



空间非均匀摩擦棘轮的输运性能

曹佳慧 刘艳艳 艾保全 黄仁忠 高天附

Transport performance of spatial non-uniform friction ratchets

Cao Jia-Hui Liu Yan-Yan Ai Bao-Quan Huang Ren-Zhong Gao Tian-Fu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210802

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210802>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

空间非均匀摩擦棘轮的运输性能*

曹佳慧¹⁾ 刘艳艳¹⁾ 艾保全²⁾ 黄仁忠¹⁾ 高天附^{1)†}

1) (沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034)

2) (华南师范大学物理与电信工程学院, 广州 510006)

(2021年4月26日收到; 2021年7月28日收到修改稿)

本文研究了耦合布朗粒子在空间非均匀摩擦环境下的定向运输问题, 并进一步讨论了摩擦系数振幅、空间相位差等因素对耦合粒子质心平均速度及能量转化效率的影响. 研究发现, 耦合粒子的质心平均速度和能量转化效率随摩擦系数振幅的变化都能呈现多峰结构. 这一结果表明摩擦阻尼并不总是阻碍布朗粒子的定向运动, 一定条件下合适的摩擦环境还能多次增强耦合布朗棘轮的运输性能. 此外, 在小摩擦系数振幅条件下通过改变外力振幅、外势不对称度、空间相位差还能诱导摩擦棘轮流反转的产生. 本文所得结论不仅有助于理解摩擦环境中耦合布朗粒子的运输性能, 还可为微观纳米机器的设计与粒子的筛选分离技术提供理论指导.

关键词: 摩擦棘轮, 质心平均速度, 能量转化效率, 摩擦系数振幅**PACS:** 02.30.-f, 05.60.-k, 05.40.-a**DOI:** 10.7498/aps.70.20210802

1 引言

生物分子马达是一种广泛存在于细胞内部的蛋白质大分子, 尺度通常在纳米量级, 其主要功能是将化学反应高效地转化为定向的轨道运动, 因此又被称为天然的纳米机器^[1,2]. 分子马达沿轨道做定向运动的同时可以将 ATP 分子中含有的化学能转化为机械运动, 进而持续地为物质运输过程提供动力^[3]. 作为细胞内物质运输的载体, 生物分子马达参与了众多的生命活动, 从肌肉收缩、DNA 的复制到细胞内的有丝分裂等都是分子马达做功的结果. 此外, 在医学领域, 分子马达在运输物质时受到的阻碍可能会引发多种神经性疾病, 如老年痴呆症、遗传性感觉神经病等^[4]. 特别地, 从分子马达角度开展药物设计可以有效地寻找到对应的快速诊断和治疗疾病的方法^[5,6]. 因此, 对生物分子马达的运输问题展开研究在物理学、生物学、医学等方

面都具有重要的实际意义^[7-9].

为了深入研究分子马达的定向运输, 人们基于布朗运动理论建立了布朗棘轮模型^[10-13]. 近些年来, 越来越多的科学家开始致力于布朗棘轮定向运输的研究. 如 Dinis 和 Quintero^[14] 通过建立过阻尼布朗棘轮模型, 发现合适的外力振幅能够促进布朗粒子的定向运输. 同时, Li 等^[15] 研究了空间对称外势中的耦合布朗粒子, 发现一定的耦合强度可以诱导流反转. Yan 等^[16] 还研究了耦合马达拖动负载时的定向运输, 发现粒子在一定的脉冲相位下会发生流反转, 且存在合适的脉冲相位能使棘轮的定向运输达到最强. 值得关注的是, 上述棘轮研究中考虑的都是单位摩擦阻尼条件下布朗粒子的运动情况. 为了深入研究介质阻尼对布朗粒子定向运动的影响, 本课题组进一步研究了布朗棘轮在溶液摩擦对称性破缺条件下的定向运输, 发现一定摩擦条件下外力振幅可以使耦合粒子的几率流曲线呈现多峰结构, 合适的摩擦阻尼系数比还能够增强耦

* 国家自然科学基金 (批准号: 11347003) 和沈阳师范大学高层次人才支持计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tianfugao@synu.edu.cn

合布朗粒子的定向输运^[17]. 此外, Gehlen 等^[18]还发现在溶液环境的摩擦不为 1 时, 一定条件下摩擦阻尼会抑制棘轮的定向输运. 需要指出的是, 在我们的早期工作中考虑的都是空间摩擦均匀条件下布朗粒子的运动. 事实上, 生物体内的细胞环境十分复杂, 细胞内的浓度、杂质等都在时刻发生变化. 由于分子马达受到的介质阻尼并不总是固定不变^[19–21], 因此本文进一步通过选取空间非均匀摩擦条件对不同阻尼环境下耦合布朗粒子的定向运动进行研究能够更加深入理解摩擦棘轮的定向输运特性.

此外, 人们对生物分子马达研究的另一兴趣点则是其能量转化的高效性. 研究发现几种常见分子马达的能量转化效率均超过 70%, 个别马达效率甚至接近于 100%, 远远高于人造机器的效率. 如 Muneyuki 小组在非平衡统计力学理论的基础上应用单分子技术研究了 F_1 马达合成与水解 ATP 的过程, 发现在较大力矩下其能量转化效率是非常高的, 几乎接近于 100%^[22]. 然而, 通过将实验结果与理论研究进行比较可以发现, 棘轮模型计算得到的效率远远低于实验上测得的分子马达的效率. 如早期 Sumithra 等^[23]在空间不对称外势中构建的布朗棘轮模型, 研究发现粒子能量转化效率只有千分之几, 最大值也仅有千分之六, 这与实验研究相比有着数量级的差别. 关于空间非均匀摩擦环境中布朗粒子输运特性的研究, 人们提出了随粒子位置变化的空间非均匀摩擦形式, 但研究的并不深入. 如 Kharkongor 小组^[24]在研究非均匀空间摩擦对棘轮输运性能的影响时, 发现负载作用下的棘轮热力学效率与摩擦系数呈非单调关系. 鉴于目前对耦合布朗马达在空间非均匀环境中的输运性能问题仍不十分清楚, 因此本文深入研究了在空间非均匀摩擦环境中耦合布朗粒子的定向运动, 在此基础上进一步讨论了布朗粒子做功时的能量转化效率问题.

本文通过建立空间非均匀摩擦棘轮模型, 主要讨论了摩擦系数振幅, 空间相位差, 外势不对称度等对耦合布朗棘轮定向输运的影响, 并进一步讨论了在空间非均匀摩擦环境中耦合棘轮拖动负载做功时的能量转化效率问题. 研究发现一定条件下合适的摩擦阻尼振幅能够促进耦合布朗粒子的定向输运和能量转化效率. 同时, 研究还发现在小摩擦系数振幅作用下分子马达还会出现流反转现象. 本文所得结论不仅能够帮助人们深入了解空间非均

匀摩擦环境中耦合布朗粒子的定向输运特性, 同时还可作为摩擦棘轮性能优化的理论指导.

2 空间非均匀摩擦棘轮模型

本文主要研究空间非均匀摩擦环境中耦合布朗马达的输运性能, 在周期外力与负载的作用下其动力学行为可由朗之万方程描述:

$$\gamma_i(x_i) \dot{x}_i(t) = -\partial U(x_1, x_2; l) / \partial x_i + F(t) - \lambda + \sqrt{2\gamma_i(x_i) D} \xi_i(t), \quad i = 1, 2. \quad (1)$$

式中 $x_i(t)$ 为 t 时刻两个耦合布朗粒子的位置; $F(t)$ 为随时间变化的周期外力, λ 为负载; D 为热噪声强度, 满足关系 $D = k_B T_0$, k_B 为玻尔兹曼常量, T_0 为溶液环境温度; $\xi_i(t)$ 为高斯白噪声, 且满足如下统计关系:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad (2)$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad i, j = 1, 2. \quad (3)$$

(1) 式中, 外势 $U(x_1, x_2; l)$ 的具体形式为

$$U(x_1, x_2; l) = V_r(x_i) + V_i(x_1, x_2; l), \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

式中, $V_r(x_i)$ 为棘轮势, 具体表达形式为

$$V_r(x_i) = \cos(x_i) + \frac{\Delta}{8} \cos(2x_i), \quad (5)$$

式中, Δ 为棘轮势的不对称系数. 同时, 两个粒子的耦合相互作用为 $V_i(x_1, x_2; l)$, 其具体关系为

$$V_i(x_1, x_2; l) = \frac{k}{2}(x_2 - x_1 - l)^2, \quad (6)$$

式中, k 为耦合强度, l 为弹簧的自由长度.

分子马达在空间中运动的介质环境通常是不均匀的, 所以介质的不均匀性为分子马达提供了一个空间变化的摩擦. 进而, 布朗粒子的阻尼系数会随空间位置的不同而变化, 并且通常是不等的. 因此, 耦合粒子受到的摩擦力也是不相同的. 数学上, (1) 式中的 $\gamma_i(x_i)$ ($i = 1, 2$) 表示第 i 个粒子的阻尼系数, 可采用如下的形式进行描述^[25]:

$$\gamma_i(x_i) = \gamma_0(1 - \alpha \sin(x_i + \theta)), \quad i = 1, 2, \quad (7)$$

式中, γ_0 为摩擦系数振幅, α 是非均匀性参数, θ 为相位差. 物理上, 由于非均匀性参量需要满足 $0 \leq \alpha \leq 1$ 才能保证摩擦系数为正, 因此存在关系 $\gamma_0(1 - \alpha) \leq \gamma_i(x_i) \leq \gamma_0(1 + \alpha)$. 这种摩擦系数的选择改变了棘轮左右空间的对称性. 值得注意的是, 本文研究的布朗粒子所处的摩擦环境不是空间均匀的, 而是受溶液环境 (主要是空间位置) 的改

变而发生变化的. 因此, 通过采用非均匀摩擦阻尼的形式可进一步研究摩擦棘轮的定向输运行为和输运性能. 此外, 摩擦棘轮还将受到外力 $F(t)$ 的作用, 其具体形式为

$$F(t) = A \sin(\omega t), \quad (8)$$

式中, A 为外力振幅, ω 为外力频率, $\tau = 2\pi/\omega$ 为外驱动力的周期.

为了深入研究耦合布朗粒子在空间非均匀摩擦环境中的定向输运行为, 通常以布朗粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 来描述耦合棘轮的定向运输, 其具体表达式可以表示为^[26]:

$$\langle v \rangle = \frac{1}{2} (\langle v_1 \rangle + \langle v_2 \rangle), \quad (9)$$

$$\langle v_i \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \dot{x}_i(t) dt, \quad i = 1, 2, \quad (10)$$

式中, $\langle \cdot \rangle$ 表示系综平均, T 为耦合粒子的演化时间, $\langle v_i \rangle$ 表示第 i 个布朗粒子的平均速度. 关于耦合布朗粒子输运性能的研究, 仅知道粒子质心的平均速度是远远不够的, 因此本文又深入讨论了摩擦棘轮的能量转化效率问题.

由于第 i 个粒子受到的总势

$$U_T(x_i, t) = \left[\sin(x_i) + \frac{\Delta}{4} \sin(2x_i) \right] + \frac{k}{2} (x_2 - x_1 - l)^2 - x_i F(t) + x_i \lambda, \quad i = 1, 2. \quad (11)$$

根据随机能量理论^[27], 对于 i 粒子, 由时变外力引起的系统的输入功率为

$$\begin{aligned} P_{m_i} &= \frac{1}{T} \int_0^T \left\langle \frac{\partial U_T(x_i(t), t)}{\partial t} \right\rangle dt \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \left\langle \frac{\partial (-x_i F(t))}{\partial t} \right\rangle dt \\ &= -\frac{A\omega}{T} \int_0^T \langle x_i \cos(\omega t) \rangle dt. \end{aligned} \quad (12)$$

因此, 摩擦棘轮总的输入功率为

$$P_{in} = \sum_{i=1}^2 P_{m_i}. \quad (13)$$

此外, 耦合布朗粒子在空间非均匀介质中拖动负载做功时总的输出功率为

$$P_{out} = \sum_{i=1}^2 \lambda \cdot \langle v_i \rangle. \quad (14)$$

因此, 摩擦棘轮的能量转化效率为布朗粒子拖动负

载做的有用功率与时变外力输入到棘轮的总输入功率之比, 具体表达式为^[16]

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{\sum_{i=1}^2 \lambda \langle v_i \rangle}{-\frac{A\omega}{T} \sum_{i=1}^2 \int_0^T \langle x_i \cdot \cos(\omega t) \rangle dt}. \quad (15)$$

本文采用二阶龙格-库塔算法对空间非均匀介质中耦合布朗粒子的定向运动进行数值模拟, 主要研究空间非均匀摩擦环境下系统各参量对棘轮输运性能的影响. 为了能够得到稳定的系综平均值, 本文模拟了 1.5×10^3 个轨道, 每个轨道演化 2×10^3 个周期, 时间步长取 $h = 1 \times 10^{-3}$. 文中所有物理量均采用无量纲化参量, 无特殊说明时参量取 $k = 20$, $\lambda = 0.1$, $D = 0.35$, $\omega = \pi$, $\alpha = 0.9$.

3 结果与讨论

3.1 摩擦系数振幅对耦合棘轮定向输运的影响

为了研究摩擦棘轮的定向运输问题, 本文深入讨论了空间非均匀摩擦环境中耦合棘轮的输运随摩擦参量变化的行为. 首先, 在不同外力振幅 A 条件下, 耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化关系, 如图 1 所示. 研究表明, 在小摩擦系数振幅条件下 (如 $\gamma_0 = 0.1$ 附近), 随着 γ_0 的变化耦合粒子的定向运动方向能够发生改变, 即由负向转变为正向, 说明耦合粒子的几率流发生了反转. 随着 γ_0 的继续增加, 耦合粒子几率流的变化曲线能够呈现多峰结构. 如当 $A = 2.5$ 时, 几率流曲线存在 2 个峰值; 当 $A = 3.0$ 和 3.5 时, 几率流曲线存在 3 个峰值; 当 $A = 4.0$ 时, 几率流曲线存在 4 个峰值. 上述结果表明, 一定条件下摩擦棘轮质心平均速度峰值的个数会随着外力振幅 A 的增大而逐渐增加. 这是由于外力振幅 A 的增加会引起简谐力大小的改变, 这就意味着 A 越大简谐力变化的范围也越大, 相应地, 耦合粒子的质心平均速度在摩擦力与时刻变化的简谐力、耦合作用力等多种因素共同协作下被不断地促进或抑制. 因此, 一定条件下几率流峰值的个数会随 A 的变化而增加. 然而, 随着摩擦系数振幅 γ_0 的继续增大, 摩擦棘轮平均速度的极值会逐渐减小且最终趋于零. 这是因为当 γ_0 较大时, 耦合粒子受到的摩擦力增大, 此时其他外力

很难再与黏滞阻力竞争, 因此耦合粒子不容易产生定向运动, 进一步摩擦棘轮的速度将最终趋于零. 此外, 曲线出现的交叉现象表明外力振幅对耦合粒子定向运输的影响并非单调. 因此, 一定条件下通过选取合适的摩擦系数振幅和外力振幅可共同促进摩擦棘轮的定向运输.

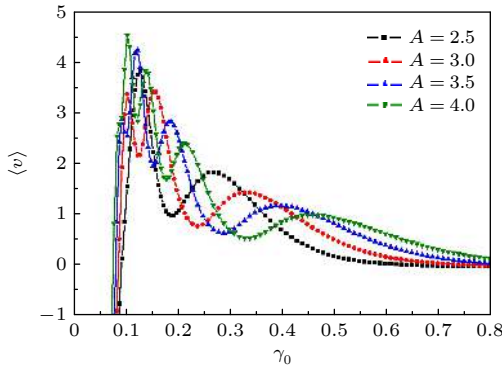


图 1 不同外力振幅 A 下质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线, 其中 $\Delta = 1, \theta = 0.75\pi$

Fig. 1. The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 under different external force amplitude A , where $\Delta = 1, \theta = 0.75\pi$.

为了进一步研究摩擦系数振幅对耦合棘轮定向运输的影响, 本文深入讨论了在不同外势不对称度 Δ 下耦合布朗粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 与摩擦系数振幅 γ_0 的变化关系, 如图 2 所示. 从图中可以发现, 较小的摩擦系数振幅更容易诱导摩擦棘轮流反转的产生, 且随摩擦系数振幅的逐渐增加粒子流曲线仍会呈现多峰结构. 这是因为耦合布朗粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 在摩擦力与简谐力 $F(t)$ 、耦合作用力等其他外力同时存在时将被促进或抑制, 因此几率流曲线能够产生多个极值. 然而, 当 γ_0 较大时, 粒子受到的摩擦阻力会随之变大, 相应地布朗粒子克服摩擦阻力时的定向运动能力将会减弱, 因此几率流曲线会变得逐渐平缓并趋于零. 更为有趣的是, 在较小的摩擦系数振幅作用下, 外势不对称度 Δ 还会影响耦合布朗粒子几率流的峰值变化, 如图 2 插图所示. 在小 γ_0 范围内, 如 $\gamma_0 < 0.09$, 几率流曲线的两个峰值都随外势不对称度的增加 (由负到正) 逐渐变小. 特别地, 当 Δ 较大时, 如 $\Delta = 3$, 曲线的第一个峰值消失且其附近的变化行为近似于单调变化. 上述现象主要是因为外势不对称度 Δ 的增加会引起外势 $V_r(x)$ 结构的改变, 平均而言耦

合粒子受到的外势作用会随 Δ 的增加而逐渐变大 (如下图 2(b) 所示). 因此, 在小摩擦范围内布朗粒子几率流的峰值会随 Δ 的增加而减小. 关于不对称度 Δ 的影响, 下文还有更详细的讨论. 由此可见, 在一定摩擦系数振幅条件下通过选取合适的外势不对称度也能够增强耦合粒子的定向运输.

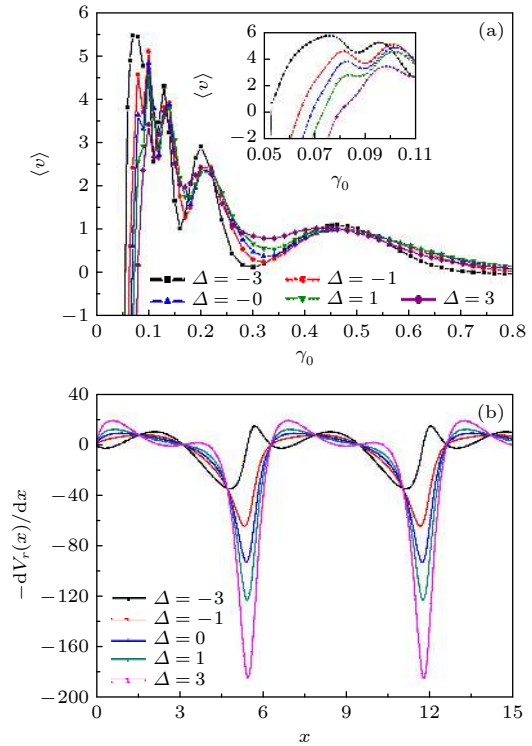


图 2 (a) 不同外势不对称度 Δ 下质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线; (b) 外势作用力 $-dV_r(x)/dx$ 随外势不对称度 Δ 变化的曲线, 其中 $A = 4, \theta = 0.75\pi$

Fig. 2. (a) The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 under different asymmetric parameter Δ ; (b) the curves of the external potential force $-dV_r(x)/dx$ varying with asymmetric parameter Δ , where $A = 4, \theta = 0.75\pi$.

图 3 给出不同摩擦空间相位差 θ 下耦合布朗粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 与摩擦系数振幅 γ_0 的变化关系. 从图中可以发现, 在一定的空间相位差 θ 下, 摩擦棘轮的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随 γ_0 的变化同样会出现多个极值. 如 $\theta = 0.75\pi$ 时, 曲线在 $\gamma_0 = 0.1$ 附近能够产生极大值. 由此说明摩擦阻尼并不总是抑制棘轮的定向运输, 合适的摩擦条件还可以增强摩擦棘轮的定向运输. 这是由于随着摩擦系数振幅 γ_0 的增加, 耦合粒子受到的黏滞阻尼将增大, 因此摩擦棘轮产生的几率流逐渐变小. 由于几率流的减小会导致耦合粒子受到的黏滞阻尼减小, 因此, 当黏滞

阻力减小到一定程度时摩擦棘轮的几率流将会增大, 而增大的几率流又会再次增大耦合粒子受到的黏滞阻尼. 当溶液的黏滞阻力再次增大后耦合粒子的定向输运会再次减小. 因此, 对于图 1, 图 2, 图 3 中不同的外部条件下 (外力振幅 A , 外势不对称度 Δ 和空间相位差 θ) 耦合粒子几率流随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线都能呈现多个极值. 然而, 当 γ_0 较大时摩擦棘轮的整体输运行为都呈 $\langle v \rangle \rightarrow 0$. 这是因为摩擦系数振幅越大, 粒子受到的摩擦阻力也越大, 粒子很难形成定向运动. 因此, 在较大的 γ_0 下摩擦系数振幅的增加将抑制摩擦棘轮定向输运的产生. 值得关注的是, 当 θ 较小时 (如 $\theta = 0.25\pi$), 耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle < 0$, 即布朗粒子沿 x 轴的负方向运动, 同时粒子的反向输运速度随 θ 的增加而逐渐减小. 通过数值计算发现, 当 θ 增加到 $\theta \simeq 0.57\pi$ 时耦合粒子质心平均速度的整体行为趋于零, 即 $\langle v \rangle \rightarrow 0$. 然而, 当 $\theta > 0.57\pi$ 时, 耦合粒子质心平均速度的整体行为变成 $\langle v \rangle > 0$, 即布朗粒子会沿 x 轴的正方向运动且正向输运速度随 θ 的继续增加而增大. 上述结果表明, 空间摩擦相位差 θ 对耦合棘轮定向输运的影响是非单调的, 只有在合适的摩擦系数振幅与空间相位差的共同作用下耦合粒子的定向输运才能达到最强.

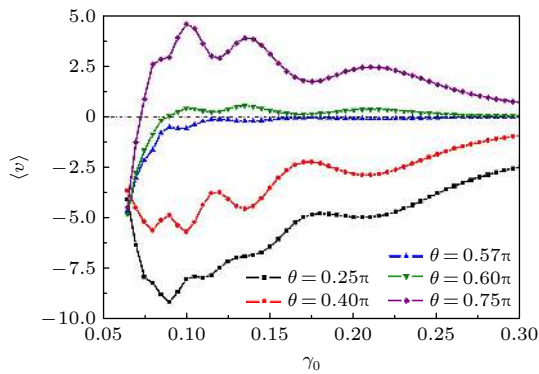


图 3 不同空间相位差 θ 下质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线, 其中 $A = 4$, $\Delta = 1$

Fig. 3. The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 under different spatial phase difference θ , where $A = 4$, $\Delta = 1$.

3.2 摩擦系数振幅对耦合棘轮输运性能的影响

上文讨论了摩擦系数振幅对耦合棘轮定向输运的影响, 由于摩擦棘轮的能量转化效率能够在一定程度上反应耦合粒子的输运性能, 因此本文进一

步讨论了摩擦系数振幅对耦合棘轮能量转化效率的影响. 由于上文讨论中粒子流存在反转现象, 物理上为了保证摩擦棘轮的能量转化效率有意义, 接下来讨论的棘轮效率图像都是在相应流为正的区间上作出的曲线.

图 4 表示的是不同外力振幅 A 下摩擦系数振幅 γ_0 对摩擦棘轮能量转化效率 η 的影响. 可见, 图 4 与图 1 的变化规律相似, 即随着摩擦系数振幅的变化耦合棘轮的能量转化效率同样能够产生多个极值并最终趋于零. 同时, 当耦合粒子的正向输运速度 $\langle v \rangle$ 达到极大值时相应的能量转化效率也会近似达到极大值. 如当 $A = 2.5$ 时, 耦合粒子几率流曲线出现两个极大值, 相应的能量转化效率 η 也会产生两个极大值. 这一结果可由能量转化效率 η 的定义 (15) 式进行分析, 当外力振幅与频率一定时输入功率 P_{in} 的变化较小, 此时能量转化效率 η 主要由输出功率 P_{out} 决定. 又由 (14) 式可知, $P_{out} \propto \langle v \rangle$, 所以一定条件下 η 近似正比于 $\langle v \rangle$. 因此, 在一定的摩擦系数振幅变化范围内摩擦棘轮的能量转化效率能够产生和几率流同样数量的极值. 此外, 经过数值计算与分析, 得到当 $A = 2.5$ 时效率的最大值为 $\eta_{max} = 0.0053$, 对应的摩擦系数振幅的最优值为: $\gamma_{0opt} = 0.295$. 随着 γ_0 的不断增大, 由于耦合粒子的几率流逐渐减小, 最终有 $\langle v \rangle \rightarrow 0$, 相应地会有 $P_{out} \rightarrow 0$, 则摩擦棘轮的能量转化效率也会趋于 0. 此外, 研究还发现随着外力振幅 A 的增加, 摩擦棘轮的能量转化效率整体减小, 这个结果表明较大的外力振幅对摩擦棘轮的能量转化效率具有抑制作用.

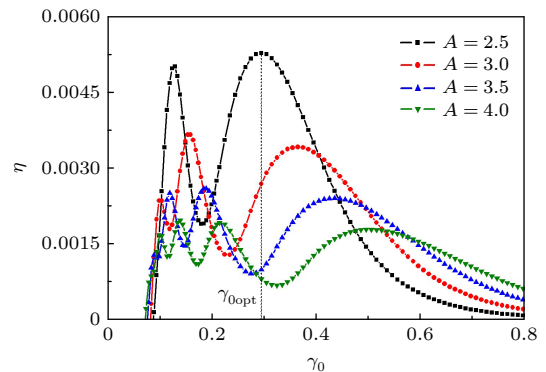


图 4 不同外力振幅下能量转化效率 η 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线, 其中 $\Delta = 1 = 1$, $\theta = 0.75\pi$

Fig. 4. The curves of the energy conversion efficiency η varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 under different external force amplitudes A , where $\Delta = 1 = 1$, $\theta = 0.75\pi$.

为了更全面地了解摩擦棘轮的输运性能, 本文又讨论了在不同外势不对称度 Δ 下摩擦系数振幅 γ_0 对粒子能量转化效率 η 的影响, 所得结果如图 5 所示. 研究表明, 耦合棘轮能量转化效率的变化同几率流曲线的变化趋势一致, 即随着摩擦系数振幅的增加耦合粒子的能量转化效率也呈现多峰结构. 根据图 4 类似的分析可得, 一定条件下能量转化效率与耦合粒子的质心平均速度呈正比关系. 因此在耦合粒子的输运速度 $\langle v \rangle$ 达到极大时, 相应的能量转化效率也会近似达到极大值. 这一结果表明, 通过选取合适的外势不对称度与摩擦系数振幅, 不仅能够促进耦合粒子的定向输运同时还可以增强摩擦棘轮的能量转化效率. 此外, 在图 2 中可以发现当 $\gamma_0 > 0.5$ 时, 耦合粒子的质心平均速度随摩擦系数振幅的增加逐渐减小直至 0, 因此相应的摩擦棘轮的能量转化性能也会逐渐减弱并最终趋于 0.

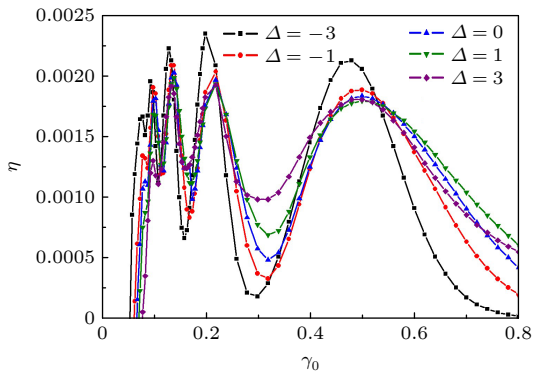


图 5 不同外势不对称度 Δ 下能量转化效率 η 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线, 其中 $A = 4$, $\theta = 0.75\pi$
 Fig. 5. The curves of the energy conversion efficiency η varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 under different external asymmetric parameter Δ , where $A = 4$, $\theta = 0.75\pi$.

根据图 3 的讨论可知, 当摩擦系数的相位差 θ 较大时耦合布朗粒子的质心平均速度才会呈现 $\langle v \rangle > 0$. 因此, 本文进一步分析了当空间相位差较大时, 如 $\theta = 0.75\pi$ 时耦合粒子的能量转化效率 η 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化关系, 如图 6 所示. 结果表明摩擦棘轮的能量转化效率随 γ_0 的变化曲线与粒子几率流的变化规律类似, 即也会有波峰与波谷的产生. 产生上述现象的原因可由图 4 和图 5 的类似分析可得, 耦合粒子质心平均速度的多峰结构同样会导致能量转化效率多峰结构的产生. 因此, 当 γ_0 较小时通过选取合适的摩擦相位差 θ 也有助于摩擦棘轮定向输运效率的提高. 然而, 当 γ_0 较大时 (如

$\gamma_0 > 0.22$), η 逐渐减小并趋于零. 这是因为此时的摩擦系数 $\gamma_i(x_i)$ 会变得相对较大, 在强烈的摩擦阻尼作用下耦合粒子进行能量转化的能力逐渐减小并会最终消失.

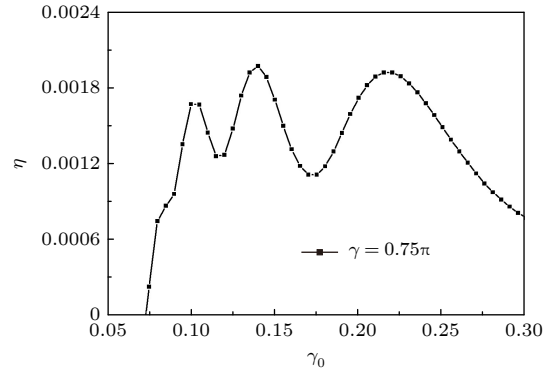


图 6 $\theta = 0.75\pi$ 时能量转化效率 η 随摩擦系数振幅 γ_0 的变化曲线, 其中 $A = 4$, $\Delta = 1$
 Fig. 6. The curve of the energy conversion efficiency η varying with the amplitude of the friction coefficient γ_0 , where $\theta = 0.75\pi$, $A = 4$, $\Delta = 1$.

3.3 摩擦棘轮的流反转

3.3.1 外力振幅 A 的影响

图 1—图 3 的研究表明, 摩擦棘轮的定向输运行为随外力振幅 A 、空间相位差 θ 及外势不对称度 Δ 的变化均不是单调的. 为了更深入理解摩擦棘轮的输运特性, 本文又进一步研究了耦合粒子几率流随外力振幅 A 的变化关系, 如图 7 所示. 研究表明, 在小 γ_0 条件下外力振幅 A 能够诱导摩擦棘轮产生流反转, 并且在一定条件下还能使耦合粒子的平均速度达到极值. 以 $\gamma_0 = 0.07$ 和 $\gamma_0 = 0.08$ 为例, 当 $0 < A < 2.5$ 时, 随着外力振幅的增加耦合粒子的平均速度 $\langle v \rangle < 0$ 且呈现反向增大现象, 并在 $A = 2.5$ 附近时达到最大值. 当 $2.5 < A < 5.0$ 时, 随着外力振幅的继续增加摩擦棘轮的速度反向减小, 并在 A 到达某一临界值时摩擦棘轮的平均速度 $\langle v \rangle = 0$. 然而, 当 A 大于某一临界值时摩擦棘轮的平均速度 $\langle v \rangle > 0$, 且 $\langle v \rangle$ 随外力振幅的继续增加而增大, 并能最终达到稳态. 同时, 研究还发现随着摩擦系数振幅 γ_0 的继续增加 (如 $\gamma_0 > 0.1$ 后), 耦合粒子几率流曲线整体呈现 $\langle v \rangle > 0$, 并且随外力振幅 A 的增加摩擦棘轮还能够呈现多峰结构且峰值变化的幅度随外力振幅的增加而逐渐减小. 粒子流曲线呈现这种多峰结构主要是由于本文中的摩擦阻尼为空间非均匀摩擦, 由于外驱动力与摩擦阻力

之间的持续竞争, 耦合粒子的定向输运速度将被增强或抑制, 因此摩擦棘轮的 $\langle v \rangle$ 能够获得多个极值. 上述研究结果表明, 小 γ_0 能够诱导摩擦棘轮流反转的产生, 随着 γ_0 的增加摩擦棘轮的流反转现象消失并且能够呈现多峰结构.

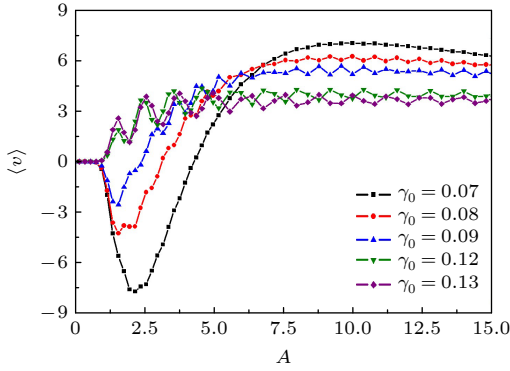


图 7 质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随外力振幅 A 的变化曲线, 其中 $\Delta = 1, \theta = 0.75\pi$
 Fig. 7. The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with the amplitude of the external force A , where $\Delta = 1, \theta = 0.75\pi$.

3.3.2 外势不对称度 Δ 的影响

为了深入分析摩擦棘轮的流反转现象, 本文又讨论了不同空间相位差 θ 下耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随外势不对称度 Δ 的演化行为, 如图 8 所示. 研究表明, 随着外势不对称度的变化几率流可正可负, 并且平均速度 $\langle v \rangle$ 在合适的空间不对称条件下能够分别达到极值. 经过数值计算与分析, 研究发现当 $\theta = 0.75\pi$ 时, 摩擦棘轮正向质心平均速度能够达到最大值 $v_{\max}^+ = 5.8$, 对应的外势不对称度的最优值为 $\Delta_{\text{opt}}^+ = -5.6$; 当 $\theta = 0.25\pi$ 时, 负向质心平均速度能够达到最大值 $v_{\max}^- = -12$, 对应的 $\Delta_{\text{opt}}^- = -4.8$. 这说明在空间外势不对称的情况下, 存在最优的不对称度 Δ 能使耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 获得极值. 然而, 当 Δ 较大时几率流几乎趋于零. 这是因为当 Δ 很大时, 耦合粒子在巨大的不对称外势中受到很大的外势阻碍作用, 此时耦合粒子在短时间内很难逃出较深的势垒, 因此粒子无法产生定向运动. 此外, 在 $\Delta = 1$ 附近, 当 $\theta > 0.5\pi$ 时, 粒子的平均速度 $\langle v \rangle$ 随空间相位差 θ 的增加而增大; 当 $\theta < 0.5\pi$ 时, 粒子的平均速度 $\langle v \rangle$ 随空间相位差 θ 的增加而反向减小. 这一现象与图 3 所得到的结论一致, 说明耦合棘轮的定向输运在合适的外势结构与摩擦的空间相位差两种因素共同作用下能够达到最强.

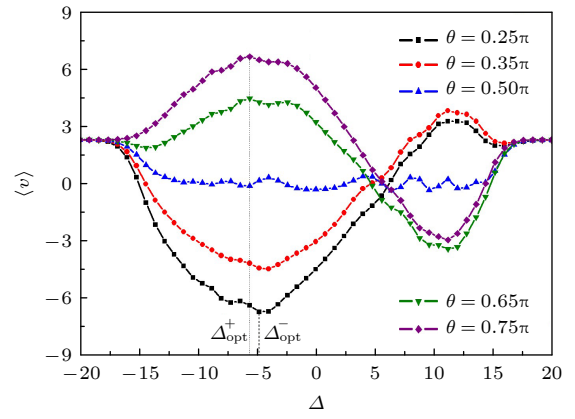


图 8 质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随外势不对称度 Δ 的变化曲线, 其中 $A = 4, \gamma_0 = 0.08$
 Fig. 8. The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with asymmetric parameter Δ , where $A = 4, \gamma_0 = 0.08$.

3.3.3 空间相位差 θ 的影响

图 8 的研究结果已表明空间相位差 θ 能够改变摩擦棘轮的定向输运方向, 且棘轮的输运速度随空间相位差的变化关系并不是单调的. 为了深入研究空间相位差对摩擦棘轮输运的影响, 本文详细讨论了不同外力振幅作用下耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随空间相位差 θ 的变化关系. 图 9 的研究结果表明, 所有曲线均关于空间相位差 $\theta = 0.5\pi$ 呈反对称, 并且随着 θ 的变化摩擦棘轮还能够产生流反转现象. 此外, 在较小的外力振幅作用下耦合粒子的几率流曲线还能够产生极值. 如当 $A = 1.5$ 时, 耦合粒子的几率流曲线在 $\theta = 0.3\pi$ 附近产生了波峰, 并随着 θ 的继续增加在 $\theta = 0.7\pi$ 附近产生了波谷. 这是因为当外力振幅较小时, 耦合粒子的定向运动在摩擦力与简谐力、耦合作用力等外力的相互协作与竞争中将被促进或抑制, 因此 $\langle v \rangle$ 随 θ 的变化曲线能够呈现多个极值, 同时也说明了合适的空间相位差能够促进耦合粒子定向输运的产生. 有趣的是, 随着 A 的增加 (如 $A = 3$ 与 $A = 4.5$), 耦合粒子几率流曲线的峰值消失且近似于一条倾斜的直线. 随着空间相位差 θ 的增加耦合粒子的负向速度逐渐减小且在 $\langle v \rangle = 0$ 后正向速度随 θ 的继续增加而逐渐变大, 该结论与图 3 的结论一致. 这是由于此时较大的简谐力对摩擦棘轮的定向输运行为起主导作用, 因此耦合粒子的质心平均速度 $\langle v \rangle$ 近似呈单调变化. 上述分析表明, 只有在合适的空间相位差与外力共同作用下才能提高摩擦棘轮的定向输运.

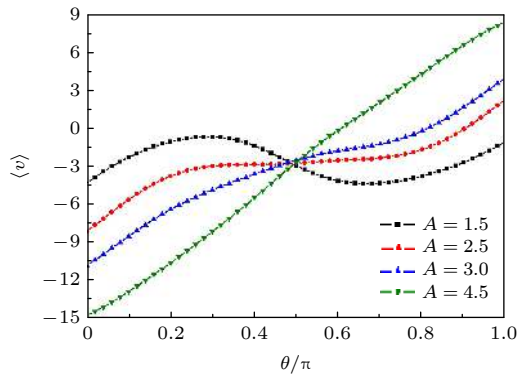


图9 质心平均速度 $\langle v \rangle$ 随空间相位差 θ 的变化曲线, 其中 $\Delta = 1$, $\gamma_0 = 0.08$

Fig. 9. The curves of the center-of-mass mean velocity $\langle v \rangle$ varying with spatial phase difference θ , where $\Delta = 1$, $\gamma_0 = 0.08$.

4 结论

本文主要研究了空间非均匀摩擦环境中耦合布朗粒子的定向输运与性能, 并详细讨论了在不同外力振幅、空间相位差、外势不对称度下摩擦系数振幅对耦合粒子质心的平均速度及粒子能量转化效率的影响. 研究发现, 耦合粒子的定向输运随摩擦系数振幅的变化曲线呈现多峰结构, 即通过选取合适的摩擦系数振幅能使耦合粒子的质心平均速度获得极值. 这一结论表明耦合粒子的定向运动并不总是受到空间摩擦阻尼的阻碍, 一定条件下的摩擦环境还能多次增强耦合布朗粒子的定向输运. 此外, 值得关注的是在合适的较小摩擦系数振幅环境下, 摩擦棘轮的定向运动能够获得相对更大的数值.

同时, 摩擦棘轮拖动负载做功的能量转化效率与耦合粒子的速度曲线存在类似的变化行为, 也就是说合适的摩擦阻尼还能够增强摩擦棘轮的输运性能. 此外, 在小摩擦振幅条件下, 外力振幅、外势不对称度、空间相位差均能够诱导摩擦棘轮的流反转. 本文所得结论不仅能够帮助人们深入地了解耦合粒子在空间非均匀摩擦环境中的定向输运性能,

还可以为粒子的分离筛选技术以及人造纳米机器的设计提供一定的理论启发.

参考文献

- [1] Shu Y G, Ouyang Z C 2007 *Physics* **36** 735 (in Chinese) [舒咬根, 欧阳钟灿 2007 物理 **36** 735]
- [2] Xie P 2010 *Int. J. Biol. Sci.* **6** 665
- [3] Guo X Q 2019 *Chin. J. Nat.* **41** 56 (in Chinese) [郭晓强 2019 自然杂志 **41** 56]
- [4] Ross J L 2012 *P. Natl. Acad. Sci. Usa.* **109** 5911
- [5] Nara Y, Niemi H, Steinheimer J, Stöcker H 2017 *Phys. Lett. B* **769** 543
- [6] Mateos J L, Arzola A V, Volke-Sepveda K 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 168104
- [7] Palmigiano A, Santamiello F, Cerutti A, Penkov D, Purushothama D 2018 *Sci. Rep.* **8** 3198
- [8] Linke H 2002 *Appl. Phys. A* **75** 167
- [9] Van den Heuvel M G L, Dekker C 2007 *Science* **317** 333
- [10] Zhang H W, Wen S T, Zhang H T, Li Y X, Chen G R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 078701
- [11] Doering C R 1995 *Nuovo Cimento* **17** 685
- [12] Astumian R D, Bier M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **2** 1766
- [13] Gao T F, Chen J C 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 065002
- [14] Dinis L, Quintero R N 2015 *Phys. Rev. E* **91** 032920
- [15] Li P C, Chen H B, Fan H, Shen W M, Zheng Z G 2017 *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 475003
- [16] Yan M Y, Zhang X, Liu C H, Huang R Z, Gao T F, Zheng Z G 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 190501 (in Chinese) [延明月, 张旭, 刘晨昊, 黄仁忠, 高天附, 郑志刚 2018 物理学报 **67** 190501]
- [17] Zhang X, Cao J H, Ai B Q, Gao T F, Zheng Z G 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 100503 (in Chinese) [张旭, 曹佳慧, 艾保全, 高天附, 郑志刚 2020 物理学报 **69** 100503]
- [18] Gehlen S V, Evstigneev M, Reimann P 2009 *Phys. Rev. E* **79** 031114
- [19] Lombardo J, Broadwater D, Collins R, Cebe K, Brady R, Harrison S 2019 *Hum. Pathol.* **86** 129
- [20] Toyoshima H 1951 *J. Japan. Forest. Soc.* **33** 203
- [21] Toyoshima H 1951 *J. Japan. Forest. Soc.* **33** 83
- [22] Li M, Ouyang Z C, Shu Y G 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 188702 (in Chinese) [黎明, 欧阳钟灿, 舒咬根 2016 物理学报 **65** 188702]
- [23] Sumithra K, Sintés T 2001 *Physica A* **297** 1
- [24] Kharkongor D, Reenbohn W L, Mahato Mangal C 2018 *J. Stat. Mech.* **3** 033209
- [25] Kharkongor D, Reenbohn W L, Mahato Mangal C 2016 *Phys. Rev. E* **94** 022148
- [26] Camargo S, Anteneodo C 2018 *Physica A* **495** 114
- [27] Sekimoto K 1997 *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 1234

Transport performance of spatial non-uniform friction ratchets*

Cao Jia-Hui¹⁾ Liu Yan-Yan¹⁾ Ai Bao-Quan²⁾Huang Ren-Zhong¹⁾ Gao Tian-Fu^{1)†}¹⁾ (*College of Physical Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China*)²⁾ (*School of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 26 April 2021; revised manuscript received 28 July 2021)

Abstract

Biomolecular motor is a kind of protein macromolecule widely existing in cells. It can convert the chemical energy contained in ATP molecules into mechanical motion, and then continuously provide power for the material transport process. In order to further study the directional transport of molecular motors, the Brownian ratchet model is established based on Brownian motion theory. However, most of the considerations in previous studies are devoted to the motion of Brownian particles under the condition of unit friction damping. In order to further study the influence of medium damping on the directional motion of Brownian particles, our group further study the directional transport of Brownian ratchets in different damping environments, and find that the suitable friction damping coefficient ratio can increase the center-of-mass mean velocity of the coupled Brownian particle. It should be pointed out that the above studies of Brownian ratchets consider the motion of Brownian particles under the condition of uniform spatial friction. In fact, the cell environment in organism is very complex, and the concentration and impurities in the cell change all the time. The medium damping of molecular motor is not always fixed, so choosing the space non-uniform friction condition to study the directional motion of coupled Brownian particles under different damping environments can better understand the directional transport characteristics of friction ratchets. In addition, other point of interest in the research of biomolecular motors is the high efficiency of energy conversion. Experimental results show that the energy conversion efficiencies of most molecular motors are more than 70%, and the efficiencies of some motors are even close to 100%. However, by comparing the experimental results with the theoretical studies, it can be found that the efficiency calculated by ratchet model is much lower than that measured in experiment. Therefore, in this paper, the directional motion of coupled Brownian particles in the space non-uniform friction environment is studied in depth, and the energy conversion efficiency of Brownian particles is further discussed.

The results show that the center-of-mass mean velocity varying with the amplitude of the friction coefficient presents a multi-peak structure. This conclusion shows that friction damping does not always hinder the directional motion of coupled particles, and the frictional environment under certain conditions can also enhance the directional transport of coupled Brownian particles. At the same time, the change of the energy conversion efficiency of friction ratchets is similar to that of the center-of-mass mean velocity, which means that the proper friction damping can also enhance the transport performance of the friction ratchets. In addition, under the condition of small friction amplitude, the flow reversal of friction ratchet can be induced by external force amplitude, external potential asymmetry and spatial phase difference. The conclusions obtained in this paper can not only help people understand the directional transport performance of coupled particles in a spatially non-uniform friction environment, but also provide theoretical inspiration for particle separation and screening technology and the design of artificial nanomachines.

Keywords: friction ratchets, center-of-mass mean velocity, energy conversion efficiency, friction coefficient amplitude

PACS: 02.30.-f, 05.60.-k, 05.40.-a

DOI: 10.7498/aps.70.20210802

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11347003) and the High-level Talent Support Program of Shenyang Normal University, China.

† Corresponding author. E-mail: tianfugao@synu.edu.cn