

外力作用下反馈耦合布朗棘轮的定向输运*

王莉芳¹⁾ 高天附^{1)†} 黄仁忠¹⁾ 郑玉祥²⁾

1) (沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034)

2) (复旦大学光科学与工程系, 上海 200433)

(2012年10月19日收到; 2012年11月22日收到修改稿)

本文研究了处于外力作用下双阱棘轮势中两个反馈耦合布朗粒子的定向输运性能. 通过对过阻尼朗之万方程的数值求解, 详细讨论了外力、热噪声与势阱的不对称参数等对耦合布朗粒子的平均速度、有效扩散系数及 Pe 数的影响. 研究发现, 平均速度随外力呈周期性的变化规律. 同时耦合系统存在最优噪声强度会使定向输运达到最强. 值得指出的是棘轮系统可通过改变双阱势的结构来获得较强的定向流.

关键词: 耦合布朗棘轮, 外力, 双阱棘轮势, 平均速度

PACS: 05.40.-a, 05.40.Jc, 02.30.Yy

DOI: 10.7498/aps.62.070502

1 引言

生物体内的细胞分裂、物质运输、ATP合成、肌肉收缩等一系列重要生命活动都与分子马达的做功有着密切的联系^[1-3]. 分子马达是能够把化学能直接转化为机械能, 并沿着微管(微丝)做定向运动的酶蛋白生物分子. 为了探寻分子马达动力学机理的合理解释, 人们提出了布朗棘轮模型. 布朗棘轮是可以整流热噪声并能够产生定向运输的系统^[4-6], 其工作原理可应用于纳米技术和相关生物学等诸多领域^[7-10].

近年来, 有关布朗棘轮的定向输运研究已被广泛关注. 例如, 在温度为 T 的热浴环境中, 对两个耦合布朗粒子的输运研究表明耦合强度、粒子间的平衡位置以及跃迁率等参量都会影响棘轮系统的定向输运^[11]. 在延迟时间和非对称驱动力的作用下, 关于处在对称周期势中的布朗粒子的研究发现当驱动力的频率较低时通过改变驱动力的振幅可产生粒子流的反转; 当系统处于高频时, 存在驱动力振幅的最优值使粒子流达到最大^[12]. 另外, 关于棘轮系统的控制方面也日益受到大多数学者的关注. 通常对周期势的研究主要采用不考虑系统状

态的开环控制策略^[13,14]. 然而, 当前一些学者提出了更为实际的依赖于系统状态的闭环反馈控制策略^[15-20]. 这种控制方法在实验上可通过监测悬浮在溶液里的胶体粒子的状态来决定外势的打开或者关闭^[21]. 研究发现闭环控制下的最优耦合强度可使布朗粒子的平均速度达到最大^[22,23]. 此外, 闭环控制策略不仅可以解释相关生物分子马达的步进机理与高效率^[24-27], 而且可以改进棘轮的技术与应用^[28]. 鉴于闭环控制策略在布朗棘轮定向输运中表现出的优越性能, 本文中我们将采用该控制方法.

目前, 关于棘轮系统输运性能的研究主要关注的是布朗粒子的平均速度. 那么反馈控制下热涨落究竟如何影响耦合系统的定向输运, 这一过程我们并不十分清楚. 为了获得耦合布朗粒子定向输运性能的全面了解, 本文除计算了布朗粒子的平均速度外, 还讨论了有效扩散系数 D_{eff} 及 Pe 数. 通常关于布朗棘轮的研究采用的是分段锯齿势来描述马达与微管间的相互作用. 而本文将采用双阱棘轮势^[29,30]来代替锯齿势. 由于该棘轮势具有理论上可计算且实验上可操作的特点, 因此双阱棘轮势在棘轮系统的实现中具有重要意义. 本文通过采用闭环控制策略, 研究了处于外力作用下双阱棘轮势中

* 辽宁省教育厅科学研究一般项目(批准号: L2012386)和复旦大学重点实验室高级访问学者计划(批准号: 11FG065)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: tianfugao@163.com

两个耦合布朗粒子的定向输运性能. 有趣地发现平均速度会随外力或弹簧长度的改变而呈周期性的变化规律. 研究还发现系统存在最优噪声强度, 该强度下耦合布朗棘轮的定向输运可达最大化. 值得指出的是通过改变势阱的结构可增强棘轮系统的定向输运.

2 模型

考虑处于周期势中两个耦合布朗粒子构成的反馈控制棘轮, 采用双阱棘轮势^[29,30]

$$U(x) = -U_1 e^{-\sin^2(\pi x)/2\sin^2(\pi R)} - U_2 e^{-\sin^2(\pi(x-d))/2\sin^2(\pi R)}, \quad (1)$$

如图 1 所示, 其中 U_1 和 U_2 分别表示强阱与弱阱的深度, d 为两势阱间的距离, R 为势阱的宽度, $\beta = U_1/U_2$ 为势阱的不对称参量, 双阱棘轮势的周期为 L .

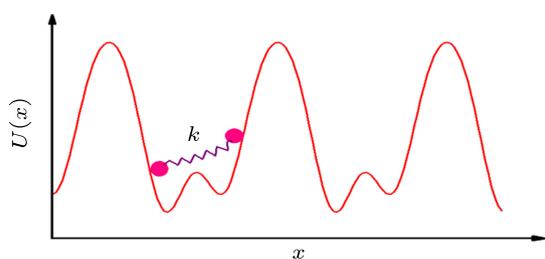


图 1 双阱棘轮势的结构示意图

采用过阻尼朗之万方程描述耦合系统的动力学行为

$$\gamma \dot{x}_1(t) = \alpha(t) F_{\text{pot}}(x_1(t)) - k(x_1 - x_2 - a) + \xi_1(t) - F, \quad (2)$$

$$\gamma \dot{x}_2(t) = \alpha(t) F_{\text{pot}}(x_2(t)) + k(x_1 - x_2 - a) + \xi_2(t) + F, \quad (3)$$

其中, t 时刻两个粒子的位置分别为 $x_1(t)$ 与 $x_2(t)$, γ 为摩擦系数, k 为弹簧的弹性系数, a 为弹簧原长. 该系统主要受高斯白噪声 $\xi_1(t)$ 与 $\xi_2(t)$ 的作用, 并满足如下统计特性:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad (4)$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (5)$$

D 为噪声强度. $F_{\text{pot}}(x_i(t))$ 表示粒子受到外势的作用, 具有如下关系:

$$F_{\text{pot}}(x_i(t)) = -U'(x_i(t)). \quad (6)$$

(2), (3) 式中 $\alpha(t)$ 为控制开关. 模型中外势的打开或关闭主要由两个耦合布朗粒子受到的平均作用力来决定. 当粒子受到的平均作用力为正时让势打开 ($\alpha(t) = 1$), 如果平均作用力为负时让势关闭 ($\alpha(t) = 0$), 故控制开关 $\alpha(t)$ 可表示为

$$\alpha(t) = \Theta(f(t)) = \begin{cases} 0, & f(t) \leq 0, \\ 1, & f(t) > 0, \end{cases} \quad (7)$$

其中 Θ 为亥维赛函数, $f(t)$ 为耦合粒子受到的平均作用力

$$f(t) = \frac{1}{2} [F_{\text{pot}}(x_1(t)) + F_{\text{pot}}(x_2(t))]. \quad (8)$$

F 为施于棘轮系统上的外力, 即方程 (2) 中的 $-F$ 表示左端粒子受到的负载力, 方程 (3) 中的 $+F$ 表示施于右端粒子上的驱动力.

为了研究涨落存在时耦合布朗粒子的输运特性, 采用棘轮系统的平均速度来描述粒子的定向输运. 平均速度的表达式如下^[31]:

$$\langle V \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \sum_{i=1}^2 \int_0^T \dot{x}_i(t) dt. \quad (9)$$

其中, $\langle \cdot \rangle$ 表示系综平均. 由于布朗粒子在一段时间内会产生扩散现象, 因此引入平均有效扩散系数 D_{eff} 来描述粒子位移的涨落, 其表达式如下:

$$D_{\text{eff}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^2 \frac{\langle x_i(t)^2 \rangle - \langle x_i(t) \rangle^2}{2 \cdot 2T}. \quad (10)$$

对于耦合布朗棘轮来说, 仅知道有效扩散系数还不能对系统的定向输运性能进行全面了解, 为此引入 Pe 数^[19,32,33], 如下式:

$$Pe = \frac{|V|L}{D_{\text{eff}}}. \quad (11)$$

Pe 数是描述布朗粒子定向运动与随机扩散之间相互竞争的物理量. 因此 Pe 数越大, 表明耦合布朗粒子的定向输运就越强.

采用随机龙格-库塔算法对方程 (2) 和 (3) 进行数值求解, 模拟了 5×10^3 条轨道, 每个轨道取 10^5 步, 时间步长 $h = 10^{-3}$, 模型参数取 $d = 0.36$, $R = 0.15$, $U_1 = 3.2$, $\beta = 0.9$, $L = 1$. 无特别说明时 $\gamma = 1.0$, $a = 0.6$, $k = 1.2$, $F = 0.05$. 为方便计算, 所有物理量已采用无量纲化处理.

3 结果和讨论

3.1 外力的影响

图 2(a) 给出不同热噪声强度 D 下, 耦合布朗粒

子的平均速度随外力 F 的变化关系. 从图中可以发现随着外力 F 的增大, 平均速度呈周期性的变化规律, 而且这种周期性会随热噪声强度的增大而变得越来越不明显. 从图 2(a) 中还发现在每个周期内, 总会存在一个外力 F 的最优值使平均速度达到最大, 说明此时耦合系统的定向输运达到最强. 在每个周期内同时也存在某 F 值使平均速度达到最小. 这一现象说明当布朗粒子受到外力、双阱棘轮势与热噪声的共同作用时, 如果棘轮势的作用强于热噪声与外力作用时, 这种情况下布朗粒子将处于势阱中而不能越过势垒. 随着噪声强度 D 的增大, 发现双阱棘轮势的作用会减小, 因此平均速度的周期性效应也逐渐减弱. 同时还发现耦合布朗粒子的平均速度会随 D 的增加而增大, 这一现象说明热噪声对平均速度会有显著影响.

图 2(b) 给出不同热噪声强度下耦合布朗粒子的有效扩散系数随外力 F 的变化关系曲线. 研究发现当热噪声强度 D 较小时, 有效扩散系数 D_{eff} 不随 F 呈明显变化, 说明温度较低时不利于耦合布朗粒子的扩散. 随着温度的升高, 有效扩散系数随 D 的变化明显起来, 说明热噪声强度 D 越大, 粒子越容易扩散, 因此粒子的平均有效扩散系数 D_{eff} 也越大.

为了进一步研究耦合布朗棘轮的定向输运性能, 图 2(c) 给出系统的 Pe 数随外力 F 的变化关系. 结果发现耦合布朗粒子的 Pe 数随外力 F 呈准周期性的变化关系, 结果与图 2(a) 中平均速度的变化规律类似. 这是因为当温度不太高时, 对于某一固定的热噪声强度 D 来说 D_{eff} 接近于常量, 而 Pe 数表示平均速度与平均有效扩散系数的比, 因此 Pe 数的改变依赖于平均速度的变化. 同时还发现当外力 F 固定时, $D \leq 0.04$ 比 $D > 0.04$ 时的 Pe 数要大. 这说明温度越高, Pe 数越小, 粒子越不容易产生定向输运. 因此, 为了获得较强的定向输运, 适当选取热噪声是非常必要的.

3.2 热噪声的影响

图 3 为不同的势阱不对称参数条件下, 耦合布朗粒子的平均速度随热噪声强度 D 的变化关系. 从图中可看出平均速度不是热噪声的单调函数. 发现当势阱的不对称参数 $\beta \geq 9$ 时, 系统存在最优噪声值 D_{opt} 使平均速度达到最大, 且 β 越大平均速度的最大值也越大. 当 $\beta < 9$ 时, 发现对于较小的热噪声, 平均速度随 D 增加, 而当 D 达到一定值时, 平均速度将不再明显变化, 且平均速度的稳定值会随着

β 的增加而增大. 这说明势阱的不对称参数对耦合系统的定向输运同样具有显著影响. 同时还发现当噪声强度较小时, 对于不同的 β , 系统的定向输运都很微弱. 这一现象表明只有当热噪声的作用强于势阱的作用时耦合系统才会产生明显的定向输运.

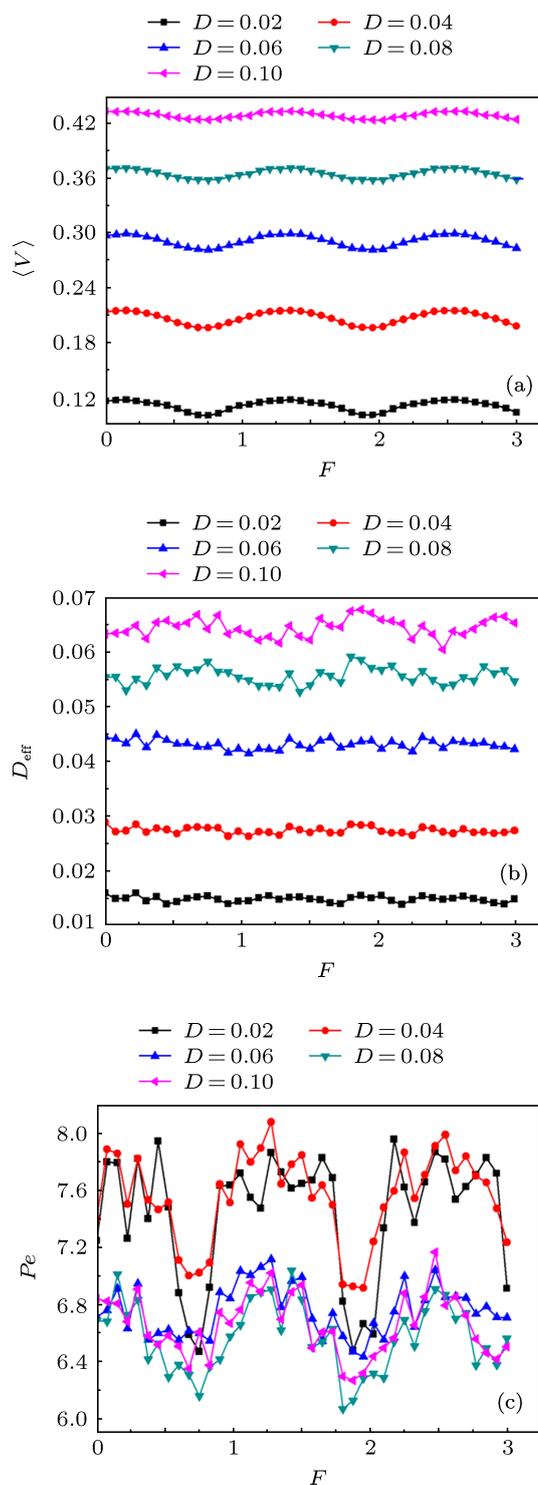


图 2 (a) 平均速度 $\langle V \rangle$ 、(b) 平均有效扩散系数 D_{eff} 和 (c) Pe 数随外力 F 的变化曲线

3.3 弹簧长度的影响

图 4 给出不同热噪声强度下耦合布朗粒子的平均速度随弹簧长度 a 的变化关系. 从图中可以发现平均速度随 a 也呈周期性的变化关系, 且平均速度随着热噪声强度 D 的增加而增大, 这与文献 [20] 所得到的结果类似, 同样其周期性效应随 D 的增大也逐渐减弱. 当弹簧长度 a 大致为双阱周期势的整数倍时, 发现耦合系统的平均速度达到最小. 这是由于此时在外力与热噪声的共同作用下外势居于主导地位, 使得布朗粒子处于势阱中而不能越过势垒.

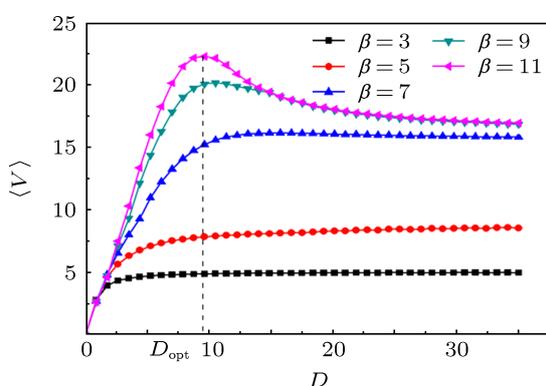


图 3 平均速度 $\langle V \rangle$ 随噪声强度 D 的变化曲线

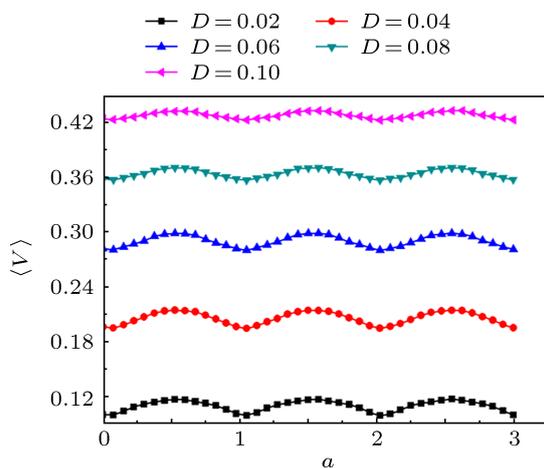


图 4 平均速度 $\langle V \rangle$ 随弹簧长度 a 的变化曲线

3.4 不对称参数的影响

图 5(a) 为不同热噪声强度下, 耦合布朗粒子的平均速度随势阱不对称参数 β 的变化关系. 可以看到耦合布朗粒子的平均速度不是 β 的单调函数, 因此存在 β 的最优值 β_{opt} 使平均速度达到最大. 当不对称参数 β 较大时, 平均速度随 β 的增加而趋于稳

定值. 同样可以发现对于某一固定值 β , D 越大粒子的平均速度也越大.

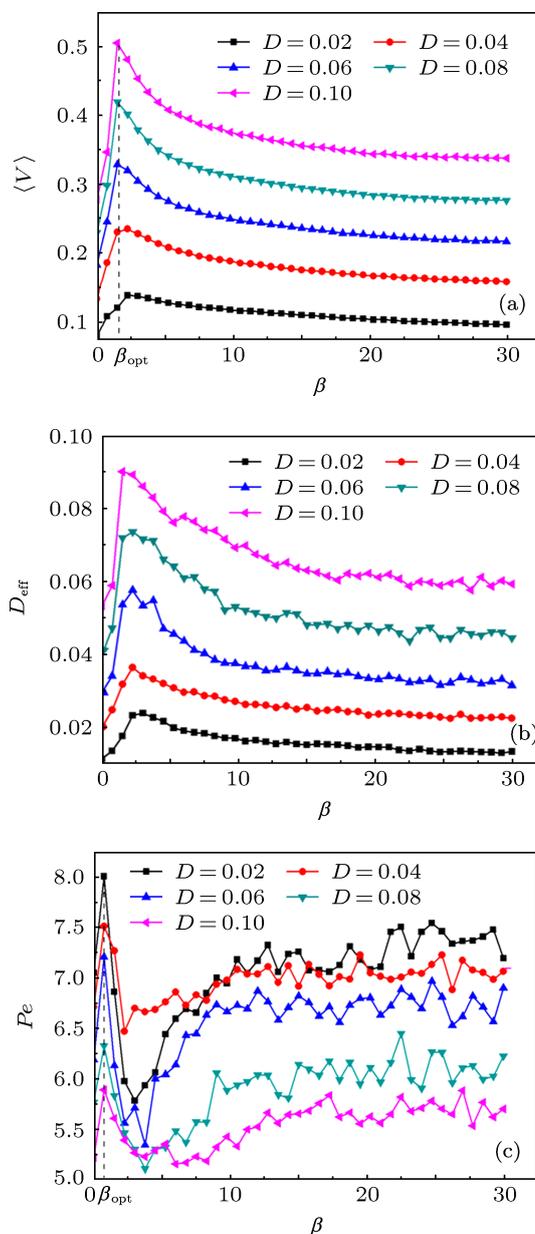


图 5 (a) 平均速度 $\langle V \rangle$ 、(b) 平均有效扩散系数 D_{eff} 和 (c) Pe 数随势阱不对称参数 β 的变化曲线

图 5(b) 给出热噪声强度不同时耦合布朗粒子的平均有效扩散系数 D_{eff} 与势阱不对称参数 β 的变化关系. 发现当 β 不太大时, D_{eff} 随 β 先增大后减小, 在这个变化过程中 D_{eff} 的峰值随噪声强度的增大而向左移动. 当 β 较大时, D_{eff} 不再随 β 的增加而明显变化, 且逐渐趋于稳定值. 这表明当势阱的不对称情况较大时, 粒子将很难扩散. 同时还发现, 当 β 固定时, D 越大 D_{eff} 也越大. 这再次说明热噪声对粒子的有效扩散系数 D_{eff} 具有显著的影响.

图 5(c) 表示不同热噪声强度下, 耦合布朗粒子的 Pe 数作为势阱不对称参数 β 的函数. 可以发现 Pe 数不随 β 单调变化, 因此系统同样会存在最优值 β_{opt} 使 Pe 数达到最大. 同时发现当 β 不太大时, 对于较小的 D 值, Pe 数的最大值也较大. 这意味着可通过改变势阱结构的方法来增强耦合系统的定向输运. 研究发现随着 β 的继续增加, Pe 数将逐渐趋于稳定值. 此外, 研究还发现当 $\beta > 11$ 后, 对于某一固定的 β 值 Pe 数随热噪声强度 D 的增大而减小.

4 结论

本文研究了处于外力作用下双阱棘轮势中反

馈耦合布朗粒子的定向输运性能. 通过计算, 详细分析了外力、热噪声、弹簧长度及势阱的不对称参数对布朗粒子的平均速度、有效扩散系数及 Pe 数的影响. 很有趣地发现, 随着外力或弹簧长度的改变, 耦合布朗粒子的平均速度呈现周期性的变化规律. 研究发现热噪声对定向输运具有显著的影响, 且系统存在噪声强度的最优值使定向输运的平均速度达到最大. 研究还发现通过改变势阱的结构可以增强耦合布朗棘轮的定向输运. 上述结论可应用于渗透、粒子分离与分子马达的控制等方面, 对微观尺度下生物纳米器件的研制具有一定的理论指导作用.

-
- [1] Vale R D, Milligan R A 2000 *Science* **288** 88
 [2] Vale R D 2003 *Cell* **112** 467
 [3] Oster G, Wang H 2003 *Trends Cell Biol.* **13** 114
 [4] Reimann P 2002 *Phys. Rep.* **361** 57
 [5] Li F Z, Jiang L C 2010 *Chin. Phys. B* **19** 020503
 [6] Zeng C H, Wang H 2012 *Chin. Phys. B* **21** 050502
 [7] Linke H 2002 *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* **75** 167
 [8] van den Heuvel M G L, Dekker C 2007 *Science* **317** 333
 [9] Braun O M, Kivshar Y S 1998 *Phys. Rep.* **306** 1
 [10] Landa P S, McClintock P V E 2000 *Phys. Rep.* **323** 1
 [11] Dan D, Jayannavarar A M, Menon G I 2003 *Physica A* **318** 40
 [12] Yi S T, Song H, Ou Z E, Ai B Q, Xiong J W 2012 *Commun. Theor. Phys.* **57** 223
 [13] Csahk Z, Family F, Vicsek T 1997 *Phys. Rev. E* **55** 5197
 [14] Li Y X, Wu X Z, Zhuo Y Z 2000 *Mod. Phys. Lett. B* **14** 479
 [15] Feito M, Cao F J 2006 *Phys. Rev. E* **74** 041109
 [16] Feito M, Cao F J 2007 *Eur. Phys. J. B* **59** 63
 [17] Feito M, Cao F J 2007 *Phys. Rev. E* **76** 061113
 [18] Feito M, Cao F J 2008 *Physica A* **387** 4553
 [19] Gao T F, Chen J C 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 065002
 [20] Zhao A K, Zhang H W, Li Y X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 110506
 [21] Rousselet J, Salome L, Ajdari A, Prost J 1994 *Nature* **370** 446
 [22] Evstigneev M, Gehlen S, Reimann P 2010 *Phys. Rev. E* **79** 011116
 [23] Gao T F, Liu F S, Chen J C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020502
 [24] Bier M 2007 *Biosystems* **88** 301
 [25] Zhang H W, Wen S T, Chen G R, Li Y X, Cao Z X, Li W 2012 *Chin. Phys. B* **21** 038701
 [26] Bustamante C, Chemla Y R, Forde N R, Izhyak D 2004 *Annu. Rev. Biochem.* **73** 705
 [27] Lv Y, Wang H Y, Bao J D 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4466 (in Chinese) [吕艳, 王海燕, 包景东 2010 物理学报 **59** 4466]
 [28] Cao F J, Feito M, Touchette H 2009 *Physica A* **388** 113
 [29] de Souza Silva C C, van de Vondel J, Morelle M, Moshchalkov V V 2006 *Nature* **440** 651
 [30] Costantini G, Marchesoni F 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 114102
 [31] Zheng Z G, Cross M C, Hu G 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 154102
 [32] Lindner B, Schimanasky-Geier L 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 230602
 [33] Wang H Y, Bao J D 2005 *Physica A* **357** 373

Influence of the external force on the directed transport of feedback-coupled Brownian ratchet*

Wang Li-Fang¹⁾ Gao Tian-Fu^{1)†} Huang Ren-Zhong¹⁾ Zheng Yu-Xiang²⁾

1) (College of Physical Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China)

2) (Department of Optical Science and Engineering, Fudan University, Shanghai 200433, China)

(Received 19 October 2012; revised manuscript received 22 November 2012)

Abstract

The directed transport performance of two coupled Brownian particles in the double-well ratchet potential under the external force has been studied in this paper. Langevin equation in the overdamped regime is solved numerically. The influence of the external force, the thermal noise, and the asymmetric parameter of the potential on the transport properties of the coupled Brownian particles including the average velocity, the effective diffusion coefficient D_{eff} , and the Pe number, is discussed in detail. It is found that the average velocity changes periodically under the external force. Meanwhile, there is an optimal value of the intensity of the thermal noise at which the current reaches the maximum. It is worthwhile to point out that the enhancement of the current can be achieved by changing the structure of the ratchet potential.

Keywords: coupled Brownian ratchet, external force, double-well ratchet potential, average velocity

PACS: 05.40.-a, 05.40.Jc, 02.30.Yy

DOI: 10.7498/aps.62.070502

* Project supported by the Scientific Project of the Educational Department of Liaoning Province, China (Grant No. L2012386) and Fudan University Key Lab Senior Visiting Scholar Project, China (Grant No. 11FG065).

† Corresponding author. E-mail: tianfugao@163.com