Relaciones de incertidumbre termodinámicas

6 de octubre de 2025

Las *relaciones de incertidumbre termodinámicas* (thermodynamic uncertainty relations (TURs)) son una serie de inecuaciones recientemente descubiertas que iluminan aspectos de la dinámica de sistemas fuera de equilibrio.

Para ver una TUR en su forma más básica, consideremos una partícula actuada por una fuerza constante, resistencia viscosa y ruido blanco. La ecuación de movimiento es por lo tanto

$$\ddot{x} + \Gamma \dot{x} = f + j \tag{1}$$

donde, por el teorema de fluctuación-disipación

$$\left\langle j\left(t\right) j\left(t'\right)\right\rangle = 2\Gamma k_B T \delta\left(t - t'\right) \tag{2}$$

La solución para la velocidad es

$$\dot{x} = \dot{x}\left(0\right) e^{-\Gamma t} + \frac{f}{\Gamma}\left[1 - e^{-\Gamma t}\right] + \int_0^t dt'\; j\left(t'\right) e^{-\Gamma\left(t-t'\right)} \tag{3}$$

A tiempos largos la velocidad fluctúa alrededor de la velocidad límite

$$v_\infty = \frac{f}{\Gamma} \tag{4}$$

$$\dot{x} = v_\infty + v_s \tag{5}$$

$$v_s = \int_0^t dt'\; j\left(t'\right) e^{-\Gamma\left(t-t'\right)} \tag{6}$$

Integrando una vez más

$$x = v_\infty t + x_s \tag{7}$$

$$\begin{aligned} x_s &= \int_0^t dt'\; v_s \\ &= \frac{1}{\Gamma}\int_0^t dt'\; j\left(t'\right)\left[1 - e^{-\Gamma\left(t-t'\right)}\right] \end{aligned} \tag{8}$$

x_s es una variable Gaussiana con media cero y varianza

$$\sigma^2 = \frac{2k_B T}{\Gamma}\int_0^t dt'\;\left[1 - e^{-\Gamma\left(t-t'\right)}\right]^2 \tag{9}$$

A tiempos largos

$$\sigma^2 = \frac{2k_BT}{\Gamma}t \tag{10}$$

Ahora vemos que

$$\frac{\langle x\rangle^2}{\sigma^2} = \frac{\Gamma v_\infty^2}{2k_BT}t \tag{11}$$

Reconocemos que Γv_∞^2 es el calor disipado en el medio ambiente por unidad de tiempo, y por lo tanto debe ser

$$\frac{\Gamma v_\infty^2}{T}t \leq \Delta S \tag{12}$$

donde ΔS es la variación de entropía en el Universo. En resumen, encontramos que

$$\frac{\sigma^2 \Delta S}{\langle x\rangle^2} \geq 2k_B \tag{13}$$

que es la TUR.

Vemos que si queremos que la posición de la partícula permanezca bien definida ($\sigma^2 \ll \langle x\rangle^2$), entonces debe ser a costa de un proceso altamente disipativo ($\Delta S \gg 2k_B$). Por otro lado, si podemos medir σ^2 y $\langle x\rangle^2$, la TUR nos permite estimar ΔS.

Una de las aplicaciones de las TURs es la estimación de la eficiencia de un motor molecular [1]. Nuestra partícula se convierte en un modelo de motor molecular si escribimos la fuerza como $f = f_s - f_{ext}$. Al avanzar, la partícula hace trabajo contra la fuerza externa, y por lo tanto se comporta como un motor. La velocidad límite ahora es $v_\infty = \Gamma^{-1}(f_s - f_{ext})$, por lo cual cuando $f_{ext} = f_s$ la máquina se detiene (de ahí la s, por *stall*); la dispersión en la posición no varía. $T\Delta S$ es por lo menos el calor disipado Q, y éste, por unidad de tiempo, es por lo menos la potencia disipada por la fuerza viscosa Γv_∞^2, de manera que sigue siendo cierto que

$$\sigma^2 \Delta S \geq \frac{1}{T}\sigma^2 Q \geq \frac{1}{T}\sigma^2 \Gamma v_\infty^2 t = 2k_B v_\infty^2 t^2 \tag{14}$$

La eficiencia de la máquina entonces es

$$\eta = \frac{W}{W+Q} \leq \frac{W}{W + 2k_BT\,(v_\infty^2 t^2/\sigma^2)} = \frac{1}{1 + 2k_BT\,(v_\infty t/f_{ext}\sigma^2)} \tag{15}$$

Lo importante de esta fórmula es que vincula la eficiencia con parámetros fácilmente accesibles.

Para más aplicaciones de las TURs ver [2] y [3]. Para una aplicación específica a la kinesina ver [4]. El libro de Shiraishi [5] contiene una discusión bastante exhaustiva.

Referencias

[1] P. Pietzonka, A. C Barato and U. Seifert, Universal bound on the efficiency of molecular motors, J. Stat. Mech. (2016) 124004.

[2] C. Dieball and A. Godec, Direct Route to Thermodynamic Uncertainty Relations and Their Saturation, Phys. Rev. Lett 130, 087101 (2023).

[3] Y. Song and C. Hyeon, Thermodynamic uncertainty relation to assess biological processes, J. Chem. Phys. 154, 130901 (2021).

[4] T. Ariga, M. Tomishige, and D. Mizuno, Nonequilibrium Energetics of Molecular Motor Kinesin, Phys. Rev. Lett 121, 218101 (2018).

[5] N. Shiraishi, *An Introduction to Stochastic Thermodynamics*, Springer (2023).