УДК 533.723:544.034:577.353(086.48)

ВОЗВРАТНО-ПОСТУПАТЕЛЬНЫЙ ИНЕРЦИОННЫЙ БРОУНОВСКИЙ МОТОР

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

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

Представлена теория инерционного возвратно-поступательного броуновского мотора, справедливая при произвольных массах частиц и частот дихотомных флуктуаций потенциальной энергии. Получено точное решение уравнения Клейна − Крамерса с флуктуирующими параболическими потенциалами для амплитуды возвратно-поступательного движения и средней скорости этого движения в состояниях дихотомного процесса. Показано, что учет инерции принципиально важен для получения корректных частотных зависимостей основных характеристик броуновского мотора.

В настоящее время существует множество примеров наносистем, в которых энергия химических реакций или электромагнитного взаимодействия преобразуется в энергию направленного движения частиц вдоль границы раздела фаз [1, 2]. Теория таких систем часто строится в рамках диффузионной динамики, учитывающей внешние воздействия посредством дихотомных флуктуаций пространственно периодической потенциальной энергии [3−5]. При этом используется предположение о малости инерционных эффектов, которое хорошо обосновано для многих систем и существенно упрощает рассматриваемую задачу. Наноразмерный механизм, направленное движение которого возникает вследствие неравновесных флуктуаций потенциальной энергии и описывается в рамках диффузионной динамики, принято называть броуновским мотором.

Представляют интерес также системы, генерирующие возвратно-поступательное движение. Примером такого движения может служить экспериментально наблюдаемое возвратно-поступательное движение полимеров, синтезированных из бистабильных фоточувствительных азобензолов, которое возникает в процессе оптомеханического превращения энергии [6]. В работе [7] приведена теория безынерционного возвратно-поступательного нанодвигателя. В данной статье представлено обобщение этой теории, учитывающее произвольную приведенную массу частиц. Получено точное выражение для средней скорости движения наночастицы в каждом состоянии дихотомного процесса при флуктуирующих потенциальных энергиях параболического вида, описывающих межчастичное взаимодействие.

В данной статье в качестве модели возвратно-поступательного мотора рассмотрим броуновскую частицу, находящуюся в контакте с тепловым резервуаром абсолютной температуры *T*, потенциальная энергия которой флуктуирует между двумя функциями $U_+(x)$ и $U_-(x)$, а коэффициент трения − между двумя значениями ζ_+ и ζ_-. Индексы "+" и "−" здесь и далее обозначают два состояния дихотомного процесса. Пусть γ_+ и γ_- − скорость перехода из состояния "+" в состояние "−" и из состояния "−" в состояние "+", соответственно. Плотность вероятности $\rho_\pm(x,v,t)$ найти частицу в состоянии "+" или "−" с координатой x и скоростью v в момент времени t

удовлетворяет уравнению Клейна–Крамерса [8] с дополнительными слагаемыми $\gamma_{\mp}\rho_{\mp}(x,v,t)$ и $\gamma_{\pm}\rho_{\pm}(x,v,t)$, учитывающими так называемые источники и стоки (скорости прихода и ухода частицы в одно состояние из другого):

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial t}\rho_{\pm}(x,v,t)=-\frac{\partial}{\partial x}v\rho_{\pm}(x,v,t)+\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v}\left(\zeta_{\pm}v+U'_{\pm}(x)+\frac{\zeta_{\pm}k_BT}{m}\frac{\partial}{\partial v}\right)\rho_{\pm}(x,v,t)- \\ -\gamma_{\pm}\rho_{\pm}(x,v,t)+\gamma_{\mp}\rho_{\mp}(x,v,t).\end{gathered} \tag{1}$$

Здесь m – приведенная масса, k_B – постоянная Больцмана, а $U'_{\pm}(x)\equiv dU_{\pm}(x)/dx$. Условие нормировки функции распределения дает дополнительное уравнение для $\rho_{\pm}(x,v,t)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dv\left[\rho_{+}(x,v,t)+\rho_{-}(x,v,t)\right]=1. \tag{2}$$

Для компактности выкладок и дальнейшего анализа от $\rho_{\pm}(x,v,t)$ удобно перейти к новым, нормированным на единицу, функциям распределения $p_{\pm}(x,v,t)$:

$$\rho_{\pm}(x,v,t)=\frac{\gamma_{\mp}}{\gamma_{+}+\gamma_{-}}p_{\pm}(x,v,t),\quad \int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dv\,p_{\pm}(x,v,t)=1, \tag{3}$$

которые при установившемся процессе ($\partial p_{\pm}(x,v,t)/\partial t=0$) удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial}{\partial x}vp_{\pm}(x,v)-\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v}\left(\zeta_{\pm}v+U'_{\pm}(x)+\frac{\zeta_{\pm}k_BT}{m}\frac{\partial}{\partial v}\right)p_{\pm}(x,v)=-\gamma_{\pm}\left[p_{\pm}(x,v)-p_{\mp}(x,v)\right]. \tag{4}$$

Искомой величиной является средняя скорость в состоянии "$+$" или "$-$"

$$\langle v_{\pm}\rangle\equiv\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dv\,v\,\rho_{\pm}(x,v)=\frac{\gamma_{\mp}}{\gamma_{+}+\gamma_{-}}\langle v\rangle_{\pm}. \tag{5}$$

Здесь через

$$\langle\ldots\rangle_{\pm}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dv\ldots p_{\pm}(x,v) \tag{6}$$

обозначена операция усреднения по "$+$" и "$-$" состояниям.

Будем считать, что $U_{\pm}(x)\to\infty$ при $x\to\pm\infty$, так что плотность вероятности найти частицу при $x\to\pm\infty$ равна нулю ($p_{\pm}(\pm\infty,v)=0$). Плотность вероятности найти частицу с бесконечной скоростью также равна нулю ($p_{\pm}(v,\pm\infty)=0$). С учетом этого интегрирование уравнения (4) по v дает:

$$\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty}dv\,v\,p_{\pm}(x,v)=-\gamma_{\pm}\int_{-\infty}^{\infty}dv\left[p_{\pm}(x,v)-p_{\mp}(x,v)\right], \tag{7}$$

так что

$$\int_{-\infty}^{\infty}dv\,v\,p_{\pm}(x,v)=-\gamma_{\pm}\int_{-\infty}^{x}dy\int_{-\infty}^{\infty}dv\left[p_{\pm}(y,v)-p_{\mp}(y,v)\right]. \tag{8}$$

Интегрирование обеих частей последнего уравнения по x приводит к выражениям

$$\begin{aligned}\langle v\rangle_{\pm} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv\, v\, p_{\pm}(x,v) = -\gamma_{\pm} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{x} dy \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \left[p_{\pm}(y,v) - p_{\mp}(y,v) \right] = \\ = \gamma_{\pm} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, x \left[p_{\pm}(y,v) - p_{\mp}(y,v) \right],\end{aligned} \quad . \tag{9}$$

в которых использовано тождество

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{x} dy p_{\pm}(y,v) = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, p_{\pm}(x,v)\,. \tag{10}$$

Результат (9) дает выражение для искомой средней скорости (5)

$$\langle v_{\pm} \rangle = \gamma^{*} \left(\langle x \rangle_{\pm} - \langle x \rangle_{\mp} \right), \tag{11}$$

где γ^{*} – эффективная частота переключения состояний, определяющаяся соотношением

$$\gamma^{*} = \frac{\gamma_{+}\gamma_{-}}{\gamma_{+} + \gamma_{-}}\,. \tag{12}$$

Формула (11) имеет ясный физический смысл. Средняя скорость движения в каждом из состояний пропорциональна эффективной частоте их переключения и разности средних значений координаты в этих состояниях. Из этой формулы также следует, что суммарная скорость $\langle v_{+} \rangle + \langle v_{-} \rangle$ по двум состояниям равна нулю, как и должно быть для возвратно-поступательного движения.

Получим еще одно важное соотношение, связывающее среднее значение скорости $\langle v \rangle_{\pm}$ (или координат $\langle x \rangle_{\pm}$) со средним значением производной от потенциальной энергии $\langle U'_{\pm} \rangle_{\pm}$. Для этого почленно проинтегрируем уравнение (4) по x:

$$\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \left(\zeta_{\pm} v + U'_{\pm}(x) + \frac{\zeta_{\pm} k_B T}{m} \frac{\partial}{\partial v} \right) p_{\pm}(x,v) = \gamma_{\pm} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \left[p_{\pm}(x,v) - p_{\mp}(x,v) \right]. \tag{13}$$

Отсюда следует, что

$$\frac{1}{m} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \left(\zeta_{\pm} v + U'_{\pm}(x) + \frac{\zeta_{\pm} k_B T}{m} \frac{\partial}{\partial v} \right) p_{\pm}(x,v) = \gamma_{\pm} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{v} dv' \left[p_{\pm}(x,v') - p_{\mp}(x,v') \right]. \tag{14}$$

Почленное интегрирование уравнения (13) по v и использование тождеств

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \frac{\partial}{\partial v} p_{\pm}(x,v) = 0\,, \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \int\limits_{-\infty}^{v} dv' p_{\pm}(x,v') = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} dv\, v\, p_{\pm}(x,v) \tag{15}$$

дает:

$$\frac{1}{m} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \left[\zeta_{\pm} v + U'_{\pm}(x) \right] p_{\pm}(x,v) = -\gamma_{\pm} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{\infty} dv\, v \left[p_{\pm}(x,v) - p_{\mp}(x,v) \right] \tag{16}$$

или, с использованием операции усреднения $\langle ... \rangle_\pm$,

$$\frac{\zeta_\pm}{m}\langle v \rangle_\pm + \frac{1}{m}\langle U'_\pm \rangle_\pm = -\gamma_\pm \left(\langle v \rangle_\pm - \langle v \rangle_\mp \right). \qquad (17)$$

Учитывая соотношение (5) и тождество $\langle v \rangle_\mp = -(\gamma_\mp / \gamma_\pm)\langle v \rangle_\pm$, следующее из равенства $\langle v_\pm \rangle = -\langle v_\mp \rangle$, получаем окончательно:

$$\langle U'_\pm \rangle_\pm = -\zeta_\pm \left(1 + \tau_\pm \Gamma\right)\langle v \rangle_\pm = -\gamma_\pm \zeta_\pm \left(1 + \tau_\pm \Gamma\right)\left(\langle x \rangle_\pm - \langle x \rangle_\mp \right), \quad \tau_\pm = m / \zeta_\pm, \quad \Gamma = \gamma_+ + \gamma_- . \qquad (18)$$

Величина $\tau_\pm$, имеющая размерность времени, характеризует время релаксации скоростей к равновесному распределению Максвелла. Соотношения (11) и (18) являются основными результатами данной работы. В отсутствие инерции (когда m и $\tau_\pm$ стремятся к нулю) эти соотношения переходят в соответствующие соотношения безынерционного рассмотрения, полученные в [7].

Рассмотрим важный частный случай параболических потенциальных энергий

$$U_\pm(x) = \frac{1}{2} k_\pm (x - a_\pm)^2 , \qquad (19)$$

для которого задача нахождения средних скоростей ($\langle v_\pm \rangle$) и амплитуды возвратно-поступательного движения ($\langle x \rangle_+ - \langle x \rangle_-$) решается точно. Наличие точного решения связано с тем, что среднее значение $\langle U'_\pm \rangle_\pm$ выражается через среднее значение координаты:

$$\langle U'_\pm \rangle_\pm = k_\pm (\langle x \rangle_\pm - a_\pm) , \qquad (20)$$

и подстановка (20) в (18) дает систему двух линейных уравнений относительно $\langle x \rangle_+$ и $\langle x \rangle_-$:

$$(1 + G_\pm)\langle x \rangle_\pm - G_\pm \langle x \rangle_\mp = a_\pm . \qquad (21)$$

Для компактности записи здесь введена безразмерная величина

$$G_\pm \equiv (\gamma_\pm \zeta_\pm / k_\pm)\left(1 + \tau_\pm \Gamma\right). \qquad (22)$$

Решение системы уравнений (21) имеет вид

$$\langle x \rangle_\pm = \frac{a_\pm (1 + G_\mp) + a_\mp G_\pm}{1 + G_+ + G_-} , \qquad (23)$$

с учетом которого соотношение (11) дает следующие точные выражения для средней скорости и амплитуды A возвратно-поступательного движения:

$$\langle v_\pm \rangle = \pm \gamma^* A, \quad A = \langle x \rangle_+ - \langle x \rangle_- = \frac{A_0}{1 + G_+ + G_-}, \quad A_0 \equiv a_+ - a_- . \qquad (24)$$

Анализ частотных зависимостей выражений (24) проведем для симметричного случая $\zeta_{\pm} = \zeta$, $\gamma_{\pm} = \gamma$, $k_{\pm} = k$, при котором выражения (24) принимают вид

$$\langle v_{\pm} \rangle = \pm \frac{1}{2} \gamma A, \quad A = A_0 \left[1 + 2\gamma\zeta / k + 4\gamma^2 / \omega_0^2 \right]^{-1}, \quad \omega_0^2 = k / m. \tag{25}$$

Амплитуда A возвратно-поступательного движения равна разности положений минимумов A_0 параболических потенциальных ям двух состояний дихотомного процесса при малых частотах γ переключений этих состояний и убывает с ростом γ. Средние скорости движения в каждом состоянии являются немонотонными функциями частоты, принимая нулевые значения при $\gamma = 0$ и $\gamma \to \infty$ и достигая максимального значения

$$\left| \langle v_{\pm} \rangle \right|_{\max} = \frac{kA_0}{4\zeta} \left(1 + 2 \frac{\sqrt{mk}}{\zeta} \right)^{-1} \tag{26}$$

при $\gamma_{\max} = \omega_0 / 2$, где ω_0 − циклическая частота гармонических колебаний частицы в потенциальных ямах. В отсутствие инерции ($m \to 0$, $\omega_0 \to \infty$) частотные зависимости скорости становятся монотонно возрастающими функциями. Таким образом, учет инерции дает качественно другое поведение скорости с изменением частоты, обеспечивая правильное асимптотическое поведение при больших частотах флуктуаций потенциальной энергии: $\left| \langle v_{\pm} \rangle \right| \to 0$ при $\gamma \to \infty$.

Особо отметим, что полученные выражения справедливы для произвольных значений коэффициента трения и эффективной массы и являются уникальными, поскольку класс точных решений уравнения Клейна−Крамерса ограничен всего несколькими примерами [8]. Это обстоятельство позволяет рассмотреть случай сильной инерции ($\tau_{\pm}\Gamma >> 1$), в котором $\left| \langle v_{\pm} \rangle \right|_{\max} \approx \omega_0 A_0 / 8$, т.е. средняя скорость пропорциональна циклической частоте колебаний частицы в параболических потенциальных ямах и разности положений минимумов этих ям.

На рис. 1 и 2 представлены частотные зависимости амплитуды возвратно-поступательного движения и средней скорости для различных значений безразмерного параметра $\varepsilon = mk / \zeta^2$, характеризующего отношение времени релаксации в фазовом пространстве скоростей $\tau = m / \zeta$ к времени скольжения в параболическом потенциале ζ / k (которое определяется как x / v при учете двух равенств $F = kx = \zeta v$ для силы, действующей на частицу в параболическом потенциале). Амплитуда возвратно-поступательного движения является монотонно убывающей функцией частоты переключения потенциалов, высокочастотная асимптотика которой пропорциональна γ^{-1} в отсутствие инерции и γ^{-2} в отсутствие трения. Поэтому по мере увеличения инерционного вклада (параметра ε) амплитуда убывает. Средняя скорость в состояниях дихотомного процесса является немонотонной функцией частоты с максимумом, который уменьшается и сдвигается в область низких частот по мере увеличения инерционного вклада.

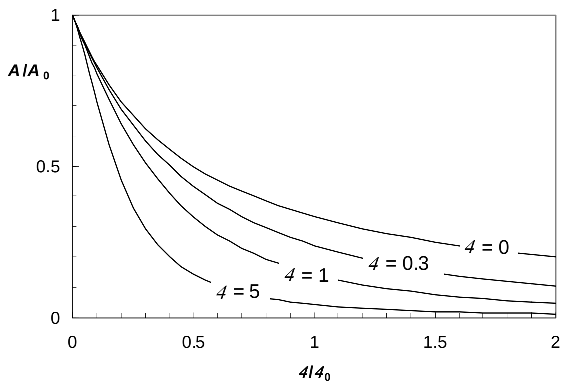

Рис. 1. Зависимость амплитуды возвратно-поступательного движения A, измеряемой в единицах параметра A_0, от отношения частоты флуктуаций параболического потенциала γ к параметру $\gamma_0 = k/\zeta$ при различных значениях инерционного параметра $\varepsilon = mk/\zeta^2$.

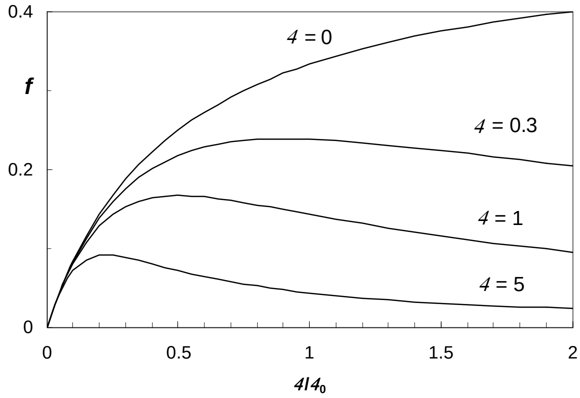

Рис. 2. Зависимость функции $f = 2\left|\langle v_\pm \rangle\right| / \gamma_0 A_0$, характеризующей среднюю скорость в состояниях дихотомного процесса, от отношения частоты флуктуаций параболического потенциала γ к параметру $\gamma_0 = k/\zeta$ при различных значениях инерционного параметра $\varepsilon = mk/\zeta^2$.

В данной статье изучено влияние инерционных эффектов на работу возвратно-поступательного адиабатического броуновского мотора для произвольных масс частиц и частот флуктуаций потенциальной энергии. Полученные выражения для генерируемой мотором средней скорости и амплитуды являются точным решением уравнения Клейна−Крамерса. Результаты данной статьи показывают, что учет инерции принципиально важен для получения правильных частотных зависимостей основных характеристик броуновского мотора, а именно, немонотонного поведения средней скорости возвратно-поступательного движения и ее убывания при больших частотах смены состояний дихотомного процесса, в отличие от ее монотонного возрастания в отсутствие инерции (см. рис. 2). Это связано с тем, что в высокочастотной области период флуктуаций потенциала становится сравнимым со временем релаксации в фазовом пространстве скоростей, уменьшающимся до нуля при уменьшении инерционного вклада. Кроме того, получение простых выражений, справедливых при произвольной массе частицы, представляет большую методологическую ценность, поскольку расширяет достаточно узкий круг известных точных решений уравнения Клейна−Крамерса.

Литература

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // Phys. Rep. – 2002. – V. **361. – P.** 57-265.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81. – P. 387-442.
3. Astumian R. D., Bier M. Fluctuation driven ratchets: molecular motors // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 72. – P. 1766-1769.
4. Prost J., Chawin J.-F., Peliti L., Adjari A. Asymmetric pumping of particles // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 72. – P. 2652-2655.

5. Chauwin J.-F., Ajdari A., Prost J. A. Mechanism without Diffusive Steps. // Europh. Lett. – 1994. – V. 27. – P. 421-426.
6. Hugel T., Holland N. B., Cattani A., Moroder L., Seitz M., Gaub H. E. Single-Molecule Optomechanical Cycle // Science. – 2002. – V. 296. – P. 1103-1106.
7. Makhnovskii Yu. A., Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H., Tsong T. Y. Reciprocating nanoengine // Europ. Phys. J. B. – 2006. – V. 52. – P. 501–505.
8. Riskin H. The Fokker-Plank Equation. Methods of Solution and Applications. – Berlin: Springer-Verlag, 1989. – 288 p.

ЗВОРОТНЬО-ПОСТУПАЛЬНИЙ ІНЕРЦІЙНИЙ БРОУНІВСЬКИЙ МОТОР

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

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

Представлено теорію інерційного зворотньо-поступального броунівського мотора, що є справедливою при довільних масах частинок і частот дихотомних флуктуацій потенціальної енергії. Отримано точний розв'язок рівняння Клейна-Крамерса з флуктуючими параболічними потенціалами для амплітуди зворотно-поступального руху і середньої швидкості цього руху в станах дихотомного процесу. Показано, що урахування інерції є принципово важливим для отримання коректних частотних залежностей основних характеристик броунівського мотора.

INERTIAL RECIPROCATING BROWNIAN MOTOR

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

[1]Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine, 17 General Naumov Str. Kyiv, 03164, Ukraine, taiscrust@mail.ru
[2]Belarusian State University, Prospekt Nezavisimosti 4, 220050 Minsk, Belarus, e-mail: shapoch@mail.ru

We present a theory of an inertial reciprocating Brownian motor that is valid for an arbitrary particle mass as for as arbitrary frequencies of dichotomic fluctuations of potential energy. The exact solution of Klein-Kramers equation with fluctuating parabolic potentials is derived that gives analytical expressions for the amplitude of reciprocation motion as well as the mean velocity of this motion in dichotomic states. We demonstrate that inertia accounting is essentially important for deriving of accurate frequency dependencies of the main Brownian motor characteristics.