

布朗粒子越过双峰位垒的逃逸速率

钟云霄 陈俊珍
(北京大学)

摘 要

本文计算了布朗粒子越过双峰位垒的逃逸速率, 计算结果表明逃逸速率与位能的具体形状有较大关系。

一、引 言

用 Kramers 或 Smoluchowski 方程的定态解来讨论布朗粒子越过位垒的逃逸速率时, 所得结果只与表示初始位阱及高峰的曲率的谐振频率有关^[1], 与峰与谷之间的距离以及峰与谷之间的位能形状无关。由于应用布朗粒子越过位垒逃逸的模型所碰到的实际问题, 位能形状可能比较复杂。例如, 在核裂变问题中, 有些裂变位垒就是双峰位垒, 因而只考虑一个峰而不管另一峰的存在是不够的。在本文中, 我们用解 Smoluchowski 方程严格解的方法^[2,3], 计算了布朗粒子越过双峰位垒的逃逸速率, 说明了用 Kramer 及 Smoluchowski 的定态解的公式在位垒情况较复杂时不一定适用。

二、几率分布函数随时间的变化

布朗运动的 Smoluchowski 方程的严格解为^[2,3]:

$$P(x, t) = \phi_0^2(x) + \frac{\phi_0(x)}{\phi_0(y)} \sum_{n=1} \phi_n(x) \phi_n(y) e^{-\lambda_n t} \quad (1)$$

$P(x, t)dx$ 为 $t=0$ 时粒子处于 y 处, 而 t 时粒子处于 $x \rightarrow x + dx$ 的几率。 $\phi_n(x)$ 服从微分方程:

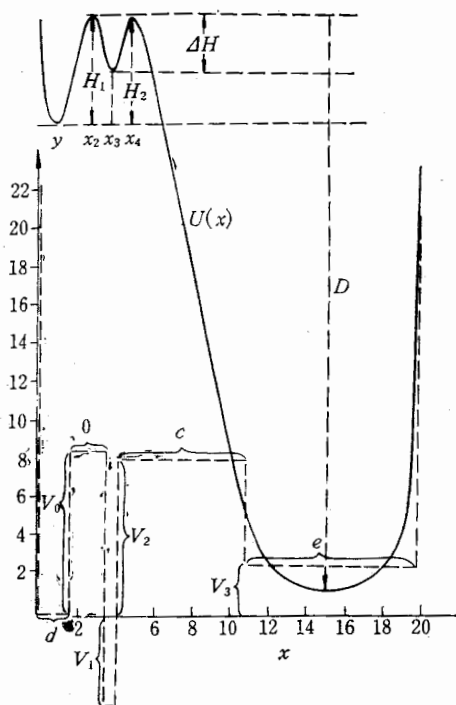
$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^2} + [K_n - V(x)] \phi_n(x) = 0. \quad (2)$$

以 $U(x)$ 代表以 $K_B T$ (K_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度.) 为单位的布朗粒子单位质量位能, 取 x 为无量纲量, 时间单位为 $\theta = \alpha / K_B T$, (α 为阻尼系数.) 则

$$U(x) = -2 \ln \phi_0(x), \quad (3)$$

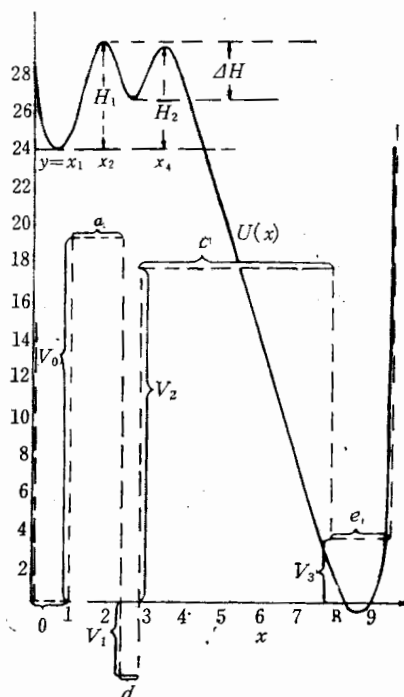
$$\lambda_n = K_n - K_0. \quad (4)$$

我们选择了如图 1 及图 2 所示的两种方形位阱 $V(x)$ (图中虚线所示), 和由(2)及(3)式



$H_1 = 5.7$ $d = 1.5$
 $H_2 = 5.68$ $a = 2.055$
 $\Delta H = 3.0$ $b = 0.5$
 $D = 30$ $c = 6.7634$
 $\Delta x = 2.8743$ $e = 9.1396$
 $V_0 = 8.524$
 $V_1 = 4.6995$
 $V_2 = 8.1754$
 $V_3 = 2.7253$

图 1



$H_1 = 5.7$ $d = 1.0$
 $H_2 = 5.68$ $a = 1.336$
 $\Delta H = 3$ $b = 0.5$
 $D = 30$ $c = 5$
 $\Delta x = 1.9693$ $e = 1.5419$
 $V_0 = 19.1793$
 $V_1 = 3.8225$
 $V_2 = 17.5746$
 $V_3 = 3.2657$

图 2

表 1

	第一套数据	第二套数据
K_0	2.83310	6.37448
λ_1	.002046	.004485
λ_2	.17792	.32913
λ_3	.32294	8.5899
λ_4	.85792	11.5981
λ_5	1.60770	12.7174

所求得的相应的位能 $U(x)$. (实线所示)

由第一套数据(即图 1 所示位能)与第二套数据(图 2 所示位能)求得 K_0 与前五个 λ_n 值如表 1 所示. 将解出的 ϕ_n 代入 (1) 式可得几率分布函数 $P(x, t)$. 现将第一套数据

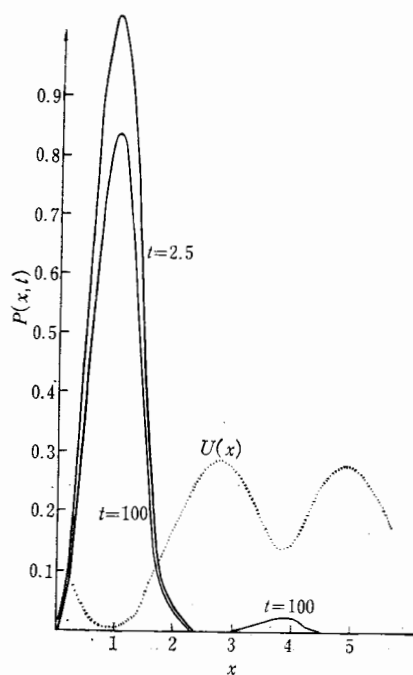


图 3

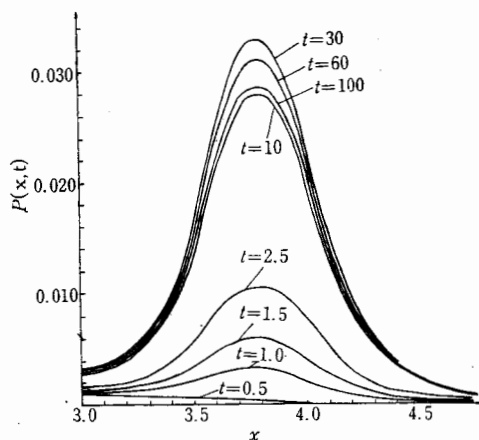


图 4

的 $P(x,t)$, 在不同的时间参数下, 在两峰之间的变化表示在图 3 及图 4 中。图 3 中的两条曲线分别代表 $t=2.5$ 与 $t=100$ 单位时间时的几率分布; 图 4 为两峰之间的几率分布随时间变化的情况。可以看到, 粒子处于两峰之间的几率开始是随时间增加, 然后随时间减少。在 $x=x_1$ 及 $x=x_3$ (即布朗粒子初始位置与两峰之间的位谷处), $P(x,t)$ 随时间变化如图 5 及图 6 所示。

三、逃逸速率与位形的关系

令 $I(t)$ 为 t 时刻布朗粒子还在第二位垒内的几率。则有:

$$I(t) = \int_0^{x_4} P(x,t) dx \quad (5)$$

将(1)式代入可得:

$$I(t) = I_0 + \sum_{n=1} I_n e^{-\lambda_n t} \quad (6)$$

图 7 就是用 (5) 式计算的第一套数据的 $\ln I(t)$ 随 t 变化的曲线, 这曲线是一条斜率为 “-0.00204” 的直线, 而 0.00204 就是 λ_1 的数值。这说明了(6)式可以简化为:

$$I(t) = I_1 e^{-\lambda_1 t} \quad (7)$$

这种简化的合理性从图 8 对第一套数据的 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_5$ 的分析中也可以看出。对 $I(t)$ 的贡献, 主要是 $n=1$ 的一项, $n=2$ 的一项经严格的计算, 只有 $n=1$ 的一项的 1% 左右。 I_0 更是一微小的量, 因而简化成(7)式是合理的。这不仅是对第一套数据

0.04
0.08
0.12
0.16

如此:
有这
J

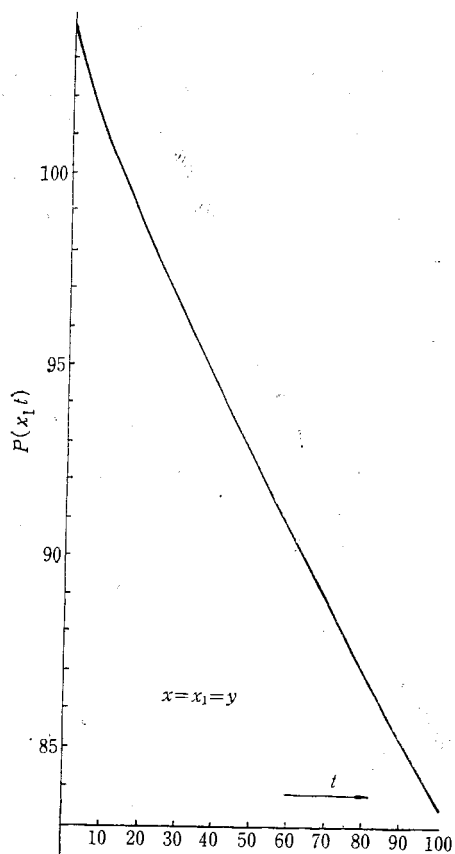


图 5

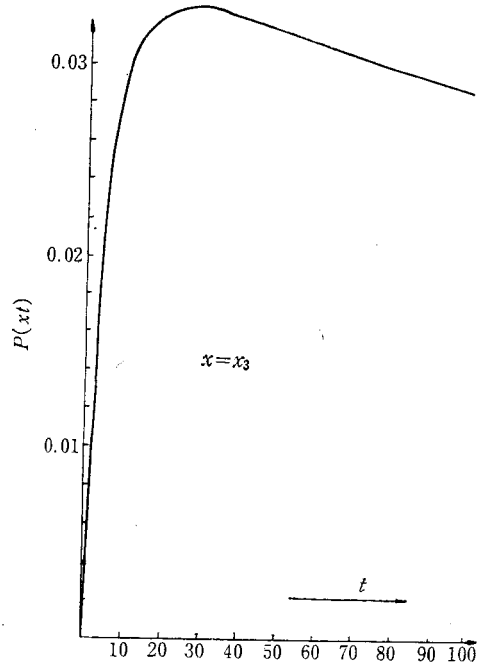


图 6

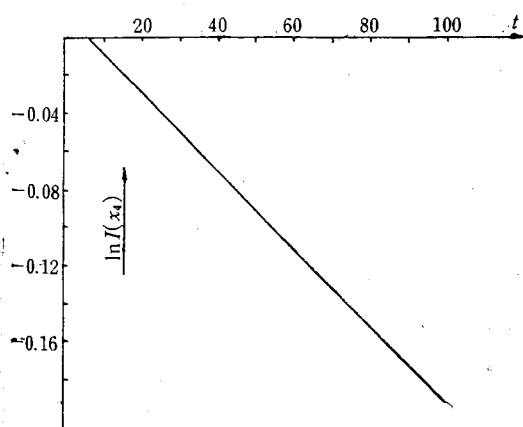


图 7

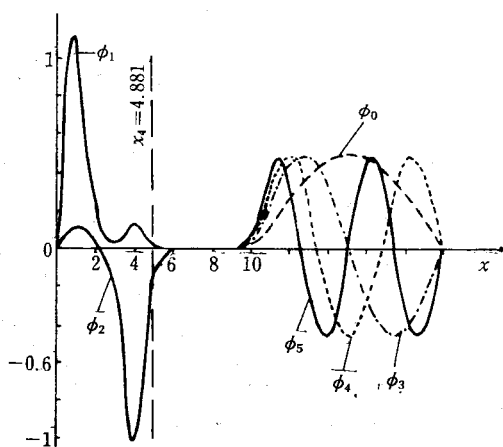


图 8

如此，对第二套数据以及其它数据来说，只要是 $U(x)$ 中 $D \gg H_1$ (或 H_2) 的情况都具有这性质。

从(7)式可得：

$$-\frac{1}{I} \frac{dI}{dt} = \lambda_1 \quad (8)$$

λ_1 就是布朗粒子越过位垒的逃逸速率。比较第一组数与第二组数的 λ_1 ，可以看到第二组数的 λ_1 比第一组数要大一倍多。这两组数主要是初始位阱与位垒之间的距离有着很大差别，这说明了距离对 λ_1 的影响是较大的。

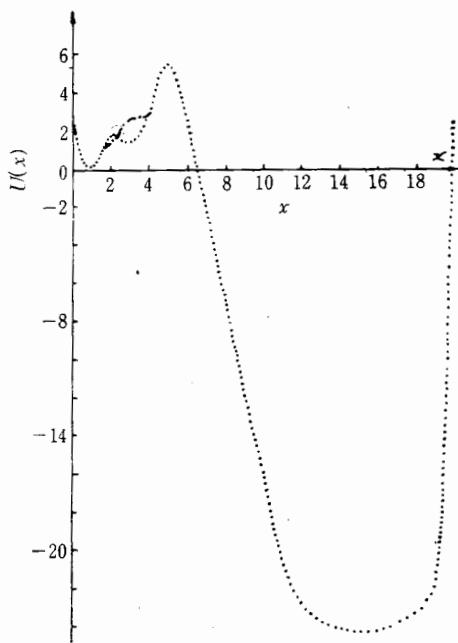


图 9
.....第四套数据, ————第三套与第四套
数据不同之处。

为了研究位能的中间形状(初始位阱与第二高峰之间)对逃逸速率的影响,我们又计算了第三组数与第四组数。这两组数的位能如图9所示。这两组数的特点是初始位阱与第二高峰的曲率与位置均和第一组数相同,而中间的第一高峰变低了,第三组数两峰间的谷很不明显,第四组数则有较低的谷,但第一峰的高度更小了。对这两组数计算的结果为:

$$\text{第三组数: } \lambda_1^{(3)} = .002718$$

$$\text{第四组数: } \lambda_1^{(4)} = .002845$$

与第一组数的 $\lambda_1^{(1)} = 0.002046$ 比较, $\lambda_1^{(3)}$ 比 $\lambda_1^{(1)}$ 大 32.8%, $\lambda_1^{(4)}$ 比 $\lambda_1^{(1)}$ 大 39.05%。这结果说明了第一峰的高度明显影响了布朗粒子逃逸速率,第一峰越高,逃逸速率越小。

四、与 Kramer 理论比较

Kramer 理论的逃逸速率公式为:

$$W_K = \frac{\omega_1 \theta}{4\pi\tau\omega_2} (\sqrt{1 + 4\omega_2^2\tau^2} - 1) e^{-H} \quad (9)$$

其中 $\tau = \frac{M}{\alpha}$, M 为布朗粒子质量, H 为以 $K_B T$ 为单位的位垒高度。当粘滞性比较大,使得 $\omega_2\tau \ll 1$ 时, Kramer 公式即为 Smoluchowski 方程的定态解公式,即

$$W_S = \frac{\tau\omega_1\omega_2\theta}{2\pi} e^{-H} \quad (10)$$

ω_1 为位阱附近的谐振频率, ω_2 为位垒附近的谐振频率。当位能只有一个峰时,我们在上一篇文章中^[3]已说明了所得结果基本上是一致的。现在将(10)式用于双峰位垒,令 ω_2 为第二峰附近的谐振频率。对第一、第三、第四套数据, ω_1 、 ω_2 、 H 均有完全相同的值,按 Kramer 公式计算,应该具有完全相同的逃逸速率。

$$\text{令 } \left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_{x=y} = 2\beta_1^2 \left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_{x=x_1} = 2\beta_1^2$$

则

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2K_B T}{M}} \beta_1 \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2K_B T}{M}} \beta_2$$

(10)式成为:

$$W_s = \frac{\beta_1 \beta_4}{\pi} e^{-H} \quad (11)$$

从第一、第三及第四套数据得:

$$\beta_1 = 1.68318 \quad \beta_4 = 2.31135 \quad H = 5.68$$

代入(11)式得:

$$W_s = 0.004227$$

将第一、第三、第四套数据的逃逸速率与 W_s 列表比较如表 2 所示。可以看出, 用定态解得的结果不但抹杀了初始位阱与第二峰之间的千差万别, 所得的逃逸速率也要大得多。因而应用定态解对双峰位垒不是好的近似。

表 2

$\lambda_1^{(1)}$.002046
$\lambda_1^{(3)}$.002718
$\lambda_1^{(4)}$.002845
W_s	.004227

我们的工作得到胡济民老师的多方面指点与帮助, 特此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, 15(1943), 1.
 [2] L. E. Reichl, *J. Chem. Phys.*, 77(1982), 4199.
 [3] 钟云霄, 高能物理与核物理, 9(1985), 108.

THE RATE OF ESCAPE OF BROWNIAN PARTICLE OVER DOUBLY PEAKED POTENTIAL BARRIERS

ZHONG YUN-XIAO CHEN JUN-ZHEN
 (Peking University)

ABSTRACT

The rate of escape of Brownian particle over doubly peaked potential barriers is calculated by the exact solution of the Smoluchowski equation. It is found that the rate depends strongly on the form of the potential barriers.