

外部信号驱动下胶原粒子在谐振 势场中的协作效应^{*}

覃 莉 包景东[†]

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2008 年 4 月 10 日收到, 2008 年 7 月 16 日收到修改稿)

基于朗之万方程研究了一个运动在简谐势场中胶原粒子的热力学行为, 给出了其在周期信号驱动下的有效温度和耗散功的解析表达式. 结果表明, 外部周期搅拌能够聚合环境热能传递给胶原粒子, 使其有效温度大幅度增加, 这是势场、外部信号及噪声的协作机理所引起, 但是在共振条件下, 外界所作的耗散功也达到极大.

关键词: 耗散功, 有效温度, 周期信号, 协作效应

PACC: 0570L, 0540, 0500

1. 引 言

经典热力学研究一个系统在平衡态或经历一个准静态过程的热性质, 未涉及时间参量. 但实际的物理和化学过程均是在有限时间内完成的, 且总是伴随着热量的产生, 因此经典热力学只是一个理想化的理论. 若运用于不可逆过程, 仅能给出一些热力学态函数和过程量之间的不等式. 而传统的非平衡统计力学局限于线性响应区域的近平衡系统, 例如涨落耗散定理、昂萨格倒易关系等, 也不能处理任意的有限时间非平衡过程.

近年来, 小系统非平衡热力学引起了实验和理论上极大关注^[1], 一些研究者利用布朗运动观点建立了涨落功理论: Jarzynski 等式^[2]、Crooks 关系^[3]等, 将非平衡过程功与平衡态间的自由能差严格地联系起来. 这些涨落功理论适用于偏离平衡任意远的有限时间和有限尺度系统. 与平衡态热力学用态函数计算过程量的思路相反, 涨落功理论通过计算功这个过程量来确定某态的热力学态函数. 由于无约束的微观粒子作自由布朗运动, 它的方均涨落位移是发散的, 而利用光学陷阱可以将其俘获在一个局域内. 这里, 光学陷阱是指将一个折射率高于周围介质的透明微观粒子置于聚焦激光束. 通过研究光学陷

阱中的纳米大小的胶原粒子的功分布^[4-6], 实验验证了上述涨落功理论. 注意到在这类实验中, 胶原粒子所感受到的是一个中心做平行移动或弹性系数随时间变化的简谐势场, 亦可以是非简谐势场^[7]. 结果显示外界对系统所作平均功与环境温度无关. 假如再对胶原粒子施加一个周期信号, 使简谐势场中心从一个态变化到另一个态时还做周期性振荡, 会产生什么效果呢? 无疑给实验提供了新的话题.

如所周知, 在准静态热力学过程中, 忽略了摩擦所产生的热, 而对于有限时间热力学, 系统在外源的“搅拌”强迫作用下, 将聚合吸收周围的能量, 导致其温度升高. 另一方面, 人们对动力学共振和随机共振已有了大量的理论和实验研究^[8-11]. 然而, 对于共振条件下可能产生的负面效应, 例如能量耗散的极大, 很少被人们揭示和探讨. 如果小系统所处的环境是一个由有限自由度的快变化量所等效构成, 那么, 当外界对系统所作功的部分耗散到环境的份额过大, 将会影响环境的温度, 这对器件是有害的.

本文从动力学和非平衡热力学相结合的角度出发, 建立了一个精确可解的耗散振子随机热力学模型. 第二节运用拉普拉斯变换方法求解朗之万方程, 给出了系统有效温度的解析表达式; 第三节计算了系统从一个平衡态到另一个平衡态过程中所作的耗散功, 发现耗散功在通常共振条件下, 同样达到极

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10674016)和教育部博士点基金(批准号: 20050027001)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

大, 第四节给出了本文的小结.

2. 受迫耗散振子的有效温度

2.1. 白噪声情况

假定一个质量为 m 的胶原粒子, 处在频率为 ω_0 的简谐势场中, 受到周围环境的白噪声与外部周期信号的作用. 其运动由以下朗之万方程描述:

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = \epsilon(t) + A\cos(\omega t), \quad (1)$$

式中 γ 为阻尼系数, $\epsilon(t)$ 为高斯白噪声, 满足 $\epsilon(t) = 0$ 和 $\epsilon(t)\epsilon(t') = 2m\gamma k_B T\delta(t - t')$, 其中 T 为环境温度, k_B 是玻尔兹曼常数, 本文取无量纲单位 $k_B = m = A = 1.0$.

对 (1) 式进行拉普拉斯变换, 得到暂态解

$$\begin{aligned} x(t) = & \left[1 - \omega_0^2 \int_0^t H(s) ds \right] x_0 + H(t) v_0 \\ & + \frac{1}{m} \int_0^t H(t-s) \epsilon(s) ds \\ & + \frac{A}{m} \int_0^t H(t-s) \cos(\omega s) ds, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v(t) = & v_0 h(t) - \omega_0^2 x_0 H(t) \\ & + \frac{1}{m} \int_0^t h(t-s) \epsilon(s) ds \\ & + \frac{A}{m} \int_0^t h(t-s) \cos(\omega s) ds, \quad (2) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} H(t) &= L^{-1}(\hat{H}(p)), \\ \hat{H}(p) &= \frac{1}{p^2 + \gamma p + \omega_0^2}, \\ h(t) &= \dot{H}(t). \end{aligned}$$

应用留数定理, 求得响应函数

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \hat{H}(p) e^{pt} dp \\ &= E \exp(p_1 t) + F \exp(p_2 t), \\ h(t) &= E p_1 \exp(p_1 t) + E p_2 \exp(p_2 t), \quad (3) \end{aligned}$$

式中 $E = \frac{1}{(p_1 - p_2)}$, $F = \frac{1}{(p_1 - p_2)}$, p_1, p_2 是方程 $p^2 + \gamma p + \omega_0^2 = 0$ 的两个根, 它们的实部均为负.

进而求得粒子的位移和速度的一次矩和二次矩

$$\langle x(t) \rangle = \left[1 - \omega_0^2 \int_0^t H(s) ds \right] x_0 + H(t) v_0 + \frac{A}{m} \int_0^t H(t-s) \cos(\omega s) ds, \quad (4)$$

$$\langle v(t) \rangle = v_0 h(t) - \omega_0^2 x_0 H(t) + \frac{A}{m} \int_0^t h(t-s) \cos(\omega s) ds, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle = & x_0^2 + \left[v_0^2 - \frac{k_B T}{m} \right] H^2(t) + 2 x_0 v_0 H(t) \left[1 - \omega_0^2 \int_0^t H(s) ds \right] \\ & + \frac{A^2}{m^2} \left[\int_0^t H(t-s) \cos(\omega s) ds \right]^2 + \left[\omega_0^2 x_0^2 - \frac{k_B T}{m} \right] \int_0^t H(s) ds \left[\omega_0^2 \int_0^t H(s) ds - 2 \right] \\ & + 2 x_0 \frac{A}{m} \left[1 - \omega_0^2 \int_0^t H(s) ds \right] \left[\int_0^t H(t-s) \cos(\omega s) ds \right] \\ & + 2 H(t) v_0 \frac{A}{m} \left[\int_0^t H(t-s) \cos(\omega s) ds \right], \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle v^2(t) \rangle = & \frac{k_B T}{m} - 2 x_0 v_0 \omega_0^2 H(t) h(t) + \left[v_0^2 - \frac{1}{m} k_B T \right] h^2(t) + \left[\omega_0^2 x_0^2 - \frac{k_B T}{m} \right] \omega_0^2 H^2(t) \\ & + \frac{A^2}{m^2} \left[\int_0^t h(t-s) \cos(\omega s) ds \right]^2 + 2 \frac{A}{m} \left[v_0 h(t) - \omega_0^2 x_0 H(t) \right] \int_0^t h(t-s) \cos(\omega s) ds. \quad (7) \end{aligned}$$

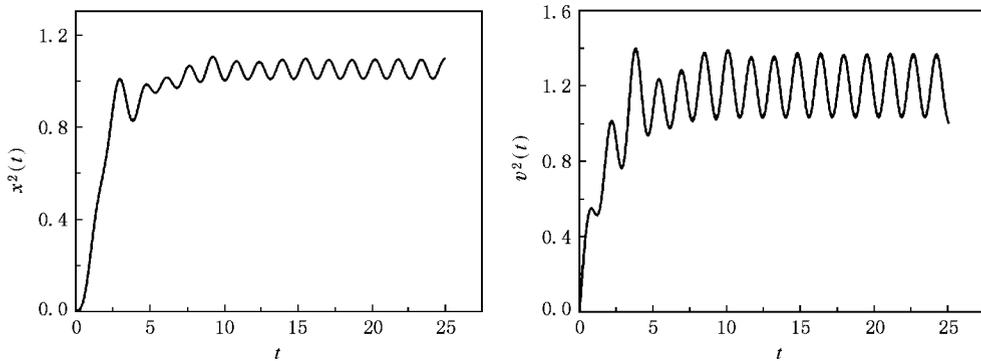


图 1 位移和速度的二次矩随时间的变化(所取参数为 $T = 1.0, \gamma = 0.5, \omega_0 = 1.0, \omega = 2.0, x_0 = 0, v_0 = 0, x_0^2 = 0, v_0^2 = 0$)

系统经一段弛豫时间 t_0 后,其所有物理量的平均随时间以 $2\pi/\omega$ 周期性变化,如图 1 所示.我们根据系统的平均总能量来定义系统的有效温度

$$k_B T_{\text{eff}} = \frac{\omega}{2\pi} \int_{t_0}^{t_0 + \frac{2\pi}{\omega}} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 [x(t) - x(t_0)]^2 \right) dt. \quad (8)$$

将(4)–(7)式代入(8)式,取 $t_0 \rightarrow \infty$ 极限,获得

$$T_{\text{eff}} = T + \frac{A^2}{4m} \frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2 \gamma^2}. \quad (9)$$

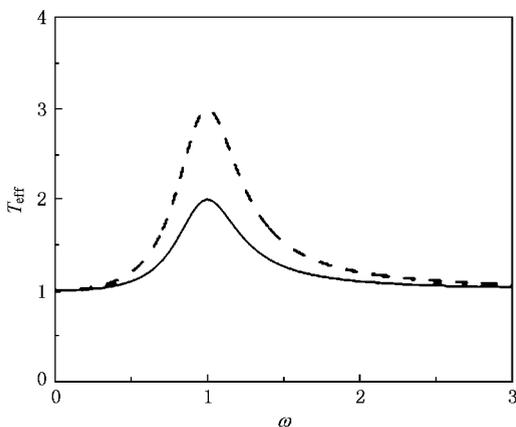


图 2 白噪声环境下系统有效温度随信号频率的变化(所取参数 $T = 1.0, \gamma = 0.5, \omega_0 = 1.0$. 实线是(8)式的结果,虚线是文献[12]的结果)

在图 2,我们给出了系统的有效温度随外部信号频率的变化关系.从(8)式可以看出:当 $\omega = \omega_0$, 即谐振子的固有振荡和外部信号周期振荡之间发生同步和协作时, T_{eff} 有极大值 $T_{\text{max}} = T + \frac{A^2}{4m\gamma^2}$; 当 ω

$\rightarrow 0$, 即信号的周期 $\frac{2\pi}{\omega} \rightarrow \infty$ 时,此即为通常意义下的准静态过程, $T_{\text{eff}} = T$; 当 $\omega \rightarrow \infty$ 时, $T_{\text{eff}} = T$, 这是由于信号的快速变化使系统没有时间聚合环境的热能而使自身的温度升高.清楚地可见,两个极端频率下(即搅拌很慢或很快),系统的温度与环境的温度相同,而对于一般的信号频率,系统的有效温度都要高于其在准静态过程的值.文献[12]由系统的平均动能来确定它的有效温度 $\frac{1}{2} k_B T_{\text{eff}} = \frac{1}{2} m \overline{v^2(t)}_{\text{st}}$, 其结果为图 2 的虚线.其由于没有考虑系统作“荡秋千”运动所带来的势能变化,除了两个极端频率与本文结果一样外,其他频率下,文献[12]的结果比本文的要大一些.这是因为系统达到稳定后一个信号周期内的平均势能比平均动能小,如图 1 所示.

2.2. 准单色噪声情况

真实的环境往往是复杂的,粒子对它的运动速度会有记忆效应;而包含各种频谱的白噪声应被一个准单色噪声所代替.故一般情况下人们要考虑一个非马尔可夫过程.简谐噪声^[13,14]作为一种低频部分丰富、高频部分衰减的准单色噪声,被广泛地应用.此时粒子的运动由以下广义朗之万方程^[15]描述:

$$m\ddot{x} + m \int_0^t \gamma(t-s) \dot{x}(s) ds + m\omega_0^2 x = \epsilon(t) + A \cos(\omega t). \quad (10)$$

随机力关联函数与阻尼核函数之间满足涨落耗散定理 $\epsilon(t)\epsilon(t') = mk_B T \gamma(t-t')$, 记忆阻尼核函数取作

$$\chi(t-s) = \frac{\eta_0 \Omega^4}{u_1^2 - u_2^2} \left[\frac{1}{u_1} \exp(u_1 |t-s|) - \frac{1}{u_2} \exp(u_2 |t-s|) \right], \quad (11)$$

式中 u_1, u_2 为方程 $u^2 + \Gamma u + \Omega^2 = 0$ 的两个根, 这里 η_0 是系统的阻尼强度, Γ 和 Ω 分别为简谐噪声的阻尼和频率参数.

在简谐噪声背景下, 我们给出系统的有效温度表达式

$$T_{\text{eff}} = T + \frac{A^2}{2m} \left[\frac{E p_1^2}{p_1^2 + \omega^2} E_1 + \frac{F p_2^2}{p_2^2 + \omega^2} F_1 + \frac{G p_3^2}{p_3^2 + \omega^2} G_1 + \frac{M p_4^2}{p_4^2 + \omega^2} M_1 \right], \quad (12)$$

式中的系数被写在附录 A 里.

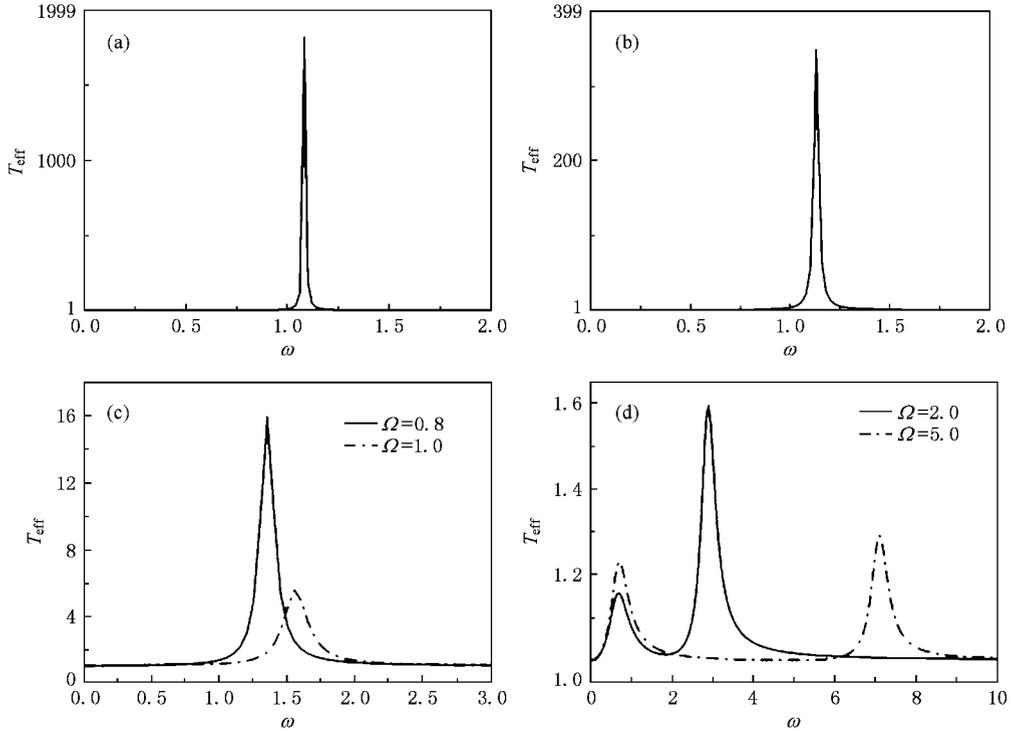


图 3 系统有效温度随信号频率的变化(参数 $T=1.0, \omega_0=1.0, \eta_0=1.0, \Gamma=1.0$) (a) $\Omega=0.4$ (b) $\Omega=0.5$ (c) 实线: $\Omega=0.8$, 点划线: $\Omega=1.0$ (d) 实线: $\Omega=2.0$, 点划线: $\Omega=5.0$

在图 3 中, 我们画出了在固定谐振频率 ω_0 和不同噪声频率 Ω 下, 系统有效温度作为外部信号频率 ω 的函数. 为使动力学共振得以发生, 这里取 $\eta_0 < 2\omega_0$, 即系统处于欠阻尼情况. (a) 和 (b) 分别给出了简谐噪声处于过阻尼 ($\Gamma^2 - 4\Omega^2 > 0$) 和临界阻尼 ($\Gamma^2 - 4\Omega^2 = 0$) 区域时, 系统有效温度随 ω 的变化情况. 当 $\Omega \rightarrow 0$ 时, T_{eff} 在 $\omega = \omega_0$ 处发散, 显示纯粹的力学共振. 这是因为由 (11) 式和涨落耗散定理知, 此时简谐噪声的有效强度趋于 0, 系统的运动退化为无噪声无阻尼的确定性情况. 在临界阻尼和过阻尼这两个区域, 由于 Ω 很小, 有效噪声强度 $\alpha = 2\eta_0 \Omega^4 T$ 亦很小, 胶原粒子主要受外部信号和谐振势场的调制作用, 因而共振峰很高, 且共振频率接近势频率 ω_0 . (c) 和 (d) 给出了噪声处于欠阻尼区域 ($\Gamma^2 - 4\Omega^2 < 0$)

时, 系统有效温度随 ω 的变化关系. 由于 Ω 的增大, 噪声振荡加剧, 从而导致系统动能和势能剧烈振荡而平均值降低, 因而在这个区域共振峰变低. 当 $\Omega > \omega_0$ 时, 出现两个共振频率, 这两个共振频率分别位于 $(0, \omega_0)$ 和 $\omega > \Omega$ 的范围内. 当 $\Omega \leq \omega_0$ 时, 只有一个共振发生, 可以理解为两个共振频率的重叠. 无论 Ω 处于过阻尼、临界阻尼还是欠阻尼区域, 同白噪声情况一样, 当信号频率趋于无穷大和无穷小时, 系统的温度与环境的温度相同, 而对于一般频率信号驱动下的系统, 有效温度高于其在准静态过程的值.

3. 动力学共振下的耗散功

系统有效温度很高是由于信号持续地作用在其之上, 使其远离平衡态的结果. 如果系统初始处于平

平衡态,且第 n 个周期后信号变为常数力 A , 则系统最终会达到与初始相同的力学和热平衡态. 现以简谐噪声为例,用 Jarzynski 功来研究系统在这两个相同平衡态过程中耗散的能量. Jarzynski 定义外界对系统做功如下^[2,16]:

$$W = - \int_0^\tau \dot{f}(t)x(t)dt, \quad (13)$$

这里 $\tau = \frac{2n\pi}{\omega}$. 由于第 n 个周期后, $f(t) = A$ 为常数,对 W 没有贡献. 平均耗散功 $W_d = W - \Delta F$, 其中 ΔF 为系统在初末态的自由能之差. 若选 τ 为

信号周期的整数倍, 则 $\Delta F = 0$, 故

$$W_d = W = - \int_0^\tau \dot{f}(t)x(t)dt. \quad (14)$$

将(4)式代入(14)式,可计算得

$$W_d = EE_2 + FF_2 + GG_2 + MM_2, \quad (15)$$

式中的系数被列在附录 B 里.

图 4(a)–(d)给出了不同 Ω 下,外界所作的平均耗散功随信号频率的变化曲线.可以看出,耗散功随外部信号的变化规律与系统有效温度随 ω 变化规律是一样的.这是由于系统所聚合的环境能量最终会耗散到热浴环境之中.

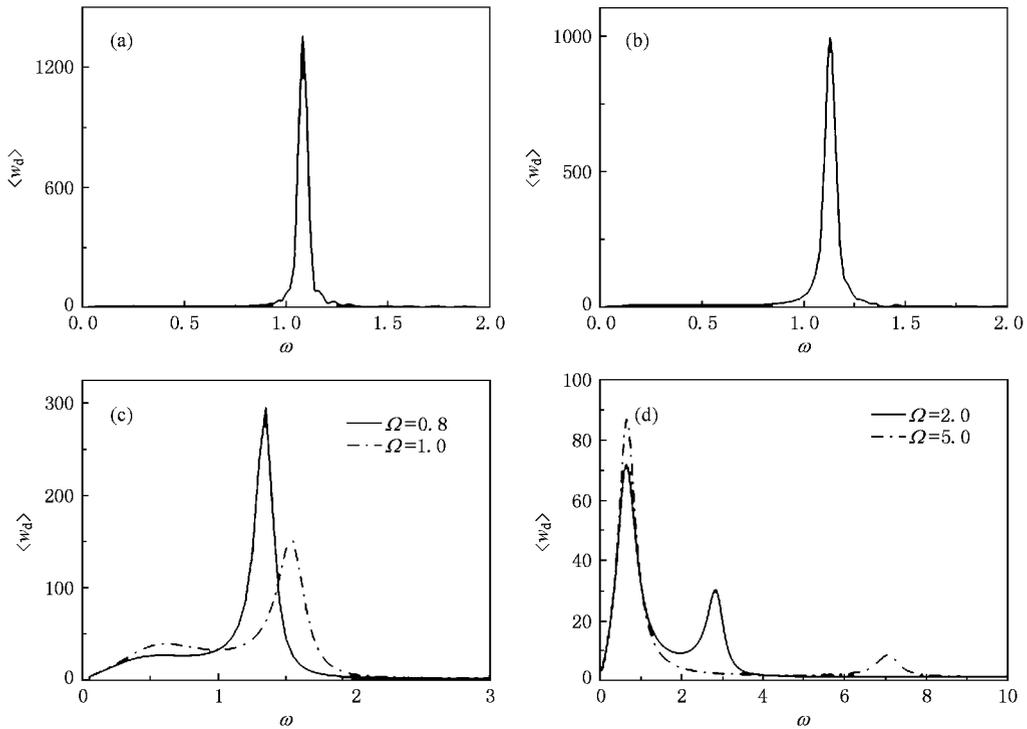


图 4 简谐噪声环境中耗散功随信号频率的变化(所取参数 $n = 20$,其他参数同图 3)

在图 5,我们对周期信号驱动下的系统有效温度和耗散功进行比较,绘出了 $\Omega = 2.0$ 时这两个物理量随 ω 的变化曲线.可以看出,系统有效温度和耗散功的峰出现在同一 ω 处,也就是说,当系统在外部信号强迫作用下获得的有效温度极大时,外界所作的耗散功亦极大.

4. 结 论

本文提出用系统有效温度的提高来刻画周期信号驱动下的胶原粒子远离平衡态的程度,其中胶原粒子被模型为一个处于简谐势中的点粒子,并受到

一个外部周期力的驱动.我们用系统在稳定态时一个信号周期内的平均能量来定义它的有效温度,这既计及了系统作“荡秋千”运动所带来的势能变化,也包含了由于“搅拌”所引起的动能的增加.结果发现,随着外部信号频率的变化,系统有效温度发生非单调变化.在 $\omega \rightarrow 0$ 和 $\omega \rightarrow \infty$ 两个极端频率下,系统的有效温度与热浴温度相同;对于有限信号频率,系统有效温度被大幅度增加.在白噪声环境中,周期信号与谐振势的协作效应发生在两者的频率相等处.在简谐噪声情况下,由于这种准单色噪声与谐振子的匹配,则信号能与系统发生协作效应的频率发生移动.如果我们选择非平衡过程进行的时间为信号

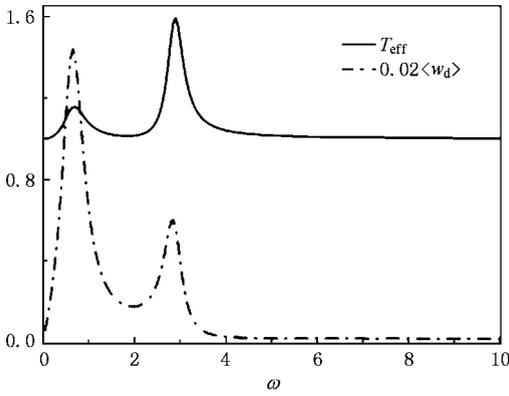


图 5 系统有效温度和耗散功随外部信号变化曲线(所取参数 $\Omega = 2.0$, 其他参数同图 3)

周期的整数倍,那么系统的初末态位型相同,则在两个相同平衡态之间系统自由能未发生改变,外界所作功完全变为耗散功而损失到环境中,本文的结果显示在动力学共振条件下,系统所耗散的能量也是极大的.

附录 A

$$E = \frac{p_1^2 + \Gamma p_1 + \Omega^2}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)(p_1 - p_4)},$$

$$F = \frac{p_2^2 + \Gamma p_2 + \Omega^2}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)(p_2 - p_4)},$$

$$G = \frac{p_3^2 + \Gamma p_3 + \Omega^2}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)(p_3 - p_4)},$$

$$M = \frac{p_4^2 + \Gamma p_4 + \Omega^2}{(p_4 - p_1)(p_4 - p_2)(p_4 - p_3)},$$

$$E_1 = \frac{E}{2} + \frac{Fp_2}{p_1 + p_2} + \frac{Gp_3}{p_1 + p_3} + \frac{Mp_4}{p_1 + p_4},$$

$$F_1 = \frac{F}{2} + \frac{Ep_1}{p_2 + p_1} + \frac{Gp_3}{p_2 + p_3} + \frac{Mp_4}{p_2 + p_4},$$

$$G_1 = \frac{G}{2} + \frac{Ep_1}{p_3 + p_1} + \frac{Fp_2}{p_3 + p_2} + \frac{Mp_4}{p_3 + p_4},$$

$$M_1 = \frac{M}{2} + \frac{Ep_1}{p_4 + p_1} + \frac{Fp_2}{p_4 + p_2} + \frac{Gp_3}{p_4 + p_3}.$$

p_1, p_2, p_3, p_4 是方程

$$p^4 + \Gamma p^3 + \left(\Omega^2 + \frac{\eta_0 \Omega^2}{\Gamma} + \omega_0^2 \right) p^2 + (\eta_0 \Omega^2 + \omega_0^2 \Gamma) p + \omega_0^2 \Omega^2 = 0$$

的四个根,它们的实部也均为负.

附录 B

$$E_2 = \frac{A^2}{m} \frac{n\pi\omega}{p_1^2 + \omega^2} + \frac{(1 - e^{p_1\tau}) \left[\left(\frac{A^2}{m} - A \right) r_1^2 \omega^2 - A\omega^4 \right]}{p_1(p_1^2 + \omega^2)^2},$$

$$F_2 = \frac{A^2}{m} \frac{n\pi\omega}{p_2^2 + \omega^2} + \frac{(1 - e^{p_2\tau}) \left[\left(\frac{A^2}{m} - A \right) r_2^2 \omega^2 - A\omega^4 \right]}{p_2(p_2^2 + \omega^2)^2},$$

$$G_2 = \frac{A^2}{m} \frac{n\pi\omega}{p_3^2 + \omega^2} + \frac{(1 - e^{p_3\tau}) \left[\left(\frac{A^2}{m} - A \right) r_3^2 \omega^2 - A\omega^4 \right]}{p_3(p_3^2 + \omega^2)^2},$$

$$M_2 = \frac{A^2}{m} \frac{n\pi\omega}{p_4^2 + \omega^2} + \frac{(1 - e^{p_4\tau}) \left[\left(\frac{A^2}{m} - A \right) r_4^2 \omega^2 - A\omega^4 \right]}{p_4(p_4^2 + \omega^2)^2}.$$

[1] Bustamante C ,Liphardt J ,Ritort F 2005 *Physics Today* **58**(7)43
 [2] Jarzynski C 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2690
 Jarzynski C 1997 *Phys. Rev. E* **56** 5018
 [3] Crooks G E 1999 *Phys. Rev. E* **60** 2721
 Crooks G E 2000 *Phys. Rev. E* **61** 2361
 [4] Wang G M ,Sevick E M ,Mittag E *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 050601
 [5] Carberry D M ,Reid J C ,Wang J M *et al* 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 140601
 [6] Trepagnier E H ,Jarzynski C ,Ritort F *et al* 2004 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** 15038
 [7] Blickle V ,Speck T ,Helden L *et al* 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 070603

[8] Haynes G R ,Noth G A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2143
 [9] Gillan M J 1987 *J. Phys. C* **20** 3621
 [10] Chang L D ,Chakravarty S 1984 *Phys. Rev. B* **29** 130
 [11] Bai Z W ,Song Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6220 (in Chinese)
 [白占武、宋艳丽 2007 物理学报 **56** 6220]
 [12] Huang K S 2006 *Lectures on Statistical Physics and Protein Folding* (Shanghai :Fudan press) p125
 [13] Dykman M I ,McClintock P V E ,Stein N D *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 933
 [14] Bao J D ,Song Y L ,Ji Q ,Zhuo Y Z 2005 *Phys. Rev. E* **72** 011113
 [15] Bao J D ,Hanggi P ,Zhuo Y Z 2005 *Phys. Rev. E* **72** 061107
 [16] Mai T ,Dhar A 2007 *Phys. Rev. E* **75** 061101

The cooperative effect of a colloidal particle driven by a periodic signal in a harmonic potential^{*}

Qin Li Bao Jing-Dong[†]

(*Department of Physics ,Beijing Normal University ,Beijing 100875 ,China*)

(Received 10 April 2008 ; revised manuscript received 16 July 2008)

Abstract

For a colloidal particle in a harmonic potential driven by a periodic signal ,we study its thermodynamic behavior and obtain the exact expressions of the effective temperature and dissipated work by solving the corresponding Langevin equation . The results show that due to the cooperative effect of the potential ,the signal and the noise ,the energy of the environment can be transferred to the colloidal particle through the stirring action of the periodic driving force ,which makes the effective temperature of the system increase greatly . Under the condition of dynamical resonance ,the dissipated work also reaches its maximum .

Keywords : dissipated work , effective temperature , periodic signal , cooperative effect

PACC : 0570L , 0540 , 0500

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674016) and the Doctor Education Fund of Ministry of Education of China (Grant No. 20050027001).

[†] Corresponding author. E-mail : jdbao@bnu.edu.cn