

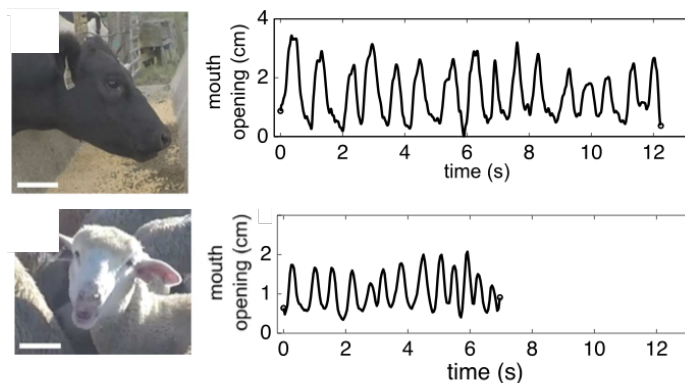
Übungsblatt 11

Besprechung am 23.1.2018/25.1.2018

Aufgabe 1

Harmonisches Kauen. Ein Forscherteam hat die Kaubewegungen von Landsäugetieren untersucht (Viro *et al.*, *Scientific Reports*, 2017). Die Abbildung unten zeigt experimentelle Daten zur Öffnung des Maules als Funktion der Zeit für eine Kuh mit Masse $M_K = 427$ kg (oben) und für ein Schaf mit Masse $M_S = 31$ kg (unten). Wir wollen die Kaubewegung als harmonische Schwingung nähern.

- a) Bestimmen Sie aus den gezeigten Daten die ungefähre Kaufrequenz der Kuh f_K und des Schafes f_S . Was ist das Verhältnis f_K/f_S ?



- b) Was sind die Periodendauern der Kaubewegungen T_K und T_S ?
- c) Als einfaches Modell für die Kaubewegungen nehmen wir an, dass i) es sich um eine harmonische Schwingung des Kiefers handelt, ii) dass die Masse des Kiefers einem festen Anteil p der Gesamtmasse des Tieres entspricht ($M_{\text{Kiefer}} = p \cdot M_{\text{Tier}}$) und iii) dass die Kaumuskulatur eine lineare Rückstellkraft mit einer Federkonstante K ausübt, wobei p und K für alle Tiere gleich sind. Was ist die Vorhersage des Modells für das Verhältnis f_P/f_S ?
- d) Beschreibt das Modell die experimentellen Daten? Wie könnte man das Modell verbessern?

Aufgabe 2

Molekülschwingung. In sogenannten Molekulardynamiksimulationen werden Atome als Punktmassen und chemische Bindungen als elastische Federn dargestellt. Wir betrachten hier ein Wasserstoffatom ($m_H = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg), das über eine Einfachbindung an ein wesentlich schwereres Molekül gebunden ist. Wir können hier die Bewegung des größeren Moleküls vernachlässigen und die Einfachbindung als harmonische Feder mit der Federkonstanten (in den in Molekulardynamiksimulationen üblichen Einheiten) $k_H = 160 \text{ \AA}^{-2} \cdot \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$ annehmen.

- Geben Sie den Wert der Federkonstante k_H in SI Einheiten an.
- Stellen Sie die Differentialgleichung der Bewegung auf und lösen Sie diese.
- Was ist die Periode der Schwingung des Wasserstoffatoms?
- In Molekulardynamiksimulationen werden die Newton'schen Bewegungsgleichungen numerisch gelöst, indem man die Zeit in kleine Intervalle (sogenannte Zeitschritte) δt einteilt und für jeden Zeitschritt nacheinander die aktuellen Positionen der Atome berechnet. Als Faustregel muss man δt dabei so wählen, dass der Integrationszeitraum mindestens 10 mal kleiner ist als die kürzeste Schwingungsperiode im simulierten System. Was für einen Integrationszeitraum muss man nehmen, wenn wir davon ausgehen, dass die oben berechnete Wasserstoffschwingung die kürzeste Schwingungsperiode im simulierten System ist? Wie viele Integrationschritte muss man berechnen, um insgesamt 1 ns zu simulieren? Wie viele Schritte werden benötigt, um 1 ms zu simulieren?

Aufgabe 3

Oberflächenspannung und Kapillarkraft

Die Steighöhe h einer Flüssigkeitssäule ist gegeben durch $h = \frac{2\sigma \cos\alpha}{\rho g r}$. Berechnen Sie die Steighöhe der vier abgebildeten Röhren bei 293 K auf Meereshöhe und zeichnen Sie diese unter Berücksichtigung des Kontaktwinkels ein. Die großen Glasröhren haben einen Durchmesser von 1,0 cm, die kleinere ist halb so dick.

Die Oberflächenspannungen betragen $\sigma_{H_2O} = 0,073 \frac{N}{m}$, $\sigma_{Hg} = 0,476 \frac{N}{m}$ und $\sigma_{Benzol} = 0,029 \frac{N}{m}$, alle bei Raumtemperatur (293 K). Der Kontaktwinkel seien $\alpha_{H_2O} = 20^\circ$, $\alpha_{Hg} = 140^\circ$ und $\alpha_{Benzol} = 6^\circ$. Dichte $\rho_{H_2O} = 1000 \frac{kg}{m^3}$, $\rho_{Hg} = 13,55 \frac{g}{cm^3}$ und $\rho_{Benzol} = 876 \frac{kg}{m^3}$, ebenfalls alle bei Raumtemperatur (293 K).

