

ТОЧНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ В ТЕОРИИ БРОУНОВСКИХ МОТОРОВ И НАСОСОВ

Т.Е. Корочкова, Н.Г. Шкода, А.А. Чернова, В.М. Розенбаум

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйка Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, taiscrust@mail.ru*

Рассмотрена диффузионная динамика броуновской частицы, потенциальная энергия которой в силовом поле окружающей среды претерпевает дихотомные флуктуации между двумя потенциальными рельефами, представляющими собой кусочно-линейные функции. Показано, что если на каком-то интервале изменения этих функций наклоны линейных участков равны или противоположны по знаку, то общее решение системы дифференциальных уравнений, описывающих диффузионную динамику, записывается в простой аналитической форме. Это обстоятельство позволяет получить для средней скорости направленного движения частицы, возникающего вследствие флуктуаций потенциальной энергии, ряд точных решений в следующих ситуациях: броуновский мотор с предельно асимметричным пилообразным потенциалом, флуктуирующим на полпериода, броуновский насос с двумя линейными участками потенциала, флуктуирующими по знаку, и возвратно-поступательный мотор с V-образным потенциальным профилем, претерпевающим сдвиговые флуктуации. Получены закономерности зависимости средней скорости наночастицы от температуры и частоты флуктуаций потенциала в перечисленных ситуациях.

Введение

Фундаментальной проблемой создания микромеханических систем на наноуровне является превращение различных типов энергии (тепловой, химических реакций, электромагнитного взаимодействия и др.) в энергию направленного движения частиц вдоль границы раздела фаз [1, 2]. Проблема представляет интерес для объяснения механизмов возникновения направленного движения в биологических системах (так называемых молекулярных моторов [3, 4] и ионных насосов [5]). Известно, что неравновесные флуктуации, генерируемые извне или химическими реакциями, протекающими в условиях, далеких от равновесия (с нарушением условия детального баланса), могут вызывать дрейф броуновских частиц в анизотропной среде в отсутствие макроскопических сил и градиентов температур. Кроме того, развитие теории таких наноустройств требуется для разработки искусственных молекулярных [6] и наноразмерных [7] механизмов, движением которых можно управлять путем подвода к ним энергии и информации.

Возникновение направленного движения возможно только в тех системах, в которых присутствует пространственная асимметрия. Для сложных многочастичных систем такая асимметрия может быть обусловлена наличием на поверхности, вдоль которой движется молекулярный мотор, малых неупорядоченных областей (например, замороженных дефектов или участков с нарушенной периодичностью [8, 9]). Учет межчастичных взаимодействий также вносит асимметрию в систему вследствие динамической конкуренции между внутренними длинами движущегося объекта и подложки [10]. При низких концентрациях движущихся частиц, когда взаимодействиями между ними можно пренебречь или же когда рассматривается движение центра масс ансамбля частиц в эффективном потенциале, вполне оправданно использование одночастичного приближения. Оно существенно упрощает классификацию механизмов направленного движения.

В рамках одночастичного описания существует два основных класса броуновских моторов, отличающиеся характером неравновесных флуктуаций. Первый класс предполагает флуктуации приложенной силы, которая в сочетании со стационарным периодическим потенциальным рельефом вызывает направленное движение частиц при наличии временной асимметрии флуктуаций и/или асимметрии потенциального рельефа [11–13]. Конкуренция пространственной и временной асимметрии, а также наличие других факторов (например, постоянной силы) приводит к возникновению точек остановки мотора, при прохождении через которые скорость изменяет знак. Это явление широко используется для сегрегации наночастиц [1, 2]. Численное моделирование точек остановки, выполненное в адиабатическом пределе флуктуаций приложенной силы, широко представлено в литературе [14, 15].

Второй класс моторов функционирует за счет флуктуаций самого периодического потенциального рельефа при условии, что он пространственно асимметричен [16–18]. Для этого класса моторов обычно рассматривался случай симметричных дихотомных флуктуаций потенциала, в котором точки остановки отсутствуют. Характеристики движения двух упомянутых классов моторов различаются вследствие того, что в первом из них отсутствует периодичность полной потенциальной энергии, а во втором она сохраняется. В случае направленного вращательного движения различия между двумя классами исчезают благодаря периодичности угловой координаты [19].

Наряду с распространенными моделями броуновских моторов, эффективно функционирующих при низких температурах, существует множество систем (в частности дипольные фотомоторы [20]), в которых отношение амплитуды пространственного изменения потенциальной энергии к тепловой энергии является малым параметром. Для таких систем возможно низкоэнергетическое разложение уравнения Смолуховского с зависящей от времени и периодической по координате потенциальной энергией; получаемое в результате аналитическое решение позволяет исследовать особенности действия моторов с детерминистическими и стохастическими флуктуациями потенциальной энергии в широком интервале флуктуационных частот [21].

Несмотря на обилие приближенных методов описания броуновских моторов, точные аналитические решения модельных систем играют фундаментальную роль в описании рассматриваемых процессов, поскольку позволяют изучать поведение системы в широкой области параметров и устанавливать закономерности, которые сложно выявить из численных зависимостей, полученных при заданных значениях параметров. В задачах диффузионной динамики, описывающих направленное движение наночастиц вследствие дихотомных флуктуаций потенциального рельефа, соответствующие дифференциальные уравнения сводятся к системе алгебраических уравнений в случае потенциальных рельефов, описываемых кусочно-линейными функциями [16, 17]. Тогда решение этих систем уравнений производится методом трансфер-матриц, которые позволяют сшивать решения, полученные на каждом участке линейного изменения потенциальных профилей [22, 23]. Итоговые соотношения для характеристик движения наночастицы являются точными, однако зависят от корней кубических уравнений, явная запись выражений которых очень громоздкая. В результате, искомое точное решение задачи нельзя отнести к аналитическим, так как оно может быть получено в результате численных операций с трансфер-матрицами и корнями кубических уравнений.

Ситуация существенно упрощается, если на периоде изменения потенциальной энергии имеется не более двух участков, описываемых линейными функциями, и коэффициенты наклона этих функций в двух состояниях, претерпевающих переходы с одинаковыми константами скоростей переходов, равны или противоположны по знаку. Первый случай реализуется для броуновских моторов, функционирующих за счет дихотомных сдвигов предельно пилообразного потенциала на полпериода [22] (рис. 1).

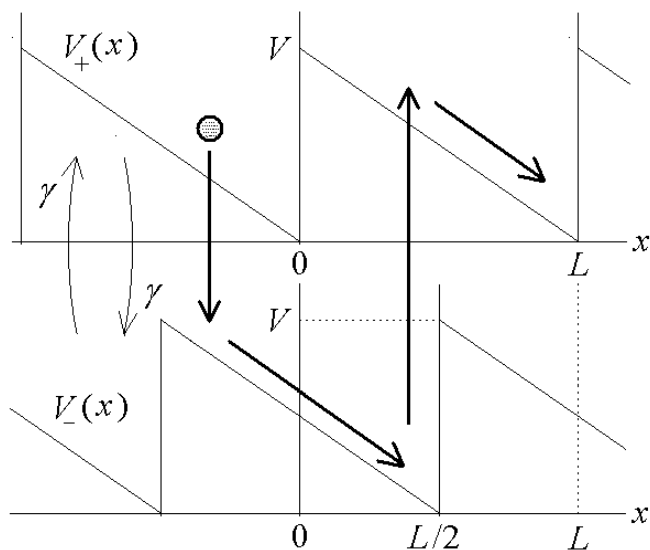


Рис. 1. Схема возникновения направленного движения в модели броуновского мотора со сдвигающимися предельно асимметричными потенциалами.

Второй случай не представляет интереса для броуновских моторов, поскольку флуктуации знака потенциальной энергии не приводят к направленному движению [23]. С другой стороны, броуновский насос, модель которого изображена на рис. 2, способен перекачивать частицы между областями $x < 0$ и $x > 0$ за счет флуктуаций знака внутримембранного потенциала с одинаковыми частотами γ в области $0 < x < L$.

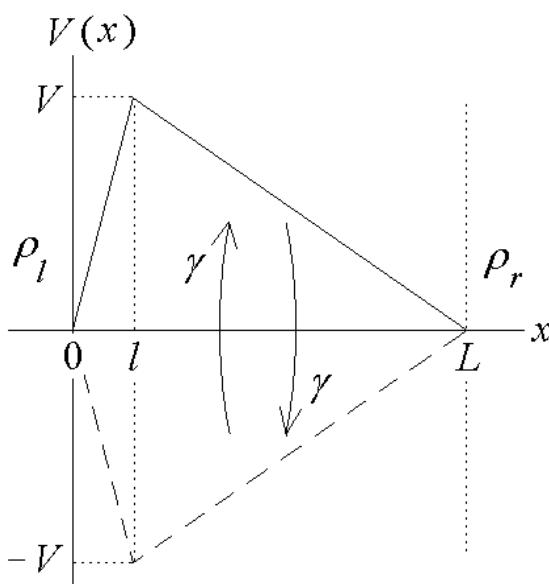


Рис. 2. Модель броуновского насоса, в которой флуктуирующие два пилообразных потенциала отличаются знаком.

Параметрами этой модели являются концентрации частиц слева, (ρ_l) , и справа, (ρ_r) , от мембраны, отношение максимума потенциальной энергии к тепловой энергии, $v = V/k_B T$, длины участков линейного изменения потенциальных профилей, l и $L-l$, а также характерная обратная длина, $\lambda = \sqrt{2\gamma/D}$, связанная с частотой переключения потенциальных профилей γ и коэффициентом диффузии $D = k_B T/\zeta$ (ζ – коэффициент

трения). Подобная модель броуновского насоса, в которой одно из состояний соответствовало нулевому потенциалу, рассматривалась в работе [24].

Интересная возможность использования явных общих решений системы дифференциальных уравнений для кусочно-линейных потенциалов с равными или противоположными по знаку наклонами возникает, если интересоваться возвратно-поступательным движением броуновской частицы, схема возникновения которого представлена на рис. 3.

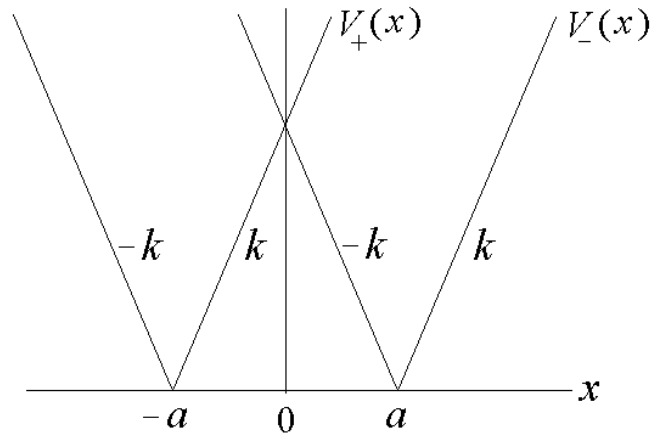


Рис. 3. Схема работы возвратно-поступательного броуновского мотора.

Здесь флуктуационные сдвиги V-образного потенциала на расстояние $2a$ приводят к тому, что на участках $x < -a$ и $x > a$ наклоны линейных участков одинаковы ($-k$ и k соответственно), а на внутреннем участке $-a < x < a$ наклоны флуктуируют по знаку ($\pm k$). Общая модель возвратно-поступательного мотора с произвольным видом сдвигающегося потенциального профиля рассматривалась в работах [25–27].

В данной статье приводятся основные уравнения, описывающие функции распределения броуновской частицы в двух состояниях с различными потенциальными рельефами, а также их решение для участка потенциального рельефа, характеризующегося линейными функциями с одинаковыми и противоположными по знаку наклонами. Эти решения используются для нахождения средней скорости движения броуновской частицы для предельно асимметричного пилообразного потенциала, который в случае броуновского мотора флуктуирует на полпериода, а для броуновского насоса флуктуирует по знаку. Также выводится точное аналитическое выражение для потока частиц, накачиваемых броуновским насосом за счет дихотомных флуктуаций потенциала с двумя линейными участками. Средняя скорость возвратно-поступательного движения при сдвиговых флуктуациях V-образного потенциала рассчитывается в предпоследнем разделе. Статью завершает раздел, в котором обсуждаются свойства рассмотренных моделей и формулируются выводы проведенного исследования.

Основные уравнения

Функции распределения $\rho_{\pm}(x,t)$ пребывания броуновской частицы в двух состояниях с потенциальными рельефами $U_+(x)$ и $U_-(x)$ удовлетворяют уравнениям Смолуховского с дополнительными слагаемыми $r(x,t)$, описывающими скорости вероятностей перехода частицы между этими состояниями [3, 4]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\pm}(x,t) &= -\frac{\partial}{\partial x}J_{\pm}(x,t) \mp r(x,t), \quad r(x,t) = [\gamma_+\rho_+(x,t) - \gamma_-\rho_-(x,t)], \\ J_{\pm}(x,t) &= -De^{-\beta U_{\pm}(x)} \frac{\partial}{\partial x} [e^{\beta U_{\pm}(x)} \rho_{\pm}(x,t)].\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь $D = k_B T / \zeta$ – коэффициент диффузии (ζ – коэффициент трения), $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура. Для стационарных процессов ($\partial \rho_{\pm}(x,t) / \partial t = 0$) полный поток частиц $J(x) = J_+(x) + J_-(x)$ через произвольное поперечное сечение x определяется суммой потоков $J_{\pm}(x)$ и не зависит от x . Именно этот поток $J \equiv J(x)$ является искомой характеристикой броуновских моторов и насосов. Для возвратно-поступательного мотора полный поток частиц отсутствует ($J = 0$), а искомой величиной является средняя скорость возвратно-поступательного движения, определяющаяся выражением: $v = \int_{-\infty}^{\infty} J_+(x) dx$ [6–8].

Перейдем от переменных $\rho_+(x)$ и $\rho_-(x)$ к новым переменным $\rho(x) = \rho_+(x) + \rho_-(x)$ и $r(x)$. Введем также новые энергетические функции $u(x)$ и $w(x)$, описывающие средний потенциальный рельеф и его флуктуации: $U_{\pm}(x) = u(x) \pm w(x)$. Тогда система уравнений (1) примет вид:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} \Delta J(x) &= -2r(x), \quad \Delta J(x) = -2D(\gamma_+ + \gamma_-)^{-1} [r'(x) + \beta u'(x)r(x)] - \\ &\quad - \varepsilon D[\rho'(x) + \beta u'(x)\rho(x)] - D\beta w'(x)\rho(x), \\ J &= -D[\rho'(x) + \beta u'(x)\rho(x)] - \varepsilon D\beta w'(x)\rho(x) - 2D(\gamma_+ + \gamma_-)^{-1} \beta w'(x)r(x),\end{aligned}\quad (2)$$

где $\Delta J(x) \equiv J_+(x) - J_-(x)$ и $\varepsilon \equiv (\gamma_- - \gamma_+) / (\gamma_- + \gamma_+)$. Эта система уравнений должна быть дополнена граничными условиями, соответствующими той или иной постановке задачи.

Обратим внимание, что если имеется участок потенциальных рельефов, описываемых линейной функцией с наклонами $\pm k$, то общее решение системы уравнений (2) можно искать в виде функций, пропорциональных $\exp(\kappa x)$, в которых одно из четырех значений параметра κ равно нулю, а три других удовлетворяют характеристическому уравнению третьей степени [4]:

$$\kappa^3 + (\tilde{k}_+ + \tilde{k}_-)\kappa^2 + (\tilde{k}_+ \tilde{k}_- - \tilde{\gamma}_+ - \tilde{\gamma}_-)\kappa - (\tilde{\gamma}_- \tilde{k}_+ + \tilde{\gamma}_+ \tilde{k}_-) = 0, \quad (3)$$

где $\tilde{k}_{\pm} = k_{\pm} L / k_B T$, $\tilde{\gamma}_{\pm} = \gamma_{\pm} L^2 / D$. Корни кубического уравнения (3) можно рассчитать по формулам Кардано и подставить в общее решение системы уравнений (2). Такая численная процедура как раз и заложена в метод трансфер-матрицы, использованный в [3, 4] для расчетов характеристик броуновских моторов. В случае одинаковых наклонов линейных участков флуктуирующих потенциалов, когда $\tilde{k}_+ = \tilde{k}_- \equiv \tilde{k}$, корни уравнения (3) принимают вид:

$$\kappa_1 = -\tilde{k}, \quad \kappa_{2,3} = \frac{1}{2} \left[-\tilde{k} \pm \sqrt{\tilde{k}^2 + 4(\tilde{\gamma}_+ + \tilde{\gamma}_-)} \right]. \quad (4)$$

В случае одинаковых наклонов линейных участков флуктуирующих потенциалов, когда $\tilde{k}_+ = \tilde{k}_- \equiv \tilde{k}$, корни уравнения (3) принимают простой вид только в случае симметричных флуктуаций $\tilde{\gamma}_+ = \tilde{\gamma}_- \equiv \tilde{\gamma}$ ($\varepsilon = 0$):

$$\kappa_1 = 0, \quad \kappa_{2,3} = \pm \sqrt{\tilde{k}^2 + 2\tilde{\gamma}}. \quad (5)$$

В последующих двух разделах общие решение системы уравнений (2) будут выведены для частных случаев, соответствующих найденным корням (4) и (5).

Одинаковые наклоны линейных участков флуктуирующих потенциалов

Рассмотрим участок, на котором $w(x) = 0$ и производная по координате u' не зависит от x . В случае симметричных флуктуаций $\varepsilon = 0$, согласно формуле (2),

$$J = -D[\rho'(x) + \beta u' \rho(x)], \quad \Delta J(x) = -\frac{2}{\lambda^2} [r'(x) + \beta u' r(x)], \quad (6)$$

и потоки зависят от разных переменных. Поскольку $J = \text{const}$, то функция $\rho(x)$ легко находится из первого уравнения

$$\rho(x) = C_0 e^{-\beta u' x} - J / \beta D u'. \quad (7)$$

Выражение (2) для потока $\Delta J(x)$ дает следующее уравнение для $r(x)$:

$$r''(x) + \beta u' r'(x) - \lambda^2 r(x) = 0, \quad (8)$$

общее решение которого имеет вид:

$$r(x) = e^{-\beta u' x / 2} (C_1 e^{-\mu x / 2} + C_2 e^{\mu x / 2}), \quad \mu \equiv \sqrt{\beta^2 u'^2 + 4\lambda^2}. \quad (9)$$

Заметим, что показатели экспонент в выражениях (7) и (9) соответствуют корням (4) характеристического уравнения (3) при условии симметрии дихотомных флуктуаций $\tilde{\gamma}_+ = \tilde{\gamma}_- \equiv \tilde{\gamma}$ ($\varepsilon = 0$).

Воспользуемся представленными соотношениями для расчета полного потока J броуновского мотора с флуктуациями предельно асимметричного потенциала на полпериода (рис. 1). Общие решения (7) и (9) содержат четыре произвольные постоянные J , C_0 , C_1 и C_2 , которые должны быть определены следующим образом. Функция распределения $\rho_+(x)$ должна претерпевать скачок в точке $x = 0$ и быть непрерывной в точке $x = L/2$:

$$\rho_+(0 + \delta) = \rho_+(0 - \delta) e^{-\beta V}, \quad \rho_+(L/2 + \delta) = \rho_+(L/2 - \delta), \quad \delta \rightarrow 0. \quad (10)$$

Используя симметрию задачи, приводящую к свойству $\rho_-(x + L/2) = \rho_+(x)$, и ограничиваясь рассмотрением интервала $0 \leq x < L/2$, имеем:

$$\rho_+(0) = \rho_-(L/2) e^{-\beta V}, \quad \rho_-(0) = \rho_+(L/2). \quad (11)$$

Переходя к функциям $\rho(x)$ и $r(x)$ в (11), получаем два уравнения на константы J , C_0 , C_1 и C_2 . Третье уравнение на эти константы получается из условия непрерывности

потоков. Поскольку $J_-(x+L/2) = J_+(x)$, а сумма потоков в любой точке равна J и постоянна, то

$$\Delta J(L/2) = -\Delta J(0). \quad (12)$$

Четвертым уравнением является условие нормировки

$$\int_0^L \rho(x) dx = 2 \int_0^{L/2} \rho(x) dx = 1. \quad (13)$$

В результате решения системы четырех уравнений (11)–(13) относительно четырех констант J , C_0 , C_1 и C_2 приходим к следующему выражению для искомого потока:

$$\begin{aligned} J &= \frac{D}{L^2} \frac{A}{2(Z_1 B - Z_2 A)}, \\ A &= (\Psi_0 e^{\beta V/2} - \Psi_{L/2}) (\cosh \beta V/2 - 1), \quad B = \Psi_0 e^{\beta V/2} \cosh \beta V/2 + \Psi_{L/2}, \\ Z_1 &= \frac{4}{(\beta V)^2} \sinh^2(\beta V/4), \quad Z_2 = \frac{1}{(\beta V)^2} (e^{\beta V/2} - \beta V/2 - 1), \\ \Psi_{0, L/2} &= \frac{1}{2 \sinh \Delta} \left[(e^{\mp \beta V/4} + \cosh \Delta) \Delta \mp \beta V \sinh \Delta \right], \\ \Delta &= \frac{1}{4} \sqrt{(\beta V)^2 + 8\gamma L^2 / D}. \end{aligned} \quad (14)$$

которое было получено в работе [3] другим методом. В той же работе был дан подробный анализ полученных соотношений, на котором мы здесь останавливаться не будем.

Противоположные по знаку наклоны линейных участков потенциалов

Рассмотрим участок $a < x < b$, на котором $u(x) = 0$, а $w(x) = w(a) + w'(x-a)$, где производная по координате $w' \equiv [w(b) - w(a)] / (b-a)$ не зависит от x . В случае симметричных флуктуаций $\varepsilon = 0$ выражение в (2) для полного потока J позволяет представить его через интеграл от функции $r(x)$:

$$J = -D \frac{\rho(b) - \rho(a)}{b-a} - \frac{2\beta w'}{\lambda^2 (b-a)} \int_a^b dx r(x) \quad (15)$$

и выразить производную $\rho'(x)$ через функцию $r(x)$:

$$\rho'(x) = -D^{-1} \left[2\lambda^{-2} \beta w' r(x) + J \right], \quad (16)$$

где введена характерная обратная длина $\lambda = \sqrt{2\gamma_{\pm} / D}$. Подставляя выражение (16) в уравнение для $\Delta J(x)$, содержащееся в системе уравнений (2), получаем неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка для $r(x)$:

$$r''(x) - \tilde{\lambda}^2 r(x) = 2^{-1} \lambda^2 \beta w' J, \quad (17)$$

где $\tilde{\lambda}^2 \equiv \lambda^2 + \beta^2 w'^2$. Общее решение этого уравнения имеет вид:

$$r(x) = C_1 e^{\tilde{\lambda}x} + C_2 e^{-\tilde{\lambda}x} + A, \quad A \equiv -\frac{\beta w' \lambda^2}{2 \tilde{\lambda}^2} J, \quad (18)$$

где C_1 и C_2 – произвольные постоянные, определяющиеся граничными условиями. Заметим, что показатели экспонент в выражении (18) соответствуют корням (5) характеристического уравнения (3). Если считать граничные значения $r(a)$ и $r(b)$ заданными, то

$$C_1 = \frac{r(b)e^{-\tilde{\lambda}a} - r(a)e^{-\tilde{\lambda}b} + A(e^{-\tilde{\lambda}b} - e^{-\tilde{\lambda}a})}{2 \sinh \tilde{\lambda}(b-a)}, \quad C_2 = \frac{-r(b)e^{\tilde{\lambda}a} + r(a)e^{\tilde{\lambda}b} - A(e^{\tilde{\lambda}b} - e^{\tilde{\lambda}a})}{2 \sinh \tilde{\lambda}(b-a)}. \quad (19)$$

Тогда, если считать также заданными значения $\rho(a)$ и $\rho(b)$, получаем следующие выражения для потоков:

$$J = -\frac{\tilde{\lambda}^2}{\lambda^2 + \beta^2 w'^2 \varphi_{b-a}} \left[D \frac{\rho(b) - \rho(a)}{b-a} + \frac{\beta w' \varphi_{b-a}}{\lambda^2} (r(a) + r(b)) \right],$$

$$\Delta J(a) = \frac{2\tilde{\lambda}}{\lambda^2} r(a) \coth \tilde{\lambda}(b-a) - \frac{2\tilde{\lambda}}{\lambda^2 \sinh \tilde{\lambda}(b-a)} r(b) + \frac{1}{2} \beta w' \varphi_{b-a} (b-a) J - D \beta w' \rho(a), \quad (20)$$

$$\Delta J(b) = \frac{2\tilde{\lambda}}{\lambda^2 \sinh \tilde{\lambda}(b-a)} r(a) - \frac{2\tilde{\lambda}}{\lambda^2} r(b) \coth \tilde{\lambda}(b-a) - \frac{1}{2} \beta w' \varphi_{b-a} (b-a) J - D \beta w' \rho(b),$$

где введена функция

$$\varphi_{b-a} \equiv \frac{\tanh \tilde{\lambda}(b-a)/2}{\tilde{\lambda}(b-a)/2} < 1. \quad (21)$$

При сшивке решений, полученных на различных участках функции распределений (в отсутствие скачков потенциала на границе), потоки должны быть непрерывны. Полезность формул (8) заключается в том, что они позволяют производить эту сшивку решений.

Как пример прямого использования соотношений этого раздела, приведем решение задачи нахождения скорости броуновского насоса с одним линейным участком потенциала, наклон которого флуктуирует по знаку (см. рис. 2 с $l=0$). Наличие скачка потенциалов в точке $x=0$ приводит к следующим граничным условиям:

$$\rho_{\pm}(0) = \frac{\gamma_{\mp}}{\gamma_{+} + \gamma_{-}} \rho_l e^{-v}, \quad v \equiv V / k_B T, \quad (22)$$

$$\rho(0) = \rho_l \cosh v, \quad r(0) = \frac{2\gamma_{+}\gamma_{-}}{\gamma_{+} + \gamma_{-}} \rho_l \sinh v.$$

В точке $x=L$ скачок потенциала отсутствует, так что граничные условия принимают вид:

$$\rho_{\pm}(L) = \frac{\gamma_{\mp}}{\gamma_{+} + \gamma_{-}} \rho_r, \quad \rho(0) = \rho_r, \quad r(L) = 0. \quad (23)$$

Тогда соотношение (20) для потока J при $\gamma_{+} = \gamma_{-} \equiv \gamma$ дает:

$$J = \frac{D}{L} \frac{\lambda^2 L^2 + v^2}{\lambda^2 L^2 + v^2 \varphi_L} \left[\frac{1}{2} \rho_l v (\varphi_0 - \varphi_L) \sinh v - (\rho_r - \rho_l) \right]. \quad (24)$$

Полученное выражение является предельным случаем (при $l \rightarrow 0$) более общего выражения для потока, которое выводится в следующем разделе.

Броуновский насос с двумя линейными участками флуктуирующих потенциалов

Вернемся к профилю потенциала, состоящего из двух линейных участков $(0, l)$ и (l, L) (рис. 2). Для каждого из этих участков воспользуемся соотношениями (15), (18) – (21) предыдущего раздела, в которых будут фигурировать 6 граничных параметров: $\rho(0)$, $\rho(l)$, $\rho(L)$, и $r(0)$, $r(l)$ и $r(L)$. Четыре из шести этих параметров определяются четырьмя граничными условиями в точках $x = 0$ и $x = L$:

$$\rho(0) = \rho_l, \quad \rho(L) = \rho_r, \quad r(0) = 0, \quad r(L) = 0. \quad (25)$$

Оставшиеся два параметра $\rho(l)$ и $r(l)$ определяются двумя условиями непрерывности потоков J и $\Delta J(l)$, каждый из которых представлен соотношениями (20) с $a = 0$, $b = l$ для участка $(0, l)$ и $a = l$, $b = L$ для участка (l, L) .

В результате использования этих условий приходим к следующему точному аналитическому выражению для потока частиц, накачиваемых насосом:

$$J = D \frac{\psi_l \psi_{L-l}}{\psi_l \varphi_l + \psi_{L-l} \varphi_{L-l}} [\varphi_{L-l} \rho_l - \varphi_l \rho_r + (\varphi_l - \varphi_{L-l}) \rho(l)], \quad (26)$$

в котором

$$\rho(l) = \frac{4(\chi_l + \chi_{L-l})(\psi_l \rho_l + \psi_{L-l} \rho_r) + v^2 \psi_l \psi_{L-l} (\varphi_l - \varphi_{L-l})(\varphi_{L-l} \rho_l - \varphi_l \rho_r)}{4(\chi_l + \chi_{L-l})(\psi_l + \psi_{L-l}) - v^2 \psi_l \psi_{L-l} (\varphi_l - \varphi_{L-l})^2 - 2l^{-1}(L-l)^{-1} L v^2 (\psi_l \varphi_l + \psi_{L-l} \varphi_{L-l})}, \quad (27)$$

$$\psi_x = \frac{\lambda^2 x^2 + v^2}{x(\lambda^2 x^2 + v^2 \varphi_x)}, \quad \varphi_x = \frac{\tanh(\sqrt{\lambda^2 x^2 + v^2} / 2)}{\sqrt{\lambda^2 x^2 + v^2} / 2}, \quad \chi_x = x^{-1} \sqrt{\lambda^2 x^2 + v^2} \coth \sqrt{\lambda^2 x^2 + v^2}. \quad (28)$$

Из выражения (26) следует, что при одинаковой концентрации частиц по обе стороны от мембраны ($\rho_l = \rho_r$) и при несимметричном потенциальном профиле ($l \neq L/2$) поток частиц отличен от нуля. С другой стороны, флуктуации потенциального профиля могут исключить поток через мембрану ($J = 0$) при наличии градиента концентраций ($\rho_l \neq \rho_r$). Выражение (26) также позволяет проследить частотную и температурную зависимости потока при различных концентрациях ρ_l и ρ_r по обе стороны мембраны и параметрах потенциального профиля l и V .

На рис. 4 и 5 приведены частотные и температурные зависимости потока частиц, который инициирует насос при одинаковых концентрациях по обе стороны от мембраны, рассчитанные по соотношениям (11) – (13).

Частотная зависимость (рис. 4) носит немонотонный характер, то есть поток имеет максимум, и таким образом можно определить оптимальный режим работы насоса. На рис. 5 представлены температурные зависимости, из которых видно, что при уменьшении температуры поток монотонно возрастает.

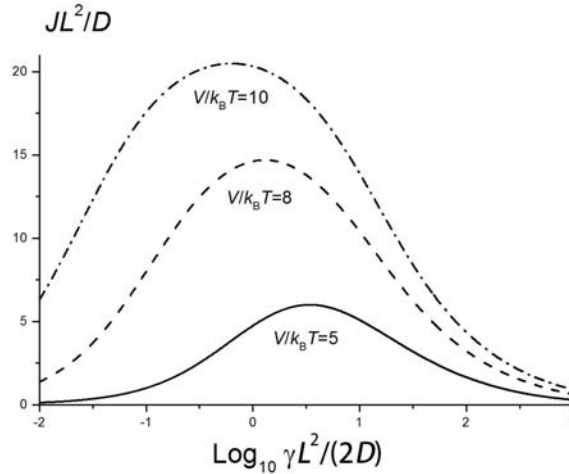


Рис. 4. Зависимость потока частиц J (в единицах D/L^2), возникающего при работе насоса при одинаковых концентрациях заряженных частиц слева и справа ($\rho_l = \rho_r$) от частоты переключения потенциала (в безразмерных единицах) при асимметрии потенциального профиля $l/L=0.1$.

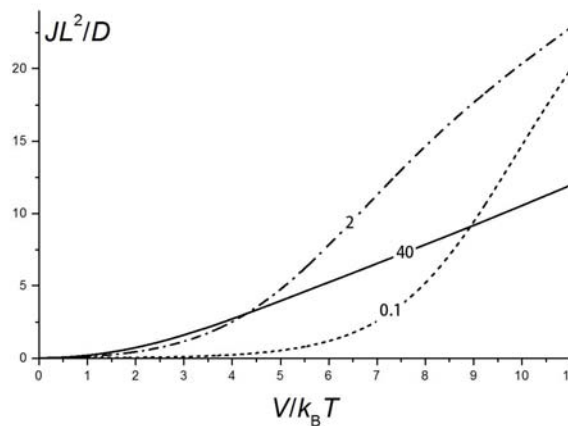


Рис. 5. Зависимость потока частиц J (в единицах D/L^2) через насос при одинаковых концентрациях от отношения амплитуды потенциального профиля к температуре при $l/L=0.1$. Семейство кривых рассчитано для различных значений безразмерного параметра $\gamma L^2 / D$, который характеризует частоту смены потенциальных профилей (значения $\gamma L^2 / D$ указаны на рисунке).

Возвратно-поступательное движение при сдвиговых флуктуациях симметричного V-образного потенциала

В этом разделе получено точное решение для средней скорости возвратно-поступательного движения, возникающее при симметричных ($\gamma_+ = \gamma_-$, $\varepsilon = 0$) флуктуациях кусочно-линейных потенциалов, изображенных на рис. 3. Воспользуемся симметрией задачи, из которой следует: $\rho(-x) = \rho(x)$, $r(-x) = -r(x)$, $J_-(x) = -J_+(x)$, так что полный поток $J = 0$.

Области $a < x < b$, рассмотренной в предыдущем разделе, соответствует участок $-a < x < a$, на котором $w' = -k$. Используя уравнения (18) и (19), получаем:

$$r(x) = \frac{\sinh \tilde{\lambda} x}{\sinh \tilde{\lambda} a} r(a), \quad \tilde{\lambda} = \sqrt{\beta^2 k^2 + \lambda^2}, \quad \lambda^2 = \frac{2\gamma}{D}, \quad \gamma \equiv \gamma_+ = \gamma_-. \quad (29)$$

Тогда из уравнения (16) $\rho'(x) = \beta k \gamma^{-1} r(x)$ следует:

$$\rho(x) = \rho(a) + \frac{\beta k (\cosh \tilde{\lambda} x - \cosh \tilde{\lambda} a)}{\gamma \tilde{\lambda} \sinh \tilde{\lambda} a} r(a), \quad (30)$$

а из (20) получаем:

$$\Delta J(a) = -2\lambda^{-2} \tilde{\lambda} r(a) \coth \tilde{\lambda} a + D\beta k \rho(a). \quad (31)$$

Воспользуемся теперь соотношениями из раздела, где рассмотрен броуновский мотор с одинаковыми наклонами линейных участков флуктуирующих потенциалов для области $x > a$, в которой $u' = k$. Из (6) при условии $J = 0$ сразу получаем равновесное решение для $\rho(x)$:

$$\rho(x) = \rho(a) e^{-\beta k (x-a)}. \quad (32)$$

Из условия ограниченности решений при $x \rightarrow \infty$ следует, что $C_2 = 0$ и

$$r(x) = r(a) e^{-(\beta k + \mu)(x-a)/2}, \quad \mu \equiv \sqrt{\beta^2 k^2 + 4\lambda^2}. \quad (33)$$

Тогда из (6) получаем:

$$\Delta J(a) = \lambda^{-2} (\mu - \beta k) r(a). \quad (34)$$

Приравнявая (31) и (34), находим связь между $r(a)$ и $\rho(a)$:

$$r(a) = \frac{2\gamma\beta k}{2\tilde{\lambda} \coth \tilde{\lambda} a + \mu - \beta k} \rho(a). \quad (35)$$

Подстановка (35) в (30) дает:

$$\rho(x) = \frac{2\lambda^2 \coth \tilde{\lambda} a + 2\beta^2 k^2 \cosh \tilde{\lambda} x / \sinh \tilde{\lambda} a + \tilde{\lambda} (\mu - \beta k)}{\tilde{\lambda} (2\tilde{\lambda} \coth \tilde{\lambda} a + \mu - \beta k)} \rho(a). \quad (36)$$

Теперь соотношения (32) и (36), полученные для областей $x > a$ и $0 < x < a$ и содержащие только одну неизвестную константу $\rho(a)$, позволяют найти ее из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = 2 \int_0^{\infty} dx \rho(x) = 2 \int_0^a dx \rho(x) + 2 \int_a^{\infty} dx \rho(x) = 1. \quad (37)$$

Интегрируя (36) и (32) при учете (37), получаем:

$$\rho(a) = \beta k \tilde{\lambda}^2 (2\tilde{\lambda} \coth \tilde{\lambda} a + \mu - \beta k) / \Delta, \quad (38)$$

где

$$\Delta \equiv 4\beta^2 k^2 (\tilde{\lambda} \coth \tilde{\lambda} a + \beta k) + 2\tilde{\lambda} (1 + \beta k a) [2\lambda^2 \coth \tilde{\lambda} a + \tilde{\lambda} (\mu - \beta k)]. \quad (39)$$

Тогда из (35) получаем:

$$r(a) = 2\gamma\beta^2 k^2 \tilde{\lambda}^2 / \Delta. \quad (40)$$

Искомая скорость возвратно-поступательного движения вычисляется по формуле [26]:

$$v = \int_{-\infty}^{\infty} dx xr(x) = 2 \int_0^{\infty} dx xr(x) = 2 \int_0^a dx xr(x) + 2 \int_a^{\infty} dx xr(x). \quad (41)$$

Интегрируем (29) по области $0 < x < a$:

$$\int_0^a dx xr(x) = \frac{\tilde{\lambda}a \coth \tilde{\lambda}a - 1}{\tilde{\lambda}^2} r(a), \quad (42)$$

а (33) по области $x > a$:

$$\int_a^{\infty} dx xr(x) = 2 \frac{2 + (\beta k + \mu)a}{(\beta k + \mu)^2} r(a). \quad (43)$$

Подставляя (42) и (43) в (41), используя выражение (40) для $r(a)$ и упрощая, получаем искомое выражение для скорости возвратно-поступательного движения:

$$v = 4\gamma\beta^2 k^2 \frac{\tilde{\lambda}a(\beta k + \mu)[(\beta k + \mu) \coth \tilde{\lambda}a + 2\tilde{\lambda}] - 2\beta k(\mu - \beta k)}{(\beta k + \mu)^2 \Delta}. \quad (44)$$

Напомним обозначения, входящие в (44):

$$\begin{aligned} \Delta &\equiv 4\beta^2 k^2 (\tilde{\lambda} \coth \tilde{\lambda}a + \beta k) + 2\tilde{\lambda}(1 + \beta ka)[2\lambda^2 \coth \tilde{\lambda}a + \tilde{\lambda}(\mu - \beta k)], \\ \tilde{\lambda} &= \sqrt{\beta^2 k^2 + \lambda^2}, \quad \mu = \sqrt{\beta^2 k^2 + 4\lambda^2}, \quad \lambda^2 = \frac{2\gamma}{D}, \quad \gamma \equiv \gamma_+ = \gamma_- \end{aligned} \quad (45)$$

Ниже проверена справедливость этого выражения в низкочастотном и высокочастотном пределах, а затем, после перехода к удобным безразмерным переменным, проанализирована частотная и температурная зависимости средней скорости.

А. Низкочастотный предел

В этом пределе $\gamma \rightarrow 0$ имеем $\lambda \rightarrow 0$, $\tilde{\lambda} \rightarrow \beta k$, $\mu \rightarrow \beta k$, так что $\Delta \rightarrow 4\beta^3 k^3 (\coth \beta ka + 1)$ и

$$v \rightarrow \gamma a, \quad (46)$$

как и должно быть. Заметим, что в этом пределе функции распределения принимают вид:

$$\begin{aligned}
r(x) &= \frac{1}{4} \gamma \beta k (1 - e^{-2\beta ka}) \times \begin{cases} \sinh \beta kx / \sinh \beta ka, & 0 < x < a \\ e^{-\beta k(x-a)}, & x > a \end{cases} \\
\rho(x) &= \frac{1}{4} \gamma \beta k (1 + e^{-2\beta ka}) \times \begin{cases} \cosh \beta kx / \cosh \beta ka, & 0 < x < a \\ e^{-\beta k(x-a)}, & x > a \end{cases}
\end{aligned} \tag{47}$$

Эти функции равновесны, что проверяется простой проверкой расчета равновесных функций и подтверждает приведенные общие выкладки.

Б. Высокочастотный предел

В этом пределе $\gamma \rightarrow \infty$ имеем $\lambda \rightarrow \infty$, $\tilde{\lambda} \rightarrow \lambda$, $\mu \rightarrow 2\lambda$, так что $\Delta \rightarrow 8\lambda^3(1 + \beta ka)$ и

$$v = \frac{k}{\zeta} \rho(a)a = \frac{k}{2\zeta} \frac{\beta ka}{1 + \beta ka}. \tag{48}$$

Этот результат совпадает с высокочастотным пределом, известным для произвольного потенциала. В этом пределе

$$\rho(x) = \frac{\beta k}{2(1 + \beta ka)} \times \begin{cases} 1, & 0 < x < a; \\ e^{-\beta k(x-a)}, & x > a; \end{cases} \tag{49}$$

как и должно быть.

В. Частотная и температурная зависимости средней скорости

Введем удобные безразмерные переменные

$$z \equiv \beta ka, \quad \Gamma \equiv 2\zeta \gamma a / k, \tag{50}$$

характеризующие обратную температуру и частоту флуктуаций потенциала. Среднюю скорость возвратно-поступательного движения будем измерять в единицах размерного параметра $v_0 \equiv k / \zeta$. На рис. 6 и 7 представлены семейства зависимостей v/v_0 от z и Γ .

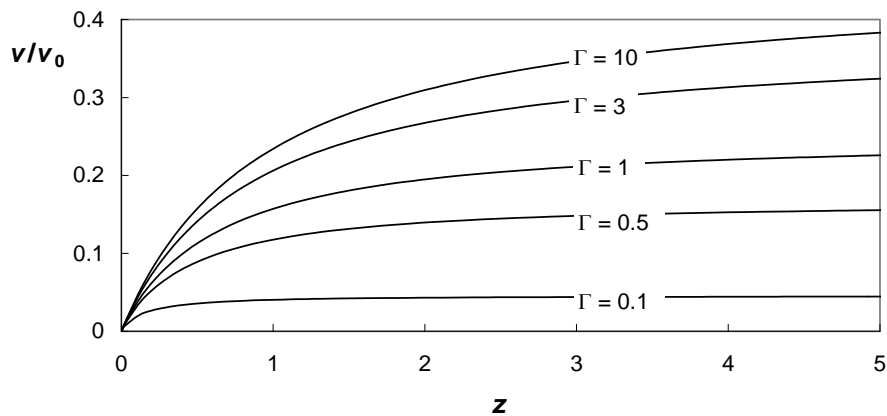


Рис. 6. Зависимость средней скорости возвратно-поступательного движения (в единицах v_0) от параметра обратной температуры z при различных значениях частотного параметра Γ .

Из рис. 6 следует, что при нулевой температуре ($z \rightarrow \infty$) возвратно-поступательное движение существует. Можно показать, что в пределе $z \rightarrow \infty$ имеет место асимптотическое равенство $v/v_0 = \Gamma/[2(1+\Gamma)]$, справедливость которого подтверждает кривая с $z=10$ на рис. 7. С ростом температуры средняя скорость возвратно-поступательного движения монотонно убывает до нуля. Из приведенных зависимостей также следует справедливость низкочастотной и высокочастотной асимптотик, представленных формулами (46) и (48).

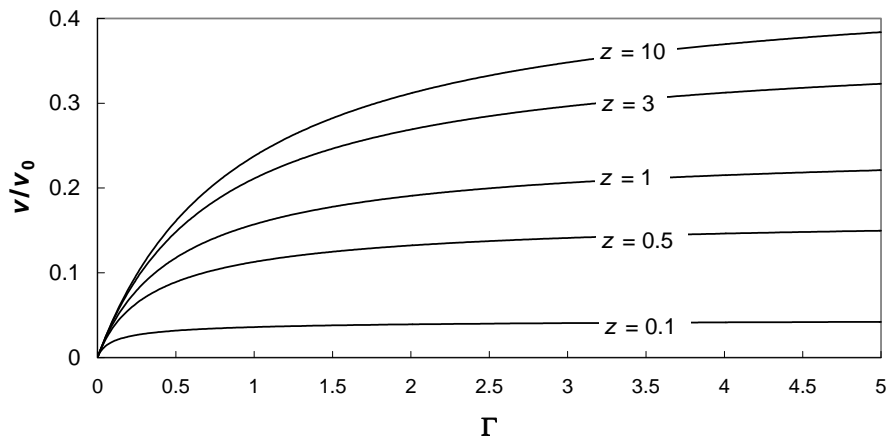


Рис. 7. Зависимость средней скорости возвратно-поступательного движения (в единицах v_0) от частотного параметра Γ при различных значениях параметра обратной температуры z .

Обсуждение и выводы

Получен ряд точных решений задач диффузионной динамики броуновской частицы, потенциальная энергия которой в силовом поле окружающей среды претерпевает дихотомные флуктуации между двумя потенциальными рельефами, представляющими собой кусочно-линейные функции. Ценность этих решений состоит в том, что они справедливы во всей области значений двух основных параметров, регулирующих работу броуновских моторов и насосов, а именно, отношения амплитуды потенциального рельефа к тепловой энергии $k_B T$ и частоты дихотомных флуктуаций потенциального рельефа.

Полученные решения показали, что для функционирования броуновского мотора с предельно асимметричным пилообразным потенциалом, флуктуирующим на полпериода, броуновского насоса с двумя линейными участками потенциала, флуктуирующими по знаку, и возвратно-поступательного мотора с V-образным потенциальным профилем, претерпевающим сдвиговые флуктуации, тепловой шум играет деструктивную роль. Действительно, переключение потенциалов, изображенных на рис. 1–3, приводит к тому, что частица приводится в движение за счет скольжения по линейным наклонным участкам потенциала и ей не приходится преодолевать потенциальные барьеры. Поэтому рассматриваемые модели могут функционировать и при нулевой температуре, а температурная зависимость скорости является монотонно убывающей функцией.

Скорость направленного движения и скорость возвратно-поступательного движения различным образом зависят от частоты флуктуаций потенциала. Скорость направленного движения стремится к нулю как при малых, так и при больших частотах

флуктуаций. Поэтому частотная зависимость является немонотонной функцией. С другой стороны, скорость возвратно-поступательного движения стремится к нулю только при малых частотах и выходит на насыщение при больших частотах, так что частотная зависимость является монотонно возрастающей функцией. Масштабы, на которых происходят указанные изменения, определяются характерными временами рассматриваемых систем: временем диффузии $\tau_D = L^2 / D$ на расстоянии L и временами скатывания частицы $\tau_s = \zeta l / k$ на линейных участках l с наклоном k .

Приведем оценки характерных значений параметров рассматриваемых моторов и насосов в случае белковых систем, для которых движущаяся частица имеет размер $L \sim 10$ нм и характеризуется белковым трением $\zeta \sim 10^{-4}$ пН·с/нм. Тогда при комнатной температуре $T = 300$ К тепловая энергия равна $k_B T \approx 4.1$ пН·нм и коэффициент диффузии $D \approx 4.1 \cdot 10^4$ нм²/с ($4.1 \cdot 10^{-14}$ м²/с). При данных значениях параметров $\tau_D \approx 2.4 \cdot 10^{-4}$ с и размерный параметр скорости $D/L = L/\tau_D \approx 4.1 \cdot 10^3$ нм/с. Если считать, что амплитуда V пространственного изменения потенциального рельефа порядка тепловой энергии $k_B T$ при комнатной температуре и силовую постоянную k оценить соотношением $k = V/L$, то размерный параметр скорости $v_0 \equiv k/\zeta$, введенный для построения зависимостей на рис. 6 и 7, окажется того же порядка, как и D/L . Поэтому оценки характерных скоростей рассмотренных в данной статье насосов и возвратно-поступательных моторов составляют 10^4 и 10^3 нм/с. Для сравнения укажем, что средние скорости известных белковых моторов и искусственно создаваемых наномашин могут достигать значений 10^3 нм/с [1–7].

Несмотря на то, что полученные в данной статье результаты относятся к модельным потенциальным рельефам, представляющим собой кусочно-линейные функции, они имеют важное значение для понимания и моделирования процессов неравновесного транспорта наночастиц как вдоль поверхности раздела фаз (молекулярные моторы), так и через такие поверхности раздела (молекулярные насосы). Действительно, реальные координатные зависимости потенциальной энергии наночастицы в поле, создаваемом границей раздела фаз, с определенной степенью точности можно аппроксимировать кусочно-линейной функцией. Временная зависимость этой потенциальной энергии будет определяться изменением состояния самой частицы, происходящим под действием неравновесных внешних процессов. Поэтому рассмотренные в данной статье задачи описания транспорта наночастиц во флуктуирующих потенциальных рельефах отражают реальные ситуации, в которых такие явления могут существовать и наблюдаться. Основной характеристикой обсуждаемого явления является средняя скорость направленного или возвратно-поступательного движения. Полученные точные решения позволили установить закономерности, как эта основная характеристика зависит от температуры, пространственной амплитуды и частоты флуктуаций потенциального профиля.

Работа выполнена при поддержке Целевой комплексной программы фундаментальных исследований НАН Украины (грант № 3/12-Н)

Литература

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // Phys. Rep. – 2002. – V. 361. – P. 57-265.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. – V. 81. – N. 1. – P. 387-442.

3. Howard J. *Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton* // Sinauer Associates, Sunderland, Massachusetts. – 2001. – Part II. – P. 117.
4. Lipowsky R., Klumpp S. *Life is Motion - Multiscale Motility of Molecular. Motor* // *Physica A*. – 2005. – V. 352. – P. 53-112.
5. Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H., Tsong T.Y. *Catalytic wheel as a Brownian Motor* // *J. Phys. Chem. B*. – 2004. – V. 108. – P. 15880-15889.
6. Kay E. R., Leigh D. A., Zerbetto F. *Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines* // *Angew. Chem*. – 2007. – V. 46. – P. 72-191.
7. Drexler K.E. *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation* // Wiley: N. Y.. – 1992. – P. 311–312.
8. Harms T., Lipowsky R. *Driven Ratchets with Frozen Disorder* // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 79. – P. 2895-2898
9. Kafri Y., Lubensky D. K., Nelson D. R. *Biophys. Dynamics of molecular motors and polymer translocation with sequence heterogeneity* // *Biophys. J.* – 2004. – V. 86. – N. 6. – P. 3373-3391.
10. Porto M., Urbakh M., Klafter J. *Atomic scale engines: Cars and wheels* // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 6058-6061.
11. Magnasco M. O. *Forced thermal ratchets* // *Phys. Rev. Lett.* – 1993. – V. 71. – P. 1477-1481.
12. Doering C. R., Horsthemke W., Riordan J. *Nonequilibrium fluctuation-induced transport* // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 72. – P. 1766-1769.
13. Sokolov M. *Lévy flights from a continuous-time process* // *Phys. Rev. E*. – 2001. – V. 63. – P. 021107-1-4.
14. Dan D., Mahato M. C., Jayannavar A. M. *Multiple current reversals in forced inhomogeneous ratchets* // *Phys. Rev. E*. – 2001. – V. 63. – P. 056307-1-5.
15. Ai B. Q., Xie H. Z., Liu L.G. *Heat flow and efficiency in a microscopic engin.* // *Europ. Phys. J. B*. – 2005. – V. 47. – P. 109-114.
16. Astumian R. D., Bier M. *Fluctuation driven ratchets: molecular motors* // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 72. – P. 1766-1769.
17. Prost J., Chawin J.-F., Peliti L., Adjari A. *Asymmetric pumping of particles* // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 72. – P. 2652-2655.
18. Chauwin J.-F., Ajdari A., Prost J. A. *Mechanism without Diffusive Steps.* // *Europ. Lett.* – 1994. – V. 27. – P. 421-426.
19. Rozenbaum V. M., Vovchenko O. Ye., Korochkova T. Ye. *Brownian dipole rotator in alternating electric field* // *Phys. Rev. E*. – 2008. – V. 77. – P. 061111-1-9.
20. Dekhtyar M. L., Ishchenko A. A., Rozenbaum V. M. *Photoinduced molecular transport in biological environments based on dipole moment fluctuations* // *J. Phys. Chem. B*. – 2006. – V. 110. – P. 20111-1-4.
21. Розенбаум В. М. *Высокотемпературные броуновские моторы: детерминистические и стохастические флуктуации периодического потенциала* // *Письма в Журн. эксперим. и теорет. физики*. – 2008. – Т. 88. – В. 5. – С. 391-395.
22. Rozenbaum V. M., Korochkova T. Ye., Yang D.-Y., Lin S. H., Tsong T. Y. *Two approaches toward a high-efficiency flashing ratchet* // *Phys. Rev. E*. – 2005. – V. 71. – P. 041102 –1–8.
23. Rozenbaum V. M., Korochkova T. Ye., Chernova A. A., Dekhtyar M. L. *Brownian motor with competing spatial and temporal asymmetry of potential energy* // *Phys. Rev. E*. – 2011. – V. 83. – P. 051120-1-10.
24. Gomez-Marin, Sancho J. M. *Two-state flashing molecular pump* // *EPL*. – 2009. – V. 86. – P. 40002- -40002.

25. Makhnovskii Yu. A., Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H., Tsong T. Y. Reciprocating nanoengine // *Europ. Phys. J. B.* – 2006. – V. 52. – P. 501–505.
26. Makhnovskii Yu. A., Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H. Reciprocating Motion on the Nanoscale // *J. Phys. Chem. A.* – 2007. – V. 111. – P. 9486–9493.
27. Makhnovskii Yu. A., Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H. Net transport due to noise-induced internal reciprocating motion // *J. Chem. Phys.* – 2009. – Vol. 130. – P. 164101-1–164101-8.

ТОЧНІ АНАЛІТИЧНІ РОЗВ'ЯЗКИ В ТЕОРІЇ БРОУНІВСЬКИХ МОТОРІВ І НАСОСІВ

Т.Е. Корочкова, Н.Г. Шкода, А.А. Чернова, В.М. Розенбаум

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна*

Розглянуто дифузну динаміку броунівської частинки, з потенціальною енергією якої в силовому полі оточуючого середовища відбуваються дихотомні флуктуації між двома потенціальними рельєфами, що являють собою кусково-лінійні функції. Показано, що якщо на якомусь інтервалі зміни цих функцій, нахили лінійних ділянок рівні чи протилежні за знаком, то загальний розв'язок системи диференціальних рівнянь, що описують дифузну динаміку, записується в простому аналітичному вигляді. Ця обставина дозволяє отримати для середньої швидкості направленої руху частинки, виникаючої внаслідок флуктуацій потенціальної енергії, ряд точних розв'язків для наступних ситуацій: броунівський мотор з гранично асиметричним пилкоподібним потенціалом, флуктуюючим на півперіода, броунівський насос з двома лінійними ділянками потенціала, флуктуюючими за знаком, і обернено-поступальний мотор з V-образним потенціальним профілем, з яким відбуваються флуктуації, що зсовуються. Отримані закономірності залежності середньої швидкості наночастинки від температури і частоти флуктуацій для перерахованих ситуацій.

EXACT ANALYTICAL SOLUTIONS IN THE THEORY OF BROWNIAN MOTORS AND PUMPS

T.Ye. Korochkova, N.G. Shkoda, A.A. Chernova, V.M. Rozenbaum

*Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine*

We have considered the diffusion dynamics of a Brownian particle, with its potential energy undergoing, in the force field of the environment, dichotomic fluctuations between two potential profiles representing piecewise linear functions. It is shown that if on some variation interval of these functions the slopes of their linear pieces are equal or opposite in sign, then the general solution of the system of differential equations describing the diffusion dynamics can be written in a simple analytic form. This allows derivation of exact solutions for the average velocity of the particle directed motion induced by potential energy fluctuations, as far as the following cases are concerned: a Brownian motor with extremely asymmetric sawtooth potential fluctuating by half a period, a Brownian pump with two sign-fluctuating linear pieces of the potential, and a reciprocating Brownian motor with a V-shaped potential profile undergoing shift fluctuations. For the situations mentioned, the regularities have been established referring to the dependence of the nanoparticle average velocity on the temperature and potential fluctuation frequency.