УДК 533.723:577.352.4(086.48)

СВОЙСТВА СИММЕТРИИ БРОУНОВСКИХ МОТОРОВ С ФЛУКТУИРУЮЩЕЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ

И. В. Шапочкина[1], Т. Е. Корочкова[2], В. М. Розенбаум[2]

[1] *Белорусский государственный университет, пр-т Независимости, 4, Минск 220050, Беларусь, e-mail: shapoch@mail.ru*
[2] *Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины, ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, e-mail: taiscrust@mail.ru*

Рассмотрено безинерционное движение броуновской частицы в потенциальном поле, задаваемом произвольной периодической функцией координаты и времени. Представлены первые члены разложения средней скорости частицы по малому параметру, равному отношению амплитуды изменения потенциальной энергии к тепловой энергии, то есть выражение для средней скорости высокотемпературного броуновского мотора. Его анализ выявил векторную, сдвиговую и скрытую пространственно-временную симметрию Куберо-Рензони (D.Cubero, F.Renzoni). Эти типы симметрии использованы для анализа пространственно-временных зависимостей потенциальной энергии, приводящих к отсутствию моторного эффекта. Исследованы дополнительные типы симметрии, присущие адиабатически медленным и быстрым броуновским моторам, и условия на потенциальную энергию, при которых средняя скорость этих моторов обращается в ноль.

Введение

Броуновские частицы, диффундирующие в пространственно периодическом потенциале под действием управляющей силы с нулевым средним значением (unbiased driving force), являются прототипом броуновских моторов – модельных систем, в которых временные флуктуации потенциальной энергии могут приводить к направленному движению [1-5]. К широкому классу таких систем относятся частицы в растворах [6], вихри в сверхпроводниках [7], атомы в диссипативных оптических решетках [8] и электроны в органических полупроводниках [9]. К нему также можно отнести и теоретически предсказанные [10-12] броуновские моторы, функционирующие вблизи полярной поверхности твердого тела. Природа флуктуаций может быть различной: стохастические конформационные переходы молекул вследствие внешних неравновесных воздействий, влияние внешнего переменного электромагнитного поля, приложенного к системе, и др. При этом возникновение отличной от нуля средней скорости направленного движения броуновской частицы, моделирующей работу броуновского мотора, становится возможным за счет выполнения определенных условий, связанных с симметрией системы [1,2,5,13]. Хотя нарушение теплового равновесия (симметрии детального баланса) и пространственно-временной симметрии являют собой необходимые условия возникновения моторного эффекта, отсутствие последнего не всегда является результатом только тонкой подстройки управляющих параметров (как в случае получения точек остановки мотора), но может быть проявлением определенной, возможно скрытой, симметрии. Таким образом, особенно важным представляется выявление типов симметрий, исключающих возникновение направленного движения, поскольку реальные моторы могут функционировать только при их нарушении.

Первая наиболее полная публикация с систематическим изложением основных типов симметрий и их анализа принадлежит Рейманну [14]. Он ввел определения симметричной и суперсимметричной функций координаты и времени, что позволило ему сформулировать условия обращения средней скорости мотора в нуль, отметив при этом, что эти симметрии являются лишь известными на текущий момент, так что, вероятно должны быть открыты новые, более тонкие, и не столь очевидные, типы симметрий. Следует иметь в виду, что движение частиц и распространение волн в пространственно-периодических структурах, управляемое внешними меняющимися во времени силами, зависят от пространственно-временной симметрии соответствующих уравнений движения. Подробный анализ такой симметрии был проведен в работе [15] на основе стандартного подхода, основанного на нахождении и изучении группы преобразований, обращающих скорость частицы и оставляющих инвариантным уравнение движения. Недавняя работа Куберо и Рензони [16] сообщает об обнаружении в диссипативных системах одной из существующих скрытых симметрий, «не поддающихся» стандартному анализу.

С другой стороны, за последнее десятилетие авторами настоящей работы был получен ряд явных аналитических выражений для скорости броуновского мотора, функционирующего в высокотемпературном и адиабатическом режимах [17-19]. Их наличие дает альтернативный, более наглядный и эффективный, путь к выявлению и анализу типов пространственно-временной симметрии, оставляющих инвариантной скорость броуновского мотора или обращающих ее направление, а также условий обращения в ноль средней скорости различных броуновских моторов. Здесь эти выражения приводятся к виду, упрощающему такого рода анализ. Скрытая симметрия, обнаруженная в работе [16], также следует из приведенных выражений.

Фурье-представление скорости броуновского мотора с детерминистическим изменением потенциальной энергии

Следуя работе [17] рассмотрим одномерную динамику броуновской частицы в вязкой среде, которая характеризуется функцией $x(t)$, удовлетворяющей уравнению Ланжевена:

$$m\ddot{x} = -\zeta \dot{x} + F(x,t) + \xi(t) . \tag{1}$$

Здесь $\dot{x}(t)$ и $\ddot{x}(t)$ обозначают первую и вторую производные функции $x(t)$ по времени, m – масса частицы, ζ – коэффициент трения, $F(x,t) = -\partial U(x,t)/\partial x$ – соответствующая потенциальной энергии $U(x,t)$ приложенная сила, которая является периодической функцией координаты x и времени t,

$$F(x+L,t) = F(x,t+\tau) = F(x,t), \tag{2}$$

где L и τ − пространственный и временной периоды. Тепловые флуктуации моделируются как гауссовский белый шум $\xi(t)$ со средним значением и корреляционной функций вида

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t-t') \tag{3}$$

(k_B – постоянная Больцмана, T – равновесная абсолютная температура). Для малых частиц в достаточно вязкой среде инерционный член $m\ddot{x}$ может быть опущен. Тогда для статистического описания такого (безинерционного) движения броуновской частицы можно использовать функцию распределения $\rho(x,t)$, которая удовлетворяет уравнению Смолуховского [20]

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}J(x,t), \qquad J(x,t) = \zeta^{-1}\left[F(x,t)\rho(x,t) - k_B T\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,t)\right] \tag{4}$$

и условию нормировки $\int_0^L \rho(x,t)\,dx = 1$. Мгновенная скорость направленного движения частицы выражается через поток $J(x,t)$:

$$v(t) = \int_0^L dx\, J(x,t)\,. \tag{5}$$

Интересующее нас среднее значение скорости является результатом усреднения по периоду τ флуктуаций движущей силы:

$$\langle v(t)\rangle = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\, v(t)\,. \tag{6}$$

Периодичность функции $F(x,t)$ как по координате, так и по времени делает удобным использование двойного Фурье-преобразования:

$$f(x,t) = \sum_{qj} f_{qj}\exp(ik_q x - i\omega_j t), \quad k_q = (2\pi/L)q, \quad \omega_j = (2\pi/\tau)\,j\,, \tag{7}$$

где q и j – целые числа, k_q и ω_j − волновые векторы и частоты, а $f(x,t)$ – произвольная функция (здесь – сила и функция распределения установившегося процесса). Тогда дифференциальное уравнение (4) преобразуется в интегральную форму:

$$\rho_{qj}(t) = L^{-1}\delta_{q,0}\delta_{j,0} - i\zeta^{-1}\frac{k_q}{Dk_q^2 - i\omega_j}\sum_{q'j'} F_{q'j'}\rho_{q-q',j-j'}\,, \tag{8}$$

позволяющую записать решение уравнения Смолуховского в виде ряда, который получается путем последовательных итераций. Поскольку Фурье компонента мгновенной скорости направленного движения частицы (5) может быть выражена через Фурье компоненты F_{qj} (движущей силы) и ρ_{qj} (функции распределения):

$$v_j = \zeta^{-1}L\sum_{qj'} F_{qj'}\rho_{-q,j-j'}\,, \tag{9}$$

то она также представима в виде бесконечного ряда:

$$v_j = \zeta^{-1}F_{0j} + \sum_{n=1}^{\infty} i^n\zeta^{-n-1}\sum_{q_1 j_1\ldots q_n j_n}\frac{k_{q_1}\ldots k_{q_1+\ldots+q_n}F_{q_1 j_1}\ldots F_{q_n j_n}F_{-q_1-\ldots-q_n,\,j-j_1-\ldots-j_n}}{\left(i\omega_{j_1-j} + Dk_{q_1}^2\right)\ldots\left(i\omega_{j_1+\ldots+j_n-j} + Dk_{q_1+\ldots+q_n}^2\right)}\,. \tag{10}$$

Согласно формуле (6), среднее значение скорости броуновской частицы, являющейся следствием флуктуаций вынуждающей силы, соответствует значению Фурье компоненты v_j с $j=0$. Понятие броуновских моторов исключает тривиальное движение со скоростью $\zeta^{-1}F_{00}$ за счет постоянной приложенной силы F_{00}. Поэтому, полагая $F_{00}=0$, получаем окончательно:

$$\langle v\rangle = v_0 = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \zeta^{-n-1} \sum_{q_1 j_1 \ldots q_n j_n} \frac{k_{q_1}\ldots k_{q_1+\ldots+q_n} F_{q_1 j_1}\ldots F_{q_n j_n} F_{-q_1-\ldots-q_n,-j_1-\ldots-j_n}}{\left(i\omega_{j_1}+Dk_{q_1}^2\right)\ldots\left(i\omega_{j_1+\ldots+j_n}+Dk_{q_1+\ldots+q_n}^2\right)}. \tag{11}$$

Заметим, что среднее значение скорости является функционалом от функции $F(x,t)$, задаваемой, согласно формуле (11), набором ее Фурье компонент F_{qj}. Поэтому для дальнейшего анализа будем использовать обозначение этого функционала как: $\langle v\rangle = v\{F(x,t)\}$.

Высокотемпературное приближение и свойства симметрии

Высокотемпературное приближение в теории броуновских моторов справедливо при малых отношениях амплитуды изменения (пространственного и временного) потенциальной энергии частицы к ее тепловой энергии, что соответствует учету первых членов ряда (11) по степеням обратного коэффициента трения ζ. В работе [19] были приведены выражения для средней скорости броуновских моторов с флуктуирующей периодической потенциальной энергией, ограничиваясь значениями $n=1$ и 2, что было достаточно для реализации поставленных в ней целей. Для анализа симметрий этого не достаточно (как мы убедимся далее), и нам потребуется также явное выражение для $v\{F(x,t)\}$, включающее и $n=3$. Таким образом, приведем выражения для трех первых членов ряда в представлении с вещественными знаменателями, которое особенно удобно для планируемого симметрийного рассмотрения:

$$\langle v\rangle = v\{F(x,t)\} \approx v\{F(x,t)\}\big|_{n=1} + v\{F(x,t)\}\big|_{n=2} + v\{F(x,t)\}\big|_{n=3}, \tag{12}$$

$$v\{F(x,t)\}\big|_{n=1} = \frac{1}{\zeta^2}\sum_{qj}\frac{k_q\omega_j}{\omega_j^2+D^2k_q^4}\left|F_{qj}\right|^2, \tag{13}$$

$$v\{F(x,t)\}\big|_{n=2} = \frac{1}{\zeta^3}\sum_{q_1j_1,q_2j_2}\frac{k_{q_1}k_{q_1+q_2}\left(D^2k_{q_1}^2k_{q_1+q_2}^2-\omega_{j_1}\omega_{j_1+j_2}\right)}{\left(\omega_{j_1}^2+D^2k_{q_1}^4\right)\left(\omega_{j_1+j_2}^2+D^2k_{q_1+q_2}^4\right)}F_{q_1j_1}F_{q_2j_2}F_{-q_1-q_2,-j_1-j_2}, \tag{14}$$

$$\begin{aligned} v\{F(x,t)\}\big|_{n=3} &= \frac{1}{\zeta^4}\sum_{q_1j_1,q_2j_2,q_3j_3} k_{q_1}k_{q_1+q_2}k_{q_1+q_2+q_3}F_{q_1j_1}F_{q_2j_2}F_{q_3j_3}F_{-q_1-q_2-q_3,-j_1-j_2-j_3}\times \\ &\times\frac{\omega_{j_1}\omega_{j_1+j_2}\omega_{j_1+j_2+j_3}-\omega_{j_1}D^2k_{q_1+q_2}^2k_{q_1+q_2+q_3}^2-\omega_{j_1+j_2}D^2k_{q_1}^2k_{q_1+q_2+q_3}^2-\omega_{j_1+j_2+j_3}D^2k_{q_1}^2k_{q_1+q_2}^2}{\left(\omega_{j_1}^2+D^2k_{q_1}^4\right)\left(\omega_{j_1+j_2}^2+D^2k_{q_1+q_2}^4\right)\left(\omega_{j_1+j_2+j_3}^2+D^2k_{q_1+q_2+q_3}^4\right)}. \end{aligned} \tag{15}$$

Прежде всего, заметим, что в силу соотношения (7) операциям обращения знака координаты и времени в функции $F(x,t)$ соответствует обращение знака индексов q и j. Докажем это на примере обращения знака координаты:

$$F(-x,t) = \sum_{qj}F_{qj}\exp(-ik_qx-i\omega_jt) \underset{q\to -q}{=} \sum_{qj}F_{-q,j}\exp(ik_qx-i\omega_jt)\ . \tag{16}$$

Поэтому, запишем в символическом виде все интересующие нас операции, связанные с обращением знака пространственной и временной переменных в $F(x,t)$ как:

$$F(x,t) \to F_{qj},\ F(-x,t) \to F_{-q,j},\ F(x,-t) \to F_{q,-j},\ F(-x,-t) \to F_{-q,-j}\,. \tag{17}$$

Докажем далее три важных свойства симметрии, которые понадобятся нам для анализа. Начнем с векторного свойства симметрии, согласно которому все векторные величины изменяют знак при замене $x \to -x$:

$$v\{F(x,t)\} = -v\{-F(-x,t)\}\,. \tag{18}$$

Обращение знака скорости в выражениях (13) и (15) при замене $x \to -x$ происходит исключительно за счет нечетности количества сомножителей k_q (они меняют знак при $q \to -q$), поскольку количество сомножителей F_{qj} в этих выражениях четное, а, значит, выражения (13), (15) инвариантны относительно знаков последних. Наоборот, обращение знака скорости в выражении (14) происходит исключительно за счет нечетности количества сомножителей F_{qj} (также изменяющих знак при $q \to -q$), поскольку количество сомножителей k_q в этих выражениях четное.

Перейдем теперь к доказательству сдвигового свойства симметрии. Оно является следствием периодичности силы по координате и времени: сдвиг начала отсчета координаты на x_0 и времени на t_0 не должен влиять на величину скорости броуновского мотора:

$$v\{F(x+x_0,t+t_0)\} = v\{F(x,t)\}\,. \tag{19}$$

Исходя из разложения в двойной ряд Фурье (7), легко показать, что сдвиг первого и второго аргументов функции $F(x,t)$ на, соответственно, x_0 и t_0, приводит к возникновению фазового множителя $\exp(ik_q x_0 - i\omega_j t_0)$ перед Фурье компонентами F_{qj}: $F(x+x_0,t+t_0) \to \exp(ik_q x_0 - i\omega_j t_0)F_{qj}$. Однако при этом в произведениях $\left|F_{qj}\right|^2$, $F_{q_1 j_1}F_{q_2 j_2}F_{-q_1-q_2,-j_1-j_2}$ и $F_{q_1 j_1}F_{q_2 j_2}F_{q_3 j_3}F_{-q_1-q_2-q_3,-j_1-j_2-j_3}$, входящих в соотношения (13)-(15), все фазовые сомножители взаимно сокращаются, что и доказывает инвариантность скорости относительно пространственно-временных сдвигов.

Отметим, что свойства (18) и (19) имеют общий характер и не зависят от специфики описываемой динамики броуновской частицы, в частности, не ограничиваются случаем ее безинерционного движения. Принципиально иной является скрытая симметрия, открытая Куберо и Рензони [16]:

$$v\{F(x,t)\} = v\{F(-x,-t)\}\,. \tag{20}$$

Она имеет место только для безинерционного движения (overdamped limit). На первый взгляд, существование такой симметрии может показаться очевидным следствием структуры уравнения Ланжевена (1), записанного при $m=0$. Поскольку при заменах $x \to -x$ и $t \to -t$ скорость частицы $\dot{x}(t)$ не меняет знак, а ускорение $\ddot{x}(t)$ меняет, то уравнение (1) принимает вид:

$$-m\ddot{x} = -\zeta\,\dot{x} + F(-x,-t) + \xi(t)\,. \tag{21}$$

Тогда, исключая эффекты инерции (полагая $m = 0$), проводя усреднение уравнений (1) и (21) по всем возможным траекториям $x(t)$ и учитывая, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$, получаем для средней скорости равенства:

$$\langle \dot{x} \rangle = \zeta^{-1} \langle F(x,t) \rangle = \zeta^{-1} \langle F(-x,-t) \rangle\,. \tag{22}$$

Среднее значение $\langle F(x,t) \rangle$ можно рассматривать как функционал от $F(x,t)$. Поэтому свойство (20) можно считать формально доказанным. По крайней мере, из приведенного доказательства видно, что обсуждаемое свойство справедливо только при $m = 0$. Формальность этого доказательства состоит, однако, в том, что процедура усреднения не конкретизирована. Остается не ясным поведение траекторий $x(t)$ или функции распределения $\rho(x,t)$ (см., например, уравнение (9), определяющее зависимость скорости от Фурье компоненты ρ_{qj}) при заменах $x \to -x$ и $t \to -t$. Принципиальная трудность сопряжена с операцией обращения времени. Она состоит в том, что законы механики обратимы при обращении времени, тогда как законы статистической физики, которые, казалось бы, используют законы механики, необратимы. Попытка осмыслить данное несоответствие породила известный парадокс Лошмидта. Поскольку механическая модель предполагает, что движение тела по какой-то определенной траектории эквивалентно обратному движению по той же самой траектории, а, например, кинетическая теория газов основана на механической модели, то всякому движению молекул газа с возрастанием энтропии должно соответствовать движение его молекул с убыванием энтропии. Так как в природе «властвует» закон возрастания энтропии, то либо механическая модель не применима в термодинамике, либо подобное рассмотрение упускает некий важный момент, делающий невозможным спонтанное убывание энтропии в термодинамических процессах [21]. Этот важный момент состоит в том, что статистические веса прямого и обратного движений по одной и той же траектории не могут быть одинаковыми: статистические веса движений, соответствующих возрастанию энтропии, должны быть больше [16]. Исходя из этого, следует, что строгое доказательство поведения и свойств (в том числе и симметрии) системы, подчиняющейся законам статистической физики, должно опираться именно на сами решения уравнений Ланжевена или Смолуховского. В дополнительных материалах к работе [16] такое доказательство свойства (20) было проведено на основе крайне громоздкого анализа симметрии обратной матрицы, задающей формальное решение задачи.

Полученные нами явные выражения (12)-(15) для средней скорости высокотемпературных броуновских моторов позволяют убедиться в наличии скрытой симметрии (20) путем несложных рассмотрений. Поскольку Фурье-компоненты функции $F(-x,-t)$ есть $F_{-q,-j}$, то после изменения знаков всех переменных суммирований в (13)-(15) величины $\left|F_{qj}\right|^2$, $F_{q_1 j_1} F_{q_2 j_2} F_{-q_1-q_2,-j_1-j_2}$ и $F_{q_1 j_1} F_{q_2 j_2} F_{q_3 j_3} F_{-q_1-q_2-q_3,-j_1-j_2-j_3}$ останутся неизменными; и только волновые векторы k_q и частоты ω_j поменяют знак. Поскольку знаменатели выражений (13)-(15) являются четными функциями переменных k_q и ω_j, а числители инвариантны относительно одновременной замены $k_q \to -k_q$ и $\omega_j \to -\omega_j$, то тем самым мы и доказали свойство (20).

Существование трех симметрий (18)-(20) является мощным инструментом выявления условий обращения в ноль средней скорости различных броуновских моторов без трудоемкого аналитического либо численного решения соответствующих уравнений. В качестве иллюстрации рассмотрим сформулированное Рейманом условие, согласно которому средняя скорость мотора обращается в ноль для суперсимметричной функции координаты и времени, то есть удовлетворяющей уравнению

$$F(x,t) = -F(x+L/2,-t), \tag{23}$$

в котором, фактически, имеет место сдвиговая симметрия (на полпериода) по координате и обычная симметрия (четность функции) по времени. Тогда доказательство обращения скорости в ноль заключается в записи следующей цепочки равенств:

$$v\{F(x,t)\} \underset{(23)}{=} v\{-F(x+L/2,-t)\} \underset{(19)}{=} v\{-F(x,-t)\} \underset{(20)}{=} v\{-F(-x,t)\} \underset{(18)}{=} -v\{F(x,t)\}. \tag{24}$$

Здесь под знаками равенств указаны номера формул – записи свойств, которые обеспечивают выполнение этих равенств. Получается, что величина $v\{F(x,t)\}$ равна той же величине, взятой с обратным знаком, что и доказывает исчезновение моторного эффекта, $v\{F(x,t)\}=0$. Тот факт, что в доказательстве использовано свойство (20), говорит о том, что вывод справедлив только для безинерционного движения броуновской частицы с $m=0$.

Если бы свойство скрытой симметрии (20) не использовалось в какой-либо цепочке равенств (типа (24)), то это означало бы наличие эффекта для частицы произвольной массы (то есть возникающего не только в рамках безинерционной динамики). Примером может служить эффект обращения в ноль средней скорости частицы для случая симметричной потенциальной энергии $U(x,t)=U(-x,t)$, которой соответствует антисимметричная по координате сила:

$$F(x,t) = -F(-x,t). \tag{25}$$

Здесь доказательство равенства $v\{F(x,t)\}=0$ имеет вид:

$$v\{F(x,t)\} \underset{(25)}{=} v\{-F(-x,t)\} \underset{(18)}{=} -v\{F(x,t)\}. \tag{26}$$

В нем не использована скрытая симметрия (20), поскольку операция обращения времени в рассматриваемое преобразование (25) не входила. Следовательно, свойство $v\{F(x,t)\}=0$ с функцией $F(x,t)$ вида (25) имеет общий характер – справедливо для движения частицы произвольной массы в симметричных средах.

Свойства симметрии адиабатических моторов

В работе [19] были проанализированы свойства симметрии адиабатических (быстрого и медленного) броуновских моторов с потенциальной энергией общего вида $U(x;\mathbf{R})$, зависящей от набора параметров $\mathbf{R}=\{R_1,R_2...,R_n\}$, описывающего ее поведение во времени. Если эти параметры периодически изменяются со временем (с периодом τ), $\mathbf{R}(t+\tau)=\mathbf{R}(t)$, то дрейфовые скорости адиабатически медленного и быстрого броуновских моторов определяются, соответственно, выражениями [22]:

$$\langle v\rangle = \frac{L}{\tau}\oint d\mathbf{R}\cdot\int_0^L dx\rho_+(x;\mathbf{R})\int_0^x dy\nabla_{\mathbf{R}}\rho_-(y;\mathbf{R}), \tag{27}$$

$$\langle v\rangle = \frac{L}{\tau}\int_0^L dx\left[\rho_+^{(a)}(x)-\rho_+^{(b)}(x)\right]\int_0^x dy\left[\rho_-^{(a)}(y)-\rho_-^{(b)}(y)\right], \tag{28}$$

где

$$\rho_\pm(x;\mathbf{R}) = Z_\pm^{-1}(\mathbf{R})e^{\pm\beta U(x;\mathbf{R})},\quad Z_\pm(\mathbf{R})=\int_0^L dx e^{\pm\beta U(x;\mathbf{R})}. \tag{29}$$

а $\rho_\pm^{(a)}(x)$ и $\rho_\pm^{(b)}(x)$ определяются соотношением (29), в котором потенциал $U(x;\mathbf{R})$ заменяется на $U_a(x)$ и $U_b(x)$, соответственно.

Докажем, что средняя скорость мотора (27), функционирующего за счет адиабатически медленных изменений потенциальной энергии, является четным функционалом последней. Используя свойство $\oint d\mathbf{R}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}\Phi(\mathbf{R})=0$ (с произвольной функцией $\Phi(\mathbf{R})$), выражение (27) можно записать в виде:

$$\langle v\rangle = -\frac{L}{\tau}\oint d\mathbf{R}\cdot\int_0^L dx\nabla_{\mathbf{R}}\rho_+(x;\mathbf{R})\int_0^x dx'\rho_-(x';\mathbf{R}) \tag{30}$$

Тогда, изменяя порядок интегрирования в (30) и принимая во внимание равенство $\int_{x'}^L dx\nabla_{\mathbf{R}}\rho_+(x;\mathbf{R}) = -\int_0^{x'} dx\nabla_{\mathbf{R}}\rho_+(x;\mathbf{R})$, приходим к альтернативному представлению выражения (27):

$$\langle v\rangle = \frac{L}{\tau}\oint d\mathbf{R}\cdot\int_0^L dx\rho_-(x;\mathbf{R})\int_0^x dx'\nabla_{\mathbf{R}}\rho_+(x';\mathbf{R}). \tag{31}$$

Величины $\rho_+(x;\mathbf{R})$ и $\rho_-(x;\mathbf{R})$ переходят друг в друга при обращении знака $U(x;\mathbf{R})$, что непосредственно следует из определения (29) этих величин. Поэтому представления (27) и (31) для одной и той же величины $\langle v\rangle$ доказывают, что средняя скорость адиабатически медленного броуновского мотора является четным функционалом потенциальной энергии. В обозначениях предыдущего раздела, в котором средняя скорость рассматривалась как функционал приложенной силы $F(x,t)=-\partial U\left(x;\mathbf{R}(t)\right)/\partial x$, это свойство записывается как

$$v\{F(x,t)\} = v\{-F(x,t)\}. \tag{32}$$

Адиабатически быстрый броуновский мотор функционирует за счет мгновенных и периодических со временем переходов между двумя пространственными потенциальными профилями $U_a(x)$ и $U_b(x)$, времена жизни τ_a и τ_b которых много больше всех характеристических времен системы. Докажем, что средняя скорость (28) такого мотора является нечетным функционалом потенциальной энергии. Для этого изменим порядок интегрирования в выражении (28) и воспользуемся равенством $\int_{x'}^{L} dx\left[\rho_+^{(a)}(x)-\rho_+^{(b)}(x)\right] = \; = -\int_0^{x'} dx\left[\rho_+^{(a)}(x)-\rho_+^{(b)}(x)\right]$. В результате получим:

$$\langle v\rangle = -\frac{L}{\tau}\int_0^L dx\left[\rho_-^{(a)}(x)-\rho_-^{(b)}(x)\right]\int_0^x dx'\left[\rho_+^{(a)}(x')-\rho_+^{(b)}(x')\right]. \qquad (33)$$

Сравнение выражений (28) и (33) доказывает требуемое утверждение, которое в обозначениях предыдущего раздела принимает вид:

$$v\{F(x,t)\} = -v\{-F(x,t)\}. \qquad (34)$$

Сопоставляя результаты этого раздела с предыдущим, приходим к выводу, что в адиабатическом пределе выражения (13) и (15) высокотемпературного приближения соответствуют адиабатически медленным моторам, а выражение (14) − быстрым. Поэтому для адиабатически медленных и быстрых броуновских моторов обращение средней скорости в ноль может произойти при меньшем количестве условий (симметрий), налагаемых на потенциальную энергию (движущую силу), чем в ситуации, когда изменение потенциальной энергии мотора не является адиабатическим. Например, для адиабатически медленных броуновских моторов одного свойства инвариантности движущей силы относительно преобразования обращения времени $F(x,t)=F(x,-t)$ уже достаточно, чтобы средняя скорость $\langle v\rangle = 0$. Доказывается это так:

$$v\{F(x,t)\} = v\{F(x,-t)\} \underset{(32)}{=} v\{-F(x,-t)\} \underset{(20)}{=} v\{-F(-x,t)\} \underset{(18)}{=} -v\{F(x,t)\}. \qquad (35)$$

При этом на координатную зависимость силы не налагается никаких условий. И, наоборот, средняя скорость движения адиабатически быстрых моторов обращается в ноль, если только $F(x,t) = -F(x+L/2,t)$, причем симметрийные свойства временной зависимости силы могут быть любыми:

$$v\{F(x,t)\} = v\{-F(x+L/2,t)\} \underset{(34)}{=} -v\{F(x+L/2,t)\} \underset{(19)}{=} -v\{F(x,t)\}. \qquad (36)$$

Обсуждение и выводы

В данной статье представлен краткий обзор свойств симметрии броуновских моторов с флуктуирующей периодической потенциальной энергией, который включает и новый тип скрытой симметрии [16] (недавно открытый для безинерционного движения), затрагивающей одновременное изменение знаков как пространственной, так и временной переменной. Поскольку свойства диссипативных систем (к которым относятся и броуновские моторы) не инвариантны относительно преобразования обращения времени, стандартный симметрийный анализ к таким системам не применим, а новые типы симметрии могут быть выявлены только из анализа решений соответствующих статистических уравнений, а не самих уравнений. Для броуновских моторов таким уравнением является уравнение Смолуховского. Его аналитические решения можно получить в двух приближениях: высокотемпературном и адиабатическом [17-19]. Первое приближение (называемое также низкоэнергетическим) задается малостью отношения амплитуды пространственного и/или временного изменения потенциальной энергии к тепловой энергии. В данной статье впервые приведен и проанализирован вклад в характеристики мотора с флуктуирующей периодической потенциальной энергией, который соответствует учету четвертой степени этого малого параметра (причем оказалось, что именно его наличие принципиально значимо в процедуре анализа симметрийных свойств системы). Второе приближение (адиабатический или низкочастотный предел) предполагает слабый (в пределе – отсутствующий) теплообмен подсистемы, то есть броуновского мотора, с окружающей средой. Такая ситуация может возникать при адиабатически медленных либо адиабатически быстрых процессах, причем, для обоих процессов авторами получены аналитически выражения, анализ симметрии которых проведен в данной статье.

Из полученных соотношений для средней скорости высокотемпературных броуновских моторов следует, что скорость инвариантна относительно векторной и сдвиговой симметрий, а также относительно скрытой симметрии, предполагающей одновременное изменение знаков пространственной и временной переменных. Причем, в последнем случае представленная аналитическая запись скорости мотора позволила избежать в доказательстве громоздких рассуждений, приводимых другими авторами в аналогичных рассмотрениях. Первые два из указанных свойств симметрии носят общий характер, тогда как третье справедливо только для безинерционного движения (overdamped limit). Эти три свойства симметрии позволили достаточно легко доказать отсутствие моторного эффекта в пространственно симметричных и суперсимметричных системах. Вывод, касающийся симметричных систем, носит общий характер, тогда как суперсимметрия запрещает движение лишь безынерционного мотора. Из представленных в работе соотношений для средней скорости адиабатических броуновских моторов следует, что она является четным функционалом потенциальной энергии (приложенной силы) в случае адиабатически медленных моторов и нечетным функционалом – в случае адиабатически быстрых. Объединяя эти выводы с результатами, полученными в рамках высокотемпературного приближения, показано, что обращение средней скорости броуновского мотора в ноль выполняется при меньшем числе условий на симметрию системы по сравнению с иными режимами работы моторов. А именно, адиабатически медленный мотор не будет демонстрировать направленное движение, если его потенциальная энергия (как функция координат и времени) является нечетной функцией времени при любой координатной зависимости. С другой стороны, для адиабатически быстрых моторов, направленное движение не возникает, если произвольно зависящая от времени потенциальная энергия броуновской частицы изменяет знак при сдвиге координаты на полпериода. Выявленные типы симметрии, таким образом, следует исключать при конструировании реальных броуновских моторов, поскольку их наличие в системе запрещает направленное движение, а значит, и функционирование мотора.

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. Schadschneider A, Chowdhury D, Nishinari K. Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles. – Amsterdam: Elsevier, 2010. – 582 p.
4. Goychuk I. Molecular machines operating on the nanoscale: from classical to quantum // Beilstein J. Nanotechnol. – 2016. – V. 7. – P. 328-350.

5. Cubero D., Renzoni F. Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nano-motors. – Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2016. – 200 p.
6. Rousselet J., Salome L., Ajdari A., Prost J. Directional motion of Brownian particles induced by a periodic asymmetric potential // Nature. – 1994. – 370. – P. 446-448.
7. de Souza Silva C. C., Van de Vondel J., Morelle M., Moshchalkov V. V. Controlled multiple reversals of a ratchet effect // Nature. – 2006. – 440. – P. 651-654.
8. Gommers R., Bergamini S., Renzoni F. Dissipation-Induced Symmetry Breaking in a Driven Optical Lattice // Phys. Rev. Lett. – 2005. – 95. P. 0073003-1-4.
9. Kedem O., Lau B., Weiss E. A. How to Drive a Flashing Electron Ratchet to Maximize Current // Nano Letters. – 2017. – 17(9). – P. 5848-5854.
10. 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. – Vol. 110, No. 41. – P. 20111-20114.
11. Rozenbaum V. M., Chernova A. A. Near-surface Brownian motor with synchronously fluctuating symmetric potential and applied force // Surface Science. – 2009. – 603. – P. 3297–3300.
12. Rozenbaum V. M., Dekhtyar M. L., Lin S. H., Trakhtenberg L. I. Photoinduced diffusion molecular transport // J. Chem. Phys. – 2016. – 145. – 064110- 1-12.
13. Kanada R., Sasaki K. Thermal ratchets with symmetric potentials // J. Phys. Soc. Jpn. – 1999. – 68. – P. 3759-3762.
14. Reimann P. Supersymmetric Ratchets // Phys. Rev. Lett.—2001. – 86. – P. 4992-4995.
15. Denisov S., Flach S., Hänggi P. Tunable transport with broken spacetime symmetries // Phys. Rep. – 2014. – 538. –P. 77-120.
16. Cubero D., Renzoni F. Hidden Symmetries, Instabilities, and Current Suppression in Brownian Ratchets // Phys. Rev. Lett. – 2016. –116. – P. 010602-1-6.
17. Rozenbaum V M Brownian motors in the low-energy approximation: Classification and properties // JETP. – 2010. – 110. – P. 653-661.
18. 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.
19. Rozenbaum V. M., Makhnovskii Y. A., Shapochkina I. V. at al. Adiabatically Slow and Adiabatically Fast Driven Ratchets // Phys. Rev. E. – 2012. – 85. – P. 041116-1-5.
20. H. Riskin. The Fokker-Plank Equation. Methods of Solution and Applications. – Berlin: Springer-Verlag, 1989. – 472 p.
21. Thomson W. (Lord Kelvin) The kinetic theory of the dissipation of energy // Proc. Roy. Soc. Edinburgh. – 1874. – 8. – P. 325-334.
22. Parrondo J.M.R. Reversible ratchets as Brownian particles in an adiabatically changing periodic potential // Phys. Rev. E. – 1998. – V. 57, No 6. – P. 7297–7300.

ВЛАСТИВОСТІ СИМЕТРІЇ БРОУНІВСЬКИЙ МОТОРІВ З ПЕРІОДИЧНОЮ ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЕНЕРГІЄЮ, ЩО ФЛУКТУЮЄ

І. В. Шапочкіна[1], Т. Є. Корочкова[2], В. М. Розенбаум[2]

[1] *Білоруський державний університет, пр-т Нєзавісімості, 4, Мінськ 220050, Білорусь, e-mail: shapoch@mail.ru*
[2] *Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, taiscrust@mail.ru*

Розглянуто безінерційний рух броунівської частинки в потенціальному полі, що задається довільною періодичною функцією координати та часу. Представлено перші члени розкладання середньої швидкості частинки по малому параметру, що дорівнює відношенню амплітуди зміни потенціальної енергії до теплової енергії, тобто, вираз для середньої швидкості високотемпературного броунівського мотора. Його аналіз виявив векторну, зсувну та приховану просторово-часову симетрію Куберо-Рензоні (D.Cubero, F.Renzoni). Ці типи симетрії використані для аналізу просторово-часових залежностей потенційальної енергії, що призводять до відсутності моторного ефекту. Досліджено додаткові типи симетрії, притаманні адіабатично повільним і швидким броунівським моторам, і умови на потенціальну енергію, при яких середня швидкість цих моторів наближається до нуля.

SYMMETRY PROPERTIES OF BROWNIAN MOTORS WITH FLUCTUATING PERIODIC POTENTIAL ENERGY

I.V. Shapochkina[1], T.Ye. Korochkova[2], V.M. Rozenbaum[2]

[1] *Department of Physics, Belarusian State University, 220050 Minsk, Belarus, E-mail: shapoch@mail.ru*
[2] *Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine 17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, E-mail: taiscrust@mail.ru*

We consider the inertialess motion of a Brownian particle in a potential field described by an arbitrary periodic function of coordinate and time. The first terms of an expansion of the average particle velocity over the small parameter, which is the ratio of changes of the potential energy amplitude to the thermal energy, have been represented, that is, the expression for the high-temperature Brownian motor average velocity. The analysis of those expressions revealed the vector and shift symmetry as well as the hidden space-time symmetry of Cubero- Renzoni (D.Cubero, F.Renzoni). These symmetry types have been used to analyze space-time dependences of potential energy which prevent appearance of ratchet effect. We also study the additional types of symmetry, which are inherent in adiabatically slow and fast Brownian motors, as well as the conditions for the potential energy at which the average motor velocity becomes zero.