

01

## Асимметрия формы окружения как механизм генерации направленного движения

© А.Е. Антипов,<sup>1</sup> В.Ю. Цицерман,<sup>2</sup> Ю.А. Махновский<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

<sup>2</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

e-mail: vz1941@mail.ru; vz1941@yahoo.com

<sup>3</sup> Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, 119991 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 16 ноября 2012 г.)

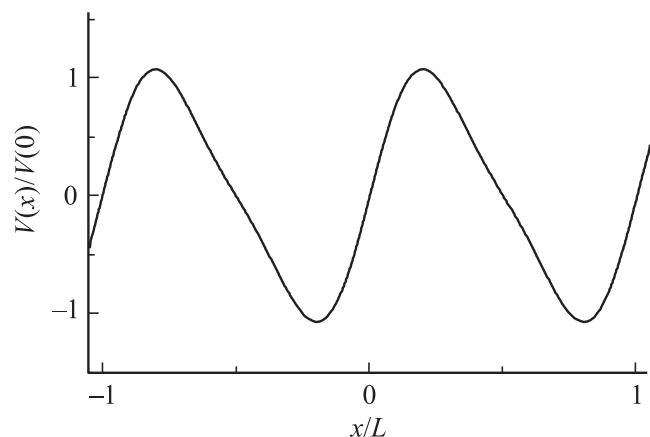
Рассмотрен механизм возникновения направленного движения броуновской частицы, находящейся в канале асимметричной формы, при воздействии на нее переменного силового поля. Устройство, реализующее подобный механизм, напоминает типовые броуновские моторы, использующие асимметрию энергетического потенциала (*ratchet effect*). Показано, что при определенных условиях асимметрия формы может обеспечить максимальный уровень выпрямления при большой силе внешнего поля, выводящего систему из равновесия. Основной вопрос, поставленный в настоящей работе, как зависит выпрямляющая способность подобного механизма от параметров внешнего воздействия и прежде всего от характера его временной зависимости. Результаты, полученные в работе для синусоидального воздействия и апериодической последовательности импульсов, сопоставлены с прежними результатами авторов для биполярных прямоугольных импульсов. Получены и общие оценки для импульсов достаточно произвольной формы, определяющие ее влияние на скорость направленного движения. Анализ предложенного механизма основан на сочетании аналитических расчетов при сильном внешнем поле с моделированием методом броуновской динамики при произвольных параметрах.

### Введение

Предмет работы — так называемый **броуновский мотор**, гипотетическая конструкция, имитирующая работу реальных устройств, способных при подводе внешней энергии обеспечить генерацию направленного тока в отсутствие приложенных макроскопических сил или градиентов термодинамических параметров. Интерес к подобным устройствам возник в связи с многочисленными исследованиями механизмов биологического транспорта — био- (белковых) моторов, трансформирующих флуктуации, порожденные энергией химической реакции, в направленное перемещение макромолекул вдоль тракта [1,2]. Инициирование дрейфа за счет неравновесных флуктуаций является также ключевым механизмом, который может использоваться при разработке искусственных молекулярных или наноразмерных механических устройств [3,4]. Спецификой устройств микро- или наноразмерного масштаба является неустраняемая роль тепловых флуктуаций, которые действуют совместно с внешним сигналом.

Обязательным условием выпрямления внешнего флуктуационного воздействия является нарушенная пространственная (или временная) симметрия в сочетании с отклонением системы от термодинамического равновесия. Существует обширная литература (см., например, обзоры [1–4] и ссылки там), посвященная механизмам направленного транспорта, восходящая еще к известным работам Смолуховского и Фейнмана [5,6]. При всем их

многообразии ключевая модель, обсуждаемая в литературе, основывается на картине броуновского движения одиночной частицы, что и послужило основанием для термина „броуновский мотор“ [7]. Предполагается, что частица движется в асимметричном периодическом потенциале, показанном на рис. 1 (так называемый, *ratchet* или пилообразный потенциал), а из равновесия систему выводит переменное поле или флуктуации профиля потенциала, индуцированные внешним источником. Кроме потенциала, „лево–правую“ асимметрию,



**Рис. 1.** Типичная форма пилообразного (*ratchet*) потенциала. По оси абсцисс отложены значения координаты, отнесенной к периоду.

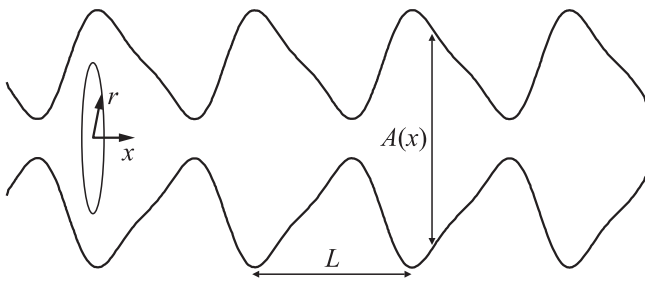


Рис. 2. Типичная форма асимметричного канала с варьируемым сечением.

„ощущаемую“ проходящей сквозь среду частицей, могут обеспечить и другие факторы, как например трение [8], неоднородность в распределении температур [9,10] или периодически расставленные асимметричные препятствия [11].

Простейший способ создать асимметричное окружение для броуновской частицы — разместить ее в канале с периодически варьируемым сечением при асимметрии формы, примерно, как на рис. 2. Сужения канала действуют наподобие энергетических барьеров, а расширения — наподобие потенциальных ям, так что в целом картина напоминает движение в энергетическом потенциале (рис. 1). Так же, как и в последнем случае, при подаче вдоль оси канала постоянного поля подвижность броуновской частицы  $\mu(F) = v/F$ , где  $v$  — ее скорость, будет зависеть не только от  $|F|$ , но и от знака, т.е. направления силы, действующей на частицу. За счет возникшей асимметрии подвижности сигнал с периодически меняемой полярностью непременно порождает направленное движение, скорость которого зависит от разности  $\Delta\mu = \mu(F) - \mu(-F)$ . Движение возникает и при произвольной модуляции силы, порождаемой полем  $F(t)$ , удовлетворяющей условию  $\langle F(t) \rangle = 0$ , как и для флуктуаций с нулевым средним и конечным временем корреляции. При слабом поле подвижность теряет зависимость от амплитуды, асимметрия подвижности исчезает, подтверждая невозможность спонтанного направленного движения в условиях равновесия. Опубликовано довольно много результатов моделирования, подтверждающих направленное движение в асимметричном канале (см., например, [12] и ссылки там, а также ссылки в наших работах [13,14]).

В настоящей работе авторы продолжают исследование выпрямляющей способности устройств, использующих асимметрию формы [13,14]. Ранее мы показали, что, выбрав определенную форму канала (периодически расположенные конусовидные сегменты, рис. 3), можно обеспечить практически полное выпрямление внешнего сигнала: сильное поле в направлении узкого сечения такой системы ( $F > 0$ ) обеспечивает свободное движение с подвижностью, равной подвижности  $\mu_0$  в свободном пространстве, в то время, как при  $F < 0$  подвижность

снижается в отношении  $a^2/R^2$ , где  $a, R$  — радиусы малого и большого сечений конуса. Если ввести коэффициент выпрямления

$$\alpha = \frac{\mu(F) - \mu(-F)}{\mu(F) + \mu(-F)}, \quad (1)$$

то легко видеть, что при  $v = a/R \ll 1$  он близок к величине  $1 - 2v^2$ , что, например, при отношении радиусов 1 : 10 дает 0.98. В этих случаях скорость направленного движения броуновской частицы при сильных полях линейно нарастает по закону  $v = \mu_0 F/2$  в отличие от каналов на рис. 2, когда  $v \rightarrow 0$  при  $F \rightarrow \infty$ .

Реализуется подобный режим при сильном поле и достаточно редкой смене его направления (адиабатический режим). Было показано также, что столь высокая эффективность процесса выпрямления обязана именно особенностям геометрии и связана с деталями диффузионного процесса в канале. В частности, для канала, показанного на рис. 2, перегородки подходят к обоим отверстиям под острым углом, что сказывается на характере движения — сильное поле фокусирует частицу вблизи оси при любом направлении, так что  $\mu(\pm F) \rightarrow \mu_0$ , и асимметрия подвижности  $\Delta\mu = \mu(F) - \mu(-F) \rightarrow 0$ . Будучи близкой к нулю, как при большой, так и при малой амплитуде поля, асимметрия подвижности и при произвольной амплитуде не достигает заметных значений, которые реализуются в предложенной нами модели, показанной на рис. 3.

Предыдущие результаты [13,14] получены при двух существенных ограничениях: внешнее воздействие представлено в виде биполярных импульсов, когда в течение полупериода  $\tau$  сила  $F$  остается постоянной, а зависимость от частоты переключений анализировалась только в асимптотическом режиме  $F \rightarrow \infty$ . Здесь проблема будет изучена в более общей постановке с целью определить, как зависит выпрямляющий механизм от параметров внешнего поля, имея в виду тип временной зависимости  $F(t)$ , частоту переключений и амплитуду. Метод анализа, как и в предыдущих работах, — сочетание аналитических оценок в асимптотическом режиме с броуновской динамикой, позволяющей моделировать конвективную диффузию во внешнем поле. Прежде всего мы изучим, как „работает“ предложенный механизм при наиболее типовой форме импульса

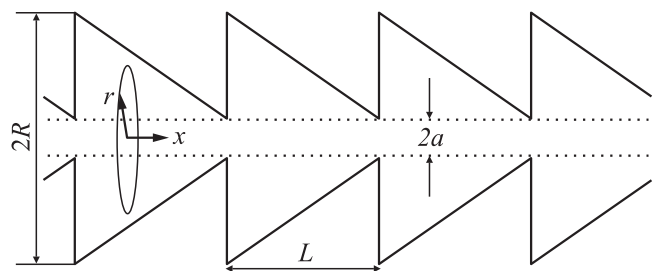


Рис. 3. Предлагаемая конструкция из конусовидных сегментов.

$F(t) = F_0 \sin \Omega t$ . Отличие от прямоугольного импульса проявляется, например, в том, что в течение всего полупериода  $\tau = \pi/\Omega$  пока сохраняется полярность невозможно выдержать условие сильного поля даже при большой амплитуде  $F_0$ . Другой пример, который иллюстрирует заметное влияние характера временной зависимости  $F(t)$  — аperiodическая последовательность импульсов с постоянной амплитудой и случайной длительностью.

Для ясности изложения в разд. 1 приведена сводка предыдущих результатов [12,13]. В разд. 2 и 3 последовательно изложены новые результаты по выпрямлению синусоидального сигнала и сигнала со случайной длительностью „полупериодов“. В разд. 4 приведены общие соображения о том, как зависит эффективная подвижность при направленном движении от временной зависимости  $F(t)$ . Итоги работы и перспективы обрисованы в Заключение.

## 1. Направленное движение при подаче биполярного сигнала

Модель, описывающая движение частицы в канале, показанном на рис. 3, крайне проста: трехмерная диффузия с заданным коэффициентом  $D_0$  при отражающих граничных условиях на стенках в сочетании с дрейфом под действием однородного поля в направлении оси канала. Соответствующее уравнение для плотности вероятности  $P(x, y, z, t)$  обнаружить частицу в точке с координатами  $x, y, z$  в момент  $t$  имеет вид

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_0 \left[ \frac{\partial}{\partial x} \exp(\beta F x) \frac{\partial}{\partial x} \exp(-\beta F x) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] P.$$

Влияние температуры на подвижность сказывается только через параметр  $f = \beta FL$ , где  $L$  — пространственный период канала. Указанное выше приближение сильного поля оправдано, когда  $f \gg 1$ ; из данных моделирования следует, что в зависимости от характера временной зависимости этот параметр должен достигать  $10^3 - 10^5$ .

Если смещение  $\Delta x = x(t) - x(0)$  достигает макроскопического масштаба, значительно превышающего период  $L$ , влияние начальных условий пропадает и процесс носит одномерный характер с эффективными значениями подвижности  $\mu, D$ . Аналитически их удается определить для сильного постоянного поля, когда время диффузионной релаксации в сечении канала намного превосходит время баллистического пролета одного периода. При  $F > 0$ , как отмечалось во Введении, сила, действующая на частицу, и столкновения со стенками фокусируют ее в цилиндре с радиусом  $a$ , где она движется без ограничений, так что  $\mu(F \rightarrow \infty) = \mu_0$ . При обратном направлении поля частица как бы „прижата“ к сечению радиуса  $R$ , а поперечная диффузия обеспечивает равномерное распределение. Тогда вероятность обнаружить частицу в пределах малого круга радиуса  $a$  равна отношению площадей  $a^2/R^2$ . Эта

величина дает не что иное, как вероятность частице оказаться в подвижном состоянии, так что при  $F < 0$   $\mu(|F| \rightarrow \infty) = \mu_0 v^2$  [12,13].

Столь простые оценки верны лишь при  $F = \text{const}$ . При периодической смене полярности их можно применять только в **адиабатическом режиме**, т.е. при длительном полупериоде, когда  $\tau \gg a^2/D_0$ . Подвижность частицы для направленного движения в этом случае  $\bar{\mu} = \mu_0(1 - v^2)/2$ , а коэффициент выпрямления, согласно (1),

$$\alpha = \frac{1 - v^2}{1 + v^2}.$$

В работах [13,14] авторам удалось рассчитать подвижность и при высокой частоте переключений, когда  $D_0 \tau / a^2 \leq 1$ , поскольку весь процесс при сильном поле определяется двумерной диффузией. Для этого надо рассчитать, как „расплывается“ функция распределения  $P(r, t)$  при переключении силы поля с положительного на отрицательное значения, поскольку в рамках принятой картины функция распределения сохраняет зависимость только от  $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ , поперечного смещения частицы относительно оси канала. Установившееся при  $F > 0$  равномерное распределение в пределах малого круга ( $r \leq a$ ) за счет поперечной диффузии постепенно переходит в равномерное распределение в пределах большого круга ( $r \leq R$ ). Пока  $r \leq a$  частица находится в мобильном состоянии, двигаясь без ограничений, а находясь за его пределами — в иммобильном, будучи не способной к продольному перемещению. Вероятности пребывания в обоих состояниях  $p_m(t), p_{im}(t)$  меняются со временем по закону

$$\begin{aligned} p_m(t) &= [p_m(0) - p_m^{\text{eq}}] \mathcal{R}(t) + p_m^{\text{eq}}, \\ p_{im}(t) &= [p_{im}(0) - p_{im}^{\text{eq}}] \mathcal{R}(t) + p_{im}^{\text{eq}}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\mathcal{R}(t)$  — релаксационная функция, удовлетворяющая условиям  $\mathcal{R}(0) = 1, \mathcal{R}(\infty) = 0$ , которая определяется из решения задачи о двумерной диффузии. В ходе релаксации вероятность мобильного состояния спадает от единицы при  $t = 0$  до равновесного уровня  $p_{im}^{\text{eq}} = v^2$  при  $t \rightarrow \infty$  с учетом того, что в любой момент времени  $p_{im}(t) = 1 - p_m(t)$ .

При  $F > 0$  частица будучи локализована в пределах малого круга проходит за полупериод путь  $\Delta x(\tau | F > 0) v_0 \tau$ , где  $v_0 = \mu_0 F$ , поскольку в течение этого полупериода  $p_m(t) = 1$ . За следующий полупериод, когда  $F < 0$ , при расчете пути надо учесть временной ход  $p_m(t)$ , что дает выражение

$$\Delta x(\tau | F < 0) = v_0 \int_0^\tau p_m(t) dt.$$

Итоговое перемещение за период с учетом соотношений (2) составляет

$$\begin{aligned} \Delta(2\tau) &= \Delta x(\tau|F > 0) - \Delta x(\tau|F < 0) \\ &= v_0(1 - v^2) \left[ \tau - \int_0^\tau \mathcal{R}(t) dt \right], \end{aligned} \quad (3)$$

а средняя скорость за период может быть представлена выражением

$$\bar{v} = v_\infty \varphi(\tau), \quad (4)$$

где  $v_\infty = v_0(1 - v^2)/2$  — адиабатическая оценка скорости, справедливая при  $\tau \rightarrow \infty$ . Фактор

$$\varphi(\tau) = 1 - \int_0^\tau \mathcal{R}(t) dt / \tau$$

определяет зависимость скорости от  $\tau$ , т.е. частоты переключений. Существенно, что в (4) первый из множителей зависит от силы  $F$ , в то время как второй от длительности полупериода  $\tau$ . При малой частоте или  $\tau \gg a^2/D_0$  фактор  $\varphi(\tau) \approx 1$ , так что средняя скорость совпадает с величиной  $v_\infty$ . Релаксационная функция  $\mathcal{R}(t)$  получена в [13,14] из решения двумерной диффузионной задачи при отражающем условии на границе диска  $R$  и начальном условии, отвечающем равномерному распределению в пределах малого круга  $r \leq a$ ,  $p_m(t=0) = 1$ . Точное выражение для нее может быть записано в виде

$$\mathcal{R}(t) = \sum_{n \geq 1} a_n \exp(-\lambda_n t), \quad (5)$$

где параметры  $\lambda_n$ ,  $a_n$  определены через цилиндрические функции Бесселя первого рода  $J_0(x)$ ,  $J_1(x)$

$$\lambda_n = \mu_n^2 D_0 / R^2, \quad a_n = \frac{4}{(1 - v^2) \mu_n^2} \frac{J_1^2(\mu_n v)}{J_0^2(\mu_n)}, \quad (6)$$

величины  $\mu_n$  являются корнями функции  $J_1(x)$  и  $\sum_{n \geq 1} a_n = 1$ . Отсюда сразу следует и выражение для фактора, определяющего, согласно (4), спад скорости с ростом частоты переключений

$$\varphi(\tau) = \sum_{n \geq 1} a_n \left[ 1 - \frac{1 - \exp(-\lambda_n \tau)}{\lambda_n \tau} \right]. \quad (7)$$

Как следует из (6), этот фактор зависит от двух параметров:  $D_0 \tau / R^2$  и  $v = a/R$ . Фактически, однако, временной масштаб релаксационной функции и фактора  $\varphi(\tau)$  задает не  $R^2/D_0$ , а другая величина — время релаксации, определяемое как интеграл

$$t_{\text{rel}} = \int_0^\infty \mathcal{R}(t) dt = \sum_n \frac{a_n}{\lambda_n}.$$

Аналитическое выражение для времени релаксации было получено как прямым решением двумерной диффузионной задачи [15], так и суммированием ряда  $\sum a_n / \lambda_n$  [14]

$$t_{\text{rel}} = \frac{a^2}{4D_0} \left[ \frac{\ln 1/v^2}{1 - v^2} - 1 \right].$$

Полученное выражение по порядку величины совпадает с  $a^2/D_0$ , если параметр  $v$  не слишком близок к границам интервала  $[0, 1]$ . Это оправдывает ранее сделанную оценку  $\tau \gg a^2/D_0$  как условие адиабатического режима. Приближение сильного поля, позволившее записать соотношения (2), (3) и последующие, нарушается при очень высоких частотах переключения, когда  $\tau$  соизмеримо с временем баллистического пролета одного сегмента  $L/v_0$  [14]. Таким образом, наряду с предложенным механизмом выпрямления нам удалось в режиме сильного поля аналитически воспроизвести зависимость скорости направленного движения от частоты переключения внешнего поля.

## 2. Выпрямление синусоидального сигнала

Проведенные рассуждения в принципе можно применить и для более сложной временной зависимости  $F(t)$ , сохраняя условие  $\langle F(t) \rangle = 0$  при том, что в большей части периода  $\beta |F(t)| L \gg 1$ . Наиболее типичный случай такой зависимости  $F(t) = F_0 \sin \Omega t$ , где частота переключений  $\Omega = \pi/\tau$ . Сохраняя в силе те же приближения, что и в разд. 1, можно утверждать, что путь, пройденный частицей за тот полупериод, когда  $F(t) > 0$ , определяет соотношение

$$\Delta x(\tau|F > 0) = v_0 \int_0^\tau \sin \Omega t dt,$$

причем здесь  $v_0 = \mu_0 F_0$ . Аналогично за следующий полупериод

$$\Delta x(\tau|F < 0) = v_0 \int_0^\tau \sin \Omega t p_m(t) dt,$$

так что средняя скорость за период

$$\bar{v} = \frac{v_0(1 - v^2)}{2\tau} \int_0^\tau \sin \Omega t [1 - \mathcal{R}(t)] dt. \quad (8)$$

При достаточно больших значениях  $\tau$  здесь можно положить  $\mathcal{R}(t) = 0$ , что дает адиабатическую оценку скорости

$$v_\infty = \frac{v_0(1 - v^2)}{\pi}.$$

В адиабатическом режиме синусоидальный сигнал индуцирует скорость в  $2/\pi$  раз меньшую, чем при

чередовании постоянных значений, если амплитуды импульсов одинаковы в обоих случаях. Подставляя в (8) релаксационную функцию (5), получим выражение для фактора  $\varphi(\tau)$ , учитывающего конечную скорость изменения поля

$$\varphi(\tau) = \bar{v}/v_\infty = \frac{\pi}{2\tau} \int_0^\tau \sin \Omega t \sum_{n \geq 1} a_n [1 - \exp(-\lambda_n t)] dt,$$

что после вычисления интеграла с учетом связи  $\tau = \pi/\Omega$  дает выражение

$$\varphi(\tau) = \sum_{n \geq 1} a_n \left[ 1 - \frac{1 + \exp(-\lambda_n \tau)}{2(1 + \lambda_n^2 \tau^2 / \pi^2)} \right]. \quad (10)$$

Переход к синусоидальному сигналу увеличивает фактор  $\varphi(\tau)$ , что следует из сравнения формул (10) и (7) с учетом неравенства

$$\frac{1 + \exp(-x)}{2(1 + x^2/\pi^2)} < \frac{1 - \exp(-x)}{x}, \quad x = \lambda_n \tau. \quad (11)$$

Формула (10) дает только асимптотики фактора  $\varphi(\tau)$  при сильных полях, когда параметр  $f = \beta F_0 L \gg 1$ . Сочетая аналитические оценки с моделированием методом броуновской динамики, удастся оценить, как зависит скорость направленного движения от двух параметров  $\tau$  и  $f$ , что иллюстрирует рис. 4. Из приведенного графика видно, что соотношение (10) выполняется при  $f \geq 10^4$ . Однако и при умеренной силе поля, когда  $f \approx 10^2 - 10^3$ , относительная скорость частицы, измеряемая фактором  $\varphi = v/v_\infty$  снижается менее, чем вдвое. С другой стороны, достаточно сильно сказывается длительность полупериода. Выход на асимптотику  $\tau \rightarrow \infty$  достигается примерно при  $\tau \geq (10 - 15)t_{rel}$ , причем для сильного поля в адиабатическом режиме  $v = v_\infty$ , а при умеренной силе  $f = 10^2$  скорость падает примерно на 25%. Интересно также, что выход на асимптотику  $v \rightarrow v_\infty$  для синусоидальных импульсов происходит заметно быстрее, чем для прямоугольных, что следует из сопоставления с данными наших предшествующих работ [13,14].

Для синусоидального сигнала, даже при большом значении амплитуды, есть временные интервалы, когда  $\beta|F(t)|L \leq 1$ . Поскольку их доля в течение периода достаточно мала, они не нарушают приближений, из которых следуют соотношения (8) и (10). Наличие таких интервалов сказывается лишь на предельной амплитуде: для прямоугольного сигнала соотношение (7) выполняется, начиная с  $f \approx 10^3$ , в то время, как для синусоидальной амплитуды приходится поднять до уровня  $f \approx 10^4$ .

### 3. Направленное движение при случайных смещениях под действием поля

В качестве модели здесь рассматривается аперiodическое воздействие на броуновскую частицу в виде после-

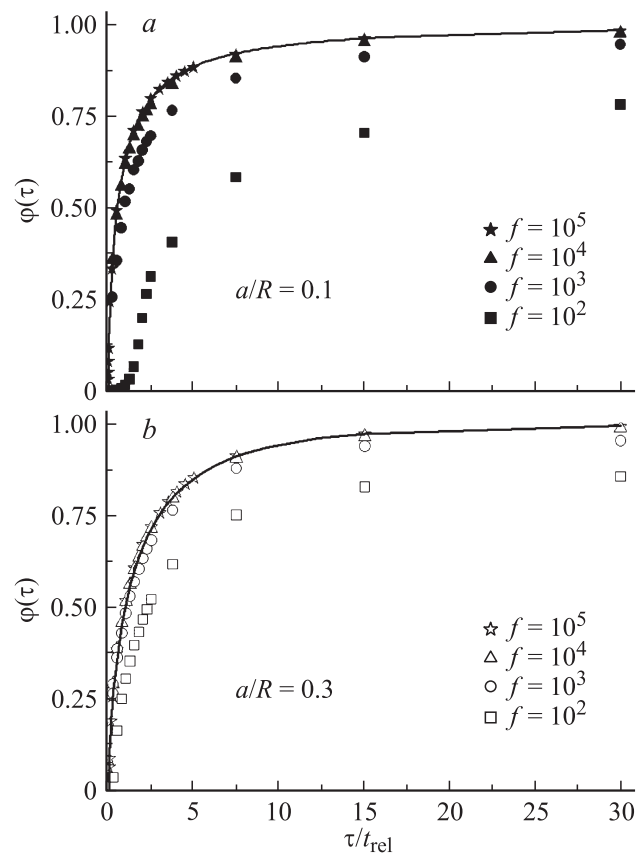


Рис. 4. Скорость направленного движения, индуцированная синусоидальным сигналом  $F_0 \sin \Omega t$  в зависимости от амплитуды поля (параметр  $f = \beta F_0 L$ ) и длительности полупериода  $\tau = \pi/\Omega$ . Данные приведены для отверстий двух размеров  $0.1R, 0.3R$ .

довательности импульсов чередующейся полярности и случайной длительности. Длительности интервалов рассматриваются как случайные величины, в то время как амплитуда каждого из импульсов считается постоянной и среднее значение поля полагается равным нулю.

Последующие рассуждения, как и в предыдущих разделах, оправданы лишь для большой силы поля, действующего на броуновскую частицу. При положительной полярности за время  $\tau_+$  смещение составляет  $s_+ = v_0 \tau_+$ , а при отрицательной полярности  $s_- = v_-(\tau_-)\tau_-$ , где зависимость  $v_-(\tau_-)$  определяется из соотношения

$$s_- = v_0 \int_0^{\tau_-} p_m(t) dt,$$

использованного ранее при выводе соотношения (3). Для длительного интервала наблюдения среднюю скорость можно определить как отношение суммарного смещения к длительности интервала  $T$

$$V = \frac{\sum s_{+,i} - \sum s_{-,i}}{T} = \frac{\sum s_{+,i} - \sum s_{-,j}}{\sum \tau_{+,i} + \sum \tau_{-,j}}. \quad (12)$$

Здесь  $\tau_{\pm,i}, s_{\pm,i}$  — длительность и смещение для импульсов положительной и отрицательной полярности соответственно. Среднее значение каждого периода  $\langle \tau_+ \rangle + \langle \tau_- \rangle$  одинаково, так что  $T = N(\langle \tau_+ \rangle + \langle \tau_- \rangle)$  при том, что  $N \gg 1$ . Переписав соотношение (12) в виде

$$V = \frac{\sum s_{+,i}/N - \sum s_{-,j}/N}{\sum \tau_{+,i}/N + \sum \tau_{-,j}/N},$$

можно каждую из 4 сумм, фигурирующих в этой формуле, отождествить со средней величиной, определяемой при  $N \rightarrow \infty, T \rightarrow \infty$ ,

$$\langle V \rangle = \frac{\langle s_+ \rangle - \langle s_- \rangle}{\langle \tau_+ \rangle + \langle \tau_- \rangle},$$

где  $\langle s_{\pm} \rangle = \sum s_{\pm,i}/N$ ,  $\langle \tau_{\pm} \rangle = \sum \tau_{\pm,i}/N$  при  $N \rightarrow \infty$ . С другой стороны, каждое из средних может быть определено посредством функций распределения  $f_{\pm}(\tau)$

$$\langle s_{\pm} \rangle = \int_0^{\infty} d\tau s_{\pm}(\tau) f_{\pm}(\tau) = \int_0^{\infty} d\tau v_{\pm}(\tau) \tau f_{\pm}(\tau),$$

$$\langle \tau_{\pm} \rangle = \int_0^{\infty} d\tau \tau f_{\pm}(\tau).$$

С учетом этих определений среднюю скорость следует определять по формуле

$$\langle V \rangle = \frac{\int_0^{\infty} d\tau \tau [v_+(\tau) f_+(\tau) - v_-(\tau) f_-(\tau)]}{\langle \tau_+ \rangle + \langle \tau_- \rangle}.$$

По ходу вывода не накладывалось ограничений на функции  $v_{\pm}(\tau)$  и  $f_{\pm}(\tau)$ . Теперь надо учесть, что скорость  $v_+(\tau) = v_0$ , а средние значения —  $\langle \tau_+ \rangle = \langle \tau_- \rangle = \langle \tau \rangle$ , обеспечивая равенство нулю среднего значения поля. Тогда из последующих выражений функция  $f_+(\tau)$  выпадает

$$\langle V \rangle = \frac{v_0 \langle \tau \rangle - \int_0^{\infty} d\tau \tau v_-(\tau) f_-(\tau)}{2 \langle \tau \rangle}, \quad (13)$$

а с учетом того, что

$$\begin{aligned} \langle \tau \rangle &= \langle \tau \rangle_- = \int_0^{\infty} \tau f_-(\tau) d\tau, \\ \langle V \rangle &= \frac{\int_0^{\infty} d\tau \tau [v_0 - v_-(\tau)] f_-(\tau)}{2 \langle \tau \rangle}. \end{aligned} \quad (14)$$

Выражение  $\tau [v_0 - v_-(\tau)]$  под интегралом в формуле (14) есть не что иное, как смещение за период, если

его рассматривать как постоянную величину. Согласно (3), эта величина определяется через релаксационную функцию  $\mathcal{R}(t)$

$$\tau [v_0 - v_-(\tau)] = v_0(1 - v^2) \left[ \tau - \int_0^{\tau} \mathcal{R}(t) dt \right],$$

что дает окончательный результат для средней скорости, полученной усреднением за интервал  $T \rightarrow \infty$

$$\langle V \rangle = v_{\infty} \frac{\langle \tau - \int_0^{\tau} \mathcal{R}(t) dt \rangle}{\langle \tau \rangle}. \quad (15)$$

Достаточно иметь решение при постоянной длительности периода, усредняя отдельно смещение за период и длительность периода. Принимая для релаксационной функции разложение (6), получим

$$\varphi = \langle V \rangle / v_{\infty} = \sum_{n \geq 1} a_n \left[ 1 - \frac{1 - \langle \exp(-\lambda_n \tau) \rangle}{\lambda_n \langle \tau \rangle} \right]. \quad (16)$$

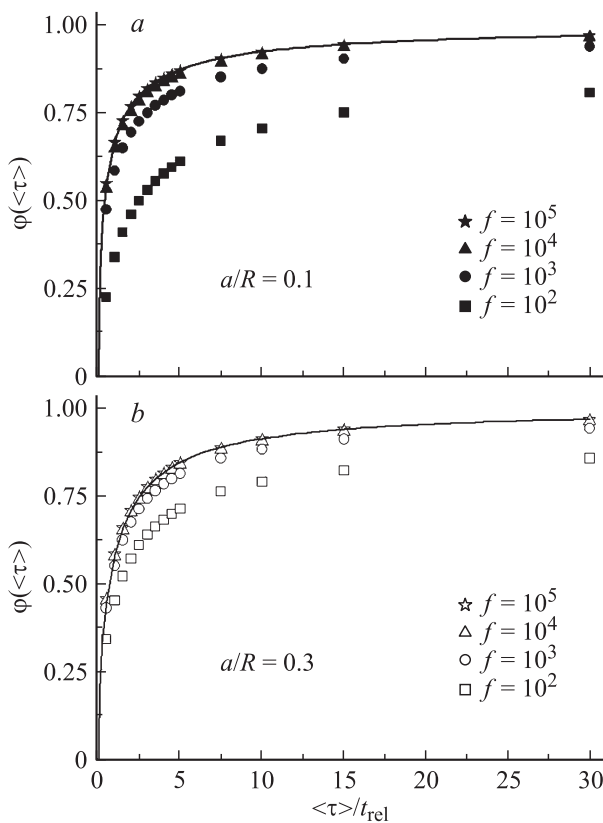
Простые и наглядные формулы возникают, если принять распределение Пуассона  $f(\tau) = k \exp(-k\tau)$ , которое дает среднее значение  $\langle \tau \rangle = k^{-1}$ . Заметим, что эта функция дает распределение длительностей при отрицательной полярности, а функция  $f_+(\tau)$  в ответ не входит. Формула (16) сводится к выражению

$$\varphi(\langle \tau \rangle) = \langle V \rangle / v_{\infty} = \sum_{n \geq 1} a_n \frac{\lambda_n}{\lambda_n + k}. \quad (17)$$

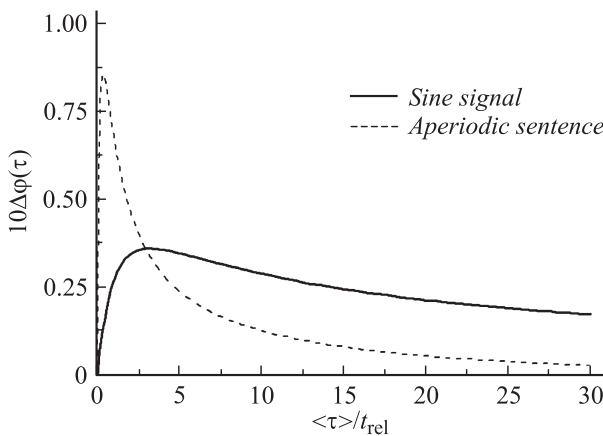
При изменении параметра  $k$  от 0 до  $\infty$ , фактор  $\varphi(\langle \tau \rangle)$  монотонно спадает от единицы до нуля, как и должно быть при монотонном сокращении полупериода. При большой в среднем длительности интервалов  $\tau_{\pm}$  средняя скорость не отличается от адиабатического предела, не „чувствуя“ случайной вариации длительностей. Она сказывается только на факторе  $\varphi(\langle \tau \rangle)$ , который, согласно (6) и (7), зависит от параметров  $D_0/kR^2$  и  $v$ . Как видно из (16), случайность меняет только вклад от фактора  $\exp(-\lambda_n \tau)$ , если принять что среднее значение длительности  $\langle \tau \rangle = k^{-1}$  идентично постоянному значению, принятому в разд. 1. Поскольку в этом случае средняя величина

$$\langle \exp(-\lambda_n \tau) \rangle = k / (k + \lambda_n) = (1 + \lambda_n \tau)^{-1}$$

превышает значение  $\exp(-\lambda_n \tau)$ , сразу видно, что выражения для скорости и фактора  $\varphi$  несколько возрастают. Таким образом, кривая зависимости  $\varphi(\tau)$  при случайном распределении длительности интервалов проходит выше, чем та же кривая при постоянных интервалах. Далее будет показано, что этот результат фактически не зависит от вида распределения. Учитывая также неравенство (11), можно заключить, что как синусоидальный, так и аperiodический сигналы увеличивают



**Рис. 5.** Скорость направленного движения, индуцированная аperiodической последовательностью импульсов в зависимости от амплитуды поля (параметр  $f = \beta FL$ ) и средней длительности полупериода  $\langle \tau \rangle = k^{-1}$ . Принято, что длительность фазы, когда  $F < 0$ , распределена по закону Пуассона  $k \exp(-k\tau)$ . Данные приведены для отверстий двух размеров  $0.1R, 0.3R$ .



**Рис. 6.** Превышение фактора  $\varphi(\langle \tau \rangle)$  для синусоидального сигнала и аperiodической последовательности импульсов над аналогичной величиной для биполярного сигнала. По оси абсцисс отложена средняя длительность полупериода  $\langle \tau \rangle$ . Для аperiodической последовательности импульсов  $\langle \tau \rangle = k^{-1}$ , где  $k$  — параметр в распределении Пуассона  $f(\tau) = k \exp(-k\tau)$ ; для синусоидального и биполярного импульсов  $\langle \tau \rangle = \tau$ , постоянной длительности полупериода. По оси ординат отложена соответствующая разность факторов  $\Delta\varphi$ , увеличенная в 10 раз для наглядности. Расчет проведен при одном значении радиуса отверстия  $a = 0.1R$ .

фактор  $\varphi(\tau)$  в сравнении с тем значением, что он бы имел для биполярного сигнала. Как видно из рис. 6, эти отклонения не слишком велики и в максимуме достигают примерно 0.08 для аperiodического и 0.03 для синусоидального сигналов.

По ходу вычислений нигде не фигурировала величина поля, поскольку принималась картина двумерной диффузии из разд. 2, что накладывает ограничение  $f \gg 1$ . Общая картина, представленная на рис. 5, позволяет оценить, как зависит скорость движения от параметра  $\langle \tau \rangle$  в широком диапазоне изменения  $f$ . Режим сильного поля, описываемый соотношением (17), достигается при  $f = 10^4 - 10^5$ , но даже при  $f = 10^2$  фактор  $\varphi$ , т.е. относительная (отмасштабированная) скорость падает не более, чем на 25%. Применимость соотношения (17) связана не только с силой поля, но и с параметром  $k$ . Необходимое выполнение неравенства  $k^{-1} \gg L/v_0$  может оказаться недостаточным для надежного воспроизведения кривой  $\varphi(\langle \tau \rangle)$ . Большая вероятность появления коротких интервалов в распределении Пуассона может привести к отклонению от простой зависимости (17), особенно по мере возрастания параметра  $k$ .

#### 4. Общие заключения

При произвольной зависимости  $F(t)$  и постоянной длительности полупериода справедливо соотношение

$$\bar{v} = \frac{\mu_0(1 - v^2)}{2\tau} \int_0^\tau F(t)[1 - \mathcal{R}(t)]dt,$$

аналогичное (8) для синусоидального сигнала. Асимптотическая оценка для  $\tau \rightarrow \infty$  следует отсюда при  $\mathcal{R}(t) = 0$ , так что

$$v_\infty = \frac{\mu_0(1 - v^2)}{2\tau} \int_0^\tau F(t)dt.$$

Сравнение интеграла с величиной  $F\tau$ , где  $F$  — амплитуда прямоугольного импульса периода, показывает, как меняется адиабатическая оценка скорости. Например, синусоидальный импульс, как и любой другой, с максимумом в интервале от 0 до  $\tau$  индуцирует при одинаковой амплитуде меньшую скорость, чем прямоугольный импульс. Несколько сложнее сказывается влияние формы импульса на факторе

$$\begin{aligned} \varphi(\tau | F(t)) &= \frac{\bar{v}}{v_\infty} = \frac{\int_0^\tau F(t)[1 - \mathcal{R}(t)]dt}{\int_0^\tau F(t)dt} \\ &= 1 - \frac{\int_0^\tau F(t)\mathcal{R}(t)dt}{\int_0^\tau F(t)dt}. \end{aligned} \quad (18)$$

Для оценки интеграла в числителе можно воспользоваться „теоремой о среднем“, что дает соотношение  $\varphi(\tau|F(t)) = 1 - \mathcal{R}(\bar{t})$ , где  $\bar{t}$  — некоторая точка в интервале  $[0, \tau]$ . Если сила поля нарастает в этом интервале, то положение точки  $\bar{t}$  сдвигается к большим значениям, чем при  $F(t) = \text{const}$ ; величина  $\mathcal{R}(\bar{t})$  падает и соответственно фактор  $\varphi$  увеличивается. Иначе говоря, спад скорости частицы по мере роста частоты переключений **замедляется**. Противоположное заключение следует, когда сила  $F(t)$  падает в течение интервала  $[0, \tau]$ , где  $F > 0$ . Если же временная зависимость имеет вид симметричной кривой с максимумом, как для синусоидального сигнала, для оценки удобно интеграл в (18) разбить на 2 слагаемых, записав

$$\varphi(\tau|F(t)) = 1 - \frac{\int_0^{\tau/2} F(t)\mathcal{R}(t)dt}{\int_0^{\tau} F(t)dt} - \frac{\int_{\tau/2}^{\tau} F(t)\mathcal{R}(t)dt}{\int_0^{\tau} F(t)dt}.$$

Использование „теоремы о среднем“ дает соотношение

$$\varphi(\tau|F(t)) = 1 - \frac{\mathcal{R}(t_1) + \mathcal{R}(t_2)}{2},$$

где точка  $t_1$  находится слева, а точка  $t_2$  справа от положения максимума. Такая же оценка при  $F(t) = \text{const}$  даст две другие точки  $t'_1, t'_2$ . Учитывая, как влияет на положение этих точек рост или падение функции  $F(t)$ , можно установить их взаимное положение, а именно  $t'_1 < t_1 < t_2 < t'_2$ . Для выпуклой вниз релаксационной функции  $\mathcal{R}(t)$  это означает, что

$$\frac{\mathcal{R}(t_1) + \mathcal{R}(t_2)}{2} < \frac{\mathcal{R}(t'_1) + \mathcal{R}(t'_2)}{2},$$

а значит фактор  $\varphi(\tau|F(t))$  возрастает в сравнении с тем значением, которое он имеет при  $F(t) = \text{const}$ . Этот результат согласуется с полученным в разд. 2 для синусоидального импульса.

Общее заключение можно получить и для аperiodической последовательности импульсов. Выражение (16) верно при произвольном распределении длительности для обеих фаз. При его сравнении с формулой (7) для постоянной длительности полупериода, равной среднему значению  $\langle \tau \rangle$  в (16), достаточно определить, как меняет усреднение фактор  $\exp(-\lambda_n \tau)$ . Здесь можно воспользоваться неравенством Йенсена для выпуклых функций

$$\langle \exp(-\lambda_n \tau) \rangle \geq \exp(-\lambda_n \langle \tau \rangle) = \exp(-\lambda_n \tau),$$

откуда видно, что вклад от величины  $\exp(-\lambda_n \tau)$  в факторе  $\varphi(\tau)$  возрастает. Тем самым увеличивается и сам этот фактор, т.е. **затягивается** спад средней скорости с ростом частоты переключений. Обнаруженный ранее этот факт на примере распределения Пуассона оказался не чувствительным к закону распределения. Разумеется, эти оценки справедливы в приближении сильного поля.

## Заключение

Проведенный анализ совместно с данными моделирования показывает, как и за счет чего переменное поле индуцирует направленное движение броуновской частицы, находящейся в канале, образованном конусовидными сегментами, (рис. 3). Особенность предложенной модели — резкая асимметрия подвижностей, гарантирующая максимальный уровень выпрямления. Основной вопрос, поставленный в настоящей работе — как скажется на возникшем движении броуновской частицы характер временной зависимости  $F(t)$ . Наряду с биполярным импульсом рассмотрено воздействие на частицу синусоидального импульса и аperiodического сигнала с чередующейся полярностью и случайной длительностью. Показано, что временная зависимость сказывается на:

- 1) адиабатической оценке скорости при  $\tau \gg a^2/D_0$ ,
- 2) скорости ее спада по мере роста частоты переключений,
- 3) обоснованности приближенной картины двумерной диффузии, положенной в основу аналитических приближений.

Полученные оценки справедливы только при сильном поле. Снижение амплитуды и сокращение длительности импульса нарушают картину двумерной диффузии, которая позволила все величины выразить через релаксационную функцию. В этом случае оценки удастся получить методом броуновской динамики, что позволяет снять ограничения на параметры задачи. В дальнейшем, комбинируя аналитический расчет с моделированием, можно ожидать результатов и для произвольного случайного сигнала.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 10-03-00393.

## Список литературы

- [1] *Иваницкий Г.Р., Медвинский А.Б., Деев А.А., Цыганов М.А.* // УФН. 1998. Т. 168. Вып. 11. С. 931–956.
- [2] *Романовский Ю.М., Тихонов А.Н.* // УФН. 2010. Т. 180. Вып. 9. С. 1221–1233.
- [3] *Drexler K.E.* Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation. NY: Wiley, 1992.
- [4] *Hänggi P., Marchesoni F.* // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. N 1. P. 387–442
- [5] *Smoluchowski M.* // Physik. Zeitschr. 1912. N 13. P. 1069–1083.
- [6] *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1967. Т. 4. гл. 46.
- [7] *Bartussek R., Hänggi P.* // Phys. Bl. 1995. Vol. 51. N 6. P. 506–507.
- [8] *Болотин Ю.Л., Тур А.В., Яновский В.В.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 7. С. 9–12.
- [9] *Buttiker M.* // Z. Phys. B: Condens. Matter. 1987. Vol. 68. N 2–3. P. 161–167
- [10] *Landauer R.* // J. Stat. Phys. 1988. Vol. 53. N 1. P. 233–248.
- [11] *Bogunovic L., Eichhorn R., Regtmeier J. et al.* // Soft Matter. 2012. Vol. 8. N 14. P. 3900–3907.



- [12] *Reguera D., Luque A., Burada P.S. et al. // Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. P. 020604.
- [13] *Zitserman V.Yu., Berezhkovskii A.M., Makhnovskii Yu.A. // J. Chem. Phys.* 2011. Vol. 135. P. 121102.
- [14] *Махновский Ю.А., Цицерман В.Ю., Антипов А.Е. // ЖЭТФ.* 2012. Т. 112. Вып. 3(9). С. 603–620.
- [15] *Berezhkovskii A.M. // Chem. Phys.* 2010. Vol. 370. N 1–3. P. 253–257.