Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

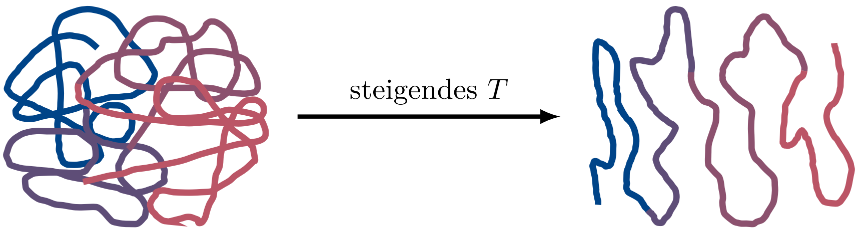
Blatt 6

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **20.11.2023**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 21.11.2023
Webseite: https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml

Aufgabe 19: Denaturierung eines Proteins (8 Punkte + 2 Bonuspunkte)

In dieser Aufgabe untersuchen wir den Wettstreit zwischen *Energie* und *Entropie*, den wir im 4. Freitagsquiz, sowie in der Vorlesung (Skript, S. 38) diskutiert haben, genauer. Als Beispiel betrachten wir den Denaturierungsprozess von Proteinen. 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 — und dadurch auch die biologische Funktion — verloren geht. Wir untersuchen hier die Temperaturabhängigkeit des Denaturierungsprozesses.



(a) aktiv, ϵ_0, g_0 (b) denaturiert, 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 $g_0 \sim 1$ (d.h. es gibt nur wenige Faltungszustände, in denen das Protein seine gewünschte Funktion wahrnehmen kann). Bei steigender Temperatur verliert es seine spezielle Form und nimmt einen angeregten Zustand mit Energie ϵ_1 und hohem Entartungsgrad $g_1 \gg g_0$ an (in fast allen Faltungsformen funktioniert das Protein nicht wie gewünscht).

a) Betrachten Sie ein einzelnes Protein, das an ein Wärmebad gekoppelt ist. Wie lautet die kanonische Zustandssumme z?

b) Berechnen Sie jetzt die kanonische Zustandssumme Z eines Systems aus N Proteinen, *ohne* zu benutzen, dass die Zustandssumme faktorisiert. Bestätigen Sie durch Vergleich mit a), dass wirklich $Z = z^N$ gilt. Wann würde dieser Zusammenhang nicht gelten? *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.

c) Wie groß sind die Wahrscheinlichkeiten, ein Protein im aktiven, bzw. denaturierten Zustand anzutreffen? Was erwarten Sie für große, bzw. kleine Temperaturen? Überprüfen Sie Ihre Vorhersage, indem Sie die Wahrscheinlichleiten in den Grenzfällen $T \to 0$ and $T \to \infty$ explizit berechnen.

d) **Zusatzaufgabe:** 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 20: Zwei-Niveau-System mit variierender Teilchenzahl (7 Punkte)

Wir betrachten ein System mit zwei Energieniveaus $\epsilon_1 = 0$ und $\epsilon_2 = \epsilon$. Zunächst nehmen wir an, dass das System höchstens ein Teilchen beherbergen kann. Das System kann also entweder unbesetzt sein (Energie $E = 0$), besetzt sein in ϵ_1 ($E = 0$) oder besetzt sein in ϵ_2 ($E = \epsilon$).

a) Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme des Systems. Schreiben Sie diese als Funktion der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$.

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 $\langle E \rangle$ des Systems.

e) Jetzt können die Niveaus ϵ_1 und ϵ_2 auch gleichzeitig von je einem Teilchen besetzt werden. Wie lautet jetzt die großkanonische Zustandssumme?

Aufgabe 21: Wasserstoffatom (5 Punkte)

Ein Wasserstoffatom kann sich in einem der folgenden vier 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 analog zu Aufgabe 20 a) und b) vor.

Aufgabe 22: Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung (3 Bonuspunkte)

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Geschwindigkeiten in einem idealen Gas der Maxwell-Boltzmann-Verteilung (oder Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung) folgen. In dieser Aufgabe sollen Sie überprüfen, dass elastische Stöße im zweidimensionalen Gas dazu führen, dass sich diese Verteilung einstellt — unabhängig von der Wahl der Anfangsverteilung der Geschwindigkeiten. Dazu haben wir Ihnen ein Notebook vorbereitet, in dem die wesentlichen Schritte bereits implementiert sind. Laden Sie das Notebook herunter, führen Sie die Simulation aus und implementieren Sie anschließend weitere Anfangsbedingungen.