Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

Blatt 6

WS 2020/21

Abgabe: Montag, **14.12.2020**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 15.12.2020

Webseite: www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2020-StatPhys.shtml

Aufgabe 20: Zwei-Niveau-System mit variierender Teilchenzahl (6 Punkte)

Wir betrachten ein physikalisches System mit zwei Energieniveaus $\epsilon_1 = 0$ und $\epsilon_2 = \epsilon$. Zunächst nehmen wir an, dass das System höchstens ein Teilchen beherbergen kann. Im Sinne des großkanonischen Ensembles kann das System demnach entweder unbesetzt sein (Energie 0), besetzt sein in ϵ_1 (Energie 0) oder besetzt sein in ϵ_2 (Energie ϵ).

a) Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme des Systems. Schreiben Sie diese als Funktion der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$, d.h. formal als $\mathcal{Y}(\beta, z)$.

b) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert der Teilchenzahl durch $\langle N \rangle = \frac{z + ze^{-\beta\epsilon}}{\mathcal{Y}}$ gegeben ist.

c) Wie lautet die mittlere Besetzungszahl des Zustands mit Energie ϵ?

d) Finden Sie einen Ausdruck für die mittlere Energie des Systems.

e) Jetzt können die Niveaus ϵ_1 und ϵ_2 gleichzeitig von je einem Teilchen besetzt werden. Zeigen Sie, dass

$$\mathcal{Y} = 1 + z + ze^{-\beta\epsilon} + z^2 e^{-\beta\epsilon} = (1 + z)\left(1 + ze^{-\beta\epsilon}\right) = \mathcal{Y}_1 \mathcal{Y}_2. \tag{1}$$

Aufgabe 21: Wasserstoffatom (4 Punkte)

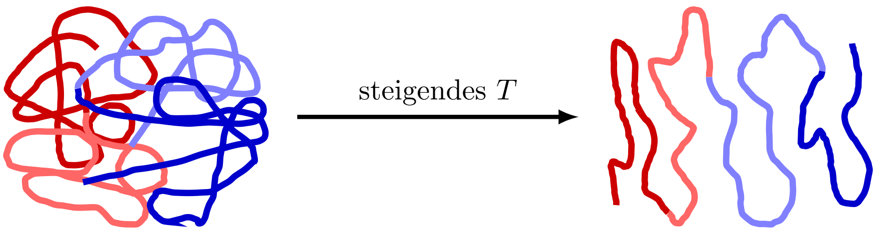
Ein Wasserstoffatom kann sich in einem der vier folgenden Zuständen befinden:

Zustand	*Anzahl der Elektronen*	*Energie*
Grundzustand	1	$-\frac{1}{2}\Delta$
Positives Ion	0	$-\frac{1}{2}\delta$
Negatives Ion	2	$\frac{1}{2}\delta$
Angeregt	1	$\frac{1}{2}\Delta$

Wie muss das chemische Potential μ gewählt werden, damit im Mittel ein Elektron pro Atom gebunden ist?
Hinweis: Gehen Sie ähnlich zu Aufgabe 20 vor.

Aufgabe 22: Denaturierung eines Proteins (5 + 2 Punkte)

Proteine bestehen aus Ketten von Aminosäuren. Ihre biologische Funktionsfähigkeit bekommen Sie erst durch eine bestimmte räumliche Faltung, siehe Abbildung 1(a). Als Denaturierung bezeichnet man strukturelle Veränderungen, bei denen diese Faltungsform verloren geht, Abbildung 1(b), und damit auch die biologische Funktion deaktiviert wird. In dieser Aufgabe wollen wir die Temperaturabhängigkeit des Denaturierungsprozesses untersuchen.



(a) aktives Protein, ϵ_0, g_0

(b) denaturiertes Protein, ϵ_1, g_1

Abbildung 1: (a) Proteine erlangen im aktiven Zustand durch Faltung ihre räumliche Struktur und damit ihre Funktionsfähigkeit. (b) Diese Faltung geht beim Denaturierungsprozess verloren.

Ein aktives, gefaltetes Protein nimmt einen energetisch günstigen Zustand mit Energie ϵ_0 ein, etwa durch Minimierung der Coulomb-Abstoßung. Dieser Zustand hat einen geringen Entartungsgrad $g_0 \sim 1$. Bei steigender Temperatur verliert es seine spezielle Form und nimmt einen angeregten Zustand mit Energie ϵ_1 und hohem Entartungsgrad $g_1 >> g_0$ an.

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z eines Systems aus N Proteinen, ohne zu benutzen, dass die Zustandssumme faktorisiert (siehe (b)).
Hinweis: Schreiben Sie die Summe über alle Mikrozustände als Summe über die Anzahl der denaturierten Proteine. Überlegen Sie sich den Entartungsgrad einer solchen Konfiguration und benutzen Sie den binomischen Lehrsatz um die Summe auszuwerten.

b) Betrachten Sie jetzt ein einzelnes Protein, das an ein Wärmebad gekoppelt ist. Berechnen Sie die Zustandssumme z und bestätigen Sie den Zusammenhang $Z = z^N$. Wann würde dieser Zusammenhang nicht gelten?

c) Wie lauten die Besetzungswahrscheinlichkeiten des aktiven und des denaturierten Zustandes? Was erwarten Sie für große, bzw. kleine Temperaturen? Überprüfen Sie Ihre Vorhersage, indem Sie die Grenzfälle $T \to 0$ and $T \to \infty$ explizit berechnen.

d) **Bonusaufgabe:** In Teil C der Vorlesung werden Sie die freie Energie F kennenlernen, die mit der Zustandssumme über $F = -k_B T \ln Z$ zusammenhängt. Berechnen Sie F und betrachten Sie auch hier die Grenzfälle $T \to 0$ and $T \to \infty$. Identifizieren Sie in Ihren Ergebnissen die Entropie und die Energie. Welcher Term dominiert für welche Temperatur?

Aufgabe 23: Anwesenheitsübung: Gibbs-Entropie

Diese Aufgabe wird im Tutorium zusammen mit dem Tutor bearbeitet.
Wir wollen uns im Folgenden näher mit der Gibbs-Entropie beschäftigen und den Zusammenhang mit der Boltzmann-Entropie und der Boltzmann-Verteilung $p_r \propto e^{-\beta E_r}$ untersuchen.

a) Zeigen Sie, analog zu Seite 38 im Skript, dass die kanonische Zustandssumme in Sattelpunktnäherung

$$Z = e^{\sigma(E^*)-\beta E^*} \tag{2}$$

lautet, wobei $\sigma(E)$ die Boltzmann-Entropie ist.

b) Verwenden Sie Ihr Ergebnis aus a) zusammen mit dem Vorlesungsresultat

$$\sigma_{\text{Gibbs}} = \beta\langle E\rangle + \ln Z \tag{3}$$

um zu zeigen, dass die Gibbs-Entropie am Sattelpunkt mit der Boltzmann-Entropie übereinstimmt.

In der Vorlesung haben Sie die Gleichgewichtsverteilungen p_r für alle Ensembles aus dem zentralen Postulat der statistischen Physik hergeleitet, das besagt, dass in einem abgeschlossenen System alle Mikrozustände gleich wahrscheinlich sind. Teilweise wird in der Literatur auch die Definition der (Gibbs-)Entropie an den Anfang der Diskussion gestellt, zusammen mit der Forderung, dass die Gleichgewichtsverteilung die Entropie (unter Nebenbedingungen) maximiert. Wir wollen hier zeigen, dass tatsächlich beide Ansätze zu identischen Resultaten führen.

c) Zeigen Sie, dass die Boltzmann-Verteilung die Verteilung mit maximaler Gibbs-Entropie ist. Maximieren Sie dafür

$$\ln \Omega_N = \ln \frac{N!}{\prod\limits_{r'} n_{r'}} \tag{4}$$

mit den Nebenbedingungen

$$\sum_r n_r = N \qquad \text{und} \qquad \sum_r n_r E_r = E \tag{5}$$

unter Verwendung von zwei Lagrange-Multiplikatoren. Welche Rolle spielt hier die Temperatur? *Hinweis: Es ist nur die Ableitung nach den n_r, der Anzahl der Replika im Mikrozustand r, relevant. Das zu zeigende Resultat lautet $n_r \propto e^{-\beta E_r}$.*