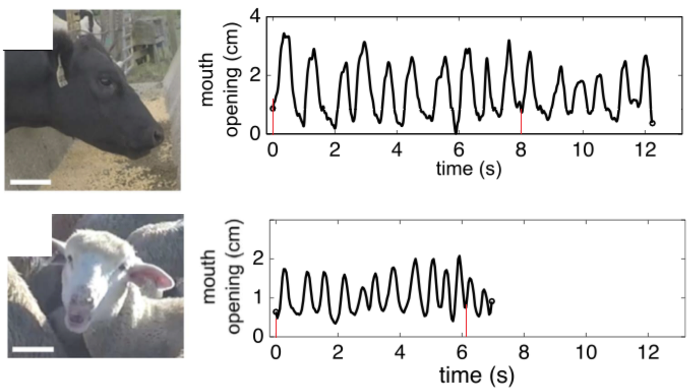
Übungsblatt 11
Besprechung am 23.1.2018/25.1.2018

Aufgabe 1

Harmonisches Kauen. Ein Forscherteam hat die Kaubewegungen von Landsäugetieren untersucht (Virot *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?



Lösung: Durch das Wählen von zwei Minima/Maxima als Referenzpunkte kann man mithilfe des Graphs näherungsweise die Kaufrequenz der Tiere bestimmen.

$$f = \frac{N}{\Delta t} \tag{1}$$

Hierbei ergeben sich folgende Werte:

Für die Kuh 10 Minima in 8 s:

$$f_K = \frac{10}{8\ \mathrm{s}} \approx 1,3\ \mathrm{Hz} \tag{2}$$

Für das Schaf 11 Minima in 6,2 s:

$$f_S = \frac{11}{6,2\ \mathrm{s}} \approx 1,8\ \mathrm{Hz} \tag{3}$$

Anhand der Frequenzen lässt sich nun das Verhältniss bestimmen:

$$\frac{f_K}{f_S} = \frac{10 \cdot 6,2}{11 \cdot 8} = 0,7045 \approx 0,7 \tag{4}$$

Hinweis: Aufgrund der verschiedenen Möglichkeiten bei der Wahl der Referenzpunkte kann es zu leichten Abweichungen der Frequenzen, Periodendauern und des Frequenzverhältnisses kommen.

b) Was sind die Periodendauern der Kaubewegungen T_K und T_S?

Lösung:
Allgemein gilt:

$$T = \frac{1}{f} \tag{5}$$

Daraus ergeben sich für die Periodendauern folgende Werte:

$$T_K = \frac{1}{f_K} = 0,8 \text{ s} \tag{6}$$

$$T_S = \frac{1}{f_S} = 0,5636 \text{ s} \approx 0,6 \text{ s} \tag{7}$$

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 Models für das Verhältnis f_P/f_S?

Lösung:
Allgemein gilt:

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \tag{8}$$

In unserem Fall bedeutet dies also:

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{p \cdot M_{Tier}}} \propto \frac{1}{\sqrt{M_{Tier}}} \tag{9}$$

Daraus ergibt sich folgendes Frequenzverhältnis:

$$\frac{f_K}{f_S} = \sqrt{\frac{M_S}{M_K}} = \sqrt{\frac{31}{427}} = 0,26944 \approx 0,3 \tag{10}$$

d) Beschreibt das Modell die experimentellen Daten? Wie könnte man das Modell verbessern?

Lösung:
Das Modell kann zwar voraussagen, welches der betrachteten Tiere schneller kaut, jedoch scheitert es bei der Beschreibung, um welchen Faktor das Tier schneller kaut (d.h. Es kann sagen, dass das Schaf schneller als die Kuh kaut. Jedoch kann es nicht voraussagen, ob das Schaf 2, 3 oder 4 mal so schnell kaut). Es ist also nur eine qualitative Aussage, jedoch keine quantitative Aussage möglich.
Mögliche Verbesserungen für das Modell wären beispielsweise eine Berücksichtigung der Kieferanatomie, sowie eine genauere Untersuchung von p und k (z.B. $p = p(m)$ und $k = k(m)$).

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) $k_H = 160\ \text{Å}^{-2} \cdot \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$ annehmen.

a) Geben Sie den Wert der Federkonstante k_H in SI Einheiten an.

Lösung:

$$k_H = 160\ \frac{kcal}{\text{mol}} \cdot \frac{4187\ \text{J}}{kcal} \cdot \frac{1\ \text{mol}}{6 \cdot 10^{23}} \cdot \left(\frac{10^{10}}{1\ \text{m}}\right)^2 = 111,653\ \frac{\text{N}}{\text{m}} \approx 112\ \frac{\text{N}}{\text{m}} \tag{11}$$

b) Stellen Sie die Differentialgleichung der Bewegung auf und lösen Sie diese.

Lösung:
Da das Wasserstoffatom eine harmonische Schwingung durchführt, lautet die Bewegungsgleichung:

$$m_H \ddot{x} + k_H x = 0 \Rightarrow \ddot{x} + \frac{k_H}{m_H} x = 0 \tag{12}$$

Lösungsansatz der Differentialgleichung:

$$x(t) = Asin(\omega t + \phi) \tag{13}$$

$$\dot{x}(t) = A\omega cos(\omega t + \phi) \tag{14}$$

$$\ddot{x}(t) = -\omega^2 Asin(\omega t + \phi) \tag{15}$$

Einsetzen in die Bewegungsgleichung liefert $\omega^2 = \frac{k_H}{m_H}$.

Die Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = 0$ werden wie folgt gewählt:
x_0 sei der Gleichgewichtsabstand zwischen den Molekül und dem Wasserstoffatom

$$x(0) = x_0 \tag{16}$$

Die Anfangsgeschwindigkeit sei 0

$$\dot{x}(0) = 0 \tag{17}$$

$$\Rightarrow x(0) = Asin(\phi) = x_0 \tag{18}$$

$$\Rightarrow \dot{x}(0) = A\omega cos(\phi) = 0 \Leftrightarrow \phi = \frac{\pi}{2} \tag{19}$$

Eingesetzt in

$$x(0) = Asin(\phi) = x_0 \tag{20}$$

$$\Rightarrow x_0 = Asin\left(\frac{\pi}{2}\right) = A \tag{21}$$

Die Lösung der Bewegungsgleichung lautet also:

$$\Rightarrow x(t) = x_0 sin(\omega t + \frac{\pi}{2}) \tag{22}$$

c) Was ist die Perdiodendauer der Schwingung des Wasserstoffatoms?

Lösung:

$$\omega = \sqrt{\frac{k_H}{m_H}} \text{ und } \omega = \frac{2\pi}{T_H} \tag{23}$$

$$\Rightarrow T_H = 2\pi\sqrt{\frac{m_H}{k_H}} \tag{24}$$

$$\Rightarrow T_H = 2\pi\sqrt{\frac{1,67 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}}{111,65\ \frac{\mathrm{N}}{\mathrm{m}}}} = 24,299775 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{s} \approx 24\ \mathrm{fs} \tag{25}$$

d) 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 Integrationsschritt mindestens 10 mal kleiner ist als die kürzeste Schwingungsperiode im simulierten System. Was für einen Integrationszeitschritt muss man nehmen, wenn wir davon ausgehen, dass die oben berechnete Wasserstoffschwingung die kürzeste Schwingungsperdiode im simulierten System ist? Wie viele Integrationsschritte muss man berechnen, um insgesamt 1 ns zu simulieren? Wie viele Schritte werden benötigt, um 1 ms zu simulieren?

Lösung:

δt soll maximal $\frac{1}{10}$ der kürzesten Schwingungsperiode T_H sein:

$$\delta t = \frac{T_H}{10} = 2,43 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{s} \tag{26}$$

Integrationsschritte für 1 ns:

$$N = \frac{1\ \mathrm{ns}}{\delta t} = \frac{1 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{s}}{2,43 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{s}} = 4,1153 \cdot 10^5 \approx 4 \cdot 10^5 \tag{27}$$

Integrationsschritte für 1 ms:

$$N = \frac{1\ \mathrm{ms}}{\delta t} = \frac{1 \cdot 10^{-3}\ \mathrm{s}}{2,43 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{s}} = 4,1153 \cdot 10^{11} \approx 4 \cdot 10^{11} \tag{28}$$

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 $\alpha_{H_2O} = 20°$, $\alpha_{Hg} = 140°$ und $\alpha_{Benzol} = 6°$. 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).

Lösung:

Durch einsetzen in $h = \frac{2\sigma cos\alpha}{\rho g r}$ ergeben sich folgende Werte:

$$h_{H_2O,breit} = 0,00279705 \text{ m} \approx 2,8 \text{ mm} \tag{29}$$

$$h_{H_2O,schmal} = 0,00559409 \text{ m} \approx 5,6 \text{ mm} \tag{30}$$

$$h_{Hg,breit} = -0,00109364 \text{ m} \approx -1,1 \text{ mm} \tag{31}$$

$$h_{Benzol,breit} = 0,00134245 \text{ m} \approx 1,3 \text{ mm} \tag{32}$$

Bitte beachten Sie, dass die folgende Skizze nicht maßstabsgetreu ist.