

粗糙势中耦合布朗粒子的定向输运性能*

刘晨昊¹⁾ 刘天宇¹⁾ 黄仁忠¹⁾ 高天附^{1)†} 舒咬根^{2)‡}

1) (沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034)

2) (中国科学院理论物理研究所, 北京 100190)

(2019年8月6日收到; 2019年9月17日收到修改稿)

研究了粗糙棘轮中耦合粒子的定向输运行为, 并进一步讨论了阻尼条件下粗糙棘轮的扰动振幅、扰动波数、粒子间的耦合强度及自由长度等因素对耦合布朗粒子质心平均速度及斯托克斯效率的影响. 研究发现, 合适的粗糙棘轮扰动振幅和扰动波数能促进耦合布朗粒子的定向输运, 同时还能增强其斯托克斯效率. 此外, 合适的耦合强度和自由长度还能使粗糙棘轮的输运性能达到最强. 还发现小扰动振幅条件下, 通过改变耦合强度和自由长度能够诱导粗糙棘轮的流反转. 通过研究更具实际意义的粗糙棘轮, 本文所得结论能为实验上理解分子马达的运动行为提供理论指导, 还可为纳米量级分子机器的设计及粒子分离技术的实现提供实验启发.

关键词: 粗糙度, 质心平均速度, 斯托克斯效率, 流反转

PACS: 05.40.-a, 02.30.Yy, 02.50.Fz

DOI: 10.7498/aps.68.20191203

1 引言

生物分子马达是一类尺度在 2—10 nm 的酶类蛋白大分子, 在细胞内马达可沿微丝、微管做定向运动^[1,2]. 实验研究已表明, 分子马达的定向运动充分参与了细胞内的各种生命活动, 如有丝分裂、肌肉收缩、减数分裂中染色体的分离及信号传导等^[3]. 早期关于分子马达的研究, Allen 等^[4]和 Vale 等^[5]借助差分干涉对比显微镜直接观察到鱿鱼巨突中囊泡的定向运动现象. 此外, Sheetz 研究组^[6]还在鱿鱼巨突中发现了沿微管做定向运动的驱动蛋白马达. 牛津大学的 Dey 研究组^[7]在最近的研究中提出一种以酶促反应产生的能量作为输入能的马达模型, 并证实该马达具有朝酶底物方向

运动的趋势, 更新了人们对分子马达定向运动的认识. 同时, 最新的医学研究还发现动力蛋白功能的缺陷可引发纤毛功能障碍, 造成呼吸道慢性感染. 此外, 在分子机器领域基于酶分子的人工合成马达技术日渐成熟, 并有希望实现分子马达的定点传输或药物运输^[8–10]. 因此, 生物分子马达定向运输的研究在生物学、医学乃至对未来分子机器的研发都具有十分重要的意义^[11–13].

为了深入理解分子马达的定向输运机制, 理论上人们提出了闪烁棘轮、摇摆棘轮等一系列棘轮模型^[14–17]. 如 Jayannavar 研究组^[18]提出了空间非对称棘轮, 发现粒子定向输运速度随外(驱动)力摇摆频率的增大而减小. Wang 和 Bao^[19]研究了二维摇摆棘轮模型, 并证明布朗粒子的耦合作用能增强棘轮的定向输运. 此外, Li 等^[20]详细讨论了空

* 国家自然科学基金(批准号: 11574329, 11774358, 11347003)、中国科学院前沿科学重点研究项目(批准号: Y7Y1472Y61)、中科院生物物理交叉创新团队项目(批准号: 2060299)、中国科学院战略性先导 A 项目(批准号: XDA17010504)和辽宁省自然科学基金(批准号: 20180550149)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tianfugao@synu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: shuyg@itp.ac.cn

间对称外势中耦合布朗粒子的流反转现象, 发现粒子间耦合强度是诱导流反转现象的关键因素. 近年来关于反馈棘轮的研究, 我们研究组发现流反转现象还与脉冲相位存在一定关联^[21]. 从上述几类不同棘轮的研究中可发现模型中采用的外势都是表面光滑的锯齿势或简谐势. 然而, 最新的实验研究表明细胞内的杂质和空间不均匀性都会导致布朗粒子对“光滑”轨道的偏离^[22]. 此外, Frauenfelder等^[23,24]还发现, 在蛋白质折叠过程中侧链的非正常连接会导致外势表面“粗糙”的产生. 这种“粗糙”不仅会影响蛋白质的快速折叠, 还会影响分子马达的定向运动. 可见外势的粗糙程度不仅是描述各类蛋白质特性的一种语言, 还对粗糙棘轮定向运输的研究具有一定的理论参考意义. 因此通过粗糙棘轮来模拟分子马达与轨道间的相互作用更具实际意义.

关于粗糙棘轮的理论研究, Zwanzig^[25]发现外势的粗糙程度会抑制净流的产生, Marchesoni^[26]的研究也表明棘轮表面的粗糙还会导致粒子运动过程中的无序性, 从而造成运输速度降低. 最近, Camargo 和 Anteneodo^[22]构建了一种新的粗糙棘轮模型, 发现外势的粗糙情况并非完全抑制单粒子的定向运动, 在一定条件下还会促进其定向运输. 可见外势粗糙程度对分子马达定向运动的影响仍存在诸多未知. 此外, 实验研究还表明分子马达在运输过程中大都呈现集体行为, 除与轨道的相互作用外马达间还存在复杂的相互作用, 且耦合粒子与单粒子的输运行为性质上还存在明显差别, 因此研究粗糙棘轮中耦合粒子的定向运输更具实际意义. 本文将在上述理论研究基础上采用一种新的粗糙棘轮模型, 深入讨论外势粗糙度对耦合布朗粒子定向运输的影响.

早期关于生物分子马达的实验研究已表明, 生物体内大多数分子马达都是拖动负载做定向运动的. 但 Parrondo 研究组^[27]的实验结果表明, 生物体内还存在一类并不拖动负载但同样做定向运动的分子马达. 为了深入分析这类马达的定向运输能力, Wang^[28]在理论上提出可用斯托克斯效率来研究这类马达的定向运输性能. 理论研究表明马达的斯托克斯效率越大, 其克服黏滞阻力时做定向运动的能力越强. 然而, 目前关于粗糙棘轮中耦合粒子的定向运动情况如何, 特别是外势的粗糙度对马达斯托克斯效率的影响我们还知之甚少. 因此, 本文

将深入讨论外势的粗糙结构对耦合布朗马达定向运输性能的影响.

本文主要研究周期无偏外力作用下的粗糙棘轮模型, 并讨论粗糙势的扰动振幅、扰动波数及粒子间的耦合强度、自由长度等因素对分子马达定向运输速度及斯托克斯效率的影响. 研究发现, 一定条件下外势的粗糙度会促进粗糙棘轮定向运输速度和斯托克斯效率. 此外, 有趣地发现在外势的小扰动作用及耦合作用的共同协作下, 分子马达还会出现流反转现象. 本文所得结论不仅能为微小粒子的整流与分离提供理论指导, 同时还能对纳米量级分子机器的研发及医学上药物定点投放技术的实现提供实验启发.

2 粗糙棘轮模型

本文主要研究粗糙势中过阻尼耦合布朗粒子的定向运动情况. 同时马达还受周期无偏置外力及热噪声的影响, 其动力学行为可由朗之万方程描述:

$$\gamma \frac{dx'_i}{ds} = - \frac{\partial W(x'_i(s))}{\partial x'_i} - \frac{\partial W_0(x'_1, x'_2)}{\partial x'_i} + F(s) + \theta_i(s) \quad (i = 1, 2), \quad (1)$$

式中 x' 为耦合粒子的位置坐标; s 为时间; γ 为介质阻尼系数; $W(x'(s))$ 为粗糙外势; $W_0(x'_1, x'_2)$ 为耦合粒子间的相互作用势; $\theta(s)$ 为高斯白噪声, 满足统计特性 $\langle \theta_i(s) \rangle = 0$, $\langle \theta_i(s) \theta_j(s') \rangle = 2D_0 \delta_{ij} \delta(s - s')$, $i, j = 1, 2$, 其中 $D_0 = \gamma k_B T$, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为环境温度. 此外, 引入 $F(s)$ 来描述外界环境对粗糙棘轮周期性的驱动作用.

为使方程 (1) 中的物理量无量纲化, 引入特征长度 λ 和特征时间 τ_0 , 其中 λ 为外粗糙势周期长度, τ_0 为过阻尼条件下布朗粒子的特征时间, 且 $\tau_0 = \frac{\gamma \lambda^2}{\Delta U}$, ΔU 为势垒高度. 通过定义新的无量纲位置坐标 $x = x'/\lambda$, 无量纲时间 $t = s/\tau_0$, 可以得到新的无量纲化参量 $U(x) = W(x')/\Delta U$, $U_0(x) = W_0(x')/\Delta U$, $F(t) = (\lambda/\Delta U)F(s)$, $\xi(t) = \frac{\lambda}{\Delta U} \frac{1}{\sqrt{\gamma \Delta U}} \theta(s)$. 将上述参量代入方程 (1) 便可得到无量纲化后的朗之万方程:

$$\frac{dx_i}{dt} = - \frac{\partial U(x_i(t))}{\partial x_i} - \frac{\partial U_0(x_1, x_2)}{\partial x_i} + F(t) + \xi_i(t) \quad (i = 1, 2). \quad (2)$$

方程 (2) 中 $\xi_i(t)$ 为无量纲化后的高斯白噪声

且满足如下统计特征: $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t-t')$, $i, j = 1, 2$, $D = \frac{k_B T}{\Delta U}$ 为无量纲噪声强度.

此外, 方程 (2) 中的 $U(x_i)$ 为粗糙外势, 则 $-\frac{\partial U(x_i(t))}{\partial x_i}$ 为粒子受到粗糙棘轮势的作用. 周期外势 $U(x_i)$ 的表达形式为 [22]

$$U(x_i) = [U_1(x_i) - \varepsilon \cos(2\pi H x_i) / 2] / N, \quad (3)$$

其中

$$U_1(x_i) = \begin{cases} \frac{x_i}{l}, & 0 \leq x_i < l, \\ \frac{\lambda - x_i}{\lambda - l}, & l < x_i \leq \lambda. \end{cases} \quad (4)$$

(3) 式中 ε 和 H 分别为粗糙势的扰动振幅和扰动波数, N 为归一化因子. (4) 式中 $U_1(x_i)$ 为常见的锯齿势, 且 λ 为锯齿势的周期, l 为锯齿势的不对称度. (3) 式构建的粗糙棘轮结构示意图如图 1 所示, 其中图 1(a) 表示扰动波数 $H = 5$ 时粗糙势 $U(x)$ 随空间位置 x 及扰动振幅 ε 的变化, 图 1(b) 为扰动振幅 $\varepsilon = 0.1$ 时粗糙势 $U(x)$ 随空间位置 x 及扰动波数 H 的变化.

此外, $U_0(x_1, x_2)$ 为两个耦合粒子的相互作用势, 具体关系如下:

$$U_0(x_1, x_2) = \frac{1}{2}k(x_1 - x_2 - a)^2, \quad (5)$$

其中 k 为耦合强度, a 为弹簧的自由长度. $F(t)$ 为外驱动力, 其具体形式为

$$F(t) = A \cos(\omega t), \quad (6)$$

其中 A 为外驱动振幅, ω 为外力频率, $T_\omega = 2\pi/\omega$

为外力周期. 为了研究耦合布朗粒子在粗糙棘轮中的定向运动, 采用耦合粒子的质心平均速度来描述粗糙棘轮的定向输运, 其公式表述如下 [22]:

$$\langle V \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \sum_{i=1}^2 \int_0^T \dot{x}_i(t) dt, \quad (7)$$

式中, $\langle \cdot \rangle$ 表示系宗平均, T 为耦合粒子的演化时间. 为了深入研究无负载下分子马达的定向输运能力, 采用斯托克斯效率 η 来讨论马达的定向输运性能, 其具体表示如下 [27]:

$$\eta = \frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}}}, \quad (8)$$

其中 P_{out} 为粒子克服溶液阻尼的输出功率,

$$P_{\text{out}} = \frac{1}{T} \int_0^T \gamma \dot{x}_c \langle V \rangle dt = \gamma \langle V \rangle^2. \quad (9)$$

根据随机能量理论 [29], 时变外力对耦合粒子做的功为 $W_E = \int_0^T F(t) \dot{x}_c dt$, $x_c = (x_1 + x_2)/2$ 为耦合粒子的质心位移, 则时变外力对系统的输入功率 P_{in} 为

$$\begin{aligned} P_{\text{in}} &= \frac{W_E}{T} = \frac{1}{T} \int_0^T \left\langle \frac{\partial (-x_c F(t))}{\partial t} \right\rangle dt \\ &= A\omega \frac{1}{T} \int_0^T \langle x_c(t) \sin(\omega t) \rangle dt. \end{aligned} \quad (10)$$

因此, 耦合布朗粒子斯托克斯效率的表达式为

$$\eta = \frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}}} = \frac{\gamma \langle V \rangle^2}{A\omega \frac{1}{T} \int_0^T \langle x_c(t) \sin(\omega t) \rangle dt}, \quad (11)$$

其中粒子演化时间 $T = nT_\omega$, n 为耦合粒子演化的周期.

本文采用二阶随机龙格-库塔算法对过阻尼条

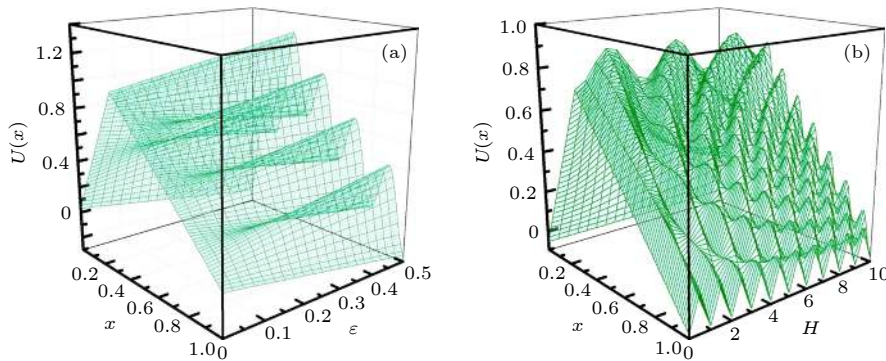


图 1 (a) 粗糙势 $U(x)$ 随扰动振幅 ε 的变化, 其中扰动波数 $H = 5$; (b) 粗糙势 $U(x)$ 随扰动波数 H 的变化, 其中扰动振幅 $\varepsilon = 0.1$.
Fig. 1. (a) Diagram of the rough potential $U(x)$ varying with the amplitude of perturbation ε , where perturbed wavenumber $H = 5$; (b) diagram of the rough potential $U(x)$ varying with perturbed wavenumber H , where the perturbation amplitude $\varepsilon = 0.1$.

件下粗糙棘轮的定向输运进行数值模拟, 主要研究粗糙势中耦合粒子定向输运性能受系统各参量变化的影响. 为了得到稳定的系宗平均值, 本文模拟了 2×10^3 条轨道, 每个轨道演化 2×10^3 个周期, 步长 h 取 1×10^{-3} . 无特殊说明参数取 $\gamma = 1$, $l = 0.7$, $\lambda = 1$, $\omega = 2\pi$, $D = 0.1$.

3 结果与讨论

3.1 扰动振幅 ε 的影响

为了研究耦合粒子在粗糙棘轮中的定向运动, 分析了棘轮的质心平均速度 $\langle V \rangle$ 随不同参量的变化行为. 首先, 不同耦合条件下粗糙棘轮的扰动振幅 ε 对质心平均速度 $\langle V \rangle$ 的影响如图 2(a) 所示. 研究结果表明在弱耦合条件下, 如 $k = 1$ 时质心平均速度单调减小. 在强耦合条件下, 如 $k \geq 5$ 时速度能够产生峰值. 说明在一定的耦合条件下合适的扰动振幅能够促进粗糙棘轮的定向输运. 然而, 随扰动振幅 ε 的继续增加, 粗糙棘轮整体的输运行为都呈 $V \rightarrow 0$. 这是因为随着外势扰动振幅的增加, 由粗糙棘轮的结构示意图 1(a) 可知 ε 越大势垒越高, 粒子更不容易跨越势垒形成定向运动, 因此一定条件下势垒的扰动振幅将抑制耦合棘轮净流的产生. 然而, 随着耦合强度的增加如图 2(a) 所示, 有趣地发现当 $k \geq 30$ 时耦合粒子的质心平均速度 $\langle V \rangle$ 在小扰动振幅范围 (如 $\varepsilon = 0.15$ 附近) 其方向会由负变为正, 说明此时粗糙棘轮发生了流反转. 这种现象的产生是由于粒子间的强耦合与扰动振幅的共同作用抑制了耦合粒子负向运动的趋势, 同时又促进了其正向的运动^[30], 因此在小扰动振幅条件下粗糙棘轮更容易产生流反转. 关于这一流反转现象我们

还将在后面进行深入讨论. 此外, 强耦合作用下随着扰动振幅 ε 的继续增加, 研究发现粗糙棘轮的定向输运还能产生极值流. 这种极值流的产生是因为随着 ε 的增加耦合粒子平均速度先由负变正, 并且最终再次趋于零. 因此粗糙棘轮中会存在合适的扰动振幅 ε_{opt} 使其质心平均速度 $\langle V \rangle$ 达到极大值, 说明强耦合条件下合适的 ε_{opt} 能够促进粗糙棘轮的定向输运. 此外, 通过比较不同耦合强度下粒子的平均速度, 研究还发现弱耦合条件下的 $\langle V \rangle_{\text{max}}$ 大于强耦合下的 $\langle V \rangle_{\text{max}}$, 这是因为强耦合条件下的粒子如同被一根“硬杆”连接, 粒子更不容易产生定向运动, 故其 $\langle V \rangle_{\text{max}}$ 会减小.

根据 Wang 的理论^[28], 斯托克斯效率 η 一定程度上反映了布朗粒子的定向输运性能, 因此进一步研究了斯托克斯效率随粗糙棘轮各参量的变化行为. 图 2(b) 首先给出了不同耦合强度下粗糙棘轮的扰动振幅对斯托克斯效率的影响. 结果表明斯托克斯效率的变化规律和图 2(a) 速度的变化规律类似. η 与 $\langle V \rangle$ 变化规律的相似性可由 (11) 式进行分析, 一定条件下 η 正比于粒子克服溶液阻尼做功的输出功率, 即 $\eta \propto P_{\text{out}}$. 又由 (9) 式分析知, $P_{\text{out}} \propto \langle V^2 \rangle$, 故一定条件下 η 近似正比于 $\langle V \rangle$, 即 η 与 $\langle V \rangle$ 有类似的变化趋势. 在弱耦合条件下, 如 $k = 1$ 时, η 随扰动振幅的增加单调减小. 在强耦合条件下, 如 $k \geq 5$ 时, 斯托克斯效率会出现一个或多个极值, 且随 $\varepsilon \rightarrow \infty$, $\eta \rightarrow 0$. 此外, 通过对比图 2(b) 与图 2(a) 发现, 一定条件下当耦合粒子的质心平均速度达到极值时其斯托克斯效率也会达到最大. 意味着粗糙棘轮的定向输运达到最强时, 其粒子克服黏滞阻力的定向输运效率也将达到最大. 同时研究还发现, 在强耦合条件下增大粒子间耦合强度会使粗糙棘

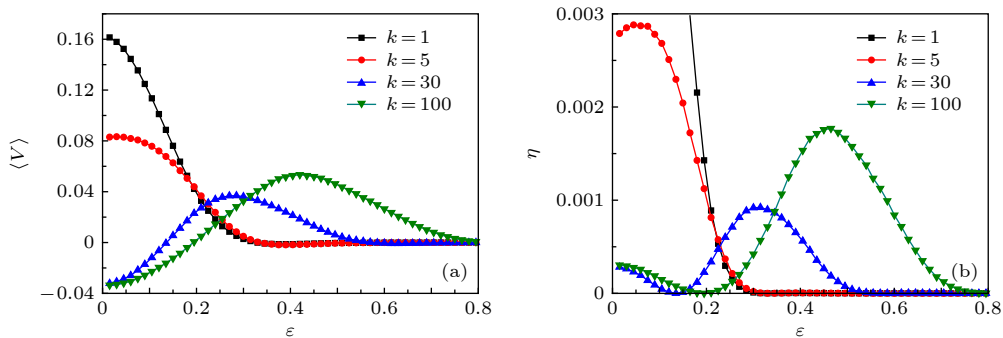


图 2 不同耦合强度下, (a) 质心平均速度 $\langle V \rangle$ 、(b) 斯托克斯效率 η 随粗糙势扰动振幅 ε 的变化 ($a = 0.5$, $A = 3$, $H = 5$)

Fig. 2. Curves of (a) the center-of-mass velocity $\langle V \rangle$ and (b) the Stokes efficiency η varying with perturbation amplitude ε for different coupling strength k , where $a = 0.5$, $A = 3$, $H = 5$.

轮的定向运输速度及斯托克斯效率的极值增大, 说明耦合强度 k 还会促进粗糙棘轮的定向运输. 因此下文将进一步讨论耦合强度对粗糙棘轮定向运输性能的影响.

3.2 耦合强度 k 的影响

由上文分析知耦合强度对粗糙棘轮的定向运输会产生影响, 因此本文进一步研究了不同扰动波数 H 下耦合强度 k 对粗糙棘轮定向运输的影响, 如图 3(a) 所示. 结果表明, 耦合粒子的质心平均速度 $\langle V \rangle$ 在扰动波数较小时 (如 $H = 0, 2$) 会随 k 的增加出现极值, 并随 k 的继续增大 $\langle V \rangle$ 逐渐减小, 且当 $k \rightarrow \infty$ 时 $\langle V \rangle$ 趋于稳定值. 当扰动波数较大时 (如 $H = 5, 10$), 粒子的平均速度在达到极值后会随耦合强度的增大不断减小, 且当 $k \rightarrow \infty$ 时 $v \rightarrow 0$. 产生这种现象的原因主要是当耦合强度趋于无穷时粒子间的相互作用很强, 耦合粒子受到外驱动力的作用相对较弱, 此时较大的扰动波数将对粒子的运输起抑制作用 (关于扰动波数对粒子流的影响下文还会深入讨论), 因此耦合粒子很难产生定向运输. 这一结果表明, 在不同扰动波数下, 粒子间耦合强度能够促进粗糙棘轮的定向运输, 即合适的耦合强度 k_{opt} 能使粗糙棘轮的定向运输达到最强. 此外, 由图 1(b) 的粗糙棘轮结构发现, 扰动波数 H 越大外势的表面越粗糙, 可见 H 在一定程度上反映了棘轮的粗糙程度. 由图 3(a) 所示, 当 $H \neq 0$ 时对于一定的耦合强度, 棘轮的 $\langle V \rangle$ 随粗糙势扰动波数的增加而单调减小. 这是由于扰动波数越大外势越粗糙, 粒子更不容易跨越势垒形成定向运动, 所以 $\langle V \rangle$ 会减小. 特别地, 当 $H = 0$ 时发现强耦合条件下, $\langle V(H = 2) \rangle > \langle V(H = 0) \rangle$, 也就是说扰动波

数的增加对粗糙棘轮定向运输的影响并不是完全抑制的, 合适的粗糙度 (外势结构) 还会促进耦合粒子的定向运输.

基于上述讨论, 我们进一步研究了不同扰动波数下, 耦合强度对粒子定向运输效率的影响, 如图 3(b) 所示. 研究发现图 3(b) 与图 3(a) 之间仍存在类似的变化关系, 即斯托克斯效率 η 随耦合强度 k 的变化也能产生极值, 类似的结论可由图 2(b) 的分析所得. 也就是说, 一定条件下合适的耦合强度 k_{opt} 还能增强粗糙棘轮的定向运输性能. 此外, 研究还发现在较弱的耦合条件下, 小扰动波数 H 还能提升耦合粒子的运输性能. 因此, 下文将讨论棘轮扰动波数对耦合粒子定向运输性能的影响.

3.3 扰动波数的影响

如图 4(a) 所示, 进一步研究了不同噪声强度下扰动波数对粒子质心平均速度的影响. 结果表明随着扰动波数的增加, 耦合粒子质心平均速度整体的变化趋势逐渐减小. 通过图 3(a) 类似的分析可得随着外势粗糙度的增加 (扰动波数 H 增加) 会抑制耦合粒子的定向运动. 然而, 有趣的是当扰动波数为整数时耦合粒子的质心平均速度会产生一定的振荡, 但总体变化行为仍呈下降趋势. 由外势结构示意图图 1(b) 可知当扰动波数 H 为整数时, 外势 $U(x)$ 在一个周期 λ 内包含了 H 个完整的扰动波形, 此时扰动波数对粒子定向运输的影响较 H 为非整数时更强, 所以整数个 H 的扰动将使 $\langle V \rangle$ 的行为呈现局域的振荡. 此外研究还发现随着噪声强度的增大, 平均速度减小的趋势越来越平缓. 这是由于随着 D 的增大, 在 D 与 H 两种扰动的竞争中热噪声的影响将成为粒子运输的主导因素, 因此热噪声抑

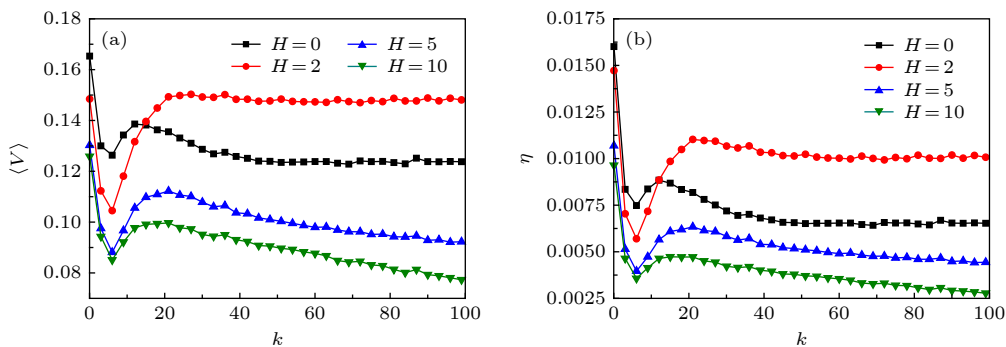


图 3 不同扰动波数 H 下 (a) 质心平均速度 $\langle V \rangle$; (b) 斯托克斯效率 η 随耦合强度 k 的变化曲线, 其中 $a = 0.2$, $A = 3$, $\varepsilon = 0.1$
 Fig. 3. Curves of (a) the center-of-mass velocity $\langle V \rangle$; (b) the Stokes efficiency η varying with coupling strength k for different perturbed wavenumber H , where $a = 0.2$, $A = 3$, $\varepsilon = 0.1$.

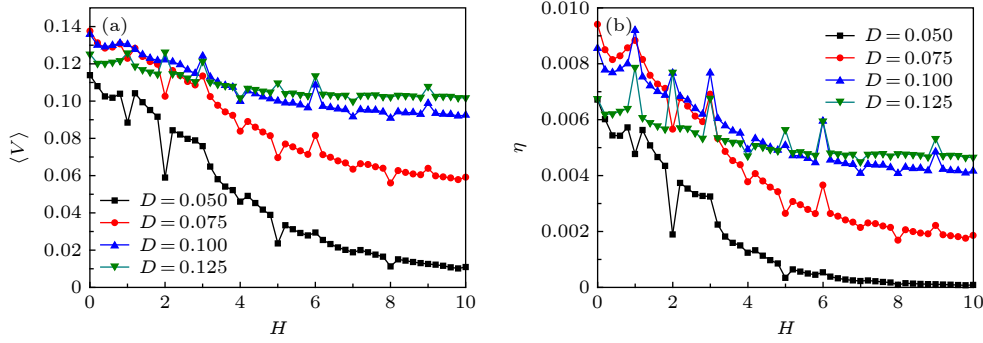


图 4 不同噪声强度下, (a) 质心平均速度 $\langle V \rangle$ 、(b) 斯托克斯效率 η 随扰动波数 H 的变化 ($a=0.2, k=10, A=3, \varepsilon=0.1$)
 Fig. 4. Curves of (a) the center-of-mass velocity $\langle V \rangle$ and (b) the Stokes efficiency η varying with perturbed wavenumber H for different noise intensity D , where $a=0.2, k=10, A=3, \varepsilon=0.1$.

制了粗糙度对耦合粒子运输的影响. 此外, 研究还发现当外势的扰动波数较大时, 如 $H \geq 4$, 噪声强度越大耦合粒子的定向运输速度也越大, 这一结果表明在较大的粗糙度下噪声强度越大耦合粒子越容易跨越势垒形成定向运输.

图 4(b) 讨论了扰动波数对粗糙棘轮斯托克斯效率的影响. 在小噪声条件下, 如 $D < 0.1$ 时, 斯托克斯效率 η 减小的速度较快; 然而, 随着噪声强度的增加, 如 $D \geq 0.1$ 时, η 减小的速度反而较慢. 产生上述现象的原因可由图 4(a) 的分析得到: 小噪声条件下耦合粒子的速度 $\langle V \rangle$ 随 H 的增加迅速减小, 故斯托克斯效率也会随 H 的增加迅速降低. 然而, 当 D 较大时, 通过类似的分析可知, 此时噪声强度将成为影响 η 的主导因素, 因而 H 对粗糙棘轮定向运输的抑制效果将会减弱, 故 η 减小的速度变慢. 研究还发现, 当外势扰动波数较大时, 如 $H \geq 5$, 噪声强度越大粗糙棘轮的定向运输效率也越大. 这是由于 D 越大, 噪声对粗糙棘轮定向运输的影响越强, 因此外势粗糙度较大时噪声 D 还能促进粗糙棘轮的定向运输效率. 此外, 耦合粒子的定向输

运效率也会在 H 为整数时产生与速度类似的振荡行为, 其原因主要是图 4(a) 中 $\langle V \rangle$ 的振荡行为将导致 H 对粗糙棘轮定向运输效率的影响也存在局部的非单调性. 结果表明一定噪声条件下, 通过构建合适的粗糙棘轮结构 (如取扰动波数为整数) 也能增强耦合粒子的定向运输性能.

3.4 外力振幅的影响

由于耦合布朗粒子的运动还受周期外力 $F(t)$ 的影响, 因此又讨论了不同耦合强度下粗糙棘轮的定向运输速度 $\langle V \rangle$ 随外力振幅 A 的变化, 如图 5(a) 所示. 结果表明, 粗糙棘轮的平均速度 $\langle V \rangle$ 整体呈现多峰结构, 且随外力振幅的增加 $\langle V \rangle$ 的峰值逐渐减小. 这种多峰结构主要是由于本文所采用的外势为非对称周期势, 在粗糙棘轮对称性破缺和耦合相互作用这两种因素相互协作和竞争中耦合粒子的定向运输速度将被促进或抑制, 因而粗糙棘轮的 $\langle V \rangle$ 能够存在多个极值. 此外, 研究还发现随着外力振幅的增加 $\langle V \rangle$ 的极值将逐渐减小, 最终会趋于

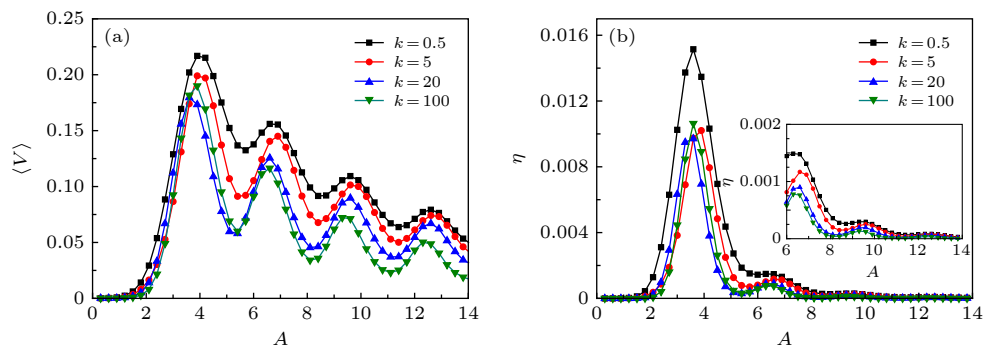


图 5 不同耦合强度下, (a) 质心平均速度 $\langle V \rangle$ 、(b) 斯托克斯效率 η 随外力振幅 A 的变化 ($a=0.2, H=5, \varepsilon=0.1$)
 Fig. 5. Curves of (a) the center-of-mass velocity $\langle V \rangle$ and (b) the Stokes efficiency η varying with amplitude A for different coupling strength k , where $a=0.2, H=5, \varepsilon=0.1$.

零. 这是由于当振幅 A 较大时, 外驱动力将成为耦合粒子定向运动的主导因素, 而此时粒子在无偏置的 $F(t)$ 作用下难以产生定向运动, 所以耦合粒子速度的极值将会减小并趋于零.

同时, 进一步研究了不同耦合强度下粗糙棘轮的斯托克斯效率随外力振幅的变化, 如图 5(b) 所示. 结果表明, 随着外力振幅的增加粗糙棘轮的斯托克斯效率仍呈现多峰结构 (局部放大图如内插图所示), 也就是说合适的外力振幅 A 也能够使粗糙棘轮的定向输运效率达到最强. 由图 2(b)—图 4(b) 的类似分析可得, 粗糙棘轮平均速度的多峰结构同样会导致斯托克斯效率多峰结构的产生. 此外, 研究还发现随着 A 的增加斯托克斯效率的峰值也会迅速减小. 这是因为当 $A \geq 4$ 时随着外力振幅的增大 $\langle V \rangle$ 的极值逐渐减小, 同时由 (9) 和 (11) 式可知此时 P_{out} 的极值将减小. 然而, 由 (10) 式又可知随着 A 的增大外界对系统的输入功率 P_{in} 不断增大, 所以粗糙棘轮斯托克斯效率 η 的峰值会迅速减小.

3.5 粗糙棘轮的流反转

图 2(a) 的研究结果已表明, 小 ε 条件 ($\varepsilon \leq 0.1$) 下粒子间的耦合强度能够诱导棘轮流反转的产生. 为了进一步研究粗糙棘轮的流反转现象, 又研究了小扰动振幅条件下耦合布朗粒子的质心平均速度 $\langle V \rangle$ 随自由长度 a 的变化. 由于外势的平移不变性会使耦合粒子的平均速度 $\langle V \rangle$ 随 a 的变化呈现周期性, 即 $\langle V(x) \rangle = \langle V(x + Ka) \rangle$, $K \in Z$ [31]. 故图 6(a) 仅画出一个周期内 $\langle V \rangle$ 的变化情况. 有趣地发现一个演化周期内质心平均速度 $\langle V \rangle$ 的变化规律关于 $a = 0.5$ 对称. 研究还发现随 a 的增加 $\langle V \rangle$ 会呈现多

个峰值, 也就是说通过选择合适的自由长度能够促进粗糙棘轮的定向输运. 然而, 此时在强耦合作用下, 即耦合强度 $k = 30$, 粗糙棘轮在 $a = 0.5$ 附近产生了流反转, 这一现象表明粗糙棘轮的流反转不仅会受耦合强度 k 的作用, 还会受到耦合自由长度 a 的影响. 因此进一步讨论了粗糙棘轮的耦合强度 k 和自由长度 a 对粗糙棘轮流反转的影响, 如图 6(b) 所示.

由于图 6(a) 中 $\langle V \rangle$ 的变化规律关于 $a = 0.5$ 对称, 故图 6(b) 的计算中仅画出 $a \leq 0.5$ 范围内不同耦合强度下 $\langle V \rangle$ 的变化行为, 对于 $a > 0.5$ 时 $\langle V \rangle$ 的变化行为可由对称性分析得到. 研究发现, 在自由长度 a 较小时, 如 $a \leq 0.275$, 粗糙棘轮的 $\langle V \rangle > 0$. 然而, 当 $a > 0.275$ 时发现存在较大的区域使 $\langle V \rangle < 0$, 也就是说从点 $(A, k) = (0.275, 100)$ 开始沿红线 ($\langle V \rangle = 0$) 所包围的区域粗糙棘轮都能产生流反转. 此外, 就耦合作用来说红线区域范围内的耦合强度在 $k \geq 10$ 范围. 同时, 由图 2(a) 可知弱耦合条件下 $\langle V \rangle > 0$, 这一结果说明 k 较小时耦合粒子间的相互作用较弱, 其行为近似于两个独立粒子. 而当 k 较大时, 耦合粒子间的相互作用较强, 两个耦合粒子如同被一“硬杆”连接, 则此时两个粒子的运动可近似看作单粒子的运动. 从图 6(b) 可发现, 当 $k > 10$ 时 $\langle V \rangle < 0$, 说明当耦合粒子间的相互作用在由弱变强的过程中, 耦合粒子的行为将由双粒子性趋于单粒子性. 这种粒子属性的改变与自由长度 a 的影响将共同导致耦合粒子的形变, 正是这种形变在粗糙棘轮小扰动振幅 ($\varepsilon \leq 0.1$) 条件下促进了耦合粒子流反转的产生. 由于大扰动振幅将抑制粗糙棘轮定向运动的产生, 因此本文仅详细讨

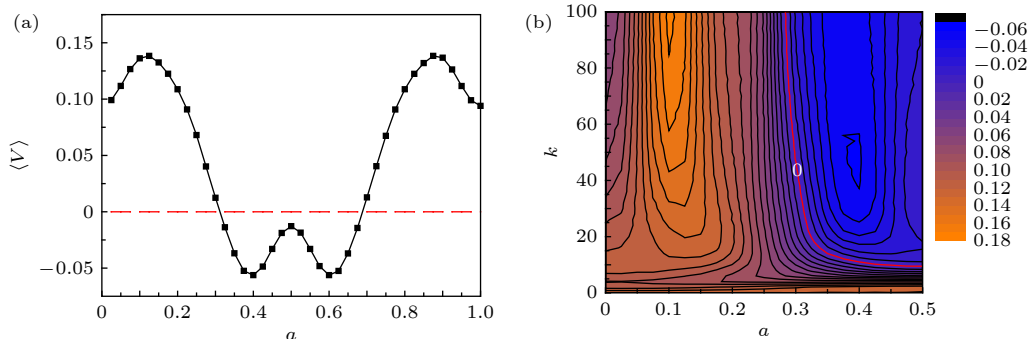


图 6 (a) 质心平均速度 $\langle V \rangle$ 随耦合自由长度 a 的变化 ($A = 3, \varepsilon = 0.1, H = 5, k = 30, D = 0.1$); (b) 质心平均速度 $\langle V \rangle$ 随耦合自由长度 a 及耦合强度 k 的变化 ($A = 3, \varepsilon = 0.1, H = 5, D = 0.1$)

Fig. 6. Curves of (a) the center-of-mass velocity $\langle V \rangle$ varying with free length a , where $A = 3, k = 30, \varepsilon = 0.1, D = 0.1$; the curves of (b) $\langle V \rangle$ varying with coupling strength k and free length a , where $A = 3, \varepsilon = 0.1, k = 30, D = 0.1$.

论小扰动振幅条件下粗糙棘轮的流反转现象. 同时, 本文发现的耦合粒子形变导致的流反转现象还与粗糙度为零时 Zheng 研究组^[20]的结果类似, 这一结果可为实验上纳米粒子的分离、整流与医学上药物的定点投放提供了理论指导与启发.

4 结 论

研究了粗糙棘轮中耦合布朗粒子的定向输运行为, 并详细讨论了棘轮的扰动振幅、扰动波数、耦合强度及自由长度等对粗糙棘轮质心平均速度和斯托克斯效率的影响. 研究发现, 一定条件下棘轮的粗糙度 (扰动振幅、扰动波数) 都能够促进耦合布朗粒子的定向输运及斯托克斯效率. 这一结论表明棘轮的粗糙度对耦合粒子定向运动的影响并非完全抑制, 也就是说通过构建合适的粗糙棘轮结构还能够促进耦合布朗粒子的输运性能. 同时, 在一定条件下合适的耦合强度和自由长度也能促进粗糙棘轮的定向输运性能并能使其达到最强. 此外, 研究发现粒子间耦合强度和自由长度的变化还将导致耦合粒子的形变, 正是这一形变成为诱导粗糙棘轮产生流反转的重要因素. 由于本文仅讨论两个耦合粒子的情况, 若增加粒子数计算结果将与文献^[32]类似, 也就是说耦合棘轮的定向输运速度会随粒子数的增加而减小. 本文所得结论不仅可为生物实验上利用合适的粗糙棘轮来加速蛋白质的折叠过程, 还可为纳米量级粒子的整流与分离、分子机器的设计及医学上药物的定点投放提供实验启发.

参考文献

- [1] Xie P 2010 *Int. J. Biol. Sci.* **6** 665
- [2] Li M, Ouyang Z C, Shu Y G 2016 *Acta Phys. Sin.* **18** 188702 (in Chinese) [黎明, 欧阳钟灿, 舒咬根 2016 物理学报 **18** 188702]
- [3] Guo X Q 2019 *Chin. J. Nat.* **41** 56 (in Chinese) [郭晓强 2019 自然杂志 **41** 56]
- [4] Allen R D, Metzuzals J, Tasahi I, Brady S T, Gilbert S P 1982 *Science* **218** 1127
- [5] Vale R D, Schnapp B J, Reese T S, Sheetz M P 1985 *Cell* **40** 449
- [6] Vale R D, Reese T S, Sheetz M P 1985 *Cell* **42** 39
- [7] Dey K K, Zhao X, Tansi B M, Mendez-Ortiz W J, Cordova-Figueroa U M, Golestanian R, Sen A 2015 *Nano Lett.* **15** 8311
- [8] Nara Y, Niemi H, Steinheimer J, Stöcker H 2017 *Phys. Lett. B* **769** 543
- [9] Mateos J L, Arzola A V, Volke-Sepveda K 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 168104
- [10] Mimucci S, Pelicci P G 2006 *Nat. Rev. Cancer* **6** 38
- [11] Palmigiano A, Santaniello F, Cerutti A, Penkov D, Purushothama D 2018 *Sci. Rep.* **8** 3198
- [12] Linke H 2002 *Appl. Phys. A* **75** 167
- [13] Van den Heuvel M G L, Dekker C 2007 *Science* **317** 333
- [14] Zhang H W, Wen S T, Zhang H T, Li Y X, Chen G R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 078701
- [15] Doering C R 1995 *Nuovo Cimento* **17** 685
- [16] Astumian R D, Bier M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1766
- [17] Gao T F, Chen J C 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 065002
- [18] Krishnan R, Chacko J, Sahoo M, Jayannavar A M 2006 *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2006** P06017
- [19] Wang H Y, Bao J D 2013 *Physica A* **392** 4850
- [20] Li P C, Chen H B, Fan H, Shen W M, Zheng Z G 2017 *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 475003
- [21] 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]
- [22] Camargo S, Anteneodo C 2018 *Physica A* **495** 114
- [23] Frauenfelder H, Sligar S G, Wolynes P G 1991 *Science* **254** 1598
- [24] Frauenfelder H, Wolynes P G, Austin R H 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** S419
- [25] Zwanzig R 1988 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **85** 2029
- [26] Marchesoni F 1997 *Phys. Rev. E* **56** 2492
- [27] Parrondo J M R, Cisneros B J D 2002 *Physics A* **75** 179
- [28] Wang H, Oster G 2002 *Europhys. Lett.* **57** 134
- [29] Sekimoto K 1997 *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 1234
- [30] Ai B Q, Xie H Z, Liao H Y, Liu L G 2006 *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2006** P09016
- [31] Gehlen S V, Evstigneev M, Reimann P 2009 *Phys. Rev. E* **79** 031114
- [32] Ai B Q, Zhong W R 2011 *Phys. Rev. E* **83** 051106

Transport performance of coupled Brownian particles in rough ratchet*

Liu Chen-Hao¹⁾ Liu Tian-Yu¹⁾ Huang Ren-Zhong¹⁾

Gao Tian-Fu^{1)†} Shu Yao-Gen^{2)‡}

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

2) (*Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 6 August 2019; revised manuscript received 17 September 2019)

Abstract

Molecular motor is a kind of protein macromolecule, which moves along the microfilament or microtubule in cell directionally and participates in all kinds of intracellular life activities fully. In order to study the directional motion of molecular motor, a series of ratchet models have been proposed. However, the potentials used in most of the ratchet models are smooth sawtooth potential or harmonic potential. Recently, the experimental studies show that intracellular impurities, spatial inhomogeneity or the folding process of protein can yield deviation from a smooth ratchet profile. This kind of deviation will roughen the known smooth potential. In fact, the roughness of potential is not only closely related to the properties of protein, but also has an important implication in transition rate. Therefore, the rough ratchet will be used to simulate the interaction between molecular motor and trajectory in this work. In addition, experimental researches show that there is a class of molecular motor that can move directionally without dragging load in organism. According to the theory presented by Wang and Oster (Wang H, Oster G 2002 *Europhys. Lett.* **57** 134), the directional transport capability of this kind of motor can be investigated by means of Stokes efficiency. The higher the Stokes efficiency of the motor, the stronger the ability of the motor to use external input energy for directional motion.

Here in this work, the overdamped Brownian transport of the two harmonically interacting particles is investigated, and the performance of transport is analyzed by studying the mean velocity and Stokes efficiency of the dimer induced by the introduction of roughness into the potential profile. The influences of the amplitude of perturbation, the wavenumber, the coupling strength and the free length of coupled Brownian particles on the directional transport performance are discussed in detail. According to the structure of ratchet, it is found that the roughness can either restrain or enhance the ratchet performance. It is shown that the appropriate amplitude and wavenumber of rough ratchet can promote the directional transport and enhance the Stokes efficiency of coupled Brownian particles. Moreover, one can distinguish between the optimal value of the coupling strength and free length that leads to a local maximum current. In addition, the directional transport of rough ratchet can be reversed by modulating the suitable coupling strength and free length. The conclusions obtained in this paper can provide theoretical guidance for understanding the motion behavior of molecular motor in experiment, and can also provide experimental inspiration for developing the nanometer machines and realizing the particle separation technology.

Keywords: roughness, center-of-mass mean velocity, Stokes efficiency, current reversal

PACS: 05.40.-a, 02.30.Yy, 02.50.Fz

DOI: 10.7498/aps.68.20191203

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11574329, 11774358, 11347003), the Key Research Program of Frontier Sciences of CAS (Grant No. Y7Y1472Y61), the CAS Biophysics Interdisciplinary Innovation Team Project (Grant No. 2060299), the Strategic Priority Research Program (A) of CAS (Grant No. XDA17010504), and the Natural Science Foundation of Liaoning Province, China (Grant No. 20180550149).

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

‡ Corresponding author. E-mail: shuyg@itp.ac.cn