

Supervivencia de un blanco rodeado por trampas subdifusivas

Santos Bravo Yuste^{(1)*} y Katja Lindenberg^{(2)†}

⁽¹⁾ *Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz*

⁽²⁾ *Department of Chemistry and Biochemistry 0340, e Institute for Nonlinear Science, University of California San Diego, 9500 Gilman Drive, La Jolla, CA 92093-0340, USA*

Sistemas en los que los procesos difusivos son anómalos aparecen en muy diversos ámbitos de la Ciencia: en Geología, Sociología, Biología, y por supuesto, en Física. Debido a recientes avances tecnológicos, un buen número de experimentos han puesto de relieve la existencia de difusión anómala en medios biológicos, en particular, en el interior de las estructuras celulares, en donde se encuentra que el desplazamiento de ciertas partículas (“camionantes”) es subdifusivo, es decir, que su desplazamiento crece de forma sublineal en el tiempo:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^\gamma, \quad 0 < \gamma < 1. \quad (1)$$

Una cuestión natural que surge de inmediato es la siguiente: ¿cómo afecta el carácter anómalo de la difusión de las partículas a la cinética de las reacciones que estas partículas puedan sufrir?. Por ejemplo, recientemente, un buen número de trabajos experimentales y teóricos han comenzado a estudiar el problema de estimar el efecto de la difusión anómala en el acoplo y desacoplo de enzimas en lugares específicos (“blancos”) en el ADN.¹

En esta comunicación se estudia el problema de una partícula *blanco* (el “target”) rodeada de un mar de trampas subdifusivas (“target problem”) y nos preguntamos por la probabilidad de que, tras un cierto tiempo, el acoplo blanco-trampa no se haya producido. En la jerga habitual, nos preguntamos por la probabilidad de supervivencia $Q(t)$ del blanco (el término supervivencia alude a la suposición tácita de que el blanco desaparece tras acoplarse con la trampa, pero esto no es, por supuesto, obligatorio). En el modelo que consideraremos aquí, el acoplo podría no producirse cuando el blanco y la trampa se encuentran, es decir, hay una cierta probabilidad de que la reacción no se produzca (blanco parcialmente absorbente). Por supuesto, es posible considerar el caso límite en el que la reacción siempre ocurre (probabilidad de reacción uno, blanco completamente absorbente). Este caso especial ha sido estudiado recientemente en la referencia 2. El modo en el que atacamos el problema es a través de una descripción del movimiento subdifusivo en el continuo mediante la ecuación de difusión fraccional. Para hallar $Q(r)$ es necesario conocer previamente la probabilidad $Q_1(r, t)$ de que una única partícula subdifusiva situada inicialmente a una distancia r del blanco no reaccione con éste antes del instante t (una

cantidad que interesante en si misma). En el espacio de Laplace se encuentra que

$$u\tilde{Q}_1(r, u) = 1 - \rho^{-\lambda} \frac{K_\lambda(\rho z)}{K_\lambda(z) + (z/q)K_{\lambda+1}(z)}, \quad (2)$$

donde u es la variable de Laplace conjugada del tiempo t , ρ es la densidad de trampas, K es la función esférica de Bessel de tercera especie, $\rho = r/R$, $z = \sqrt{R^2 u^\gamma / D}$, $\lambda = d/2 - 1$, d es la dimensión del medio, R es el radio del blanco, D la constante de difusión de las partículas subdifusivas, y q es un parámetro que describe la reactividad del blanco (si $q \rightarrow \infty$ el blanco es completamente absorbente). Es posible demostrar que la probabilidad de supervivencia en presencia de una única trampa $Q_1(r, t)$ depende de la reactividad del blanco para todas las dimensiones d . Sin embargo, para $d = 1$ y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp \left\{ -\rho \frac{\sqrt{4\pi Dt^\gamma}}{\Gamma(1 + \gamma/2)} \right\}$$

tanto para blanco completamente absorbente *como también* para blanco parcialmente absorbente. Para $d = 2$ y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp \left\{ -\rho \frac{4\pi Dt^\gamma}{\Gamma(1 + \gamma) \ln(4Dt^\gamma/R^2)} \right\}$$

tanto para blanco completamente absorbente *como también* para blanco parcialmente absorbente. Sin embargo, para $d = 3$ y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp \left\{ -\rho \frac{4\pi R D t^\gamma}{(1 + 2\lambda/q)\Gamma(1 + \gamma)} \right\},$$

de modo que en esta dimensión la probabilidad de supervivencia *sí depende de la reactividad* del blanco.

* santos@unex.es

† kl@hypatia.ucsd.edu

¹ S. E. Halford and J. F. Marko, *Nucleic Acids Res.* **32**, 3040 (2004); I. Golding and E. C. Cox, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 098102 (2006).

² S. B. Yuste, K. Lindenberg, *Phys. Rev. E* **76**, 051114 (2007).