

## Molekulární motory: Smoluchowského rovnice a „blikající potenciál“

Milada Krejčová<sup>1</sup>

### 1 Molekulární motory

Veškeré transportní koherentní procesy uvnitř buněk jsou řízeny molekulárními motory, viz Lipowsky (2001). Jsou poháněny energií z hydrolyzy adenosintrifosfátu (ATP) a vykonávají tedy mechanickou práci uvnitř buněk. Příkladem využití této práce může být transport iontů a makromolekul přes buněčnou membránu, vnitro buněčný transport váčků a organel, buněčné dělení a v neposlední řadě pohyb samotných buněk.

Jejich charakteristická velikost se pohybuje v desítkách nanometrů, takže jsou velmi ovlivňovány Brownovým (tepelným) pohybem, který slouží jako efektivní „lubrikant“, jak je ukázáno v Fall et al. (2002).

### 2 Smoluchowského rovnice

Jak již bylo zmíněno v předešlé části, molekulární motory jsou ovlivňovány Brownovým pohybem, který však ze své podstaty vyžaduje stochastický přístup. Proto místo počítání velkého množství jednotlivých částic je lepší počítat velké množství nezávislých částic, resp. pravděpodobnost výskytu jedné částice, pohybující se ve stejném čase a sledovat vývoj této pravděpodobnosti.

Nejjednodušší způsob jejich popisu je pomocí Smoluchowského rovnice (odvozené v Fall et al. (2002)), která má tvar

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( p \frac{\partial(\phi/(k_B T))}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right]. \quad (1)$$

První člen na pravé straně této rovnice vyjadřuje posun, druhý difuzi. Přičemž  $p$  je pravděpodobnost výskytu jedné částice,  $D$  koeficient difuze,  $\phi$  potenciál hnací síly motoru,  $k_B$  Boltzmannova konstanta a  $T$  je termodynamická teplota.

### 3 Motor řízený „blikajícím potenciálem“

Proces, kde je motor řízený „blikajícím potenciálem“, se nazývá přeskakující západka (*angl.* flashing ratchet). Jedná se o paradigma molekulárních motorů (Fall et al. (2002)).

Tento případ je matematickým modelem proteinu vystaveného střídání dvou potenciálů  $\phi_1$  a  $\phi_2$ , kdy první je silně asymetrický a druhý konstantní. Přepínání mezi potenciály je řízeno chemickou reakcí s rychlostí  $k$ . Tento parametr pak musí splňovat, že protein dosáhne minima potenciálové jámy před vypnutím potenciálu, a zároveň, že volná difuze neprobíhá na větším intervalu než je vlnová délka  $\phi_1$ .

<sup>1</sup> studentka doktorského studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná mechanika, e-mail: mkrejcov@kme.zcu.cz

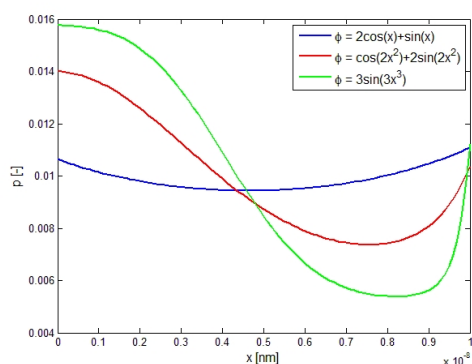
Takto nadefinovanou úlohu lze popsat soustavou dvou Smoluchovského rovnic ve tvaru

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( p_i \frac{\partial(\phi_i/(k_B T))}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 p_i}{\partial x^2} \right] + k(-p_i + p_j), \quad i = 1, 2, j \neq i, \quad (2)$$

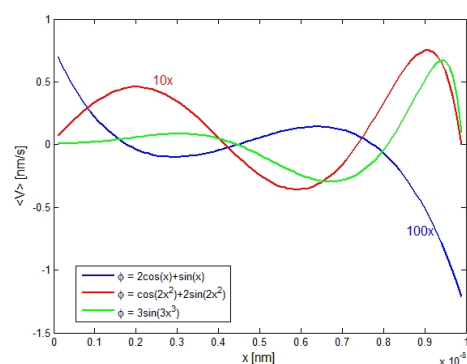
která se řeší na intervalu  $[0, L]$  s periodickými okrajovými podmínkami.

Když pravděpodobnostní rozložení dosáhne ustáleného stavu, je možné vypočítat střední rychlost pomocí vztahu  $\langle V \rangle = -LD \left[ \frac{\partial(p_1 + p_2)}{\partial x} + \frac{\partial\phi_1/\partial x}{k_B T} p_1 \right]$ .

## 4 Výsledky a závěr



**Obrázek 1:** Rozložení pravděpodobnosti výskytu jedné částice pro přeskakující západku při daných „blikajících“ potenciálech“, které jsou v jednotkách  $k_B T$ .



**Obrázek 2:** Rozložení rychlosti přeskakující západky při daných „blikajících“ potenciálech“, které jsou v jednotkách  $k_B T$ .

Na obr. 1 je zobrazeno rozložení hustoty pravděpodobnosti nalezení 1 částice pro různé hodnoty potenciálu uváděných v jednotkách  $k_B T$ . Pokud bychom tuto rozložení porovnali s tvarem příslušného potenciálu, dostali by jsme, že maximum v rozložení odpovídá minimu potenciálu a obráceně. Tento jev je možné zdůvodnit tím, že maximum potenciálu tvoří nestabilní „podloží“, proto částice „sede“ do údolí, kde má potenciál minimum. Částici lze tedy přirovnat k vodě stékající z hor.

Na obr. 2 je vykreslena střední rychlost přeskakující západky pro různé hodnoty potenciálů uváděných v jednotkách  $k_B T$ . Protože rychlost se pro málo rozkmitaný potenciál blíží k nule, bylo nutné rychlosti vynásobit koeficienty 100, 10, 1 kvůli zobrazení v jednom obrázku.

Na těchto výsledcích lze tedy pozorovat značnou závislost na potenciálu.

### Poděkování

Příspěvek byl podpořen grantovým projektem SGS-2016-059

### Literatura

- LIPOWSKY, R., 2001. Movements of Molecular Motors. Biological Physics 2000.  
 FALL, Ch. P., et al., 2002. Computational cell biology. Springer, New York.