

**ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И РЕАКЦИОННОЙ
СПОСОБНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ**

УДК 533.723:577.352.4(086.48)

**КУСОЧНО-ЛИНЕЙНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ
ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ РЕЛЬЕФОВ БРОУНОВСКИХ
МОТОРОВ**

Т.Е. Корочкова

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины,
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, e-mail: taiscrust@isc.gov.ua*

Сделан краткий обзор кусочно-линейной аппроксимации потенциальных рельефов реально существующих и модельных наноструктур (броуновских моторов), выпрямляющих хаотическое броуновское движение в системах с нарушенной зеркальной симметрией под действием внешнего флуктуационного возмущения в отсутствие макроскопических движущих сил. Выведены соотношения, позволяющие проводить такую аппроксимацию.

Введение

Ключевым моментом в теории броуновских моторов является ретчет-эффект – выпрямление хаотического теплового движения в направленное с помощью организации механизма блокирования разнонаправленных потоков при выполнении определенных условий [1–3]. Для генерации таких потоков обязательно наличие в системе пространственной асимметрии, которая и будет обуславливать выделенное направление движения. Часто это условие реализуется с помощью кусочно-линейного пилообразного, периодического и асимметричного профиля. Существует ряд экспериментальных приложений, в которых используются пилообразные профили, и зачастую возникает необходимость реализации пилообразного потенциала, конструирования такого приспособления, которое бы создавало потенциальный профиль, максимально близкий к пилообразному. В первую очередь, это ретчет-устройства – наномашин, создающие и изучающие направленные потоки частиц, основу которых составляют периодически расположенные разнообразие конструкции, обязательно асимметричные, которые управляются приложенными, зависящими от времени, случайными или детерминированными, силами, выводящими систему из равновесия [4]. На данный момент существует множество реализаций ретчет-механизма на практике – различные варианты простейших on-off ретчетов и их модификации, приборы для сортировки частиц, двухмерные ретчет-конструкции, состоящие из узора пилообразных профилей, искусственные белковые ретчеты, электронные, квантовые ретчеты и т.д. В следующих разделах будет дан краткий обзор наиболее известных устройств, в которых используются пилообразные потенциалы, рассмотрены особенности и преимущества кусочно-линейных потенциалов при расчетах модельных систем в теории броуновских моторов, предложен способ аппроксимации реальных произвольных антисимметричных периодических потенциалов, близких к пилообразным, кусочно-линейными, и проиллюстрирован на примере суммы двух синусоид.

Примеры экспериментальных броуновских машин

Как известно, ретчет-механизм используется при создании приборов для сепарации частиц [5, 6]. В них обычно реализован механизм on-off ретчета (в котором потенциал «включается» и «выключается», что одновременно решает вопрос с подводом энергии в систему и созданием флуктуаций, выводящих ее из равновесия) с пилообразным профилем, сконструированный под наклоном, и частицы различной массы либо приводятся в движение ретчет-механизмом (более легкие) и увлекаются вверх по пилообразному профилю вверх, либо вследствие большой массы собираются внизу [7, 8]. Существуют и более совершенные модели; так, в работе [9] предлагается использовать усовершенствованную схему on-off ретчета, в котором с фазой отсутствия потенциала чередуются два пилообразных профиля разного периода (отличающиеся, например, в два раза), разного направления асимметрии и разного времени жизни. Варьирование параметрами модели позволяет легко манипулировать направлением создаваемых разных потоков.

Одним из примеров броуновских моторов является электронный ретчет [10, 11], реализация которого обычно затруднена из-за необходимости создания криогенных рабочих температур и низкой эффективности. В 2011 г. Кемеринк и соавторы [12] создали органический электронный ретчет, который функционирует при комнатной температуре и обеспечивает производительность, достаточную для питания простой логической схемы. В нем был реализован принцип on-off ретчета: повторяющиеся включения-выключения пилообразного потенциала выпрямляют тепловое движение носителей заряда с получением направленного переноса заряда в отсутствие постоянного напряжения. Основной блок устройства – органический транзистор, в котором тонкая пентаценовая пленка, нанесенная на слой диэлектрика SiO_2 и silicone back gate, контактирует с Ti-Au источник-сток электродами, которые расположены в диэлектрике периодически и асимметрично. На электроды подается синусоидально зависящее от времени напряжение, что приводит к генерации направленного потока заряженных частиц величиной около 0,3 мкА, что в три раза превышает обычные значения для подобных устройств. Это объясняется тем, что в данном устройстве on-off механизм выпрямления усиливается отталкиванием одноименно заряженных частиц [12]. Дальнейшее усовершенствование электронных ретчетов, например оптимизация и усложнение конфигурации электродов, использование гибридных материалов и разработка комбинированных методов выпрямления движения, открывает перспективы для генерации больших токов при комнатных температурах, конструирования устройств для разделения заряда и т.д.

Существуют ретчеты, способные контролировать движение заряженных компонентов мембраны, белков и липидов, внутри структурированного липидного бислоя [13]. Мембранные белки ответственны за поддержание ионной концентрации и градиентов в клетках, передачу метаболитов и питательных веществ, а также для межклеточного сообщения, и поэтому являются мишенью для многих лекарственных веществ. Исследование таких белков является проблематичным из-за их нестабильности вне мембранной среды, также как и воссоздание мембранных белков в больших концентрациях в липосомах или в липидном бислое. Поэтому очень актуальными для функциональных исследований являются методы, позволяющие манипулировать мембранными белками, а также их концентрацией [14, 15]. Используя механизм функционирования ретчета [1–3, 15, 16] (переменное электрическое поле, приложенное в плоскости структурированного липидного бислоя, имеющего форму геометрического узора – двух совмещенных пилообразных профилей, позволяет выпрямить диффузионное движение и создать поток компонентов в нужном направлении), было экспериментально реализовано ретчет-устройство, позволяющее

перекачивать заряженные частицы в заданном направлении между четко определенными областями [13]. Это открывает возможности для создания сложных геометрических массивов пилообразных структур разного размера, которые будут селективно транспортировать только те мембранные компоненты, на которые настроен каждый из отдельных ретчетов. Также вследствие того, что приложенное поле может перемещать только белки определенной ориентации, подобные устройства могут осуществлять селективную сортировку мембранных белков.

Еще один класс ретчет-устройств – синтетические аналоги белковых моторов. Как известно, существующие внутри клеток белковые моторы выполняют конкретные задачи для жизнеобеспечения клеток, например, кинезин и динеин осуществляют внутриклеточный транспорт, двигаясь вдоль микротрубок, используя энергию гидролиза аденозинтрифосфата. Эти моторы совершают дискретные «шаги» длиной около 8 нм и могут перетаскивать грузы на расстояние около 1 мкм [17–20]. Существует ряд разработок синтетических аналогов белковых моторов, такие, как self-assembled DNA walkers, которые могут скачкообразно передвигаться вдоль РНК-субстрата или функционировать как programmable assembly lines [21–26]. В работе [27] представлен синтетический ДНК-мотор, который может перетаскивать наночастицу-груз (нанокристалл CdS) вдоль однослойной углеродной нанотрубки. Используя энергию рибонуклеиновой кислоты (РНК), нанесенной на нанотрубку, этот мотор может автономно двигаться вдоль нанотрубки вследствие серии последовательных конформационных изменений; при этом возможно управление движением устройства, останавливать и снова запускать, воздействуя на окружающую среду мотора. Транслокацию отдельных моторов можно наблюдать в реальном времени с использованием видимой флуоресценции. Такой синтетический мотор может преодолеть расстояние в 3 мкм со скоростью движения около 1 нм/с [27].

Кроме ретчет-устройств, существуют другие механизмы генерации направленных потоков с помощью пилообразных профилей или даже воздействий. Например, в работе [28] получен ретчет-эффект при асимметричной модуляции лазера: вследствие пилообразной временной модуляции параметров накачки и введения в систему флуктуаций фиксировалось появление потока энергии, причем в зависимости от знака возмущения менялось и направление потока. Как и в обычном ретчете, для того, чтобы наблюдался феномен, необходимо одновременное присутствие и асимметрии модуляций, и наличие флуктуаций [28].

В работе [29] описан эксперимент улавливания и управления движением капель Лейденфроста с помощью ретчет-профиля. Эффект Лейденфроста состоит в том, что если капля жидкости попадает на очень горячую поверхность (температура которой намного выше температуры кипения и выше определенного значения – точки Лейденфроста), внешний слой капли при соприкосновении испаряется и образует изолирующий слой газа, который заставляет каплю воды «зависать» и двигаться вдоль горячей поверхности. Моделирование формы этой поверхности может оказывать влияние на характер движения, который в общем случае хаотический, что изучалось в ряде работ [30, 31]. В [29] описана экспериментальная установка, в которой на круглой разогреваемой поверхности на равном расстоянии друг от друга вырезаны концентрические окружности таким образом, что вдоль радиуса профиль имеет форму предельно асимметричной пилы, а ориентация асимметрии подобрана так, чтобы капли Лейденфроста, которые попадают на эту поверхность, двигались к центру. Вследствие быстрого испарения жидкости капли радиусом R 3–5 мм над раскаленной поверхностью (высота капли над поверхностью d 0,06 мм) с рельефом в форме пилообразных каналов (амплитуда пилы $\delta = 0.3$ мм, период пилы $\lambda = 1.5$ мм) под каплями возникают неоднородные потоки газа, направленные вдоль каналов в глубоких

областях пины и вверх на пиках, что приводит к воздействию на каплю разнонаправленных сил. Асимметрия пилообразного профиля в сочетании с возникающими силами быстрого неоднородного испарения и инерцией капли вызывает направленное движение центра капли вдоль пилообразного рельефа.

Пилообразный потенциал в теоретических моделях

Как видно из приведенного выше небольшого обзора, создание пилообразного потенциального профиля или профиля, близкого к нему, важно для большинства экспериментальных реализаций броуновских моторов. В теории броуновских моторов пилообразный потенциал занимает не менее важное место. Кроме того, что он простой как при его описании (такой потенциал характеризуется всего двумя параметрами – амплитудой и коэффициентом асимметрии), так и при его использовании (состоит из двух линейных участков, что позволяет получить аналитические представления основных характеристик мотора, а также воспользоваться методом трансфер-матрицы), он позволяет оценить и прогнозировать моторный эффект в достаточно многих случаях [32–35]. В работе [36], посвященной пилообразным потенциалам, подробно рассмотрены задание функции пилообразного потенциала, ее параметризация и особенности, предложена простая модификация пилообразного потенциала, позволяющая снять ограничения в инициации движения броуновскими моторами, вызванные повторением идентичных участков, а также для модели модифицированного пилообразного потенциала, флуктуирующего по знаку в адиабатическом режиме с учетом инерционных поправок движения частиц, рассчитано аналитическое представление средней скорости мотора.

Реальные периодические одномерные объекты (дипольные цепочки, волокна цитоскелета, углеродные нанотрубки и др.) создают периодические асимметричные потенциалы, близкие к пилообразным, которые используются при создании ретчет-устройств. В теории броуновских моторов многие известные соотношения выведены для пилообразного потенциала. Для того, чтобы оценить или прогнозировать работу броуновского мотора с помощью известных формул, нужно пользоваться именно пилообразным потенциалом, и в этом случае необходим удобный способ нахождения параметров пилообразного потенциала, максимально близкого к заданному реальному.

Метод аппроксимации, в первую очередь, зависит от способа задания исходной функции. Если это табличная форма, и, кроме периода функции, о ней больше ничего не известно, то задачу аппроксимации в общем случае можно решить методом наименьших квадратов процедурно, т. е. перебором возможных квадратичных сумм отклонений и нахождения минимальной. Такая задача является скорее задачей вычислительной математики. Если же исходная функция задана аналитически, тогда можно предварительно оценить направление иницируемого движения: его определяет ряд факторов, конкурирующих между собой, таких как тип броуновского мотора (механизм организации движения), наличие или отсутствие временной асимметрии в системе, температурный режим [1–3,34,37]. Тогда, определив центр масс исходной функции и оценив направление генерируемого движения, можно определить приблизительные координаты минимума и максимума пилообразного потенциала и далее рассчитать параметры пины методом наименьших квадратов. В следующем разделе будет рассмотрена аппроксимация произвольной антисимметричной периодической функции пилообразным потенциалом и сформулирована общая система уравнений для нахождения его параметров.

Аппроксимация методом наименьших квадратов

Рассмотрим задачу аппроксимации пилообразным потенциалом реального потенциала от экспериментально наблюдаемого объекта $V(x)$ произвольной формы в том случае, когда известно, что $V(x)$ – антисимметричная периодичная немонотонная (причем имеющая один максимум и один минимум на периоде) функция. Согласно строгому определению, данному в работе [36], потенциальный профиль $U(x)$ – антисимметричный, если существуют такие произвольные постоянные \tilde{x} и \tilde{U} , при которых удовлетворяется равенство $U(-x) = -U(x + \tilde{x}) + \tilde{U}$. Любой пилообразный потенциал также является антисимметричной функцией. Так как в области диффузионной динамики выбор начала координат не влияет на значения рассчитываемых величин [36], то любой антисимметричный профиль путем передвижения осей координат можно представить как нечетную функцию. В таком случае, считаем, что координатные оси уже расположены так, что заданный произвольный потенциальный профиль $V(x)$ – нечетная функция (т. е. $V(-x) = -V(x)$), периодичная по пространственной координате x с полным периодом L (см. рис. 1, сплошная кривая).

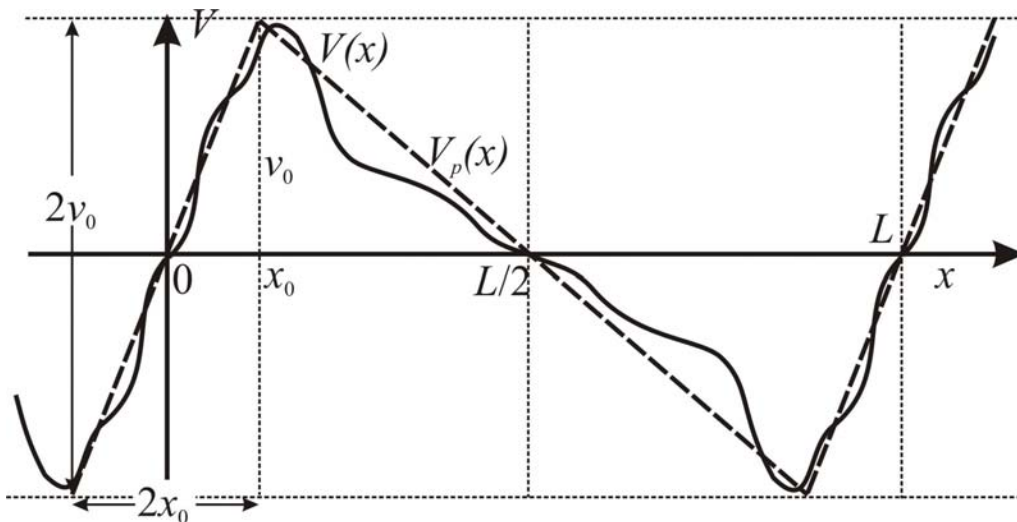


Рис. 1. Антисимметричная периодичная по x с периодом L функция произвольной формы $V(x)$ (сплошная кривая) и аппроксимирующий ее пилообразный потенциал $V_p(x)$ (штриховая кривая).

Одновременное условие нечетности и периодичности функции $V(x)$ и аппроксимирующего пилообразного потенциала $V_p(x)$ задают также симметричность этих двух функций относительно точек $x = \pm L/2$ (в точках $x = \pm L/2$ и заданный потенциал $V(x)$, и пилообразный $V_p(x)$ будут принимать нулевые значения вследствие этих же условий и условий немонотонности) (см. рис. 1). Тогда достаточно рассматривать задачу на участке $(0, L/2)$. Запишем искомый пилообразный потенциал в следующем виде:

$$V_p(x) = \begin{cases} \frac{v_0 x}{x_0}, & 0 < x < x_0, \\ \frac{v_0(L/2 - x)}{L/2 - x_0}, & x_0 < x < L/2. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь x_0 – положение максимума пила, v_0 – амплитуда пилообразного потенциала на участке $(0, L/2)$. Следует отметить, что для стандартной записи пилообразного потенциала положение максимума пила будет $l = 2x_0$, полная амплитуда $V_0 = 2v_0$, а коэффициент асимметрии $\kappa = 1 - 2l/L = 1 - 4x_0/L$. Величины x_0 и v_0 – две неизвестные, определяющие пилообразный профиль (1), которые будем искать методом наименьших квадратов. Для этого запишем интегральную функцию квадратичных отклонений профилей $V(x)$ и $V_p(x)$ в виде

$$\Delta(x_0, v_0) = \int_0^{x_0} dx \left[V(x) - \frac{v_0}{x_0} x \right]^2 + \int_{x_0}^{L/2} dx \left[V(x) - \frac{v_0}{L/2 - x_0} (L - x) \right]^2. \quad (2)$$

Нахождение минимума функции $\Delta(x_0, v_0)$ – приравнивание к нулю ее частных производных по x_0 и v_0 , – определяет два уравнения для нахождения этих неизвестных

$$\begin{aligned} \frac{1}{x_0^2} \int_0^{x_0} x V(x) dx - \frac{1}{(L/2 - x_0)^2} \int_{x_0}^{L/2} (L/2 - x) V(x) dx &= 0, \\ \frac{1}{2} v_0 L - \frac{2}{x_0} \int_0^{x_0} x V(x) dx - \frac{2}{(L/2 - x_0)} \int_{x_0}^{L/2} (L/2 - x) V(x) dx &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Эта система уравнений для x_0 и v_0 справедлива для любого потенциала $V(x)$, отвечающего условиям антисимметричности, периодичности и немонотонности. Она содержит интегралы, которые возможно взять в случае, когда известен явный вид антисимметричного периодичного профиля $V(x)$.

Для того, чтобы проиллюстрировать предложенный метод аппроксимации, конкретизируем вид потенциала $V(x)$ и рассмотрим случай суммы двух синусоид разного периода

$$V(x) = A_1 \sin \frac{2\pi x}{L} + A_2 \sin \frac{4\pi x}{L} \quad (4)$$

Потенциал такого вида при $A_2/A_1 = 1/4$ создается цепочкой коллинеарно расположенных диполей [36, 38] и, как близкий к пилообразному, широко представлен в работах по теории броуновских моторов [39, 40].

Для такого вида потенциала интегралы, входящие в уравнения (3) в общем виде, можно взять аналитически:

$$\int_0^{x_0} xV(x)dx = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \left\{ \frac{2\pi x_0}{L} \left(-A_1 \cos \frac{2\pi x_0}{L} - \frac{1}{2} A_2 \cos \frac{4\pi x_0}{L}\right) + A_1 \sin \frac{2\pi x_0}{L} + \frac{1}{4} A_2 \sin \frac{4\pi x_0}{L} \right\},$$

$$\int_{x_0}^{L/2} \left(\frac{L}{2} - x\right)V(x)dx = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \left\{ \frac{2\pi(L/2 - x_0)}{L} \left(A_1 \cos \frac{2\pi x_0}{L} + \frac{1}{2} A_2 \cos \frac{4\pi x_0}{L}\right) + A_1 \sin \frac{2\pi x_0}{L} + \frac{1}{4} A_2 \sin \frac{4\pi x_0}{L} \right\}.$$

(5)

Введем следующие переменные: $\alpha = A_2 / A_1$, $v = v_0 / A_1$, $\lambda = 2x_0 / L$, Тогда уравнение для λ (первое из системы уравнений (3)) примет вид

$$\frac{1}{\lambda^2} f_1(\lambda) - \frac{1}{(1-\lambda)^2} f_2(\lambda) = 0,$$

(6)

где функции f_1 и f_2 – это выражения (5) после замены переменных с точностью до констант

$$f_1(\lambda) = \pi\lambda \left(-\cos \pi\lambda - \frac{\alpha}{2} \cos 2\pi\lambda\right) + \sin \pi\lambda + \frac{\alpha}{4} \sin 2\pi\lambda,$$

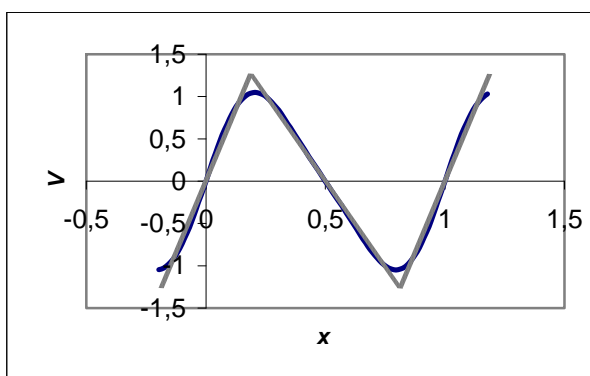
(7)

$$f_2(\lambda) = \pi(1-\lambda) \left(\cos \pi\lambda + \frac{\alpha}{2} \cos 2\pi\lambda\right) + \sin \pi\lambda + \frac{\alpha}{4} \sin 2\pi\lambda.$$

Из уравнения (6) можно найти λ (и, соответственно, x_0) численными методами, после чего рассчитать v (и v_0) по формуле, полученной из второго уравнения системы (3),

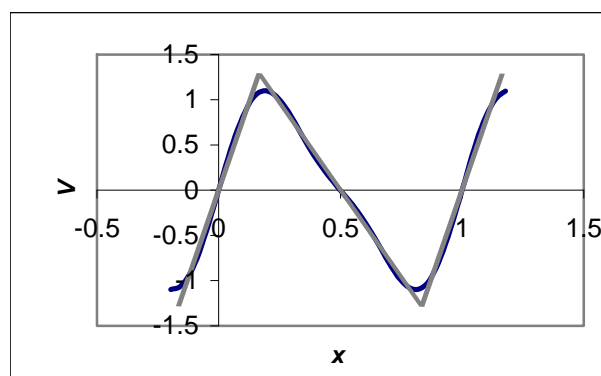
$$v = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{f_1(\lambda)}{\lambda} + \frac{f_2(\lambda)}{1-\lambda}\right).$$

(8)



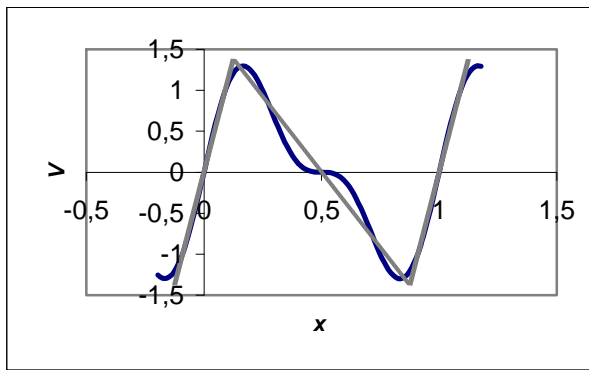
$A_2 = A_1 / 6$, $\lambda = 0.3751$, $v = 1.2364$

a



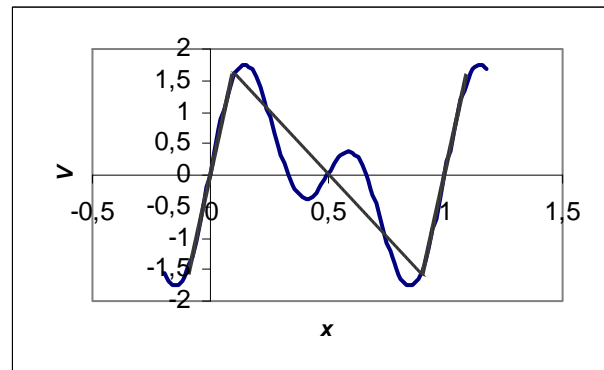
$A_2 = A_1 / 4$, $\lambda = 0.3309$, $v = 1.2586$

b



$$A_2 = A_1 / 2, \lambda = 0.2508, v = 1.3490$$

а



$$A_2 = A_1, \lambda = 0.1842, v = 1.5694$$

б

Рис. 2. Аппроксимация функции вида (4) пилообразным потенциалом для разных значений $\alpha = 1/6, 1/4, 1/2, 1$ – рисунки *а, б, в, г* соответственно. Рассчитанные параметры пилообразного потенциала λ и v указаны на рисунке в каждом случае.

Таким образом находятся две искомые переменные, x_0 и v_0 , которые определяют аппроксимирующий пилообразный потенциал. На рис. 2 приведены примеры предложенного метода для разных значений $\alpha = A_2 / A_1$ (значения α , а также рассчитанные λ и v указаны на рисунке в каждом случае).

Результативность предложенного метода можно визуальнo оценить по рис. 2. На рис. 2 *а* и *б* пила практически повторяет форму исходного аппроксимируемого потенциала (за исключением областей экстремумов), на рис. 2 *в* видно, что исходный потенциал и аппроксимирующий несколько отличаются, тогда как на рис. 2 *г* комбинация синусоид такова, что исходный потенциал становится уже двухъямным, и в этом случае возникает вопрос о целесообразности такой аппроксимации.

Обсуждение и выводы

В работе дан краткий обзор кусочно-линейной аппроксимации потенциальных рельефов реально существующих и модельных броуновских моторов, а также предложен метод, позволяющий построить такую аппроксимацию, минимально отклоняющуюся от заданного потенциального профиля.

В [41] проведено сравнение функционирования двух видов ретчетов для потенциала двух синусоид и пилообразного, рассчитанного по методу наименьших квадратов (соответствующих рис. 2 *б*) при учете инерционных поправок и без них. Расчеты средней скорости, генерируемой моторами (on-off ретчета и ретчета с чередованием двух потенциалов одинаковой формы, но разного растяжения по энергетической оси) показали, что разница в форме экстремумов (плавная функция или стык двух прямых) играет принципиальную роль в низкотемпературном режиме: средние скорости, генерируемые моторами, значительно отличаются. Это объясняется тем, что в области низких температур основной вклад в искомые величины дают распределения частиц вблизи минимумов потенциальных профилей и вероятности преодоления потенциальных барьеров, которые определяются формой кривых вблизи максимумов этих профилей. Поскольку форма реальных потенциальных профилей и их аппроксимации кусочно-линейной функцией существенно различаются именно вблизи экстремальных точек, то возникающие отличия в значениях средней скорости не удивительны.

В то же время при высоких температурах, когда вероятности найти частицу в разных точках потенциального рельефа мало отличаются и форма экстремумов уже практически не влияет на функционирование мотора, различия в генерируемых скоростях незначительны [38]. Приведенный анализ показывает, что использование аппроксимации пилообразным потенциалом в теории броуновских моторов хорошо оправдано в области высокотемпературных режимов движения.

Литература

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // *Phys. Rep.* – 2002. – V. 361. – P. 57–265.
2. Astumian R.D. Adiabatic Theory for Fluctuation-Induced Transport on a Periodic Potential // *J. Phys. Chem.* – 1996. – V. 100, N 49. – P. 19075–19081.
3. Astumian R. D. Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor // *Science.* – 1997. – V. 276. – P. 917-922.
4. Hanggi P. Organic electronics: Harvesting randomness // *Nature Mat.* – 2011. – V. 10. – P. 6–7.
5. Squires T. M., Quake S. R. Microfluidics: Fluid *physics* at the nanoliter scale // *Rev. Mod. Phys.* – 2005. – Vol. 77, No. 3. – P. 977-1026.
6. Pamme N. Continuous flow separations in microfluidic devices // *Lab Chip.* – 2007. – V. 7. – P. 1644–1659.
7. Faucheux L.P., Libchaber A. Selection of Brownian particles // *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* – 1995. – Vol. 91. – P. 3163-3166.
8. Gorre-Talini L., Jeanjean S., Silberzan P. Sorting of Brownian particles by pulsed application of an asymmetric potential // *Phys. Rev. E.* – 1997. – Vol. 56. – P. 2025-2034.
9. Grimm A., Stark H., and Van der Maarel J. R. C. Model for a Brownian ratchet with improved characteristics for particle separation // *Phys. Rev. E* – 2009. – V. 79. –P. 061102.
10. Linke H. Humphrey T., Lofgren A. et al. Experimental tunneling ratchets. // *Science.* – 1999. – V. 286, – P.2314–2317.
11. Kharpai V. S., Ludwig S., Kotthaus J. P., Tranitz H. P., Wegscheider W. Double-Dot Quantum Ratchet Driven by an Independently Biased Quantum Point Contact // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 97, P. 176803.
12. Roeling E. M, Germs W. Ch., Smalbrugge B., Geluk E. J., de Vries T., Janssen R. A. J., Kemerink M. et al. Organic electronic ratchets doing work // *Nature Mater.* – 2011. – V. 10. – P. 51–55.
13. Cheetham M.R., Bramble J.P., McMillan D.G.G. et al Manipulation and sorting of membrane proteins using patterned diffusion-aided ratchets with AC fields in supported bilayers // *Soft Matter.* – 2012. – V. 8. – P. 5459–5465..
14. Krogh A., Larsson B., von Heijne G., Sonnhammer E. Predicting transmembrane protein topology with a hidden Markov model. Application to complete genomes // *J. Mol. Biol.* – 2001. – V. 305. – P. 567–580.
15. Overington J. P., Al-Lazikani B., Hopkins A. L. How many drug targets are there? // *Nat. Rev. Drug Discov.* – 2006. – V. 5. – P. 993–996.
16. Bader J.S., Hammond R.W., Henck S.A., Deem M.W., McDermott G.A., Bustillo J.M., Simpson J.W., Mulhern G.T., Rothberg J.M. DNA Transport by a Micromachined Brownian Ratchet Device // *Proc. Nat. Acad. Sci. of USA.* – 1999. – V. 96. – P 13165.
17. Vale R. D. The molecular motor toolbox for intracellular transport // *Cell.* – 2003.—V. 112. – P. 467–480.

18. Finer J. T., Simmons R. M., Spudich J. A. Single myosin molecule mechanics—piconewton forces and nanometre steps // *Nature*. – 1994. – V. 368. – P. 113–119.
19. Hirokawa N. Kinesin and dynein superfamily proteins and the mechanism of organelle transport // *Science*. – 1998. – V. 279. – P. 519–526.
20. Howard J., Hudspeth A. J., Vale R. D. Movement of microtubules by single kinesin molecules // *Nature*. – 1989. – V. 342. – P. 154–158.
21. Bath J., Green S. J., Turberfield A. J. A Free-running DNA motor powered by a nicking enzyme // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2005. – V. 44. – P. 4358–4361.
22. Yin P., Choi H. M. T., Calvert C. R., Pierce N. A. Programming biomolecular self-assembly pathways // *Nature*. – 2008. – V. 451. – P. 318–322.
23. Omabegho T., Sha R., Seeman N. C. A bipedal DNA Brownian motor with coordinated legs // *Science*. – 2009. – V. 324. – P. 67–71.
24. He Y., Liu D. R. Autonomous multistep organic synthesis in a single isothermal solution mediated by a DNA walker // *Nature Nanotech.* – 2010. – V. 5. – P. 778–782.
25. Lund K., Manzo A. J., Dabby N. et al. Molecular robots guided by prescriptive landscapes // *Nature*. – 2010. – V. 465. – P. 206–210.
26. Wickham S. F. J., Endo M., Katsuda Y. et al. Direct observation of stepwise movement of a synthetic molecular transporter // *Nature Nanotech.* – 2011. – V.6. – P. 166–169.
27. Cha T.G., Pan J., Chen H. et al. A synthetic DNA motor that transports nanoparticles along carbon nanotubes // *Nature Nanotechnology*. – 2013. – V. 9, N 1. – P. 39–43.
28. Preda C. E., Ségard B., and Glorieux P. Weak temporal ratchet effect by asymmetric modulation of a laser // *Optics Letters*. – 2006. – Vol. 31, No. 15. – P. 2347-49
29. Cousins T. R., Goldstein R. E., Jaworski J. W., Pesci A. I. A ratchet trap for Leidenfrost drops // *J. Fluid Mech.* – 2012. – V. 696. – P. 215-227.
30. Adachi K., Takaki, T. Vibration of a flattened drop. Part 1. Observation. // *J. Phys. Soc. Japan* – 1984. – 53. –P. 4184–4191.
31. Linke H., Alemán, B. J., Melling, L. D., Taormina, M. J., Francis, M. J., Dow-Hygelund, C. C., Narayanan, V., Taylor, R. P. & Stout, A. Self-propelled Leidenfrost droplets // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – 96. – P. 154502.
32. Magnasco M. O. Forced thermal ratchets // *Phys. Rev. Lett.* –1993. – V. 71, No 10. – P. 1477-1481.
33. Sokolov M. Irreversible and reversible modes of operation of deterministic ratchets // *Phys. Rev. E.* – 2001. – V. 63. No 2. – P. 021107-1-4.
34. Rozenbaum V. M., Korochkova T. Ye., Chernova A. A., Dekhtyar M. L. Brownian motor with competing spatial and temporal asymmetry of potential energy // *Phys. Rev. E.* – 2011. – V. 83, No 5. – P. 051120-1-10.
35. Корочкова Т. Е., Шкода Н. Г., Чернова А. А., Розенбаум В. М. Точные аналитические решения в теории броуновских моторов и насосов // *Поверхность*. – 2012. – № 4(19). – С. 19–35.
36. Корочкова Т. Е. Модельный пилообразный потенциал в теории броуновских моторов / Т. Е. Корочкова, В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина // *Поверхность*. - 2015. - Вып. 7. - С. 12-23.
37. Розенбаум В.М. Низкотемпературный режим функционирования адиабатического броуновского мотора // *Физика низких температур*. – 2014. – Т. 40, № 5. – С. 604–607.
38. Корочкова Т. Е., Розенбаум В. М., Чуйко А. А. Дрейф броуновской частицы, обусловленный ориентационным структурированием адсорбата // *Доповіді НАН України* – 2004. – № 8. – С. 93–98.

39. Kharchenko V. O. and Goychuk I. Subdiffusive rocking ratchets in viscoelastic media: Transport optimization and thermodynamic efficiency in overdamped regime // Phys. Rev. E. – 2013. – 87. – P. 052119.
40. Son W.-S., Ryu J.-W., Hwang D.-U., Lee S.-Y., Park Y.-J., and Kim C.M. Transport control in a deterministic ratchet system // Phys. Rev. E. – 2008. – V. 77. – P. 066213.
41. Rozenbaum V. M., Makhnovskii Yu. A., Shapochkina I. V., Sheu S.-Y., Yang D.-Y., Lin S. H. Inertial effects in adiabatically driven flashing ratchets // Phys. Rev. E. – 2014. – V. 89, No 1. – P. 052131-1-9.

КУСКОВО-ЛІНІЙНА АПРОКСИМАЦІЯ ПОТЕНЦІАЛЬНИХ РЕЛЬЄФІВ БРОУНІВСЬКИХ МОТОРІВ

Т.Є. Корочкова

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, e-mail: taiscrust@isc.gov.ua*

Зроблено короткий огляд кусково-лінійної апроксимації потенціальних рельєфів реально існуючих і модельних нанопристроїв (броунівських моторів), що випрямляють хаотичний броунівський рух в системах з порушеною дзеркальною симетрією під дією зовнішнього флуктуаційного збурення за відсутності макроскопічних рушійних сил. Виведено співвідношення, що дозволяють проводити таку апроксимацію.

PIECEWISE-LINEAR APPROXIMATION OF THE POTENTIAL RELIEF OF A BROWNIAN MOTORS

T.Ye. Korochkova

*Chuiiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, e-mail: taiscrust@isc.gov.ua*

The review of the piecewise linear potential reliefs approximation of actual and model nanodevices (Brownian motors) rectifying chaotic Brownian motion in systems with broken reflexion symmetry under the action of an external fluctuation perturbation in the absence of macroscopic driving forces is given. Relations are derived to carry out this approximation.