

$$= n dt \frac{\int \exp(-\Phi/k_B T) dy dz dQ \int_0^\infty \frac{p_x}{M} \exp(-p_x^2/2Mk_B T) dp_x}{\int \exp(-\Phi/k_B T) d\tau_r dQ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-p_x^2/2Mk_B T) dp_x}. \quad (2.76)$$

Определим теперь среднюю потенциальную энергию $V(x)$ посредством равенства

$$\exp[-V(x)/k_B T] = \int \exp[-\Phi(x \dots)/k_B T] dy dz dQ \quad (2.77)$$

и, следовательно, получим для вероятности w

$$w = \frac{\exp[-V(x')/k_B T] \int_0^\infty \frac{p_x}{M} \exp(-p_x^2/2Mk_B T) dp_x}{\frac{1}{N} \int \exp[-V(x)/k_B T] dx \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-p_x^2/2Mk_B T) dp_x}. \quad (2.78)$$

Функция $V(x)$ периодична с периодом, равным расстоянию между ямами a . Интеграл по x в (2.78) является, следовательно, интегралом по отрезку от x_0 до x_1 , взятым N раз. Если высота потенциального барьера между x_0 и x_1 велика по сравнению с $k_B T$, можно заменить $V(x)$ в интеграле первыми двумя членами разложения в ряд Тейлора: $V(x) = V(x_0) + (K/2)(x - x_0)^2$. Интегрирование тогда легко выполняется. Второе отношение в (2.78) есть средняя скорость $\bar{v}$, которая после вычисления интеграла приводится к виду $(k_B T/2\pi M)^{1/2}$. Собирая все вместе, получаем

$$w = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{M}} \exp(-\Delta V/k_B T), \quad \Delta V = V(x') - V(x_0). \quad (2.79)$$

Это равенство можно упростить, заметив, что коэффициент перед экспонентой является частотой колебаний дефекта внедрения вдоль оси x в потенциальной яме: $V(x) = V(x_0) + (K/2)(x - x_0)^2$. Обозначив эту частоту через ν , получаем окончательно для вероятности перескока:

$$w = \nu \exp(-\Delta V/k_B T). \quad (2.80)$$

В равновесном состоянии в каждом направлении имеет место одинаковое число переходов. Под действием *постоянного электрического поля* дефекты внедрения движутся (если они заряжены) по *) направлению поля. Подвижность можно получить, если предположить, что электрическое поле меняет только высоту потен-

*) Или, соответственно, против. (Примеч. пер.)