Praca Domowa Termodynamika i Fizyka Statystyczna R 2021/2022

Kacper Cybiński

7 kwietnia 2022

1 Zadanie 2

Model suwakowy DNA. Suwak składa się N par ząbków, z których każda może być połączona lub rozłączona. Energia połączonej pary wynosi 0 , a rozłączonej E. Ponadto wymagamy, aby suwak otwierał się tylko z jednej strony (na przykład z lewej) - a zatem para k może być otwarta tylko wtedy, gdy otwarte są pary $1, 2, \ldots, k-1$ (patrz rys.). Znajdź sumę statystyczną dla takiego układu oraz wyznacz średnią liczbę otwartych par ząbków $< N_{otw} >$ w temperaturze T. Pokaż, że dla malych temperatur (tj. $kT \ll E$) średnia liczba otwartych par ząbków $< N_{otw} >$ jest niezależna od N. Jaką wartość przybiera $< N_{otw} >$ w wysokich temperaturach (tj. dla $kT \gg E$) ?

2 Rozwiązanie

Rozważmy sytuację, gdy rozłączone jest pierwsze n par ząbków. Skoro energia rozłączonej pary jest równa E, a połączonej 0 , to energia układu w takim stanie równa jest $E_n = nE$. Suma statystyczna będzie sumą dla wszystkich takich stanów energii i dana będzie wzorem:

$$Z = \sum_{n=0}^{N} \exp(-\beta En) = \frac{\exp(-\beta E(N+1)) - 1}{\exp(-\beta E) - 1}$$

Prawdopodobieństwo znalezienia się układu w stanie o energii E_n równe jest:

$$p_n = \frac{\exp(-\beta En)}{Z}$$

A stąd średnia liczba otwartych par jest postaci:

$$\langle N_{otw} \rangle = \sum_{n=0}^{N} np_n = \frac{1}{Z} sum_{n=0}^{N} n \exp(-\beta En) = -\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial \exp(-\beta En)}{\partial E}\right)_T = -\left(\frac{\partial \log Z}{\partial E}\right)_T$$

Rozpiszmy wyrażenie $\log Z$:

$$\log Z = \log\left(\frac{\exp(-\beta E(N+1)) - 1}{\exp(-\beta E) - 1}\right) = \log(\exp(-\beta E(N+1)) - 1) - \log(\exp(-\beta E) - 1)$$

Wracając z podstawieniem do wyrażenia na średnią liczbę otwartych par ząbków:

$$\langle N_{otw} \rangle = \frac{\beta(N+1)\exp(-\beta E(N+1))}{\exp(-\beta E(N+1)) - 1} - \frac{\beta \exp(-\beta E)}{\exp(-\beta E) - 1}$$

$$\langle N_{\mathrm{otw}} \rangle = \frac{\beta(N+1)\exp(-\beta E(N+1))(\exp(-\beta E) - 1) - \beta \exp(-\beta E)(\exp(-\beta E(N+1)) - 1)}{(\exp(-\beta E(N+1)) - 1)(\exp(-\beta E) - 1)}$$

Rozważmy teraz granicę niskich temperatur $kT \ll E$. W tej granicy wyrażenie $\beta E \to \infty$, więc $\exp(-\beta E) \to 0$. Wynika stąd, że średnia liczba otwartych par ząbków będzie równa po prostu:

$$\langle N_{otw} \rangle = 0$$

Co jak należało udowodnić jest niezależne od całkowitej liczby par ząbków. Rozważmy jeszcze granice dla $kT \gg E$. Wówczas wyrażenie βE dąży do 0 , a więc $\exp(-\beta E) \to 1$. Wprowadźmy oznaczenie $x = \exp(-\beta E)$. Policzmy teraz przejście graniczne dla $x \to 1$:

$$\langle N_{otw} \rangle = \frac{N}{2}$$