



ВРЕМЕНА СТОХАСТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ В КУСОЧНО-ПАРАБОЛИЧЕСКИХ БИСТАБИЛЬНЫХ СИСТЕМАХ С ШУМОМ

А. Н. Малахов, А. Л. Панкратов

Рассмотрена кинетика стохастических переходов из одного устойчивого состояния в другое в бистабильных системах с шумом, описываемых кусочно-параболическими потенциальными профилями. Методом преобразования Лапласа исходного уравнения Фоккера - Планка получены точные значения средних времен переходов (времен релаксации) броуновских частиц через потенциальные барьеры, разделяющие устойчивые состояния. Для трех конкретных кусочно-параболических профилей проведен сравнительный анализ полученных точных значений времен релаксации с известными ранее приближенными результатами Крамерса. Прослежено влияние формы и ширины потенциального барьера на времена релаксации. В структуре времени релаксации выявлены множители, отвечающие за форму устойчивого состояния, за форму, высоту и ширину потенциального барьера.

Введение

Броуновское движение в потенциальных полях, впервые рассмотренное Крамерсом [1] с точки зрения скоростей реакций, успешно применяется до сих пор как адекватная модель кинетики процессов перехода различных динамических систем из одного устойчивого состояния в другое через соответствующие потенциальные барьеры. Эта модель широко используется во многих задачах физики, химии и биологии (см., например, обзор [2]) и прежде всего для определения скоростей переходов, времен релаксации и времен жизни метастабильных состояний.

Начиная с Крамерса основные результаты этой проблемы были получены главным образом для высоких потенциальных барьеров, когда интенсивность флуктуаций, существующих в динамических системах, предполагалась много меньшей потенциальной энергии барьера, благодаря чему поток вероятности через потенциальный барьер считался постоянным и все рассмотрение велось квазистационарным образом.

Отыскание временных характеристик стохастических переходов для случаев средних и низких потенциальных барьеров, когда флуктуации достаточно велики, требует знания нестационарного решения уравнения Фоккера - Планка (УФП), являющегося основополагающим дифференциальным уравнением рассматриваемой проблемы, в чем и заключается основная ее трудность.

Наиболее широко используемый подход к отысканию нестационарного решения УФП состоит из разложения оператора Фоккера - Планка по собственным функциям и нахождения минимального ненулевого собственного числа, которое и определяет временной масштаб релаксации (см. монографию

Ризкина [3] и приведенную там библиографию). Однако, с помощью этого метода удается получить искомые временные характеристики лишь для некоторых простейших моделей потенциальных профилей.

Наш подход к решению проблемы основан на отыскании нестационарного решения УФП в терминах преобразования Лапласа и получении искомых временных характеристик непосредственно из преобразования Лапласа. Этим методом в работах [4-6] были определены точные временные характеристики нестационарной диффузии через произвольные кусочно-линейные потенциальные профили без каких либо ограничений на высоту потенциальных барьеров. В настоящей работе этот подход распространен на анализ нестационарного броуновского движения в трех конкретных кусочно-параболических потенциальных профилях.

Отметим, что кроме упомянутой работы Крамерса кусочно-параболический профиль рассматривался также и в других работах [7-10]. Однако, использованный в этих работах метод разложения по собственным функциям не позволил найти решение для произвольной высоты потенциальных барьеров; полученные приближенные решения и поправки относятся лишь к высоким потенциальным барьерам.

1. Общее решение УФП в изображении Лапласа

1.1. Как известно, движение броуновских частиц в поле сил с потенциалом $\Phi(x)$ в режиме большого трения описывается следующим исходным уравнением Ланжевена:

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{1}{h} \frac{d\Phi(x)}{dx} + \xi(t),$$

где $\xi(t)$ - белый гауссов шум

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t) \xi(t+\tau) \rangle = D\delta(\tau), \quad D = 2kT/h,$$

h - вязкость, T - температура и k - постоянная Больцмана. Для плотности вероятности координат броуновских частиц $W(x,t)$ УФП имеет следующий вид:

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial G(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{B} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{d\Phi(x)}{dx} W(x,t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} W(x,t) \right\}, \quad (1.1)$$

где $B = 2/D$, $G(x,t)$ - поток вероятности и $\varphi(x) = 2\Phi(x)/hD = \Phi(x)/kT$ - безразмерный потенциальный профиль.

Пусть при $t=0$ все броуновские частицы расположены в точке $x = x_0$, чему соответствует начальное условие $W(x, 0) = \delta(x - x_0)$. С течением времени это начальное распределение расплывается, и в конце концов может установиться ненулевое стационарное вероятностное распределение

$$W(x, \infty) = A \exp[-\varphi(x)], \quad (1.2)$$

если

$$A^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\varphi(x)] dx$$

является конечной величиной. Общей задачей является нахождение временных масштабов изменения вероятностного распределения от начального $W(x, 0)$ до финального $W(x, \infty)$.

Для решения УФП (1.1) применим преобразование Лапласа

$$Y(x, s) = \int_0^{\infty} W(x, t) e^{-st} dt.$$

Уравнение (1.1) запишется при этом в виде

$$\frac{d^2 Y(x, s)}{dx^2} + \frac{d}{dx} \left[\frac{d\varphi(x)}{dx} Y(x, s) \right] - \gamma^2 Y(x, s) = -B\delta(x - x_0), \quad (1.3)$$

где $\gamma^2 = sB$. Заметим, что поток вероятности в изображении Лапласа равен

$$\hat{G}(x, s) = \int_0^{\infty} G(x, t) e^{-st} dt = -\frac{1}{B} \left[\frac{d\varphi(x)}{dx} Y(x, s) + \frac{dY(x, s)}{dx} \right].$$

Рассмотрим параболический потенциальный профиль

$$\varphi(x) = b_k(x - l_k)^2/2 + \varphi_{0k},$$

заданный в интервале $x \in [x_k, x_{k+1}]$. Уравнение (1.3) в этом интервале примет вид

$$\frac{d^2 Y(x, s)}{dx^2} + \frac{d}{dx} [b_k(x - l_k)Y(x, s)] - \gamma^2 Y(x, s) = -B\delta(x - x_0). \quad (1.4)$$

Можно показать, что общее решение уравнения (1.4) при $b_k \neq 0$ может быть представлено в указанном интервале в виде

$$Y_k(x, s) = \exp(-\varphi(x)/2) \{A_k U(a, z) + C_k U(a, -z)\}, \text{ если } x_0 \notin [x_k, x_{k+1}].$$

Если же $x_0 \in [x_k, x_{k+1}]$, то $Y(x, s) = Y_k(x, s) + y(x, s)$, где

$$y(x, s) = \frac{B\Gamma(a + 1/2)}{(2\pi|b_l|)^{1/2}} \exp[(\varphi(x_0) - \varphi(x))/2] \begin{cases} U(a, z_0)U(a, -z), & x < x_0 \\ U(a, -z_0)U(a, z), & x > x_0 \end{cases} \equiv \begin{cases} y^-(x, s), & x < x_0 \\ y^+(x, s), & x > x_0, \end{cases}$$

здесь A_k, C_k - произвольные постоянные, $a = \sigma - 1/2 \operatorname{sgn} b_k$, $\sigma = \gamma^2/|b_k| = sB/|b_k|$, $z = |b_k|^{1/2}(x - l_k)$, $z_0 = |b_k|^{1/2}(x_0 - l_k)$ и $\Gamma(x)$ - гамма-функция. Функции Вебера $U(a, z)$, $U(a, -z)$ являются линейно независимыми решениями и обладают, в частности, следующими свойствами [11]: $U(a, \infty) = 0$, $U(a, -\infty) = \infty$.

1.2. Для определения произвольных постоянных A_k, C_k необходимо задаться граничными условиями, связанными с конкретным видом исследуемого потенциального профиля $\varphi(x)$ [3,6]. Так, например, для трех типов потенциальных профилей, изображенных на рис. 1-3 и анализируемых далее, нетрудно установить граничные условия, налагаемые на трансформации Лапласа плотностей и потоков вероятностей. Для профиля, изображенного на рис. 1

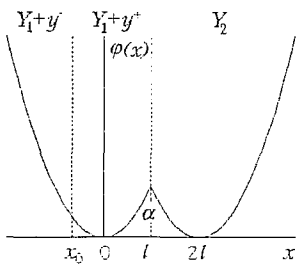


Рис.1

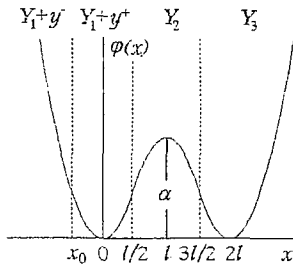


Рис.2

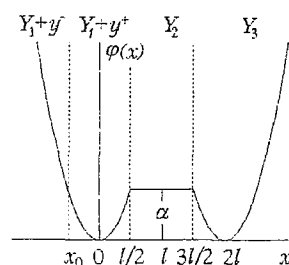


Рис.3

$$Y_1(-\infty, s) + y^-(-\infty, s) = 0, \quad Y_2(+\infty, s) = 0,$$

$$Y_1(l, s) + y^+(l, s) = Y_2(l, s),$$

$$\hat{G}(l-0, s) = \hat{G}(l+0, s);$$

для профилей, изображенных на рис.2 и 3

$$Y_1(-\infty, s) + y^-(-\infty, s) = 0, \quad Y_3(+\infty, s) = 0,$$

$$Y_1(l/2, s) + y^+(l/2, s) = Y_2(l/2, s), \quad Y_2(3l/2, s) = Y_3(3l/2, s),$$

$$\hat{G}(l/2 - 0, s) = \hat{G}(l/2 + 0, s), \quad \hat{G}(3l/2 - 0, s) = \hat{G}(3l/2 + 0, s).$$

2. Временные характеристики эволюции плотности вероятности

2.1. Приведем теперь метод определения характерного времени диффузии броуновских частиц в потенциальном профиле. Рассмотрим, например,

потенциальный профиль, изображенный на рис. 4. Пусть начальное распределение $W(x, 0)$ как-то расположено в районе точки $x = x_0$. С течением времени плотность вероятности будет расплываться по оси x . Выберем на этой оси некоторую граничную точку $x = L > x_0$ и найдем среднее время, за которое броуновские частицы пересекут эту границу в положительном направлении. Введем вероятность

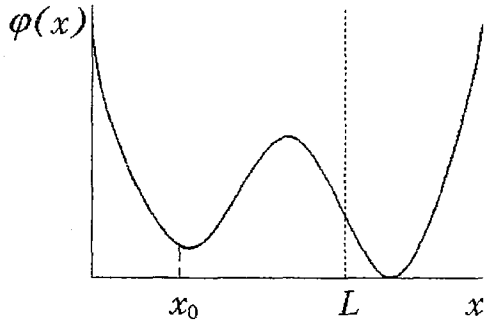


Рис. 4

$$P(t) = \int_{-\infty}^L W(x, t) dx,$$

которая уменьшается от $P(0)$ до $P(\infty)$

$$P(0) = \int_{-\infty}^L W(x, 0) dx, \quad P(\infty) = \int_{-\infty}^L W(x, \infty) dx = A \int_{-\infty}^L e^{-\varphi(x)} dx.$$

Согласно [6], характерное время эволюции вероятности равно

$$T = \frac{\int_0^{\infty} [P(t) - P(\infty)] dt}{P(0) - P(\infty)}. \quad (2.1)$$

Это определение работает, если изменение $P(t)$ происходит монотонно и достаточно быстро, так что интеграл в (2.1) сходится. В изображениях Лапласа это характерное время принимает вид [6]

$$T = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{s \hat{P}(s) - P(\infty)}{s [P(0) - P(\infty)]}, \quad \hat{P}(s) = \int_0^{\infty} P(t) e^{-st} dt. \quad (2.2)$$

Отыскание T , согласно (2.2), требует интегрирования решения уравнения (1.4) по координате, так как

$$\hat{P}(s) = \int_{-\infty}^L Y(x, s) dx.$$

Можно дать другой рецепт вычисления T согласно (2.2), не требующий указанного интегрирования, поскольку его можно провести заранее. Так, интегрируя исходное уравнение (1.1) по координате в указанных пределах, получим

$$\frac{dP(t)}{dt} = - \int_{-\infty}^L \frac{\partial G(x, t)}{\partial x} dx = - G(L, t) + G(-\infty, t).$$

Полагая, что $G(-\infty, t) = 0$ и совершая преобразование Лапласа, найдем

$$s\hat{P}(s) - \hat{P}(0) = - G(L, s) = \frac{1}{B} \left[\frac{d\varphi(x)}{dx} Y(x, s) + \frac{dY(x, s)}{dx} \right]_{x=L}$$

Подставляя это в (2.2), находим окончательно

$$T = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{[P(0) - P(\infty)] + \frac{1}{B} \left[\frac{d\varphi(x)}{dx} Y(x) + \frac{dY(x)}{dx} \right]_{x=L}}{s[P(0) - P(\infty)]}. \quad (2.3)$$

Заметим, что если $W(x, 0) = \delta(x - x_0)$, то $P(0) = 1$, поскольку $x_0 < L$.

Таким образом, для определения скорости стохастического перехода броуновских частиц через некоторую границу $x = L$ потенциального профиля, достаточно знать решение УФП «в Лапласе» $Y(x, s)$ и его производную $dY(x, s)/dx$ только в точке $x = L$.

Перейдем теперь к конкретным примерам.

3. Времена релаксации бистабильных систем

Рассмотрим три примера бистабильных систем, потенциальные профили которых изображены на рис. 1-3. Поскольку для всех этих профилей существуют ненулевые равновесные вероятностные распределения $W(x, \infty)$, то характерное время T , определяемое согласно (2.1), есть ни что иное, как время релаксации θ равновесного распределения в этих системах.

3.1. Первый пример. Рассмотрим бистабильную систему с острым потенциальным барьером, безразмерный потенциальный профиль которой изображен на рис. 1 и равен ($b > 0$)

$$\varphi(x) = \begin{cases} bx^2/2, & x \leq l \\ b(x - 2l)^2/2, & x \geq l \end{cases}$$

Высота потенциального барьера равна $\alpha = bl^2/2 = \Delta\Phi/(kT)$, $\Delta\Phi = \Phi(l)$. Начальная дельта-образная плотность вероятности расположена в точке $x_0 < l$. С течением времени в бистабильной системе установится стационарное бимодальное вероятностное распределение $W(x, \infty) = Ae^{-\varphi(x)}$ (1.2). Найдем время установления этого распределения - время релаксации, воспользовавшись формулой (2.3) и положив $L = l$. Как очевидно, $P(0) = 1$, $P(\infty) = 1/2$.

Вычисления показывают, что значение $Y_2(x, s)$, справедливое для $x \geq l$, равно

$$Y_2(x, s) = \frac{B \exp(bx_0^2/4 - b(x - 2l)^2/4) U(\sigma - 1/2, -b^{1/2}x_0) U(\sigma - 1/2, b^{1/2}(x - 2l))}{b^{1/2}2\sigma U(\sigma + 1/2, -(2\alpha)^{1/2}) U(\sigma - 1/2, -(2\alpha)^{1/2})},$$

где $\sigma = sB/b$, $B = 2iD$.

Вычисляя значение $\hat{G}(x, s)$ в точке $x = l + 0$, используя свойства функций Вебера [11], на основании (2.3) получим следующее точное значение времени релаксации рассматриваемой бистабильной системы, справедливое для любой высоты потенциального барьера

$$\theta = [2/(bD)][A((2\alpha)^{1/2}) - A(b^{1/2}x_0)]. \quad (3.1)$$

Здесь введена функция

$$A(z) = \int_0^z \exp(x^2/2) \left[\int_{-\infty}^x \exp(-t^2/2) dt \right] dx, \quad (3.2)$$

которую можно разложить на четное и нечетное слагаемые

$$A(z) = A^0(z) + A^1(z). \quad (3.3)$$

Для малых z

$$A^0(z) = \int_0^z \exp(x^2/2) \left[\int_0^x \exp(-t^2/2) dt \right] dx = z^2/2! + 2z^4/4! + 2 \cdot 4z^6/6! + \dots, \quad (3.4)$$

$$A^1(z) = (\pi/2)^{1/2} \int_0^z \exp(x^2/2) dx = (\pi/2)^{1/2} (z + z^3/3! + 3z^5/5! + 3 \cdot 5z^7/7! + \dots).$$

Асимптотический ряд при $z \gg 1$ для функций $A^0(z)$, $A^1(z)$ имеет следующий вид

$$A^0(z) = A^1(z) = [(\pi/2)^{1/2} \exp(z^2/2)/z][1 + 1/z^2 + 1 \cdot 3/z^4 + 1 \cdot 3 \cdot 5/z^6 + \dots]. \quad (3.5)$$

Для анализа времени релаксации ограничимся случаем $x_0 = 0$. Для низкого потенциального барьера ($(2\alpha)^{1/2} \ll 1$) из формул (3.1) - (3.4) следует

$$\theta = [2/(bD)][(\pi\alpha)^{1/2} + \alpha + \dots]. \quad (3.6)$$

Пусть интенсивность флуктуаций kT много больше размерной высоты барьера $\Delta\Phi$, которая, как и расстояние от начального минимума до барьера l , сохраняется постоянной. В этом случае формулу (3.6) удобно записать в виде

$$\theta = hl^2/(2\Delta\Phi) [(\pi\Delta\Phi/(kT))^{1/2} + \Delta\Phi/(kT) + \dots]. \quad (3.7)$$

Таким образом, при возрастании интенсивности флуктуаций время релаксации, как и должно быть, стремится к нулю.

В другом предельном случае высокого барьера, когда интенсивность тепловых флуктуаций мала ($(2\alpha)^{1/2} \gg 1$), используя формулу (3.5), из (3.1) находим

$$\theta = 2\pi^{1/2}/(bD\alpha^{1/2}) e^\alpha [1 + 1/(2\alpha) + \dots]. \quad (3.8)$$

Таким образом, при малой интенсивности флуктуаций

$$\theta = \pi^{1/2} hl^2/(2\Delta\Phi) (kT/\Delta\Phi)^{1/2} \exp(\Delta\Phi/(kT)). \quad (3.9)$$

Практически такой же профиль был рассмотрен Крамерсом [1]. В наших обозначениях результат Крамерса равен

$$\theta_{Kr} = 2\pi^{1/2} hl^2/(2\Delta\Phi) (kT/\Delta\Phi)^{1/2} \exp(\Delta\Phi/(kT)). \quad (3.10)$$

Отличие в численном коэффициенте этой формулы от (3.9) связано с тем, что Крамерс полагал, что в точке $x = 2l$ плотность вероятности равна нулю, то есть он фактически помещал в точку $x = 2l$ поглощающую границу. А в этом случае за

вершину барьера с течением времени должны выйти все частицы, тогда как в нашем случае бистабильной системы за барьер выйдет только половина частиц, после чего установится стационарное распределение, и именно поэтому в нашем случае время релаксации θ получается вдвое меньшим.

Заметим, что точный расчет времени жизни метастабильного состояния, получаемого из изображенного на рис. 1 при размещении в точке $x = 2l$ поглощающей границы, в точности подтверждает формулу Крамерса (3.10) для высокого барьера.

С другой стороны, формула Крамерса (3.10), если попытаться ее использовать для большой интенсивности тепловых флуктуаций, дает даже качественно неверный результат по сравнению с точной формулой (3.7). При $kT \rightarrow \infty$ формула (3.10) приводит к $\theta \rightarrow \infty$, в то время как согласно (3.7) $\theta \rightarrow 0$, что физически очевидно.

Отметим, наконец, что время релаксации для рассматриваемого профиля, полученное приближенно в работе [10] для высокого барьера методом разложения по собственным функциям, полностью совпадает с формулой (3.9).

3.2. Второй пример. Рассмотрим бистабильную систему с гладким барьером, безразмерный потенциальный профиль которой состоит из трех парабол одинаковой крутизны $b > 0$ (см.рис. 2),

$$\varphi(x) = \begin{cases} bx^2/2, & x \leq l/2, \\ -b(x-l)^2/2 + bl^2/4, & l/2 < x < 3l/2, \\ b(x-2l)^2/2, & x \geq 3l/2. \end{cases} \quad (3.11)$$

Безразмерная высота потенциального барьера равна $\alpha = bl^2/4$.

Для нахождения времени релаксации выберем граничную точку на вершине барьера ($L = l$). Решение уравнения (1.3) в области $l/2 < x < 3l/2$ имеет вид

$$Y_2(x, s) = \exp(b(x-l)^2/4) [A_2 U(\sigma+1/2, -b^{1/2}(x-l)) + C_2 U(\sigma+1/2, b^{1/2}(x-l))], \quad (3.12)$$

где $\sigma = sB/b$, $A_2 = Fp/(q^2 - p^2)$, $C_2 = Fq/(q^2 - p^2)$,

$$F = B/b^{1/2} U(\sigma - 1/2, -b^{1/2}x_0) \exp(bx_0^2/4 - \alpha/2),$$

$$p = U(\sigma-1/2, -\alpha^{1/2}) U(\sigma-1/2, \alpha^{1/2}) - \sigma U(\sigma+1/2, -\alpha^{1/2}) U(\sigma+1/2, \alpha^{1/2}),$$

$$q = \sigma U^2(\sigma+1/2, -\alpha^{1/2}) + U^2(\sigma-1/2, -\alpha^{1/2}).$$

Подставляя (3.12) в (2.3), можно получить следующее точное выражение для времени релаксации бистабильной системы с потенциальным профилем (3.11)

$$\theta = 2/(bD) \{ 2A^0(\alpha^{1/2}) + A^1(\alpha^{1/2}) - A(b^{1/2}x_0) + (\pi/2) e^\alpha \operatorname{erf}((\alpha/2)^{1/2}) [1 + \operatorname{erf}((\alpha/2)^{1/2})] \}. \quad (3.13)$$

Для высокого барьера ($\alpha > 3$) и $x_0 = 0$

$$\theta = 2\pi e^\alpha / (bD). \quad (3.14)$$

Подобный случай, когда профиль имеет гладкие параболические яму и барьер, также был рассмотрен Крамерсом [1]. В наших обозначениях формула Крамерса имеет вид

$$r_{Kr} = 4\pi e^\alpha / (bD)$$

Как и ранее, различие в два раза вызвано тем, что Крамерс помещал во втором минимуме ($x=2l$) поглощающую границу и рассматривал, фактически, метастабильное состояние, которое с течением времени должны покинуть все частицы.

Если потенциальный барьер рассматриваемой бистабильной системы низкий ($\alpha \ll 1$), то из (3.13) следует, что

$$\theta = 2/(bD) [(2\pi)^{1/2}\alpha^{1/2} + 2\alpha + \dots]. \quad (3.15)$$

Если размерная высота барьера $\Delta\Phi$, как и расстояние от минимума до вершины барьера l , сохраняются постоянными, в то время как изменяется лишь интенсивность тепловых флуктуаций, то из (3.15) следует

$$\theta = hl^2/(2\Delta\Phi) \{[\pi\Delta\Phi/(2kT)]^{1/2} + \Delta\Phi/(kT) + \dots\}.$$

3.3. Третий пример. Рассмотрим бистабильную систему, обладающую плоским потенциальным барьером (см.рис. 3)

$$\varphi(x) = \begin{cases} bx^2/2, & x \leq l/2, \\ bl^2/8, & l/2 < x < 3l/2, \\ b(x - 2l)^2/2, & x \geq 3l/2. \end{cases}$$

Как и в предыдущих случаях, выберем L на вершине барьера ($L = l$). Выполняя описанную выше процедуру, можно получить следующий точный результат для времени релаксации равновесного распределения в таком потенциальном профиле:

$$\theta = 2/(bD) \{A((2\alpha)^{1/2}) - A(b^{1/2}x_0) + \pi^{1/2}\alpha^{1/2} e^\alpha [1 + \operatorname{erf}(\alpha^{1/2})] + \alpha\},$$

Для высокого барьера ($\alpha > 3$) и $x_0 = 0$ время релаксации имеет следующий вид:

$$\theta = 2/(bD) 2\pi^{1/2}\alpha^{1/2} e^\alpha. \quad (3.16)$$

В случае низкого барьера нетрудно получить следующее асимптотическое разложение:

$$\theta = 2/(bD) [2\pi^{1/2}\alpha^{1/2} + 4\alpha + \dots]. \quad (3.17)$$

3.4. Анализ результатов. Проведем теперь общий сравнительный анализ полученных времен релаксации для трех рассмотренных примеров. Начнем со случая высокого барьера.

В соответствии с формулами (3.8), (3.14), (3.16) время релаксации для острого (sharp), гладкого (smooth) и плоского (flat) барьеров равно, соответственно,

$$\theta_{sh} = 2/(bD)\pi^{1/2}\alpha^{1/2}e^\alpha, \quad \theta_{sm} = 2/(bD)\pi e^\alpha, \quad \theta_{fl} = 2/(bD)2\pi^{1/2}\alpha^{1/2}e^\alpha. \quad (3.18)$$

В этих формулах естественно выделяется фактор Крамерса e^α , дающий основной вклад высокого потенциального барьера в значение времени релаксации. Префактор отражает зависимость времени релаксации от конкретной формы потенциальной ямы и потенциального барьера.

Примечательно, что множитель $\alpha^{1/2}$ не входит в «среднюю» формулу (3.18) и совершенно по-разному входит в «крайние» значения θ . Причиной этого, по нашему мнению, является то, что гладкий барьер, будучи параболическим, представляет, фактически, линейную систему, описываемую линейным исходным уравнением Ланжевена, в то время как «крайние» барьеры описываются нелинейным уравнением Ланжевена, причем у них нелинейности «обратные» по отношению к чисто параболическому барьеру: один более крутой чем парабола, другой более пологий. Заметим, что аналогичная ситуация имеет место и для времени установления равновесного распределения в моностабильных системах. Так, время релаксации стационарного вероятностного распределения в линейной системе (параболический потенциальный профиль) не зависит от интенсивности воздействующего шума D , которая, однако, существенно влияет на время релаксации нелинейных моностабильных систем, причем качественно по-разному в зависимости от того, является ли потенциальный профиль нелинейной системы более крутым чем парабола или более пологим, [12, гл. 15].

Для низких потенциальных барьеров ($\alpha \ll 1$) времена релаксации в соответствии с формулами (3.6), (3.15), (3.17) имеют следующий вид:

$$\theta_{sh}=2/(bD)[\pi^{1/2}\alpha^{1/2}+\alpha+...], \theta_{sm}=2/(bD)[(2\pi)^{1/2}\alpha^{1/2}+2\alpha+...], \theta_{pl}=2/(bD)[2\pi^{1/2}\alpha^{1/2}+4\alpha+...].$$

Легко видеть, что разница между этими значениями времен релаксации только численная. Она легко может быть объяснена, если принять во внимание различную ширину потенциальных барьеров как расстояния от минимумов потенциальных ям до вершин потенциальных барьеров w . Если мы зафиксируем ширину барьеров $w_{sh} = w_{sm} = w_{pl} = w = l$, предполагая различными высоты барьеров $\alpha_{sh} = bl^2/2$, $\alpha_{sm} = bl^2/4$, $\alpha_{pl} = bl^2/8$, то времена релаксации для всех трех случаев низкого барьера станут одинаковыми

$$\theta = 2/(bD)[\pi^{1/2}b^{1/2}w/2^{1/2} + bw^2/2 + ...].$$

Таким образом, в случае малой высоты барьера основной вклад во время релаксации дает именно ширина барьера, а форма не играет заметной роли. Лишь по мере возрастания высоты барьера начинает сказываться его форма.

Заключение

На основании вышеизложенного могут быть сформулированы следующие общие замечания о зависимости $\theta = \theta(\alpha)$ - времени релаксации бистабильных кусочно-параболических систем от безразмерной высоты потенциального барьера.

1. Множитель Крамерса e^α появляется в $\theta(\alpha)$ только для высокого барьера, когда $e^\alpha \gg 1$.

2. При низком потенциальном барьере ($\alpha \ll 1$) время релаксации зависит главным образом от ширины барьера.

3. Непараболичность высокого потенциального барьера отражается на отклонении $\theta(\alpha)$ от закона Крамерса $\theta \sim e^\alpha$. По характеру отклонения можно судить о форме потенциального барьера.

4. Для высоких потенциальных барьеров в префакторах могут быть выделены множители, отвечающие за форму потенциальной ямы, за форму потенциального барьера и за ширину барьера. Так, множитель $2/(bD)$, одинаковый для всех трех префакторов в (3.18), есть время релаксации в моностабильной параболической потенциальной яме*: $\varphi(x)=bx^2/2$, $-\infty < x < \infty$. Множители $\pi^{1/2}/\alpha^{1/2}$, $\pi/2^{1/2}$ и $\pi^{1/2}\alpha^{1/2}$ отражают влияние формы потенциальных барьеров, а множители 1, $2^{1/2}$ и 2 связаны с различной шириной барьеров.

Авторы выражают благодарность Н.В. Агудову за интерес к работе и ценные замечания.

Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 94-02-04698-а).

Библиографический список

1. *Kramers H.* Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions // *Physica*. 1940. Vol.7. P. 284.
2. *Hänggi P. Talkner P., Borkovec M.* Reaction-rate theory: fifty years after Kramers // *Rev.Mod.Phys.* 1990. Vol.62. P. 251.
3. *Risken H.* The Fokker - Planck Equation. Berlin: Springer-Verlag, 1989.
4. *Малахов А.Н.* Диффузия через резкие потенциальные барьеры 1. Точное решение // *Изв. вузов. Радиофизика*. 1991. Т. 34, № 5. С. 536.

* Рассматривая размерный параболический потенциальный профиль $\Phi(x) = ax^2/2$, легко убедиться, что, как должно быть для линейной системы, время релаксации $2/bD = \hbar/a$ не зависит от интенсивности воздействующего шума.

5. Малахов А.Н. Диффузия через резкие потенциальные барьеры 2. Временные характеристики диффузии // Изв. вузов. Радиофизика. 1991. Т. 34, № 6. С. 681.

6. Агудов Н.В. Малахов А.Н. Нестационарная диффузия через произвольный кусочно-линейный потенциальный профиль. Точное решение и временные характеристики // Изв. вузов. Радиофизика. 1993. Т. 36, № 2. С.148.

7. Blomberg C. The Brownian motion theory of chemical transition rates // Physica(Utrecht) A. 1977. Vol. 86. P. 49.

8. Edholm O., Leimar O. The accuracy of Kramers' theory of chemical kinetics // Physica A. 1979. Vol. 98. P. 313.

9. Larson R.S., Kostin M.D. Kramers' theory of chemical kinetics: Eigenvalue and eigenfunction analysis // Journ. Chem. Phys. 1978. Vol. 69, № 11. P. 4821.

10. Larson R.S. Thermally activated crossing of a sharp potential barrier // Journ. Chem. Phys. 1984. Vol. 81, № 4. P. 1731.

11. Miller J.C.P. Tables of Weber parabolic cylinder functions. London, Her Majesty's Stationery Office, 1955.

12. Малахов А.Н. Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований. М.: Сов. Радио, 1978.

Нижегородский государственный
университет

Поступила в редакцию 12.11.94

TEMPORAL SCALES OF STOCHASTIC TRANSITIONS IN THE PIECEWISE-PARABOLIC BISTABLE SYSTEMS WITH NOISE

A.N. Malakhov, A.L.Pankratov

The kinetics of stochastic transitions from one stable state to another in bistable systems with noise which are described by piecewise-parabolic potential profiles is considered. Using the method of the Laplace transform of the initial Fokker - Planck equation it has obtained the exact values of the mean transition times (i.e. relaxation times) of Brownian particles across the potential barriers, which separate the stable states. For the three concrete piecewise-parabolic profiles it has been made a comparative analysis of the obtained results with the well-known approximate Kramers' results. The influence of the shape and width of the potential barriers on the relaxation times is analyzed. There are found the factors of the relaxation time structure, which represent the shape of stable state and the shape, height and width of a potential barrier.



Малахов Аскольд Николаевич - родился в 1926 году, доктор физико-математических наук, заслуженный деятель науки РФ, профессор кафедры статистической радиофизики Нижегородского государственного университета. Область научных интересов: шумы и флуктуации в динамических системах и средах; теория негауссовых случайных процессов; случайные волны; броуновское движение в нелинейных системах. Общее число публикаций в отечественных и иностранных журналах около 200, из них 4 монографии в центральных издательствах (одна за рубежом).



Панкратов Андрей Леонидович - родился в 1971 году в Горьком, окончил радиофизический факультет Нижегородского государственного университета (1993). Аспирант кафедры статистической радиофизики ННГУ. Область научных интересов: шумы и флуктуации в динамических системах, броуновское движение в нелинейных системах.