

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>13</b>
<b>1. Beschreibung von Diffusion</b>	<b>15</b>
1.1. Beschreibung von normaler Diffusion	15
1.1.1. Vorgehensweise	15
1.1.2. Ficksche Diffusion	15
1.1.2.1. Die Fickschen Gesetze	
1.1.2.2. Propagator der Fickschen Diffusion	
1.1.2.3. Normalverteilung und Einstein-Relation	
1.1.3. Normale Diffusion nach Cattaneo	17
1.1.4. Normale Diffusion nach dem Diffusionsprinzip	18
1.1.4.1. Verbale Formulierung des Diffusionsprinzips	
1.1.4.2. Superponierbarkeit	
1.1.4.3. Differenzgleichung	
1.1.4.4. Lösung der Differenzgleichung	
1.1.4.5. Übergang zu einer Differentialgleichung	
1.1.5. Weiteres Vorgehen	21
1.1.5.1. Grenzübergang zur Fickschen Diffusionsgleichung	
1.1.5.2. Hypothese zur Varianz	
1.2. Klassifikation von Diffusion	23
1.2.1. Vergleich von Meßwerten mit Theoriepropagatoren	23
1.2.1.1. Problem	
1.2.1.2. Varianztheorem	
1.2.1.3. Bedeutung des Varianztheorems	
1.2.2. Klassifikation von Transportprozessen über die Varianz	24
1.2.2.1. Bestätigung der Einstein-Relation	
1.2.2.2. Varianz des statischen Wellenpropagators	
1.2.2.3. Klassifikationsschema diffusiver Prozesse	
1.2.3. Weitere Aspekte der Diffusionsbeschreibung	26
1.2.3.1. Umgang mit Drift in der Dynamik	
1.2.3.2. Verallgemeinerung auf mehrere Raumdimensionen	
1.3. Beschreibung anomaler Diffusion	28
1.3.1. Die Formel von Wei, Bechinger und Leiderer	28
1.3.2. Zeit-fraktionale Diffusionsgleichungen	28
1.3.3. Orts-fraktionale Diffusionsgleichungen	29
1.3.4. Orts- und zeit-fraktionale Diffusionsgleichungen	30
1.4. Zusammenfassung	30

<b>2. Mathematische Methoden</b>	<b>31</b>
2.1. Motivation	31
2.2. Die Diracsche Delta-Funktion	31
2.2.1. Singuläre Integrale	31
2.2.2. Die Fourier-Transformation der Eins	32
2.2.2.1. Eigenschaften der Fourier-Transformation	
2.2.2.2. Verwendung des Mittelwertsatzes	
2.2.2.3. Definition der Delta-Funktion nach Dirac	
2.2.2.4. Bestimmung des Vorfaktors der Fourier-Transformation	
2.2.3. Die Mellin-Transformation der Eins	34
2.2.3.1. Ergebnis aus der Fourier-Transformation	
2.2.3.2. Mellin-Residuum der Delta-Funktion	
2.2.3.3. Unabhängige Bestätigung	
2.2.3.4. Konsequenzen aus dem Satz von Mellin	
2.2.4. Die Momente der Delta-Funktion	37
2.2.4.1. Zusammenhang zwischen Mellin-Transformation und Momenten	
2.2.4.2. Berechnung der Delta-Momente	
2.2.4.3. Möglichkeiten zur Erweiterung der Funktionentheorie	
2.3. Laplace- und Fourier-Transformation	39
2.3.1. Bekannte Zusammenhänge	39
2.3.1.1. Vorgehensweise	
2.3.1.2. Begriff Propagator	
2.3.1.3. Begriff Greensche Funktion	
2.3.2. Erweiterungen	41
2.3.2.1. Laplace-Transformation der Delta-Funktion	
2.3.2.2. Konsequenzen für die Computeralgebra	
2.3.2.3. Laplace-Faltung mit Delta-Funktion	
2.3.2.4. Orts- und zeitabhängige Steuerfunktionen	
2.3.2.5. Ortsabhängige analytische Koeffizienten	
2.3.2.6. Fourier-Transformation des Riesz-Operators	
2.4. Mellin-Transformation	45
2.4.1. Differenzgleichungen	45
2.4.1.1. Erzeugung von linearen Differenzgleichungen	
2.4.1.2. Lösung von linearen Differenzgleichungen	
2.4.1.3. Foxsche H-Funktionen	
2.4.2. Momentenberechnung aus der Laplace-Transformierten	47
2.4.2.1. Motivation	
2.4.2.2. Berechnung	
2.4.3. Momentenberechnung aus der Fourier-Transformierten	48
2.4.3.1. Direkte Berechnung	
2.4.3.2. Momente einer Fourier-Faltung	
2.5. Zusammenfassung	49

---

<b>3. Lösung fraktionaler Diffusionsgleichungen</b>	<b>51</b>
3.1. Lösung der Gleichung von Schneider und Wyss	51
3.1.1. Optimierte Darstellung der Gleichung	51
3.1.2. Lösungsweg	53
3.1.2.1. Laplace-Transformation	
3.1.2.2. Anschließende Fourier-Transformation	
3.1.2.3. Fourier-Transformierte der Lösung	
3.1.2.4. Lösungsfunktion von Schneider und Wyss	
3.1.3. Eigenschaften der Lösung	56
3.1.3.1. Momente der Lösung	
3.1.3.2. Reihendarstellung und Asymptotik der Lösung	
3.1.3.3. Graphische Darstellung der eindimensionalen Propagatoren	
3.1.3.4. Similarity-Darstellung der Lösung	
3.1.3.5. Interessante Sonderfälle der Lösung	
3.2. Weitere dynamische Gleichungen	63
3.2.1. Die Gleichung zur Lösung von Wei et al.	63
3.2.1.1. Zugang im Fourier-Raum	
3.2.1.2. Hinführung zur Formel von Wei et al.	
3.2.1.3. Laplace- und Fourier-Transformierte	
3.2.1.4. Probleme	
3.2.2. Ausweg	67
3.3. Lösung der zeit- und orts-fraktionalen Diffusionsgleichung	68
3.3.1. Motivation	68
3.3.2. Lösung der Gleichung	69
3.3.2.1. Darstellung der Gleichung	
3.3.2.2. Laplace-Transformation der Gleichung	
3.3.2.3. Anschließende Fourier-Transformation	
3.3.2.4. Transformierte der Lösung	
3.3.2.5. Lösung und Similarity-Darstellung	
3.3.2.6. Stammfunktionen der Momentendichten	
3.3.2.7. Momente	
3.4. Zusammenfassung	74

<b>4. Diskussion von kernmagnetischer Relaxation</b>	<b>75</b>
4.1. Hinführung	75
4.2. Bedeutung und Bestimmung des Strukturfaktors	75
4.2.1. Korrelationsfunktion	75
4.2.2. Mathematische Gesichtspunkte	77
4.2.2.1. Fourier-Faltung in mehreren Dimensionen	
4.2.2.2. Inverse Fourier-Transformation in mehreren Dimensionen	
4.2.3. Einfluß fraktaler Oberflächen	79
4.3. Potenzgesetz für die Relaxationsrate $T_1$	81
4.3.1. Auswerteformel	81
4.3.2. Messungen zur Relaxationsrate $T_1$	82
4.3.3. Vergleich zwischen Theorie und Messung	83
4.4. Zusammenfassung	84
<b>5. Varianzanalyse von Diffusionsmessungen</b>	<b>85</b>
5.1. Analytische Gesichtspunkte	85
5.1.1. Eigenschaften von Diffusionsmessungen	85
5.1.1.1. Video-Mikroskopie	
5.1.1.2. Single File Diffusion	
5.1.1.3. Alternative Voigt-Profile	
5.1.2. Eigenschaften von Diffusionsfaltungen	87
5.1.2.1. Momente einer speziellen Fourier-Faltung	
5.1.2.2. Varianz einer speziellen Fourier-Faltung	
5.1.2.3. Varianz einer weiteren speziellen Fourier-Faltung	
5.1.2.4. Analytische Darstellung der Fourier-Faltungen	
5.2. Schaubilder	91
5.2.1. Erste Begutachtung von Meßwerten	91
5.2.1.1. Varianzabgleich	
5.2.1.2. Verhalten am Verteilungsmaximum	
5.2.2. Schaubilder von Fourier-Faltungen	93
5.2.2.1. Kleine Zeiten	
5.2.2.2. Große Zeiten	
5.2.2.3. Faltung nach Wei et al.	
5.2.2.4. Vergleich beider Theorien	
5.2.3. Graphischer Vergleich mit Meßwerten	100
5.2.3.1. Schneider/Wyss-Theorie	
5.2.3.2. Formel von Wei et al.	
5.2.3.3. Vergleich beider Theorien	
5.3. Zusammenfassung	103

<b>Zusammenfassung</b>	<b>105</b>
1. Varianztheorem	105
2. Delta-Funktion	106
3. Anomale Diffusion	106
4. Kernmagnetische Relaxation	107
5. Diffusionsmessung	108
6. Computeralgebra	108
7. Ausblick	109
<b>Anhänge</b>	<b>111</b>
A. Varianztheorem	111
A.1. Definitionen	111
A.2. Beweis des Varianztheorems	112
A.3. Konsequenzen	113
B. Integraltransformationen	115
B.1. Motivation	115
B.2. Fourier-Transformationen	115
B.2.1. Definitionen	
B.2.2. Eigenschaften	
B.3. Inverse Fourier-Transformationen	116
B.3.1. Definitionen	
B.3.2. Eigenschaften	
B.4. Mellin-Transformation	118
B.4.1. Eigenschaften	
B.4.2. Fourier-Transformationen	
B.4.3. Laplace-Transformation	
B.4.4. Integration	
C. Mittag-Leffler-Funktion	123
C.1. Definition	123
C.2. Inverse Laplace-Transformation einer algebraischen Funktion	123
C.2.1. Zugrundeliegende Mellin-Transformation	
C.2.2. Idee der residualen Optimierung	
C.2.2.1. Verallgemeinerung einer Eigenschaft der Mellin-Transformation	
C.2.2.2. Anwendungsbereiche der residualen Optimierung	
C.2.2.3. Etablierte Inkonsistenzen	
C.2.3. Allgemeiner Zugang zur Mittag-Leffler-Funktion	

D. Programmbeschreibung	129
D.1. Überblick	129
D.2. Beschreibung der Pakete von <i>FractionalCalculus</i>	131
D.2.1. Paket <i>FractionalCalculus.m</i>	131
D.2.1.1. Aufgabe	
D.2.1.2. Beteiligte Notebooks	
D.2.1.3. Neue Symbole	
D.2.2. Paket <i>Options.m</i>	132
D.2.2.1. Aufgabe	
D.2.2.2. Neue Symbole	
D.2.3. Paket <i>Var.m</i>	133
D.2.3.1. Aufgabe	
D.2.3.2. Neue und ergänzte Symbole	
D.2.4. Paket <i>Boole.m</i>	134
D.2.4.1. Aufgabe	
D.2.4.2. Neue Symbole	
D.2.4.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.5. Paket <i>Synonyms.m</i>	136
D.2.5.1. Aufgabe	
D.2.5.2. Neue Symbole	
D.2.5.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.6. Paket <i>Gamma.m</i>	138
D.2.6.1. Aufgabe	
D.2.6.2. Neue Symbole	
D.2.7. Paket <i>Fox.m</i>	139
D.2.7.1. Aufgabe	
D.2.7.2. Neue Symbole	
D.2.8. Paket <i>SymmetricalDelta.m</i>	140
D.2.8.1. Aufgabe	
D.2.8.2. Neue Symbole	
D.2.8.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.9. Paket <i>MellinTr.m</i>	141
D.2.9.1. Aufgabe	
D.2.9.2. Neue Symbole	
D.2.9.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.10. Paket <i>RiemannL.m</i>	142
D.2.10.1. Aufgabe	
D.2.10.2. Neue Symbole	
D.2.10.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.11. Paket <i>Weyl.m</i>	143
D.2.11.1. Aufgabe	
D.2.11.2. Neue Symbole	
D.2.11.3. Weitere Eigenschaften	

---

D.2.12. Paket <i>ErdelyiKober.m</i>	144
D.2.12.1. Aufgabe	
D.2.12.2. Neue Symbole	
D.2.12.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.13. Paket <i>Riesz.m</i>	145
D.2.13.1. Aufgabe	
D.2.13.2. Neue Symbole	
D.2.13.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.14. Paket <i>IntegralTrafosExtensions.m</i>	145
D.2.14.1. Aufgabe	
D.2.14.2. Neue Symbole (Hilfetext für Version 3.0)	
D.2.14.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.15. Paket <i>MellinBarnesSeries.m</i>	149
D.2.15.1. Aufgabe	
D.2.15.2. Neue Symbole	
D.2.15.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.16. Paket <i>Integral.m</i>	150
D.2.16.1. Aufgabe	
D.2.16.2. Neue Symbole	
D.2.16.3. Weitere Eigenschaften	
D.2.17. Paket <i>FractalDSolve.m</i>	151
D.2.17.1. Aufgabe	
D.2.17.2. Neues Symbol	
D.2.17.3. Weitere Eigenschaften	
D.3. Protokoll	152
D.4. Bemerkungen	152
E. Abkürzungen	153
E.1. Motivation	153
E.2. Symbole physikalischer Größen und Einheiten	153
E.3. Weitere Abkürzungen	154
F. Meßdaten	155
F.1. Motivation	155
F.2. Meßergebnisse von T. Zavada	155
F.3. Meßergebnisse von Wei Q.-H.	156
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>159</b>
Danksagung	165
Erklärung	167
Lebenslauf	169

<b>Summary</b> (englische Zusammenfassung)	<b>171</b>
1. Variance Theorem	171
2. Delta Function	172
3. Anomalous Diffusion	172
4. Nuclear Magnetic Relaxation	173
5. Measuring Diffusion	174
6. Computer Algebra	174
7. Outlook	175
<b>Fehlerbericht (Stand: 2015)</b>	<b>177</b>