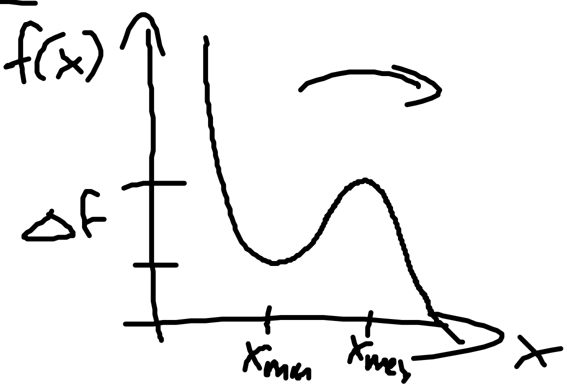
Problemstellung:

Potential



FP-Gl.: $$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP} P(x,t)$$

$$\hat{L}_{FP} = \frac{\partial}{\partial x} f'(x) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$= f''(x) + f'(x)\frac{\partial}{\partial x} + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Ausbruchsrate??

Betrachte zunächst Stromdichte

$$J(x,t) \underset{\uparrow}{=} -K^{(2)}(x)\, e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{\Phi(x)} P(x,t)\right)$$

I.10.

mit $$\Phi(x) = \ln K^{(2)}(x) - \int^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}$$

hier: $k^{(1)}(x) = -f'(x)$, $k^{(2)}(x) = D = \text{const}$

$$\Rightarrow \underset{\substack{\uparrow \\ \text{hier}}}{\phi(x) =} \ln D + \frac{f(x)}{D} - \frac{f(c)}{D}$$

$$\rightarrow J(x,t) = -D e^{-f(x)/D}$$

$$\underset{\text{'mal'}}{\times} \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{f(x)/D} P(x,t)\right)$$

Annahme

$\frac{\Delta f}{D}$ sehr groß

Interpretation:

Barrieren sehr hoch!!
im Vergleich zu D

und: $D = k_B T / \gamma m$

$\Rightarrow \Delta f \gg k_B T$

$\rightarrow$ quasi-stationärer Zustand
in dem Tal

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) \approx 0 \qquad\qquad \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

$J \approx \text{const}$

$\uparrow$

Strom über die Barriere

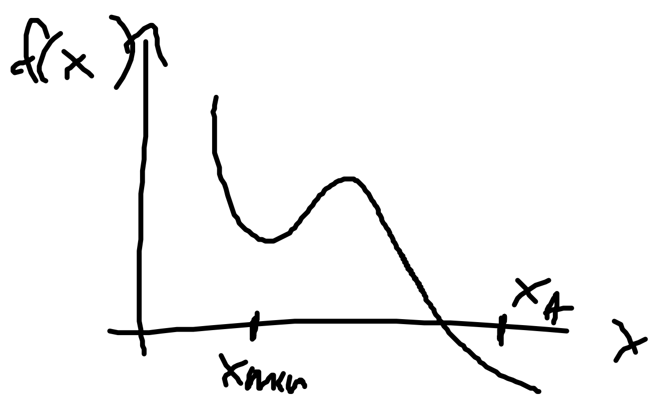
Beachte: Wir nehmen nicht $J=0$ an $\Rightarrow$ sonst gäbe es keinen "Ausbruch" aus dem Tal

$$J = e^{-f(x)/D} \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{f(x)/D} P^{stat}(x) \right)(-1)$$

$\|$

const

Integriere von x_{min} (Minimum in $f(x)$) bis x_A



$$\Rightarrow J \int_{x_{min}}^{x_A} e^{f(x')/D} dx' = D e^{f(x_{min})/D} \cdot P^{stat}(x_{min}) - D e^{f(x_A)/D} P^{stat}(x_A)$$

Weitere Annahme:

$$P^{stat}(x_A) \approx 0$$

da Teilchen hier nur sehr selten hinkommen!

$$\Rightarrow J = D\, e^{f(x_{min})/D}\, P^{stat}(x_{min}) \cdot \left(\int_{x_{min}}^{x_A} dx' e^{f(x')/D} \right)^{-1}$$

(1)

Nächster Schritt: Ansatz für die Wahrscheinlichkeitsdichte

Für $\Delta f/_D \gg 1$ (sehr hohe Barriere)

wird P in Nähe des Minimums im Gleichgewicht zur stationären Verteilung!

$$\Rightarrow P^{stat}(x) = \alpha\, e^{-\Phi(x)}$$

(I.10)

mit $\Phi(x) = f(x)/D$

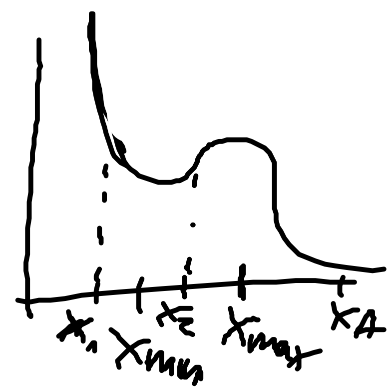
unter Vernachlässigung der Konstanten Terme

nähere also: $P^{stat}(x_{min}) \approx \alpha\, e^{-f(x_{min})/D}$

ebenso in der Nähe von x (mit x noch im Tal)

$$P^{stat}(x) = \alpha\, e^{-f(x)/D} \quad \text{für } x \text{ „im Tal"}$$

$$\Rightarrow \frac{P^{stat}(x)}{P^{stat}(x_{min})} = e^{-(f(x)-f(x_{min}))/D}$$



Betrachte die totale Wahrsch., das Teilchen im Tal (d.h. in der Nähe von x_{min}) zu finden

$$(2) \quad \tilde{P} = \int_{x_1}^{x_2} P^{stat}(x')\,dx' = P^{stat}(x_{min})\, e^{f(x_{min})/D} \int_{x_1}^{x_2} e^{-f(x')/D}\,dx'$$

Betrachte nun die „Ausbruchsrate"

Berechnung über folgende Relation:

Ansatz $\boxed{\tilde{P} \cdot \nu = J}$ (*)

Ausbruchsrate

("denn"

$$P \cdot \dot{x} = J$$

Wahrsch.   Geschw.   Stromdichte

wie beim Ladungstransport

setze $\dot{x} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$

$$\underbrace{P \cdot \Delta x}_{\text{totale Wahrsch.}} \cdot \frac{1}{\Delta t} = J$$

Stromdichte

Dimension der Ausbruchsrate

Aus ⊗ inverse Ausbruchsrate

$$\frac{1}{r} = \frac{\tilde{p}}{j} = \frac{(2)}{(1)}$$

$$= \cancel{\overset{\text{stat}}{P}(x_{min})\, e^{f(x_{min})/D}} \int_{x_1}^{x_2} e^{-f(x')/D}\, dx' \;{}^{-1}$$

$$\cdot \left[D\, \cancel{e^{f(x_{min})/D}}\, \cancel{\overset{\text{stat}}{P}(x_{min})} \cdot \left(\int_{x_{min}}^{x_A} e^{f(x')/D}\, dx' \right)^{-1} \right]$$

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{D} \int_{x_1}^{x_2} e^{-f(x')/D}\, dx' \int_{x_{min}}^{x_A} e^{f(x'')/D}\, dx''$$

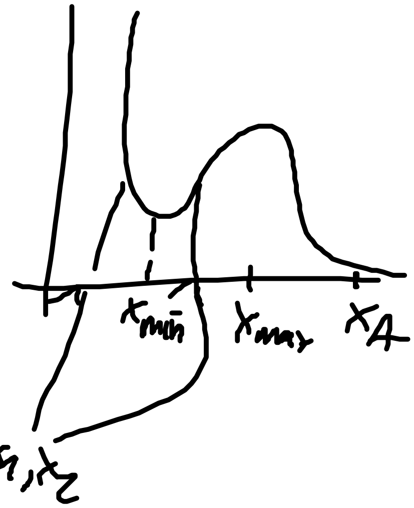
Das ist das Ergebnis für $\frac{1}{r}$ bzw r als Funktion von $f(x)$

{Annahme: Quasi-stationäre Verteilung im Tal, konstanter Strom! $\Delta f/D \gg 1$

Beiträge zu den beiden Integralen stammen im wesentlichen von

x_{min} (1. Integral)

bzw x_{max} (2. Integral)



Im 1. Integral:

$$f(x) \simeq f(x_{min}) + \underbrace{f'(x_{min})}_{0}(x - x_{min}) + \frac{1}{2}\underbrace{f''(x_{min})}_{>0}(x - x_{min})^2 + O((\Delta x)^3)$$

$$\Rightarrow \int_{x_1}^{x_2} e^{-f(x')/D} \, dx' \approx e^{-f(x_{min})/D} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2D} f''(x_{min})(x' - x_{min})^2} \, dx'$$

Erweitere die Integrationsgrenze nach $\pm\infty$!!

Gaussintegral!

$$\int_{x_1}^{x_2} e^{-f(x')/D}\, dx' \approx e^{-f(x_{min})/D} \sqrt{\frac{2\pi D}{f''(x_{min})}}$$

positiv!

2. Integral: völlig analoges Vorgehen:

Beiträge kommen im wesentl. von $x \approx x_{max}$

$$\Rightarrow f(x) \approx f(x_{max}) + \frac{1}{2} \underbrace{f''(x_{max})}_{<0} (x - x_{max})^2 + O(\Delta x^3)$$

$$\int_{x_{min}}^{x_A} e^{f(x')/D}\, dx' \approx e^{f(x_{max})/D} \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, e^{-\frac{1}{2D}|f''|(x-x_{max})^2}$$

$$= e^{f(x_{max})/D} \sqrt{\frac{2\pi D}{|f''(x_{max})|}}$$

Einsetzen in Ausdruck für $\frac{1}{\nu}$

$$\frac{1}{\nu} = \frac{1}{D} e^{-f(x_{min})/D} e^{f(x_{max})/D} \cdot \frac{2\pi D}{\sqrt{f''(x_{min}) \, |f''(x_{max})|}}$$

Ausbruchsrate:

$$\boxed{\Rightarrow \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{f''(x_{min}) \, |f''(x_{max})|} \, e^{-\Delta f/D}}$$

mit $\Delta f = f(x_{max}) - f(x_{min})$

Bemerkungen

- Die zentrale Größe, die ν bestimmt, ist die Energiebarriere Δf relativ zur thermischen Energie ($D = k_B T/\gamma_m$)

- Exponentieller Abfall mit $\Delta f / D$

$\Rightarrow$ „Arrhenius"-Verhalten !

typisch für thermisch aktivierte Prozesse

- Wir haben bisher mit der Vorlesung von Risken (Buch) gearbeitet

„richtige Einheiten" nach unserer Vl.

$$\mathcal{L}_{FP} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{D}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} f'(x)$$

$$\Rightarrow r = \frac{D}{2\pi k_B T} \sqrt{f''(x_{min}) |f''(x_{max})|} \, e^{-\Delta f / k_B T}$$