(*) A20 (HW 2008 3.3)

DNA molecule.

(*)

$$Z=\sum_{p=0}^{N-1} G^p\cdot e^{-\beta\epsilon p}=\sum_{p=0}^{N-1}x^p=\frac{1-x^N}{1-x}\quad\left[x=Ge^{-\beta\epsilon}\right]$$ (c)

$$\langle p\rangle=\frac{\sum_p p x^p}{\sum_p x^p}=x\frac{\partial \ln Z}{\partial x}=\frac{Nx^N}{x^N-1}-\frac{x}{x-1}$$

נפתח מסביב לנקודה $x=1$ כש״ נגדיר

$$x=1+\eta \rightarrow \eta=x-1$$

$N\gg1$, ונפתח עבור $\eta\ll1$

$$(*)\quad \frac{N(1+\eta)^N}{(1+\eta)^N-1}\approx\frac{N\left(1+N\eta+\frac12N^2\eta^2+\frac16N^3\eta^3+O(\eta^4)\right)}{N\eta\left(1+\frac12N\eta+\frac16N^2\eta^2+\frac1{24}N^3\eta^3+O(\eta^4)\right)}$$

שים לב

$$\left[\frac{1}{N\eta\left(1+\frac12N\eta+\cdots\right)}=\frac{1}{N\eta(1+\epsilon)}\approx\frac{1}{N\eta}\left(1-\epsilon+\frac12\epsilon^2\right)=\frac{1}{N\eta}\left(1-\frac12N\eta+\frac{N^2\eta^2}{12}+O(N^3\eta^3)\right)\right.$$

לכן

$$(*)=\frac1\eta\left(1+N\eta+\frac12N^2\eta^2+\frac16N^3\eta^3\right)\left(1-\frac12N\eta+\frac{N^2\eta^2}{12}+O(N^3\eta^3)\right)$$

מכאן

$$\left.\frac{Nx^N}{x^N-1}-\frac{x}{x-1}\right|_{x\approx1}\approx\frac1\eta\left(1+\frac12N\eta+\frac{N^2\eta^2}{12}+O(N^3\eta^3)\right)-\left(\frac1\eta+1\right)$$

$$\approx\frac N2\left[1+\frac N6\eta+\cdots\right]$$

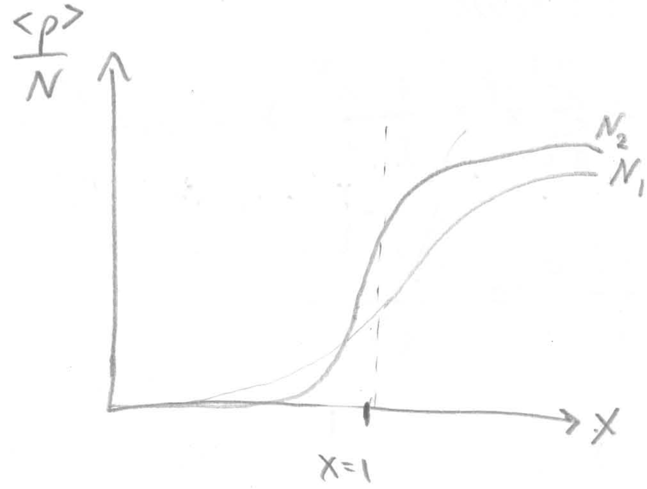
$$=\frac N2\left[1+\frac16(x-1)+\cdots\right]$$

ועבור $x=1$

$$\frac1N\frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x}=\frac1N\frac{\partial\langle p\rangle}{\partial\eta}=\frac1{12}N-\frac1{240}N^3\eta^2$$

as $N\to\infty$ & $\eta\to0$ $\quad\frac1N\frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x}\to\infty$

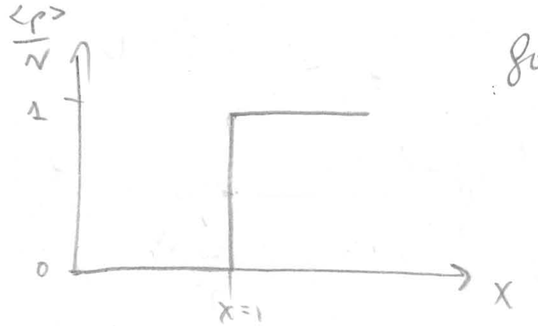
<u>הנ״ל</u>: דמספר הקשרים הפתוחים פרופו׳ ל x מתבדר!



$N_2 > N_1$

$\langle p \rangle = \frac{1}{2}N$ עבור $x=1$ (נקודה)

$\frac{\langle p \rangle}{N} = \begin{cases} 1 & x>1 \\ 0 & x<1 \end{cases}$ עבור $x \neq 1$ $N\to\infty$



for $N\to\infty$ $\left(\begin{array}{ll} \frac{\langle p \rangle}{N} \to 1 & \text{עבור } x\to+\infty,\ N\to\infty \\ \frac{\langle p \rangle}{N} \to 0 & x\to 0,\ N\to\infty \end{array} \right)$

$\left(\frac{\langle p \rangle}{N} = \frac{x^N}{x^N - 1} - \frac{1}{N}\frac{x}{(x-1)} \right)$

האנטרופיה

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}(kT\ln Z) = kT\frac{\partial \ln Z}{\partial T} + k\ln Z$$

נציב

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \frac{-1}{kT^2}\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{+1}{kT^2}\langle U \rangle = \frac{+1}{kT^2}\epsilon\langle p \rangle$$

לכן

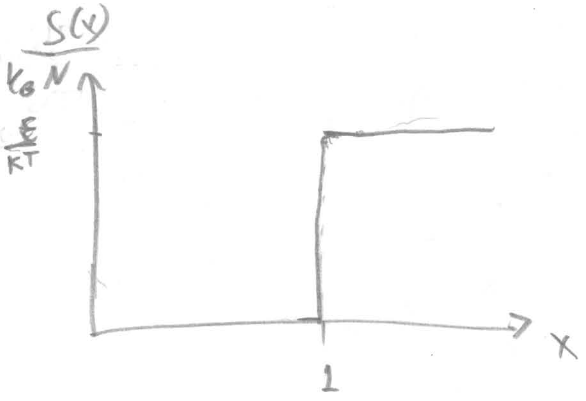
$$\frac{S}{k_B} = \frac{\epsilon\langle p \rangle}{k_B T} + \ln\left(\frac{1-x^N}{1-x}\right)\Bigg|_{x\to 1} = \frac{\langle p \rangle \epsilon}{kT} + \ln N$$

↑ L'Hôpital
" $\ln N$

$$\frac{S}{k_B} \approx \frac{\langle p \rangle \epsilon}{k_B T}$$

כיוון $(\ln N) << (\langle p \rangle \sim N)$ לכן
(עבור $N >> 1$)

לכן



$$\frac{S}{k_B N}\bigg|_{x=1} = \frac{\langle p\rangle}{N}\bigg|_{x=1}\cdot\frac{\epsilon}{kT}$$

בפרט "הקפיצה" באנטרופיה מגיע לנקודה $x=1$

שבה $\frac{\langle p\rangle}{N}$ הולך מאפס לאמצע

$$\frac{\Delta S}{k_B N} = \frac{\epsilon}{kT}$$

האם זה מעבר מסדר ראשון?

לגבי הקיבול חום:

$$\frac{\partial x}{\partial T} = \frac{\epsilon}{kT^2}x$$

$$C_V = T\frac{\partial S}{\partial T} = \frac{-k\epsilon\langle p\rangle}{kT} + k\left(\frac{1-x}{1+x^N}\right)\left(\frac{1-x^N}{(1-x)^2} - \frac{Nx^{N-1}}{1-x}\right)\cdot\frac{\epsilon}{kT}x$$

$$\lim_{x\to 1} = \frac{1}{2}(N-1) \approx \frac{1}{2}N$$

$$C_V\Big|_{x=1} = -k\frac{\epsilon\langle p\rangle}{kT} + \frac{k}{2}N\frac{\epsilon}{kT}$$

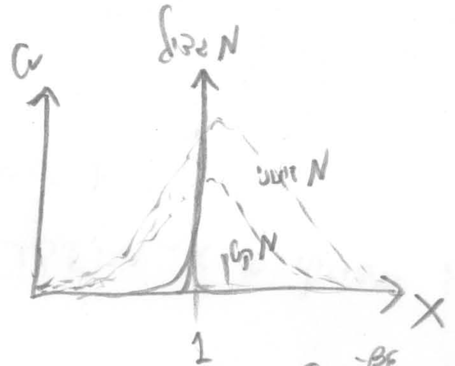
אבל $\langle p\rangle\Big|_{x=1} = \frac{N}{2}$

ואנו מקבלים $C_V\Big|_{x=1} = \infty$ (*)

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial(\epsilon\langle p\rangle)}{\partial T} = +\epsilon\frac{\partial\langle p\rangle}{\partial T} = +\left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^2\frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x}$$

ניתן גם לפי

ואז לגזור את הנוסחה מתחילת התרגיל.



זהו מעבר פאזה מסדר שני.

מה קורה פה? כל עוד $Ge^{-\beta\epsilon} < 1$

ה-DNA נשאר סגור ושלם. כאשר $Ge^{-\beta\epsilon}\to 1$ אז הוא נפתח (דנטורציה) לחלוטין. בתהליך הפרימה המערכת סובלת תום על מנת להגדיל את האנטרופיה שלה.