Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik 14. Mai 2018
http://www.tu-berlin.de/?193615

Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Dr. Jérôme Burelbach (Sprechstunde: Mo 14:00-15:00 in EW 708)

5. Übungsblatt – Biologische Physik

Abgabe/Vorrechnen: Mi. 23.05.2018 in der Übung

M **Aufgabe 15**: *Persistenter Zufallsgeher in 1D*

Polymere haben eine gewisse Steifigkeit, die mit dem folgenden einfachen Modell beschrieben werden kann: Ein Zufallsgeher bewege sich auf einem 1D Gitter mit Gitterplätzen n und Gitterkonstante L. Bei jedem Schritt behält er seine ursprüngliche Bewegungsrichtung mit einer Wahrscheinlichkeit α bei oder läuft mit der Wahrscheinlichkeit $\beta = 1 - \alpha$ in die umgekehrte Richtung. Gesucht ist die Diffusionskonstante D dieser Bewegung.

(a) Seien $a_k(n)$ und $b_k(n)$ die Wahrscheinlichkeiten, dass der Zufallsgeher sich zum Zeitpunkt k auf dem Gitterplatz n befindet und im Schritt davor von Platz $n-1$ bzw. $n+1$ gekommen ist. Überzeugen Sie sich davon, dass folgende Rekursions-Gleichungen (Master-Gleichungen) gelten:

$$(1) \qquad \begin{cases} a_{k+1}(n) &= \alpha a_k(n-1) + \beta b_k(n-1)\,, \\ b_{k+1}(n) &= \alpha b_k(n+1) + \beta a_k(n+1)\,. \end{cases}$$

Da wir einen diskreten Prozess auf einem Gitter betrachten, ist es sinnvoll, die charakteristischen Funktionen (Fourier-Transformierten) $A_k(\theta)$ und $B_k(\theta)$ von $a_k(n)$ bzw. $b_k(n)$ einzuführen:

$$(2) \qquad A_k(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_k(n) \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}\,, \quad B_k(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_k(n) \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}\,.$$

Wie lauten die transformierten Rekursions-Gleichungen (1) für $A_k(\theta)$ und $B_k(\theta)$?

(b) Kombinieren Sie die Rekursions-Gleichungen zu einer Bestimmungsgleichung nur für $A_k(\theta)$ und einer Bestimmungsgleichung nur für $B_k(\theta)$.

(c) Uns interessiert nur die Gesamtwahrscheinlichkeit $p_k(n) = a_k(n) + b_k(n)$, den Zufallsgeher zur Zeit k am Ort n aufzufinden. Welche Rekursions-Gleichung gilt für $P_k(\theta)$? Zeigen Sie mit dem Ansatz $P_k(\theta) \overset{!}{=} U^k(\theta)$, dass die Funktion $U(\theta)$ zwei unabhängige Lösungen $U_{1,2}(\theta) = \alpha\cos(\theta) \pm \sqrt{\alpha^2\cos^2(\theta) + 1 - 2\alpha}$ hat.

(d) Demzufolge ist die allgemeine Lösung für $P_k(\theta)$ gegeben durch $P_k(\theta) = c_1(\theta)U_1^k(\theta) + c_2(\theta)U_2^k(\theta)$, wobei die Funktionen $c_{1,2}(\theta)$ durch die Anfangsbedingungen bestimmt werden. Eine spezielle Lösung ergibt sich mit den Anfangsbedingungen

$$(3) \qquad a_0(n) = b_0(n) = \frac{\delta_{n,0}}{2}\,.$$

Was ist die anschauliche Bedeutung dieser Anfangsbedingung? Zeigen Sie, dass daraus

$$(4) \qquad P_0(\theta) = 1\,, \quad P_1(\theta) = \cos\theta$$

folgt. Wie lautet die Lösung $P_k(\theta)$ für diese Anfangsbedingungen?

(e) ($optional$)
Sei $f'(\theta)$ die Ableitung einer Funktion $f(\theta)$ nach θ. Zeigen Sie mithilfe einer numerischen Software (z.B. Mathematica), dass für die spezielle Lösung $P_k(\theta)$ folgende Relationen gelten:
(5)
$$c_1(0) = 1, \quad U''_{1,2}(0) = -\alpha\left(1 \pm \frac{\alpha}{1-\alpha}\right), \quad c''_{1,2}(0) = \pm\frac{2\alpha - 1}{2(1-\alpha)^2}, \quad U'_{1,2}(0) = c'_{1,2}(0) = 0$$

(f) Bestimmen Sie damit die Momente $\langle n \rangle$ und $\langle n^2 \rangle$ von $P_k(\theta)$. Was ergibt sich daraus für die Diffusionskonstante

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle}{2t} \qquad \text{mit } x = nL,\ t = k\tau \tag{6}$$

(τ ist eine charakteristische Sprungzeit) im Langzeitlimes $k \to \infty$? Welchen Einfluss hat die „Persistenz" auf D? Auf der Skala der sog. Persistenzlänge ℓ ergibt sich ein gewöhnlicher Zufallsgeher (mit dem üblichen Diffusionskoeffizienten). Wie ist diese Länge zu wählen?

S **Aufgabe 16 (10 Punkte):** *Bakterieller Metabolismus*

Wir betrachten ein idealisiertes Bakterium in Form einer Kugel mit Radius R. Das Bakterium befindet sich in einem See, von dem es Sauerstoff bezieht. Da der See ein riesiges Reservoir an Sauerstoff darstellt, wird das Bakterium die gesamte Sauerstoffkonzentration c_0 des Sees nicht merklich beeinflussen. Es wird sich ein stationärer Zustand einstellen, bei dem die Sauerstoffkonzentration $c(r)$ nur vom Abstand r zum Bakterium (und nicht von der Zeit) abhängt.

(a) Weit weg vom Bakterium ist die Konzentration $c(\infty) = c_0$. Wir nehmen an, dass das Bakterium den ganzen Sauerstoff in ihrer unmittelbaren Umgebung aufnimmt: $c(R) = 0$. Dieses Konzentrationsgefälle bedeutet nach dem 1. Fick'schen Gesetz, dass es einen Fluss j von Sauerstoffmolekülen ins Innere des Bakteriums geben muss:

$$j = -D\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}r}\,.$$

Bestimmen Sie das Konzentrationsprofil $c(r)$. Hierbei ist die Erhaltung der Teilchenzahl zu berücksichtigen. Welche Beziehung $I = I(R)$ ergibt sich für die Menge Sauerstoff, die ein Bakterium mit Radius R pro Zeit maximal aufnehmen kann?

(b) Die in a) bestimmte Größe I beschreibt die maximal mögliche Menge Sauerstoff, die das Bakterium pro Zeit aufnehmen kann. Einerseits wächst I linear mit dem Bakterienradius. Andererseits nimmt jedoch der Sauerstoffverbrauch eines Bakteriums mit seinem Volumen zu ($\sim R^3$). Folglich wird es für die Größe des Bakteriums eine obere Schranke R_c geben.
Sei $\mathcal{J}$ der Sauerstoffverbrauch des Bakteriums (pro Zeit), bezogen auf seine Masse. Welche Beziehung $R_\mathrm{c} = R_\mathrm{c}(\mathcal{J}, c_0, D, \rho)$ gilt für den maximalen Bakterienradius? (ρ ist hierbei die Massendichte des Bakteriums.)

(c) Welcher Wert ergibt sich mit $\mathcal{J} = 0,02$ mol/(kg s), $c_0 = 0,2$ mol/m^3, $D = 10^{-9}$ m^2/s und $\rho \approx \rho_\mathrm{Wasser}$? Vergleichen Sie dies mit einem realistischen Wert für die Größe von Bakterien. Welche Möglichkeit könnte es für Bakterien geben, diese obere Grenze für das Wachstum zu überschreiten?