Neklidné molekuly

František Slanina

Spolupráce: P. Chvosta Fyzikální ústav AVČR slanina@fzu.cz

- Robert Brown
- Perpetuum mobile pro každého
- Kde už to funguje
- Jak chytit DNA
- Nejtenčí gumička
- Zkrocení entropie

Robert Brown (1773–1858)



Robert Brown (1773–1858)



BRIEF ACCOUNT

A

OF

MICROSCOPICAL OBSERVATIONS

Made in the Months of June, July, and August, 1827,

ON THE PARTICLES CONTAINED IN THE POLLEN OF PLANTS;

AND

ON THE GENERAL EXISTENCE OF ACTIVE MOLECULES

IN ORGANIC AND INORGANIC BODIES.

BY

ROBERT BROWN,

F.R.S., HON. M.R.S.E. AND R.I. ACAD., V.P.L.S.,

MEMBER OF THE ROYAL ACADEMY OF SCIENCES OF SWEDEN, OF THE ROYAL SOCIETY OF DENMARK, AND OF THE IMPERIAL ACADEMY NATURÆ CURIOSORUMA CORRESPONDING MEMBER OF THE ROYAL INSTITUTES OF FRANCE AND OF THE NETHERLANDS,

Neklidné molekuly – p.3/22

BRIEF ACCOUNT

A

OF

MICROSCOPICAL OBSERVATIONS

Made in the Months of June, July, and August, 1827,

ON THE PARTICLES CONTAINED IN THE POLLEN OF PLANTS;

AND

ON THE GENERAL EXISTENCE OF ACTIVE MOLECULES

IN ORGANIC AND INORGANIC BODIES.

BY

ROBERT BROWN,

F.R.S., HON. M.R.S.E. AND R.I. ACAD., V.P.L.S.,

MEMBER OF THE ROYAL ACADEMY OF SCIENCES OF SWEDEN, OF THE ROYAL SOCIETY OF DENMARK, AND OF THE IMPERIAL ACADEMY NATURÆ CURIOSORUMA; CORRESPONDING MEMBER OF THE ROYAL INSTITUTES OF FRANCE AND OF THE NETHERLANDS,

Neklidné molekuly – p.3/22

BRIEF ACCOUNT

A

OF

MICROSCOPICAL OBSERVATIONS

Made in the Months of June, July, and August, 1827,

ON THE PARTICLES CONTAINED IN THE POLLEN OF PLANTS;

AND

This plant was Clarckia pulchella,

ON THE GENERAL EXISTENCE OF ACTIVE MOLECULES

IN ORGANIC AND INORGANIC BODIES.

BY

ROBERT BROWN,

F.R.S., HON. M.R.S.E. AND R.I. ACAD., V.P.L.S.,

MEMBER OF THE ROYAL ACADEMY OF SCIENCES OF SWEDEN, OF THE ROYAL SOCIETY OF DENMARK, AND OF THE IMPERIAL ACADEMY NATURÆ CURIOSORUM; CORRESPONDING MEMBER OF THE ROYAL INSTITUTES OF FRANCE AND OF THE NETHERLANDS,

Neklidné molekuly – p.3/22











Neklidné molekuly - p.3/22

In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist

Neklidné molekuly – p.4/22

In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



Neklidné molekuly – p.4/22

In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



Neklidné molekuly - p.4/22

In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die <u>klassische Thermodynamik</u> schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



In dieser Arbeit solf gezeigt werden, daß nach der molekularkinetischen Theorie der Wärme in Flüssigkeiten suspendierte Körper von mikroskopisch sichtbarer Größe infolge der Molekularbewegung der Wärme Bewegungen von solcher Größe ausführen müssen, daß diese Bewegungen leicht mit dem Mikroskop nachgewiesen werden können. Es ist möglich, daß die hier zu behandelnden Bewegungen mit der sogenannten "Brown schen Molekularbewegung" identisch sind; die mir erreichbaren Angaben über letztere sind jedoch so ungenau, daß ich mir hierüber kein Urteil bilden konnte.

Wenn sich die hier zu behandelnde Bewegung samt den für sie zu erwartenden Gesetzmäßigkeiten wirklich beobachten läßt, so ist die klassische Thermodynamik schon für mikroskopisch unterscheidbare Räume nicht mehr als genau gültig anzusehen und es ist dann eine exakte Bestimmung der wahren Atomgröße möglich. Erwiese sich umgekehrt die Voraussage dieser Bewegung als unzutreffend, so wäre damit ein schwerwiegendes Argument gegen die molekularkinetische Auffassung der Wärme gegeben.

§ 1. Über den suspendierten Teilchen zuzuschreibenden osmotischen Druck.

Im Teilvolumen V^* einer Flüssigkeit vom Gesamtvolumen Vseien z-Gramm-Moleküle eines Nichtelektrolyten gelöst. Ist



Neklidné molekuly - p.4/22

Efekt rohatky (Smoluchowski, Feynman,...)



Efekt rohatky (Smoluchowski, Feynman,...)



Browův motor[P. Reiman, Phys. Rep. 361, 57 (2002); P. Hänggi et al., cond-mat/0410033] ingredience:

1) Nerovnovážný otevřený systém { Přepínání kolébání

Browův motor[P. Reiman, Phys. Rep. 361, 57 (2002); P. Hänggi et al., cond-mat/0410033] ingredience:

1) Nerovnovážný otevřený systém

Přepínání kolébání

2) zrcadlová nesymetrie



Volnoběh

Browův motor[P. Reiman, Phys. Rep. 361, 57 (2002); P. Hänggi et al., cond-mat/0410033] ingredience:

1) Nerovnovážný otevřený systém

Přepínání kolébání

2) zrcadlová nesymetrie



Volnoběh

S nákladem

Teplotní rohatka



Difuze

<

proud

Neklidné molekuly – p.7/22

Teplotní rohatka



Difuze

proud

Kolébací rohatka

(koho to zajímá: Aristotelovská mechanika)

-

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x(t) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} + F_{\text{load}} + F_0 \sin \omega t + \xi(t)$$

Neklidné molekuly – p.7/22



Heterostruktura na bázi GaAs/AlGaAs. Perioda $L \simeq 1.2 \mu m$.



Heterostruktura na bázi GaAs/AlGaAs. Perioda $L \simeq 1.2 \mu m$.



Napětí skáče mezi ± 1 mV, frekvence 191Hz



Heterostruktura na bázi GaAs/AlGaAs. Perioda $L \simeq 1.2 \mu m$.

nanopóry v křemíku





Napětí skáče mezi ±1mV, frekvence 191Hz



Heterostruktura na bázi GaAs/AlGaAs. Perioda $L \simeq 1.2 \mu m$.

nanopóry v křemíku



nanočásticové sítko





Napětí skáče mezi ±1mV, frekvence 191Hz



Heterostruktura na bázi GaAs/AlGaAs. Perioda $L \simeq 1.2 \mu \text{m}$.

nanopóry v křemíku

sin ωt



Napětí skáče mezi ±1mV, frekvence 191Hz





<---

 \rightarrow

Kinesin přepravuje váčky





Kinesin přepravuje váčky



Myosin tahá za svalová vlákna



Kinesin přepravuje váčky



Myosin tahá za svalová vlákna



Kinesin přepravuje váčky



sarcomere

actin



myosin

muscle fiber



(a)

(b)

(c)

[Igor M. Kulic, Rochish Thaokar, Helmut Schiessel, cond-mat/0410197]

Myosin tahá za svalová vlákna

Pohled dovnitř [The Kinesin Home Page http://www.proweb.org/kinesin//index.html]



Kinesin připojený ke chromozomům. Kinesin červeně, mikrotubuly zeleně



Kinesin pohybuje membránou. Mikrotubuly zeleně, Xklp1 červeně.

Model: kolébací rohatka s tuhými částicemi



 \rightarrow

Neklidné molekuly – p.11/22

Model: kolébací rohatka s tuhými částicemi



Model: kolébací rohatka s tuhými částicemi



Model: kolébací rohatka s tuhými částicemi

Model: kolébací rohatka s tuhými částicemi



Spusť simulaci



 \rightarrow

-

Neklidné molekuly – p.12/22



 \rightarrow

<---

Spusť simulaci



 \rightarrow

-

Neklidné molekuly – p.12/22



Spusť simulaci



 \rightarrow

-

Neklidné molekuly – p.12/22



 \rightarrow

<---

Výsledky: jak závisí proud na zatížení



Parametry: L = 1000, $\alpha = 0.5$, T = 150, $F_0 = 0.9$. a dále: $+ \omega = 0.01$, g = 1; $\times \omega = 0.01$, g = 0; $\boxdot \omega = 0.1$, g = 1; $\odot \omega = 0.1$, g = 0.

Jak závisí účinnost na zátěži



Parametry: L = 1000, $\alpha = 0.5$, T = 150, $F_0 = 0.9$. a dále: $+ \omega = 0.01$, g = 1; $\times \omega = 0.01$, g = 0; $\boxdot \omega = 0.1$, g = 1; $\odot \omega = 0.1$, g = 0.

Jak to závisí na teplotě



Proud

Parametry: L = 1000, $\alpha = 0.5$, $F_0 = 0.9$, $\omega = 0.1$, $F_{\text{load}} = 0.08$. a dále: + g = 1; $\times g = 0$; $\boxdot g = 0.5$; $\odot g = 0.75$.

Jak to závisí na teplotě



Proud

Účinnost

Parametry: L = 1000, $\alpha = 0.5$, $F_0 = 0.9$, $\omega = 0.1$, $F_{\text{load}} = 0.08$. a dále: + g = 1; $\times g = 0$; $\boxdot g = 0.5$; $\odot g = 0.75$.

Jak to závisí na hustotě částic



Proud

Parametry: L = 1000, $F_0 = 0.9$, $\omega = 0.1$, T = 150, $F_{\text{load}} = 0.08$. a dále: $\times g = 0$; $\forall g = 0.1$; $\boxdot g = 0.8$; $\odot g = 0.95$; $\triangle g = 0.99$; + g = 1;

Neklidné molekuly – p.16/22

Jak to závisí na hustotě částic



Proud Účinnost Parametry: $L = 1000, F_0 = 0.9, \omega = 0.1, T = 150, F_{\text{load}} = 0.08.$ a dále: $\times g = 0; \forall g = 0.1; \boxdot g = 0.8; \odot g = 0.95; \triangle g = 0.99;$ + g = 1;

Neklidné molekuly - p.16/22

Jak chytit DNA



◄---

Jak chytit DNA



Nejtenčí gumička



Nejtenčí gumička







Zkrocení entropie



Zkrocení entropie



Zkrocení entropie



N particles on stripe of lenth L. Periodic b.c.

- Potential $V(x) = x \pmod{3}$,
- Average density $\alpha = N/L$
- Temperature T, interaction strength $g \in [0, 1]$.
- Number of particles on site *x*: $n(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i x)$

N particles on stripe of lenth L. Periodic b.c.

- Potential $V(x) = x \pmod{3}$,
- Average density $\alpha = N/L$
- Temperature T, interaction strength $g \in [0, 1]$.
- Number of particles on site *x*: $n(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i x)$
- Attempted move from x to $x_{new} = x \pm 1$

$$\Delta E = V(x_{\text{new}}) - V(x) + (x_{\text{new}} - x) \left[F_{\text{load}} + F_0 \cos \omega t\right]$$

N particles on stripe of lenth L. Periodic b.c.

- Potential $V(x) = x \pmod{3}$,
- Average density $\alpha = N/L$
- Temperature T, interaction strength $g \in [0, 1]$.
- Number of particles on site *x*: $n(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i x)$
- Attempted move from x to $x_{new} = x \pm 1$

$$\Delta E = V(x_{\text{new}}) - V(x) + (x_{\text{new}} - x) \left[F_{\text{load}} + F_0 \cos \omega t\right]$$

Probability to accept move

$$\max(1, \exp(-\Delta E/T))$$
Metropolis

N particles on stripe of lenth L. Periodic b.c.

- Potential $V(x) = x \pmod{3}$, _____ Average density $\alpha = N/L$
- Temperature T, interaction strength $g \in [0, 1]$.
- Number of particles on site *x*: $n(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i x)$
- Attempted move from x to $x_{new} = x \pm 1$

$$\Delta E = V(x_{\text{new}}) - V(x) + (x_{\text{new}} - x) \left[F_{\text{load}} + F_0 \cos \omega t\right]$$

• Probability to accept move

N particles on stripe of lenth L. Periodic b.c.

- Potential $V(x) = x \pmod{3}$, _____ Average density $\alpha = N/L$
- Temperature T, interaction strength $g \in [0, 1]$.
- Number of particles on site *x*: $n(x) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i x)$
- Attempted move from x to $x_{new} = x \pm 1$

$$\Delta E = V(x_{\text{new}}) - V(x) + (x_{\text{new}} - x) \left[F_{\text{load}} + F_0 \cos \omega t\right]$$

• Probability to accept move

 $\max(1, \exp(-\Delta E/T)) \times \{1 - \delta(n(x_{\text{new}}))g\}$ Metropolis Interaction - exclusion



Measured quantities Current

◄---

$$J = \left\langle \sum_{i=1}^{N} x_i(t+1) - x_i(t) \right\rangle$$

Measured quantities Current

<---

$$J = \left\langle \sum_{i=1}^{N} x_i(t+1) - x_i(t) \right\rangle$$

Efficiency

$$\eta = \frac{\Delta W}{\Delta U}$$

Measured quantities Current

<---

$$J = \left\langle \sum_{i=1}^{N} x_i(t+1) - x_i(t) \right\rangle$$

Efficiency

$$\eta = \frac{\Delta W}{\Delta U}$$

$$\Delta W = -\langle \sum_{i=1}^{N} (x_i(t+1) - x_i(t)) F_{\text{load}} \rangle \quad \text{useful work}$$

$$\Delta U = \langle \sum_{i=1}^{N} (x_i(t+1) - x_i(t)) F_0 \cos \omega t \rangle \quad \text{input from external source}$$

 \rightarrow





