

Т.Е. Корочкива¹, Н.Г. Шкода¹, В.М. Розенбаум¹, Е.В. Шакель^{2,3},
И.В. Шапочкина², М.И. Иким⁴, А.С. Бугаев⁴

АДИАБАТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ ТЕМПЕРАТУРНОГО РЕГУЛИРОВАНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ БРОУНОВСКОГО МОТОРА

¹ Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, E-mail: taiscrust@mail.ru

² Физический факультет, Белорусский государственный университет

пр. Независимости, 4, Минск, 220030, Беларусь

³ Республиканский институт высшей школы

ул. Московская, 15, Минск, 220007, Беларусь

⁴ ФИЦ Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

ул. Косыгина, 4, Москва, 119991, Россия

Броуновские моторы – класс наномеханизмов, генерирующих направленное движение броуновских частиц под действием неравновесных возмущений. Симметрийный анализ факторов, влияющих на возникновение направленного потока и определяющих его направление, указывает на зависимость характеристик мотора от фазового сдвига между потенциальными рельефами стационарной и флуктуирующей компонент потенциальной энергии наночастицы. Рассмотрено движение броуновской частицы, находящейся в поле действия предельно асимметричного стационарного пилообразного потенциала, флуктуирующего в результате дихотомных воздействий пространственно гармонического сигнала. Поскольку пилообразный потенциал легко реализуется вблизи поверхности с нанесенной решеткой электродов определенной формы, а дихотомные изменения пространственно гармонического сигнала легко моделируются лазерными пучками, то рассматриваемое движение наночастицы (броуновского мотора) может быть реализовано экспериментально. Известно, что при достаточно высоких температурах, когда тепловая энергия превышает энергетический барьер пилообразного потенциала, направление движения определяется исключительно фазовым сдвигом гармонического сигнала относительно экстремумов пилообразного потенциала. В данной статье получено аналитическое выражение для средней скорости движения мотора, справедливое при произвольных температурах, но низких частотах дихотомных флуктуаций (адиабатический режим). Анализ выражения показал, что существует критическая температура T_c , ниже которой направление движения теряет зависимость от величины фазового сдвига, тогда как при $T > T_c$ направление движения определяется этим сдвигом. В области промежуточных температур T для каждого значения фазового сдвига можно указать такую температуру $T_s > T_c$, что при $T < T_s$ частица движется в одну сторону, а при $T > T_s$ – в другую.

Ключевые слова: диффузионный транспорт, броуновские моторы, рэтчет-эффект, симметрия рэтчет-систем, дихотомный процесс, телеграфный шум

Броуновские моторы (рэтчеты) моделируют направленное движение броуновской частицы, находящейся в контакте с термостатом, под действием неравновесных возмущений различной природы при нарушении пространственной и/или временной симметрии [1–5]. Одним из следствий симметрийного анализа факторов, влияющих на возникновение рэтчет-эффекта и ответственных за выбор броуновским мотором направления движения [6–9], является вывод о зависимости характеристик мотора от фазового сдвига между

потенциальными рельефами, обеспечивающими стационарный и флуктуирующий вклады [10, 11]. В рамках высокотемпературного приближения этот фазовый сдвиг является единственным параметром, влияющим на направление движения. Естественно предположить, что выход за рамки высокотемпературного приближения может дать дополнительную возможность регулирования направления движения через изменение температуры. Поскольку вне этого приближения анализ температурных характеристик возможен

только путем численного решения математической модели, представляет интерес выбор таких предположений (отличных от высокотемпературных ограничений), которые позволили бы получить аналитические выражения для температурных зависимостей средней скорости броуновского мотора. Таким приближением может служить, например, рассмотрение адиабатического режима движения броуновской частицы в предельно асимметричном пилообразном потенциале, модулируемом дихотомными флюктуациями пространственно гармонического сигнала. В данной статье приводится решение такой задачи, продемонстрировавшее, в частности, возможность температурного регулирования направления движения броуновского мотора.

Будем считать, что пространственно-временная зависимость потенциальной энергии броуновского мотора имеет аддитивно-мультипликативную форму

$$U(x, t) = u(x) + \sigma(t)w(x). \quad (1)$$

Стационарный вклад в $U(x, t)$ описывается периодической функцией $u(x+L) = u(x)$ (далее – предельно асимметричный пилообразный потенциал), которая на своем периоде L задается выражением

$$u(x) = u[x/L - \theta(x-L)], \quad x \in (\varepsilon, L+\varepsilon), \\ 0 < \varepsilon \rightarrow 0, \quad (2)$$

где $\theta(x)$ – скачкообразная тэта-функция, равная 1 при $x > 0$ и 0 при $x < 0$. Пространственная зависимость флюктуирующего вклада задается выражением

$$w(x) = w \cos[2\pi(x/L - \lambda_0)], \quad (3)$$

в котором λ_0 – фазовый сдвиг гармонического сигнала относительно положения скачка предельно асимметричного пилообразного потенциала (рис. 1).

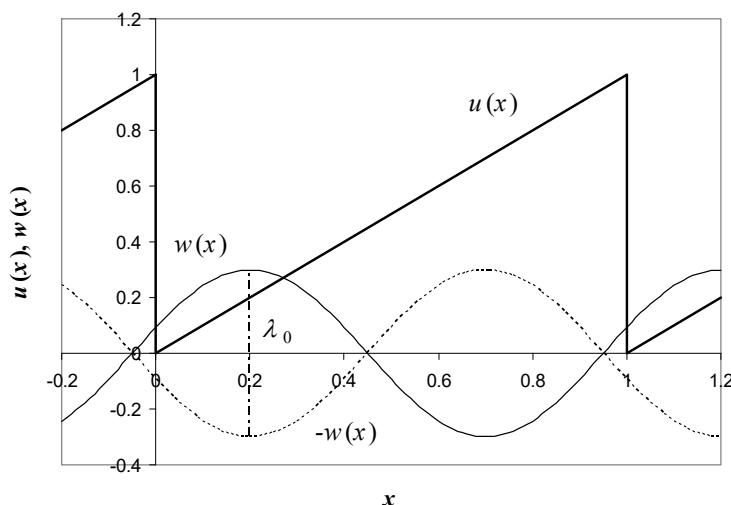


Рис. 1. Пространственные зависимости составляющих аддитивно-мультипликативной потенциальной энергии рэчтата (1): стационарный предельно асимметричный пилообразный рельеф $u(x)$ и малое флюктуирующее гармоническое возмущение $w(x)$, характеризуемое фазовым сдвигом λ_0

Дихотомные временные флюктуации описываются стохастической функцией $\sigma(t)$, принимающей значения ± 1 с нулевым средним значением $\langle \sigma(t) \rangle = 0$ и корреляционной функцией

$$\langle \sigma(t)\sigma(t') \rangle = \exp(-\Gamma|t-t'|), \quad (4)$$

где Γ – обратное время корреляции (частота флюктуаций).

Средняя скорость броуновской частицы с потенциальным профилем вида (1), претерпевающим малые дихотомные флюктуации с большими временами корреляции ($\Gamma^{-1} \gg \tau_{sl}$, где $\tau_{sl} = \zeta L^2 / u$ –

время скольжения по наклонному участку L потенциального профиля высоты $u = \max|u(x)| >> w$, ζ – коэффициент трения),

может быть рассчитана по формуле (35) обзорной статьи [4]:

$$\nu = -\Gamma L \beta^2 \int_0^L dx \rho_+(x) \left[w(x) - \int_0^L dz \rho_+(z) w(z) \right] \int_0^x dy \rho_-(y) \left[w(y) - \int_0^L dz \rho_-(z) w(z) \right], \quad (5)$$

в которой

$$\rho_{\pm}(x) = \frac{\exp[\pm \beta u(x)]}{\int_0^L dy \exp[\pm \beta u(y)]}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (6)$$

(k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура). Подставляя в эти соотношения выражения (2) и (3), легко вычислить величины $\rho_{\pm}(x)$,

$$\rho_{\pm}(x) = \pm L^{-1} \frac{\alpha \exp(\pm \alpha x / L)}{\exp(\pm \alpha) - 1}, \quad \alpha = \beta u, \quad (7)$$

а с их помощью – и двойные интегралы в (5). В результате получаем следующее итоговое выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\nu}{v_0} &= \frac{\gamma \alpha^5}{8(\alpha^2 + 4\pi^2) \sinh^2(\alpha/2)} \left(\frac{2\alpha^2}{\alpha^2 + 4\pi^2} + \cos 4\pi\lambda_0 \right), \\ v_0 &= \left(\frac{w}{u} \right)^2 \frac{L}{\tau_{sl}}, \quad \gamma = \Gamma \tau_{sl} \ll 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Из соотношения (8) следует ряд важных выводов. В области высоких температур ($\alpha \ll 1$) направление движения определяется знаком $\cos 4\pi\lambda_0$. Например, для значений фазового сдвига, лежащих в интервале $0 < \lambda_0 < 1/2$, средняя скорость принимает положительные значения при $\lambda_0 < 1/8$, $\lambda_0 > 3/8$, а отрицательные – при $1/8 < \lambda_0 < 3/8$. При достаточно низких температурах $T < T_c$, где $T_c = u/(2\pi k_B)$, знак скорости всегда положителен. Наконец, в области промежуточных температур $T > T_c$ направление движения может регулироваться настройкой величины фазового сдвига λ_0 (см. вкладку на рис. 2).

Семейство зависимостей средней скорости движения броуновской частицы от температуры при разных значениях фазового сдвига λ_0 представлено на рис. 2. При $1/8 < \lambda_0 < 3/8$ частица движется налево в области высоких температур и направо в области

низких. При определенных температурах, зависящих от λ_0 , возникают точки остановки ($v = 0$), которые соответствуют зависимости $\alpha(\lambda_0)$, представленной на вкладке рис. 2.

В заключение отметим, что рассматриваемая в данной статье модель броуновского мотора легко реализуется экспериментально. Например, асимметричный пилообразный потенциал может быть создан вблизи поверхности с нанесенной на нее периодической решеткой электродов определенной формы [12], а дихотомные изменения пространственно гармонического сигнала легко моделируются лазерными пучками [2, 3, 13]. Адиабатический режим флюктуаций реализуется при частотах флюктуаций достаточно низких относительно обратного характерного времени скатывания частицы по пологому участку пилообразного потенциального профиля. Для такого режима функционирования броуновского мотора мы показали, что в отличие от высоко-

температурного поведения, при котором направление движения определяется исключительно фазовым сдвигом гармонического сигнала относительно положений экстремальных точек пилообразного потенциала, направление движения оказывается возможным обращать изменением температуры. При этом в системе существует

такая критическая температура, ниже которой направление движения становится инвариантным относительно величины фазового сдвига. Эти выводы следуют из полученной в данной статье аналитической зависимости средней скорости от температуры и фазового сдвига, справедливой при низких частотах дихотомных флуктуаций.

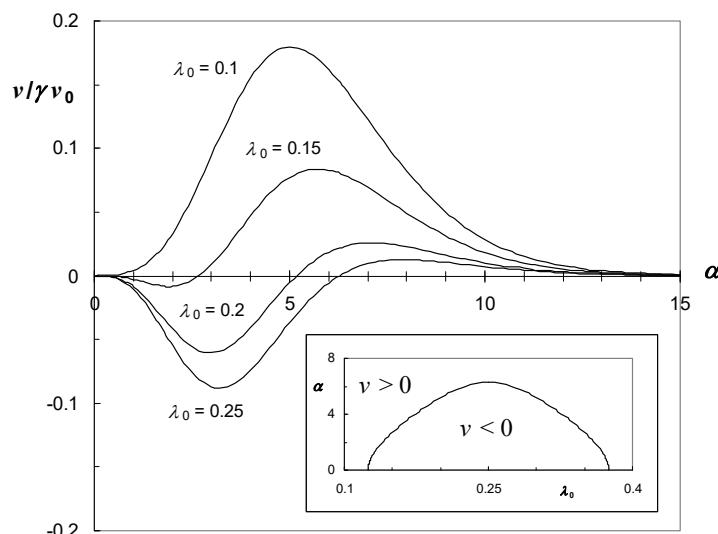


Рис. 2. Зависимости средней скорости движения броуновской частицы (в единицах γv_0) от обратной температуры (в безразмерных единицах $\alpha = u/k_B T$) при разных значениях фазового сдвига λ_0 , рассчитанные по соотношению (8). На вкладке представлена зависимость $\alpha(\lambda_0)$, определяющая точки остановки броуновского мотора ($v = 0$)

Работа поддержанна грантами БРФФІ (Ф20Р-032) и РФФІ (20-57-00007; 18-29-02012-мк).

Адіабатичний режим температурного регулювання напрямком руху броунівського мотора

Т.С. Корочкова, Н.Г. Шкода, В.М. Розенбаум, Е.В. Шакель, І.В. Шапочкіна, М.І. Ікім, А.С. Бугайов

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
бул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, taiscrust@yahoo.com
Фізичний факультет, Білоруський державний університет
пр. Незалежності, 4, Мінськ, 220050, Білорусь
Республіканський інститут вищої школи
бул. Московська, 15, Мінськ, 220007, Білорусь
ФІЦ Інститут хімічної фізики ім. Н.Н. Семенова РАН
бул. Косигіна, 4, Москва, 119991, Росія

Броунівські мотори – клас наномеханізмів, що генерують направлений рух броунівських частинок під дією нерівноважних збурень. Симетрійний аналіз факторів, що впливають на виникнення направленого потоку і визначають його напрям, вказує на залежність характеристик мотора від фазового зсуву між потенціальними рельєфами стаціонарної і флюктууючої компонент потенціальної енергії наночастинки.

Розглянуто рух броунівської частинки, що знаходиться в полі дії гранично асиметричного стаціонарного пилоподібного потенціалу, що флуктує в результаті дихотомних впливів просторово гармонійного сигналу. Оскільки пилоподібний потенціал легко реалізується поблизу поверхні з нанесеною траткою електродів певної форми, а дихотомні зміни просторово гармонійного сигналу легко моделюються лазерними пучками, то рух наночастинки (броунівського мотора), що розглядається, може бути реалізовано експериментально. Відомо, що при досить високих температурах, коли теплова енергія перевищує енергетичний бар'єр пилоподібного потенціалу, напрямок руху визначається виключно фазовим зсувом гармонійного сигналу щодо екстремумів пилоподібного потенціалу. У даній статті отримано аналітичний вираз для середньої швидкості руху мотора, справедливий при довільних температурах, але низьких частотах дихотомних флуктуацій (адіабатичний режим). Аналіз виразу показав, що існує критична температура T_c , нижче якої напрямок руху втрачає залежність від величини фазового зсуву, тоді як при $T > T_c$ напрямок руху визначається цим зсувом. В області проміжних температур T для кожного значення фазового зсуву можна вказати таку температуру $T_s > T_c$, що при $T < T_s$ частинка рухається в один бік, а при $T > T_s$ – в іншій.

Ключові слова: дифузійний транспорт, броунівські мотори, ретчет ефект, симетрія ретчет-систем, дихотомний процес, телеграфний шум

Adiabatic temperature control of the direction of motion of a Brownian motor

T.Ye. Korochkova, N.G. Shkoda, V.M. Rozenbaum, E.V. Shakel, I.V. Shapochkina, M.I. Ikim, A.S. Bugayov

Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, taiscrust@yahoo.com

Department of Physics, Belarusian State University
4 Nezavisimosti pr., Minsk, 220050, Belarus
Republican Institute of High School
15 Moskovskaya Str., Minsk, 220007, Belarus
ICP Semenov Institute of Chemical Physics

4 Kosyginna Str., Building 1, Moscow, 119991, Russian Federation

Brownian motors are a class of nanomechanisms that generate directional motion of Brownian particles under nonequilibrium perturbations. A symmetry analysis of the factors affecting the appearance of a directed current and determining its direction indicates the dependence of the motor characteristics on the phase shift between the potential reliefs of the stationary and fluctuating components of nanoparticle potential energy. The motion of a Brownian particle located in the field of action of an extremely asymmetric stationary sawtooth potential fluctuating as a result of dichotomous effects of spatially harmonic signal is considered. Since the sawtooth potential is easily realized near a surface with a series of electrodes of a certain shape buried inside it, and the dichotomous changes of a spatially harmonic signal are easily created by laser beams, the considered motion of a nanoparticle (Brownian motor) can be realized experimentally. It is known that at sufficiently high temperatures, when the thermal energy exceeds the energy barrier of the sawtooth potential, the direction of motion is determined exclusively by the phase shift of the harmonic signal relative to the extrema of the sawtooth potential.

In this article, an analytical expression for the motor average velocity has been obtained, which is valid at arbitrary temperatures, but at low frequencies of dichotomous fluctuations (adiabatic mode). An analysis of the expression has shown that there exists a critical temperature T_c below which the direction of motion loses its dependence on the magnitude of the phase shift, whereas at $T > T_c$ the direction of motion is determined by that shift. In the region of intermediate temperatures T , for each value of the phase shift, one can indicate a temperature $T_s > T_c$ such that at $T < T_s$ the particle moves in one direction, while at $T > T_s$ in the other.

Keywords: diffusion transport, Brownian motors, ratchet effect, symmetry of ratchet systems, dichotomous process, telegraph noise

ЛИТЕРАТУРА

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // Phys. Rep. – 2002. – V. 361, N 2–4. – P. 57–265.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81, N 1. – P. 387–442.
3. Cubero D., Renzoni F. Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nanomotors. – Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2016. – 200 p.
4. Розенбаум В.М., Шапочкина И.В., Трахтенберг Л.И. Метод функций Грина в теории броуновских моторов // Успехи физ. наук. – 2019. – Т. 189, № 5. – С. 529–543.
5. Розенбаум В.М. Конструктивная роль хаоса: броуновские моторы и выигрышные стратегии в теории игр // Химия, физика и технология поверхности. – 2020. – Т. 11, № 1. – С. 100–114.
6. Denisov S., Flach S., Hänggi P. Tunable transport with broken spacetime symmetries // Phys. Rep. – 2014. – V. 538. –P. 77–120.
7. Cubero D., Renzoni F. Hidden symmetries, instabilities, and current suppression in Brownian ratchets // Phys. Rev. Lett. – 2016. – V. 116, N 1. – P. 010602-1-6.
8. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. Symmetry of deterministic ratchets // Phys. Rev. E. – 2019. – V. 100, N 2. – P. 022115-1-16.
9. Корочкова Т.Е., Розенбаум В.М., Машира В.А. и др. Пространственно-временная симметрия броуновских моторов, управляемых дихотомным процессом // Поверхность. – 2019. – Вып. 11(26). – С. 382–393.
10. Высоцкая В.А., Шапочкина И.В., Корочкова Т.Е., Розенбаум В.М. Стохастические броуновские моторы с малыми флуктуациями потенциальной энергии // Химия, физика и технология поверхности. – 2017. – Т.8, № 3. – С. 299–309.
11. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. High-temperature ratchets driven by deterministic and stochastic fluctuations // Phys. Rev. E. – 2019. – V. 99, N 1. – P. 012103-1-10.
12. Roth J.S., Zhang Y., Bao P. et al. Optimization of Brownian ratchets for the manipulation of charged components within supported lipid bilayers // Appl. Phys. Lett. – 2015. – V. 106, N 18. – P. 183703 (1-4).
13. Lau B., Kedem O., Schwabacher J. et al. An introduction to ratchets in chemistry and biology // Mater. Horiz. – 2017. – V. 4, N 3. – P. 310–318.

REFERENCES

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium. *Phys. Rep.* 2002. **361**(2–4): 57.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale. *Rev. Mod. Phys.* 2009. **81**(1): 387.
3. Cubero D., Renzoni F. *Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nanomotors*. (Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2016).
4. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Trakhtenberg L.I. Green's function method in the theory of Brownian motors. *Physics-Uspekhi*. 2019. **62**(5): 496.
5. Rozenbaum V.M. Constructive role of chaos: Brownian motors and winning strategies in game theory. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2020. **11**(1): 100. [in Russian].
6. Denisov S., Flach S., Hänggi P. Tunable transport with broken spacetime symmetries. *Phys. Rep.* 2014. **538**: 77.
7. Cubero D., Renzoni F. Hidden symmetries, instabilities, and current suppression in Brownian ratchets. *Phys. Rev. Lett.* 2016. **116**(1): 010602-1-6.
8. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. Symmetry of deterministic ratchets. *Phys. Rev. E*. 2019. **100**(2): 022115-1-16.
9. Korochkova T.E., Rosenbaum V.M., Mashira V.A., Shakel E.V., Shapochkina I.V., Ikim M.I., Gerasimov G.N., Gromov V.F., Bugaev A.S. Spatial-temporal symmetry of Brownian motors controlled by a dichotomous process. *Surface*. 2019. **11**(26): 382. [in Russian].
10. Vysotskaya V.A., Shapochkina I.V., Korochkova T.E., Rosenbaum V.M. Stochastic Brownian motors with small fluctuations in potential energy. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2017. **8**(3): 299. [in Russian].
11. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. High-temperature ratchets driven by deterministic and stochastic fluctuations. *Phys. Rev. E*. 2019. **99**(1): 012103-1-10.

12. Roth J.S., Zhang Y., Bao P., Cheetham M.R., Han X., Evans S.D. Optimization of Brownian ratchets for the manipulation of charged components within supported lipid bilayers. *Appl. Phys. Lett.* 2015. **106**(18): 183703 (1-4).
13. Lau B., Kedem O., Schwabacher J., Kwasnieski D., Weiss E.A. An introduction to ratchets in chemistry and biology. *Mater. Horiz.* 2017. **4**(3): 310.

Получена 20.05.2020, принята 27.08.2020