DEL MOVIMIENTO BROWNIANO A LOS MOTORES BROWNIANOS

FROM BROWNIAN MOTION TO BROWNIAN MOTORS

L. A. MANZANEDA OSORIO G.[†] Carrera de Física, Universidad Mayor de San Andrés c. 27 Cota-Cota, Campus Universitario, Casilla de Correos 8635 La Paz - Bolivia

RESUMEN

En el presente trabajo se estudia el fenómeno de obtener movimiento en una dirección preferencial a partir del movimiento aleatorio de partículas microscópicas como una consecuencia de sistemas con potencial asimétrico y periódico espacialmente. En adición, se explora brevemente el fenómeno de transporte de la kinesina en microtúbulos.

Código(s) PACS: 83.10.Mj - 02.30.Em - 87.16.Nn

Descriptores: Movimiento browniano - teoría de los potenciales - kinesina.

ABSTRACT

In this paper we study the movement in a preferential direction obtained from the random movement of microscopic particles as a consequence of systems with spatial asymmetric and periodic potential. In addition, the transport phenomenon of kinesin in microtubules is briefly explored.

Subject headings: Brownian dynamics — Potential theory -- Kinesin.



FIG. 1.— Esquema de la rueda dentada y trinquete de Feynman, tomado de (Feynman et al. 1963).

1. INTRODUCCIÓN

El movimiento browniano hace referencia al movimiento de partículas microscópicas que experimentan un movimiento aleatorio debido a fluctuaciones térmicas, fenómeno observado por primera vez en 1827 por R. Brown y descrito formalmente en 1905 por A. Einstein. En 1963 R. Feynman propone un dispositivo que realiza trabajo a partir del movimiento aleatorio, (Feynman et al. 1963). En base a este mecanismo se discuten nuevos sistemas microscópicos fuera del quilibrio térmico que consiguen un movimiento dirigido por medio de potenciales tipo *ratchet*, (Astumian 1997). Los *motores brownianos* surgen como una consecuencia de obtener movimiento en una dirección a partir del movimiento browniano a escala microscópica, principal diferencia con un motor térmico convencional.

En la siguiente sección se discute el funcionamiento de un motor browniano propuesto por R. Feynman, como punto de partida para sistemas con potenciales asimétricos (tipo *ratchet*), cuyo formalismo se revisa brevemente en la sección 3, posteriormente en la sección 4 se discute acerca del movimiento de partículas brownianas en potenciales *flashing ratchet* y *rocking ratchet*. En la sección 5 se analiza el transporte de la kinesina sobre microtúbulos que pueden ser modelados por potenciales tipo *ratchet* como aplicación a sistemas biológicos y por ultimo, en la sección 6, se presentan las conclusiones y recomendaciones bibliográficas en caso de querer profundizar sobre el tema.

2. RUEDA DENTADA Y TRINQUETE DE FEYNMAN

La rueda dentada y trinquete es un dispositivo ingenioso ideado por R. Feynman (Feynman et al. 1963), que a primera vista pretende violar la segunda ley de la termodinámica la cual según la declaración de Kelvin-Planck afirma que; en ningún proceso cíclico es posible la extracción de energía de un reservorio de calor, y la conversión de toda esa energía en trabajo. Este dispositivo en escala mesoscópica consta de dos cajas que contienen cierto gas a la misma temperatura T, en un caja hay un eje con aspas que conecta con la otra caja donde esta la rueda dentada y el trinquete (o gatillo), ver Fig. 1.



FIG. 2.— Ejemplo de potencial ratchet asimétrico con periodo L, específicamente: $V(x) = V_0[\operatorname{sen} (2\pi x/L) + 0.25 \operatorname{sen} (4\pi x/L)]$ en unidades adimensionales.

Debido al movimiento browniano de las partículas en la caja 1, las múltiples colisiones con las aspas transmitirán un movimiento de rotación a la segunda caja, no obstante este movimiento es sesgado a una dirección de giro favorable debido al sistema de rueda dentada y trinquete. Incluso, según Feynman podría atarse a una "pulga" para levantarla, como se muestra en la Fig. 1. En otro sentido este dispositivo consigue un tipo de movimiento perpetuo lo cual va en contra de la segunda ley de la termodinámica, i.e.se extrae el calor de los reservorios (cajas a temperatura constante) y se convierte completamente en trabajo (levantando la pulga) en un proceso cíclico.

Es evidente que este dispositivo no puede funcionar ya que en la naturaleza no existe un movimiento aislado perpetuo y una de las razones se debe a que la rueda dentada y el trinquete también tienen movimiento Browniano, esto provoca que el tringuete ocasionalmente se levante justo cuando el movimiento de las aspas se da en sentido contrario y cuanto más se eleva la temperatura de estas cajas, esto ocurre con mayor frecuencia, por lo que el movimiento neto es nulo. Por otro lado si la temperatura en la caja 1 es mayor a la temperatura donde se encuentra la rueda dentada y el trinquete ($T_1 > T_2$), la colisión de las partículas con las aspas será mucho más frecuente que el movimiento browniano del trinquete, con lo cual se consigue que el dispositivo rote en un sentido favorable, esto no va en contra de la segunda ley de la termodinámica debido a que la transferencia de energía ocurre de un reservorio de mayor temperatura T_1 a un reservorio de menor temperatura T_2 . Este mecanismo de movimiento circular puede ser adaptado a un movimiento lineal a través de un potencial asimétrico de diente de cierra, conocido comúnmente como potencial ratchet, Fig. 2.

Este tipo de potencial simula una perturbación externa que da lugar al transporte de partículas en una dirección, lo que se conoce como *efecto ratchet*.

Por otro lado en caso de añadir una fuerza externa que se opone a este movimiento (e.g., levantamiento de peso) y a pesar de ello el transporte continua, significa que el sistema realiza trabajo sobre esta fuerza. Debido a ello tales sistemas son llamados motores brownianos.

3. FORMALISMO

Una partícula suficientemente pequeña inmersa en un fluido, debido a fluctuaciones térmicas exhibe movimiento browniano, cuya evolución en el tiempo puede ser descrita por la ecuación de Langevin (un tipo de ecuación diferencial estocástica), para ello se considera una partícula de masa m en una dimensión con coordenada x(t) sujeta a un potencial asimétrico periódico V(x) = V(x + L) (potencial ratchet), además de efectos térmicos con el ambiente tales como disipación de energía y ruido térmico (Reimann & Hänggi 2002), entonces la dinámica de la partícula esta dada por:

$$m\ddot{x}(t) + V'(x) = -\gamma \dot{x}(t) + \eta(t) \tag{1}$$

La fuerza de fricción que experimenta la partícula con su ambiente es descrita por $\gamma \dot{x}$, donde γ es el coeficiente de fricción, mientras que las fluctuaciones térmicas $\eta(t)$ quedan descritas por el *ruido blanco Gaussiano* de media cero $\langle \eta(t) \rangle = 0$ y relación de fluctuación-disipación dada por:

$$\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = 2\gamma k_B T \delta(t-t') \tag{2}$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura del medio, $\delta(t)$ es la función delta-Dirac, el término $2\gamma k_B T$ representa la intensidad del ruido.

Por otro lado al tratarse de una partícula browniana y con la constancia de experimentos el factor m/γ es del orden de pico-segundos (Jülicher et al. 1997), por lo que como una muy buena aproximación se desprecia el término inercial $m\ddot{x}(t)$ dando lugar a la ecuación de Langevin:

$$\gamma \dot{x}(t) = -V'(x) + \eta(t) \tag{3}$$

A partir de esta ecuación se puede construir la correspondiente ecuación de Fokker-Planck (Reimann 2002) para la evolución temporal de la densidad de probabilidad, la cual esta dada por:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{V'(x)}{\gamma} P(x,t) \right) + \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)$$
(4)

Los términos primero y segundo del lado derecho de la ecuación (4) son conocidos como "*drift term*" (término de arrastre o deriva) y "*difussion term*" (término de difusión) respectivamente. Esta ecuación puede ser expresada en términos de una densidad de corriente de probabilidad:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}$$
(5)

$$j(x,t) = -\frac{1}{\gamma} \left(V'(x) + k_B T \frac{\partial}{\partial x} \right) P(x,t)$$
 (6)

Ahora bien, si se considera una fuerza estática adicional F que modela el efecto de un torque constante como en el dispositivo de la Fig. 1, lo cual corresponde



FIG. 3.— Ejemplo de potencial efectivo inclinado a la izquierda, gráfica a partir de la ecuación (8); $V_{eff}(x) = \operatorname{sen}(2\pi x) + 0.25 \operatorname{sen}(4\pi x) + x$, con $V_0 = L = -F = 1$.

a una generalización de la ecuación (3), la ecuación de Langevin toma la forma:

$$\gamma \dot{x}(t) = -V'(x) + F + \eta(t) \tag{7}$$

Es posible englobar el potencial ratchet V(x) y la fuerza F dentro de un potencial efectivo, de la forma:

$$V_{eff}(x) = V(x) - xF \tag{8}$$

Dependiendo de si la fuerza F es negativa o positiva, las partículas sujetas al potencial efectivo se moverán en promedio pendiente abajo a la izquierda o derecha respectivamente, como se muestra en Fig. 3.

4. POTENCIALES RATCHET

4.1. Flashing ratchet

Este tipo de potencial además de ser tipo ratchet, periódico y asimétrico, se caracteriza por ser intermitente entre los estados prendido (on) y apagado (off). El modelo es descrito por la ecuación de Langevin:

$$\gamma \dot{x}(t) = -V'(x)[1+f(t)] + \eta(t)$$
 (9)

Donde f(t) representa una función de control que le da el carácter intermitente al potencial y es restringida a los valores ± 1 . Cuando f(t) toma el valor de -1 cancela la acción de V(x), que se interpreta como un estado *off* del potencial, mientras que si f(t) = 1 el potencial V(x) esta activo, es decir, en estado *on*. Esta ecuación modela la dinámica de las partículas sometidas a este tipo de potencial, ahora bien si se considera la interacción con una fuerza Fexterna, la ecuación (9) toma la siguiente forma:

$$\gamma \dot{x}(t) = -V'(x)[1+f(t)] + F + \eta(t)$$
 (10)

El comportamiento de estas partículas sujetas a este tipo de potencial *flashing ratchet* se visualiza en la Fig. 4.(a) y en la Fig. 4.(b) se considera la interacción con una fuerza externa no nula $F \neq 0$.

La energía térmica (k_BT) de las partículas es menor a la altura del potencial V(x), es decir, cuando el potencial se encuentra en estado *on* las partículas quedan concentradas en los puntos mínimos del potencial y cuando el potencial es desactivado (estado *off*) las partículas son libres de difundirse con movimiento browniano, como se muestra en la Fig.4. El ciclo de apagado y encendido (*off-on*) del potencial induce un movimiento de partículas en una dirección particular debido a la asimetría del potencial obteniendo un flujo neto de partículas $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$. Para lograr tal propósito el periodo de tiempo para el potencial en estado *on-off* no debe ser muy corto, ya que si lo fuera, las partículas no tendrían tiempo suficiente para difundirse y prácticamente se quedarían atrapadas en cercanías del mínimo de potencial y por tanto el flujo neto de partículas seria nulo $\langle \dot{x} \rangle = 0$.

En presencia de una fuerza externa F, el movimiento de las partículas en sentido opuesto al de esta fuerza es posible, si la misma no es muy intensa, como se observa en la Fig. 4.(b), en tal caso el sistema realiza trabajo, acción de un motor browniano. Por otro lado si la fuerza externa es muy grande, el flujo de la partículas debido al potencial flashing no es posible y el movimiento neto de las partículas es causado por este agente externo, lo cual no corresponde a un motor browniano ya que se realiza trabajo sobre el sistema.

4.2. Rocking ratchet

Este tipo de potencial, a diferencia del estudiado en la subsección previa, consiste de una fuerza periódica en el tiempo. La ecuación de Langevin que modela este caso es similar a la ecuación (7) con la diferencia de que la fuerza aplicada es dependiente del tiempo F(t) y análogamente a la ecuación (8) el potencial efectivo es de la forma:

$$V_{eff}(x,t) = V(x) - xF(t)$$
(11)

Este potencial se regirá entre dos limites marcados por los máximos $\pm |F(t)|$ de la fuerza aplicada, esto y la dinámica del sistema se observa en la Fig. 5. El movimiento dirigido se consigue en cada ciclo de F(t)y con la asimetría del potencial V(x).

5. APLICACIONES A MOTORES MOLECULARES

A escala microscópica en células eucariotas se encuentran cierto tipo de proteínas motoras como la *kinesina* que se transporta sobre los *microtúbulos* (estructuras celulares formadas por polímeros proteicos) a partir de la energía liberada por la hidrólisis de ATP (nucleótido fundamental en la obtención de energía celular), cuya reacción es dada por la ecuación (12) y el proceso se muestra en la Fig. 6. El movimiento constante de la kinesina es compatible con funciones celulares muy importantes como ser la *mitosis, meiosis y transporte axonal.*

$$ATP + H_2O \Rightarrow ADP + P_i + energía$$
 (12)

donde P_i corresponde a un grupo de fosfato inorgánico.

El mecanismo de conversión de energía recolectada de la hidrólisis de ATP en un progresivo movimiento



FIG. 4.— Gráfica cualitativa donde se presenta; en la parte superior el efecto de un potencial ratchet en estado on con (a) F = 0 y (b) $F \neq 0$, en el estado off del potencial, las partículas se dispersan con movimiento browniano (aleatorio) cuya distribución se observa en la parte inferior, donde las regiones sombreadas corresponden a partículas que se encuentran donde inicia o finaliza un pico de potencial y debido a la asimetría del potencial el número de estas partículas en tales regiones no es igual y por tanto en cada ciclo se obtiene un movimiento preferencial en una dirección.



FIG. 5.— Gráfica del potencial efectivo de la ecuación (11) con $F(t) = a \cos \omega t$, $a = 3 \text{ y} \omega$ arbitrario. (a) y (c) son correspondientes para los máximos de $F(t) = \pm a$ respectivamente, mientras que (b) es obtenido cuando se anula F(t). La transición entre (a), (b) y (c) es suave a medida que avanza t. El movimiento dirigido surge de la asimetría del potencial en cada ciclo.



FIG. 6.- Transporte de la kinesina sobre un microtúbulo, tomado de https://en.wikipedia.org/wiki/Kinesin.

sobre los microtúbulos por la kinesina puede ser estudiado desde el formalismo de los motores brownianos con potencial ratchet, (Xie 2010), por ejemplo, se considera el potencial *flashing ratchet* como modelo para describir la dinámica de la kinesina, donde las partículas brownianas son reemplazadas por ésta

proteína. El potencial en estado on corresponde a la kinesina en estado ATP y cuando el potencial se anula la kinesina se encuentra en estado ADP. La aplicación cíclica de (12) genera un movimiento favorable hacia la dirección positiva del microtúbulo.

El comportamiento de una partícula browniana dentro del potencial intermitente es análogo al comportamiento de la kinesina en un ciclo dado por la ecuación (12), debido a ello, el modelo de motores brownianos con potencial flashing ratchet es investigado para describir la dinámica de esta proteína, incluso es posible modelar la acción de una fuerza externa que apunta a la dirección negativa del microtúbulo, de manera similar a la ec. (8), (Xie 2010).

6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Este trabajo describe de manera resumida el mecanismo de generar movimiento en una dirección preferencial a partir del movimiento browniano de partículas a escala microscópica con la implementación de potenciales tipo ratchet y por tanto este trabajo puede servir como punto de partida para un estudio más detallado acerca de los motores brownianos, (Reimann 2002).

Se recomienda al lector, en caso de profundizar más acerca de motores moleculares, consultar; (Jülicher et al. 1997), donde se estudian sistemas biológicos a pequeña escala que convierten energía química en mecánica, comportamiento típico de un motor molecular, también se puede consultar, (Tu & Cao 2018), donde se estudia el rendimiento de un motor molecular con un análisis analítico y numérico.

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no hay conflicto de intereses con respecto a la publicación de éste documento.

REFERENCIAS

Astumian, R. D. 1997, Science, 276, 917

Avellaneda, D. R. & Naranjo, F. 2014, Ciencia en Desarrollo, 5, 173

Feynman, R., Leighton, R., & Sands, M. 1963, The Feynman Lectures on Physics, Volume 1 (Addison-Wesley)

Jülicher, F., Ajdari, A., & Prost, J. 1997, Rev. Mod. Phys., 69, 1269 Parrondo, J. M. & de Cisneros, B. 2002, Applied Physics A, 75, 179

- Reif, F. 1965, Fundamentals of statistical and thermal physics (McGraw-Hill Book Company)
- Reimann, P. 2002, Phys. Rep., 361, 57 Reimann, P. & Hänggi, P. 2002, Applied Physics A, 75, 169
- Tu, Y. & Cao, Y. 2018, Phys. Rev. E, 97, 022403
- Xie, P. 2010, International journal of biological sciences, 6, 665