

МЕТОД СИНГУЛЯРНЫХ БАРЬЕРОВ В ТЕОРИИ АДИАБАТИЧЕСКИХ БРОУНОВСКИХ МОТОРОВ

Рассмотрены свойства сингулярного потенциального барьера, характеризующегося бесконечно малой шириной l и бесконечно большой высотой V при конечной мощности барьера $\Lambda = l \exp(V / k_B T)$ (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), и методы его использования в задачах диффузионной динамики. Преимущество этого метода состоит в том, что он позволяет разделить зависящие от времени параметры $R_1(t)$ и $R_2(t)$, определяющие временную зависимость потенциала $V(x; R_1, R_2)$, которые ответственны за выведение системы из равновесия (параметр R_2) и выпрямление возникающего движения в направленное (параметр R_1). При наличии сингулярных барьеров малой проницаемости ($\Lambda(R_1) \gg L$, L – пространственный период потенциала) возникает дополнительное характеристическое время системы $\tau_{\text{bar}} \sim \Lambda L / D$ – время преодоления барьера, которое много больше, чем диффузионное время релаксации $\tau_{\text{rel}} \sim L^2 / D$ (D – коэффициент диффузии). Если период циклического изменения потенциала $\tau \gg \tau_{\text{rel}}$, то в участках между потенциальными барьерами (потенциальных ямах), описываемых плавной составляющей $V(x; R_2)$ потенциала $V(x; R_1, R_2)$, успевает установиться квазиравновесие и квазиравновесная функция распределения зависит от параметра R_2 . Тогда другой параметр R_1 , регулирующий высоты барьеров, выпрямляет движение. Установлены закономерности, связывающие функционирование адиабатически медленных и быстрых броуновских моторов. Показано, что при наличии двух сингулярных барьеров большой мощности на периоде пространственного изменения потенциала средняя скорость броуновского мотора, функционирующего в адиабатически медленном режиме изменения потенциала со временем, ограничена сверху значением скорости при дихотомном режиме изменения потенциала. Равенство этих двух скоростей имеет место, когда адиабатически медленные циклические изменения мощностей барьеров и гладкой части потенциального профиля можно представить прямоугольным контуром в фазовом пространстве переменных R_1 и R_2 , задающих эти изменения.

Ключевые слова: броуновские моторы; рэтчеты; адиабатически быстрые и адиабатически медленные процессы; сингулярный потенциальный барьер; флуктуации потенциала; диффузионная динамика; эффективность преобразования энергии.

We consider the properties of a singular potential barrier of an infinitely small width l and an infinitely large height V at the finite barrier power $\Lambda = l \exp(V / k_B T)$ (k_B is the Boltzmann constant and T is the absolute temperature) as well as the using of the singular barrier techniques in problems of diffusion dynamics. The benefit of this technique over other ones is that it allows separating time-dependent parameters $R_1(t)$ and $R_2(t)$ determining the time variation of the potential $V(x; R_1, R_2)$, which are responsible for driving the system away from equilibrium (parameter R_2) and for the rectification of the emergent motion into directed one (parameter R_1). With introducing the time-dependent singular barriers with low permeabilities ($\Lambda(R_1) \gg L$, L is the spatial period of the potential), an additional characteristic time of the system arises, namely barrier transition time $\tau_{\text{bar}} \sim \Lambda L / D$, which is much larger than the diffusive relaxation time $\tau_{\text{rel}} \sim L^2 / D$ (D is the diffusion coefficient). Thus, if the period of the cyclic potential change $\tau \gg \tau_{\text{rel}}$, quasiequilibrium has been established in the areas between the potential barriers (i. e. in the potential wells) described by the smooth component $V(x; R_2)$ of the potential $V(x; R_1, R_2)$, so that the quasiequilibrium distribution function depends on R_2 . Then the other parameter R_1 , regulating the barrier heights, rectifies the emergent motion. On this way, a set of analytical regularities describing adiabatically slow and fast driven Brownian motors is established. It is shown that, under the presence of two large power singular barriers on the period of the spatial variation of the potential, the average velocity of the Brownian motor operating due to an adiabatically slow variation of the potential in time is upper limited by the value of the velocity at dichotomous variation in the potential. The equality of these two velocities takes place when the adiabatically slow cyclic variation of barrier powers and a smooth part of the potential profile can be expressed as a rectangular loop in the phase space of variables R_1 and R_2 that specify these changes.

Key words: Brownian motors; ratchets; adiabatically fast and adiabatically slow processes; singular potential barrier; time dependent potential; diffusion dynamics; energy conversion efficiency.

Адиабатические броуновские моторы – модельные наноустройства, эффективно преобразующие накачиваемую в систему энергию в полезную работу направленного движения, – функционируют за счет циклических изменений пространственно периодической потенциальной энергии наночастицы, совершаемых или настолько медленно, или в определенные моменты так быстро, что теплообмен между системой и окружающей средой практически отсутствует. Теория таких моторов развивалась сначала для адиабатически медленного изменения потенциальной энергии, при котором существенно наличие не менее двух зависящих от времени управляющих параметров. Отличительной чертой таких адиабатически медленных моторов является высокая эффективность преобразования энергии [1, 2]. Затем было показано, что адиабатически быстрые моторы, функционирующие за счет дихотомных периодических изменений потенциальной энергии, содержащие два скачка на временном периоде, также обеспечивают высокую эффективность при определенной структуре потенциального рельефа [3–5]. Если характеризовать эту структуру потенциальными барьерами и ямами между ними, то зависимость от времени глубин потенциальных ям ответственна за выведение системы из равновесия и организацию возвратно-поступательного движения между ними, тогда как временная зависимость барьеров способна выпрямлять возвратно-поступательное движение в направленное [6–8]. Эта качественная картина

механизма функционирования броуновского мотора мало пригодна для количественного описания, поскольку в уравнения диффузионной динамики [9, 10] и их решения, полученные в адиабатическом приближении [1, 2, 8], входят функции потенциального профиля, который можно только условно разделить на участки, называемые барьерами и ямами. С другой стороны, для выяснения требований к потенциальному рельефу, обеспечивающих высокую эффективность преобразования энергии, оказывается важным построение такого модельного рельефа, в котором функции, выполняемые барьерами и ямами, были бы предельно разделены. Эту задачу решает использованный в данной статье формализм сингулярных барьеров [3, 4], позволяющий существенно упростить известные решения уравнений диффузионной динамики, придать им физически ясную интерпретацию и установить ряд закономерностей, связывающих функционирование адиабатически медленных и быстрых броуновских моторов.

Сингулярный барьер представляет собой прямоугольник большой высоты $V(t)$ (которая в общем случае может зависеть от времени t) и малой ширины l , так что при $V(t) \rightarrow \infty$ и $l \rightarrow 0$ величина $\Lambda(t) \equiv l \exp[\beta V(t)]$ (мощность барьера) конечна и может принимать произвольные значения. Преимущество таким образом определенного сингулярного барьера состоит в том, что введение последнего позволяет связать поток частиц через него с функциями распределения $\rho(x, t)$ на его границах, т. е. задает новое граничное условие, которое можно использовать для решения уравнений диффузионной динамики при наличии указанных барьеров. Такая связь возникает из определения потока [11]

$$J(x, t) = -De^{-\beta V(x, t)} \frac{d}{dx} e^{\beta V(x, t)} \rho(x, t) \quad (1)$$

($V(x, t)$ – зависящий от координаты и времени потенциал, D – коэффициент диффузии, $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), входящего в уравнение Смолуховского, и следующего ниже рассмотрения.

Пусть левая граница сингулярного барьера расположена в точке $x=0$ (рис. 1 а). Тогда, умножая левую и правую части уравнения (1) на $\exp[\beta V(x, t)]$ и интегрируя по x от $-\varepsilon$ до $l + \varepsilon$ с последующим предельным переходом $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем

$$e^{\beta V(t)} \int_0^l J(x, t) dx = -D \left[e^{\beta V(l, t)} \rho(l, t) - e^{\beta V(0, t)} \rho(0, t) \right]. \quad (2)$$

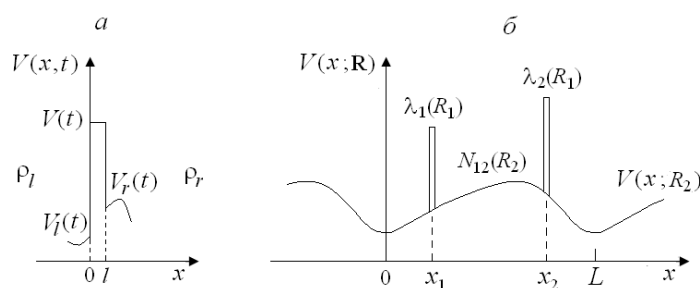


Рис. 1. Схематическое представление проникаемого сингулярного барьера (а) и потенциального профиля, временная зависимость которого управляется функциями $R_1(t)$ и $R_2(t)$ (б)

Переходя в формуле (2) к пределу $l \rightarrow 0$ (одновременно с условием $V(t) \rightarrow \infty$ при конечности $\Lambda(t)$), приходим к искомому граничному условию:

$$J(0, t) = -\frac{D}{\Lambda(t)} \left[e^{\beta V_r(0, t)} \rho_r(0, t) - e^{\beta V_l(0, t)} \rho_l(0, t) \right], \quad (3)$$

где использованы индексы r и l , чтобы различать значения потенциала и функции распределения справа и слева от сингулярного барьера соответственно. Отметим, что в случае $\Lambda(t) \rightarrow 0$ из условия ограниченности значений потока следует: $e^{\beta V_r(0, t)} \rho_r(0, t) = e^{\beta V_l(0, t)} \rho_l(0, t)$. Последнее равенство позволяет рассматривать уравнение (3) как обобщение известного граничного условия в точке скачка потенциала [11]. Если $\Lambda(t) \rightarrow 0$ и потенциал непрерывен, $V_l(0, t) = V_r(0, t)$, то и функция распределения должна быть непрерывной, $\rho_l(0, t) = \rho_r(0, t)$.

Рассмотрим теперь броуновскую частицу с координатой $x(t)$, движущуюся в пространственно периодическом потенциале $V(x; \mathbf{R})$ с периодом L . Потенциал зависит от набора параметров $\{R_1, R_2, \dots, R_n\}$,

заклученных в векторе $\mathbf{R}$. Если эти параметры периодически изменяются со временем (с периодом τ), $\mathbf{R}(t + \tau) = \mathbf{R}(t)$, то дрейф частиц возникает даже в адиабатическом пределе $\tau \rightarrow \infty$. При этом скорость дрейфа такого адиабатически медленного броуновского мотора определяется выражением [1]

$$\mathfrak{A} = \frac{L}{\tau} \oint d\mathbf{R} \cdot \int_0^L dx \rho_+(x; \mathbf{R}) \int_0^x dx' \nabla_{\mathbf{R}} \rho_-(x'; \mathbf{R}), \quad (4)$$

где

$$\rho_{\pm}(x; \mathbf{R}) = Z_{\pm}^{-1}(\mathbf{R}) e^{\pm \beta V(x; \mathbf{R})}, \quad Z_{\pm}(\mathbf{R}) = \int_0^L dx e^{\pm \beta V(x; \mathbf{R})}. \quad (5)$$

Наличие сингулярного барьера дает пренебрежимо малый вклад в $\rho_-(x; \mathbf{R})$, тогда как в функции $\rho_+(x; \mathbf{R})$ вклад этого барьера является определяющим. Это дает возможность различать и аналитически описывать влияние зависящих от времени барьеров и областей между ними (потенциальных ям) на характеристики мотора.

Рассмотрим два сингулярных барьера, локализованных в точках $x = x_1$ и $x = x_2$, с временной зависимостью их мощности, управляемой первой компонентой $R_1(t)$ двухкомпонентной функции $\mathbf{R}(t) = \{R_1(t), R_2(t)\}$ (рис. 1 б). Проницаемости этих барьеров равны $\Lambda_1^{-1}(R_1)$ и $\Lambda_2^{-1}(R_1)$. Если $\Lambda(R_1) \equiv \Lambda_1(R_1) + \Lambda_2(R_1) \gg L$, то $Z_+(\mathbf{R}) \approx \Lambda(R_1)$ и не зависит от R_2 . Тогда, пренебрегая вкладами порядка Λ^{-1} , получаем

$$\rho_+(x, R_1) \approx \lambda_1(R_1) \delta(x - x_1) + \lambda_2(R_1) \delta(x - x_2), \quad \lambda_i(R_1) = \Lambda_i(R_1) / \Lambda(R_1), \quad i = 1, 2, \quad (6)$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Введем упрощающее предположение, согласно которому полная проницаемость двух барьеров $\Lambda^{-1}(R_1)$ не зависит от R_1 , т. е. проницаемости барьеров могут только перераспределяться между собой. С учетом этого, а также тождества $\lambda_1(R_1) + \lambda_2(R_1) = 1$ после подстановки (6) в (4) средняя скорость примет приближенный вид:

$$\mathfrak{A} \approx \frac{L}{\tau} \oint d\mathbf{R} \cdot \lambda_2(R_1) \nabla_{\mathbf{R}} \int_{x_1}^{x_2} dx \rho_-(x, R_2). \quad (7)$$

Здесь вторая компонента $R_2(t)$ задает временную зависимость исходного гладкого потенциала $V[x; \mathbf{R}(t)]$ (без дополнительно введенных сингулярных барьеров) и использовано тождество $\oint d\mathbf{R} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} F(\mathbf{R}) = 0$ ($F(\mathbf{R})$ – произвольная функция). Из выражения (7) следует, что скорость дрейфа частиц определяется изменением доли частиц $N_{12}(R_2) \equiv \int_{x_1}^{x_2} dx \rho_-(x, R_2)$, заключенных между двумя барьерами.

Для упрощения будем считать, что контур интегрирования разбит точками a и b на два участка, описываемых однозначными функциями $R_1^{ab}(R_2)$ и $R_1^{ba}(R_2)$ (фазовая диаграмма $R_1 - R_2$ на рис. 2 а слева). Для определенности положим, что в состояниях, соответствующих точкам a и b на фазовой диаграмме, относительная проницаемость $\lambda_2(R_1)$ барьера в точке x_2 равна нулю и единице соответственно, так что зависимость $\lambda_2(R_1)$ при изменении R_1 от R_{1a} до R_{1b} является монотонно возрастающей функцией (рис. 2 а справа). Тогда контурный интеграл можно заменить двумя интегралами по R_2 от R_{2a} до R_{2b} и представить выражение (7) как

$$\mathfrak{A} \approx \frac{L}{\tau} \int_{R_{2a}}^{R_{2b}} dR_2 [\lambda_2^{ab}(R_2) - \lambda_2^{ba}(R_2)] \frac{d}{dR_2} N_{12}(R_2), \quad (8)$$

где $\lambda_2^{ab}(R_2) \equiv \lambda_2[R_1^{ab}(R_2)]$ и $\lambda_2^{ba}(R_2) \equiv \lambda_2[R_1^{ba}(R_2)]$. Для положительности $\mathfrak{A}$ потребуем, чтобы скорость изменения доли частиц $N_{12}(R_2)$ между сингулярными барьерами являлась положительной величиной при любых R_2 (рис. 2 б) и чтобы выполнялись неравенства $0 \leq \lambda_2^{ba}(R_2) < \lambda_2^{ab}(R_2) \leq 1$ (рис. 2 в). Значения $\lambda_2^{ab}(R_2) - \lambda_2^{ba}(R_2)$ ограничены сверху единицей, так что максимальное значение $\mathfrak{A}$ оказывается равным

$$\mathfrak{A}_{\max} \approx \frac{L}{\tau} [N_{12}(R_{2b}) - N_{12}(R_{2a})]. \quad (9)$$

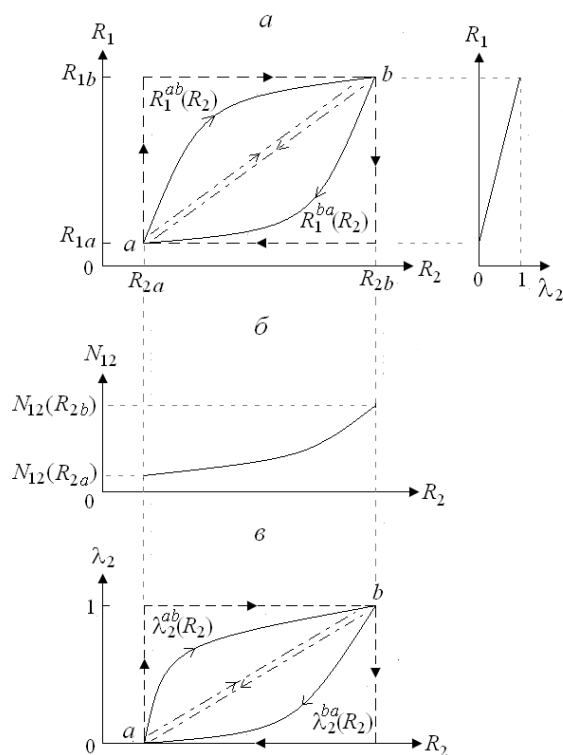


Рис. 2. Фазовая диаграмма $R_1 - R_2$ и функция $\lambda_2(R_1)$ (а); характерные зависимости функции $N_{12}(R_2)$ (б) и функций $\lambda_2^{ab}(R_2)$, $\lambda_2^{ba}(R_2)$ (в)

Это значение достигается на прямоугольном контуре в фазовом пространстве переменных R_1 и R_2 , вписанном между точками $\mathbf{R}_a$ и $\mathbf{R}_b$ (штриховая линия на рис. 2 а слева). Движение по этому контуру соответствует попеременному изменению проницаемостей барьеров и доли частиц между барьерами.

Покажем, что скорость, заданная соотношением (9), совпадает со средней скоростью частиц при дихотомном изменении состояний с потенциалами $V_a(x) = V(x; \mathbf{R}_a)$ и $V_b(x) = V(x; \mathbf{R}_b)$ в адиабатическом пределе $\tau \rightarrow \infty$ при наличии сингулярных барьеров (штрихпунктирные линии на рис. 2 а, в). Для этой величины известно выражение [1, 8, 12]:

$$\mathfrak{A} = \frac{L}{\tau} \int_0^L dx [\rho_+^{(a)}(x) - \rho_+^{(b)}(x)] \int_0^x dx' [\rho_-^{(a)}(x') - \rho_-^{(b)}(x')], \quad (10)$$

где $\rho_{\pm}^{(a)}(x)$ и $\rho_{\pm}^{(b)}(x)$ определяются соотношениями (5), в которых потенциал $V(x; \mathbf{R})$ заменяется на $V_a(x)$ и $V_b(x)$ соответственно. Поскольку $\lambda_2(R_{1a}) = 0$ и $\lambda_2(R_{1b}) = 1$, то $\rho_+^{(a)}(x) = \delta(x - x_1)$ и $\rho_+^{(b)}(x) = \delta(x - x_2)$. Подставляя эти дельта-функции в (10), приходим к формуле (9).

Полученные результаты показывают, что метод сингулярных барьеров [3, 4] чрезвычайно полезен в изучении адиабатических броуновских моторов. Преимущество этого метода состоит в том, что он позволяет разделить параметры, определяющие временную зависимость потенциала, которые ответственны за выведение системы из равновесия и выпрямление возникающего движения в направленное. Наличие малопроницаемых сингулярных барьеров ($\Lambda \equiv l \exp(\beta V) \gg L$) приводит к возникновению дополнительного характеристического времени $\tau_{\text{bar}} \sim \Lambda L / D$ – времени преодоления барьера, которое много больше, чем диффузионное время релаксации $\tau_{\text{rel}} \sim L^2 / D$. Поэтому при периоде циклического процесса τ , заметно превышающего τ_{rel} , в участках между потенциальными барьерами (потенциальных ямах) успевает установиться квазиравновесие, параметрически зависящее через плавную составляющую потенциала $V(x, R_2)$ от параметра R_2 . Тогда другой параметр R_1 , регулирующий высоты барьеров, начинает выполнять функции, выпрямляющие движение. Именно это разделение ролей параметров R_1 и R_2 привело к соотношению (7) для средней скорости движения, в котором последние входят в функции $\lambda_2(R_1)$ и $\rho_{\pm}(x, R_2)$, описывающие соответственно изменения барьеров и ям. Упрощение этого соотношения показало, что результат фактически зависит от вероятности пребывания частицы в рассматриваемой потенциальной яме. В этом смысле введение сингулярных барьеров эквивалентно

кинетическому описанию, также позволяющему отдельно описывать барьеры и ямы [7]. В то же время метод сингулярных барьеров имеет ряд преимуществ. Действительно, простые свойства сингулярных барьеров приводят к упрощению громоздких решений уравнения Смолуховского. За счет этого удалось дать физически ясную интерпретацию рассматриваемых процессов и установить закономерности, связывающие функционирование адиабатически медленных и быстрых броуновских моторов. Так, полученные соотношения показывают, что средняя скорость броуновского мотора, функционирующего в адиабатически медленном режиме, ограничена сверху значением скорости при дихотомном режиме изменения потенциала и совпадает с этим значением, когда циклические временные изменения мощностей барьеров и гладкой части потенциального профиля можно представить в виде прямоугольного контура в фазовом пространстве переменных $R_1 - R_2$.

Представленная работа была частично поддержана грантом 3/13-Н «Наномоторы на границе раздела фаз» целевой комплексной программы фундаментальных исследований НАН Украины «Фундаментальные проблемы наноструктурных систем, наноматериалов, нанотехнологий».

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Parrondo J. M. R. Reversible ratchets as Brownian particles in an adiabatically changing periodic potential // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 57. P. 7297–7300.
2. Parrondo J. M. R., Blanko J. M., Chao F. J., Brito R. Efficiency of Brownian motors // Europhys. Lett. 1998. Vol. 43. P. 248–254.
3. Розенбаум В. М. Механизм возникновения высокой эффективности броуновского мотора с флуктуирующим потенциалом // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 79. С. 475–479.
4. Розенбаум В. М., Корочкова Т. Е. Аналитическая модель броуновского мотора с флуктуирующим потенциалом // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. С. 242–252.
5. Makhnovskii Yu. A., Rozenbaum V. M., Yang D.-Y., Lin S. H., Tsong T. Y. Flashing ratchet model with high efficiency // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 69. P. 021102-1–021102-7.
6. Шапочкина И. В., Розенбаум В. М. Высокотемпературный диффузионный транспорт: асимметричные переходные процессы в симметричных детерминистических дихотомных флуктуациях потенциальной энергии // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2010. № 2. С. 41–45.
7. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V. Quasiequilibrium directed hopping in a time-dependent two-well periodic potential // Phys. Rev. E. 2011. Vol. 84. P. 051101-1–051101-12.
8. Rozenbaum V. M., Makhnovskii Yu. A., Shapochkina I. V., Sheu S.-Y., Yang D.-Y., Lin S. H. Adiabatically slow and adiabatically fast driven ratchets // Phys. Rev. E. 2012. Vol. 85. P. 041116-1–041116-5.
9. Reimann P. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium // Phys. Rep. 2002. Vol. 361. P. 57–265.
10. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P. 387–442.
11. Riskin H. The Fokker-Plank Equation. Methods of Solution and Applications. Berlin: Springer-Verlag, 1989. P. 472.
12. Rozenbaum V. M., Korochkova T. Ye., Chernova A. A., Dekhtyar M. L. Brownian motor with competing spatial and temporal asymmetry of potential energy // Phys. Rev. E. 2011. Vol. 83. P. 051120-1–051120-10.

Поступила в редакцию 10.04.13.

Ирина Викторовна Шапочкина – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры компьютерного моделирования.

Виктор Михайлович Розенбаум – доктор физико-математических наук, заведующий отделом теории наноструктурных систем Института химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины.

УДК 539.1.07,539.216.2

А. И. УРБАНОВИЧ, Н. С. ШЛАПАКОВА

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ, ВОЗНИКАЮЩИЕ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КАПИЛЛЯРАХ ПРИ ТРАНСПОРТИРОВКЕ ИОННЫХ ПУЧКОВ

Транспортировка ускоренных ионов через микро- и нанокapиллярные структуры дала возможность получать ионные пучки очень малого поперечного сечения с небольшой расходимостью. Усилия многих исследователей в настоящее время направлены на увеличение мощности таких ионных пучков.

При прохождении ионных пучков через диэлектрические капилляры цилиндрической или конической формы в результате передачи части кинетической энергии ионов внутренней поверхности капилляров может происходить интенсивный нагрев последних.

В веществах с небольшим коэффициентом теплопроводности следует ожидать появления значительного перепада температур между внутренней и внешней поверхностью капилляра и, как следствие, возникновения температурных напряжений, которые при превышении критических значений могут приводить к разрушению капилляра.

Известен ряд экспериментальных работ, где для предотвращения разрушения капилляров вследствие нагрева применяют различные системы активного охлаждения. В данной работе проведен теоретический расчет радиальных σ_r и угловых $\sigma_{\theta\theta}$ температурных напряжений, возникающих в диэлектрических капиллярах при транспортировке ионных пучков. Задача решалась в квазистатическом приближении, т. е. на отрезках времени, когда ускорениями частиц среды, происходящими под действием термоупругой силы, можно пренебречь. Напряжения σ_r и $\sigma_{\theta\theta}$ пропорциональны тепловой мощности, передаваемой капилляру, а значит, при увеличении плотности выходного тока в пучке эти значения могут сильно возрасти. В стекле