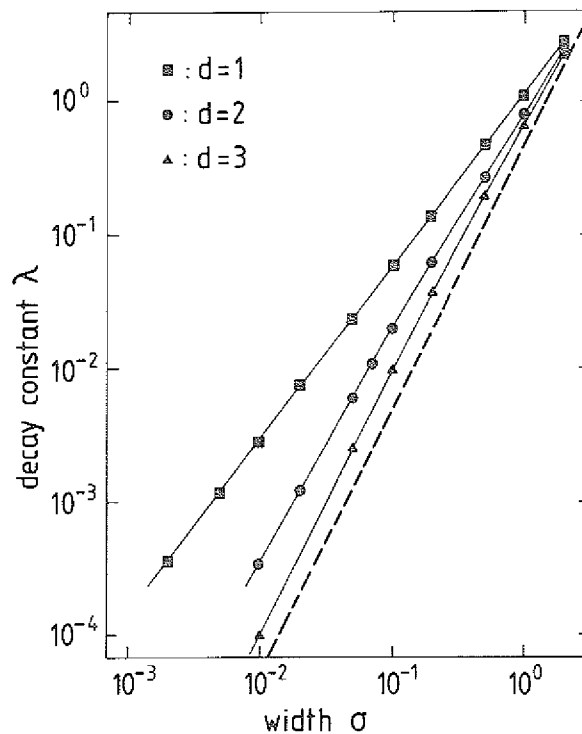


Bild II.13: Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ in $P_n \sim \exp(-\lambda t)$ von der Breite σ der Gaußverteilung. Resultate numerischer Simulationen von diskretem RW auf linearer Kette ($d = 1$), quadratischem ($d = 2$) und einfach-kubischem Gitter ($d = 3$). Gestrichelte Linie: untere Grenze $\lambda = \frac{1}{2}\sigma^2$, vgl. Gl. (II.10b).

In Bild II.13 sind die numerisch gefundenen Zerfallskonstanten in Abhängigkeit

[†]Eine Zusammenfassung von Resultaten bzgl. der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze in höheren Dimensionen ist z.B. in Ref. 71 zu finden.

vom Parameter σ aufgetragen, wobei zum Vergleich die Werte für $d = 1$ miteingezeichnet wurden. Betrachten wir zuerst die Ergebnisse für $d = 2$: Nimmt man wiederum eine Abhängigkeit der Form $\lambda \propto \sigma^\beta$ an, so zeigen die Daten, daß der Exponent β — ebenso, wie dies im kontinuierlichen Modell der Fall war, vgl. Bild II.11 — langsam mit kleiner werdendem σ zunimmt. Bei den kleineren simulierten Werten von σ findet man $\beta \approx 1,77$. Es ist daran zu erinnern, daß die Effektive-Medium-Theorie in diesem Bereich vergleichbare Werte lieferte, siehe Tab. II.1.

Für die Diskussion der Ergebnisse im dreidimensionalen Fall ist es sinnvoll, die Daten mit Schranken zu vergleichen, die sich für die Zerfallskonstante angeben lassen. Zum einen bezieht sich dies auf die triviale untere Schranke $\lambda = \frac{1}{2}\sigma^2$, Gl. (II.10b), die von der Depolarisation des Strong-Collision-Modells geliefert wird, in dem keine Rückkehreffekte auftreten. Zum anderen läßt sich in Analogie zu Gl. (II.19) aus der Ungleichung von Jensen eine untere Schranke für P_n — und daraus eine obere Schranke für λ — ableiten:

$$P_n \geq \exp \left(-\frac{\sigma^2}{2} \langle \sum_r h_r^2 \rangle \right). \quad (II.62)$$

Wie den Hollander [72] explizit gezeigt hat, ist bei transienten Random Walks

$$\langle \sum_r h_r^2 \rangle \sim (2a_0 - 1)n \quad (n \gg 1),$$

so daß der Ausdruck auf der rechten Seite von (II.62) — die gaußsche Näherung von P_n — asymptotisch einfach-exponentiell mit der Zerfallskonstanten $\lambda = (a_0 - 1/2)\sigma^2$ zerfällt. Diese ist beim einfach-kubischen Gitter durch $\lambda \simeq 1,016\sigma^2$ gegeben. Anzumerken ist, daß der Unterschied zur entsprechenden Zerfallskonstanten im kontinuierlichen Modell ($\lambda = a_0\sigma^2$) in Übereinstimmung mit Gl. (II.31) gerade $\sigma^2/2$ beträgt.

Die Zerfallskonstante muß also folgender Bedingung genügen:

$$\frac{1}{2}\sigma^2 \leq \lambda \leq (a_0 - \frac{1}{2})\sigma^2. \quad (II.63)$$

Bild II.14 zeigt deren Gültigkeit für die Resultate der Simulationen. Darüberhinaus ist deutlich zu erkennen, daß sich die Daten mit kleiner werdendem σ der oberen Grenze $(a_0 - 1/2)\sigma^2$ annähern. Dieses Verhalten ist unter Berücksichtigung von Gl. (II.31) konsistent mit den Resultaten für die Zerfallskonstante des kontinuierlichen Modells, die sich, wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt, bei kleinen σ -Werten ebenfalls dem Wert der gaußschen Näherung annähert.

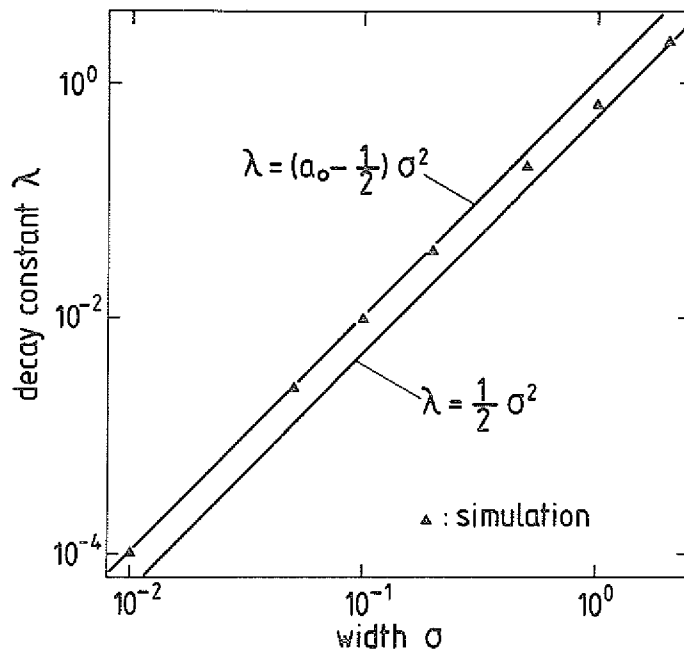


Bild II.14: Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ von der Breite σ bei Random Walk auf einem einfach-kubischen Gitter ($d = 3$, Gaußverteilung). Resultate von Simulationen sowie obere und untere Schranke für λ , siehe Gl. (II.63). Die obere Schranke ist die Zerfallskonstante der gaußschen Näherung für $\omega(t)$.

III. Depolarisation durch Random Walk von bzw. zu Störstellen

Im vorhergehenden Kapitel ist die (transversale) Depolarisation von Spins diskutiert worden, die Random Walk auf einem Gitter ausführen, wobei sie auf jedem Gitterplatz einem zufälligen lokalen Feld ausgesetzt sind, das die magnetischen Wechselwirkungen mit der jeweiligen Umgebung repräsentiert.

In diesem Kapitel werden einfache Modelle für einen anderen möglichen Mechanismus für Spindepolarisation durch Diffusion betrachtet. Es wird angenommen, daß die betrachteten Spins nur mit einzelnen Störstellen magnetisch wechselwirken. Von Interesse sind die Depolarisationseffekte, die entweder infolge der Diffusion eines Spins zu einer ortsfesten Störstelle oder umgekehrt infolge der Diffusion einer Störstelle zu einem ortsfesten Spin auftreten.

Es gibt viele Beispiele für reale Systeme, in denen Spindepolarisations- bzw. Relaxationseffekte in Wechselwirkungen mit lokalisierten Störstellen ihre Hauptursache haben. Als ein Beispiel soll die NMR-Relaxation diffundierender Ionen in superionischen Leitern erwähnt werden, die wesentlich von der Anwesenheit paramagnetischer Verunreinigungen beeinflusst wird (vgl. dazu die Arbeiten von Richards [73-75] sowie die darin enthaltenen Referenzen). Dieser Effekt, der oftmals noch bei "nominell reinen" Proben bedeutsam ist, läßt sich gezielt ausnutzen, um Informationen über das Diffusionsverhalten der Ionen zu bekommen, indem man in den Ionenkristallen (z.B. PbF_2) nichtmagnetische Ionen (Pb^{2+}) teilweise durch paramagnetische Ionen (Mn^{2+}) ersetzt (sog. "magnetic tagging" [76, 77]).

Erwähnt werden sollen in diesem Zusammenhang auch μSR -Messungen an Polyazethylen-Ketten, die in letzter Zeit ein großes Interesse hervorgerufen haben [78, 79]. Für die Depolarisation der Myonen-Spins in *trans*-Polyazethylen wird dabei als wesentlicher Mechanismus angenommen, daß die Spins der jeweils an einem bestimmten Ort (C-Atom) auf der Kette gebundenen Myonen durch Wechselwirkung mit dem vom Myon erzeugten ungepaarten Elektron depolarisiert werden, welches auf der Kette beweglich ist. In dieser vereinfachenden Beschreibung kann dieser Mechanismus also als ein Beispiel für die Depolarisation ortsfester Spins durch bewegliche Störstellen angesehen werden (— die in diesem Fall eindimensionale Diffusion ausführen).

Wenngleich diese μSR -Messungen den eigentlichen Anstoß zu den Überlegungen dieses Abschnitts gegeben haben, so soll dennoch von vorneherein deutlich herausge-

stellt werden, daß die nachfolgend betrachteten Modelle aufgrund der ihnen zugrundeliegenden Annahmen — insbesondere bezüglich der Wechselwirkung zwischen Spin und Störstelle — nicht den Anspruch erheben, die diesem μSR -Experiment zugrundeliegende physikalische Situation möglichst wirklichkeitsnah abzubilden. Im Vordergrund steht vielmehr wiederum der stochastische Aspekt, der mit der Diffusion von Störstelle zu Spin (bzw. umgekehrt) verbunden ist.

Für die Dynamik der betrachteten Spins wird wieder das einfache, klassische Bild der Spin-Präzession gewählt. Die magnetische Wechselwirkung eines Spins mit einer Störstelle wird durch ein zufälliges magnetisches Feld bzw. eine zufällige Rotationsfrequenz $\underline{\omega}$ modelliert, der der Spin ausgesetzt ist, wenn sich Spin und Störstelle am *gleichen* Ort befinden. Während es bei einem starken transversalen Feld im allgemeinen genügt, nur die Komponente von $\underline{\omega}$ in Vorzugsrichtung zu berücksichtigen, soll hier vornehmlich der Fall betrachtet werden, daß $\underline{\omega}$ beliebig im Raum orientiert sein kann. Dieser Fall ist insbesondere für die Depolarisation in einem longitudinalen oder verschwindenden äußeren Feld von Interesse. Die Möglichkeit der Spinpräzession in beliebig orientierten Feldern bedingt dabei eine analytische Behandlung, die zwar aufwendiger als im Fall der rein transversalen Rotation, dafür aber auch von allgemeinerer Gültigkeit ist.

Nachfolgend wird stets ein Ensemble klassischer Spins $\underline{S}$ der Länge $\|\underline{S}\| = 1$ betrachtet, das zu einer Anfangszeit $t = 0$ vollständig in einer bestimmten Richtung polarisiert sei, d.h. $\underline{S}(t = 0) = \underline{S}_0$ für alle Spins $\underline{S}$. Bestimmt werden soll das Verhalten der mittleren Polarisation $\underline{P} \equiv \langle \underline{S}(t) \rangle$ der Spins, deren Bewegungsgleichung jeweils durch

$$\dot{\underline{S}}(t) = \underline{\omega}_{tot}(t) \times \underline{S}(t) \equiv \underline{\Omega}_{tot}(t) \cdot \underline{S}(t) \quad (III.1)$$

gegeben ist, wobei $\underline{\omega}_{tot}(t)$ dem gesamten momentanen Feld entspricht, dem der Spin zur Zeit t ausgesetzt ist, und im allgemeinen Fall neben dem stochastischen Anteil $\underline{\omega}(t)$ noch einen externen Feldbeitrag $\underline{\omega}_0$ enthalten kann [$\underline{\Omega}(t)$ bzw. $\underline{\Omega}_0$ seien die entsprechenden antisymmetrischen Matrizen].

Die stochastische Rotationsfrequenz $\underline{\omega}(t)$ wird zum einen durch das konkrete Modell für die Diffusion von Störstelle bzw. Spin definiert, zum anderen durch die Annahmen, die hinsichtlich der zufälligen Frequenz $\underline{\omega}$ gemacht werden, die die Wechselwirkung zwischen Spin und Störstelle beschreibt. Zuerst wird ein Modell betrachtet, bei dem jede Störstelle durch ein zeitlich konstantes $\underline{\omega}$ charakterisiert ist. Im zweiten Modell wird

demgegenüber die Annahme gemacht, daß bei jedem neuen Kontakt zwischen Störstelle und Spin ω durch einen neuen, zufällig aus der zugrundeliegenden Verteilung $g(\omega)$ gezogenen Vektor gegeben ist ("Strong-Collision"-Modell).

Für konkrete Berechnungen wird für die den zufälligen Vektoren zugrundeliegende Verteilung in beiden Modellen eine isotrope, dreidimensionale Gaußverteilung,

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}} \exp[-\frac{1}{2}(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)/\sigma^2] = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}} \exp[-\frac{1}{2}\omega^2/\sigma^2] , \quad (III.2)$$

angenommen werden [Kubo-Toyabe-Modell, s. unten].

III.1. DEPOLARISATION IM STATISCHEN FALL

Im Hinblick auf die Resultate, die in diesem Kapitel diskutiert werden, ist es sinnvoll, kurz den statischen Fall zu betrachten, in dem sich jeder Spin in einem zeitlich konstanten, aber zufälligen "Feld" ω (Matrix Ω) befindet. Bei verschwindendem äußeren Feld ist mit $\Omega_{tot}(t) \equiv \Omega$ die Lösung von Gl. (III.1) durch

$$\underline{S}(t) = \underline{D}(\omega, t) \cdot \underline{S}_0, \quad \underline{D}(\omega, t) \equiv e^{\Omega t}, \quad (III.3)$$

gegeben; $\underline{D}$ ist die orthogonale Matrix, die eine Drehung mit dem Winkel ωt um die durch ω definierte Drehachse beschreibt. Zur Berechnung der mittleren Polarisation ist diese über ω zu mitteln:

$$\underline{P}(t) = \langle \underline{D}(\omega, t) \rangle_{\omega} \cdot \underline{S}_0 = \int d^3\omega \underline{D}(\omega, t) g(\omega) \cdot \underline{S}_0. \quad (III.4)$$

Im Fall der Verteilung (III.2) erhält man

$$\langle \underline{D}(\omega, t) \rangle = G(t) \cdot \underline{E} \quad (III.5)$$

($\underline{E}$ = Einheitsmatrix) mit der sog. (statischen) Kubo-Toyabe-Relaxationsfunktion

$$G(t) = \frac{2}{3}(1 - \sigma^2 t^2) \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 t^2) + \frac{1}{3}. \quad (III.6)$$

Dieses Resultat, das zuerst von Kubo und Toyabe [49] gefunden wurde, wurde später im Zusammenhang mit μ SR von Yamazaki [80] und Hayano *et. al.* [81] diskutiert.

$G(t)$ beschreibt die statische Null-Feld-Depolarisation bei gaußverteilten Zufallsfeldern. Nach anfänglich gaußförmigem Zerfall, $G(t) \approx \exp(-\sigma^2 t^2)$, zerfällt die Depolarisation — im Gegensatz zur transversalen Depolarisation (I.2) — asymptotisch nicht zu

Null, sondern nähert sich bei großen Zeiten "wieder" dem Wert $\frac{1}{3}$ an (Bild III.1). Dieser Wert tritt als Folge der Mittelung über alle möglichen Richtungen (Raumwinkel R) der (sphärisch symmetrisch verteilten) Vektoren $\underline{\omega}$ auf,

$$\langle \mathbf{D}(\underline{\omega}, t) \rangle_R = \left[\frac{2}{3} \cos(\omega t) + \frac{1}{3} \right] \mathbf{E}, \quad (\text{III.7})$$

und läßt sich so plausibel machen, daß (im Mittel) ein Drittel der Vektoren $\underline{\omega}$ parallel zur anfänglichen Spinrichtung $\underline{S}_0$ und dementsprechend für die Depolarisation irrelevant sind.

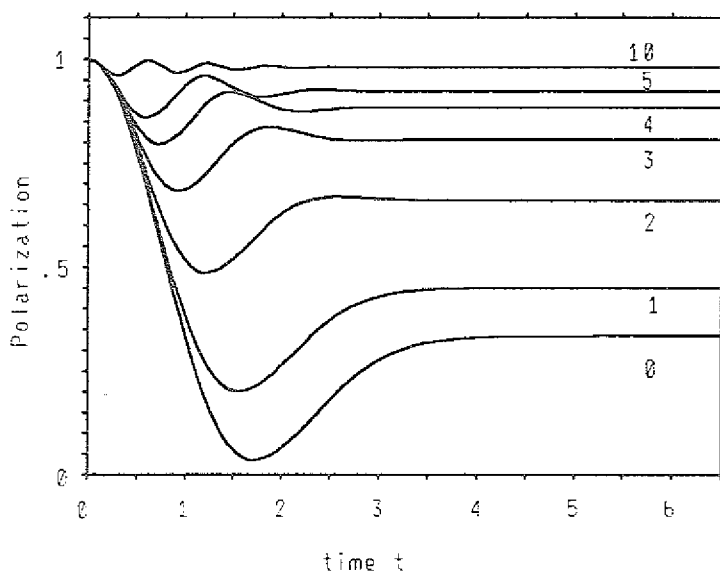


Bild III.1 : Statische longitudinale Depolarisation im Fall der dreidimensionalen Gaußverteilung (III.2) für verschiedene externe Feldstärken ω_0 . Die Kurve mit $\omega_0 = 0$ ist die Kubo-Toyabe-Funktion (III.6), die anderen Kurven sind durch Gl. (III.9) gegeben. $\sigma = 1$.

Dieses charakteristische Verhalten im statischen Fall hat zur Folge, daß die Null-Feld-Depolarisation besonders sensitiv gegenüber (auch vergleichsweise langsamen) zeitlichen Modulationen der Zufallsfelder $\underline{\omega}$ (vgl. [49]) und deren jeweiligen stochastischen Eigenschaften ist; so hat z.B. Petzinger [82] darauf hingewiesen, daß Null-Feld-Messungen es erlauben sollten, zwischen Einfang- und Entkommprozessen von Myonen an Haftstellen (Traps) zu unterscheiden, wenn die Myonen hauptsächlich an den Trap-Plätzen depolarisiert werden.

Betrachten wir abschließend den Fall, in dem ein externes Feld ω_0 parallel zur anfänglichen Polarisation S_0 angelegt ist, die in z -Richtung zeigen soll. Die statische longitudinale Depolarisation, d.h. die z -Komponente von

$$P(t) = \langle \mathbf{D}(\omega + \omega_0, t) \rangle_{\omega} \cdot S_0, \quad (III.8)$$

vgl. (III.3,4), ist in diesem Fall ($\omega_0 = \omega_0 e_z$, $S_0 = e_z$) durch

$$\begin{aligned} G_+(t) &\equiv \left(\langle \mathbf{D}(\omega + \omega_0, t) \rangle_{\omega} \right)_{zz} \\ &= 1 - \frac{2\sigma^2}{\omega_0^2} [1 - \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 t^2) \cos(\omega_0 t)] + \frac{2\sigma^4}{\omega_0^3} \int_0^t \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 t'^2) \sin(\omega_0 t') dt' \end{aligned} \quad (III.9)$$

gegeben [81]. Bild III.1 zeigt das Verhalten dieser Funktion für verschiedene Werte von ω_0 . Festzuhalten ist, daß mit größer werdendem Feld der asymptotische Wert der Depolarisation zunimmt, wobei gleichzeitig die totale zeitliche Variation von $G_+(t)$ immer mehr ausnivelliert wird.

III.2. MODELL MIT ZEITLICH KONSTANTEM STÖRSTELLENFELD

Zur Definition dieses Modells betrachten wir die Situation, in der die Spins S , deren Depolarisation bestimmt werden soll, ortsfest sind, während die Störstellen auf dem zugrundeliegenden Gitter diffundieren. Das Gitter kann im Prinzip von beliebiger Dimension und beliebigem Typ sein. Bild III.2 veranschaulicht das Modell für den Fall eines quadratischen Gitters in $d = 2$ (Bild III.2a) sowie den einer halboneindlichen linearen Kette (Bild III.2b), der später konkret behandelt werden wird.

Ein Spin S wird jeweils zur Zeit $t = 0$ mit der vorgegebenen Orientierung S_0 auf den Ursprung $r = 0$ des Gitters gesetzt, auf dem sich zur gleichen Zeit an einem bestimmten Platz r_0 eine Störstelle befindet, die durch eine zufällige, aber zeitlich konstante Rotationsfrequenz ω charakterisiert ist. Die Störstelle führt anschließend einen einfachen, kontinuierlichen Random Walk mit Sprungrate $\gamma = \tau^{-1} \equiv 1$ aus (Bild III.2).

Mit der charakteristischen Funktion $\eta(t)$, die durch

$$\eta(t) = \begin{cases} 1, & \text{wenn Störstelle zur Zeit } t \text{ auf } r = 0, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (III.10)$$

definiert ist, ist die momentane Rotationsfrequenz des Spins S mithin durch $\omega_{tot} = \omega_0 + \eta(t)\omega$ gegeben. [Einen entsprechenden Ausdruck erhält man offensichtlich,

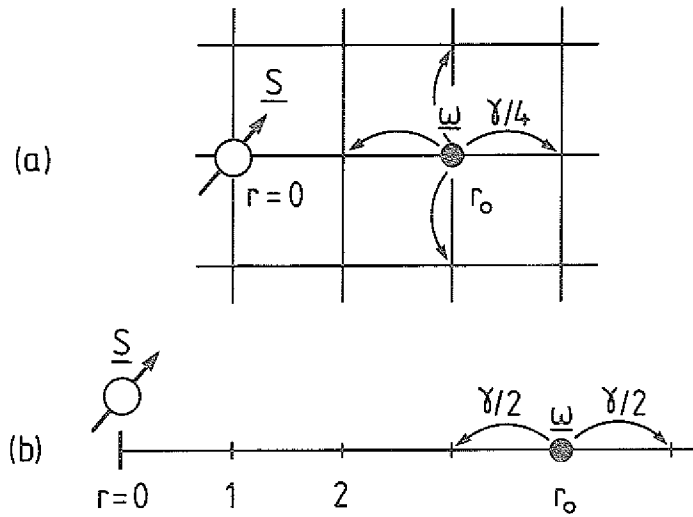


Bild III.2: Modell für die Depolarisation der Spins $\underline{S}$ durch Random Walk einer Störstelle.

(a) Quadratgitter ($d = 2$)

(b) halbbeschränkte lineare Kette ("Halbstrahl")

wenn man umgekehrt annimmt, daß die Störstelle am Ursprung fest sitzt, während der Spin $\underline{S}$ diffundiert; $\eta(t)$ beschreibt in diesem Fall einfach den Random Walk der Spins zum Ursprung.] In der Schreibweise mit den entsprechenden Matrizen Ω_0 bzw. Ω lautet die Bewegungsgleichung (III.1) für $\underline{S}$

$$\dot{\underline{S}}(t) = [\Omega_0 + \eta(t)\Omega] \cdot \underline{S}(t), \quad \underline{S}(t=0) = \underline{S}_0. \quad (III.11)$$

Zu beachten ist, daß die Rotationen mit ω_0 und ω im allgemeinen nicht vertauschen, so daß dementsprechend auch Ω_0 und Ω nichtkommutierende Matrizen sind.

Um Gl. (III.11) formal lösen zu können, wird eine Transformation ins mit ω_0 rotierende Bezugssystem durchgeführt:

$$\underline{S}'(t) = \mathbf{D}_0^T(t) \cdot \underline{S}(t), \quad (III.12)$$

$$\mathbf{D}_0^T(t) \equiv [\mathbf{D}(\omega_0, t)]^T = e^{-\Omega_0 t}, \quad (III.13)$$

vgl. (III.3). Beachte, daß die transponierte Matrix $\mathbf{D}_0^T$ gleichzeitig die inverse Matrix von $\mathbf{D}_0$ ist. Die Bewegungsgleichung für $\underline{S}'$ hat dann die Form

$$\dot{\underline{S}}'(t) = \eta(t)\Omega'(t) \cdot \underline{S}'(t), \quad \underline{S}'(t=0) = \underline{S}_0, \quad (III.14)$$

wobei

$$\Omega'(t) \equiv \mathbf{D}_0^T(t) \cdot \Omega \cdot \mathbf{D}_0(t) . \quad (III.15)$$

Gl. (III.14) kann formal durch Iteration gelöst werden. Man erhält den folgenden Ausdruck, in den die Mittelung über den Random Walk der Störstelle bereits formal einbezogen wurde:

$$\begin{aligned} \langle S'(t) \rangle_{RW} = & \left\{ \mathbb{E} + \int_0^t dt_1 \Omega'(t_1) \langle \eta(t_1) \rangle_{RW} \right. \\ & \left. + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \Omega'(t_1) \Omega'(t_2) \langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle_{RW} + \dots \right\} \cdot S_0 . \end{aligned} \quad (III.16)$$

Die Random-Walk-Mittelwerte der Form $\langle \eta(t_1) \dots \eta(t_n) \rangle_{RW}$ lassen sich unter Benutzung der Markov-Eigenschaft des RW's auf Produkte von einfachen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten zurückführen. Definieren wir für beliebige Gitterplätze r_1, r_2 und Zeiten $t \geq 0$

$$P_{r_1 r_2}(t) \equiv P(r_2, t | r_1, t = 0) \quad (III.17)$$

als die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen zur Zeit t am Platz r_2 befindet, wenn es sich zur Zeit $t = 0$ am Platz r_1 befunden hat, so ergibt sich für die obigen Mittelwerte

$$\begin{aligned} \langle \eta(t_1) \rangle_{RW} &= P_{r_0 0}(t_1) \\ \langle \eta(t_1) \dots \eta(t_n) \rangle_{RW} &= P_{00}(t_1 - t_2) P_{00}(t_2 - t_3) \dots P_{00}(t_{n-1} - t_n) P_{r_0 0}(t_n) . \end{aligned} \quad (III.18)$$

Der konkrete Typ des Gitters geht somit nur über die Wahrscheinlichkeiten $P_{00}(t)$ und $P_{r_0 0}(t)$ in die analytische Beschreibung ein.

Mit (III.18) und der Definition

$$\mathbf{M}_{r_1 r_2}(t) \equiv P_{r_1 r_2}(t) \cdot \Omega \cdot \mathbf{D}_0(t) \quad (III.19)$$

läßt sich Gl. (III.16) in der folgenden Form schreiben:

$$\begin{aligned} \langle S'(t) \rangle_{RW} = & \mathbf{D}_0^T(t) \cdot \left\{ \mathbf{D}_0(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \mathbf{D}_0(t - t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \mathbf{M}_{00}(t_1 - t_2) \cdot \dots \right. \\ & \left. \dots \cdot \int_0^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{M}_{00}(t_{n-1} - t_n) \mathbf{M}_{r_0 0}(t_n) \right\} \cdot S_0 . \end{aligned} \quad (III.20)$$

Nach Rücktransformation ins Laborsystem, $\underline{S}(t) = \underline{D}_0(t) \cdot \underline{S}'(t)$, und anschließender Laplace-Transformation,

$$\tilde{\underline{A}}(u) \equiv \mathcal{L}\{\underline{A}(t)\} = \int_0^\infty \exp(-ut) \underline{A}(t) dt \quad [\underline{A}(t) \text{ beliebige Matrix}] ,$$

läßt sich die Summe in Gl. (III.20) ausführen. Man erhält als Ergebnis

$$\langle \tilde{\underline{S}}(u) \rangle_{RW} = \tilde{\underline{D}}_0(u) \cdot \frac{1}{\underline{E} - \tilde{\underline{M}}_{00}(u)} \cdot [\underline{E} + \tilde{\underline{M}}_{r_0 0}(u) - \tilde{\underline{M}}_{00}(u)] \cdot \underline{S}_0 . \quad (III.21)$$

Zur Berechnung der mittleren Polarisation $\underline{P}(t) = \langle \langle \underline{S}(t) \rangle \rangle_{RW}$ bzw. deren Laplace-Transformierter $\tilde{\underline{P}}(u)$ ist noch die Mittelung über alle zufälligen Rotationsfrequenzen ω auszuführen. Zu beachten ist, daß Gl. (III.21) für beliebiges äußeres Feld ω_0 und beliebige Anfangspolarisation $\underline{S}_0$ gültig ist, mithin also auf beliebige experimentelle Situationen (transversale, longitudinale und Null-Feld-Depolarisation) anwendbar ist.

Im folgenden soll mit Gl. (III.21) der Polarisationszerfall für die dreidimensionale, isotrope Gaußverteilung (III.2) berechnet werden. Hierbei werden wir uns auf den Fall verschwindenden äußeren Feldes ω_0 konzentrieren (Null-Feld-Depolarisation). Anzumerken ist, daß die Ausführung der Frequenzmittelung von (III.21) für $\omega_0 \neq 0$ mit erheblichen analytischen Schwierigkeiten verbunden ist (vgl. Anhang A), weshalb keine geschlossene Form für die mittlere Polarisation $\underline{P}$ angegeben werden konnte.

III.2.1. NULL-FELD-DEPOLARISATION

Bei verschwindendem äußeren Feld $\omega_0 = 0$ ist $\underline{D}_0(t) = \underline{D}_0^T(t) = \underline{E}$, $\tilde{\underline{D}}_0(u) = \tilde{\underline{D}}_0^T(u) = u^{-1} \underline{E}$ und $\tilde{\underline{M}}_{r_1 r_2}(u) = \tilde{\underline{P}}_{r_1 r_2}(u) \Omega$, vgl. Gl. (III.19), so daß sich (III.21) zu

$$\langle \tilde{\underline{S}}(u) \rangle_{RW} = \frac{1}{u} \underline{A}(u) \cdot \underline{S}_0 \quad (III.22a)$$

mit

$$\underline{A}(u) \equiv \frac{\underline{E} + [\tilde{\underline{P}}_{r_0 0}(u) - \tilde{\underline{P}}_{00}(u)] \Omega}{\underline{E} - \tilde{\underline{P}}_{00}(u) \Omega} \quad (III.22b)$$

reduziert. Die Berechnung der Polarisation

$$\tilde{\underline{P}}(u) = \frac{1}{u} \langle \underline{A}(u) \rangle_\omega \cdot \underline{S}_0 \quad (III.23)$$

soll in zwei Schritten diskutiert werden, wobei in dem ersten nur Bezug auf die Isotropie der Verteilung $g(\omega)$ genommen werden soll. Wie die Mittelung im einzelnen durchzuführen ist, wird im Anhang A erläutert.

(i) *Sphärisch-symmetrische Verteilung $g(\underline{\omega})$:*

Eine sphärisch-symmetrische (isotrope) Verteilung $g(\underline{\omega})$ ist dadurch charakterisiert, daß sie nur vom Betrag ω des Vektors $\underline{\omega}$ und nicht von dessen Orientierung abhängt:

$$g(\underline{\omega}) = \frac{1}{4\pi} \bar{g}(\omega) , \quad (III.24)$$

wobei der Faktor $1/4\pi$, der die Normierung der Raumwinkelanteile liefert, explizit herausgezogen ist. Führt man die Mittelung in (III.23) zunächst nur über alle möglichen Richtungen von $\underline{\omega}$ (Raumwinkel R) aus, so findet man, in Analogie zu (III.7) im statischen Fall, daß die Matrix $\langle \mathbf{A}(u) \rangle_R$ die einfache Form

$$\langle \mathbf{A}(u) \rangle_R = f(u, \omega) \mathbf{E}$$

annimmt; die Polarisation $\underline{P}$ hat also erwartungsgemäß eine nichtverschwindende Komponente P nur in Richtung der anfänglichen Polarisation $\underline{S}_0$: $\underline{P}(t) = P(t) \underline{S}_0$. Deren Laplace-Transformierte,

$$\tilde{P}(u) = \frac{1}{u} \langle f(u, \omega) \rangle_\omega = \frac{1}{u} \int_0^\infty d\omega \omega^2 f(u, \omega) \bar{g}(\omega) ,$$

ist explizit durch

$$\tilde{P}(u) = \frac{1}{u} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \frac{1 + a(u) \omega^2 \tilde{P}_{00}^2(u)}{1 + \omega^2 \tilde{P}_{00}^2(u)} \bar{g}(\omega) \quad (III.25)$$

mit

$$a(u) \equiv \frac{1}{3} \{ 1 + 2[1 - \tilde{P}_{r0}(u)/\tilde{P}_{00}(u)] \} \quad (III.26)$$

gegeben (s. Anhang A). Mithilfe der Gln. (III.25, 26) läßt sich die Depolarisation also im Prinzip für beliebig ω -abhängige isotrope Verteilungen $g(\underline{\omega})$ berechnen.

(ii) *Dreidimensionale Gaußverteilung $g(\underline{\omega})$:*

Zur Berechnung der Depolarisation P für die Verteilung (III.2) ist das Integral in (III.25) mit

$$\bar{g}(\omega) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} \exp(-\frac{1}{2}\omega^2/\sigma^2) \quad (III.27)$$

auszuführen. Die explizite Berechnung dieses Integrals erfordert — vgl. Anhang A — einen gewissen Aufwand, so daß an dieser Stelle direkt das Endresultat für $\tilde{P}(u)$ angegeben werden soll:

$$\begin{aligned}\tilde{P}(u) &= \frac{1}{u}(a-1)\frac{1}{b^2}\left[\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{b}\exp\left(\frac{1}{2b^2}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{2}b}\right)-1\right]+\frac{a}{u}, \\ b(u) &\equiv \sigma\tilde{P}_{00}(u), \quad a(u) \text{ vgl. Gl. (III.26)}.\end{aligned}\tag{III.28}$$

Durch numerische Laplace-Rücktransformation läßt sich mit diesem Resultat der Polarisationszerfall $P(t)$ explizit für alle Typen von Gittern berechnen, für die die RW-Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\tilde{P}_{00}(u)$ und $\tilde{P}_{r_0 0}(u)$ bekannt sind. Bevor als konkretes Beispiel der Fall der halbumendlichen linearen Kette (Bild III.2b) diskutiert wird, soll auf einige allgemeinere Eigenschaften der Depolarisation dieses Modells hingewiesen werden, die sich aus (III.28) ableiten lassen, ohne daß eine genauere Kenntnis der speziellen Form von $\tilde{P}_{00}$ und $\tilde{P}_{r_0 0}$ erforderlich wäre.

Das Kurzzeitverhalten der Depolarisation $P(t)$ bei Zeiten $t \ll 1$ läßt sich mit (III.28) aus dem Kurzzeitverhalten der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $P_{00}(t)$ und $P_{r_0 0}(t)$ ableiten. Unabhängig von der Dimension und vom Gittertyp gilt

$$P_{00}(t) \underset{t \ll 1}{=} 1 + O(t),$$

bzw. (allgemeiner)

$$P_{r_0 0}(t) \underset{t \ll 1}{=} \frac{t^{n_0}}{n_0!} w [1 + O(t)], \tag{III.29}$$

wobei n_0 die minimale Anzahl von Schritten bezeichnet, mit denen die auf r_0 startende Störstelle den Ursprung $r = 0$ erreichen kann, und w die RW-Wahrscheinlichkeit, daß sie bei n_0 Schritten auch tatsächlich den Ursprung erreicht ($w = \text{Zahl aller minimalen Wege der Länge } n_0 / \text{Zahl aller diskreten } n_0\text{-Schritt Random Walks}$). Der Faktor $t^{n_0}/n_0!$ ist das führende Verhalten der Wahrscheinlichkeit, daß die Störstelle in $[0, t]$ n_0 Sprünge ausführt. Gl. (III.29) liefert das führende Verhalten von $\tilde{P}_{00}(u)$ bzw. $\tilde{P}_{r_0 0}(u)$ für $u \gg 1$, so daß aus (III.28) das führende Verhalten von $\tilde{P}(u)$ für $u \gg 1$ abgeleitet werden kann und daraus wiederum das Kurzzeitverhalten von $P(t)$:

$$P(t) = 1 - \frac{2}{(n_0 + 2)!} w \sigma^2 t^{n_0+2} [1 + O(t)] \quad (t \ll 1, t \ll \sigma^{-1}). \tag{III.30}$$

Während das Kurzzeitverhalten im Fall $r_0 = 0$ trivialerweise durch das Kurzzeitverhalten der statischen Kubo-Toyabe-Funktion (III.6) gegeben ist, zeigt dieses Resultat

darüberhinaus deutlich die Verlangsamung des Polarisationszerfalls mit zunehmender Entfernung n_0 der Startposition r_0 vom Ursprung; der zusätzliche Faktor t^{n_0} spiegelt in Übereinstimmung mit der Erwartung die Tatsache wider, daß die Störstelle mindestens n_0 Sprünge ausführen muß, um zum ersten Mal den Ursprung zu erreichen.

Zur Diskussion des *asymptotischen Verhaltens* betrachten wir der Einfachheit halber zuerst den Fall $r_0 = 0$ [(d.h. $a(u) = \frac{1}{3}$, Gl. (III.26)] und unterscheiden zwischen wiederkehrenden und transienten Random Walks. Wiederkehrende Random Walks, wie z.B. der RW auf der (halb)unendlichen linearen Kette, sind durch $\tilde{P}_{00}(u) \rightarrow \infty$ ($u \rightarrow 0$) charakterisiert; in diesem Fall verschwindet der erste Summand in Gl. (III.28) für $u \rightarrow 0$ [vgl. Gl. (7.1.23) in Ref. 68], während er bei endlichem $\tilde{P}_{00}(u=0) = a_0$ (transiente Random Walks) durch $\frac{1}{u}c(a_0)$ gegeben ist. Somit folgt:

$$P(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{wiederkehrende Random Walks,} \\ \frac{1}{3} + c(a_0) & \text{transiente Random Walks.} \end{cases} \quad (\text{III.31})$$

Auch dieses Resultat entspricht ganz den Erwartungen; während bei wiederkehrenden RW-Prozessen von jedem einzelnen Walk die Kubo-Toyabe-Funktion im Laufe der Zeit mit Wahrscheinlichkeit 1 vollständig "durchgefahren" wird, beschreibt die Konstante $c(a_0)$ bei transienten Random Walks den Effekt, daß ein endlicher Bruchteil aller Walks früher oder später nicht mehr den Ursprung besucht und damit nur eine unvollständige Kubo-Toyabe-Relaxation zur Folge hat. Der Fall $r_0 \neq 0$ hat nur insoweit Einfluß auf das Verhalten in (III.31), daß bei transienten Walks die Konstante c eine zusätzliche Abhängigkeit von r_0 bekommt, d.h. $c = c(a_0, r_0)$. Wie sich die Polarisation $P(t)$ ihrem asymptotischen Wert annähert, läßt sich nur von Fall zu Fall, d.h. bei expliziter Kenntnis des (Langzeit-)Verhaltens von P_{00} und $P_{r_0 0}$, beantworten.

III.2.2. DEPOLARISATION DURCH RANDOM WALK AUF HALBSTRAHL

Da sich der Random Walk auf dem Halbstrahl als eindimensionaler RW mit reflektierender Randbedingung (bei $r = -\frac{1}{2}$) charakterisieren läßt, lassen sich die Größen $\tilde{P}_{00}(u)$ und $\tilde{P}_{r_0 0}(u)$ mit der sog. Spiegelbildmethode (s. z.B. [83]) leicht angeben. Die Wahrscheinlichkeit $P^H(r, t | r_0, 0)$, daß sich ein auf dem Halbstrahl diffundierendes Teilchen T, das zur Zeit $t = 0$ am Platz $r_0 \geq 0$ gestartet ist, zur Zeit t am Platz r ($r \geq 0$) befindet, ist gegeben durch die Summe der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des *uneingeschränkten* Random Walks des Teilchens selbst und seines Spiegelbildes T', das zur

Zeit $t = 0$ am Ort $-(r_0 + 1)$ gestartet ist (vgl. Bild III.3):

$$\begin{aligned} P^H(r, t | r_0, 0) &= P(r, t | r_0, 0) + P(r, t | -(r_0 + 1), 0) \\ &= P(r - r_0, t) + P(r + r_0 + 1, t) . \end{aligned}$$

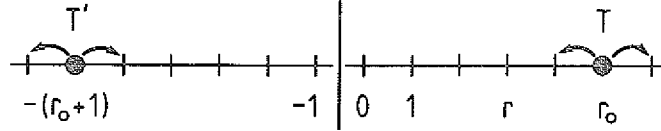


Bild III.3: Random Walk auf Halbstrahl: Reflektierende Randbedingung bei $-\frac{1}{2}$, Teilchen T und Spiegelbild T' .

Für $P_{00}(t) = P^H(0, t | 0, 0)$ und $P_{r_0 0}(t) = P^H(0, t | r_0, 0)$ folgt somit mit Gl. (II.23) für $\tilde{P}(r, u)$:

$$\tilde{P}_{00}(u) = \frac{1}{C(u)} [1 + A(u)] , \quad \tilde{P}_{r_0 0}(u) = \frac{1}{C(u)} A^{r_0}(u) [1 + A(u)] , \quad (III.32)$$

wobei

$$C(u) = \sqrt{u(u+2)} , \quad A(u) = u + 1 - \sqrt{u(u+2)} .$$

Der aus Gl. (III.28) mit (III.32) berechnete Zerfall der Polarisation $P(t)$ ist in Bild III.4 und Bild III.5 für verschiedene Kombinationen der Parameter σ und r_0 dargestellt. Es sei hier nochmals daran erinnert, daß in dieser Arbeit Zeiten bzw. Frequenzen dimensionslos in Vielfachen der mittleren Wartezeit τ bzw. der Sprungrate $\gamma = \tau^{-1}$ gemessen werden. Bild III.4 zeigt bei fester Startposition $r_0 = 0$ die Abhängigkeit des Verhaltens von $P(t)$ von der Breite σ der Frequenzverteilung (III.2), die — zu lesen als $\sigma\tau$ bzw. $\sigma\gamma^{-1}$ — als inverses Maß für die Schnelligkeit der durch den RW bedingten Frequenzmodulation anzusehen ist. Bei den größeren Werten von σ wird der Zerfall noch deutlich vom Verhalten der statischen Kubo-Toyabe-Funktion, vgl. Bild III.1, geprägt. Der Effekt, der bei allmählich abnehmendem σ , d.h. bei schneller werdender Frequenzmodulation, auftritt, läßt sich so charakterisieren, daß sich das für diese Funktion typische Minimum langsam zu größeren Zeiten hin verschiebt (auch im Vergleich zu $t_{min} = \sqrt{3}/\sigma$ im statischen Fall) und gleichzeitig immer schwächer wird. Dieses Verhalten ist ein weiteres Beispiel für die bereits angesprochene Sensitivität der Nullfeld-Depolarisation im Bereich nicht allzu schneller Frequenzmodulation. Bei noch

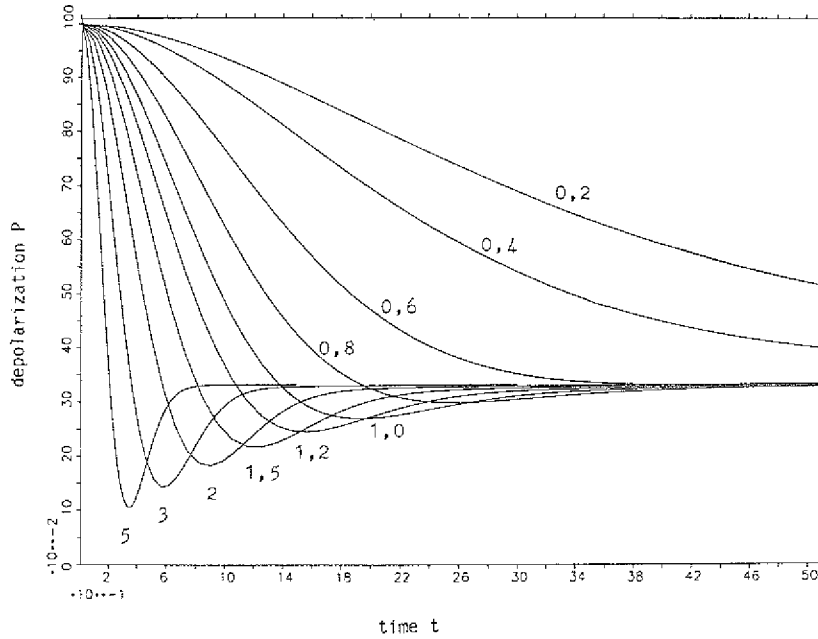


Bild III.4: Depolarisation durch Störstellen bei Random Walk auf halbumendlicher linearer Kette ($r_0 = 0$) für verschiedene Werte von σ [dreidimensionale Gaußverteilung (III.2)].

kleineren Werten von σ ($\sigma \lesssim 0,6$ in Bild III.4) fällt die Depolarisation schließlich von Anfang an monoton auf den asymptotischen Wert $\frac{1}{3}$, vgl. Bild III.5a ($\sigma = 0,1$).

Aus den Gln. (III.28, 32) läßt sich ein einfacher Ausdruck für den asymptotischen Zerfall auf $\frac{1}{3}$ ableiten, der bei kleinen Werten von σ das Verhalten der Depolarisation bestimmt. Betrachten wir zuerst den Fall $r_0 = 0$: Setzt man das führende Verhalten von $\tilde{P}_{00}(u)$ für $u \ll 1$, $\tilde{P}_{00}(u) \approx \sqrt{2}u^{-1/2}$, in (III.28) ein, so erhält man mit $a(u) = \frac{1}{3}$ für $r_0 = 0$ einen Ausdruck für die Laplace-Transformierte der Depolarisation,

$$\tilde{P}(u) \underset{u \ll 1}{\approx} \frac{1}{3\sigma^2} u \left[\frac{1}{u} - \frac{\sqrt{\pi}}{u^{1/2}} \exp\left(\frac{u}{4\sigma^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{u^{1/2}}{2\sigma}\right) \right] + \frac{1}{3u},$$

der dem folgenden Verhalten im Zeitbereich [68] entspricht:

$$P(t) \underset{t \gg 1}{\approx} \frac{1}{3} + \frac{2}{3}(1 + 4\sigma^2 t)^{-3/2} \quad (r_0 = 0). \quad (\text{III.33})$$

Wie Bild III.5b zeigt, liefert dieser Näherungsausdruck auf fast dem gesamten Zeitbereich eine sehr gute Beschreibung des (exakt berechneten) Polarisationszerfalls. Bild III.5b zeigt — ebenso wie Bild III.5a — deutlich die mit r_0 zunehmende Verlangsamung der Annäherung an den asymptotischen Wert $\frac{1}{3}$. Die Gln. (III.28, 32) erlauben

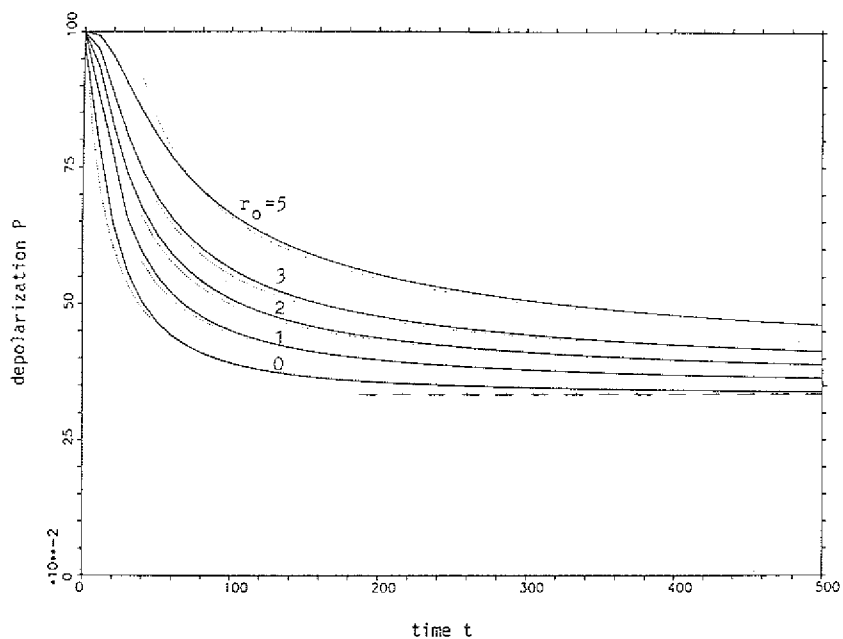
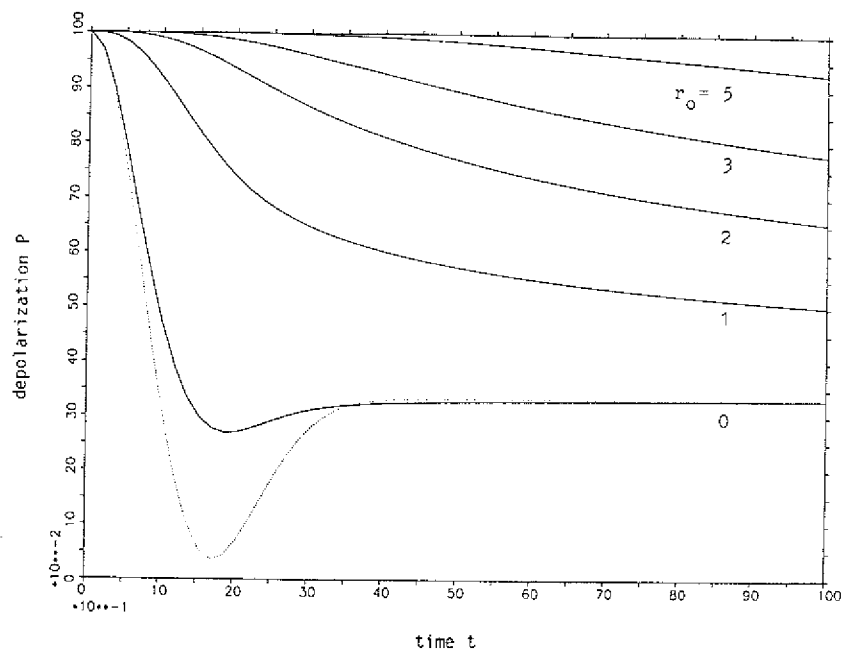


Bild III.5 : Depolarisation durch Störstellen bei Random Walk auf halbbunendlicher linearer Kette für verschiedene Startpositionen r_0 [dreidimensionale Gaußverteilung (III.2) mit Breite σ].
 (a) $\sigma = 1,0$. Punktierte Linie: statische Kubo-Toyabe-Funktion (III.6).
 (b) $\sigma = 0,1$. Punktierte Linien: asymptotisches Verhalten (vgl. Text).

näherungsweise eine einfache Beschreibung des Effekts, der damit verbunden ist, daß die Störstelle *nicht* am Ort des Spins startet. Die einzige Abhängigkeit von r_0 tritt in der Größe $a(u)$ auf [(III.26)]; mit

$$a(u) \underset{u \ll 1}{\approx} a^{(r_0=0)} + \frac{1}{3} \sqrt{2} r_0 u^{-1/2}$$

berücksichtigen wir diese zusätzliche Abhängigkeit von r_0 in führender Ordnung von $u \ll 1$ und können damit Gl. (III.28) formal als $\tilde{P}(u) = \tilde{P}^{(r_0=0)} + r_0 f(u)$ schreiben. Ein analoges Vorgehen wie oben liefert schließlich:

$$P(t) \underset{t \gg 1}{=} P^{(r_0=0)}(t) + r_0 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t^{-1/2} [1 + O(t^{-1})], \quad (\text{III.34a})$$

bzw. mit (III.33)

$$P(t) \underset{t \gg 1}{=} \frac{1}{3} + r_0 \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t^{-1/2} + O(t^{-3/2}). \quad (\text{III.34b})$$

Bemerkenswert ist, daß der asymptotische Zerfall auf $\frac{1}{3}$ in führender Ordnung nun durch einen Term $\propto t^{-1/2}$ statt $t^{-3/2}$ für $r_0 = 0$ gegeben ist. Die in Bild III.5b eingetragenen asymptotischen Kurven entsprechen der Gl. (III.34a) mit Gl. (III.33) für $P^{(r_0=0)}(t)$.

Die Abhängigkeit des anfänglichen Polarisationszerfalls von der Startposition r_0 wird durch Gl. (III.30) mit $n_0 = r_0$ und $w = 2^{-r_0}$ beschrieben. Bei größeren Werten von σ , vgl. Bild III.5a, hat die mit r_0 zunehmende Verlangsamung der Depolarisation den Effekt, daß bereits in dem Fall, in dem die Störstelle statt am Ursprung am nächsten Nachbarplatz $r_0 = 1$ startet, der Zerfall qualitativ anders aussieht: Das bei $r_0 = 0$ noch zu beobachtende Minimum verschwindet. Dieser Effekt ist abermals ein Beispiel dafür, daß die Null-Feld-Depolarisation vielfach in einfacherer Weise als z.B. die transversale Spinrotation Rückschlüsse auf die der Depolarisation zugrundeliegenden Mechanismen zuläßt.

III.3. STRONG-COLLISION-MODELL

In diesem Abschnitt wird das zuvor betrachtete Modell für die Depolarisation durch Störstellen insoweit modifiziert, daß nun das "Feld" ω , das die Störstelle auf den Spin ausübt, nicht mehr zeitlich konstant ist, sondern bei jedem neuen Kontakt zwischen Spin und Störstelle durch einen neuen, zufällig aus der zugrundeliegenden Verteilung $g(\omega)$ gezogenen Vektor gegeben ist. Diese Annahme kann als vereinfachtes Modell für Situationen angesehen werden, in denen z.B. die diffundierende Störstelle auf anderen

Gitterplätzen als dem, an dem sie mit dem Spin wechselwirkt, zusätzlichen (schnellen) Störungen ausgesetzt ist, die das mit ihr verbundene magnetische Feld zufällig — und auf der durch den Random Walk gegebenen Zeitskala unkorreliert — verändern.

Zur Berechnung der Polarisierung P der Spins folgen wir hier in den Grundzügen der Vorgehensweise von Kehr *et. al.* [23], die das Strong-Collision-Modell für die transversale Spinrotation behandelt haben, bei dem in einem Poisson-Prozeß mit Übergangsrate γ_c instantane Übergänge zwischen zufälligen, unkorrelierten Frequenzen ω erfolgen. Das äquivalente Modell ist von Hayano *et. al.* [81] für die Null-Feld-Depolarisation diskutiert worden, d.h. für Übergänge zwischen Rotationsfrequenzen ω mit Gaußverteilung (III.2). Betrachtet man die statische Kubo-Toyabe-Funktion als Grenzfall $\gamma_c = 0$, so läßt sich der Effekt der stochastischen Frequenzmodulation so beschreiben, daß bei kleinem γ_c (d.h. $\gamma_c \lesssim 0.5\sigma$) im wesentlichen nur das asymptotische Plateau von $\frac{1}{3}$ (langsam) exponentiell zerfällt, während der anfänglich gaußsche Zerfall noch kaum berührt wird. Erst bei größeren Übergangsraten ist der Zerfall praktisch von Anfang an exponentiell.

Abgesehen davon, daß im nachfolgend betrachteten Modell auch die Möglichkeit der Anwesenheit eines externen Feldes ω_0 miteingeschlossen wird, ist auch der stochastische Prozeß, mit dem die Übergänge selbst erfolgen, komplizierter. Dieser Prozeß ist hier durch die Statistik der Besuche der Störstelle am Ort $r = 0$ des Spins gegeben (vgl. Bild III.2). Bild III.6 veranschaulicht das Modell am Beispiel eines Random Walks, charakterisiert durch die in Gl. (III.10) definierte Funktion $\eta(t)$, bei dem die Störstelle bis zur Zeit t n -mal den Ursprung besucht.

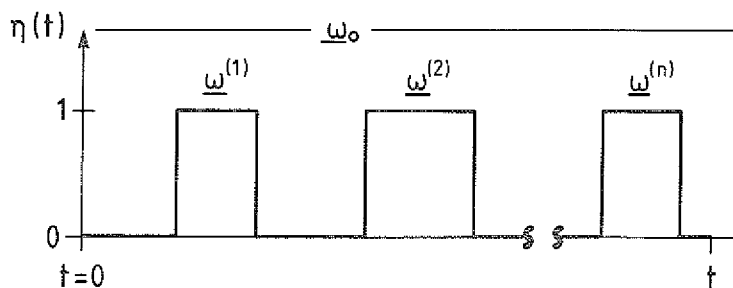


Bild III.6: Random Walk mit n Besuchen am Ursprung [$\eta(t) = 1$], zufällige Rotationsfrequenzen $\omega^{(1)}, \dots, \omega^{(n)}$.

Die Frequenz $\omega^{(i)}$ bezeichne die zufällige Rotationsfrequenz beim i -ten Besuch der Störstelle (Bild III.6). Die Rotation des Spins mit $\omega_0 + \omega^{(i)}$ während dieses Besuchs läßt sich mit der Drehmatrix

$$\mathbf{D}_+^{(i)} \equiv \mathbf{D}(\omega_0 + \omega^{(i)}, t), \quad (\text{III.35})$$

vgl. Gl. (III.3), beschreiben, deren Mittelwert über alle möglichen Werte von $\omega^{(i)}$,

$$\mathbf{G}_+(t) \equiv \langle \mathbf{D}(\omega_0 + \omega^{(i)}, t) \rangle_{\omega^{(i)}}, \quad (\text{III.36})$$

(unabhängig von i) nur von der konkreten Gestalt der Verteilung $g(\omega)$ abhängt, vgl. die Gln. (III.5, 6) bzw. (III.8, 9) für die dreidimensionale Gaußverteilung (III.2). $\mathbf{D}_0(t) = \mathbf{D}(\omega_0, t)$ sei wie zuvor die Drehmatrix der Rotation mit ω_0 .

Vor der Berechnung der mittleren Polarisierung $\underline{P}$ ist es sinnvoll, die RW-Wahrscheinlichkeiten für die mit dem Random Walk verbundenen Teilprozesse zu definieren, die für die zeitliche Statistik der Besuche am Ursprung von Bedeutung sind:

(a) Random Walk zu $r = 0$:

$$F_{r_0}(t) \quad \text{bzw.} \quad N_{r_0}(t) = 1 - \int_0^t F_{r_0}(t') dt' \quad (\text{III.37})$$

$F_{r_0}(t) dt$ ist definiert als die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen (die Störstelle) *zum ersten Mal* in $[t, t+dt]$ auf $r = 0$ springt, wenn es zur Zeit $t = 0$ auf r_0 gestartet ist. Die zugehörige "Überlebenswahrscheinlichkeit" N_{r_0} ist demgegenüber die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen bis t *nicht* den Ursprung besucht hat. Die "First-Passage"-Wahrscheinlichkeit F_{r_0} läßt sich für Markov'sche Random Walks wie den hier betrachteten kontinuierlichen Random Walk in einfacher Weise (s. z.B. [84]) durch elementare RW-Aufenthaltswahrscheinlichkeiten ausdrücken: In der im vorigen Abschnitt eingeführten Notation [Def. (III.17)] ist

$$P_{r_0 0}(t) = \int_0^t P_{00}(t-t') F_{r_0}(t') dt' \quad (r_0 \neq 0), \quad (\text{III.38})$$

so daß für die Laplace-Transformierte von F_{r_0} folgt:

$$\tilde{F}_{r_0}(u) = \tilde{P}_{r_0 0}(u) / \tilde{P}_{00}(u). \quad (\text{III.39})$$

Als Spezialfall hiervon wird $F_1(t)$ als die Wahrscheinlichkeitsdichte für den ersten Besuch am Ursprung definiert, wenn das Teilchen auf einem der (äquivalenten) nächsten Nachbarplätze ("r = 1") des Ursprungs gestartet ist. Entsprechend ist $N_1(t)$ die zugehörige Überlebenswahrscheinlichkeit.

(b) Aufenthalt auf r = 0:

$$\psi_0(t) \quad \text{bzw.} \quad \phi_0(t) = 1 - \int_0^t \psi_0(t') dt' \quad (III.40)$$

$\psi_0(t) dt$ sei die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen, das zur Zeit $t = 0$ auf den Ursprung $r = 0$ gesprungen ist, diesen im Zeitintervall $[t, t + dt]$ das erste Mal wieder verläßt, d.h. auf irgendeinen der nächsten Nachbarplätze springt. $\phi_0(t)$ ist dementsprechend die Wahrscheinlichkeit, daß bis t kein Sprung erfolgt ist. Für den kontinuierlichen Random Walk mit Sprungrate γ ist

$$\psi_0(t) = \gamma_0 \exp(-\gamma_0 t) \quad \text{bzw.} \quad \phi_0(t) = \exp(-\gamma_0 t), \quad (III.41)$$

wobei $\gamma_0 = \gamma$ für einfache d -dimensionale Gitter (vgl. Bild III.2a), aber z.B. $\gamma_0 = \frac{1}{2}\gamma$ für den Halbstrahl (Bild III.2b), bei dem das Teilchen vom Ursprung nur auf den Platz $r = 1$ springen kann.

Die mittlere Polarisation, die der Bequemlichkeit halber in der Form

$$P(t) = \mathbf{P}(t) \cdot \mathbf{S}_0 \quad (III.42)$$

geschrieben werden soll, soll zuerst nur für den Fall betrachtet werden, daß die Störstelle am Ursprung startet ($r_0 = 0$). Die Verallgemeinerung auf $r_0 \neq 0$ kann in einem zweiten Schritt mit Hilfe von (III.37) leicht durchgeführt werden. Zur Berechnung der Matrix $\mathbf{P}(t)$ ist es sinnvoll, die Random Walks nach der Zahl der Besuche n am Ursprung ($n \geq 1$, da $r_0 = 0$) und darüberhinaus danach zu klassifizieren, ob der letzte (n -te) Besuch zur Zeit t (a) noch andauert oder (b) bereits vorher abgeschlossen wurde. $\mathbf{P}_n^{(a)}(t)$ bzw. $\mathbf{P}_n^{(b)}(t)$ seien die Beiträge aller Walks mit den entsprechenden Eigenschaften:

$$\mathbf{P}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} [\mathbf{P}_n^{(a)}(t) + \mathbf{P}_n^{(b)}(t)]. \quad (III.43)$$

Betrachten wir zuerst $P_n^{(a)}$. Mit den Definitionen (III.35, 36, 37 u. 40) folgt

$$\begin{aligned}
 P_1^{(a)}(t) &= \left\langle \phi_0(t) D_+^{(1)}(t) \right\rangle_{\omega(1)} = \phi_0(t) G_+(t), \\
 P_2^{(a)}(t) &= \left\langle \int_0^t dt_2 \phi_0(t-t_2) D_+^{(2)}(t-t_2) \int_0^{t_2} dt_1 F_1(t_2-t_1) D_0(t_2-t_1) \psi_0(t_1) D_+^{(1)}(t_1) \right\rangle_{\omega(1), \omega(2)} \\
 &= \int_0^t dt_2 \phi_0(t-t_2) G_+(t-t_2) \int_0^{t_2} dt_1 F_1(t_2-t_1) D_0(t_2-t_1) \psi_0(t_1) G_+(t_1), \\
 &\text{usw.}
 \end{aligned}$$

Das $(2n-2)$ -fache Faltungsintegral, das sich in dieser Weise für $P_n^{(a)}(t)$ ergibt, ist symbolisch in Bild III.7a dargestellt. Laplace-Transformation des entsprechenden Ausdrucks liefert

$$\tilde{P}_n^{(a)}(u) = \phi \widetilde{G}_+(u) \cdot [F_1 \widetilde{D}_0(u) \cdot \psi \widetilde{G}_+(u)]^{n-1}, \quad (\text{III.44a})$$

wobei

$$\phi \widetilde{G}_+(u) = \mathcal{L}\{\phi(t) G_+(t)\}, \text{ usw. .}$$

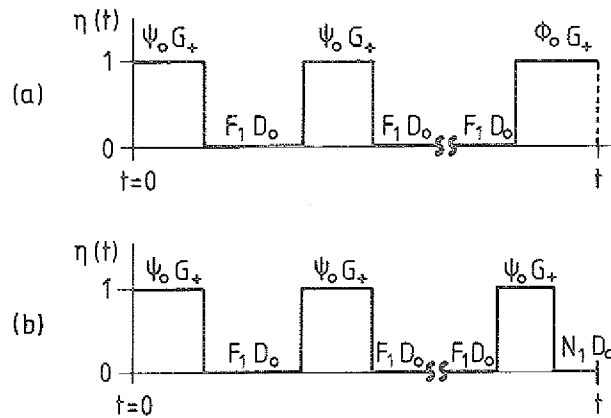


Bild III.7: Symbolische Darstellung der Beiträge von Random Walks mit n Besuchen am Ursprung:

(a) Teilchen zur Zeit t am Ursprung ($P_n^{(a)}$).

(b) Teilchen zur Zeit t nicht am Ursprung ($P_n^{(b)}$).

Ganz analog findet man für die Beiträge $P_n^{(b)}$ der Walks, bei denen sich das Teilchen nach dem n -ten Besuch zur Zeit t nicht mehr am Ursprung befindet, vgl. Bild III.7b,

das Resultat

$$\tilde{\mathbf{P}}_n^{(b)}(u) = \widetilde{N_1 \mathbf{D}_0}(u) \cdot \widetilde{\psi \mathbf{G}_+}(u) \cdot [\widetilde{F_1 \mathbf{D}_0}(u) \cdot \widetilde{\psi \mathbf{G}_+}(u)]^{n-1}. \quad (III.44b)$$

Die Aufsummation aller Beiträge in Gl. (III.43) liefert mit (III.44a, b) das Resultat

$$\tilde{\mathbf{P}}(u) = [\widetilde{\phi \mathbf{G}_+}(u) + \widetilde{N_1 \mathbf{D}_0}(u) \widetilde{\psi \mathbf{G}_+}(u)] \cdot \frac{1}{\mathbf{E} - \widetilde{F_1 \mathbf{D}_0}(u) \widetilde{\psi \mathbf{G}_+}(u)}. \quad (III.45)$$

Dieses Resultat beschreibt das Verhalten der Polarisation für den Fall $r_0 = 0$. Mit den in (III.37) definierten Wahrscheinlichkeiten F_{r_0} bzw. N_{r_0} läßt sich ein einfacher Zusammenhang zwischen dem allgemeinen Fall mit beliebigem r_0 und dem oben behandelten aufstellen. Indem wir die Matrizen $\mathbf{P}$ explizit durch die Startposition r_0 kennzeichnen, ergibt sich mit

$$\mathbf{P}^{(r_0)}(t) = \int_0^t dt' \mathbf{P}^{(0)}(t - t') F_{r_0}(t') \mathbf{D}_0(t') + N_{r_0}(t) \mathbf{D}_0(t)$$

im Laplace-Raum die einfache Beziehung

$$\tilde{\mathbf{P}}^{(r_0)}(u) = \tilde{\mathbf{P}}^{(0)}(u) \cdot \widetilde{F_{r_0} \mathbf{D}_0}(u) + \widetilde{N_{r_0} \mathbf{D}_0}(u). \quad (III.46)$$

Dieses Resultat ermöglicht also in Verbindung mit Gl. (III.45) die Berechnung der mittleren Polariation $\mathbf{P}$ [Gl. (III.42)] für beliebige Startpositionen der Störstelle.

Gl. (III.45) läßt sich im Hinblick auf konkrete Berechnungen noch etwas vereinfachen. Zum einen stellen wir fest, daß aus Gl. (III.37) mit $r_0 = 1$

$$\widetilde{N_1 \mathbf{D}_0}(u) = \tilde{\mathbf{D}}_0(u) \cdot [\mathbf{E} - \widetilde{F_1 \mathbf{D}_0}(u)] \quad (III.47)$$

folgt, so daß die Matrix $\widetilde{N_1 \mathbf{D}_0}$ in (III.45) eliminiert werden kann. Beziehen wir uns weiterhin explizit auf die exponentielle Form von ψ_0 bzw. ϕ_0 [(III.41)], so ergibt sich

$$\begin{aligned} \widetilde{\psi \mathbf{G}_+}(u) &= \gamma_0 \tilde{\mathbf{G}}_+(u + \gamma_0), \\ \widetilde{\phi \mathbf{G}_+}(u) &= \tilde{\mathbf{G}}_+(u + \gamma_0). \end{aligned} \quad (III.48)$$

Mit (III.47, 48) erhalten wir aus Gl. (III.45) schließlich:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{P}}(u) &= \tilde{\mathbf{P}}(u) \cdot \mathbf{S}_0 \\ &= \{\mathbf{E} + \gamma_0 \tilde{\mathbf{D}}_0(u) [\mathbf{E} - \widetilde{F_1 \mathbf{D}_0}(u)]\} \tilde{\mathbf{G}}_+(u + \gamma_0) \frac{1}{\mathbf{E} - \gamma_0 \widetilde{F_1 \mathbf{D}_0}(u) \tilde{\mathbf{G}}_+(u + \gamma_0)} \cdot \mathbf{S}_0. \end{aligned} \quad (III.49)$$

Mit diesem Resultat kann im Prinzip der Polarisationszerfall für beliebige externe Felder ω_0 und Anfangspolarisationen $\mathcal{S}_0$ berechnet werden, sowie für alle Typen von Gittern, für die die First-Passage-Wahrscheinlichkeit F_1 [z.B. über Gl. (III.39)] bekannt ist. Im Fall der Gaußverteilung (III.2) ist $\mathbf{G}_+$ dabei wie erwähnt im wesentlichen durch die Resultate (III.6, 9) gegeben.

III.3.1. LONGITUDINALE UND NULL-FELD-DEPOLARISATION

Die Berechnung der Polarisation P wird im longitudinalen Fall, d.h. für $\mathcal{S}_0 \parallel \omega_0 = \omega_0 e_z$, wesentlich dadurch vereinfacht, daß die Matrix $\mathbf{G}_+$ ebenso wie die Drehmatrix $\mathbf{D}_0$ keine Matrixelemente hat, die longitudinale Komponenten (z) mit transversalen Komponenten (x, y) koppelt. Das Problem ist also vollständig auf den longitudinalen Unterraum beschränkt. Mit $(\tilde{\mathbf{D}}_0)_{zz} = \frac{1}{u}$, $(\tilde{F}_1 \tilde{\mathbf{D}}_0)_{zz} = \tilde{F}_1(u)$ und $(\tilde{\mathbf{G}}_+)_{zz} = \tilde{G}_+(u)$ folgt aus (III.49) für die Depolarisation $\tilde{P}(u) = \tilde{P}_z(u)$ ($r_0 = 0$):

$$\tilde{P}(u) = \frac{\{1 + \frac{\gamma_0}{u}[1 - \tilde{F}_1(u)]\} \tilde{G}_+(u + \gamma_0)}{1 - \gamma_0 \tilde{F}_1(u) \tilde{G}_+(u + \gamma_0)}. \quad (\text{III.50})$$

Gl. (III.46), die die Verallgemeinerung auf beliebiges $r_0 \neq 0$ erlaubt, wird entsprechend zu

$$\tilde{P}^{(r_0)}(u) = \tilde{P}^{(r_0=0)}(u) \tilde{F}_{r_0}(u) + \tilde{N}_{r_0}(u). \quad (\text{III.51})$$

Die Funktion $\tilde{G}_+$ ist für $\omega_0 = 0$ durch die Laplace-Transformierte (vgl. [81]) der statischen Kubo-Toyabe-Funktion (III.6) gegeben,

$$\tilde{G}_+(u) = \frac{1}{3u} + \frac{2u}{3\sigma^2} [1 - u \tilde{g}_0(u)], \quad (\text{III.52a})$$

und für $\omega_0 \neq 0$ durch die Laplace-Transformierte des Ausdrucks (III.9), die die folgende Gestalt hat:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_+(u) = \frac{1}{u} \left(1 - \frac{2\sigma^2}{\omega_0^2} \right) + \frac{\sigma^2}{\omega_0^2} \tilde{g}_0(u + i\omega_0) \left(1 + i \frac{\sigma^2}{\omega_0 u} \right) \\ + \frac{\sigma^2}{\omega_0^2} \tilde{g}_0(u - i\omega_0) \left(1 - i \frac{\sigma^2}{\omega_0 u} \right). \end{aligned} \quad (\text{III.52b})$$

Die in (III.52) auftretende Funktion $\tilde{g}_0$ ist die Laplace-Transformierte von $g_0(t) \equiv \exp(-\frac{1}{2}\sigma^2 t^2)$:

$$\tilde{g}_0(u) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sigma} \exp\left(\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{u}{\sqrt{2}\sigma}\right). \quad (\text{III.53})$$

Die longitudinale bzw. Null-Feld-Depolarisation $P(t)$, die mit den Gln. (III.50–53) explizit berechnet werden kann, soll wiederum beispielhaft für den Random Walk auf der halbumendlichen linearen Kette diskutiert werden.

III.3.2. DEPOLARISATION DURCH RANDOM WALK AUF HALBSTRAHL

Die Laplace-Transformierte der in (III.37) definierten First-Passage-Wahrscheinlichkeit $F_{r_0}(t)$ ist für beliebige $r_0 > 0$ mit der allgemeinen Beziehung (III.39) und dem Resultat (III.32) für die RW-Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\tilde{P}_{00}(u)$ und $\tilde{P}_{r_0 0}(u)$ auf dem Halbstrahl durch

$$\tilde{F}_{r_0}(u) = [A(u)]^{r_0} = \left[u + 1 - \sqrt{u(u+2)} \right]^{r_0} \quad (\text{III.54})$$

gegeben. Anzumerken ist, daß dieses Resultat natürlich identisch mit dem ist, welches man im Fall des Random Walk auf einer unendlichen linearen Kette findet. Der Unterschied zwischen den beiden Modellen manifestiert sich somit in Gl. (III.50) allein in den unterschiedlichen Werten für γ_0 ($\gamma_0 = 1/2$ für den Halbstrahl).

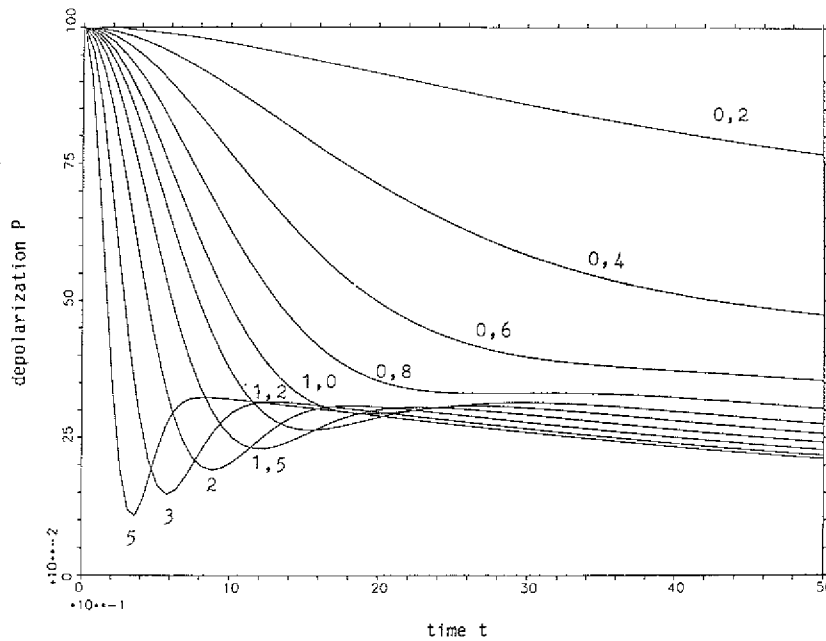


Bild III.8: Depolarisation durch Störstellen bei Random Walk auf Halbstrahl (Strong-Collision-Modell) für verschiedene Werte von σ ($\omega_0 = 0$, $r_0 = 0$)

Bild III.8 zeigt das Verhalten der Null-Feld-Depolarisation für verschiedene Werte von σ zwischen $\sigma = 5,0$ und $\sigma = 0,2$. Ebenso wie beim vorher betrachteten Modell

mit zeitlich konstantem Störstellenfeld, s. Bild III.4, wird auch hier der Übergang vom fast-statischen Verhalten, bei dem noch das für die Kubo-Toyabe-Funktion typische Minimum (abgeschwächt) vorhanden ist, zu einem Verhalten deutlich, bei dem die Depolarisation von Anfang an monoton fällt. Wie für das Strong-Collision-Modell zu erwarten ist, bleibt das asymptotische Plateau allerdings nicht erhalten; die Polarisation zerfällt asymptotisch langsam zu Null. Bild III.9 macht für $\sigma = 2,0$ und $\sigma = 0,5$ den Unterschied zwischen beiden Modellen noch einmal im direkten Vergleich deutlich.

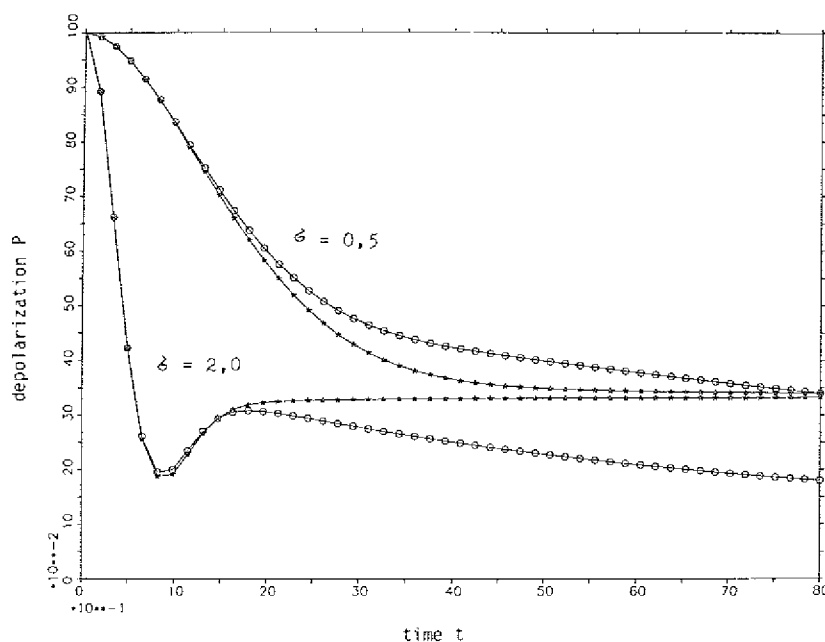


Bild III.9: Depolarisation durch Störstellen bei Random Walk auf Halbstrahl. Vergleich zwischen Modell mit zeitlich konstantem Störstellenfeld ($-*$) und Strong-Collision-Modell ($-o-$) für $\sigma = 2,0$ und $\sigma = 0,5$ ($\omega_0 = 0$, $\tau_0 = 0$)

Bild III.10a und Bild III.10b zeigen jeweils für festes σ ($\sigma = 2,0$ bzw. $\sigma = 0,1$) das Verhalten der longitudinalen Depolarisation bei verschiedenen Stärken ω_0 des externen Feldes. Typisch ist wiederum der langsame Zerfall (s.u.) des im statischen Fall vorhandenen asymptotischen Plateaus, das, vgl. Bild III.1, mit zunehmender Feldstärke bei höheren Werten liegt. Bei noch relativ langsamer Frequenzmodulation ($\sigma = 2,0$) sind die typischen ω_0 -abhängigen Oszillationen im Anfangsbereich noch weitgehend zu erkennen, Bild III.10a, nicht aber im Fall schneller Frequenzmodulation (vgl. Bild III.10b), in dem der Polarisationszerfall bei allen Werten von ω_0 durch einen langsamen, monotonen Abfall gekennzeichnet ist. Die Langsamkeit dieses Zerfalls — beachte die Zeitskala

in Bild III.10b — ist offensichtlich darauf zurückzuführen, daß der mit abnehmendem σ zunehmende Ausmittelungseffekt, der bei stochastischen Übergängen zwischen *verschiedenen* Rotationsfrequenzen ohnehin auftritt (vgl. das Strong-Collision-Modell von Hayano *et. al.* [81]), in seiner Wirkung zeitlich noch dadurch gestreckt wird, daß der Spin nur bei Besuchen der Störstelle depolarisiert wird.

Aus den Gln. (III.50, 54) läßt sich das führende asymptotische Verhalten ableiten; man findet:

$$P(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\gamma_0 \tilde{G}_+(\gamma_0)}{1 - \gamma_0 \tilde{G}_+(\gamma_0)} t^{-1/2}. \quad (III.55)$$

Im Fall der Null-Feld-Depolarisation ergibt sich hieraus in den beiden Grenzfällen langsamer ($\gamma_0 \ll \sigma$) bzw. schneller Frequenzmodulation ($\gamma_0 \gg \sigma$) mit (III.53) in jeweils führender Ordnung

$$P(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} (2\pi t)^{-1/2}, & \text{falls } \gamma_0 \ll \sigma, \\ \left(\frac{\gamma_0}{\sigma}\right)^2 (2\pi t)^{-1/2}, & \text{falls } \gamma_0 \gg \sigma. \end{cases} \quad (III.56)$$

Im Grenzfall $\gamma_0 \ll \sigma$ dauert jeder Besuch des Teilchens am Ursprung so lange, daß die Polarisation bei diesen Besuchen stets vollständig auf $\frac{1}{3}$ ihres Anfangswertes zerfällt; dies erklärt, daß das asymptotische Verhalten — zumindest in führender Ordnung — nicht von den Parametern γ_0 und σ abhängt.

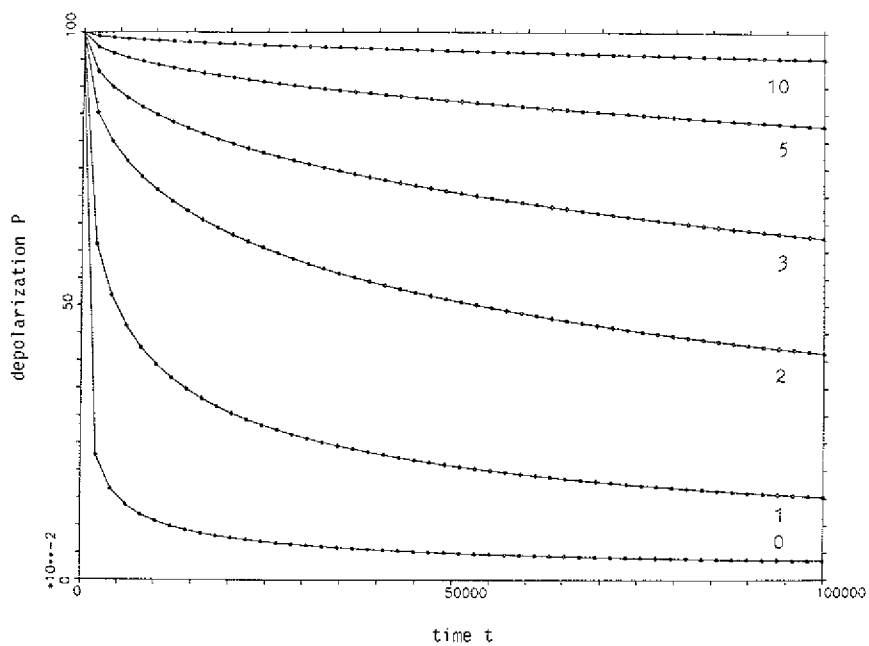
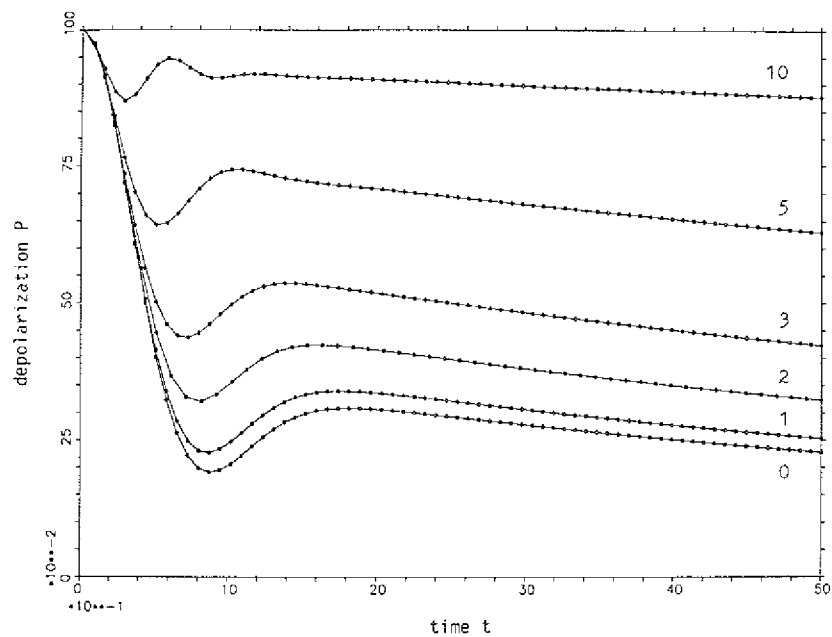


Bild III.10: Longitudinale Depolarisation durch Störstellen bei Random Walk auf Halbstrahl (Strong-Collision-Modell) für verschiedene Feldstärken ω_0 ($r_0 = 0$).

(a) $\sigma = 2,0$

(b) $\sigma = 0,1$

IV. Depolarisation durch Diffusion im Gittergas

Das in Kapitel II diskutierte Modell für die transversale Spindepolarisation durch Random Walks auf Gittern entspricht einer vergleichsweise idealisierten Beschreibung der Depolarisation infolge von Diffusionsprozessen. Eine wesentliche Annahme dieses Modells ist, daß jeder diffundierende Spin einen einfachen, in keiner Weise eingeschränkten Random Walk auf dem zugrundeliegenden Gitter ausführt. Sieht man von möglichen zusätzlichen Effekten wie z.B. Trapping an Verunreinigungen einmal ab, so ist diese Annahme in vielen Fällen durchaus gerechtfertigt, so z.B. bei der Myonenspinrotation in Metallen, bei der einzelne Myonen auf dem Zwischengitter diffundieren. Auf der anderen Seite liegt jedoch bei realen Diffusionsprozessen oft die Situation vor, daß die Bewegungen *vieler* diffundierender Teilchen miteinander korreliert sind. Als Beispiele wurden in der Einleitung bereits die Selbstdiffusion über thermische Leerstellen in Metallen, Ionenbewegungen in superionischen Leitern, die Wasserstoffdiffusion in Metallhydriden, usw. genannt. In all diesen Fällen hängt das Diffusionsverhalten der Teilchen deutlich von der Konzentration ab, mit der die diffundierenden Teilchen die ihnen zur Verfügung stehenden (Zwischen-)Gitterplätze besetzen; eine Beschreibung in einem einfachen Einteilchen-Bild ist in aller Regel — d.h. von gewissen einfachen Grenzfällen abgesehen — nicht mehr angemessen.

Ein einfaches Modell, mit dem sich Korrelationen infolge der Bewegung vieler Teilchen beschreiben lassen, ist das der Diffusion im sog. *Gittergas*, bei dem Teilchen in endlicher Konzentration c auf einem zugrundeliegenden Gitter diffundieren, wobei kein Platz doppelt besetzt werden darf. Als "nichtwechselwirkendes" Gittergas bezeichnet man dabei das Modell, in dem über dieses Verbot der Doppelbesetzung hinaus keine weiteren — z.B. anziehenden oder abstoßenden — Wechselwirkungen zwischen den Gittergasteilchen angenommen werden; dies soll nachfolgend — sofern nicht explizit anders vermerkt — stets vorausgesetzt werden.

Von Interesse ist beim Gittergas nicht so sehr die kollektive Diffusion, sondern vielmehr die einzelner, markierter "Tracer"-Teilchen, deren Bewegung durch die Anwesenheit der anderen "Hintergrund"-Teilchen eingeschränkt wird. Während dieser Effekt in höheren Dimensionen u.a. zu einer charakteristischen Konzentrationsabhängigkeit der Diffusionskonstanten führt, hat er in einer Dimension — wenn nur nächste Nachbar-Sprünge zugelassen sind, sich die Teilchen also nicht gegenseitig passieren können —

besonders drastische Konsequenzen: Die Tracer-Diffusion ist anomal, d.h. $\Delta r^2 \propto t^{1/2}$ für $t \gg 1$ (vgl. Abschnitt IV.1.2).

Abgesehen vom grundsätzlichen theoretischen Interesse ist das Studium der Tracerdiffusion auch im Hinblick auf experimentelle Anwendungen von Bedeutung. Die Einteilchen-Korrelationsfunktion, d.h. die bedingte Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r, t|0, 0)$ eines Tracerteilchens, ist z.B. bei der inelastischen Neutronenstreuung der Messung zugänglich. Ein anderes Beispiel (NMR) ist das bereits in Kapitel III erwähnte "magnetic tagging" in superionischen Leitern [76, 77]. In diesem Zusammenhang ist das Studium der Abhängigkeit der Gittergasdiffusion von der Dimensionalität insbesondere im Hinblick auf Ionenleiter mit quasi-eindimensionaler bzw. quasi-zweidimensionaler ionischer Leitfähigkeit von Bedeutung; hervorzuheben ist hier β -Eucryptit (LiAlSiO_4), das eine der am besten dokumentierten Substanzen mit ausgeprägt eindimensionaler [85] Ionenleitfähigkeit darstellt (vgl. [74, 86, 87]).

Eine Vielzahl von Fragestellungen, die sich im Zusammenhang mit der Diffusion in Gittergasen ergeben, ist — insbesondere auch in den letzten Jahren — in der Literatur diskutiert worden. Im nächsten Abschnitt wird ein kurzer Überblick über die wichtigsten Resultate gegeben werden, die im Hinblick auf die Untersuchungen in dieser Arbeit von Bedeutung sind.

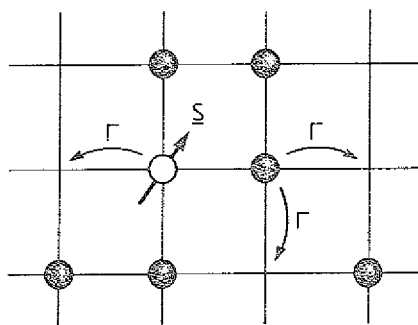


Bild IV.1: Gittergas ($d = 2$): Tracerteilchen (Spin $\underline{S}$) und Hintergrundteilchen (schwarz). $\Gamma = \gamma/z$ ist die Rate für einen Sprung zu einem freien nn-Platz.

In diesem Kapitel soll die Frage untersucht werden, wie sich der für die Diffusion im Gittergas typische Effekt der eingeschränkten Beweglichkeit der Teilchen auf den

Spinpolarisationszerfall auswirkt. Dazu wird das zuvor diskutierte Modell für die transversale Spindepolarisation, Abschnitt II.1, insofern modifiziert, daß nun angenommen wird, daß die Spinteilchen Tracer in einem nichtwechselwirkenden Gittergas diffundierender Hintergrundteilchen sind (Bild IV.1). Die spinabhängigen Wechselwirkungen werden wie zuvor durch zufällige (gaußverteilte) Rotationsfrequenzen ω_r modelliert, mit denen der Spin $\underline{S}$ auf den Plätzen r des zugrundeliegenden Gitters rotiert.

Man kann sich dieses Depolarisationsmodell als einfaches Modell für die transversale Spinrotation von Myonen in Metall-Wasserstoff-Systemen vorstellen, in denen die μ^+ als Tracer auf dem Zwischengitter diffundieren, das mit einer bestimmten Konzentration c mit (ihrerseits diffundierenden) H-Atomen als Hintergrundteilchen besetzt ist. Hervorzuheben ist hier eine Arbeit von Richter *et. al.* [39], die μ SR-Messungen an Nb H_x- bzw. Nb D_x-Proben durchgeführt haben, wobei im Vordergrund ihrer Untersuchungen gerade die Frage stand, inwieweit die Myonen überhaupt als Tracer Aufschlüsse über die H-Diffusion geben können. Die Ergebnisse dieser Arbeit sollen an dieser Stelle nicht im Detail erläutert werden (vgl. aber die Anmerkungen unten).

Im Vergleich zum einfachen Random-Walk-Modell, das man als Grenzfall $c \rightarrow 0$ auffassen kann, erwartet man infolge der Blockierungseffekte qualitativ einen mit zunehmender Konzentration c schneller werdenden Polarisationszerfall (— der Grenzfall $c \rightarrow 1$ entspricht offensichtlich dem statischen Limes, in dem die Polarisation gaußisch zerfällt). Die wesentlichen Fragen, die sich hierbei ergeben, sind, ob — insbesondere auch in $d = 1$ — die Polarisation immer noch einfach-exponentiell zerfällt, und falls ja, wie die Zerfallskonstante von der Konzentration c der Gittergasteilchen abhängt.

Das Ziel der folgenden Untersuchungen ist es, zunächst die allerwesentlichsten Aspekte der Depolarisation bei Diffusion im Gittergas zu verstehen. Deshalb wird auch ein möglichst einfaches Gittergas-Modell betrachtet. So soll z.B. stets davon ausgegangen werden, daß die Spinteilchen mit gleicher Übergangsrate Sprünge ausführen wie die anderen Gittergasteilchen, obwohl es gerade auch im Hinblick auf reale experimentelle Situationen interessant wäre, auch den allgemeineren Fall zu diskutieren, in dem sich die Übergangsraten von Tracer- und Hintergrundteilchen unterscheiden können. Insbesondere im Fall von Myonen in Metall-Wasserstoff-Systemen sollte man — ebenso wie Richter *et. al.* [39] — von diesem allgemeineren Fall ausgehen. Darüberhinaus stellt

natürlich bereits die Annahme eines *nicht*wechselwirkenden Gittergases eine ganz wesentliche Vereinfachung dar. Hier soll erwähnt werden, daß die o.g. Autoren anhand qualitativer Überlegungen aus den experimentellen Daten für NbH_x (β -Phase) den Schluß gezogen haben, daß statt eines nichtwechselwirkenden Gittergas-Modells eher ein Modell mit abstoßenden Myon-Wasserstoff-Wechselwirkungen herangezogen werden sollte. Diese Beispiele machen deutlich, daß das vergleichsweise einfache Depolarisationsmodell, das in diesem Kapitel diskutiert werden soll, im allgemeinen noch nicht ausreicht, wenn man eine möglichst wirklichkeitsnahe Beschreibung realer Systeme anstrebt. Zudem ist, wie im Verlauf der folgenden Diskussion deutlich werden wird, bereits die Behandlung des "einfachen" Modells mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden.

Abschließend soll noch eine Bemerkung zu der dem Modell zugrundeliegenden Annahme gemacht werden, daß die Spins $\underline{S}$ wiederum nur an die statischen lokalen Felder des Gitters ankoppeln (also z.B. die Dipolfelder der Kernspins der Wirtsatome). Diese Annahme bedeutet, daß keinerlei spinabhängige Wechselwirkungen zwischen den Gittergasteilchen selbst, d.h. zwischen dem Tracer $\underline{S}$ und den Hintergrundteilchen, berücksichtigt werden. Zumindest im Fall der Myonen in NbH_x scheint dies gerechtfertigt zu sein; der Beitrag der H-Atome zur statischen Linienbreite σ ortsfester Myonen ist hier nur von der Größenordnung einiger Prozent [39]. Allgemein bleibt aber in jedem Einzelfall zu prüfen, inwieweit diese Annahme noch eine gute Näherung liefert.

Das weitere Programm dieses Kapitels ist folgendes: Im nächsten Abschnitt (IV.1) wird noch einmal eine genaue Definition des Gittergasmodells gegeben, gefolgt von einem kurzen Überblick über einige wichtige Resultate zur Tracerdiffusion. In dem nächsten großen Abschnitt (IV.2) wird die Depolarisation im eindimensionalen Fall untersucht werden; der Fall $d = 1$ ist wegen der anomalen Diffusion der einzelnen Teilchen besonders interessant. Wie in Kapitel II deutlich geworden ist, sind die Zahl der verschiedenen besuchten Plätze sowie die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsverteilung von zentraler Bedeutung für das Depolarisationsproblem; diese Größen werden in größerer Ausführlichkeit diskutiert werden. Resultate für $d = 2$ und $d = 3$ werden im letzten Teil dieses Kapitels diskutiert (Abschnitt IV.3).

IV.1. MODELL DES NICHTWECHSELWIRKENDEN GITTERGASES

Das Gittergasmodell, das in diesem Kapitel betrachtet werden wird, ist in der folgenden Weise definiert (vgl. Bild IV.1): Das zugrundeliegende, d -dimensionale Gitter ist mit einer Konzentration c mit Teilchen besetzt. Die Wechselwirkung zwischen diesen Teilchen besteht einzig darin, daß kein Gitterplatz doppelt oder mehrfach besetzt werden darf; der Gleichgewichtszustand des Systems ist demnach durch eine zufällige Besetzung der einzelnen Gitterplätze (Wahrscheinlichkeit c) charakterisiert. Die Diffusion der Teilchen erfolgt in der Weise, daß entsprechend einer exponentiellen Wartezeitverteilung mit Sprungrate $\Gamma \equiv \gamma/z$ Übergänge zu freien nächste-Nachbar-Plätzen erfolgen. (z = Zahl der nächsten Nachbarn). Bezogen auf ein beliebiges einzelnes Teilchen ist die Dynamik also die gleiche wie im Modell des einfachen kontinuierlichen Random Walks, vgl. Abschnitt II.1, nur daß nun die Möglichkeit besteht, daß die nächsten Nachbarplätze durch andere Teilchen blockiert sind. Wie in Kapitel II soll sich auch hier die Diskussion auf d -dimensionale "einfach-kubische" Gitter beschränken.

In einer Vielzahl von Arbeiten sind Probleme, die sich bei der Diffusion im Gittergas ergeben, sowohl analytisch wie auch mittels numerischer Simulationen untersucht worden. Einen sehr guten, aktuellen Überblick bietet hier eine Arbeit von Kehr und Binder [88]. Diese Arbeit, in der die numerischen Simulationen im Vordergrund stehen, enthält eine Vielzahl von Referenzen, die für eine weitergehende Einarbeitung in dieses Thema von großem Nutzen sind. Nachfolgend sollen einige wichtige Eigenschaften der Diffusion im Gittergas sowie die grundsätzlichen Probleme, die sich im Vergleich zum einfachen RW-Modell ergeben, diskutiert werden.

Während die kollektive Diffusion, die z.B. für den Zerfall eines Dichte-Gradienten maßgeblich ist, im nichtwechselwirkenden Gittergas ein vergleichsweise einfaches Problem darstellt (vgl. [89]), ist die Diffusion einzelner Teilchen (Tracer) weitaus schwieriger zu behandeln. Der Grund dafür ist, daß zwar die Änderung des Zustands des Gesamtsystems durch einen Markov-Prozeß gegeben ist, die Bewegung eines einzelnen Teilchens selbst aber *kein* Markov-Prozeß mehr ist. Vermittelt durch die An- oder Abwesenheit der anderen diffundierenden Teilchen sind die Sprünge des Tracers stark miteinander korreliert — ganz im Gegensatz zum einfachen RW, bei dem die einzelnen Sprünge völlig unabhängig voneinander erfolgen. Der grundsätzliche Mechanismus ist folgender: Unmittelbar nachdem das Teilchen einen Sprung ausgeführt hat, befindet sich mit

Sicherheit eine Leerstelle hinter ihm, so daß eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für einen Rücksprung besteht. Der Einfluß der Leerstellen, die das Teilchen hinter sich läßt, macht sich dabei jeweils so lange bemerkbar, bis diese — anschaulich gesprochen — aus der Umgebung des Teilchens wegdiffundiert sind. Der für das Gittergas typische Effekt der Rückwärtskorrelation ist umso ausgeprägter, je kleiner die Koordinationszahl z des Gitters ist.

Die einfachste Theorie für die Tracerdiffusion im Gittergas ist die sog. "Mean-Field(MF)-Theorie" ([88], vgl. auch [90]), in die die Anwesenheit der anderen Teilchen nur pauschal über die Wahrscheinlichkeit $(1 - c)$ eingeht, mit der Gitterplätze im Mittel nicht blockiert sind. Die Annahme ist, daß das Teilchen einen gewöhnlichen Random Walk mit einer effektiven Sprungrate $\gamma_{MF} = (1 - c)\gamma$ ausführt. In diesem einfachen Bild ergibt sich für die mittlere quadratische Auslenkung des Teilchens in allen Dimensionen d

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = D_{MF} \cdot t$$

mit

$$D_{MF} = a^2 \gamma_{MF} = (1 - c) \cdot D_0 . \quad (IV.1)$$

$D_0 = a^2 \gamma \equiv 1$ (mit Skalierung Gitterkonstante $a \equiv 1$, Sprungrate $\gamma \equiv 1$) ist die Diffusionskonstante eines einzelnen Teilchens auf dem leeren Gitter, d.h. die des einfachen kontinuierlichen RW's. Die Autokorrelationsfunktion $P(r, t) = P(r, t | r_0 = 0, 0)$ des Tracerteilchens (von dem stets angenommen werden soll, daß es sich zur Zeit $t = 0$ am Ursprung $r = 0$ des Gitters befindet) ist entsprechend durch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des einfachen RW's mit γ_{MF} statt γ gegeben.

IV.1.1. TRACERDIFFUSION IN HÖHEREN DIMENSIONEN

Zur Diskussion der Frage, inwieweit sich die für das Gittergas charakteristischen Korrelationen in einem von (IV.1) abweichenden Verhalten niederschlagen, soll zuerst der Fall höherer Dimensionen betrachtet werden. In $d \geq 2$ liegt normale Tracerdiffusion in dem Sinne vor, daß die mittlere quadratische Auslenkung zumindest bei großen Zeiten t linear mit der Zeit wächst:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim D_T \cdot t \quad (d \geq 2). \quad (IV.2)$$

Die Rückwärtskorrelationen haben allerdings zur Folge, daß die Tracer-Diffusionskonstante D_T gegenüber D_{MF} um einen konzentrationsabhängigen Faktor, den sog. Kor-

relationsfaktor $f(c)$, reduziert ist:

$$D_T = f(c) \cdot D_{MF} = f(c)(1 - c) \cdot D_0 \quad (IV.3)$$

mit $f(c) \leq 1$. Dieser prinzipielle Effekt wurde in den fünfziger Jahren zuerst von Bardeen und Herring [91] im Zusammenhang mit der Tracerdiffusion in Metallen erkannt. Der Korrelationsfaktor f läßt sich im sog. metallphysikalischen Limes $c \rightarrow 1$ ($\hat{=}$ geringe Konzentration thermisch aktivierter Leerstellen) exakt berechnen, da es im Prinzip genügt, den Random Walk einer einzigen Leerstelle zu berücksichtigen (s. Referenzen in [88]). Man findet z.B. im Fall des einfach-kubischen Gitters ($d = 3$) einen Wert von $f(c \rightarrow 1) = 0,653 \dots$. Im umgekehrten Grenzfall $c \rightarrow 0$ ist offensichtlich $f(c \rightarrow 0) = 1$.

Während die exakte Berechnung des Korrelationsfaktors in der Nähe dieser beiden Grenzfälle (Verhalten von $f(c)$ für $c \ll 1$ bzw. $1 - c \ll 1$) möglich ist, stellt die Tracerdiffusion im allgemeinen Fall beliebiger, intermediärer Konzentration c ein erheblich schwierigeres Problem dar, da nun die Korrelationen infolge der Bewegung *vieler* Teilchen bzw. Leerstellen berücksichtigt werden müssen und sich diese nicht in einfacher Weise beschreiben bzw. analytisch erfassen lassen. Bisher ist keine exakte Lösung für den Korrelationsfaktor $f(c)$ bei beliebigem c bekannt; entsprechendes gilt für die Autokorrelationsfunktion eines Tracerteilchens. Es sind verschiedene — zum Teil sehr komplizierte — Näherungsverfahren zur Berechnung dieser Größen angewandt worden, vgl. z.B. [92–95], die hier aber nicht im Detail diskutiert werden sollen (siehe auch Ref. 88). Angegeben werden soll das Resultat für $f(c)$, das von Nakazato und Kitahara [93] abgeleitet wurde:

$$f(c) = \frac{1 + \langle \cos \theta \rangle}{1 + [(2 - 3c)/(2 - c)] \langle \cos \theta \rangle} \quad (IV.4)$$

wobei $\langle \cos \theta \rangle$ der mittlere Cosinus des Winkels zwischen aufeinanderfolgenden Sprüngen im Limes $c \rightarrow 1$ ist. Gl. (IV.4) ist in den beiden Grenzfällen $c \rightarrow 1$ und $c \rightarrow 0$ exakt und stimmt auch bei intermediären Werten von c sehr gut mit den Simulationen überein. Anzumerken ist, daß das Resultat (IV.4) von Tahir-Kheli und Elliott [94] auf anderem Wege ebenfalls gefunden wurde (vgl. auch [96, 97]).

Das im Vergleich zum einfachen Random Walk komplizierte zeitliche Verhalten der Diffusion eines Tracers im Gittergas ist in einer Arbeit von Kehr *et. al.* [90] untersucht worden (vgl. auch [98]).

IV.1.2. ANOMALE TRACERDIFFUSION IN EINER DIMENSION

Charakteristisch für die Diffusion im eindimensionalen Gittergas ist, daß die einzelnen Teilchen einander nicht passieren können. Jeweils "gefangen" zwischen dem linken und rechten Nachbarn sind die Teilchen in ihrer Bewegungsfreiheit deutlich eingeschränkt. Das Problem der Diffusion in eindimensionalen Systemen, die dieser Einschränkung unterliegen, ist in der mathematischen Literatur von Harris [32] und Spitzer [33] diskutiert worden, die daraufhingewiesen haben, daß die mittlere quadratische Auslenkung eines markierten Teilchens nicht linear mit der Zeit, sondern nur proportional zu $t^{1/2}$ anwächst. Unabhängig von diesen Arbeiten fand das Problem der Tracer-Diffusion auf linearen Ketten in den späten Siebzigern im Zusammenhang mit der Beschäftigung mit eindimensionalen Ionenleitern das Interesse der Festkörperphysiker. Richards [34] führte erste numerische Simulationen aus und beobachtete dabei die anomale Diffusion $\propto t^{1/2}$; er führte qualitative Argumente für dieses Verhalten an. Kurz danach konnte Fedders [35] (mit einer diagrammatischen Entwicklung) das asymptotische Verhalten der mittleren quadratischen Auslenkung ableiten,

$$\langle r^2(t) \rangle \underset{t \gg 1}{\sim} \frac{1-c}{c} \left(\frac{2}{\pi} t \right)^{1/2}, \quad (IV.5)$$

dessen Gültigkeit später von Arratia [37] mathematisch streng bewiesen wurde. Eine elegante physikalische Erklärung dieses Resultats wurde von Alexander und Pincus [36] gegeben, die die Diffusion des Tracerteilchens mit der kollektiven Diffusion der anderen Teilchen in Beziehung setzten.

Van Beijeren *et. al.* [38] gelang es, eine näherungsweise Theorie aufzustellen, mit der sich das Verhalten von $\langle r^2(t) \rangle$ bei beliebigen Zeiten t beschreiben läßt. Das von ihnen aus einem genäherten, aber expliziten Ausdruck für die Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktion $\langle v(t)v(0) \rangle$ des Tracerteilchens (im Laplace-Raum) abgeleitete Resultat für die mittlere quadratische Auslenkung liefert sowohl das asymptotische Verhalten (IV.5) wie auch das richtige Kurzzeitverhalten, das in führender Ordnung durch das MF-Verhalten, vgl. (IV.1), gegeben ist:

$$\langle r^2(t) \rangle \underset{t \ll 1}{\approx} (1-c)t. \quad (IV.6)$$

Darüberhinaus zeigte der Vergleich mit numerischen Simulationen, die für verschiedene Konzentrationen c durchgeführt wurden (Ref. 38), daß diese Theorie auch bei intermediären Zeiten t das Verhalten von $\langle r^2(t) \rangle$ sehr gut beschreibt. Die Resultate zeigen

deutlich den Übergang von (IV.6) zu (IV.5); die Zeit, bei der dieser Übergang ungefähr auftritt, läßt sich mit (IV.5, 6) zu

$$t^* \approx \frac{2}{\pi c^2} \quad (IV.7)$$

abschätzen.

Explizite Resultate für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r, t)$ bei allen Zeiten t bzw. für deren Laplace-Transformierte sind mir nicht bekannt (vgl. aber z.B. [35, 99]). Arratia [37] hat in seiner mathematischen Arbeit gezeigt, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Variablen $rt^{-1/4}$ asymptotisch gegen eine Gaußverteilung konvergiert; das asymptotische Verhalten von $P(r, t)$ läßt sich damit folgendermaßen schreiben:

$$P(r, t) \approx (2\pi)^{-1/2}(at)^{-1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 / (at)^{-1/2} \right] \quad (IV.8)$$

mit $a \equiv \frac{2}{\pi}[(1-c)/c]^2$. Dieses Resultat deckt sich mit einer entsprechenden Annahme von Richards [34], die dieser aus seinen numerischen Simulationen gefolgert hatte.

Zum Abschluß sollen noch einige kurze Anmerkungen zur anomalen Tracerdiffusion (IV.5) gemacht werden. Untersuchungen an Modellen, mit denen sich der Übergang vom eindimensionalen zu höherdimensionalem Verhalten studieren läßt [100, 101], zeigen deutlich, daß das Auftreten der anomalen Diffusion (d.h. das Verschwinden der Tracer-Diffusionskonstanten D_T) in der Tat wesentlich von der strikten Eindimensionalität des Systems abhängt. Darüberhinaus ist die anomale Diffusion eine spezifische Eigenschaft des $d = 1$ -Gittergases mit *symmetrischen* Sprungraten. Ein noch so kleiner Unterschied zwischen den Sprungraten für Sprünge zu linken bzw. rechten nn -Plätzen — bedingt z.B. durch eine externe treibende Kraft — hat zur Folge, daß wieder normales diffusives Verhalten vorliegt (d.h., die Dispersion $\langle r^2(t) \rangle - \langle r(t) \rangle^2$ wächst asymptotisch linear mit t) [37, 102, 103].

IV.2. EINDIMENSIONALES GITTERGAS

In diesem Abschnitt soll die Depolarisation bei Diffusion im eindimensionalen Gittergas untersucht werden. Vom theoretischen Standpunkt aus gesehen ist der Fall $d = 1$ besonders interessant. Der drastische Unterschied im Diffusionsverhalten von "freien" und Gittergasteilchen wirft die Frage auf, ob beim Gittergas überhaupt noch motional narrowing im Sinne eines asymptotisch einfach-exponentiellen Polarisationszerfalls zu beobachten ist. Die Überlegungen in Kapitel II für das einfache RW-Modell haben

gezeigt, daß sich das grundsätzliche Verhalten der Depolarisation aus dem Verhalten der Zahl $s(t)$ der verschiedenen Plätze ableiten läßt, die ein Spinteilchen bis zur Zeit t besucht. Es ist zu erwarten, daß dies gleichermaßen beim Gittergas der Fall ist. Vor der eigentlichen Diskussion der Depolarisation soll daher zunächst die Zahl der verschiedenen besuchten Plätze (der Span) von Tracerteilchen im Gittergas untersucht werden.

IV.2.1. MITTLERER SPAN UND SPANVERTEILUNG

Beim Gittergas sind bisher weder die Verteilung $W(s, t)$ der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze noch deren Mittelwert

$$S(t) \equiv \langle s(t) \rangle$$

explizit untersucht worden. Zu erwähnen sind allerdings Arbeiten von Bunde *et. al.*, die numerische Simulationen zum Trapping von Tracerteilchen im eindimensionalen Gittergas durchgeführt haben. Untersucht wurde sowohl der Einfang an einzelnen [104] wie auch der an zufällig mit einer Konzentration c_H verteilten [105] "Tracer-selektiven" Haftstellen. Zu verstehen sind hierunter Gitterplätze, an denen *nur* Tracerteilchen absorbiert werden — die Diffusion der anderen Gittergasteilchen wird durch die Anwesenheit dieser Haftstellen nicht beeinflußt. Die Zahl der verschiedenen Plätze, die ein Teilchen bei Abwesenheit der Haftstellen besuchen würde, ist für Trapping-Probleme von zentraler Bedeutung (vgl. z.B. [84]); dies ist anschaulich klar, da ein Teilchen umso eher die Chance hat, auf eine Haftstelle zu treffen, je mehr verschiedene Plätze es besucht.

Bunde *et. al.* haben beobachtet, daß beim Gittergas der Einfang an den Haftstellen wesentlich langsamer erfolgt als im Fall von einzelnen Teilchen, die einen einfachen RW ausführen ("anomales" Trapping). Sie konnten dieses Verhalten mit einfachen Skalenargumenten qualitativ erklären.

Aus der Annahme, daß in $d = 1$ der mittlere Span $S(t)$ von der Größenordnung der mittleren Auslenkung der Teilchen sein sollte,

$$S(t) \sim \langle r^2(t) \rangle^{1/2} \propto \left(\frac{1-c}{c} \right)^{1/2} t^{1/4}, \quad (IV.9)$$

haben die Autoren bei dem Modell mit Einfang an einer einzelnen Haftstelle einen Skalenausdruck für die Einfangrate abgeleitet, mit dem sich das in den numerischen Simulationen beobachtete Verhalten dieser Größe gut beschreiben

ließ [104]. Vergleichbare, ebenfalls auf (IV.5) aufbauende Argumente für das Modell mit zufällig verteilten Haftstellen lieferten einen asymptotischen Ausdruck für die Überlebenswahrscheinlichkeit Φ der Tracerteilchen, $\Phi \sim \exp(-\text{const} \cdot t^{1/5})$, die deutlich langsamer zerfällt als im Fall einfacher RW's, wo das asymptotische Verhalten, $\Phi(t) \sim \exp(-\text{const} \cdot t^{1/3})$ in $d = 1$ ([45, 106]) exakt bekannt ist.

Die Ergebnisse von Bunde *et. al.* sprechen für die Gültigkeit der Annahme (IV.9). In unserem Zusammenhang ist weiterhin von Bedeutung, daß das asymptotische Verhalten der Überlebenswahrscheinlichkeit Φ bei zufällig verteilten Haftstellen wesentlich vom Verhalten der Spanverteilung auf der linken Flanke, d.h. bei kleinen Werten von s , bestimmt wird (vgl. z.B. [45, 84]). Die Skalentheorie für die Überlebenswahrscheinlichkeit — die für das Trapping von einzelnen, freien Teilchen für beliebige Dimension d z.B. von Anlauf [107] diskutiert wurde (siehe auch Ref. 108) — kann gleichermaßen auch als Skalentheorie für $W(s, t)$ bei kleinem s angesehen werden. Interpretiert man die Überlegungen von Bunde *et. al.* beim Gittergas in dieser Weise, so sollte sich $W(s, t)$ bei kleinem s ($1 \ll s < \langle s \rangle$) qualitativ wie

$$W(s, t) \sim \exp \left[-\text{const} \cdot \left(\frac{1-c}{c} \right)^2 \frac{t}{s^4} \right] \quad (\text{IV.10})$$

verhalten.

Im folgenden soll das Verhalten von $s(t)$ und $W(s, t)$ genauer untersucht werden. Eine Frage wird sein, ob bzw. inwieweit die obigen Skalenausdrücke tatsächlich eine qualitativ richtige Beschreibung liefern.

Das Problem der Statistik der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze — in $d = 1$ die Statistik der Minima und Maxima des Prozesses $r(t)$ — gehört zum allgemeinen Problemkreis der Statistik von Erstbesuchs ("First-Passage")-Prozessen. Die Berechnung von Größen wie $S(t)$ oder $W(s, t)$ läßt sich auf die Berechnung von — mehr oder weniger komplizierten — First-Passage(FP)-Wahrscheinlichkeiten zurückführen (vgl. z.B. [62, 84]). Um die Schwierigkeiten zu verdeutlichen, die bei dem Versuch der analytischen Behandlung dieser Größen beim Gittergas auftreten, betrachten wir als einfacheren Fall den mittleren Span S . Dieser läßt sich durch die Erstbesuchswahrscheinlichkeiten $F(r, t)$ für die einzelnen Gitterplätze r ausdrücken [— $F(r, t)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß zur Zeit t der Platz r zum ersten Mal besucht

wird]:

$$S(t) = 1 + \sum_{r \neq 0} \int_0^t F(r, t') dt' . \quad (IV.11)$$

Beim einfachen RW ist die Berechnung der FP-Wahrscheinlichkeiten F deshalb in einfacher Weise möglich, weil die folgende grundlegende Beziehung gilt:

$$P(r, t) = \int_0^t P(0, t - t') F(r, t') dt' , \quad (IV.12)$$

vgl. (III.38). Diese kann im Laplace-Raum nach F aufgelöst werden, $\tilde{F}(r, u) = \tilde{P}(r, u) / \tilde{P}(0, u)$, und man erhält unter Ausnutzung der Normierung $\sum_r \tilde{P}(r, u) = u^{-1}$ für den mittleren Span das einfache Resultat

$$\tilde{S}(u) = \frac{1}{u^2 \tilde{P}(0, u)} . \quad (IV.13)$$

$S(t)$ kann also in allen Fällen explizit berechnet werden, in denen die Laplace-Transformierte der RW-Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(0, t)$ bekannt ist.

Die wesentliche Voraussetzung für die Gültigkeit von (IV.12) ist die Markov-Eigenschaft des einfachen RW's. Die beiden Teilprozesse, die zu $P(r, t)$ beitragen — der erste Besuch des Teilchens auf r zu einer Zeit t' und die "Rückkehr" zu r nach einer weiteren Zeitspanne $t - t'$ — sind unabhängig voneinander und können daher getrennt ausgemittelt werden.

Bei Nicht-Markov-Prozessen stellt sich das Problem, daß beide Teilprozesse nicht mehr unabhängig voneinander betrachtet werden können. Da ein "kanonischer" Weg zur Berechnung der FP-Wahrscheinlichkeiten $F(r, t)$, wie er im markov'schen Fall von (IV.12) geliefert wird, für nicht-markov'sche Prozesse fehlt, muß im Prinzip in jedem Einzelfall nach einer jeweils geeigneten Methode gesucht werden, mit der sich die FP-Wahrscheinlichkeiten berechnen lassen. Das besondere Problem bei FP-Größen ist, daß bei diesen das Verhalten des betrachteten Prozesses zu allen vorherigen Zeiten eine Rolle spielt. Dies erklärt, weshalb die Behandlung von First-Passage-Problemen bei Nicht-Markov-Prozessen in aller Regel äußerst schwierig ist.

Das zuvor Gesagte gilt natürlich insbesondere für die hier betrachtete Diffusion von Tracerteilchen im Gittergas, bei der zeitlich-langreichweitige Gedächtniseffekte auftreten. Theoretische Konzepte, mit denen sich beim Gittergas FP-Probleme erfolgreich analytisch behandeln lassen, sind zur Zeit nicht bekannt. Als ein Beispiel soll hier

das sog. "Scavenger"-Problem genannt werden [109–111] (vgl. auch Ref. 112). Bei diesem Problem, bei dem im Gegensatz zum Trapping-Problem nicht die diffundierenden Teilchen von den zufällig verteilten Traps, sondern umgekehrt die "Traps" von den Teilchen absorbiert werden, läßt sich die Überlebenswahrscheinlichkeit der Traps in vergleichsweise einfacher Weise exakt berechnen, wenn Teilchen betrachtet werden, die unabhängig voneinander Random Walk auf einem Gitter ausführen (s. obige Referenzen). Demgegenüber ist dieses Problem in dem Fall, in dem die Teilchen korrelierte Diffusion im Gittergas ausführen, bereits in $d = 1$ so schwierig, daß bisher keine exakte Lösung angegeben werden konnte [113].

Obwohl Gl. (IV.12) und damit auch Gl. (IV.13) im Gittergas nicht gelten, ist es trotzdem interessant zu fragen, was sich für den mittleren Span $S(t)$ ergibt, wenn man — im Sinne einer "markov'schen Näherung" — von der Gültigkeit der Beziehung (IV.12) ausgeht. Das asymptotische Verhalten der Rückkehrwahrscheinlichkeit $P(0, t)$ ist mit (IV.8) durch

$$P(0, t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \pi^{-1/4} 2^{-3/4} \left(\frac{c}{1-c} \right)^{1/2} t^{-1/4} \quad (IV.14)$$

gegeben, d.h. im Laplace-Raum:

$$\tilde{P}(0, u) \underset{u \ll 1}{\sim} \pi^{-1/4} 2^{-3/4} \Gamma(3/4) \left(\frac{c}{1-c} \right)^{1/2} u^{-3/4}. \quad (IV.15)$$

$\Gamma(\dots)$ ist die Gamma-Funktion (Eulersches Integral). Das Verhalten von $\tilde{S}(u)$ für $u \ll 1$, daß sich mit (IV.15) aus (IV.13) ergibt, entspricht dem folgenden asymptotischen Verhalten im Zeitbereich:

$$S(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} a_M \left(\frac{1-c}{c} \right)^{1/2} t^{1/4} \quad (IV.16)$$

mit

$$a_M = 4(8\pi)^{1/4} / [\Gamma(1/4) \cdot \Gamma(3/4)] \approx 2,016.$$

Wie zu erwarten war, findet man in dieser Näherung das Skalenverhalten (IV.9) wieder.

Nachdem die grundsätzlichen Schwierigkeiten erläutert worden sind, die einer direkten analytischen Behandlung des Spans von Gittergasteilchen entgegenstehen, soll kurz das weitere Vorgehen skizziert werden: Zunächst wird ein vergleichsweise einfaches nicht-markov'sches RW-Modell diskutiert werden, das — obwohl die physikalische

Ursache des nicht-markov'schen Verhaltens eine völlig andere als im Gittergas ist — gewisse Analogien zur Tracer-Diffusion aufweist. Das Modell hat den Vorteil, daß sich exakte Aussagen über das Verhalten von $S(t)$ und $W(s, t)$ ableiten lassen. Wie sich zeigen wird, lassen sich hieraus Rückschlüsse auf das Verhalten dieser Größen im Gittergas ziehen. Anschließend werden die Resultate für den mittleren Span und die Spanverteilung diskutiert, die mittels numerischer Simulationen gewonnen wurden.

IV.2.1.1. EIN EINFACHES MODELL MIT ANOMALER TEILCHENDIFFUSION: RANDOM WALK AUF EINEM RANDOM WALK.

Das Modell des "Random Walk auf einem Random Walk" (RWRW), das zuerst von Kehr und Kutner [114] untersucht wurde, beschreibt den RW einzelner Teilchen auf einer linearen Kette, die sich nicht gleichmäßig in eine Richtung erstreckt, sondern vielfach in $d = 1$ gefaltet ist. Die Faltung der Kette wird ihrerseits in einem RW-Bild beschrieben (sog. "Basis"-RW). Kehr und Kutner geben Beispiele für physikalische Situationen, die mit einem solchen Modell beschrieben werden können (Diffusion in irregulären Kanälen in amorphen Substanzen, etc.), vgl. auch [115].

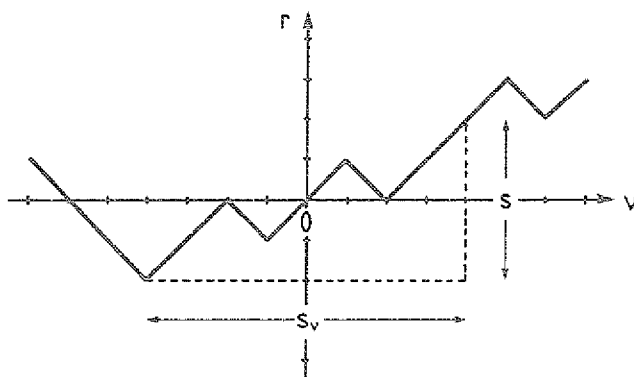


Bild IV.2: Random Walk auf einem Random Walk: Basis-RW (s bzw. s_v : vgl. Text).

Das Modell ist in der folgenden Weise definiert (vgl. Bild IV.2): Die Kette, auf der die Teilchen RW ausführen, wird als Realisation $r(\nu)$ eines eindimensionalen, symmetrischen RW's mit einer Hilfsvariablen ν als diskreter Schrittzahl definiert: $\nu \in \{0, \pm 1, \dots\}$ zählt die Plätze auf der Kette ab, auf denen sich ein Teilchen befinden kann. Für jeden Basis-RW $r(\nu)$ sei o.b.d.A. $r(\nu = 0) = 0$. Ein Teilchen, das sich zur Zeit $t = 0$ am

Platz $\nu = 0$ befindet, vollführt einen einfachen RW auf der Kette. Kehr und Kutner [114] haben das Verhalten der Teilchen sowohl für den diskreten wie auch den kontinuierlichen RW diskutiert. Hier soll die Untersuchung der Einfachheit halber auf den diskreten Fall beschränkt werden; die aktuelle Position eines Teilchen nach dem n -ten Schritt ist durch $r(n) = r[\nu(n)]$ gegeben.

Kehr und Kutner haben die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P_n(r)$ und deren Momente $\langle r^k(n) \rangle$ diskutiert. Für das asymptotische Verhalten der mittleren quadratischen Auslenkung finden sie

$$\langle r^2(n) \rangle \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \left(\frac{2}{\pi} n \right)^{1/2}.$$

Intuitiv ist die Proportionalität zu $n^{1/2}$ plausibel, da es sich hier um eine Überlagerung zweier RW-Prozesse handelt.

Man kann in der folgenden Weise eine gewisse Analogie zur Tracerdiffusion im eindimensionalen Gittergas sehen [114]: Ein Tracerteilchen kann jeweils soweit einen RW ausführen, wie es seine beiden Nachbarteilchen zulassen. Da sich diese ebenfalls bewegen, befindet sich das Teilchen im Laufe der Zeit in ständig unterschiedlich großen Gebieten, in denen es sich frei bewegen kann. Beim RW auf einem RW nimmt das Teilchen Teilstücke des Basis-RW's wahr, die in ihrer Länge variieren. Auf ihnen kann es normalen Random Walk ausführen.

Beim Gittergas hängt die mittlere Größe des Bereichs, in dem ein Teilchen "frei" beweglich ist, von der Konzentration ab, mit der das Gitter besetzt ist. Beim RWRW kann dieser Effekt dadurch simuliert werden, daß man statt eines einfachen Basis-RW's einen *korrelierten* Basis-RW mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten p_f für Vorwärtsschritte und p_b für Rückwärtsschritte betrachtet. Der mittlere Abstand zwischen zwei Umkehrpunkten beträgt $\frac{1}{c}$, wenn man $p_f = 1 - c$ und $p_b = c$ wählt. Mit dieser Erweiterung des Modells ergibt sich [114] für die mittlere quadratische Auslenkung

$$\langle r^2(n) \rangle \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \left(\frac{2}{\pi} f n \right)^{1/2}, \quad (IV.17)$$

wobei

$$f \equiv \frac{p_f}{p_b} = \frac{1 - c}{c} \quad (IV.18)$$

der Korrelationsfaktor des korrelierten Basis-RW's ist. Das asymptotische Verhalten ist also mit der Identifizierung $n \equiv t$ formal identisch zu Gl. (IV.5). Zu betonen ist,

daß die Analogie zwischen den beiden Modellen natürlich nicht überbewertet werden sollte. Die physikalischen Ursachen für das Auftreten der anomalen Diffusion — zum einen die Korrelation mit der Bewegung anderer Teilchen, zum anderen räumliche Unordnung — sind dazu zu unterschiedlich. Die resultierenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten sind verschieden: Während beim Gittergas $P(r, t)$ asymptotisch durch die Gaußverteilung (IV.8) gegeben ist, finden Kehr und Kutner beim RWRW für große Schrittzahlen n ein Verhalten der Form $P_n(r) \sim \exp(-\text{const} \cdot r^{4/3}/n^{1/3})$.

Es ist aber nichtsdestoweniger interessant, der Frage nachzugehen, inwieweit sich aus dem Verhalten des Spans in RWRW-Modell Hinweise auf das Verhalten des Spans eines Tracerteilchens ergeben.

Wie eine Untersuchung für das kontinuierliche Modell gezeigt hat, läßt sich die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze beim RWRW-Modell direkt berechnen. Die First-Passage-Wahrscheinlichkeiten $F(r, t)$ des RW auf einem RW lassen sich durch First-Passage-Wahrscheinlichkeiten der beiden überlagerten RWs ausdrücken, und man erhält schließlich mit Gl. (IV.11) einen Ausdruck für die Laplace-Transformierte $\tilde{S}(u)$ von $S(t)$, aus dem sich das asymptotische Verhalten von $S(t)$ exakt berechnet läßt. Da die damit verbundenen Rechnungen etwas aufwendiger sind, möchte ich hier direkt das Verhalten der Spanverteilung diskutieren. Der mittlere Span wird sich dabei in einfacher Weise ableiten lassen.

$W_n(s)$ sei die Verteilung der Zahl der verschiedenen Plätze r , die bei einem diskreten n -Schritt-RW auf einem (korrelierten) RW besucht werden. Um Verwechslungen zu vermeiden, bezeichnen wir die Spanverteilung des einfachen, eindimensionalen RW's als $W_n^1(s)$ und die des korrelierten RW's mit Korrelationsfaktor f als $W_n^f(s)$. RW-Mittelwerte von Größen werden entsprechend als $\langle \dots \rangle_1$ bzw. $\langle \dots \rangle_f$ bezeichnet. Wir betrachten zunächst einen festen n -Schritt-RW in der Variablen ν . Die Zahl der verschiedenen besuchten Plätze ν auf der Kette sei s_ν , siehe Bild IV.2. Nach Mittelung über alle Basis-RWs ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß s verschiedene Plätze r besucht werden, durch $W_{s_\nu-1}^f(s)$ gegeben. Mittelung über alle n -Schritt-RWs in ν liefert somit

$$W_n(s) = \sum_{s_\nu=1}^{\infty} W_n^1(s_\nu) W_{s_\nu-1}^f(s). \quad (\text{IV.19})$$

Für die k -ten Momente von $W_n(s)$ erhält man hieraus

$$\langle s^k(n) \rangle = \sum_{s_\nu} W_n^1(s_\nu) \langle s^k(s_\nu - 1) \rangle_f . \quad (IV.20)$$

Zur Berechnung des asymptotischen Verhaltens des mittleren Spans nutzen wir aus, daß die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze beim korrelierten RW asymptotisch durch

$$\langle s(n) \rangle_f = \left(\frac{8}{\pi} \right)^{1/2} f^{1/2} n^{1/2} + 1 - f + O(n^{-1/2}) \quad (IV.21)$$

gegeben ist [116]. Mit dem asymptotischen Resultat [62]

$$\langle s^{1/2}(n) \rangle_1 = K 2^{7/4} \pi^{-1/2} \Gamma(3/4) n^{1/4} + O(n^{-1/4}) ,$$

wobei $K = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \sqrt{j} = 0,7602 \dots$ (abelsche Summation), folgt aus Gl. (IV.20)

$$S(n) \equiv \langle s(n) \rangle = a f^{1/2} n^{1/4} + 1 - f + O(n^{-1/4}) . \quad (IV.22)$$

Die Konstante a ist durch

$$a = \pi^{-1} 2^{15/4} \Gamma(3/4) K = 1,995 \dots \quad (IV.23)$$

gegeben. Wie Gl. (IV.22) zeigt, verletzt der erste Korrektur-Term bereits das Skalenverhalten bzgl. f , das man in Analogie zu Gl. (IV.9) auch beim RW auf einem RW erwarten würde. Der Grund dafür ist offensichtlich, daß bereits beim korrelierten RW das Skalenverhalten auf die führende Ordnung beschränkt ist, siehe Gl. (IV.21).

Anlauf *et. al.* [117] haben die Spanverteilung $W_n^f(s)$ des korrelierten RW's sehr detailliert untersucht und eine asymptotisch exakte Lösung für $n \gg 1$ angegeben. Von Interesse ist hier die asymptotisch gültige Skalenrelation,

$$W_n^f(s) \approx W_{fn}^1(s + f - 1) , \quad (IV.24)$$

mit der sich das Verhalten der Spanverteilung im korrelierten Fall auf das im unkorrelierten Fall zurückführen läßt. Der Ausdruck für die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze, $\langle s(n) \rangle_f$, Gl. (IV.21), der in Ref. 116 mit direkten Methoden abgeleitet wurde, ergibt sich nunmehr als einfache Konsequenz von Gl. (IV.24).

Aus der Skalenrelation (IV.24) läßt sich mit Gl. (IV.19) ein Skalenausdruck für die Verteilung $W_n(s)$ des RW's auf einem RW ableiten, wenn man weiterhin benutzt, daß die Spanverteilung $W_n^1(s)$ des unkorrelierten RW's asymptotisch die Form

$$W_n^1(s) \approx n^{-1/2} \bar{W}(sn^{-1/2})$$

annimmt [62]. Das Verhalten der Skalenfunktion $\bar{W}$ läßt sich aus den Gln. (II.28, 41) ablesen. Man findet für den RW auf dem RW für $n \gg 1$

$$W_n(s) \approx \frac{1}{f^{1/2} n^{1/4}} \hat{W}[\xi(s)] \quad (IV.25)$$

mit

$$\xi = \frac{s + f - 1}{f^{1/2} n^{1/4}}. \quad (IV.26)$$

Wie ein Vergleich mit Gl. (IV.22) zeigt, entspricht die Konstante a [Gl. (IV.23)] gerade dem Mittelwert $\langle \xi \rangle = \int d\xi \xi \hat{W}(\xi)$ [— beachte die Normierung $\int d\xi \hat{W}(\xi) = 1$].

Die Skalenfunktion $\hat{W}(\xi)$ läßt sich nicht auf einfache Weise in geschlossener Form angeben. Eine Aussage über das führende Verhalten von $\hat{W}$ auf der rechten bzw. linken Flanke, d.h. für $\xi < a$ bzw. $\xi > a$ läßt sich mittels Sattelpunktsintegration gewinnen. Benutzt wird dabei nur das führende Verhalten von $W_n^1(s)$ für $s \lesssim \langle s \rangle$ bzw. $s \gtrsim \langle s \rangle$, vgl. die Abschnitte II.2.2 und II.3.1, in denen die entsprechenden Ausdrücke zur näherungsweisen Berechnung der Depolarisation herangezogen wurden. Die Ausführung dieser Sattelpunktsintegration soll hier nicht explizit vorgeführt werden. Es wird direkt das Endresultat angegeben, wobei wir uns auf das führende Verhalten beschränken wollen:

$$\hat{W}(\xi) \sim \begin{cases} \exp[-3 \frac{\pi^2}{4^{1/3} \xi^{4/3}}] & (\xi < a) \\ \exp[-3 \frac{\xi^{4/3}}{2^{5/3}}] & (\xi > a) \end{cases}. \quad (IV.27)$$

Interessant ist, daß das führende Verhalten von $\hat{W}$ auf der rechten Flanke dem führenden Verhalten der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P_n(r)$ entspricht, das Kehr und Kutner [114] ebenfalls über Sattelpunktsintegration abgeleitet haben.

Zum Abschluß der Untersuchung des RWRW-Modells soll die Frage beantwortet werden, was sich für die mittlere Zahl der besuchten Plätze ergibt, wenn man wie zuvor beim Gittergas [Gl. (IV.16)] näherungsweise von der Gültigkeit der Beziehung (IV.13) ausgeht. Der Einfachheit halber betrachten wir direkt den Fall $f = 1$, d.h. den RW

auf einem unkorrelierten Basis-RW. Die Laplace-Transformierte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r, t)$ des kontinuierlichen RWRW-Modells läßt sich mit Gl. (29) in Ref. 114 leicht berechnen, und damit auch $\tilde{S}(u)$ nach Gl. (IV.13). Hier soll nur das asymptotisch führende Verhalten von $S(t)$ angegeben werden, das sich aus dem Ausdruck für $\tilde{S}(u)$ ableiten läßt:

$$S(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} a_M \cdot t^{1/4}, \quad a_M = \frac{2^{1/4}}{\Gamma(1/4)} \approx 1,312. \quad (\text{IV.28})$$

Die markov'sche Annahme liefert einen Vorfaktor a_M , der deutlich kleiner als der exakte Wert $a \approx 1,995$ ist, vgl. Gl. (IV.23).

Daß die Analogie zwischen dem Random Walk auf einem Random Walk und der Diffusion von Tracerteilchen im Gittergas so weit geht, daß die Resultate für das RWRW-Modell auch das Verhalten von $S(t)$ oder $W(s, t)$ im Gittergas richtig beschreiben, ist kaum anzunehmen. Die Zahl der verschiedenen Plätze, die ein Teilchen bis zu einer Zeit t besucht hat, hängt von der ganzen Vorgeschichte dieses Teilchens ab. Hier ist zu bedenken, daß die "Übereinstimmung" zwischen den mittleren quadratischen Auslenkungen beider Modelle *nur* im asymptotischen Bereich gegeben ist. Das Kurzzeitverhalten von $\langle r^2(t) \rangle$ ist völlig unterschiedlich [114]. Trotz dieser Einwände haben sich aber einige interessante Aspekte für die Untersuchung von $S(t)$ und $W(s, t)$ im Gittergas ergeben; diese werden bei der Diskussion der Resultate von numerischen Simulationen des Gittergases eine wichtige Rolle spielen.

IV.2.1.2. RESULTATE NUMERISCHER SIMULATIONEN

Die Verteilung $W(s, t)$ der Anzahl der verschiedenen besuchten Plätze und deren Mittelwert $S(t)$ sind für verschiedene Konzentrationen c des Gittergases simuliert worden. Wie diese Simulationen konkret durchgeführt worden sind, ist in Anhang B erläutert, so daß an dieser Stelle nur die Resultate diskutiert werden sollen.

Der mittlere Span $S(t)$ ist für fünf verschiedene Konzentrationen c von $c = 0,1$ bis $c = 0,9$ simuliert worden. Um möglichst genaue Aussagen über das asymptotische Verhalten treffen zu können, wurde bis zu Zeiten von typischerweise $t_{max} = 10^4$, für $c = 0,9$ sogar bis zu $t_{max} = 10^5$ simuliert. Bild IV.3 zeigt die Resultate für $S(t)$ in doppelt-logarithmischer Auftragung; die Bedeutung der in diesem Bild ebenfalls eingezeichneten asymptotischen Kurven wird weiter unten erläutert. Bild IV.3 gibt einen

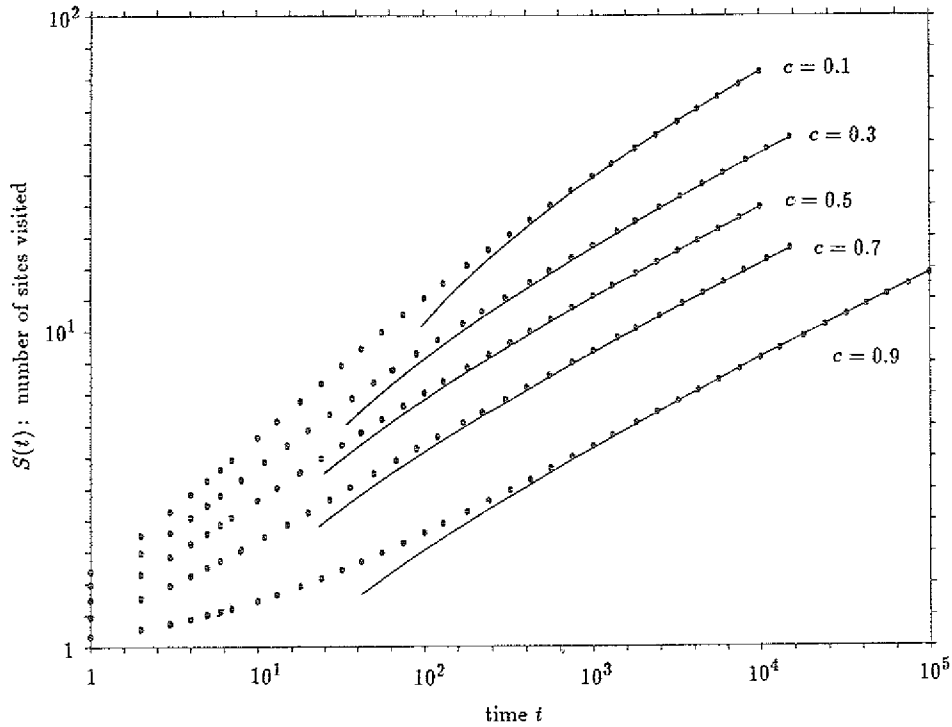


Bild IV.3: Mittlerer Span $S(t)$ im $d = 1$ -Gittergas. $\circ$: numerische Simulationen. Die durchgezogenen Linien sind das asymptotische Verhalten mit Einschluß des ersten Korrekturterms (vgl. Text)

ersten Eindruck von dem Verhalten von $S(t)$. Aus der Steigung der Datenpunkte läßt sich abschätzen, mit welchem Exponenten der mittlere Span mit t ansteigt. Während der Anstieg bei $c = 0,9$ von Anfang an sehr langsam erfolgt, ist bei $c = 0,1$ erwartungsgemäß noch ein Bereich sichtbar, in dem $S(t)$ in etwa wie $t^{1/2}$ wächst, bevor sich die Kurve abzuflachen beginnt.

Bevor die Gültigkeit der Skalenrelation (IV.9) überprüft wird, soll zunächst die Frage untersucht werden, ob $S(t)$ asymptotisch tatsächlich proportional zu $t^{1/4}$ ist. Obwohl die Zeiten t_{max} in Bild IV.3 bereits sehr groß sind, ist das asymptotische Verhalten aus diesem Bild nur schwer abzulesen, da die Kurven auch bei diesen Zeiten immer noch eine leichte Krümmung aufweisen. Es wäre wenig sinnvoll, die in den Simulationen beobachteten effektiven Exponenten gegen die Zeit t aufzutragen, da man dann zur Bestimmung des asymptotischen Wertes α gegen unendlich extrapolieren müßte. Da

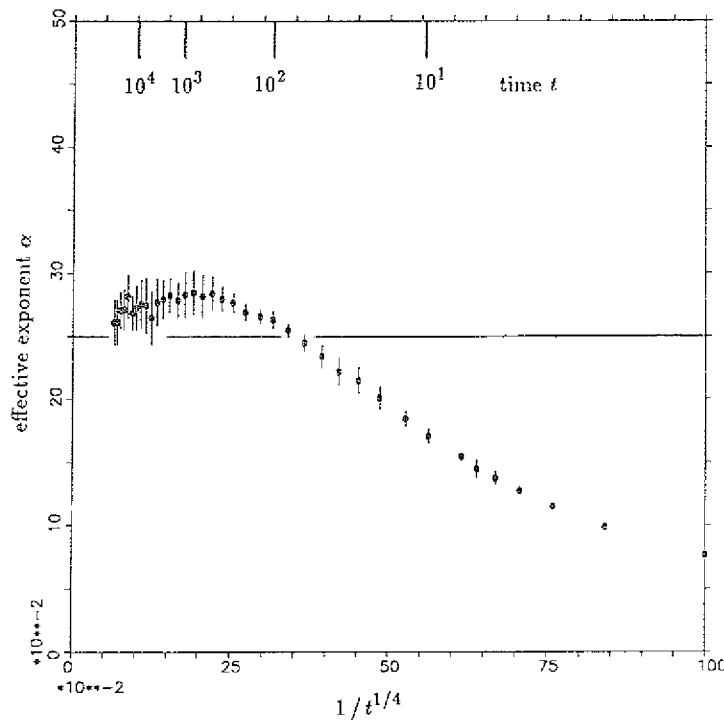


Bild IV.4: Effektiver Exponent α in $S(t) \propto t^\alpha$ für $c = 0,9$ ($d = 1$ -Gittergas, Simulation)

bei einem Verhalten der Form

$$S(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} k_1 t^\alpha + k_2 \quad (\text{IV.29})$$

der effektive Exponent $\alpha_{eff} = d \ln S / d \ln t$ sich asymptotisch wie

$$\alpha_{eff} \sim \alpha [1 - (k_2/k_1)t^{-\alpha}]$$

verhält, ist es zur Überprüfung der Hypothese $\alpha = \frac{1}{4}$ sinnvoller, den effektiven Exponenten gegen $x \equiv t^{-1/4}$ aufzutragen. Stimmt die Hypothese, so sollte sich, falls $k_2 \neq 0$, durch lineare Extrapolation der Daten für $x \rightarrow 0$ der Wert $\alpha = \frac{1}{4}$ ergeben. Bild IV.4 zeigt eine derartige Auftragung beispielhaft für $c = 0,9$. Die Daten sind offensichtlich konsistent mit $\alpha = \frac{1}{4}$; allerdings lassen die vergleichsweise großen Fehlerbalken bei kleinem x keine definitivere Aussage zu. Entsprechende Auftragungen für die anderen Werte von c erlauben eine genauere Extrapolation gegen $\alpha \approx \frac{1}{4}$ für $x \rightarrow 0$. Bild IV.4 ist deshalb gewählt worden, weil es zeigt, wie langsam die Annäherung von $S(t)$ an das

asymptotische Verhalten selbst bei $c = 0,9$ noch erfolgt [— beachte, daß die cross-over-Zeit t^* der mittleren quadratischen Auslenkung für $c = 0,9$ von der Größenordnung 1 ist, s. (IV.7)].

Zur weiteren Diskussion wollen wir in Anlehnung an (IV.22) für den mittleren Span beim RWRW-Modell $S(t)$ in der Form

$$S(t) \underset{t \gg 1}{\approx} a f^{1/2} t^{1/4} - b \quad (\text{IV.30})$$

schreiben, wobei f entsprechend als

$$f \equiv \left(\frac{1-c}{c} \right)$$

definiert ist. Die beobachtete langsame Annäherung von $S(t)$ an das asymptotische Verhalten $\propto t^{1/4}$ deutet an, daß der Korrekturterm b auch bei sehr großen Zeiten t noch bedeutsam ist. Dieser war beim RWRW durch $b = f - 1$ gegeben und verletzte damit das Skalenverhalten der führenden Ordnung.

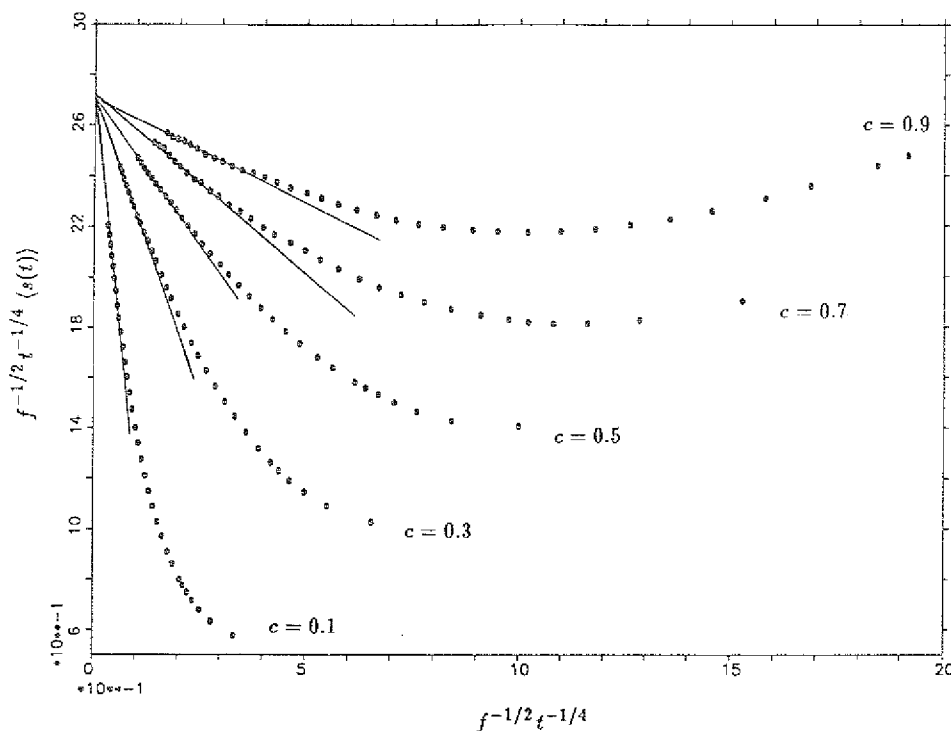


Bild IV.5: Lineare Extrapolation zur Bestimmung der Größen a und b in Gl. (IV.30) aus den Resultaten der numerischen Simulationen für $S(t)$.

Bild IV.5 zeigt für alle Konzentrationen c die Auftragung von $y \equiv f^{-1/2}t^{-1/4}S(t)$ gegen $x \equiv f^{-1/2}t^{-1/4}$. In dieser Auftragung entspricht Gl. (IV.30) einem Verhalten der Form

$$y(x) \underset{x \ll 1}{\approx} a - bx,$$

so daß sich durch lineare Extrapolation für $x \rightarrow 0$ der Wert von a bestimmen läßt. Aus der Steigung der Extrapolationsgeraden ergibt sich der Wert für b .

Bild IV.5 zeigt, daß die Konstante a für alle Konzentrationen c praktisch den gleichen Wert annimmt. Die Skalenannahme (IV.9) für das führende Verhalten von $S(t)$ wird somit durch die Simulationen bestätigt. Eine genauere Analyse der Daten liefert den folgenden Wert für a :

$$a_{MC} = 2,72 \pm 0,04. \quad (IV.31)$$

Dieser ist deutlich größer als der Wert von $a = 1,995$ im RWRW-Modell, vgl. Gl. (IV.23). Ebenso wie bei diesem Modell ist der tatsächliche Wert größer als der, der sich in der Markov'schen Näherung ergibt [Gl. (IV.13)].

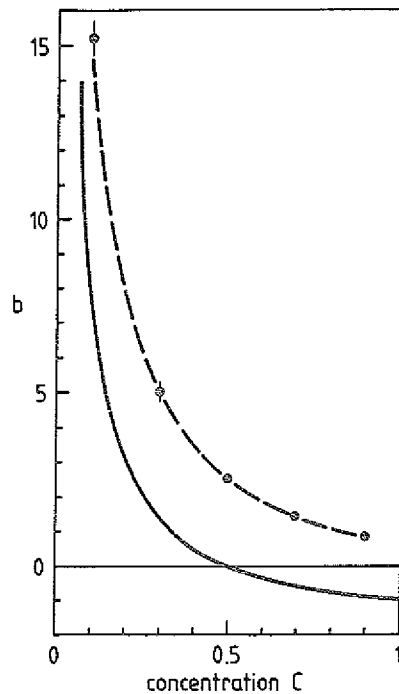


Bild IV.6: Korrektur b in Gl. (IV.30) im $d = 1$ -Gittergas (*, Simulation) im Vergleich zu $b = f - 1$ beim Random Walk auf einem Random Walk (durchgezogene Linie).

Bild IV.6 zeigt die aus den Simulationen gefundenen Werte für die Korrektur b im Vergleich zu $b = f - 1$ im RWRW-Modell. Wie deutlich wird, ergibt sich bei beiden Modellen die gleiche qualitative Abhängigkeit von dem Parameter c . Festzuhalten ist, daß auch beim Gittergas der erste Korrekturterm das Skalenverhalten verletzt.

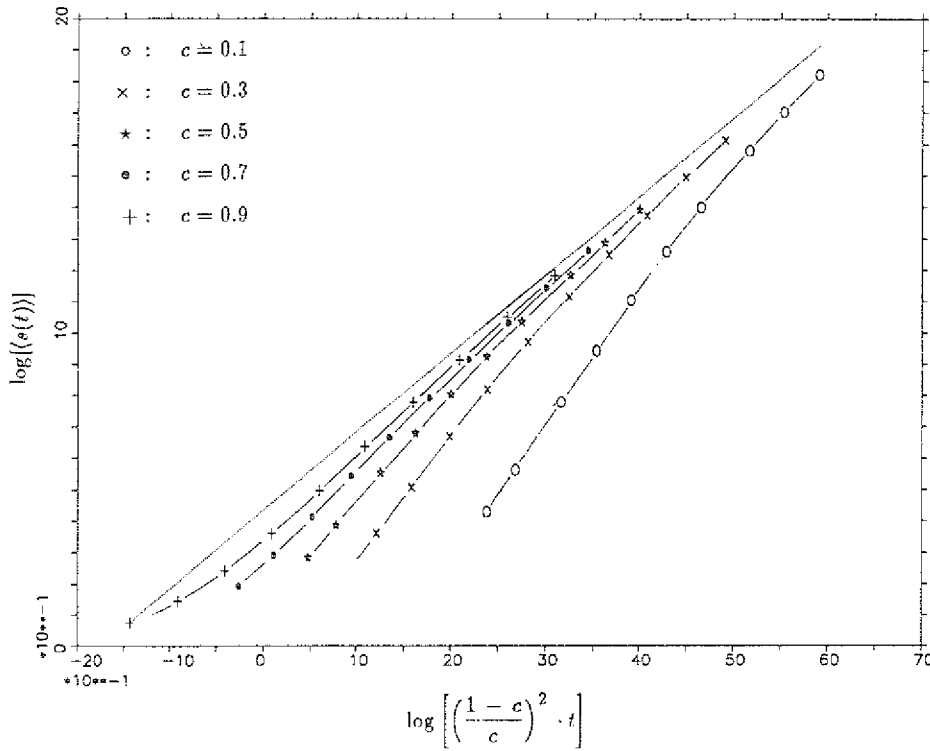


Bild IV.7: Skalenplot für den mittleren Span im $d = 1$ -Gittergas. Die punktierte Linie entspricht dem führenden Verhalten $S(t) = a f^{1/2} t^{1/4}$ mit a aus Gl. (IV.31).

In Bild IV.7 ist der mittlere Span S noch einmal als Funktion der Skalenvariablen

$$f^2 t = \left(\frac{1-c}{c} \right)^2 t$$

dargestellt. Die gestrichelte Linie entspricht dem asymptotisch führenden Verhalten, $S = a f^{1/2} t^{1/4}$, mit $a = a_{MC}$. Die Abweichungen vom asymptotisch führenden Skalenverhalten sind bei den hier betrachteten Zeiten immer noch beträchtlich. An dieser Stelle sei noch einmal auf Bild IV.3 verwiesen. Die zusätzlich zu den Simulationsdaten eingezeichneten Kurven entsprechen der Gl. (IV.30) mit den aus den Simulationen abgeleiteten Daten für die Konstanten a und $b(c)$.

Die Spanverteilung $W(s, t)$ ist für die Konzentrationen $c = 0, 1, c = 0, 5$ und $c = 0, 9$ bei verschiedenen Zeiten t simuliert worden. Die Frage, die hier im Vordergrund des Interesses stehen soll, ist, ob für die Spanverteilung im Gittergas ebenso wie für die im RWRW-Modell eine Skalenfunktion $\hat{W}$ einer Variablen $\xi(s)$ mit

$$W(s, t) \approx \frac{1}{f^{1/2} t^{1/4}} \hat{W}[\xi(s)] \quad (IV.32)$$

existiert, vgl. Gl. (IV.25). Übertragen wir Gl. (IV.26) auf das Gittergas, so sollte ξ durch

$$\xi = \frac{s + b}{f^{1/2} t^{1/4}} \quad (IV.33)$$

gegeben sein, wobei für die Verschiebung $b = b(c)$ gerade die aus den numerischen Simulationen des mittleren Spans gewonnenen Werte einzusetzen wären.

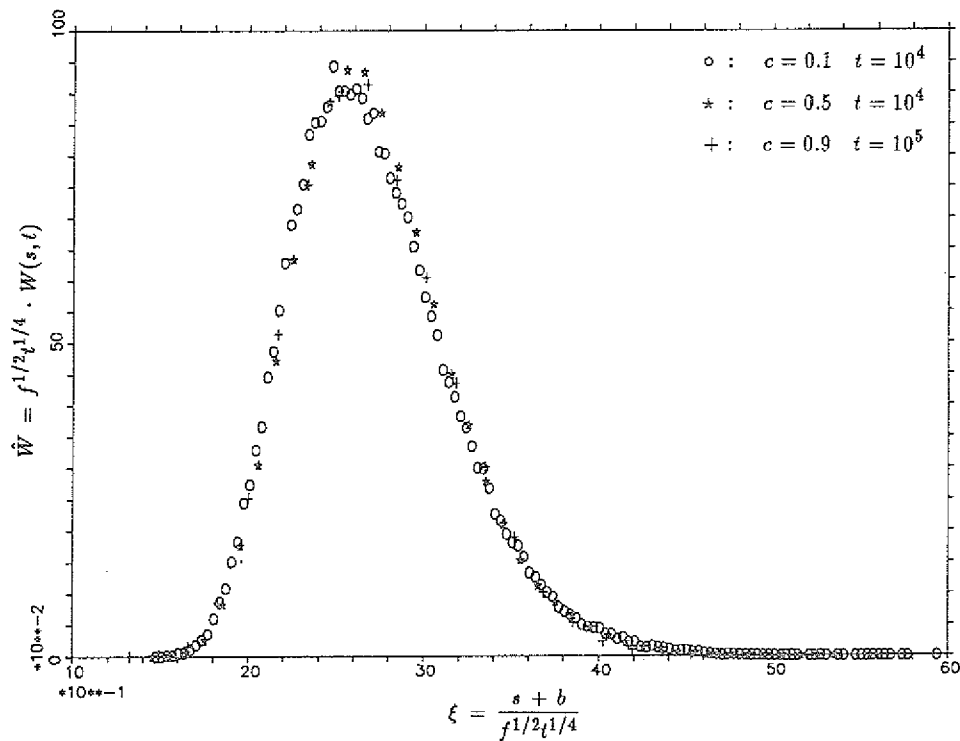


Bild IV.8: Skalenplot für die Spanverteilung $W(s, t)$ im $d = 1$ -Gittergas, vgl. die Gln. (IV.32, 33). Für die Verschiebung $b(c)$ in ξ wurden die aus den Resultaten für $S(t)$ gewonnenen Werte eingesetzt, vgl. Bild IV.6.

Wie Bild IV.8 zeigt, lassen sich die Resultate der numerischen Simulationen tatsächlich mit dem obigen Skalenverhalten gut beschreiben. Die in diesem Bild einge-

gezeichneten Verteilungen sind die für die jeweils maximale Zeit t , für die eine Verteilung bei der entsprechenden Konzentration c simuliert wurde.

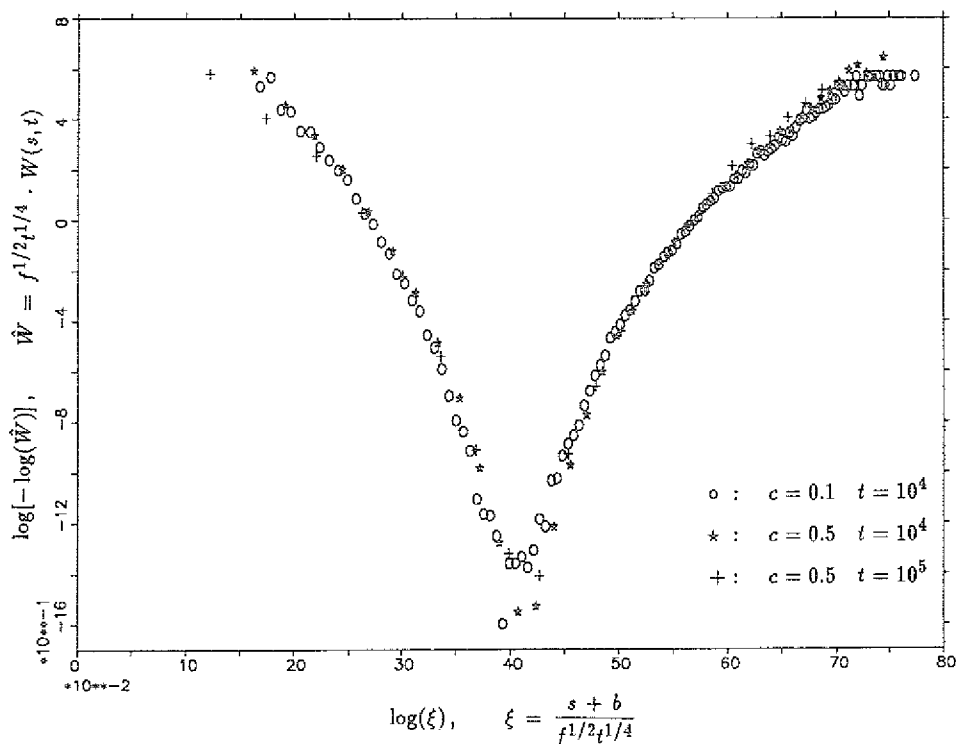


Bild IV.9: vgl. Bild IV.8 und Text.

Zur Untersuchung der Frage, wie das Verhalten der Spanverteilung auf der rechten bzw. linken Flanke aussieht, sind in Bild IV.9 die obigen Verteilungen in der Form $\log[-\log(\hat{W})]$ vs. $\log(\xi)$ dargestellt. In dieser Auftragung liefert die Steigung der Flanken eine Abschätzung für den Exponenten ν eines Verhaltens der Form

$$\hat{W}(\xi) \approx \exp[-\text{const} \cdot \xi^\nu] . \quad (\text{IV.34})$$

Wie Bild IV.9 zeigt, läßt sich nur ein ungefährender Bereich für ν angeben. Man kann in diesem Sinne die linke Flanke von $\hat{W}$ ($\xi < \langle \xi \rangle = a$) in etwa durch

$$\hat{W}(\xi) \approx \exp[-\text{const} \cdot \xi^{-\nu'}] , \quad \nu' \approx 3,5 - 4,5 , \quad (\text{IV.35})$$

und die rechte ($\xi > \langle \xi \rangle = a$) durch

$$\hat{W}(\xi) \approx \exp[-\text{const} \cdot \xi^\nu] , \quad \nu \approx 3,0 - 4,0 , \quad (\text{IV.36})$$

charakterisieren. Diese Beschreibungen liefern natürlich nur ein sehr pauschales Bild der Skalenfunktion $\hat{W}$.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, daß der Skalenausdruck (IV.10) für die linke Flanke von $W(s, t)$, der aus der Skalentheorie für das Trapping herausgelesen werden konnte, einen Exponenten von $\nu' = 4$ besitzt und damit gut in das Bild paßt, daß sich aus den Simulationen für die Spanverteilung ableiten läßt [– beachte, daß die Verschiebung b in dem Ausdruck (IV.33) für ξ im asymptotischen Limes $t \rightarrow \infty$ keine Rolle mehr spielt].

Die Spanverteilung im RWRW-Modell ist durch einen Exponenten von $\nu = \nu' = \frac{4}{3}$ charakterisiert und unterscheidet sich damit deutlich von der Spanverteilung im Gittergas.

Zum Abschluß dieses Abschnitts soll noch einmal betont werden, daß das Skalenverhalten (IV.32) erst bei sehr großen Zeiten t wirklich erfüllt ist. Wie die durchgeführten Simulationen gezeigt haben, konvergieren die Spanverteilungen $W(s, t)$ mit zunehmender Zeit t vergleichsweise langsam gegen die in Bild IV.7 dargestellte asymptotische Skalenfunktion. Zu erwähnen ist, daß sich dabei die Exponenten ν bzw. ν' , mit denen sich der Abfall der Verteilung $W(s, t)$ in den Flanken charakterisieren läßt, von *kleineren* Werten her den asymptotischen Werten annähern.

IV.2.2. DEPOLARISATION

In diesem Abschnitt soll das Verhalten der Depolarisation $P(t)$ im eindimensionalen Gittergas untersucht werden. Hierbei wird die Diskussion notwendigerweise auf einer mehr qualitativen Ebene geführt werden müssen, da beim Gittergas keinerlei vergleichbare Basis für analytische Untersuchungen vorliegt, wie sie für das einfache RW-Modell durchgeführt werden konnten.

Ausgangspunkt ist wie in Kapitel II der Ausdruck für $P(t)$, der sich nach Ausmittlung der zufälligen Rotationsfrequenzen ω_r ergibt:

$$P(t) = \left\langle \exp \left[-\frac{1}{2} \sigma^2 \sum_r t_r^2(t) \right] \right\rangle . \quad (IV.37)$$

Dieser Ausdruck wurde auch bei den numerischen Simulationen der Depolarisation simuliert, deren Resultate weiter unten diskutiert werden.

Eine grundsätzliche Frage ist, mit welchem Exponenten α der asymptotische Polarisationszerfall,

$$P(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \exp[-\text{const} \cdot t^\alpha] , \quad (IV.38)$$

im Gittergas erfolgt. Im Vergleich zum einfachen RW-Modell ist insbesondere zu fragen, ob trotz der anomalen Tracerdiffusion immer noch einfach-exponentieller Zerfall ($\alpha = 1$) auftreten kann.

Eine erste Vergleichsmöglichkeit zwischen beiden Modellen bietet die einfache Näherung, die am Anfang des Abschnitts II.2.2 für die Depolarisation P_n des diskreten RW-Modells aufgestellt wurde und in die der RW-Prozeß nur über die *mittlere* Zahl der verschiedenen besuchten Plätze eingeht. Die Depolarisation (IV.37) schreibt sich in dieser Näherung als

$$P(t) \approx \exp\left[-\frac{1}{2}\sigma^2 t^2 / S(t)\right] , \quad (IV.39)$$

wobei $S(t)$ nun die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze im Gittergas ist. Beziehen wir uns nur auf das durch die Simulationen bestätigte asymptotisch führende Verhalten (IV.9) für $S(t)$, so liefert diese Näherung qualitativ einen Zerfall der Form

$$P(t) \approx \exp\left[-\text{const} \cdot \sigma^2 \left(\frac{c}{1-c}\right)^{1/2} t^{7/4}\right] , \quad (IV.40)$$

also einen Zerfall mit einem Exponenten von $\alpha = \frac{7}{4}$. Im Unterschied dazu führte diese Näherung beim einfachen Random Walk mit $S(t) \sim t^{1/2}$ zu dem Exponenten $\alpha = \frac{3}{2}$, der sich gleichermaßen aus der gaußschen Annahme für den Prozeß $\omega(t)$ ergab.

Die gaußsche Näherung,

$$P(t) \approx \exp\left[-\frac{1}{2}\sigma^2 \left\langle \sum_r t_r^2(t) \right\rangle\right] , \quad (IV.41)$$

liefert, vgl. (II.19), eine untere Schranke für den tatsächlichen Polarisationszerfall. Sie ermöglichte im Fall des einfachen Random Walks, bei dem (IV.41) für beliebige Zeiten t berechnet werden konnte, darüberhinaus eine Beschreibung des in den Simulationen beobachteten anfänglichen Zerfalls [vgl. II.2.1]. Beim Gittergas ist ein entsprechendes Vorgehen nicht möglich; selbst das asymptotische Verhalten der Depolarisation in der gaußschen Näherung kann nicht exakt angegeben werden. Der Grund ist, daß sich im Gegensatz zum Fall des markov'schen Random Walks der Mittelwert $\langle \sum_r t_r^2(t) \rangle$ bzw. dessen Laplace-Transformierte nicht mehr auf einen einfachen Ausdruck reduzieren läßt,

der nur noch die Laplace-Transformierte der einfachen Rückkehr-Wahrscheinlichkeit $P(0, t)$ enthält [vgl. (II.21)]. Geht man — wiederum im Sinne einer “markov’schen Näherung” — trotzdem von der Gültigkeit der Beziehung (II.21) aus, so erhält man mit (IV.15) asymptotisch das folgende Verhalten:

$$\left\langle \sum_r t_r^2(t) \right\rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{16}{21} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{c}{1-c} \right)^{1/2} t^{7/4}. \quad (IV.42)$$

Mit (IV.41) ergibt sich dann wie erwartet qualitativ das gleiche Verhalten für $P(t)$ wie in der einfachen Näherung (IV.39). Anzumerken ist, daß Gl. (IV.42) trotz der Vereinfachung, mit der diese Beziehung abgeleitet wurde, das in den Simulationen beobachtete Verhalten von $\langle \sum_r t_r^2(t) \rangle$ bei großen Zeiten t gut beschreibt. Wir können deshalb annehmen, daß der tatsächliche Wert des Exponenten α in (IV.38) nach oben durch den Wert $\frac{7}{4}$ begrenzt wird.

Was ergibt sich nun für den Polarisationszerfall, wenn man nicht wie in (IV.38) nur den mittleren Span $S(t)$, sondern die Verteilung der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze berücksichtigt? In Analogie zu (II.24) gehen wir von der Näherung aus, daß die Zeiten $t_r(t)$ für alle s verschiedenen besuchten Plätze r durch t/s gegeben sind:

$$P(t) \approx \sum_s W(s, t) \exp \left[-\frac{1}{2} \sigma^2 t^2 / s \right]. \quad (IV.43)$$

Für die Verteilung $W(s, t)$ der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze ist im Gegensatz zum Fall des einfachen Random Walks in $d = 1$ kein expliziter Ausdruck bekannt. Wir knüpfen an die Diskussion im vorherigen Abschnitt an, indem wir von der Gültigkeit der Skalenrelation (IV.32, 33) ausgehen,

$$W(s, t) = \frac{1}{f^{1/2} t^{1/4}} \hat{W}(\xi), \quad \xi = \frac{s + b}{f^{1/2} t^{1/4}}, \quad (IV.44)$$

die zumindest bei großen Zeiten t gut mit den numerischen Simulationen übereinstimmt. Für die Depolarisation sind ausgedehnte Walks von besonderer Bedeutung; für das Verhalten von $W(s, t)$ auf der rechten Flanke nehmen wir die einfache Form (IV.34)/(IV.36) an:

$$\hat{W}(\xi) = \exp(-K \cdot \xi^\nu). \quad (IV.45)$$

Zunächst soll nur das asymptotisch führende Verhalten der Depolarisation P diskutiert werden, so daß die Verschiebung b in der Skalenvariable ξ nicht berücksichtigt zu werden braucht.

Die Berechnung der Depolarisation (IV.43) läßt sich mit den obigen Annahmen wiederum näherungsweise über Sattelpunktsintegration ausführen. Wie man sich leicht überzeugt, liegt das Maximum bei

$$s_0 \sim \text{const} \cdot \sigma^{2/(1+\nu)} f^{\frac{1}{2}\nu/(1+\nu)} t^{(2+\nu/4)/(1+\nu)} . \quad (\text{IV.46})$$

s_0 ist der Span der Walks, die — gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit $W(s, t)$ — den größten Beitrag zur Depolarisation P liefern. Für $P(t)$ ergibt sich damit in führender Ordnung für $t \rightarrow \infty$ ein Verhalten der Form

$$P(t) \sim \exp \left[-\text{const} \cdot \sigma^{2\mu} f^{-\mu/2} t^{7\mu/4} \right] , \quad (\text{IV.47})$$

wobei

$$\mu \equiv \frac{\nu}{\nu + 1} .$$

Festzuhalten ist, daß infolge des Skalenverhaltens (IV.44) der Spanverteilung W die Depolarisation P selbst eine Funktion der Skalenvariablen

$$z \equiv \sigma^{8/7} f^{-2/7} t \quad (\text{IV.48})$$

ist: $P(t) \sim \exp[-\text{const} \cdot z^{7\mu/4}]$. Diese Skalenvariable z ist ebenfalls in der einfachen Näherung (IV.40) zu identifizieren.

Gl. (IV.47) zeigt, wie der Exponent α in (IV.38) von dem Verhalten (der "Steilheit") der Spanverteilung $W(s, t)$ auf der rechten Flanke abhängt:

$$\alpha = \frac{7}{4}\mu = \frac{7}{4} \frac{\nu}{\nu + 1} . \quad (\text{IV.49})$$

Interessant ist, daß die hier diskutierte Näherung für das Modell des Random Walks auf einem Random Walk, bei dem $\nu = \frac{4}{3}$ [vgl. (IV.27)], einen einfach-exponentiellen Polarisationszerfall liefert. Die Resultate der numerischen Simulationen für das Gittergas zeigen demgegenüber, daß der Wert von ν bei $\approx 3,5$ liegt, vgl. (IV.36), so daß demnach der Zerfall asymptotisch mit einem Exponenten $\alpha \approx 1,36$ erfolgen sollte. Der abgeschätzte Bereich $3 \lesssim \nu \lesssim 4$ entspricht dem folgenden Wertebereich für α :

$$1,31 \lesssim \alpha \lesssim 1,4 . \quad (\text{IV.50})$$

Bevor diskutiert werden soll, inwieweit diese (qualitativen) Vorhersagen dem in den Simulationen beobachteten Verhalten der Depolarisation entsprechen, sollen noch einige Anmerkungen zu den obigen Überlegungen gemacht werden.

Gl. (IV.47) basiert auf dem Skalenverhalten der Spanverteilung, das, wie in Abschnitt IV.2.1.2 herausgestellt wurde, nur bei sehr großen Zeiten t wirklich erfüllt ist. Dies bedeutet, daß man nur dann erwarten kann, ein (IV.47) entsprechendes Verhalten der Depolarisation zu sehen, wenn der in den Simulationen noch beobachtbare Zerfall auf entsprechend großen Zeitskalen erfolgt. Hier sind also bei fester Konzentration c möglichst kleine Werte des Parameters σ von Interesse.

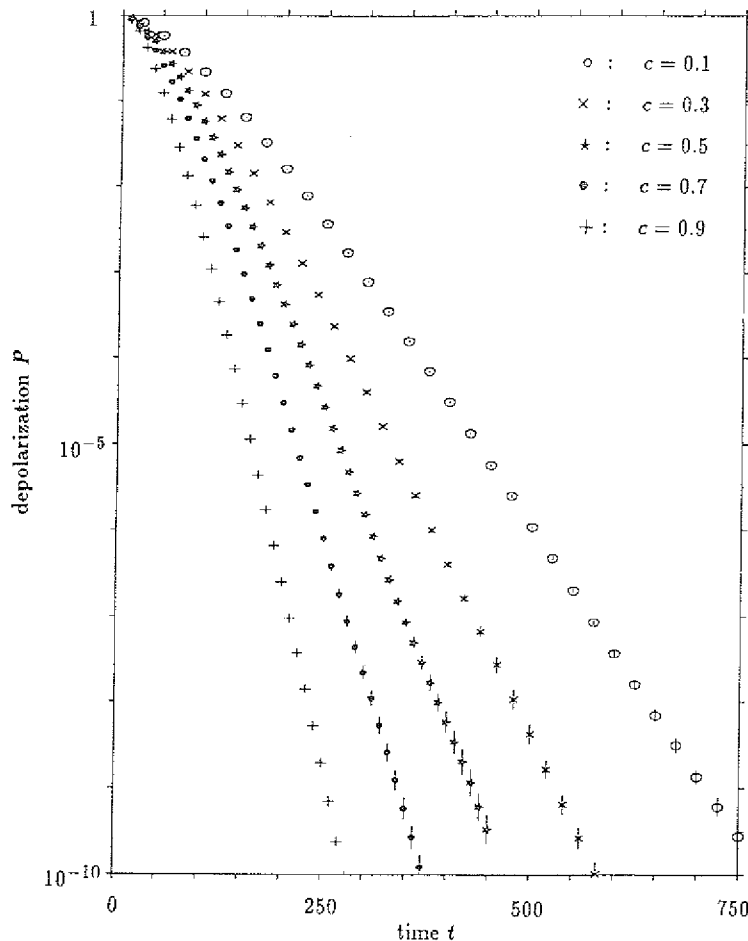


Bild IV.10: Depolarisation im eindimensionalen Gittergas bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen). Die Breite σ beträgt 0,05.

Die Verschiebung b in der Skalenvariablen $\xi(s)$ ist bisher noch nicht berücksichtigt worden. Wie sich $b \neq 0$ auf das Verhalten der Depolarisation P auswirkt, läßt sich in der Sattelpunktsnäherung in niedrigster Ordnung von b/s_0 erfassen. Man erhält auf diese

Weise einen additiven Korrekturterm im Exponenten von (IV.47); dieser ist qualitativ durch

$$\text{const} \cdot b \sigma^{2/7} f^{-4/7} z^{(3\nu-4)/[2(\nu+1)]} \quad (\text{IV.51})$$

gegeben und verletzt erwartungsgemäß das Skalenverhalten der Depolarisation im asymptotischen Fall $b = 0$. Während dieser Korrekturterm bei asymptotisch einfach-exponentiellem Zerfall ($\nu = \frac{4}{3}$) verschwindet, wächst bei er z.B. bei $\nu = 4$ immerhin proportional zu $z^{4/5}$. Inwieweit die obige Korrektur für den tatsächlichen Polarisationszerfall von Bedeutung ist, ist allerdings schwer abzuschätzen. Zu bedenken ist, daß bereits das führende Verhalten (IV.47) auf einer Näherung [Gl. (IV.43)] basiert.

Die Simulationen der Spanverteilung haben gezeigt, daß bei festgehaltener Konzentration c der Exponent ν , mit dem sich der Abfall der Verteilung auf der rechten Flanke charakterisieren läßt, sich mit zunehmender Zeit t von kleineren Werten her an $\approx 3,5$ annähert. Es ist demnach zu erwarten, daß bei größeren Werten von σ der beobachtete Polarisationszerfall mit kleineren, d.h. näher bei eins liegenden Exponenten α erfolgt.

Bild IV.10 zeigt für einen typischen Wert von σ die Resultate numerischer Simulationen der Depolarisation $P(t)$ im Gittergas; es gibt beispielhaft einen Eindruck davon, wie der mit zunehmender Konzentration c schneller werdende Polarisationszerfall konkret aussieht. Um zu prüfen, ob bzw. inwieweit das Skalenverhalten der Näherung (IV.47) erfüllt ist, sind die gleichen Daten für $P(t)$ in Bild IV.11 gegen die Skalenvariable $z = \sigma^{8/7} f^{-2/7} t$ aufgetragen. Es wird deutlich, daß zumindest in diesem Fall, in dem Zeiten t von weniger als $t = 10^3$ eine Rolle spielen, die Skalenannahme dem tatsächlichen Verhalten noch nicht ganz gerecht wird. Daß Korrekturen zum Skalenverhalten bei kleineren Werten von σ eine immer geringere Rolle spielen, zeigt Bild IV.12, in dem für $\sigma = 0,002$ die Depolarisation P ebenfalls als Funktion von z dargestellt ist. Die maximalen Zeiten t , bis zu denen $P(t)$ simuliert wurde, liegen hier zwischen 10^4 und $1,5 \cdot 10^4$.

Die folgenden Bilder zeigen beispielhaft für verschiedene Kombinationen der Parameter c und σ das Verhalten des (effektiven) Exponenten α des Zerfallsgesetzes $P(t) = \exp(-\text{const} \cdot t^\alpha)$. Die maximalen Zeiten t , bis zu denen die Exponenten jeweils aufgetragen sind, sind durch $P(t) \approx 10^{-10}$ charakterisiert. In Bild IV.13 ist α

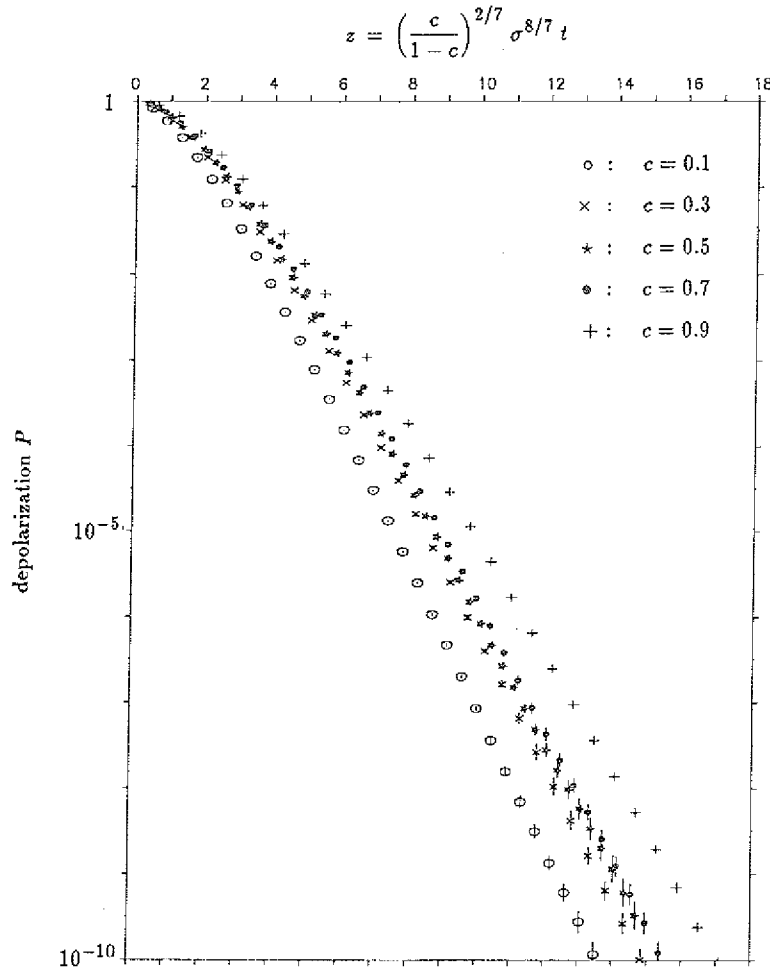


Bild IV.11: Depolarisation im eindimensionalen Gittergas bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen): Skalenplot ($\sigma = 0.05$, vgl. Bild IV.10).

für zwei verschiedene Werte von σ bei gleicher Konzentration $c = 0,1$ dargestellt. Wie erwartet ist der im Bereich maximaler Zeiten beobachtete Exponent bei dem größeren Wert $\sigma = 0,2$ (Bild IV.13a) etwas kleiner als der bei $\sigma = 0,02$ (Bild IV.13b). Beide liegen immer noch unterhalb des Bereichs (IV.50), der in der oben diskutierten Näherung aus dem Verhalten der asymptotischen Skalenfunktion $\hat{W}$ abgeschätzt worden ist. Bild IV.14 zeigt den effektiven Exponenten für die Parameter $c = 0,5$ und $\sigma = 0,005$. Hier ergibt sich ein asymptotischer Wert von α , der zwischen 1,35 und 1,4 und somit im Bereich der Vorhersage (IV.50) liegt. Entsprechende Exponenten sind auch bei den anderen Simulationen der Depolarisation beobachtet worden, bei denen der Zerfall auf sehr großen Zeitskalen erfolgt. Eine genauere Aussage über den tatsächlichen

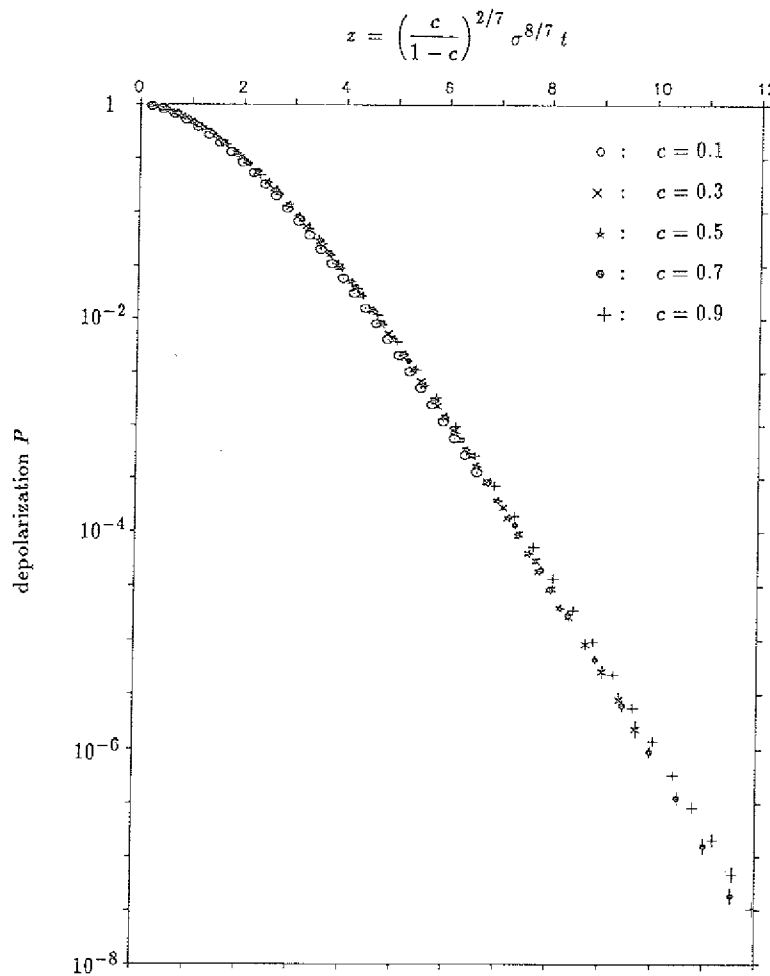


Bild IV.12: Depolarisation im $d = 1$ - Gittergas für verschiedene Konzentrationen c (Simulationen): Skalenplot ($\sigma = 0.002$).

asymptotischen Wert des Exponenten α ist allerdings kaum möglich, da die statistischen Schwankungen der Daten dazu einfach zu groß sind.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die obigen, auf der Näherung (IV.43) aufbauenden Überlegungen zumindest ein qualitatives Verständnis des Verhaltens der Depolarisation im eindimensionalen Gittergas ermöglichen. Hervorzuheben ist insbesondere das durch die Resultate der Simulationen für $\sigma \ll 1$ bestätigte Skalenverhalten der Depolarisation, das sich als Konsequenz des asymptotischen Skalenverhaltens der Spanverteilung ergeben hat. Es ist weiterhin deutlich geworden, daß der Polarisationszerfall asymptotisch nicht einfach-exponentiell wie im Fall des einfachen Random Walks erfolgt, sondern proportional zu $\exp(-\text{const} \cdot t^\alpha)$ mit einem Exponenten α , der im Bereich

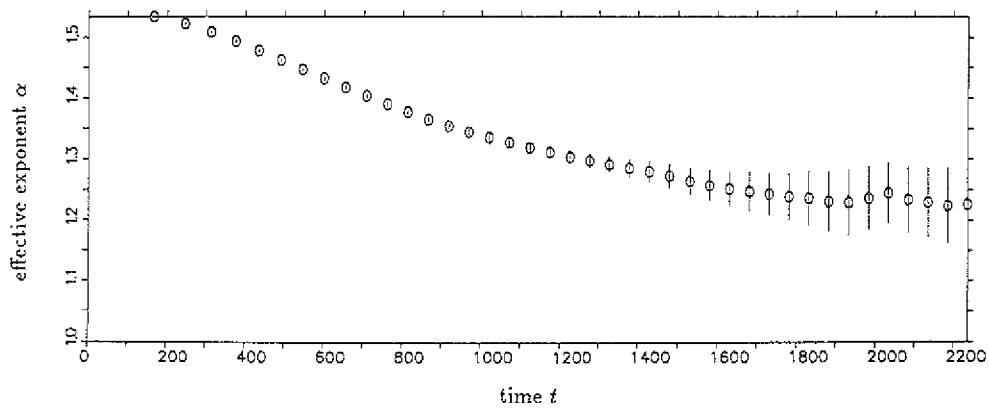
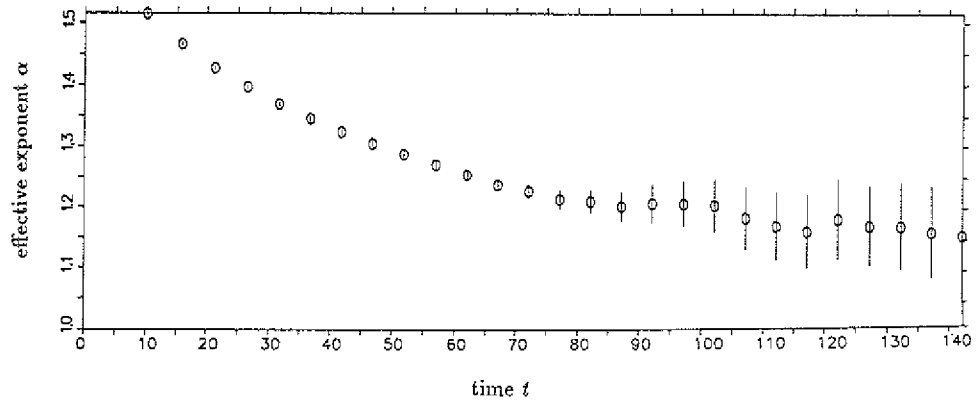


Bild IV.13: Effektiver Exponent α der Depolarisation $P(t)$ im $d = 1$ -Gittergas, definiert durch $P(t) = \exp(-\text{const} \cdot t^\alpha(t))$. Resultate numerischer Simulationen für $c = 0,1$.

(a) $\sigma = 0,2$ (oben)

(b) $\sigma = 0,02$ (unten)

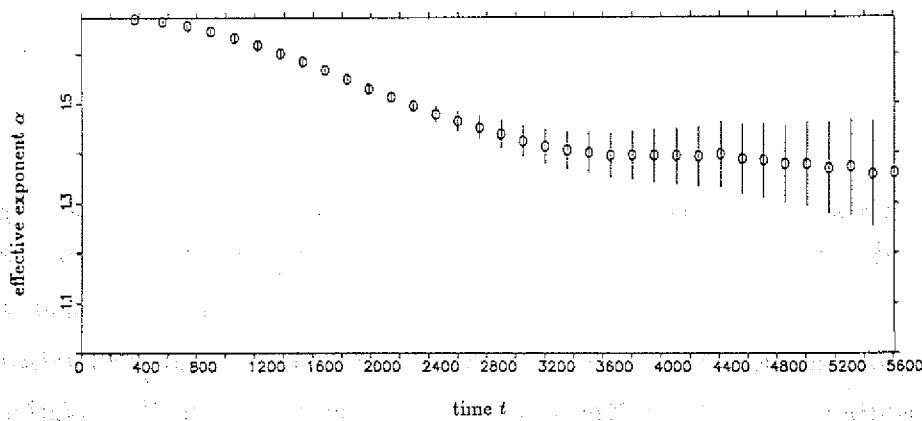


Bild IV.14: Effektiver Exponent der Depolarisation im $d = 1$ -Gittergas für $c = 0,5$ und $\sigma = 0,005$ (Simulation).

von 1,3 bis 1,4 liegt. Ein genaueres Verständnis des Verhaltens der Depolarisation wäre sicherlich wünschenswert; inwieweit dies angesichts der grundsätzlichen Schwierigkeit dieses Problems beim Gittergas überhaupt möglich ist, läßt sich nur schwer vorhersagen.

IV.3. GITTERGAS IN HÖHEREN DIMENSIONEN

In diesem Abschnitt soll das Verhalten der Depolarisation in $d = 2$ und $d = 3$ diskutiert werden. Im Mittelpunkt werden dabei die Resultate numerischer Simulationen stehen, die für das Gittergas auf einem quadratischen bzw. einfach-kubischen Gitter durchgeführt wurden. Neben $P(t)$ und dem für die gaußsche Näherung relevanten Mittelwert $\langle \sum_r t_r^2(t) \rangle$, vgl. (IV.41), wurde auch die mittlere Zahl $S(t) = \langle s(t) \rangle$ der verschiedenen besuchten Plätze simuliert.

Bei der Simulation dieser Größen treten bei höheren Dimensionen schnell erhebliche Speicherplatzprobleme auf; ohne eine Methode, die eine platzsparende Organisation des zur Verfügung stehenden Speichers ermöglicht (— und dabei gleichzeitig noch einen schnellen Zugriff auf die Daten erlaubt), sind diese Simulationen kaum in vernünftiger Weise durchzuführen. Hierauf soll allerdings an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden. In Anhang B wird erläutert, wie dieses Problem gelöst und wie die Simulationen im einzelnen durchgeführt wurden.

Vor der Untersuchung der Depolarisation wird — wie im Fall $d = 1$ — zunächst auf die Resultate für $S(t)$ eingegangen werden. Die Diskussion soll in diesem Fall allerdings nicht so detailliert erfolgen wie im eindimensionalen Fall.

Im vorhergehenden Kapitel ist bereits auf die grundsätzlichen Schwierigkeiten eingegangen worden, die beim Gittergas der analytischen Behandlung von Größen wie der mittleren Zahl der verschiedenen besuchten Plätze oder erst recht der Depolarisation entgegenstehen. Das Gleiche gilt um so mehr im Fall höherer Dimensionen. Vor diesem Hintergrund wird das Ziel der folgenden Untersuchungen sein, soweit möglich ein zumindest qualitatives Verständnis des Verhaltens von $S(t)$ bzw. $P(t)$ zu erzielen.

Die Tatsache, daß im Gegensatz zum eindimensionalen Fall in $d \geq 2$ normale Tracer-Diffusion auftritt, (IV.2), legt die Vermutung nahe, daß das asymptotisch führende Verhalten der hier betrachteten Größen qualitativ ebenfalls dem im einfachen RW-Modell entsprechen sollte (d.h. z.B., daß auch beim Gittergas in $d = 3$

$S(t)$ linear mit t wächst). Gehen wir von der Richtigkeit dieser Annahme aus, so ist die eigentlich interessante Frage die nach der Konzentrationsabhängigkeit der entsprechenden Vorfaktoren. Die Untersuchungen für $\langle r^2(t) \rangle$ haben gezeigt, daß die einfache MF-Beschreibung, Gl. (IV.1), nicht ausreicht; die für das Gittergas typischen Rückwärtskorrelationen führen zu einem zusätzlichen Korrelationsfaktor $f(c) \leq 1$ in der Tracer-Diffusionskonstanten. Ein Gesichtspunkt in der folgenden Diskussion wird sein, ob bzw. inwieweit sich das Verhalten der untersuchten Größen durch einen einfachen Skalenansatz bezüglich dieses Korrelationsfaktors beschreiben läßt. Diese Skalenannahme entspricht der Vorstellung, daß sich zumindest im asymptotischen Bereich das Verhalten einer Gittergas-Größe aus dem Verhalten der entsprechenden Größe des einfachen kontinuierlichen RW's ableiten läßt, wenn man die Sprungrate γ durch die skalierte Sprungrate

$$\gamma_{sk} = f(c)(1 - c)\gamma \quad (IV.52)$$

ersetzt.

Dieser Ansatz ist offenbar die einfachste Möglichkeit für einen Versuch, den in der MF-Theorie nicht berücksichtigten Effekt der Rückwärtskorrelationen zumindest pauschal zu erfassen. Einen Schritt weiter geht das Modell eines korrelierten Random Walks, bei dem — in Abhängigkeit von der Konzentration c — unterschiedliche Sprungraten für Rück- und Vorwärts- bzw. Seitwärtssprünge angenommen werden. Ein solches Modell wird im nächsten Abschnitt im Zusammenhang mit der Untersuchung von $S(t)$ diskutiert werden.

IV.3.1. MITTLERE ZAHL DER VERSCHIEDENEN BESUCHTEN PLÄTZE

Beim einfachen kontinuierlichen Random Walk ist das asymptotische Verhalten von $S(t)$ in $d = 3$ durch [53]

$$S(t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} a_0^{-1}t + O(t^{1/2})$$

gegeben [$a_0 = \tilde{P}(0, u = 0) = 1,516 \dots$ für das einfach-kubische Gitter, vgl. Kapitel II], in $d = 2$ durch ein Verhalten der Form $S(t) \sim t/\ln(t)$, vgl. (II.26). Gehen wir davon aus, daß beim Gittergas qualitativ das gleiche Verhalten auftritt, so stellt sich speziell in $d = 3$ die Frage nach der Konzentrationsabhängigkeit des "Korrelationsfaktors" $f^S(c)$,

der in Analogie zu (IV.2, 3) durch

$$S(t) \sim a_0^{-1} f^S(c) (1-c) t \quad (IV.53)$$

definiert werden soll und im Fall der Gültigkeit der Skalenannahme (IV.52) gerade durch $f(c)$ gegeben wäre.

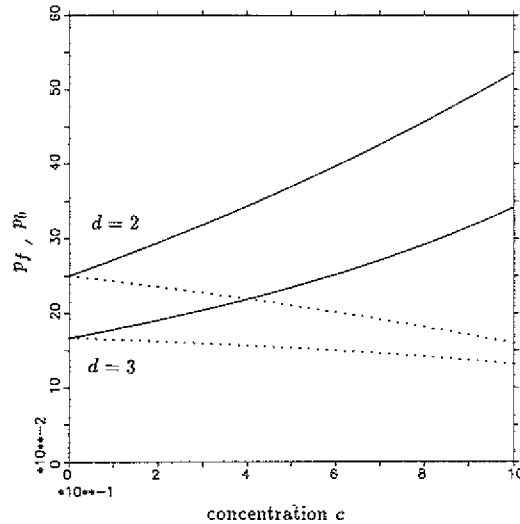


Bild IV.15: Rücksprung-Modell für die Tracer-Diffusion im Gittergas: Konzentrationsabhängigkeit von p_b (durchgezogene Linie) und p_f (punktirierte Linie).

Bevor auf die Resultate der numerischen Simulationen eingegangen wird, soll zunächst diskutiert werden, was sich im Vergleich zur einfachen Skalenannahme ergibt, wenn die Diffusion der Tracerteilchen durch ein einfaches *korreliertes* RW-Modell beschrieben wird. Kehr und Argyrakakis [116] haben die mittlere Zahl $S(n)$ der verschiedenen besuchten Plätze für einen diskreten RW untersucht, bei dem das Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit p_b Rücksprünge ausführt, die sich von der für Vor- bzw. Seitwärtssprünge (p_f) unterscheidet [$p_f = (1 - p_b)/(z - 1)$]. Wir wollen dieses "Rücksprung"(RS)-Modell[†] hier in der Weise modifizieren, daß wir statt eines diskreten einen kontinuierlichen RW mit Sprungraten $\Gamma_{b/f} = p_{b/f} \cdot (1-c)$ annehmen, wobei wir den Effekt

[†]Zu beachten ist, daß man im Gegensatz zu $d = 1$ (vgl. auch Abschnitt IV.2.1.1) in höheren Dimensionen unterschiedliche Typen von RW's mit Korrelationen zwischen aufeinanderfolgenden Sprüngen betrachten kann (vgl. Kapitel 4 in Ref. 84, in dem verschiedene solcher Modelle diskutiert werden). Das hier betrachtete RS-Modell geht im wesentlichen auf Arbeiten von Domb und Fischer [118] (diskretes Modell)

der Rückwärtskorrelationen im Gittergas durch eine gegenüber dem unkorrelierten Fall ($p_b/f = 1/z$) erhöhte Rücksprungwahrscheinlichkeit $p_b(c)$ simulieren; $p_b(c)$ wird dabei in naheliegender Weise durch die Bedingung definiert, daß der Korrelationsfaktor

$$f = \frac{1 - (p_b - p_f)}{1 + (p_b - p_f)} \quad (IV.54)$$

des Rücksprung-Modells gerade gleich $f(c)$ des Gittergases ist. Zur Veranschaulichung zeigt Bild IV.15, welche Konzentrationsabhängigkeiten sich hieraus für p_b bzw. p_f in $d = 2$ und $d = 3$ ergeben, wenn man für $f(c)$ den Korrelationsfaktor (IV.4) verwendet. [Dieser ist zwar nicht exakt, stellt aber immerhin eine gute Näherung dar. Auch nachfolgend wird stets dieser Ausdruck verwendet werden, wenn konkrete Berechnungen von $f(c)$ durchgeführt werden.]

Zu betonen ist der Unterschied zwischen dem hier betrachteten Modell und dem korrelierten RW-Modell, das Kehr *et. al.* [90] explizit für das fcc-Gittergas diskutiert haben. Während hier für Rück- bzw. Vorwärtssprünge zeitlich konstante Sprungraten angenommen werden, deren c -Abhängigkeit sich aus der geforderten Konsistenz mit dem "tatsächlichen" Verhalten der mittleren quadratischen Auslenkung ergibt, werden bei Kehr *et. al.* (soweit möglich) die tatsächlichen Wartezeitverteilungen für die verschiedenen Typen von Sprüngen berücksichtigt, die durch komplizierte Zeitabhängigkeiten charakterisiert sind. Die Autoren können auf diese Weise dann u.a. einen Näherungsausdruck für $f(c)$ berechnen.

(i) $d = 3$

Betrachten wir zuerst den Fall $d = 3$. Das Resultat, das Kehr und Argyrakis [116] für $S(n)$ abgeleitet haben, entspricht übertragen auf unseren Fall [d.h.: n ersetzt durch $(1-c)t$, f ersetzt durch $f(c)$] einem Verhalten der Form (IV.53) mit

$$f^S(c) = \frac{f(c)}{1 + \frac{1}{2}[f(c) - 1]a_0^{-1}} \quad (IV.55)$$

Im RS-Modell ist also das Skalenverhalten von $S(t)$ bezgl. f bereits in führender Ordnung verletzt.

bzw. Haus und Kehr [119] (kont. Modell) zurück, die jeweils die Aufenthaltswahrscheinlichkeit berechnet haben.

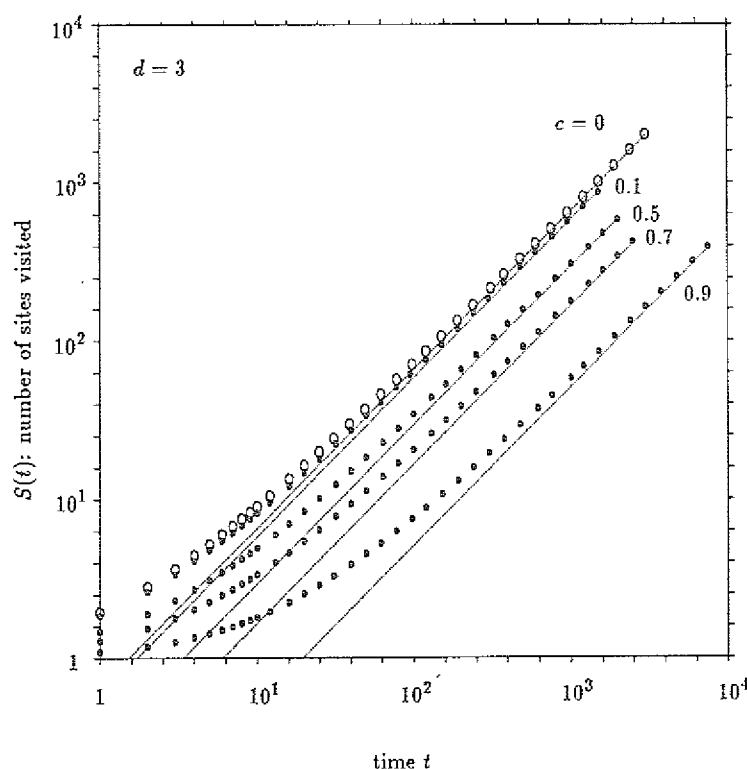


Bild IV.16: Mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze im $d = 3$ -Gittergas. $\circ$ bzw. $\bullet$: Resultate numerischer Simulationen. Punktierte Linien: asymptotisches Verhalten von $S(t)$ im RS-Modell, (IV.53, 55). [Der Korrelationsfaktor $f(c)$ in (IV.55) wurde nach Gl. (IV.4) berechnet.]

Bild IV.16 zeigt für verschiedene Konzentrationen c die Resultate der numerischen Simulationen von $S(t)$ im Gittergas. Wie erwartet wächst $S(t)$ asymptotisch linear mit t . Bild IV.16 macht darüberhinaus deutlich, daß das Rücksprung-Modell in der Tat eine recht gute Beschreibung des Verhaltens von $S(t)$ bei großen Zeiten t liefert. Der Vergleich läßt sich quantitativer diskutieren, wenn man die Simulationsdaten genauer analysiert, d.h. den Einfluß des Korrekturterms $[O(t^{1/2})]$ zum führenden linearen Verhalten von $S(t)$, der in Bild IV.16 nur schwer abzuschätzen ist, berücksichtigt und durch übliche Extrapolation ($t^{-1/2} \rightarrow 0$) die asymptotische Steigung von $S(t)$ bestimmt.

Bild IV.17 zeigt die auf diese Weise aus den Simulationen gewonnenen Werte von $f^S(c)$ im Vergleich mit Gl. (IV.55) sowie dem Korrelationsfaktor $f(c)$ †. Die Abwei-

†Bei den Simulationen, deren Ergebnisse hier diskutiert werden, ist zu Vergleichszwecken auch die mittlere quadratische Auslenkung simuliert worden. Die simulierten Werte von $f(c)$ sind in Bild IV.17 miteingezeichnet. Die Theorie von Nakazato und Kitahara, Gl. (IV.4), liefert Werte, die bei den mittleren Konzentrationen c

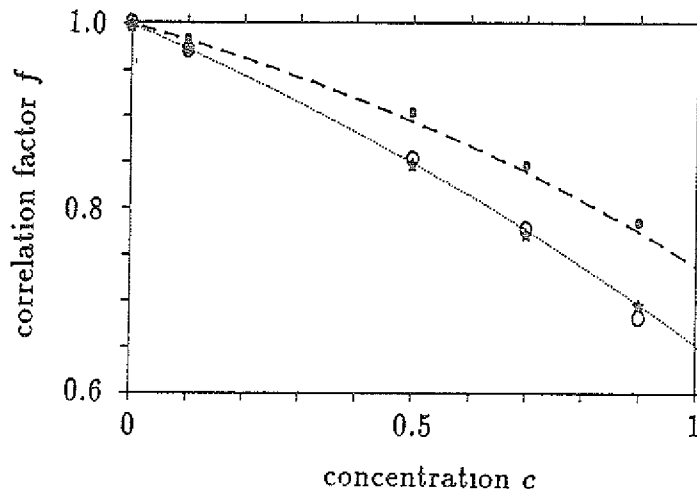


Bild IV.17: Korrelationsfaktor $f^S(c)$ des asymptotisch linearen Anstiegs von $S(t)$ im $d = 3$ -Gittergas: Resultate numerischer Simulationen (•) im Vergleich mit $f^S(c)$ im Rücksprung-Modell [gestrichelte Linie, Gl. (IV.55)] und $f(c)$ [punktirierte Linie: Gl. (IV.4), * : Simulation]. Miteingezeichnet ist der Korrelationsfaktor $f^\Sigma(c)$ (o, Simulation), vgl. Abschnitt IV.3.2.

chungen der Werte des RS-Modells von den simulierten betragen weniger als $\approx 1,5\%$, was angesichts der Einfachheit des Modells eine erstaunlich gute Übereinstimmung ist.

(ii) $d = 2$

Im Fall $d = 2$ finden Kehr und Argyrakis [116] für $S(n)$ des diskreten RS-Modells den folgenden Ausdruck:

$$S(n) \underset{n \gg 1}{\sim} \frac{a n}{\ln(b n)} \sum_{j=0}^{\infty} c_j [\ln(b n)]^{-j}, \quad (IV.56a)$$

wobei

$$a = \pi f, \quad b = 8f \exp[\pi(f - 1)/2]. \quad (IV.56b)$$

Hier ist anzumerken, daß die Form (IV.56a) für $S(n)$ ursprünglich von Henyey und Seshadri [120] abgeleitet wurde, die $S(n)$ für einfache RW's auf zweidimensionalen Gittern unterschiedlichen Typs untersucht haben [— je nach Gittertyp ergeben sich dann

- typischerweise $0,5\%$ größer als die simulierten sind und damit gerade noch im abgeschätzten Fehlerbereich liegen. Die Tendenz, daß diese Theorie den tatsächlichen Korrelationsfaktor etwas überschätzt, wird allerdings durch genauere Simulationen von Tahir-Kheli [97] bestätigt.

in (IV.56a) unterschiedliche Konstanten a und b ; die Koeffizienten c_j sind Ableitungen von Gamma-Funktionen und in Ref. 120 bis zu $j = 20$ tabelliert]. Hervorzuheben ist, daß das Resultat von Kehr und Argyrakis zeigt, daß wiederum bereits in führender Ordnung das Skalenverhalten bezüglich f verletzt ist. Übertragen wir das obige Resultat auf den hier diskutierten Fall, so läßt das RS-Modell mithin das folgende führende Verhalten von $S(t)$ im Gittergas erwarten ($c_0 = 1$):

$$S(t) \underset{t \gg 1}{\sim} \frac{\pi f(c)(1-c)t}{\ln[8\pi f(c)(1-c)t] + \pi[f(c) - 1]/2}. \quad (IV.57)$$

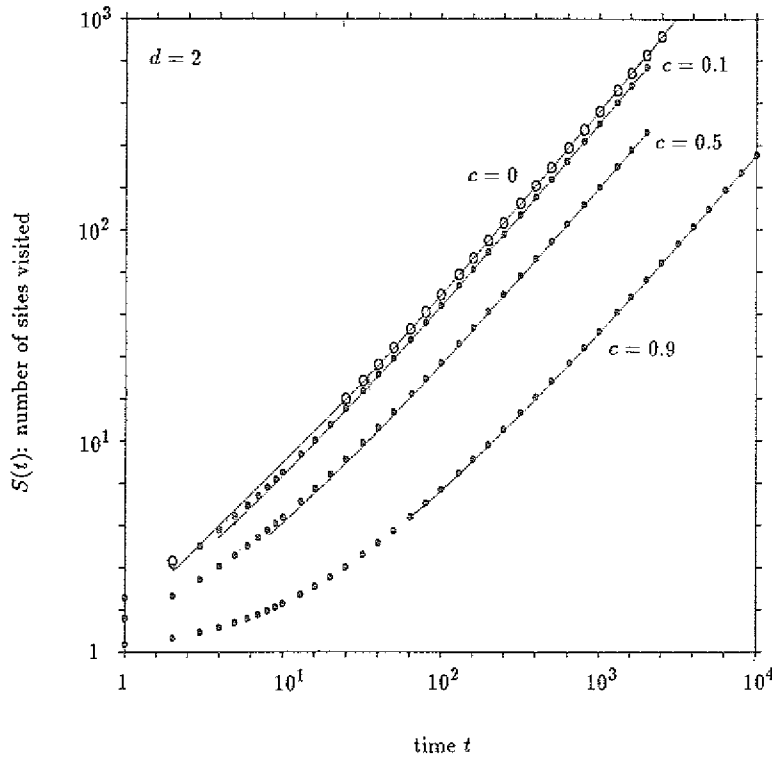


Bild IV.18: Mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze im $d = 2$ -Gittergas. $\bullet$ bzw. $\circ$: Resultate numerischer Simulationen. Punktierte Linien: $S(t)$ im Modell des korrelierten RW's (RS-Modell); die Berechnung erfolgte in Analogie zu Gl. (IV.56).

Bild IV.18 zeigt die Resultate der numerischen Simulationen von $S(t)$ im zweidimensionalen Gittergas. Zum Vergleich ist wiederum das Verhalten von $S(t)$ im RS-Modell miteingezeichnet worden; anzumerken ist, daß hierbei nicht nur der führende Term, Gl. (IV.57), sondern der der ganzen Summe in (IV.56a) entsprechende Ausdruck (bis $j = 20$) berechnet wurde. Es wird deutlich, daß das RS-Modell wie auch bereits im

Fall $d = 3$ eine sehr gute Beschreibung des tatsächlich beobachteten Verhaltens von $S(t)$ liefert.

Die Simulationsergebnisse für $d = 2$ ließen sich sicherlich noch weiter im Detail analysieren und genauer diskutieren; hierauf soll an dieser Stelle allerdings verzichtet werden.

Abschließend ist also Folgendes festzuhalten: Die Simulationen haben gezeigt, daß die mittlere Zahl der verschiedenen Plätze, die ein Tracerteilchen im Gittergas besucht, sowohl in $d = 2$ wie auch in $d = 3$ bei großen Zeiten qualitativ die gleiche zeitliche Abhängigkeit wie im Fall eines einfachen RW's aufweist. Das asymptotische Verhalten von $S(t)$ genügt *nicht* der einfachen Skalenannahme bezüglich des Korrelationsfaktors $f(c)$. Hierfür liefert das einfache Modell eines korrelierten RW's mit erhöhter Rücksprung-Wahrscheinlichkeit eine qualitative Erklärung. Darüberhinaus hat sich gezeigt, daß dieses Modell auch quantitativ eine gute Beschreibung des Verhaltens von $S(t)$ liefert.

IV.3.2. RESULTATE FÜR DIE DEPOLARISATION

Das in den Simulationen beobachtete Verhalten der mittleren Zahl der verschiedenen besuchten Plätze ist ein weiteres Indiz dafür, daß die Depolarisation im höherdimensionalen Gittergas ebenso wie beim einfachen Random Walk asymptotisch einfach-exponentiell zerfällt. Dieses Verhalten wurde in der Tat in den Simulationen von $P(t)$ in $d = 2$ und $d = 3$ bei allen untersuchten Konzentrationen c beobachtet. Bild IV.19 ($d = 2$) und Bild IV.20 ($d = 3$) zeigen dies beispielhaft für einen typischen Wert von σ . In Bild IV.20 ist neben $P(t)$ auch das aus der Simulation von $\langle \sum_r t_r^2(t) \rangle$ abgeleitete Verhalten der gaußschen Näherung für $P(t)$ eingezeichnet; dieses wird weiter unten noch diskutiert werden.

Die interessante Frage ist nun, wie die Zerfallskonstante λ des einfach-exponentiellen Polarisationszerfalls von der Konzentration c des Gittergases und der Breite σ der Frequenzverteilung abhängt. In Bild IV.21 und Bild IV.22 sind die in den Simulationen beobachteten Werte von λ gegen σ aufgetragen; zum Vergleich wurden die Zerfallskonstanten des einfachen kontinuierlichen Random Walks, $\lambda_0(\sigma) \equiv \lambda(\sigma, c = 0)$, miteingezeichnet. Abgesehen davon, daß die Zerfallskonstanten bei festem σ mit zunehmender Konzentration natürlich größer werden, ist zu erkennen, daß dabei der effektive Ex-

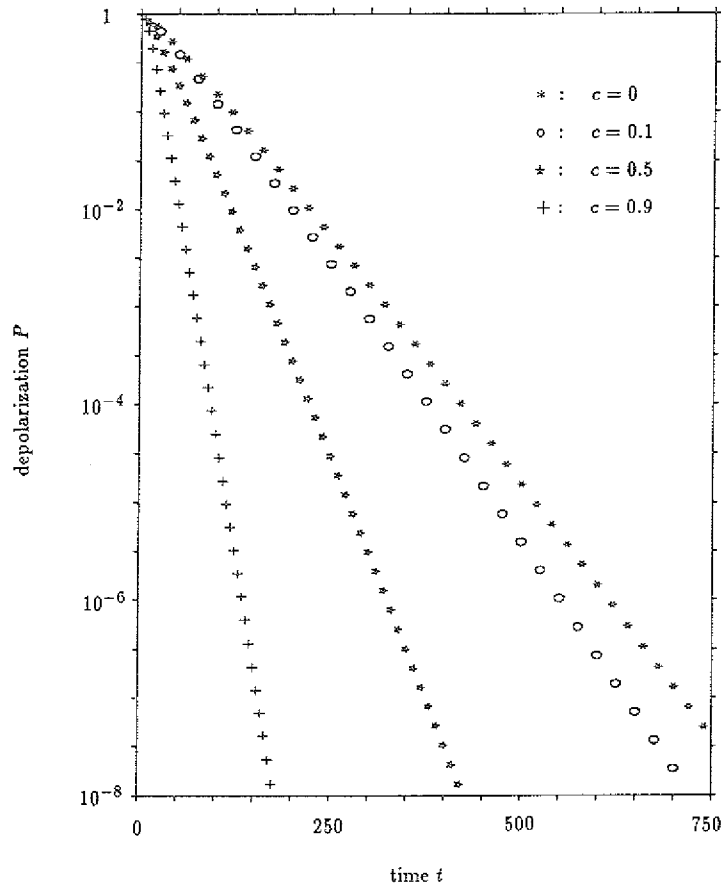


Bild IV.19: Depolarisation im zweidimensionalen Gittergas bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen). Die Breite σ der Frequenzverteilung beträgt 0,1.

ponent β , definiert durch $\lambda = \text{const} \cdot \sigma^\beta$, gleichzeitig kleinere Werte annimmt. Dieses Verhalten läßt sich qualitativ bereits im Rahmen der MF-Theorie,

$$\lambda^{MF}(\sigma, c) = (1 - c) \lambda_0[\sigma/(1 - c)] , \quad (IV.58)$$

verstehen [wie in Kapitel II deutlich geworden ist, nimmt der effektive Exponent von λ_0 mit abnehmendem σ zu (vgl. Bild II.11, Tab. II.1)].

Konzentrieren wir uns bei der weiteren Diskussion zunächst auf den Fall $d = 3$. Beim einfachen RW hat sich gezeigt, daß sich das Verhalten der Depolarisation im Grenzfall schneller Frequenzmodulation ($\sigma \ll 1$) durch das der gaußschen Näherung beschreiben läßt (vgl. Abschnitt II.4, II.5):

$$\lambda_0(\sigma) \underset{\sigma \ll 1}{\sim} \lambda_0^G(\sigma) = a_0 \sigma^2 .$$

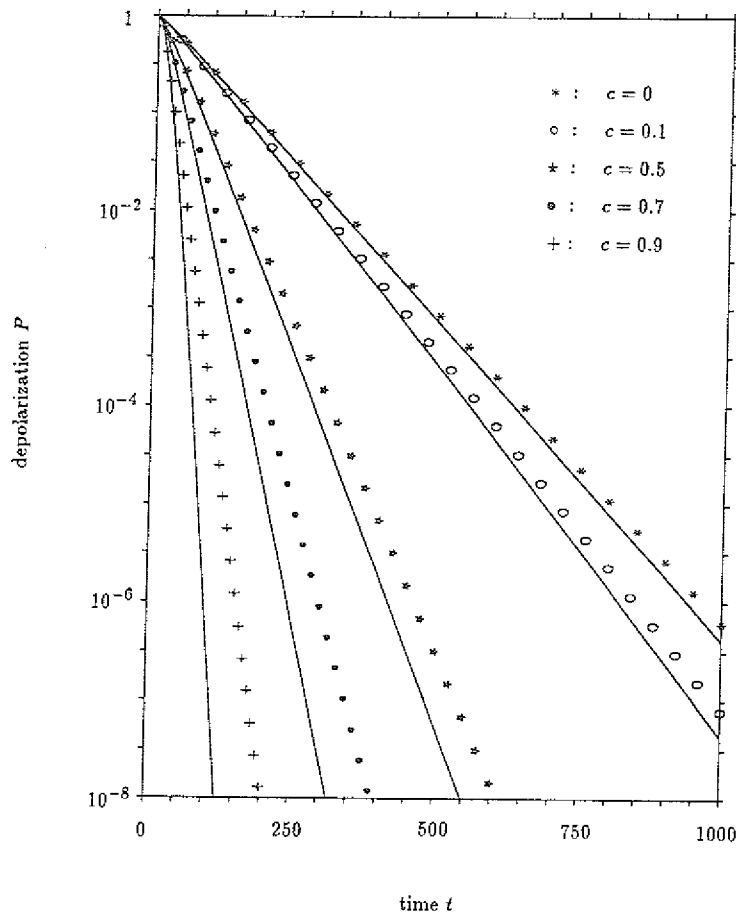


Bild IV.20: Depolarisation im dreidimensionalen Gittergas bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen). Wie in Bild IV.19 ist $\sigma = 0,1$. Die Resultate der Simulationen der gaußschen Näherung für $P(t)$ sind als durchgezogene Linien dargestellt.

Zu vermuten ist, daß die gaußsche Näherung auch beim Gittergas eine gute Beschreibung liefern sollte, wenn die Frequenzmodulation hinreichend schnell ist, d.h. wenn $\sigma/(1-c) \ll 1$. Zur Beantwortung dieser Frage ist beim dreidimensionalen Gittergas bei allen Konzentrationen c auch der Mittelwert

$$\Sigma(t) \equiv \left\langle \sum_r t_r^2(t) \right\rangle$$

simuliert worden. Bild IV.20 macht beispielhaft deutlich, daß bei festem σ die gaußsche Näherung mit kleiner werdender Konzentration c immer besser wird. Vergleiche bei festem c und verschiedenen Werten von σ haben darüberhinaus besonders deutlich gezeigt, daß sich $P(t)$ mit abnehmendem σ immer mehr dem gaußschen Verhalten annähert. Die obige Vermutung ist in also in der Tat von den Simulationen bestätigt worden.

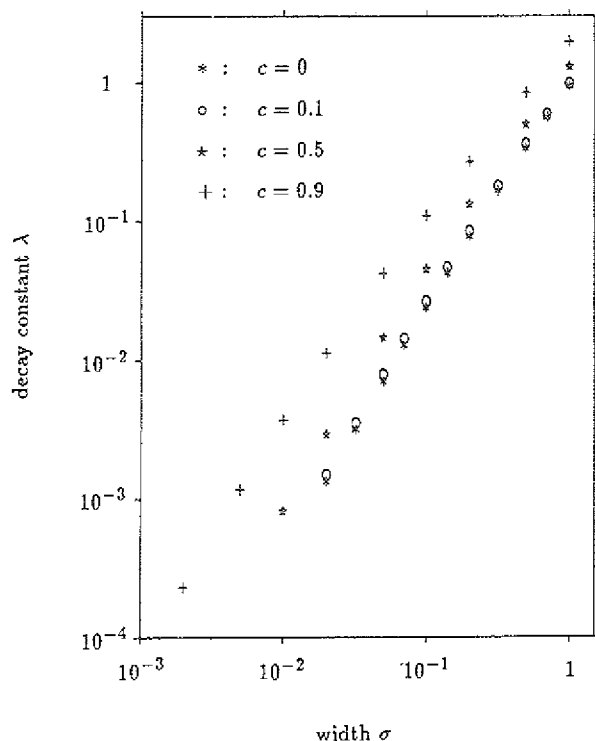


Bild IV.21: Zweidimensionales Gittergas: Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ des einfach-exponentiellen Polarisationszerfalls von der Breite σ bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen).

Die Steigung $m(c)$ des asymptotisch linearen Anstiegs von $\Sigma(t)$,

$$\Sigma(t) \underset{t \gg 1}{\sim} m(c) \cdot t + O(t^{1/2}) ,$$

ist in üblicher Weise aus den Simulationsdaten bestimmt worden. In Analogie zur Definition von $f^S(c)$ [Gl. (IV.53)] bei der Untersuchung der mittleren Zahl der verschiedenen besuchten Plätze definieren wir einen Korrelationsfaktor $f^\Sigma(c)$ durch

$$m(c) = \frac{2a_0}{f^\Sigma(c)(1-c)} . \quad (IV.59)$$

Im Fall der Gültigkeit der Skalenannahme (IV.52) wäre wiederum $f^\Sigma(c) = f(c)$. Die sich aus den Simulationen ergebenden Werte von $f^\Sigma(c)$ sind in Bild IV.17 zu finden. Wie deutlich wird, unterscheiden sie sich tatsächlich nur geringfügig vom Korrelationsfaktor $f(c)$ der mittleren quadratischen Auslenkung.

Gehen wir im folgenden in guter Näherung von $f^\Sigma(c) = f(c)$ aus, können wir das Verhalten der Zerfallskonstanten $\lambda(\sigma, c)$ im Grenzfall schneller Frequenzmodulation also

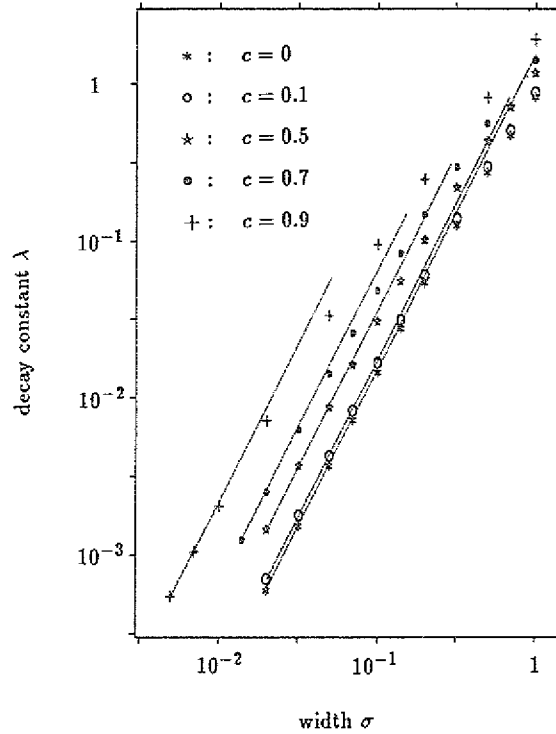


Bild IV.22: Dreidimensionales Gittergas: Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ von der Breite σ bei verschiedenen Konzentrationen c der Gittergasteilchen (Simulationen).
Punktierte Linien: gaußsche Zerfallskonstanten λ^G , vgl. Text.

folgendermaßen beschreiben:

$$\lambda(\sigma, c) \underset{\sigma \ll (1-c)}{\sim} \lambda^G(\sigma, c) \approx \frac{a_0}{f(c)(1-c)} \sigma^2. \quad (IV.60)$$

Die Zerfallskonstanten λ^G sind in Bild IV.22 für die jeweiligen Werte von c miteingezeichnet worden.

Gl. (IV.60) zeigt, daß die Skalenannahme bezüglich f , die sich Analogie zu (IV.58) als

$$\lambda(\sigma, c) = f(c)(1-c) \lambda_0 \left[\frac{\sigma}{f(c)(1-c)} \right], \quad (IV.61)$$

schreibt, zumindest für $\sigma \ll (1-c)$ in guter Näherung erfüllt sein sollte. Bild IV.23, in dem alle Zerfallskonstanten aus Bild IV.22 noch einmal in skalierten Form $\lambda/[f(c)(1-c)]$ gegen $\sigma/[f(c)(1-c)]$ aufgetragen sind, zeigt darüberhinaus, daß diese Skalenannahme nicht nur bei den kleineren Werten von $\sigma/(1-c)$, sondern auf dem *gesamten* untersuchten Parameterbereich eine gute Beschreibung der Daten darstellt.

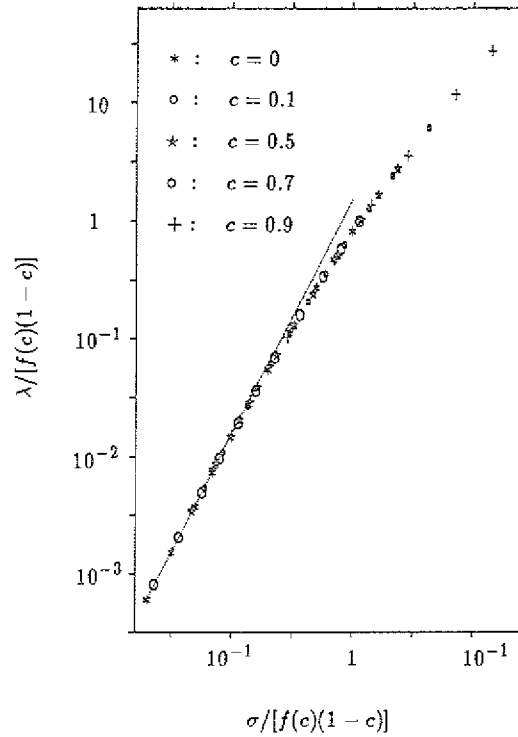


Bild IV.23 : Dreidimensionales Gittergas: Skalenplot der Zerfallskonstanten aus Bild IV.22. Die punktierte Linie entspricht der gaußschen Zerfallskonstanten λ^G aus (IV.60).

Die gleiche Auftragung der Daten ist auch für den Fall $d = 2$ vorgenommen worden. Wie man anhand von Bild IV.24 sieht, ist auch hier die Skalenannahme sehr gut erfüllt. Wir können also im Prinzip die Ergebnisse der Diskussion der Depolarisation des einfachen RW-Modells in $d = 2$ unter Berücksichtigung von (IV.61) einfach auf das Gittergas übertragen. Eine einfache Beschreibung, wie sie bei $d = 3$ im Fall schneller Frequenzmodulation von der gaußschen Näherung geliefert wird, existiert für die Zerfallskonstante in $d = 2$ zwar nicht, aber es ist hier z.B. daran zu denken, die Ergebnisse der Effektiven-Medium-Theorie (vgl. Abschnitt II.4) für λ_0 zu benutzen, wenn beim Gittergas Zerfallskonstanten von Interesse sind, die durch den in den Simulationen untersuchten Parameterbereich nicht abgedeckt sind.

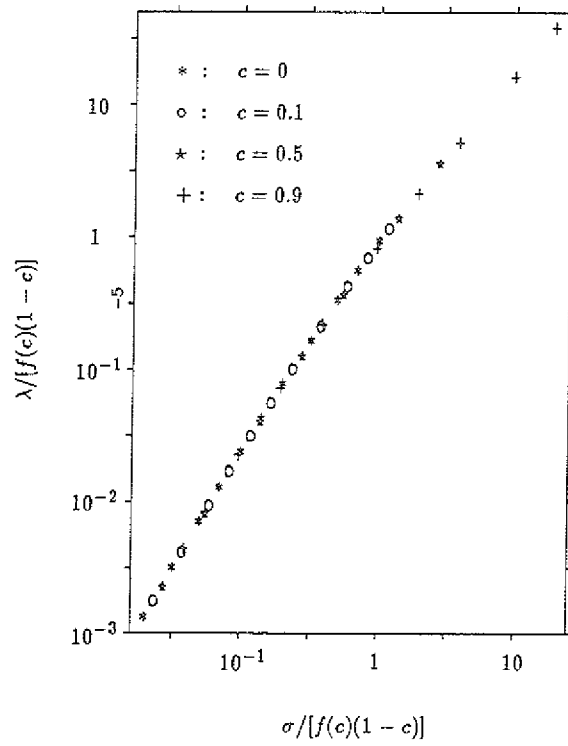


Bild IV.24: Zweidimensionales Gittergas: Skalenplot der Zerfallskonstanten aus Bild IV.21.

Die Zerfallskonstante λ ist eine Funktion von c und σ . In Bild IV.24 ist ein Skalenplot dargestellt, bei dem die Zerfallskonstante λ auf der y-Achse (logarithmisch skaliert) und das Produkt $\sigma/[f(c)(1-c)]$ auf der x-Achse (logarithmisch skaliert) aufgetragen ist. Die Datenpunkte für verschiedene Werte von c ($c = 0, 0.1, 0.5, 0.9$) fallen auf eine einzige Kurve zusammen, was auf ein universelles Verhalten hindeutet.

Die Kurve in Bild IV.24 zeigt, dass die Zerfallskonstante λ mit dem Produkt $\sigma/[f(c)(1-c)]$ in einer Potenz von 2 ansteigt. Dies ist ein charakteristisches Merkmal für die Diffusion in einem zweidimensionalen Gittergas.

V. Zusammenfassung

In dieser Arbeit sind verschiedene Modelle für die Spindepolarisation infolge von Diffusionsprozessen auf Gittern untersucht worden. Die wichtigsten Ergebnisse sollen zum Abschluß noch einmal kurz zusammengefaßt werden. Im Vordergrund der Untersuchungen stand das Modell für die Depolarisation der transversalen Spinrotation von Spins, die auf einem Gitter diffundieren, das durch zufällige lokale Spinrotationsfrequenzen ω_r charakterisiert ist. Für die Verteilung dieser Frequenzen wurde eine Gaußverteilung mit Mittelwert Null und Breite σ angenommen.

Das Modell wurde in Kapitel II zunächst für den Fall diskutiert, daß einzelne Spinteilchen unabhängig voneinander einen einfachen (diskreten oder kontinuierlichen) Random Walk auf dem Gitter ausführen. Eine charakteristische Eigenschaft dieses Modells ist, daß als Folge von Rückkehrprozessen des RW's Frequenzkorrelationen nur sehr langsam, d.h. algebraisch, zerfallen: Unter der gaußschen Annahme für den Prozeß $\omega(t)$ würde sich daher ergeben, daß die Polarisation in den Dimensionen $d = 1$ und $d = 2$ schneller als einfach-exponentiell zerfällt. Frühere Untersuchungen für den eindimensionalen Fall (RW auf einer linearen Kette) haben aber gezeigt, daß dennoch bereits in $d = 1$ motional narrowing im Sinne eines asymptotisch einfach-exponentiellen Polarisationszerfalls auftritt. Im Fall schneller Frequenzmodulation ($\sigma\tau \ll 1$) ergibt sich dabei eine charakteristische Abhängigkeit der Zerfallskonstanten λ von der Breite σ und der (mittleren) Wartezeit τ des RW's: $\lambda \propto \sigma^\beta \tau^{\beta-1}$ mit $\beta \approx \frac{4}{3}$.

In dieser Arbeit wurde die Depolarisation auch für höhere Dimensionen, d.h. für RW's auf einem quadratischen bzw. einfach-kubischen Gitter untersucht. Die Zerfallskonstante des kontinuierlichen RW's ist für beide Dimensionen in der Effektiv-Medium-Näherung berechnet worden. Die Theorie liefert in $d = 2$ in qualitativer Übereinstimmung mit den Resultaten numerischer Simulationen einen effektiven Exponenten β , der sich für $\sigma\tau \rightarrow 0$ logarithmisch dem Wert $\beta = 2$ annähert. Auch quantitativ liefert diese Theorie in $d = 2$ bereits eine recht gute Beschreibung; bei den kleineren Werten von $\sigma\tau$, für die Simulationsergebnisse vorlagen, waren die theoretischen Werte nur etwa um einen Faktor 1,3 zu groß.

Da im Fall $d = 3$ die Zerfallskonstante der EM-Theorie für $\sigma\tau \ll 1$ gegen die der gaußschen Theorie konvergiert, konnte geschlossen werden, daß die gaußsche Theorie, $\lambda = a_0\sigma^2$, im Grenzfall schneller Frequenzmodulation exakt wird. Dieser Schluß wurde

durch die Simulationen sowohl des kontinuierlichen wie auch des diskreten RW-Modells bestätigt.

Um der Frage nachzugehen, inwieweit das Verhalten der Depolarisation von der expliziten Annahme einer gaußschen Frequenzverteilung abhängt, wurden speziell für den diskreten RW in $d = 1$ auch andere Beispiele von Frequenzverteilungen betrachtet. Es wurde deutlich, daß der asymptotische Polarisationszerfall von der speziellen Form der jeweiligen Verteilung abhängt; für das Beispiel der symmetrischen Exponentialverteilung konnte ein asymptotischer Zerfall proportional zu $\exp[-n^{1/3} \ln^{2/3}(n)]$ abgeleitet werden. Bei kleinem $\sigma\tau$ gibt es allerdings bei jeder Verteilung einen bestimmten Schrittzahl-Bereich, in dem ein einfach-exponentieller Polarisationszerfall vergleichbar zu dem im Fall der gaußschen Verteilung vorherrscht. Der tatsächliche asymptotische Zerfall wird dabei mit kleiner werdendem $\sigma\tau$ zu unmeßbar kleinen Werten von P verschoben. Die spezifische Eigenschaft der Gaußverteilung kann darin gesehen werden, daß sie bei *allen* großen Schrittzahlen zu einem einfach-exponentiellen Polarisationszerfall führt.

Im Kapitel III dieser Arbeit wurden Modelle für einen anderen möglichen Depolarisationsmechanismus diskutiert. Untersucht wurden die Depolarisationseffekte, die durch die Diffusion einer Störstelle zu einem ortsfesten Spin — bzw. umgekehrt durch die Diffusion einzelner Spins zu einer ortsfesten Störstelle — verursacht werden. Die Diffusion wurde wiederum als einfacher RW beschrieben. Die Störstelle wird in diesen Modellen durch eine zufällige Spinrotationsfrequenz ω charakterisiert. Diskutiert wurde die Depolarisation dabei sowohl für ein Modell, in dem diese Frequenz ω zeitlich konstant ist, wie auch für ein Modell, bei dem angenommen wird, daß der Spin bei jedem neuen Kontakt mit der Störstelle eine *neue*, zufällig aus der zugrundeliegenden Verteilung gezogene Frequenz ω wahrnimmt (Strong-Collision-Modell).

Die Modelle sind für den allgemeinen Fall diskutiert worden, in dem die Frequenzen ω beliebig im Raum orientiert sein können, und damit nicht wie das in Kapitel II untersuchte Modell auf den Fall der transversalen Spindepolarisation beschränkt. Das Problem der Berechnung der mittleren Polarisation $P(t)$ konnte vollständig gelöst werden. Als Beispiel einer konkreten Verteilung wurde die dreidimensionale Gaußverteilung diskutiert (Kubo-Toyabe-Modell), wobei beim Strong-Collision-Modell auch explizit der Einfluß eines externen longitudinalen Magnetfeldes miteinbezogen werden konnte.

Die Resultate erlauben die explizite Berechnung von $P(t)$ für all diejenigen RW's, für die die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ursprung bekannt ist. Beispielhaft wurde bei beiden Modellen die Depolarisation für einen RW auf einem Halbstrahl diskutiert.

Der letzte Teil dieser Arbeit (Kapitel IV) wurde dem Gittergas gewidmet. Das Modell der transversalen Spindepolarisation wurde für Spinteilchen untersucht, die korrelierte Tracerdiffusion in einem (nichtwechselwirkenden) Gittergas der Konzentration c ausführen. Da die Zahl s der verschiedenen besuchten Plätze (d.h. Frequenzen), die ein Teilchen im Laufe der Zeit besucht, für das Verhalten der Depolarisation von besonderer Bedeutung ist, wurde in allen Dimensionen d deren Mittelwert $S(t)$ sowie in $d = 1$ auch deren Verteilung $W(s, t)$ diskutiert.

Von besonderem Interesse ist der Fall $d = 1$, bei dem anomale Tracer-Diffusion auftritt. Es wurde durch Simulationen gezeigt, daß die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze (der mittlere *Span*) $S(t)$ asymptotisch proportional zu $[(1-c)/c]^{1/2} t^{1/4}$ anwächst. Die grundlegenden Schwierigkeiten, die beim Gittergas einer analytischen Behandlung von First-Passage-Problemen (zu denen auch die Zahl der verschiedenen besuchten Plätze gehört) entgegenstehen, wurden verdeutlicht. Wichtige Anhaltspunkte für die Untersuchung des Spans im eindimensionalen Gittergas ergaben sich aber aus der Diskussion des Modells eines RW auf einem RW, das ebenfalls anomale Diffusion $\propto t^{1/2}$ aufweist und mit dem sich auch der Effekt der Konzentrationsabhängigkeit im Gittergas simulieren läßt. Für dieses vergleichsweise einfache nicht-markov'sche Modell läßt sich das asymptotische Verhalten der Spanverteilung angeben; es zeigt ein Skalenverhalten, das auch für das in den Simulationen beobachtete Verhalten der Spanverteilung $W(s, t)$ im Gittergas eine gute Beschreibung lieferte.

Aus diesem Skalenverhalten konnte ein Skalenausdruck für die Depolarisation $P(t)$ abgeleitet werden, mit dem sich die in den Simulationen beobachtete Abhängigkeit des Polarisationszerfalls von den Parametern σ und c gut beschreiben ließ. Im Gegensatz zum einfachen RW-Modell tritt beim eindimensionalen Gittergas *kein* asymptotisch einfach-exponentieller Polarisationszerfall mehr auf. Der Zerfall läßt sich durch $P(t) \sim \exp(-\text{const} \cdot t^\alpha)$ beschreiben, wobei der Exponent α im Bereich von 1,3 bis 1,4 liegt.

Im höherdimensionalen Gittergas verhält sich die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze bei großen Zeiten t qualitativ genauso wie im Fall des einfachen RW's,

d.h. $S(t) \sim t/\ln(t)$ in $d = 2$ und $S(t) \sim t$ in $d = 3$. Das führende Verhalten genügt nicht der Skalenannahme bezüglich des Korrelationsfaktors $f(c)$ der mittleren quadratischen Auslenkung. In $d = 3$ tritt statt $f(c)$ ein Korrelationsfaktor $f^S(c)$ auf, der bei größeren Konzentrationen c deutlich größer als $f(c)$ ist. Im Rahmen eines korrelierten RW-Modells für die Tracerdiffusion im Gittergas wurde für $f^S(c)$ ein Ausdruck gewonnen, mit dem sich die Ergebnisse der Simulationen gut beschreiben ließen. Auch in $d = 2$ ermöglichte dieses Modell eine gute Beschreibung des in den Simulationen beobachteten Verhaltens von $S(t)$.

Die Polarisation des zwei- und dreidimensionalen Gittergases zerfällt im Gegensatz zum eindimensionalen Fall bei großen Zeiten t einfach-exponentiell. Die Simulationen haben gezeigt, daß die Skalenannahme, in der der Korrelationsfaktor $f(c)$ verwendet wird, bei allen untersuchten Parametern σ und c eine sehr gute Beschreibung des Verhaltens der Zerfallskonstanten des einfach-exponentiellen Zerfalls ermöglicht. Dies bedeutet, daß sich in guter Näherung die Resultate für das RW-Modell aus Kapitel II auf das Gittergas übertragen lassen. Hervorzuheben ist, daß in $d = 3$ auch beim Gittergas die gaußsche Näherung im Fall schneller Frequenzmodulation das Verhalten der Depolarisation richtig beschreibt. Die Zerfallskonstante ist in diesem Fall durch $\lambda \approx a_0 \sigma^2 / [f(c)(1-c)]$ gegeben.

Anhang A. Depolarisation durch Störstellen: Frequenzmittelung

Die Laplace-Transformierte der mittleren Polarisation $\underline{P}(t) = \langle \underline{S}(t) \rangle$ des Modells, in dem die Spins mit jeweils einer Störstelle wechselwirken, die durch eine zeitlich konstante Rotationsfrequenz $\underline{\omega}$ charakterisiert ist, ist bei verschwindendem äußerem Feld durch Gl. (III.22a),

$$\tilde{P}(u) = \frac{1}{u} \langle \underline{A}(u) \rangle_{\underline{\omega}} \cdot \underline{S}_0, \quad (A.1)$$

gegeben, wobei

$$\underline{A}(u) = \frac{\underline{E} + [\tilde{P}_{r00}(u) - \tilde{P}_{00}(u)] \underline{\Omega}}{\underline{E} - \tilde{P}_{00}(u) \underline{\Omega}} \quad (A.2)$$

[Gl. (III.22b)]. Mit

$$\underline{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix}$$

hat die Matrix $\underline{A}$, die mit der Verteilung $g(\underline{\omega})$ zu mitteln ist, konkret die folgende Gestalt ($\omega_{1,2,3} \equiv \omega_{x,y,z}$, $\omega^2 = \sum_{i=1}^3 \omega_i^2$):

$$A_{ii} = \frac{1}{N(\omega)} \{1 + \omega^2 \tilde{P}_{00}^2 - (\omega^2 - \omega_i^2) \tilde{P}_{00} \tilde{P}_{r00}\} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (A.3a)$$

$$A_{ij} = \frac{1}{N(\omega)} \{\omega_i \omega_j \tilde{P}_{00} + \chi_{ij} \omega_k\} \tilde{P}_{r00} \quad (i \neq j = 1, 2, 3), \quad (A.3b)$$

$$\text{wobei } k \neq i, k \neq j \text{ und } \chi_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{für } (i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1) \\ 1, & \text{sonst} \end{cases},$$

mit gemeinsamem Nenner

$$N(\omega) = 1 + \tilde{P}_{00}^2 \omega^2.$$

Betrachtet man nur *sphärisch symmetrische* Verteilungen $g(\underline{\omega})$, so verschwinden offensichtlich wegen $\langle \omega_i \rangle = 0$ ($i = 1, 2, 3$) alle Nichtdiagonalelemente. Die Mittelung eines Diagonalelementes A_{ii} über alle möglichen Richtungen von $\underline{\omega}$ läßt sich einfach ausführen, wenn man zu sphärischen Polarkoordinaten ω , θ und φ übergeht, die jeweils bezüglich der i -Achse definiert werden (d.h. $\cos(\theta) = \underline{\omega} \cdot \underline{e}_i$). Die einzige Winkelabhängigkeit in Gl. (A.3a) ist dann durch den Term $(\omega^2 - \omega_i^2) = \omega^2 \sin^2(\theta)$ gegeben, so daß die Mittelung über θ und φ (den Raumwinkel R) mit $\langle \sin^2(\theta) \rangle_R = \frac{2}{3}$ direkt das Resultat

$$f(u, \omega) \equiv \langle A_{ii} \rangle_R = \frac{1}{N(\omega)} (1 + a \omega^2 \tilde{P}_{00}^2), \quad (A.4a)$$

$$a \equiv \frac{1}{3} [1 + 2(1 - \tilde{P}_{r00}/\tilde{P}_{00})], \quad (A.4b)$$

liefert, s. Gl. (III.25, 26).

Die Polarisation P , Gl. (A.1), ist durch $\tilde{P}(u) = \frac{1}{u} \langle f(u, \omega) \rangle_\omega S_0$ gegeben. Die Berechnung des Mittelwertes

$$\langle f(u, \omega) \rangle_\omega = \int_0^\infty d\omega \omega^2 f(u, \omega) \bar{g}(\omega) ,$$

vgl. (III.24), erfordert im Fall der dreidimensionalen *Gaußverteilung* (III.2) die Auswertung des folgenden Integrals:

$$I \equiv \langle f(u, \omega) \rangle_\omega = \frac{2}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \frac{1 + a\tilde{P}_{00}^2\omega^2}{1 + \tilde{P}_{00}^2\omega^2} \exp(-\frac{1}{2}\omega^2/\sigma^2) , \quad (A.5)$$

die hier kurz skizziert werden soll.

Mittels einfacher Substitution läßt sich I auf die Form

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}b^3} \int_0^\infty dx x^{1/2} \left(\frac{1+ax}{1+x} \right) \exp(-\frac{1}{2}x/b^2) \quad (b \equiv \sigma\tilde{P}_{00}) \quad (A.6)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}b^3} (I_1 + I_2) , \quad (A.7)$$

bringen, wobei die Integrale I_1 und I_2 durch einfache Aufspaltung der Summe $(1+ax)$ im Zähler des Integranden in (A.6) definiert seien. I_1 und I_2 lassen sich, siehe Gl. (13.2.5) in [68], durch konfluente hypergeometrische Funktionen U ausdrücken; mit der Definition $z \equiv 1/2b^2$ ergibt sich

$$I_1 = I_1(z) = \Gamma(\frac{3}{2}) U(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, z) , \quad (A.8a)$$

$$I_2 = I_2(z) = \Gamma(\frac{5}{2}) U(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}, z) . \quad (A.8b)$$

Γ bezeichnet die Gamma-Funktion. Mittels der allgemeinen Beziehung

$$\frac{d^n}{dz^n} U(a, b, z) = (-1)^n \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} U(a+n, b+n, z) \quad (n \geq 0) ,$$

Gl. (13.4.22) in [68], folgt aus (A.8), daß sich $I_1(z)$ und $I_2(z)$ als Ableitungen der Funktion $H(z) \equiv U(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$ schreiben lassen:

$$I_1(z) = -\Gamma(\frac{1}{2}) H'(z) , \quad (A.9a)$$

$$I_2(z) = \Gamma(\frac{1}{2}) H''(z) . \quad (A.9b)$$

Die z -Abhängigkeit von H läßt sich mit Gl. (13.6.39) in Ref. 68 explizit angeben:

$$H(z) = \sqrt{\pi} \exp(z) \operatorname{erfc}(z^{1/2}) . \quad (A.10)$$

Somit lassen sich mit (A.9a, b) $I_1(z)$ und $I_2(z) = \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ — und letztendlich mit (A.6) auch das ursprüngliche Integral I konkret berechnen. Das Ergebnis dieser einfachen Rechnungen ist:

$$I = (a - 1) \frac{1}{b^2} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{b} \exp\left(\frac{1}{b^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{2}b}\right) - 1 \right] + a , \quad (A.11)$$

vgl. Gl. (III.28).

Die obigen Berechnungen sind für den Polarisationszerfall bei verschwindendem äußerem Feld ω_0 durchgeführt worden. Ein entsprechendes Vorgehen für $\omega_0 \neq 0$ erwies sich demgegenüber als nicht durchführbar. Um die damit verbundenen Schwierigkeiten zu verdeutlichen, soll hier nur kurz der Fall betrachtet werden, in dem sich Spin und Störstelle zur Zeit $t = 0$ beide am Ursprung $r = 0$ befinden. Gl. (III.21) liefert mit $r_0 = 0$

$$\tilde{P}(u) = \tilde{D}_0(u) \cdot \langle \mathbf{B} \rangle_{\omega} \cdot \underline{S}_0 , \quad \mathbf{B} \equiv \frac{1}{\mathbf{E} - \mathbf{M}_{00}(u)} .$$

Im folgenden soll angenommen werden, daß das externe Feld in z -Richtung zeige, d.h. $\omega_0 = \omega_0 \underline{e}_z$. Die Elemente der Matrix $\mathbf{B}$, vgl. die Gln. (III.19,13) sowie (A.2), lassen sich mit einem gewissen Aufwand — und daher am einfachsten z.B. mit REDUCE — explizit berechnen. Allerdings ist es wenig sinnvoll, diese hier vollständig anzugeben. Wie unmittelbar festzustellen und auch von der Symmetrie her zu erwarten ist, hat $\mathbf{B}$ nach Mittelung mit einer sphärisch symmetrischen Verteilung die folgende prinzipielle Gestalt:

$$\langle \mathbf{B} \rangle_{\omega} = \begin{pmatrix} \bar{b}_{xx} & \bar{b}_{xy} & 0 \\ \bar{b}_{yx} & \bar{b}_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{b}_{zz} \end{pmatrix} ,$$

so daß im Fall der longitudinalen Geometrie ($\underline{S}_0 = \underline{e}_z \|\omega_0$) die Polarisation $\underline{P}$ vollständig durch $\bar{b}_{zz} = \langle B_{zz} \rangle_{\omega}$ bestimmt ist. [$\tilde{P}$ ist dann durch $\frac{1}{u} \bar{b}_{zz} \underline{e}_z$ gegeben.] Das zu mittelnde

Matrixelement B_{zz} sieht folgendermaßen aus:

$$B_{zz} = \frac{1 + 2\tilde{P}_{00}^s \omega_z + [(\tilde{P}_{00}^c)^2 + (\tilde{P}_{00}^s)^2] \omega_z^2}{1 + 2\tilde{P}_{00}^s \omega_z + \tilde{P}_{00}^c \tilde{P}_{00} (\omega_x^2 + \omega_y^2) + [(\tilde{P}_{00}^c)^2 + (\tilde{P}_{00}^s)^2] \omega_z^2},$$

wobei

$$\tilde{P}_{00}^s \equiv \mathcal{L}\{\cos(\omega_0 t) P_{00}(t)\},$$

$$\tilde{P}_{00}^c \equiv \mathcal{L}\{\sin(\omega_0 t) P_{00}(t)\}$$

($\mathcal{L}\{\dots\}$ = Laplace-Transformierte von $\dots$) .

Die Mittelung dieses Ausdrucks mit der dreidimensionalen Gaußverteilung (III.2), d.h. die Berechnung der entsprechenden Integrale, konnte allerdings nicht bis zu Ende ausgeführt werden. Die Schwierigkeiten hängen dabei insbesondere mit der unterschiedlichen Symmetrie von B_{zz} (nur Rotationssymmetrie bzgl. der z -Achse) und der Verteilung $g(\underline{\omega})$ (sphärische Symmetrie) zusammen.

Anhang B. Numerische Simulationen (Gittergas)

Die numerischen Simulationen, deren Ergebnisse in dieser Arbeit diskutiert werden, sind auf einem IBM 3081-Rechner der Kernforschungsanlage Jülich durchgeführt worden. Es soll in diesem Anhang nicht darum gehen, die (FORTRAN)-Programme im Detail zu erläutern, mit denen die Depolarisation P oder (in $d = 1$) die Spanverteilung W im Gittergas simuliert wurden, sondern darum, die grundsätzlichen Methoden und wesentlichen Ideen zu verdeutlichen, die diesen Programmen zugrundeliegen.

Die Simulation der Depolarisation von Spins, die unabhängig voneinander Random Walk auf einem Gitter ausführen, ist in den Grundzügen bereits an anderer Stelle erläutert worden [29, 40], vgl. auch die Anmerkungen in Kapitel II.2.3. Im Vordergrund sollen hier die spezifischen Probleme stehen, die mit den entsprechenden Simulationen im Gittergas verbunden sind. Das gesamte Problem läßt sich in zwei Teile zerlegen: Zum einen muß ein möglichst schnelles Verfahren bereitgestellt werden, mit dem sich die *Diffusion* der Teilchen im Gittergas simulieren läßt. Zum anderen treten im Zusammenhang mit der Berechnung der eigentlich interessierenden *Mittelwerte* — insbesondere bei höheren Dimensionen — erhebliche Speicherplatzprobleme auf, die im Endeffekt als der eigentlich begrenzende Faktor der Simulationen angesehen werden müssen. Hier stellt sich die Forderung nach einer Methode, die eine platzsparende Speicherorganisation bei gleichzeitig noch schneller Zugriffsmöglichkeit auf die Daten erlaubt.

Von einigen, jeweils spezifischen Modifikationen abgesehen, sind die Programme von der Struktur her für alle Dimensionen d gleich. Die Diskussion soll sich daher soweit wie möglich auf den allgemeinen Fall beliebiger Dimension beziehen.

B.1. DIFFUSION IM GITTERGAS

Die Gittergasdiffusion wird auf einem endlichen Grundgebiet G simuliert, das durch einen d -dimensionalen Würfel mit Kantenlänge L und $N = L^d$ Gitterplätzen gegeben ist. Die Gitterplätze $r \in G$,

$$r = (r_1, \dots, r_d) \quad 0 \leq r_\alpha < L \quad (\alpha = 1, \dots, d),$$

werden dabei stets durch skalare Größen

$$r \equiv \sum_{\alpha=1}^d L^{\alpha-1} r_\alpha \quad (0 \leq r < N) \quad (B.1)$$

repräsentiert. Diese Art der Darstellung hat offensichtlich zwei Vorteile: Erstens können r -abhängige Größen einfach mit r indiziert werden. Darüberhinaus lassen sich die $2d$ verschiedenen, möglichen nächste-Nachbar(nn)-Spünge der Teilchen durch einfache skalare Additionen beschreiben. Wählt man sinnvollerweise sog. "helikale" Randbedingungen, ist die Darstellung eines Sprungs in $\pm\alpha$ -Richtung von r nach r' durch

$$r \longrightarrow r' = (r \pm L^{\alpha-1}) \bmod N \quad (B.2)$$

gegeben ($\alpha = 1, \dots, d$). Die $\bmod N$ -Operation läßt sich im allgemeinen Fall durch bedarfsweise Addition oder Subtraktion von N realisieren; ist speziell $N = 2^m$, so kann diese Operation auch mit der (eingebauten) bitweisen Logischen-Und-Operation ($\wedge$) durchgeführt werden ($MASKN \equiv 2^m - 1$):

$$r' = (r \pm L^{\alpha-1}) \wedge MASKN. \quad (B.2')$$

Die eigentliche Simulation der Diffusion im Gittergas erfolgte im wesentlichen nach der sog. "Standard-Monte-Carlo(MC)"-Methode, vgl. [90], und soll nachfolgend skizziert werden:

Eine zufällige Anfangskonfiguration ($t = 0$) wird erzeugt, indem jeder Platz r des Grundgebietes G mit Wahrscheinlichkeit c mit einem Teilchen besetzt wird. Die Zahl der insgesamt erzeugten Teilchen sei n ($\langle n \rangle = cN$), die der Leerstellen sei $n_v = N - n$. Nach Mittelung über alle N_k erzeugten Konfigurationen läßt sich der Simulation eine mittlere Konzentration $\bar{c}$ zuordnen:

$$\bar{c} = \frac{1}{N_k} \sum_{k=1}^{N_k} \frac{n^{(k)}}{N}. \quad (B.3)$$

Zur Beschreibung des Algorithmus, mit dem die Diffusion der Gittergasteilchen simuliert wird, betrachten wir einen sog. elementaren MC-Schritt (eMCS). Dieser besteht darin, daß von den n (individuell markierten) Teilchen zufällig ein Teilchen i ausgewählt wird. Weiterhin wird zufällig eine der $2n$ möglichen Richtungen für einen nn-Sprung ausgewählt. Ist der entsprechende nn-Platz des Teilchens i frei, wird es auf diesen Platz gesetzt. Ist der Platz nicht frei, so bleibt das Teilchen auf dem ursprünglichen Platz, wobei jedoch die "Uhr" ebenfalls weiterläuft. Ein Zyklus von n elementaren Monte-Carlo-Schritten, bei dem im Mittel jedes Teilchen einmal die Chance zu springen hat, entspricht im realen System der Zeitspanne $\tau = \gamma^{-1} \equiv 1$. Mit dieser Methode wird die

exponentielle Wartezeitverteilung für versuchte Sprünge simuliert; die Teilchenzahl n sollte möglichst groß sein.

Da bei dem oben beschriebenen eMCS im Mittel nur mit Wahrscheinlichkeit $(1 - c)$ ein Sprung erfolgreich ausgeführt wird, wird dieser Algorithmus mit zunehmendem c immer weniger effektiv. Für Konzentrationen $c > 0,5$ wurde daher der analoge Algorithmus gewählt, bei dem in einem eMCS jeweils eine zufällig gewählte Leerstelle einen potentiellen Sprung ausführt (— der Austausch zweier benachbarter Leerstellen ist hierbei nicht erlaubt). Die Zeitspanne τ entspricht in diesem Fall einem Zyklus von n_v elementaren MC-Schritten.

Zu speichern sind die aktuellen Positionen r der Teilchen sowie für jeden Gitterplatz r eine (logische) Variable, die angibt, ob r gerade besetzt ist oder nicht. Im Fall $c > 0,5$ sind zusätzlich die aktuellen Positionen der (markierten) Leerstellen zu speichern.

B.2. SIMULATION DER SPANVERTEILUNG ($d=1$)

In einer Dimension ist die Berechnung der Zahl s der verschiedenen besuchten Plätze der einzelnen Gittergasteilchen, die alle zur Mittelung beitragen sollen, ohne großen zusätzlichen Aufwand durchführbar. Speicherplatz ist nur für die aktuelle *Auslenkung* Δr_i jedes Teilchens ($1 \leq i \leq n$) sowie deren Minimal- und Maximalwert bereitzustellen. Der Span $s_i(t)$ selbst wird nur zu den Zeiten t berechnet, zu denen die Verteilung $W(s, t)$ oder Mittelwerte $\langle s^k(t) \rangle$, $k = 1, 2, \dots$, bestimmt werden sollen:

$$s_i(t) = \max_{t' \leq t} \{ \Delta r_i(t') \} - \min_{t' \leq t} \{ \Delta r_i(t') \} + 1. \quad (B.4)$$

Unter $\Delta r_i(t)$ ist hier die uneingeschränkte Auslenkung der Teilchen auf der unendlichen linearen Kette zu verstehen, die durch periodische Aneinanderreihung des Grundgebiets der Länge N entsteht. Δr_i wird ebenso wie das Minimum und das Maximum bei jedem erfolgreichen Sprung des Teilchens aktualisiert.

Die Spanverteilung wurde auf diese Weise für verschiedene Konzentrationen c ($c = 0,1, 0,5$ und $0,9$) bei jeweils fünf verschiedenen Zeiten $t_1 < \dots < t_5 = t_{max}$ simuliert. Gleichzeitig wurden für eine größere Anzahl von Zeitpunkten $t \leq t_{max}$ die ersten Momente $\langle s^k(t) \rangle$ der Verteilung ($k = 1, 2, 3$) sowie zu Vergleichszwecken die mittlere quadratische Auslenkung $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ bestimmt. Simuliert wurde bis zu $t_{max} = 10^4$ bei $c = 0,1$ und $0,5$ und bis zu $t_{max} = 10^5$ bei $c = 0,9$. Um einen ungefähren Eindruck von diesen Simulationen zu geben, seien als Beispiel die wichtigsten Parameter der

Simulation für $c = 0,5$ aufgeführt: Simuliert wurden $N_k = 10$ verschiedene Anfangskonfigurationen auf einem Grundgebiet mit jeweils $N = 50000$ Gitterplätzen, so daß insgesamt ≈ 250000 Teilchen zur Mittelung beitrugen ($\bar{c} \simeq 0,4997$). Da $t_{max} = 10^4$, wurden somit insgesamt $\approx 2,5 \cdot 10^9$ elementare MC-Schritte ausgeführt; bei einer totalen CPU-Zeit (inklusive Aufbereitung und Ausgabe aller Resultate) von ≈ 390 Minuten läßt sich die mittlere CPU-Zeit für einen eMCS zu $\lesssim 10 \mu\text{sec}$ abschätzen.

B.3. SIMULATION DER DEPOLARISATION

Simuliert wurde, vgl. die Anmerkungen in Abschnitt II.2.3, der Ausdruck (II.7),

$$P(t) = \left\langle \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2} \sum_r t_r^2(t)\right] \right\rangle,$$

bei dem die Mittelung über die zufälligen Frequenzkonfigurationen $\{\omega_r\}$ bereits exakt ausgeführt ist. Die Berechnung von P erfolgt prinzipiell in der folgenden Weise: Bei jedem erfolgreichen Sprung $r \rightarrow r'$ des i -ten Teilchens wird die Zeit $t_{r,i}$, die das Teilchen insgesamt auf dem gerade verlassenen Platz r zugebracht hat (und die sinnvollerweise in *ganzzahligen* Vielfachen der elementaren Zeiteinheit τ/n gemessen wird), aktualisiert; als dazu notwendige Information muß gespeichert sein, wann — d.h. bei welchem eMCS — das Teilchen den letzten Sprung ausgeführt hat. Gleichzeitig wird die Summe $\sum_r t_{r,i}^2$, die ebenfalls für jedes Teilchen gespeichert wird, auf den aktuellen Stand gebracht. Soll zu einer bestimmten Zeit t die Depolarisation für einen oder mehrere Werte von σ berechnet werden, muß dieser sonst nur bei erfolgreichen Sprüngen notwendige Aktualisierungsprozeß einmal komplett für alle Teilchen durchgeführt werden, damit die bei t noch andauernden Besuche richtig erfaßt werden.

Die eingangs bereits angedeuteten Speicherplatzprobleme hängen offensichtlich damit zusammen, daß für jedes Teilchen i ($i = 1, \dots, n$) und jeden der N Gitterplätze r , die das Teilchen im Prinzip alle besuchen *kann*, stets der aktuelle Wert von $t_{r,i}$ abrufbar sein muß. Das entsprechende Problem stellt sich, wenn man in höheren Dimensionen z.B. die Verteilung der Zahl der verschiedenen besuchten Plätze oder auch nur deren Mittelwert simulieren will; die $t_{r,i}$ entsprechende Information ist in diesem Fall die, ob das Teilchen i den Platz r bereits besucht hat oder nicht.

Im Hinblick auf die weitere Diskussion soll dieses grundsätzliche Problem etwas allgemeiner formuliert werden: Zu jedem Teilchen i und jedem Platz r , d.h. zu jedem

Paar

$$(i, r) \quad \text{mit} \quad i \in \{1, \dots, n\}, r \in \{1, \dots, N\}, \quad (B.5)$$

muß jederzeit eine aktuelle Besetzungsvariable $A(i, r)$ abrufbar sein, die sich folgendermaßen charakterisieren läßt:

$$A(i, r) \begin{cases} \neq 0, & \text{wenn Teilchen } i \text{ Platz } r \text{ besucht hat,} \\ = 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (B.6)$$

Es ist bequemer und auch für praktische Zwecke sinnvoll, jedem Paar (i, r) umkehrbar eindeutig einen (leicht berechenbaren, ganzzahligen) Schlüssel $K(i, r)$ zuzuordnen. Als naheliegende Wahl bieten sich an

$$K(i, r) = i + r n \quad (B.7a)$$

oder

$$K(i, r) = r + i N. \quad (B.7b)$$

Statt von $A(i, r)$ werden wir dementsprechend meist von $A(K)$ — der mit dem Schlüssel K assoziierten Information — sprechen.

Die einfachste Speicherorganisation wäre natürlich, die Informationen A in einer Tabelle (einem Vektor) der Länge $M \equiv n N$ abzulegen, wobei die mit K assoziierte Information gerade unter der (Relativ-)Adresse K zu finden ist. Ein einfaches Beispiel macht die Grenzen dieser Methode (und damit die oben genannten Speicherplatzprobleme) deutlich: Nehmen wir an, A werde typischerweise mit 4 Bytes dargestellt; man benötigt dann bei einer Simulation für $c = 0,5$ bereits bei $N = 2000$ Gitterplätzen 8 MBytes Arbeitsspeicher allein zur Speicherung der Daten A .

Der offensichtliche Nachteil dieser Methode ist, daß die Tabelle nur sehr dünn besetzt ist. Aus (B.6) geht hervor, daß in Abhängigkeit von t nur

$$M^*(t) = \sum_{i=1}^n s_i(t) \approx n \cdot \langle s(t) \rangle \quad (B.8)$$

verschiedene Einträge A von null verschieden sind, die Tabelle also nur einen i.a. sehr kleinen Bruchteil

$$\frac{M^*(t)}{M} \approx \frac{\langle s(t) \rangle}{N} \leq \frac{\langle s(t_{max}) \rangle}{N} \ll 1 \quad (B.9)$$

an relevanter Information enthält. Die Bedingung, daß der Quotient $\langle s \rangle / N$ auch bei der größten simulierten Zeit t_{max} immer noch klein gegen eins ist, wird offensichtlich bei

jeder "vernünftigen" Simulation erfüllt sein, da andernfalls die Resultate durch Finite-Size-Effekte mit Sicherheit stark verfälscht würden. Bei Simulationen, die nur bis zu relativ kurzen Zeiten t_{max} durchgeführt werden, d.h. bei denen die mittlere Zahl der besuchten Plätze relativ klein ist, ließe sich natürlich die Gittergröße entsprechend verkleinern, um die Effektivität der Speicherausnutzung, also M^*/M , auf dem größtmöglichen Wert zu halten, der im Rahmen der obigen Bedingung möglich ist. Dem steht aber die grundsätzliche Forderung entgegen, daß N immer so groß wie möglich sein sollte, damit eine möglichst gute Simulation des Gittergases erreicht wird.

Die gerade diskutierte Methode stellt einen Extremfall in dem Sinne dar, daß sie einerseits den einfachsten und damit schnellsten Zugriff auf die Daten A erlaubt, andererseits aber die schlechteste Speicherausnutzung bietet. Der umgekehrte Extremfall entspräche einer Methode, bei der die Minimierung des Speicherplatzes absolute Priorität besitzt. Das könnte im Prinzip so aussehen, daß man bei jedem neuen Besuch eines Teilchens auf einem neuen Platz, also bei jedem neuen Schlüssel K mit $A(K) \neq 0$, die Daten als Paar $[K, A(K)]$ — im einfachsten Fall in der Reihenfolge ihres Auftretens — sequentiell auf einer Liste ablegt, deren gesamte Länge dann kaum größer als $M^*(t_{max})$ zu sein bräuchte. Um den Zugriff auf die Daten zu erleichtern, könnte man die Daten auch sequentiell nach K geordnet speichern (sequentielle geordnete Liste). Einen ersten Schritt von diesem Extremfall weg stellt bereits eine verbundene, (nach K) geordnete Liste dar, bei der das Einfügen neuer Daten $[K, A(K)]$ wesentlich einfacher wäre; in diesem Fall muß zusätzlicher Speicherplatz für die "Zeiger" bereitgestellt werden, die die Adresse des Eintrags mit nächstgrößerem (oder -kleinerem) K angeben. Um die Suche nach vorhandenen Einträgen abzukürzen, könnte man den Speicher auch so organisieren, daß für jedes Teilchen i eine verbundene, nach r geordnete Liste angelegt wird.

Die Effektivität dieser und ähnlicher Methoden soll hier nicht im Detail diskutiert werden (— vgl. dazu z.B. [121]). Ein offensichtlicher Nachteil all dieser Methoden ist, daß insbesondere bei langen (Teil-)Listen die Suche nach Einträgen mit einem erheblichen Zeitaufwand verbunden sein kann. Da bei jedem elementaren MC-Schritt, der zu einem erfolgreichen Sprung eines Teilchens führt, eine solche Suche durchgeführt werden muß, dürften diese Methoden — zumindest in aller Regel — für die Simulationen allein aus Rechenzeitgründen kaum in Frage kommen.

Benötigt wird also ein Verfahren, das — im Sinne eines geeigneten Kompromisses zwischen den beiden diskutierten Extremen — eine der Simulation flexibel anpaßbare, möglichst effektive Auslastung des zur Verfügung stehenden Arbeitsspeichers gewährleistet und dabei gleichzeitig einen immer noch schnellen Zugriff auf die Daten ermöglicht.

B.3.1. STREUSPEICHERVERFAHREN (HASH CODING)

Das sog. Streuspeicherverfahren (engl. Bez.: storage scattering, hash coding) ist in der Informationsverarbeitung seit langem als eine Methode bekannt, mit der sich die Zeit, die ein Programm mit dem Durchsuchen von Tabellen beschäftigt ist, u.U. drastisch reduzieren läßt, ohne daß allzu große Kompromisse hinsichtlich der Speicherauslastung gemacht werden müßten, vgl. [121, 122]. Das Prinzip dieses Verfahrens läßt sich vereinfacht so beschreiben, daß die Adresse eines Eintrags direkt aus dem zugehörigen Schlüssel *berechnet* wird ("content-addressable memory"). Hierdurch entfällt — sofern dies eindeutig möglich ist — die ansonsten oftmals langwierige Suche nach dem Eintrag. Es soll an dieser Stelle nicht der Versuch gemacht werden, einen Überblick über die verschiedenen Klassen von Verfahren zu geben, die nach diesem Prinzip arbeiten. Zu empfehlen ist diesbezüglich die einführende Literatur, s. z.B. [121, 122], in der Vor- wie auch Nachteile der wichtigsten Verfahren diskutiert werden. Das Streuspeicherverfahren soll hier nur insoweit diskutiert werden, wie es für die konkrete Anwendung in den Simulationen von Bedeutung ist [123].

Die grundsätzlichen Bestandteile des Streuspeicher-Verfahrens sind (vgl. auch Bild B.1):

- die sog. *Streu-* oder *Hashtabelle*, in der die Daten in der Form $[K, A(K)]$ gespeichert werden. Ihre Länge sei H .
- die *Streu-* oder *Hashfunktion*

$$h : \{K\} \longrightarrow \{0, \dots, H-1\}, \quad (B.10)$$

mit der aus einem Schlüssel K eine Adresse $h(K)$ ausgerechnet wird, unter der die Daten $[K, A(K)]$ in der Hash-Tabelle abgelegt werden sollen.

- ein Verfahren zur *Kollisionsauflösung*. Als sog. Primärkollision bezeichnet man den Fall

$$h(K) = h(K') \quad \text{mit } K \neq K', \quad (B.11)$$

dessen Auftreten im allgemeinen Fall, d.h. wenn keine detaillierte Kenntnis über die relevanten Schlüssel K mit $A(K) \neq 0$, s. (B.6), vorliegt, kaum vermieden werden kann. Da offensichtlich nicht mehrere Daten unter der gleichen Adresse abgelegt werden können, muß eine effiziente Methode gefunden werden, solche Kollisionen "aufzulösen".

Nehmen wir an, K sei ein Schlüssel, dessen assoziierte Information $A(K)$ zu aktualisieren oder erstmals einzutragen sei, und der K über h zugeordnete Platz sei bereits besetzt. Das allgemeine Verfahren funktioniert nun so, daß eine Sequenz von Adressen $h_1(K), h_2(K), \dots$ so lange durchlaufen wird, bis (a) entweder ein freier Platz (" $K = 0$ ") gefunden wird ($\rightarrow$ Neueintrag, vgl. Bild B.1), oder (b) ein Eintrag mit gleichem Schlüssel K ($\rightarrow$ Aktualisierung). Bei erneuter Suche nach K wird dieselbe Sequenz durchlaufen.

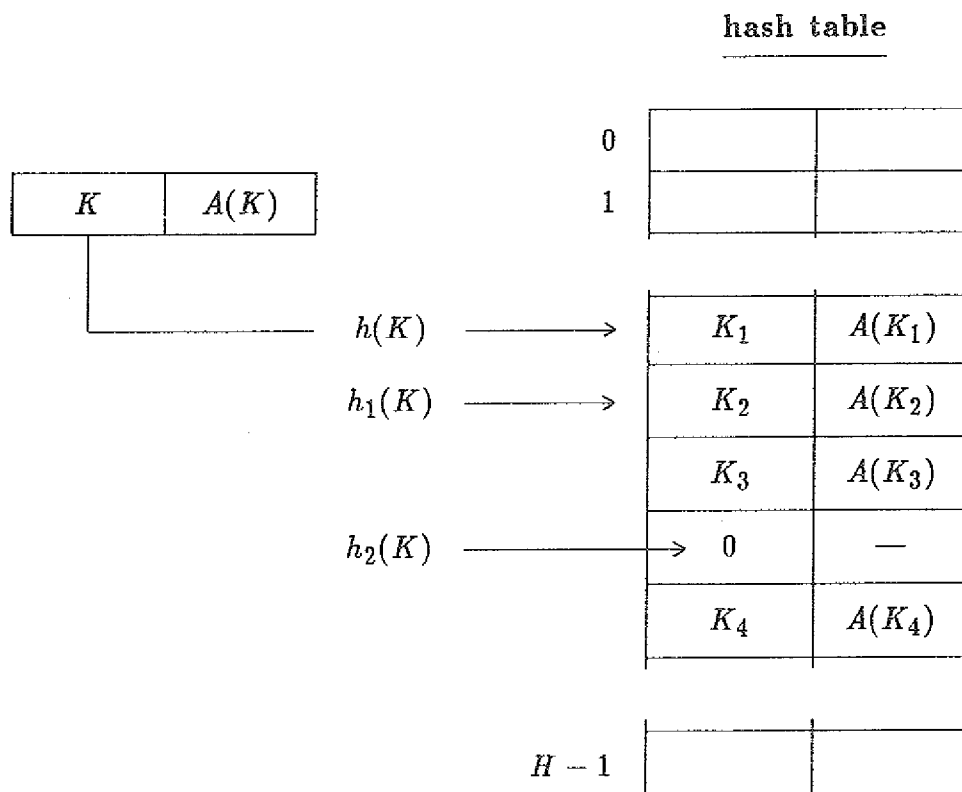


Bild B.1 : Streuspeicherverfahren: Suchen eines freien Platzes in der Hash-Tabelle für einen neuen Eintrag $[K, A(K)]$ ($K \neq K_j, j = 1, 2, \dots$).

Die Hash-Funktion sollte so gewählt werden, daß Primärkollisionen möglichst vermieden

werden, d.h., daß die Schlüssel K möglichst gleichmäßig über die Hash-Tabelle verteilt ("gestreut") werden. Dieser Anforderung kann man umso besser gerecht werden, je mehr man über die Verteilung der relevanten Schlüssel weiß. Andererseits sollte h natürlich schnell und einfach zu berechnen sein. Gerade unter diesem Gesichtspunkt bietet sich die sog. "Quotientenmethode" an:

$$\begin{aligned} h(K) &= K \bmod H \\ &= K \wedge MASKH, \quad \text{falls } H = 2^q \quad (MASKH = 2^q - 1). \end{aligned} \quad (B.12)$$

Diese Hash-Funktion wurde auch bei den Simulationen verwendet.

Bevor auf die konkrete Wahl des Verfahrens zur Kollisionsauflösung eingegangen wird, sollen drei weitere Definitionen gegeben werden, die in diesem Zusammenhang von Bedeutung sind: Man spricht von einer *Häufung von Primärkollisionen*, wenn das Auflösungsverfahren die Eigenschaft hat, das aus einer Primärkollision (B.11) auch $h_i(K) = h_i(K')$ für alle $i \geq 1$ folgt. Als *Sekundärkollision* bezeichnet man eine Kollision, die bei verschiedenen Suchschritten auftritt (es sei $h_0 \equiv h$):

$$h_i(K) = h_j(K') \quad (i, j \geq 0 \text{ mit } i \neq j, K \neq K'). \quad (B.13)$$

Eine *Häufung von Sekundärkollisionen* ist dementsprechend so definiert:

$$h_i(K) = h_j(K') \longrightarrow h_{i+l}(K) = h_{j+l}(K') \quad \text{für alle } l \geq 1 \quad (i \neq j, K \neq K'). \quad (B.14)$$

Alle diese Effekte können die Effizienz des Streuspeicherverfahrens unter Umständen deutlich verschlechtern.

Die allgemeinen Anforderungen an eine Methode zur Kollisionsauflösung sind:

1. Die Suchsequenz soll nach Möglichkeit erschöpfend sein, d.h. nach H Schritten $h_0(K), \dots, h_{H-1}(K)$ sollte jeder Platz der Hash-Tabelle einmal aufgesucht worden sein.
2. Die mittlere Zahl der erforderlichen Suchschritte soll so klein wie möglich sein (s.o.).
3. Die Funktionen h_i sollen leicht zu berechnen sein.

Anzumerken ist, daß die beiden letztgenannten Anforderungen nicht unbedingt immer miteinander zu vereinbaren sind.

Im Hinblick auf die Anwendung bei den Simulationen sollen nachfolgend zwei Methoden zur Kollisionsauflösung diskutiert werden, die beide dadurch gekennzeichnet sind, daß die Suchsequenz in sehr einfacher Weise berechnet werden kann.

(a) Die einfachste Methode ist die sog. *lineare Suche*,

$$h_i(K) = [h_{i-1}(K) + 1] \bmod H, \quad (B.15)$$

bei der die Hash-Tabelle ausgehend von $h_0(K) = h(K)$ sequentiell durchsucht wird, bis entweder der Schlüssel K oder aber ein freier Platz gefunden wird. Kriterium 1 (s.o.) ist dabei trivialerweise erfüllt. Die Effizienz dieses Verfahrens im Sinne des Kriteriums 2 — d.h. die mittlere Zahl der Suchschritte in Abhängigkeit vom Besetzungsgrad b der Hash-Tabelle — läßt sich unter der vereinfachenden Annahme, daß die M Schlüssel K durch h vollkommen zufällig über die Hash-Tabelle verteilt werden, auch analytisch analysieren (vgl. [121]); hier soll jedoch eine qualitative Diskussion ausreichen. Es ist unmittelbar klar, daß bei der linearen Suche sowohl Häufungen von Primär- wie auch Häufungen von Sekundärkollisionen auftreten. Dies hat zur Folge, daß dieses Verfahren, das bei kleinem Besetzungsgrad b noch relativ gut funktioniert (vgl. auch Bild B.2), bei größerem b sehr ineffizient wird. Typisch für die lineare Suche ist das Auftreten von langen, zusammenhängenden Sequenzen von Einträgen mit starker Wachstumstendenz ("pile-up"-Phänomen).

Anzumerken ist, daß die lineare Suche in Kombination mit der Quotientenmethode (B.12) besonders problematisch ist, wenn bei den tatsächlichen Daten Cluster aufeinanderfolgender Schlüssel $K, K+1, K+2, \dots$, die dann mit (B.12) zu Clustern $h(K), h(K+1), h(K+2), \dots$ in der Hash-Tabelle führen, relativ wahrscheinlich sind. Solche Cluster sind zu erwarten, wenn beim Gittergas die Schlüssel K mit (B.7b) berechnet werden [$r \rightarrow r \pm 1$ und damit $K \rightarrow K \pm 1$ bei Sprüngen eines Teilchens in $\pm x(\alpha=1)$ -Richtung, Gl. (B.2)].

(b) Eine deutliche Verbesserung der Effizienz läßt sich von der folgenden, immer noch sehr einfachen Methode erwarten, deren Suchsequenz durch

$$h_i(K) = [h_{i-1}(K) + i] \bmod H \quad (B.16)$$

gegeben ist. Diese Sequenz gehört zur Klasse der Kollisionsauflösungen mittels sog. *quadratischer Suche* [124] — der "Abstand" $h_i(K) - h_0(K)$ wächst nicht wie bei (B.15)

linear, sondern quadratisch mit i]. Der Vorteil dieser Methode ist, daß dadurch, daß die Schrittweite von der Anzahl der bereits erfolgten Suchschritte abhängt, Häufungen von Sekundärkollisionen, vgl. (B.14), vermieden werden. Häufungen von Primärkollisionen treten allerdings immer noch auf. Im allgemeinen hat die quadratische Suche den Nachteil, daß das Kriterium 1 (erschöpfende Suche) nur unter gewissen Einschränkungen erfüllt werden kann [125]. Die spezielle quadratische Sequenz (B.16) ist auch deshalb für die Simulationen gewählt worden, weil bei ihr — wie man sich leicht überzeugen kann — das Kriterium 1 zwar auch nicht für beliebige H , aber dafür für jedes $H = 2^q$ mit ganzzahligem $q \geq 1$ erfüllt ist; der Vorteil der einfachen mod H -Berechnung, vgl. (B.12), bleibt also erhalten.

Anzumerken ist, daß in der Literatur darüberhinaus eine Vielzahl von Verfahren diskutiert worden ist, bei denen dadurch, daß die Schrittweite selbst K -abhängig gemacht wird, *beide* Typen von Kollisionshäufungen vermieden werden können, vgl. [121]. Wie sich z.B. die oben diskutierten Methoden (die quadratische bzw. lineare Suche) in diesem Sinne modifizieren lassen, ist von Bell [126] bzw. Bell und Kaman [127] diskutiert worden. Abgesehen davon, daß nun die Berechnung der Suchsequenzen aufwendiger wird†, sind bei diesen Verfahren bestimmte Einschränkungen, z.B. bezüglich der erlaubten Werte für H , zu beachten. Insgesamt erschien es daher im Fall der Simulationen sinnvoller zu sein, bei der einfachen Methode (B.16) zu bleiben, die — vgl. unten — recht gute Ergebnisse liefert.

In der vorangegangenen Diskussion ist bereits ansatzweise deutlich geworden, daß die Effizienz eines bestimmten Streuspeicherverfahrens auch sehr von der konkret vorliegenden Situation abhängt, d.h. davon, für welche Schlüssel wann und wie oft Zugriffe auf die Hash-Tabelle notwendig sind. Vor den Simulationen der Depolarisation sind daher verschiedene Testläufe für das Gittergas durchgeführt worden, bei denen die Statistik der Suchschritte in der Hash-Tabelle mitverfolgt wurde. Abgesehen davon, daß auf diese Weise verschiedene Realisierungen des Verfahrens miteinander verglichen werden können, bieten diese Testläufe auch die Möglichkeit abzuschätzen, bis zu welchem Besetzungsgrad b_{max} ein bestimmtes Verfahren noch sinnvoll angewandt werden kann.

†Hier muß allerdings nochmals explizit betont werden, daß natürlich weder Kriterium 3 noch Kriterium 2 *allein* ausschlaggebend für das letztendlich entscheidende Qualitätsmerkmal — die mittlere Zugriffszeit — des Verfahrens sind.

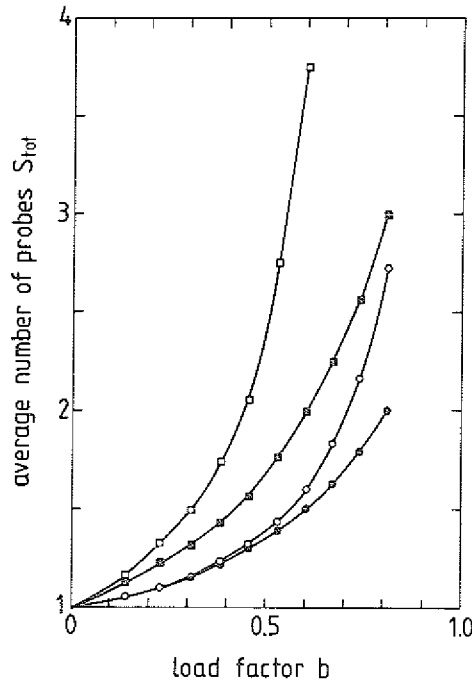


Bild B.2: Mittlere Anzahl der Suchschritte ("Effektivität") S_{tot} als Funktion des Besetzungsgrades b der Hash-Tabelle (vgl. Text) für verschiedene Suchalgorithmen und Schlüsselberechnungen.

- : lin. Suche mit Schlüssel (B.7b)
- : quadr. Suche mit Schlüssel (B.7b)
- : lin. Suche mit Schlüssel (B.7a)
- : quadr. Suche mit Schlüssel (B.7a)

Simulation für $d = 2$, $N = 400$, $n = 200$, $H = 8192$ und $t_{max} = 150$ ($N_k = 5$).

Bild B.2 zeigt ein Resultat eines solchen einfachen Testlaufs und kann — in gewissen Grenzen — als typisch angesehen werden. Aufgetragen ist in Abhängigkeit vom Besetzungsgrad b die sog. totale Effektivität S_{tot} verschiedener Verfahren. Diese Größen wurden folgendermaßen ermittelt: Zu einer bestimmten Zeit $t_i \leq t_{max}$ ($i = 1, 2, \dots$) wird zum einen die Anzahl aller Einträge in die Hash-Tabelle — also $M^*(t_i)$, vgl. (B.8) — und damit $b(t_i) = M^*(t_i)/H$ bestimmt. Zum anderen wird die Zahl aller bis t_i erfolgten Zugriffe auf die Hash-Tabelle, d.h. im wesentlichen die Zahl aller bis t_i erfolgten erfolgreichen elementaren MC-Schritte, sowie die Zahl aller dabei notwendigen Suchschritte $h_0, h_1, \dots$ bestimmt; das Verhältnis von beiden liefert $S_{tot}(t_i)$ als die mittlere Anzahl von Suchschritten pro Zugriff, bezogen aber auf *alle* bis t_i erfolgten Zugriffe. Die Datenpunkte in Bild B.2 entsprechen der Auftragung von $S_{tot}(t_i)$ versus $b(t_i)$, wobei diese Größen selbst jeweils Mittelwerte über N_k verschiedene Anfangskonfigurationen

darstellen.

Bild B.2 zeigt erwartungsgemäß, daß die quadratische Suche (B.16) mit zunehmendem b wesentlich effektiver als die lineare Suche (B.15) wird. Darüberhinaus wird die Abhängigkeit von der Wahl der Schlüsselberechnung (B.7) deutlich: Die Berechnung nach (B.7b), bei der benachbarte Schlüssel infolge von $\pm x$ -Sprüngen einzelner Teilchen relativ wahrscheinlich sind, liefert sowohl bei der linearen wie auch bei der quadratischen Suche eine geringere Effektivität als die Berechnung nach (B.7a), bei der die Schlüssel nicht in dieser Weise clustern. In aller Regel ist dieser Unterschied — mehr oder weniger stark ausgeprägt — auch bei Simulationen mit anderen Parametern (d, c, N, H, t_{max}) zu beobachten und insofern typisch. Anzumerken ist allerdings, daß in gewissen "pathologischen Fällen", d.h. bei bestimmten Konstellationen von H und N bzw. n auch einmal der umgekehrte Fall eintreten kann, bei dem die Schlüsselberechnung nach (B.7b) bessere Resultate als die nach (B.7a) liefert. Sieht man von solchen Ausnahmen ab, so kann zusammenfassend gesagt werden, daß das Streuspeicherverfahren mit der Hash-Funktion (B.12) bei Schlüsselberechnung (B.7a) und quadratischer Suche (B.16) unter den hier diskutierten Alternativen die beste Effizienz garantiert.

Wie Bild B.2 beispielhaft zeigt, ist bei einer Gittergas-Simulation, bei der die Hash-Tabelle am Ende — d.h. bei der maximalen Zeit t_{max} , bis zu der simuliert wird — zu $\approx 80\%$ besetzt ist ($b_{max} \approx 0,8$), davon auszugehen, daß im Mittel etwa zwei Suchschritte pro Zugriff erfolgen. (Diese Zahl, die von Fall zu Fall natürlich etwas schwanken kann, kann zumindest als ungefährender Richtwert angesehen werden.) Sie erscheint im Hinblick auf die Simulationen durchaus akzeptabel; zu berücksichtigen ist schließlich auch, daß bei jedem (erfolgreichen) eMCS neben dem Zugriff auf die Hash-Tabelle noch etliche andere Berechnungen ausgeführt werden müssen. Eine größere Wahl von b_{max} bringt nicht mehr viel ein, da man dann für den — relativ unbedeutenden — Speicherplatzgewinn in Kauf nehmen muß, daß sich das Streuspeicherverfahren unter Umständen drastisch verlangsamt.

Welchen Einschränkungen unterliegen nun die Simulationen infolge des beschränkt zur Verfügung stehenden Speicherplatzes, der eine obere Grenze für die Größe H der Hash-Tabelle setzt? Die wesentlichen Parameter einer Simulation sind die Dimension d , die Konzentration c , die Maximalzeit t_{max} sowie die Gittergröße N . Die Frage ist, wie groß N gewählt werden kann, ohne daß der Besetzungsgrad der Hash-Tabelle den

vorgegebenen Wert b_{max} überschreitet; mit $M^*(t_{max}) \simeq b_{max} \cdot H$, vgl. (B.8), und $n \approx c \cdot N$ ergibt sich

$$N \leq N_{max} \simeq \frac{b_{max} \cdot H}{c \cdot \langle s(t_{max}) \rangle} . \quad (B.17)$$

Im Hinblick auf Finite-Size-Effekte ist darüberhinaus natürlich wieder zu fordern:

$$N \gg \langle s(t_{max}) \rangle , \quad (B.18)$$

vgl. (B.9). Die Dimension d geht hier nur indirekt über die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze ein. Das Verhalten von $\langle s(t) \rangle$ sollte vor der konkreten Planung einer Simulation — z.B. durch einfache Testläufe — im wesentlichen bekannt sein.

Um konkrete Beispiele für die nach (B.17) erlaubten Gittergrößen geben zu können, nehmen wir an, daß für die Hash-Tabelle 4 MBytes Arbeitsspeicher zur Verfügung stehen und die Schlüssel K ebenso wie die assoziierten Informationen A (— im Fall der Depolarisation die Aufenthaltszeiten $t_{r,i}$ —) jeweils INTEGER-Größen mit 4 Bytes sind. Die (maximale) Größe der Hash-Tabelle ist dann durch $H = 2^{19} = 524288$ gegeben. Dieses Beispiel entspricht im wesentlichen der Situation bei den Simulationen der Depolarisation im Gittergas. Jeweils für $d = 1 - 3$ und drei verschiedene Konzentrationen c zeigt Tab. B.1 — beispielhaft für $t_{max} = 1000$ — die mittlere Zahl der verschiedenen besuchten Plätze $\langle s(t_{max}) \rangle$ und den sich dann unter der obigen Annahme mit $b_{max} = 0.8$ aus (B.17) ergebenden Wert von N_{max} . Es wird deutlich, daß bei diesem t_{max} (das im Hinblick auf die Simulationen einen realistischen Wert darstellt) das Verfahren in $d = 3$ bereits insofern schon an seine Grenzen stößt, als daß das Verhältnis von N_{max} zu $\langle s(t_{max}) \rangle$, vgl. (B.18), bereits relativ ungünstig ist; bei $c = 0,5$ wird ungefähr jeder neunte Platz des Grundgebietes mindestens einmal besucht. Als Ausweg wurden daher in den Simulationen für $d = 3$ nicht alle Teilchen, sondern nur jedes zweite oder dritte zur Mittelung herangezogen, womit das Gitter um einen entsprechenden Faktor größer gemacht werden konnte.

Die Simulationen der Depolarisation, die für $d = 1 - 3$ und verschiedene Konzentrationen c durchgeführt wurden, sollen hier nicht im Detail diskutiert werden. Allgemein ist noch folgendes anzumerken: Wie deutlich geworden ist, sind allein schon aus Speicherplatzgründen den Zeiten t_{max} obere Grenzen gesetzt, die mit zunehmender Dimension d deutlich kleiner werden. Berücksichtigt man weiterhin, daß $P(t)$ mit zunehmender

	$d = 1$		$d = 2$		$d = 3$	
c	$\langle s(t_{max}) \rangle$	N_{max}	$\langle s(t_{max}) \rangle$	N_{max}	$\langle s(t_{max}) \rangle$	N_{max}
0,1	31,0	135000	319	13100	593	7070
0,5	12,9	65000	160	5240	306	2740
0,9	4,33	108000	33,2	14000	58,2	8000

Tab. B.1: Mittlere Zahl $\langle s(t_{max}) \rangle$ der verschiedenen besuchten Plätze (Simulation) und maximal erlaubte Gittergröße N_{max} , vgl. (B.17), für $t_{max} = 1000$, $H = 524288$ und $b_{max} = 0.8$ (jeweils auf 3 Stellen genau).

Dimension immer langsamer zerfällt, so wird ersichtlich, daß in $d = 2$ und $d = 3$ der Polarisationszerfall nur für einen relativ eingeschränkten Bereich an σ -Werten simuliert werden kann. [Beispiel Simulationen für $c = 0,5$: $t_{max} = 10000$, $\sigma \gtrsim 0,001$ in $d = 1$; $t_{max} = 2000$, $\sigma \gtrsim 0,02$ bzw. $\sigma \gtrsim 0,03$ in $d = 2$ bzw. $d = 3$.]

Die Simulationen wurden so durchgeführt, daß in einem bestimmten Lauf (bestimmtes d , c) die Depolarisation P gleichzeitig für alle betrachteten Werte von σ bestimmt wurde. Zu allen Zeiten, zu denen P für einen oder mehrere Werte von σ ermittelt wurde, wurden ferner der Mittelwert $\langle \sum_r t_r^2(t) \rangle$ sowie die — quasi von selbst anfallende — mittlere Zahl $\langle s(t) \rangle$ der verschiedenen besuchten Plätze bestimmt. Die sich bei einer Simulation ergebende mittlere CPU-Zeit pro eMCS hängt natürlich in diesem Fall, bei dem bei einem erfolgreichen eMCS vergleichsweise aufwendige Berechnungen durchzuführen sind, mehr noch als im Fall der Spanverteilung in $d = 1$ von der Wahrscheinlichkeit ab, mit der überhaupt ein erfolgreicher eMCS ausgeführt wird. Nur zu Vergleichszwecken soll hier wiederum die Größenordnung der Werte angegeben werden, die sich aus den Simulationen abschätzen ließen: In $d = 1$ lag die CPU-Zeit pro eMCS zwischen 15 und 25 μsec , in $d = 2$ zwischen 20 und 35 μsec und in $d = 3$ zwischen 13 und 20 μsec , wobei hier allerdings zu berücksichtigen ist, daß nur die Hälfte bzw. ein Drittel aller Teilchen zur Mittelung beitrugen.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] E. Zavoisky, J. Phys. USSR **9**, 211, 245, 447 (1945)
- [2] E. M. Purcell, H. C. Torrey und R. V. Pound, Phys. Rev. **69**, 37 (1946)
- [3] F. Bloch, W. W. Hansen und M. Packard, Phys. Rev. **69**, 127 (1946)
- [4] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, 4. Auflage (Oldenbourg, München, 1976)
- [5] A. Abragam, *Principles of Nuclear Magnetism*, 1st ed. (Oxford University Press, London, 1961)
- [6] C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1978)
- [7] R. L. Garwin, L. M. Ledermann und M. Weinreich, Phys. Rev. **105**, 1415 (1957)
- [8] A. Schenck, *On the Application of Polarized Positive Muons in Solid State Physics*, in *Nuclear and Particle Physics at Intermediate Energies*, p. 159, ed. by J. B. Warren (Plenum, New York, 1976)
- [9] A. Schenck, *Muon Spin Rotation Spectroscopy. Principles and Applications in Solid State Physics* (Hilger, Bristol, 1985)
- [10] S. F. J. Cox, J. Phys. C, 3187 (1987)
- [11] E. Hahn, Phys. Rev. **80**, 580 (1950)
- [12] H. Y. Carr und E. M. Purcell, Phys. Rev. **94**, 630 (1954)
- [13] *Hydrogen in Metals I*, ed. by G. Alefeld und J. Vökl, Topics in Applied Physics, Vol. 28 (Springer, Berlin, 1978)
- [14] N. Bloembergen, E. M. Purcell und R. V. Pound, Phys. Rev. **73**, 679 (1948)
- [15] J. H. van Vleck, Phys. Rev. **74**, 1168 (1948)
- [16] G. J. Gorter und J. H. van Vleck, Phys. Rev. **72**, 1128 (1947)

- [17] P. W. Anderson und P. R. Weiss, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 269 (1954)
- [18] P. W. Anderson, *J. Phys. Soc. Jpn.* **9**, 316 (1954)
- [19] R. Kubo und K. Tomita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **9**, 888 (1954)
- [20] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **9**, 935 (1954)
- [21] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981)
- [22] R. Kubo, in *Fluctuation, Relaxation, and Resonance in Magnetic Systems*, Scottish Universities Summer School Proceedings 1961, p. 23, edited by D. ter Haar (Oliver and Boyd, Edinburgh, 1962)
- [23] K. W. Kehr, G. Honig und D. Richter, *Z. Phys.* **B 32**, 49 (1978)
- [24] Z. Soos, *J. Chem. Phys.* **44**, 1729 (1966)
- [25] R. E. Dietz, F. R. Merrit, R. Dingle, D. Hone, B. G. Silbernagel und P. M. Richards, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 1186 (1971)
- [26] D. Hone und K. G. Petzinger, *Phys. Rev.* **B 6**, 245 (1972)
- [27] P. M. Richards, *Phys. Rev.* **B 10**, 805 (1974)
- [28] P. M. Richards und M. B. Salamon, *Phys. Rev.* **B 9**, 32 (1974)
- [29] R. Czech, Diplomarbeit, Universität Köln (1984), unveröffentlicht
- [30] R. Czech und K. W. Kehr, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1783 (1984)
- [31] G. F. Reiter und J. P. Boucher, *Phys. Rev.* **B 11**, 1823 (1975)
- [32] T. E. Harris, *J. Appl. Prob.* **2**, 232 (1965)
- [33] F. Spitzer, *Adv. Math.* **5**, 246 (1970)
- [34] P. M. Richards, *Phys. Rev.* **B 16**, 1363 (1977)
- [35] P. A. Fedders, *Phys. Rev.* **B 17**, 40 (1978)

- [36] S. Alexander und P. Pincus, Phys. Rev. **B 18**, 2011 (1978)
- [37] R. Arratia, Ann. Prob. **11**, 362 (1983)
- [38] H. van Beijeren, K. W. Kehr und R. Kutner, Phys. Rev. **B 28**, 5711 (1983)
- [39] D. Richter, R. Hempelmann, O. Hartmann, E. Karlsson, L. O. Norlin, S. F. J. Cox und R. Kutner, J. Chem. Phys. **79**, 4564 (1983)
- [40] R. Czech und K. W. Kehr, Phys. Rev. **B 34**, 261 (1986)
- [41] B. Ya Balagurov und V. G. Vaks, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **65**, 1939 (1973) [Sov. Phys. JETP **38**, 958 (1974)]
- [42] M. D. Donsker und S. R. S. Varadhan, Commun. Pure Appl. Math. **32**, 721 (1979)
- [43] P. Grassberger und I. Procaccia, J. Chem. Phys. **77**, 6281 (1981)
- [44] A. Blumen und G. Zumofen, J. Stat. Phys. **30**, 487 (1983)
- [45] J. K. Anlauf, Phys. Rev. Lett. **52**, 1845 (1984)
- [46] C. Domb und G. S. Joyce, J. Phys. **C 5**, 956 (1972)
- [47] P. M. Duxbury und S. L. A. de Queiroz, J. Phys. **A 18**, 661 (1985)
- [48] K. W. Kehr, private Mitteilung
- [49] R. Kubo und T. Toyabe, *Magnetic Resonance and Relaxation*, Proc. XIVth Colloque Ampere Ljubljana, 1966, p. 810, ed. by R. Blinc (North Holland, 1967)
- [50] O. Hartmann, private Mitteilung
- [51] G. Pólya, Math. Ann. **84**, 149 (1921)
- [52] E. W. Montroll, in *Proceedings of the Sixteenth Symposium on Applied Mathematics* (American Mathematical Society, Providence, R.I., 1964) Vol. 16, p.193
- [53] E. W. Montroll und G. H. Weiss, J. Math. Phys. **6**, 167 (1965)

- [54] W. Th. den Hollander, private Mitteilung
- [55] J. L. Doob, *Stochastic Processes* (John Wiley and Sons, New York, 1953)
- [56] R. J. Rubin und G. H. Weiss, *J. Math. Phys.* **23**, 250 (1982)
- [57] H. van Beijeren, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 195 (1982)
- [58] H. van Beijeren und H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **31**, 231 (1983)
- [59] P. L. Leath und P. M. Duxbury, *J. Phys. A* **18**, 1435 (1985)
- [60] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962)
- [61] N. G. van Kampen, *Phys. Reports* **24**, 171 (1976)
- [62] G. H. Weiss und R. J. Rubin, *J. Stat. Phys.* **14**, 333 (1976)
- [63] R. M. Mazo und C. Van den Broeck, *Phys. Rev. A* **34**, 2364 (1986)
- [64] D. Maes und C. Van den Broeck, Preprint 1987
- [65] R. H. Silsbee und D. W. Hone, *Phys. Rev. B* **27**, 85 (1983)
- [66] Es soll erwähnt werden, daß Th. M. Nieuwenhuizen unser Interesse auf die interessante Verteilung (II.33) gelenkt hat.
- [67] G. Zumofen und A. Blumen, *J. Chem. Phys.* **76**, 3713 (1982)
- [68] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972)
- [69] G. S. Joyce, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser A* **273**, 583 (1973)
- [70] S. Jorna, *J. Math. Phys.* **16**, 2333 (1975)
- [71] W. Th. F. den Hollander, *J. Stat. Phys.* **37**, 331 (1984)
- [72] W. Th. F. den Hollander, private Mitteilung
- [73] P. M. Richards, *Phys. Rev. B* **18**, 6358 (1978)
- [74] P. M. Richards, *Phys. Rev. B* **20**, 2964 (1979)

- [75] P. M. Richards, Phys. Rev. B **25**, 1514 (1982)
- [76] R. D. Hogg, S. P. Vernon und V. Jaccarino, Phys. Rev. Lett. **39**, 481 (1977)
- [77] S. P. Vernon, P. Thayamballi, R. D. Hogg und V. Jaccarino, Phys. Rev. B **24**, 3756 (1981)
- [78] K. Nagamine, K. Ishida, T. Matsusaki, K. Nishiyama, Y. Kuno und T. Yamazaki, Phys. Rev. Lett. **53**, 1763 (1984)
- [79] K. Ishida, K. Nagamine, T. Matsusaki, Y. Kuno, T. Yamazaki, E. Torikai, H. Shirakawa und J. H. Brewer, Phys. Rev. Lett. **55**, 2009 (1985)
- [80] T. Yamazaki, Hyperfine Interactions **6**, 115 (1979)
- [81] R. S. Hayano, Y. J. Uemura, J. Imazato, N. Nishida, T. Yamazaki und R. Kubo, Phys. Rev. B **20**, 850 (1979)
- [82] K. G. Petzinger, Phys. Lett. **75 A**, 225 (1980)
- [83] E. W. Montroll und B. J. West, *On an Enriched Collection of Stochastic Processes*, in *Studies in Statistical Mechanics*, Vol. VII, ed. by E. W. Montroll and J. L. Lebowitz, (North-Holland, Amsterdam, 1979)
- [84] J. W. Haus und K. W. Kehr, *Diffusion in Regular and Disordered Lattices*, Physics Reports **150**, 263 (1987)
- [85] U. V. Alpen, H. Schulz, G. H. Talat und H. Bohm, Solid State Comm. **23**, 911 (1977)
- [86] D. Brinkmann, M. Mali, J. Roos und E. Schweichert, Solid State Ionics **5**, 433 (1981)
- [87] P. M. Richards, Solid State Ionics **5**, 429 (1981)
- [88] K. W. Kehr und K. Binder, *Simulation of Diffusion in Lattice Gases and Related Kinetic Phenomena*, in *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, p. 181 / 310, ed. by K. Binder, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1987)

- [89] R. Kutner, Phys. Lett. **81 A**, 239 (1981)
- [90] K. W. Kehr, R. Kutner und K. Binder, Phys. Rev. **B 23**, 4931 (1981)
- [91] J. Bardeen und C. Herring, in *Imperfections in Nearly Perfect Crystals*, ed. by W. Shockley, p. 261 (Wiley, New York 1952)
- [92] O. F. Sankey und P. A. Fedders, Phys. Rev. **B 15**, 356 (1977)
- [93] K. Nakazato und K. Kitahara, Progr. Theor. Phys. **64**, 2261 (1978)
- [94] R. A. Tahir-Kheli und R. J. Elliott, Phys. Rev. **B 27**, 844 (1983)
- [95] H. van Beijeren und R. Kutner, Phys. Rev. Lett. **55**, 238 (1985)
- [96] R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **B 28**, 3049 (1983)
- [97] R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **B 35**, 5503 (1987)
- [98] R. Kutner, J. Phys. **C 18**, 6326 (1985)
- [99] R. A. Tahir-Kheli und N. El-Meshad, Phys. Rev. **B 27**, 7759 (1983)
- [100] R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **B 27**, 6072 (1983)
- [101] R. Kutner, H. van Beijeren und K. W. Kehr, Phys. Rev. **B 30**, 4382 (1984)
- [102] A. de Masi und P. A. Ferrari, J. Stat. Phys. **38**, 603 (1985)
- [103] R. Kutner und H. van Beijeren, J. Stat. Phys. **39**, 317 (1985)
- [104] A. Bunde, S. Havlin, R. Nossal und H. E. Stanley, Phys. Rev. **B 32**, 3367 (1985)
- [105] A. Bunde, L. L. Moseley, H. E. Stanley und D. Ben-Avraham, Phys. Rev. **A 34**, 2575 (1986)
- [106] M. A. Prasad und K. Unnikrishnan, Phys. Rev. **A 31**, 523 (1985)
- [107] J. K. Anlauf, Diplomarbeit, Universität Köln (1984), unveröffentlicht
- [108] G. Zumofen, A. Blumen und J. Klafter, J. Phys. **A 17**, L479 (1984)

- [109] M. F. Shlesinger und E. W. Montroll, Proc. Nat. Acad. Sci. USA **81**, 1280 (1984)
- [110] S. Redner und K. Kang, J. Phys. A **17**, L451 (1984)
- [111] A. Blumen, G. Zumofen und J. Klafter, Phys. Rev. B **30**, 5379 (1984)
- [112] A. Blumen, *Models for Dynamics of Relaxation in Glasses*, to appear in *Molecular Dynamics and Relaxation. Phenomena in Glasses*, ed. by Th. Dorfmueller and G. Williams, Lecture Notes in Physics (Springer, Heidelberg, 1987)
- [113] J. K. Anlauf, private Mitteilung
- [114] K. W. Kehr und R. Kutner, Physica **110 A**, 535 (1982)
- [115] D. A. Huckaby und J. B. Hubbard, Physica **122 A**, 602 (1983)
- [116] K.W. Kehr und P. Argyrakis, J. Chem. Phys. **84**, 5816 (1986)
- [117] J. K. Anlauf, K. W. Kehr und S. H. Reulein, to be published (1987)
- [118] C. Domb und M. E. Fisher, Proc. Camb. Phil. Soc. **54**, 48 (1958)
- [119] J. W. Haus und K. W. Kehr, a) Solid State Commun. **26**, 753 (1978),
b) J. Phys. Chem. Solids **40**, 1019 (1979)
- [120] F. S. Henyey und V. Seshadri, J. Chem. Phys. **76**, 5530 (1982)
- [121] Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 3, *Sorting and Searching* (Addison Wesley, 1973)
- [122] R. Bayer, *Datenorganisation und Suchverfahren*, Einheit 5 des Kurses *Datenstrukturen*, herausgegeben von der Fernuniversität/Gesamthochschule Hagen (Hagen, 1982)
- [123] P. Spitzner und J. K. Anlauf sei dafür gedankt, daß sie mich auf das Streuspeicherverfahren aufmerksam gemacht haben.
- [124] W. D. Maurer, Comm. ACM **11**, 35 (1968)
- [125] E. E. Radke, Comm. ACM **13**, 103 (1970)

[126] J. R. Bell, Comm. ACM **13**, 107 (1970)

[127] J. R. Bell und C. H. Kaman, Comm. ACM **13**, 675 (1970)

Herrn Prof. Dr. K. W. Kehr danke ich sehr herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit und für die andauernde, engagierte Unterstützung während ihrer Anfertigung.

All den Mitarbeitern des Instituts für Festkörperforschung der Kernforschungsanlage Jülich, die — sei es durch ihre Diskussionsbereitschaft oder auch durch ihre vielfältige praktische Unterstützung — mit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich herzlich danken.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dipl.-Physiker J. K. Anlauf, dessen ständige Diskussionsbereitschaft und vielen wertvollen Anregungen von großem Nutzen waren.

Ihm, Angelika und Herbert Neben und meiner Ehefrau Gabriele möchte ich besonders für die tatkräftige Unterstützung während der endgültigen Fertigstellung dieser Arbeit danken.

