

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Метод функций Грина в теории броуновских моторов

В.М. Розенбаум, И.В. Шапочкина, Л.И. Трахтенберг

Представлены основные результаты теории броуновских моторов, полученные на основе авторского подхода, в котором рассматривается броуновская частица, движущаяся в слабо флуктуирующем потенциальном профиле. Методом функций Грина строится теория возмущений по малым флуктуациям потенциальной энергии, которая позволяет получить аналитическое выражение для средней скорости частицы, справедливое для двух основных классов моторов (пульсирующих и наклонных рэтчетов — *flashing and rocking ratchets*) и произвольной (стохастической либо детерминистической) зависимости флуктуаций от времени. Преимущество предлагаемого подхода заключается в компактности описания и, вместе с тем, в разнообразии моторных систем, анализируемых с его помощью: подавляющее большинство известных аналитических результатов теории броуновских моторов следует из этого выражения. Изложение математических выводов и их анализ составляют основное содержание данной методической заметки.

Ключевые слова: броуновские моторы, рэтчеты, управляемые диффузионные системы, функции Грина

PACS numbers: 05.40. – a, 05.60.Cd

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.04.038347>

Содержание

1. Введение (529).
 2. Теория возмущений по малым флуктуациям: общее рассмотрение (532).
 3. Теория возмущений по малым флуктуациям: дихотомный стохастический процесс (533).
 4. Низкочастотное приближение (537).
 5. Высокотемпературное приближение (539).
 6. Заключение (541).
- Список литературы (542).

1. Введение

Аналитические подходы в решении многих задач теоретической физики возникают в тех ситуациях, когда формулировка модели рассматриваемой системы позволяет выделить хорошее нулевое приближение и построить ряд теории возмущений по малым параметрам, принимающим во внимание факторы, не учтённые в

нулевом приближении. Обычно нулевое приближение выбирается соответствующим такому состоянию системы, в котором её элементы не взаимодействуют между собой или находятся в свободном движении. Тогда под возмущениями подразумевают взаимодействия элементов системы или их потенциальную энергию во внешнем поле, зависящем от времени.

Подобного рода задачи часто удаётся решить путём приближённого подхода на основе дифференциальных уравнений с использованием итераций по малым параметрам, описывающим возмущения. Процедура решения, однако, усложняется при попытках включить в нулевое приближение большее число факторов. Например, оно может учитывать стационарную составляющую потенциальной энергии, в то время как переменная составляющая считается малой и рассматривается в качестве возмущения. В таком случае возникает необходимость вначале отдельно решить невозмущённую задачу, т.е. найти отклик невозмущённой системы на точечное мгновенное воздействие. Полученное решение, называемое функцией Грина невозмущённой задачи, может затем быть использовано для анализа основной, "возмущённой", задачи (см., например, [1–3]).

Метод функций Грина используется во многих областях физики при решении как стационарных, так и нестационарных задач. Среди характерных стационарных задач можно упомянуть краевые задачи в электростатике [4], а среди нестационарных — различные задачи статистической физики и физики твёрдого тела (необратимые процессы, сверхпроводимость, ферромагнетизм, взаимодействие электронов с решёткой в металлах и полупроводниках и др.) [5–7]. Особенно продуктивно использование функций Грина в ситуации, когда для них возможно

В.М. Розенбаум^(1,*), И.В. Шапочкина^(2,†), Л.И. Трахтенберг^(3,4,‡)

⁽¹⁾ Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины, ул. Генерала Наумова 17, 03164 Киев, Украина

⁽²⁾ Белорусский государственный университет, просп. Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь

⁽³⁾ Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, ул. Косыгина 4, 119991 Москва, Российская Федерация;

⁽⁴⁾ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1-3, 119991 Москва, Российская Федерация
E-mail: *vik-roz@mail.ru, †shapoch@mail.ru, ‡litrakh@gmail.com

Статья поступила 7 ноября 2017 г.,
после доработки 19 апреля 2018 г.

получение замкнутого аналитического выражения. Так, функция Грина идеальной решётки твёрдого тела [8] использовалась при нахождении константы скорости туннельного переноса атомов в твёрдой фазе [9], а интегральное представление кулоновской функции Грина [10, 11] было использовано при вычислении констант скоростей различных процессов взаимодействия лазерного излучения с атомами (рассеяние света, фотовозбуждение, фотоионизация и др.) [10–13]. Метод функций Грина оказывается чрезвычайно плодотворным и при анализе возмущений, вносимых в энергетический спектр системы дефектами кристаллической решётки, поверхностью или молекулами с локально подключёнными фрагментами [14–16].

В данной работе метод функций Грина применяется к построению теории броуновских моторов (рэтчетов) — модельных систем, в которых временные флуктуации потенциальной энергии броуновской частицы могут приводить к её направленному движению [17–20]. Природа флуктуаций может быть различной: стохастические конформационные переходы молекул, образующих броуновский мотор, которые вызваны внешними неравновесными воздействиями, влияние переменного внешнего электромагнитного поля, приложенного к системе, и др. Первый тип флуктуаций — стохастические — характерен для биологических молекулярных моторов [21–27], а второй — периодические изменения — для искусственно создаваемых наноустройств [18, 28–34]. При этом важным является то, что среднее значение сил, действующих на частицу вследствие этих флуктуаций, равно нулю (unbiased fluctuations), но асимметрия системы и эффекты, нелинейные по флуктуациям, приводят к направленному движению. Одним из первых примеров реализации направленного движения, возникающего в таких условиях, является существование постоянного электрического тока под действием высокочастотного электромагнитного поля в средах без центра симметрии (фотогальванический эффект) [35].

Среди многообразия подходов к описанию феномена возникновения направленного движения наночастиц в неравновесных системах в отсутствие средних сил и градиентов концентраций особое место занимают теоретические построения, основанные на рассмотрении диффузионной динамики отдельной частицы в зависящем от времени потенциальном поле с потенциальной энергией $U(x, t)$. Такие подходы наиболее просты, поскольку в качестве основного объекта рассмотрения в них выступает одиночная частица или ансамбль невзаимодействующих частиц, но, вместе с тем, они и наиболее показательны, так как позволяют выяснить базовые условия возникновения направленного движения. Основным уравнением статистического описания безынерционного движения броуновской частицы является уравнение Смолуховского для функции распределения $\rho(x, t)$, задающей плотность вероятности найти частицу в точке x в момент времени t . Это уравнение является частным случаем уравнения Фоккера–Планка, приложения и методы решения которого подробно представлены в монографии [3] (см. также её краткий конспект [36] и монографию [37]). Во многих задачах теории броуновских моторов удобно записывать уравнение Смолуховского в форме уравнения непрерывности [17]

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0 \quad (1)$$

с потоком вероятности $J(x, t)$, определяемым следующими выражениями:

$$\begin{aligned} J(x, t) &= -D \exp(-\beta U(x, t)) \frac{\partial}{\partial x} \exp(\beta U(x, t)) \rho(x, t) = \\ &= -D \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - \beta D \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \rho(x, t). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $D = (\beta \zeta)^{-1}$ — коэффициент диффузии, ζ — коэффициент трения, зависящий от вязкости среды, а также от размера и формы частицы, $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обратная тепловая энергия (k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура). Средняя сила, действующая на частицу, предполагается равной нулю, при этом под операцией усреднения подразумевается усреднение как по пространственной, так и по временной переменной. Для пространственно-периодического потенциального профиля $U(x, t)$ усреднение (за период) по пространственной переменной соответствующей этому профилю силы $-\partial U(x, t)/\partial x$ всегда даёт нуль. Если форма потенциальной энергии $U(x, t)$ аддитивно-мультипликативная,

$$U(x, t) = u(x) + \sigma(t)w(x), \quad (3)$$

где функция времени $\sigma(t)$ играет роль флуктуационной переменной, то среднее значение $\sigma(t)$ должно быть равно нулю, $\langle \sigma(t) \rangle = 0$; символ $\langle \dots \rangle$ означает операцию усреднения по флуктуациям, и её определение зависит от природы величины $\sigma(t)$. Отметим, что представление (3) имеет место для большинства теоретически и практически значимых моторных систем [17, 18, 38, 39], а корреляционные функции различных порядков для $\sigma(t)$ позволяют анализировать проявление различной природы флуктуаций в характеристиках моторов.

Возникновение отличной от нуля средней скорости направленного движения броуновской частицы в отсутствие средних сил становится возможным за счёт временной зависимости потенциальной энергии $U(x, t)$, а также выполнения определённых условий, связанных с симметрией системы [17, 18, 20, 40–46]. Причём в ряде систем именно нарушение неочевидных (так называемых скрытых) симметрий позволяет системам демонстрировать моторное поведение [45, 46]. Обычно интересуются установившимися режимами движения, при которых система успевает забыть начальное состояние. Тогда, усредняя уравнение непрерывности (1) с потоком (2) по флуктуациям, можно прийти к важному выводу: среднее значение потока $J \equiv \langle J(x, t) \rangle$ не зависит не только от времени, но и от координаты, т.е. является постоянной величиной. Это постоянное значение, умноженное на пространственный период L потенциальной энергии $U(x, t)$, и определяет среднюю скорость движения $\langle v \rangle = L J$, являющуюся основной характеристикой броуновского мотора.

Для вычисления средней скорости движения мотора необходимо найти решение уравнения Смолуховского с периодическими граничными условиями и провести усреднение потока (2) по флуктуациям потенциальной энергии. Аналитическое решение этой сложной задачи возможно только при определённых упрощающих предположениях относительно вида функции $\sigma(t)$, регулирующей поведение потенциальной энергии частицы во времени, а также относительно формы потенциального

профиля и/или наличия малого параметра, по которому можно строить теорию возмущений. В качестве функции $\sigma(t)$ часто рассматривается дихотомный стохастический процесс, при котором $\sigma(t)$ принимает два значения, $+1$ и -1 , с заданными скоростями переходов γ_+ и γ_- между ними, т.е. скоростями перехода частицы между состояниями с различной потенциальной энергией (3) [47]. Характерным примером систем, для которых имеет место такая временная зависимость потенциальной энергии, выступают, прежде всего, молекулярные (белковые) моторы [22–26, 48], движение которых индуцируется циклическими переходами моторного белка между конформационными состояниями с различными потенциальными профилями $U_+(x) = u(x) + w(x)$ и $U_-(x) = u(x) - w(x)$. Для дихотомного стохастического процесса корреляционная функция $K(t) \equiv \langle \sigma(t_0 + t)\sigma(t_0) \rangle$ (t_0 — произвольный начальный момент времени) имеет экспоненциальный вид $K(t) = \exp(-\Gamma|t|)$, где $\Gamma = \gamma_+ + \gamma_-$ — обратное время корреляции. В классе детерминистических процессов изменения потенциальной энергии (они управляются созданными человеком приборами и рассматриваются при описании механизмов функционирования наноструктур [18, 28, 49]) обычно анализируются периодические процессы. Тогда $\sigma(t + \tau) = \sigma(t) = \sum_j \sigma_j \exp(-i\omega_j t)$, где τ — период, $\omega_j = 2\pi j/\tau$, $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, и σ_j — фурье-компонента функции $\sigma(t)$. В этом случае операция усреднения $\langle \dots \rangle$ означает усреднение за период, так что $\langle \sigma(t) \rangle = \sigma_0 = 0$, и корреляционная функция записывается в виде $K(t) = \sum_j |\sigma_j|^2 \exp(-i\omega_j t)$.

Выбор формы модельного потенциального профиля определяется свойствами рассматриваемой системы. Если потенциальная энергия плавно меняется с координатой, то в её функциональном описании часто можно ограничиться учётом двух (реже — трёх) первых пространственных гармоник [42, 50]. При рассмотрении потенциальных профилей, имеющих участки резкого (в пределе — скачкообразного) изменения, выбирают пилообразный профиль [51–53]. Задача описания моторных систем с потенциалом двух гармоник упрощается при переходе к фурье-представлению, поскольку при этом суммирование возникающих выражений по гармоникам ограничивается только первыми членами ряда. В случае пилообразного потенциала целесообразно использовать координатное представление, в котором кусочно-линейный вид потенциала обеспечивает аналитическое взятие интегралов. Перечисленные виды потенциальных рельефов — явные лидеры по частоте использования в задачах теории броуновских моторов [17, 18, 38, 50].

Основными параметрами, "отвечающими" за режимы работы броуновского мотора, величину и знак его средней скорости, а также энергетические характеристики, выступают частота флуктуаций потенциальной энергии и амплитуда её пространственного изменения. Для дихотомного стохастического процесса в качестве частоты можно рассматривать обратное время корреляции Γ , для периодического детерминистического процесса — обратный период τ^{-1} . Малые или большие значения частот определяются их сопоставлением с характерными частотами системы, т.е. обратными характерными временами. К последним относится, например, время диффузии частицы $\tau_D = l^2/D$ на характерном участке длины l или время её скольжения $\tau_{sl} = \zeta l^2/\Delta V$ по наклонному участку потенциального профиля высоты ΔV и длины l (отметим, что рассмотрение инерционных

броуновских моторов порождает дополнительное характерное время, связанное с учётом массы частицы, и нетривиальные эффекты — как результат конкуренции с ним величин Γ^{-1} и τ [52–54]).

Для оценок значений характерных величин в качестве длины l часто выбирается пространственный период L изменения потенциальной энергии. Тогда низкочастотное и высокочастотное приближения будут характеризоваться, соответственно, малыми и большими величинами безразмерных частот $\Gamma\tau_D$ или $\Gamma\tau_{sl}$ (для дихотомных стохастических процессов; для детерминистических периодических — это τ_D/τ или τ_{sl}/τ). Для оперирования далее этими безразмерными величинами в общем контексте введём для них единое обозначение v_{ch} . В качестве безразмерного энергетического параметра обычно берётся отношение энергетического барьера ΔU к тепловой энергии $k_B T$. Малым и большим значением этого параметра различают, соответственно, высокотемпературное (низкоэнергетическое) и низкотемпературное (высокоэнергетическое) приближения [41, 43, 48, 55, 56].

Основные методы получения аналитического описания направленного движения наночастиц базируются на использовании четырёх перечисленных выше приближений. На рисунке 1 приведены определяемые способом выбора малого параметра характерные области в плоскости $(\Delta U/k_B T, v_{ch})$, в которых возможно аналитическое решение уравнения Смолуховского. Низкочастотное приближение (полоса *A*) или адиабатический режим работы мотора позволяет получить явное выражение для средней скорости броуновской частицы в случае произвольной координатной части функции $U(x, t)$ [48, 52–54, 57–59]. Медленные изменения потенциальной энергии фактически означают, что система близка к равновесному состоянию. Тогда достаточно искать поправки к известным равновесным результатам, что значительно упрощает процесс решения. Инвариантность низкочастотного приближения относительно характера временных изменений (детерминистических либо стохастических) потенциальной энергии [55] — его дополнительное достоинство, так же как и высокая эффективность преобразования энергии, демонстрируемая адиабатическими моторами [56, 59–61].

Высокочастотные (полоса *B*) решения сильно зависят от формы потенциального профиля и характера

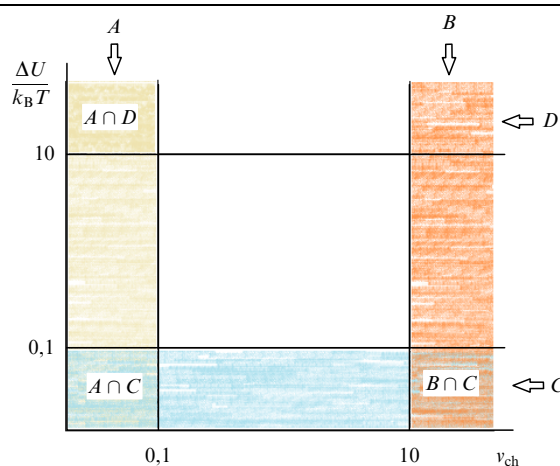


Рис. 1. Области справедливости приближений, в которых получены аналитические решения уравнения Смолуховского (1), (2).

его изменения во времени [62, 63], но именно это делает данное приближение своего рода "зондом", позволяющим "прощупать" задачу с разных сторон. Для данного режима известен ряд асимптотик [17, 64–66]. Моторы разных классов — с флуктуирующим периодическим потенциальным профилем (flashing ratchet) и флуктуирующей наклоняющей однородной силой (rocking ratchet) — демонстрируют в этом режиме различную чувствительность к наличию в потенциальном профиле точек острого перегиба (cusp points) и скачков [51].

Неравенство $\Delta U/k_B T \ll 1$ определяет область низких энергий (полоса C), а полученные в ней решения называют высокотемпературным приближением. Его преимущество в том, что это приближение можно использовать во всей области частот флуктуаций потенциальной энергии [41, 49, 55, 59]. Однако данное приближение не может привлекаться для описания белковых моторов, поскольку температура конформационных изменений молекул превышает $k_B T$. "Потребителями" высокотемпературного приближения выступают искусственно создаваемые устройства, например, дипольные фотомоторы [66], в которых энергии взаимодействия полярной частицы с подложкой малы в силу малости дипольных взаимодействий по отношению к $k_B T$. Сюда же можно отнести моторные системы на основе полупроводникового нанокластера [49]. Отметим, что отказ от дипольного приближения при рассмотрении фотоиндуцированного движения протяжённых молекул вдоль подложки не нарушает справедливость высокотемпературного приближения [67].

Существование пересечения областей действия приближений ($A \cap C$ и $B \cap C$ на рис. 1) делает возможным сопоставление результатов и даёт дополнительные критерии проверки их правильности. Кроме того, использование двух приближений позволяет сделать выводы, не достижимые в рамках одного из них. Например, анализ области $B \cap C$ [55] позволил установить, что при $\Gamma \rightarrow \infty$ ($\tau \rightarrow 0$) средняя скорость броуновского мотора линейна по обратной частоте флуктуаций потенциальной энергии для стохастического дихотомного процесса и квадратична для детерминистического. Этот результат сохраняется и вне использования высокотемпературного приближения [62–66], но получить его для произвольных $\Delta U/k_B T$ гораздо сложнее.

Рассмотрение низкотемпературной области (полоса D) само по себе не даёт приемлемого приближения, что связано с трудностью анализа дифференциальных уравнений с малым коэффициентом при старшей производной (см. уравнения (1) и (2), в которых коэффициент диффузии $D = k_B T/\zeta$ является малой величиной при малых T). Поэтому формулировка низкотемпературного приближения налагает дополнительные ограничения на пространственные и временные закономерности изменения потенциального профиля. Коротко говоря, их смысл в том, что исходная задача с непрерывным описанием движения броуновской частицы заменяется рассмотрением её прыжкового движения через потенциальные барьеры, разделяющие потенциальные ямы. Тем самым низкотемпературное приближение можно ввести для потенциальных профилей, имеющих явно выраженные ямы и барьеры, и в качестве такого приближения выступает кинетический подход. Он рассматривает изменения заселённости потенциальных ям за счёт переходов

между ними, описываемых в терминах констант скоростей переходов. Предполагается, что флуктуируют только максимумы и минимумы потенциального профиля, а их положения и кривизна профиля вблизи экстремумов остаются неизменными, высота барьеров ΔU превосходит тепловую энергию $k_B T$ и период флуктуаций τ (Γ^{-1}) заметно превышает τ_D (область $A \cap D$).

Эти условия обеспечивают локальное термодинамическое равновесие в каждой из ям, которое не меняется при флуктуациях потенциала и исключает энергетические потери, связанные с релаксацией функции распределения внутри ям [68]. Подход адекватно описывает основные свойства броуновских моторов при достаточно низких температурах $k_B T \ll \Delta U$ и в широком диапазоне частот Γ , $\tau^{-1} < \tau_D^{-1}$ флуктуаций потенциальных ям и барьеров [56]. Достоинством кинетического подхода является простота получаемых аналитических результатов, что позволяет легко проводить сопоставление с экспериментальными данными для молекулярных моторов, которые и являются основным приложением низкотемпературного приближения. Недостаток приближения — в невозможности перейти к пределу высоких частот, при котором именно внутриямные движения обеспечивают правильную асимптотику [48, 50, 60, 61, 69].

В данной статье излагается теория броуновских моторов, основанная на авторском подходе — построении теории возмущений по малым флуктуациям потенциальной энергии. Согласно этому подходу, в аддитивно-мультипликативной форме (3) представления потенциальной энергии основной вклад вносит не зависящий от времени асимметричный периодический потенциальный профиль $u(x)$, а произведение $\sigma(t)w(x)$ рассматривается как малая поправка. Будем считать, что значения, принимаемые функцией $\sigma(t)$, порядка единицы, так что порядок величины $\sigma(t)w(x)$ определяется порядком функции $w(x)$, который обозначается через $O(w)$. Как сказано выше, представление (3) охватывает большинство как практически, так и теоретически важных вариантов изменения потенциальной энергии [17, 18, 38, 39, 49]. Два основных класса броуновских моторов — с флуктуирующим периодическим потенциалом (flashing ratchet) и флуктуирующей однородной силой (rocking ratchet) — являются частными случаями использования представления (3). При этом должна иметь место периодичность функций $u(x)$ и $w'(x) \equiv dw(x)/dx$. Для моторов класса flashing ratchet $w(x+L) = w(x)$, а для класса rocking ratchet $w(x) = Fx$, $F = \text{const}$.

2. Теория возмущений по малым флуктуациям: общее рассмотрение

В данном разделе, считая малыми флуктуации потенциальной энергии $U(x, t)$, описываемые слагаемым $\sigma(t)w(x)$ в выражении (3), построим по ним теорию возмущений. Для этого подставим (3) в представление (2) для потока и усредним его по флуктуациям:

$$J \equiv \langle J(x, t) \rangle = \hat{J}(x) \langle \rho(x, t) \rangle - \beta D w'(x) \langle \sigma(t) \rho(x, t) \rangle, \quad (4)$$

где

$$\hat{J}(x) = -D \exp(-\beta u(x)) \frac{\partial}{\partial x} \exp(\beta u(x)) \quad (5)$$

— оператор потока в стационарном потенциальном рельефе $u(x)$. Если равенство (4) рассматривать как

дифференциальное уравнение относительно функции координат $\langle \rho(x, t) \rangle$, то его общее решение легко записывается в виде

$$\begin{aligned} \langle \rho(x, t) \rangle &= C \exp(-\beta u(x)) - \beta \exp(-\beta u(x)) \times \\ &\times \int_0^x dx' w'(x') \exp(\beta u(x')) \langle \sigma(t) \rho(x', t) \rangle - \\ &- \frac{J}{D} \exp(-\beta u(x)) \int_0^x dx' \exp(\beta u(x')). \end{aligned} \quad (6)$$

Представление (6) содержит две произвольные постоянные J и C , которые должны определяться из дополнительных условий. Условие нормировки $\int_0^L dx \langle \rho(x, t) \rangle = 1$ позволяет найти константу C . Тогда, с учётом того, что в предположении периодичности функций $u(x)$ и $w'(x)$ решение $\langle \rho(x, t) \rangle$ при установившемся процессе также должно быть периодическим, $\langle \rho(x + L, t) \rangle = \langle \rho(x, t) \rangle$, искомый поток J запишется следующим образом:

$$J = -\beta D \int_0^L dx q(x) w'(x) \langle \sigma(t) \rho(x, t) \rangle, \quad (7)$$

$$q(x) = \exp(\beta u(x)) \left(\int_0^L dx \exp(\beta u(x)) \right)^{-1}.$$

Будем считать, что функция $w(x)$ — порядка $O(w)$, и найдём приближённое выражение для величины $\langle \sigma(t) \rho(x, t) \rangle$ с точностью $O(w)$. В качестве первого шага построим теорию возмущений относительно малой функции $w(x)$ исходя из уравнений (1)–(3) [3, 70]:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho^{(0)}(x) - \beta D \int_0^L dx' \frac{\partial}{\partial x'} [w'(x') \rho^{(0)}(x')] \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sigma(t') g(x, x', t - t') + O(w^2). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь невозмущённая функция распределения $\rho^{(0)}(x)$ удовлетворяет уравнению $\hat{J}(x) \rho^{(0)}(x) = 0$, которое есть условие обращения в нуль невозмущённого потока. Нормированное решение этого уравнения — распределение Больцмана

$$\rho^{(0)}(x) = \exp(-\beta u(x)) \left(\int_0^L dx \exp(-\beta u(x)) \right)^{-1}.$$

Запаздывающая функция Грина $g(x, x', t)$ ($g(x, x', t) = 0$ при $t < 0$), входящая в выражение (8), удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} g(x, x', t) + \frac{\partial}{\partial x} \hat{J}(x) g(x, x', t) = -\delta(x - x') \delta(t). \quad (9)$$

В качестве второго шага почленно умножим уравнение (8) на $\sigma(t)$ и усредним по флуктуациям с использованием равенства $\langle \sigma(t) \rangle = 0$, что приводит к искомому выражению для $\langle \sigma(t) \rho(x, t) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \sigma(t) \rho(x, t) \rangle &= -\beta D \int_0^L dx' \frac{\partial}{\partial x'} [w'(x') \rho^{(0)}(x')] \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle \sigma(t) \sigma(t') \rangle g(x, x', t - t') + O(w^2). \end{aligned} \quad (10)$$

Введём функцию двух пространственных переменных $S(x, x')$ для обозначения внутреннего интеграла в правой

части выражения (10). Учитывая определение корреляционной функции $K(t - t') \equiv \langle \sigma(t) \sigma(t') \rangle$ и тот факт, что $g(x, x', t - t') = 0$ при $t' > t$, функция $S(x, x')$ может быть представлена в виде

$$S(x, x') = \int_0^{\infty} dt g(x, x', t) K(t). \quad (11)$$

Наконец, подстановка в (7) выражения (10) с учётом (11) приводит к итоговому выражению

$$\begin{aligned} J &= (\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \times \\ &\times \int_0^L dx' S(x, x') \frac{\partial}{\partial x'} w'(x') \rho^{(0)}(x') + O(w^3). \end{aligned} \quad (12)$$

Это выражение, впервые полученное в [71], — наиболее общий результат приближения малых флуктуаций. Его анализ имеет большое значение, поскольку даёт широкий спектр аналитических результатов, в том числе и известных в теории броуновских моторов для различных частных случаев. Рассмотрение выражения (12) проводится в последующих разделах данной статьи.

Отметим, что в частном случае стохастического дихотомного процесса, при котором $K(t) = \exp(-\Gamma|t|)$, где Γ — обратное время корреляции, функция $S(x, x')$ представляет собой преобразование Лапласа функции Грина $g(x, x', t)$, описывающей диффузию в потенциальном профиле $u(x)$, и удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{J}(x) + \Gamma \right] S(x, x') = -\delta(x - x'), \quad (13)$$

которое легко получить из уравнения (9), если почленно умножить его на $\exp(-\Gamma t)$ и проинтегрировать по t от $-\varepsilon$ до ∞ , где ε — бесконечно малая положительная величина. При этом следует учесть, что вклад $\exp(\Gamma \varepsilon) g(x, x', -\varepsilon)$ равен нулю, в силу того что $g(x, x', t)$ — запаздывающая функция Грина. В разделе 3 будет предложен альтернативный вывод уравнения (12) с функцией $S(x, x')$, удовлетворяющей уравнению (13), следующий непосредственно из уравнения Смолуховского с источниками и стоками (master equation), которое описывает именно стохастический дихотомный процесс и составляет основу стохастических моделей броуновских моторов [17, 37, 47, 72]. Там же мы обсудим физический смысл функции $S(x, x')$ и приведём её явный вид для пилообразного потенциального профиля.

3. Теория возмущений по малым флуктуациям: дихотомный стохастический процесс

Рассмотрим движение броуновской частицы, потенциальная энергия которой является случайной величиной, описываемой стохастическим дихотомным процессом. Два состояния дихотомного процесса, обозначаемые далее индексами "+" и "-", характеризуются разными потенциальными профилями $U_+(x)$ и $U_-(x)$, которые описываются периодическими функциями координаты с периодом L : $U_{\pm}(x + L) = U_{\pm}(x)$. Такое поведение потенциальной энергии можно характеризовать аддитивно-мультипликативной зависимостью (3), в которой функция $\sigma(t)$ принимает два значения, +1 и -1, с заданными скоростями переходов между этими значениями, γ_+ и γ_- . Далее будем считать, что рассматриваемый дихотомный

процесс симметричен, т.е. $\gamma_+ = \gamma_-$, и обратное время корреляции Γ равно $2\gamma_+$. Это упрощение не повлияет на итоговое выражение, поскольку в приближении малых флуктуаций характеристики обоих (несимметричного и симметричного) процессов зависят только от суммы величин γ_+ и γ_- . В справедливости этого утверждения можно убедиться, например, из анализа высокотемпературного результата работы [55]: с точностью до членов порядка $O(w^3)$ средняя скорость при $\gamma_+ = \gamma_-$ зависит только от $\Gamma = \gamma_+ + \gamma_-$ (см. также формулу (68) далее).

Плотности вероятности $\rho_+(x, t)$ и $\rho_-(x, t)$ нахождения броуновской частицы в состояниях "+" и "-" удовлетворяют уравнению Смолуховского с дополнительным слагаемым $r(x, t)$, описывающим скорость переходов частицы между этими состояниями [17, 37, 38, 55]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\pm}(x, t) &= -\frac{\partial}{\partial x} J_{\pm}(x, t) \mp r(x, t), \\ r(x, t) &= \frac{1}{2} \Gamma [\rho_+(x, t) - \rho_-(x, t)], \\ J_{\pm}(x, t) &= -D \frac{\partial \rho_{\pm}(x, t)}{\partial x} - \beta D \frac{\partial U_{\pm}(x)}{\partial x} \rho_{\pm}(x, t).\end{aligned}\quad (14)$$

На функции распределения накладываются условия периодичности и нормировки:

$$\rho_{\pm}(x + L, t) = \rho_{\pm}(x, t), \quad \int_0^L [\rho_+(x, t) + \rho_-(x, t)] dx = 1. \quad (15)$$

Для стационарных процессов ($\partial \rho_{\pm}(x, t) / \partial t = 0$) полный поток частиц через произвольное поперечное сечение x определяется суммой потоков $J_{\pm}(x)$, $J(x) = J_+(x) + J_-(x)$, и не зависит от x . Именно этот поток $J \equiv J(x)$ является основной искомой величиной в теории броуновских моторов, поскольку через него посредством соотношения $\langle v \rangle = LJ$ выражается средняя скорость мотора.

Введём новые функции распределения $\xi(x)$ и $\eta(x)$ так, что

$$\begin{cases} \xi(x) = \rho_+(x) + \rho_-(x), \\ \eta(x) = \rho_+(x) - \rho_-(x), \\ \rho_{\pm}(x) = \frac{1}{2} [\xi(x) \pm \eta(x)] \end{cases} \quad (16)$$

и, следуя (3) с $\sigma(t) = \pm 1$, выделим в потенциальных профилях $U_{\pm}(x)$ некоторый средний рельеф $u(x)$ и флуктуационную составляющую $w(x)$:

$$U_{\pm}(x) = u(x) \pm w(x). \quad (17)$$

Среднему рельефу поставим в соответствие оператор потока, определённый формулой (5). Тогда полный поток можно представить в виде:

$$J = \hat{J}(x)\xi(x) - \beta D w'(x)\eta(x). \quad (18)$$

Соотношение (18) с учётом (5) рассмотрим как дифференциальное уравнение относительно функции $\xi(x)$. Его общее решение

$$\begin{aligned}\xi(x) &= C \exp(-\beta u(x)) - \beta \exp(-\beta u(x)) \times \\ &\times \int_0^x dx' w'(x') \eta(x') \exp(\beta u(x')) - \\ &- \frac{J}{D} \exp(-\beta u(x)) \int_0^x dx' \exp(\beta u(x'))\end{aligned} \quad (19)$$

содержит произвольную константу C и искомую постоянную величину (поток J), которая не зависит от C и находится из условия периодичности $\xi(x + L) = \xi(x)$, так что поток J оказывается равным

$$J = -\beta D \int_0^L dx q(x) w'(x) \eta(x), \quad (20)$$

$$q(x) = \exp(\beta u(x)) \left(\int_0^L dx \exp(\beta u(x)) \right)^{-1}.$$

Уравнение для функции $\eta(x)$ можно получить из системы уравнений (14), записанной для стационарного случая:

$$\frac{d}{dx} [J_+(x) - J_-(x)] = -\Gamma \eta(x). \quad (21)$$

Подставляя в (21) выражение для разности потоков $J_+(x) - J_-(x) = \hat{J}(x)\eta(x) - \beta D w'(x)\xi(x)$, имеем дифференциальное уравнение для нахождения функции $\eta(x)$:

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{J}(x) + \Gamma \right] \eta(x) = \beta D \frac{d}{dx} w'(x) \xi(x) \quad (22)$$

(функция $\xi(x)$ здесь предполагается заданной).

Решение этого уравнения можно записать с использованием введённого выше обозначения $S(x, x')$ для функции — решения уравнения (13), — представляющей собой преобразование Лапласа функции Грина $g(x, x', t)$, а именно:

$$\eta(x) = -\beta D \int_0^L dy S(x, y) \frac{d}{dy} w'(y) \xi(y). \quad (23)$$

Подстановка (23) в (20) позволяет выразить искомый стационарный поток через функцию $\xi(x)$:

$$J = (\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \int_0^L dy S(x, y) \frac{d}{dy} w'(y) \xi(y). \quad (24)$$

Уравнение (24) точно определяет полный поток J , если найдена функция $\xi(x)$ — решение системы дифференциальных уравнений (18), (22) (или интегральных уравнений (19), (23)), дополненных периодическими граничными условиями и условиями нормировки:

$$\int_0^L \xi(x) dx = 1, \quad \int_0^L \eta(x) dx = 0. \quad (25)$$

Рассмотрим теперь малые (по сравнению с тепловой энергией) флуктуации потенциальной энергии наночастицы, т.е. примем приближение $|w(x)| \ll k_B T$. Структура выражения (24) такова, что в этом приближении поток является малой величиной порядка $O(w^2)$. Если ограничиться учётом только квадратичных по $w(x)$ вкладов в поток, то функция $\xi(x)$ должна вычисляться в нулевом по $w(x)$ приближении. Это означает, что в общем решении (19) можно пренебречь вторым и третьим слагаемыми (третье слагаемое обращается в нуль, как следует из соотношения (20), которое даёт $J = 0$ при $w(x) \equiv 0$). Оставшееся первое слагаемое содержит постоянную интегрирования C , которая легко находится из условия нормировки (25) для функции $\xi(x)$. В результате в нулевом приближении по флуктуациям функция $\xi(x)$, обозначаемая далее как $\xi_0(x)$, оказывается равной

$$\xi_0(x) = \exp(-\beta u(x)) \left(\int_0^L dx \exp(-\beta u(x)) \right)^{-1}, \quad (26)$$

т.е. является нормированным на единицу распределением Больцмана для невозмущённого потенциального профиля $u(x)$. Иными словами, мы и получили альтернативным путём выражение (12) с $\rho^{(0)}(x) = \xi_0(x)$, справедливое в приближении малых стохастических дихотомных флуктуаций потенциальной энергии [72].

Перейдём далее к рассмотрению некоторых важных свойств функции $S(x, y)$, вытекающих из уравнения (13) в определённых частных случаях. Так, в высокочастотном пределе $\Gamma \rightarrow \infty$ и при условии, что потенциальный рельеф $u(x)$ (определяющий, согласно соотношению (5), оператор $\hat{J}(x)$) является гладкой функцией, из уравнения (13) следует приближённое равенство $S(x, y) = -\Gamma^{-1} \delta(x - y)$ (с точностью до замены $x' \rightarrow y$), подстановка которого в (12) даёт:

$$J = \frac{D^2 \beta^3}{\Gamma} \frac{\int_0^L dx u'(x) [w'(x)]^2}{\int_0^L dx \exp(\beta u(x)) \int_0^L dx \exp(-\beta u(x))}. \quad (27)$$

Этот результат совпадает с выражениями, известными из работ [64, 66] (см. также обзор [17]). Низкочастотное ($\Gamma \rightarrow 0$) представление потока (12) для дихотомного процесса (стохастического или детерминистического) будет получено в разделе 4.

Физический смысл функции $S(x, y)$ состоит в том, что она описывает вероятностный процесс распространения частицы из точки y в точку x и содержит всю важную информацию о диффузии в потенциале $u(x)$ с флуктуационной переменной $\sigma(t)$, характеризуемой корреляционной функцией $K(t)$. Для пилообразного потенциала, задаваемого кусочно-линейной периодической функцией с двумя линейными участками $[0, l]$ и $[l, L]$ на периоде L и энергетическим барьером u_0 ($u(x) = u_0 x/l$ для $x \in [0, l]$ и $u(x) = u_0(L - x)/(L - l)$ для $x \in [l, L]$), уравнение (13), соответствующее стохастическому дихотомному процессу с $K(t) = \exp(-\Gamma|t|)$, дополненное граничными условиями периодичности самой функции $S(x, y)$ и её частной производной по x , а также условиями непрерывности $S(x, y)$ в точке $x = y$ и скачка потока в той же точке:

$$\hat{J}(x)S(x, y) \Big|_{x=y+\varepsilon} - \hat{J}(x)S(x, y) \Big|_{x=y-\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -1, \quad (28)$$

может быть решено аналитически [71, 73]:

$$- \Gamma S(x, y) \Big|_{0 < x < y < l < L} = \lambda^2 \frac{\exp(f_l(y - x))}{\Delta A_l} \left\{ -(f_l - f_{L-l})^2 \times \right. \\ \times \sinh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l(l - y) \sinh A_l x - \\ - (f_l - f_{L-l}) A_l \sinh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l(x + y - l) + \\ + A_l A_{L-l} [\cosh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l(x - y + l) - \\ - \sinh A_l(x - y)] + \sinh A_{L-l}(L - l) [A_l^2 \cosh A_l(l - y) \times \\ \times \cosh A_l x + A_{L-l}^2 \sinh A_l(l - y) \sinh A_l x] \Big\}, \quad (29)$$

$$- \Gamma S(x, y) \Big|_{0 < y < x < l < L} = \lambda^2 \frac{\exp(f_l(y - x))}{\Delta A_l} \left\{ -(f_l - f_{L-l})^2 \times \right. \\ \times \sinh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l y \sinh A_l(l - x) - \\ - (f_l - f_{L-l}) A_l \sinh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l(x + y - l) + \\ + A_l A_{L-l} [-\cosh A_{L-l}(L - l) \sinh A_l(x - y - l) + \\ + \sinh A_l(x - y)] + \sinh A_{L-l}(L - l) [A_l^2 \cosh A_l y \times \\ \times \cosh A_l(x - l) + A_{L-l}^2 \sinh A_l y \sinh A_l(l - x)] \Big\}, \quad (30)$$

$$- \Gamma S(x, y) \Big|_{0 < y < l < x < L} = \lambda^2 \frac{\exp(f_l y + f_{L-l}(L - x))}{\Delta} \times \\ \times \left\{ (f_l - f_{L-l}) [\sinh A_l(l - y) \sinh A_{L-l}(x - l) - \right. \\ - \sinh A_l y \sinh A_{L-l}(L - x)] + \\ + A_{L-l} [\sinh A_l(l - y) \cosh A_{L-l}(x - l) + \\ + \sinh A_l y \cosh A_{L-l}(L - x)] + \\ + A_l [\cosh A_l(l - y) \sinh A_{L-l}(x - l) + \\ + \cosh A_l y \sinh A_{L-l}(L - x)] \Big\}, \quad (31)$$

где

$$\Delta = 2(\lambda^2 + f_l f_{L-l}) \sinh A_l l \sinh A_{L-l}(L - l) + \\ + 2 A_l A_{L-l} [\cosh A_l l \cosh A_{L-l}(L - l) - 1], \\ A_l = \sqrt{f_l^2 + \lambda^2}, \quad A_{L-l} = \sqrt{f_{L-l}^2 + \lambda^2}, \quad (32) \\ f_l = \frac{\beta u_0}{2l}, \quad f_{L-l} = -\frac{\beta u_0}{2(L-l)}, \quad \lambda^2 = \frac{\Gamma}{D}.$$

Для получения аналогичных формул на интервале $l < y < L$ достаточно в выражениях (29)–(32) выполнить следующие преобразования:

$$l \leftrightarrow L - l, \quad x \leftrightarrow L - x, \quad y \leftrightarrow L - y, \quad f_l \leftrightarrow -f_{L-l}. \quad (33)$$

Величина $-\Gamma S(x, y)$ задаёт плотность вероятности найти частицу в точке x в пилообразном потенциале с временем жизни Γ^{-1} при условии, что она первоначально была помещена в точку y . Для долгоживущих потенциалов ($\Gamma \rightarrow 0$) величина $-\Gamma S(x, y)$ стремится к распределению Больцмана $\rho^{(0)}(x)$. Для короткоживущих потенциалов ($\Gamma \rightarrow \infty$) она близка к начальному дельтаобразному распределению $\delta(x - y)$.

Графики функций $-\Gamma S(x, y)$ (29)–(33) представлены на рис. 2 [71]. Форма кривых сильно зависит от того, где выбрано начальное положение $y = 0$ частицы: на узкой или широкой частях основания профиля (ср. рис. 2в, д и г, е). Значение отношения амплитуды u_0 потенциала $u(x)$ к тепловой энергии $k_B T$ также влияет на форму кривых. Положения максимумов кривых $-\Gamma S(x, y)$ соответствуют положениям минимумов потенциальных ям и начальному положению y частицы. Видно, что если частица "стартует" с широкого звена потенциала, то чем меньше частота Γ (больше время жизни состояния с данным потенциалом), тем больше вклад минимумов потенциала и меньше вклад начального положения y на этом звене в вероятность обнаружить частицу в искомой точке x (рис. 2г, е). Если в начальный момент времени частица находится на узком звене потенциала, то такой тенденции нет: значения плотности вероятности для x , совпадающих с положениями потенциальных ям, и для $x = y$ уменьшаются по мере продвижения в область низких частот (рис. 2в, д). Кроме того, в этом случае наивысшая точка на графике функции $-\Gamma S(x, y)$ соответствует положению ямы; это означает, что если наклон профиля достаточно крутой, то у частицы достаточно времени, чтобы "скатиться" в яму даже короткоживущего потенциального профиля (кривая с $\Gamma L^2/D = 2$ на рис. 2в является здесь единственным исключением: амплитуда потенциала выбрана ещё недостаточно большой, а время жизни — достаточно малым). Суммируя, хотелось бы подчеркнуть, что именно особенности поведения

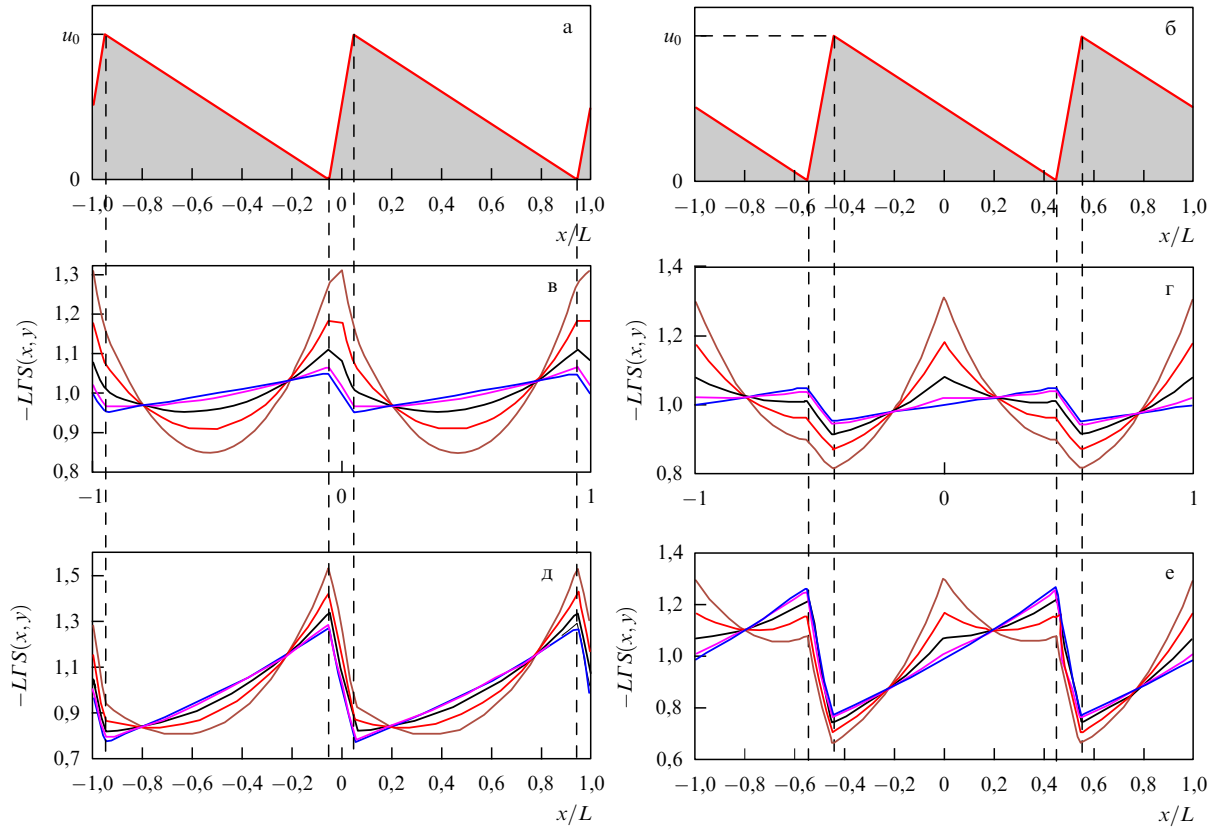


Рис. 2. пилообразные потенциалы $u(x)$ (для нормированных длин звеньев "пилы", равных $l/L = 0,1$ (а) и $1 - l/L = 0,9$ (б) (L — пространственный период), начальное положение частицы $y = 0$ выбрано, соответственно, на основании крутого (а) или пологого (б) склонов потенциала) и соответствующие им плотности вероятностей $-LGS(x, y)$ (в единицах L^{-1}) обнаружить частицу в точке x в пилообразном потенциале с временем жизни Γ^{-1} (рис. (в, д) и (г, е)), найденные для различных значений амплитуды u_0 функции $u(x)$: $\beta u_0 = 0,1$ (в, г) и $\beta u_0 = 0,5$ (д, е). Кривые на рисунках (в–е), сверху вниз вблизи точки $x = 0$, идут в порядке уменьшения параметра $\Gamma L^2/D = 2, 1, 5, 1, 0, 5, 0$ (последнее значение соответствует бесконечному времени жизни, когда $-LGS(x, y)$ не зависит от y и совпадает с распределением Больцмана).

функции $-LGS(x, y)$ определяют, посредством соотношения (12), основные характерные черты зависимости средней скорости броуновского рэтчета от параметров модели.

Используя результаты (29)–(33) в составе формулы (12), можно вычислить значение средней скорости стохастического броуновского мотора, функционирующего за счёт флуктуаций $\pm w(x)$ пилообразного рельефа $u(x)$ с амплитудой u_0 и характерными длинами l и L . На рисунке 3 приведены частотные зависимости потока, рассчитанного для моделей рэтчетов с флуктуирующим потенциалом, для которых $w(x) = (w_0/u_0)u(x)$, и с флуктуирующей силой, где $w(x) = w_0x$. Видно, что при одинаковой асимметрии потенциального профиля $u(x)$ направления движения данных моторов противоположны. Ещё одно отличие этих моторов заключается в нулевой низкочастотной асимптотике средней скорости для мотора с флуктуирующей потенциальной энергией, тогда как средняя скорость мотора с флуктуирующей силой при малых частотах отлична от нуля. Отметим, что при $w_0/u_0 = 0,1$ и $l/L = 0,9$ расчёты по аналитическим формулам (12), (29)–(33) полностью воспроизводят результаты работы [38], авторы которой не использовали технику функций Грина, а исследовали эти же системы с привлечением определённой численной процедуры. Такое согласование — дополнительная проверка достоверности полученных результатов и подтверждение возможности их использования для исследования поведения харак-

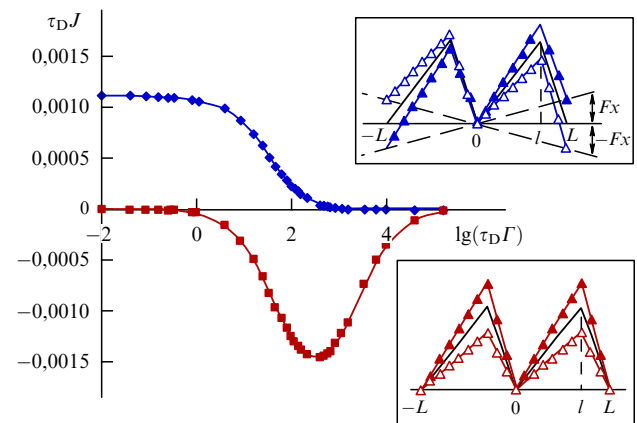


Рис. 3. Частотная зависимость потока, определяющего среднюю скорость рэтчета с флуктуирующей силой (верхняя кривая, $w(x) = Fx$, $F = w_0$) и с флуктуирующим потенциалом (нижняя кривая, $w(x) = (w_0/u_0)u(x)$); $\tau_D \equiv L^2/D$. Вставки справа от кривых схематически изображают профили $u(x)$ (кривая без маркеров), $u(x) + w(x)$ и $u(x) - w(x)$ (кривые с заполненными и незаполненными маркерами).

теристик мотора при изменении геометрических параметров потенциальных профилей с флуктуациями произвольной формы $w(x)$.

Резюмируя данный раздел, отметим, что средняя скорость частицы, движимой малыми флуктуациями потен-

циальной энергии, записана здесь в достаточно простом аналитическом представлении. Более того, из (12) можно непосредственно получить все известные (в рамках других различных приближений) аналитические выражения для средней скорости мотора, разложенные по малым $w(x)$. Так, в случае малых частот флуктуаций потенциальной энергии, дополнительно полагая мгновенный режим изменения потенциального профиля, получаем обобщение знаменитой леммы Паррондо [57]. Для высокочастотного варианта дихотомного стохастического процесса из (12) следуют соотношения работы [17], полученные для гладких потенциальных профилей. Применимость уравнения (12) для описания рэтчетов с флуктуирующей силой и флуктуирующим периодическим потенциальным профилем также усиливает его универсальность.

4. Низкочастотное приближение

Приближение малых частот флуктуаций потенциальной энергии, или адиабатическое приближение, занимает особое место в теории броуновских моторов. Оно допускает получение явных аналитических выражений для средней скорости моторов, анализ которых позволяет выявить многие закономерности в их функционировании: общность в поведении стохастических и детерминистических моторных систем, а также моторов, управляемых предельно быстрыми или предельно медленными изменениями потенциальной энергии, симметричные свойства, условия высокой эффективности преобразования энергии и др. [41, 50, 52–55, 59, 61]. Упрощение рассмотрения при малых флуктуациях достигается за счёт адиабатичности процессов. Отсутствие теплообмена между рассматриваемой подсистемой и тепловым резервуаром может быть реализовано двумя способами [59], которыми и различаются так называемые "адиабатически медленные" и "адиабатически быстрые" моторы, функционирующие за счёт флуктуаций периодического потенциального профиля (flashing ratchet). Первый способ предполагает настолько медленное изменение потенциальной энергии, что в каждый момент времени имеет место квазиравновесное состояние [57]. Второй способ соответствует мгновенным переходам системы между состояниями с двумя различными потенциальными профилями (быстрое изменение потенциальной энергии) при условии, что время жизни каждого состояния велико настолько, чтобы в нём успевало установиться равновесное распределение. При этом поток, определяющий среднюю скорость таких броуновских моторов с флуктуирующим периодическим потенциалом, равен [57, 59]

$$J = \tau^{-1} \int_0^L dx [q_+(x) - q_-(x)] \int_0^x dy [\rho_+^{(0)}(y) - \rho_-^{(0)}(y)], \quad (34)$$

где использованы обозначения

$$\rho_{\pm}^{(0)}(x) \equiv \exp(-\beta U_{\pm}(x)) \left(\int_0^L dx \exp(-\beta U_{\pm}(x)) \right)^{-1}$$

для равновесных распределений в состояниях дихотомного процесса с потенциальными энергиями $U_{\pm}(x)$ (17),

$$q_{\pm}(x) \equiv \exp(\beta U_{\pm}(x)) \left(\int_0^L dx \exp(\beta U_{\pm}(x)) \right)^{-1};$$

τ — сумма времён жизни двух состояний, равная периоду изменения потенциальной энергии, если она изменяется периодически, или сумме обратных скоростей переходов γ_+^{-1} и γ_-^{-1} между состояниями, если эти переходы происходят случайно. Подчеркнём, что результат (34) инвариантен относительно того, является ли рассматриваемый дихотомный процесс детерминистическим или стохастическим [55]. В приближении малых флуктуаций потенциальной энергии, рассматриваемом в данной работе, разложение выражения (34) по малым $w(x)$ даёт:

$$J = -\Gamma \beta^2 \int_0^L dx q(x) \left[w(x) - \int_0^L dz q(z) w(z) \right] \times \\ \times \int_0^x dy \rho^{(0)}(y) \left[w(y) - \int_0^L dz \rho^{(0)}(z) w(z) \right]. \quad (35)$$

Здесь учтено, что для симметричного стохастического дихотомного процесса обратное время корреляции Γ связано с τ как $\Gamma = 4/\tau$.

Для броуновских моторов с однородной силой, флуктуирующей по знаку между двумя симметричными состояниями $\pm F$ (rocking ratchet), в которых значение F не обязательно мало, выражение для потока в адиабатическом пределе имеет вид [39, 74]

$$J = \frac{1}{2} [J(F) + J(-F)], \\ J(F) = D (1 - \exp(-\beta FL)) \left[\int_0^L dx \exp(-\beta U(x)) \times \right. \\ \times \int_0^L dx \exp(\beta U(x)) - (1 - \exp(-\beta FL)) \times \\ \times \left. \int_0^L dx \exp(-\beta U(x)) \int_0^x dy \exp(\beta U(y)) \right]^{-1}, \quad (36)$$

$$U(x) = u(x) - Fx.$$

Отметим, что зависимость $J(F)$ является известным аналитическим решением задачи о движении частицы в вязкой среде в периодическом потенциале $u(x)$ под действием однородной стационарной силы F [3, 75]. Для этого типа моторов обсуждаемому приближению малых флуктуаций соответствуют малые значения F . Тогда разложение выражений (36) по F даёт [53]:

$$J = -\beta F^2 \mu \Phi_{\text{on-off}}, \\ \Phi_{\text{on-off}} = \int_0^L dx [q(x) - L^{-1}] \int_0^x dy [\rho^{(0)}(y) - L^{-1}], \quad (37) \\ \mu = \frac{L^2}{\zeta \int_0^L dx \exp(-\beta u(x)) \int_0^L dx \exp(\beta u(x))}.$$

Здесь μ — подвижность частицы в периодическом потенциале $u(x)$; она является коэффициентом пропорциональности между скоростью частицы и малой приложенной силой F : $LJ(F) = \mu F$; функция $q(x)$ — то же, что и $q_{\pm}(x)$ выше с точностью до замены $U_{\pm}(x)$ на $u(x)$. Смысл величины $\Phi_{\text{on-off}}$ — интегральный поток, равный доле частиц, пересекающих произвольное поперечное сечение за один цикл включения и выключения периодического потенциала $u(x)$ [57]. Эта же величина определяет скорость броуновского мотора с мерцающим потенциалом, или так называемого он-офф-рэтчета

(on-off ratchet), для которого $w(x) = u(x)$ и $\sigma(t) = \pm 1$ (см. (3), (17)): $LJ = (L/\tau)\Phi_{\text{on-off}}$, т.е. с точностью до τ^{-1} величина $\Phi_{\text{on-off}}$ совпадает с потоком J (34) при $U_+(x) = u(x)$ и $U_-(x) = 0$. Как показано в [53], средняя скорость адиабатических броуновских моторов с флуктуирующей силой и мерцающим потенциалом определяется одной и той же величиной $\Phi_{\text{on-off}}$ даже при учёте малых инерционных вкладов.

Чтобы замкнуть рассмотрение, решим обратную задачу, т.е. покажем, что низкочастотные выражения (35) и (37) могут быть получены из общего соотношения (12) путём записи его адиабатического предела. Для определённости рассмотрим дихотомный процесс с функцией $S(x, x')$, удовлетворяющей уравнению (13). Переобозначим переменные $x \rightarrow x'$, $x' \rightarrow y$ и проинтегрируем почленно это уравнение по x' в пределах от 0 до x :

$$\Gamma \int_0^x dx' S(x', y) + \hat{J}(x)S(x, y) + C_1(y) = \\ = - \int_0^x dx' \delta(x' - y). \quad (38)$$

Интеграл в правой части уравнения (38) равен эта-функции Хевисайда $\theta(x - y)$. Используя явное выражение (5) для оператора потока $\hat{J}(x)$ в стационарном потенциале $u(x)$ и умножая обе части уравнения (38) на $D^{-1} \exp(\beta u(x))$, имеем после интегрирования по x :

$$\exp(\beta u(x))S(x, y) = C_2(y) + D^{-1}C_1(y) \int_0^x dx' \exp(\beta u(x')) + \\ + D^{-1} \int_0^x dx' \exp(\beta u(x')) \theta(x' - y) + \\ + D^{-1} \Gamma \int_0^x dx' \exp(\beta u(x')) \int_0^{x'} dx'' S(x'', y). \quad (39)$$

Две константы интегрирования $C_1(y)$ и $C_2(y)$ можно найти из условий

$$S(0, y) = S(L, y), \quad \int_0^L dx S(x, y) = -\Gamma^{-1}, \quad (40)$$

которые следуют из периодичности функций $u(x)$ и $\hat{J}(x)S(x, y)$ (второе равенство в (40) получается после интегрирования уравнения (13) по x в пределах от нуля до L).

Интегрирование по частям, выполненное во внутреннем интеграле в выражении для потока (12), а также использование периодических граничных условий позволяют переписать (12) в удобной для вычислений форме:

$$J = -(\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \times \\ \times \int_0^L dy \rho^{(0)}(y) w'(y) \frac{\partial}{\partial y} S(x, y) + O(w^3). \quad (41)$$

Входящая в (41) частная производная $\partial S(x, y)/\partial y$ может быть представлена, с использованием формулы (39) и подстановкой туда найденных констант интегрирования $C_1(y)$ и $C_2(y)$, в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial y} S(x, y) = \left(\frac{\partial S(x, y)}{\partial y} \right)_{\Gamma=0} + \Gamma R(x, y) + O(\Gamma^2), \quad (42)$$

где

$$\left(\frac{\partial S(x, y)}{\partial y} \right)_{\Gamma=0} = D^{-1} \rho^{(0)}(x) q(y) \int_0^L d\xi \exp(-\beta u(\xi)) \times \\ \times \int_0^L d\eta \exp(\beta u(\eta)) \left[- \int_0^L dx' \rho^{(0)}(x') \int_0^{x'} dx'' q(x'') + \right. \\ \left. + \int_y^L dx' \rho^{(0)}(x') + \int_0^x dx' q(x') - \theta(x - y) \right], \quad (43)$$

$$R(x, y) = D^{-1} \rho^{(0)}(x) \int_0^L d\xi \exp(-\beta u(\xi)) \int_0^L d\eta \exp(\beta u(\eta)) \times \\ \times \left\{ \left[\int_0^L dx' \rho^{(0)}(x') \int_0^{x'} dx'' q(x'') - \int_0^x dx' q(x') \right] A(L, y) + \right. \\ \left. + A(x, y) - \int_0^L dx' \rho^{(0)}(x') A(x', y) \right\}, \quad (44)$$

$$A(x, y) \equiv \int_0^x dx' q(x') \int_0^{x'} dx'' \left(\frac{\partial S(x'', y)}{\partial y} \right)_{\Gamma=0}. \quad (45)$$

Далее, учитывая малость Γ (адиабатический предел), достаточно ограничиться подстановкой в выражение (41) не зависящего от Γ первого слагаемого $(\partial S(x, y)/\partial y)_{\Gamma=0}$ из разложения (42), чтобы показать, что для броуновских моторов с флуктуирующей однородной силой ($w'(x) = F$) выражение для потока принимает вид (37). Однако аналогичная подстановка, выполненная для моторов с флуктуирующим периодическим потенциалом, когда функция $w(x)$ периодична, $w(x + L) = w(x)$, даст значение потока J , равное нулю. Это значит, что при рассмотрении этого класса моторов ненулевой вклад может обеспечить линейное по Γ второе слагаемое $\Gamma R(x, y)$ из представления (42) для $\partial S(x, y)/\partial y$, так что

$$J \approx -\Gamma(\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \int_0^L dy \rho^{(0)}(y) w'(y) R(x, y) = \\ = -\Gamma\beta^2 D \int_0^L dx w'(x) \int_0^L dy \rho^{(0)}(y) w'(y) \times \\ \times \left[-A(L, y) \int_0^x dx' q(x') + A(x, y) \right] = \\ = -\Gamma\beta^2 D \int_0^L dx w'(x) \int_0^x dx' q(x') \times \\ \times \left[\int_0^{x'} dx'' \varphi(x'') - \int_0^L dx'' q(x'') \int_0^{x''} dx''' \varphi(x''') \right] = \\ = \Gamma\beta^2 D \int_0^L dx q(x) \left[w(x) - \int_0^L dz q(z) w(z) \right] \int_0^x dx' \varphi(x'). \quad (46)$$

Здесь функция $\varphi(x)$ — результат интегрирования по y :

$$\varphi(x) \equiv \int_0^L dy \rho^{(0)}(y) w'(y) \left(\frac{\partial S(x, y)}{\partial y} \right)_{\Gamma=0} = \\ = -D^{-1} \rho^{(0)}(x) \left[w(x) - \int_0^L dx' \rho^{(0)}(x') w(x') \right]. \quad (47)$$

Подставляя (47) в (46), мы и приходим к выражению (35), справедливому для броуновских моторов с флуктуирующим периодическим потенциалом.

Как мы уже отмечали в разделе 3, одно из основных отличий броуновских моторов с флуктуирующей одно-

родной силой от моторов с флуктуирующим периодическим потенциалом состоит в том, что средняя скорость в адиабатическом пределе отлична от нуля для первого класса и стремится к нулю для второго. Высокочастотный же предел даёт нулевое значение скорости в обоих случаях (см., например, выражение (27)), поэтому очевидно, что частотная зависимость скорости является монотонно убывающей функцией для моторов с флуктуирующей силой и немонотонной для моторов с флуктуирующим потенциалом (см. рис. 3). При этом для последних, при малых Γ , закон возрастания скорости с частотой флуктуаций определяется тем, насколько процесс переключения потенциалов может считаться чисто дихотомным. А именно, наличие малых временных интервалов, на которых функция $\sigma(t)$ изменяется быстро (в пределе — скачкообразно), приводит к линейной низкочастотной асимптотике [76]. Пропорциональность скорости броуновского мотора второй степени Γ характерна для плавных $\sigma(t)$, т.е. именно существование переходных процессов (с которыми скачкообразные изменения потенциального профиля становятся непрерывными) приводит к замене линейного закона возрастания скорости с частотой флуктуаций на квадратичный [76]. Следует упомянуть, что в линейном по частоте приближении скорость аддитивно зависит от вкладов каждого временного интервала с быстрым изменением функции $\sigma(t)$: каждый скачок даёт линейный по Γ вклад, а каждое отклонение от скачкообразного поведения — квадратичную по длительности скачка поправку. Форма участков $\sigma(t)$ с плавным изменением в данном приближении не вносит вклада в скорость [76].

В работе [71] показано, что для броуновских фото-моторов, в которых направленное движение происходит вследствие циклически действующего на частицу резонансного лазерного излучения [49], учёт быстрых релаксационных процессов длительности τ_{rel} (описываемых суперсимметричной периодической функцией $\sigma(t) = -\sigma(t + \tau/2)$; $\sigma(t) = 1 - 2\exp(-t/\tau_{\text{rel}})$, $t \in [0, \tau/2]$, $\tau \gg \tau_{\text{rel}}$), также вносит неадиабатическую поправку к скорости. При этом характер зависимости средней скорости от τ_{rel}/τ_D зависит от наличия или отсутствия скачков в пространственной зависимости потенциальной энергии. Так, для пилообразного потенциального рельефа по мере увеличения отношения τ_{rel}/τ_D значение скорости убывает, причём при малых значениях τ_{rel}/τ_D убывание линейно для предельно асимметричных потенциальных профилей и квадратично для профилей, не имеющих скачков. Характер зависимостей средней скорости мотора от величины τ_{rel}/τ_D и пространственной асимметрии потенциала различается для малых и больших значений τ_{rel} по отношению к $\tau_l \equiv l^2/D$ — характерному времени диффузии на характерной малой длине l потенциала. Интересно, что неадиабатический вклад в среднюю скорость как результат учёта релаксационных процессов в периодической временной зависимости потенциальной энергии совпадает с выражением, полученным в работе [51], непосредственно для средней скорости мотора, движущегося за счёт стохастических дихотомных (мгновенных) изменений потенциальной энергии с корреляционной функцией $K(t) = \exp(-\Gamma|t|)$ (с точностью до формальной замены τ_{rel} на Γ^{-1}). Таким образом, в последнем случае параметр Γ "ответствен" за возникновение самого моторного эффекта, тогда как параметр τ_{rel} в [71] определял только неадиабатическую

поправку. Такое нетривиальное совпадение результатов порождает мысль о глубокой общности двух различных механизмов рэтчет-эффекта (стохастического с обратным временем корреляции Γ^{-1} и детерминистического периодического с переходными процессами, длительность которых определяется τ_{rel}): присутствию экспоненциального поведения в "распаде" потенциального профиля [71].

5. Высокотемпературное приближение

Обсуждаемая в данной статье малость флуктуаций $\sigma(t)w(x)$ потенциальной энергии $U(x, t)$ означает, что их величина мала по сравнению с тепловой энергией $k_B T$, в то время как вклад $u(x)$ в $U(x, t)$ может быть произвольным. Если к тому же и отношение $u(x)/k_B T$ предполагается малым, то мы приходим к хорошо известным высокотемпературному [55] или низкоэнергетическому [41] приближениям, используемым в ряде приложений [49, 66, 67].

Выведем соотношения высокотемпературного приближения из формул, полученных в предыдущих разделах в приближении малых флуктуаций, с использованием операторной формы преобразований вида

$$\hat{S}(x)f(x) = \int_0^L dy S(x, y)f(y). \quad (48)$$

Здесь действие интегрального оператора $\hat{S}(x)$ на произвольную периодическую функцию $f(x)$ определяется интегралом, в котором интегральным ядром выступает функция $S(x, y)$, введённая в (11). Использование интегральных операторов делает компактной запись необходимых преобразований. Действительно, с использованием интегральных операторов соотношения (12), (11) и (9) принимают лаконичный вид:

$$J = (\beta D)^2 \int_0^L dx q(x)w'(x)\hat{S}(x)\frac{\partial}{\partial x} w'(x)\rho^{(0)}(x) + O(w^3), \quad (49)$$

где

$$\hat{S}(x) = \int_0^\infty dt \hat{g}(x, t)K(t), \quad (50)$$

а оператор Грина $\hat{g}(x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{g}(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \hat{J}(x)\hat{g}(x, t) = -\hat{1}\delta(t), \quad (51)$$

($\hat{1}$ — единичный оператор). Если ввести оператор Грина $\hat{g}_0(x, t)$ невозмущённого уравнения (51) с $u(x) = 0$ и $\hat{J}(x) = -D\partial/\partial x$, то исходный оператор $\hat{g}(x, t)$ удовлетворяет уравнению Дайсона [70]:

$$\hat{g}(x, t) = \hat{g}_0(x, t) - \beta D \int_0^t dt' \hat{g}_0(x, t - t') \frac{\partial}{\partial x} u'(x)\hat{g}(x, t'). \quad (52)$$

Заметим, что интеграл по времени в этом выражении можно распространить на всю область изменения t' , поскольку операторы Грина являются запаздывающими, т.е. $\hat{g}_0(x, t - t') = 0$ при $t' > t$ и $\hat{g}(x, t') = 0$ при $t' < 0$. Это позволяет в частотном фурье-представлении,

в котором

$$\begin{aligned}\hat{g}(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp(-i\omega t) \hat{g}(x, \omega), \\ \hat{g}(x, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \hat{g}(x, t),\end{aligned}\quad (53)$$

записать уравнение (52) в виде

$$\hat{g}(x, \omega) = \hat{g}_0(x, \omega) - \beta D \hat{g}_0(x, \omega) \frac{\partial}{\partial x} u'(x) \hat{g}(x, \omega). \quad (54)$$

Тогда оператор $\hat{S}(x)$, определённый в (50), может быть выражен через $\hat{g}(x, \omega)$:

$$\begin{aligned}\hat{S}(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{K}(-\omega) \hat{g}(x, \omega) = \\ &= \hat{S}_0(x) - \frac{\beta D}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{K}(-\omega) \hat{g}_0(x, \omega) \frac{\partial}{\partial x} u'(x) \hat{g}(x, \omega),\end{aligned}\quad (55)$$

где

$$\hat{S}_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{K}(-\omega) \hat{g}_0(x, \omega) \quad (56)$$

(второе равенство в (55) получено с использованием (54)).

Подставим результат (55) в (49) и введём обозначение $J_0\{u\}$ для первого слагаемого:

$$J_0\{u\} \equiv (\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \hat{S}_0(x) \frac{\partial}{\partial x} w'(x) \rho^{(0)}(x), \quad (57)$$

которое отражает тот факт, что введённая величина является функционалом от $u(x)$. Для дальнейших преобразований нам понадобится свойство нечётности этого функционала. Докажем его. Для этого прежде требуется доказать эрмитовость оператора $\hat{S}_0(x)$ и его коммутативность с оператором $\partial/\partial x$. В силу равенства (56) достаточно доказать, что аналогичными свойствами обладает невозмущённый оператор Грина $\hat{g}_0(x, t)$. Его эрмитовость следует из уравнения для $\hat{g}_0(x, t)$, а коммутативность с $\partial/\partial x$ — из свойства однородности пространства, которое имеет место для свободной диффузии в отсутствие потенциала и приводит к тому, что $g_0(x, y, t)$ зависит только от разности аргументов $x - y$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \hat{g}_0(x, t) f(x) &= \int_0^L dy \frac{\partial g_0(x - y, t)}{\partial x} f(y) = \\ &= - \int_0^L dy \frac{\partial g_0(x - y, t)}{\partial y} f(y) = \\ &= \int_0^L dy g_0(x - y, t) \frac{\partial}{\partial y} f(y) = \hat{g}_0(x, t) \frac{\partial}{\partial x} f(x).\end{aligned}\quad (58)$$

Тогда нечётность функционала $J_0\{u\}$ доказывается приведённой ниже цепочкой преобразований

$$\begin{aligned}J_0\{u\} &= (\beta D)^2 \int_0^L dx q(x) w'(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{S}_0(x) w'(x) \rho^{(0)}(x) = \\ &= -(\beta D)^2 \int_0^L dx \left[\frac{\partial}{\partial x} q(x) w'(x) \right] \hat{S}_0(x) w'(x) \rho^{(0)}(x) = \\ &= -(\beta D)^2 \int_0^L dx \rho^{(0)}(x) w'(x) \hat{S}_0(x) \frac{\partial}{\partial x} w'(x) q(x) = -J_0\{-u\},\end{aligned}\quad (59)$$

в которой использовано (см. последнее равенство), что функция $q(x)$ отличается от $\rho^{(0)}(x)$ только заменой $u(x)$ на $-u(x)$. Из равенства $J_0\{-u\} = -J_0\{u\}$ следует, что $J_0\{0\} = 0$, а значит, в линейном приближении по $u(x)$ путём разложения функций $q(x)$ и $\rho^{(0)}(x)$ с точностью до $u(x)$ функционал $J_0\{u\}$ можно представить в виде

$$J_0\{u\} \approx -2\beta^3 D^2 \int_0^L dx \left[\frac{\partial}{\partial x} u(x) w'(x) \right] \hat{S}_0(x) w'(x). \quad (60)$$

Возвращаясь к формуле (49) с оператором $\hat{S}(x)$, определённым соотношением (55), и используя равенство (60), представим искомый поток J в линейном по $u(x)$ приближении как

$$\begin{aligned}J &\approx J_0\{u\} - \frac{\beta^3 D^2}{L^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{K}(-\omega) W(\omega), \\ W(\omega) &= \frac{D}{2\pi} \int_0^L dx w'(x) \hat{g}_0(x, \omega) \frac{\partial}{\partial x} u'(x) \hat{g}_0(x, \omega) \frac{\partial}{\partial x} w'(x).\end{aligned}\quad (61)$$

Выражение для $W(\omega)$ можно упростить, используя коммутативность операторов $\hat{g}_0(x, \omega)$ и $\partial/\partial x$, а также тождества

$$\frac{\partial}{\partial x} u'(x) \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} u(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (62)$$

$$D \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \hat{g}_0^{-1}(x, \omega) - i\omega \hat{1}.$$

В результате с учётом эрмитовости оператора $\hat{g}_0(x, \omega)$ выражение для $W(\omega)$ принимает вид

$$\begin{aligned}W(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_0^L dx \left[\frac{\partial}{\partial x} u(x) w'(x) \right] \hat{g}_0(x, \omega) w'(x) + \\ &+ \frac{i\omega}{2\pi} \int_0^L dx u'(x) [\hat{g}_0(x, \omega) w'(x)]^2.\end{aligned}\quad (63)$$

Подставляя (63) в приближённое равенство (61) и учитывая (56), легко видеть, что первое слагаемое в (63) компенсируется с $J_0\{u\}$, так что искомый поток в высокотемпературном приближении окончательно принимает вид

$$J = -\frac{i\beta^3 D^2}{2\pi L^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \tilde{K}(-\omega) \int_0^L dx u'(x) [\tilde{w}'(x, \omega)]^2, \quad (64)$$

в записи которого использован так называемый флуктуационный эффективный потенциал [51]

$$\tilde{w}(x, \omega) = \hat{g}_0(x, \omega) w(x) = \int_0^L dy \tilde{g}_0(x - y, \omega) w(y). \quad (65)$$

Соотношение (64) представляет собой наиболее общую запись для потока, определяющего скорость высокотемпературного броуновского мотора с флуктуирующим периодическим потенциальным профилем [51, 71], которая справедлива для любого закона изменения этого профиля со временем. В случае стохастического дихотомного процесса с обратным временем корреляции Γ имеем $\tilde{K}(-\omega) = 2\Gamma/(\omega^2 + \Gamma^2)$, и

$$J = \frac{\beta^3 D^2 \Gamma}{L^2} \int_0^L dx u'(x) [\tilde{w}'(x, i\Gamma)]^2, \quad (66)$$

где функция $\tilde{w}'(x, i\Gamma)$ определяется формулой (65), в которой функция Грина $\tilde{g}_0(x, i\Gamma)$ записывается в следующем явном виде:

$$\tilde{g}_0(x, i\Gamma) = - \sum_q \frac{\exp[ik_q(x-y)]}{\Gamma + Dk_q^2} = - \frac{z \cosh[z(1-2|x|/L)]}{\Gamma \sinh z}, \quad (67)$$

$$z = \frac{1}{2} \sqrt{\Gamma \tau_D}, \quad \tau_D = \frac{L^2}{D}.$$

Здесь и в последующих соотношениях мы ввели волновые векторы $k_q = 2\pi q/L$, являющиеся функциями целочисленного аргумента q .

Представленные соотношения удобны для анализа потенциальных профилей с большими градиентами (см., например, анализ броуновских моторов с пилообразными потенциалами, представленный в [51, 71]). В случае плавных потенциальных профилей, наоборот, более продуктивной является форма записи в фурье-гармониках, поскольку она позволяет ограничиваться учётом только первых гармоник. Например, для несимметричного дихотомного процесса такое высокотемпературное фурье-представление получено в работе [55]:

$$J = \frac{i\beta^3 D \Gamma}{L} \sum_{qq'} \frac{Dk_q k_{q+q'} u_{q'} + (\gamma_+ - \gamma_-) w_{q'}}{(\Gamma + Dk_q^2)(\Gamma + Dk_{q+q'}^2)} k_{q'} w_{q'} w_{-q-q'}. \quad (68)$$

В симметричном случае ($\gamma_+ = \gamma_-$) формула (68) соответствует представлению (66), записанному в фурье-компонентах.

Для периодического процесса

$$\tilde{K}(-\omega) = 2\pi \sum_j |\sigma_j|^2 \delta(\omega - \omega_j),$$

так что формула (64) принимает вид

$$J = - \frac{i\beta^3 D^2}{L^2} \sum_j |\sigma_j|^2 \omega_j \int_0^L dx u'(x) [\tilde{w}'(x, \omega_j)]^2. \quad (69)$$

Аналогично ситуации для стохастического процесса, выражение (69) удобно для анализа потенциальных профилей с большими градиентами, тогда как для плавных координатных зависимостей потенциальной энергии продуктивным становится представление в фурье-компонентах [55]:

$$J = \frac{i\beta^3 D^3}{L} \sum_{qj, q'j'} \frac{k_q^2 k_{q+q'}^2 k_{q'} U_{qj} U_{q'j'} U_{-q-q', -j-j'}}{(i\omega_j + Dk_q^2)(i\omega_{j+j'} + Dk_{q+q'}^2)}. \quad (70)$$

Формула (70) справедлива для произвольной функции $U(x, t)$, а не только сводящейся к аддитивно-мультипликативной форме (3). Если же воспользоваться формулой (3) и приближением малых флуктуаций с точностью до членов порядка $O(w^2)$, то выражение (69), записанное в фурье-компонентах, может быть представлено в виде [49]

$$J = \frac{2i\beta^3 D^3}{L} \sum_{\substack{qq'(\neq 0) \\ (q+q' \neq 0)}} k_q k_{q'} k_{q+q'} (k_q^2 + k_{q'}^2) \times \\ \times w_q w_{q'} u_{-q-q'} \psi(Dk_q^2, Dk_{q'}^2),$$

$$\psi(a, b) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\omega_j^2 |\sigma_j|^2}{(\omega_j^2 + a^2)(\omega_j^2 + b^2)}, \quad (71)$$

который следует и из (70) с точностью до $O(w^2)$.

6. Заключение

Броуновские моторы (рэтчеты) как модели активно исследуемых в настоящее время управляемых диффузионных систем с нарушенной зеркальной симметрией [17–20] функционируют под действием внешнего флуктуационного возмущения в отсутствие макроскопических движущих сил. Материал данной методической заметки охватывает наиболее типичные примеры теоретического описания систем, в которых внешнее возмущение $w(x)$ создаётся искусственно, а потому обычно оказывается существенно меньшим по сравнению со стационарными взаимодействиями $u(x)$ мотора с окружающей средой. К таким (небиологическим) системам можно отнести, например, частицы, движущиеся в растворах под действием периодического асимметричного потенциала [77, 78], вихри в сверхпроводниках [79], атомы в диссипативных оптических решётках [80] и электроны в органических полупроводниках [81]. Броуновские моторы с флуктуирующей силой или флуктуирующей периодической потенциальной энергией могут также функционировать за счёт электрофоретического или диэлектрофоретического эффекта [78, 82], что представляется перспективным для расширения набора методов радиоэлектронной доставки и сегрегации биологических препаратов [83, 84]. В качестве управляющего возмущения при этом могут использоваться пространственно-гармонические сигналы с различными временными зависимостями [72, 85]. Обратная приближению малых флуктуаций ситуация, предполагающая большие величины возмущений потенциальных профилей, характерна для молекулярных моторов биологического происхождения. Поэтому описание таких моторных белков, как протонная АТФ-синтаза [24], кинезин, миозин V [25] и биологическая микротрубочка [26] выходит за рамки данной работы.

Малость возмущений позволяет использовать хорошо разработанный и эффективный теоретический аппарат функций Грина для вывода аналитических выражений, описывающих зависимость средней скорости броуновской частицы (броуновского мотора) от параметров задачи (температуры, частоты флуктуаций, геометрических параметров потенциального профиля и др.). Многообразие этих зависимостей заключено в одном компактном выражении (12), подробный вывод которого приводится в разделах 2 и 3 в рамках как общего рассмотрения (предполагающего произвольную временную зависимость возмущения), так и для случая дихотомного стохастического процесса.

Компактность представления (12) обеспечивается введением функции двух переменных $S(x, x')$, которая определяется функцией Грина $g(x, x', t)$ диффузии в стационарном потенциальном профиле $u(x)$; при этом нахождение функции $S(x, x')$ при произвольных $u(x)$ является отнюдь не тривиальной задачей. Аналитические выражения для функции $S(x, x')$ могут быть получены, например, для пилообразного потенциала, претерпевающего стохастические дихотомные флуктуации (см. вы-

ражения (29)–(32) и рис. 2). Расчёт с использованием этих выражений даёт характерные частотные зависимости средней скорости, которые существенно различаются для основных типов рэтчетов (см. рис. 3), — с флуктуирующей силой и флуктуирующей периодической потенциальной энергией. Явные выражения для $S(x, x')$ также могут быть получены в определённых приближениях (относительно частот флуктуаций и амплитуд потенциальных профилей), которые активно используются в теории броуновских моторов. Таким образом, предлагаемый подход позволяет воспроизвести результаты этих приближений, "стартуя" с одного базового выражения, т.е. взглянуть на них с единых позиций. Всё это и реализовано в данной методической заметке.

Так, средняя скорость мотора при высокочастотном дихотомном стохастическом процессе изменения его потенциальной энергии, представленная формулой (27), легко выводится из общего выражения (12). Раздел 4 посвящён значительно более трудоёмкому выводу формул низкочастотного (адиабатического) приближения. Основным результатом этого приближения является выражение для линейного по частоте флуктуаций вклада в среднюю скорость броуновских моторов с флуктуирующим периодическим потенциальным профилем. В разделе 5 рассматривается ещё одно важное приближение — высоких температур, которое позволяет анализировать скорость мотора при произвольных частотах флуктуаций потенциальной энергии. Соотношения, представленные в этом разделе, удобны для анализа как плавных потенциальных профилей [41, 55], так и профилей, содержащих участки с большими градиентами потенциала [51, 71]. Обратное приближение — низких температур — также может быть получено непосредственно из выражения (12) с использованием метода перевала, однако этот материал не представлен в данной заметке. Это связано с тем, что, с одной стороны, такой метод получения низкотемпературных выражений вполне очевиден (см., например, [68]), а с другой стороны, его изложение привело бы к необходимости давать громоздкие выражения, упрощённые варианты которых легко получаются при прыжковом описании движения [56].

Работа выполнена в рамках Государственного задания 0082-2018-0003 (регистрационный номер АААА-А18-118012390045-2) и поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 18-57-00003 и 18-29-02012-мк), Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект Ф18Р-022). И.В.Ш. выражает благодарность за поддержку её работы грантом Президента Республики Беларусь в области образования.

Список литературы

- Владимиров В С *Уравнения математической физики* (М.: Наука, 1981); Пер. на англ. яз.: Vladimirov V S *Equations of Mathematical Physics* (Moscow: Mir, 1984)
- Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Статистическая физика Ч. 2 Теория конденсированного состояния* (М.: Наука, 1978); Пер. на англ. яз.: Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Statistical Physics Pt. 2 Theory of the Condensed State* (Oxford: Pergamon Press, 1980)
- Riskin H *The Fokker–Plank Equation. Methods of Solution and Applications* (Berlin: Springer-Verlag, 1989)
- Eyges L *The Classical Electromagnetic Field* (New York: Dover Publ., 1972)
- Зубарев Д Н *УФН* **71** 71 (1960); Zubarev D N *Sov. Phys. Usp.* **3** 320 (1960)
- Бонч-Бруевич В Л, Тябликов С В *Метод функций Грина в статистической механике* (М.: Физматлит, 1961); Пер. на англ. яз.: Bonch-Bruевич V L, Tyablikov S V *The Green Function Method in Statistical Mechanics* (Amsterdam: Interscience Publ., 1962)
- Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962); Пер. на англ. яз.: Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1963)
- Ludwig W *Dynamics of Crystal Lattice with Defects* (Prague: Academics, 1966)
- Гольдманский В И, Трахтенберг Л И, Флеров В Н *Туннельные явления в химической физике* (М.: Наука, 1986); Пер. на англ. яз.: Goldanskii V I, Trakhtenberg L I, Fleurov V N *Tunneling Phenomena in Chemical Physics* (New York: Gordon and Breach, 1989)
- Vetchinkin S I, Khristenko S V *Chem. Phys. Lett.* **1** 437 (1967)
- Зон Б А, Рапопорт Л И *Письма в ЖЭТФ* **7** 70 (1968); Zon B A, Rapoport L I *JETP Lett.* **7** 52 (1968)
- Зон Б А, Манаков Н Л, Рапопорт Л И *ЖЭТФ* **55** 924 (1968); Zon B A, Manakov N L, Rapoport L I *Sov. Phys. JETP* **28** 480 (1969)
- Рapoпорт Л И, Зон Б А, Манаков Н Л *ЖЭТФ* **56** 400 (1969); Rapoport L I, Zon B A, Manakov N L *Sov. Phys. JETP* **29** 220 (1969)
- Лифшиц И М *ЖЭТФ* **17** 1017 (1947)
- Лифшиц И М *ЖЭТФ* **17** 1075 (1947)
- Дядюша Г Г, Розенбаум В М, Дехтярь М Л *ЖЭТФ* **100** 1051 (1991); Dyadyusha G G, Rozenbaum V M, Dekhtyar M L *Sov. Phys. JETP* **73** 581 (1991)
- Reimann P *Phys. Rep.* **361** 57 (2002)
- Hänggi P, Marchesoni F *Rev. Mod. Phys.* **81** 387 (2009)
- Schadschneider A, Chowdhury D, Nishinari K *Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles* (Amsterdam: Elsevier, 2010)
- Cubero D, Renzoni F *Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nano-motors* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2016)
- Bressloff P C, Newby J M *Rev. Mod. Phys.* **85** 135 (2013)
- Kolomeisky A B *Motor Proteins and Molecular Motors* (Boca Raton, FL: CRS Press, 2015)
- Howard J *Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton* (Sunderland, MA: Sinauer Associates, 2001)
- Романовский Ю Л, Тихонов А Н *УФН* **180** 931 (2010); Romanovsky Yu M, Tikhonov A N *Phys. Usp.* **53** 893 (2010)
- Романовский Ю Л, Тихонов А Н *УФН* **186** 125 (2016); Romanovsky Yu M, Tikhonov A N *Phys. Usp.* **59** 121 (2016)
- Захаров П Н и др. *УФН* **186** 853 (2016); Zakharov P N et al. *Phys. Usp.* **59** 773 (2016)
- Chowdhury D *Phys. Rep.* **529** 1 (2013)
- Goychuk I *Beilstein J. Nanotechnol.* **7** 328 (2016)
- Browne W R, Feringa B L *Nature Nanotechnol.* **1** 25 (2006)
- Cheng C, Stoddart J F *Chem. Phys. Chem.* **17** 1780 (2016)
- Kay E R, Leigh D A, Zerbetto F *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** 72 (2007)
- Saha S, Stoddart J F *Chem. Soc. Rev.* **36** 77 (2007)
- Zheng Y B et al. *J. Nanophoton.* **4** 042501 (2010)
- Michl J, Sykes E C H *ACS Nano* **3** 1042 (2009)
- Белиничер В И, Стурман Б И *УФН* **130** 415 (1980); Belinicher V I, Sturman B I *Sov. Phys. Usp.* **23** 199 (1980)
- Олемской И А *УФН* **168** 475 (1998); Olemskoi A I *Phys. Usp.* **41** 411 (1998)
- Gardiner C W *Stochastic Methods. Handbook for the Natural and Social Sciences* 4th ed. (Berlin: Springer-Verlag, 2009); Пер. на русск. яз.: Гардинер К В *Стохастические методы в естественных науках* (М.: Мир, 1986)
- Astumian R D, Bier M *Phys. Rev. Lett.* **72** 1766 (1994)
- Sokolov I M *Phys. Rev. E* **63** 021107 (2001)
- Reimann P *Phys. Rev. Lett.* **86** 4992 (2001)
- Розенбаум В М *ЖЭТФ* **137** 740 (2010); Rozenbaum V M *JETP* **110** 653 (2010)
- Швед Н Ю, Шапочкина И В, Розенбаум В М *Вестник Белорусск. эос. ун-та. Сер. I* (2) 27 (2014)
- Розенбаум В М *ФНТ* **40** 604 (2014); Rozenbaum V M *Low Temp. Phys.* **40** 469 (2014)

44. Denisov S, Flach S, Hänggi P *Phys. Rep.* **538** 77 (2014)
45. Cubero D, Renzoni F *Phys. Rev. Lett.* **116** 010602 (2016)
46. Розенбаум В М и др. *Письма в ЖЭТФ* **107** 525 (2018); Rozenbaum V M et al. *JETP Lett.* **107** 525 (2018)
47. Van den Broeck C, Hänggi P *Phys. Rev. A* **30** 2730 (1984)
48. Astumian R D *J. Phys. Chem.* **100** 19075 (1996)
49. Rozenbaum V M et al. *J. Chem. Phys.* **145** 064110-1 (2016)
50. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **83** 051120 (2011)
51. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **94** 052140-1 (2016)
52. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **92** 062132-1 (2015)
53. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **89** 052131-1 (2014)
54. Розенбаум В М, Шапочкина И В *Письма в ЖЭТФ* **102** 275 (2015); Rozenbaum V M, Shapochkina I V *JETP Lett.* **102** 248 (2015)
55. Розенбаум В М *Письма в ЖЭТФ* **88** 391 (2008); Rozenbaum V M *JETP Lett.* **88** 342 (2008)
56. Rozenbaum V M, Shapochkina I *Phys. Rev. E* **84** 051101-1 (2011)
57. Parrondo J M R *Phys. Rev. E* **57** 7297 (1998)
58. Parrondo J M R et al. *Europhys. Lett.* **43** 248 (1998)
59. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **85** 041116 (2012)
60. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **71** 041102 (2005)
61. Розенбаум В М *Письма в ЖЭТФ* **79** 475 (2004); Rozenbaum V M *JETP Lett.* **79** 388 (2004)
62. Doering C R, Dontcheva L A, Klosek M M *Chaos* **8** 643 (1998)
63. Reimann P, in *Stochastic Processes in Physics, Chemistry, and Biology* (Eds J A Freund, T Poeschel) (Berlin: Springer-Verlag, 2000) p. 50
64. Mielke A *Ann. Physik* **4** 721 (1995)
65. Elston T C, Doering C R *J. Stat. Phys.* **83** 359 (1996)
66. Dekhtyar M L, Ishchenko A A, Rozenbaum V M *J. Phys. Chem. B* **110** 20111 (2006)
67. Dekhtyar M L, Rozenbaum V M *J. Chem. Phys.* **134** 044136-1 (2011)
68. Rozenbaum V M et al. *Physica A* **363** 211 (2006)
69. Ambaye H, Kehr K W *Physica A* **267** 111 (1999)
70. Dyson F J *Phys. Rev.* **75** 486 (1949)
71. Rozenbaum V M et al. *JETP Lett.* **105** 542 (2017)
72. Высоцкая В А и др. *Химия, физика и технология поверхности* **8** 299 (2017)
73. Высоцкая В А и др. *Журн. Белорусск. гос. ун-в. Физика* (3) 33 (2017)
74. Magnasco M O *Phys. Rev. Lett.* **71** 1477 (1993)
75. Lifson S *J. Chem. Phys.* **36** 2410 (1962)
76. Розенбаум В М, Шапочкина И В *Письма в ЖЭТФ* **92** 124 (2010); Rozenbaum V M, Shapochkina I V *JETP Lett.* **92** 120 (2010)
77. Rousselet J et al. *Nature* **370** 446 (1994)
78. Gorre-Talini L, Spatz J P, Silberzan P *Chaos* **8** 650 (1998)
79. De Souza Silva C C et al. *Nature* **440** 651 (2006)
80. Gommers R, Bergamini S, Renzoni F *Phys. Rev. Lett.* **95** 073003 (2005)
81. Kedem O, Lau B, Weiss E A *Nano Lett.* **17** 5848 (2017)
82. Pethig R *Dielectrophoresis. Theory, Methodology and Biological Applications* (Hoboken, NJ: John Wiley and Sons, Inc. 2017)
83. Pommer M S *Electrophoresis* **29** 1213 (2008)
84. Mahabadi S, Labeed F H, Hughes M P *Electrophoresis* **36** 1493 (2015)
85. Rozenbaum V M et al. *Phys. Rev. E* **99** 012103 (2019)

Green's function method in the theory of Brownian motors

V.M. Rozenbaum^{(1,*), I.V. Shapochkina^{(2,†), L.I. Trakhtenberg^(3,4,‡)}}

⁽¹⁾ *Chuiiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, ul. Generala Naumova 17, 03164 Kiev, Ukraine*

⁽²⁾ *Belarusian State University, prosp. Nezavisimosti 4, 220030 Minsk, Belarus*

⁽³⁾ *Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, ul. Kosygina 4, 119991 Moscow, Russian Federation*

⁽⁴⁾ *Lomonosov Moscow State University, Leninskie gory 1-3, 119991 Moscow, Russian Federation*

E-mail: * vik-roz@mail.ru, † shapoch@mail.ru, ‡ litrakh@gmail.com

We present the main results of the theory of Brownian motors obtained using the author approach in which a Brownian particle moving in a slightly fluctuating potential profile is considered. By the Green's function method, the perturbation theory in small fluctuations of potential energy is constructed. This approach allows obtaining an analytical expression for the average particle velocity that is valid for two main types of Brownian motors (flashing and rocking ratchets) and any (stochastic or deterministic) time dependence of the fluctuations. The advantage of the proposed approach lies in the compactness of the description and, at the same time, in the variety of motor systems analyzed with its help: the overwhelming majority of known analytical results in the theory of Brownian motors follow from this expression. The mathematical derivations and analysis of those results forms the main content of these methodological notes.

Keywords: Brownian motors, ratchets, driven diffusive systems, Green's functions

PACS numbers: **05.40. – a**, 05.60.Cd

Bibliography — 85 references

Received 7 November 2017, revised 19 April 2018

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **189** (5) 529 – 543 (2019)

Physics – Uspekhi **62** (5) (2019)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.04.038347>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2018.04.038347>