

00362
4
24.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

"UN MODELO DE MOTORES MOLECULARES EN EL
REGIMEN BROWNIANO CON RUIDO TERMICO
DE COLOR"

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE
MAESTRIA EN CIENCIAS (FISICA)
P R E S E N T A
LAURA ALICIA IBARRA BRACAMONTES



DIRECTOR DE TESIS: DR. VICTOR M. ROMERO ROCHIN

MEXICO, D. F.

1998.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

266025



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



FACULTAD DE CIENCIAS
División de Estudios
de Posgrado

Of. Núm. P-1918

DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN
P R E S E N T E.

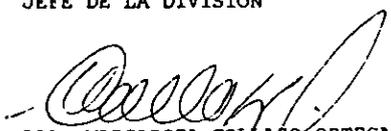
Por este conducto me permito comunicarle que ha sido ratificado como Director de Tesis del(a) alumno(a) LAURA ALICIA IBARRA BRACAMONTES, quién desarrolló el Trabajo de Tesis titulada: UN MODELO DE MOTORES MOLECULARES EN EL REGIMEN BROWNIANO CON RUIDO TERMICO DE COLOR.

Así mismo, les comunico a los siguientes miembros que la Dirección de la Facultad, los ha designado como sinodales para dictaminar si el trabajo que ha desarrollado como tesis el(a) alumno(a) antes mencionado(a) tiene los méritos para obtener el grado de MAESTRA EN CIENCIAS (FISICA).

CARGO	GRADO,	NOMBRE COMPLETO
PRESIDENTE	: DR.	PIER ACHILLE MELLO PICCO
PRIMER VOCAL	: DR.	ROSALIO FERNANDO RODRIGUEZ ZEPEDA
SEGUNDO VOCAL	: DR.	RAMON PERALTA Y FABI
TERCER VOCAL	: DR.	VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN
SECRETARIO	: DR.	JOSE LUIS MATEOS TRIGOS
SUPLENTE	: DRA.	PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
SUPLENTE	: DR.	ROLANDO CRISOSTOMO CASTILLO CABALLERO

Sin más por el momento aprovecho la ocasión para enviarles un cordial saludo

A T E N T A M E N T E
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
Cd. Universitaria, D. F., a 21 de Agosto de 1997.
JEFE DE LA DIVISION



DRA. MARGARITA COLLAZO ORTEGA

Quiero dedicar este trabajo como muestra de mi **agradecimiento**:

A mis *padres Laura E. y José*, por todo su amor, comprensión y apoyo en cada momento de mi vida.

A mis *hermanos, familiares y amigos*, en especial a *Martha, José y Ana Lidia, Claudia, Carlos, Vanessa, José Adalberto, Erick y Jannette*, por llenar de alegría mi existencia.

A ti *Gonzalo*, por todo lo que representas para mí, todo mi amor y admiración.

A ti *mi pequeño(a)*, que aunque todavía no te conozco, no dejas de hacerme sentir que estás conmigo y enciendes una nueva luz en mi ser.

A *Víctor Romero* por su entusiasmo, guía y apoyo en mis estudios y sobre todo su gran amistad.

A la *UNAM*, en particular al *Instituto de Física*, por el apoyo brindado en mi formación académica.

Al *CONACyT* y al programa *Fundación UNAM*, por la beca otorgada durante mis estudios y estancia en el extranjero.

Y principalmente quiero agradecerte a *Ti mi Señor*, por sentir que aún estás conmigo y darme siempre una nueva esperanza.

Con cariño:

Laura A. Ibarra B.

Indice

1	Introducción	7
2	Proteínas Motoras y Matracas Estocásticas.	15
2.1	Introducción	15
2.2	Proteínas Motoras	15
2.3	Matraca Estocástica	19
2.4	Modelo de la Proteína Motora	21
3	Matracas estocásticas en el régimen Browniano.	25
3.1	Introducción	25
3.2	Movimiento Browniano	26
3.3	Ecuación de Langevin	28
3.4	Ecuaciones de Fokker-Planck y de Smoluchowski	33
3.4.1	Partícula Browniana sin potencial	34
3.4.2	Partícula Browniana en presencia de un potencial $V(x)$	35
3.4.3	Caso sobreamortiguado o de Smoluchowski	36
3.5	Ecuación Generalizada de Langevin	37
3.6	Corriente con ruido térmico blanco. Trabajos previos	39
4	Corriente con ruido térmico de color.	55
4.1	Introducción	55
4.2	Método Numérico	56
4.3	Matraca Estocástica con Ruido Térmico de Color	59
4.3.1	Ausencia de corriente para $F_{ext}(t) = 0$	61
4.3.2	Dependencia en la asimetría del potencial $V(x)$	63

4.3.3	Dependencia en la intensidad de la fuerza externa oscilatoria.	65
4.3.4	Dependencia en la frecuencia. Inversión y filtración	66
4.3.5	Dependencia en el tiempo de correlación del baño térmico.	68
4.4	Matraca Estocástica con Fuerza Externa Aleatoria	69
5	Inversión de Corriente	73
5.1	Introducción	73
5.2	Parámetros relevantes y definición de corriente	75
5.3	Variación de la Fuerza Externa.	77
5.4	Variación de las propiedades del baño térmico.	80
5.4.1	Tiempo de Correlación Térmico	81
5.4.2	Temperatura	88
5.4.3	Fricción	89
6	Conclusiones	95
	Referencias	103
	Apéndice A	107
	Apéndice B	111
	Apéndice C	113
	Apéndice D	119
	Apéndice E	121

Capítulo 1

Introducción

Recientemente se ha dado un creciente interés interdisciplinario en el estudio de procesos biológicos, así como en la realización de nuevos experimentos que han mostrado resultados cada vez más detallados de dichos procesos, permitiendo realizar su análisis con la ayuda de principios y técnicas de la Física. Entre estos procesos biológicos tenemos los fenómenos de transporte que se realizan a nivel celular, los cuales se llevan a cabo tanto en regiones internas de la célula así como en el flujo a través de sus membranas, transportándose sustancias químicas en los organismos, desde el lugar donde son producidas hasta donde son requeridas [1]. Para llevarse a cabo el transporte se requiere de los llamados "motores moleculares", como son las proteínas y las enzimas motoras. Dichas moléculas no sólo consumen energía al realizar el transporte, sino también al ejercer fuerzas en nuestros músculos causando movimientos intracelulares y contracción muscular, todo esto dentro de un dominio Browniano. Tenemos entonces que estos motores moleculares Brownianos pueden convertir la energía química en movimiento mecánico [2, 3].

Uno de los primeros modelos biofísicos que se han propuesto para la proteína motora que ejecuta movimientos unidireccionales a lo largo de filamentos moleculares, consiste en una partícula puntual que experimenta cuatro fuerzas distintas: *a*) una fuerza aleatoria correlacionada (ruido térmico) como resultado del constante golpeteo de las moléculas del medio sobre la proteína; *b*) una fuerza de fricción debida a la vis-

cosidad del medio; *c*) una fuerza espacial periódica asimétrica debida a la interacción de la proteína con la estructura periodica asimétrica del filamento sobre el que se desplaza [4, 5] y *d*) una fuerza externa que le dé energía al sistema para realizar el proceso de transporte.

El ruido térmico solo, no puede proveer la energía requerida para que la proteína motora realice un trabajo mecánico. Sin embargo, tenemos que la energía liberada por procesos bioquímicos como la hidrólisis de ATP, presenta un acoplamiento químico-mecánico, permitiendo que el movimiento Browniano de la proteína pueda ser rectificado.

En estudios recientes [4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12] se ha introducido el modelo de *matraca estocástica*, el cual representa un sistema unidimensional disipativo de partículas que se mueven en un potencial periódico asimétrico en presencia de ruido térmico; al incluir ruido externo simétrico la partícula presenta un movimiento preferencial en una sola dirección. Esto es, los sistemas de matracas estocásticas muestran una capacidad de "rectificar" ruido *correlacionado* simétrico y entonces son capaces de producir una corriente neta. Este resultado fue señalado por Magnasco [4], y posteriormente verificado en otros trabajos [6, 7], para el caso de ruido térmico blanco, en presencia de ruido externo *coloreado* y en el límite sobreamortiguado (Smoluchowski). Dicho estudio fue inspirado en el trabajo clásico de Feynman [13], donde el sistema de matraca (rueda dentada más trinquete) es usado para ejemplificar la segunda ley de la Termodinámica.

Claramente, uno de los aspectos más interesantes de este problema es tratar de entender cómo con la aplicación de una fuerza externa simétrica y de promedio cero, en un sistema donde las fluctuaciones del medio son también simétricas, pueda producirse una corriente neta de manera unidireccional. En otras palabras, el sistema matraca estocástica trabaja como un diodo mecánico capaz de rectificar una señal de entrada.

Este mecanismo a través del cual se produce una corriente direccional, no es muy obvio y somos de la opinión que las explicaciones que se han dado no son del todo satisfactorias, como se discutirá con detalle en el capítulo 3. Por lo tanto, es un campo todavía abierto para seguir investigando y obtener un mejor entendimiento del fenómeno, además de sus potenciales aplicaciones en Biología Molecular [14] y en aplicaciones tecnológicas en nanoescalas y microescalas [9, 15].

En la literatura [4, 6, 7, 5, 16] se han propuesto modelos biológicos, en los cuales se les ha atribuido a las partes correlacionadas del baño térmico, ser las causantes de la producción de corriente.

Por lo tanto, una de las principales motivaciones del presente estudio, es el de tratar de determinar si las fluctuaciones térmicas correlacionadas son en realidad o no, las responsables de la producción de corriente, aunque en principio esto nos parece una violación de la segunda ley de la Termodinámica.

Se han dicho frases como: "Tenemos entonces que la matraca térmica puede extraer energía (de a gratis) de las partes correlacionadas temporalmente de un baño térmico de color" [4], y entonces ¿quién debe pagar por esta pérdida de energía?, ¿cómo vamos a mantener en equilibrio térmico al sistema?. Por otra parte se ha dicho: "La única diferencia entre nuestras matracas (macroscópicas) que sí se mueven y las matracas isotérmicas de Feynman que no se mueven, es que nosotros movemos nuestras matracas en una manera obviamente correlacionada en el tiempo, mientras que Feynman mueve sus matracas con ruido térmico blanco" [17]. Feynman jamás hizo la aclaración de que su modelo era válido solamente para baños térmicos blancos. Sin embargo, nuestro modelo ha mostrado que aún con ruido térmico blanco podemos mover la matraca estocástica, siempre y cuando haya una fuerza externa simétrica presente. Y por otra parte, no es correcto querer comparar sistemas que se encuentran a tan diferentes escalas de tiempo y longitud.

En vista de lo que ya se ha trabajado, el propósito de esta tesis es poder formular el problema de matraca estocástica desde el punto de vista más amplio posible, dentro de la teoría del movimiento Browniano, y así tratar de entender cómo es que se produce un arrastre unidireccional de la partícula.

En el presente trabajo abordamos el problema de la matraca estocástica usando la ecuación generalizada de Langevin del movimiento Browniano, que en nuestra opinión y como se verá en los capítulos subsecuentes, ha dado lugar a nuevos resultados que nos han ayudado a tener una visión más amplia del problema. La ecuación generalizada de Langevin nos permite poder expresar, de manera explícita, las correlaciones del baño térmico en términos de su tiempo de correlación (ruido de color), lo cual no es posible estudiarlo en el caso sobreamortiguado,

donde sólo se puede trabajar con ruido blanco.

Tenemos por consiguiente que la ecuación generalizada de Langevin nos permite tener acceso a diferentes escalas de tiempo del sistema, como: *i*) el tiempo natural del sistema debido a su potencial de interacción, *ii*) el tiempo de correlación de la partícula Browniana consigo misma o tiempo de relajamiento del sistema, *iii*) el tiempo de correlación del baño térmico y *iv*) el periodo natural de la fuerza externa o su tiempo de correlación según sea el caso.

Queremos recalcar que nuestro trabajo es el primero que se realiza tomando en cuenta la "memoria" del baño térmico. Por lo tanto, podríamos decir que los resultados presentados hasta antes del nuestro, no podían predecir si las partes correlacionadas podían estar involucradas en el origen de la corriente, porque su teoría sólo es válida para baños blancos. Para poder estudiar baños térmicos con correlaciones finitas tenemos que hacer uso de la ecuación generalizada de Langevin. Así, identificando de manera precisa lo que es "interno" de lo que es "externo" podemos discernir si el ruido interno es el causante o no del movimiento preferencial. Nuestro trabajo muestra que es estrictamente necesario una fuerza externa dependiente del tiempo.

Esto no debe quitarle ningún mérito a trabajos anteriores que mostraron que existe producción de corriente con fuerzas externas simétricas. Nosotros simplemente hemos ayudado a un mejor entendimiento del tema.

Es importante señalar que todo este análisis se realiza tomando en consideración el Teorema Fluctuación-Disipación [18] para garantizar el balance detallado del sistema y no violar la Segunda Ley de la Termodinámica. Este teorema nos dice que la fuerza estocástica térmica y la fuerza de fricción *no* son independientes. Esto tiene como consecuencia que un sistema de matraca estocástica en presencia *solamente* de ruido térmico, no muestra corriente alguna, ya sea que las fluctuaciones del baño estén correlacionadas o descorrelacionadas en el tiempo. Por lo tanto, la corriente neta o el "arrastre" de la partícula debe ser producido por la presencia de una fuente *externa*. En particular, mostramos que *cualquier* fuerza externa puede ser usada para producir tal corriente. Esto es, la presencia de una corriente neta se debe solamente a la asimetría del potencial y a la presencia de una fuerza externa, no siendo necesario que la fuerza externa esté correla-

cionada en el tiempo.

La serie de trabajos que se han desarrollado alrededor de la matraca estocástica muestran el efecto de la producción de corriente, cuando el "sentido común" nos hace pensar lo contrario ante la presencia de tantas componentes simétricas (más aún el mismo Feynman ya lo había señalado). Nuestro trabajo se puede contar entre muchos más que han tratado de esclarecer el origen de tal aparición de corriente y han mostrado lo robusto de este fenómeno, así como su impredecibilidad en la inversión de corriente, como se verá en el capítulo 4.

Nosotros hemos podido entender qué elementos debe tener el sistema para moverse y cuáles son las condiciones que lo producen; esto fue verificado tanto para fuerzas externas senosoidales como estocásticas. Pero en nuestra opinión, aún no queda del todo claro, como puede corroborarse en la literatura referida en esta tesis, ¿cuál es el mecanismo preciso que da lugar a la aparición de corriente?, ¿cómo se lleva a cabo el acoplamiento entre las diferentes partes del sistema para que éste se mueva?, y en particular ¿cómo es que se presenta el fenómeno de la inversión de corriente?. Sin embargo, hemos presentado una serie de conclusiones parciales que muestran bajo que condiciones se hace presente la inversión de corriente.

Uno de los trabajos pioneros [4] fue pensado introduciendo una fuerza senoidal. Nosotros tenemos el caso extremo de una fuerza externa estocástica blanca que presenta no sólo corriente, sino también inversión de corriente. Aún para fuerzas senosoidales, obtuvimos que la corriente se invierte como función de la frecuencia externa ω_0 , del tiempo de correlación del baño térmico τ_0 y del coeficiente de fricción γ .

Por otra parte, se ha popularizado una explicación del mecanismo de las matracas estocásticas, como una consecuencia de la inclinación o "vaivén" del potencial asimétrico, propuesto por Magnasco [17]. Sin embargo, podemos observar que una vez que usamos un modelo más completo, esta explicación del vaivén del potencial se ve muy restringida. Por ejemplo, nosotros hemos obtenido que el movimiento de la partícula se ve acoplado con la frecuencia de la fuerza externa senoidal, obteniéndose corrientes positivas, negativas o cero en función de ella. Esto no puede ser apreciado para modelos como el descrito anteriormente, al estar limitado sólo a las amplitudes de la fuerza externa, lo cual

de ninguna manera permite vislumbrar la posible aparición de una inversión de corriente.

En general, podemos ver que esta explicación del vaivén del potencial no muestra la dependencia con otras cantidades, como por ejemplo la fricción, el tiempo de correlación del baño térmico, la temperatura, etc., como los casos que fueron considerados en nuestro modelo. Nosotros creemos que debe haber una explicación más "universal" donde la asimetría del potencial es crucial. En el análisis que mostraremos en el capítulo 5, podemos apreciar un juego de tiempos que se acoplan y dan lugar a un movimiento unidireccional.

El modelo que nosotros presentamos es no-lineal (por la forma funcional del potencial asimétrico propuesto) y, dado al trabajo de García [19] la no-linealidad es evidentemente fundamental. Se ha mostrado que uno puede obtener corriente neta, aún sin ningún tipo de ruido térmico (temperatura $T = 0$), tomando en cuenta fuerzas inerciales. Esto se hizo para el caso en que se tienen fuerzas externas senosoidales, pero ¿cómo se explica ésto cuando se tienen fuerzas externas estocásticas?

Por lo tanto, dado a la naturaleza tanto no-lineal como no-Markoviana del modelo que nosotros estudiamos, así como el hecho de querer abarcar todos los casos posibles, hemos recurrido a una solución numérica. Como se discutirá con más detalle en el capítulo 3, sólo cuando se tiene ruido interno blanco hay posibilidades de hacer un tratamiento analítico aproximado del caso sobreamortiguado, en el límite adiabático.

En el Capítulo 2, presentamos una breve descripción respecto a las proteínas motoras y a los factores a los que se ven expuestas en la realización del transporte de componentes químicos. Así también, describimos el modelo de matraca estocástica en el que se basa nuestro estudio, usando la teoría de Langevin y el balance que se presenta entre las fluctuaciones y la disipación del sistema. Se presenta también, el modelo original propuesto por Feynman [13] del sistema rueda dentada y trinquete, que bajo ciertas consideraciones, puede mostrar un movimiento dirigido del sistema, sin violar la segunda ley de la Termodinámica.

En el Capítulo 3, se presenta una breve revisión de los concep-

tos básicos que involucran un movimiento Browniano, cuya descripción puede ser realizada en términos de fuerzas que actúan sobre la partícula Browniana (representación de Langevin), o en términos de probabilidades de encontrar a la partícula en una posición, con una cierta velocidad, a un tiempo determinado (ec. de Fokker-Planck). Nuestro interés se enfoca en utilizar una ecuación del tipo Langevin Generalizada, en donde podemos incluir escalas de tiempo del orden del tiempo característico del baño térmico.

En el Capítulo 4, se muestra el método empleado para la solución numérica de la ecuación generalizada de Langevin con un potencial periódico asimétrico, tomando los casos en que se tiene una fuerza externa oscilatoria o una fuerza estocástica dependientes del tiempo y de promedio cero. Analizamos tiempos finitos de correlación del baño térmico y encontramos los elementos necesarios para la aparición de un arrastre neto de la partícula Browniana.

En el Capítulo 5, se estudia con más detalle el caso en que se tiene una fuerza externa oscilatoria, pero variando también los parámetros que describen al sistema cerrado, como por ejemplo el coeficiente de fricción, la temperatura y el tiempo de correlación del baño térmico. Todo esto es para obtener un panorama más amplio, que nos permita especular sobre los factores involucrados en la inversión de corriente.

Finalmente, en el Capítulo 6 se presentan las conclusiones sobre el trabajo realizado y se plantean posibles extensiones del mismo.

Capítulo 2

Proteínas Motoras y Matracas Estocásticas.

2.1 Introducción

En el presente capítulo presentamos una breve descripción de ciertos procesos biológicos que presentan fenómeno de transporte a nivel celular. Y de especial interés, son aquellos procesos que muestran un movimiento neto unidireccional. Para tratar de entender este tipo de fenómeno, haremos uso del modelo de *Matraca Estocástica* o *Ratchet*, cuya idea original fue propuesta por Feynman [13]. En este modelo utilizaremos la representación de Langevin, incluyendo un potencial periódico asimétrico y un término de fuerza externa.

2.2 Proteínas Motoras

Las proteínas conforman la mayor parte de la célula y ellas juegan un papel importante en gran parte de los procesos biológicos. Las proteínas no son sólo trozos rígidos de materia cuya superficie reacciona químicamente, sino que también poseen partes que se mueven

precisamente como máquinas, cuyas acciones mecánicas están acopladas a eventos químicos. Este acoplamiento químico y mecánico, le da a las proteínas una capacidad extraordinaria en la que se basan todos los procesos dinámicos de las células vivas.

La forma de una proteína puede ser alterada por la unión de otra molécula, llamada *ligamento*. Las proteínas *alostéricas* son aquellas que sufren cambios reversibles en su forma, cuando ciertos ligamentos se unen a su superficie [2].

Los cambios en la forma de la proteína pueden ser llevados de una manera *unidireccional* a través del gasto de energía química. Acoplando cambios conformacionales alostéricos a la hidrólisis de la molécula de ATP (Adenosin-trifosfato), por ejemplo, las proteínas pueden realizar trabajo útil, tal como generar una fuerza mecánica o bombear iones a través de membranas celulares [1]. Pequeños cambios locales en las proteínas pueden ser amplificadas para crear cambios mayores en toda la proteína, de tal manera que estas proteínas son capaces de servir como traductores de información, motores, relojes o factores de ensamblado [20].

Ya que el movimiento direccional de una proteína realiza trabajo, las leyes de la termodinámica demandan que tales movimientos consuman energía libre de alguna otra fuente (de otra manera la proteína podría ser usada para hacer una máquina de movimiento perpetuo).

Debido a la gran cantidad de energía libre que es liberada cuando el ATP es hidrolizado, las proteínas llamadas "*proteínas motoras*" son capaces de trasladarse grandes distancias en una misma dirección.

Estos variados movimientos celulares producidos por proteínas motoras, las cuales se mueven rápidamente a lo largo de filamentos proteicos, son guiados por la energía derivada de ciclos repetidos de la hidrólisis de ATP. El mejor ejemplo de estas proteínas motoras es la *miosina*, una proteína que se mueve a lo largo de filamentos de *actina*, encontrándose de manera abundante en el músculo esquelético; este movimiento direccional de la miosina produce tanto movimientos intracelulares como contracción muscular [3]. La hidrólisis de ATP y la disociación subsecuente en una molécula de ADP (Adenosin-difosfato) y en un fosfato inorgánico *P*, produce una serie ordenada de cambios alostéricos en la conformación de la miosina. Como resultado, parte de la energía liberada es acoplada a la producción de movimiento. Cada

ciclo en una molécula de miosina se realiza alrededor de 5 veces por segundo durante una contracción muscular rápida y la velocidad relativa de la miosina sobre los filamentos de actina es del orden de $15\mu\text{m}/\text{seg}$ [21].

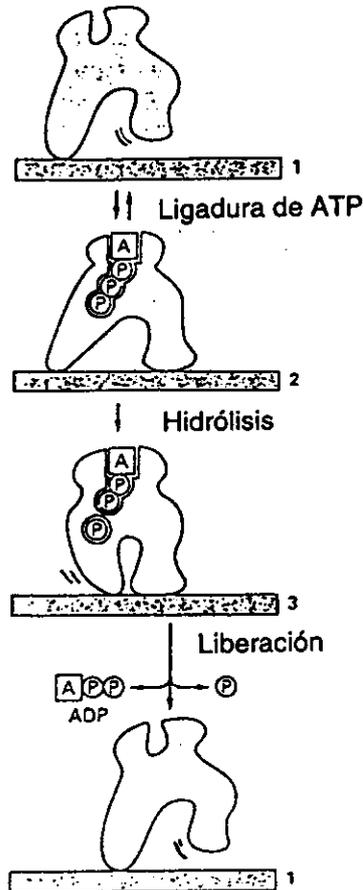


Figura 2.1: Transiciones ordenadas de las 3 conformaciones de una proteína motora alostérica, son guiadas por la hidrólisis de la unión de una molécula de ATP.

En el modelo esquemático mostrado en la Figura (2.1) *, la unión de ATP mueve a la proteína motora desde la conformación 1 a la con-

*Figura adaptada de la ref. [2]

formación 2. El ATP ligado es entonces hidrolizado para producir ADP y P , causando un cambio desde la conformación 2 a la conformación 3. Finalmente, la liberación de ADP y P llevan de regreso a la proteína a la conformación 1. Debido a que las transiciones $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ son realizadas a través de la energía provista por la hidrólisis de ATP, esta serie de cambios conformacionales serán efectivamente irreversibles bajo condiciones fisiológicas (ya que la probabilidad de que el ADP se recombine con un fosfato inorgánico P para formar una molécula de ATP por la trayectoria $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ es extremadamente pequeña). Por lo tanto, el ciclo completo irá en una sola dirección. Muchas proteínas generan movimientos direccionales de esta manera, incluyendo a las enzimas helicoidales de la molécula del ADN (Acido Desoxirribonucleico) que se impulsan entre ellas mismas a lo largo del ADN a una razón tal alta como de 1000 nucleótidos por segundo [22].

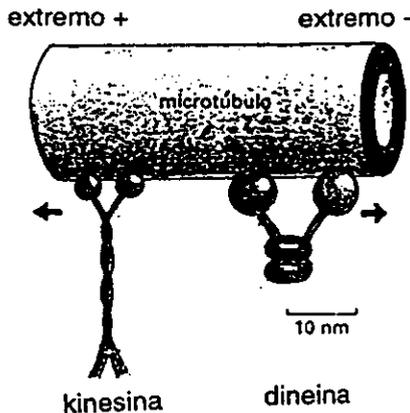


Figura 2.2: Kinesina y dineina son proteínas motoras que generalmente se mueven en direcciones opuestas a lo largo de un microtúbulo.

Los filamentos del citoesqueleto, por ejemplo los *microtúbulos* que son polímeros rígidos, no sólo sirven como un soporte estructural en las células, sino también como líneas de transporte. La *kinesina* y la

dineína son otro tipo de proteínas motoras que también usan la energía de la hidrólisis del ATP para moverse a lo largo de un microtúbulo, transportando vesículas con componentes químicos, desde y hacia el cuerpo de la célula (centrosoma), respectivamente (Figura 2.2)[†]. No todas las moléculas de kinesina realizan el transporte hacia la misma dirección en los microtúbulos. Un tipo de kinesina llamada *Ncd*, por ejemplo, es requerida para el proceso de miosis normal (división celular) y difiere de la kinesina axonal (presente en las neuronas), tanto en la dirección de su movimiento como en la razón a la cual se desplazan a lo largo de los microtúbulos. Tenemos que la kinesina axonal camina hacia el extremo positivo (alejándose del centrosoma), aproximadamente a $2\mu\text{m}/\text{seg}$, y la proteína *Ncd* camina hacia el extremo negativo del microtúbulo, alrededor de $0.1\mu\text{m}/\text{seg}$ [23].

2.3 Matraca Estocástica

Por “matraca” queremos dar a entender un mecanismo que desarrolla un movimiento preferencial hacia un sentido en particular. Por ejemplo tal dispositivo puede constar de una rueda dentada de dientes asimétricos y un trinquete, de tal manera que cuando la rueda dentada trata de moverse en un sentido puede girar con facilidad, no así en el caso cuando trata de girar en sentido contrario debido a la presencia del trinquete que impide su movimiento. El trinquete debe tener un resorte, para que pueda regresar a su posición, una vez que el diente de la rueda ha pasado.

Consideremos ahora que tenemos dos cajas, una con un gas y un sistema de aspas a temperatura T_1 y en la otra caja tenemos un gas y una matraca a temperatura T_2 , unidas a través de un mismo eje, como se muestra en la Figura (2.3)[‡]. Suponemos que tanto el trinquete como la rueda dentada son de dimensiones tales que presentan movimiento

[†]Figura adaptada de la ref. [2]

[‡]Figura tomada de la ref. [13]

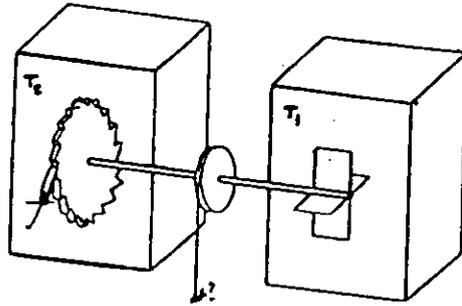


Figura 2.3: El sistema matraca compuesto de una rueda dentada y un trinquete unido, a través de un eje, a un sistema de aspas.

Browniano. Por tal motivo, a este dispositivo se le conoce como *Matraca Estocástica* (Stochastic Ratchet), y fue discutido originalmente por Feynman [13]. De igual manera las aspas presentan movimiento aleatorio, pero puede considerarse como una fuerza externa que trata de inducir movimiento dirigido en la matraca estocástica.

Primero tomemos el caso en que las dos cajas se encuentran a la misma temperatura $T_1 = T_2 = T$. Aparentemente tenemos que el sistema podría girar sólo en una dirección debido a la asimetría de la rueda y la presencia del trinquete. Pero debido a las fluctuaciones térmicas del sistema, tenemos que de vez en cuando y de manera accidental, el trinquete podrá levantarse justo cuando el movimiento Browniano de las aspas esté tratando de girar al eje de la rueda dentada en sentido contrario. Por tal motivo tenemos que, en general, la rueda dentada no presentará un movimiento promedio neto diferente de cero; en otras palabras, el dispositivo de matraca estocástica no trabaja como máquina de movimiento perpetuo.

Una característica importante de la matraca, es que una vez que el trinquete ha sido levantado y regresado por el resorte, éste golpeará a la rueda dentada y disipará energía; parte de ella será cedida a la rueda

calentándola y parte será absorbida por el gas que rodea al sistema.

Veamos ahora el caso en que $T_1 \neq T_2$. Si la temperatura de las aspas es mayor que la temperatura de la matraca estocástica $T_1 > T_2$, el movimiento neto de la matraca será en la dirección en que presenta mayor facilidad para moverse. Esto es debido a que los impactos de las moléculas del gas sobre las aspas son más energéticos, por lo que es menos posible que una fluctuación sobre el trinquete lo levante y dé lugar a un movimiento en sentido inverso. Por el contrario, y en cierta medida de manera inesperada, si la temperatura de la matraca es mayor que el de las aspas $T_2 > T_1$, los movimientos aleatorios sobre la matraca son más dominantes, pudiéndose presentar en ésta un desplazamiento neto diferente al de su movimiento preferencial.

En el aspecto experimental, esta propiedad de la matraca estocástica ha sido encontrada en sistemas ópticos, eléctricos y mecánicos [9].

2.4 Modelo de la Proteína Motora

Podemos observar que los tipos de proteínas motoras descritos en la Sección 2.2, presentan ciertas características comunes: *a)* los procesos de transporte se realizan a temperatura constante y no en presencia de gradientes de temperatura; *b)* las dimensiones de la proteína motora son tales que se encuentra en el régimen Browniano donde las fluctuaciones térmicas del baño son apreciables; *c)* las proteínas motoras se desplazan sobre otro tipo de moléculas que presentan una estructura periódica como filamentos o microtúbulos en la célula; y *d)* existe un agente externo que proporciona la energía suficiente para que la proteína motora realice su trabajo mecánico, a través de la energía liberada en la hidrólisis de ATP.

Estas observaciones sugieren [4, 8, 10] que los movimientos unidireccionales de las proteínas motoras, como la kinesina a lo largo de un microtúbulo o los cambios alostéricos en la conformación de la miosina, pueden ser entendidos en términos de un mecanismo que involucra una matraca estocástica biológica operando a temperaturas finitas. En estos

procesos la proteína actúa como una partícula Browniana ejecutando una cierta caminata aleatoria en presencia de un potencial asimétrico, el cual representa la interacción con el microtúbulo, en el caso de la kinesina, o con el filamento, en el caso de la miosina. En ambos casos, la partícula Browniana sufre la acción de una fuerza externa proveniente de las reacciones químicas del consumo de ATP.

Para ser más específicos, en esta tesis hemos considerado el modelo de matraca estocástica haciendo uso de la teoría de Langevin del movimiento Browniano. En este modelo se considera a la proteína como una partícula con inercia, bajo la acción de fuerzas estocásticas producidas por el constante golpeteo de las moléculas del baño térmico que la rodea, a la vez que se ve frenada por fuerzas disipativas del mismo medio. Además se incluye la acción de un potencial periódico asimétrico que modela la interacción de la proteína motora con la estructura periódica no simétrica sobre la cual se desplaza. Finalmente, se incluye un término de fuerza externa dependiente del tiempo que simula el proceso de hidrólisis de ATP a través del cual la proteína motora aprovecha la energía para realizar su trabajo mecánico. Todos estos elementos dan por resultado que, bajo ciertas condiciones, se obtenga una corriente neta de la partícula Browniana, que representa el movimiento unidireccional de la proteína. Los detalles matemáticos de este modelo son descritos en los subsecuentes capítulos.

Queremos hacer las siguientes observaciones al modelo:

i) A través de la variable estocástica descrita por la teoría de Langevin, representamos de manera general la posición instantánea de la partícula Browniana, pero debido a que la proteína motora sufre una serie de cambios alostéricos, dicha variable también puede representar las configuraciones morfológicas por las que pasa el sistema.

ii) Se conoce que la energía liberada se produce a través de ciclos repetitivos de hidrólisis de ATP, por lo cual podemos especular que existe una frecuencia que caracteriza a este proceso y pudieramos entonces modelarlo como una fuerza externa oscilatoria periódica. Sin embargo, como no conocemos que tan frecuentemente ocurren estos procesos de hidrólisis en las células (por lo menos carezco de alguna referencia al respecto) podemos también modelar la fuerza externa como un proceso estocástico con su propio tiempo de correlación, independiente de las características del baño térmico. En ambos casos, se supone que

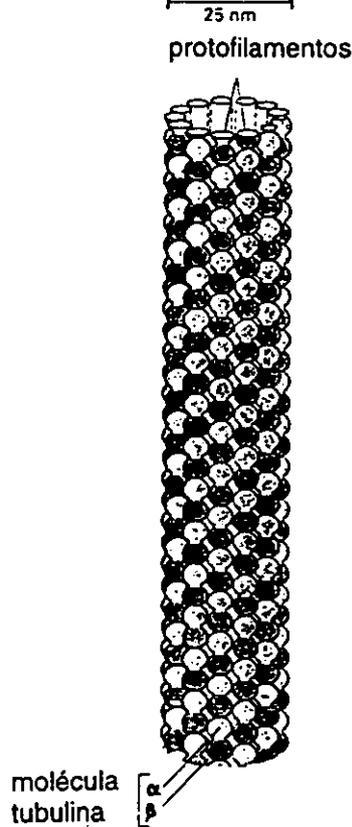


Figura 2.4: Microtúbulo compuesto de moléculas α y β -tubulinas alineadas a lo largo de filamentos paralelos (protofilamentos).

el promedio temporal de dicha fuerza es cero. Esto previene que la direccionalidad del movimiento se vea forzada de manera preferencial.

iii) Por otra parte, tenemos que el microtúbulo sobre el cual se desplazan cierto tipo de proteínas motoras, lo conforman las llamadas moléculas α -tubulina y β -tubulina, que difieren en su polaridad, y que se encuentran alineadas de manera alternada a lo largo del microtúbulo (Figura 2.4)[§]. Este tipo de estructuras son las que nos permiten modelar la interacción de la proteína motora con los filamentos del microtúbulo

[§]Figura adaptada de la ref. [2]

por medio de un potencial que sea periódico y asimétrico.

iv) Como vimos anteriormente, un mismo tipo de proteína motora como la kinesina, bajo ciertas condiciones puede realizar el transporte de vesículas ya sea en una dirección o en otra. Se ha visto, y lo mostraremos aquí también, que el modelo de matraca estocástica reproduce este tipo de arrastre de la partícula Browniana en la dirección preferencial, así como la aparición de corrientes invertidas.

El modelo completo con el que trabajamos, considera la ecuación de *Langevin Generalizada*, en la cual se incluyen correlaciones finitas del baño térmico, es decir, la fuerza aleatoria presenta memoria que decae a razón de su tiempo de correlación, conocido como ruido térmico de color. Su expresión funcional se mostrará en el siguiente capítulo.

Variantes de este modelo han sido estudiadas por otros autores, por ejemplo ver las referencias [4, 6, 7]. En estos trabajos se le ha atribuido a las correlaciones temporales del ruido, el origen de la aparición de una corriente diferente de cero cuando el potencial periódico es asimétrico. Posteriormente retomaremos estas propuestas y argumentaremos nuestro punto de vista al respecto.

Capítulo 3

Matracas estocásticas en el régimen Browniano.

3.1 Introducción

En este capítulo incluimos la teoría de Langevin del movimiento Browniano para describir el movimiento de una partícula, cuando las fluctuaciones del medio no son despreciables. Así también mostramos su problema equivalente en términos de distribuciones de probabilidad, a través de las ecuaciones de Fokker-Planck asociadas, para el caso de ruido térmico blanco. Sólo introduciendo la ecuación generalizada de Langevin podemos considerar el caso de ruido térmico con correlaciones finitas; en este contexto, tenemos que la memoria del baño surge como consecuencia de la aplicación del teorema Fluctuación-Disipación. Finalmente, para enmarcar nuestro trabajo y apreciar las contribuciones obtenidas, presentamos una breve revisión de algunos de los trabajos que se han realizado sobre las matracas estocásticas, mostrando nuestras observaciones al respecto, en donde la gran mayoría de estos trabajos sólo han considerado el límite sobreamortiguado con ruido térmico blanco.

3.2 Movimiento Browniano

El término “Movimiento Browniano” se deriva del nombre del botánico Robert Brown quien, en 1828, hizo cuidadosas observaciones de diminutos granos de polen con un microscopio. Brown descubrió que el polen llega a ser dispersado en el agua en un gran número de pequeñas partículas, las cuales observó que tenían un movimiento fluctuante ininterrumpido e irregular.

Ahora sabemos que la fuente real de este movimiento recae en el bombardeo incesante y aleatorio sobre las partículas Brownianas (o cualquier suspensión coloidal) que son transmitidas por las moléculas del fluido que las rodean. Como el movimiento Browniano ejemplifica aspectos de la Teoría Cinética de una manera visible, para poder apreciarse sólo necesita las condiciones adecuadas de baja densidad, débil interacción y fuerzas de fricción pequeñas.

Para una partícula de masa m_p que se encuentra suspendida en un fluido a temperatura T , donde:

$$m_p \gg m_m, \quad (3.1)$$

siendo m_m la masa de las moléculas del fluido, tenemos que la velocidad media de la partícula Browniana es tal que:

$$v_{típica}^{partícula} \sim \sqrt{\frac{kT}{m_p}} \ll v_{típica}^{moléculas}. \quad (3.2)$$

Einstein en sus primeros artículos clásicos (1905) [24], mostró un análisis teórico del movimiento Browniano sobre la base del llamado “problema del caminante al azar” y entonces estableció una relación muy cercana entre:

- i) su naturaleza *irreversible*, como en los fenómenos de difusión y viscosidad,
- ii) las *fluctuaciones* moleculares.

El desplazamiento cuadrático medio de la partícula Browniana respecto al número total de pasos elementales, es una consecuencia típica de la naturaleza aleatoria e independiente de los pasos y se manifiesta en una gran variedad de fenómenos físicos que ocurren en la naturaleza.

La aproximación de *Smoluchowski* [25] al problema del movimiento Browniano (1906), fue en esencia la misma que la de Einstein; la diferencia radica primordialmente en el procedimiento matemático.

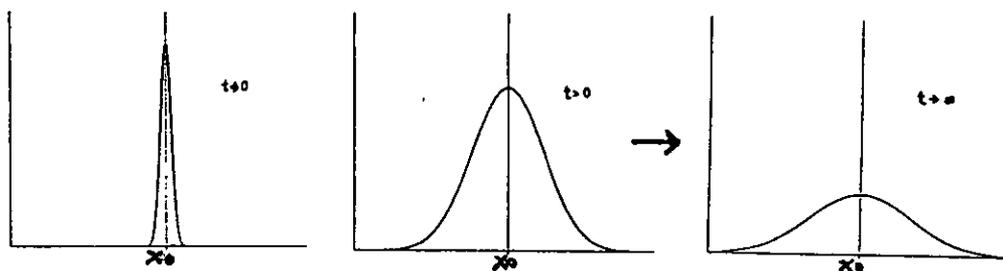


Figura 3.1: Distribución de probabilidad $p(x, t|x_0)$ a través del tiempo.

Smoluchowski introduce la función de probabilidad $p_n(x|x_0)$, la cual denota la probabilidad de que, en una serie de n pasos, la partícula Browniana inicialmente en el punto x_0 alcance el punto x (en términos de la longitud de los pasos elementales l). La suposición fundamental es que los pasos consecutivos son independientes. Esto, en realidad, quiere decir que la longitud l de cada paso ocurre en un tiempo mayor que el tiempo de correlación o de relajamiento τ de la partícula Browniana. En el límite continuo, cuando $l \rightarrow 0$ y $\tau \rightarrow 0$ con $D = l^2/\tau$ constante, se puede mostrar que la probabilidad condicional $p_n(x|x_0)$ puede escribirse como:

$$p(x, t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-x_0)^2/4Dt}, \quad (3.3)$$

que muestra que la desviación cuadrática media de la posición es $\langle (x - x_0)^2 \rangle \sim Dt$, identificando así el coeficiente de difusión D . Notamos también que esta distribución de probabilidad se reduce a una delta de Dirac $p(x, t|x_0) \rightarrow \delta(x - x_0)$, cuando $t \rightarrow 0$ (ver Figura 3.1).

Ya sea que enfoquemos nuestra atención en una simple partícula en el ensemble o que observemos el ensemble completo, la fuente principal del fenómeno recae en los impactos incesantes y aleatorios recibidos por la partícula Browniana de las moléculas del fluido. En otras palabras, el carácter irreversible del fenómeno surge de las fuerzas fluctuantes y aleatorias ejercidas por las moléculas del fluido sobre la partícula Browniana. Sin embargo, una descripción más precisa es la que formuló Langevin y que a continuación pasamos a describir.

3.3 Ecuación de Langevin

Langevin analizó la naturaleza del movimiento Browniano de la siguiente manera [26]: Una partícula moviéndose en un medio, digamos agua, está sujeta a la fuerza proveniente de sus alrededores. Podemos escribir su ecuación de movimiento de la forma:

$$m \frac{dv}{dt} = F(t), \quad (3.4)$$

donde m es la masa de la partícula, $v(t)$ es la velocidad de la partícula y $F(t)$ es la fuerza que actúa sobre la partícula en virtud de los incesantes impactos de las moléculas del fluido. Langevin sugirió que la fuerza $F(t)$ pudiera ser expresada como la suma de dos partes (fuerzas lentas y rápidas):

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v + f(t). \quad (3.5)$$

Los términos de la derecha son:

1. Una parte promediada que representa la *fricción* $-\gamma v$ que experimenta la partícula en el fluido, donde γ es el coeficiente de fricción.
2. Una parte que fluctúa rápidamente $f(t)$, que promedia a cero $\langle f(t) \rangle = 0$ ya que no hay arrastre neto debido al fluido, tal que sus correlaciones decaen en un tiempo corto τ_0 . Como $f(t)$ es independiente de la posición, se considera que el medio es uniforme.

Dada la naturaleza del presente estudio, es importante recalcar las propiedades de las correlaciones de la fuerza fluctuante. La cantidad importante es $\langle f(t_1)f(t_2) \rangle$, la cual es una medida de la correlación estadística entre el valor de la variable fluctuante $f(t)$ al tiempo t_1 y su valor al tiempo t_2 , y es conocida como *Función de Autocorrelación* de la variable $f(t)$, o simplemente *Función de Correlación* de $f(t)$.

A medida que el intervalo de tiempo $t = |t_2 - t_1|$ llega a ser grande en comparación con el tiempo característico del baño térmico τ_0 , los valores de $f(t_1)$ y $f(t + t_1)$ llegan a estar *descorrelacionados*, esto es:

$$\langle f(0)f(t) \rangle \xrightarrow{t \gg \tau_0} \langle f(0) \rangle \langle f(t) \rangle = 0. \quad (3.6)$$

En otras palabras, la “*memoria*” de los impactos moleculares recibidos durante un intervalo de tiempo dado, digamos entre t_1 y $t_1 + dt$, se pierde completamente después de un lapso de tiempo largo en comparación con el tiempo de correlación τ_0 ; entonces, la magnitud de la función $\langle f(0)f(t) \rangle$ es significativa sólo cuando el intervalo de tiempo t es del mismo orden que la magnitud de τ_0 .

La idea de Langevin fue considerar escalas de tiempo de observación de la partícula Browniana mucho mayores que el tiempo de correlación τ_0 del baño ($t \gg \tau_0$), por lo que:

$$\langle f(t)f(t') \rangle \simeq \alpha \delta(t - t'), \quad (3.7)$$

que es a lo que llamamos *ruido blanco*, cuyo espectro de potencias nos da una constante, siendo α la magnitud de la correlación. Sin embargo, dicha constante no es arbitraria, sino que refleja el hecho de que el fluido se encuentra en equilibrio. Esto se ve a continuación.

La solución a la ecuación de Langevin, Ec. (3.5), es:

$$v(t) = v(0)e^{-t/\tau} + \int_0^t e^{-(t-t')/\tau} f(t') dt', \quad (3.8)$$

donde hemos definido el tiempo de relajamiento de la partícula como:

$$\tau = \frac{m}{\gamma}. \quad (3.9)$$

Esto es, el promedio de la velocidad decae exponencialmente a una razón determinada por el tiempo de relajamiento τ , hasta el valor

último de cero. Este resultado es típico de fenómenos gobernados por propiedades disipativas tales como la viscosidad del fluido.

Analizaremos ahora el promedio del cuadrado de la velocidad. Con la solución (3.8) y con la Ec. (3.7), obtenemos [26]:

$$\langle v^2(t) \rangle = v^2(0) + \left(\frac{\alpha}{2m\gamma} - v^2(0) \right) (1 - e^{-2t/\tau}). \quad (3.10)$$

Ahora usamos el hecho de que, a medida que $t \rightarrow \infty$, la velocidad cuadrática media $\langle v^2(t) \rangle$ debe tender al valor de equipartición de la energía kT/m . Con este límite obtenemos que:

$$\alpha = 2kT\gamma, \quad (3.11)$$

y es a lo que se conoce como Teorema *Fluctuación-Disipación*, siendo α la magnitud de la correlación de la fuerza fluctuante, k la constante de Boltzmann, T la temperatura del medio y γ el coeficiente de fricción del proceso disipativo.

El Teorema Fluctuación-Disipación (TFD) relaciona las fluctuaciones de una cantidad física, que pertenece al estado de equilibrio del sistema dado, con un proceso disipativo, el cual es observado sólo cuando el sistema está sujeto a una fuerza externa que lo saca linealmente de equilibrio. Por consecuencia, este teorema nos hace capaces de determinar las propiedades fuera de equilibrio de un sistema estadístico dado, sobre la base del conocimiento de las fluctuaciones térmicas que ocurren en el sistema, cuando éste está en uno de sus estados de equilibrio.

Por lo tanto, tenemos que el TFD relaciona *fluctuaciones* con *disipación*, lo que nos garantiza el balance detallado (reversibilidad microscópica) del sistema, que es el origen de la segunda ley de la Termodinámica.

Veamos ahora como puede obtenerse la difusión. De la ecuación de Langevin, Ec. (3.5), multiplicamos por la posición instantánea x de la partícula y promediando sobre el ensemble, obtenemos:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 2 \langle v^2 \rangle. \quad (3.12)$$

Si la partícula Browniana ya ha alcanzado el equilibrio térmico con las moléculas del fluido, la cantidad $\langle v^2 \rangle$ en esta ecuación debe ser reemplazada por su valor de equipartición kT/m . Al integrar obtenemos:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} \tau^2 \left(\frac{t}{\tau} - (1 - e^{-t/\tau}) \right). \quad (3.13)$$

Para $t \ll \tau$ se reduce a:

$$\langle x^2 \rangle \simeq \frac{kT}{m} t^2 = \langle v^2 \rangle t^2, \quad (3.14)$$

lo cual es consistente con las ecuaciones de movimiento reversibles de Newton.

Pero si $t \gg \tau$ entonces [27]:

$$\langle x^2 \rangle \simeq \frac{2kT}{m} \tau t = \left(\frac{2kT}{\gamma} \right) t, \quad (3.15)$$

el cual es el resultado de *Einstein-Smoluchowski*:

$$D = \frac{kT}{\gamma}, \quad (3.16)$$

donde D es el coeficiente de difusión. Entonces:

$$\langle x^2(t) \rangle \simeq 2Dt; \quad \langle x(t) \rangle = 0. \quad (3.17)$$

En otras palabras, el conjunto de partículas Brownianas, inicialmente concentradas en el origen, se difunde a medida que el tiempo se incrementa y su desviación cuadrática media está dada por la Ec. (3.17). El proceso de difusión, claramente irreversible, nos da una buena representación del comportamiento estadístico de la evolución de una simple partícula en el ensemble.

Por lo tanto, el carácter irreversible surge esencialmente de la viscosidad del sistema. La relación (3.16) nos expresa una relación entre la disipación y la difusión. Es decir, tanto la fricción como la difusión provienen de las fuerzas fluctuantes y aleatorias del movimiento incesante de las moléculas del fluido.

Podemos entonces notar la naturaleza *reversible* del movimiento Browniano para tiempos menores al tiempo de relajamiento ($t \ll \tau$),

cuando $\langle x^2 \rangle \simeq v^2(0)t^2$, y su naturaleza *irreversible* para tiempos mayores al tiempo de relajamiento ($t \gg \tau$), cuando $\langle x^2 \rangle \simeq (2kT/\gamma)t$.

Por lo tanto, para $t \gg \tau$ el sistema muestra las propiedades de:

- a) $\langle v^2(t) \rangle \rightarrow \frac{kT}{m}$ Equilibrio Térmico,
 b) $\langle x^2(t) \rangle \rightarrow 2Dt$ Difusión ;

las cuales son características de un sistema que satisface la condición de Fluctuación-Disipación.

Es importante recalcar que la escala de tiempo para la función de correlación $\langle v(0)v(t) \rangle$, está dada por el tiempo de relajamiento τ del movimiento Browniano, el cual es muchos órdenes de magnitud mayor que el tiempo característico τ_0 , que da la escala de tiempo para las funciones de correlación $\langle f(0)f(t) \rangle$. Es decir $\tau \gg \tau_0$.

Regresando a la correlación de la fuerza estocástica $f(t)$, en que tenemos ruido blanco, y haciendo uso del TFD, vemos que el coeficiente de fricción γ lo podemos expresar de la siguiente manera [26]:

$$\gamma = \frac{1}{2kT} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f(0)f(t) \rangle dt, \quad (3.18)$$

o de manera equivalente:

$$\frac{2kT}{\gamma} = 2D = \int_{-\infty}^{\infty} \langle v(0)v(t) \rangle dt. \quad (3.19)$$

De una manera general, podemos expresar el Teorema Fluctuación-Disipación como [27]:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2kT\Gamma(t-t') \quad \text{para } t > t', \quad (3.20)$$

donde el factor $\Gamma(t)$ se le conoce como el *kernel de memoria* o la fricción retardada, el cual debe reducirse en el caso de ruido blanco a:

$$\Gamma(t-t') \rightarrow \gamma\delta(t-t'), \quad (3.21)$$

siendo equivalente a tener:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \alpha\delta(t-t'). \quad (3.22)$$

En resumen, podemos decir que la fuerza estocástica $f(t)$ es una fuerza tal que posee las siguientes propiedades:

i) $\langle f(t) \rangle = 0$.

ii) $f(t)$ es un proceso Gaussiano y, por lo tanto, sólo requiere de sus dos primeros momentos para ser descrito.

iii) Su función de correlación está dada como $\langle f(t)f(t') \rangle = \alpha\delta(t-t')$, para el caso de ruido blanco.

Sin embargo, la solución al problema se reduce a encontrar el ensemble de $v(t)$, para toda realización de la fuerza estocástica $f(t)$, lo cual es equivalente a buscar la solución en términos de distribuciones de probabilidad; por ejemplo $W(x, v, t|x_0, v_0, t_0)$, que es la probabilidad de encontrar a la partícula al tiempo t en la posición x con velocidad v , dado que se encontraba al tiempo t_0 en la posición x_0 con velocidad v_0 . Con este tipo de probabilidades uno puede determinar cualquier cantidad de interés del sistema, pero el problema se vuelve más complicado cuando uno considera un potencial arbitrario $V(x)$, como es en nuestro caso. Esto es, el sistema cerrado lo conforman la partícula Browniana en presencia de una fuerza proveniente de un potencial asimétrico $V(x)$ y el baño térmico en el que se encuentra inmersa.

3.4 Ecuaciones de Fokker-Planck y de Smoluchowski

La ecuación diferencial de Langevin (3.5) representa un proceso estocástico Markoviano y estacionario, cuya solución puede ser expresada en términos de $W(x, v, t|x_0, v_0, t_0)dx dv$, siendo la probabilidad condicional de encontrar a la partícula entre x y $x + dx$ con velocidad entre v y $v + dv$ al tiempo t , dado que estaba en x_0 , con velocidad v_0 en $t_0 < t$.

Por proceso *Markoviano* queremos decir que para conocer el estado de un sistema al tiempo $t + dt$ es necesario sólo conocer su estado al tiempo t , pero *no* su historia previa.

La distribución de probabilidad en el límite en que $t \rightarrow t_0$ se reduce a:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} W(x, v, t|x_0, v_0, t_0) = \delta(x - x_0)\delta(v - v_0) \quad (3.23)$$

y para tiempos grandes tiende a $W_s(x, v)$, la probabilidad estacionaria de encontrar a la partícula en la posición x , con velocidad v , a cualquier tiempo t :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W(x, v, t | x_0, v_0, t_0) \rightarrow W_s(x, v). \quad (3.24)$$

Se puede mostrar [29] que dado que el proceso es Gaussiano, Markoviano (ruido blanco) y que obedece el teorema Fluctuación-Disipación, se pueden escribir ecuaciones para la función de distribución $W(v, t | v_0, t_0)$. A continuación presentamos algunos casos límites.

3.4.1 Partícula Browniana sin potencial

En ausencia de potenciales externos podemos derivar la información estocástica requerida para el proceso $v(t)$, el cual es un proceso Gaussiano y Markoviano, a partir de la probabilidad condicional $W(v, t | v_0, t_0)$ de que la partícula adquiera una velocidad v al tiempo t dado que su velocidad era v_0 al tiempo t_0 , para cualquier posición de la partícula. Esta probabilidad condicional a dos tiempos es la solución fundamental de la ecuación de Fokker-Planck, que es una ecuación lineal en W y no es más que una ecuación de difusión en el espacio de velocidades, dada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} W = \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{kT}{\gamma} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\gamma v}{m} \right) W, \quad (3.25)$$

tal que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} W(v, t | v_0, t_0) = \delta(v - v_0). \quad (3.26)$$

Como estamos considerando que el movimiento Browniano se realiza en un baño térmico en equilibrio termodinámico, tenemos entonces que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W(v, t | v_0, t_0) \rightarrow e^{-\frac{1}{2}mv^2/kT}, \quad (3.27)$$

es decir, la solución estacionaria de equilibrio coincide con la distribución de velocidades de Maxwell [29].

3.4.2 Partícula Browniana en presencia de un potencial $V(x)$

Para el caso del movimiento Browniano en un campo de potencial, tenemos que la ecuación de Langevin está dada por la serie de ecuaciones acopladas:

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v + f(t) - \frac{dV(x)}{dx} \quad (3.28)$$

y

$$\frac{dx}{dt} = v. \quad (3.29)$$

Bajo las propiedades estocásticas de la fuerza aleatoria $f(t)$, la ecuación de Fokker-Planck para la probabilidad condicional $W(x, v, t|x_0, v_0, t_0)$ en el espacio fase, la podemos expresar como [18]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v} \right) W = \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{kT}{\gamma} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\gamma v}{m} \right) W, \quad (3.30)$$

tal que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} W(x, v, t|x_0, v_0, t_0) = \delta(x - x_0) \delta(v - v_0), \quad (3.31)$$

cuya solución estacionaria coincide con la distribución canónica:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W(x, v, t|x_0, v_0, t) \rightarrow e^{-[\frac{1}{2}mv^2 + V(x)]/kT}. \quad (3.32)$$

Nuestras suposiciones implican que la naturaleza de la fuerza estocástica es independiente de la presencia del campo de fuerzas. Esto es, los tiempos característicos τ_n asociados al potencial $V(x)$ deben ser mucho mayores que el tiempo de correlación τ_0 del baño térmico ($\tau_n \gg \tau_0$).

3.4.3 Caso sobreamortiguado o de Smoluchowski

En el caso sobreamortiguado (en donde se desprecia el término inercial) la ecuación de Langevin, incluyendo el término del potencial, se reduce a:

$$\gamma \frac{dx}{dt} \approx -\frac{dV(x)}{dx} + f(t),$$

con $f(t)$ obedeciendo las respectivas propiedades estocásticas y el teorema Fluctuación-Disipación. En este caso podemos directamente hablar de la probabilidad $W(x, t|x_0, t_0)$ sin referirnos a la velocidad de la partícula. W en este caso obedece la llamada ecuación de Smoluchowski (que se puede derivar directamente de la ecuación de Langevin en el caso sobreamortiguado o de la ecuación de Fokker-Planck completa [30]), dada como:

$$\partial_t W(x, t) + \partial_x J(x, t) = 0, \quad (3.33)$$

donde $J(x, t)$ es la corriente de probabilidad. Para una fuerza $F(x) = -\partial_x V(x)$ y otra fuerza dependiente del tiempo $F(t)$, siempre y cuando la fuerza $F(t)$ varíe lo suficientemente lenta, la corriente de probabilidad se puede expresar como:

$$J(x, t) = -\frac{kT}{\gamma} \partial_x W(x, t) + [F(x) + F(t)]W(x, t). \quad (3.34)$$

Es muy importante recalcar que el límite sobreamortiguado es en realidad una aproximación de escalas de tiempo; es decir, la ecuación de Smoluchowski es válida para escalas de tiempo $t \gg \frac{m}{\gamma}$ (i.e. en el régimen difusivo). Con esto se tienen restricciones tanto para el potencial $V(x)$ como para la fuerza dependiente del tiempo $F(t)$: los tiempos característicos τ_n de $V(x)$ deben ser tales que $\tau_n \gg \frac{m}{\gamma}$ y la fuerza $F(t)$ debe variar muy lentamente en esta escala.

Es relevante para nuestra discusión los siguientes puntos: La solución estacionaria se obtiene cuando $\partial_t W = 0$, es decir cuando ya no hay dependencia temporal (para tiempos grandes). Esto implica que $J = \text{constante}$. Si $F(t) = 0$ y $V(x)$ es cualquier potencial con un mínimo global, obtenemos que la corriente es $J = 0$. Esto es, la solución

estacionaria es la solución de equilibrio térmico con distribución de probabilidad dada por la distribución de Gibbs $W(x) = Ne^{-V(x)/kT}$, siendo N la constante de normalización. El estado estacionario es único y su validez depende de manera esencial del teorema Fluctuación-Disipación.

Es también interesante ver que si $V(x) = 0$ y $F(t) = 0$ la ecuación de Smoluchowski es la ecuación de difusión:

$$\partial_t W(x, t) = \frac{kT}{\gamma} \partial_x^2 W(x, t). \quad (3.35)$$

3.5 Ecuación Generalizada de Langevin

Los casos anteriormente vistos, corresponden al hecho de considerar que el tiempo de correlación del baño térmico es despreciable en comparación con el resto de los tiempos característicos del sistema. Es de nuestro interés, poder tener acceso a escalas de tiempo comparables con el tiempo característico del baño τ_0 .

Es importante recalcar que, en general, la separación de escalas de tiempo depende de lo que se considera sea el "sistema" y el "baño". En realidad, como sabemos, un baño térmico es siempre de color (i.e. $\tau_0 \neq 0$). Sin embargo, si las escalas de tiempo de evolución son tales que uno es capaz de aproximar el baño como un baño blanco, en comparación con las escalas de tiempo del sistema, la descripción se convierte en Markoviana. Esto propiamente es lo que nos da acceso a la descripción matemática completa de la dinámica del sistema, no siendo el caso si se mantienen las correlaciones temporales finitas del baño térmico. Pero ciertamente, si las escalas de tiempo del sistema y el baño son comparables, entonces uno debe enfrentar el carácter no-Markoviano de las correspondientes ecuaciones dinámicas como veremos a continuación.

Si el tiempo de correlación del baño térmico, τ_0 , ya *no* es despreciable con respecto a los demás tiempos del sistema, la descripción del

movimiento Browniano debe hacerse con la ecuación *generalizada* de Langevin:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \int_{-\infty}^t d\tau \Gamma(t - \tau) \frac{dx(\tau)}{d\tau} - \frac{d}{dx} V(x) + f(t) + F_{ext}(t), \quad (3.36)$$

donde ya hemos incluido un potencial $V(x)$ y una fuerza *externa* dependiente del tiempo $F_{ext}(t)$. El punto más notorio es la aparición de la función $\Gamma(t)$, llamada kernel de *memoria* de la fricción. El incluir dicho kernel es consecuencia directa del Teorema Fluctuación-Disipación, ya que la fuerza térmica fluctuante ejercida por el baño, $f(t)$, además de obedecer las propiedades estocásticas usuales de ser Gaussiana con media cero, $\langle f(t) \rangle = 0$, debe obedecer el Teorema Fluctuación-Disipación, Ec. (3.20):

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2kT\Gamma(t - t') \quad \text{para } t > t'. \quad (3.37)$$

Esto obliga a considerar el término de memoria y convierte al proceso estocástico de la partícula Browniana en *no-Markoviano*. Este teorema garantiza el propio equilibrio del conjunto sistema-baño, cuando $F_{ext}(t) = 0$.

Por conveniencia del análisis numérico posterior, hemos escogido la correlación de la fuerza estocástica como un decaimiento exponencial simple, de la forma:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \frac{kT\gamma}{\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}, \quad (3.38)$$

donde τ_0 es el tiempo de correlación del baño. La ecuación de Langevin usual con ruido blanco se recobra cuando el kernel de memoria llega a ser delta-correlacionado ($\tau_0 \rightarrow 0$). Esto es, cuando

$$\Gamma(t) = \gamma\delta(t), \quad (3.39)$$

siendo γ el coeficiente de fricción.

Es importante señalar también que las propiedades de la fuerza $F_{ext}(t)$, ya sea estocástica o determinística, corresponden a un proceso externo *dado*, las cuales son completamente independientes de los grados de libertad *internos* de la composición sistema-baño.

Una de las dificultades más serias debida a la pérdida de Markovianidad, es que la jerarquía completa de las distribuciones de probabilidad para múltiples tiempos, no puede ser construida a partir del conocimiento de la distribución de probabilidad condicional a dos tiempos $W(x, v, t|x_0, v_0, t_0)$ [28]. Y en general, uno no puede determinar una ecuación de Fokker-Planck (generalizada) para este tipo de distribuciones. Este último resultado tiene consecuencias en el estudio que estamos presentando. Como veremos más adelante, uno de los objetivos en este trabajo es encontrar si el sistema muestra una corriente estacionaria diferente de cero para una situación dada, definida por los parámetros descritos anteriormente. Sin embargo, en la descripción generalizada no-Markoviana no es muy claro cuál es la función que mide la corriente, tal que se reduzca a la corriente de la densidad de probabilidad $J(x, t)$ en el límite Markoviano, dado por la Ec. (3.34). Recordemos que dicha función se deduce de la ley de conservación de la densidad de probabilidad $W(x, t)$, la cual puede obtenerse a partir de la correspondiente ecuación de Fokker-Planck (o de Smoluchowski) [29]. Como no se conoce una ecuación de Fokker-Planck "generalizada", debido a la no-Markovianidad introducida con el término de memoria, por consiguiente uno no puede establecer la correspondiente ley de conservación para la distribución de probabilidad generalizada $W(x, t)$,

3.6 Corriente con ruido térmico blanco. Trabajos previos

En las descripciones hechas en otros estudios respecto a la matraca estocástica (ver por ejemplo las referencias [4, 6, 7]), se hace la suposición de que el movimiento se lleva a cabo dentro del régimen sobreamortiguado (límite de Smoluchowski) y entonces la memoria del baño no puede ser tomada en cuenta. La ecuación dinámica para tal situación, se expresa como:

$$\gamma \frac{dx}{dt} = -\frac{d}{dx}V(x) + \bar{f}(t), \quad (3.40)$$

donde hemos escrito $\tilde{f}(t)$ para hacer las siguientes observaciones: Una ecuación de este tipo representa la interacción de una partícula con un baño térmico, sólo si $\tilde{f}(t)$ es delta-correlacionada. En otras palabras, sólo una función $\tilde{f}(t)$ delta-correlacionada obedece al Teorema Fluctuación-Disipación, ver Ecs. (3.20) y (3.39). Si $\tilde{f}(t)$ muestra correlaciones temporales con tiempos de correlación diferentes de cero entonces, necesariamente, éstas fueron producidas por una fuente externa.

Se ha argumentado (ver por ejemplo ref.[7]) que estas correlaciones son en realidad *fluctuaciones fuera de equilibrio*. Esto pudiera ser en efecto el caso, sin embargo, estas fluctuaciones serían aún de origen externo. Esto es, un sistema aislado tal como el conjunto sistema-baño, debe alcanzar un estado de equilibrio térmico en la ausencia de fuerzas externas (tales como un campo dependiente del tiempo o un gradiente de temperatura [12]) y entonces no podría haber corrientes (estacionarias). De hecho, esta es la situación para el proceso estocástico $x(t)$ definida por la Ec. (3.40), con una fuerza *correlacionada* simétrica $\tilde{f}(t)$ y en la que se ha encontrado que el sistema alcanza un estado estacionario con una corriente neta [4, 6, 7, 8]. El concepto de *fluctuación fuera de equilibrio* requiere de una fuente externa o puede ocurrir en el transitorio hacia un estado estacionario, mientras que las fluctuaciones de equilibrio son de una naturaleza interna (las cuales obedecen el Teorema Fluctuación-Disipación).

Por otra parte, en nuestra aproximación hemos considerado que la fuente externa actúa sólo sobre la partícula y no sobre el baño, esto significa que las fluctuaciones térmicas no se ven afectadas y el sistema se mantiene en equilibrio térmico, aunque no mecánico, no viéndose modificada su temperatura. Por lo tanto, nuestro interés sólo se basa en comparar ruido interno contra ruido externo y no así procesos en equilibrio termodinámico contra procesos fuera de equilibrio.

En previos estudios desarrollados en relación a la aparición de corriente en un sistema de matraca estocástica (ver referencias [4, 6, 7, 8, 9, 10, 11]), la descripción de la dinámica del sistema fue hecha bajo la suposición de escalas de tiempo grandes de la matraca estocástica con respecto a las del baño térmico. Este tipo de aproximaciones sin embargo, permite considerar solamente ruido térmico "blanco" y entonces, cualquier correlación temporal de la fuerza debe provenir de una fuente externa. De aquí, podemos ver que al describir el sistema

de la matraca estocástica en el régimen Browniano por medio de una ecuación generalizada de Langevin, uno es capaz de considerar ruido térmico con tiempos de correlación finitos y así podremos mostrar que la producción de la corriente es debida a la presencia de una fuerza externa que depende del tiempo.

Entre los trabajos que se han realizado haciendo uso de potenciales asimétricos, podemos bosquejar brevemente los siguientes resultados a los que se han llegado, como a continuación mencionaremos:

- Millonas y Dykman [6] realizaron un estudio de un sistema dinámico no-lineal sobreamortiguado y con ruido, descrito por la ecuación diferencial estocástica:

$$\dot{x} = -\frac{dV(x)}{dx} + f(t), \quad (3.41)$$

donde $V(x)$ es un potencial periódico asimétrico y $f(t)$ es un ruido de media cero. El propósito de este trabajo fue determinar la densidad de corriente estacionaria $j = \langle \dot{x}(t) \rangle$.

Tomando el caso de ruido Gaussiano débil, tal que el tiempo característico del ruido τ_c sea mucho mayor que el tiempo de relajamiento τ_r ($\tau_c \gg \tau_r$), dentro de uno de los pozos del potencial, obtienen una corriente en función de las probabilidades de transición: $j = \lambda(W_+ - W_-)$, con λ el periodo del potencial y W_{\pm} la probabilidad por unidad de tiempo de brincar desde un mínimo del potencial a otro pozo que se encuentre a su derecha o a su izquierda. Cabe señalar que este resultado es aproximado y depende de la forma del espectro de potencias del ruido. Para potenciales asimétricos esto produce $j \neq 0$ y su signo (o dirección) depende de los valores relativos de W_{\pm} .

Una crítica a este trabajo es que $f(t)$ se refiere a un ruido de color, que en realidad es externo ya que no satisface el Teorema Fluctuación-Disipación (TFD). Por lo tanto no es posible relacionarlo con la temperatura del baño térmico.

- Doering et al.[7] por su parte, presentan algunos modelos del ruido externo para mostrar cómo ciertos mecanismos tipo matraca pueden rectificar ruido simétrico fuera de equilibrio, dando por resultado corrientes inducidas por dicho ruido. Ellos obtienen que la magnitud y la

dirección de la corriente inducida depende no sólo de la forma del potencial asimétrico sino también de los detalles del proceso estocástico de las fluctuaciones del ruido; sus resultados son numéricos y los comparan con análisis perturbativos.

Como ellos mismos hacen alusión, Feynman usó un mecanismo tipo matraca como ejemplo para ilustrar algunas implicaciones de la segunda ley de la termodinámica, en particular, que el trabajo útil no puede ser extraído a partir de fluctuaciones en equilibrio. Uno de los casos que ellos estudian, es cuando el potencial es asimétrico y las fluctuaciones son simétricas pero no blancas, a través de la ecuación diferencial estocástica:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \sqrt{2kT}\xi(t) + Z(t), \quad (3.42)$$

donde $f(x) = -dV(x)/dx$ es la fuerza determinista y las fluctuaciones térmicas están representadas por $\xi(t)$ un proceso de ruido blanco Gaussiano con media cero, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, y δ -correlacionada:

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t - s). \quad (3.43)$$

$Z(t)$ denota un proceso aleatorio para la fuerza fluctuante simétrica aplicada, de media cero, $\langle Z(t) \rangle = 0$, y correlacionada exponencialmente:

$$\langle Z(t)Z(s) \rangle = \frac{D}{\tau} e^{-|t-s|/\tau}, \quad (3.44)$$

donde τ es el tiempo de correlación del ruido y D es su intensidad. Si $Z(t)$ esta correlacionada sobre intervalos de tiempo grandes comparados con las escalas de tiempo de las fluctuaciones térmicas, se obtiene una corriente de probabilidad diferente de cero.

La corriente de probabilidad es calculada en función de la densidad de probabilidad conjunta $\rho(x, z, t)$ de la variable de la posición $x(t)$ y de la variable de la fuerza fluctuante $Z(t)$. De la correspondiente ecuación de Fokker-Planck, la corriente de probabilidad se puede expresar como:

$$J(x, t) = \left\{ f(x) - kT \frac{\partial}{\partial x} \right\} r(x, t) + \int z \rho(x, z, t) dz, \quad (3.45)$$

donde $r(x, t)$ es la densidad marginal de la posición:

$$r(x, t) = \int \rho(x, z, t) dz. \quad (3.46)$$

En ausencia de fluctuaciones fuera de equilibrio, es decir si $Z = 0$ o si $Z(t)$ es otro proceso de ruido blanco simétrico, el sistema alcanza un estado de equilibrio satisfaciendo la condición de balance detallado, en cuyo caso ninguna corriente es posible ($J = 0$), para cualquier forma del potencial. Podemos ver que para el caso sobreamortiguado que ellos consideran, sólo el ruido blanco $\xi(t)$ satisface el TFD del baño térmico:

$$2kT\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle \xi(t') \xi(0) \rangle, \quad \text{donde } t' = t - s \quad (3.47)$$

y entonces el ruido correlacionado no-blanco $Z(t)$ corresponde a un ruido externo.

El análisis aproximado que realizan, sin embargo, lo hacen en el límite de temperatura $T = 0$. En nuestro modelo, tomamos ruidos con características similares a los de Doering et al. a temperaturas finitas y sin irnos al caso límite sobreamortiguado, es decir considerando el término de inercia e incluyendo tiempos finitos de memoria del baño.

Doering et al. mencionan que se han hecho conjeturas de que estas fluctuaciones fuera de equilibrio surgen del consumo casi irreversible de la energía química. En nuestro caso, nosotros a estos elementos les hemos llamado "campos externos", que pueden identificarse como provenientes de los procesos de hidrólisis del ATP y que son los que proveen del combustible necesario para que las proteínas motoras realicen el transporte de compuestos.

- En los trabajos de Jung et al.[32] se considera el efecto de inercia finita en el transporte direccional de partículas masivas en un potencial periódico asimétrico y en presencia de una fuerza externa dependiente del tiempo senoidal. No consideran fuerzas térmicas fluctuantes.

Jung et al. caracterizan el movimiento por promedios de cúmulos para la probabilidad en el espacio fase de la solución de la ecuación de Liouville, obteniendo tanto transporte regular como caótico. En la ausencia de ruido térmico, se estudia qué parte del caos determinista podría jugar el papel del ruido.

Para una partícula con amortiguamiento finito y en un potencial periódico asimétrico de la forma:

$$V(x) = -\sin(x) - \mu \sin(2x), \quad (3.48)$$

su ecuación de movimiento puede expresarse como:

$$\epsilon \ddot{x}(t) + \dot{x}(t) = -\frac{d}{dx}V(x) + A \sin(\Omega t), \quad (3.49)$$

siendo ϵ la masa finita de la partícula. Integrando de manera numérica la Ec. (3.49), observan que el término de arrastre de una trayectoria caótica muestra fuertes fluctuaciones. Jung et al. describen el transporte a través de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo $\rho(x, \dot{x}, t)$, dada la densidad de probabilidad inicial $\rho_0(x, \dot{x})$ y la solución a la Ec. (3.49).

Para potenciales asimétricos en el caso sobreamortiguado ($\epsilon = 0$), el sistema muestra ya sea corrientes positivas o cero, pero al incluir el término de inercia se tiene la posibilidad de obtener inversión de corriente o corrientes negativas. La dirección de la corriente puede ser controlada al ajustar parámetros como la amplitud del forzamiento A , la intensidad de la inercia ϵ y la fricción (en este caso γ fue igual a 1).

El estudio de sistemas inerciales en ausencia de fuerzas térmicas estocásticas ($T = 0$), es un caso límite de nuestro modelo. Otros trabajos desarrollados en conexión a éste [19], muestran cómo la no-linealidad de estos sistemas juega un papel importante en la dinámica caótica del mismo.

- Por su parte, en los trabajos de Bartussek et al. [31] se estudiaron partículas Brownianas sobreamortiguadas que se desplazan sobre estructuras periódicas anisotrópicas, con fuerzas externas periódicas en el tiempo. Bartussek et al. hacen la observación de que al aplicar una fuerza periódica con promedio temporal cero, junto con ruido térmico blanco, se puede generar una velocidad macroscópica diferente de cero. Muestran también que la dirección de esta corriente se puede invertir modulando los parámetros involucrados.

Se considera la ecuación de Langevin sobreamortiguada, expresándola de la siguiente manera:

$$\dot{x} = -\partial_x \{V(x) - xF(t)\} + \xi(t). \quad (3.50)$$

Se considera un potencial asimétrico de la forma dientes de sierra con las puntas suavizadas, expresado como:

$$V(x) = -\frac{1}{K} \left(\sin(Kx) + \frac{1}{4} \sin(2Kx) \right), \quad (3.51)$$

con una fuerza periódica dada por $F(t) = A \sin(\omega t)$ y un ruido blanco Gaussiano $\xi(t)$ con media cero y correlación:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t - t'). \quad (3.52)$$

Definen una corriente promedio como:

$$\bar{J} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{TL} \int_t^{t+T} dt' \int_0^L dx J(x, t'), \quad (3.53)$$

con $T = 2\pi/\omega$ el periodo temporal y $L = 2\pi/K$ el periodo espacial. Esta corriente promedio se calcula haciendo uso del método numérico de matriz de fracciones continuas (matrix continued-fraction method), en el límite adiabático ($\omega \rightarrow 0$).

Bartussek et al. llegan a resultados consistentes con los nuestros. Observan que la corriente se anula asintóticamente para valores grandes de la amplitud del forzamiento A o para valores grandes de la intensidad del ruido D , ya que en estos límites la influencia del potencial tiende a ser despreciable. En ausencia del término de forzamiento ($A = 0$), la corriente se anula debido a que el sistema abierto se reduce a un sistema en equilibrio térmico. En el límite determinista, es decir en ausencia de fuerzas térmicas ($D = 0$), la corriente puede tomar valores positivos finitos o cero, dependiendo de la amplitud del forzamiento y de su frecuencia ω . Sin embargo, si el potencial periódico es simétrico, la corriente promedio \bar{J} se anula, para cualquier valor de A y D con $\omega \neq 0$.

Bartussek et al. reconocen que para el caso de corriente invertida, donde parece presentarse un 'juego cooperativo' entre el ruido y la frecuencia finita del forzamiento (no el límite adiabático), no se ha podido encontrar una explicación analítica satisfactoria. Tenemos por lo tanto que el movimiento sobreamortiguado de una partícula Browniana en un potencial asimétrico con una fuerza periódica, muestra un alto grado de complejidad, aún en el régimen determinista.

- Un trabajo muy reciente desarrollado por Marchesoni [16] ha tratado de investigar el papel del desorden en las propiedades de transporte de una matraca térmica, a través de impurezas (invirtiendo al azar la asimetría de una cierta fracción de los "dientes" del potencial) y

de aleatoriedad (aquí todos las barreras del potencial tienen la misma asimetría pero sus tamaños están aleatoriamente distribuidos).

En este trabajo se describe el proceso estocástico de la matraca térmica, a través de la ec. de Langevin en el límite sobreamortiguado:

$$\dot{x} = -V'(x) + \xi(t), \quad (3.54)$$

donde $\xi(t)$ denota un ruido estacionario Gaussiano de media cero y $V(x)$ es un potencial periodico con periodo L . Ellos aseguran sin mostrar gráficamente los resultados que una corriente de probabilidad estacionaria de promedio diferente de cero, $J(\tau) \equiv (1/L) \int_0^L J(x, \tau) dx$, puede resultar de la acción combinada por la asimetría espacial del corrimiento $V(x) \neq V(-x)$ y la correlación finita del ruido con tiempo característico τ .

Como veremos en el siguiente capítulo, nuestros resultados han mostrado que si se tiene una partícula en presencia solamente de un potencial, por ejemplo asimétrico, y de un baño térmico, aunque éste sea de color, no mostrará una corriente neta. Esto es porque el sistema, al no tener una fuerza externa que lo mantenga fuera de equilibrio, relajará a equilibrio térmico.

Por otra parte, todos sus resultados para la corriente de probabilidad (en función solamente de τ), la expresan de manera lineal en términos de una corriente $J_0(\tau)$ que suponen es la corriente que se obtiene para el caso común de potencial tipo matraca no perturbado, es decir sin desorden, el cual como nosotros demostramos toma valor $J_0(\tau) = 0$, en ausencia de fuerzas externas.

• Magnasco [17] ha propuesto una explicación del mecanismo de transporte a través de la figura de un potencial que se balancea periódicamente. La explicación esquemática del vaivén del potencial, proviene de proponer un potencial efectivo que incluye el término de la fuerza externa, de la forma:

$$V_{ef}(x, t) = V(x) - xF(t), \quad (3.55)$$

de tal manera que si $F(t)$ varía lentamente, tenemos el efecto de un potencial efectivo que varía con el tiempo; se puede visualizar como si tuvieramos una lámina acanalada (con dientes asimétricos) y la fuerza externa lo que hace es inclinarla hacia un lado y hacia el otro.

Por su parte, Magnasco propone que al tomar el caso adiabático ($\lim \omega \rightarrow 0$, o $\tau_{ext} \rightarrow \infty$), $F(t)$ puede considerarse como una oscilación “cuadrada”, donde $F(t) = F$, con $F = \text{constante} > 0$, durante la primer mitad del periodo y $F(t) = -F < 0$ para la segunda mitad, e identificando como la corriente neta al promedio de ambos casos:

$$\bar{J} = \frac{1}{2} (J(F) + J(-F)). \quad (3.56)$$

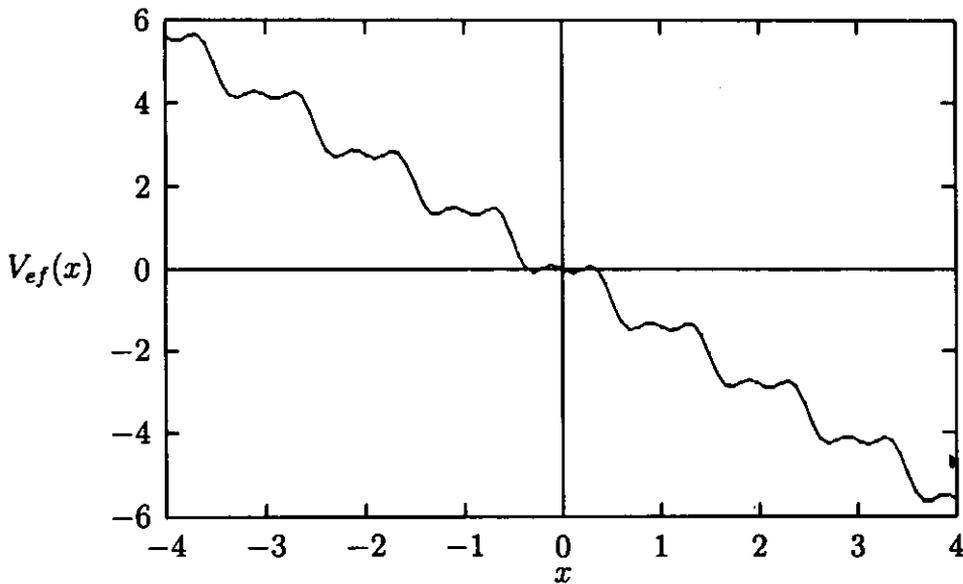


Figura 3.2: Potencial efectivo $V_{ef}(x)$ en el mínimo de la fuerza externa.

Obviamente podemos ver que se obtiene corriente, ya que durante intervalos de tiempo muy grandes lo que se está haciendo es “inclinarse” el potencial, lo cual es equivalente a empujar direccionalmente a la partícula (podemos imaginarla como una pelotita que cae rodando sobre los escalones formados de las barreras del potencial), produciéndose un movimiento unidireccional preferente; ya que en sentido contrario, el movimiento de la partícula se ve obstruido por la gran pendiente del

potencial a vencer. Se puede ver en las Figuras (3.2) y (3.3) los valores extremos del potencial efectivo $V_{ef}(x)$, para el caso de un potencial periódico asimétrico de la forma:

$$V(x) = \frac{5}{4\pi} \left[\sin(2\pi x) - \frac{1}{2}\sin(4\pi x) + \frac{1}{3}\sin(6\pi x) \right],$$

y una fuerza oscilatoria cuadrada de amplitud $F = 1.4$.

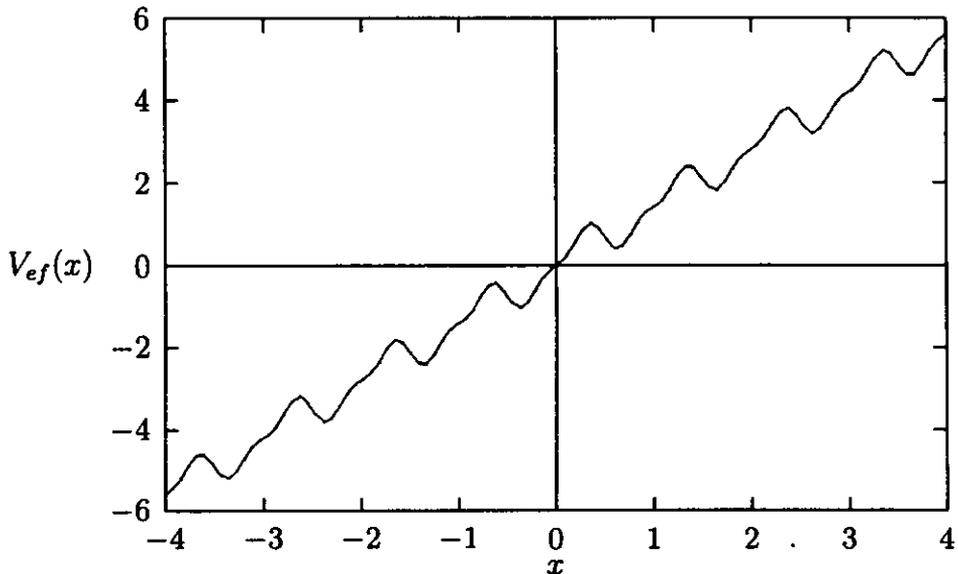


Figura 3.3: Potencial efectivo $V_{ef}(x)$ en el máximo de la fuerza externa.

Una observación que tenemos de esto, es que un potencial efectivo expresado como la Ec. (3.55), no permite realmente obtener una solución estacionaria, ya que para ello se requiere que el potencial tenga por lo menos un mínimo absoluto y lo que aquí se obtendrá es que la partícula tenderá a caerse indefinidamente, pues $V_{ef} \rightarrow \infty$ si $x \rightarrow \infty$, y entonces el sistema estará siempre perdiendo energía.

Esto es válido dentro de un intervalo de valores para la intensidad de la fuerza externa, es decir para valores menores a una cierta F_{min} no habrá corriente ya que la partícula no podrá salir de alguno de los pozos de potencial. Esto es debido a que la amplitud con la cual se pone a oscilar el potencial, no es suficiente para que la partícula pueda vencer cualquiera de las barreras del potencial que se le presenten. Por otra parte, si la intensidad de la fuerza es más grande que cierta F_{max} , tampoco obtendremos una corriente neta; esto es porque la partícula tendrá la fuerza suficiente para lograr vencer tanto las pendientes grandes como pequeñas de las barreras de potencial, pudiendo entonces moverse distancias del mismo orden tanto hacia un lado como hacia el otro, y obtendremos que en promedio el desplazamiento neto de la partícula es cero. Por lo tanto, para valores de la amplitud de la fuerza externa entre estos valores $F_{min} \leq F \leq F_{max}$, tenemos que cada vez que el potencial se incline en la dirección de las pendientes menores, la partícula podrá avanzar sobre cierto número de escalones, pero al cambiarse la dirección de inclinación la partícula quedará atrapada en alguno de los pozos, y cuando la inclinación cambie nuevamente la partícula avanzará otro tanto y así sucesivamente. Y entonces, obtenemos una corriente neta diferente de cero.

Sabemos, de la sección (3.4.3), que en presencia de fuentes térmicas, la densidad de probabilidad obedece una ecuación de Fokker-Planck en la forma de una ley de conservación para la probabilidad, Ec. (3.33):

$$\partial_t P(x, t) + \partial_x J(x, t) = 0, \quad (3.57)$$

donde $P(x, t)$ o $W(x, t)$ como llamamos anteriormente, es la distribución de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t y $J(x, t)$ es la corriente de probabilidad.

Para una fuerza $f(x) = -\partial_x V(x)$ y otra fuerza dependiente del tiempo $F(t)$, siempre y cuando esta última fuerza varíe lo suficientemente lenta, la corriente es [30]:

$$J(x, t) = -\frac{kT}{\gamma} \partial_x P(x, t) + [f(x) + F(t)]P(x, t). \quad (3.58)$$

Para la solución estacionaria $\partial_t P = 0$, tenemos que $J = \text{constante}$. Si $F(t) = 0$ y $V(x)$ es una función periódica (sin importar si es simétrica

o asimétrica) obtenemos que la corriente es $J = 0$, lo cual es válido si el ruido térmico es blanco. Al hacer uso de la ecuación generalizada de Langevin, nosotros hemos comprobado que aún con ruido térmico de color, en ausencia de fuerzas externas, obtenemos que la corriente es $J = 0$.

Entonces, si x es una variable que puede tomar cualquier valor, $-\infty < x < \infty$, y la fuerza es derivable de un potencial (de la forma que sea pero sin ninguna dependencia temporal), tenemos que la solución estacionaria es la solución de equilibrio térmico y la corriente es $J = 0$, con distribución de probabilidad dada por la distribución de Gibbs $P(x) \sim e^{-V(x)/kT}$.

Por otra parte, si extrapolamos la validez de las ecuaciones con x una variable de ángulo cuyo valor está entre $0 \leq x \leq \lambda$, es decir que podemos expresar la variable x en términos de $\theta = 2\pi x/\lambda$, con $0 \leq \theta \leq 2\pi$, tenemos que el sistema puede mostrar una corriente estacionaria $J \neq 0$, dependiendo de la fuerza que se le imponga.

Se ha mostrado [4], y lo hemos verificado con cuidado, que para el caso de una fuerza oscilatoria cuadrada de amplitud F y un potencial tipo dientes de sierra asimétrico de la forma (ver Figura 3.4):

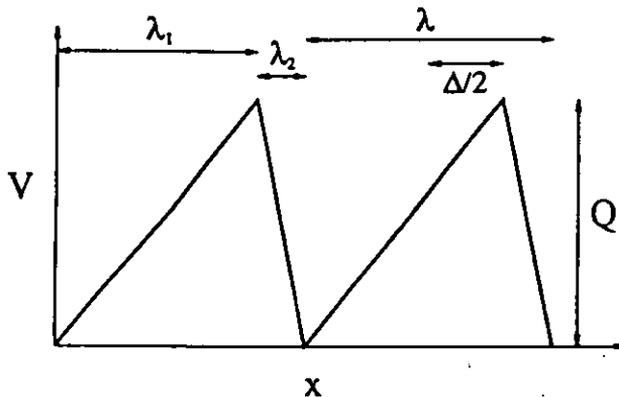


Figura 3.4: Potencial tipo dientes de sierra asimétrico $V(x)$, con $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ el periodo del potencial y $\Delta = \lambda_1 - \lambda_2$ la amplitud del rompimiento de simetría.

$$V(x) = \begin{cases} \frac{Q}{\lambda_1}x & \text{para } 0 \leq x \leq \lambda_1 \\ -\frac{Q}{\lambda_2}(x - \lambda) & \text{para } \lambda_1 \leq x \leq \lambda \end{cases} \quad (3.59)$$

donde Q es la amplitud del potencial, $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ es la longitud de onda del potencial, siendo λ_1 y λ_2 los segmentos para cada tipo de pendiente del potencial y $\Delta = \lambda_1 - \lambda_2$ es la amplitud del rompimiento de simetría (es decir si $\Delta = 0$ tenemos un potencial simétrico).

Magnasco propone que la solución a la Ec. (3.58) se puede expresar en términos de cuadraturas:

$$P(x) = \chi(x)P_h(x), \quad (3.60)$$

donde

$$P_h(x) = e^{[V(x) - xF]/kT} \quad (3.61)$$

y

$$\chi(x) = -\frac{J}{kT} \int_0^x dx' e^{[V(x') - x'F]/kT} + C. \quad (3.62)$$

Esta constante C se determina de la normalización de $P(x)$:

$$\int_{\lambda}^0 P(x)dx = 1. \quad (3.63)$$

Si requerimos que la solución sea periódica:

$$P(0) = P(\lambda), \quad (3.64)$$

obtenemos la siguiente solución completa:

$$\frac{kT(e^{\lambda F/kT} - 1)}{J} = \int_0^{\lambda} dx \int_0^{\lambda} dx' \exp\{[V(x') - V(x) - x'F + xF + \lambda F \Theta(x' - x)]/kT\}, \quad (3.65)$$

donde Θ es la función escalón (Heavyside step).

Para la forma del potencial del tipo dientes de sierra, Ec. (3.59), tenemos que la corriente de probabilidad se puede expresar como:

$$J(F) = \frac{P_1^2 \sinh\left(\frac{\lambda F}{2kT}\right)}{kT \left(\frac{\lambda}{Q}\right)^2 P_2 - \frac{\lambda}{Q} P_1 P_3 \sinh\left(\frac{\lambda F}{2kT}\right)}, \quad (3.66)$$

donde

$$P_1 = \left(1 - \frac{\Delta F}{2Q}\right)^2 - \left(\frac{\lambda F}{2Q}\right)^2,$$

$$P_2 = \cosh\left(\frac{Q - \Delta F/2}{kT}\right) - \cosh\left(\frac{\lambda F}{2kT}\right)$$

y

$$P_3 = \Delta + \frac{(\lambda^2 - \Delta^2) F}{4Q}.$$

Tenemos las siguientes observaciones para este modelo:

i) Satisfactoriamente, esta solución muestra que la corriente neta \bar{J} se hace cero si $F = 0$ o si el potencial es asimétrico. Sin embargo, es sólo válida para frecuencias externas pequeñas, $\omega_0 \rightarrow 0$ (límite adiabático), y no da ningún indicio sobre la inversión de corriente.

ii) La solución sólo es válida para x variable de ángulo; en ese caso, *no* es periodicidad lo que se exige sino que la función P sea univaluada, es decir, que como $x = 0$ y $x = \lambda$ es el *mismo* punto en el espacio, entonces $P(0) = P(\lambda)$. Esta exigencia, sin embargo, anula la interpretación de que la fuerza total que aparece en la ec. de Smoluchowski:

$$F_{ef}(x) = f(x) + F,$$

sea derivable de un potencial. Entonces si ponemos que:

$$F_{ef}(x) = -\partial_x V_{ef}(x) = -\partial_x [V(x) - xF],$$

tenemos un serio problema ya que el potencial efectivo *no* es univaluado y por lo tanto no obedece que: $V_{ef}(0) = V_{ef}(\lambda)$. Sin embargo, parece "capturar" el hecho de que si se *fuera* a la partícula hacia un lado (ya sea "inclinando" el potencial o no), la asimetría del potencial hace que sea más fácil el movimiento en una dirección. Por otra parte, tenemos que esta explicación da lugar sólo a corrientes positivas y nunca a corrientes negativas.

iii) Finalmente, como ya habíamos mencionado en la introducción de la tesis, este modelo del vaivén del potencial no muestra la dependencia con otras cantidades de interés, como por ejemplo la frecuencia

del forzamiento, la fricción, el tiempo de correlación del baño térmico, etc.

Como veremos en los siguientes capítulos, nuestro modelo incluye a los modelos mencionados como casos especiales, tal que nuestros resultados son consistentes con los de ellos. Es importante recalcar que el nuestro es el único que puede tomar en cuenta correlaciones finitas del baño térmico, es decir, incluir ruido térmico de color. Esta añadidura da como resultado que con sólo variar la frecuencia externa, manteniendo fijos *todos* los demás parámetros, obtenemos corrientes ya sea positivas, cero o negativas.

Capítulo 4

Corriente con ruido térmico de color.

4.1 Introducción

El propósito principal de este capítulo es tratar de aclarar bajo qué condiciones se presenta la corriente. Debido a las dificultades anteriormente descritas sobre el manejo de la ecuación generalizada de Langevin, los resultados que se muestran son de carácter numérico. A continuación se presenta el método empleado para resolver numéricamente la ecuación generalizada de Langevin, Ec. (3.36), cuyos programas empleados se muestran en los Apéndices A, B y C. Comenzamos describiendo el método numérico y la forma de generar ruido térmico correlacionado. Posteriormente apreciamos el efecto de trabajar con un potencial periódico asimétrico. Así también se dan a conocer los principales resultados obtenidos al considerar tiempos de correlación finitos τ_0 en el baño térmico, tomando los casos en que la fuerza externa es una fuerza oscilatoria determinista y cuando tenemos una fuerza externa aleatoria. En ambos casos la fuerza externa presenta promedio temporal cero $\langle F_{ext} \rangle = 0$. Estos resultados están contenidos en el artículo *Stochastic Ratchets with Colored Thermal Noise* [33] que re-

cientemente hemos publicado Víctor M. Romero y Laura A. Ibarra en la revista *Physical Review E*, en Octubre de 1997 (ver Apéndice E). Se ha mostrado que las correlaciones del baño son incapaces de inducir corriente (de acuerdo con la segunda ley de la Termodinámica) y se ha obtenido que las condiciones necesarias para la generación de la corriente son la asimetría del potencial y la dependencia temporal (simétrica) de la fuerza externa.

4.2 Método Numérico

Para el cálculo de la solución numérica de la ecuación generalizada de Langevin se elaboraron programas en lenguaje FORTRAN (ver Apéndices A y C) implementándose un algoritmo de Runge-Kutta de segundo orden basado en la definición de derivada:

$$\frac{dx(t)}{dt} \cong \frac{x(t) - x(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (4.1)$$

y en el desarrollo de Taylor hasta segundo orden de $x(t + \Delta t)$ y $x(t - \Delta t)$, de tal manera que obtenemos:

$$\frac{d^2x}{dt^2} \Delta t^2 \cong x(t + \Delta t) + x(t - \Delta t) - 2x(t). \quad (4.2)$$

Esta última expresión la sustituimos en la ec. generalizada de Langevin, Ec. (3.36), y discretizando el tiempo, con $t = n\Delta t$ donde $n = 1, 2, 3, \dots$, obtenemos:

$$\begin{aligned} m [x((n + 1)\Delta t) + x((n - 1)\Delta t) - 2x(n\Delta t)] = \\ -\Delta t^2 \sum_{j=1}^n \Delta t \Gamma((n - j)\Delta t) \left[\frac{x(j\Delta t) - x((j - 1)\Delta t)}{\Delta t} \right] \\ - \frac{dV(x(n\Delta t))}{dx} \Delta t^2 + f(n\Delta t) \Delta t^2 \\ + F_{ext}(n\Delta t) \Delta t^2. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Por lo tanto la posición de la partícula Browniana al tiempo $t + \Delta t$ queda en función de la posición a dos tiempos anteriores t y $t - \Delta t$.

Escribiendo en cantidades adimensionales, tenemos entonces:

$$\begin{aligned} \tilde{x}((n+1)\Delta\tilde{t}) &= 2\tilde{x}(n\Delta\tilde{t}) - \tilde{x}((n-1)\Delta\tilde{t}) \\ &- \frac{1}{\tilde{m}} \sum_{j=1}^n \tilde{\Gamma}((n-j)\Delta\tilde{t}) [\tilde{x}(j\Delta\tilde{t}) - \tilde{x}((j-1)\Delta\tilde{t})] \Delta\tilde{t}^2 \\ &- \frac{1}{\tilde{m}} \frac{d\tilde{V}(\tilde{x}(n\Delta\tilde{t}))}{d\tilde{x}} \Delta\tilde{t}^2 + \frac{1}{\tilde{m}} \tilde{f}(n\Delta\tilde{t}) \Delta\tilde{t}^2 + \frac{1}{\tilde{m}} \tilde{F}_{ext}(n\Delta\tilde{t}) \Delta\tilde{t}^2, \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde $\tilde{m} = m/m_0$, $\tilde{x} = x/\lambda$, $\tilde{t} = t/t_N$, $\tilde{V} = V/V_0$, $\tilde{f} = \frac{\lambda}{V_0} f$, $\tilde{F}_{ext} = \frac{\lambda}{V_0} F_{ext}$ y $\tilde{\Gamma} = \frac{\lambda^2}{V_0} \Gamma$. Es decir, las unidades del sistema con el que trabajamos, se escalan con:

1. La amplitud del potencial V_0 (en unidades de energía).
2. La masa de la partícula m_0 (en unidades de masa).
3. El periodo espacial del potencial periódico λ (en unidades de longitud).

Las cuales nos definen un tiempo natural del sistema como $t_N = \sqrt{\frac{m_0 \lambda^2}{V_0}}$. A partir de ahora, todas las cantidades son en unidades reducidas usando estas variables (por simplicidad omitiremos el símbolo tilde sobre cada una de las variables).

Por otra parte tenemos que, para que $f(t)$ sea una fuerza estocástica con promedio cero,

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (4.5)$$

y su función de correlación temporal esté dada por, Ec. (3.38):

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \frac{kT\gamma}{\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}, \quad (4.6)$$

la fuerza estocástica $f(t)$ la podemos expresar como:

$$f(t) = \frac{\sqrt{2kT\gamma}}{\tau_0} \int_{-\infty}^t dt' e^{-|t-t'|/\tau_0} \xi(t'), \quad (4.7)$$

donde $\xi(t)$ es una variable estocástica gaussiana con momentos:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t') \quad \text{y} \quad \langle \xi(t) \rangle = 0. \quad (4.8)$$

Sustituyendo estas ecuaciones en la Ec. (4.7) recuperamos las expresiones (4.5) y (4.6). El propósito de introducir la variable $\xi(t)$ es que ésta puede ser fácilmente calculada por medio de un generador de números aleatorios descorrelacionados entre sí. En particular, hicimos uso de un generador de números aleatorios con distribución Normal [34]; en el Apéndice B se puede ver la subrutina utilizada de dicho generador para los programas principales.

Discretizando la integral (4.7), obtenemos finalmente que la fuerza estocástica puede calcularse como:

$$f(n\Delta t) = \frac{\sqrt{2kT\gamma}}{\tau_0} \sqrt{\Delta t} \sum_{j=-\infty}^n e^{-(n-j)\Delta t/\tau_0} \tilde{\xi}(j\Delta t), \quad (4.9)$$

siendo $\tilde{\xi}$ el ruido gaussiano de manera adimensional.

Cada resultado fue obtenido a partir de 100 realizaciones de la fuerza estocástica $f(t)$, con corridas de 900,000 pasos temporales de tamaño $\Delta t = 0.01$. Para asegurarnos de que no hay corrientes espurias debido al uso de generadores de números pseudo-aleatorios, se verificó, como se verá más adelante, que cuando no hay un campo de potencial o cuando se trabaja con un potencial simétrico, en presencia de una fuerza externa simétrica dependiente del tiempo, no se produce corriente.

Por otra parte, se programaron Shell Scripts en UNIX para obtener una automatización de los cálculos y una más rápida generación de resultados; puede verse un ejemplo de estos Scripts en el Apéndice D.

De la función de correlación de la fuerza estocástica, Ec. (4.6), y del Teorema Fluctuación-Disipación, Ec. (3.20):

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2kT\Gamma(t - t'). \quad (4.10)$$

Al compararlas obtenemos la expresión:

$$\Gamma(t - t') = \frac{\gamma}{2\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}, \quad (4.11)$$

donde γ es el coeficiente de fricción.

De tal manera que el kernel de fricción para tiempos de correlación muy pequeños, tiende a:

$$\Gamma(t) = \frac{\gamma}{2\tau_0} e^{-t/\tau_0} \xrightarrow{\tau_0 \rightarrow 0} \gamma \delta(t). \quad (4.12)$$

Es importante recordar que el uso de un kernel de disipación $\Gamma(t)$, con o sin memoria, depende de las escalas de tiempo de evolución de lo que uno considera sea el “sistema” y el “baño”. En realidad, como sabemos, un baño térmico es siempre de color. Sin embargo, si las escalas de tiempo de evolución son tales que uno es capaz de aproximar el baño como un baño blanco, en comparación con las escalas de tiempo del sistema, la descripción se convierte en Markoviana. Esto propiamente nos da acceso a una descripción matemática más completa de la dinámica del sistema que si se mantienen las correlaciones temporales finitas del baño térmico. Pero ciertamente, si las escalas de tiempo del sistema y el baño son comparables, entonces uno debe enfrentar el carácter no-Markoviano de las correspondientes ecuaciones dinámicas.

4.3 Matraca Estocástica con Ruido Térmico de Color

Como hemos visto, la solución de la ecuación de Langevin generalizada, Ec. (3.36), depende de varios parámetros: m la masa de la partícula, V_0 la amplitud del potencial asimétrico, λ el periodo del potencial, τ_0 el tiempo de correlación o tiempo de “memoria” del baño, γ el coeficiente de fricción del medio y T la temperatura del baño.

Para propósitos de comparación hemos usado como fuerzas externas, por una parte, una fuerza oscilatoria determinista sistemática y por otra parte, consideramos el caso en que $F_{ext}(t)$ es una fuerza estocástica y simétrica en el tiempo. Por lo tanto, si consideramos una fuerza externa determinista oscilatoria $F_{ext}(t)$, tenemos otros dos parámetros libres, la intensidad de la fuerza externa F_0 y la frecuencia de oscilación ω_0 ; o si el campo externo es estocástico, debemos especificar al menos su intensidad F_0 y su tiempo de correlación τ_{ext} .

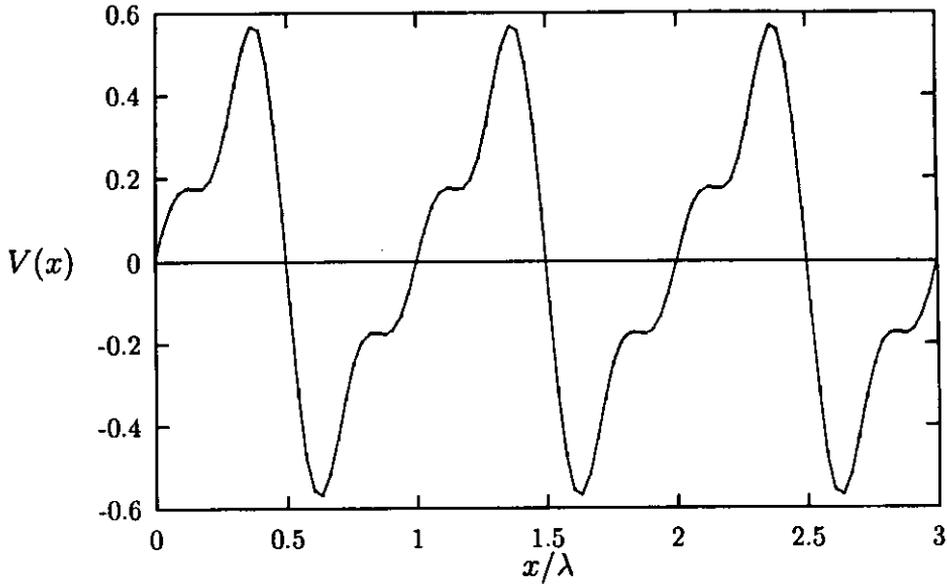


Figura 4.1: Potencial periódico asimétrico $V(x)$ considerado.

El potencial considerado en la ecuación generalizada de Langevin, es un potencial periódico asimétrico (conocido como *Potencial Ratchet* o de *matraca*) de forma sencilla [7], como el mostrado en la Figura (4.1), el cual podemos expresarlo como:

$$V(x) = V_0 \frac{5}{4\pi} \left[\sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{4\pi x}{\lambda}\right) + \frac{1}{3} \sin\left(\frac{6\pi x}{\lambda}\right) \right], \quad (4.13)$$

donde V_0 es la amplitud del potencial y λ su periodo.

Por conveniencia hemos mantenido constante durante todo el análisis m_0 la masa de la partícula, V_0 la amplitud del potencial y λ la longitud de onda del potencial periódico, y hemos variado el resto de los parámetros: τ_0 el tiempo de correlación del baño térmico, γ el coeficiente de fricción del medio, T la temperatura del baño y τ_{ext} el tiempo de correlación de la fuerza externa o F_0 la intensidad de la fuerza externa y ω_0 su frecuencia de oscilación. De tal manera que el tiempo característico t_N es del orden de la unidad ($t_N \sim 1$), así como sus energías.

Como veremos en las siguientes subsecciones, a través de soluciones numéricas de la ecuación generalizada de Langevin, *no* se observa una corriente neta en la ausencia de fuerzas externas, es decir si $F_{ext}(t) = 0$ en la Ec. (3.36). No obstante, y ésto fue realmente inesperado [4], si uno agrega una fuerza externa *simétrica en el tiempo*, el sistema presenta una corriente neta, en general. Un resultado novedoso aquí es el hecho de que si el tiempo de correlación de la fuerza externa es aún más corto que el del baño térmico se produce una corriente.

Para decidir si existe o no una corriente en el sistema, hemos analizado principalmente el comportamiento de la posición promedio de la partícula como función del tiempo, $\langle x(t) \rangle$. Este promedio de ensemble es calculado sobre muchas realizaciones de la fuerza térmica estocástica y del ruido externo cuando éste es también estocástico. Si $\langle x(t) \rangle = 0$ entonces no hay corriente, pero si $\langle x(t) \rangle \neq 0$ la partícula presenta arrastre.

Para la fuerza externa oscilatoria usamos una de la forma:

$$F_{ext}(t) = F_0 \cos(\omega_0 t), \quad (4.14)$$

con F_0 la intensidad de la fuerza externa y ω_0 la frecuencia de oscilación, siendo éstas constantes y arbitrarias.

Debido a que queremos encontrar cuándo existe corriente y cuándo no, analizaremos varios casos:

4.3.1 Ausencia de corriente para $F_{ext}(t) = 0$

Para empezar mostramos en la Figura (4.2) la gráfica de 10 caminantes al azar o realizaciones de la partícula Browniana en un potencial periódico asimétrico, pero en ausencia de fuerza externa y con tiempo de correlación finito, bajo las mismas condiciones iniciales. Por otro lado, podemos constatar en la Figura (4.3) que el desplazamiento medio de la partícula es cero, no así su desviación cuadrática media que va aumentando a través del tiempo, mostrando el carácter difusivo de la partícula Browniana. En este caso tenemos el promedio de ensemble

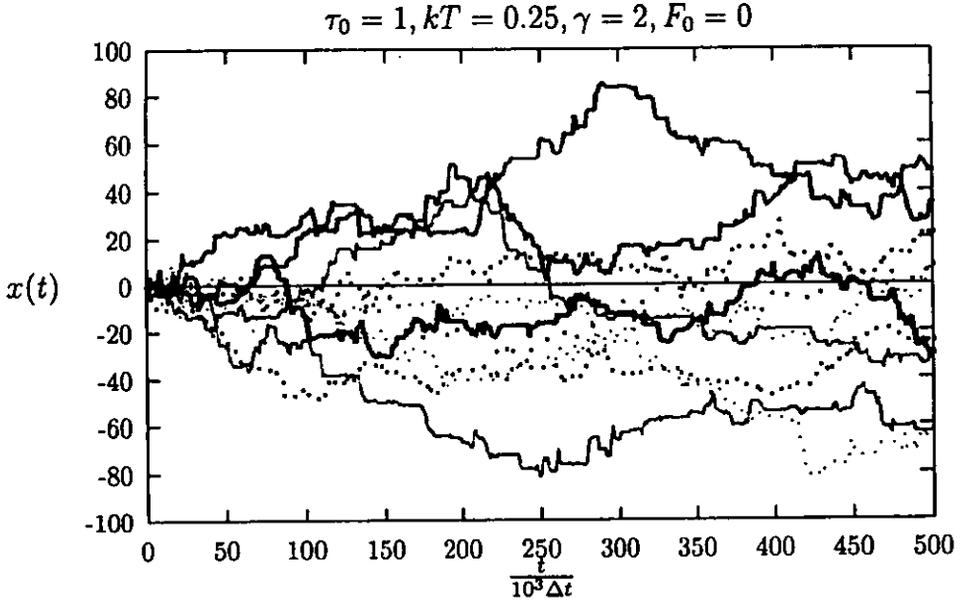


Figura 4.2: 10 realizaciones de la fuerza estocástica en ausencia de fuerza externa.

$\langle x \rangle$ para 300 realizaciones, la cual se ve claramente que se superpone a la línea $x = 0$.

Nótese que sí existe una clara difusión; esto implica, a su vez, que la temperatura usada $T = 0.25$ no es despreciable y que juega un papel importante.

De estas dos figuras podemos concluir que no existe corriente en ausencia de fuerzas externas dependientes del tiempo aún cuando las fluctuaciones del baño están *correlacionadas* en el tiempo (con $\tau_0 \neq 0$). Todo esto en concordancia con la Segunda Ley, de que no se puede extraer una corriente neta solamente partiendo de un baño térmico

aunque éste sea “blanco” o de “color”. Obviamente no importa que el potencial sea asimétrico.

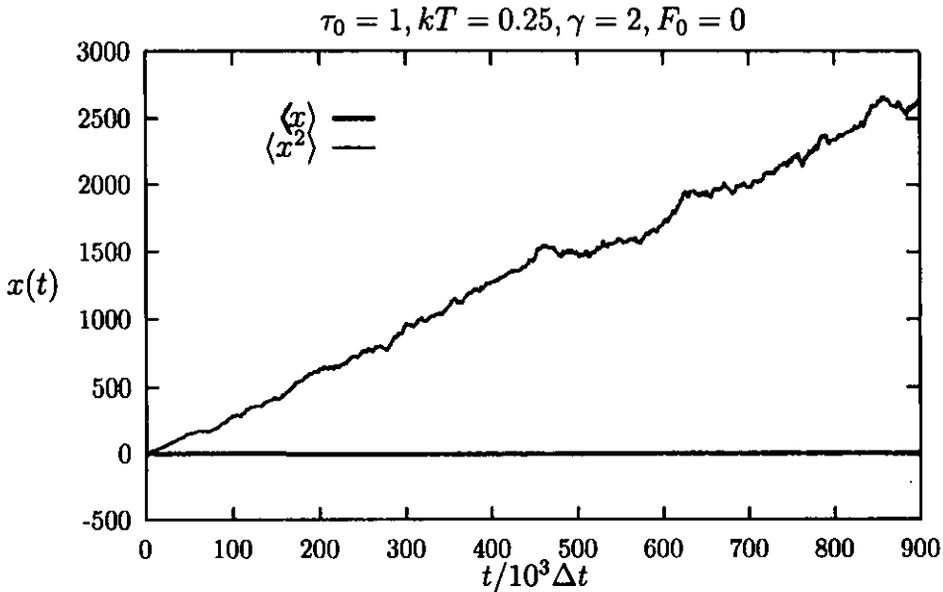


Figura 4.3: Posición promedio de la partícula $\langle x \rangle$ y su desviación cuadrática media $\langle x^2 \rangle$.

4.3.2 Dependencia en la asimetría del potencial $V(x)$

En la Figura (4.4) mostramos el promedio de la posición como función del tiempo $\langle x(t) \rangle$ en presencia de la fuerza externa oscilatoria, Ec. (4.14), pero para diferentes potenciales:

1. En primer lugar un potencial periódico asimétrico de la forma dada por la Ec. (4.13) con $V_0 = 1.0$.
2. En ausencia completa del potencial de interacción $V(x) = 0$ (haciendo $V_0 = 0$).

3. Considerando el caso de un potencial periódico pero ahora simétrico, por ejemplo de la forma:

$$V_{sim}(x) = V_0 \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right), \quad (4.15)$$

con $V_0 = 1.0$.

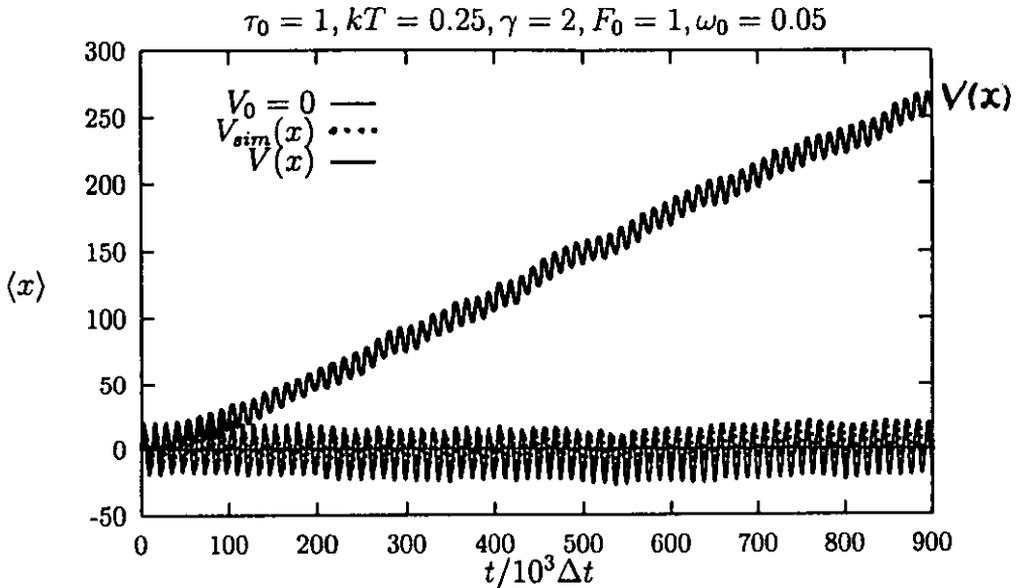


Figura 4.4: Desplazamiento medio de la partícula $\langle x \rangle$ en presencia de un potencial periódico asimétrico $V(x)$, de un potencial simétrico $V_{sim}(x)$ y en ausencia de potencial ($V_0 = 0$).

De aquí, observamos que existe arrastre neto, i.e. $\langle x(t) \rangle \neq 0$, sólo para el caso asimétrico. El desplazamiento medio de la partícula Browniana se anula para el caso simétrico, al igual que para el caso en que no tenemos fuerzas derivables de un potencial, $V_0 = 0$. Todo esto en presencia de una fuerza externa oscilatoria simétrica. Nótese que existen oscilaciones cuya frecuencia es igual a ω_0 , la frecuencia de la fuerza externa; regresaremos a este punto más adelante.

4.3.3 Dependencia en la intensidad de la fuerza externa oscilatoria.

En la Figura (4.5) se muestra el desplazamiento promedio de la partícula en presencia de un potencial periódico asimétrico dado por Ec. (4.13) y con una fuerza externa senosoidal periódica dada, Ec. (4.14). Las diferentes curvas corresponden a distintas intensidades de la fuerza externa F_0 . Aquí hemos incluido también el caso cuando no hay fuerza externa, es decir $F_0 = 0$, y encontramos que no hay corriente neta. Podemos apreciar como la presencia de una fuerza externa de este tipo, produce un arrastre en la partícula acoplándola a su frecuencia de oscilación.

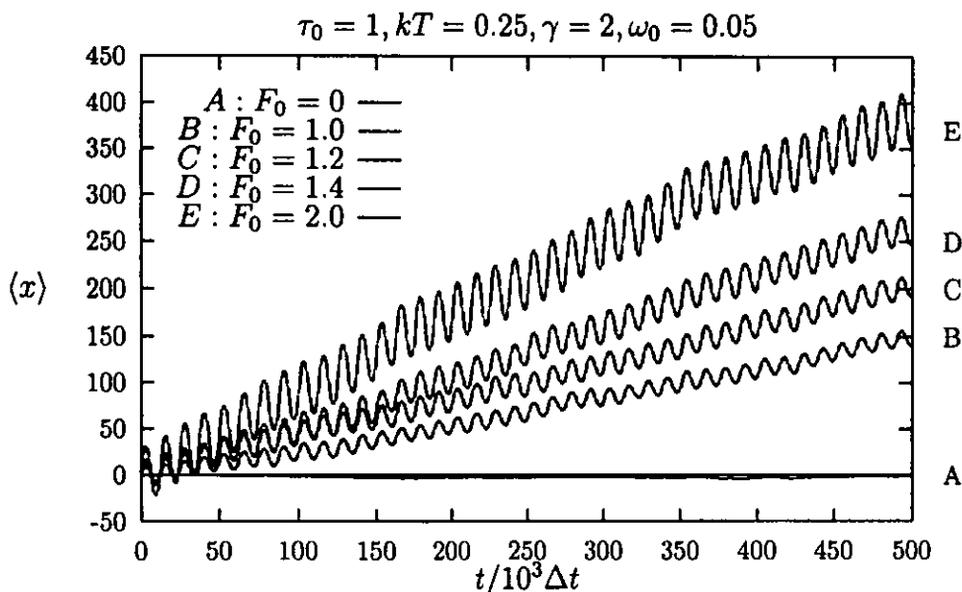


Figura 4.5: Posición promedio de la partícula Browniana para diferentes intensidades de la fuerza externa F_0 .

4.3.4 Dependencia en la frecuencia. Inversión y filtración

En la Figura (4.6) tenemos el comportamiento obtenido al variar la frecuencia ω_0 de la fuerza externa y quisieramos señalar las notables oscilaciones de la posición promedio $\langle x(t) \rangle$. La frecuencia de estas oscilaciones corresponde, dentro de los errores estadísticos, a la frecuencia ω_0 de la fuerza externa. Si no hubiera potencial tendríamos que la ecuación de Langevin utilizada sería lineal, presentándose las oscilaciones de la fuerza externa en el comportamiento de la partícula Browniana. Curiosamente puede observarse en la figura que se obtiene inversión de la corriente cuando la frecuencia externa es grande.

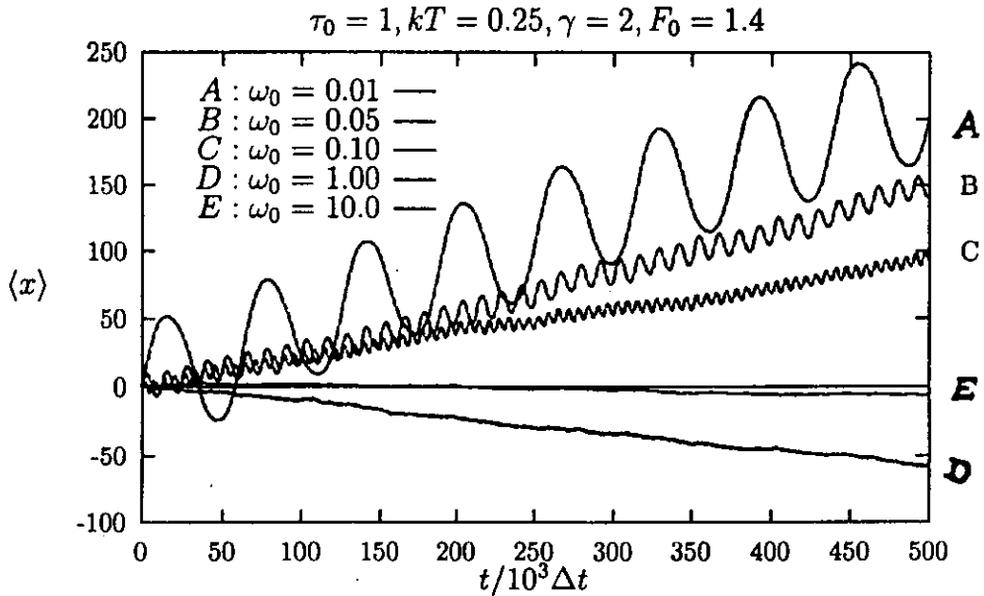


Figura 4.6: Posición promedio de la partícula Browniana para diferentes valores de la frecuencia externa ω_0 .

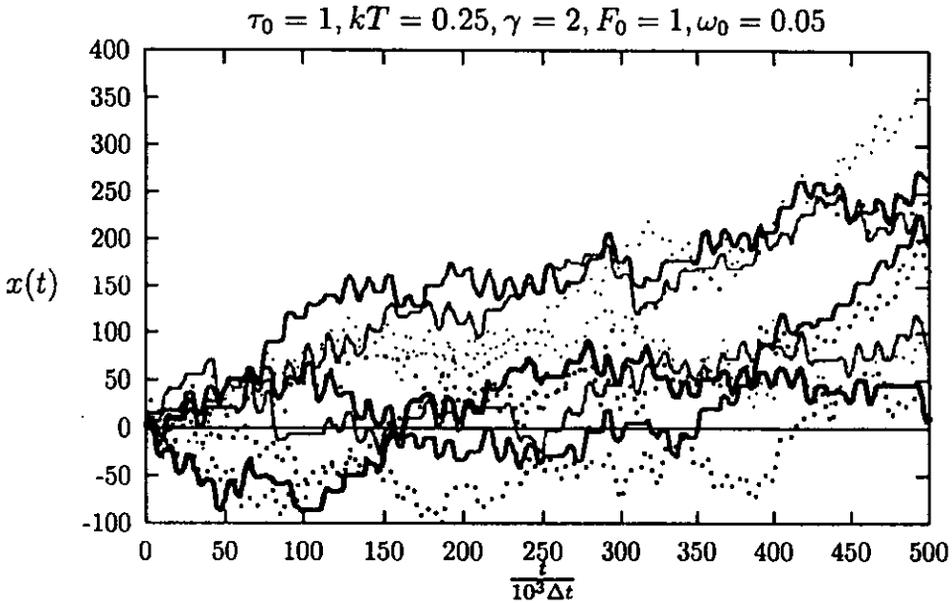


Figura 4.7: 10 realizaciones de la partícula Browniana en un baño térmico de color y en presencia de una fuerza externa.

Por comparación, queremos mostrar en la Figura (4.7), el “camionante al azar” $x(t)$ de 10 corridas, correspondientes a diferentes realizaciones del ruido térmico para una τ_0 , F_0 y ω_0 dados. Uno difícilmente podría esperar que a partir de esta figura, el promedio $\langle x(t) \rangle$ mostrara un claro filtramiento de la frecuencia de forzamiento, dado al hecho de que estamos trabajando con un sistema altamente no-lineal. La dispersión presente en la figura muestra que la temperatura no es baja, lo cual hace menos obvio ver la filtración de la frecuencia externa. En el siguiente capítulo se hará un estudio detallado del caso de fuerza externa oscilatoria.

4.3.5 Dependencia en el tiempo de correlación del baño térmico.

En la Figura (4.8) tenemos la posición promedio de la partícula para diferentes valores del tiempo de correlación del baño térmico o memoria τ_0 . Podemos ver que en general hay un arrastre neto para prácticamente todos los casos. Es importante hacer notar el comportamiento no-monotónico de la corriente como función del tiempo de memoria τ_0 , para una fuerza externa fija. El caso $\tau_0 \rightarrow 0$ corresponde al de un baño blanco. Podemos observar que cuando el baño tiene un tiempo de correlación muy largo ($\tau_0 = 100$), el arrastre de la partícula llega a ser muy ineficiente.

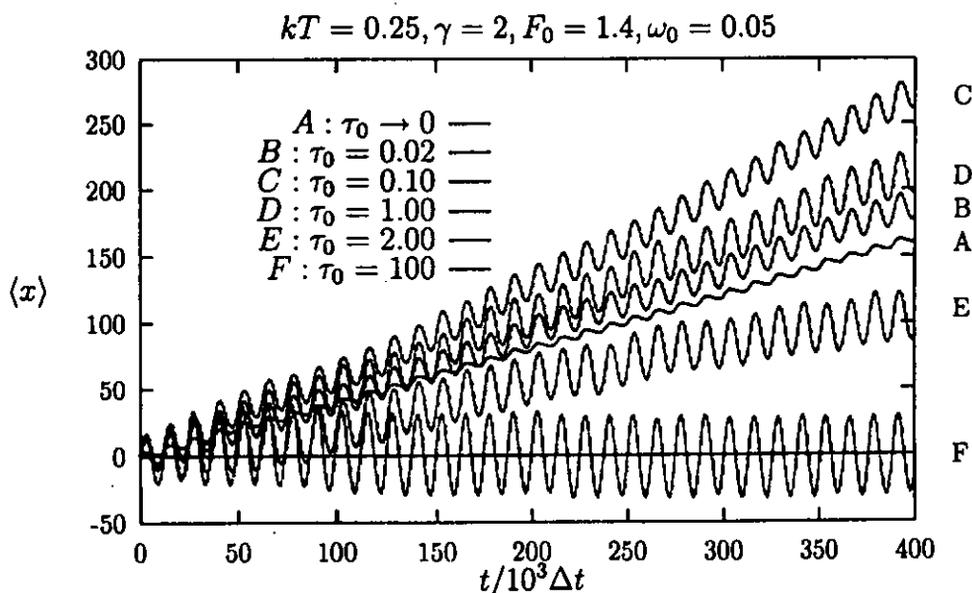


Figura 4.8: Posición promedio de la partícula Browniana para diferentes tiempos de correlación del baño térmico τ_0 .

4.4. MATRACA ESTOCÁSTICA CON FUERZA EXTERNA ALEATORIA

4.4 Matraca Estocástica con Fuerza Externa Aleatoria

Ahora discutiremos el caso en el cual la fuerza externa $F_{ext}(t)$ es estocástica. Consideramos que tal fuerza presenta una distribución Gaussiana con media cero $\langle F_{ext}(t) \rangle = 0$ y con la siguiente función de correlación:

$$\langle F_{ext}(t)F_{ext}(t') \rangle = F_0^2 \frac{1}{2\tau_{ext}} e^{-|t-t'|/\tau_{ext}}. \quad (4.16)$$

Los resultados son mostrados en la Figura (4.9). Las diferentes curvas corresponden a distintos tiempos de correlación τ_{ext} de la fuerza externa.

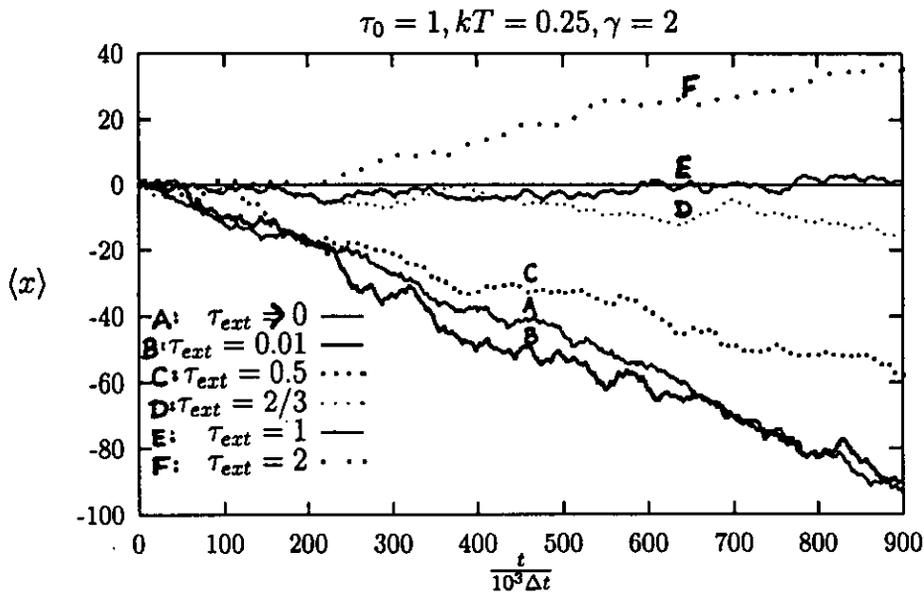


Figura 4.9: Posición promedio de la partícula Browniana para diferentes tiempos de correlación de la fuerza externa τ_{ext} , con tiempo de correlación del baño térmico fijo ($\tau_0 = 1$).

Tres principales observaciones pueden ser concluidas a partir de aquí: Primero, si el tiempo de correlación de la fuerza externa es igual al tiempo de correlación del baño, $\tau_{ext} = \tau_0$, no hay corriente (tal como debería ser, ya que la matraca estocástica llega a estar en contacto con un ruido coloreado simple). En este caso tenemos que, la fuerza externa más la fuerza térmica es equivalente a incrementar la intensidad del ruido térmico, como puede verse de las Ecs. (4.6), (4.10) y (4.16); esto es completamente análogo al caso de un baño blanco con una fuerza externa delta-correlacionada, como se mostró en las referencias [4, 7]. Segundo, para tiempos de correlación externos más largos que el tiempo de correlación térmico, $\tau_{ext} > \tau_0$, la situación podría aproximarse a la de un baño blanco en presencia de una fuente externa coloreada: Debe haber una corriente “positiva” en este caso, como ya ha sido demostrado en las referencias [4, 6, 7]. Por corriente positiva queremos expresar que es aquella que se produce en la dirección de inclinación del potencial asimétrico (en nuestro caso, por la forma del potencial considerado, la corriente positiva sería cuando la partícula presenta un arrastre hacia la derecha). Y tercero, siendo novedoso ya que los trabajos previos realizados no habían incluido un término de memoria del baño, tenemos que para tiempos de correlación externos *más cortos* que el tiempo de correlación térmico, $\tau_{ext} < \tau_0$, se presenta también corriente. Es importante señalar que la corriente en este último caso es “negativa” o “invertida”. El origen de esta inversión, no explicada aquí, es claramente diferente a la inversión de corriente encontrada en previos estudios [6, 7, 8, 11].

Un caso interesante es aquel de un baño térmico *coloreado*, $\tau_0 \neq 0$, con una fuerza externa *delta-correlacionado* o *blanca*, $\tau_{ext} \rightarrow 0$. Encontramos que la matraca estocástica se mueve, como se muestra en la Figura (4.9); en otras palabras, la matraca estocástica es capaz de rectificar aún un ruido externo *delta-correlacionado* simétrico. Este resultado indica que la única condición necesaria para que un sistema térmico muestre corriente es que el potencial $V(x)$ sea asimétrico.

El presente estudio con memoria nos ha indicado que el fenómeno de producción de corriente se debe principalmente a la asimetría del potencial y a la presencia de una fuerza externa (simétrica) dependiente del tiempo. Ya que en ausencia de una fuerza externa no obtendríamos corriente sino sólo difusión de la partícula Browniana.

El estudio de un sistema con un baño térmico de color, con memoria y con fuerzas externas dependientes del tiempo (aún aquellas que son delta-correlacionadas) pueden solamente ser estudiadas haciendo uso de una ecuación de Langevin *generalizada*, tal como la Ec. (3.36).

El estudio de este fenómeno con otros modelos límites, tal como la explicación del vaivén del potencial, muestra que no es obvio el por qué ocurre la corriente cuando se tiene inversión, así como su dependencia no trivial con la frecuencia de oscilación externa. Todo esto nos indica que el fenómeno es más complicado, lo cual nos ha motivado a realizar un estudio con más detalle de los diferentes parámetros en cuestión, para el caso de una fuerza externa oscilatoria. Estos resultados se muestran en el siguiente capítulo para el estudio de inversión de corriente.

Capítulo 5

Inversión de Corriente

5.1 Introducción

En el capítulo anterior los resultados que se obtuvieron muestran que el fenómeno de la producción de corriente dista de estar completamente entendido; sin embargo, el modelo aquí considerado es lo bastante rico para estudiarlo con más detalle. El aspecto que despierta el mayor interés es la aparición de una corriente en la dirección contraria al movimiento preferencial de la partícula (*corriente invertida*). Se ha visto en estudios realizados que la variación de uno de los parámetros del modelo puede llegar a producir inversión de corriente; esto fue observado desde el modelo original propuesto por Feynman [13]. Por ejemplo, se ha encontrado inversión de corriente al variar el potencial asimétrico $V(x)$ en el límite sobreamortiguado ($\gamma \gg m$) [6, 11], o al variar la fuerza externa F_{ext} en ausencia de términos estocásticos [19], o considerando términos de fluctuaciones fuera de equilibrio [7]. Sin embargo, el fenómeno en sí, no es aún bien entendido.

Por nuestra parte, en el modelo que estamos analizando se puede apreciar que se da una competencia entre los tiempos involucrados del sistema, dando lugar, de manera general, a corrientes tanto positivas como negativas. Para ilustrar este comportamiento general, a ser analizado con más detalle, mostramos la Figura (5.1), donde se grafica la posición promedio de la partícula como función del tiempo, $\langle x(t) \rangle$,

para una fuerza externa oscilatoria.

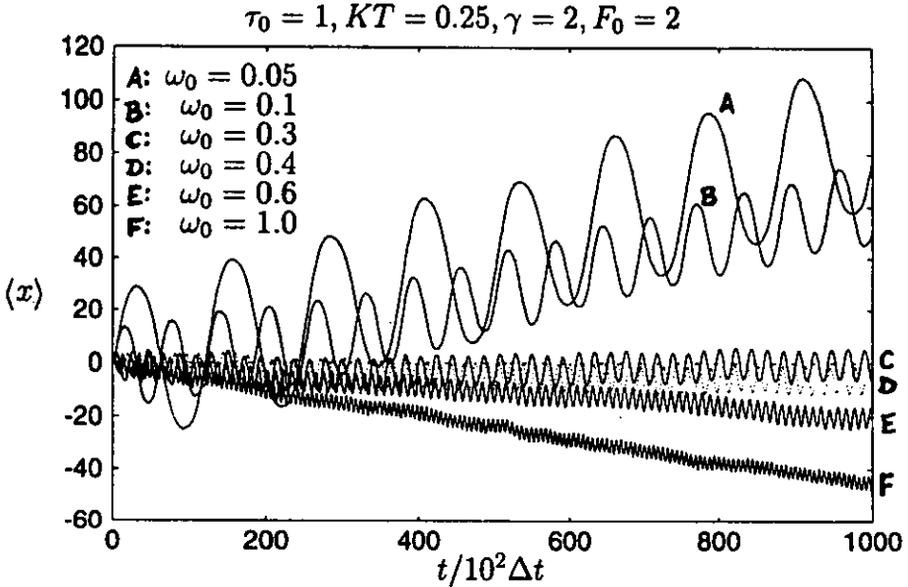


Figura 5.1: Promedio de la posición de la partícula para frecuencias bajas.

En dicha Figura (5.1) podemos observar, además del filtramiento de la frecuencia externa mencionado en el capítulo anterior, el fenómeno de la inversión de corriente. Notamos que conforme la frecuencia es más baja el arrastre ocurre siempre en la dirección positiva. Esto podría sugerir que la explicación sencilla, basada en el vaivén del potencial [17], es correcta; sin embargo, insistimos, dicho razonamiento es incapaz de explicar la inversión a frecuencias “altas”. Sin embargo, cabe la posibilidad de que otro mecanismo sea el responsable de la inversión de corriente en esta región.

Por lo tanto, la finalidad del presente capítulo es el realizar un estudio sistemático del caso en que se tiene una fuerza externa oscilatoria del tipo $F_{ext}(t) = F_0 \cos(\omega_0 t)$, Ec. (4.14), y así, poder analizar los cambios en la corriente al variar los diferentes parámetros involucrados en

5.2. PARÁMETROS RELEVANTES Y DEFINICIÓN DE CORRIENTE 75

la ecuación de Langevin Generalizada, Ec. (3.36). Todo esto con el propósito de encontrar algún indicio respecto al origen de la inversión de corriente.

5.2 Parámetros relevantes y definición de corriente

El sistema que estamos estudiando corresponde al de una partícula de masa m en presencia de un potencial $V(x)$ y sujeto a una fuerza de fricción y a una fuerza aleatoria $f(t)$ provenientes del baño térmico en el que se encuentra inmersa, así como a una fuerza externa $F_{ext}(t)$ independiente del medio. Esto da lugar a 8 parámetros que podemos clasificar en tres grupos:

Parámetros del sistema:

$$\begin{array}{ll} m & \text{masa de la partícula,} \\ V_0 & \text{amplitud del potencial (energía),} \\ \lambda & \text{periodo del potencial (longitud).} \end{array} \quad (5.1)$$

Parámetros del baño térmico:

$$\begin{array}{ll} kT & \text{Temperatura,} \\ \gamma & \text{coeficiente de fricción,} \\ \tau_0 & \text{tiempo de correlación del baño.} \end{array} \quad (5.2)$$

Parámetros de la fuerza externa:

$$\begin{array}{ll} F_0 & \text{Intensidad de la fuerza,} \\ \omega_0 & \text{frecuencia de forzamiento.} \end{array} \quad (5.3)$$

Debido a que queremos que el sistema mecánico de la matraca no varíe durante todo el análisis, se mantuvieron fijos los 3 primeros parámetros: m , V_0 y λ y los utilizamos para adimensionalizar los demás. Esto nos deja 5 parámetros (adimensionales) variables, 3 del entorno o

baño térmico (kT , γ y τ_0) y 2 externos (F_0 y ω_0). Notamos además que existen varios tiempos característicos asociados, cuyos valores relativos deben jugar un papel importante. Estos tiempos son:

1. Tiempo natural del sistema:

$$t_N = \sqrt{\frac{m\lambda^2}{V_0}} \equiv 1 \quad (5.4)$$

Este tiempo, por suposición, es igual a 1 y todos los demás se miden con respecto a él.

2. En ausencia de interacción con el baño y la fuerza externa, la energía E de la partícula se conserva y existen periodos de oscilación dentro del potencial ($|E| < V_0$). Típicamente, estos tiempos son $\tau_{osc} \simeq 1.7$ para $E = 0$, hasta $\tau_{osc} \simeq 6.76$ para la parte superior del potencial $E \approx V_0$. Lo relevante aquí es que son tiempos del orden de 1.
3. Tiempo de relajamiento de la partícula. Aunque la presencia de la memoria del baño hace un poco más difícil identificar exactamente el tiempo de relajamiento, lo podemos seguir estimando como el caso sin memoria:

$$\tau = \frac{m}{\gamma}. \quad (5.5)$$

4. Tiempo de correlación del baño térmico, τ_0 .
5. Periodo externo de forzamiento, $\tau_{ext} = 2\pi/\omega_0$.

Aunque, estrictamente, podemos asociar un tiempo característico con la temperatura, de manera similar al tiempo natural t_N , en este problema parece no jugar un papel esencial dado que la temperatura sólo aparece como la intensidad de la fuerza estocástica, i.e. $f(t) \sim \sqrt{kT}$. De hecho, como veremos adelante, existe inversión de corriente como función de la variación de los tiempos τ_0 , m/γ y ω_0^{-1} ; la temperatura y la intensidad de la fuerza externa tienden a aumentar o disminuir la corriente pero no a invertirla.

Como mencionamos en capítulos anteriores, no es obvio como calcular la generalización de la corriente para el presente caso, dada la no-Markovianidad del problema. Por lo tanto, para propósitos de comparación, definimos una "corriente" por:

$$J \equiv \frac{d\langle x \rangle}{dt}. \quad (5.6)$$

Esta función es una medida del arrastre de la partícula y nos da la pendiente del promedio de la posición de la partícula Browniana, para diferentes realizaciones de la fuerza estocástica $f(t)$. Esta corriente es calculada bajo las mismas condiciones iniciales de $x_0 = 0$ y $v_0 = 0.1$.

Los resultados que a continuación se muestran corresponden a 100 realizaciones de la fuerza estocástica $f(t)$ con corridas de 100,000 pasos temporales de tamaño $\Delta t = 0.01$.

Los cálculos para la corriente J fueron obtenidos a partir de valores de la frecuencia externa ω_0 entre $0.05 \leq \omega_0 \leq 10$.

En las siguientes secciones mostramos los resultados al dividir su estudio en parámetros del baño térmico y en parámetros externos.

5.3 Variación de la Fuerza Externa.

La fuerza externa considerada en el presente capítulo es de la forma de una fuente externa oscilatoria

$$F_{ext}(t) = F_0 \cos(\omega_0 t), \quad (5.7)$$

con F_0 la intensidad de la fuerza externa y ω_0 la frecuencia de oscilación.

A continuación se presentan los resultados correspondientes al variar la intensidad de la fuerza externa F_0 y la frecuencia externa ω_0 . En todos los casos, se mantuvieron constantes el coeficiente de fricción $\gamma = 2.0$, la temperatura del baño térmico $kT = 0.25$ y el tiempo de correlación del baño $\tau_0 = 1.0$.

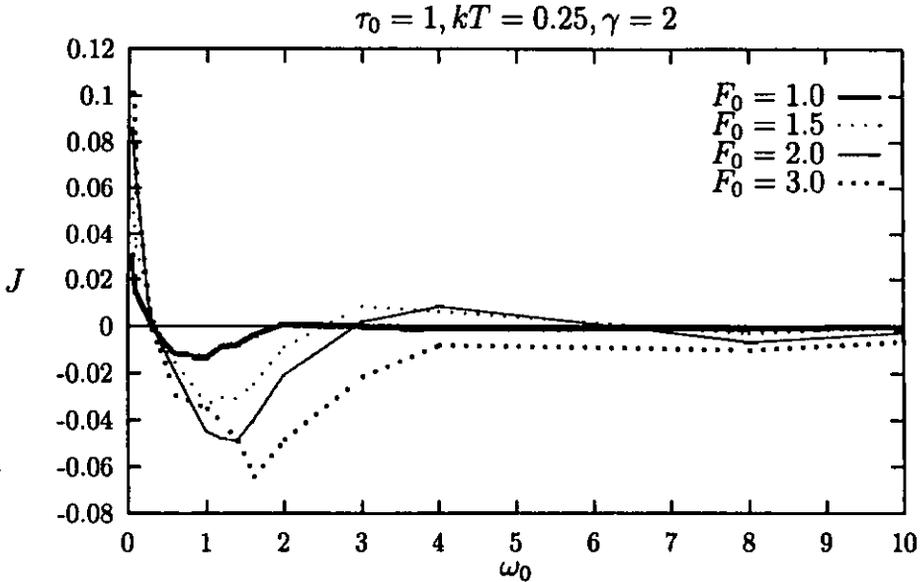


Figura 5.2: Corriente para intensidades de la fuerza externa entre $1 \leq F_0 \leq 3$.

a) Corriente para diferentes intensidades de la fuerza externa F_0 .

En las Figuras (5.2) y (5.3) tenemos las gráficas de la corriente contra la frecuencia externa ω_0 , variando el valor de la intensidad de la fuerza externa entre $1 \leq F_0 \leq 5$. En la Figura (5.2) se puede ver que al aumentar la amplitud de la fuerza externa F_0 , la inversión de corriente es más eficiente. Pero en la Figura (5.3) se tiene que para intensidades de la fuerza externa $F_0 \geq 3$ se empieza a apreciar un efecto que produce que la curva comience a deflectarse tendiendo a formar una segunda inversión; además se recorre el máximo de la corriente negativa hacia frecuencias mayores. Queremos hacer notar que en ambas gráficas, el punto o frecuencia de corte ω_c , es decir, donde se realiza la primer inversión ($\omega_c \simeq 0.3$), permanece invariante.

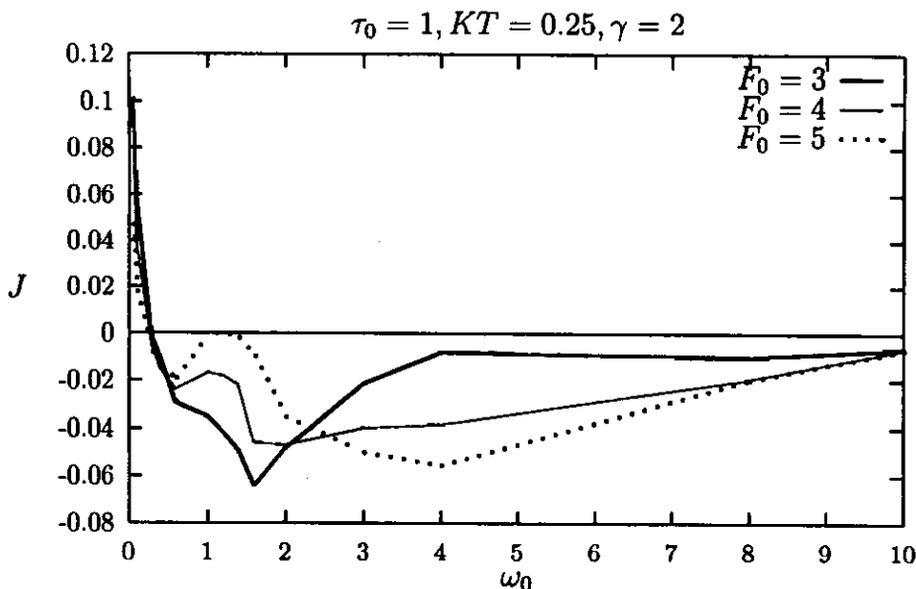


Figura 5.3: Corriente para intensidades de la fuerza externa entre $3 \leq F_0 \leq 5$.

b) Comportamiento general de la corriente contra la amplitud de la fuerza externa F_0 .

De estas dos últimas gráficas (5.2) y (5.3), podemos apreciar el siguiente comportamiento resumido en la Figura (5.4) de la corriente J contra la amplitud de la fuerza externa F_0 , donde observamos que para valores de:

$$\begin{array}{ll}
 0 \leq \omega_0 < 0.3 & J > 0 \\
 0.3 \leq \omega_0 < 3 & J < 0 \\
 3 \leq \omega_0 \leq 5 & \left\{ \begin{array}{l} J > 0 \text{ para } F_0 \leq 2 \\ J < 0 \text{ para } F_0 > 2 \end{array} \right\} \\
 \omega_0 > 10 & J = 0.
 \end{array}$$

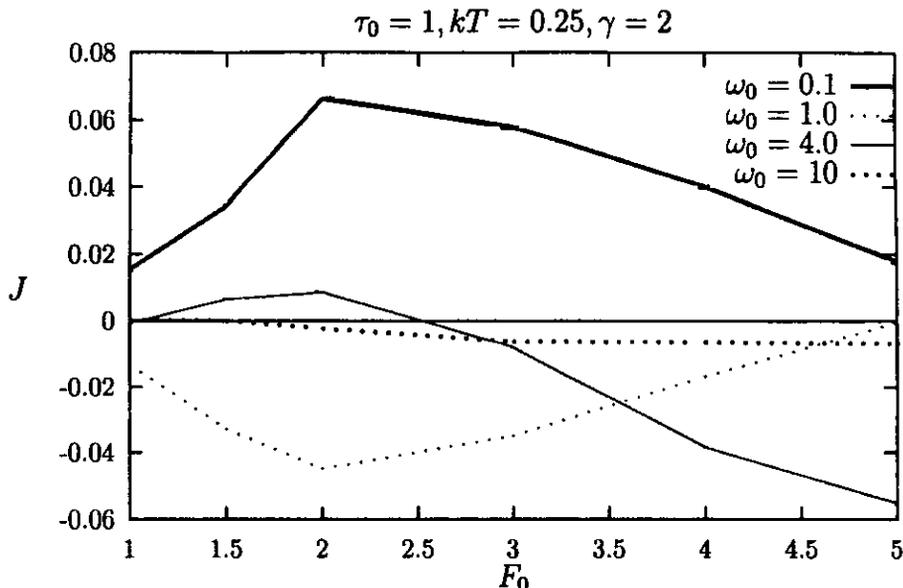


Figura 5.4: Comportamiento general de la corriente J contra la amplitud de la fuerza externa F_0 .

5.4 Variación de las propiedades del baño térmico.

De la expresión para la función de correlación de la fuerza estocástica térmica, Ec. (4.6), tenemos que se expresa en términos de su tiempo de correlación τ_0 de la forma:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = \frac{kT\gamma}{\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}, \quad (5.8)$$

pero por el Teorema Fluctuación-Disipación, Ec. (3.20), entonces la fuerza de fricción también se puede expresar en función del tiempo de correlación del baño térmico como:

$$\Gamma(t-t') = \frac{\gamma}{2\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}. \quad (5.9)$$

A continuación mostraremos los resultados correspondientes al variar el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , la temperatura kT y la fricción γ , en términos de la frecuencia forzadora ω_0 .

5.4.1 Tiempo de Correlación Térmico

a) Función de correlación para diferentes tiempos del baño térmico.

La Figura (5.5) muestra la función de correlación para $f(t)$ con decaimiento exponencial para diferentes tiempos de correlación o memoria del baño ($0.1 \leq \tau_0 \leq 10$), manteniendo constante la intensidad de la fuerza estocástica con valor de $\sqrt{2\gamma kT}/\tau_0 = 1$ y la intensidad de la fuerza de fricción con valor de $G = \gamma/2\tau_0 = 1$.

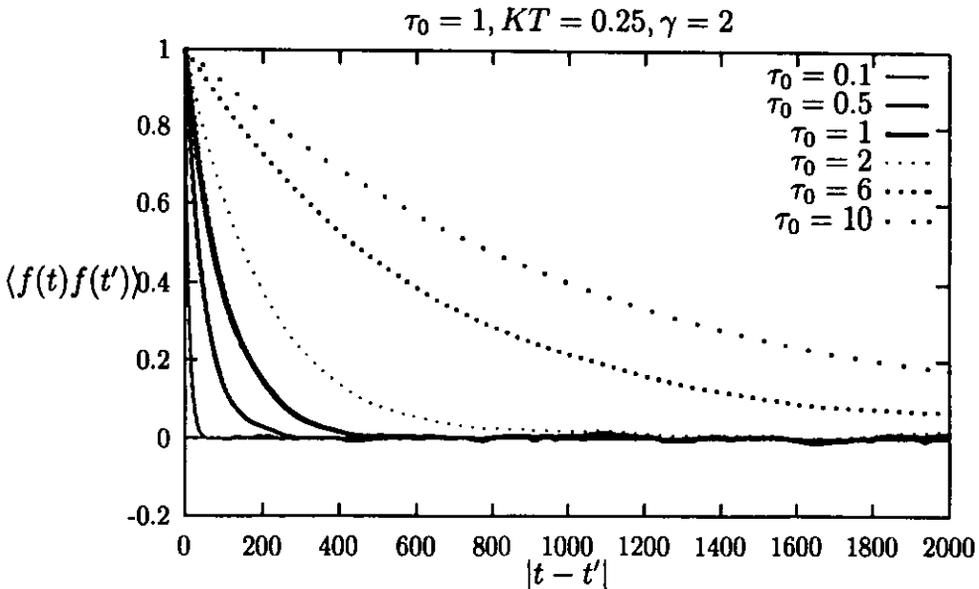


Figura 5.5: Función de correlación de la fuerza estocástica para diferentes tiempos de correlación del baño térmico τ_0 .

Aquí podemos apreciar claramente que a mayor tiempo de correlación, la fuerza estocástica presenta mayor memoria respecto a lo ocurrido a 2 tiempos distintos, perdiéndose su correlación cuando la diferencia de tiempos es muy grande. Tenemos además que cuando el tiempo de correlación se hace cada vez más pequeño $\tau_0 \rightarrow 0$, el baño térmico de color tiende a un baño blanco delta-correlacionado, en donde la memoria de la fuerza estocástica es extremadamente pequeña y entonces se dice que la memoria del baño térmico es "instantánea".

b) Corriente para diferentes tiempos de correlación del baño térmico a una frecuencia externa dada.

En la Figura (5.6) se muestra la gráfica de la corriente J para diferentes tiempos de correlación del baño térmico τ_0 , en el caso particular en que la intensidad de la fuerza externa es $F_0 = 1.0$ y su frecuencia es $\omega_0 = 0.05$. Hemos mantenido constante, al igual que en la gráfica anterior Fig. (5.5), la intensidad de la fuerza estocástica y la intensidad de la fuerza de fricción, al ir variando el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 (ver Ecs. (5.8) y (5.9)).

De aquí, podemos observar que para valores del tiempo de correlación del baño:

$$\begin{array}{ll} \tau_0 & \text{pequeñas } (\tau_0 \leq 5) & J \neq 0 \\ \tau_0 & \text{grandes } (\tau_0 > 5) & J = 0. \end{array}$$

Queremos señalar lo siguiente, si aumentamos la memoria del baño pero mantenemos la temperatura T y la fricción γ constantes, lo que estamos haciendo es ir apagando la fuerza estocástica (ver Ec. (5.8)). Por lo tanto, si queremos mantener la misma intensidad de la fuerza estocástica y a la vez aumentar la memoria, eso corresponde a un aumento tanto de la temperatura como de la fricción del medio.

En las siguientes gráficas, se ha variado el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , pero manteniéndose constante la temperatura con valor de $kT = 0.25$ y el coeficiente de fricción con valor de $\gamma = 2.0$. No así el valor de la intensidad de las fuerzas estocásticas y de fricción.

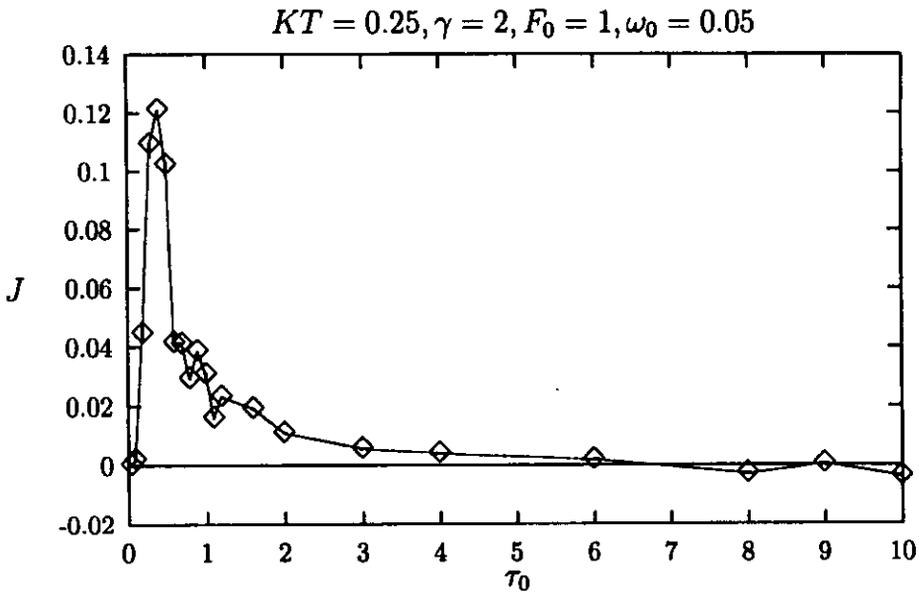


Figura 5.6: Corriente para diferentes tiempos de correlación del baño térmico, con frecuencia externa de $\omega_0 = 0.05$.

c) Corriente en función del tiempo de correlación del baño térmico para diferentes frecuencias de la fuerza externa.

La Figura (5.7) muestra la corriente del sistema respecto al tiempo de correlación del baño τ_0 . Esto es, para valores pequeños de la frecuencia externa ($0.05 \leq \omega_0 \leq 1$). Podemos verificar que para un tiempo de correlación fijo, por ejemplo $\tau_0 = 1$, a medida que aumentamos la frecuencia externa ω_0 se da una inversión de la corriente para valores alrededor de $0.3 < \omega_0 < 0.4$.

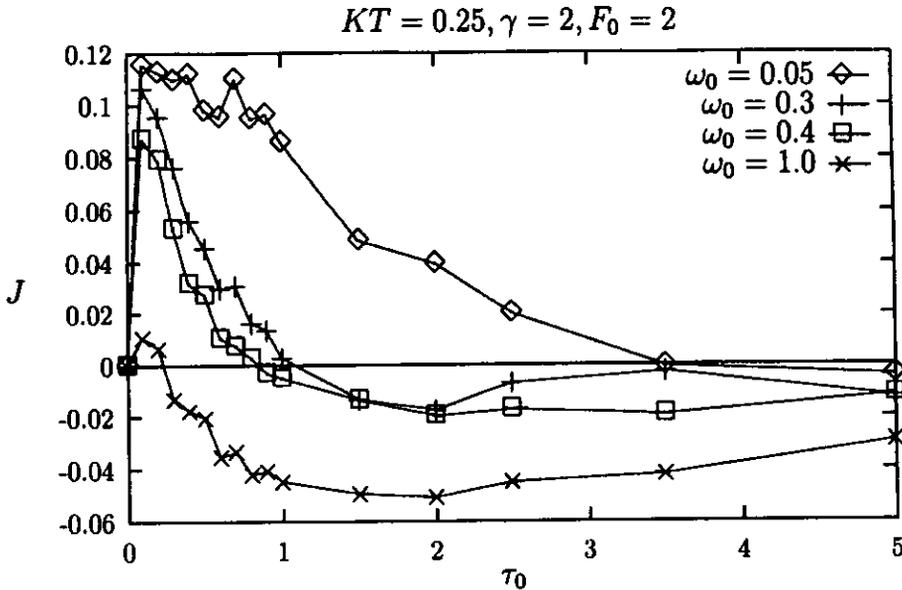


Figura 5.7: Corriente en función del tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , para diferentes frecuencias de la fuerza externa ω_0 .

d) Corriente para tiempos de correlación pequeños del baño térmico.

En la Figura (5.8) tenemos la gráfica de la corriente J contra la frecuencia externa ω_0 , para los casos en que el tiempo de correlación toma los valores entre $0.1 \leq \tau_0 \leq 0.4$. Aquí podemos observar que para estos valores del tiempo de correlación ($\tau_0 < 0.5$) se presenta sólo una frecuencia de corte ω_c . Pero en la Figura (5.9), tenemos que cuando el tiempo de correlación se encuentra en un rango de $0.5 \leq \tau_0 \leq 1$, se obtiene una doble inversión, es decir dos valores de la frecuencia de corte, ω_c y ω'_c . En otras palabras, a medida que la frecuencia externa va aumentando su valor, pasamos de una corriente en la dirección positiva a una en dirección negativa y posteriormente se obtiene nuevamente una corriente positiva, hasta que finalmente como en todos los casos, la corriente se anula ($J \rightarrow 0$) a frecuencias altas.

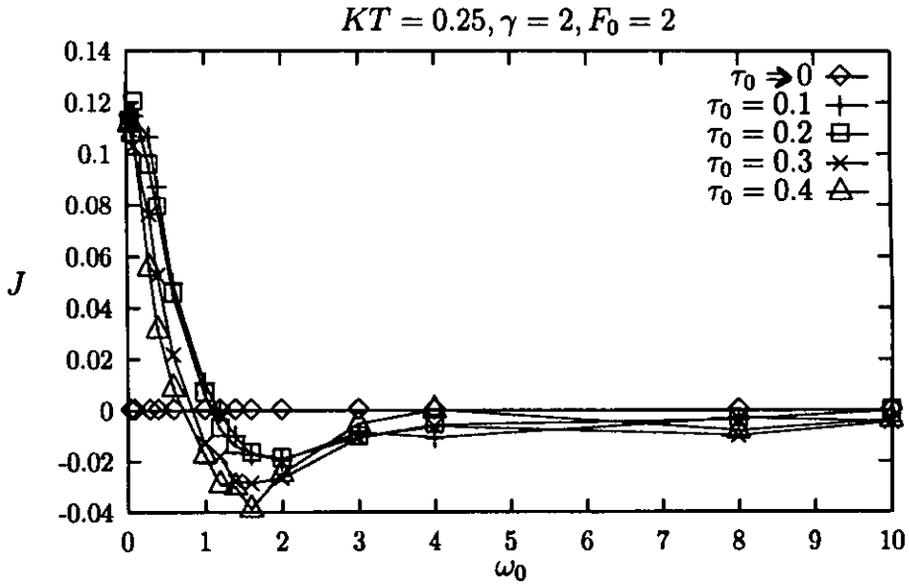


Figura 5.8: Corriente para tiempos de correlación del baño térmico entre $0.1 \leq \tau_0 \leq 0.4$.

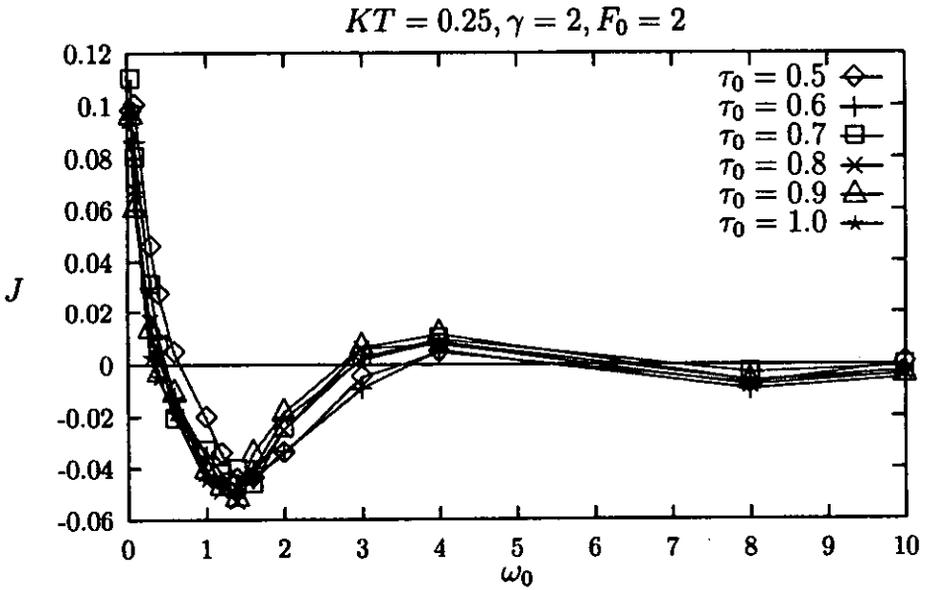


Figura 5.9: Corriente para tiempos de correlación del baño térmico entre $0.5 \leq \tau_0 \leq 1$.

e) Comportamiento general de la corriente para diferentes valores del tiempo de correlación térmico.

Por lo tanto, si analizamos el caso en que aparece la primer inversión de corriente (ver Fig. (5.10)), tenemos que conforme:

$$\begin{array}{lll} \tau_0 \rightarrow 0 & \omega_c \rightarrow \infty & \text{ó } \tau_c \rightarrow 0 \\ \tau_0 \rightarrow \infty & \omega_c \rightarrow 0 & \text{ó } \tau_c \rightarrow \infty \end{array}$$

Es importante recalcar que no existe una frecuencia única de inversión como función del tiempo de memoria. Esto nos indica que la memoria del baño térmico juega un papel importante en la comprensión completa del fenómeno de producción de corriente.

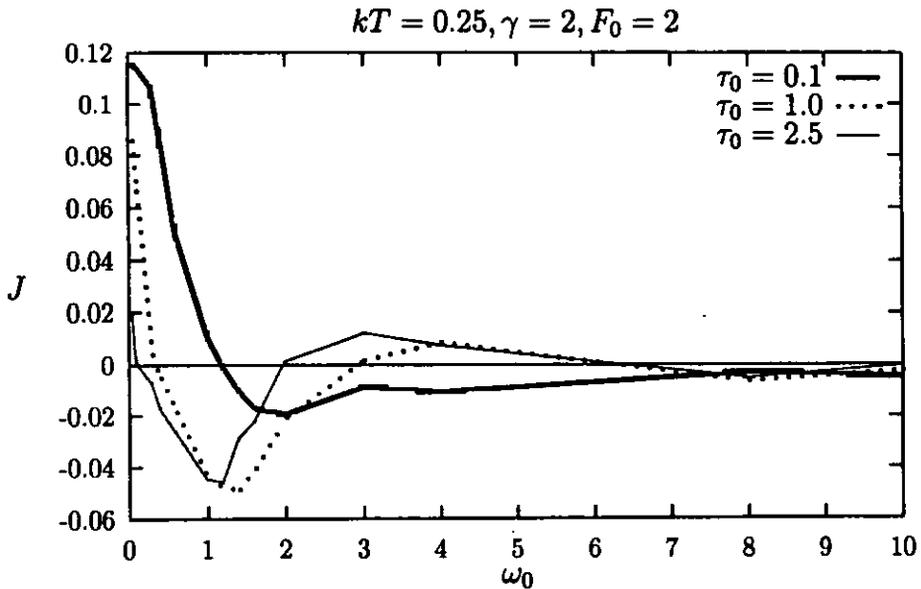


Figura 5.10: Comportamiento general de la corriente para diferentes valores del tiempo de correlación térmico.

5.4.2 Temperatura

Los resultados que a continuación mostraremos, corresponden a variaciones hechas en la temperatura del baño térmico T . Partimos del hecho de que manteniendo constante el tiempo de correlación $\tau_0 = 1.0$, el coeficiente de fricción $\gamma = 2.0$ y la intensidad de la fuerza externa $F_0 = 2.0$, se obtienen los dos tipos de inversión de corriente, así como una corriente más eficiente.

De la expresión para la correlación de la fuerza estocástica, Ec. (5.8), vemos que un aumento en la temperatura del medio sólo intensifica el efecto en las fuerzas fluctuantes pero *no* lo modifica en esencia. Siempre y cuando, por supuesto, no sean temperaturas lo suficientemente altas que dominen el comportamiento del sistema, opacando el efecto del potencial asimétrico y de la fricción del medio.

Corriente para diferentes temperaturas del baño térmico.

La Figura (5.11) muestra la gráfica de la corriente J contra la frecuencia externa ω_0 , para valores de la temperatura entre $0.05 \leq kT \leq 5$. Aquí se puede apreciar que obtenemos un transporte eficiente de la partícula Browniana para temperaturas bajas, pero el transporte se hace menos eficiente a temperaturas altas. Esto se observa, tanto en el caso en que se tiene corriente positiva como negativa. Así también, tenemos que se conserva la frecuencia de corte del sistema con valor aproximado de $\omega_c \simeq 0.3$, que es como ya mencionamos, la frecuencia tal en la que comienza a aparecer una corriente invertida. Por otra parte, tenemos también que cuando la frecuencia externa comienza a tomar valores muy grandes deja de aparecer corriente en el sistema, es decir cuando $\omega_0 \rightarrow \infty$, $J \rightarrow 0$. Esto se puede ver también del Teorema Fluctuación-Disipación, Ec. (3.20), en donde al aumentar la temperatura se disminuye la fricción, manteniendo constante el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , lo que dá por consiguiente que las fuerzas estocásticas dominen respecto al efecto que produce el potencial asimétrico, en presencia de una fuerza externa.

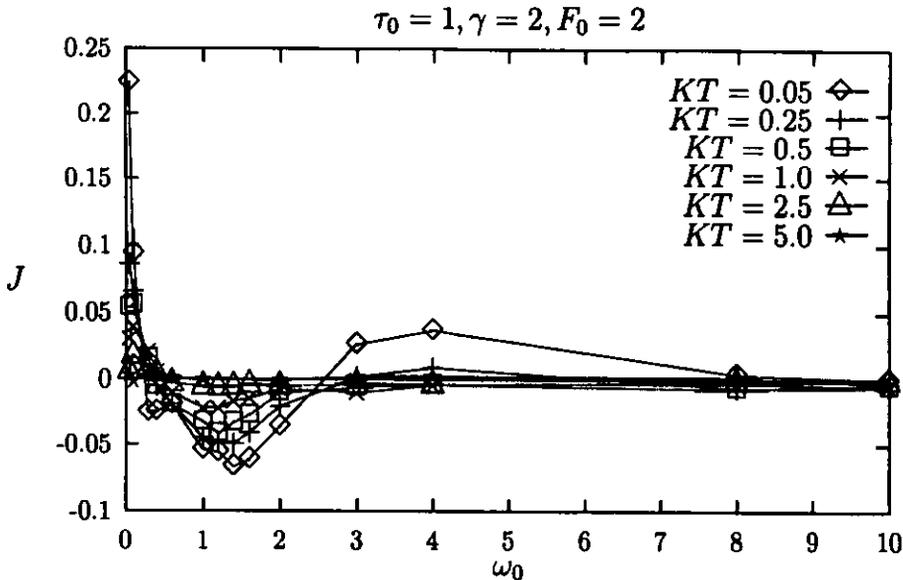


Figura 5.11: Corriente para diferentes temperaturas del baño térmico.

5.4.3 Fricción

Para analizar los casos en que se varia la fuerza de fricción, hay que tomar en cuenta que la fricción está íntimamente relacionada con la fuerza estocástica del baño térmico, al satisfacerse un balance entre las propiedades fluctuantes y disipativas del sistema.

Los siguientes resultados corresponden a los casos en que se varió el coeficiente de fricción γ , pero manteniendo fijos el tiempo de correlación del baño térmico $\tau_0 = 1.0$, su temperatura con $kT = 0.25$ y la intensidad de la fuerza externa $F_0 = 2.0$.

a) Corriente con fricciones pequeñas.

En la Figura (5.12) se grafica la corriente J contra la frecuencia externa ω_0 , para valores pequeños del coeficiente de fricción ($0.1 \leq \gamma \leq 0.6$). Se observa que, de manera contraria a lo obtenido en los casos

anteriores, para valores de la fricción $\gamma \leq 0.6$, la inversión de corriente se presenta partiendo de una corriente negativa a una positiva, hasta que llega a anularse ($J \rightarrow 0$). Esto es, para frecuencias externas:

$$\begin{array}{ll} \omega_0 < \omega_c & J < 0 \\ \omega_c < \omega_0 < 3 & J > 0 \\ \omega_0 > 3 & J \rightarrow 0. \end{array}$$

donde la frecuencia de inversión ω_c depende del valor de la fricción.

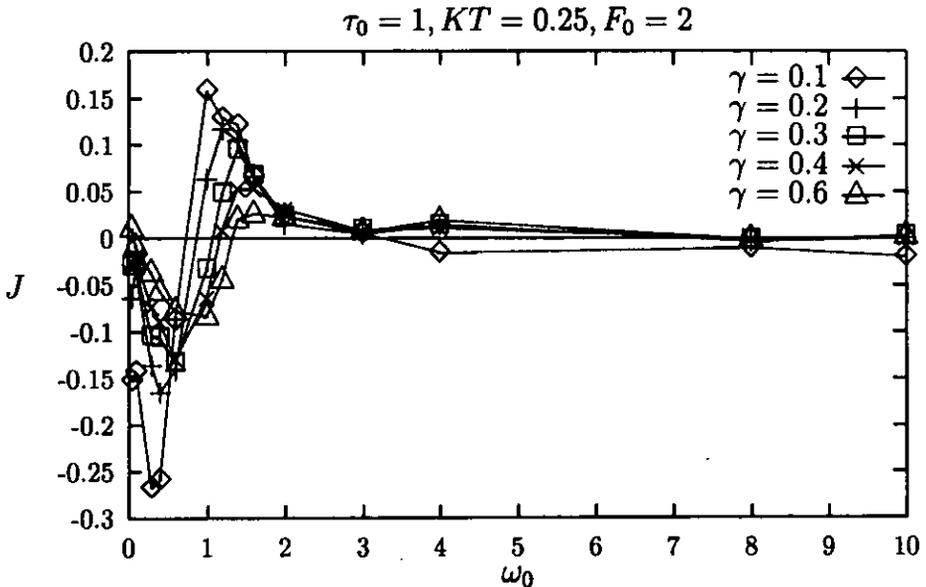


Figura 5.12: Corriente con fricciones entre $0.1 \leq \gamma \leq 0.6$.

b) Corriente con fricciones grandes.

Por su parte, en la Figura (5.13) tenemos algunos valores del coeficiente de fricción entre $0.8 \leq \gamma \leq 20$. Se observa que para valores del coeficiente de fricción $\gamma > 0.6$, se presenta una doble inversión de corriente; esto es, de corrientes positivas a negativas y después a positivas

nuevamente, $(J > 0) \rightarrow (J < 0) \rightarrow (J > 0) \rightarrow (J = 0)$, es decir:

$$\begin{array}{ll} \omega_0 < \omega_c & J > 0 \\ \omega_c < \omega_0 < \omega'_c & J < 0 \\ \omega_0 > \omega'_c & J > 0 \\ \omega_0 \gg \omega'_c & J \rightarrow 0. \end{array}$$

De nuevo, las dos frecuencias de inversión, ω_c y ω'_c , dependen del valor de la fricción.

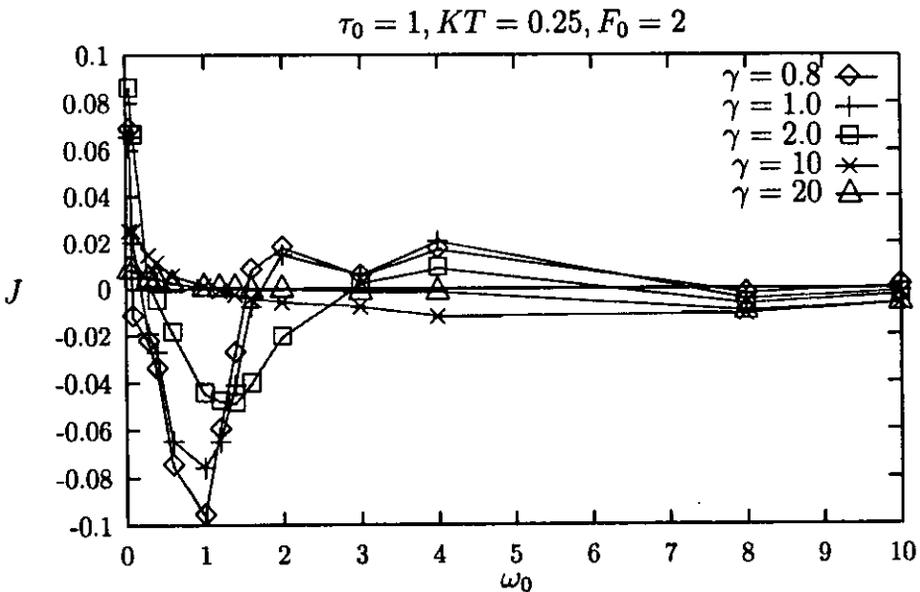


Figura 5.13: Corriente con fricciones entre $0.8 \leq \gamma \leq 20$.

c) Comportamiento general de la corriente en función de la fricción del medio.

Por lo tanto, podemos resumir en la Figura (5.14) el comportamiento de la corriente para diferentes valores de la fricción del medio, de tal manera que para:

$$\gamma \text{ pequeñas} \quad J \neq 0,$$

entonces si:

$$\gamma \rightarrow 0 \quad J \text{ es más eficiente,}$$

pero si:

$$\gamma \rightarrow \infty \quad J \rightarrow 0.$$

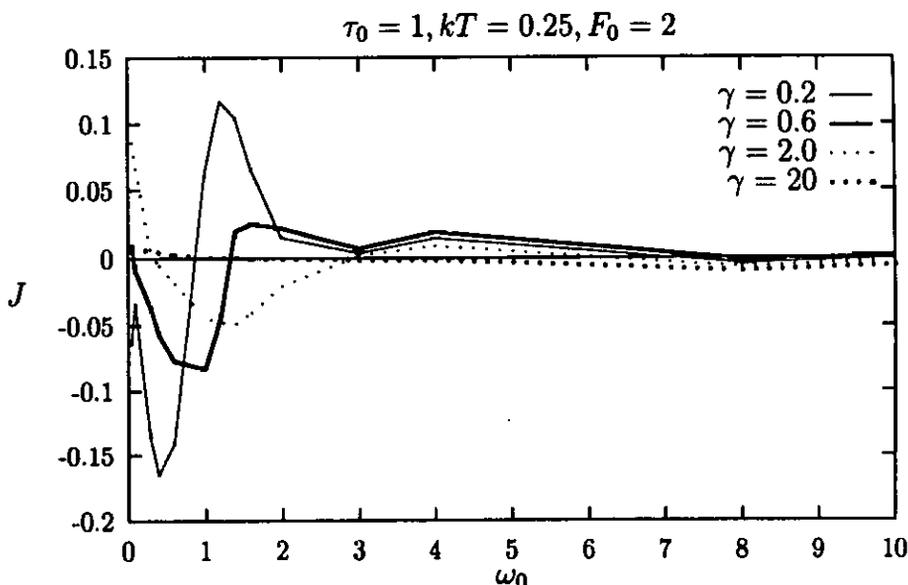


Figura 5.14: Comportamiento general de la corriente en función de la fricción del medio.

En otras palabras, cuando el término de fricción es dominante (por ejemplo $\gamma = 20$) la partícula Browniana se queda atrapada en uno de los pozos del potencial. Podemos decir también que si el coeficiente de fricción del medio tiende a disminuir, esto es equivalente a que su tiempo de correlación aumente. Esto se puede ver también de las expresiones para la intensidad de la fuerza de fricción $\gamma/2\tau_0$ y de la intensidad de la fuerza estocástica del baño $\sqrt{2\gamma kT}/\tau_0$.

El valor de la frecuencia de corte $\omega_c \simeq 0.3$ parece presentarse de manera general en los casos en que $\tau_0 = 1.0$, $kT = 0.25$ y $\gamma = 2.0$. Sin embargo, no hemos encontrado una relación obvia entre la frecuencia donde se presenta la inversión de corriente y el resto de los tiempos característicos del sistema.

Sería muy deseable, poder realizar un estudio más exhaustivo, con más resultados y curvas más continuas que nos permitan observar más comportamientos del sistema. Sin embargo, tenemos la limitante en cuanto a tiempo, ya que por ejemplo para obtener *sólo una curva* típica de la corriente J contra la frecuencia de oscilación de la fuerza externa, para un tiempo de correlación dado, por ejemplo de $\tau_0 = 1$, se requieren aproximadamente 12 horas de CPU (Unidad Central de Procesamiento), incrementándose grandemente para valores mayores del tiempo de correlación (que en tiempo real se traducen en días). Los cálculos se realizaron en una estación de trabajo Alpha SERVER 1000A 5/300, con un procesador DEC-ALPHA de 300 MHz de velocidad y 128 MBytes en RAM.

Aunque aún no se han obtenido conclusiones definitivas que nos muestren la relación funcional que guardan los diferentes tiempos característicos entre sí, en el siguiente capítulo se muestran los resultados más importantes y novedosos que se han podido observar del comportamiento general del sistema.

Capítulo 6

Conclusiones

Con el fin de tener una mejor comprensión de los mecanismos de transporte unidireccional que se llevan a cabo a nivel celular por medio de las llamadas proteínas motoras, se ha introducido en el presente trabajo la teoría de Langevin del movimiento Browniano. Esta teoría ha sido utilizada como base para el estudio del modelo de matraca estocástica, en el que se ha incluido un término de fuerza externa.

Se trabajó con la ecuación generalizada de Langevin y es importante señalar, que el uso de una ecuación de este tipo permite poder separar la contribución de fuerzas internas (que son las fuerzas que el medio ejerce sobre la partícula Browniana, como las fuerzas estocásticas térmicas y las fuerzas disipativas) y fuerzas externas. Así también permite considerar todas las escalas de tiempo relativas entre las diferentes fuerzas que actúan sobre la matraca estocástica, que como recordamos son: el tiempo natural del sistema t_N , el tiempo de relajamiento del sistema $\tau \sim m/\gamma$, el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , el periodo natural de la fuerza externa $\tau_{ext} \sim 1/\omega_0$ o el tiempo de correlación de la fuerza externa τ_{ext} , según corresponda. Como ya hemos visto, el modelo presenta una fenomenología muy rica dependiendo de los valores relativos de estos tiempos; en particular, resaltamos la aparición de corrientes invertidas.

Se realizó un estudio comparativo al ir variando cada uno de los parámetros que describen al sistema. Por ejemplo, para el caso de la fuerza externa, se varió tanto su intensidad F_0 como su frecuencia de

oscilación ω_0 o el tiempo de correlación τ_{ext} , según correspondiera el caso de fuerzas deterministas o estocásticas. Así también se realizaron variaciones en el medio que rodea a la partícula Browniana a través del coeficiente de fricción γ , la temperatura T y el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 . Como se puede apreciar, el espacio de parámetros es muy grande y pudimos observar que el comportamiento del sistema es muy sensible al variar sus valores, en el conjunto de parámetros involucrados.

Para el cálculo de la corriente o arrastre de la partícula Browniana hicimos uso de la variación temporal de su posición promedio: $J = d\langle x \rangle / dt$, en donde la corriente presenta, de acuerdo a nuestro modelo, una dependencia en los siguientes cinco parámetros adimensionales:

$$J = J(\tau_0, \gamma, kT, F_0, \omega_0) \quad (6.1)$$

Uno de los requisitos que exigimos para tomar en consideración una fuerza externa, es que su promedio temporal tuviera valor cero; esto es para no introducir una direccionalidad preferente en el movimiento de la partícula Browniana.

Del análisis realizado podemos mencionar los siguientes resultados:

I. Generales:

1. Una matraca estocástica en presencia de ruido térmico únicamente, ya sea correlacionado o descorrelacionado, *no* muestra corriente. Esto es debido a que el baño térmico satisface el Teorema Fluctuación-Disipación, garantizando con ello que no se viole la segunda ley de la Termodinámica.
2. El único requerimiento para la producción de corriente, es la presencia de un potencial periódico asimétrico más una fuerza externa correlacionada o descorrelacionada en el tiempo.
3. La matraca estocástica rectifica ruido externo simétrico. Como resultado, la partícula puede moverse en una dirección específica aún cuando las fluctuaciones del medio y la fuerza externa sean completamente simétricas.

II. Particulares:

1. Para tiempos de correlación de la fuerza externa mucho mayores a los tiempos de correlación del baño térmico ($\tau_{ext} \gg \tau_0$), se presenta corriente en la dirección preferencial de la partícula, determinada por la asimetría presente en el potencial. Esto es equivalente a pensar que tenemos un ruido térmico blanco y una fuerza externa de color.
2. Para tiempos de correlación de la fuerza externa mucho menores a los tiempos de correlación del baño térmico ($\tau_{ext} \ll \tau_0$), se presenta inversión de corriente.
3. Para un tiempo de correlación del baño y un coeficiente de fricción fijos, tenemos un valor para la frecuencia externa tal que produce una inversión de la corriente, que denotamos como frecuencia de corte ω_c , la cual es siempre menor que la frecuencia natural del sistema. Por lo tanto, al variar ya sea el tiempo de correlación o la fricción del medio, la inversión se presenta a diferentes frecuencias ω_c .
4. A frecuencia externa, a temperatura o a fricción altas, el efecto de la corriente en el sistema se pierde. De la misma manera ocurre cuando tenemos tiempos de correlación grandes del baño térmico.
5. Bajo ciertas condiciones de la fuerza externa oscilatoria, puede presentarse una doble inversión de la corriente.

El interés por tener un panorama más claro que nos permitiera entender el mecanismo de la inversión de corriente, nos llevó a realizar un estudio más detallado de los parámetros involucrados, para el caso de una fuerza externa oscilatoria. De aquí obtuvimos las siguientes observaciones, al variar:

A) Parámetros Externos:

1. Dado que la fuerza externa acoplada al potencial son los términos dominantes, cuando la temperatura del medio no es muy alta, se

obtiene un filtramiento de la frecuencia forzadora en la posición promedio de la partícula Browniana.

2. Al ir aumentando la intensidad de la fuerza externa oscilatoria obtenemos una producción de corriente más eficiente, para amplitudes pequeñas ($F_0 \leq 2$).

B) Parámetros Internos:

1. Para tiempos de correlación pequeños ($\tau_0 \leq 5$), manteniendo constantes la intensidad de la fuerza estocástica y la intensidad de la fuerza de fricción, se obtiene una corriente neta diferente de cero, pero al aumentar la memoria del baño el desplazamiento neto de la partícula es cero.
2. A temperaturas bajas, menores a la energía natural del sistema ($kT < V_0$), se presenta una mejor eficiencia en el arrastre de la partícula Browniana.
3. De manera semejante, al ir disminuyendo la fricción del medio obtenemos una corriente neta más eficiente, para valores pequeños del coeficiente de fricción ($\gamma \leq 0.6$). Pero contrario a lo observado a frecuencias bajas la corriente neta que se obtiene es negativa.

Tenemos por lo tanto que variaciones en el tiempo de correlación del baño térmico τ_0 , en el coeficiente de fricción γ o en la frecuencia externa ω_0 , producen fuertes cambios en el comportamiento del sistema al permitir la transición de corrientes positivas a negativas y viceversa.

Por el contrario, parámetros como la temperatura T y la amplitud de la fuerza externa F_0 sólo magnifican el efecto de la producción de corriente. Sin embargo, cabe señalar que si los valores de la temperatura o de la fricción son grandes, se pierde el movimiento inducido de la partícula, al apantallar los efectos del potencial asimétrico.

Quisieramos hacer la observación de que la aparición de diferentes frecuencias de inversión para tiempos de correlación grandes y la presencia de corrientes que cambian más de una vez de signo, como en

el caso de fricciones altas, nos indican que debe existir un mecanismo más complejo del que hasta ahora se ha discutido en la literatura y que aún falta por entender. Por otra parte, la no-Markovianidad y la no-linealidad del modelo que hemos propuesto dificulta la posibilidad de obtener resultados analíticos, así también la falta de un potencial más realista y de una expresión funcional que nos describa más fielmente los procesos químicos que se llevan a cabo a nivel molecular, nos limita a comparar con resultados experimentales que se han obtenido con muestras de proteínas motoras.

Una de las principales contribuciones que presenta el trabajo, es que se han podido aclarar aspectos sobre la interpretación de las fuerzas que actúan sobre la partícula Browniana (como puede apreciarse en las conclusiones generales), ya que en trabajos anteriores [4, 5, 10] se argumentaba que las correlaciones del ruido térmico inducían rompimiento de la simetría, dando por resultado una corriente macroscópica diferente de cero.

Por otra parte, se han obtenido resultados novedosos al establecerse una amplia gama de condiciones bajo las cuales se presenta inversión de corriente, que en aproximaciones donde se toma el límite sobreamortiguado sería imposible el acceso a tal análisis, ya que involucran un juego entre los tiempos característicos de las diferentes fuerzas que actúan sobre la partícula Browniana.

Se puede ver que el modelo estudiado presenta riqueza en los resultados, ya que podemos establecer bajo qué condiciones la partícula mostrará un arrastre neto diferente de cero, o hacer que cambie su dirección o simplemente que se mantenga en el mismo lugar. Sin embargo, es claro que resulta muy complicado obtener una expresión funcional que nos muestre la relación entre los diferentes tiempos que caracterizan al sistema de matraca estocástica, el entorno y los factores externos. Una posible extensión de nuestro trabajo es ciertamente buscar estas relaciones entre los tiempos involucrados, tal que nos permita controlar la aparición de la corriente y por consiguiente su inversión. La presencia de la no-linealidad en la ecuación generalizada de Langevin y su carácter no-Markoviano son las principales causas responsables de las dificultades en hallar dichas relaciones.

Nuestro trabajo es el primero que ha considerado la memoria del baño térmico, al hacer uso de la ecuación generalizada de Langevin y

del teorema Fluctuación-Disipación. Este esquema nos ha permitido obtener una clara distinción entre el ruido térmico, ya sea blanco o de color, y campos externos deterministas o estocásticos. Hemos mostrado que la única condición necesaria para rectificar un ruido externo y producir una corriente neta, es la presencia de un potencial asimétrico.

A través de la ecuación de Langevin podemos obtener un modelo simplificado de la matraca de Feynman. Primeramente, en el modelo de Langevin podemos reemplazar todo el mecanismo de la matraca por una partícula en un potencial asimétrico. Por su parte, en el modelo de Feynman tenemos:

i) Un sistema asimétrico a través de la rueda dentada y el trinquete, que se encuentran en un medio a temperatura T en todos lados (que corresponde al caso $T_1 = T_2$). En esta situación no se presenta corriente. Feynman utilizó este esquema para mostrar la validez de la segunda ley: Un sistema ejecutando movimiento Browniano en contacto con un reservorio térmico no puede producir trabajo. Esto es, aunque el sistema es asimétrico no obtenemos un "movimiento perpetuo". Este caso corresponde en nuestro modelo a aquel en donde no se tiene una fuerza externa que depende del tiempo, $F_{ext} = 0$, y donde sólo tenemos una temperatura que corresponde a la de la fuerza estocástica térmica.

Magnasco [17], por su parte, argumenta que para este caso no se obtiene corriente porque el modelo de Feynman solamente es válido para fuerzas térmicas blancas y, dado que en la realidad son de color, eso no es aplicable. Nosotros hemos demostrado que si la temperatura es la misma en todas partes no hay corriente, no importando si el baño térmico es de color o no.

ii) Si en el modelo de Feynman se tiene $T_1 \neq T_2$, ya no se está en equilibrio y entonces sí se obtiene corriente; la presencia de las aspas que actúan sobre el sistema es, desde el punto de vista de nuestro modelo, equivalente a tener una fuerza externa dependiente del tiempo y simétrica, pero que no satisface el TFD del baño térmico. Esto es, el desbalance de temperaturas que saca de equilibrio total al sistema, lo hace simétricamente en el tiempo. Y es entonces cuando se presenta corriente.

Para el caso de una fuerza externa pero estocástica, el desbalance no ocurre en la magnitud de las fuerzas sino en los tiempos de correlación; esto se debe a que hemos propuesto la misma forma funcional

de la función de correlación tanto para el baño térmico como para la fuerza externa. Entonces, si los tiempos son iguales, y dado que las dos fuerzas se suman, el resultado es equivalente a tener un baño térmico a una temperatura mayor, pero la *misma* en todos lados, y no hay corriente. Ahora, cuando tenemos tiempos de correlación diferentes, no estamos simulando que tenemos dos baños térmicos ya que seguimos teniendo sólo un baño térmico (que es el que satisface el TFD); en este caso el ruido externo sí saca de balance al TFD del medio y el sistema se ve afectado de manera neta por la fuerza externa; obteniéndose entonces una corriente neta diferente de cero. No es correcto suponer que tenemos dos baños térmicos ya que sólo uno está conectado con la fricción.

En un trabajo desarrollado por Parrondo y Español [35], se reconoce que en el modelo de Feynman no sólo se tienen dos baños térmicos, sino que también se tienen dos sistemas que son la matraca y las aspas. El primero de éstos es un sistema asimétrico con un grado de libertad y el segundo es un sistema simétrico con también un solo grado de libertad; es decir, son dos "partículas" y no una, y cada una obedece una ecuación de Langevin con sus respectivos TFD; adicionalmente, estas dos partículas se encuentran acopladas. Así también se muestra que se puede obtener una corriente si las temperaturas son diferentes.

Nosotros hemos podido observar que la producción de corriente ocurre aún con un solo grado de libertad, pero considerando una fuerza externa dependiente del tiempo.

Ahora, retomando el aspecto biológico, como parte de la motivación de nuestro trabajo, tenemos que como los sistemas biológicos son en realidad sistemas abiertos, y estos están expuestos a gradientes de temperatura o a factores bioquímicos que interactúan con ellos a través de sus reacciones químicas, necesitamos delimitar un sistema que esté excluido de dichos efectos, tal que de manera natural pueda relajarse a equilibrio. Tenemos entonces que la partícula Browniana en un potencial periódico asimétrico, más el baño térmico en el que se encuentra inmersa, constituyen el sistema cerrado a estudiar. La presencia del ATP, como la fuente de energía para la realización de los procesos biológicos, se representa por medio de la fuerza externa.

Tenemos también, que se han podido observar los cambios conformacionales que sufre la estructura tridimensional de la proteína motora

miosina a través de estudios con cristalografía de rayos X [3] y podemos entonces considerar que el presente trabajo es sólo una pequeña parte de lo que sería un motor molecular con más grados de libertad. Otra posible extensión de nuestro trabajo sería investigar potenciales más realistas de la interacción entre las proteínas motoras y los filamentos moleculares sobre los que se desplazan. Así también, tratar de describir con mayor precisión el proceso de hidrólisis que se realiza en la unión de una molécula de ATP sobre las proteínas motoras, a nivel celular.

Para concluir, queremos hacer énfasis que el modelo de matraca estocástica nos da una buena representación cualitativa de los procesos de transporte que realizan las proteínas motoras con ayuda de agentes bioquímicos, como el ATP. Consideramos que el uso de una ecuación generalizada de Langevin nos ha permitido entrar a escalas de tiempo del baño térmico, inaccesibles con otras aproximaciones, de esta manera podemos separar los efectos del medio de los factores externos que actúan sobre la partícula Browniana.

Referencias

- [1] L.E. Hokin, *The molecular machine for driving the coupled transports of Na^+ and K^+ is an $(\text{Na}^+ + \text{K}^+)$ -activated ATPase*. Trends Biochem. Sci. **1**, 233-237 (1976).
- [2] Bruce Alberts, et al., *Molecular Biology of the cell* (3rd. ed., Garland Publising Inc., New York & London, 1994); capítulos: "Protein Function" y "The Cytoskeleton".
- [3] I. Rayment, H.M. Holden, M. Whittaker, et al. *Structure of the actin-myosin complex and its implications for muscle contraction*. Science **261**, 58-65 (1993).
- [4] M.O. Magnasco, *Forced Thermal Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **71**, 1477 (1993).
- [5] T.E. Dialynas, K. Lindenberg and G.P. Tsironis, *Ratchet motion induced by deterministic and correlated stochastic forces*, (1997), por publicarse.
- [6] M.M. Millonas and M.I. Dykman, *Transport and current reversal in stochastically driven ratchets*, Phys. Lett. A **185**, 65 (1994).
- [7] C.R. Doering, W. Horsthemke, and J. Riordan, *Nonequilibrium Fluctuation-Induced Transport*, Phys. Rev. Lett. **72**, 2984 (1994); T.C. Elston and C.R. Doering, *Numerical and Analytical Studies of Nonequilibrium Fluctuation-Induced Transport Processes*, J. Stat. Phys. **83**, 359 (1996).
- [8] D.R. Chialvo and M.M. Millonas, *Asymmetric Unbiased Fluctuations are sufficient for the operation of a Correlation Ratchet*,

- Phys. Lett. A **209**, 26 (1995); R. Bartussek, P. Reimann, and P. Hänggi, *Precise Numerics versus Theory for Correlation Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1166 (1996); G.A. Cecchi and M.O. Magnasco, *Negative Resistance and Rectification in Brownian Transport*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1968 (1996).
- [9] Para realizaciones experimentales de la matraca estocástica se pueden consultar, por ejemplo: L.P. Faucheux, L.S. Bourdieu, P.D. Kaplan, and A.J. Libchaber, *Optical Thermal Ratchet*, Phys. Rev. Lett. **74**, 1504 (1995); L. Gorre, E. Ioannidis, and P. Silberzan, *Rectified motion of a mercury drop in an Asymmetric Structure*, Europhys. Lett. **33**, 267 (1996).
- [10] M.O. Magnasco, *Molecular Combustion Motors*, Phys. Rev. Lett. **72**, 2656 (1994); M.M. Millonas and D.R. Chialvo, *Nonequilibrium Fluctuation-Induced Phase Transport in Josephson junctions*, Phys. Rev. E **53**, 2239 (1996).
- [11] J.F. Chauwin, A. Ajdari, and J. Prost, *Current Reversal in Asymmetric Pumping*, Europhys. Lett. **32**, 373 (1995); M. Bier, *Reversals of Noise Induced Flow*, Phys. Lett. A **211**, 12 (1996).
- [12] M.M. Millonas, *Self-Consistent Microscopic Theory of Fluctuation-Induced Transport*, Phys. Rev. Lett. **74**, 10 (1995); A.M. Jayannavar, *Simple model for Maxwell's-demon-type Information Engine*, Phys. Rev. E **53**, 2957 (1996).
- [13] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, (Addison-Wesley, Reading, MA, 1966); Vol. I, Cap. "Ratchet and Pawl".
- [14] W. Hua, E. Young, M. Fleming y J. Gelles, *Coupling of Kinesin Steps to ATP Hydrolysis*, Nature **388**, 390 (1997); J. Finer, R. Simmons y J. Spudis, *Single Myosin Molecule Mechanics: Piconewton Forces and Nanometre Steps*, Nature **368**, 113 (1994); R. Astumian, *Thermodynamics and Kinetics of a Brownian Motor*, Science **276**, 917 (1997).

- [15] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari y J. Prost, *Directional Motion of Brownian Particles Induced by a Periodic Asymmetric Potential*, Nature **370**, 446 (1994).
- [16] F. Marchesoni, *Transport Properties in Disordered Ratchet Potentials*, Phys. Rev. E **56**, 2492 (1997).
- [17] M. Magnasco, Cap. "Brownian Combustion Engines", *Fluctuations and Order, The New Synthesis*, editado por M. Millonas (Springer, New York, 1996).
- [18] R. Kubo, *The Fluctuation-Dissipation Theorem*, Repts. Prog. Phys. **24**, 255 (1966); R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II* (Springer Verlag Series in Solid State Physics 31, 1978); p. 31.
- [19] C. García-García, *Transporte Caótico en Potenciales Asimétricos*, tesis de Licenciatura (Física), Facultad de Ciencias, UNAM (1997).
- [20] B. Alberts and R. Miake-Lye, *Unscrambling the puzzle of biological machines: the importance of the details*. Cell **68**, 415-420 (1992).
- [21] I. Rayment, et al. *The cycle of changes by which a myosin molecule walks along an actine filament*. Science **261**, 50-58 (1993).
- [22] T.L. Hill, *Biochemical cycles and free energy transduction*. Trends Biochem. Sci. **2**, 204-207 (1977).
- [23] G.S. Bloom, *Motor proteins for cytoplasmic microtubules*. Curr. Opin. Cell Biol. **4**, 66-73 (1992); V.I. Gelfand and J.M. Scholey, *Every motion has its motor*. Nature **359**, 480-482 (1992).
- [24] A. Einstein, Ann. Phys. **17**, 549 (1905).
- [25] M. Smoluchowski, Ann. Phys. **21**, 756 (1906).
- [26] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, Great Britain, 1980), capítulo "Fluctuations".
- [27] R. Kubo, *Statistical Mechanics*, (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965).

- [28] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [29] S.Chandrasekhar, *Stochastic Problems in Physics and Astronomy*, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).
- [30] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*, (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [31] R. Bartussek, P. Hänggi and J.G. Kissner, *Periodically Rocked Thermal Ratchets*, Europhys. Lett. **28**, 459 (1994).
- [32] P. Jung, J.G. Kissner and P. Hänggi, *Regular and Chaotic Transport in Asymmetric Periodic Potentials: Inertia Ratchets*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3436 (1996).
- [33] L. Ibarra-Bracamontes y V. Romero-Rochín, *Stochastic Ratchets with Colored Thermal Noise*, Phys. Rev. E **56**, 4048 (1997).
- [34] W.H. Press and S.A. Teukolsky, *Portable Random Number Generators*, Comp. in Phys. **6**, 522 (1992); W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing* (Cambridge U.P., New York, 1992), 2nd. ed.
- [35] J. Parrondo y P. Español, *Criticism of Feynman's Analysis of the Ratchet as an Engine*, Am.J.Phys. **64**, 1125 (1996).

Apéndice A

Aquí se presenta el programa para resolver numéricamente la ecuación generalizada de Langevin con potencial periódico asimétrico, ruido de color y fuerza externa oscilatoria. El programa lee de un archivo de datos los valores de: *idum* la semilla para el generador de números aleatorios, *nt* el número total de pasos temporales, *J* el intervalo en el que va ir registrando cada nuevo resultado de la posición *x*, *dt* el tamaño del paso temporal, *Tb* el tiempo de correlación del baño térmico, *xKT* el valor de la energía *kT* que depende de la temperatura del medio, γ el coeficiente de fricción del medio, *Fe* la amplitud de la fuerza externa, *ome* la frecuencia de oscilación de la fuerza externa, *X(0)* y *X(1)* la posición de la partícula al inicio y después del primer paso temporal respectivamente.

```
C      *   program  glxaut.f
C      *   PROGRAMA PARA LA EC. GENERALIZADA
C      *   DE LANGEVIN CON POTENCIAL RATCHET, RUIDO
C      *   DE COLOR Y FZA. EXTERNA OSCILATORIA.
      implicit integer (I-N)
      implicit real (A-H,O-Z)
      dimension Z(21000),fac1(21000),X(21000)
C      *   DATOS DE ENTRADA
      read(5,*)idum
      read(5,*)nt
      read(5,*)J
      read(5,*)dt
      read(5,*)Tb
      read(5,*)xKT
```

```

read(5,*)gama
read(5,*)Fe
read(5,*)ome
read(5,*)X(0)
read(5,*)X(1)
C
Pi = 3.14159265358979
dt2 = dt*dt
Kc = int(20.0*Tb/dt)+1
C
C *   CALCULO DE NUMEROS ALEATORIOS
do I = 1,Kc
    call gaudist(idum,Z(I))
end do
C
C *   EL KERNEL DE LAS INTEGRALES
do M = 1,Kc
    fac1(M) = EXP(-(Kc-M)*dt/Tb)
end do
C
C *   INICIO DE LA SECUENCIA
do ii = 1,10
    X(0) = 0.0
    X(1) = 0.001
    write(69+ii,*)X(0)
C
C *   CALCULO DEL TERMINO DE FRICCION
G = gama/(2.0*Tb)
    sum1 = 0.0
    sum1 = G*(X(1)-X(0)) + sum1
C
C *   CALCULO DE LA FUERZA DEBIDA AL POTENCIAL
Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(1)) -COS(4.0*Pi*X(1))
#   +COS(6.0*Pi*X(1)))
C
C *   CALCULO DE LA PRIMERA FUERZA ESTOCASTICA
Fsb = SQRT(2.0*gama*xKT)/Tb

```

```

        sum2 = 0.0
        do M = 1,Kc
            sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
        end do
    FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
C
C    *   CALCULO DE LA FUERZA EXTERNA OSCILATORIA
    FEXT = Fe*COS(ome*dt)
C
C    *   CALCULO DE LA POSICION
    X(2) = 2.0*X(1) -X(0) -sum1*dt2 -Vp*dt2 +FS*dt2
#       +FEXT*dt2
C
C
C    *   CALCULO DE 2 A Kc DE LAS FUERZAS Y POSICIONES
    do K = 2,Kc
        sum1 = 0.0
        do I = 1,K
            sum1 = G*EXP(-(K-I)*dt/Tb)*(X(I)-X(I-1))
#           + sum1
        end do
        Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(K)) -COS(4.0*Pi*X(K))
#       +COS(6.0*Pi*X(K)))
        sum2 = 0.0
        do M = 1,Kc-1
            Z(M) = Z(M+1)
            sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
        end do
        call gaudist(idum,Z(Kc))
        sum2 = Z(Kc) + sum2
        FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
        FEXT = Fe*COS(ome*K*dt)
        X(K+1) = 2.0*X(K) -X(K-1) -sum1*dt2 -Vp*dt2
#           +FS*dt2 +FEXT*dt2
        if(mod(K,J).eq.0)write(69+ii,*)X(K+1)
    end do
C

```

```

C      *   CALCULO DE LOS VALORES Kc EN ADELANTE, DE
C      *   LAS FUERZAS Y POSICIONES
      do K = Kc+1,nt
          sum1 = 0.0
          X(0) = X(1)
          do M = 1,Kc-1
              X(M) = X(M+1)
              sum1 = G*fac1(M)*(X(M)-X(M-1))
#              + sum1
          end do
          X(Kc) = X(Kc+1)
          sum1 = G*(X(Kc)-X(Kc-1)) + sum1
      Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(Kc))-COS(4.0*Pi*X(Kc))
#      +COS(6.0*Pi*X(Kc)))
          sum2 = 0.0
          do M = 1,Kc-1
              Z(M) = Z(M+1)
              sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
          end do
          call gaudist(idum,Z(Kc))
          sum2 = Z(Kc) + sum2
          FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
          FEXT = Fe*COS(ome*K*dt)
          X(Kc+1) = 2.0*X(Kc) -X(Kc-1) -sum1*dt2 -Vp*dt2
#          +FS*dt2 +FEXT*dt2
          if(mod(K,J).eq.0)write(69+ii,*)X(Kc+1)
      end do
C
      idum = idum - 10
      end do
      end

```

Apéndice B

Algoritmo utilizado para la generación de números aleatorios con distribución gaussiana (gasdev), el cual utiliza a su vez una subrutina para el generador de números aleatorios con distribución uniforme (ran1), ver referencia [34].

```
subroutine gaudist(idum,x)
  x=gasdev(idum)
  return
end
```

```
FUNCTION GASDEV(IDUM)
DATA ISET/0/
IF (ISET.EQ.0) THEN
1   V1=2.*RAN1(IDUM)-1.
   V2=2.*RAN1(IDUM)-1.
   R=V1**2+V2**2
   IF (R.GE.1..OR.R.EQ.0.) GO TO 1
   FAC=SQRT(-2.*LOG(R)/R)
   GSET=V1*FAC
   GASDEV=V2*FAC
   ISET=1
ELSE
   GASDEV=GSET
   ISET=0
END IF
RETURN
```

END

```

FUNCTION ran1(idum)
  INTEGER idum,IA,IM,IQ,IR,NTAB,NDIV
  REAL ran1,AM,EPS,RNMX
  PARAMETER (IA=16807,IM=2147483647,AM=1./IM,
*   IQ=127773,IR=2836,NTAB=32,NDIV=1+(IM-1)/NTAB,
*   EPS=1.2E-7,RNMX=1.-EPS)
  INTEGER j,k,iv(NTAB),iy
  SAVE iv,iy
  DATA iv /NTAB*0/, iy /0/
  if (idum.le.0.or.iy.eq.0) then
    idum=max(-idum,1)
    do   j=NTAB+8,1,-1
      k=idum/IQ
      idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
      if (idum.lt.0) idum=idum+IM
      if (j.le.NTAB) iv(j)=idum
    end do
    iy=iv(1)
  end if
  k=idum/IQ
  idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
  if (idum.lt.0) idum=idum+IM
  j=1+iy/NDIV
  iy=iv(j)
  iv(j)=idum
  ran1=min(AM*iy,RNMX)
  return
END

```

Apéndice C

A continuación se presenta el programa para la solución de la ecuación generalizada de Langevin con potencial periódico asimétrico, ruido de color y una fuerza externa correlacionada. El programa lee de un archivo de datos los valores de: *idum* la semilla para el generador de numeros aleatorios, *nt* el número total de pasos temporales, *J* el intervalo en el que va ir registrando cada nuevo resultado de la posición *x*, *dt* el tamaño del paso temporal, *Tb* el tiempo de correlación del baño térmico, *Text* el tiempo de correlación de la fuerza externa, αKT el valor de la energía kT que depende de la temperatura del medio, γ el coeficiente de fricción del medio, *phiext* la intensidad de la fuerza externa, *X(0)* y *X(1)* la posición de la partícula al inicio y después del primer paso temporal respectivamente.

```
C      *   program glmrcfc.f
C      *   PROGRAMA PARA LA EC. GENERALIZADA DE
C      *   LANGEVIN CON POTENCIAL RATCHET, RUIDO DE
C      *   COLOR Y FZA. EXTERNA CORRELACIONADA.
      implicit integer (I-N)
      implicit real (A-H,O-Z)
      dimension Z(21000),ZZ(21000),fac1(21000),
#         fac2(21000),X(21000)
C      *   DATOS DE ENTRADA
      read(5,*)idum
      read(5,*)nt
      read(5,*)J
      read(5,*)dt
      read(5,*)Tb
```

```

read(5,*)Text
read(5,*)xKT
read(5,*)gama
read(5,*)phiext
read(5,*)X(0)
read(5,*)X(1)
C
iome = idum-100
Pi = 3.14159265358979
dt2 = dt*dt
Kc = int(20.0*Tb/dt)+1
Lc = int(20.0*Text/dt)+1
C
C * CALCULO DE NUMEROS ALEATORIOS
do I = 1,Kc
  call gaudist(idum,Z(I))
end do
do I = 1,Lc
  call gaudist(iome,ZZ(I))
end do
C
C * EL KERNEL DE LAS INTEGRALES
do M = 1,Kc
  fac1(M) = EXP(-(Kc-M)*dt/Tb)
end do
do M = 1,Lc
  fac2(M) = EXP(-(Lc-M)*dt/Text)
end do
C
C * INICIO DE LA SECUENCIA
do ii = 1,10
  X(0) = 0.0
  X(1) = 0.001
  write(69+ii,*)X(0)
C
C * CALCULO DEL TERMINO DE FRICCION
G = gama/(2.0*Tb)

```

```

        sum1 = 0.0
        sum1 = G*(X(1)-X(0)) + sum1
C
C      *   CALCULO DE LA FUERZA DEBIDA AL POTENCIAL
Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(1)) -COS(4.0*Pi*X(1))
#      +COS(6.0*Pi*X(1)))
C
C      *   CALCULO DE LA PRIMERA FUERZA ESTOCASTICA
Fsb = SQRT(2.0*gama*xKT)/Tb
        sum2 = 0.0
        do M = 1,Kc
            sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
        end do
FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
C
C      *   CALCULO DE LA FUERZA EXTERNA ESTOCASTICA
Fsx = phiext/Text
        sum3 = 0.0
        do M = 1,Lc
            sum3 = fac2(M)*ZZ(M) + sum3
        end do
FEXT = Fsx*sum3*SQRT(dt)
C
C      *   CALCULO DE LA POSICION
X(2) = 2.0*X(1) -X(0) -sum1*dt2 -Vp*dt2 +FS*dt2
#      +FEXT*dt2
C
C      *   CALCULO DE 2 A Kc DE LAS FUERZAS Y POSICIONES
do K = 2,Kc
        sum1 = 0.0
        do I = 1,K
            sum1 = G*EXP(-(K-I)*dt/Tb)*(X(I)-X(I-1))
#            + sum1
        end do
Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(K)) -COS(4.0*Pi*X(K))
#      +COS(6.0*Pi*X(K)))
        sum2 = 0.0

```

```

      do M = 1,Kc-1
          Z(M) = Z(M+1)
          sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
      end do
      call gaudist(idum,Z(Kc))
      sum2 = Z(Kc) + sum2
      FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
      sum3 = 0.0
      do M = 1,Lc-1
          ZZ(M) = ZZ(M+1)
          sum3 = fac2(M)*ZZ(M) + sum3
      end do
      call gaudist(iome,ZZ(Lc))
      sum3 = ZZ(Lc) + sum3
      FEXT = Fsx*sum3*SQRT(dt)
      X(K+1) = 2.0*X(K) -X(K-1) -sum1*dt2 -Vp*dt2
      #      +FS*dt2 +FEXT*dt2
      if(mod(K,J).eq.0)write(69+ii,*)X(K+1)
      end do
C
C      *   CALCULO DE LOS VALORES Kc EN ADELANTE, DE
C      *   LAS FUERZAS Y POSICIONES
      do K = Kc+1,nt
          sum1 = 0.0
          X(0) = X(1)
          do M = 1,Kc-1
              X(M) = X(M+1)
              sum1 = G*fac1(M)*(X(M)-X(M-1)) + sum1
          end do
          X(Kc) = X(Kc+1)
          sum1 = G*(X(Kc)-X(Kc-1)) + sum1
          Vp = 2.5*(COS(2.0*Pi*X(Kc))-COS(4.0*Pi*X(Kc))
          #      +COS(6.0*Pi*X(Kc)))
          sum2 = 0.0
          do M = 1,Kc-1
              Z(M) = Z(M+1)
              sum2 = fac1(M)*Z(M) + sum2
          end do
      end do

```

```

    end do
  call gaudist(idum,Z(Kc))
  sum2 = Z(Kc) + sum2
  FS = Fsb*sum2*SQRT(dt)
  sum3 = 0.0
  do M = 1,Lc-1
    ZZ(M) = ZZ(M+1)
    sum3 = fac2(M)*ZZ(M) + sum3
  end do
  call gaudist(iome,ZZ(Lc))
  sum3 = ZZ(Lc) + sum3
  FEXT = Fsx*sum3*SQRT(dt)
  X(Kc+1) = 2.0*X(Kc) -X(Kc-1) -sum1*dt2 -Vp*dt2
#      +FS*dt2 +FEXT*dt2
  if(mod(K,J).eq.0)write(69+ii,*)X(Kc+1)
end do

```

C

```

  idum = idum - 10
  iome = iome - 10
end do
end

```

Apéndice D

Este es un ejemplo de los scripts utilizados para la generación de cada uno de los archivos que nos muestran la posición de la partícula Browniana en cada paso temporal. El presente script permite la generación de 100 archivos, llamando cada vez al programa principal (Apéndices A o C), para diferentes semillas y así obtener distintas realizaciones de la fuerza estocástica.

```
#!/bin/sh
# script para el programa glxaut
# ./filescript < semilla
  ./glxaut<datext.10
mv fort.70 gf2c1g2.10
mv fort.71 gf2c1g2.20
mv fort.72 gf2c1g2.30
mv fort.73 gf2c1g2.40
mv fort.74 gf2c1g2.50
mv fort.75 gf2c1g2.60
mv fort.76 gf2c1g2.70
mv fort.77 gf2c1g2.80
mv fort.78 gf2c1g2.90
mv fort.79 gf2c1g2.00
for datos
  in datext.?
do
  ./glxaut<${datos}
  read semilla
mv fort.70 gf2c1g2.00$semilla
```

```
mv fort.71 gf2c1g2.1$semilla
mv fort.72 gf2c1g2.2$semilla
mv fort.73 gf2c1g2.3$semilla
mv fort.74 gf2c1g2.4$semilla
mv fort.75 gf2c1g2.5$semilla
mv fort.76 gf2c1g2.6$semilla
mv fort.77 gf2c1g2.7$semilla
mv fort.78 gf2c1g2.8$semilla
mv fort.79 gf2c1g2.9$semilla
done
```

Apéndice E

Finalmente se muestra el artículo *Stochastic ratchets with colored thermal noise*, que fue aceptado para su publicación en *Physical Review E*, donde dimos a conocer parte de los resultados que ahora mostramos en la presente tesis.

Stochastic ratchets with colored thermal noise

Laura Ibarra-Bracamontes and Víctor Romero-Rochín*

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, Mexico

(Received 19 November 1996)

We study thermal ratchet systems, i.e., particles moving in asymmetric periodic potentials using a generalized Langevin equation. This scheme allows for a clear distinction of thermal noise, whether "white" or "colored," and time-dependent external fields, deterministic or stochastic. It can then be verified that, as a consequence of the fluctuation-dissipation theorem, the ratchet does not drift if it is in interaction *only* with a thermal bath. That is, we show that a net current arises only if the forcing is done by an *external* source. Hence we find that the only necessary condition for rectifying an external field, producing a current, is the asymmetry of the potential. The use of the generalized Langevin equation gives access to a wider variation of the quantities involved; for instance, we find that an inverted current arises for external fields correlated in shorter time scales than the thermal noise. [S1063-651X(97)09110-1]

PACS number(s): 05.40.+j, 87.10.+e

Unexpected transport properties of the so-called stochastic ratchets, namely, dissipative systems of particles moving in asymmetric periodic potentials in the presence of thermal and external noise, have been the focus of attention of recent studies [1-8]. In addition to their potential application in the understanding of biological or molecular machines [5,6], one of the most intriguing aspects of stochastic ratchets is their ability to "rectify" symmetric *correlated* noise and thus being able to produce a net current. This result was pointed out by Magnasco [1] and further verified by others [2,3], using a one-dimensional ratchet system in the presence of external *colored* noise, in the overdamped (Smoluchowski) limit. That study was inspired by the classical work by Feynman [9], where the ratchet and pawl system is used to exemplify the second law of thermodynamics: Feynman shows that a system executing Brownian motion in contact with a thermal reservoir cannot produce work.

In this paper we verify that, as a consequence of the fluctuation-dissipation theorem [10], a ratchet in the presence of thermal noise *only* does not show any current, whether the fluctuations of the bath are time correlated or uncorrelated. Thus the net current or drift of the particle must be produced by the presence of an *external* source. In particular, we shall show that *any* external forcing may be used to produce the drift. That is, we shall argue that the onset of a net current is only due to the asymmetry of the potential and that it is not necessary that the external forcing be correlated in time.

In previous studies [1-7], the description of the dynamics of the system was done under the assumption of a large separation of time scales, those of the ratchet (e.g., a motor protein), and of the thermal bath. The latter approximation, however, allows for considering "white" thermal noise only and therefore any time correlation of the forcing must come from an external source. Here, by describing the ratchet system in the Brownian regime by means of a generalized Langevin equation, one is able to consider thermal noise with finite correlation times and thus it can be shown that the production of the current is due to a time-dependent external force.

The *generalized* Langevin equation of a particle of mass *m* moving in an asymmetric periodic potential *V(x)* (see Fig. 1) is

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = - \int_{-\infty}^t d\tau \Gamma(t-\tau) \frac{dx(\tau)}{d\tau} - \frac{d}{dx} V(x) + f(t) + F_{ext}(t), \tag{1}$$

where $\Gamma(t)$ is the *memory* friction kernel and $f(t)$ is the stochastic fluctuating thermal force exerted by the bath. $F_{ext}(t)$ is a time-dependent *external* force. It is important to stress that the properties of $F_{ext}(t)$, whether stochastic or deterministic, correspond to a *given* external process and they are completely independent of the *internal* degrees of freedom of the system-bath composite. The thermal force $f(t)$ has the usual stochastic properties of being gaussian with zero mean $\overline{f(t)} = 0$ and its second moment is related to the memory friction kernel by the fluctuation-dissipation expression [10]

$$\overline{f(t)f(t')} = 2kT\Gamma(t-t') \text{ for } t > t', \tag{2}$$

where k is Boltzmann constant and T the temperature of the bath. This theorem ensures proper equilibration of the overall system-bath composite when $F_{ext}(t) = 0$. As is well known,

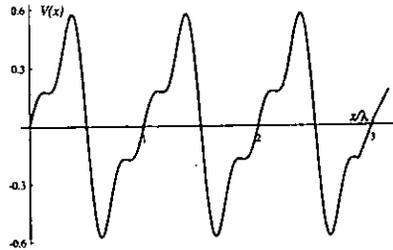


FIG. 1. Ratchet potential. See Eq. (6).

* Author to whom correspondence should be addressed.

one recovers the usual Langevin equation with white noise when the memory kernel becomes δ correlated, that is, when

$$\Gamma(t) = \gamma\delta(t), \quad (3)$$

with γ the friction coefficient. It is important to recall that the use of a dissipation kernel $\Gamma(t)$ with or without memory depends on the time scales of evolution of what one considers to be the "system" and the "bath." In reality, of course, a thermal bath is always colored. However, if the time scales of evolution are such that one is able to approximate the bath as being white, in comparison with the time scale of the system, the description becomes Markovian. This property allows for a more complete mathematical description of the dynamics of the system than if the finite time correlations of the bath are kept. But certainly, if the time scales of the system and the bath are comparable, then one must face the non-Markovian character of the corresponding dynamical equations. One of the most serious difficulties due to the lack of Markovian character is that the whole hierarchy of multiple-time probability distributions cannot be constructed from the knowledge of the two-time conditional probability distribution [11]. Moreover, in general, one cannot write down a (generalized) Fokker-Planck equation for this distribution [12]. The latter result has consequences in the present study.

As we shall show below, by a numerical solution of Eq. (1), such an equation does not show a net current in the absence of external forces, i.e., if $F_{ext}(t) = 0$ in Eq. (1). Nevertheless, and this was truly unexpected [1], if one adds a *time-symmetric* external force, the system then shows a net current, in general. A different result here is the fact that the correlation time of the external force can even be shorter than that of the thermal bath in order to produce a current.

For comparison purposes we shall use as external forces a systematic deterministic oscillatory force, such as

$$F_{ext}(t) = F_0 \cos(\omega_0 t), \quad (4)$$

with F_0 and ω_0 arbitrary and constant. In the other extreme, we shall consider $F_{ext}(t)$ to be a stochastic force and time symmetric as well.

As already mentioned, in the descriptions given in, e.g., Refs. [1-3], it is assumed that the motion takes place in the overdamped (Smoluchowski) regime and the memory of the bath cannot be taken into account. The dynamical equation then reads

$$\gamma \frac{dx}{dt} = -\frac{d}{dx} V(x) + \tilde{f}(t), \quad (5)$$

where we have written $\tilde{f}(t)$ to make the following points. As such, this equation represents the interaction of a particle with a thermal bath only if $\tilde{f}(t)$ is δ correlated. In other words, only a δ -correlated $\tilde{f}(t)$ obeys the fluctuation-dissipation theorem; see Eqs. (2) and (3). If $\tilde{f}(t)$ shows time correlations with correlation time different from zero, then these are produced necessarily by an external source. It has been argued (see, e.g., Ref. [3]) that these correlations are actually *nonequilibrium fluctuations*. This may indeed be the case, but nonetheless those fluctuations are still of an exter-

nal origin. That is, an isolated system such as the overall system-bath composite, must reach a thermal equilibrium state in the absence of external forcing (such as a time-dependent field or a temperature gradient [8]) and there can be no (stationary) currents. This is in fact the situation for the stochastic process $x(t)$ defined by Eq. (5), with symmetric *correlated* force $\tilde{f}(t)$, and it is precisely in such a case that it has been found [1-4] that the system reaches a stationary state with a net current.

We now proceed to exemplify the above results via numerical solutions of the generalized Langevin equation (1). In dimensionless units ($m=1$ and $\lambda=1$, the mass of the particle and the period of the potential), the ratchet potential is a simple one [3] (see Fig. 1)

$$V(x) = \frac{V_0}{2\pi} \left\{ \sin(2\pi x) - \frac{1}{2} \sin(4\pi x) + \frac{1}{3} \sin(6\pi x) \right\}. \quad (6)$$

The thermal stochastic force is taken to be Gaussian, with zero mean and with the correlation function

$$\overline{\tilde{f}(t)\tilde{f}(t')} = A^2 \frac{1}{2\tau_0} e^{-|t-t'|/\tau_0}, \quad (7)$$

where τ_0 is the bath correlation time. One recovers the δ -correlated situation in the limit $\tau_0 \rightarrow 0$. The memory kernel $\Gamma(t)$ is defined through the fluctuation-dissipation relation (2). The solution to the generalized Langevin equation is dependent on several parameters: V_0 , the amplitude of the ratchet potential; A , the amplitude of the stochastic force; τ_0 , the correlation time, or memory time, of the bath; and T , the temperature that enters in the fluctuation-dissipation relation given by Eq. (2). If in addition we consider an external field $F_{ext}(t)$, as in Eq. (4), we have two more free parameters F_0 and ω_0 ; if the external field is stochastic, we must specify at least its strength and its correlation time. We have kept $V_0 = 2.5$ throughout and vary the rest of the parameters.

The goal here is to find out if the system shows a stationary current different from zero in a given situation defined by the parameters described above. It turns out, however, that in the generalized non-Markovian description it is not clear which is the function that measures the current, such that it reduces to the probability density current in the Markovian limit [13],

$$j(x,t) = -\frac{kT}{\gamma} \partial_x \rho(x,t) + \frac{1}{\gamma} [F_{ext}(t) - \partial_x V(x)] \rho(x,t), \quad (8)$$

with $F_{ext}(t)$ slowly varying. The latter identification follows from the conservation law for the probability density $\rho(x,t)$. This law can be deduced from the corresponding Fokker-Planck (or Smoluchowski) equation [13]. Now, since a "generalized" Fokker-Planck equation is not known [12] (due to the non-Markovian character introduced by the memory term) one cannot write down the conservation law for the generalized probability distribution $\rho(x,t)$. Thus, in order to find out whether or not a current exists, we shall mainly look for the behavior of the average position of the particle as a function of time $x(t)$. This average is calculated over many realizations of the stochastic thermal force, and of

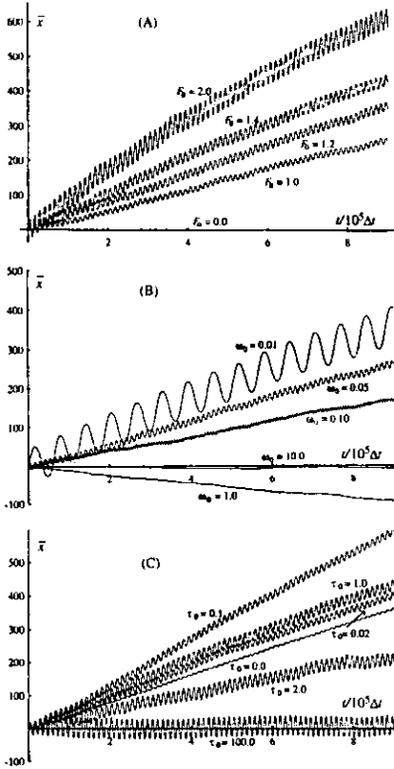


FIG. 2. Average position $\overline{x(t)}$ vs time (a) as a function of the strength F_0 of the external force for $\tau_0=1.0$ and $\omega_0=0.05$, Eq. (4); (b) as a function of the frequency ω_0 of the external force for $\tau_0=1.0$ and $F_0=1.0$, Eq. (4); and (c) as a function of the correlation time τ_0 of the fluctuations of the bath for $\omega_0=0.05$ and $F_0=1.4$, Eq. (7).

the external noise if the latter is also stochastic. If $\overline{x(t)}=0$, there is no current. If $\overline{x(t)}\neq 0$, the particle is drifting. Every situation described below was obtained with 100 realizations of the stochastic force $f(t)$ and for runs of 900 000 time steps ($\Delta t=0.01$) [14].

In Figs. 2(a)–2(c), the average position $\overline{x(t)}$ of a Brownian particle in a ratchet potential in the presence of a given periodic sinusoidal force is shown; cf. Eq. (4). The different curves correspond to different strengths of the external force F_0 [Fig. 2(a)], to different frequencies ω_0 of the external force [Fig. 2(b)], and to different values of the bath correlation time, or memory, τ_0 [Fig. 2(c)]. We can see that, in general, there is a net drift for almost all cases.

We want to highlight the following points. First, in Fig. 2(a), the case of no external force is also shown, i.e.,

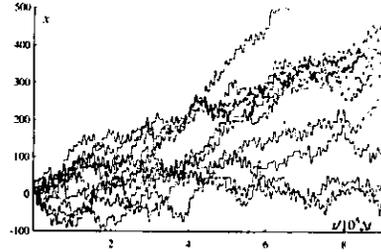


FIG. 3. Position $x(t)$ vs time, for ten different realizations of the stochastic thermal force $f(t)$, in the presence of an external force $F_{ext}(t)$, Eq. (9), $\tau_0=1.0$, $F_0=1.0$, and $\omega_0=0.05$.

$F_0=0.0$, and one finds that there is no net current. We stress that the fluctuations of the bath are time correlated, i.e., $\tau_0\neq 0$. In accordance with the second law, one cannot extract a current from a thermal bath, whether white or colored.

Next, we direct the reader's attention [see Fig. 2(b)] to the striking oscillations of the average position $\overline{x(t)}$. The frequency of this oscillation is, within statistical errors, the frequency ω_0 of the external force. For comparison, in Fig. 3, we show the actual “walker” $x(t)$ of ten runs, corresponding to different realizations of the thermal noise for given τ_0 , F_0 , and ω_0 . One can hardly expect from Fig. 3, given the fact that we are facing a highly nonlinear system, that the average $\overline{x(t)}$ will show such a clean filtering of the forcing frequency. Note also the inversion of the current in Fig. 2(b) for a large driving frequency.

Finally, in Fig. 2(c), it is important to note the nonmonotonic behavior of the current as a function of the memory time τ_0 of the bath, for fixed external force. The case $\tau_0=0.0$ corresponds to a white bath. Note that when the bath has a very long correlation time ($\tau_0=100.0$) it becomes very inefficient in driving the particle.

We now discuss the case in which the time-dependent external force $F_{ext}(t)$ is stochastic. We take it to be Gaussian, with zero mean $\overline{F_{ext}(t)}=0$ and the correlation function

$$\overline{F_{ext}(t)F_{ext}(t')} = F_0^2 \frac{1}{2\tau_{ext}} e^{-|t-t'|/\tau_{ext}}. \quad (9)$$

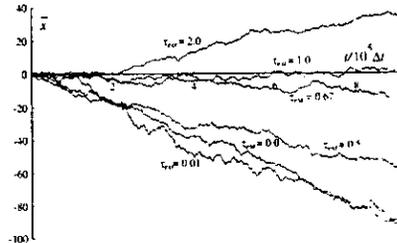


FIG. 4. Average position $\overline{x(t)}$ vs time, as a function of the correlation time τ_{ext} of a stochastic external force $F_{ext}(t)$, Eq. (9) $\tau_0=1.0$ and $F_0=10.0$.

The results are shown in Fig. 4. The different curves correspond to different correlation times τ_{ext} of the external force. Three main conclusions can be drawn from here. First, if the correlation time of the external force is equal to the correlation time of the bath $\tau_{ext} = \tau_0$, there is no drift (as it should because the ratchet comes into contact with a single colored noise). That is, the external force plus the thermal force is equivalent to increasing the intensity of the thermal noise, as can be seen from Eqs. (2), (7), and (9) (completely analogous to the case of a white bath with a δ -correlated external force, as shown in [1,3]). Second, for external correlation times longer than the thermal correlation time $\tau_{ext} > \tau_0$, the situation should approach that of a white bath in the presence of a colored external source: There must be a drift ("positive" in this case), as it has already been demonstrated [1-3]. Third, for external correlation times shorter than the thermal correlation time $\tau_{ext} < \tau_0$, there is also current. It is important to point out that the current in this case is "negative," or "inverted." The origin of this inversion, not elucidated here,

is clearly different from the current inversion found in previous studies [2-4,7].

An interesting case is the extreme one of a colored thermal bath, $\tau_0 \neq 0$, with a white, or δ -correlated, external force $\tau_{ext} = 0$. We found, as shown in Fig. 4, that the ratchet moves. That is, it is capable of rectifying even a symmetric δ -correlated external noise. This result indicates that the only necessary condition for a thermal system to show current is that the potential $V(x)$ be asymmetric. From the present work we can further conclude that the phenomenon is very robust: Perturb in (almost) any way an otherwise ratchet in thermal equilibrium and it will generate a current. We stress once more that the study of a system with a colored thermal bath, memory, and with time-dependent external forces (even δ correlated) can only be studied with a *generalized* Langevin equation, such as Eq. (1).

L.I.B. acknowledges support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Mexico).

-
- [1] M. O. Magnasco, Phys. Rev. Lett. **71**, 1477 (1993).
 [2] M. M. Millonas and M. I. Dykman, Phys. Lett. A **185**, 65 (1994).
 [3] C. R. Doering, W. Horsthemke, and J. Riordan, Phys. Rev. Lett. **72**, 2984 (1994); T. C. Elston and C. R. Doering, J. Stat. Phys. **83**, 359 (1996).
 [4] D. R. Chialvo and M. M. Millonas, Phys. Lett. A **209**, 26 (1995); R. Bartussek, P. Reimann, and P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **76**, 1166 (1996); G. A. Cecchi and M. O. Magnasco, *ibid.* **76**, 1968 (1996).
 [5] For experimental realizations of thermal ratchets see L. P. Faucheux, L. S. Bourdieu, P. D. Kaplan, and A. J. Libchaber, Phys. Rev. Lett. **74**, 1504 (1995); L. Gorre, E. Ioannidis, and P. Silberzan, Europhys. Lett. **33**, 267 (1996).
 [6] M. O. Magnasco, Phys. Rev. Lett. **72**, 2656 (1994); M. M. Millonas and D. R. Chialvo, Phys. Rev. E **53**, 2239 (1996).
 [7] J. F. Chauwin, A. Ajdari, and J. Prost, Europhys. Lett. **32**, 373 (1995); M. Bier, Phys. Lett. A **211**, 12 (1996).
 [8] M. M. Millonas, Phys. Rev. Lett. **74**, 10 (1995); A. M. Jayanavar, Phys. Rev. E **53**, 2957 (1996).
 [9] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1966), Vol. I, Chap. 46.
 [10] R. Kubo, Rep. Prog. Phys. **24**, 255 (1966); see also R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, edited by M. Cardona, P. Fulde, K. von Klitzing, and H.-J. Queisser, Springer Series in Solid State Physics Vol. 31 (Springer-Verlag, Berlin, 1978), p. 31.
 [11] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).
 [12] Of course, a non-Markovian problem can be transformed into a Markovian one by extending the number of variables and equations. We mean here that for a (generic) generalized Langevin equation, such as Eq. (1), there is not a (generic) procedure to obtain a generalized Fokker-Planck equation, analogous to the Markovian case.
 [13] S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).
 [14] In order to check that there are no spurious drifts due to the use of pseudorandom number generators [W. H. Press and S. A. Teukolsky, Comput. Phys. **6**, 522 (1992)] we verified that no current develops for a symmetric or no potential at all, driven by a symmetric time-dependent external force.