

Письма редактору

Низкотемпературный режим функционирования адиабатического броуновского мотора

В.М. Розенбаум

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины
ул. Генерала Наумова, 17, г. Киев, 03164, Украина
E-mail: vik-roz@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 14 января 2014 г.

Рассмотрено движение броуновской частицы в двух циклически переключающихся пространственно-периодических асимметричных потенциалах с периодом цикла, превышающим время релаксации. Показано, что при низких температурах направленное движение существует при чередовании положений абсолютных максимумов и минимумов двух потенциалов, а также при циклическом включении и выключении асимметричного потенциала. Полученные результаты выявляют роль диффузионных процессов и силовых эффектов, возникающих при переключении потенциалов, в механизмах функционирования броуновских моторов.

Розглянуто рух броунівської частинки у двох просторово-періодичних асиметричних потенціалах, що циклічно перемикаються з періодом циклу, довшим за час релаксації. Показано, що за низьких температур напрямлений рух існує при чергуванні положень абсолютних максимумів і мінімумів двох потенціалів, а також при циклічному вмиканні та вимиканні асиметричного потенціалу. Отримані результати виявляють роль дифузійних процесів і силових ефектів, що виникають при перемиканні потенціалів, у механізмах функціонування броунівських моторів.

PACS: **05.40.-a** Флуктуационные явления, случайные процессы, шум и броуновское движение;
05.60.Cd Классический транспорт;
87.16.Nn Моторные белки.

Ключевые слова: броуновские моторы, белковые моторы, броуновское движение, флуктуационные явления, случайные процессы.

Броуновские моторы моделируют процессы возникновения направленного движения наночастиц в отсутствие средних приложенных сил и градиентов концентраций, которые обусловлены неравновесными воздействиями различной природы. Эти воздействия описываются стохастической или детерминистической зависимостью потенциальной энергии частицы от времени, возникающей за счет изменения параметров самой частицы (конформационного состояния, заряда, мультипольных моментов) или внешних сил с нулевым средним значением [1,2]. Броуновские моторы, подобно обычным моторам, могут совершать полезную работу (против силы нагрузки или сил трения), отношение которой к энергии, подводимой в систему извне, определяет эффективность их функционирования [3].

Наибольшей эффективностью характеризуются те броуновские моторы, в которых изменения потенциальной энергии частицы сопровождаются сдвигом их экстремумов [4–6].

Интерес к броуновским моторам исторически возник при описании свойств белковых моторов [7,8]. Первоначально использовались модели сокращения мышц, в которых сдвиг молекулы миозина относительно нити актина возникал непосредственно за счет гидролиза АТФ (tight mechanochemical coupling) [9]. Рабочий ход (power stroke) такого белкового мотора не связан с диффузионным (или термоактивационным) движением частицы [10], и поэтому долгое время считалось, что такие моторы (power stroke motors) не являются броуновскими. Впоследствии оказалось, что

концепция броуновского мотора одинаково хорошо применима к процессам со слабой и сильной механохимической связью, порождающей направленное движение [11]. В первом случае достаточно рассматривать флуктуации потенциальной энергии с неизменными, а во втором — с изменяющимися положениями экстремумов [12].

Низкотемпературный предел средней скорости броуновского мотора позволяет различать те процессы, для которых диффузия играет доминирующую роль, и те, для которых она не важна. Поскольку диффузионное движение исчезает в пределе низких температур, анализ низкотемпературного поведения броуновского мотора дает ключ к разделению двух рассматриваемых процессов. В данном сообщении получено простое явное выражение для средней скорости адиабатического броуновского мотора, из которого следует ряд нетривиальных выводов о том, как чередование положений экстремумов флуктуирующего потенциала обеспечивает функционирование мотора и регулирует направление его движения. Отметим, что аналогичный анализ адиабатического режима в низкотемпературном пределе проводился в задаче о движении вихря в сверхпроводнике с периодическим потенциалом пиннинга [13,14].

Рассмотрим движение броуновской частицы, потенциальная энергия которой флуктуирует между двумя периодическими (с периодами L) потенциальными рельефами $U_\sigma(x)$ ($\sigma = \pm 1$) с настолько большими временами жизни τ_σ , что в них успевает установиться термодинамическое равновесие (адиабатическое приближение). В адиабатическом приближении стирается различие между стохастическим и детерминистическим переключением потенциальных рельефов [15], так что флуктуационный процесс можно считать циклическим с периодом $\tau = \tau_1 + \tau_{-1}$. Скорость движения частицы $\langle v \rangle$, усредненная за период τ флуктуаций потенциальной энергии, выражается простым аналитическим соотношением [12,16,17]:

$$\langle v \rangle = \frac{L}{\tau} \Phi, \quad \Phi = \int_0^L dx [q_1(x) - q_{-1}(x)] \int_0^x dy [\rho_1(y) - \rho_{-1}(y)], \quad (1)$$

где

$$\rho_\sigma(x) = \frac{\exp[-\beta U_\sigma(x)]}{\int_0^L dx \exp[-\beta U_\sigma(x)]}, \quad (2)$$

$$q_\sigma(x) = \frac{\exp[\beta U_\sigma(x)]}{\int_0^L dx \exp[\beta U_\sigma(x)]}, \quad \beta = (k_B T)^{-1},$$

k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Соотношение (1) справедливо, когда время установления равновесного распределения Максвелла в фазовом пространстве скоростей $\tau_v = m/\zeta$ (m — масса частицы, ζ — коэффициент трения) является самым малым характеристическим временем системы, а период τ — самым большим. Можно выделить несколько характеристических времен системы, определяющихся временем диффузии $\tau_D = \zeta L^2 / k_B T$ на периоде потенциалов L , временем скатывания частицы $\tau_s = \zeta L^2 / V$ с максимумов потенциальных рельефов амплитуды V и временем $\tau_b = \tau_s \exp(\Delta V / k_B T)$ преодоления локальных барьеров ΔV , если такие присутствуют в потенциальном профиле. В низкотемпературном приближении предполагается, что $k_B T \ll V$ и $\tau_s \ll \tau_D$, т.е. имеет место доминирование движения в заданном потенциальном профиле над диффузионным движением. Поскольку в рассматриваемом дихотомном процессе имеется два переключающихся потенциальных рельефа с различными амплитудами, следует различать общий случай ненулевых рельефов, когда низкотемпературное приближение оправданно при $\tau_v \ll \tau_s < \tau_b \ll \tau$, и частный случай отсутствия потенциального рельефа в одном из состояний дихотомного процесса (так называемый on-off ratchet [1]), в котором $\tau_v \ll \tau_D \ll \tau$. Эти два случая будут рассмотрены ниже отдельно.

Пусть a_σ и b_σ ($a_\sigma, b_\sigma \in (0, L)$) соответственно обозначают координаты наименьшего минимума и наибольшего максимума потенциального рельефа $U_\sigma(x)$ (рис. 1). Тогда в пределе низких температур функции $\rho_\sigma(x)$ и $q_\sigma(x)$, входящие в соотношение (1), можно аппроксимировать дельта-функциями: $\rho_\sigma(x) = \delta(x - a_\sigma)$, $q_\sigma(x) = \delta(x - b_\sigma)$. Их подстановка в (1) приводит к следующему результату:

$$\Phi = \sum_{\sigma=\pm 1} [\theta(b_\sigma - a_\sigma) - \theta(b_\sigma - a_{-\sigma})], \quad (3)$$

где $\theta(x)$ — тэта-функция (равная 1 при $x > 0$, 1/2 при $x = 0$ и -1 при $x < 0$).

Наличие или отсутствие движения в низкотемпературном пределе, а также направление этого движения определяется относительным расположением четырех экстремумов a_σ и b_σ ($\sigma = \pm 1$). Прежде всего отметим, что симметрия каждого потенциала накладывает определенное условие на их экстремумы, $|a_\sigma - b_\sigma| = L/2$, которое приводит к обращению средней скорости движения в нуль, как и должно быть. Для потенциалов, флуктуирующих по амплитуде, положения экстремумов двух потенциалов совпадают: $a_1 = a_{-1}$, $b_1 = b_{-1}$, когда положения минимумов и максимумов одинаковы в обоих потенциалах, и $a_1 = b_{-1}$, $b_1 = a_{-1}$, когда минимум одного потенциала становится максимумом другого и наоборот. Легко проверить, что в этих случаях $\Phi = 0$. Средняя скорость движения отлична от нуля только при чередовании положений минимумов и максимумов флуктуирующих потенциалов (круговые диа-

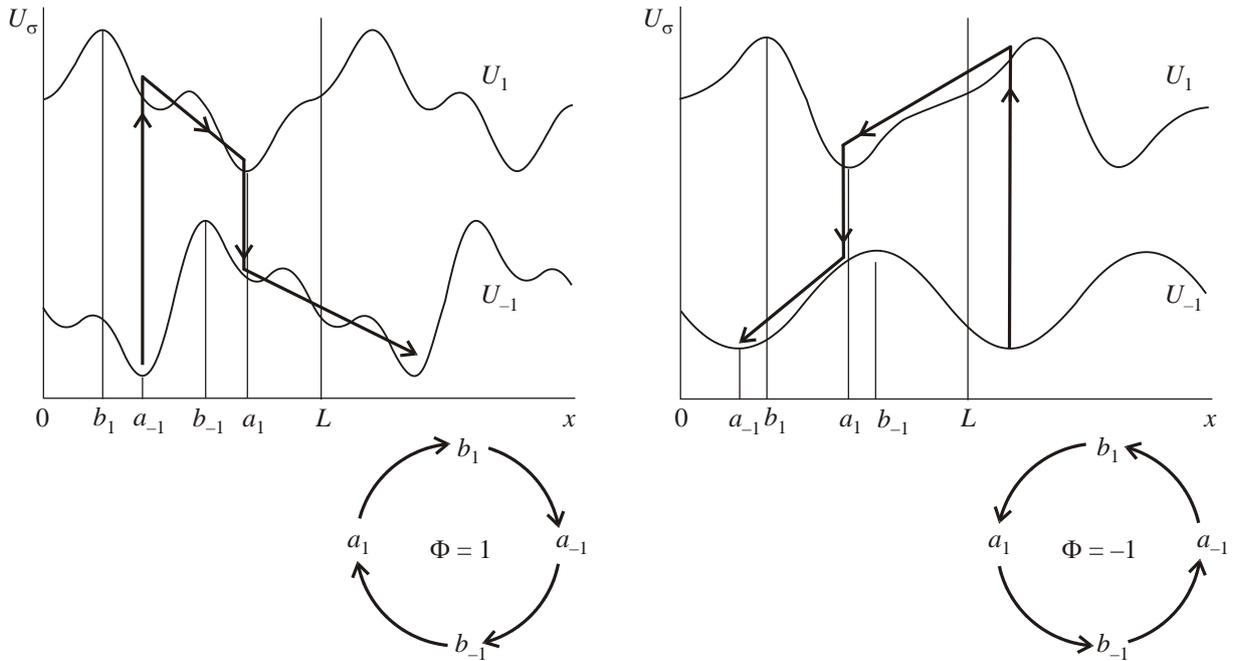


Рис. 1. Механизм возникновения направленного движения направо и налево (левые и правые части рисунка) при переключении потенциалов. Движение при низких температурах становится возможным при чередовании положений максимумов и минимумов переключающихся потенциалов.

граммы на рис. 1). Положительное и отрицательное направления движения (левая и правая части рисунка) соответствуют циклическому обходу экстремумов по часовой стрелке и против нее. Анализ траекторий движения (стрелки вдоль и поперек профилей потенциальной энергии) показывает, что результирующее направление движения определяется направлением от максимума к минимуму какого-либо потенциала, между которыми расположен максимум другого потенциала. При таком расположении экстремумов частица в каждом потенциальном рельефе движется к минимальной точке, минуя барьеры другого потенциала благодаря переключениям между двумя потенциалами.

Рассмотрим случай, когда потенциальный рельеф в одном из состояний дихотомного процесса отсутствует (on-off ratchet): $U_\sigma(x) = (1/2)(\sigma + 1)V(x)$, $V(x) = V(x + L)$ (рис. 2). Отсутствие потенциала при $\sigma = -1$ обеспечивает в данном состоянии чисто диффузионное движение и равномерное равновесное распределение $\rho_{-1}(x) = q_{-1}(x) = L^{-1}$. Используя в соотношении (1) это равномерное распределение и распределения $\rho_1(x) = \delta(x - a)$, $q_1(x) = \delta(x - b)$ для состояния $\sigma = 1$ в пределе низких температур (где a и b — координаты наименьшего минимума и наибольшего максимума функции $V(x)$), получаем

$$\Phi = \left(\frac{|a-b|}{L} - \frac{1}{2} \right) \text{sgn}(a-b), \quad \text{sgn} x = 2\theta(x) - 1. \quad (4)$$

В результате диффузионной стадии движения в состоянии $\sigma = -1$ (штриховые линии со стрелками на рис. 2) частица может оказаться в минимумах потен-

циала $U_1(x)$, принадлежащих различным периодам L . Эффективное среднее смещение частицы происходит в направлении, соответствующем направлению от минимума к ближайшему максимуму потенциала $U_1(x)$. При этом предполагается, что потенциал $U_1(x)$ асимметричен, т.е. $|a-b| \neq L/2$.

Таким образом, функционирование адиабатических броуновских моторов при низких температурах возможно только при определенном расположении экстремальных точек флуктуирующих потенциальных профилей. Направленное движение возникает при чередовании положений их абсолютных максимумов и минимумов, а также всегда, когда один из профилей отсутствует, а второй является асимметричным. Поскольку характерные времена релаксации системы зависят от формы потенциальных рельефов и растут с

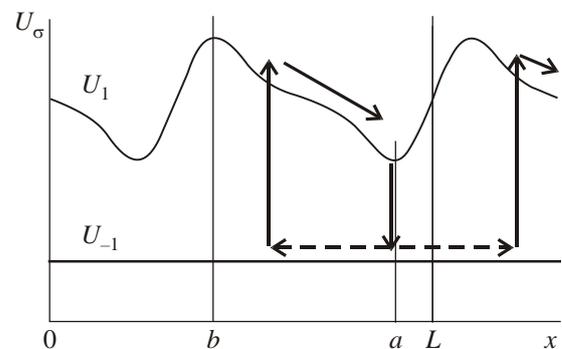


Рис. 2. Низкотемпературный механизм возникновения направленного движения при включении и выключении асимметричного потенциала.

уменьшением температуры, а адиабатичность процесса обеспечивается достаточно длительными временами жизни обоих потенциальных профилей (превышающими все времена релаксации), то средние скорости направленного движения в рассматриваемом режиме не будут очень малы только для профилей с одним максимумом и минимумом на одном периоде. Проведенный анализ низкотемпературного поведения адиабатических броуновских моторов позволяет выявить роль диффузионных процессов и силовых эффектов, возникающих при переключении потенциалов, в механизмах функционирования броуновских моторов.

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».

1. P. Reimann, *Phys. Rep.* **361**, 57 (2002).
2. P. Hänggi and F. Marchesoni, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 387 (2009).
3. J.M.R. Parrondo and B.J. de Cisneros, *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process* **75**, 179 (2002).
4. J.-F. Chauwin, A. Ajdari, and J. Prost, *Europhys. Lett.* **27**, 421 (1994).
5. A. Parmeggiani, F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost, *Phys. Rev. E* **60**, 2127 (1999).
6. Yu.A. Makhnovskii, V.M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S.H. Lin, and T.Y. Tsong, *Phys. Rev. E* **69**, 021102 (2004).
7. J. Howard, *Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton*, Sinauer Associates, Sunderland, MA (2001).
8. P.C. Bressloff and J.M. Newby, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 135 (2013).
9. A.F. Huxley, *Prog. Biophys.* **7**, 255 (1957).
10. H. Wang and G. Oster, *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process* **75**, 315 (2002).
11. V.M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S.H. Lin, and T.Y. Tsong, *J. Phys. Chem. B* **108**, 15880 (2004).
12. V.M. Rozenbaum, Yu.A. Makhnovskii, I.V. Shapochkina, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, and S.H. Lin, *Phys. Rev. E* **85**, 041116 (2012).
13. V.A. Shklovskij and O.V. Dobrovolskiy, *Phys. Rev. B* **84**, 054515 (2011).
14. V.A. Shklovskij, V.V. Sosedkin, and O.V. Dobrovolskiy, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 025703 (2013).
15. В. М. Розенбаум, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 391 (2008) [*JETP Lett.* **88**, 342 (2008)].
16. J.M.R. Parrondo, *Phys. Rev. E* **57**, 7297 (1998).
17. V.M. Rozenbaum, T.Ye. Korochkova, A.A. Chernova, and M.L. Dekhtyar, *Phys. Rev. E* **83**, 051120 (2011).

Low-temperature operational regime of an adiabatic Brownian motor

V.M. Rozenbaum

Consideration concerns the motion of a Brownian particle in two cyclically switching spatially periodic asymmetric potentials, with the cycle period longer than the relaxation time. It is shown for low temperatures that directed motion occurs at the alternation of the absolute maximum and minimum positions of the two potentials as well as at the cyclic on/off switching of an asymmetric potential. The results obtained elucidate the role of diffusion processes and force effects arising from the potential switching in the operational mechanisms of Brownian motors.

PACS: **05.40.-a** Fluctuation phenomena, random processes, noise, and Brownian motion;
05.60.Cd Classical transport;
87.16.Nn Motor proteins.

Keywords: Brownian motors, protein motors, Brownian motion, fluctuation phenomena, random processes.