ЖЭТФ, 2012, том 142, вып. 3 (9), стр. 603–620

НАПРАВЛЕННЫЙ ТРАНСПОРТ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ В ПЕРИОДИЧЕСКИ СУЖАЮЩЕЙСЯ ТРУБКЕ

Ю. А. Маховский[a*], *В. Ю. Зицерман*[b], *А. Е. Антипов*[c]

[a] *Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук 119991, Москва, Россия*

[b] *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия*

[c] *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 119992, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 ноября 2011 г.

Рассмотрена задача о движении броуновской частицы в периодически сужающейся трубке, обусловленном периодически меняющейся со временем продольной силой, в среднем равной нулю. Показано, что под действием этой силы частица дрейфует в направлении, обратном приложенной к ней постоянной силе нагрузки. При большой амплитуде движущей силы, когда обсуждаемый эффект максимален, получены аналитические решения для скорости дрейфа, силы остановки (величины нагрузки, приводящей к исчезновению эффекта) и эффективности преобразования энергии вносимых возмущений в направленное движение. В области своей применимости, простирающейся от нуля до асимптотически больших частот переключения силы (пропорциональных амплитуде движущей силы), эти решения находятся в хорошем согласии с результатами компьютерного моделирования, выполненного методом броуновской динамики.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно считается, что дрейф частиц обусловлен направленным действием либо стационарных макроскопических сил, либо градиентов температуры, химического потенциала и т. п. Сравнительно недавно на примере ряда явлений обнаружено, что происхождение дрейфа может быть и совершенно иным: в пространственно-периодических системах с нарушенной зеркальной симметрией направленное движение может возникать в результате регулярно или случайно повторяемых неравновесных возмущений (ratchet effect). Под неравновесными возмущениями понимаются порождаемые внешним источником процессы, разрушающие равновесие (детальный баланс): химические реакции, в которые вовлечены частицы; фотостимулированные конформационные переходы в них; воздействия случайных или регулярных электрических полей (с нулевым средним) и др. Эти возмущения следует отличать от равновесных флуктуаций (теплового шума), которые неизбежны благодаря контакту с окружающей средой, но сами по себе ни к какому дрейфу не приводят в соответствии со вторым началом термодинамики.

Транспорт частиц, индуцируемый флуктуациями, впервые обсуждался Смолуховским [1] и Фейнманом [2] в связи с анализом возможности «выпрямления» броуновского движения. В дальнейшем исследование проводилось в разных направлениях. Так, в физике твердого тела новый класс явлений переноса был детально изучен на примере появления постоянного электрического тока под воздействием высокочастотного электромагнитного поля в средах без центра симметрии (фотогальванический эффект) [3]. В последние годы основной акцент сместился в область механизмов внутриклеточного транспорта для прояснения принципов работы молекулярных белковых моторов и насосов, конвертирующих энергию биохимических реакций в направленное движение [4–7]. Наряду с фундаментальной значимостью эффекта для неравновесной статистической механики интерес к нему обусловлен также потребностью создания устройств, которые, будучи

*E-mail: yuam@ps.ac.ru

снабжены энергией, способны совершать контролируемое движение на наноуровне [8, 9].

Модели, обеспечивающие направленное движение броуновских частиц в периодическом, асимметричном окружении под действием неравновесных возмущений и теплового шума, получили название броуновских моторов [10]. Существует обширная литература, посвященная разработке и анализу таких моделей (см. работы [9, 11–15] и ссылки в них). Наряду со средней скоростью дрейфа каждый мотор характеризуется эффективностью преобразования энергии, вносимой возмущениями, в полезную работу [16–19], например, против силы нагрузки. Различают два основных класса броуновских моторов, свойства которых существенно различны [13, 20, 21]: в первом частица реагирует на флуктуации асимметричного окружения (flashing ratchets) [20, 22], а во втором она подвержена зависящей от времени (регулярно или случайно) силе с нулевым средним (rocking ratchets) [23–26].

Зеркальная (лево-правая) асимметрия в направлении периодичности (наряду с источником неравновесия) является необходимым условием реализации эффекта. Она может быть присуща системе априори благодаря нарушенной симметрии локального окружения, а может быть и привнесена возмущениями. Если зеркальная асимметрия обусловлена асимметрией взаимодействия частицы с окружением, транспорт частицы эффективно описывается в терминах диффузии в одномерном ($1D$) периодическом, асимметричном потенциале, возмущаемом источником неравновесия. Такая постановка обсуждается в большинстве публикаций [11–14]. Нарушение симметрии может быть обусловлено и чисто геометрическими факторами: периодически расположенными асимметричными рассеивателями [27, 28] или пространственными ограничениями, например, в трубках и каналах с периодически меняющимся вдоль длины сечением [25, 26, 29–31].

Вариация сечения вдоль оси трубки означает, что область доступного для диффундирующей частицы пространства (энтропия частицы) зависит от ее положения. В этих условиях транспорт частицы эффективно описывается в терминах диффузии в периодическом энтропийном потенциале [33, 34]. Поскольку описания диффузии и дрейфа под действием постоянной силы в энергетическом [35–37] и энтропийном [38, 39] потенциалах формально схожи, обычно полагают [38, 39], что движение частицы в этих случаях протекает сходным образом и, более того, аналогичны и характеристики направленного движения, индуцируемого возмущениями [24, 25, 32]. Это действительно так, когда геометрия трубки меняется плавно. Однако, если сечение трубки периодически меняется скачкообразно, аналогия между движением частицы в энергетическом $1D$-потенциале и трубке переменного сечения разрушается, поскольку определяющую роль играет диффузионная релаксация в поперечном направлении [40–44]. В этом случае, как показано в данной работе, механизм выпрямления за счет асимметрии энтропийного потенциала оказывается особенно эффективным.

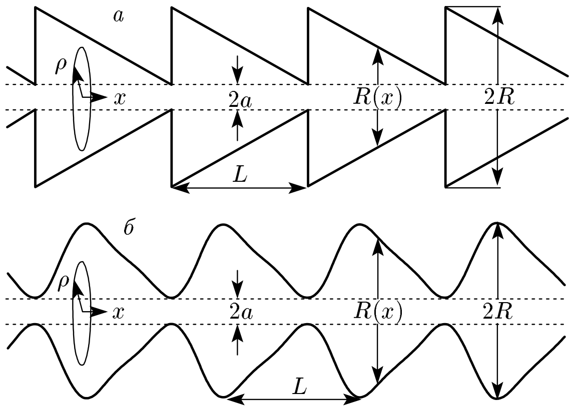

Рис. 1. Трубки с периодически меняющимся по длине сечением, обладающие асимметрией формы: a — периодически сужающаяся трубка; $б$ — трубка с плавно изменяющимся сечением. Обе трубки имеют одинаковый период L, наибольший R и наименьший a радиусы, но разную зависимость радиуса сечения вдоль их оси, $R(x)$. Пунктиром обозначена цилиндрическая трубка радиуса a

В качестве броуновского мотора рассмотрена частица, движущаяся в периодически сужающейся трубке (рис. 1a) под действием периодически меняющейся со временем силы $\mathbf{F}(t)$ и постоянной силы нагрузки $\mathbf{Q}$, направленных вдоль оси трубки. Геометрия трубки характеризуется ее периодом L, а также наибольшим R и наименьшим a радиусами. Переменная сила $\mathbf{F}(t)$ принимает два значения, $\mathbf{F}$ и $-\mathbf{F}$, мгновенно сменяющих друг друга через время τ, так что ее среднее значение за период 2τ равно нулю. Интерес представляют большие времена, когда смещение частицы значительно превышает период L и характеристики транспорта выходят на стационарные значения. Задача состоит в том, чтобы при заданных параметрах, определяющих геометрию трубки и внешнее воздействие, найти основные характеристики мотора: эффективную скорость дрейфа $v(F, \tau, Q)$, так называемую силу остановки (stopping force) Q_s, под которой понимается величина нагрузки, приводящая к исчезновению эффекта, $v(F, \tau, Q_s) = 0$, и эффективность η преобразования энергии, вносимой возмущениями, в направленное движение. Упрощенная версия модели, в которой отсутствует сила нагрузки, была недавно рассмотрена в кратком сообщении [45].

Привлекательность предложенной модели (рис. 1*a*) в ее простоте, необычных свойствах, эффективности, а также в возможности получить аналитические решения. Как показано ниже, несмотря на действие силы $\mathbf{Q}$, постоянно направленной налево, частица (при $Q < Q_s$) движется направо под влиянием в среднем ненаправленной силы $\mathbf{F}(t)$, поскольку в нелинейном по F режиме эффективная подвижность частицы в разных направлениях существенно различна. В отличие от других моделей, где асимметрия подвижности ведет себя немонотонно с ростом амплитуды возмущения F, обращаясь в нуль не только при малых, но и при больших значениях F, здесь она монотонно нарастает, принимая наибольшее значение при $F \to \infty$. Наш анализ сфокусирован на больших значениях F, при которых эффект максимален, а эффективная скорость дрейфа и сила остановки неограниченно растут с ростом F. Найденное решение для $v(F, \tau, Q)$ при $F \to \infty$ показывает, как, по мере роста частоты переключений и силы нагрузки, скорость дрейфа убывает от наибольшего значения при адиабатически медленном переключении ($\tau \to \infty$) и нулевой нагрузке ($Q = 0$) до нуля при больших частотах ($\tau \to 0$) и нагрузке, близкой к силе остановки ($Q \to Q_s$). Оно прекрасно согласуется с результатами компьютерного моделирования методом броуновской динамики. Это решение также позволило найти энергетические характеристики мотора в зависимости от силы нагрузки и выяснить условия, обеспечивающие его высокую эффективность. Подчеркнем, что до сих пор аналитические результаты для броуновских моторов (как в энергетической, так и в энтропийной постановке) удавалось получить лишь в адиабатическом пределе, а учет конечности времени переключения осуществлялся лишь численными методами.

В следующем разделе обсуждается броуновское движение под действием постоянной силы в трубках с периодически меняющимся сечением. Особое внимание обращается на то, что зависимость эффективной подвижности частицы от движущей силы в трубках различной геометрии оказывается качественно разной. Основные результаты статьи представлены в разд. 3 и 4. На основе фактов, приведенных в разд. 2, в разд. 3 предложена и проанализирована модель броуновского мотора (рис. 1*a*). Главный результат этого раздела — аналитическое выражение для скорости мотора как функции параметров, определяющих геометрию модели и внешнее воздействие, включая силу нагрузки. Раздел 4 посвящен обсуждению энергетических аспектов задачи. В нем, в частности, получена зависимость эффективности от силы нагрузки при различных значениях τ. Заключение (разд. 5) суммирует основные результаты работы и методы их получения.

2. ДРЕЙФ И ДИФФУЗИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОСТОЯННОЙ СИЛЫ В ТРУБКАХ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ

Задача о диффузии частицы в трубке переменного сечения возникает в разном контексте (см., например, работы [39, 43] и ссылки в них). Физику задачи определяет то обстоятельство, что область пространства, доступного для диффундирующей частицы, зависит от ее положения.

Рассмотрим точечную броуновскую частицу, движущуюся в трубке под действием постоянной силы $\mathbf{F}$, направленной вдоль оси x трубки $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$, где $\mathbf{e}_x$ — единичный вектор в направлении x. Радиус $R(x)$ трубки и ее сечение $A(x) = \pi R^2(x)$ периодически меняются вдоль x с периодом L. В режиме сильного трения динамика частицы описывается уравнением

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mu_0 F \mathbf{e}_x + \sqrt{2D_0}\, \xi(t) \qquad (1)$$

наряду с отражающими условиями на стенках трубки. Здесь $\mathbf{r}(t)$ — радиус-вектор положения частицы в момент времени t, μ_0 и D_0 — подвижность и коэффициент диффузии свободной броуновской частицы в отсутствие пространственных ограничений, причем $\mu_0 = \beta D_0$ (соотношение Эйнштейна), $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\xi(t)$ — стандартный гауссов белый $3D$-шум с нулевым средним и коррелятором

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(s) \rangle = \delta_{ij} \delta(t - s),$$

где $i, j = x, y, z$. Эквивалентное описание возникает при использовании плотности вероятности $P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|f)$, характеризующей положение частицы в момент времени t, где $\boldsymbol{\rho}$ — радиус-вектор в цилиндрической системе координат $(x, \boldsymbol{\rho})$, а безразмерный параметр $f = \beta F L$ определяет величину силы через отношение работы, совершаемой ею по перемещению частицы на период, к тепловой энергии.

Плотность вероятности $P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|f)$ удовлетворяет $3D$-уравнению диффузии с дрейфовым членом и условию обращения в нуль нормальной компоненты потока вероятности на стенках трубки.

В стационарном режиме транспорт частицы характеризуется ее эффективной подвижностью $\mu(f)$ и эффективным коэффициентом диффузии $D(f)$, которые определяются асимптотикой больших времен среднего (по траекториям и точкам старта) и дисперсии смещения частицы $\Delta x(t|f) = x(t|f) - x(0)$:

$$\mu(f) = \frac{1}{F} \lim_{t\to\infty} \left\langle \frac{\Delta x(t|f)}{t} \right\rangle, \tag{2}$$

$$D(f) = \frac{1}{F} \lim_{t\to\infty} \frac{\left\langle [\Delta x(t|f)]^2 \right\rangle - \langle \Delta x(t|f) \rangle^2}{2t}. \tag{3}$$

В цилиндрической трубке постоянного сечения благодаря разделению переменных задача, по существу, является одномерной. Как подвижность, так и коэффициент диффузии остаются равными своим невозмущенным значениям μ_0 и D_0 независимо от величины приложенной силы. Совершенно иная ситуация имеет место, когда сечение трубки меняется вдоль ее длины. Сложная геометрия не позволяет разделить переменные и найти точное решение. Значительного упрощения можно добиться при использовании огрубленного описания, приближенно сводящего задачу к одномерной.

2.1. Редукция к одномерной задаче

Имеются различные методы сведения задачи к одномерной. Наиболее известный из них, метод Фика – Джейкобса [33, 46], был впервые предложен для анализа чисто диффузионного транспорта, $F = 0$. В его основе переход от детального описания $3D$-диффузии в трубке, даваемого функцией $P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|0)$, к эффективному, характеризуемому $1D$-плотностью вероятности

$$P(x,t) \equiv P(x,t|0) = 2\pi \int\limits_{A(x)} P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|0)\, \rho\, d\rho.$$

При этом предполагается, что релаксация в поперечном направлении протекает мгновенно, обеспечивая однородность распределения частицы в любом сечении трубки, что позволяет записать

$$P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|0) \approx P(x,t)/A(x),$$

где $A(x)$ — площадь сечения трубки. Это предположение оправдано, если $R(x)$ меняется с x медленно, $|dR(x)/dx| \ll 1$. Основным результатом подхода является кинетическое уравнение для $P(x,t)$:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D_0 \left[A(x) \frac{\partial}{\partial x} \frac{P(x,t)}{A(x)} \right], \tag{4}$$

получившее название уравнение Фика – Джейкобса. Уравнение (4) представляет собой уравнение непрерывности, в котором поток вероятности определяется произведением градиента $3D$-плотности вероятности $P(x,t)/A(x)$ на площадь сечения $A(x)$.

Определив энтропийный потенциал соотношением

$$U(x) = -k_B T \ln \frac{A(x)}{A_{min}},$$

где A_{min} — минимальная площадь сечения трубки, нетрудно заметить, что уравнение (4) описывает диффузию в энтропийном потенциале точно так же, как уравнение Смолуховского – диффузию в обычном энергетическом $1D$-потенциале. Таким образом, в рамках подхода Фика – Джейкобса результаты, полученные ранее в теории броуновского движения в периодическом $1D$-потенциале, могут быть использованы применительно к рассматриваемой задаче. В частности, согласно известной формуле Лифсона – Джексона [47], эффективные коэффициент диффузии (3) и подвижность (2) при $F = 0$ равны

$$\frac{D(0)}{D_0} = L^2 \left(\int\limits_0^L e^{-\beta U(x)} dx \int\limits_0^L e^{\beta U(y)} dy \right)^{-1} = \left(\int\limits_0^1 A(\tilde{x})\, d\tilde{x} \int\limits_0^1 \frac{d\tilde{x}}{A(\tilde{x})} \right)^{-1}, \tag{5}$$

$$\mu(0) = \beta D(0),$$

где

$$\tilde{x} = \frac{x}{L}.$$

Из формулы (5), в силу неравенства Йенсена [48], следует, что $\mu(0) < \mu_0$ и $D(0) < D_0$, т. е. периодическая вариация сечения трубки всегда приводит к замедлению транспорта в ней.

Учет конечных времен поперечной релаксации приводит к модифицированному уравнению Фика – Джейкобса [33, 34, 49], отличающемуся от уравнения (4) тем, что вместо D_0 в нем фигурирует зависящий от положения частицы коэффициент диффузии $D(x)$, меньший D_0 при всех x. Использование модифицированного уравнения существенно расширяет область применимости подхода Фика – Джейкобса. Условием его применимости является выполнение неравенства $|dR(x)/dx| \le 1$.

В случае, когда $F \neq 0$, модифицированный подход Фика–Джейкобса приводит к уравнению

$$\frac{\partial P(x,t|f)}{\partial t} = = \frac{\partial}{\partial x}\left\{D(x)\left[\frac{\partial P(x,t|f)}{\partial x} + \beta V'(x)P(x,t|f)\right]\right\}, \quad (6)$$

где свободная энергия

$$V(x) = -Fx - k_BT\ln\left[A(x)/A_{min}\right]$$

наряду с энтропийным содержит энергетический вклад. Имеет место формальная аналогия этого уравнения с уравнением Смолуховского, описывающим дрейф и диффузию в периодическом энергетическом $1D$-потенциале. Это означает, что результаты, полученные ранее в случае чисто энергетического потенциала [35–37], распространяются и на рассматриваемую задачу. В частности, эффективная подвижность может быть представлена формулой [38, 39]

$$\frac{\mu(f)}{\mu_0} = (1-e^{-f})\left(f\int_0^1 I(\tilde{x};f)\,d\tilde{x}\right)^{-1}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{L},$$
$$I(\tilde{x};f) = \frac{D_0}{D(\tilde{x})}\int_{\tilde{x}-1}^{\tilde{x}} \exp\left[f(\tilde{y}-\tilde{x})\right]\frac{A(\tilde{y})}{A(\tilde{x})}\,d\tilde{y}, \quad (7)$$

аналогичной известной формуле Стратоновича [35]. Сходным образом (по аналогии с результатом работы [37]) получена формула и для эффективного коэффициента диффузии $D(f)$ [38, 39]. Наряду с формальным сходством описаний транспорта в энергетическом и энтропийном потенциалах, между ними имеется и существенное различие. В первом случае сила и температура — независимые параметры, тогда как во втором процесс характеризуется единственным параметром $f = \beta FL$ (см., например, формулу (7)). Тот факт, что динамика частицы в трубке демонстрирует однопараметрический скэйлинг, присущ исходной $3D$-задаче, а не является результатом приближения [38, 39]. Сравнение с данными компьютерного моделирования показало, что обобщенный подход Фика–Джейкобса правильно передает поведение транспортных коэффициентов при $f \lesssim 20$ и $|dR(x)/dx| \leq 1$. При больших значениях f более адекватным оказывается уравнение (6) с $D(x) = D_0$ [38, 39].

Подход Фика–Джейкобса непригоден, когда поперечное сечение трубки периодически меняется скачкообразно. В такой ситуации задачу удобно сформулировать в терминах случайного блуждания между соседними узлами $1D$-решетки [50–52]. При этом игнорируются детали движения частицы в элементарной ячейке трубки, и дело сводится к нахождению распределения времен перехода между соседними ячейками. В общем случае аналитическая реализация такого подхода вряд ли возможна, однако при очень малых значениях f распределение времен перехода удается найти, используя метод гомогенизации граничных условий [53–55]. Что же касается очень больших значений f, соответствующий подход предложен в недавних работах [42, 43].

Основываясь на методах и результатах, изложенных выше, в следующем разделе мы обсуждаем зависимость $\mu(f)$ в трубках различной геометрии. Она оказывается качественно разной. В данной статье наиболее важно, как асимметрия трубки проявляется в асимметрии подвижности при разных значениях f.

2.2. Влияние формы трубки на эффективную подвижность частиц

Вначале рассмотрим трубку, сечение которой меняется плавно (рис. 1*б*). В этом случае редукция к $1D$-описанию методом Фика–Джейкобса (с оговорками, сделанными выше) оправдана и, следовательно, поведение функции $\mu(f)$ аналогично тому, которое известно в задаче о диффузии со сносом в энергетическом потенциале [35–37]. Как следует из формулы Стратоновича или аналогичной ей формулы (7), независимо от направления силы эффективная подвижность растет с ростом $|f|$ от наименьшего значения, определяемого формулой (5), до наибольшего, равного μ_0 (рис. 2*б*). Тот факт, что $\mu(\pm\infty) = \mu_0 > \mu(0)$ имеет простое объяснение. Эффект приложенной силы нивелирует воздействие потенциала, сводя его к пренебрежимо малому возмущению при больших значениях $|f|$, когда $|F|L$ существенно превышает высоту барьеров. В трубке с плавно меняющимся сечением столкновения со стенками в сочетании с внешней силой фокусируют частицу в цилиндре, проходящем через ее минимальные сечения (см. рис. 1*б*), так что при $|f| \to \infty$ частица не ощущает пространственных ограничений [42]. Эффективный коэффициент диффузии частицы в такой трубке (как и в энергетическом потенциале [37]) ведет себя немонотонно [38, 39]: с ростом силы вначале он растет, достигая максимального значения, превышающего D_0, а затем убывает, приближаясь к D_0 сверху при $|f| \to \infty$. Все это свидетельствует о том, что большие силы подавляют влияние пространственных ограничений на движение частицы.

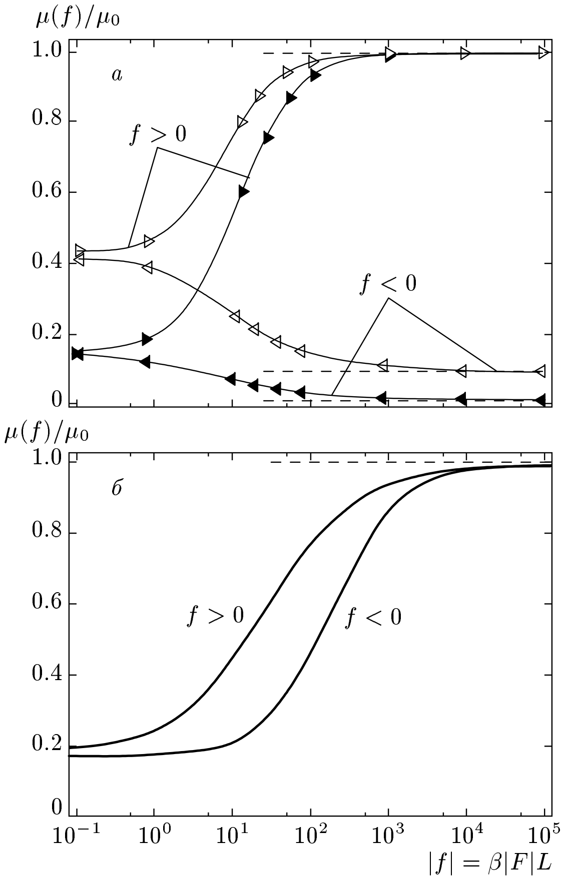

Рис. 2. Зависимости эффективной подвижности μ частицы, движущейся в трубках, показанных на рис. 1, от величины и направления движущей силы $f = \beta FL$. *а*) Символами представлены результаты, полученные на основании данных компьютерного моделирования движения частицы в трубке, показанной на рис. 1*а*: треугольники с вершиной, направленной направо (налево), отвечают положительным (отрицательным) значениям f; темными (светлыми) значками представлены результаты, полученные при $a/R = 0.1$ ($a/R = 0.3$). Сглаживающие кривые приведены для удобства. Штрихами даны асимптотические значения подвижности при $f \to \pm\infty$ (см. формулу (9)). *б*) Иллюстрация типичного поведения зависимости $\mu(f)$ при разных направлениях движущей силы в случае, когда частица движется в трубке, показанной на рис. 1*б*

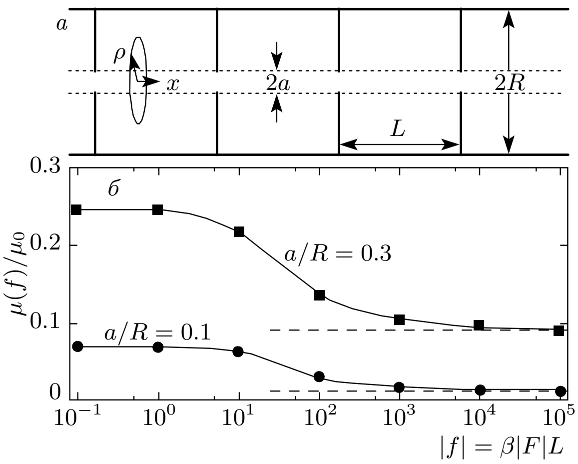

Рис. 3. *а*) Цилиндрическая трубка радиуса R, содержащая периодически расположенные (с периодом L) бесконечно тонкие перегородки с круглым отверстием радиуса a в центре каждой из них. Пунктиром обозначена цилиндрическая трубка радиуса a. *б*) Зависимость эффективной подвижности μ частицы, движущейся в трубке, показанной на рис. 3*а*, от величины движущей силы $f = \beta FL$. Символами представлены результаты, полученные на основании данных компьютерного моделирования: кружки (квадраты) отвечают значениям $a/R = 0.1$ ($a/R = 0.3$). Сглаживающие кривые приведены для удобства. Штрихами даны асимптотические значения подвижности при $f \to \infty$

Как следует из формулы (7) и данных моделирования [32], асимметрия трубки (или энергетического потенциала) проявляет себя не только в зависимости эффективной подвижности от величины силы, но и от ее направления. Отличие $\mu(f)$ от $\mu(-f)$, $\Delta\mu(|f|) = \mu(f) - \mu(-f)$, пренебрежимо мало в режиме линейного отклика, $|f| \ll 1$, независимо от формы трубки. В трубках с плавно меняющимся сечением (как и в случае энергетического потенциала) оно также обращается в нуль при $|f| \to \infty$. Как показано на рис. 2*б*, величина $\Delta\mu(|f|)$ заметно отлична от нуля лишь при промежуточных значениях $|f|$, достигая в максимуме (в зависимости от деталей геометрии) значений порядка нескольких десятых μ_0.

Совершенно иная картина имеет место, когда сечение трубки меняется скачкообразно. Простейший пример, иллюстрирующий этот факт для симметричных структур, приведен в работах [41–43], где рассмотрена диффузия с дрейфом в цилиндрической трубке радиуса R с периодически расположенными бесконечно тонкими перегородками, в центрах которых имеются круглые отверстия радиуса a (рис. 3*а*). На рис. 3*б* представлена зависимость $\mu(f)$ в такой трубке, полученная на основании данных компьютерного моделирования (детали изложены в Приложении А). Эта зависимость качественно отличается от той, которая наблюдалась в трубке с плавно меняющейся формой (см. рис. 2*б*): с ростом силы подвижность частицы не растет, а, наоборот, монотонно убывает. В такой трубке совместное воздействие силы и столкновений со стенками не приводит к локализации частицы в центральной области трубки, поскольку радиальное распределение частицы в ней,

$$P_{2D}(\boldsymbol{\rho}) = \int_{-\infty}^{\infty} P_{3D}(x, \boldsymbol{\rho}; t|f)\, dx = \\ = P_{2D}^{eq}(\boldsymbol{\rho}) = (\pi R^2)^{-1}, \quad (8)$$

остается однородным при любом значении f. Благодаря приложенной силе, продольное распределение частицы в каждой ячейке становится неоднородным, поскольку она повышает вероятность обнаружения частицы вблизи той перегородки, к которой ее подталкивает. Тормозящий эффект перегородки нарастает по мере роста силы, приводя к снижению подвижности.

Частица может находиться либо в цилиндре радиуса a, соединяющим отверстия (см. рис. 3*а*), либо в узком слое толщиной L/f вблизи стенки. При $f \gg 1$ в первом случае она, не испытывая ограничений, движется вдоль оси трубки, т. е. находится в подвижном состоянии, а во втором, будучи прижатой к стенке, находится в неподвижном состоянии. Переходы из одного состояния в другое происходят за счет радиальной диффузии, что исключает аналогию с движением частицы в $1D$-потенциале. Подвижность частицы при $f \to \infty$ определяется не зависящей от f вероятностью ее пребывания в подвижном состоянии, которая с учетом формулы (8) равна a^2/R^2. Следовательно, $\mu(f) \to \mu_0 a^2/R^2$ при $f \to \infty$ [41–43] в хорошем согласии с результатами моделирования, представленными на рис. 3*а*. Заметим, что и зависимость $D(f)$ в трубке, показанной на рис. 3*а*, совершенно иная, чем в трубке с плавно меняющейся формой (как на рис. 1*б*): коэффициент диффузии неограниченно растет с ростом силы, $D(f) \propto f^2$ при $f \to \infty$ [42, 43][1)]. Таким образом, в зависимости от того, резко или плавно меняется форма трубки, влияние пространственных ограничений на диффузионный транспорт может нарастать или подавляться с ростом приложенной силы [44][2)].

[1)] Отметим, что асимптотики эффективной подвижности и эффективного коэффициента диффузии при $f \to \infty$ не зависят от расстояния L между перегородками. Это означает, что при больших f результаты работ [42, 43] справедливы при произвольном (апериодическом) расположении перегородок.

[2)] В работе [44] показано, что возможны и промежуточные варианты, когда форма трубки меняется с большой, но конечной скоростью. Тогда с ростом силы эффективная подвижность частицы вначале убывает, но затем снова возрастает до μ_0 при $f \to \infty$.

Учитывая изложенное выше, перейдем к основной задаче этого раздела — анализу движения частицы под действием постоянной силы в периодически сужающейся трубке (см. рис. 1*а*). Здесь имеет место пространственная асимметрия (как в трубке на рис. 1*б*) наряду со скачкообразным изменением формы (как в трубке на рис. 3*а*). Это определяет поведение представленной на рис. 2*а* зависимости $\mu(f)$ при разных направлениях силы. При $f > 0$ подвижность монотонно растет с ростом силы и стремится к μ_0, когда $f \to +\infty$. Как и в трубке с плавно меняющимся сечением (см. рис. 1*б*), внешняя сила, благодаря столкновениям частицы со стенками, фокусирует ее в цилиндре радиуса a, так что при достаточно больших f она не ощущает наличия пространственных ограничений (ср. с кривыми на рис. 2*б*). Если же $f < 0$, то, как видно из рис. 2*а*, подвижность частицы монотонно убывает с ростом силы аналогично тому, как это происходит в трубке с перегородками (ср. с кривыми на рис. 3*б*). При больших f, когда частица плотно прижата к стенке, такая аналогия становится количественно точной, о чем свидетельствует совпадение асимптотических значений $\mu(f)$ на рис. 2*а* и 3*б*. Таким образом, асимметрия периодически сужающейся трубки приводит к асимметрии подвижности частицы, которая наиболее ярко выражена при больших значениях силы:

$$\mu(+\infty) = \mu_0, \quad \mu(-\infty) = \mu_0 a^2/R^2. \qquad (9)$$

Как видно на рис. 2*а*, выход на асимптотику происходит при $f \approx 100$, если сила положительна, и при $|f| \approx 1000$, когда она отрицательна.

Анизотропия подвижности, возникающая благодаря асимметрии окружения, указывает на возможность генерации направленного движения под действием зависящей от времени силы с нулевым средним. Схема, реализующая такое выпрямление, была впервые предложена в работах [23, 24], где рассматривалась диффузия в асимметричном периодическом энергетическом $1D$-потенциале. Затем она обсуждалась применительно к плавно меняющемуся периодическому энтропийному потенциалу [25, 26, 32]. В следующих разделах эта идея обсуждается в ситуации, когда асимметричный энтропийный потенциал периодически меняется резко. В ранее предложенных моделях (схематически представленных на рис. 1*б*) величина $\Delta\mu(|f|)/\mu_0$, характеризующая асимметрию подвижности, сравнительно мала и обращается в нуль при больших значениях $|f|$ (см. рис. 2*б*). Привлекательность модели, представленной на рис. 1*а*, в том, что отношение $\Delta\mu(|f|)/\mu_0$ достигает значений, близких к единице,

$\Delta\mu_{max}/\mu_0 = 1-(a/R)^2$, при достаточно больших $|f|$ и малых a/R, обеспечивая тем самым высокую скорость и эффективность работы предлагаемого броуновского мотора.

3. СКОРОСТЬ ДРЕЙФА ЧАСТИЦЫ, ИНДУЦИРУЕМОГО ПЕРИОДИЧЕСКИ МЕНЯЮЩЕЙСЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ СИЛОЙ

3.1. Формулировка задачи

Рассмотрим точечную броуновскую частицу, движущуюся в трубке, показанной на рис. 1*а*, под действием переменной силы $\mathbf{F}(t)$ и постоянной силы нагрузки $\mathbf{Q} = -Q\mathbf{e}_x$, направленных вдоль оси x трубки. Переменная сила принимает два значения, $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$ и $-\mathbf{F} = -F\mathbf{e}_x$; продолжительность каждого периода равна τ, так что среднее значение силы за период 2τ равно нулю. Динамика частицы в режиме сильного трения описывается уравнением

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mu_0\left[\mathbf{F}(t) - Q\mathbf{e}_x\right] + \sqrt{2D_0}\,\boldsymbol{\xi}(t), \tag{10}$$

наряду с отражающими условиями на стенках трубки (обозначения в формуле (10) такие же, как в аналогичной формуле (1)). Несмотря на действие силы $\mathbf{Q}$, постоянно толкающей частицу налево, она (при значениях Q, меньших силы остановки Q_s) дрейфует направо под влиянием в среднем ненаправленной силы $\mathbf{F}(t)$, благодаря асимметрии эффективной подвижности. Задача состоит в том, чтобы при заданных параметрах, определяющих геометрию модели и внешнее воздействие, найти эффективную скорость дрейфа в установившемся режиме, $v(F,\tau;Q)$. Анализ сфокусирован на область больших амплитуд F, где асимметрия подвижности выражена наиболее ярко (см. рис. 2*а*) и обсуждаемый эффект максимален. Заметим, что $F-Q_s>0$ при таких значениях F.

В течение положительного полупериода изменения $\mathbf{F}(t)$ на частицу действует результирующая сила $F-Q$ и частица (в установившемся режиме) смещается направо в среднем на $\langle\Delta x[\tau; f(1-q)]\rangle$, где $f=\beta FL$ и $q=Q/F$. Аналогично, во втором полупериоде частица под действием силы $-(F+Q)$ смещается налево в среднем на $\langle\Delta x[\tau; -f(1+q)]\rangle$. Следовательно, интересующая нас эффективная скорость дрейфа равна

$$v(f,\tau;q) = \frac{\langle\Delta x[\tau; f(1-q)]\rangle - \langle\Delta x[\tau; -f(1+q)]\rangle}{2\tau}. \tag{11}$$

3.2. Адиабатический предел

В адиабатическом пределе, $\tau\to\infty$, смещения частицы за полупериод легко находятся. В этом случае релаксация одного неравновесного стационарного состояния, отвечающего постоянной силе, скажем, направленной направо, в другое, которое возникает под действием силы, направленной налево, и наоборот, протекает практически мгновенно (по сравнению с τ). Поскольку рассматриваются амплитуды $F\to\infty$ и, более того, разность $F-Q$ также предполагается достаточно большой при любых $Q<Q_s$, то при $\tau\to\infty$

$$\begin{aligned} \langle\Delta x[\tau; f(1-q)]\rangle_{ad} &= \mu(+\infty)(F-Q)\tau,\\ \langle\Delta x[\tau; -f(1+q)]\rangle_{ad} &= \mu(-\infty)(F+Q)\tau. \end{aligned} \tag{12}$$

Таким образом, для скорости дрейфа в адиабатическом режиме имеем

$$\begin{aligned} v_{ad}(F;Q) &\equiv v(F,\infty;Q) = \\ &= v_{ad,0}(F)\left[1 - Q/Q_{s,ad}(F)\right]. \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{gathered} v_{ad,0}(F) = \mu_0\frac{\alpha}{1+\alpha}F, \quad Q_{s,ad}(F) = \alpha F,\\ \alpha = \frac{\mu(+\infty)-\mu(-\infty)}{\mu(+\infty)+\mu(-\infty)} = \frac{1-a^2/R^2}{1+a^2/R^2}, \end{gathered} \tag{14}$$

имеющие ясный физический смысл. Величина $v_{ad,0}(F)$ есть скорость движения частицы в адиабатическом режиме при нулевой нагрузке. Будучи линейной по F, она неограниченно нарастает с ростом амплитуды движущей силы, т.е. ведет себя совершенно иначе, чем в ранее предложенных моделях броуновских моторов, индуцируемых осциллирующей силой [23–25]. Сила остановки в адиабатическом режиме, $Q_{s,ad}(F)$, также линейно растет с F. Параметр α количественно характеризует асимметрию подвижности при $F\to\infty$. Если значение F велико, то даже при высокой асимметрии разность $F - Q_{s,ad}(F) = F(1-\alpha)$ оказывается достаточно большой, чтобы считать, что $\mu[f(1-\alpha)] = \mu(+\infty)$. Например, при $a/R = 0.1$ и $\alpha\approx 0.98$ это выполняется при $f > 5\cdot 10^3$ (см. рис. 2*а*).

Формула (13) описывает зависимость «скорость–нагрузка», которая является одной из важнейших характеристик любого мотора. Отличительной особенностью этой зависимости является то, что как скорость дрейфа, так и сила остановки могут быть сколь угодно велики, тогда как обычно они ограничены сверху.

3.3. Иерархия характерных времен

Здесь и далее обсуждается ситуация с конечными временами τ переключения силы. Соответствующий анализ предполагает сравнение τ с другими характерными временами задачи. В условиях, обеспечивающих высокий уровень выпрямления внешнего сигнала (большие амплитуды F в сочетании с малым отношением a/R), имеет место существенное различие временных масштабов релаксационных процессов.

Масштаб R^2/D_0 характеризует радиальную релаксацию точечной неоднородности по наибольшему сечению трубки. Именно он определяет границы применимости адиабатического приближения. Значительно меньшее время, a^2/D_0, определяет диффузионное рассасывание по сечению неоднородности размером порядка a. Оба указанных масштаба не зависят от амплитуды движущей силы и величины нагрузки. Наименьший из существенных временных масштабов — время пролета элементарной ячейки трубки частицей, движущейся под действием положительно направленной силы. При наличии нагрузки эта величина равна

$$t_d = \frac{L}{\mu_0(F-Q)} = \frac{L^2/D_0}{f(1-q)},$$

что при $f \gg 1$ на много порядков меньше остальных характерных времен задачи. Временной масштаб t_d определяет границы применимости предлагаемого подхода.

Обсудим теперь протекание релаксационных процессов, обусловленных переключением направления силы. В начале положительного полупериода силы $\mathbf{F}(t)$ радиальное распределение частицы в трубке однородно по сечению радиуса R (см. формулу (8)). Далее, благодаря совместному воздействию силы и столкновений со стенками, распределение частицы быстро, за времена порядка t_d, фокусируется в пределах цилиндра радиуса a. Это означает, что если $\tau \gg t_d$, то положительный полупериод частица в основном проводит в подвижном состоянии (в полном согласии с данными компьютерного моделирования). Наоборот, в начале отрицательного полупериода действия силы $\mathbf{F}(t)$ частица находится в подвижном состоянии, $\rho < a$. Затем медленно, благодаря радиальной диффузии, она переходит в новое неравновесное стационарное состояние, характеризуемое однородным распределением по сечению радиуса R. При этом заселенность подвижного состояния, $p(t)$, снижается от единицы при $t = 0$ до a^2/R^2 при $t \to \infty$. Характерное время этого процесса, t_{rel} не зависит от силы, и поэтому $t_{rel} \gg t_d$. Таким образом, асимметрия формы трубки проявляется не только в асимметрии подвижности, но и в асимметрии времен релаксации. Если первая наиболее ярко выражена при малых значениях отношения a/R, то вторая, наоборот, ослабевает в этих условиях. Дело в том, что (как показано ниже) $t_{rel} \to 0$ при $a \to 0$, а время t_d от a не зависит, поэтому неравенство $t_{rel} \gg t_d$ теряет силу.

Исходя из этой качественной картины и следуя определению (11), получим выражение для скорости дрейфа, зависящей от частоты переключения, которое оправдано вплоть до асимптотически малых времен $\tau \sim t_d$. Среднее смещение частицы за положительный полупериод действия силы $\mathbf{F}(t)$, как и в адиабатическом режиме (см. формулу (12)), равно $\mu_0(F-Q)\tau$, в то время как эта же величина за отрицательный полупериод дается выражением $\mu_0(F+Q)\int_0^\tau p(t)\,dt$. Следовательно, интересующая нас скорость дрейфа может быть представлена в виде

$$v(F,\tau;Q) = v_0(F,\tau)\left[1 - Q/Q_s(F,\tau)\right], \tag{15}$$

где $v_0(F,\tau)$ — зависящая от τ скорость дрейфа частицы в отсутствие нагрузки,

$$v_0(F,\tau) \equiv v(F,\tau;0) = \frac{1}{2}\mu_0 F\left[1 - \int\limits_0^\tau \frac{p(t)\,dt}{\tau}\right], \tag{16}$$

и $Q_s(F,\tau)$ — зависящая от частоты переключений сила остановки,

$$Q_s(F,\tau) = F\frac{1 - \int\limits_0^\tau p(t)\,dt/\tau}{1 + \int\limits_0^\tau p(t)\,dt/\tau}. \tag{17}$$

Таким образом, задача сводится к отысканию величин $v_0(F,\tau)$ и $Q_s(F,\tau)$.

3.4. Релаксационная функция

Полученные формулы принимают более простой вид, если для описания кинетики затухания заселенности $p(t)$ подвижного состояния воспользоваться релаксационной функцией $\mathfrak{R}(t)$, характеризующей релаксацию начального состояния, $p(0) = 1$, к равновесному значению, $p_{eq} = p(\infty) = (a/R)^2$:

$$p(t) = p_{eq} + (1 - p_{eq})\mathfrak{R}(t). \tag{18}$$

Функция

$$\mathfrak{R}(t) = \frac{p(t) - p_{eq}}{1 - p_{eq}} = \frac{p(t) - a^2/R^2}{1 - a^2/R^2} \qquad (19)$$

монотонно убывает со временем от единицы при $t = 0$ до нуля при $t \to \infty$. Интегральной характеристикой процесса служит время релаксации

$$t_{rel} = \int_0^\infty \mathfrak{R}(t)\, dt. \qquad (20)$$

Воспользовавшись формулой (18), величины $v_0(F,\tau)$ (16) и $Q_s(F,\tau)$ (17) удобно записать в факторизованном виде:

$$\begin{aligned} v_0(F,\tau) &= v_{ad,0}(F)\varphi(\tau), \\ Q_s(F,\tau) &= Q_{s,ad}(F)\tilde{\varphi}(\tau), \end{aligned} \qquad (21)$$

где $v_{ad,0}(F)$ — скорость дрейфа частицы в адиабатическом режиме при нулевой нагрузке, $Q_{s,ad}(F)$ — сила остановки в адиабатическом режиме. Функции

$$\varphi(\tau) = 1 - \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathfrak{R}(t)\, dt, \quad \tilde{\varphi}(\tau) = \frac{\varphi(\tau)}{1+\alpha-\alpha\varphi(\tau)}, \qquad (22)$$

где α — параметр, характеризующий асимметрию подвижности, определены формулами (14), описывают затухание скорости дрейфа при нулевой нагрузке и силы остановки с ростом частоты переключений. Как $\varphi(\tau)$, так и $\tilde{\varphi}(\tau)$ монотонно возрастают от нуля до единицы по мере роста τ от 0 до ∞. Из формул (21) следует, что функции $v_0(F,\tau)$ и $Q_s(F,\tau)$ ведут себя с изменением F точно так же, как в адиабатическом режиме: они линейны по амплитуде силы и принимают сколь угодно большие значения при $F \to \infty$. Зависимости этих величин от τ, по существу, определяются функцией $\varphi(\tau)$, анализу которой посвящен следующий раздел. Объединив формулы (14), (15) и (21), получим для скорости дрейфа частицы выражение, в котором вклад каждого из определяющих процесс факторов указан в явном виде:

$$v(F,\tau;Q) = \mu_0 \frac{\alpha}{1+\alpha} F\varphi(\tau)\left[1 - \frac{Q}{\alpha F \tilde{\varphi}(\tau)}\right]. \qquad (23)$$

3.5. Вычисление $\varphi(\tau)$

Поведение функции $\varphi(\tau)$ в предельных случаях больших и малых τ понятно без всяких расчетов. При $\tau \to \infty$ релаксация протекает мгновенно и $\varphi(\tau) \to 1$, как и должно быть. Более того, при $\tau \gg t_{rel}$ функция $\mathfrak{R}(t)$ быстро затухает и можно считать, что $\int_0^\tau \mathfrak{R}(t)\, dt \approx t_{rel}$, т. е.

$$\varphi(\tau) \approx 1 - t_{rel}/\tau. \qquad (24)$$

Если же время τ очень мало, то можно считать, что $\mathfrak{R}(t) \approx 1$ и, следовательно, $\varphi(\tau) \to 0$ при $\tau \to 0$. Таким образом, и скорость дрейфа, и сила остановки обращаются в нуль при высоких частотах переключения. Чтобы найти $\varphi(\tau)$ точно, нужно решить задачу о $2D$-диффузии в круге радиуса R с условием отражения на границе и начальным условием, отвечающим равномерному распределению в пределах малого круга радиуса a.

Рассмотрим частицу, диффундирующую в круге радиуса R, точка старта которой находится на расстоянии $\rho_0 < R$ от его центра. Плотность вероятности обнаружить эту частицу на расстоянии $\rho < R$ в момент времени t, $G(\rho, t|\rho_0)$, удобно записать, воспользовавшись собственными функциями ψ_n и собственными значениями ν_n $(n = 0, 1, 2, \dots)$ $2D$-оператора Лапласа, удовлетворяющими уравнениям

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho \frac{d\psi_n}{d\rho}\right) = -\nu_n \psi_n, \quad \left.\frac{d\psi_n}{d\rho}\right|_{\rho=R} = 0. \qquad (25)$$

Нулевому собственному значению, $\nu_0 = 0$, отвечает константа $\psi_0(\rho) = (\pi R^2)^{-1}$, которая соответствует равновесному, однородному распределению. Остальным собственным значениям, $\nu_n = \varepsilon_n^2/R^2$ $(n \ge 1)$, отвечают собственные функции $J_0(\varepsilon_n \rho/R)$, где $J_k(z)$ — функция Бесселя первого рода порядка k, а ε_n — n-й положительный корень уравнения $J_1(\varepsilon_n) = 0$, определяемый для любого n с хорошей точностью приближенной формулой [56]

$$\varepsilon_n \approx \pi \left[n + 0.25 - \frac{0.151982}{4n+1} + \frac{0.015399}{(4n+1)^3} - \right. \\ \left. - \frac{0.245270}{(4n+1)^5} + \frac{1.68637}{(4n+1)^7}\right]. \qquad (26)$$

В этих терминах спектральное разложение пропагатора $G(\rho, t|\rho_0)$ имеет вид

$$G(\rho, t|\rho_0) = \frac{1}{\pi R^2}\left[1 + \sum_{n=1}^\infty \frac{J_0(\varepsilon_n \rho/R) J_0(\varepsilon_n \rho_0/R)}{J_0^2(\varepsilon_n)} \times \right. \\ \left. \times \exp\left(-\varepsilon_n^2 \frac{D_0 t}{R^2}\right)\right]. \qquad (27)$$

Поскольку $p(t)$ есть вероятность обнаружения частицы в круге радиуса a в момент времени t при условии, что точки ее старта равномерно распределены в этом круге, то

$$p(t)=\frac{4\pi}{a^2}\int\limits_0^a\int\limits_0^a G(\rho,t|\rho_0)\rho\rho_0\,d\rho\,d\rho_0.$$

Формула (27) позволяет записать $p(t)$ в виде

$$p(t)=\frac{a^2}{R^2}+4\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n a/R)}{\varepsilon_n^2 J_0^2(\varepsilon_n)}\times \exp\left(-\varepsilon_n^2\frac{D_0 t}{R^2}\right). \quad (28)$$

Далее находим релаксационную функцию $\mathfrak{R}(t)$, определяемую формулой (19):

$$\mathfrak{R}(t)=\frac{4}{1-a^2/R^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n a/R)}{\varepsilon_n^2 J_0^2(\varepsilon_n)}\times \exp\left(-\varepsilon_n^2\frac{D_0 t}{R^2}\right). \quad (29)$$

Как и должно быть, $p(\infty)$ есть равновесная заселенность, $p_{eq}=a^2/R^2$ и $\mathfrak{R}(\infty)=0$. С другой стороны, $p(0)=1$ и $\mathfrak{R}(0)=1$ в силу соотношения

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n x)}{\varepsilon_n^2 J_0^2(\varepsilon_n)}=\frac{1-x^2}{4},\quad 0<x\le 1. \quad (30)$$

Наконец, подставляя выражение (29) для $\mathfrak{R}(t)$ в первую из формул (22) и выполнив интегрирование, приходим к основному результату этого раздела:

$$\varphi(\tau)=1-\frac{4}{1-a^2/R^2}\frac{R^2}{D_0\tau}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n a/R)}{\varepsilon_n^4 J_0^2(\varepsilon_n)}\times \left[1-\exp\left(-\varepsilon_n^2\frac{D_0\tau}{R^2}\right)\right]. \quad (31)$$

Монотонное убывание скорости с частотой возмущения (от наибольшего значения в адиабатически медленном режиме до нуля при больших частотах) присуще любому броуновскому мотору, дрейф которого обусловлен флуктуирующей силой (rocking ratchets) [23–26]. Формула (31) определяет эту зависимость аналитически (до сих пор она изучалась лишь численными методами). Отметим, что скорость моторов, функционирующих за счет флуктуаций потенциала (flashing ratchets) [20, 22], ведет себя немонотонно с ростом частоты, обращаясь в нуль в низко- и высокочастотном пределах.

3.6. Низко- и высокочастотные пределы

Формулы (23) и (31) определяют зависимость скорости дрейфа от параметров, характеризующих геометрию трубки и внешнее воздействие, включая силу нагрузки, т. е. решают поставленную задачу. Проанализируем их более подробно, сфокусировав основное внимание на эффекте частоты переключений.

Вначале найдем время t_{rel}. Из определения (20) и выражения (29) следует, что

$$t_{rel}=\frac{4}{1-a^2/R^2}\frac{R^2}{D_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n a/R)}{\varepsilon_n^4 J_0^2(\varepsilon_n)}. \quad (32)$$

Суммирование ряда (32) (основные этапы которого приведены в Приложении В) дает[3)]

$$t_{rel}=\frac{a^2}{4R^2}\left[\frac{\ln(R^2/a^2)}{1-a^2/R^2}-1\right]\frac{R^2}{D_0}. \quad (33)$$

Из полученных формул видно, что t_{rel} обращается в нуль при $a=0$ и $a=R$, достигая максимума между этими двумя значениями. В диапазоне $0.03\le a/R\le 0.3$ время релаксации совпадает по порядку величины с a^2/D_0. Именно эта область значений a/R наиболее удобна для наблюдения эффекта, поскольку соответствующие отношения a/R достаточно малы, чтобы обеспечить высокую асимметрию подвижности, но в то же время и достаточно велики, чтобы имела место асимметрия времен релаксации, определяемая неравенством $t_{rel}\gg t_d$. Так как при этом $t_{rel}\approx a^2/D_0$, из последнего неравенства и определения t_d следует условие на амплитуду силы, которая требуется для оптимальной реализации эффекта:

$$f(1-q)\gg (L/a)^2. \quad (34)$$

Обсудим зависимость $\varphi(\tau)$ (31). Начнем с низких частот переключения силы. Если время τ достаточно велико, $\tau>t_\infty=\varepsilon_1^{-2}R^2/D_0$, то членами, содержащими экспоненты в формуле (31), можно пренебречь и в силу соотношения (32) она сводится к формуле (24). Время $t_\infty\gg t_{rel}$ дает оценку границы перехода к адиабатическому режиму. В случае медленных переключений величина $\tilde{\varphi}(\tau)$, определяемая формулой (22), может быть записана в виде

$$\tilde{\varphi}(\tau)\approx\frac{1-t_{rel}/\tau}{1+\alpha t_{rel}/\tau}\approx 1-(1+\alpha)\frac{t_{rel}}{\tau}. \quad (35)$$

3) Отметим, что формула (33) получается и иным методом, основанным на анализе неравновесной части пропагатора (27), как это показано в работе [57].

Сравнение формул (22) и (35) показывает, что сила остановки несколько более чувствительна к неадибатичности процесса, чем скорость при нулевой нагрузке.

Обсуждение обратного предела (высоких частот переключения силы) удобно начать с анализа поведения производной по времени вероятности $p(t)$ (28) при малых t:

$$-\frac{dp(t)}{dt} = 4\frac{D_0}{R^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_1^2(\varepsilon_n a/R)}{J_0^2(\varepsilon_n)}\exp\left(-\varepsilon_n^2\frac{D_0 t}{R^2}\right). \quad (36)$$

Ключевым является тот факт, что предел $t \to 0$ эквивалентен пределу $R \to \infty$ (при фиксированном отношении a/R). Он означает, что спектр собственных значений $\nu_n = \varepsilon_n^2/R^2$ квазинепрерывен и суммирование в формуле (36) можно заменить интегрированием. Учитывая это и воспользовавшись формулой (26), соотношением $J_0^2(\varepsilon_n) \approx 2/\pi\varepsilon_n$ и асимптотикой функций Бесселя при больших значениях аргумента [56], получим

$$-\frac{dp(t)}{dt} \approx 2\pi^2\frac{D_0}{R^2}\sum_{n=1}^{\infty} nJ_1^2\left(\frac{\pi n a}{R}\right) \times \\ \times \exp\left(-\pi^2\frac{n^2 D_0 t}{R^2}\right) \approx 2\frac{D_0}{R^2}\int_0^{\infty} xJ_1^2\left(\frac{xa}{R}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{x^2 D_0 t}{R^2}\right)dx = \frac{2}{t}\int_0^{\infty} zJ_1^2\left(\frac{za}{\sqrt{D_0 t}}\right) \times \\ \times \exp\left(-z^2\right)dz \approx \sqrt{\frac{D_0}{\pi a^2 t}}. \quad (37)$$

Следовательно, $p(t) \approx 1 - \sqrt{4Dt/\pi a^2}$ при $t \to 0$. Обратим внимание на то, что в этом пределе заселенность подвижного состояния (вероятность обнаружения частицы в круге радиуса a) не зависит от R. Дело в том, что за столь малые времена частица, стартующая из круга радиуса a, просто не успевает «ощутить» влияние отражающей границы, расположенной на окружности радиуса R. Это дает оценку границы применимости асимптотики малых времен:

$$t \ll t_0 = \frac{1}{2}\frac{R^2}{D_0}\left(1 - \frac{a}{R}\right)^2.$$

Асимптотика функции $p(t)$ определяет поведение релаксационной функции (29) на малых временах и, в конечном итоге, позволяет найти асимптотическое поведение функций $\varphi(\tau)$ (31) и $\tilde{\varphi}(\tau)$ (22) при высоких частотах переключения силы:

$$\varphi(\tau) \approx \frac{2(1+\alpha)}{3\alpha}\sqrt{\frac{D\tau}{\pi a^2}}, \quad (38)$$

$$\tilde{\varphi}(\tau) \approx \frac{\varphi(\tau)}{1+\alpha} = \frac{2}{3\alpha}\sqrt{\frac{D\tau}{\pi a^2}}. \quad (39)$$

Зависимость (38) правильно передает поведение функции $\varphi(\tau)$ при $\tau \ll t_0$. Однако она (как и сама формула (31)) становится непригодна, когда времена переключения очень малы, $\tau \le t_d \propto f^{-1}$.

3.7. Сопоставление с результатами компьютерного моделирования

Предложенный подход и полученные результаты основаны на нескольких приближениях: считается, что амплитуда движущей силы достаточно велика и релаксация при положительном направлении силы $\mathbf{F}(t)$ протекает практически мгновенно, а в течение отрицательного полупериода действия силы $\mathbf{F}(t)$ контролируется радиальной диффузией. Для оценки точности сделанных приближений и выяснения границ их применимости предсказания аналитических расчетов были сопоставлены с результатами компьютерного моделирования, выполненного методом броуновской $3D$-динамики (детали приведены в Приложении А).

Графики, иллюстрирующие поведение функции $\varphi(\tau)$ (31) во всем диапазоне времен переключения, представлены на рис. 4 для двух значений отношения радиусов: $a/R = 0.1$ и $a/R = 0.3$. На этом же рисунке показаны кривые, демонстрирующие асимптотическое поведение функции $\varphi(\tau)$ при больших и малых значениях τ, рассчитанные соответственно по формулам (24) и (38). Поскольку при выбранных значениях a/R время релаксации $t_{rel} = a^2/D_0$, из рис. 4 следует, что низкочастотная асимптотика (24) оправдана при $\tau \ge 0.1R^2/D_0$, а высокочастотная (38) — при $\tau \le a^2/D_0$.

В ходе моделирования, следуя первой из формул (21), значения $\varphi(\tau)$ определялись как отношение эффективной скорости дрейфа при нулевой нагрузке (вычисляемой по формуле (11)) к скорости частицы в адиабатическом пределе $v_{ad,0}(F)$ (задаваемой первой из формул (14)). Результаты расчетов представлены символами на рис. 4. Моделирование проводилось в трубке с периодом $L = R$ при $a/R = 0.1$ и $a/R = 0.3$ и двух значениях безразмерной силы $f = 10^4$ и $f = 10^5$, достаточно больших, чтобы обеспечить асимметрию подвижности $\Delta\mu(|f|)/\mu_0$ близкую к максимальной, $1 - a^2/R^2$ (см. рис. 2*а*). Сопоставление аналитических и численных результатов показывает их хорошее согласие при $f = 10^5$ вплоть до асимптотически малых времен переключения. Как и следовало ожидать, при $f = 10^4$ форму-

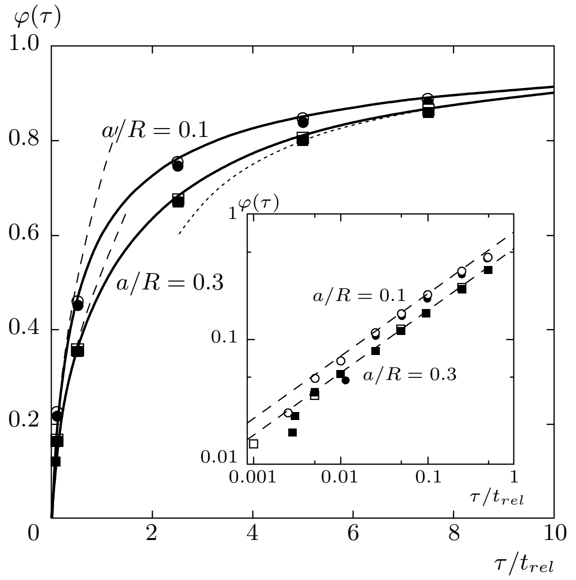

Рис. 4. Сопоставление аналитических и численных результатов, характеризующих рост скорости дрейфа частицы с увеличением времени переключения τ. Сплошные кривые представляют графики зависимости $\varphi(\tau)$, определяемой формулой (31), при $a/R = 0.1$ и $a/R = 0.3$. Штриховые кривые иллюстрируют асимптотическое поведение $\varphi(\tau)$ при малых τ (формула (38)). Пунктиром дана кривая, отвечающая асимптотике $\varphi(\tau)$ при больших значениях τ/t_{rel} (формула (24)). Результаты компьютерного моделирования представлены символами: темными для $f = 10^4$ и светлыми для $f = 10^5$. Вставка содержит результаты для малых τ, где формулы (31) и (38) неразличимы

ла (31) дает оценку $\varphi(\tau)$, завышенную на несколько процентов, поскольку асимметрия подвижности при таких силах чуть меньше максимальной.

На вставке к рис. 4 представлены асимптотики малых τ, рассчитанные по формуле (38), и соответствующие результаты моделирования. Как не раз отмечалось, предлагаемый подход оправдан при $\tau \gg t_d$. Измеряя τ в единицах t_{rel}, получим следующие оценки границ применимости теории: 10^{-3} и 10^{-2} при $a/R = 0.1$ соответственно для $f = 10^5$ и $f = 10^4$, и $2.5 \cdot 10^{-3}$ и $2.5 \cdot 10^{-4}$ при $a/R = 0.3$ и тех же значениях силы. Представленные на вставке данные показывают, что вблизи этих значений характер зависимости скорости дрейфа от τ резко меняется. При τ/t_{rel}, меньших указанных значений, функция $v_0(F,\tau)$ затухает с уменьшением времени переключения не как $\sqrt{\tau}$, что предсказывает формула (37), а гораздо быстрее. В то же время, согласно данным моделирования, она убывает с ростом τ существенно более медленно, чем это происходит в энергетическом $1D$-потенциале, где, как было показано в работе [58], $v_0(F,\tau) \propto \tau^4$ при $\tau \to 0$.

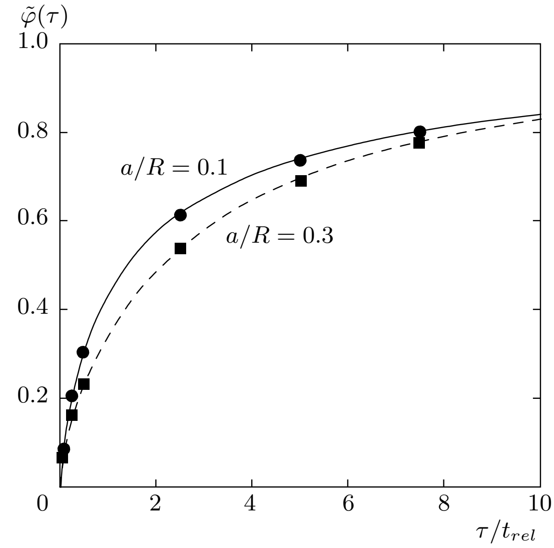

Рис. 5. Сопоставление аналитических и численных результатов, характеризующих рост силы остановки с увеличением времени переключения τ. Графики зависимости $\tilde{\varphi}(\tau)$, определяемой формулами (22) и (31), представлены кривыми, а соответствующие результаты компьютерного моделирования — символами

На рис. 5 представлена зависимость $\tilde{\varphi}(\tau)$ от τ/t_{rel}, рассчитанная по формулам (22) и (31) при $a/R = 0.1$ и $a/R = 0.3$. Она характеризует уменьшение силы остановки с ростом частоты переключения силы. Символами представлены значения $\tilde{\varphi}(\tau)$, полученные на основании данных моделирования. Следуя второй из формул (21), они определялись как отношение силы остановки $Q_s(F,\tau)$, найденной в компьютерном эксперименте при заданных F и τ, к силе остановки в адиабатическом режиме $Q_{s,ad}(F) = \alpha F$ при той же амплитуде F. Сопоставление результатов аналитических и численных расчетов (полученных при $a/R = 0.1$, 0.3 и $f = 10^5$) показывает их хорошее согласие друг с другом.

Рисунки 4 и 5, служат не только наглядной иллюстрацией обсуждаемого эффекта, но и убедительно свидетельствуют об адекватности основных приближений, положенных в основу теории, и подтверждают оценки области их применимости.

4. ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ

Функционирование мотора связано с преобразованием энергии, вносимой возмущением $\mathbf{F}(t)$, в направленное движение. Эффективность такого преобразования (КПД), наряду со скоростью направленного движения, является важнейшей характеристикой мотора. Следуя термодинамическому определению эффективности [16, 17], под полезной понимается работа против силы нагрузки, которая в единицу времени (в среднем за период изменения силы) равна $P_{out} = Qv(F, \tau; Q)$. Затраченная (в единицу времени) работа по организации движения, P_{in}, есть просто произведение амплитуды возмущения на сумму средних скоростей частицы в каждом из полупериодов. С учетом соображений, изложенных в последнем абзаце в разд. 3.3, и считая, как обычно, $f \gg 1$, среднее значение P_{in} можем записать в виде

$$P_{in} = \frac{1}{2}\mu_0 F \left[F - Q + (F+Q)\int_0^\tau \frac{p(t)\,dt}{\tau} \right].$$

Воспользовавшись выражениями для P_{in} и P_{out}, а также формулами (22) и (23), получим, что эффективность равна

$$\eta(q,\tau) = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{\alpha q \varphi(\tau)\,[1 - q/q_s(\tau)]}{1 - \alpha q + \alpha(1+q)\,[1-\varphi(\tau)]}, \quad (40)$$

где $q = Q/F$ — безразмерная сила нагрузки и $q_s(\tau) = Q_s(F,\tau)/F = \alpha\tilde{\varphi}(\tau)$ — безразмерная сила остановки ($q \le q_s$), параметр α, характеризующий асимметрию подвижности при $F \to \infty$, задан формулой (14), $\varphi(\tau)$ находится из формулы (31) и $\tilde{\varphi}(\tau)$ определяется формулой (22). Легко убедиться в том, что $P_{in} > P_{out}$, т. е. $\eta(q,\tau) < 1$ при всех значениях параметров, как и должно быть. Из формулы (40) следует, что эффективность а) обращается в нуль в предельных случаях $q = 0$ и $q = q_s$, принимая максимальное значение в промежутке между ними; б) убывает с ростом частоты переключения силы, обращаясь в нуль при $\tau = 0$; в) растет с увеличением параметра α, характеризующего асимметрию трубки. К последнему утверждению следует отнестись с определенной осторожностью. При очень малых значениях a/R (и, соответственно, значениях α близких к единице) асимметрия времен релаксации ослабевает и эффективность мотора резко убывает.

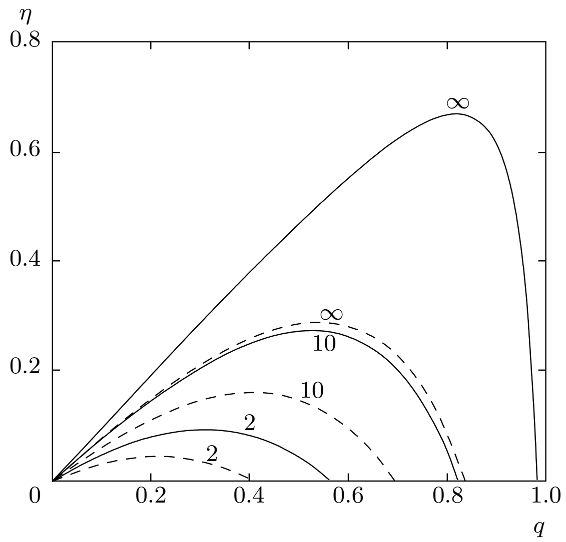

Рис. 6. Зависимость эффективности преобразования энергии η от безразмерной силы нагрузки $q = Q/F$. Графики $\eta(q)$ рассчитаны по формулам (41) и (44) при различных временах переключения силы (указанных цифрами возле кривых) и отношении радиусов. Сплошные кривые отвечают $a/R = 0.1$, штриховые — $a/R = 0.3$

4.1. Адиабатический предел

Наиболее эффективно вносимая энергия преобразуется, если процесс протекает предельно медленно, т. е. при $\tau \to \infty$. В этом случае $\varphi(\infty) = \tilde{\varphi}(\infty) = 1$ и сила остановки принимает максимальное для заданной геометрии значение, $q_s(\infty) = \alpha$, благодаря чему формула (40) заметно упрощается:

$$\eta(q,\infty) \equiv \eta_{ad}(q) = q\frac{\alpha - q}{1 - \alpha q}, \quad 0 \le q \le \alpha. \quad (41)$$

Зависимость $\eta_{ad}(q)$ имеет немонотонный характер (рис. 6). Обращаясь в нуль на концах интервала $(0, \alpha)$, она принимает свое максимальное значение

$$\eta_{ad}(q_m) = q_m^2 = \alpha^{-2}\left(1 - \sqrt{1-\alpha^2}\right)^2 \quad (42)$$

при силе нагрузки равной

$$q_m = \alpha^{-1}\left(1 - \sqrt{1-\alpha^2}\right). \quad (43)$$

Единственным параметром, контролирующим максимальную эффективность в адиабатическом режиме, является асимметрия подвижности α. Его малость, $\alpha \ll 1$, означает медленность дрейфа и узость диапазона возможных нагрузок (см. формулы (13) и (14)), а также указывает на низкую (порядка α) эффективность преобразования энергии, как это следует из формулы (42). В обратном пределе, $\alpha \to 1$, максимальная эффективность (42) близка к единице. Таким образом, условием достижения высокой эффективности является наличие высокого энтропийного барьера (в одном из направлений), точно так же как в случае энергетического $1D$-потенциала, таким условием служит высокий энергетический барьер, запирающий обратный поток [19].

Высокая эффективность достигается, однако, в условиях, когда сам эффект (скорость дрейфа частицы) мал. Действительно, при $\alpha \to 1$ нагрузка q_m близка к силе остановки α, поскольку, согласно формуле (43), разность $\alpha - q_m \propto \sqrt{1-\alpha}$. При этом скорость частицы при нулевой нагрузке составляет лишь малую долю, $\sqrt{1-\alpha}$, от своего максимального значения $v_{ad,0}(F)$, определяемого формулой (14).

4.2. Влияние частоты переключений силы

По мере роста частоты переключений снижается скорость мотора, а также уменьшаются сила остановки мотора и его эффективность. Последнее вытекает как из формулы (40), так и из того факта, что с уменьшением τ заселенность (средняя за период) подвижного состояния оказывается выше равновесной, способствуя уменьшению скорости дрейфа (полезной работы) и увеличению затраченной работы.

Влияние частоты переключений на эффективность становится особенно наглядным, если, воспользовавшись формулами (13) и (22), представить выражение (40) в виде

$$\eta(q,\tau) = q\frac{\alpha\tilde{\varphi}(\tau)-q}{1-\alpha\tilde{\varphi}(\tau)q}, \quad 0 \le q \le q_s(\tau) = \alpha\tilde{\varphi}(\tau), \quad (44)$$

аналогичном формуле (41). Функция $\tilde{\varphi}(\tau)$ введена (см. формулу (21)) как величина, характеризующая снижение силы остановки с уменьшением τ. Как видно из формулы (44), она определяет и спад эффективности с ростом частоты переключений. Из сопоставления формул (41) и (44) следует, что при $\tau < \infty$

1) числитель дроби в формуле (44) меньше, а знаменатель больше, чем в формуле (41), т. е. (при одной и той же нагрузке) $\eta(q,\tau) < \eta_{ad}(q)$;

2) снижение КПД эффективно учитывается заменой коэффициента асимметрии подвижности α на $\alpha\tilde{\varphi}(\tau) < \alpha$. Последнее позволяет использовать формулы (42) и (43) с перенормированными величинами α для нахождения положения $q_m(\tau)$ и величины максимума эффективности $\eta(q_m(\tau))$ как функции нагрузки при произвольном τ.

На рис. 6 представлены зависимости эффективности от нагрузки при различных значениях a/R (а значит, и α) и τ/t_{rel}. Все кривые на этом рисунке демонстрируют сходное немонотонное поведение. Эффективность обращается в нуль при $q = 0$, линейно возрастает в области $q \ll q_s(\tau) = \alpha\tilde{\varphi}(\tau)$, достигает максимального значения в точке $q_m(\tau)$, а затем быстро убывает до нуля при $q \to q_s$. Рисунок 6 также иллюстрирует тот факт, что эффективность мотора растет с ростом асимметрии трубки, достигая в адиабатическом пределе значений, близких к единице при малых a/R, а максимум смещается в сторону правой границы. Наиболее интересным наблюдением является то, что эффективность резко убывает в неадиабатических условиях, причем тем сильнее, чем выше ее значение при $\tau = \infty$. Так, при $\tau/t_{rel} = 10$, когда скорость дрейфа снижается по сравнению с максимальной всего на 10 % (см. рис. 4), а сила остановки на 20 % (см. рис. 5), эффективность уменьшается почти в 2.5 раза в случае $a/R = 0.1$ (в 1.8 раз в случае $a/R = 0.3$). Если же $\tau/t_{rel} < 2$, то эффективность преобразования энергии становится очень низкой даже при малых значениях a/R, в то время как сам эффект (скорость дрейфа) заметно снижается при гораздо более высоких частотах переключений.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проанализирована задача о дрейфе броуновской частицы в трубке, показанной на рис. 1*a*, возникающем под действием силы, периодически во времени меняющей свое направление. Предложенная модель представляет собой броуновский мотор, способный совершать работу против силы нагрузки, преобразуя энергию вносимых возмущений в направленное движение. Эффект выпрямления возникает благодаря качественно разному поведению эффективной подвижности μ частицы в зависимости от направления силы f (рис. 2*a*): при $f > 0$ ($f < 0$) подвижность увеличивается (уменьшается) с ростом силы, достигая максимального (минимального) значения при $f \to \infty$ ($f \to -\infty$). Конструктивную роль при этом играет тепловой шум, обеспечивающий радиальную диффузию, которая ответственна за релаксацию в поперечном направлении. Предложенный механизм обладает рядом особенностей. Во-первых, он опирается на асимметрию формы, а не потенциала, как в большинстве моделей, обсуждавшихся ранее. Во-вторых, этот механизм наиболее эффективен в ситуации, когда амплитуда движущей силы велика, обеспечивая возможность неограниченной скорости дрейфа и силы остановки. Наконец, в-третьих, он способен в определенных условиях обеспечить достаточно высокий КПД.

Получены аналитические выражения для основных характеристик работы мотора: скорости направленного движения (формулы (23) и (31)), силы остановки (формулы (21) и (22)) и эффективности преобразования энергии (формула (44)). Это позволило выяснить зависимость этих характеристик от параметров, определяющих геометрию модели и внешнее воздействие, включая силу нагрузки. В частности, показано, как скорость, сила остановки и эффективность убывают по мере роста частоты переключения силы (см. рис. 4–6), и продемонстрировано немонотонное поведение эффективности с увеличением силы нагрузки (см. рис. 6). Предложенная теория основана на особенности геометрии обсуждаемой системы, в силу которой при больших амплитудах силы наряду с асимметрией подвижности имеет место асимметрия времен релаксации. На основе этого представляется, что оптимальный выбор отношения a/R находится в диапазоне $0.03 < a/R < 0.3$, где как асимметрия подвижности, так и асимметрия времен релаксации выражены достаточно отчетливо. Об адекватности используемых приближений свидетельствует тот факт, что предсказания теории находятся в хорошем согласии с данными компьютерного моделирования (см. рис. 4 и 5) во всем диапазоне параметров модели за исключением области асимптотически малых (по обратной величине силы) времен переключения, где предложенная теория не пригодна.

В данной работе был рассмотрен лишь один, простейший тип возмущений — сила, периодически меняющая направление. В действительности эффект имеет место при воздействии на частицу произвольно (как регулярно, так и случайно) меняющейся силы с нулевым средним.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-03-00393).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В этом приложении изложены наиболее важные детали компьютерного моделирования, используемого в данной работе для анализа движения частицы в трубках переменного сечения (рис. 1*а* и 3*а*) под действием как постоянной (рис. 2*а* и 3*б*), так и зависящей от времени силы (рис. 4–6). В обоих случаях траектории частицы получались путем численного интегрирования методом Эйлера приведенных к безразмерному виду стохастических дифференциальных уравнений, эквивалентных уравнениям движения (1) и (10) соответственно при $a/R = 0.1$ и $a/R = 0.3$. Учет отражающего граничного условия на стенках трубки проводился следующим образом. Если в результате сделанного шага частица оказывалась вне трубки, то лишь компонента этого шага, параллельная поверхности, принималась во внимание, его нормальная компонента не учитывалась. В обоих случаях время наблюдения (длина траектории) бралось достаточно большим (от $20R^2/D_0$ до $200R^2/D_0$), чтобы можно было пренебречь переходной стадией процесса.

В случае постоянной силы (рис. 2*а* и 3*б*) моделирование проводилось при значениях безразмерной силы $f = \beta FL$ от 0.1 до 10^5 с постоянным временным шагом, принимающим значения от $1.25 \cdot 10^{-7} R^2/D_0$ до $2 \cdot 10^{-6} R^2/D_0$, в зависимости от величины силы f и отношения радиусов a/R. Значение эффективной подвижности $\mu(f)/\mu_0$ вычислялось по формуле (2) в результате усреднения по 10^5 траекторий. В случае переменной силы моделирование (рис. 4–6) проводилось при $f = 10^4$ и $f = 10^5$ с временным шагом $8 \cdot 10^{-8} R^2/D_0$, одним и тем же при разных значениях f и a/R. Эффективная скорость дрейфа вычислялась по формуле (11) в результате усреднения по $2.5 \cdot 10^3$ траекторий. Величина силы нагрузки менялась от нуля до силы остановки.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Покажем, как суммируется ряд

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1^2(\varepsilon_n x)}{\varepsilon_n^4 J_0^2(\varepsilon_n)} = S(x), \quad 0 \le x \le 1, \tag{B.1}$$

входящий в формулу (32). Вначале заметим, что $S(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{dS(x)}{dx} = 2\left[\frac{S(x)}{x} - S_1(x)\right], \tag{B.2}$$

где

$$S_1(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1(\varepsilon_n x) J_2(\varepsilon_n x)}{\varepsilon_n^3 J_0^2(\varepsilon_n)}.$$

Затем для вычисления вспомогательной суммы $S_1(x)$ воспользуемся формулой (30), обе части которой один раз умножим на $3x^3$ и проинтегрируем от

0 до x, а второй раз умножим на x, проинтегрируем от 0 до x и умножим на x^2. Вычитая из первой полученной таким образом формулы вторую и используя соотношение

$$3\int_0^x y^3 J_1^2(\xi y)\,dy - x^2\int_0^x y J_1^2(\xi y)\,dy = \\ = \frac{1}{2}\frac{x^3}{\xi} J_1(\xi x) J_2(\xi x), \quad (\text{B.3})$$

где ξ — произвольное число, получим, что

$$S_1(x) = \frac{x(1-x^2)}{16}. \quad (\text{B.4})$$

И, наконец, решив дифференциальное уравнение (B.2) с учетом формулы (B.4) при условии $S(1) = 0$, найдем интересующую нас величину

$$S(x) = \frac{x^2}{16}(x^2 - 1 - \ln x^2). \quad (\text{B.5})$$

Этот результат доказывает эквивалентность формул (32) и (33) основного текста статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. V. Smoluchowski, Phys. Z. **13**, 1069 (1912).
2. Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс, *Фейнмановские лекции по физике*, Мир, Москва (1967), т. 4, гл. 46.
3. В. И. Белиничер, Б. И. Стурман, УФН **130**, 415 (1980).
4. J. Howard, *Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton*, Sinauer Associates, Sunderland (2001).
5. B. Hille, *Ionic Channels of Excitable Membranes*, Sinauer Associates, Sunderland (1992).
6. Г. Р. Иваницкий, А. Б. Медвинский, А. А. Деев, М. А. Цыганов, УФН **168**, 1221 (1998).
7. Ю. Л. Романовский, А. Н. Тихонов, УФН **180**, 931 (2010).
8. K. E. Drexler, *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation*, Wiley, New York (1992).
9. P. Hänggi and F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
10. R. Bartussek and P. Hänggi, Phys. Bl. **51**, 506 (1995).
11. F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost, Rev. Mod. Phys. **69**, 1269 (1997).
12. R. D. Astumian, Science **276**, 917 (1997).
13. P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).
14. P. Hänggi, F. Marchesoni, and F. Nori, Ann. der Phys. **14**, 51 (2005).
15. Yu. A. Makhnovskii, V. M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, and S. H. Lin, J. Chem. Phys. **130**, 164101 (2009).
16. K. Sekimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 1234 (1997).
17. J. M. R. Parrondo and B. J. de Cisneros, Appl. Phys. A **75**, 179 (2002).
18. L. Machura, M. Kostur, P. Talkner et al., Phys. Rev. E **70**, 061105 (2004).
19. Yu. A. Makhnovskii, V. M. Rosenbaum, D.-Y. Yang et al., Phys. Rev. E **69**, 021102 (2004).
20. R. D. Astumian and M. Bier, Phys. Rev. Lett. **72**, 1766 (1994).
21. В. М. Розенбаум, ЖЭТФ **137**, 740 (2010).
22. A. Ajdari and J. Prost, C. R. Acad. Sci. Paris Ser. II **315**, 1635 (1992).
23. M. O. Magnasco, Phys. Rev. Lett. **71**, 1477 (1993).
24. R. Bartussek, P. Hänggi, and J. G. Kissner, Europhys. Lett. **28**, 459 (1994).
25. B. Q. Ai and L. G. Liu, Phys. Rev. E **74**, 051114 (2006).
26. B. Q. Ai, H. Z. Xie, and L. G. Liu, Phys. Rev. E **75**, 061126 (2007).
27. I. Derényi and R. D. Astumian, Phys. Rev. E **58**, 7781 (1998).
28. C. Keller, F. Marquardt, and C. Bruder, Phys. Rev. E **65**, 041927 (2002).
29. C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, and F. Muller, Phys. Rev. E **61**, 312 (2000).
30. C. Marquet, A. Buguin, L. Talini, and P. Silberzan, Phys. Rev. Lett. **88**, 168301 (2002).
31. S. Matthias and F. Muller, Nature **424**, 53 (2003).
32. G. Schmid, P. S. Burada, P. Talkner, and P. Hänggi, Adv. Sol. St. Phys. **48**, 317 (2009).
33. R. Zwanzig, J. Phys. Chem. **96**, 3926 (1992).
34. D. Reguera and J. M. Rubi, Phys. Rev. E **64**, 061106 (2001).
35. Р. Л. Стратонович, Радиотехн. и электрон. **3**, 494 (1958).

36. H. Risken, *The Fokker–Planck Equation*, Springer, Berlin (1984).

37. P. Reimann, C. Van den Broek, H. Linke et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 010602 (2001).

38. D. Reguera, G. Schmid, P. S. Burada et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 130603 (2006|).

39. P. S. Burada, G. Schmid, and P. Hänggi, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **367**, 3157 (2009).

40. F. Marchesoni and S. Savel'ev, Phys. Rev. E **80**, 011120 (2009).

41. F. Marchesoni, J. Chem. Phys. **132**, 166101 (2010).

42. A. M. Berezhkovskii, L. Dagdug, Yu. A. Makhnovskii, and V. Yu. Zitserman, J. Chem. Phys. **132**, 221104 (2010).

43. Yu. A. Makhnovskii, A. M. Berezhkovskii, L. V. Bogachev, and V. Yu. Zitserman, J. Phys. Chem. B **115**, 3992 (2011).

44. L. Dagdug, A. M. Berezhkovskii, Yu. A. Makhnovskii et al., J. Chem. Phys. **134**, 101102 (2011).

45. V. Yu. Zitserman, A. M. Berezhkovskii, A. E. Antipov, and Yu. A. Makhnovskii, J. Chem. Phys. **135**, 121102 (2011).

46. M. H. Jacobs, *Diffusion Processes*, Springer, New York (1967).

47. S. Lifson and J. L. Jackson, J. Chem. Phys. **36**, 2410 (1962).

48. В. Феллер, *Введение в теорию вероятностей и ее приложения*, т. 2, Мир, Москва (1984).

49. A. M. Berezhkovskii and A. Szabo, J. Chem. Phys. **135**, 074108 (2011).

50. A. M. Berezhkovskii, V. Yu. Zitserman, and S. Y. Shvartsman, J. Chem. Phys. **118**, 7146 (2003).

51. Ю. А. Махновский, В. Ю. Зицерман, А. М. Бережковский, Хим. физика **28**, 61 (2009).

52. Yu. A. Makhnovskii, A. M. Berezhkovskii, and V. Yu. Zitserman, J. Chem. Phys. **131**, 104705 (2009).

53. A. M. Berezhkovskii, Yu. A. Makhnovskii, M. I. Monine et al., J. Chem. Phys. **121**, 11390 (2004).

54. Yu. A. Makhnovskii, A. M. Berezhkovskii, and V. Yu. Zitserman, J. Chem. Phys. **122**, 236102 (2005).

55. C. B. Muratov and S. Y. Shvartsman, Multiscale Model. Simul. **7**, 44 (2008).

56. Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш, *Специальные функции (формулы, графики, таблицы)*, Наука, Москва (1968).

57. A. M. Berezhkovskii, J. Chem. Phys. **370**, 253 (2010).

58. P. Reimann, Lecture Notes in Phys. **557**, 50 (2000).