



Transporte Dirigido en Matracas con un Grado de Libertad Interno

N. A. Naranjo^a, T. Dittrich^a

^aGrupo Ceiba, Departamento de Física, Universidad Nacional, Bogotá D.C., Colombia

Recibido 23 de Oct. 2007; Aceptado 6 de Mar. 2009; Publicado en línea 30 de Abr. 2009

Resumen

Estudiamos los efectos de un grado de libertad interno en el fenómeno de transporte dirigido para un sistema con un potencial de matraca. Nuestro modelo incluye además un grado de libertad químico que reemplaza el forzamiento externo de otros modelos.

Palabras Clave: matraca, motores moleculares, transporte dirigido.

Abstract

We study the effects of an inner degree of freedom for a ratchet. Our model includes in addition a chemical degree of freedom that replaces the external driving in others models.

Keywords: ratchet, molecular motors, directed transport.

©2008. Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

Se denomina potencial de matraca a un potencial que no posee gradientes globales y cuya simetría espacial está rota [1]. Este tipo de potencial es común a un gran número de sistemas biológicos denominados *motores moleculares* (MM) los cuales exhiben el fenómeno de transporte dirigido en ausencia de gradientes globales de energía potencial (fuerza promedio nula) y en presencia de fluctuaciones térmicas. En general los mecanismos que producen trabajo útil a partir de la rectificación de las fluctuaciones térmicas, en un sistema fuera del equilibrio, son llamados *motores Brownianos* (MB). Estos motores poseen aplicaciones tanto en sistemas biológicos (MM) como en sistemas electrónicos (rectificadores, compuertas lógicas) y sistemas mecánicos (segregación de partículas, nanomáquinas).

La dinámica de un MM se puede modelar mediante la solución de la ecuación de Langevin, la ecuación de Fokker-Planck, las ecuaciones de Cinética Química [2]

o simplemente la ecuación de Newton para cada átomo de la molécula (Dinámica Molecular). Los modelos existentes que hacen uso de la EL con un potencial de matraca han sido exitosos respecto a la aclaración de aspectos fundamentales como lo son el papel que juegan los potenciales de matraca, las fluctuaciones térmicas, la disipación y las reacciones químicas en el transporte dirigido. Sin embargo, queda pendiente el estudio de la forma en que los grados de libertad funcionales de los MM (torsiones, doblamientos y cambios conformacionales) interactúan con los demás grados de libertad del sistema para producir transporte. Los resultados podrían tener aplicaciones en cualquier tipo de MB con grados de libertad internos (p.e. el espín en electrónica).

Nosotros modelamos un motor molecular con un grado de libertad interno (grado de libertad funcional), mediante la integración numérica de las ecuaciones de Langevin, haciendo del uso del método convencional de dinámica Browniana (CBD)[3]. Al sistema le asignaremos una coordenada de reacción química que viene a

reemplazar el forzamiento externo periódico de otros modelos, lo cual implica un avance, ya que en general las reacciones químicas no son periódicas y están acopladas a la dinámica del sistema.

2. Modelo

Nuestro modelo consta de tres Grados de Libertad x_{ex} , x_{in} , x_{ch} . Su significado físico y las características que imponemos sobre cada una de estos grados de libertad se describen a continuación.

- Grado de Libertad de posición o Externo x_{ex} . Es en este grado de libertad donde se presenta el fenómeno de transporte. Como es un grado de libertad de tipo angular la energía potencial promedio debe cumplir para algún valor de Δx_{ex} que $V(x_{ex} + \Delta x_{ex}, x_{in}, x_{ch}) = V(x_{ex}, x_{in}, x_{ch})$ [2].
- Grado de Libertad Interno x_{in} . Representa los cambios conformacionales de la molécula, por lo cual la energía potencial promedio que siente el grado de libertad externo depende de su valor.
- Grado de Libertad Químico x_{ch} . Es este grado de libertad el que provee de energía al sistema. El grado de libertad químico debe ser mucho más inercial que las demás grados de libertad del sistema, de modo que la reacción sea robusta ante cambios en el grado de libertad externo. Como las reacciones químicas en un MM hidrolizan o sintetizan una molécula Trifosfato de Adenosina *ATP*, entonces en un ciclo químico se debe satisfacer que [2] $V(x_{ex}, x_{in}, x_{ch} + \Delta x_{ch}) = V(x_{ex}, x_{ch}, x_{in}) \pm \Delta V$, donde ΔV es la energía de la reacción *ATP* \rightarrow *ADP* + *P* + ΔV (Difosfato de Adenosina *ADP*).

Teniendo en cuenta los anteriores requerimientos para cada GL, queda justificada la proposición de un potencial de la forma $V(x_{ex}, x_{in}, x_{ch}) = V_{in} + V_{ch} + V_{ex,in} + V_{ex,ch}$ donde

$$\begin{aligned} V_{in} &= -K \sin(x_{in}), \\ V_{ex,in} &= -\left(\frac{1 + \epsilon_{in} \sin(x_{in})}{1 + \epsilon_{in}}\right) \left(\frac{\sin(x_{ex}) + A \sin(2x_{ex})}{2f_A}\right), \\ V_{ch} &= -\frac{\Delta V x_{ch}}{2\pi}, \\ V_{ex,ch} &= -\epsilon_{ch} \sin(x_{ch}) \sin(x_{ex} - \delta). \end{aligned}$$

El cual genera el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas

$$m_{ex} \frac{d^2 x_{ex}}{dt^2} = -m_{ex} \gamma_{ex} \frac{dx_{ex}}{dt} + \left(\frac{1 + \epsilon_{in} \sin(x_{in})}{1 + \epsilon_{in}}\right) \left(\frac{\cos(x_{ex}) + 2A \cos(2x_{ex})}{2f_A}\right) + \epsilon_{ch} \sin(x_{ch}) \cos(x_{ex} - \delta) + R(t), \quad (1)$$

$$m_{in} \frac{d^2 x_{in}}{dt^2} = K \cos(x_{in}) + \left(\frac{\epsilon_{in} \cos(x_{in})}{1 + \epsilon_{in}}\right) \left(\frac{\sin(x_{ex}) + A \sin(2x_{ex})}{2f_A}\right), \quad (2)$$

$$m_{ch} \frac{d^2 x_{ch}}{dt^2} = -m_{ch} \gamma_{ch} \frac{dx_{ch}}{dt} + \frac{\Delta V}{2\pi}. \quad (3)$$

Donde $R(t)$ es una fuerza aleatoria con las siguientes propiedades estadísticas [4] $\langle R(t) \rangle = 0$ y $\langle R(t)R(0) \rangle = 2m_{ex} \gamma_{ex} kT \delta(t)$. Para kT la energía térmica característica del sistema y $\langle \rangle$ denota el promedio sobre un ensamble.

Tabla 1. Tomamos la masa del grado de libertad externo como unidad um . Tomamos como unidad de energía la profundidad del pozo del potencial de matraca la cual es constante uE . El valor de γ_{ex} se selecciona de forma que el sistema se encuentre en el régimen sobreamortiguado. Además γ_{ex}^{-1} define una unidad de tiempo ut para el sistema.

Parámetro	m_{ex}	m_{in}	m_{ch}	K	ϵ_{ch}	ϵ_{in}	A	kT	ΔV	δ	γ_{ex}	γ_{ch}
Valor	1	0,1	100	0,5	1,0	1,0	0,25	1	100	4,53	0,1	1

3. Transporte

El transporte del grado de libertad externo x_{ex} se define como

$$\langle \dot{x}_{ex}(t) \rangle = \left\langle \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{x_{ex}(t) - x_{ex}(0)}{t} \right\rangle. \quad (4)$$

Lanzando un ensamble simétrico de trayectorias en el espacio de fase y dejándolo evolucionar lo suficiente calculamos numéricamente valor del transporte para un cierto conjunto de parámetros del sistema.

3.1. Transporte y grado de libertad interno

De acuerdo al valor de ϵ_{ch} , se tiene una velocidad terminal promedio en el grado de libertad químico, por lo tanto se tiene un forzamiento periódico en el grado de libertad externo. Cuando la frecuencia de forzamiento coincide con un múltiplo de la frecuencia propia del grado de libertad externo se produce un fenómeno de resonancia como se observa en la proyección de los conjuntos atractores Fig.1 (b) lo cual aumenta el transporte Fig.1 (a). La interacción con el grado de libertad hace que el fenómeno de resonancia se vea amplificado por el aumento de la complejidad del sistema haciendo que haya transporte en regiones de parámetros en los cuales no habría transporte sin el grado de libertad interno.

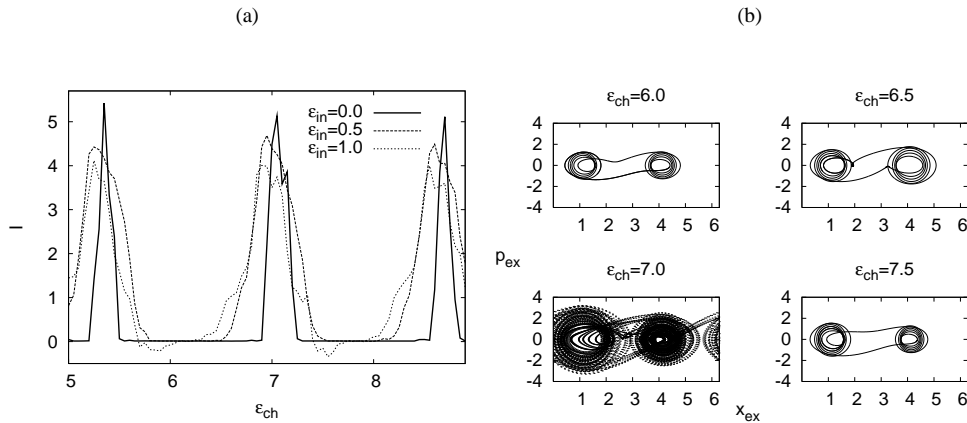


Figura 1. (a) El transporte tiene máximos para ciertos valores de ϵ_{ch} , en los cuales se observa el fenómeno de resonancia entre los grados de libertad externo y químico. (b) Proyección del conjunto atractor sobre x_{ex} , p_{ex} para varios valores de ϵ_{ch} .

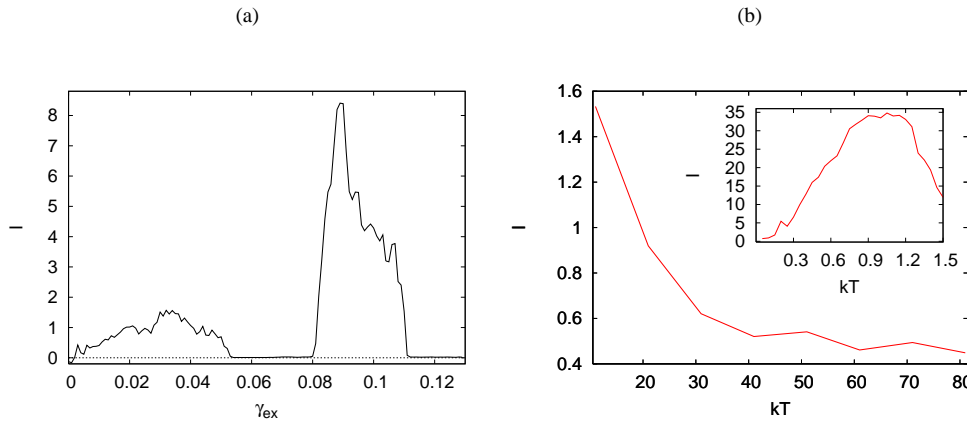


Figura 2. (a) Al romper la simetría temporal $\gamma_{ex} \neq 0$ es posible obtener transporte. Para grandes valores de γ_{ex} no es posible obtener transporte ya que la gran disipación de energía no permite al sistema atravesar la barrera del potencial de matraca. (b) Cuando la energía térmica es del orden de la energía del potencial de matraca (en la inserción $kT \approx 1$) hay un máximo en el transporte ya que la dirección del transporte es dirigida por la asimetría del potencial de matraca. Para grandes valores de kT el sistema no siente el potencial de matraca y el transporte tiende a cero.

3.2. Transporte e interacción con el baño

Cuando no hay disipación no puede haber transporte ya que no se ha roto la simetría temporal en las ecuaciones de movimiento [5]. Al incrementarse γ_{ex} se observa un aumento en el transporte por el rompimiento de la simetría (Fig.2 (a)). Para valores altos de γ_{ex} no hay transporte ya que la energía disipada es mayor que la entrada de energía del sistema. Sin embargo, dado que la velocidad terminal del grado de libertad químico depende también del valor de γ_{ex} habrá ciertos valores para los cuales se dará un fenómeno de resonancia análogo al mencionado sección anterior.

Cuando la energía térmica kT es del orden de la energía potencial de la matraca se tiene un máximo en el transporte (ver inserción para $kT \approx 1$ en la Fig.2 (b))

dado que las perturbaciones térmicas sobre los atractores dan energía suficiente al sistema para atravesar la barrera del potencial de matraca (como en la Fig.1 (b)). Cuando la energía térmica es muy grande, el potencial de matraca es despreciable respecto a las energía típicas de el sistema y por lo tanto se tiene un proceso puramente difusivo para el cual no hay una dirección privilegiada para el transporte. Una comparación del comportamiento de la corriente para $kT \approx 1$ y para $kT \gg 1$ aparece en la Fig.2 (b).

Conclusiones

Al tener en cuenta una variable química en vez de un forzamiento externo el fenómeno que da lugar al transporte dirigido es el de resonancia entre los grados de

libertad externo y químico. El transporte esta relacionado con la dinámica compleja del sistema [6] por esta razón al incluir un grado de libertad interno es posible obtener transporte para un mayor rango de parámetros del sistema.

Referencias

- [1] R. P. Feynman, "The Feynman Lectures on Physics". Addison-Wesley, MA(1996).
- [2] D. Keller, Biophys. J. **78**, 541-556 (2000).
- [3] A. C. Branka, Phys. Rev. E **28-2**, 2611-2615 (1998).
- [4] F. Reif, "Fundamentos de Física Estadística y Térmica". McGRAW-HILL, ES (1976).
- [5] S. Flach, Phys. Rev. Lett. **84**, 2358-2361 (2000).
- [6] H. Schanz, T. Dittrich, R. Ketzmerick, Phys. Rev. E **71**, 026228 (2005).