

МОДЕЛЬНЫЙ ПИЛООБРАЗНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ В ТЕОРИИ БРОУНОВСКИХ МОТОРОВ

Т.Е. Корочкова¹, В.М. Розенбаум¹, И.В. Шапочкина²

¹Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины,
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, e-mail: taiscrust@mail.ru

²Белорусский государственный университет,
пр-т Независимости, 4, Минск 220050, Беларусь

Разработана модель броуновского мотора с флуктуациями потенциального профиля пилообразной формы, представлены параметризация этого профиля, свойства симметрии и качественный анализ зависимостей средней скорости мотора от параметров модели. Предложена модификация пилообразного профиля, который не принадлежит к классу антисимметричных периодических функций и обеспечивает направленное движение инерционных частиц при флуктуациях знака потенциального профиля. Для этого случая получено аналитическое выражение для средней скорости мотора, из которого следует ее немонотонная зависимость от параметра, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного. Показано, что направление движения может обращаться с изменением этого параметра.

Введение

Расчеты динамических характеристик броуновских моторов сопряжены с решением сложных дифференциальных уравнений, содержащих функции флуктуирующей потенциальной энергии частицы, явная пространственная зависимость которых определяется реальным взаимодействием частицы с конкретной подложкой [1–3]. Расчеты таких взаимодействий и динамических характеристик соответствующих моторов могут быть проведены только численно, и их востребованность невысока, если не стоит задача описания реального, конкретного экспериментально наблюдаемого объекта. С другой стороны, для объяснения существующих явлений и планирования экспериментов часто достаточно оценивать величины динамических характеристик и оперировать несколькими ключевыми параметрами пространственно-периодического потенциала подложки. Такими параметрами являются амплитуда изменения потенциала на его пространственном периоде и асимметрия потенциального профиля. Простейшим представителем периодических потенциалов, который полностью характеризуется именно этими двумя параметрами, является пилообразный потенциал. Кусочно-линейная зависимость этого потенциала делает возможным получение точных аналитических выражений для скорости движения частицы, описывающей броуновский мотор [4, 5], и использование метода трансфер-матрицы [6, 7].

Другая причина активного использования пилообразного потенциала при описании направленного диффузионного транспорта состоит в том, что им можно достаточно точно аппроксимировать реальный профиль потенциальной энергии. Так, электростатический потенциал линейной цепочки ориентационно структурированных полярных групп атомов с хорошей степенью точности может быть представлен как пилообразный, что позволило аналитически изучить дрейф броуновской частицы вдоль такой цепочки, обусловленный флуктуациями потенциальной энергии их взаимодействия [8]. При учете инерционности частицы динамические характеристики становятся более чувствительными к форме потенциального рельефа [2, 9, 10], однако и в этом случае пилообразный потенциал позволяет правильно отобразить основные

закономерности зависимостей рассчитываемых величин от его параметров. Все это объясняет важность выбора пилообразного потенциального профиля как основного модельного потенциала при решении задач теории броуновских моторов.

В данной статье задается функция пилообразного потенциала, рассматриваются приемы параметризации и особенности, дается определение симметричных и антисимметричных периодических профилей, и на примере пилообразного потенциала изучается влияние симметричных свойств потенциала на характеристики броуновских моторов. Изучение этих свойств позволяет предложить и обосновать простую модификацию пилообразного потенциала, позволяющую снять ограничения в инициации движения броуновских моторов, которые вызваны повторением идентичных участков в классическом пилообразном потенциале [11]. Для общей модели двух состояний – произвольных потенциальных профилей с одинаковым пространственным периодом – предлагается феноменологическое представление средней скорости движения частицы, генерируемого таким мотором. Это представление позволяет в зависимости от иерархии времен, характерных для нашей системы, и времен жизни состояний, качественно охарактеризовать режимы работы мотора и объяснить механизмы, обеспечивающие немонотонное частотное поведение средней скорости. В случае пилообразных потенциалов в модели двух состояний показано, что наличие линейных участков разного наклона вводит дополнительные характерные времена – времена бездиффузионного скольжения частицы по ним. Это расширяет и усложняет иерархию времен системы и позволяет предположить иной характер поведения средней скорости в зависимости от частоты переключения потенциала в случае больших градиентов потенциала. Далее выводится аналитическое представление средней скорости в модели модифицированного пилообразного потенциала, который флуктуирует по знаку в адиабатическом режиме, с учетом инерционных поправок [10], а также аналитически обосновывается возможность возникновения моторного эффекта в этом случае и управления направлением движения частиц.

Параметризация и свойства пилообразного потенциала

Известно, что пространственная асимметрия потенциала – одно из обязательных условий функционирования молекулярного мотора в ряде моделей класса flashing ratchet [1]. Стационарный асимметричный потенциал может быть создан, в частности, ориентационно-структурированной системой адсорбированных полярных молекул [8].

Действительно, при определенных условиях двухмерная решетка адсорбата на границе раздела фаз может состоять из набора дипольных цепочек с коллинеарными ориентациями дипольных моментов вдоль оси цепочки x . Потенциал, создаваемый такой одномерной цепочкой диполей, расположенных в точках $x_n = nL$ (где n – целое число, а L – пространственный период цепочки) в точке (x, z) (где z – расстояние по перпендикуляру от цепочки), можно представить в виде быстросходящегося ряда по функциям Макдональда $K_0(\xi)$ [8]:

$$\varphi_z(x) = \frac{8\pi\mu}{L^2} \sum_{h=1}^{\infty} h K_0\left(\frac{2\pi h}{L} z\right) \sin\left(\frac{2\pi h}{L} x\right). \quad (1)$$

где μ – дипольный момент полярной молекулы. При $z/L \geq 0.3$ с большой точностью можно ограничиться первыми двумя членами этого ряда, и при «фиксированном» значении параметра z/L потенциал представляет собой периодическую по x асимметричную функцию

$$\varphi(x) = \frac{8\pi\mu}{L^2} K_0(1,76) \left[\sin(2\pi x / L) + \frac{1}{4} \sin(4\pi x / L) \right]. \quad (2)$$

которую с достаточной точностью можно аппроксимировать пилообразной (см. рис. 1) [8].

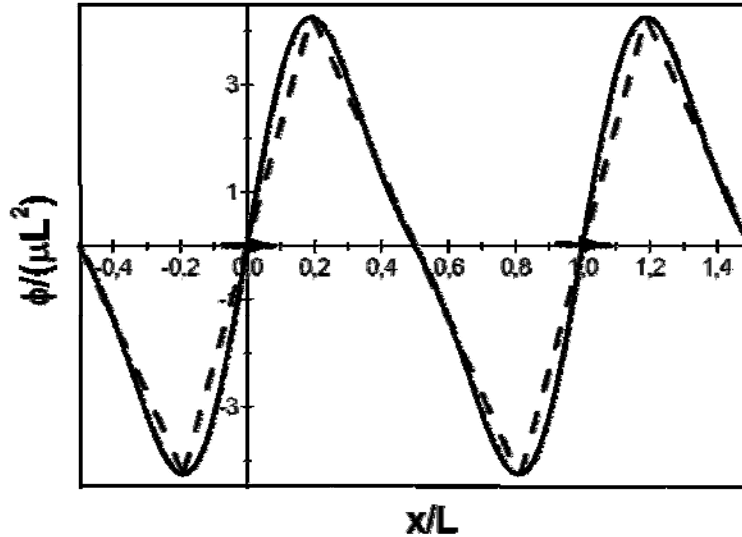


Рис. 1. Аппроксимация асимметричного потенциала дипольной цепочки пилообразной функцией.

Пилообразный потенциал представляет собой периодическую функцию (рис. 2), которую можно определить на ее периоде L следующим образом:

$$V(x) = \begin{cases} Vx/l, & 0 \leq x \leq l, \\ V(L-x)/(L-l), & l \leq x \leq L. \end{cases} \quad (3)$$

Параметры V и l определяют, соответственно, величину потенциального барьера и ширину одного из звеньев ($0 \leq l \leq L$). При $l = L/2$ ширины двух звеньев, l и $L-l$, одинаковы, и потенциальный профиль становится симметричным. Это означает, что можно выбрать такое сечение $x = x_0$, которое будет плоскостью симметрии профиля. Для системы координат, изображенной сплошными линиями на рис. 2 а, значения $x_0 = 0$ и l соответствуют таким сечениям. При $l \neq L/2$ направления направо и налево становятся неэквивалентными, а потенциал – асимметричным. Удобно ввести коэффициент асимметрии κ пилообразного потенциального профиля таким образом, чтобы он равнялся нулю для симметричного профиля и ± 1 – для максимально асимметричного (т.е. при $l = 0$ или $l = L$):

$$\kappa = 1 - 2l/L. \quad (4)$$

Обратим внимание, что предельно асимметричный пилообразный потенциал ($\kappa = \pm 1$) характеризуется точками разрыва первого рода, соответствующими бесконечным значениям сил $F(x) = -V'(x)$ (бесконечным градиентам потенциала). Поэтому моделирование различных процессов в системах, в которых в качестве периодического потенциального профиля используется пилообразный, позволяет анализировать влияние больших градиентов потенциала на изучаемые характеристики. Важно также и то, что всего два параметра (V и l или V и κ) полностью характеризуют этот потенциал.

Пилообразный потенциал относится к антисимметричным потенциальным профилям. Строгое определение симметричных и антисимметричных потенциальных профилей дается следующим образом. Периодический потенциальный профиль $V(x)$ называется, соответственно, симметричным или антисимметричным, если существуют такие произвольные постоянные x_0 и V_0 , при которых удовлетворяются равенства $V(-x) = V(x + x_0) + V_0$ или $V(-x) = -V(x + x_0) + V_0$ [11]. Поскольку в физических приложениях выбор начала координат не влияет на значения рассчитываемых результирующих величин, а в диффузионной динамике – и от добавления произвольной постоянной к потенциальной энергии, то приведенное определение означает, что симметричный или антисимметричный потенциальный профиль всегда можно представить четной или нечетной функцией в определенном образом сдвинутых координатных осях. На рис. 2 штриховыми линиями проведены новые координатные оси, в которых пилообразный потенциал становится нечетной функцией, что иллюстрирует его антисимметричность.

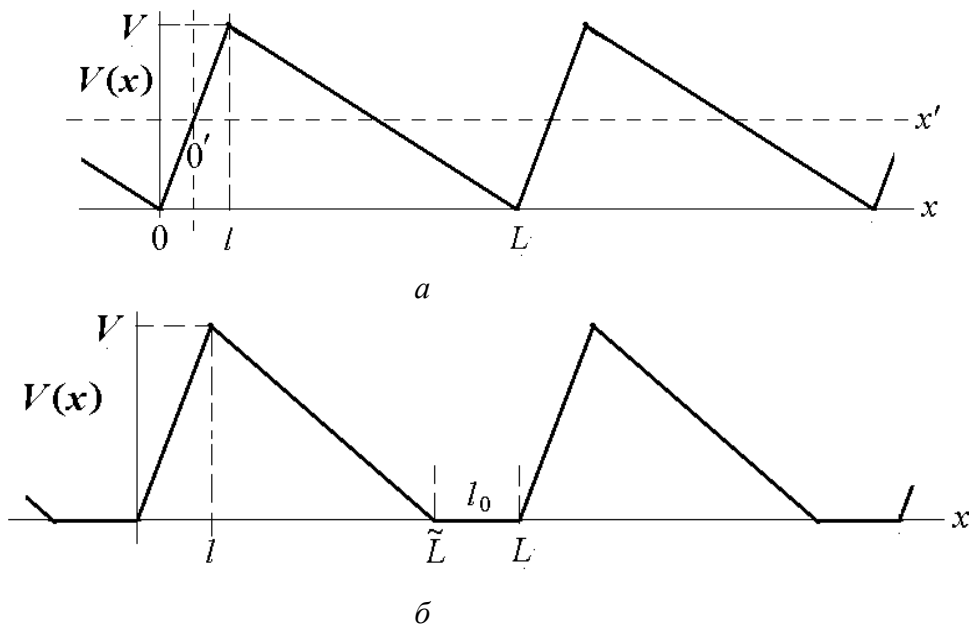


Рис. 2. Стандартный антисимметричный пилообразный потенциальный профиль, определенный формулой (1) (в штрихованных осях $0'x'$ этот профиль становится нечетной функцией) – а. неантисимметричный пилообразный потенциальный профиль, определенный формулой (3) – б.

Обратим внимание на отличия в определениях четности или нечетности функций и симметрии или антисимметрии потенциальных профилей. Понятие четности/нечетности принципиально связано с выбором координатных осей, тогда как свойство симметрии/антисимметрии является характеристикой профиля и не относится к выбору координатных осей (их выбор только помогает определить вид профиля). Поэтому неудивительно, что при $\kappa = 0$ пилообразный профиль одновременно относится и к симметричным, и к антисимметричным.

Антисимметрия пилообразного потенциала (3) существенно упрощает вычисление характеристик броуновских моторов [11]. Это связано с тем, что равновесные свойства броуновской частицы определяются структурой периодического потенциала вблизи его минимумов, а динамические свойства – вблизи его максимумов. Идентичность структуры антисимметричного потенциала вблизи его минимумов и максимумов и приводит к упрощению расчетов. В то же время для анализа ряда

эффектов, связанных с учетом инерции броуновской частицы, необходимо проведение моделирования с потенциальными профилями, не относящимися к антисимметричным [10]. Мы предлагаем рассмотреть небольшую модификацию пилообразного потенциала, которая может превратить его в неантисимметричный. Для этого достаточно ввести на каждом периоде дополнительный участок шириной l_0 , на котором потенциал можно полагать для простоты нулевым (см. рис.2б). Функция, описывающая такой неантисимметричный пилообразный потенциал на его периоде L , может быть задана следующим образом:

$$V(x) = \begin{cases} Vx/l, & 0 \leq x \leq l; \\ V(\tilde{L}-x)/(\tilde{L}-l), & l \leq x \leq \tilde{L}; \\ 0, & \tilde{L} \leq x \leq L. \end{cases} \quad (5)$$

В отличие от двухпараметрического потенциала (3) такой потенциал является трехпараметрическим. В качестве его параметров можно выбрать V , l и l_0 , но более продуктивно заменить параметр l на модифицированный коэффициент асимметрии $\tilde{\kappa} = 1 - 2l/\tilde{L}$, который изменяется от -1 до 1 , как и его немодифицированный аналог (4). Легко проверить, что при $\tilde{\kappa} = 0$ рассматриваемый потенциальный профиль также становится симметричным.

Средняя скорость броуновского мотора

Рассмотрим модель двух состояний (далее состояния a и b) как наиболее распространенную модель броуновского мотора с флуктуирующим периодическим потенциальным профилем [1–3]. Предполагается, что каждое состояние характеризуется своим потенциальным профилем $V_a(x)$ и $V_b(x)$ с одинаковыми периодами L , а также временами жизни τ_a и τ_b . Пусть система поочередно находится то в одном то в другом состоянии, причем процесс смены состояний может быть как детерминистическим, так и стохастическим. В первом случае говорят о циклическом процессе с временным периодом $\tau = \tau_a + \tau_b$, а во втором – о дихотомном процессе, при котором под τ_a и τ_b подразумевают средние времена жизни состояний, так что обратные величины τ_a^{-1} и τ_b^{-1} задают частоты переключения соответствующих состояний. Тогда средний период дихотомного процесса также задается соотношением $\tau = \tau_a + \tau_b$.

Поскольку потенциальные профили a и b имеют одинаковый период L и через время τ частица попадает в исходный профиль, можно сформулировать важный вывод, справедливый, по крайней мере, для безынерционных частиц: максимальная величина средней скорости броуновской частицы (броуновского мотора) равна L/τ . Поэтому средняя скорость может быть представлена в виде

$$\langle v \rangle = \frac{L}{\tau} \Phi(\{V_{a,b}(x)\}, \tau_{a,b}), \quad (6)$$

где $\Phi(\{V_{a,b}(x)\}, \tau_{a,b})$ – функционал, зависящий от потенциальных рельефов $V_a(x)$ и $V_b(x)$ и от времен жизни τ_a и τ_b . Значения этого функционала лежат в интервале $(-1, 1)$. Он имеет вероятностный смысл – задает долю частиц, пересекающих произвольное сечение $x = x_0$ за время τ_a в состоянии a и за время τ_b в состоянии b .

При $\Phi = 1$ частицы достоверно пересекают сечение направо, а при $\Phi = -1$ – налево. Этот функционал можно выразить через нормированные на единицу неравновесные функции распределения $\rho_j(x, t)$ ($\int_0^L dx \rho_j(x, t) = 1$) в моменты переключения потенциалов $t = \tau_j$, $j = a, b$ [6]:

$$\Phi(\{V_{a,b}(x)\}, \tau_{a,b}) = \int_0^L dx [q_b(x) - q_a(x)] \int_0^x dy [\rho_b(y, \tau_b) - \rho_a(y, \tau_a)], \quad (7)$$

где $q_j(x) = \exp[\beta V_j(x)] / \int_0^L dx \exp[\beta V_j(x)]$, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная тепловая энергия (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура). Если времена жизни состояний τ_a и τ_b заметно превышают все характерные времена системы, то функции распределения $\rho_j(y, \tau_j)$ к моментам переключения потенциалов становятся равновесными, $\rho_j(y, \tau_j) = \exp[-\beta V_j(x)] / \int_0^L dx \exp[-\beta V_j(x)]$, и функционал перестает зависеть от τ_j . Такой режим движения называется адиабатическим, и для него формула (7) обеспечивает прямой расчет средней скорости для произвольных потенциальных профилей. Формула (7) при замене $\rho_j(y, \tau_j)$ их равновесными больцмановскими выражениями легко выводится из леммы Паррондо, описывающей поток частиц после мгновенного переключения двух потенциальных профилей [12]. В неадиабатическом режиме вычисление Φ по формуле (7) требует решения уравнения Смолуховского [13] для нахождения функций $\rho_j(y, \tau_j)$.

Из формулы (6) следует, что увеличение значений средней скорости броуновского мотора может быть достигнуто за счет увеличения частоты переключения потенциалов (уменьшения периода τ). Пространственный период L является константой, значение которой определяется характерными межатомными расстояниями полярной подложки, и не поддается регулированию. Казалось бы, за счет уменьшения τ можно достичь сколь угодно больших значений скорости. Однако это не так. Величина Φ не зависит от τ только в адиабатическом режиме, когда τ заметно превышает все характерные времена системы (подробнее о временах – см. следующий раздел). При дальнейшем уменьшении τ величина Φ уменьшается при ненулевой температуре по закону τ^n с $n > 1$, так что средняя скорость стремится к нулю при $\tau \rightarrow 0$ [1]. Показатель степени n зависит от вида потенциалов и характера процесса их переключения. В работе [14] было показано, что в случае плавного потенциала (не имеющего скачков первой производной, как в пилообразном потенциале) средняя скорость при $\tau \rightarrow 0$ стремится к нулю по закону τ^2 для детерминистического процесса и τ – для стохастического. Это означает, что для этих процессов $n = 3$ и $n = 2$, соответственно. В следующем разделе будет дан качественный анализ поведения величины Φ для пилообразного потенциала.

Отметим, что модель двух состояний также часто используется для описания другого известного класса броуновских моторов, которые функционируют за счет флуктуаций приложенной силы с нулевым средним значением. Зависимость средней скорости $\langle v \rangle$ таких моторов от частоты флуктуаций силы в этом случае принципиально другая. При частотах, стремящихся к нулю ($\tau \rightarrow \infty$), скорость не стремится к нулю [6] в отличие от моторов с флуктуирующим периодическим потенциалом, которым соответствует формула (6). При уменьшении τ скорость монотонно убывает от

определенного значения, соответствующего адиабатическому режиму, и также стремится к нулю при $\tau \rightarrow 0$. Высокочастотная асимптотика закона убывания скорости зависит от температуры T . При $T = 0$ скорость убывает по экспоненциальному закону $\langle v \rangle \propto \exp(-\text{const}/\tau)$. Однако при сколь угодно малых температурах ($T \neq 0$) экспоненциальный закон сменяется степенным $\langle v \rangle \propto \tau^n$ [15], где при стохастическом процессе $n = 3$ для плавных потенциалов [16] и $n = 5/2$ для пилообразных [15].

Результаты для пилообразного потенциала

Как отмечалось выше, зависимость доли частиц $\Phi(\{V_{a,b}(x)\}, \tau_{a,b})$, пересекающих произвольное сечение, от среднего времени цикла $\tau = \tau_a + \tau_b$ определяется конкуренцией этого временного параметра с характерными временами рассматриваемой системы. К ним относится, прежде всего, характерное время диффузии $\tau_D = L^2/D$ на периоде потенциала L , где $D = (\beta\zeta)^{-1}$ – коэффициент диффузии, а ζ – коэффициент трения. Наличие пилообразного потенциала вносит еще два характерных времени, связанных с бездиффузионным скольжением по его двум наклонным участкам, $\tau_l = \zeta l^2/V$ и $\tau_{L-l} = \zeta(L-l)^2/V$. Иерархия характерных времен зависит от величины отношения барьера потенциала V к тепловой энергии $k_B T = \beta^{-1}$ и от соотношения параметров βV и l/L (для определенности будем считать, что $l < L/2$). Если высота барьера мала ($\beta V \ll 1$), то в системе доминирует диффузионный характер движения, и иерархия времен следующая: $\tau_D \ll \tau_l < \tau_{L-l}$ при $(\beta V)^2 < l/L$ и $\tau_l < \tau_D \ll \tau_{L-l}$ при $l/L < (\beta V)^2 \ll 1$. Последний случай соответствует большим градиентам потенциала и в пределе $l \rightarrow 0$ соответствует предельно асимметричному пилообразному потенциалу. Если барьер высок ($\beta V \gg 1$), то неравенство $l/L < (\beta V)^2$ выполняется всегда, так что имеем иерархию времен $\tau_l < \tau_{L-l} \ll \tau_D$, также допускающую рассмотрение предельно асимметричного потенциала.

Детальный анализ частотной зависимости средней скорости броуновского мотора для случая пилообразных потенциалов, флуктуирующих на полпериода, был выполнен в работе [17]. В адиабатическом режиме величина $\Phi \rightarrow 1$ для предельно асимметричного пилообразного потенциала при $\beta V \gg 1$. Значения Φ меньше единицы при $\beta V \sim 1$ и пропорциональны $(\beta V)^3$ при $\beta V \ll 1$ [14]. При флуктуациях пилообразного потенциала по амплитуде значения Φ всегда меньше единицы и равны $1/2$ при циклическом включении и выключении потенциала (on-off ratchet), когда $\beta V \gg 1$. Высокочастотное поведение средней скорости и величины Φ для предельно асимметричного пилообразного потенциала ($l = 0$) существенно отличается от случая $l \neq 0$: средняя скорость выходит на насыщение ($\Phi \propto \tau$) в первом случае и стремится к нулю ($\Phi \propto \tau^2$) – во втором. Это связано с конкуренцией между τ и наименьшим характерным временем системы. Для предельно асимметричного пилообразного потенциала τ_l всегда меньше τ , тогда как для потенциала с $l \neq 0$ всегда существует такое τ , что $\tau < \tau_l$. Именно в этой области $\tau < \tau_l$ и происходит уменьшение средней скорости до нуля.

При учете инерции (массы частицы) возникает еще одно характерное время – время релаксации скоростей к распределению Максвелла $\tau_v = m/\zeta$. Эта величина предполагается наименьшим характерным временем для безынерционного

рассмотрения. Малость инерционных поправок определяется малостью отношений τ_v к τ_D , τ_{L-l} или τ_l . В адиабатическом режиме, когда τ много больше всех характерных времен, инерционные вклады нельзя считать малыми при больших градиентах потенциалов, так как значения параметров τ_v и τ_l становятся сравнимы по порядку величины. Поэтому случай предельно асимметричных пилообразных потенциалов (в котором $\tau_l = 0$) не может быть исследован в этом приближении.

В приближении малой инерционной поправки и адиабатичности флуктуаций функционал (7) может быть представлен в следующем виде [10]:

$$\Phi = \varphi_+(b, b) + \varphi_+(a, a) - \varphi_-(b, a) - \varphi_-(a, b) - \frac{m}{\zeta^2} \int_0^L dx [\tilde{V}_b''(x) \rho_+(x, b) - \tilde{V}_a''(x) \rho_+(x, a)] \int_0^x dy [\rho_-(y, b) - \rho_-(y, a)], \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{\pm}(a, b) &= \int_0^L dx \rho_{\pm}(x, a) \int_0^x dy \rho_{\mp}(y, b), \quad \varphi_{\pm}(a, b) + \varphi_{\mp}(b, a) = 1, \\ \tilde{V}_j''(x) &= V_j''(x) - \int_0^L dy V_j''(y) \rho_{\pm}(y, j), \quad j = a, b \\ \rho_{\pm}(x, j) &= \exp[\pm \beta V_j(x)] / \int_0^L dy \exp[\pm \beta V_j(y)]. \end{aligned} \quad (9)$$

Вычисление функций $\varphi_{\pm}(a, b)$ для неантисимметричного пилообразного потенциала (5) приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} \varphi_+(a, b) &= Z_{ab}^{-1} [\varphi_{\tilde{L}}(a, b) + \varphi_{l_0}(a, b)], \\ Z_{ab} &= \int_0^L dx e^{\beta V_a(x)} \int_0^L dx e^{-\beta V_b(x)} = \\ &= \frac{4\tilde{L}^2}{ab} e^{(a-b)/2} \sinh \frac{a}{2} \sinh \frac{b}{2} + l_0 \tilde{L} \left(\frac{e^a - 1}{a} + \frac{1 - e^{-b}}{b} \right) + l_0^2, \\ \varphi_{\tilde{L}}(a, b) &= \int_0^{\tilde{L}} dx e^{\beta V_a(x)} \int_0^x dy e^{-\beta V_b(y)} = \\ &= \frac{2\tilde{L}^2}{ab} e^{(a-b)/2} \sinh \frac{a}{2} \sinh \frac{b}{2} \left[1 - \frac{\tilde{L} - 2l}{\tilde{L}} \frac{a \coth(a/2) - b \coth(b/2)}{a - b} \right], \\ \varphi_{l_0}(a, b) &= \int_L^{\tilde{L}} dx e^{\beta V_a(x)} \int_0^x dy e^{-\beta V_b(y)} = l_0 \tilde{L} \frac{1 - e^{-b}}{b} + \frac{1}{2} l_0^2, \quad a = \beta V_a, \quad b = \beta V_b. \end{aligned} \quad (10)$$

При $l_0 = 0$ выражения (10) сводятся к известным результатам [11] для стандартного пилообразного потенциала (3).

В случае флуктуирующих по знаку потенциалов $V_a(x) = -V_b(x) \equiv V(x)$ не зависящий от массы вклад в среднюю скорость обращается в нуль вследствие тождества

$$\int_0^L dx [\rho_+(x) - \rho_-(x)] \int_0^x dy [\rho_+(y) - \rho_-(y)] = \frac{1}{2} \left\{ \int_0^L dx [\rho_+(x) - \rho_-(x)] \right\}^2 = 0, \quad (11)$$

в записи которого использовано обозначение

$$\rho_{\pm}(x) = \exp[\pm\beta V(x)] / \int_0^L dy \exp[\pm\beta V(y)]. \quad (12)$$

Поэтому в этом случае моторный эффект является чисто инерционным (он отсутствует при $m = 0$) и формула (8) для него преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{m}{\zeta^2} \int_0^L dx V''(x) [\rho_-(x) + \rho_+(x)] \int_0^x dy [\rho_+(y) - \rho_-(y)] - \\ & - \frac{mL}{\zeta^2 \tau} \left[\frac{1}{2} - \int_0^L dx \rho_+(x) \int_0^x dy \rho_-(y) \right] \int_0^L dx V''(x) [\rho_-(x) + \rho_+(x)]. \end{aligned} \quad (13)$$

Вычисление инерционных поправок можно упростить, подставив в (10) вторые производные потенциала $V''(x)$, выраженные через δ -функции:

$$V''(x) = \frac{V}{l} \delta(x) + \frac{V}{\tilde{L} - l} \delta(x - \tilde{L}) - \frac{V\tilde{L}}{l(\tilde{L} - l)} \delta(x - l). \quad (14)$$

В результате, при флуктуациях знака неантисимметричного пилообразного потенциала получаем

$$\begin{aligned} \Phi = & -\frac{2\tilde{\kappa}}{1 - \tilde{\kappa}^2} \frac{\kappa_0}{(1 - \kappa_0)^3} \frac{mu^3}{\beta \zeta^2 L^2} \left[\coth(u/2) - \frac{u}{2 \sinh^2(u/2)} + \frac{\kappa_0 u}{1 - \kappa_0} \right] \times \\ & \times \left\{ \frac{4 \sinh^2(u/2)}{4 \sinh^2(u/2) + 2[\kappa_0 u / (1 - \kappa_0)] \sinh u + [\kappa_0 u / (1 - \kappa_0)]^2} \right\}^2, \end{aligned} \quad (15)$$

где $u = \beta V$ и введены обозначения $\tilde{\kappa} = 1 - 2l / \tilde{L}$ для коэффициента асимметрии и $\kappa_0 = l_0 / L$ для коэффициента отклонения потенциального профиля от антисимметричного.

Область применимости полученного результата определяется малостью безразмерного инерционного параметра $\varepsilon = mV / (\zeta L)^2 \ll 1$, не слишком большими значениями градиентов потенциала ($\tilde{\kappa}^2$ не должно приближаться к единице) и областью не слишком низких температур, чтобы выполнялось неравенство $\varepsilon u^3 \ll 1$ [10].

Анализ выражения (15) проведем в высокотемпературном приближении ($u \ll 1$), в котором оно принимает вид

$$\Phi = -\varepsilon u^3 \frac{\xi(1 - 2\eta - \xi)(1 - \xi)}{6\eta(1 - \eta - \xi)}, \quad \xi = l_0 / L, \quad \eta = l / L. \quad (16)$$

На рис. 3 представлена зависимость $\Phi(\xi)$ для нескольких значений параметра $\eta = l / L$. При $\xi = 0$ моторный эффект отсутствует, так как потенциальный профиль

антисимметричен. По мере увеличения отклонения профиля от антисимметричного (с ростом параметра ξ) функция $\Phi(\xi)$ (а вместе с ней и средняя скорость частицы) сначала убывает до некоторого отрицательного значения, а затем возрастает, проходя нулевое значение в точке $\xi_0 = 1 - 2\eta$, соответствующей нулевому значению параметра асимметрии $\tilde{\kappa}$. Дальнейшее увеличение $\Phi(\xi)$ соответствует области, выходящей за пределы применимости соотношений (15) и (16) (большие градиенты потенциала).

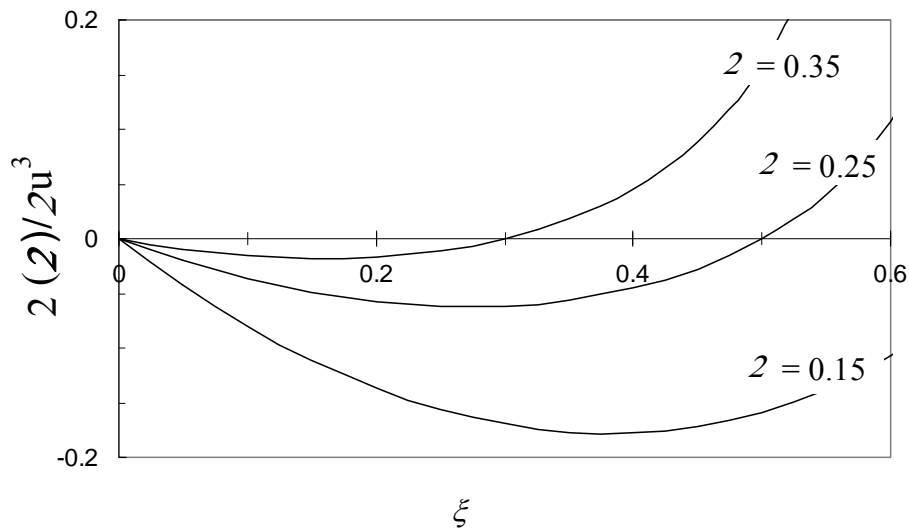


Рис. 3. Зависимость доли частиц Φ (в единицах εu^3), пересекающих произвольное поперечное сечение за время одного цикла адиабатических флуктуаций неантисимметричного пилообразного потенциала, от параметра $\xi = l_0 / L$, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного, при заданных значениях параметра $\eta = l / L$.

Выводы

Разработана модель броуновского мотора с флуктуациями потенциального профиля пилообразной формы. Представлены параметризация этого профиля, свойства его симметрии и качественный анализ зависимостей средней скорости мотора от параметров профиля, температуры и частоты флуктуаций. Детально рассмотрен адиабатический режим флуктуаций при учете малой инерционной поправки. Предложена модификация пилообразного профиля, выводящая его из класса антисимметричных периодических функций, позволившая получить чисто инерционный моторный эффект в случае флуктуаций профиля по знаку. В этом случае получено аналитическое выражение для средней скорости мотора, из которого следует ее немонотонная зависимость от параметра, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного. Установлено, что при ненулевых значениях данного параметра моторный эффект может возникать при флуктуациях знака потенциала, а также выявлена возможность использования этого параметра для управления направлением движения частицы.

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. – 2009. – V. 81, No 1. – P. 387–442.

3. Bressloff P. C., Newby J. M. Stochastic models of intracellular transport. // *Rev. Mod. Phys.* – 2013. – V. 85, No 1. – P.135–196.
4. Magnasco M. O. Forced thermal ratchets // *Phys. Rev. Lett.* –1993. – V. 71, No 10. – P. 1477-1481.
5. Sokolov M. Irreversible and reversible modes of operation of deterministic ratchets // *Phys. Rev. E.* – 2001. – V. 63. No 2. – P. 021107-1-4.
6. 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, No 5. – P. 051120-1-10.
7. Корочкова Т. Е., Шкода Н. Г., Чернова А. А., Розенбаум В. М. Точные аналитические решения в теории броуновских моторов и насосов // *Поверхность*, 2012, № 4(19), с. 19–35.
8. Корочкова Т. Е., Розенбаум В. М., Чуйко А. А. Дрейф броуновской частицы, обусловленный ориентационным структурированием адсорбата // *Доповіді НАН України* – 2004. – № 8. – С. 93–98.
9. Ghosh P. K., Hänggi P., Marchesoni F., Nori F., Schmid G. Brownian transport in corrugated channels with inertia // *Phys. Rev. E.* – 2012. – 86, 021112 ().
10. Rozenbaum V. M., Makhnovskii Yu. A., Shapochkina I. V., Sheu S.-Y., Yang D.-Y., Lin S. H. Inertial effects in adiabatically driven flashing ratchets // *Phys. Rev. E.* – 2014. – V. 89, No 1. – P. 052131-1-9.
11. Розенбаум В.М., Шапочкина И.В. Неадиабатические поправки к скорости броуновского мотора со сложным потенциальным рельефом // *Письма в ЖЭТФ* – 2010. –Т. 92, № 2. – С. 124-129.
12. Parrondo J.M.R. Reversible ratchets as Brownian particles in an adiabatically changing periodic potential // *Phys. Rev. E.* – 1998. – V. 57, N. 6. – P. 7297–7300.
13. von Smoluchowski M. Über Brownsche Molecularbewegung unter Einwirkung äußerer Kräfte und deren Zusammenhang mit der verallgemeinerten Diffusionsgleichung// *Ann. Phys. (Leipzig)* 48, 1103-1112 (1915).
14. Розенбаум В. М. Высокотемпературные броуновские моторы: детерминистические и стохастические флуктуации периодического потенциала // *Письма в ЖЭТФ* – 2008. –Т. 88, № 5. – С. 391-395.
15. Doering C. R., Dontcheva L. A., Klosek M. M. Constructive role of noise: Fast fluctuation asymptotics of transport in stochastic ratchets // *Chaos.* – 1998. – V. 8, N. 3. – P. 643-649.
16. Elston T. C., Doering C. R. Numerical and analytical studies of nonequilibrium fluctuation-induced transport processes // *J. Stat. Phys.* – 1996. – V. 83, N. 6. – P. 359-383.
17. 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, N. 4. – P. 041102-1-8.

МОДЕЛЬНИЙ ПИЛКОПОДІБНИЙ ПОТЕНЦІАЛ В ТЕОРІЇ БРОУНІВСЬКИХ МОТОРІВ

Т.Є. Корочкова¹, В.М. Розенбаум¹, І.В. Шапочкіна²

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України,
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, e-mail: taiscrust@mail.ru

²Білоруський державний університет,
пр-т Незавісності, 4, Мінськ 220050, Білорусь, e-mail: shapoch@mail.ru

Розроблено модель броунівського мотора з флуктуаціями потенціального профілю пилкоподібної форми, представлені параметризація цього профілю, властивості симетрії і якісний аналіз залежностей середньої швидкості мотора від параметрів моделі. Запропоновано модифікацію пилкоподібного профілю, який не належить до класу антисиметричних періодичних функцій і забезпечує направлений рух інерційних частинок при флуктуаціях знака потенціального профілю. Для цього випадку отримано аналітичний вираз для середньої швидкості мотора, з якого випливає її немонотонна залежність від параметра, що характеризує відхилення форми профілю від антисиметричного. Показано, що напрямок руху може обернутися зі зміною цього параметра.

SAWTOOTH POTENTIAL MODEL IN THE THEORY OF A BROWNIAN MOTORS

T.E. Korochkova¹, V.M. Rozenbaum¹, I.V. Shapochkina²

¹Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine,
17 General Naumov Str. Kyiv, 03164, Ukraine, e-mail: taiscrust@mail.ru

²Belarusian State University, Prospekt Nezavisimosti 4, 220050 Minsk, Belarus,
e-mail: shapoch@mail.ru

A Brownian motor model with a fluctuating saw-tooth potential profile is elaborated; the profile parameterization, its symmetry properties, as well as the qualitative analysis of the dependences of the average motor velocity on the parameters of the model are presented. A modification of the saw-tooth profile is suggested that does not belong to the class of antisymmetric functions and provides directed motion of inertial particles at fluctuations of the potential profile sign. For this case, an analytical expression for the average motor velocity is obtained that gives its nonmonotonic behaviour depending on a parameter characterizing the deviation of the profile from an antisymmetric one. It is shown that, for inertial particles, the direction of motion can be reversed by changing this parameter.