

# Механизм возникновения высокой эффективности броуновского мотора с флуктуирующим потенциалом

В. М. Розенбаум<sup>1)</sup>

Институт химии поверхности НАН Украины, 03164 Киев, Украина

Поступила в редакцию 9 февраля 2004 г.

После переработки 10 марта 2004 г.

Рассмотрена разновидность броуновского мотора (системы, генерирующей однонаправленное движение броуновской частицы под воздействием асимметричного флуктуирующего потенциала), когда потенциал состоит из асимметричной периодической компоненты, претерпевающей случайные сдвиги на полпериода  $L$  с некоторой частотой, и потенциала внешней силы  $F$ . Показано, что высокая эффективность такого мотора (отношение полезной работы, совершаемой против силы нагрузки  $F$ , к энергии, сообщаемой частице за счет сдвигов потенциала) обусловлена высоким и узким барьером, а также положим потенциальным рельефом произвольной формы, повторяемым с энергетическим сдвигом на обоих полупериодах  $L$ . Представлены простые аналитические зависимости потока и эффективности от силы нагрузки в широком диапазоне частот.

PACS: 05.40.–a, 05.60.Cd, 82.20.–w, 87.16.Nn

Неравновесные флуктуации в асимметричных средах, приводящие к однонаправленному движению броуновских частиц даже в отсутствие внешнего поля, представляют методологический и прикладной интерес при изучении и конструировании так называемых броуновских моторов – “наномашин”, преобразующих различные виды энергии в механическую, систем, сегрегирующих наночастицы, молекулярных насосов, работающих на энергии расщепления аденозинтрифосфата, и т.д. К настоящему времени предложен целый ряд моделей, которые описывают возникновение упорядоченного движения частиц в асимметричных потенциалах, флуктуирующих за счет каких-либо внешних факторов, например, химических реакций [1–3].

Как известно, основными характеристиками броуновских моторов являются поток  $J$ , определяющий среднюю скорость однонаправленного движения, и эффективность  $\eta$ , характеризующая отношение полезной работы, совершаемой против внешней силы нагрузки  $F$ , к энергии, затрачиваемой на флуктуации потенциала [3, 4]. Типичное поведение функций  $J(F)$  и  $\eta(F)$  показано на рис.1. Видно, что для броуновского мотора, как и для любого мотора, характерно монотонное уменьшение  $J$  с увеличением нагрузки  $F$ , а также немонотонное поведение  $\eta(F)$ . Некоторое время считалось, что высокая эффективность свойственна только адиабатическим детерминистическим моделям, в которых  $\eta$ , близкая к еди-

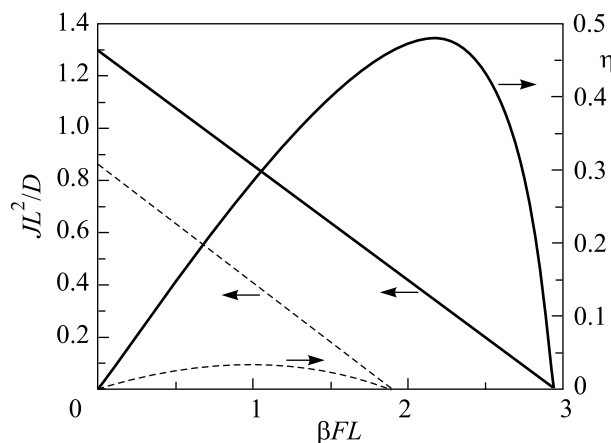


Рис.1. Типичные зависимости потока частиц  $J$  (монотонно убывающие функции) и эффективности  $\eta$  (немонотонные функции) броуновского мотора от силы нагрузки  $F$ . Как показано в статье, высокий и узкий барьер, запирающий обратный поток, существенно улучшает характеристики мотора (сплошные линии), ср. со случаем отсутствия такого барьера (штриховые линии). Значения параметров графических зависимостей указаны в тексте

нице, достигается в пределе бесконечно малых сил нагрузки ( $F \rightarrow 0$ ) и бесконечно большого временного периода изменения потенциала ( $T \rightarrow \infty$ ) при конечном произведении  $FT$  [4]. Значения  $\eta$  в моделях с мгновенным переключением потенциалов (например, в ходе быстрых химических реакций), которые наиболее интересны для биологических приложений, ограничивались значениями порядка 0.05 [4]. Это

<sup>1)</sup>e-mail: vrozen@mail.kar.net

объясняется тем, что для облегчения вычислительной работы, как правило, использовались потенциалы простого вида с минимальным числом варьируемых параметров (например, пилообразные потенциалы, характеризующиеся только амплитудой и параметром асимметрии), или тем, что в одном из переключающихся состояний потенциал вообще отсутствовал, обуславливая чисто диффузионную стадию движения. Для достижения большей эффективности в этом классе моделей необходимо, чтобы переключающиеся потенциалы были идентичны и сдвинуты на полпериода [5, 6]. Так, в [5] рассматривался простой пилообразный потенциал и считалось, что броуновская частица может переходить из этого потенциала в его сдвинутую на полпериода копию только из узкой области вблизи минимума потенциала. В [6] изучался двухъямный периодический потенциал с ямами, отстоящими друг от друга на полпериода, и с большими барьерами между ними, что позволяло ограничиться кинетическим описанием перескоков броуновской частицы между ямами при малой частоте переключения потенциалов. Высокая эффективность достигалась, когда один из барьеров был намного выше другого.

В данной статье мы исследуем механизм возникновения высокой эффективности броуновского мотора для широкого класса потенциалов  $U(x) = V(x) + Fx$ , в которых  $V(x) = V(x + 2L)$  – асимметричная периодическая компонента, претерпевающая случайные сдвиги на полпериода  $L$  с частотой  $\gamma$ , а  $F$  – сила нагрузки. Основная концепция нашего подхода состоит в следующем. Динамика движения броуновской частицы в потенциалах  $U^\pm$  (индексы  $+$  и  $-$  обозначают потенциалы со сдвинутыми на полпериода компонентами  $V(x)$  и относящиеся к ним величины) определяется двумя функциями распределения  $\rho^\pm(x, t)$ , удовлетворяющими уравнению Смолуховского [7] с дополнительным слагаемым, которое описывает случайные переходы частицы между потенциалами  $U^\pm$  с частотой  $\gamma$ :

$$\frac{\partial \rho^\pm(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial j^\pm(x, t)}{\partial x} - \gamma[\rho^\pm(x, t) - \rho^\mp(x, t)]. \quad (1)$$

Здесь потоки  $j^\pm(x, t)$  определяются выражением

$$j^\pm(x, t) = -D e^{-\beta U^\pm(x)} \frac{\partial}{\partial x} [e^{\beta U^\pm(x)} \rho^\pm(x, t)], \quad (2)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии и  $\beta = (k_B \tilde{T})^{-1}$  – обратная температура ( $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\tilde{T}$  – абсолютная температура). В стационарном состоя-

нии полный поток является постоянной величиной, которую можно представить в виде

$$J = 2j^+(0) + \gamma R(L), \quad R(x) \equiv \int_0^x [\rho^-(x') - \rho^+(x')] dx'. \quad (3)$$

Выражение (3) получено интегрированием уравнения (1) по  $x$  с учетом условий  $\rho^\pm(x + L) = \rho^\mp(x)$  и  $j^\pm(x + L) = j^\mp(x)$ , следующих из равенства  $V^\pm(x + L) = V^\mp(x)$ . Эти же условия определяют и выражение для энергии, затрачиваемой на переключение потенциалов  $U^+ \rightarrow U^- \rightarrow U^+$  в единицу времени:

$$W_{\text{in}} = 2\gamma \int_0^L [V^+(x) - V^-(x)] [\rho^-(x) - \rho^+(x)] dx. \quad (4)$$

Поскольку полезная работа мотора, совершаемая в единицу времени против силы нагрузки  $F$ , равна  $W_{\text{out}} = 2FLJ$ , то соотношения (3) и (4) определяют эффективность мотора  $\eta = W_{\text{out}}/W_{\text{in}}$ . Если разность  $V^+(x) - V^-(x)$  мало изменяется с  $x$  и оценивается величиной  $\Delta V$ , то  $W_{\text{in}} \approx 2\gamma \Delta V R(L)$  и

$$\eta \approx \frac{FL}{\Delta V} \left[ 1 + \frac{2j^+(0)}{\gamma R(L)} \right]. \quad (5)$$

Значения  $\eta$  стремятся к единице при  $FL \rightarrow \Delta V$ , если выполняется условие малости отрицательного потока  $j^+(x)$  в точке  $x = 0$ . Оно реализуется, если периодическая компонента потенциала  $V^+(x)$  в точке  $x = 0$  содержит высокий барьер  $V_0$ . Таким образом, высокая эффективность броуновского мотора возникает при одновременном выполнении двух условий: а) наличие высокого и узкого барьера  $V_0$ , запирающего обратный поток; б) пологого потенциального рельефа  $v(x)$  произвольной формы, повторяемого с энергетическим сдвигом  $\Delta V$  на обоих полупериодах функции  $V^+(x)$ .

Проанализируем возможность одновременного выполнения этих условий. Оба они приближенно удовлетворяются для модели двухъямного потенциала, рассмотренной в [6]. Действительно, если кривизна потенциала в экстремальных точках значительно превышает  $F/L$ , то положения этих точек можно считать не зависящими от  $F$ . Поскольку ямы отстоят друг от друга на полпериода  $L$ , то броуновская частица при переключении потенциалов совершает переходы между малыми окрестностями минимумов этих ям. Идентичность формы остальных участков потенциала уже не является необходимой, поэтому можно легко обеспечить наличие высокого барьера в точке  $x = 0$ , а также удовлетворить периодическим граничным условиям.

В нашем случае, когда функция  $v(x)$  имеет произвольный вид, сформулированные условия выполняются строго, если допустить скачкообразные изменения потенциалов  $U^\pm$  в окрестностях точек  $x = 0$  и  $L$  (рис.2). Определим функцию  $V^+(x)$  на двух полупериодах соотношениями

$$V^+(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x < l_0, \\ v(x), & l_0 \leq x < L, \end{cases} \quad (6)$$

$$V^+(x+L) = v(x) - \Delta V, \quad 0 \leq x < L,$$

так что в точках  $x = 0, l_0$  и  $L$  она претерпевает скачки  $V_0, V_0 - v(l_0)$  и  $v(l_0) - 2\Delta V$  (в соответствии с выбором начала координат на рис.2,  $v(L) = \Delta V$ ). В пределе  $l_0 \rightarrow 0$  граничные условия в точках  $x = 0$

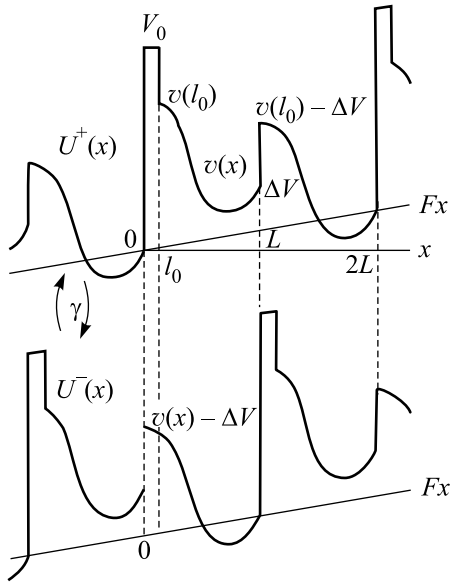


Рис.2. Потенциалы  $U^\pm(x) = V^\pm(x) + Fx$ , содержащие асимметричные периодические компоненты  $V^\pm(x) = V^\pm(x+2L) = V^\mp(x+L)$ , сдвигающиеся на полупериода  $L$  с частотой  $\gamma$ , и внешнее поле силы нагрузки  $F$ . Каждый потенциал имеет высокий барьер  $V_0$  в узкой области  $l_0$ . Пологий рельеф  $v(x)$  повторяется на обоих полупериодах  $L$  со сдвигом  $\Delta V$ . Периодичность функций  $V^\pm(x)$  обеспечивается ее скачками. Положения потенциальных кривых и граничных точек на них указаны относительно прямой  $Fx$

и  $L$  легко выводятся из (2). Они включают условия непрерывности потоков в этих точках, а также соотношения

$$\Lambda j^+(0) = D[\rho^-(L) - e^{\beta v(l_0)} \rho^+(l_0)], \quad \Lambda \equiv l_0 e^{\beta V_0}, \quad (7)$$

$$\rho^+(L) = e^{\beta[v(l_0) - 2\Delta V]} \rho^-(l_0), \quad (8)$$

учитывающие равенство  $\rho^\pm(x+L) = \rho^\mp(x)$ . В этом же пределе соотношение (4) принимает вид  $W_{in} = 2\gamma\Delta VR(L)$ , поскольку считается, что  $V_0 l_0 \rightarrow 0$ .

При этом допускаются произвольные значения параметра  $\Lambda$ , в частности, можно полагать  $\Lambda/L \gg 1$ .

Удобно ввести новые переменные  $\xi_{1,2}(x) = \rho^+(x) \mp \rho^-(x)$ , которые при учете (1) и (2) удовлетворяют на интервале  $l_0 < x < L$  дифференциальным уравнениям

$$\xi_1''(x) + \beta[v'(x) + F]\xi_1'(x) + [\beta v''(x) - 2\gamma/D]\xi_1(x) = 0, \quad (9)$$

$$\xi_2'(x) + \beta[v'(x) + F]\xi_2(x) = -J/D. \quad (10)$$

Общее решение уравнения (9) содержит две произвольные постоянные:  $C_1$  и  $C_2$ . Еще две произвольные постоянные  $C_3$  и  $J$  входят в общее решение уравнения (10):

$$\xi_2(x) = e^{-\beta[v(x)+Fx]} \left[ C_3 - (J/D) \int_{l_0}^x e^{\beta[v(x')+Fx']} dx' \right]. \quad (11)$$

Эти четыре постоянные находятся из трех уравнений (3), (7) и (8) (причем  $j^+(0)$  и  $R(L)$  выражаются через решения уравнений (9), (10)), а также условия нормировки

$$\int_{l_0}^L \xi_2(x) dx = C_3 Z_- - (J/D) Z_{-+} = \frac{1}{2}, \quad (12)$$

где

$$Z_{\pm} \equiv \int_{l_0}^L e^{\pm\beta[v(x)+Fx]} dx,$$

$$Z_{-+} \equiv \int_{l_0}^L dx e^{-\beta[v(x)+Fx]} \int_{l_0}^x dx' e^{+\beta[v(x')+Fx']}. \quad (13)$$

Трудность реализации описанной схемы решения состоит в том, что уравнение (9) с функцией  $v(x)$  произвольного вида может быть решено только численно. Однако основные черты модели выявляются при рассмотрении предельных случаев – низких,  $\gamma\tau \ll 1$ , и высоких,  $\gamma\tau \gg 1$ , частот переключения потенциалов  $\gamma$ , где характерное время  $\tau$  установления равновесия в пологом потенциальном рельефе  $v(x) + Fx$  оценивается как  $\tau = Z_+ Z_- / 2D \geq L^2 / 2D$ .

Для  $\gamma\tau \ll 1$  решение  $\xi_1(x)$  уравнения (9) приближенно определяется правой частью (11) с заменой констант  $C_3$  и  $-J/D$  на  $C_1$  и  $C_2$ . Тогда величины  $j^+(0)$  и  $R(L)$ , через которые выражаются основные характеристики мотора (см. (3) и (5)), принимают вид

$$j^+(0) = -\frac{\sinh \beta FL}{S},$$

$$R(L) = \frac{\Lambda Z_- (e^{\beta\Delta V} - e^{\beta FL}) + 2Z_+ Z_- \sinh \beta\Delta V}{2S}, \quad (14)$$

$$S = \Lambda Z_- (e^{\beta\Delta V} + e^{\beta FL}) +$$

$$+ 2Z_+ Z_- (\cosh \beta\Delta V + e^{-\beta FL}) + 4Z_{-+} \sinh \beta FL.$$

Важно, что величина  $R(L)$ , ответственная за генерацию однонаправленного движения, не зависит от коэффициента диффузии  $D$  и положительна при  $FL < \Delta V$  (причем  $R(L)$  меняет знак при  $F = F_0$ , где  $F_0 L \rightarrow \infty$ , когда  $\Lambda \rightarrow 0$ , и  $F_0 L \rightarrow \Delta V$ , когда  $\Lambda \rightarrow \infty$ ). В свою очередь, поток  $j^+(0)$  пропорционален  $D$ , отрицателен при  $F > 0$  и монотонно убывает с  $F$ . Поэтому  $J = 0$  в точке остановки  $F = F_s$ , удовлетворяющей неравенству  $F_s L < \Delta V$  (причем  $F_s \rightarrow \Delta V$ , когда  $\Lambda \rightarrow \infty$ ). Из (5) и (14) следует, что при  $\Lambda = 0$  эффективность выражается как

$$\eta = \frac{FL}{\Delta V} \left( 1 - \frac{1}{\gamma\tau} \frac{\sinh \beta FL}{\sinh \beta \Delta V} \right) \quad (15)$$

и ее максимум  $\eta_m$  мал по параметру  $\gamma\tau \ll 1$ . В случае  $\Lambda \rightarrow \infty$  имеем:  $j^+(0) \rightarrow 0$ , величина  $R(L) \rightarrow (1/2) \tanh \beta(\Delta V - FL)/2$  не зависит от вида функции  $v(x)$ , а  $\eta$  является линейной функцией  $FL/\Delta V$  (см. (5)). Анализ поведения функции  $\eta(F)$  при  $FL \rightarrow \Delta V$  требует учета поправок, малых по параметру

$$\varepsilon \equiv \frac{Z_+}{\Lambda} \frac{1 - \exp(-2\beta\Delta V)}{\beta\Delta V} \ll 1. \quad (16)$$

Тогда с точностью до слагаемых порядка  $\varepsilon$  имеем:

$$\eta = \frac{FL F_s - F}{\Delta V F_0 - F}, \quad F_0 L = \Delta V(1 + \varepsilon), \quad (17)$$

$$F_s L = \Delta V \left( 1 + \varepsilon - \frac{\varepsilon}{\gamma\tau} \right), \quad \varepsilon \ll \gamma\tau \ll 1.$$

Максимальное значение  $\eta_m(F_m)$  определяется соотношениями

$$\eta_m = (1 + \varepsilon) \left[ 1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma\tau(1 + \varepsilon)}} \right]^2, \quad (18)$$

$$F_m L = \Delta V(1 + \varepsilon) \left[ 1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma\tau(1 + \varepsilon)}} \right],$$

которые объясняют механизм возникновения высокой эффективности мотора. Предельное поведение  $\eta_m \rightarrow 1$  реализуется в частотном диапазоне  $\varepsilon \ll \gamma\tau \ll 1$ , то есть когда среднее время жизни  $\gamma^{-1}$  потенциалов  $U^\pm$  достаточно для установления равновесия в пологом потенциальном рельефе  $v(x) + Fx$  ( $\gamma^{-1} \gg \tau$ ), но не для преодоления частицей высоких и узких барьеров  $V_0$  ( $\gamma^{-1} \ll \tau/\varepsilon$ ). Поэтому и происходит задержание обратного потока, обуславливающее близкое

к единице значение  $\eta$  при такой силе нагрузки  $F$ , которая приближенно компенсирует сдвиг  $\Delta V$  пологих рельефов  $v(x)$  (см. рис.2 при  $FL \approx \Delta V$ ). Условие идентичности пологих рельефов на обоих полупериодах при  $\Lambda \rightarrow \infty$  и  $FL \approx \Delta V$  приводит к соотношениям  $\rho^-(x) = \rho^+(x) \exp \beta(\Delta V - FL) \approx \rho^+(x)$ , что позволяет избежать энергетических потерь, связанных с релаксацией после переключения потенциалов.

В случае  $\gamma\tau \gg 1$  частные решения уравнения (9) приближенно записываются как  $\exp(\pm \sqrt{2\tilde{\gamma}}x)$ , где  $\tilde{\gamma} \equiv \gamma/D$ . Тогда при выполнении более сильного неравенства  $\tilde{\gamma}L^2 \gg 1$  основные характеристики мотора примут вид

$$j^+(0) = \frac{D}{4S} (A - 2\sqrt{2\tilde{\gamma}}Z_+ e^{-\beta FL} \sinh \beta\Delta V),$$

$$R(L) = \frac{1}{\sqrt{2\tilde{\gamma}}S} [\Lambda(e^{\beta\Delta V - \beta FL} - 1) + 2Z_+ e^{-\beta FL} \sinh \beta\Delta V],$$

$$J = \frac{D}{2S} [\sqrt{2\tilde{\gamma}}\Lambda(e^{\beta\Delta V - \beta FL} - 1) + A], \quad (19)$$

$$S = \sqrt{2\tilde{\gamma}}\Lambda [Z_+ Z_- e^{\beta\Delta V - \beta FL} - Z_{-+} (e^{\beta\Delta V - \beta FL} - 1)] +$$

$$+ \Lambda Z_- (e^{2\beta\Delta V} + e^{\beta v(l_0)}) +$$

$$+ 2Z_+ Z_- e^{-\beta FL} (e^{\beta\Delta V} + e^{\beta v(l_0)} \cosh \beta\Delta V) - Z_{-+} A,$$

$$A = 2e^{\beta v(l_0)} (e^{-\beta FL} \cosh \beta\Delta V - 1) +$$

$$+ 2e^{\beta\Delta V - \beta FL} - 1 - e^{2\beta\Delta V}.$$

При  $\Lambda = 0$  абсолютные значения  $j^+(0)$  и  $\gamma R(L)$  велики по параметру  $\sqrt{\tilde{\gamma}}Z_+$ , причем в выражении для  $J$  слагаемые, пропорциональные  $\sqrt{\tilde{\gamma}}Z_+$ , сокращаются. Поэтому эффективность снова оказывается малой – теперь по параметру  $(\sqrt{\tilde{\gamma}}Z_+)^{-1}$ . В интересующем нас случае  $\Lambda \rightarrow \infty$  имеем:  $j^+(0) \rightarrow 0$  и  $J \rightarrow \gamma R(L)$  (причем  $\gamma R(L)$  не зависит от  $\gamma$ ). При  $FL \rightarrow \Delta V$  значения  $\eta$  и  $\eta_m$  задаются соотношениями (17) и (18), в которых надо формально положить  $\gamma\tau = 1$ . Тогда обобщенная оценка порядка величины максимальной возможной эффективности может быть записана следующим образом:

$$\eta_m \sim 1 - \sqrt{L/l_0} \exp(-\beta V_0/2). \quad (20)$$

Рис.1 иллюстрирует существенное повышение эффективности  $\eta$  при наличии высокого и узкого барьера (сравни сплошные и пунктирные линии со стрелками направо). Зависимости  $J(F)$  и  $\eta(F)$  рассчитаны по формулам (5), (13) и (19) для предельно

асимметричного пилообразного потенциала  $v(x) = v(l_0)(1 - x/2L)$  с  $v(l_0) = 2\Delta V(l_0 \rightarrow 0)$  при  $\beta\Delta V = 3$  и  $\gamma L^2/D = 100$ . Сплошные и штриховые линии соответствуют значениям  $\Lambda/L = 0$  и  $\Lambda/L = 1000$ .

В заключение обратим внимание на то, что в рассмотренной модели поток  $J$  при  $F = 0$  стремится к постоянному ненулевому пределу, если  $\gamma \rightarrow \infty$ . На первый взгляд, это противоречит известной закономерности (см., например, [1]), согласно которой  $J \rightarrow 0$  при  $\gamma \rightarrow \infty$ . На самом деле она имеет место только для потенциалов, не претерпевающих скачкообразных изменений. Если считать, что резкое изменение потенциала на величину  $V$  происходит на участке ненулевой ширины  $l$ , то граничные условия типа (7) и (8) (а вместе с ними и все представленные здесь результаты) справедливы при  $\gamma \ll D(\beta V/l)^2$ . Очевидно, что при  $l \neq 0$  существует область очень высоких частот  $\gamma \gg D(\beta V/l)^2$ , в которой частица не успевает пройти участок  $l$  за среднее время жизни  $\gamma^{-1}$  потенциалов  $U^\pm$ . В этой области частот поток

не чувствителен к форме потенциального рельефа и стремится к нулю при  $\gamma \rightarrow \infty$  в соответствии с указанной закономерностью.

Автор благодарен Ю. А. Махновскому за полезные обсуждения.

- 
1. P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).
  2. R. D. Astumian, Science **276**, 917 (1997).
  3. F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost, Rev. Mod. Phys. **69**, 1269 (1997).
  4. J. M. R. Parrondo, J. M. Blanco, F. J. Chao, and R. Brito, Europhys. Lett. **43**, 248 (1998).
  5. A. Parmeggiani, F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost, Phys. Rev. **E60**, 2127 (1999).
  6. Yu. A. Makhnovskii, V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang et al., Phys. Rev. **E69**, 021102 (2004).
  7. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation. Methods of Solutions and Applications*, Berlin: Springer-Verlag, 1989.