

# ИССЛЕДОВАНИЕ ИНЕРЦИОННОГО БРОУНОВСКОГО МОТОРА С ФЛУКТУАЦИЯМИ ЗНАКА ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ

**Н. Г. Шкода**

Кандидат физико-математических наук,  
научный сотрудник\*

E-mail: n\_shkoda@ukr.net

**Т. Е. Корочкова**

Кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник\*

E-mail: taiscrust@mail.ru

**В. М. Розенбаум**

Доктор физико-математических наук,  
заведующий отделом\*

E-mail: vik-roz@mail.ru

**И. В. Шапочкина**

Кандидат физико-математических наук, доцент\*\*

E-mail: shapoch@mail.ru

\*Отдел теории наноструктурных систем

Институт химии поверхности

им. А. А. Чуйко НАН Украины

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

\*\*Кафедра компьютерного моделирования

Белорусский государственный университет

пр. Независимости, 4, г. Минск, Беларусь, 220050

*Представлена модель броуновского мотора с флуктуирующим по знаку потенциальным профилем, что описується кусково-лінійною періодичною функцією, яка не відноситься до класу симетричних і антисиметричних функцій. У наближеннях малої інерції і адіабатичності флуктуацій показана суттєво інерційна природа виникнення моторного ефекту, який допускає керування напрямленням руху за рахунок зміни значень параметру, що характеризує відхилення форми профілю від антисиметричного*

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

*Представлена модель броуновского мотора с флуктуирующим по знаку потенциальным профилем, описываемым кусочно-линейной периодической функцией, не относящейся к классам симметричных и антисимметричных функций. В приближениях малой инерции и адиабатичности флуктуаций показана чисто инерционная природа возникновения моторного эффекта, допускающего управление направлением движения посредством изменения значений параметра, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного*

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

## 1. Введение

Феномен возникновения направленного движения наночастиц в неравновесных условиях в отсутствие постоянных сил и градиентов концентраций широко изучается в современной науке и используется в технических приложениях, в частности, для сегрегации частиц. Такими условиями, реализуемыми в белковых моторах и ионных насосах, выполняющих различные физиологические функции, а также в искусственных молекулярных и наноразмерных механизмах, являются неравновесные флуктуации характеристик самих наночастиц или воздействующих на них полей. В настоящее время для описания наведенного неравновесными флуктуациями транспорта наночастиц предложено много моделей различного уровня строгости и сложности, среди которых наиболее разработана концепция броуновского мотора. Она базируется на рассмотрении диффузионной динамики броуновской частицы, помещенной в периодический потенциальный профиль, претерпевающий

стохастические флуктуации или детерминистические изменения со временем.

Представляется актуальным проведенное в данной статье исследование модели броуновского мотора с флуктуирующим по знаку потенциальным профилем, который описывается кусочно-линейной периодической функцией, не относящейся к классам симметричных и антисимметричных функций. В приближениях адиабатического режима флуктуаций и малых инерционных поправок получено аналитическое выражение для средней скорости движения такого броуновского мотора, которая отлична от нуля только при ненулевой массе частицы, т. е. моторный эффект является чисто инерционным. Показано, что изменением значений параметра, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного, можно управлять направлением движения, а сама зависимость средней скорости от этого параметра является невозможной. Актуальность данного исследования также обусловлена необходимостью управления направлением движения инерционных частиц и анализа тех

факторов, которые могут влиять на характеристики этого движения.

## 2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

В диффузионной динамике микро и наночастиц широко используется приближение отсутствия инерционных эффектов, которое обусловлено малостью размеров частиц и большим коэффициентом вязкости среды, в которой они движутся. В этом приближении функция распределения частиц удовлетворяет уравнению Смолуховского [1, 2] и зависит только от координат и времени, тогда как распределение скоростей частиц считается максвелловским. Большинство результатов теории броуновских моторов получено именно в этом приближении [3–5]. Для достаточно массивных частиц или наночастиц в газовой фазе необходим учет инерционных эффектов, при котором функция распределения приобретает дополнительную зависимость от скорости и удовлетворяет гораздо более сложному уравнению Клейна-Крамера [6, 7]. Инерционность броуновских моторов снимает ряд симметричных ограничений, характерных для их безынерционных аналогов [8, 9]. Наиболее впечатляющим примером является адиабатический режим флуктуаций знака потенциальной энергии. В отличие от безынерционного мотора, который не может функционировать в таком режиме, направленное движение инерционного мотора инициируется, если координатная зависимость потенциальной энергии описывается периодической функцией, не относящейся к классам как симметричных, так и антисимметричных функций. В литературе отсутствовали, как конкретные примеры флуктуирующего по знаку неантисимметричного потенциального профиля, так и анализ характеристик броуновского мотора, функционирующего в чисто инерционном режиме. Данная статья восполняет этот пробел.

## 3. Цель и задачи исследования

Целью данной работы является построение простейшей модели, допускающей аналитическое представление результатов, в которой флуктуации по знаку неантисимметричного потенциального профиля приводили бы к чисто инерционному моторному эффекту.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие задачи:

- выбор вида неантисимметричного потенциального профиля и основных приближений, которые бы обеспечили получение основных характеристик броуновского мотора в аналитической форме;
- получение аналитического выражения для средней скорости броуновского мотора во флуктуирующем кусочно-линейном периодическом потенциале в приближениях малой инерции и адиабатичности флуктуаций;
- анализ полученных выражений в случае флуктуаций потенциального профиля по знаку и изучение возможности управления направлением чисто инерционного движения.

## 4. Расчет динамики движения броуновской частицы

Симметрия или антисимметрия периодического потенциального профиля  $V(x)$  определяется условием существования таких произвольных постоянных  $x_0$  и  $V_0$ , чтобы удовлетворялись равенства  $V(-x)=V(x+x_0)+V_0$  или  $V(-x)=-V(x+x_0)+V_0$  [10]. Поскольку в физических приложениях выбор начала координат не влияет на значения рассчитываемых величин, а в диффузионной динамике – и от добавления произвольной постоянной к потенциальной энергии, то приведенное определение означает, что симметричный или антисимметричный потенциальный профиль всегда можно представить четной или нечетной функцией в определенным образом сдвинутых координатных осях. Рассмотрим периодическую функцию  $V(x)$ , которая на ее периоде  $0 \leq x \leq L$  может быть представлена в следующем виде:

$$V(x) = \begin{cases} Vx/l, & 0 \leq x \leq l; \\ V(\tilde{L}-x)/(\tilde{L}-l), & l \leq x \leq \tilde{L}; \\ 0, & \tilde{L} \leq x \leq L. \end{cases} \quad (1)$$

На рис. 1 флуктуирующий по знаку потенциальный профиль представлен функциями  $V(x)$  и  $-V(x)$ , которые для наглядности разнесены по энергетической шкале. При  $l_0 = L - \tilde{L} = 0$  приведенный потенциальный профиль становится профилем стандартного пилообразного потенциала, характеризующегося двумя параметрами: барьером  $V$  и коэффициентом асимметрии  $\kappa = 1 - 2l/\tilde{L}$ . Легко видеть, что при  $l_0 = 0$  сдвиг профиля на  $l/2$  по оси абсцисс и на определенную величину вдоль оси ординат преобразует этот профиль в нечетную функцию, так что стандартный пилообразный потенциал относится к антисимметричным профилям. При  $\kappa = 0$  ( $l = \tilde{L}/2$ ) этот профиль становится одновременно и симметричным. Очевидно, что при  $l_0 \neq 0$  и  $\kappa \neq 0$  профиль, описываемый выражением (1) не относится ни к симметричным, ни к антисимметричным (при  $\kappa = 0$  он становится симметричным, как и в случае  $l_0 = 0$ ). Поэтому будем называть его неантисимметричным пилообразным потенциалом

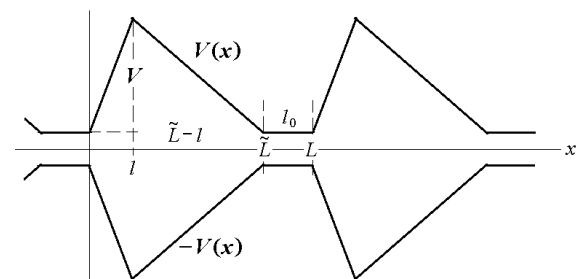


Рис. 1. Используемый в расчетах кусочно-линейный потенциальный профиль, неантисимметричный пилообразный потенциал, не относящийся к классам симметричных и антисимметричных периодических функций

Рассмотрим циклическое переключение (с периодом цикла  $\tau$ ) пространственно периодических потенциалов  $V_a(x)$  и  $V_b(x)$  (характеризующихся одинаковым пространственным периодом  $L$ ). Если

времена жизни потенциалов  $\tau_a$  и  $\tau_b$  ( $\tau_a + \tau_b = \tau$ ) велики по сравнению с характерным временем диффузии на периоде  $L$ ,  $\tau_D = L^2 / D$  ( $D$  – коэффициент диффузии), то к моментам переключения потенциалов броуновская частица успевает переходить в равновесное состояние, соответствующее потенциалу  $V_a(x)$  или  $V_b(x)$ , и ее средняя скорость определяется выражением [8]

$$\langle v \rangle = \frac{L}{\tau} \int_0^L dx [\tilde{\rho}_+(x, b) - \tilde{\rho}_+(x, a)] \int_0^x dy [\rho_-(y, b) - \rho_-(y, a)], \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_+(x, a) &= \rho_+(x, a) \left\{ 1 - \frac{m}{\zeta^2} \left[ V_a''(x) - \int_0^L dy V_a''(y) \rho_+(y, a) \right] \right\}, \\ \rho_{\pm}(x, a) &= \exp[\pm \beta V_a(x)] / \int_0^L dy \exp[\pm \beta V_a(y)] \end{aligned} \quad (3)$$

и аналогично для величин  $\tilde{\rho}_+(x, b)$  и  $\rho_{\pm}(x, b)$ , зависящих от потенциала  $V_b(x)$ . Здесь учитываются малые инерционные поправки, линейные по массе частицы  $m$ , и используются следующие обозначения:  $V_a''(x)$  – вторая производная потенциала  $V_a(x)$  по координате,  $\zeta$  – коэффициент трения, определяющийся вязкостью среды, размером и формой частицы,  $\beta = (k_B T)^{-1}$  обратная тепловая энергия ( $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура).

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

$$\begin{aligned} \int_0^L dx [\rho_+(x) - \rho_-(x)] \int_0^x dy [\rho_+(y) - \rho_-(y)] &= \\ = \frac{1}{2} \left[ \int_0^L dx [\rho_+(x) - \rho_-(x)] \right]^2 &= 0, \end{aligned} \quad (4)$$

в записи которого использовано обозначение

$$\rho_{\pm}(x) = \exp[\pm \beta V(x)] / \int_0^L dy \exp[\pm \beta V(y)]. \quad (5)$$

Поэтому в этом случае моторный эффект является чисто инерционным (он отсутствует при  $m=0$ ) и формула (2) для него преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= \frac{mL}{\zeta^2 \tau} \int_0^L dx V''(x) [\rho_-(x) + \rho_+(x)] \int_0^x dy [\rho_+(y) - \rho_-(y)] - \\ &- \frac{mL}{\zeta^2 \tau} \left[ \frac{1}{2} - \int_0^L dx \rho_+(x) \int_0^x dy \rho_-(y) \right] \times \\ &\times \int_0^L dx V''(x) [\rho_-(x) + \rho_+(x)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Подстановка в (6) явного вида  $V(x)$  из (1) и вычисление интегралов, использующее представление  $V''(x)$  через  $\delta$ -функции

$$V''(x) = \frac{V}{l} \delta(x) + \frac{V}{\tilde{L}-l} \delta(x-\tilde{L}) - \frac{V\tilde{L}}{l(\tilde{L}-l)} \delta(x-l), \quad (7)$$

приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= -\frac{L}{\tau} \frac{m l_0 (\tilde{L}-2l) u^3}{2\beta \zeta^2 \tilde{L}^2 (\tilde{L}-l)} \left[ \coth(u/2) - \frac{u}{2 \sinh^2(u/2)} + \frac{l_0 u}{\tilde{L}} \right] \times \\ &\times \left[ \frac{4 \sinh^2(u/2)}{4 \sinh^2(u/2) + 2(l_0 u / \tilde{L}) \sinh u + (l_0 u / \tilde{L})^2} \right]^2, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $u = \beta V$ . Область применимости полученного результата определяется малостью безразмерного инерционного параметра  $\epsilon = mV / (\zeta L)^2 \ll 1$ , не слишком большими значениями градиентов потенциала ( $l \neq 0, \tilde{L}$ ) и областью не слишком низких температур, чтобы выполнялось неравенство  $\epsilon u^3 \ll 1$  [8].

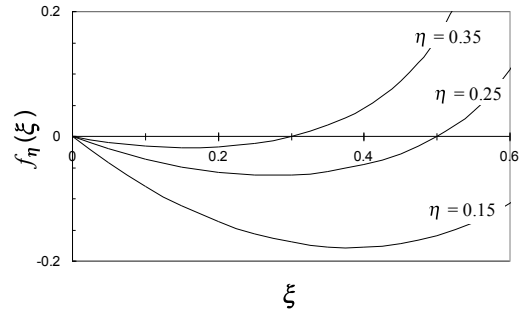


Рис. 2. Семейство функций  $f_n(\xi)$ , задающих с помощью формулы (9) зависимость средней скорости движения броуновского мотора от параметра  $\xi = l_0 / L$ , характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного, при заданных значениях параметра  $\eta = l / L$

Анализ выражения (8) проведем в высокотемпературном приближении ( $u \ll 1$ ), в котором оно принимает вид:

$$\langle v \rangle = \langle v \rangle_0 f_{l/L}(l_0 / L), \quad \langle v \rangle_0 = \frac{L}{\tau} \epsilon u^3,$$

$$f_n(\xi) = -\frac{\xi(1-2\eta-\xi)(1-\xi)}{6\eta(1-\eta-\xi)}. \quad (9)$$

Семейство функций  $f_n(\xi)$  с  $\xi = l_0 / L$  и  $\eta = l / L$  представлено на рис. 2. При  $\xi=0$  моторный эффект отсутствует, т.к. потенциальный профиль антисимметричен. По мере увеличения отклонения профиля от антисимметричного (с ростом параметра  $\xi$ ) функция  $f_n(\xi)$  (а вместе с ней и средняя скорость частицы) сначала убывает до некоторого отрицательного значения, а затем возрастает, проходя нулевое значение в точке  $\xi_0 = 1 - 2\eta$ , соответствующей нулевому значению параметра асимметрии  $\kappa = 1 - 2l / \tilde{L}$ . Дальнейшее увеличение  $f_n(\xi)$  связано с подходом к параметрической области, выходящей за пределы применимости соотношений (8) и (9) (большие градиенты потенциала).

## 5. Обсуждение результатов и выводы

В данной статье представлена модель инерционно-броуновского мотора с флуктуирующим по знаку потенциальным профилем, подтверждающая общий вывод работы [8], согласно которому моторный эффект

возможен, только если координатная зависимость потенциальной энергии описывается периодической функцией, не относящейся к классам как симметричных, так и антисимметричных функций. При формировании модели мотора была выбрана кусочно-линейная форма периодического потенциального профиля и использованы приближения малой инерции и адиабатичности флуктуаций, что позволило получить аналитическое выражение (8) (и его частный случай,

выражение (9)) для средней скорости мотора. Его анализ был проведен в высокотемпературном приближении, и было показано, что средняя скорость мотора при флуктуациях этого профиля по знаку немонотонно зависит от параметра, характеризующего отклонение формы профиля от антисимметричного (рис. 2). Таким образом, продемонстрирована возможность управления направлением чисто инерционного движения за счет изменения значений этого параметра.

### Литература

1. Smoluchowski, M., Brownsche Molecularbewegung unter Einwirkung äußerer Kräfte und deren Zusammenhang mit der verallgemeinerten Diffusionsgleichung [Text] / M. von Smoluchowski, M. Über // Ann. Phys. (Leipzig) – 1915. – Vol. 48. – P. 1103–1112.
2. Reimann, P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium [Text] / P. Reimann // Physics Reports. – 2002. – Vol. 361, Issue 2–4. – P. 57–265. doi: 10.1016/s0370-1573(01)00081-3
3. Hänggi, P., Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale [Text] / P. Hänggi, F. Marchesoni // Reviews of Modern Physics. – 2009. – Vol. 81, Issue 1. – P. 387–442. doi: 10.1103/revmodphys.81.387
4. Bressloff, P. C. Stochastic models of intracellular transport [Text] / P. C. Bressloff, J. M. Newby // Reviews of Modern Physics. – 2013. – Vol. 85, Issue 1. – P. 135–196. doi: 10.1103/revmodphys.85.135
5. Magnasco, M. O. Forced thermal ratchets [Text] / M. O. Magnasco // Physical Review Letters. – 1993. – Vol. 71, Issue 10. – P. 1477–1481. doi: 10.1103/physrevlett.71.1477
6. Klein, O. Zur statistischen Theorie der Suspensionen und Lösungen [Text] / O. Klein // Astron. och Fys. – 1922. – Vol. 16, Issue 5. – P. 51.
7. Kramers, H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions [Text] / H. A. Kramers // Physica. – 1940. – Vol. 7, Issue 4. – P. 284–304. doi: 10.1016/s0031-8914(40)90098-2
8. Rozenbaum, V. M. Inertial effects in adiabatically driven flashing ratchets [Text] / V. M. Rozenbaum, Yu. A. Makhnovskii, I. V. Shapochkina, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, S. H. Lin // Physical Review E. – 2014. – Vol. 89. – P. 052131-1–052131-9. doi: 10.1103/physreve.89.052131
9. Ghosh, P. K. Brownian transport in corrugated channels with inertia [Text] / P. K. Ghosh, P. Hänggi, F. Marchesoni, F. Nori, G. Schmid // Physical Review E. – 2012. – Vol. 86, Issue 2. – P. 021112. doi: 10.1103/physreve.86.021112
10. Розенбаум, В. М., Неадиабатические поправки к скорости броуновского мотора со сложным потенциальным рельефом [Текст] / В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – Т. 92, Вып. 2. – С. 124–129.