

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Motivation	5
2.1	Dichteverteilung voluminöser Gegenionen; Korrelation, Kondensation . . .	5
2.2	Effektive Kräfte und Potentiale zwischen großen Biomolekülen	8
3	Auswahl der Untersuchungsmethoden	13
3.1	Theoretische Methoden	13
3.2	Numerische Methoden	21
3.3	Gegenwärtige experimentelle Möglichkeiten	21
4	Theorie der Verteilung voluminöser Gegenionen an geladenen Biopolymeren	25
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}_{μ_N} . .	34
4.1.4	Beispielsystem DNA mit Gegenionen	36
4.2	Näherung A: Dichteprofil $\langle n \rangle$ als Sattelpunkt der Zustandssumme \mathcal{Z}_{μ_N} . .	40
4.2.1	Differentialgleichung für die Gegenionendichte	40
4.2.2	„Effektive“ Hamiltonfunktion \mathcal{H}_{eff} , Großkanonisches Potential Ω_{μ_N} .	45
4.2.3	Ω_{μ_N} und effektive Kräfte zwischen zwei Biopolymeren	51
4.2.4	Güte von Sattelpunktnäherung und Ω_{μ_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

5	Numerik der Modellgleichungen	93
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
6	Diskussion der numerischen Ergebnisse:	
	Verteilung voluminöser Gegenionen an DNA	117
6.1	Die Rolle der Linienladungsdichte λ und des Gegenionenradius r_{ion}	118
6.2	Der Einfluß der Randbedingungen	136
6.3	Sonstige Ergebnisse	139
6.4	Zusammenfassung	141
7	Zusammenfassung und Ausblick	143
	Anhang	145
A	Ergebnisse: ganzseitige Graphen.	147
B	Struktur des numerischen Algorithmus	171
	Literaturverzeichnis	175
	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>