

Forced thermal ratchets

Julien Chopin

12 juin 2007

Des fluctuations hors d'équilibre peuvent orienter le mouvement brownien d'une particule évoluant dans un potentiel périodique de basse symétrie. Ce mouvement qui ne requiert aucune force macroscopique ni gradient thermique est assisté par le bruit thermique. Ces moteurs browniens sont une première étape dans la compréhension des phénomènes de transport dans le milieu intracellulaire et présentent un champ d'application important comme dans la séparation de particules, la microfluidique ou bien dans l'élaboration de moteurs microscopiques.

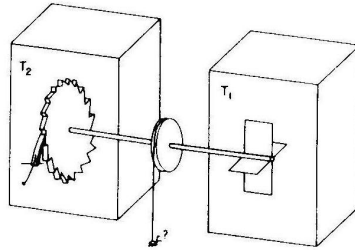


FIG. 1 – L'encliquetage à rochers de Feynman. On prend $T_1 = T_2 = T$

1 Position du problème

1905 fut l'*annus mirabilis* pour Einstein, celle où il publia quatre articles qui allaient bouleverser la physique. Deux d'entre eux ne sont rien de moins que des textes fondateurs de la mécanique quantique et de la relativité. Dans l'article de mai 1905 [2], Einstein expose une description du mouvement brownien¹ en terme de cinétique moléculaire. Il avait en vue de briser la frontière qui sépare le monde microscopique des atomes avec le monde macroscopique. En utilisant la théorie cinétique de la chaleur, il montre que des particules microscopiques en suspension dans un fluide sont animées d'un mouvement qui peut être détectée à l'aide d'un microscope. Ce mouvement est identique à celui de grains de pollen observé dès 1828 par le botaniste R. Brown [5]. Einstein montre ainsi que le mouvement d'une particule brownienne n'est pas balistique sauf pour des transitoires d'une durée inférieure à $\tau = 10^{-7}$ s. Au contraire, sur des échelles de temps supérieures à τ , il montre un résultat caractéristique du mouvement brownien à savoir que le déplacement moyen d'une particule est proportionnel à $t^{1/2}$.

Une particule brownienne ne constitue pas un système conservatif : elle échange sans cesse de l'énergie avec le fluide qui l'entoure. Dans son article, Magnasco se demande s'il serait possible de récupérer un travail utile à partir du mouvement des particules ou, ce qui revient au même, de récupérer du travail utile d'un unique bain thermique à l'équilibre. C'est en ces termes que ce pose le problème initial des moteurs browniens. La réponse est bien évidemment négative et s'exprime à travers le second principe de la thermodynamique : il n'existe pas de moteur en contact avec une unique source de chaleur. La question est donc tranchée à ceci près que le second principe n'a aucune valeur explicative. Feynman [3], à la suite de Smoluchowski [10], propose une expérience de pensée dans laquelle il donne une explication microscopique du second principe. Elle repose sur le principe de l'encliquetage à rochers utilisé depuis longtemps en horlogerie Fig. 1.

¹Le terme de mouvement brownien apparaît explicitement dans le titre d'un article d'Einstein de 1906

On considère un moulin dont les pâles sont en contact avec un gaz à l'équilibre à la température T , il est relié par un axe à une roue en dent de scie. On ajoute ensuite un loquet qui est astreint à rester en contact avec la roue, du fait de l'asymétrie des dents, la roue ne peut tourner que dans un seul sens : c'est le principe de l'encliquetage à rochers ou ratchet en anglais. En l'absence de ce dispositif, les molécules du gaz choquent aléatoirement les pâles du moulin provoquant ainsi un mouvement de rotation erratique qu'on peut qualifier de mouvement brownien de rotation. Il n'y a pas de sens de rotation privilégié. Lorsqu'on ajoute l'encliquetage à rochers, la roue ne peut plus tourner que dans un seul sens et serait par exemple capable de soulever une "puce". Cette première analyse nous conduit à penser qu'on a créé un moteur "alimenté" par l'énergie thermique du gaz. Mais le second principe nous l'interdit. Feynman résoud ce paradoxe en considérant le mouvement brownien associé au loquet. Ce dernier n'est pas en contact permanent avec la roue car il est aussi soumis aux chocs des molécules de gaz. Il existe une probabilité non nulle que, lors d'une fluctuation thermique, le loquet se trouve plus haut que le sommet d'une dent autorisant ainsi un mouvement à contre-sens. Lorsqu'on est à l'équilibre thermique cette probabilité est exactement égale à la probabilité d'aller dans le sens naturel. Au niveau macroscopique, l'asymétrie du système permet d'obtenir un mouvement dirigé, mais c'est faux au niveau microscopique.

Pour obtenir un mouvement dirigé, la seule issue est de contourner le second principe en mettant le système hors d'équilibre. Il existe plusieurs méthodes pour le faire. On exclue évidemment celles qui consistent à appliquer une force macroscopique constante qui ne conduit qu'à des résultats triviaux. Les méthodes les plus intéressantes présentent un forçage microscopique qui s'annule en moyenne à l'échelle macroscopique. Au cours de cette étude nous allons mettre en évidence les ingrédients nécessaires obtenir un moteur brownien.

Comme l'a fait Magnasco nous allons traduire l'expérience de pensée de Feynman en terme de processus stochastiques mais avant cela nous allons expliciter certaines propriétés générales liées à l'équation de Fokker-Planck appliquée au mouvement brownien.

2 Processus stochastiques liés au mouvement brownien

2.1 Généralité sur les processus stochastiques

Nous allons considérer une particule de taille micrométrique en suspension dans de l'eau, l'ensemble étant à l'équilibre thermique et regarder quelles sont les différentes échelles de temps. Pour toute démonstration on pourra consulter la ref. [8]. L'effet des fluctuations thermiques est contenu, dans l'équation de Langevin, par une force aléatoire de moyenne temporelle nulle. On note τ_c le temps de corrélation de cette force. Si on suit le système sur une échelle de temps plus grande que τ_c , on va pouvoir négliger les effets de mémoire et considérer un processus markovien. Cela suppose qu'il existe une séparation d'échelle de temps entre les variables lentes du système et les variables rapides des molécules du fluides auxquelles elles sont couplées. On suppose que l'effet de la viscosité du fluide se traduit par une force proportionnelle à la vitesse de la particule : $\vec{F}_{visc} = -\alpha \vec{v}$, on peut définir un temps caractéristique de relaxation pour la vitesse $\tau_c^v = \frac{1}{\gamma} = \frac{m}{\alpha}$. Magnasco donne une estimation de ce temps $\tau_c^v = 10^{-10}$ s. Bien que ce temps soit très petit, il reste très grand devant le temps microscopique τ_c : $\tau_c^v \gg \tau_c$.

Enfin, on va étudier la particule brownienne dans un régime très amortie dans lequel on néglige l'inertie de la particule. Cela revient à considérer des échelles de temps τ bien supérieures à τ_c^v . Magnasco considère que l'échelle de temps pertinente pour son modèle est $\tau = 10^{-2} \gg \tau_c^v$.

A partir de l'hypothèse d'un processus markovien, on peut trouver une équation d'évolution pour la densité de probabilité que l'on appelle équation maîtresse. Une propriété fondamentale de cette équation est qu'elle conduit le système vers un état d'équilibre [9]. L'état d'équilibre est caractérisé par une densité de probabilité stationnaire. Cette propriété est équivalente à vérifier le bilan global :

$$\sum_n P_m^{eq} p_{n \rightarrow m} = \sum_n P_n^{eq} p_{m \rightarrow n} \quad (1)$$

La relation (1) dit simplement que le nombre de transition par unité de temps qui conduisent à l'état m est égale au nombre de transition qui en partent. Il existe une condition plus contraignante qu'on appelle bilan détaillé qui s'exprime par :

$$P_m^{eq} p_{n \rightarrow m} = P_n^{eq} p_{m \rightarrow n} \quad (2)$$

Cet condition impose un équilibre entre toutes paires d'état du système. Cela traduit la micro-réversibilité

que l'on observe pour un système à l'équilibre thermique². De manière plus général, On peut montrer [4] que l'invariance par renversement du temps des équations du mouvement pour des degré de liberté microscopique conduit à la vérification du bilan détaillé³

En faisant l'hypothèse d'un processus lent⁴, on obtient l'équation de Fokker-Planck comme conséquence de l'équation maîtresse. Ces deux équations sont locales en temps⁵, c'est une conséquence de l'hypothèse markovienne.

2.2 Equation de Fokker-Planck du modèle de Feynman

Nous allons garder le modèle de Feynman (Part. 1) et le transposer en physique des processus stochastiques. L'équation de Langevin s'écrit :

$$\dot{x} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \xi(t) \quad (3)$$

où $U(x)$ est un potentiel périodique asymétrique indépendant du temps qui représente les dents de scie de l'encliquetage à rochers, le bain thermique est modélisé par γ et $\xi(t)$. ξ est un bruit blanc gaussien de moyenne nulle.

La grandeur d'intérêt pour le problème qui nous occupe est la vitesse moyenne de la particule brownienne $\langle \dot{x} \rangle$. En effet, comme dans l'expérience de l'encliquetage à rochers, on cherche à obtenir un phénomène de transport c'est-à-dire un déplacement moyen de la particule. L'équation de Fokker-Planck associée à l'équation Langevin citée plus haut peut être exprimée en terme d'une équation de conservation faisant intervenir un courant de probabilité \vec{J} , :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div}(\vec{J}) = 0 \quad (4)$$

On montre que la vitesse moyenne $\langle \dot{x} \rangle$ est relié au courant de probabilité \vec{J} . En effet, à l'aide d'une intégration par parties, on a :

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{d}{dt} \int x P(x, t) dx = \int J(x) dx \quad (5)$$

Supposant que la densité de probabilité tendent vers état stationnaire⁶, l'équation de conservation permet alors de montrer que $J_{st} = 0$. Par conséquent la vitesse moyenne de la particule est nulle. On a ainsi redémontré l'absence de phénomène de transport dans le modèle de Feynman. On ne s'est pas ici appuyer sur le second principe, on a simplement supposé que la densité de probabilité tendait vers un état stationnaire qui n'est rien d'autre que la distribution d'équilibre de Boltzmann.

L'existence d'un mouvement dirigé est, on l'a vu, empêché par le second principe. Or on sait que la loi de Curie affirme que si un phénomène n'est pas empêché par une symétrie alors il a lieu. Plus précisément, ce n'est pas le second principe qu'il faut invoquer mais plutôt l'invariance par renversement du temps ou la microréversibilité dont découle le bilan détaillé. Ainsi, on n'observe pas de phénomène de transport lorsqu'on brise la symétrie gauche/droite, car il existe une autre symétrie qui est satisfaite à l'équilibre thermique : la symétrie par renversement du temps des équations du mouvement microscopiques. Pour obtenir un moteur brownien, il faut encore briser la microréversibilité en portant le système hors d'équilibre. Il existe plusieurs façon de le faire, nous allons détailler la méthode de Magnasco.

3 Modèle de Magnasco

On sait très bien comment obtenir un courant de probabilité J non nul, il suffit d'incliner notre potentiel en dent de scie suffisamment fort en appliquant par exemple une force constante. Si on néglige l'agitation thermique, cela revient à faire rouler une boule sur un plan incliné. Mais l'effet que l'on recherche consiste plutôt à faire rouler une boule dans une direction fixée à appliquant une force nulle en moyenne. Lorsque l'agitation thermique joue un rôle non négligeable, on appelle cet effet l'effet ratchet. Magnasco propose d'appliquer une force F oscillant entre F_{Max} et F_{Min} qui va faire basculer le potentiel asymétrique d'avant en arrière.

²On note qu'il existe des systèmes hors d'équilibre qui vérifie le bilan détaillé, comme les lasers

³La réciproque n'est pas vraie, on peut vérifier le bilan détaillé sans pour autant que la micro-réversibilité soit vérifiée.

⁴Cette équation est valable pour les processus markoviens à diffusion lente, c'est-à-dire pour lesquelles les transferts sont petits.

⁵Le membre de droite des ces équations ne fait intervenir que des variables prises à l'instant présent t .

⁶Il y ici une subtilité puisque le temps d'équilibration dans le cas d'un potentiel périodique est infini. Un artifice purement technique de redéfinition de la densité de probabilité permet de donner un sens physique aux résultats de ce modèle [7].

Considérons le cas d'une boule non soumise à l'agitation thermique. Pour une force faible, la boule reste coincée entre deux dents. Lorsqu'elle dépasse un certain seuil, la boule va pouvoir rouler dans la direction de plus faible pente et ne roulera pas dans l'autre direction, on obtient bien un effet ratchet. Si maintenant la force dépasse un deuxième seuil, la boule peut alors rouler dans les deux sens, l'effet ratchet devient moins efficace et s'annule lorsque on augmente la force.

L'explication simpliste que nous venons de donner a le mérite de faire ressentir deux ingrédients indispensables pour obtenir un effet ratchet.

1. Système hors d'équilibre. Pour obtenir un phénomène de transport, il faut être hors d'équilibre sans quoi on violerait le second principe.
2. Potentiel asymétrique. La brisure de symétrie gauche/droite pour un potentiel unidimensionnel est responsable du déplacement du système dans une direction privilégiée.

Dans notre explication on a oublié de discuter les effets de l'environnement sur la particule. On a négligé l'inertie en se plaçant dans un régime super-amorti. On a supposé que la période de la force est beaucoup plus grande que le temps de relaxation de la particule. Enfin, dans le régime brownien, le temps d'évasion d'un puits de potentiel n'est pas infini, il décroît avec la température, si bien que le seuil de l'effet ratchet est une fonction de la température.

Pour mieux comprendre les effets de la température, Magnasco résout l'équation de Langevin associée à ce système. Il trouve l'expression du courant de probabilité en prenant un potentiel périodique asymétrique, linéaire par morceaux et une force constante. L'étape suivante consiste à supposer que la particule suit adiabatiquement l'évolution de la force oscillant en créneau à valeur moyenne nulle. Cela revient à considérer que le temps de relaxation est très petit devant la durée d'une oscillation ⁷.

On remarque que lorsque le potentiel est symétrique ($\Delta = 0$), $J(F)$ est une fonction impaire⁸ si bien que $J_{sqr} = 0$. On retrouve le fait qu'un potentiel symétrique n'induit pas de phénomène de transport. La figure 2 de l'article reproduit les caractéristiques que nous avons décrites pour une particule athermique (existence de seuils, diminution de l'efficacité à force élevée). Le rôle de la température est de baisser le seuil d'apparition de l'effet ratchet en contre partie d'une diminution de son efficacité lorsqu'elle devient trop élevée (figure 3).

Lorsqu'on change le potentiel, les simulations numériques (figures 4 et 5) montrent que les caractéristiques décrites plus hauts sont reproduites. Le forçage par un bruit brownien mérite que l'on s'y attarde. Revenant sur l'équation de Langevin initial, on ajoute un bruit brownien qui se superpose au bruit blanc gaussien. On peut alors se demander ce qui différencie ces deux bruits pour que l'un fasse marcher le moteur et que l'autre non. C'est leur fonction de corrélation qui les différencie : le bruit brownien est, à la différence du bruit thermique, un bruit corrélé. On peut ainsi tirer la conclusion que si on ne peut faire un moteur à partir d'une seule de chaleur c'est que l'équilibre thermique le bruit thermique est blanc. On ne peut tirer de l'énergie utile que des fluctuations lentes devant le temps de corrélations des fluctuations thermiques. Puisqu'à l'équilibre thermique les fluctuations sont non corrélées, on retrouve encore une fois la nécessité d'être hors d'équilibre.

4 Prolongements

4.1 Autres modèles de ratchets

Il existe d'autres modèles de ratchets qui diffèrent par le forçage qui maintient le système hors d'équilibre. Le ratchet on-off consiste à appliquer un potentiel U périodique asymétrique par intermittence. Quand U est activé, la particule brownienne est piégée dans un puits de potentiel. Comme le potentiel est asymétrique, la valeur moyenne de la position se trouve plus proche du sommet d'une dent que de l'autre. Lorsque le potentiel est désactivé, la particule diffuse dans les deux directions de manière isotrope. Mais comme, elle se trouvait plus proche d'un sommet que de l'autre, il existe alors une probabilité plus importante que la particule ait franchi le sommet dont elle était le plus proche. Une fois le potentiel activé elle tombe alors dans le puits considéré. On observe ainsi un déplacement moyen de la particule. Le sens de ce déplacement est exactement opposé à celui du modèle de Magnasco. On remarque aussi que l'effet ratchet n'est pas possible sans l'existence d'un bruit thermique. Il a été démontré que pour un certain jeu de paramètres (période temporelle de du potentiel, taille de la particule,...), il existe un courant d'inversion. Cette propriété peut être mise à profit dans la séparation de substances chimiques.

⁷Cette approximation est très mauvaise au instant où la force change de valeur. Mais si le temps de retour vers un état stationnaire est court, la moyenne de J sur une période sera une bonne approximation.

⁸Les fonctions \cosh , $P_1 \sinh$ et P_2 sont des fonctions paires de F lorsque $\Delta = 0$

4.2 Résonance stochastique

Nous avons vu que le bruit thermique abaisse le seuil de l'effet ratchet⁹. Sur l'exemple de la résonance stochastique [6] [1], nous allons voir les effets "bénéfiques" du bruit. On sait très bien que le bruit dans les appareils électroniques par exemple est un phénomène inévitable. Il est même nuisible pour des appareils de détection dont le principe est de détecter un seuil aussi bas que possible. Pour ce faire, on essaie d'isoler au mieux l'appareil. Une alternative surprenante est d'utiliser le phénomène de résonance stochastique qui consiste à ajouter un bruit aléatoire pour améliorer, dans certaines conditions, le rapport signal sur bruit d'un système modulé périodiquement. Pour expliquer ce phénomène, prenons l'exemple d'une particule brownienne dans un régime très amorti placée dans un double puits de potentiel. Les deux puits sont suffisamment profonds pour que la transition d'un puits à l'autre soit très improbable. Une force qui correspondrait dans le cas d'un détecteur à un signal d'entrée modifie la profondeur relative des puits. Les deux puits échangent donc au cours du temps leur stabilité, mais le signal est trop faible pour provoquer une transition d'un puits à l'autre. A faible injection de bruit, la particule n'effectue toujours pas de transition. Cette dernière n'a lieu que pour un bruit suffisamment important, à ce moment-là, la probabilité de transition est maximale lorsque le signal est maximal et que la particule est dans le puits métastable. Il existe alors une très forte corrélation entre le signal modulant et la position de la particule. A très forte injection de bruit, la particule ne voit plus les fluctuations de barrière. On montre [6] ainsi que le rapport signal sur bruit atteint un maximum pour une certaine injection de bruit.

5 Conclusion

Au cours de cette étude nous avons montré les conditions nécessaires de fonctionnement d'un moteur brownien : le bruit thermique responsable du mouvement brownien, un milieu dans la symétrie gauche/droite est brisée, un forçage externe qui maintient le système hors d'équilibre. Le moteur brownien ne tire pas son énergie des fluctuations thermiques d'équilibre mais des fluctuations hors d'équilibre du forçage. Ces conditions très générales laissent place à un vaste choix dans la conception du moteur proprement dit. Un point essentiel est que dans ces systèmes, comme dans le phénomène de résonance stochastique, le bruit thermique n'est pas "nuisible" bien au contraire soit il est indispensable comme dans le cas du on-off ratchet, soit il en facilite grandement le fonctionnement (résonance stochastique, moteur de Magnasco).

La physique des moteurs browniens est très active et nous n'avons pas épuisé tout le domaine, loin s'en faut. Nous n'avons pas abordé les moteurs browniens quantiques pour lesquels l'existence d'un effet tunnel est responsable d'un courant inverse ou encore des effets collectifs qui peuvent servir à l'étude de transition de phase et de génération de forme dans les systèmes hors d'équilibre.

Références

- [1] C. R. Doering and J. C. Gadoua. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :2318, 1992.
- [2] A. Einstein. *Ann. Phys.*, 17(749), 1905.
- [3] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *Les cours de physique de Feynman*, volume 2, chapter 46. Dunod, Paris, 1994.
- [4] R. Graham and H. Haken. *Z. Phys.*, 243(289), (1971).
- [5] P. Hänggi, F. Marchesoni, and F. Nori. *Ann. Phys.*, 14(51), 2005.
- [6] B. McNamara, K. Wiesenfeld, and R. Roy. *Phys. Rev. Lett.*, 60 :2626, 1988.
- [7] P. Reimann. *Phys. Rep.*, 361(57), 2002.
- [8] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation : Methods of Solution and Application*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [9] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 1992.
- [10] M. von Smoluchowski. *Ann. Phys.*, 21(756), 1906.

⁹Pour d'autres types de ratchets, le bruit est absolument nécessaire pour observer un effet de transport, c'est le cas par exemple du on-off ratchet étudié par Ajdari et Prost