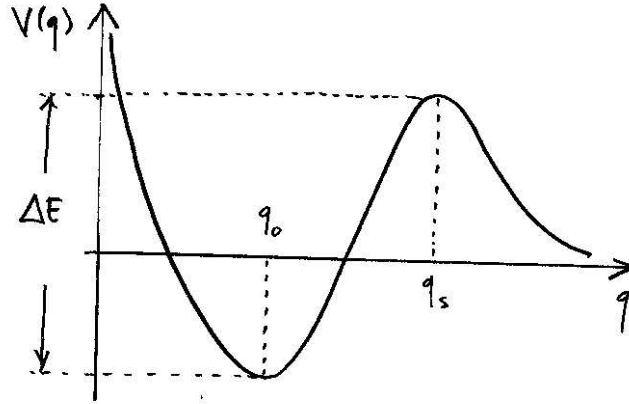


Exercices du 22/01/2004

Série 8



Considérez le potentiel en figure. Le but de l'exercice est calculer la probabilité par unité du temps k (*rate*) pour des transitions du bassin d'attraction de l'état meta-stable ($0 < q < q_0$) avec un formalisme d'équilibre (transition rate theory). Dans ce formalisme, on peut écrire

$$k = \langle \mathcal{J}(q, \dot{q}) \rangle_T \quad , \quad (1)$$

où $\mathcal{J}(q, \dot{q})$ est un courant appropriée et $\langle \dots \rangle_T$ est la moyenne sur l'ensemble d'équilibre canonique (mesure de Gibbs), et q est la coordonnée de réaction (reaction coordinate).

On peut démontrer en général que, pour le cas 1D en figure,

$$\mathcal{J}(q, \dot{q}) = \frac{\dot{q} \Theta(\dot{q}) \delta(q - q_s)}{\langle \Theta(q_s - q) \rangle_T} \quad , \quad (2)$$

où $\Theta(x)$ et $\delta(x)$ sont les fonctionnes de Heaviside e de Dirac, respectivement, et $\langle \Theta(q_s - q) \rangle_T$ joue le rôle d'un facteur de normalisation.

Discutez les expressions 1 et 2 et calculez k dans le deux cas suivantes

- Échappée d'un minimum en 1D ($q = x$)

$$\langle \mathcal{J}(q, \dot{q}) \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \int \mathcal{J}(q, \dot{q}) e^{-\beta \mathcal{H}(q, \dot{q})} dq d\dot{q}$$

- Dissociation d'une molecule bi-atomique en 3D ($q = r = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$)

$$\langle \mathcal{J}(\vec{x}_1, \vec{x}_1, \dot{\vec{x}}_1, \dot{\vec{x}}_2) \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \int \mathcal{J}(\vec{x}_1, \vec{x}_1, \dot{\vec{x}}_1, \dot{\vec{x}}_2) e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{x}_1, \vec{x}_1, \dot{\vec{x}}_1, \dot{\vec{x}}_2)} d\vec{x}_1 d\vec{x}_1 d\dot{\vec{x}}_1 d\dot{\vec{x}}_2$$