

- Chavan, S. A. Oxidation of Cyclohexane, Cyclohexanone, and Cyclohexanol to Adipic Acid by a Non- HNO_3 Route over Co/Mn Cluster Complexes [Text] / S. A. Chavan, D. Srinivas, P. Ratnasamy // Journal of Catalysis. – 2002. – № 212. – P. 39–45.
- Денисов, Е. Т. Механизм жидкофазного окисления кислородсодержащих соединений [Текст] : пособие / Е. Т. Денисов, Н. И. Мицкевич, В. Е. Агабеков; Минск: Наука и техника, –1975.– С. 334.
- Oei-Suk Park. Gif-KRICT Biomimetic Oxidation of Cyclohexane The Influence of Metal Oxides [Text] / Oei-Suk Park, Sang-Sung Nam, Seong-Bo Kim, Kyu-Wan Lee // Bull. Korean Chem. Soc. – 1999 – Vol. 20, №. 1. – P. 49-52.
- Amin Ebadi. Aerobic oxidation of cyclohexane with g-alumina supported metallophthalocyanines in the gas phase [Text] / Amin Ebadi, Nasser Safari, Mohammad Hassan Peyrovi // Applied Catalysis A: General 321 – 2007 – P. 135–139.
- Ivashchuk, O. Chelates in the oxidation process of cyclohexane [Text] / O. Ivashchuk, V. Reutsky, S. Mudryy // Materials of 14th International Symposium of Students and Young Mechanical Engineers “Advances in Chemical and Mechanical Engineering” – Gdansk, Poland. – 2011. – Vol. 1 – P. 238-241.

УДК 533.723:577.352.4(086.48)

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ НАСОС, ФУНКЦИОНИРУЮЩИЙ ВСЛЕДСТВИЕ ФЛУКТУАЦИЙ ВНУТРИМЕМБРАННОГО ПОТЕНЦИАЛА

Розглянуто модель молекулярного насосу, який внаслідок флуктуацій потенціалу створює направлений рух частинок через мембрану із заданими концентраціями на границях. Отримано чисельний розв'язок рівнянь для потоку частинок при стохастичному перемиканні двох пилоподібних потенціалів. Отримано низькочастотну асимптотику, що дозволила порівняти механізми роботи молекулярного насоса та мотору, які функціонують в аналогічних режимах флуктуацій

Ключові слова: наномашини, наномеханізми, броунівські мотори, молекулярні насоси, приповерхнева дифузія, нерівноважні флуктуації

Рассмотрена модель молекулярного насоса, который вследствие флуктуаций внутримембранного потенциала создает направленное движение частиц через мембрану с заданными концентрациями на границах. Получено численное решение уравнений для потока частиц при стохастическом переключении двух пилообразных потенциалов. Также получена низкочастотная асимптотика, позволившая сравнить механизмы работы молекулярного насоса и мотора, функционирующего в аналогичных режимах флуктуаций

Ключевые слова: наномашини, наномеханизмы, броуновские моторы, молекулярные насосы, приповерхностная диффузия, неравновесные флуктуации

Т. Е. Корочкова

Кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник*

E-mail: taiscrust@mail.ru

В. А. Машира

Младший научный сотрудник
Отдел кристаллизации

Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова
ул. Вернадского, 36, г. Киев, Украина, 03164

E-mail: mashira@mail.ru

Н. Г. Шкода

Кандидат физико-математических наук
Научный сотрудник*

E-mail: n_shkoda@ukr.net

В. М. Розенбаум

Доктор физико-математических наук,
заведующий отделом*

E-mail: vik-roz@mail.ru

*Отдел теории наноструктурных систем

Институт химии поверхности
им. А. А. Чуйко НАН Украины

ул. Генерала Наумова, 17, г. Киев, Украина, 03164

1. Введение

Известно, что флуктуации потенциальной энергии, являющейся периодической функцией координаты, могут приводить к направленному транспорту наноча-

стиц. Исследования в данной области стимулируются необходимостью объяснить рабочие механизмы белковых моторов и ионных насосов, выполняющих различные физиологические функции. В данной статье приводятся результаты численных расчетов модели

молекулярного насоса с флуктуирующими пилообразными потенциалами, изучаются режимы и особенности его функционирования, а также рассматриваются отличия в работе молекулярного насоса и мотора в рамках низкочастотного приближения флуктуаций внутримембранного потенциала.

2. Анализ литературных данных

Многообразные явления этого рода широко обсуждаются в литературе [1–3] и описываются моделями разного уровня общности и сложности [4, 5]. Кроме того, развитие теории таких наноустройств является необходимым для разработки искусственных молекулярных и наноразмерных механизмов, движением которых можно управлять путем подведения к ним энергии и информации. На подобном принципе основана электроконформационная модель [6–9], объясняющая работу молекулярного насоса, управляемого флуктуациями электрического поля [10, 11]. В работах [12, 13] анализировалась упрощенная модель молекулярного насоса, в которой флуктуации потенциала внутри клеточной мембраны могут инициировать движение ионов против их градиента концентраций на границах мембраны или, по крайней мере, препятствовать их движению через мембрану. Последнее обстоятельство чрезвычайно важно для понимания механизмов, препятствующих выравниванию концентраций ионов в живой клетке по отношению к окружающей ее среде. Несмотря на то, что в этих работах были представлены численные и аналитические решения для потока частиц в ряде частных случаев, оставался невыясненным вопрос, к каким физическим следствиям приводит отличие граничных условий для рассматриваемого насоса (заданные концентрации на границах мембраны) от соответствующего мотора (периодические граничные условия).

В данной статье приводятся результаты численных расчетов модели молекулярного насоса с флуктуирующими пилообразными потенциалами, изучаются режимы и особенности его функционирования, а также рассматриваются отличия в работе молекулярного насоса и мотора в рамках низкочастотного приближения флуктуаций внутримембранного потенциала.

3. Дихотомная динамика движения броуновской частицы

Динамика движения броуновской частицы в двух состояниях + и -, характеризуемых потенциальными энергиями $U_{\pm}(x)$ и частотами переключений γ_+ и γ_- (так что средние времена жизни состояний равны $\tau_{\pm} = \gamma_{\pm}^{-1}$), описывается уравнением Смолуховского [8] с источниками и стоками:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\pm}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} j_{\pm}(x,t) \mp \gamma_{\pm} \rho_{\pm}(x,t) \pm \gamma_{\mp} \rho_{\mp}(x,t). \quad (1)$$

Выражение, определяющее поток движения частиц, запишем в виде:

$$j_{\pm}(x,t) = -D[\beta \rho_{\pm}(x,t) \frac{\partial}{\partial x} U_{\pm}(x) + \frac{\partial}{\partial x} \rho_{\pm}(x,t)], \quad (2)$$

где $\rho_{\pm}(x,t)$ – концентрация частиц, D – коэффициент диффузии, $\beta = (k_B T)^{-1}$, (k_B – постоянная Больцмана, и T – температура). Будем считать, что потенциальные профили с достаточной точностью представимы кусочно-линейными потенциалами. Тогда для каждого линейного участка потенциальную энергию можно представить в виде:

$$U_+(x) = \frac{x F_+}{\beta}, \quad U_-(x) = \frac{x F_-}{\beta}. \quad (3)$$

Получим выражения для стационарных решений уравнений (1)-(3). Используем замену переменных

$$\rho_+(x) = \frac{P(x) + P(x)}{2}, \quad \rho_-(x) = \frac{P(x) - P(x)}{2} \quad (4)$$

и учтем, что полный поток движения частиц $J = j_+ + j_-$ является постоянной величиной, не зависящей от координаты x . За счет этого количество постоянных интегрирования двух дифференциальных уравнений (1) уменьшается с четырех до трех, а линейные комбинации исходных уравнений можно записать в виде:

$$J = \frac{1}{2} [(F_- - F_+) P(x) - (F_- + F_+) P(x) - 2P'(x)], \quad (5)$$

$$2(\gamma_- - \gamma_+) P(x) - 2(\gamma_- + \gamma_+) P(x) + (F_+ + F_-) P'(x) + (F_+ - F_-) P'(x) + 2P''(x) = 0. \quad (6)$$

Выражая $P(x)$ через $P(x)$ из (5) и подставляя его в (6), получаем дифференциальное уравнение третьего порядка относительно $P(x)$:

$$J(\gamma_- + \gamma_+) + (\gamma_- F_+ + F_- \gamma_+) P(x) + (\gamma_- - F_- F_+ + \gamma_+) P'(x) = (F_- + F_+) P''(x) + P^{(3)}(x). \quad (7)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$P(x) = -\frac{J(\gamma_- + \gamma_+)}{F_+ \gamma_- + F_- \gamma_+} + \sum_{i=1}^3 c_i e^{s_i x}, \quad (8)$$

в котором c_i – неизвестные константы, а λ_i – корни характеристического полинома для (7):

$$\lambda^3 + \lambda^2 (F_- + F_+) - \lambda (\gamma_- - F_- F_+ + \gamma_+) - (\gamma_- F_+ + F_- \gamma_+) = 0. \quad (9)$$

Выражение для $P(x)$ принимает вид:

$$P(x) = -\frac{J(\gamma_- + \gamma_+)}{F_+ \gamma_- + F_- \gamma_+} + \sum_{i=1}^3 c_i s_i e^{s_i x}, \quad (10)$$

$$s_i = \frac{F_- + F_+}{F_- - F_+} + \frac{2\lambda_i}{F_- - F_+}.$$

Таким образом, мы получили выражения для переменных $P(x)$ и $\Pi(x)$, в которых для каждого линейного участка необходимо задать четыре неизвестных, куда входит искомый поток. Для нахождения этих неизвестных можно записать условия непрерывности на границе двух линейных участков i, j . Для N

линейных участков эти условия обеспечат $3(N-1)$ уравнений. Граничные условия можно записать аналогично работе [7], а именно, левая граница задается пространственной координатой $x=0$, а правая $x=1$. Время нахождения частицы на границе в состоянии «±», совпадает с временем жизни этого состояния τ_{\pm} . В таком случае, вероятность частицы оказаться в одном из состояний на границе составляет $P_{\pm}(0) = \gamma_{\mp} / (\gamma_{+} + \gamma_{-})$, а плотность вероятности нахождения частиц в состоянии «±» на границе будет равна

$$\begin{aligned} \rho_{\pm}(0) &= \rho(0)P_{\pm}(0) = \\ &= \rho_0 \frac{\gamma_{\mp}}{\gamma_{+} + \gamma_{-}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Тогда, используя формулы (4) и (11), получаем четыре уравнения для граничных условий.

Так как общее количество уравнений для N линейных участков составляет $3(N-1)$ уравнений, следующих из условия непрерывности, и четыре уравнения, задающих граничные условия, в сумме получаем $3N+1$ уравнений для такого же количества неизвестных, что дает возможность записать полученную систему как матричное линейное уравнение $AX = b$. Для потенциала, состоящего из двух линейных участков l и $L-l$, эта система приведена ниже:

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho_1 \\ \rho_0 \\ \rho_1 \\ \rho_0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} c_{1,1} \\ c_{1,2} \\ c_{1,3} \\ c_{2,1} \\ c_{2,2} \\ c_{2,3} \\ J \end{pmatrix},$$

$$A = \begin{pmatrix} e^{\delta\lambda_{1,1}} & e^{\delta\lambda_{1,2}} & e^{\delta\lambda_{1,3}} & -e^{\delta\lambda_{2,1}} & -e^{\delta\lambda_{2,2}} & -e^{\delta\lambda_{2,3}} & -\frac{\gamma_{-} + \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{1,-} + \gamma_{-}F_{1,+}} + \frac{\gamma_{-} + \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{2,-} + \gamma_{-}F_{2,+}} \\ e^{\delta\lambda_{1,1}}s_{1,1} & e^{\delta\lambda_{1,2}}s_{1,2} & e^{\delta\lambda_{1,3}}s_{1,3} & -e^{\delta\lambda_{2,1}}s_{2,1} & -e^{\delta\lambda_{2,2}}s_{2,2} & -e^{\delta\lambda_{2,3}}s_{2,3} & -\frac{\gamma_{-} - \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{1,-} + \gamma_{-}F_{1,+}} + \frac{\gamma_{-} - \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{2,-} + \gamma_{-}F_{2,+}} \\ e^{\delta\lambda_{1,1}}g_{1,1} & e^{\delta\lambda_{1,2}}g_{1,2} & e^{\delta\lambda_{1,3}}g_{1,3} & -e^{\delta\lambda_{2,1}}g_{2,1} & -e^{\delta\lambda_{2,2}}g_{2,2} & -e^{\delta\lambda_{2,3}}g_{2,3} & \frac{\gamma_{-}\gamma_{+}(F_{1,+}F_{2,-} - F_{1,-}F_{2,+})}{(\gamma_{+}F_{1,-} + \gamma_{-}F_{1,+})(\gamma_{+}F_{2,-} + \gamma_{-}F_{2,+})} \\ 0 & 0 & 0 & e^{\lambda_{2,1}}s_{2,1} & e^{\lambda_{2,2}}s_{2,2} & e^{\lambda_{2,3}}s_{2,3} & -\frac{\gamma_{-} - \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{2,-} + \gamma_{-}F_{2,+}} \\ s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma_{-} - \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{1,-} + \gamma_{-}F_{1,+}} \\ 0 & 0 & 0 & e^{\lambda_{2,1}} & e^{\lambda_{2,2}} & e^{\lambda_{2,3}} & -\frac{\gamma_{-} + \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{2,-} + \gamma_{-}F_{2,+}} \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\gamma_{-} + \gamma_{+}}{\gamma_{+}F_{1,-} + \gamma_{-}F_{1,+}} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где функции $s_{i,j} = (F_{i,-} + F_{i,+} + 2\lambda_{i,j}) / (F_{i,-} - F_{i,+})$, $g_{i,j} = (F_{i,-} + \lambda_{i,j})(F_{i,+} + \lambda_{i,j}) / (F_{i,+} - F_{i,-})$, $\gamma = (\gamma_{-} - \gamma_{+}) / (\gamma_{-} + \gamma_{+})$, а параметр $\delta = 1/L$ определяет положение максимума.

Равенство нулю потока означает равенство нулю соответствующего минора преобразованной для существования решения матрицы A , что дает возможность быстрого нахождения точек остановки насоса как функции отношения концентраций:

$$\det \begin{pmatrix} e^{\delta\lambda_{1,1}} & e^{\delta\lambda_{1,2}} & e^{\delta\lambda_{1,3}} & -e^{\delta\lambda_{2,1}} & -e^{\delta\lambda_{2,2}} & -e^{\delta\lambda_{2,3}} \\ e^{\delta\lambda_{1,1}}s_{1,1} & e^{\delta\lambda_{1,2}}s_{1,2} & e^{\delta\lambda_{1,3}}s_{1,3} & -e^{\delta\lambda_{2,1}}s_{2,1} & -e^{\delta\lambda_{2,2}}s_{2,2} & -e^{\delta\lambda_{2,3}}s_{2,3} \\ e^{\delta\lambda_{1,1}}g_{1,1} & e^{\delta\lambda_{1,2}}g_{1,2} & e^{\delta\lambda_{1,3}}g_{1,3} & -e^{\delta\lambda_{2,1}}g_{2,1} & -e^{\delta\lambda_{2,2}}g_{2,2} & -e^{\delta\lambda_{2,3}}g_{2,3} \\ 0 & 0 & 0 & e^{\lambda_{2,1}}(s_{2,1} - \gamma) & e^{\lambda_{2,2}}(s_{2,2} - \gamma) & e^{\lambda_{2,3}}(s_{2,3} - \gamma) \\ s_{1,1} - \gamma & s_{1,2} - \gamma & s_{1,3} - \gamma & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho_1}{\rho_0} & \frac{\rho_1}{\rho_0} & \frac{\rho_1}{\rho_0} & -e^{\lambda_{2,1}} & -e^{\lambda_{2,2}} & -e^{\lambda_{2,3}} \end{pmatrix} = 0. \quad (13)$$

4. Случай пилообразных потенциалов

Дальнейшие расчеты проводились для случая, когда оба из переключающихся состояний представляют собой пилообразные потенциалы. Такие потенциалы очень часто используются в теории броуновских моторов, они демонстрируют общие закономерности функционирования таких наноустройств, а также отличаются легкостью расчетов (так как потенциал содержит только два линейных участка).

В случае, когда потенциальные профили отличаются только величиной растяжения по энергетической оси, зададим пространственные характеристики потенциалов положительной амплитудой V , отношением амплитуд потенциалов $\alpha = V_{-} / V_{+}$, и величиной $\delta = 1/L$, которая определяет положение максимума потенциала, что характеризует асимметричность потенциалов. Частотные характеристики целесообразнее рассматривать в обозначениях общего времени процесса и характерной частоты $\tau_{+} + \tau_{-} = \gamma_{+}^{-1} + \gamma_{-}^{-1} = \Gamma^{-1}$, а также асимметричности по времени $(\tau_{+} - \tau_{-}) / (\tau_{+} + \tau_{-}) = \xi$, откуда $\gamma_{+} = 2\Gamma / (1 - \xi)$, $\gamma_{-} = 2\Gamma / (1 + \xi)$.

Ниже представлены графики, рассчитанные по формулам (12), (13).

Из семейства кривых на рис. 1 видно, что при изменении отношения амплитуд пилообразных потенциалов α изменяется характер поведения потока: при нулевом α (модель насоса, аналогичная известному «flashing ratchet») поток

монотонно возрастает и выходит на некоторое постоянное значение, а при увеличении α зависимость носит немонотонный характер, имеет максимум и при дальнейшем возрастании амплитуды потенциалов убывает до нуля.

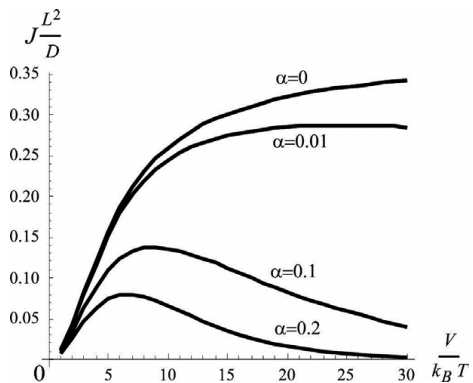


Рис. 1. Зависимость потока в безразмерных единицах от отношения максимальной амплитуды потенциала к тепловой энергии $k_B T$. Вычисления проводились для следующих значений параметров: $\delta=1/3$; $\Gamma=10$; $\xi=10$; $\rho_0=\rho_1=1$; значения параметра α указаны на кривых

Как видно из верхних двух графиков, рис. 2, а, и рис. 2, б, и поток, и отношение концентраций, соответствующих точкам остановки насоса, уменьшается с ростом параметра α , то есть при уменьшении отличий между флуктуирующими потенциальными рельефами, что логически понятно и закономерно.

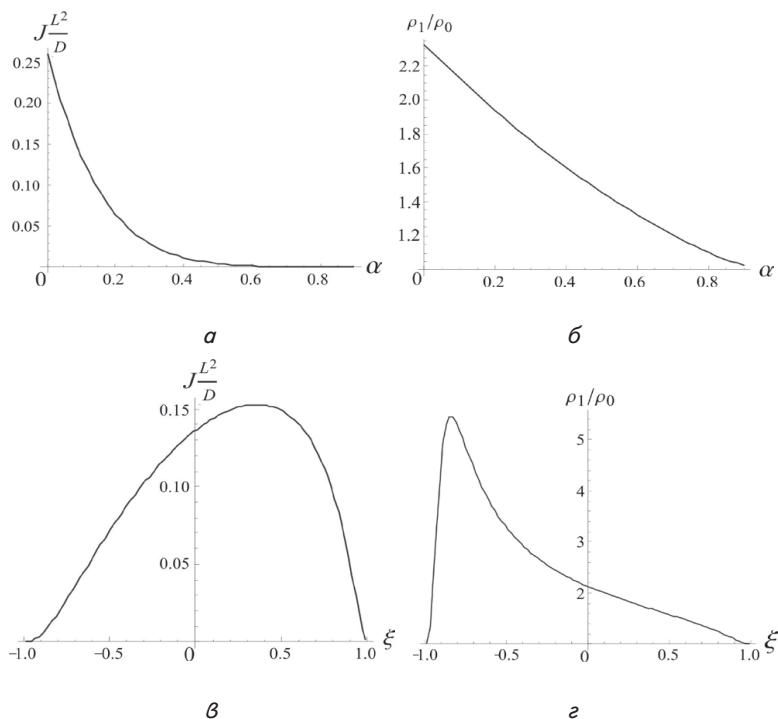


Рис. 2. Сравнение поведения основных характеристик работы насоса при изменении соотношения между амплитудами и временной асимметрии переключающихся потенциалов. а – зависимость потока в безразмерных единицах от отношений амплитуд потенциалов, $\xi=0$, $\rho_0=\rho_1=1$; б – зависимость соотношения концентраций на границах ρ_1/ρ_0 от отношений амплитуд потенциалов, $\xi=0$, $J=0$; в – зависимость потока в безразмерных единицах от асимметричности по времени переключения потенциальных профилей, $\alpha=0.1$; $\rho_0=\rho_1=1$; г – зависимость соотношения концентраций на границах ρ_1/ρ_0 от асимметричности по времени переключения потенциальных профилей, $\alpha=0.1$, $J=0$. Представленные зависимости рассчитывались для следующих значений параметров: $V/(k_B T)=10$; $\delta=1/3$; $\Gamma=10$

Как видно из нижних графиков, рис. 2, в, и рис. 2, г, оптимальная работа насоса, которая заключается в обеспечении наибольшего потока и поддержания максимального отношения концентраций на границах мембраны, осуществляется при существенно отличных условиях, накладываемых на параметр временной асимметрии ξ переключения потенциальных профилей.

К тому же, максимальный поток частиц реализуется при положительных значениях параметра временной асимметрии, тогда как поддержание максимального отношения концентраций – при отрицательных значениях этого параметра.

5. Сравнение работы броуновского мотора и насоса в приближении низких частот

Численные решения, рассчитываемые по формулам (12) и (13), не позволяют судить о характере поведения потока в общем виде. Поэтому целесообразно оперировать аналитическими выражениями низкочастотного приближения, которое было разработано для броуновских насосов и моторов в работах [7, 9]. Используя подходы, можно получить следующие приближенные выражения для насоса с равными концентрациями на границах мембраны

$$J_{\text{pump}} = (1-2\delta)\Gamma\rho L \times \left\{ \frac{1}{e^u - 1} + \frac{1}{e^{\alpha u} - 1} - \frac{1}{(1-\alpha)\alpha u} \times \left[\frac{e^{(1-\alpha)u} - 1}{e^u - 1} + \alpha^2 \frac{1 - e^{-(1-\alpha)u}}{e^{\alpha u} - 1} \right] \right\} \quad (14)$$

и для мотора с аналогичными параметрами

$$J_{\text{motor}} = (1-2\delta)\Gamma \times \left\{ \frac{u}{2\sinh^2(u/2)} + \frac{\alpha u}{2\sinh^2(\alpha u/2)} - \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \frac{\sinh[(1-\alpha)u/2]}{\sinh(u/2)\sinh(\alpha u/2)} \right\}, \quad (15)$$

где $u = \beta V$. Отличия в поведении двух моделей проиллюстрированы графическими зависимостями, построенными по соотношениям (14) и (15) (рис. 3, а, б).

Первое отличие состоит в том, что в области высоких температур ($u \ll 1$) поток частиц через мембрану значительно превышает поток частиц мотора с параметрами, соответствующими рассматриваемому насосу. Это следует из высокотемпературных асимптотик выражений (14) и (15): $J_{\text{pump}} \propto u^2$, тогда $J_{\text{motor}} \propto u^3$ (рис. 3, а). Второе отличие состоит в аномально больших потоках насоса при отрицательных значениях α (рис. 3, б), что объясняется большими заселенностями отрицательных участков потенциала при поддержа-

нии постоянной концентрации носителей на границах мембраны. Для соответствующего мотора периодические граничные условия исключают такое аномальное поведение. Наконец, третье отличие имеет место в частном случае флуктуаций знака потенциала ($\alpha = -1$). Поток мотора обращается в нуль, тогда как поток насоса экспоненциально увеличивается с увеличением амплитуды потенциала. Отметим, что в этом частном случае броуновская динамика насоса описывается точными аналитическими соотношениями во всей области частот флуктуаций знака потенциала [10].

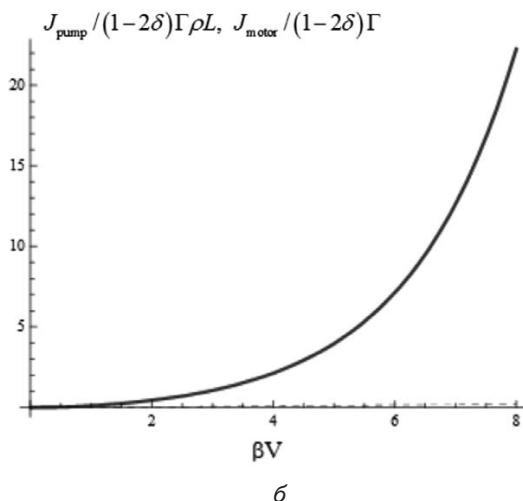
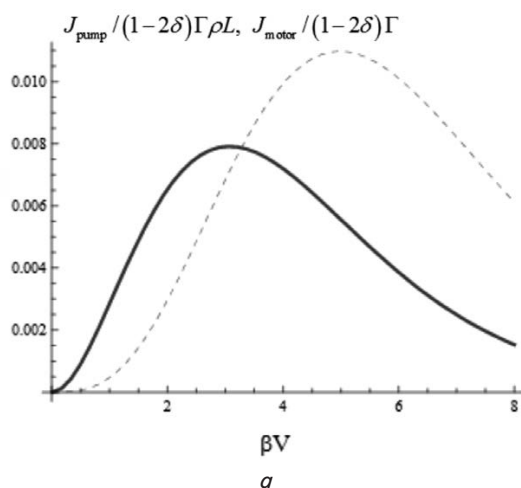


Рис. 3. Сравнение работы молекулярного мотора и насоса при аналогичных параметрах моделей. Сплошными линиями представлено решение для модели насоса, и пунктирными для модели мотора. *а* — поток (в безразмерных единицах) в зависимости от амплитуды пилообразного потенциала, измеряемой в единицах $k_B T \equiv \beta^{-1}$, для случая $\alpha = 2/3$; *б* — поток (в безразмерных единицах) в зависимости от амплитуды пилообразного потенциала, измеряемой в единицах $k_B T \equiv \beta^{-1}$, для случая $\alpha = -2/3$

6. Выводы

В данной статье получено численное решение уравнений для потока частиц через мембрану при стохастическом переключении двух пилообразных потенциалов

с заданными частотами переключений. Это решение позволило установить, как поток частиц и отношение концентраций на границах мембраны при нулевом потоке зависят от температуры, пространственной амплитуды и частот флуктуаций потенциального профиля. Анализ низкочастотных асимптотических характеристик молекулярного насоса и мотора, функционирующего в таком же режиме флуктуаций потенциальной энергии, показал, что в области высоких температур поток частиц через мембрану значительно превышает поток частиц мотора с параметрами, соответствующими рассматриваемому насосу. Кроме того, оказалось, что насос может функционировать в режиме флуктуаций знака потенциальной энергии, тогда как для соответствующего мотора такое функционирование запрещено. Отмеченные закономерности обусловлены различием граничных условий насоса и мотора: заданием концентраций на границах мембраны для насоса и периодическими граничными условиями для мотора.

Несмотря на то, что полученные результаты относятся к модельным потенциальным рельефам, представляющим собой кусочно-линейные функции, они имеют большое значение для моделирования процессов неравновесного транспорта наночастиц. Это связано с тем, что реальные координатные зависимости потенциальной энергии с хорошей точностью можно аппроксимировать кусочно-линейными функциями. При этом временная зависимость потенциальной энергии определяется изменением состояния самой частицы, происходящего под действием неравновесных внешних процессов. Поэтому рассмотренные в данной статье задачи описания транспорта наночастиц во флуктуирующих потенциальных рельефах отражают реальные ситуации, в которых такие явления могут существовать и наблюдаться.

Представленная работа была частично поддержана грантом 3/14-Н «Наномоторы на границе раздела фаз» целевой комплексной программы фундаментальных исследований НАН Украины «Фундаментальные проблемы наноструктурных систем, наноматериалов, нанотехнологий».

Литература

1. Hille, B. Ion Channels in Excitable Membranes, 3rd ed. [Текст] / B. Hille. — Sunderland, MA: Sinauer Associates, 2001. — P. 1-93.
2. Howard, J. Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton [Text] / J. Howard // Sinauer Associates, Sunderland, Massachusetts. — 2001. — Part II. — P. 117.
3. Alberts, B. Molecular Biology of the Cell, 4th ed. [Text] / B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter. — New York: Garland Science, 2002. — 1392 p.
4. Reimann, P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium [Text] / P. Reimann // Phys. Reports. — 2002. — Vol. 361, Issue 2-4. — P. 57-265.
5. Hänggi, P. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale [Text] / P. Hänggi, F. Marchesoni // Rev. Mod. Phys. — 2009. — 81. — P. 387-442.
6. Tsong, T. Y. Absorption and conversion of electric field energy by membrane bound ATPase [Text] / T. Y. Tsong, R. D. Astumian // Bioelectrochem. Bioenerg. — 1986. — 15. — P. 457-476.

7. Markin, V. S. Energy transduction between a concentration gradient and an alternating electric field [Text] / V. S. Markin, T. Y. Tsong, R. D. Astumian, and R. Robertson // J. Chem. Phys. – 1990. – № 93. – P. 5062-5066.
8. Markin, V. S. Frequency and concentration windows for the electric activation of a membrane active transport system [Text] / V. S. Markin, T. Y. Tsong // Biophys. J. – 1991. – № 59 (6). – P. 1308-1316.
9. Chen, Y. Comparison of kinetics of formation of helices and hydrophobic core during the folding of staphylococcal nuclease from acid [Text] / Y. Chen, T. Y. Tsong, // Biophys. J. – 1994. – № 66. – P. 2151-2158.
10. Rozenbaum, V. M. Catalytic wheel as a Brownian Motor [Text] / V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S. H. Lin, T.Y. Tsong // J. Phys. Chem. B. – 2004. – 108. – P. 15880-15889.
11. Корочкова, Т. Е. Молекулярный насос, управляемый флуктуациями электрического поля [Текст] / Т. Е. Корочкова, В. М. Розенбаум; под ред. П. П. Горбика // Химия, физика и технология поверхности. – 2006. – Вып. 11-12. – С. 29–40.
12. Gomez-Marin Two-state flashing molecular pump [Text] / Gomez-Marin, J. M. Sancho // EPL 86. – 2009. – P. 40002.
13. Rozenbaum, V. M. Adiabatically driven Brownian pumps [Text] / V. M. Rozenbaum, Yu. A. Makhnovskii, I. V. Shapochkina, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, S. H. Lin // Phys. Rev. E. – 2013. – 88, No. 1. – 012104-1-7.
14. Risken, H. The Fokker-Planck Equation [Text] / H. Risken. – Springer-Verlag, Berlin – Heidelberg – New York – Tokyo, XVI, 454 p.
15. Rozenbaum, V. M. Brownian motor with competing spatial and temporal asymmetry of potential energy [Text] / V. M. Rozenbaum, T. Ye. Korochkova, A. A. Chernova and M. L. Dekhtyar // Phys. Rev. E. – 2011. – 83, No. 5. – 051120-1-10.
16. Корочкова, Т. Е. Точные аналитические решения в теории броуновских моторов и насосов. [Текст] / Т. Е. Корочкова, Н. Г. Шкода, А. А. Чернова, В. М. Розенбаум // Поверхность – 2012. – № 4(19). – P. 19–35.

В статті представлено дослідження процесу піноутворення бінарних сумішей поверхнево активних речовин (ПАР) на основі комплексного визначення його фізико-хімічних, технологічних характеристик. На основі отриманих результатів дослідження визначено кількісні характеристики процесу піноутворення бінарних сумішей ПАР. Визначено оптимальне співвідношення компонентів у суміші та робочі концентрації розчинів з метою їх ефективного застосування в різних процесах обробки текстильних матеріалів

Ключові слова: піноутворення, поверхнево-активні речовини, бінарні суміші, дисперсні системи, опорядження

В статье представлено исследование процесса пенообразования бинарных смесей поверхностно-активных веществ (ПАВ) на основе комплексного анализа их физико-химических и технологических свойств. На основе полученных результатов исследования определены количественные характеристики процесса пенообразования бинарных смесей ПАВ. Определено оптимальное соотношение компонентов в смеси и рабочие концентрации растворов с целью их эффективного применения в различных процессах обработки текстильных материалов

Ключевые слова: пенообразование, поверхностно-активные вещества, бинарные смеси, дисперсные системы

УДК 661.185:66.063.6

ВИЗНАЧЕННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕСУ ПІНОУТВО- РЕННЯ В РОЗЧИНАХ ПОВЕРХНЕВО- АКТИВНИХ РЕЧОВИН

О. А. Параска

Кандидат технічних наук, доцент*

E-mail: olgaparaska@gmail.com

С. А. Карван

Доктор технічних наук, доцент, професор**

E-mail: karvan@ukr.net

Т. С. Рак

Аспірант*

E-mail: raktetyana@mail.ru

*Кафедра хімічної технології***

Кафедра хімії*

***Хмельницький національний університет

вул. Інститутська, 11,

м. Хмельницький, Україна, 29016

1. Вступ

Важливим завданням перед фахівцями підприємств текстильної промисловості є створення но-

вих технологій, що забезпечують скорочення витрат тепла, електроенергії, води, барвників та текстильно-допоміжних речовин (ТДР) при одночасному збереженні і забезпеченні високої якості продукції [1]. Для