

В.А. Высоцкая¹, И.В. Шапочкина¹, Т.Е. Корочкова², В.М. Розенбаум²

СТОХАСТИЧЕСКИЕ БРОУНОВСКИЕ МОТОРЫ С МАЛЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ

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

В приближении малых флуктуаций потенциальной энергии получено общее аналитическое выражение для скорости броуновского мотора со стохастическими флуктуациями потенциальной энергии, которое конкретизировано для случая высоких температур. Рассчитана средняя скорость мотора с пилообразным стационарным потенциалом, претерпевающим флуктуации, гармонически зависящие от координаты. Показано, что средняя скорость мультипликативна по параметрам модели: она представляет собой произведение функций, зависящих от частоты флуктуаций и геометрических параметров потенциальных профилей. Продемонстрирована возможность управления направлением движения мотора путем варьирования фазового сдвига гармонических флуктуаций относительно пилообразного потенциала.

Ключевые слова: броуновские моторы, диффузионный транспорт, малые стохастические флуктуации потенциальной энергии, высокотемпературное приближение

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время изучение физико-химических свойств наноразмерных систем и протекающих в них процессов и, в особенности, исследование феномена возникновения направленных потоков наночастиц вследствие неравновесных флуктуаций параметров системы в анизотропных средах в отсутствие градиентов температур и макроскопических сил – бурно развивающаяся тематика, которая привлекает внимание исследователей из различных научных областей [1–4]. Основные причины такого интереса – это возможность технологического конструирования искусственных наноразмерных механизмов, способных выполнять различные функции (как-то: сепарацию частиц [5], транспортирование наногрузов аналогично белковым моторам вдоль периодических волокон и поверхностей [6], перекачку заряженных частиц в заданном направлении, селективную сортировку мембранных белков [7] и т.д.).

Броуновскими моторами или броуновскими рэтчетами называется класс теоретических моделей, описывающий данное явление. Они опираются на уравнения

диффузионной динамики броуновской частицы, в которых предполагается пространственная периодичность и временная зависимость потенциальной энергии описываемой системы, и в настоящее время являются наиболее разработанным классом моделей управляемого диффузионного транспорта. Кроме того, под броуновскими моторами часто подразумевают непосредственно сами молекулярные (белковые) моторы, осуществляющие неравновесный внутриклеточный транспорт, или же искусственные наноустройства, имеющие в своей основе то же явление возникновения направленного движения из хаотических флуктуаций. Типичные размеры рассматриваемых объектов составляют 5–100 нм в случае молекулярных моторов и 0.1–10 мкм в случае искусственно создаваемых устройств. В настоящей статье мы предлагаем теоретическую модель одномерного стохастического мотора, а также некоторые идеи по ее возможной практической реализации.

Как для построения фундаментальной теории, так и, тем более, для практических приложений большой ценностью обладают аналитические представления основных

характеристик движения моторов, в первую очередь, из-за их прогностической функции. В теории броуновских моторов, как и в любой теоретической области, получение аналитических результатов обычно связано с выбором подходящих приближений или упрощающих допущений. К их числу относятся приближения низких и высоких частот флуктуаций потенциальной энергии броуновского мотора [8], приближения низких и высоких температур [9, 10], а также различные предположения относительно формы потенциального профиля и характера его временной зависимости [11].

Обычно неравновесные флуктуации вводятся в постановку задачи зависимостью (детерминистической или стохастической) потенциальной энергии от времени. Так, в ряде работ нами изучался направленный транспорт частиц, возникающий при включении и выключении пространственно-периодического потенциала или циклической смене двух его различных состояний [12–16]. Принципиально новым приближением, применимым, прежде всего, для описания широкого класса искусственно создаваемых молекулярных машин, является приближение малых флуктуаций потенциальной энергии [17].

В данной работе это приближение использовано для получения аналитических выражений, позволяющих анализировать скорость броуновских моторов со стохастическими флуктуациями потенциальной энергии. Во втором разделе дифференциальные уравнения, лежащие в основе статистического описания стохастического броуновского мотора, преобразуются в интегральные, на основе которых в последующих разделах строится теория моторов с малыми флуктуациями потенциальной энергии. В третьем разделе выводится приближенное соотношение для полного потока вероятности, определяющего скорость мотора, соответствующее малым флуктуациям потенциальной энергии. В четвертом разделе высокотемпературное приближение использовано для анализа возможности управления направлением движения мотора в предположении пилообразной (произвольной асимметрии) формы стационарной компоненты потенциала и малых гармонических флуктуаций.

ИНТЕГРАЛЬНАЯ ФОРМА УРАВНЕНИЙ СТОХАСТИЧЕСКОГО БРОУНОВСКОГО МОТОРА

Хорошо известно, что вычислительные схемы, использующие теорию возмущений по определенному малому параметру и метод итераций, проще всего реализуются путем преобразования исходных дифференциальных уравнений в интегральные. Преимущества такого подхода в квантовой механике изложены, например, в монографии [18]. Его идея состоит в том, что интегральное уравнение, в котором искомая функция представляется в виде интеграла от выражения, содержащего ту же функцию и малый параметр, может быть легко преобразовано в итерационный ряд по малому параметру – решение поставленной задачи. При этом решение содержит функцию Грина, описывающую отклик невозмущенной системы на «точечное» дельтаобразное возмущение. В данном разделе дифференциальные уравнения, обеспечивающие статистическое описание стохастического броуновского мотора, будут преобразованы в интегральные уравнения.

Рассмотрим движение броуновской частицы, потенциальная энергия которой является случайной величиной, описываемой стохастическим дихотомным процессом. Два состояния дихотомного процесса, обозначаемого далее индексами “+” и “–”, характеризуются разными потенциальными профилями $U_+(x)$ и $U_-(x)$, которые описываются периодическими функциями с периодом L , $U_{\pm}(x+L) = U_{\pm}(x)$. Скорости переходов между состояниями предполагаются равными друг другу (так называемый симметричный дихотомный процесс) и обозначаются как γ . Плотности вероятности $\rho_{\pm}(x, t)$ нахождения броуновской частицы в этих состояниях удовлетворяют уравнению Смолуховского с дополнительным слагаемым $r(x, t)$, описывающим скорость переходов частицы между этими состояниями [8, 10, 11, 19, 20]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\pm}(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J_{\pm}(x, t) \mp r(x, t),$$

$$r(x, t) = \gamma [\rho_+(x, t) - \rho_-(x, t)],$$

$$J_{\pm}(x,t) = -D \frac{\partial \rho_{\pm}(x,t)}{\partial x} - \beta D \frac{\partial U_{\pm}(x)}{\partial x} \rho_{\pm}(x,t). \quad (1)$$

Здесь $D = (\beta\zeta)^{-1}$ – коэффициент диффузии (ζ – коэффициент трения, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура). На функции распределения накладываются следующие условия периодичности и нормировки:

$$\rho_{\pm}(x+L,t) = \rho_{\pm}(x,t),$$

$$\int_0^L [\rho_+(x,t) + \rho_-(x,t)] dx = 1. \quad (2)$$

Для стационарных процессов ($\partial \rho_{\pm}(x,t)/\partial t = 0$) полный поток частиц через произвольное поперечное сечение x определяется суммой потоков $J_{\pm}(x)$, $J(x) = J_+(x) + J_-(x)$ и не зависит от x . Именно этот поток $J \equiv J(x)$ является основной искомой характеристикой в теории броуновских моторов, поскольку через него посредством соотношения $\langle v \rangle = L J$ выражается средняя скорость мотора.

Введем новые функции распределения

$$\begin{cases} \xi(x) = \rho_+(x) + \rho_-(x), \\ \eta(x) = \rho_+(x) - \rho_-(x), \end{cases}$$

$$\rho_{\pm}(x) = \frac{1}{2} [\xi(x) \pm \eta(x)]. \quad (3)$$

Выделим в потенциальных рельефах $U_{\pm}(x)$ некий средний рельеф $u(x)$ и флуктуационную составляющую $w(x)$:

$$U_{\pm}(x) = u(x) \pm w(x). \quad (4)$$

Среднему рельефу поставим в соответствие оператор потока

$$\hat{J}(x) = -D \exp[-\beta u(x)] \frac{d}{dx} \exp[\beta u(x)]. \quad (5)$$

Тогда полный поток можно представить в виде:

$$J = \hat{J}(x) \xi(x) - \beta D w'(x) \eta(x), \quad (6)$$

где $w'(x) = dw(x)/dx$.

Рассмотрим соотношение (6) с учетом (5) как дифференциальное уравнение относительно функции $\xi(x)$. Его общее решение

$$\xi(x) = C e^{-\beta u(x)} - \beta e^{-\beta u(x)} \int_0^x dx' w'(x') \eta(x') e^{\beta u(x')} - \frac{J}{D} e^{-\beta u(x)} \int_0^x dx' e^{\beta u(x')} \quad (7)$$

содержит произвольную постоянную C и искомую постоянную величину J , которая не зависит от C и находится из условия периодичности $\xi(x+L) = \xi(x)$, а именно, поток оказывается равным

$$J = -\beta D \int_0^L dx q(x) w'(x) \eta(x), \quad (8)$$

$$q(x) = e^{\beta u(x)} \left/ \int_0^L dx e^{\beta u(x)} \right.$$

Уравнение для функции $\eta(x)$ следует из системы уравнений (1), записанной для стационарного случая:

$$\frac{d}{dx} [J_+(x) - J_-(x)] = -2\gamma \eta(x). \quad (9)$$

Поскольку разность потоков $J_+(x) - J_-(x) = \hat{J}(x) \eta(x) - \beta D w'(x) \xi(x)$, то уравнение (9) превращается в дифференциальное уравнение для нахождения $\eta(x)$:

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{J}(x) + \Gamma \right] \eta(x) = \beta D \frac{d}{dx} w'(x) \xi(x), \quad (10)$$

$$\Gamma \equiv 2\gamma.$$

Для записи решения этого уравнения в интегральной форме рассмотрим уравнение для функции Грина $G(x, y)$, левая часть которого совпадает с уравнением (10), а правая равна дельта-функции Дирака $\delta(x - y)$:

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{J}(x) + \Gamma \right] G(x, y) = \delta(x - y). \quad (11)$$

Это уравнение может быть решено аналитически для ряда частных случаев, например, для популярных в теории броуновских моторов кусочно-линейных потенциальных профилей, для которых оно становится дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами. Таким образом, если считать функцию Грина $G(x, y)$ известной, то искомое решение уравнения (10) можно представить в виде:

$$\eta(x) = \beta D \int_0^L dy G(x, y) \frac{d}{dy} w'(y) \xi(y). \quad (12)$$

В справедливости представления (12) легко убедиться, если подействовать на обе части этого уравнения оператором $(d/dx)\hat{J}(x) + \Gamma$ и учесть уравнение (11). Поскольку для интегралов от выражений, содержащих дельта-функцию, справедливо равенство $\int_0^L dy f(y) \delta(x - y) = f(x)$ ($f(x)$ – произвольная функция), то применение указанных операций возвращает нас к исходному уравнению (10).

Подставим выражение (12) для функции $\eta(x)$ в (8), что даст искомый стационарный поток:

$$J = -(\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \int_0^L dy G(x, y) \frac{d}{dy} w'(y) \xi(y). \quad (13)$$

Это уравнение точно определяет полный поток J , если найдена функция $\xi(x)$ – решение системы дифференциальных уравнений (6), (10) [или интегральных уравнений (7), (12)], дополненных периодическими граничными условиями и условиями нормировки

$$\int_0^L \xi(x) dx = 1, \quad \int_0^L \eta(x) dx = 0. \quad (14)$$

В следующем разделе на основе (13) будет получено приближенное соотношение

для полного потока, соответствующее малым флуктуациям потенциальной энергии.

ПРИБЛИЖЕНИЕ МАЛЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ

Согласно представлению (4), малым флуктуациям потенциальной энергии соответствует случай, когда $w(x) \ll u(x)$. Поскольку основным безразмерным параметром, характеризующим величину пространственных изменений потенциальной энергии, является отношение амплитуды этих изменений к тепловой энергии $k_B T$, то можно считать, что приближению малых флуктуаций соответствуют функции $w(x)$, малые также относительно $k_B T$. Структура выражения (13) такова, что в рассматриваемом приближении поток есть малая величина, квадратичная по флуктуациям $w(x)$. Если ограничиваться только учетом квадратичных по $w(x)$ вкладов, то функция $\xi(x)$ должна вычисляться в нулевом приближении по $w(x)$. Это означает, что в решении (7) можно пренебречь вторым и третьим слагаемыми (причем третье слагаемое обращается в ноль, поскольку, согласно соотношению (8), $J = 0$ при $w(x) = 0$). Оставшееся первое слагаемое содержит постоянную интегрирования C , которая легко находится из условия нормировки (14) для функции $\xi(x)$. Таким образом, функция $\xi(x)$ в нулевом приближении по флуктуациям, обозначаемая далее как $\xi_0(x)$, принимает вид:

$$\xi_0(x) = e^{-\beta u(x)} / \int_0^L dx e^{-\beta u(x)} \quad (15)$$

и является нормированным на единицу распределением Больцмана для невозмущенного потенциального профиля $u(x)$.

Выражение (13) для полного потока с функцией $\xi(x)$ вида (15) является основным результатом данной статьи, поскольку решает задачу получения общего аналитического соотношения для средней скорости стохастического броуновского мотора с малыми флуктуациями потенциальной энергии:

$$\langle v \rangle = -L(\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \int_0^L dy G(x, y) \frac{d}{dy} w'(y) \xi_0(y). \quad (16)$$

Функция Грина $G(x, y)$, входящая в это выражение, удовлетворяет уравнению (11), решение которого для пилообразного потенциального профиля $u(x)$ было приведено в [17]. Используя это решение в соотношении (16), можно вычислять среднюю скорость мотора при произвольных координатных зависимостях флуктуаций $w(x)$. Отметим, что формула (16) согласуется с выражением из работы [17], полученным для флуктуаций, характеризуемых произвольными корреляционными функциями. Рассмотренные в данной статье стохастические дихотомные флуктуации соответствуют экспоненциальному спаду корреляционной функции с показателем затухания Γ (обратное время корреляции), так что величину $G(x, y)$ можно рассматривать как преобразование Лапласа от запаздывающей функции Грина, описывающей диффузию в потенциальном профиле $u(x)$.

Для дальнейших преобразований удобно ввести оператор Грина $\hat{G}(x)$, действие которого на произвольную периодическую функцию $f(x)$ определяется следующим интегралом:

$$\hat{G}(x)f(x) = \int_0^L dy G(x, y) f(y) \quad (17)$$

с интегральным ядром, равным функции Грина $G(x, y)$. С использованием этого оператора соотношение (16) становится более компактным:

$$\langle v \rangle = -L(\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \hat{G}(x) \frac{d}{dx} w'(x) \xi_0(x). \quad (18)$$

Одним из методов расчета оператора Грина является уравнение Дайсона, которое связывает искомый оператор с невозмущенным оператором Грина свободной диффузии $\hat{G}_0(x)$ (в отсутствие потенциальной энергии) и оператором возмущения, представляющим собой потенциальную энергию $u(x)$. Для вывода

этого уравнения запишем формальное решение уравнения (11) в операторной форме

$$\hat{G}^{-1}(x) = \frac{d}{dx} \hat{J}(x) + \Gamma = \hat{G}_0^{-1} - \beta D \frac{d}{dx} u'(x), \quad (19)$$

где

$$\hat{G}_0^{-1} = -D \frac{d^2}{dx^2} + \Gamma. \quad (20)$$

Действуя на каждое слагаемое уравнения (19) сначала оператором \hat{G}_0 , а затем, применяя результат к оператору $\hat{G}(x)$, получаем уравнение Дайсона:

$$\hat{G}(x) = \hat{G}_0 + \beta D \hat{G}_0 \frac{d}{dx} u'(x) \hat{G}(x). \quad (21)$$

Отметим, что (21) записано для периодической компоненты $u(x)$ произвольной формы и амплитуды.

Приведем некоторые полезные соотношения для оператора Грина свободной диффузии и соответствующей функции Грина. Прежде всего, заметим, что этот оператор является эрмитовым (в силу эрмитовости оператора Лапласа), то есть справедливо тождество:

$$\int_0^L dx g(x) \hat{G}_0 f(x) = \int_0^L dx f(x) \hat{G}_0 g(x), \quad (22)$$

где $f(x)$ и $g(x)$ – произвольные вещественные периодические функции. Соответствующая функция Грина, удовлетворяющая периодическим граничным условиям, имеет вид [21]:

$$G_0(x) = \frac{\tau_D}{4L} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(2\pi i q x / L)}{z^2 + \pi^2 q^2} = \frac{\tau_D}{L} \frac{z \operatorname{ch}[z(1-2|x|/L)]}{\operatorname{sh} z}, \quad z = \frac{1}{2} \sqrt{\Gamma \tau_D}. \quad (23)$$

Здесь представление через гиперболические функции дано для $x \in [0, L]$ и введено характерное время диффузии $\tau_D = L^2/D$ на периоде L .

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В высокотемпературном приближении $\beta|u(x)| \ll 1$ уравнение Дайсона (21) можно представить в виде быстро сходящегося

итерационного ряда. Ограничиваясь линейным по $\beta u(x)$ приближением, имеем:

$$\hat{G}(x) \approx \hat{G}_0 + \beta D \hat{G}_0 \frac{d}{dx} u'(x) \hat{G}_0. \quad (24)$$

Подставляя это равенство в соотношение (18), в котором функции $q(x)$ и $\zeta_0(x)$ также должны быть взяты в линейном по $\beta u(x)$ приближении, получаем формулу высокотемпературного приближения:

$$\langle v \rangle = \frac{\beta^3 D^2 \Gamma}{L} \int_0^L dx u'(x) \left[\hat{G}_0 w'(x) \right]^2. \quad (25)$$

В соответствии с общим анализом работы [22], средняя скорость является нечетным функционалом $u'(x)$ и четным функционалом $w'(x)$, что нашло отражение в (25).

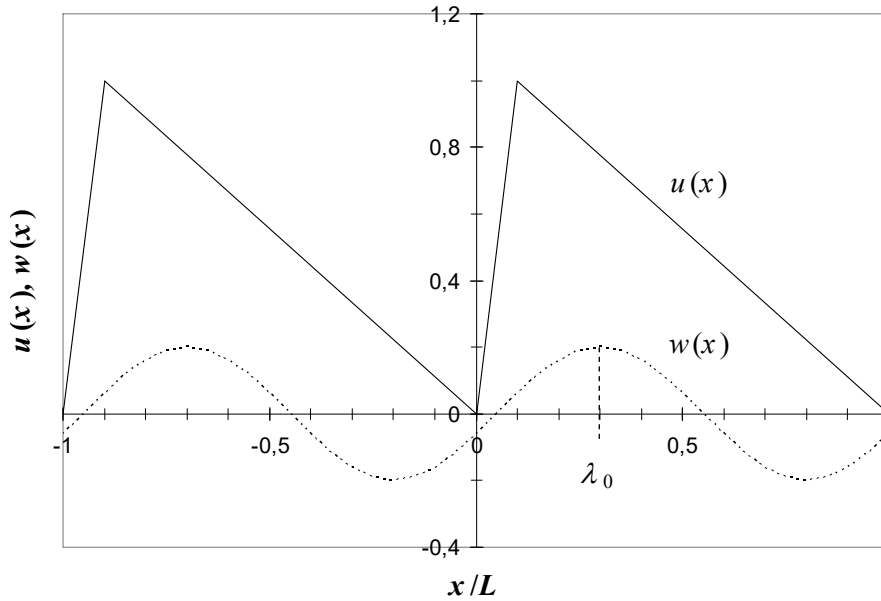


Рис. 1. Пилообразный средний рельеф $u(x)$ и гармоническая флуктуационная составляющая $w(x)$ потенциальной энергии броуновского мотора

В качестве иллюстрации использования соотношения (25) рассчитаем среднюю скорость броуновского мотора с пилообразным стационарным потенциалом (u_0 – высота барьера)

$$u(x) = u_0 \times \begin{cases} x/l, & 0 \leq x \leq l, \\ (L-x)/(L-l), & l \leq x \leq L, \end{cases} \quad (26)$$

претерпевающим гармонические флуктуации (рис. 1):

$$w(x) = w_0 \cos 2\pi(x/L - \lambda_0), \quad (27)$$

где w_0 – амплитуда флуктуационной составляющей, λ_0 – величина фазового сдвига. Подставляя эти функции в (25) и используя соотношения (17) и (23), получаем:

$$\langle v \rangle = -v_0 f_1(\tau_D \Gamma) f_2(\lambda, \lambda_0),$$

$$v_0 = \pi \beta^3 u_0 w_0^2 (D/L), \quad \lambda = l/L,$$

$$f_1(\tau_D \Gamma) = \frac{\tau_D \Gamma}{(4\pi^2 + \tau_D \Gamma)^2},$$

$$f_2(\lambda, \lambda_0) = \frac{\sin 2\pi\lambda \cos 2\pi(\lambda - 2\lambda_0)}{\lambda(1-\lambda)}. \quad (28)$$

Из представленного соотношения видно, что средняя скорость мультипликативна по параметрам модели: она представляет собой произведение функций, зависящих от частоты флуктуаций Γ и геометрических параметров потенциальных профилей, λ и λ_0 . Эти функции представлены на рис. 2 а и 2 б. Частотная функция оказывается немонотонной с максимумом $(4\pi)^{-2}$ в точке $\tau_D \Gamma = (2\pi)^2$, который, фактически, определяет

значения параметров оптимального потенциальных профилей оказывается функционирования броуновского мотора. знакпеременной. Зависимость от геометрических параметров

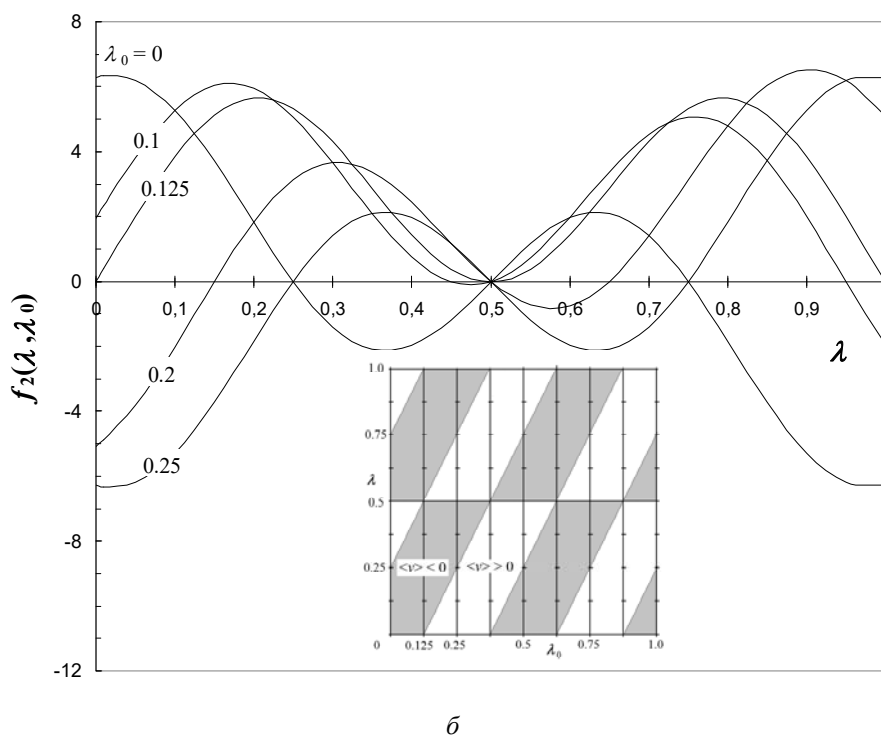
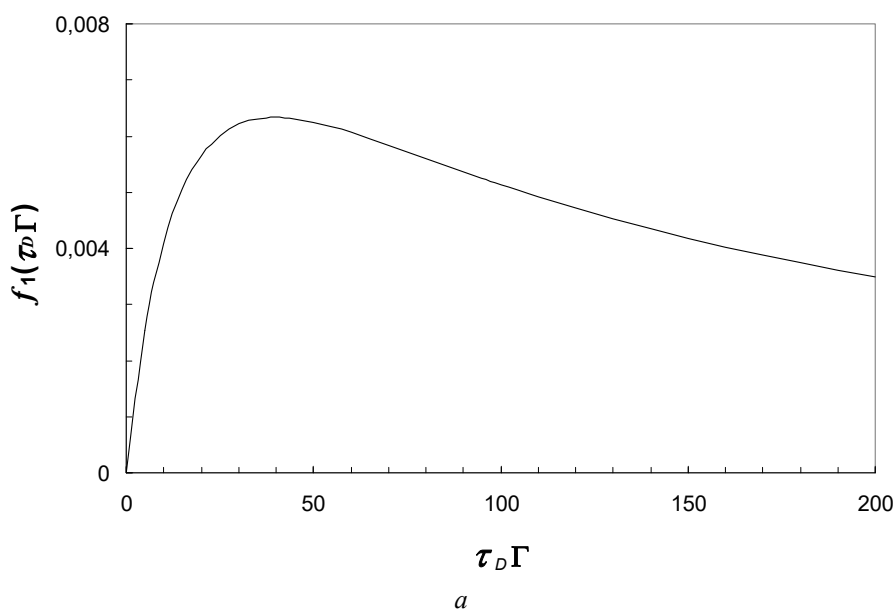


Рис. 2. Частотная зависимость средней скорости (а) и ее зависимость от геометрических параметров потенциальных профилей (б) высокотемпературного броуновского мотора с дихотомными стохастическими флуктуациями потенциальной энергии. Зависимости описываются, соответственно, функциями $f_1(\tau_D \Gamma)$ и $f_2(\lambda, \lambda_0)$ и определяют среднюю скорость мотора посредством соотношения (28). Диаграмма на вставке части (б) иллюстрирует интервалы значений величины фазового сдвига λ_0 и параметра асимметрии λ пилообразного потенциала, в которых движение мотора осуществляется направо или налево (светлые и затемненные области, соответственно)

Это значит, что направление движения зависит не только от асимметрии пилообразного потенциала, но и от фазового сдвига гармонических флуктуаций. Вставка на рис. 2 б показывает области значений параметров λ и λ_0 , при которых реализуется движение в положительном и отрицательном направлениях. Таким образом, приложение гармонических флуктуаций к асимметричному пилообразному профилю дает потенциальную возможность управления направлением движения броуновского мотора. Экспериментальная реализация этой возможности может состоять в использовании интерференции лазерных пучков, распространяющихся в противоположных направлениях и формирующих пространственно периодический потенциал, который широко используется в броуновских моторах на оптических решетках [23, 24]. При этом фазовым сдвигом такого потенциала относительно асимметричного пилообразного потенциала, создаваемого, например, полярной подложкой, легко управлять за счет изменения настроек лазеров.

ВЫВОДЫ

В данной работе разработан новый подход к описанию управляемых диффузионных систем, в которых флуктуации потенциальной энергии наночастицы, приводящие к ее направленному движению, считаются малыми. В основе предложенного подхода лежит аппарат функций Грина, которые позволяют получить аналитические выражения для средней скорости

наночастицы в различных задачах теории броуновских моторов, представляющих теоретический и практический интерес. Эти выражения существенно упрощаются в приближении высоких температур, в рамках которого в работе рассмотрена система с малыми гармоническими флуктуациями пилообразного потенциала. Полученное выражение для средней скорости броуновского мотора представляет собой произведение функций, зависящих от частоты флуктуаций и геометрических параметров стационарного и возмущающего потенциальных профилей. Показано, что частотная зависимость является немонотонной функцией с максимумом, положение которого определяется обратным временем диффузии. Показано, что зависимость средней скорости мотора от асимметрии стационарной компоненты потенциала и фазового сдвига флуктуационной компоненты знакопеременна. Это означает, что существует возможность управления направлением движения броуновских частиц за счет изменения фазового сдвига гармонических флуктуаций относительно пилообразного потенциала. Построена диаграмма, иллюстрирующая расположение интервалов значений фазового сдвига и параметра асимметрии пилообразного потенциала, в которых движение осуществляется направо или налево. Найденные закономерности важны для задания значений параметров, определяющих эффективные режимы функционирования броуновских моторов.

Стохастичні броунівські мотори з малими флуктуаціями потенціальної енергії

В.А. Висоцька, І.В. Шапочкіна, Т.С. Корочкова, В.М. Розенбаум

Білоруський державний університет
пр-т Незалежності, 4, Мінськ, 220050, Білорусь, shapoch@mail.ru
Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, taiscrust@mail.ru

У наближенні малих флуктуацій потенціальної енергії отримано загальний аналітичний вираз для швидкості броунівського мотора зі стохастичними флуктуаціями потенціальної енергії, який конкретизовано для випадку високих температур. Розраховано середню швидкість мотора з пилкоподібним стаціонарним потенціалом, що зазнає флуктуації з гармонійною залежністю від координати. Показано, що середня швидкість мультиплікативна за параметрами моделі: вона являє собою добуток функцій, що залежать від частоти флуктуацій і геометричних параметрів потенціальних профілів. Продемонстровано можливість керування напрямком руху мотора шляхом варіювання фазового зсуву гармонійних флуктуацій щодо пилкоподібного потенціалу.

Ключові слова: броунівські мотори, дифузійний транспорт, малі стохастичні флуктуації потенціальної енергії, високотемпературне наближення

Stochastic Brownian motors with small potential energy fluctuations

U.A. Vysotskaya, I.V. Shapochkina, T.Ye. Korochkova, V.M. Rozenbaum

Department of Physics, Belarusian State University
4 Nezavisimosti Pr., Minsk, 220050, Belarus, shapoch@mail.ru
Chuiiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, taiscrust@mail.ru

We suggest a new approach to description of driven diffusive systems in which fluctuations of nano-particle potential energy, being a source of directed motion, are considered as small. The base of the approach is the method of the Green's functions, which allow writing analytical expressions for the sought-for average nano-particle velocity. These expressions are essentially simplified under the assumption of high temperatures. Within this high-temperature approximation, we consider a system (Brownian motor) with small harmonic oscillations of the particle potential energy of a saw-tooth shape. The obtained representation for the average motor velocity is the product of two functions. One of them depends on the fluctuation frequency and the other includes geometrical parameters of the system (that is of the steady and perturbing potential profiles). It is shown that the frequency dependence of the average velocity is a nonmonotonic function with the maximum position determining by the inverse characteristic diffusion time. In its turn, the average motor velocity as a function of the asymmetry parameter of the nonfluctuating component of the potential profile and the phase shift of the fluctuating one is sign-changing. This result means that there exists a possibility to govern the direction of the motor motion by the phase shift of harmonic oscillations relative to a fixed saw-tooth potential component. The intervals of both the phase shift and the asymmetry parameter values, in which the particle can move to the right or to the left, are diagrammed. The regularities obtained are of great importance to choose the values of parameters which provide effective regimes of Brownian motors operation.

Keywords: Brownian motors, diffusive transport, small stochastic fluctuations of potential energy, high-temperature approximation

ЛИТЕРАТУРА

1. *Trakhtenberg L.I., Gerasimov G.N.* Metal Containing Polymers: Cryochemical Synthesis, Structure and Physico-Chemical Properties // *Metal/Polymer Nanocomposites*. – New York: Wiley & Sons, 2005. – P. 37–74.
2. *Суздаев И.П.* Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – Москва: КомКнига, 2006 – 592 с.
3. *Physico-Chemical Phenomena in Thin Films and at Solid Surfaces*. – Amsterdam: Elsevier, 2007. – 800 p.
4. *Романовский Ю.Л., Тихонов А.Н.* Молекулярные преобразователи энергии живой клетки. Протонная АТФ-синтаза – вращающийся молекулярный мотор // *Успехи физических наук*. – 2010. – Т. 180. – С. 931–956.
5. *Pamme N.* Continuous flow separations in microfluidic devices // *Lab Chip*. – 2007. – V. 7. – P. 1644–1659.
6. *Cha T.G., Pan J., Chen H. et al.* A synthetic DNA motor that transports nanoparticles along carbon nanotubes // *Nature Nanotechnology*. – 2013. – V. 9, N 1. – P. 39–43.
7. *Cheetham M.R., Bramble J.P., McMillan D.G.G. et al.* Manipulation and sorting of membrane proteins using patterned diffusion-aided ratchets with AC fields in supported bilayers // *Soft Matter*. – 2012. – V. 8. – P. 5459–5465.
8. *Reimann P.* Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // *Phys. Rep.* – 2002. – V. 361. – P. 57–265.
9. *Astumian R.D.* Adiabatic Theory for Fluctuation-Induced Transport on a Periodic Potential // *J. Phys. Chem.* – 1996. – V. 100, N 49. – P. 19075–19081.
10. *Розенбаум В.М.* Высокотемпературные броуновские моторы: детерминистические и стохастические флуктуации периодического потенциала // *Письма в ЖЭТФ*. – 2008. – Т. 88, № 5. – С. 391–395.
11. *Astumian R.D., Bier M.* Fluctuation driven ratchets: molecular motors // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 72, N 11. – P. 1766–1769.
12. *Rozenbaum V.M.* Mechanical motion in nonequilibrium nanosystems. *Nanomaterials and Supramolecular Structures: Physics, Chemistry, and Applications*. – London, Springer, 2009. – P. 35–44.
13. *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, N 5. – P. 051120-1-10.
14. *Корочкова Т.Е., Шкода Н.Г., Чернова А.А., Розенбаум В.М.* Точные аналитические решения в теории броуновских моторов и насосов // *Сб. Поверхность*. – 2012. – № 4(19). – С. 19–35.
15. *Корочкова Т.Е., Шапочкина И.В., Розенбаум В.М.* Влияние инерции на активный и пассивный транспорт наночастиц вдоль границы раздела фаз // *Химия, физика и технология поверхности*. – 2013. – Т. 4, № 4. – С. 427–436.
16. *Tsomyk O.Ye., Korochkova T.Ye., Rozenbaum V.M.* Molecular rotor as a high-temperature Brownian motor // *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. – 2016. – V. 7, N 4. – P. 444–452.
17. *Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Lin S.H., Trakhtenberg L.I.* A theory of slightly fluctuating ratchets // *JETP Lett.* – 2017. – V. 105, N 8. – P. 521–522.
18. *Ульянов В.В.* Интегральные методы в квантовой механике. – Харьков: Вища школа, 1982. – 160 с.
19. *Gardiner C.R.* Handbook of Stochastic Methods, 2nd ed. – Berlin, Springer, 1985. – 442 p.
20. *Розенбаум В.М.* Броуновское движение и поверхностная диффузия // В книге «Физика и химия поверхности». Книга 1. Физика поверхности (в двух томах). – Киев: Ин-т химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины, 2015. – Т. 2, Ч. VI. – С. 806–824.
21. *Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Sheu S.Y. et al.* High-temperature ratchets with sawtooth potentials // *Phys. Rev. E*. – 2016. – V. 94, N 5. – P. 052140-1–052140-8.
22. *Rozenbaum V.M., Makhnovskii Y.A., Shapochkina I.V. et al.* Adiabatically Slow and Adiabatically Fast Driven Ratchets // *Phys. Rev. E*. – 2012. – V. 85. – P. 041116-1-5.
23. *Faucheux L.P., Bourdieu L.S., Kaplan P.D., Libchaber A.* Optical thermal ratchet // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – V. 74. – P. 1504–1507.
24. *Robilliard C., Lucas D., Grynberg G.* Modelling a ratchet with cold atoms in an optical lattice // *Appl. Phys. A*. – 2002. – V. 75, N 2. – P. 213–216.

REFERENCES

1. *Trakhtenberg L.I., Gerasimov G.N.* Metal Containing Polymers: Cryochemical Synthesis, Structure and Physico-Chemical Properties. *Metal/Polymer Nanocomposites*. (New York: Wiley & Sons, 2005).
2. *Suzdalev I.P.* *Nanotechnology: physicochemistry of nanoclusters, nanostructures and nanomaterials*. (Moscow: KomKniga, 2006). [in Russian].
3. *Physico-Chemical Phenomena in Thin Films and at Solid Surfaces*. Ed. by L.I. Trakhtenberg, S.H. Lin, O.J. Ilegbusi. (Amsterdam: Elsevier, 2007).

4. Romanovsky Yu.L., Tikhonov A.N. Molecular energy transducers of the living cell. Proton ATP synthase: a rotating molecular motor. *Phys. Usp.* 2010. **53**: 893. [in Russian].
5. Pamme N. Continuous flow separations in microfluidic devices. *Lab Chip*. 2007. **7**:1644.
6. Cha T.G., Pan J., Chen H., Salgado J., Li X., Mao C., Choi J.H. A synthetic DNA motor that transports nanoparticles along carbon nanotubes. *Nature nanotechnology*. 2013. **9**(1):39.
7. Cheetham M.R., Bramble J.P., McMillan D.G.G., Bushby R.J., Olmsted P.D., Jeuken L.J.C., Evans S.D. Manipulation and sorting of membrane proteins using patterned diffusion-aided ratchets with AC fields in supported bilayers. *Soft Matter*. 2012. **8**: 5459.
8. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium. *Phys. Rep.* 2002. **361**: 57.
9. Astumian R.D. Adiabatic Theory for Fluctuation-Induced Transport on a Periodic Potential. *J. Phys. Chem.* 1996. **100**(49): 19075.
10. Rozenbaum V.M. High-temperature brownian motors: Deterministic and stochastic fluctuations of a periodic potential. *JETP Letters*. 2008. **88**(5): 342.
11. Astumian R.D., Bier M. Fluctuation driven ratchets: molecular motors. *Phys. Rev. Lett.* 1994. **72**(11): 1766.
12. Rozenbaum V.M. *Mechanical motion in nonequilibrium nanosystems. Nanomaterials and Supramolecular Structures: Physics, Chemistry, and Applications.* (London: Springer, 2009).
13. 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. **83**(5): 051120.
14. Korochkova T.Ye., Shkoda N.G., Chernova A.A., Rozenbaum V.M. Exact analytical solutions in the theory of Brownian motors and pumps. *Surface*. 2012. **4**(19): 19. [in Russian].
15. Korochkova T.Ye., Shapochkina I.V., Rozenbaum V.M. Influence of inertia to passive and active nanoparticles transport along the phase interface. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2013. **4**(4): 427. [in Russian].
16. Tsomyk O.Ye., Korochkova T.Ye., Rozenbaum V.M. Molecular rotor as a high-temperature Brownian motor. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2016. **7**(4): 444.
17. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Lin S.H., Trakhtenberg L.I. A theory of slightly fluctuating ratchets. *JETP Lett.* 2017. **105**(8): 521.
18. Ulyanov V.V. *Integral methods in quantum mechanics.* (Kharkov: Vyscha shkola, 1982). [in Russian].
19. Gardiner C.R. *Handbook of Stochastic Methods.* (Springer, Berlin, 1985, 2nd ed).
20. Rozenbaum V.M. Brownian motion and surface diffusion. In: *Physics and chemistry of the surface. Book 1. Physics of the surface.* **2**(Part VI, Chapter 23). (Kyiv: Chuiko Institute of Surface Chemistry of NAS of Ukraine, 2015). [in Russian].
21. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Sheu S.-Y., Yang D.-Y., Lin S.H. High-temperature ratchets with sawtooth potentials. *Phys. Rev. E*. 2016. **94**(5): 052140.
22. Rozenbaum V.M., Makhnovskii Y.A., Shapochkina I.V., Sheu S.-Y., Yang D.-Y., Lin S.H. Adiabatically Slow and Adiabatically Fast Driven Ratchets. *Phys. Rev. E*. 2012. **85**: 041116.
23. Faucheux L.P., Bourdieu L.S., Kaplan P.D., Libchaber A. Optical thermal ratchet. *Phys. Rev. Lett.* 1995. **74**: 1504.
24. Robilliard C., Lucas D., Grynberg G. Modelling a ratchet with cold atoms in an optical lattice. *Appl. Phys. A*. 2002. **75**(2): 213.

Поступила 26.04.2017, принята 20.06.2017