Statistische Physik

Blatt 4

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **06.11.2023**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 07.11.2023

Webseite: https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml

Aufgabe 14: Wiederholung und Zentraler Grenzwertsatz (7 Punkte)

In dieser Aufgabe sollen Sie wiederholend einige zentrale Begriffe der vergangenen Vorlesungswoche anhand eines einfachen Beispielsystems diskutieren, sowie die Kernaussagen des Zentralen Grenzwertsatzes numerisch überprüfen.

- a) (Wiederholung, keine Abgabe) Wir betrachten ein System aus N fairen Würfeln. Was sind die Mikrozustände? Wie lauten die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten? Was sind die Makrozustände? Was ist/sind die relevanten Zustandsgröße(n)? Erläutern Sie die Aussage "Zeitmittel = Ensemblemittel" anhand dieses Systems. Handelt es sich um ein ergodisches System, vergleichbar mit einem idealen Gas in einer abgeschlossenen Box? Betrachten Sie Systeme mit N = 1, 2, 10, 10²³ Würfeln. Die relevante Zustandsgröße werde wiederholt gemessen. Wie gut können Sie für die unterschiedlichen N die Mittelwerte der Messungen vorhersagen? Wie gut können Sie das Ergebnis einer einzelnen Messung vorhersagen? Welche Rolle spielt hierbei der zentrale Grenzwertsatz? Ist die statistische Physik eine ungenaue Theorie, weil lediglich Mittelwerte und Wahrscheinlichkeiten vorhergesagt werden können?
- b) Wir haben Ihnen ein Notebook zur Verfügung gestellt, mit dem Sie die wichtigsten Aussagen des Zentralen Grenzwertsatzes numerisch überprüfen sollen. Laden Sie sich das Notebook herunter und lesen Sie sich zunächst die Abschnitte Vorbereitungen, Zufallszahlen und Verteilungen und Testen der Verteilungen durch. Bearbeiten Sie anschließend die ausführliche Aufgabenstellung.

Aufgabe 15: Reißverschlussmodell für DNA (9 Punkte)

Wir betrachten ein einfaches Modell eines DNA-Doppelstrangs. In diesem Modell werden die Mikrozustände wie folgt festgelegt: An nummerierten Stellen $j=1,2,\ldots,N$ können die beiden Stränge Bindungen eingehen. Eine geschlossene Bindung j hat die Energie $\epsilon_j=0$, eine geöffnete Bindung die Energie $\epsilon_j=\epsilon$. Die p-te Bindung kann nur dann geöffnet sein, wenn alle Bindungen mit j< p ebenfalls geöffnet sind, wie in Abbildung 1 skizziert. Die N-te Bindung ist immer geschlossen.

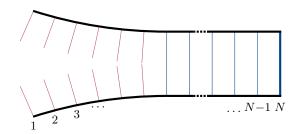


Abbildung 1 — Einfaches Reißverschlussmodell für ein DNA-Molekül. Offene Bindungen (rot) haben die Energie ϵ , geschlossene (blau) die Energie 0.

- a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme des DNA-Moleküls. Hinweis: Überlegen Sie sich zunächst die möglichen Gesamtenergien des DNA-Strangs. Wie viele Zustände gibt es für eine vorgegebene Gesamtenergie? Für die Rechnung benötigen Sie die Partialsummenformel der geometrischen Reihe.
- b) Zeigen Sie den Zusammenhang zwischen dem Erwartungswert der Energie im kanonischen Ensemble und der Zustandssumme $Z(\beta)$:

$$\langle E \rangle_{\text{kanonisch}} = -\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta) \ .$$
 (1)

- c) Benutzen Sie ihre Ergebnisse aus a) und b), um für das DNA-Molekül den Erwartungswert der Energie als Funktion von $x = \exp(-\beta\epsilon)$ zu berechnen. Bestimmen Sie daraus die mittlere Anzahl $\langle n \rangle$ der offenene Bindungen als Funktion von x. Skizzieren Sie $\frac{\langle n \rangle}{N}$ für verschiedene Werte von N und beschreiben Sie das Verhalten von $\frac{\langle n \rangle}{N}$ für große N.
- d) Nur etwa 5% der menschlichen DNA codieren tatsächlich Erbinformation für Proteine. Die übrigen, nicht-codierenden 95% der Nukleotide werden auch als "junk DNA" bezeichnet. Berechnen Sie $\frac{\langle n \rangle}{N}$ für $N \gg 1$ als Funktion von x. Diskutieren Sie das Ergebnis bezüglich der biologischen Relevanz der "junk"-Nukleotide für die Funktion der DNA.

Aufgabe 16: Ein einzelner harmonischer Oszillator – kanonisch (4 Punkte)

Ein einzelner quantenmechanischer, harmonischer Oszillator befinde sich im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T. Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme und die Energie $\langle E \rangle$. Bringen Sie das Ergebnis für $\langle E \rangle$ in eine Form, die es Ihnen erlaubt, die mittlere Besetzungszahl $\langle n \rangle$ abzulesen.