

Abstrakt:

Změny konformace biomolekuly můžeme popsat jako Markovovský proces s diskrétním prostorem stavů, které představují minima volné energie systému. Pro několik typů membránových proteinů a molekulárních motorů jsou jejich stavy spojeny do cyklu, přičemž reakční koordináty (reprezentované „částicemi“) přeskakují mezi jednotlivými stavy. K přeskokům dochází převážně v jednom směru s ojedinělým přeskokem nazpět, jež je způsoben termálními fluktuacemi. V práci jsou studovány doby nutné k dokončení jednoho cyklu za předpokladu, že interakce částice s jinými stupni volnosti (tj. jinými částicemi) nemohou být zanedbány. Srovnáme průměrné doby dokončení cyklu po a proti směru typického pohybu částice a ukážeme všeobecnou nerovnost, kterou musí splňovat – doby dokončení cyklu proti typickému směru pohybu jsou vždy kratší než po směru. Diskutujeme jak zmíněné doby závisí na síle interakce, topologii cyklu, energiích jednotlivých stavů a počtu interagujících částic. Taktéž ověříme platnost našich poznatků pro dvourozměrné modely s kanonickým a grandkanonickým rezervoárem.