

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Motivation</b>	<b>5</b>
2.1	Dichteverteilung voluminöser Gegenionen; Korrelation, Kondensation . . .	5
2.2	Effektive Kräfte und Potentiale zwischen großen Biomolekülen . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Auswahl der Untersuchungsmethoden</b>	<b>13</b>
3.1	Theoretische Methoden . . . . .	13
3.2	Numerische Methoden . . . . .	21
3.3	Gegenwärtige experimentelle Möglichkeiten . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Theorie der Verteilung voluminöser Gegenionen an geladenen Biopolymeren</b>	<b>25</b>
4.1	Modellbildung und Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ . . . . .	25
4.1.1	Vorbemerkungen . . . . .	25
4.1.2	Allgemeine Modellbildung . . . . .	28
4.1.3	Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ und Großkanonische Zustandssumme $\mathcal{Z}_{\mu_N}$ . .	34
4.1.4	Beispielsystem DNA mit Gegenionen . . . . .	36
4.2	Näherung A: Dichteprofil $\langle n \rangle$ als Sattelpunkt der Zustandssumme $\mathcal{Z}_{\mu_N}$ . .	40
4.2.1	Differentialgleichung für die Gegenionendichte . . . . .	40
4.2.2	„Effektive“ Hamiltonfunktion $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ , Großkanonisches Potential $\Omega_{\mu_N}$ .	45
4.2.3	$\Omega_{\mu_N}$ und effektive Kräfte zwischen zwei Biopolymeren . . . . .	51
4.2.4	Güte von Sattelpunktnäherung und $\Omega_{\mu_N}$ . . . . .	53
4.2.5	Analytisch lösbare Grenzfälle der Sattelpunktnäherung . . . . .	56
4.3	Näherung B: Mittlere Besetzungszahlen $\langle n_i \rangle$ über Großkanonische Potentiale $\Omega_{\mu_N}^i$ von Teilsystemen . . . . .	64
4.3.1	Zerlegung in Teilsysteme . . . . .	65
4.3.2	Der Grenzfall $r_{\text{ion}} \rightarrow 0$ . . . . .	72
4.3.3	Grenzübergang zu Näherung A . . . . .	73
4.3.4	Paarkorrelationsfunktion $\langle n_i n_j \rangle$ . . . . .	74
4.3.5	Fehlerabschätzung für $\langle n_i \rangle$ und $\langle n_i n_j \rangle$ . . . . .	76
4.4	Verschiedene Verallgemeinerungen auf $\langle n_{i_1} \dots n_{i_k} \rangle$ . . . . .	78
4.4.1	Gemeinsamkeiten aller Verallgemeinerungen . . . . .	78
4.4.2	Alternative Bestimmung von $\langle n_i n_j \rangle$ . . . . .	80
4.4.3	$k$ -Teilchen Korrelationsfunktion $\langle n_{i_1} \dots n_{i_k} \rangle$ . . . . .	85
4.4.4	Steigerung der Genauigkeit der $\langle n_i \rangle$ . . . . .	88
4.5	Mittelung über alle Gittergas-Gitter . . . . .	89
4.6	Zusammenfassung der Theorie . . . . .	91

<b>5</b>	<b>Numerik der Modellgleichungen</b>	<b>93</b>
5.1	Numerische Lösung der P-DGLs in 3 Dimensionen . . . . .	93
5.1.1	Der Lösungsalgorithmus . . . . .	93
5.1.2	Geometrische Aspekte und Randbedingungen . . . . .	98
5.2	Berechnung der Dichteprofile . . . . .	103
5.3	Zuverlässigkeit der Lösungen . . . . .	111
<b>6</b>	<b>Diskussion der numerischen Ergebnisse:</b>	
	<b>Verteilung voluminöser Gegenionen an DNA</b>	<b>117</b>
6.1	Die Rolle der Linienladungsdichte $\lambda$ und des Gegenionenradius $r_{\text{ion}}$ . . . . .	118
6.2	Der Einfluß der Randbedingungen . . . . .	136
6.3	Sonstige Ergebnisse . . . . .	139
6.4	Zusammenfassung . . . . .	141
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>143</b>
	<b>Anhang</b>	<b>145</b>
A	Ergebnisse: ganzseitige Graphen. . . . .	147
B	Struktur des numerischen Algorithmus . . . . .	171
	<b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>	<b>175</b>
	Der Autor . . . . .	181

**Hinweis:**

Ein Abdruck der Abbildungen auf den Seiten 7 und 10 ist aus urheberrechtlichen Gründen leider nur in den sogenannten „Pflichtexemplaren“ dieser Dissertation (Auflage 50 St.) möglich gewesen.

**Kontakt:**

<http://www.jmertins.de>