

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ДИФФУЗИОННЫЙ ТРАНСПОРТ: АСИММЕТРИЧНЫЕ ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В СИММЕТРИЧНЫХ ДЕТЕРМИНИСТИЧЕСКИХ ДИХОТОМНЫХ ФЛУКТУАЦИЯХ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ

The influence of asymmetry $\lambda = (\tau_0^+ - \tau_0^-) / (\tau_0^+ + \tau_0^-)$ of transition duration ($\tau_0^\pm$) between the deterministic dichotomic-process states with equal lifetimes ($\tau_+ = \tau_-$) on the average velocity (v) of the motion of high-temperature Brownian motors is analyzed. The consideration is equivalent to saw-tooth time dependence of potential energy at $\tau_\pm \rightarrow 0$. It is shown that the behaviour of $v(\lambda)$ appreciably depends on ratio (ξ) of the characteristic diffusion time of the Brownian particle on the spatial period of potential energy to time period of fluctuations: there is such a critical value $\xi_c(\tau_\pm)$ at which the function of $v(\lambda)$ monotonic decrease at $\xi \geq \xi_c(\tau_\pm)$ is replaced by its nonmonotonic behaviour at $\xi < \xi_c(\tau_\pm)$. During absence of one of transition processes ($\lambda \rightarrow \pm 1$), a linear dependence v on ξ at small ξ occurs, the proportionality factor being specified by sum of each jump process contribution.

В работе [1] на примере высокотемпературных броуновских моторов, однонаправленное движение которых обусловлено симметричными детерминистическими дихотомными флуктуациями потенциальной энергии, было показано, что учет одинаковых длительностей переходов $\tau_0^+ = \tau_0^-$ между состояниями дихотомного процесса с одинаковыми длительностями $\tau_+ = \tau_- \gg \tau_0^\pm$ существенно влияет на среднюю скорость движения v , когда величины $\tau_0^\pm$ становятся больше характерного времени диффузии частицы $\tau_D = L^2 / D$ (D – коэффициент диффузии) на пространственном периоде L потенциальной энергии. В случае асимметричных переходных процессов ($\tau_0^+ \neq \tau_0^-$) каждая из величин τ_0^+ или τ_0^- может конкурировать с τ_D , что может приводить к новым нетривиальным зависимостям скорости броуновской частицы от параметров модели, изучению которых посвящена данная статья.

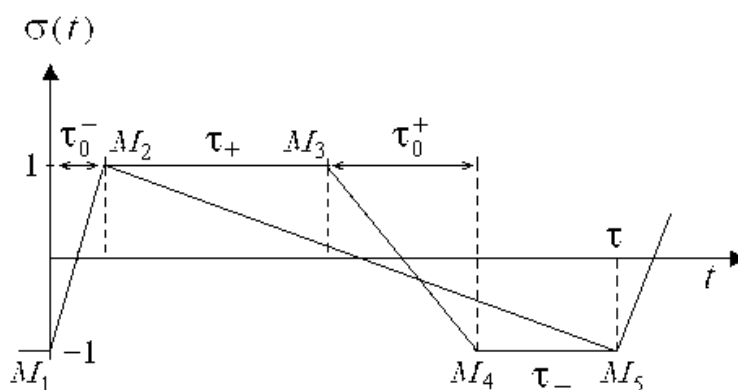


Рис. 1. Временная зависимость функции $\sigma(t)$, определяющая характер флуктуаций потенциальной энергии броуновского мотора. Линия $M_1M_2M_3M_4M_5$ соответствует пилообразной функции $\sigma(t)$ ($\eta_0 = 1$)

В качестве модельной потенциальной энергии, часто используемой в теории броуновских моторов, возьмем (как и в [2–4]) функцию вида

$$U(x, t) = [u + \sigma(t)w]V(x), \quad (1)$$

где

$$V(x) = \sin(2\pi x / L) + \kappa \sin(4\pi x / L) \quad (2)$$

является периодической функцией координаты, хорошо воспроизводящей асимметричный пилообразный потенциал при $\kappa = 1/4$. Параметры u и w задают среднее значение и амплитуду флуктуаций потенциальной энергии, а временная зависимость периодической функции $\sigma(t)$ изображена на рис. 1 (линия $M_1M_2M_3M_4M_5$). Временными параметрами функции $\sigma(t)$ являются τ_+ и τ_- , отвечающие значениям $\sigma(t) = +1$ и -1 , длительности переходных процессов $\tau_0^\pm$ и период $\tau = \tau_+ + \tau_- + \tau_0^+ + \tau_0^-$. При $\tau_0^\pm \rightarrow 0$ функция $\sigma(t)$ принимает только два значения $\sigma(t) = \pm 1$, что соответствует дихотомному процессу. Асимметрию детерминистических дихотомных флуктуаций потенциальной энергии и асим-

метрию длительностей переходных процессов будем характеризовать параметрами ε и λ , определяемыми соотношениями

$$\varepsilon = \frac{\tau_+ - \tau_-}{\tau}, \quad \eta_0^\pm = \frac{\tau_0^\pm}{\tau} = \frac{1}{2} \eta_0 (1 \pm \lambda), \quad \eta_0 = \frac{\tau_0^+ + \tau_0^-}{\tau}. \quad (3)$$

Поскольку $\tau_\pm \geq 0$ и $\tau_0^\pm \geq 0$, то области изменения введенных параметров задаются неравенствами $0 \leq \eta_0 \leq 1$, $0 \leq \lambda \leq 1$, $-1 + \eta_0 \leq \varepsilon \leq \eta_0$.

Средняя скорость броуновской частицы с потенциальной энергией $U(x, t)$, периодической по координате и времени, определяется произведением пространственного периода на поток, усредненный по временному периоду. Общее выражение для средней скорости высокотемпературного броуновского мотора выводилось в работе [4] и использовалось в [1]:

$$v = i\beta^3 D^3 \sum_{qj, q'j'} \frac{k_q^2 k_{q+q'} k_{q'} U_{qj} U_{q'j'} U_{-q-q', -j-j'}}{(i\omega_j + Dk_q^2)(i\omega_{j+j'} + Dk_{q+q'}^2)}. \quad (4)$$

Здесь $\beta = (k_B T)^{-1}$ (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), U_{qj} – фурье-компоненты функции $U(x, t)$ с $k_q = (2\pi/L)q$ и $\omega_j = (2\pi/\tau)j$ (q и j – целые числа). Подставляя в выражение (4) фурье-преобразование формулы (1) $U_{qj} = (u + \sigma_j w) V_q$, где σ_j и V_q – фурье-компоненты функций $\sigma(t)$ и $V(x)$ вида (2), и проводя суммирование по q и q' , получаем

$$\begin{aligned} \frac{v}{v_0} &= F_1(\xi, \varepsilon, \eta_0^\pm) + \frac{w}{u} F_2(\xi, \varepsilon, \eta_0^\pm), \quad F_1(\xi, \varepsilon, \eta_0^\pm) = \frac{1}{2\pi\xi^2} \sum_{j \neq 0} |\sigma_j|^2 j^2 f_1(\xi, j), \\ F_2(\xi, \varepsilon, \eta_0^\pm) &= \frac{1}{2\pi\xi^2} \left[\sigma_0 \sum_{j \neq 0} |\sigma_j|^2 j^2 f_1(\xi, j) + \sum_{\substack{j, j' \neq 0 \\ (j+j' \neq 0)}} \sigma_j \sigma_{j'} \sigma_{-j-j'} f_2(\xi, j, j') \right], \\ f_1(\xi, j) &= \frac{1}{j^2 + a^2} \left(\frac{1}{j^2 + a^2} + \frac{5}{j^2 + 16a^2} \right), \\ f_2(\xi, j, j') &= \frac{jj' + 4a^2}{(j^2 + a^2)(j'^2 + 16a^2)} + \frac{jj' + 4a^2}{(j^2 + 16a^2)(j'^2 + a^2)} + \frac{1}{2} \frac{jj' + a^2}{(j^2 + a^2)(j'^2 + a^2)}, \\ \xi &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\tau_D}{\tau}, \quad a = \frac{1}{2\pi\xi} = 2\pi \frac{\tau}{\tau_D}, \quad v_0 = \frac{L}{\tau_D} \kappa \beta^3 u w^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Размерный параметр v_0 , как и ранее [1], определяет порядок величины средней скорости броуновского мотора, которая зависит от температуры, коэффициента диффузии и характеристик флуктуирующего во времени потенциального рельефа.

Фурье-компонента функции $\sigma(t)$ имеет вид

$$\sigma_j = \frac{i}{\pi^2 j^2} \left[\frac{1}{\eta_0^-} \sin(\pi j \eta_0^-) - \frac{(-1)^j}{\eta_0^+} \sin(\pi j \eta_0^+) \exp(i\pi j \varepsilon) \right], \quad j \neq 0, \quad (6)$$

$$\sigma_0 = \varepsilon.$$

Подстановка (6) в (5) дает выражение для средней скорости броуновского мотора, учитывающее асимметрию переходов между состояниями в общем случае асимметричного дихотомного процесса.

Далее мы ограничимся рассмотрением симметричного дихотомного процесса ($\varepsilon = 0$). Тогда из соотношения (6) следует тождество $\sigma_{-j} = -\sigma_j$, благодаря которому $F_2(\xi, 0, \eta_0^\pm) = 0$ (вследствие обращения в ноль двойной суммы при учете свойства $f_2(\xi, -j, -j') = f_2(\xi, j, j')$) и $v = v_0 F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm)$, где

$$\begin{aligned}
 F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm) &= \frac{8}{\pi^3 \eta_0^2 (1 - \lambda^2)^2} \left\{ 2(1 + \lambda^2) S(0, a) + 2(1 - \lambda^2) [S(1 + \eta_0, a) - \right. \\
 &\quad \left. - S(1 - \lambda \eta_0, a)] - (1 - \lambda)^2 S((1 + \lambda) \eta_0, a) - (1 + \lambda)^2 S((1 - \lambda) \eta_0, a) \right\}, \\
 S(y, a) &\equiv \sum_{j=1}^{\infty} \cos \pi y j \left[\frac{21}{16 a^2} \frac{1}{j^2} - \frac{4}{3 a^2} \frac{1}{j^2 + a^2} + \frac{1}{48 a^2} \frac{1}{j^2 + 16 a^2} - \frac{1}{(j^2 + a^2)^2} \right] = \\
 &= \frac{7 \pi^2}{64 a^2} (2 - 6y + 3y^2) + \frac{597}{512 a^4} - \frac{11 \pi}{12 a^3} \frac{\cosh(1 - y) \pi a}{\cosh \pi a} + \frac{\pi}{384 a^3} \frac{\cosh 4(1 - y) \pi a}{\cosh 4 \pi a} - \\
 &\quad - \frac{\pi^2}{4 a^2 \sinh^2 \pi a} [y \sinh \pi a \sinh(1 - y) \pi a + \cosh \pi a y] \quad (0 \leq y \leq 2).
 \end{aligned} \tag{7}$$

Заметим, что $F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm)$ зависит от квадрата параметра λ , поскольку $S(1 - \lambda \eta_0, a) = S(1 + \lambda \eta_0, a)$.

Аналитическое суммирование в $S(y, a)$ выполнено с использованием табличных сумм из [5].

Соотношения (7) упрощаются в частном случае пилообразной зависимости $\sigma(t)$ (линия $M_1 M_2 M_3$ на рис. 1), когда $\tau_+ = \tau_- = 0$ и $\eta_0 = 1$:

$$\begin{aligned}
 F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm) &= \frac{32 \pi \xi^2}{(1 - \lambda^2)^2} \left[\frac{21}{16} (1 - \lambda^2) - \frac{\lambda \sinh \pi a \lambda}{\sinh \pi a} + \frac{\cosh \pi a \lambda \cosh \pi a - 1}{\sinh^2 \pi a} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{11}{3 \pi a} \frac{\cosh \pi a \lambda - \cosh \pi a}{\sinh \pi a} - \frac{1}{96 \pi a} \frac{\cosh 4 \pi a \lambda - \cosh 4 \pi a}{\sinh 4 \pi a} \right].
 \end{aligned} \tag{8}$$

Последняя формула при $\lambda = 0$ (симметричная «пила») совпадает с формулой (7) из работы [1], где надо положить $z = (2\xi)^{-1}$.

Рассмотрим низкочастотные асимптотики ($\xi \rightarrow 0$) представленных выражений. Если $\tau_0^\pm \gg \tau_D$ и величины η_0 , $1 - \lambda^2$ не слишком малы, то

$$F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm) \approx \frac{42 \pi \xi^2}{\eta_0 (1 - \lambda^2)}. \tag{9}$$

В случае симметричных переходных процессов ($\lambda = 0$) асимптотика (9) совпадает с приведенной в [1]. Пропорциональность скорости броуновского мотора второй степени частоты флуктуаций характерна для плавных функций $\sigma(t)$ (см., например, аналогичный результат в [6] для броуновского дипольного ротатора, управляемого электрическим полем с гармонической временной зависимостью). Наличие малых временных интервалов, на которых функция $\sigma(t)$ изменяется достаточно быстро (в пределе – скачкообразно), приводит к линейной низкочастотной асимптотике [7]. В рассматриваемой нами задаче такое поведение возникает при $\tau_0^- \ll \tau_D$ и/или $\tau_0^+ \ll \tau_D$:

$$F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm) \approx \begin{cases} 6 \pi \xi [1 - (z_0^+)^2 / 12 - (z_0^-)^2 / 12], & z_0^\pm \ll 1, \\ 3 \pi \xi [1 - (z_0^+)^2 / 6], & z_0^+ \ll 1, z_0^- \gg 1, \\ 3 \pi \xi [1 - (z_0^-)^2 / 6], & z_0^- \ll 1, z_0^+ \gg 1, \end{cases} \tag{10}$$

где $z_0^\pm \equiv (2\pi)^2 \tau_0^\pm / \tau_D = \eta_0^\pm / \xi$.

Приведенная асимптотика позволяет заключить, что в линейном по ξ приближении скорость аддитивно зависит от вкладов каждого временного интервала $\tau_0^\pm$ с быстрым изменением функции $\sigma(t)$: каждый скачок дает вклад $3\pi\xi$, а малое отклонение от скачкообразного поведения – квадратичную по $\tau_0^\pm$ поправку $-(\pi/2)\xi(z_0^\pm)^2$. Поскольку параметр η_0 не входит в выражение (10), то форма участков функции $\sigma(t)$ с плавным изменением не вносит никакого вклада.

Высокочастотная асимптотика ($\xi \rightarrow \infty$) выражения (7) имеет вид

$$F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm) \approx \frac{\pi}{60 \xi^2} [15 - 15 \eta_0^2 + 6 \eta_0^3 - \lambda^2 \eta_0^2 (15 - 18 \eta_0 + 5 \eta_0^2)]. \tag{11}$$

При $\lambda = 0$ полученная асимптотика совпадает с приведенной в [1], а при $\eta_0 = 1$ становится равной $(3 - \lambda^2)\pi / 30\xi^2$. Соотношение (11) показывает, что скорость броуновского мотора при высоких частотах флуктуаций убывает с ростом асимметрии переходного процесса. В то же время из асимптотик (9) и (10) следует, что при низких частотах рост асимметрии переходного процесса приводит к увеличению скорости. Графики зависимостей v/v_0 от ξ , рассчитанные для пилообразной функции $\sigma(t)$ ($\eta_0 = 1$) при $\lambda = 0$ и $\lambda = 1$, подтверждают эти выводы (рис. 2 а). Таким образом, характер зависимости скорости от параметра λ изменяется в случае перехода от низких частот к высоким и имеет интересные особенности в промежуточной области частот, к обсуждению которых мы и переходим.

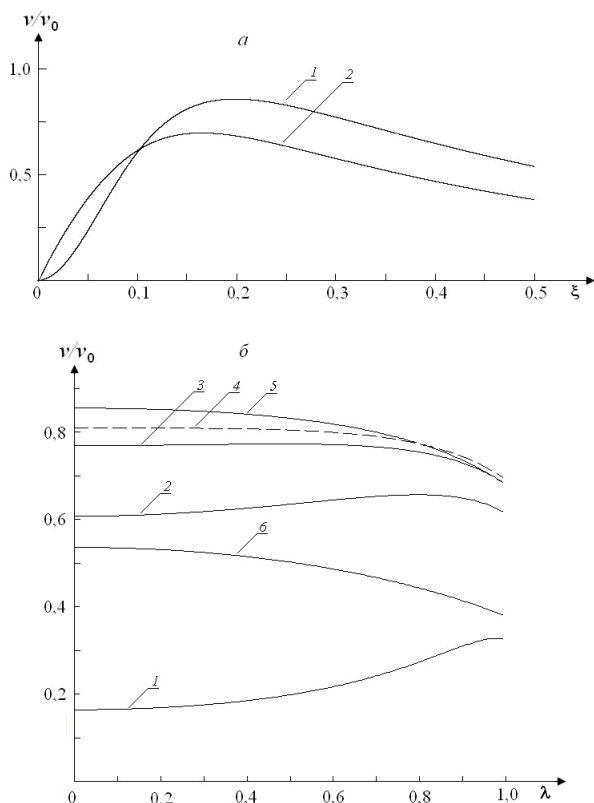


Рис. 2. Средняя скорость броуновского мотора, рассчитанная для пилообразной функции $\sigma(t)$ ($\eta_0 = 1$) в зависимости от: а – частоты при $\lambda = 0$ и $\lambda = 1$ – кривые 1 и 2; б – параметра асимметрии λ при $\xi = 0,05; 0,1; 0,135; 0,15; 0,2; 0,5$ – кривые 1–6 (штриховая линия соответствует критическому значению $\xi = \xi_c$)

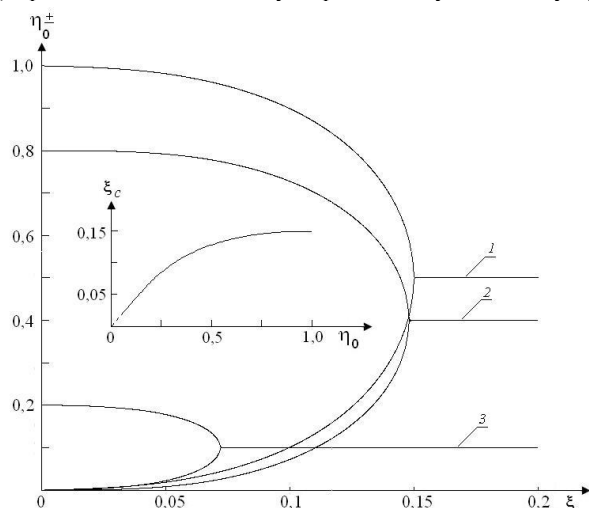


Рис. 3. Частотная зависимость относительных длительностей переходов $\eta_0^\pm = \eta_0(1 \pm \lambda_m)/2$, соответствующих максимальному значению средней скорости броуновского мотора при различных вкладах симметричных дихотомных составляющих: $\eta_0 = 1; 0,8; 0,2$ – кривые 1–3. На вставке – поведение критического значения $\xi = \xi_c$ с изменением η_0

На рис. 2 б представлены зависимости v/v_0 от параметра асимметрии λ , вычисленные при $\eta_0 = 1$ и различных значениях ξ . По мере уменьшения ξ , начиная с некоторого критического значения $\xi = \xi_c \approx 0,15$ (соответствующего значению $a_c \approx 1$), монотонно убывающая функция λ становится немонотонной с максимумом в точке $\lambda = \lambda_m$, зависящим от $\xi < \xi_c$. Такое поведение сохраняется и при $\eta_0 < 1$. Рис. 3 иллюстрирует, как критическое значение ξ_c и значения параметров $\eta_0^\pm$, соответствующие λ_m , зависят от η_0 . Механизм возникновения немонотонности зависимости v от λ описывается точно так же, как явление спонтанного нарушения симметрии в теории Ландау фазовых переходов второго рода [8]. Действительно, величина $F(\lambda, \xi, \eta_0) \equiv F_1(\xi, 0, \eta_0^\pm)$ является функцией λ^2 и может быть разложена по λ^2 в малой окрестности точки $\lambda = 0$:

$$F(\lambda, \xi, \eta_0) \approx A(\xi, \eta_0) + B(\xi, \eta_0)\lambda^2 + C(\xi, \eta_0)\lambda^4, \quad (12)$$

где $C(\xi, \eta_0) < 0$, а $B(\xi, \eta_0) \approx b(\eta_0)[\xi_c(\eta_0) - \xi]$ ($b(\eta_0) > 0$) вблизи интересующей нас критической области $\xi_c(\eta_0)$. Тогда при $\xi > \xi_c(\eta_0)$ имеет место монотонное убывание $F(\lambda, \xi, \eta_0)$ с ростом λ . При $\xi < \xi_c(\eta_0)$ монотонное поведение сменяется немонотонным с максимумом при $\lambda_m = \sqrt{b(\xi_c - \xi) / 2|C|}$. Это λ_m как раз и определяет характер зависимости значений параметров $\eta_0^\pm = \eta_0(1 \pm \lambda_m)/2$ от η_0 , приведенной на рис. 3.

Суммируя полученные результаты, следует отметить, что наиболее интересные особенности зависимостей средней скорости v броуновского

мотора от его параметров возникают, когда длительности переходных процессов $\tau_0^\pm$ могут конкурировать с характерным временем диффузии частицы τ_D . Поскольку $\tau_0^\pm$ всегда меньше периода τ изменения потенциальной энергии $U(x, t)$ со временем t , то при $\tau < \tau_D$ (что соответствует большим значениям частотного параметра ξ) $\tau_0^\pm < \tau_D$ и имеет место монотонная убывающая зависимость v от параметра асимметрии $\lambda = (\tau_0^+ - \tau_0^-) / (\tau_0^+ + \tau_0^-)$ длительностей переходных процессов. Ситуация изменяется, когда τ становится порядка τ_D , а частотный параметр достигает критического значения ξ_c , которое зависит от соотношения длительностей переходных и дихотомных процессов (параметра η_0). Смысл изменений проще увидеть в частном случае отсутствия дихотомных составляющих, когда $\eta_0 = 1$, $\tau_0^+ + \tau_0^- = \tau$ и имеет место пилообразное изменение потенциальной энергии $U(x, t)$ со временем. Тогда при $\xi < \xi_c$ с увеличением параметра λ может происходить переход от неравенств $\tau_0^\pm < \tau_D$ к неравенствам $\tau_0^- < \tau_D < \tau_0^+$, обуславливающий немонотонное поведение зависимости v от λ . Поскольку знак асимметрии временного сигнала не влияет на величину скорости и последняя зависит от λ^2 , то возникновение немонотонности описывается в терминах теории спонтанного нарушения симметрии. По мере же увеличения вклада симметричных дихотомных составляющих (уменьшения параметра η_0) критическое значение ξ_c уменьшается (см. вставку на рис. 3).

Особый интерес представляет рассмотрение низкочастотной асимптотики ($\xi \rightarrow 0$) скорости броуновского мотора. При плавных зависимостях $U(x, t)$ от времени скорость v пропорциональна ξ^2 . Линейное поведение возникает только при наличии скачков в зависимости $U(x, t)$ от t , а малые отклонения от скачкообразного поведения с длительностями $\tau_0^\pm$ дают квадратичные по $\tau_0^\pm$ поправки. Оказалось, что не только сами скачки, но и квадратичные по $\tau_0^\pm$ поправки дают аддитивные вклады в скорость. При этом линейная по ξ асимптотика не зависит от формы плавной части функции $U(x, t)$ от t . Эти закономерности важны для понимания механизма возникновения направленного движения в неравновесных системах под действием различных флуктуаций потенциальной энергии. Наибольший вклад в скорость дают дихотомные флуктуации, при которых функция $U(x, t)$ от t принимает два значения со скачкообразными переходами между ними. Как правило, теоретические модели учитывают флуктуации именно такого типа, поскольку они обеспечивают наиболее простое описание. Практическое значение полученных результатов состоит в учете ненулевых длительностей переходных процессов, которые всегда присутствуют в реальных системах.

1. Шапочкина И. В., Розенбаум В. М. // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2009. № 2. С. 43.
2. Reimann P. // Phys. Rep. 2002. Vol. 361. P. 57.
3. Hänggi P., Marchesoni F. // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P. 387.
4. Розенбаум В. М. // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88. С. 391.
5. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. М., 1981.
6. Rozenbaum V. M., Vovchenko O. Ye., Korochkova T. Ye. // Phys. Rev. E. 2008. Vol. 77. P. 061111.
7. Parrondo J. M. R. // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 57. P. 7297.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., 1976. Ч. 1.

Поступила в редакцию 04.02.10.

Ирина Викторовна Шапочкина – старший преподаватель кафедры методики преподавания физики и информатики.

Виктор Михайлович Розенбаум – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией теоретических проблем поверхностных явлений Института химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины.