第 53 卷 第 11 期 2004 年 11 月
1000-3290/2004/53(11)/3684-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53, No.11, November, 2004

布朗马达的非均匀高斯跃迁模型*

李 微[1)†] 赵同军[1)2)] 郭鸿涌[2)] 纪 青[1)] 展 永[1)]

[1)] (河北工业大学理学院，天津 300130)

[2)] (河北工业大学电气工程学院，天津 300130)

(2003 年 6 月 27 日收到；2004 年 3 月 8 日收到修改稿)

提出了布朗马达的非均匀高斯跃迁理论，用布朗粒子在多态之间的跃迁模型描述分子马达的定向运动. 假定跃迁速率与位置有关，且在跃迁点附近具有高斯函数形式，将布朗粒子在 x 处的概率密度 $P_m(x,t)$ 在跃迁点附近展开，可以进行任意阶的近似计算. 这一理论涵盖了以往的定点跃迁模型和均匀跃迁模型. 作为具体例子，研究了系统在两态之间的跃迁问题. 假定在一个周期内有两个跃迁点，讨论了布朗粒子定向运动产生的概率流随温度、跃迁速率和跃迁宽度的变化关系.

关键词：布朗马达，高斯跃迁，概率流

PACC：0540，0250，0520D

1. 引 言

布朗马达是分子马达的一类重要理论模型[1,2]. 若把分子马达看作布朗粒子，在噪声的驱动下这些粒子在非对称的周期场中运动，分子马达的动力学理论就可以纳入布朗运动的理论框架. 处在非对称周期场中的布朗粒子，由于非平衡的涨落而诱导定向运动[3—6]. 对于沿具有周期性结构的轨道运动的分子马达，伴随着其构象变化以及力学化学耦合过程，马达与轨道之间的相互作用就表现为周期性地或随机地在多态之间跃迁[7—10].

在现有的理论中，有人提出马达在不同状态之间跃迁发生在某些固定的位置，即马达只有运动到微丝或微管的某些特定空间位点时才会从某一状态变为另一状态，跃迁发生在若干几何点，这就是所谓的定点跃迁理论[11]，这种理论在考虑化学力学耦合时具有合理性，并且理论计算可以得到严格的解析解. 然而定点跃迁的假定过强，在物理上难以被人们接受. 也有人提出均匀跃迁理论，认为马达在不同状态之间的跃迁在各个位置都是等概率的[12—14]. 但这种模型通常只对相互作用势取分段线性函数形式才有解析解，所处理的问题具有较大的局限性. 在本文所提出的模型中，我们认为马达在不同状态之间的跃迁发生在某些点附近的一定宽度范围内，这些点称为跃迁点，用跃迁宽度这一特征量表征跃迁范围的大小. 在这种高斯跃迁模型中，马达与轨道的相互作用用非对称的周期势场来表示，结构和构象的变化以及能量的输入反映在势垒或噪声在多态之间的跃迁. 对于每一个状态，可以定义相应的一维周期势. 在此基础上集中讨论在不同状态之间跃迁的布朗粒子定向运动的概率流，以及这种概率流随温度、跃迁速率和跃迁宽度的变化关系. 新的理论可以涵盖定点跃迁理论和均匀跃迁理论，所研究问题的适用范围更加广泛，并且在数学上可进行任意阶的近似计算.

首先提出布朗马达非均匀跃迁的一般理论，假定马达蛋白在一个空间周期内可能经历 M 个内部状态，各状态之间可以在 K 个空间位点附近发生跃迁，选取跃迁速率为高斯函数形式. 将概率密度进行泰勒展开，得出概率流的一般表达式. 选取简单的两态模型，计算了温度、跃迁速率以及跃迁宽度对布朗粒子定向运动概率流的影响.

2. 理论模型

我们认为沿周期性轨道运动的分子马达的构象

* 国家自然科学基金(批准号：10375016)及河北省自然科学基金(批准号：A2004000005 和 B2001113)资助的课题.

† E-mail：cliwei@eyou.com

变化,以及力学化学耦合过程表现为分子马达与轨道之间的周期性势场在两态或多态之间随时间周期性变化或随机跃迁.假定布朗马达在一个工作循环内的运动要经历 M 个内部状态,并在 K 个不同位点附近发生跃迁[7,13].我们用概率密度函数 $P_m(x,t)$来描述马达在各个状态的运动,其中 $P_m(x,t)$表示在 t 时刻粒子处在 x 点的概率密度,m 表示布朗马达所处的化学态,其取值为 $m=0,1,\cdots,M-1$.概率密度满足连续性方程:

$$\frac{\partial P_m(x,t)}{\partial t}+\frac{\partial J_m(x,t)}{\partial x}=I_m(x,t),\qquad(1)$$

其中 $I_m(x,t)$表示跃迁流密度,而概率流 J_m 与分子的势函数和外力相关,引入如下形式的有效势:

$$V_m(x)=(U_m(x)-Fx)/kT,\qquad(2)$$

马达蛋白沿微管或微丝等轨道运动,由于轨道的结构是周期性的,所以势函数也应该是周期性的,用 l 表示其周期,有

$$U_m(x)=U_m(x+l).\qquad(3)$$

马达蛋白处在一维的非对称周期势场中,概率流具有 Fokker-Planck 形式[15]:

$$J_m(x,t)=-D_0\left[\frac{\partial}{\partial x}V_m(x)+\frac{\partial}{\partial x}\right]P_m(x,t),\qquad(4)$$

其中参量 D_0 表示扩散系数.

跃迁流密度 $I_m(x,t)$与跃迁速率 $\Omega_{m,n}(x)$相关,跃迁速率 $\Omega_{m,n}(x)$对应于从 m 态到 n 态的跃迁.跃迁流密度 $I_m(x,t)$由下式给出:

$$I_m(x,t)=\sum_{n(\neq m)}[-P_m(x)\Omega_{m,n}(x)+P_n(x)\Omega_{n,m}(x)].\qquad(5)$$

在一个周期内布朗马达可以在 K 个空间位点发生跃迁,对应的跃迁点为 $x_k(k=1,2,\cdots,K)$,且.$x_1<x_2<\cdots<x_K$.对应于跃迁速率可以给出更一般的表达式:

$$\Omega_{m,n}(x)=\sum_k\omega_{m,n}(x_k)\varphi(x-x_k),\qquad(6)$$

其中函数 $\varphi(x-x_k)$是正定的,当 $x=x_k$ 时,$\varphi(x-x_k)$取最大值;当$|x-x_k|$趋于无限大时,$\varphi(x-x_k)$趋于零.在以往的理论中为使计算简化,人们取 $\varphi(x-x_k)$为 Dirac's delta 函数 $\delta(x-x_k)$形式[11].为了使跃迁速率的形式更具一般性,取高斯函数的形式为

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(x-x_k)^2}{2\sigma_k^2}\right),$$

因此,跃迁速率为

$$\Omega_{m,n}(x)=\sum_k\omega_{m,n}(x_k)\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(x-x_k)^2}{2\sigma_k^2}\right).\qquad(7)$$

现在讨论限定在稳态情况下,由(4)式可得出概率流应满足如下方程:

$$e^{V_m(x)}P_m(x)=e^{V_m(x_0)}P_m(x_0)-\frac{1}{D_0}\int_{x_0}^{x}dy\,e^{V_m(y)}J_m(y).\qquad(8)$$

取高斯函数,当跃迁宽度 σ_k 不太大时,布朗马达在不同状态之间的跃迁发生在 x_k 点附近,因此可将概率密度在跃迁点附近展开:

$$P_m(x)=P_m(x_k)+\frac{1}{1!}\frac{\partial P_m(x)}{\partial x}\Big|_{x=x_k}(x-x_k)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2P_m(x)}{\partial x^2}\Big|_{x=x_k}(x-x_k)^2+\cdots+\frac{1}{j!}\frac{\partial^jP_m(x)}{\partial x^j}\Big|_{x=x_k}(x-x_k)^j+\cdots\qquad(9)$$

将上式代入(1)式,在稳态情况下,概率流表示为

$$J_m(x)=\overline{J_m(x_0)}+\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\sum_{n(\neq m)}\sum_k[-P_m^{(j)}(x_k)\omega_{m,n}(x_k)+P_n^{(j)}(x_k)\omega_{n,m}(x_k)]\Phi_k^j(x),\qquad(10)$$

其中

$$\Phi_k^j(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\int_{x_0}^{x}(x'-x_k)^j\exp\left[-\frac{(x'-x_k)^2}{2\sigma_k^2}\right]dx',\qquad(11)$$

$P_m^{(j)}(x_k)$为 $P_m(x)$在 $x=x_k$ 处的 j 阶导数值.由(4)式得出

$$P_m^{(1)}(x,t)=-\frac{J_m(x)}{D_0}-\left(\frac{\partial V_m(x)}{\partial x}\right)P_m(x),\qquad(12)$$

进而对上述方程求导:

$$P_m^{(2)}(x,t)=-\frac{1}{D_0}\frac{\partial J_m(x,t)}{\partial x}-\frac{\partial^2V_m(x)}{\partial x^2}P_m(x,t)-\frac{\partial V_m(x)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}P_m(x,t).\qquad(13)$$

对于稳态情况,由(1)式得出

$$\frac{\partial J_m(x,t)}{\partial x}=I_m(x,t).\qquad(14)$$

将(5)和(14)式分别代入(13)式,可将(13)式写成

$$P_m^{(2)}(x,t)=\frac{1}{D_0}\sum_{n(\neq m)}\Omega_{n,m}(x)P_n(x)+\left[\frac{1}{D_0}\sum_{n(\neq m)}\Omega_{m,n}(x)\right.$$

$$- \frac{\partial^2 V_m(x)}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial V_m(x)}{\partial x}\right)^2\Bigg] P_m(x) + \frac{\partial V_m(x)}{\partial x}\frac{J_m(x,t)}{D_0}. \tag{15}$$

同样也可将(9)式中的高阶导数写成低阶导数的线性组合形式：

$$P_m^{(j)}(x,t) = -\frac{1}{D_0}\sum_{n(\neq m)}\sum_{i=0}^{j-2}(i+1)\Bigg[-\frac{\partial^{j-i}\Omega_{m,n}(x)}{\partial x^{j-i}} \times P_m^{(i)}(x) + \frac{\partial^{j-i}\Omega_{n,m}(x)}{\partial x^{j-i}}P_n^{(i)}(x)\Bigg] - \sum_{i=0}^{j-1}(i+1)\frac{\partial^{j-i}V_m(x)}{\partial x^{j-i}}P_m^{(i)}(x,t). \tag{16}$$

从(10)和(15)式可以看出，展开式(9)中的一阶导数和二阶导数可化为 $P_m(x)$，$J_m(x)$的线性组合，而更高阶导数又可用低阶导数表示，因此(9)式中的各项均可化为 $P_m(x)$，$J_m(x)$的线性组合.其他部分完成积分后，上述方程只与 $P_m(x)$，$J_m(x)$在 x_k 点的函数值有关.因此对于任意阶的近似，展开方程总可以化为关于 x_k 点函数值的形式，所得方程是关于 $P_m(x_k)$，$J_m(x_k)$的线性方程组.

通过求解这些方程组，可以给出概率密度 $P_m(x)$和概率流 $J_m(x)$随各参量变化的一般关系.令 $x_0 = x_1$，$x = x_k$，$k = 2,\cdots,K$，由方程(8)可以得到关于 $P_m(x_k)$和$\overline{J_m}$的$M(K-1)$个线性齐次方程.由于势的周期性，$P_m(x_k)$，$J_m(x_k)$还应满足周期性边界条件，又可以得到 $2M$ 个线性齐次方程.因为存在如下对称性关系：

$$\sum_{n(\neq m)}\sum_n \Delta J_m(x_k) = \sum_n[-P_m(x_k)\omega_{m,n}(x_k) + P_n(x_k)\omega_{n,m}(x_k)]\Phi_k^j(x) = 0, \tag{17}$$

所以上述 $2M$ 个方程并不独立，只有 $2M-1$ 个独立方程.还要引入概率密度 $P(x)$所满足的归一化条件：

$$\int_0^1 \mathrm{d}x P(x) = 1. \tag{18}$$

至此，对于 $M(K+1)$个未知数 $P_m(x_k)$和 $\bar{J}_m$，得到了 $M(K+1)$个独立的线性方程，$P_m(x_k)$，$\bar{J}_m$ 可以求解，从而可以确定 $P_m(x)$和 $J_m(x)$的函数形式.这样，就将原来求解微积分方程的问题转化为求解代数方程组的问题.

3. 计算与分析

在上述一般的理论研究基础上进行更加具体的分析，目的是讨论高斯型跃迁速率函数对于定向运动动力学行为的影响，分析跃迁宽度在粒子输运过程中的作用.下面讨论一个具体实例.为了使计算和分析简化，又不失一般性，对分子马达多态动力学体系的理论分析限定在两个状态.对于每一个状态，给出相应的一维周期势.微管与微丝是有极性的，所以马达与轨道之间的相互作用势 $U_i(x)$既是周期性的，又是非对称的.在上述有限宽度跃迁模型中，由于理论处理中的级数展开要求势函数具有较好的解析性质，因此选取如下形式的势函数：

$$U_1 = -\frac{1}{2\pi}[\sin 2\pi(x+a) + \sin 4\pi(x+a)/4], \tag{19}$$

$$U_2 = \frac{1}{2\pi}[\sin 2\pi(x+b) + \sin 4\pi(x+b)/4]. \tag{20}$$

这一相互作用势的形式如图 1 所示.

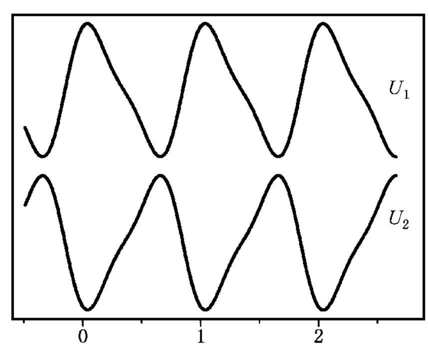

图 1 布朗粒子所处的一维非对称周期势场 U_1 和 U_2 对应状态 1 和状态 2 相应的一维周期势

在不考虑外力的情况下，对上述模型在二阶近似下进行了计算.选定一组参数，为了使计算和分析简化，假定两个状态之间相互跃迁的速率相同，在没有负载的情况下，计算了定向运动的概率流在给定跃迁速率时随温度的变化关系.计算结果如图 2 所示.

因为只有当跃迁宽度较小时对分布函数作泰勒展开计算才比较可靠，为此在计算中选取较小的跃迁宽度 $\sigma_k = 0.01$.跃迁宽度较小指的是跃迁发生在跃迁点附近较小的范围内，这种情况接近于定点跃迁.从图 2 可以看出，在温度很低或很高时，定向运

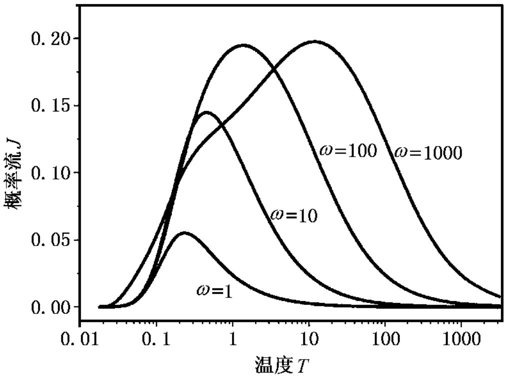

图 2　概率流随温度变化关系曲线,不同的曲线对应不同的跃迁速率(其中 $\sigma_k = 0.01$)

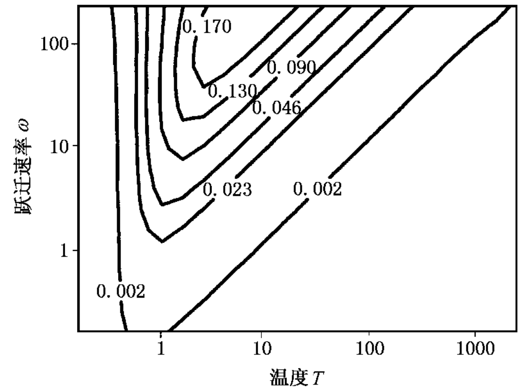

图 3　概率流随温度和跃迁速率的变化关系,曲线是概率流的等高线(其中 $\sigma_k = 0.01$)

动的概率流都趋于零.这是因为当温度很低时,热运动的能量较小,大部分粒子处于势阱底部,粒子扩散很弱,难以跨越势垒产生定向运动;而当温度很高时,粒子在整个势阱中分布趋于均匀,由 1 态跃迁到 2 态的粒子与由 2 态跃迁到 1 态的粒子总体上沿 x 轴正向和负向运动的概率几乎相等,因此总的效果出现了概率流趋向于零.从图 2 还可以看出,在适当的温度范围内,对于某一确定的跃迁速率,总存在一个概率流的最大值,而且随速率的增加相应于最大概率流的温度值升高,这是因为产生定向运动是扩散与跃迁两种效应共同作用的结果.当从一个状态向另一个状态跃迁的时候,粒子的空间分布要发生变化,这种变化需要一段时间才能达到稳定.所以跃迁的时间要与之相匹配,才能产生较大的概率流,匹配最好的情况对应于概率流的峰值.温度升高,粒子的扩散增强,在一个状态中达到稳定的时间变短,对应于最大概率流需要匹配的跃迁时间也要变短,跃迁速率也相应增加.所以随速率的增加,概率流的峰值应出现在更高的温度上.速率增加,扩散与跃迁这一过程循环的次数增加,相应概率流增加.此外值得注意的是,当改变跃迁速率时,概率流都为正值,定向运动总是沿着 x 轴的正方向.

本文还计算了在没有负载时,定向运动的概率流随温度及跃迁速率的变化关系.图 3 的结果表明,在很低的温度和很小的跃迁速率时,概率流的值很小.随温度的升高和速率的增大,概率流出现极大值,相应于最大概率流的温度在升高,与图 2 的结果一致.亦即只有在适当的温度和跃迁速率下,才会有较大的概率流,说明概率流对温度和跃迁速率都是有选择的.

温度和跃迁速率对概率流的大小都有影响,那么粒子跃迁的位置以及跃迁宽度对于概率流又有什么影响呢?为此选取某一特定跃迁速率($\omega = 10$),计算了概率流随温度、跃迁宽度的变化关系.

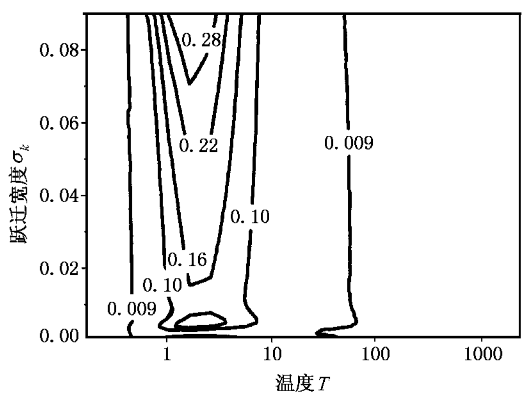

图 4　概率流随温度、跃迁宽度变化的曲线(其中 $\omega = 10$)

从图 4 可以看出,当温度很低时,概率流趋向于零,跃迁宽度对概率流的影响并不明显.这是因为温度很低时,大部分粒子处于势阱底部,偏离势阱底部的其他位置粒子出现的概率很小.当增加跃迁宽度时,这一范围内粒子出现的概率没有明显的增加,因此在低温下增大跃迁宽度对概率流基本上没有影响.对于高温而言,粒子在势阱中趋于均匀分布,概率密度函数变为常数,而概率流是概率密度函数与跃迁速率乘积在跃迁宽度上的积分.当增大跃迁宽度时,由于在此宽度上对跃迁速率的积分不变,因此对概率流的影响并不大.然而在适当的温度范围内,粒子不只是分布在势阱底部,而是分布在一定范围内,粒子在这一范围内出现概率增加,此时允许粒子在一定宽度内跃迁,就使得更多的粒子跃迁概率增

加，增大了跃迁粒子的数量，产生了较大的概率流．所以在低温和高温时，跃迁宽度对概率流的影响并不明显，只有在适当的温度范围内，增大跃迁宽度才可以产生较大的概率流．从图4也可以看出，跃迁宽度不影响最大概率流的出现位置，但可以改变概率流的幅度（详见图5），所以跃迁宽度对概率流的影响较为明显．

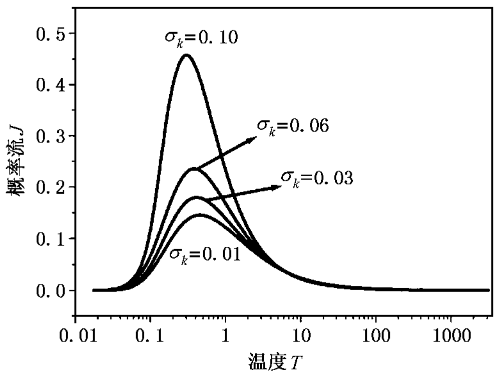

图5 概率流随温度变化的关系，不同曲线对应不同跃迁宽度（其中 $\omega=10$）

在负载作用下的定向运动是分子马达动力学行为的重要方面，为此本文讨论了概率流随外力的变化关系，并且与定点跃迁模型[11]作了对比．

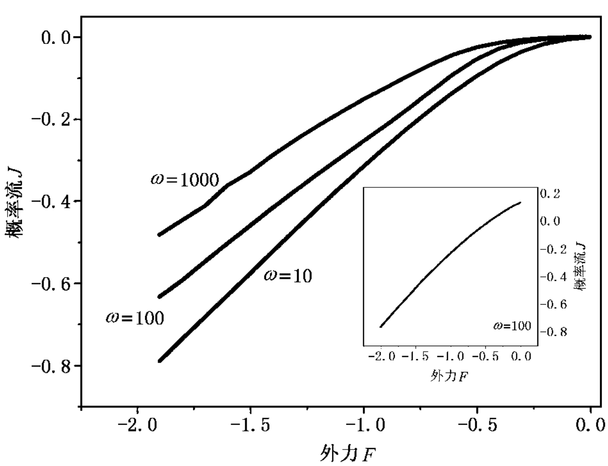

图6 概率流随外力变化的关系，不同曲线对应不同跃迁速率（其中 $T=0.1$，$\sigma_k=0.01$，内插图取 $T=0.5$）

本文选取的相互作用势更接近于定点跃迁模型中的简单锯齿势的形式，计算结果表明，随外力的增加，正向概率流数值减小，反向概率流数值增加．概率流随外力变化的总体趋势与定点跃迁模型的结果一致，如图6内插图所示．温度较高时，即使外力为零，由于相互作用势的不对称，使得布朗粒子产生定向运动，而且概率流的方向由不对称势的形状确定．当有负载外力存在时，增加的外力相当于将势垒抬高，粒子越过势垒的概率减小，因而正向概率流减小．当外力再增加时，概率流会变为负值．在低温情况下，改变跃迁速率时概率流随外力的变化关系如图6所示．可以看出，跃迁速率在局部范围内取值，当外力为零时，概率流趋向于零；在相同外力作用下，随跃迁速率的增大，概率流增加，与图2的计算结果一致．当跃迁速率进一步增大时，概率流开始减小，最终趋于稳定值．因为布朗马达的扩散与跃迁这一工作循环与其所处环境的三磷酸腺苷（ATP）的浓度有关，用跃迁速率来表征这一工作循环的次数，因此跃迁速率也就与布朗马达所处环境的ATP的浓度相关．当环境的ATP浓度达到饱和时，系统趋于稳定．此时再增大跃迁速率也不会改变布朗马达运动的概率流的大小，概率流趋于稳定值．

4．结 论

本文提出了一个有限宽度的高斯跃迁模型，运用这一模型可以描述布朗马达的运动．在讨论定向运动时，假定布朗马达在各种状态之间的跃迁发生在跃迁点附近一个有限宽度上，这种跃迁体现化学过程与力学过程的耦合．计算结果表明，在这种情况下存在沿轨道正向的定向几率流，其大小受温度、跃迁速率和跃迁宽度等因素的影响．这种理论可以涵盖早期的定点跃迁模型和均匀跃迁模型，是讨论多态动力学体系相关问题的一个更一般的理论框架．

感谢卓益忠研究员给予的指导和帮助．

[1] Howard J, Hudspeth A J and Vale R D 1989 *Nature* **342** 154
[2] Bao J D, Abe Y and Zhuo Y Z 1998 *Phys. Rev.* E **58** 2931
[3] Zhan Y, Zhao T J, Yu H and Song Y L 2002 *Chin. Phys.* **11** 624
[4] Mei D C, Chen L E, Xie G Z, Cao L and Wu D J 1999 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Edition) **8** 808
[5] Zhao T J, Zhan Y, Wu J H and Wang Y H 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 1248
[6] Zhao T J, Zhan Y, Yu H and Ji Q 2003 *Commun. Theor. Phys.*

39 121

[7] Prost J *et al* 1994 *Phys*. *Rev*. *Lett*. **72** 2652

[8] Chauwin J F, Ajdari A and Prost J 1994 *Europhys*. *Lett*. **27** 421

[9] Rousselet J *et al* 1994 *Nature* **370** 446

[10] Ajdari A and Prost J 1995 *Europhys*. *Lett*. **32** 373

[11] Lipowsky R and Harms T 2000 *Eur*. *Biophys*. *J*. **29** 542

[12] Zhao T J, Zhan Y, Zhuo Y Z and Wu X Z 1999 *Chin*. *Sci*. *Bull*. **21** 1956

[13] Julicher F, Ajdari A and Prost J 1997 *Rev*. *Mod*. *Phys*. **69** 1269

[14] Parmeggiani A, Julicher F, Ajdari A and Prost J 1999 *Phys*. *Rev*. E **60** 2127

[15] Risken H 1984 *The Fokker Planck Equation* (Berlin: Springer)

A nonuniform ratchet model with Gauss-transition rates for Brownian motor*

Li Wei[1)] Zhao Tong-Jun[1)2)] Guo Hong-Yong[2)] Ji Qing[1)] Zhan Yong[1)]

(*Institute of Sciences*, *Hebei University of Technology*, *Tianjin* 300130, *China*)

(*Institute of Electrical Engineering*, *Hebei University of Technology*, *Tianjin* 300130, *China*)

(Received 27 June 2003; revised manuscript received 8 March 2004)

Abstract

A nonuniform ratchet model with Gauss-transition rates is proposed to discuss the directional motion of Brownian particles in an asymmetrical periodic potential. It is assumed that the particles experience several internal states in a single mechanical-chemical circle. In this model, the transition rates between different states are position-dependent, which have the form of Gaussian function. For any internal states, the probability distribution as a function of time and position may be expanded near the transition points to any rank if necessary. Finally, the focus of our study is concentrated on a two-state model, in which we choose $(M, K) = (2, 2)$ and calculate the average current as a function of the transition width, temperature and transition rate. It is revealed that the transition width influences the current greatly.

Keywords: Brownian particle, Gauss transition, probability current

PACC: 0540, 0250, 0520D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10375016), and the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant Nos. A2004000005 and B2001113).