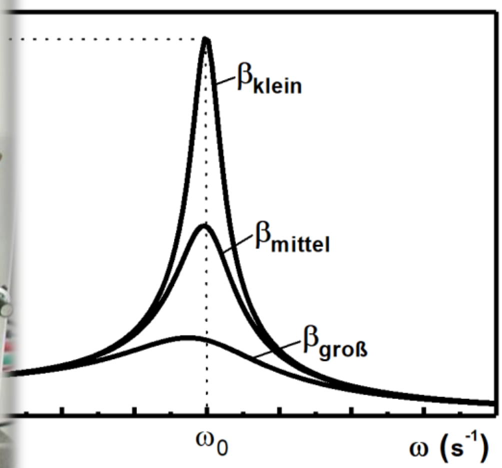
Praktikum Physik
für Naturwissenschaftler

universität
uulm

Drehschwingungen

Versuchsinhalt

Freie Schwingung, Dämpfung, Erzwungene Schwingung, Resonanz, Phasenkurve, Energieerhaltungssatz, Schwingungsgleichung, Regression/Fit, Molekulardynamik



Experimente

Aus der Messung von Periodendauer und Amplitudenabnahme werden Eigenfrequenz und Dämpfungskonstante eines frei schwingenden Drehpendels bestimmt.

Amplitude und Phase von erzwungenen Schwingungen bei verschiedenen Erregerfrequenzen werden bestimmt und in einer Resonanzkurve aufgetragen.
Eigenfrequenz und Dämpfungskonstante werden durch Anpassung einer Modellfunktion an die Resonanzkurve bestimmt und mit den Ergebnissen für die freie Schwingung verglichen.

Der Zusammenhang zwischen Infrarotabsorption und verschiedenen Schwingungsmoden eines Moleküls wird mit Hilfe einer Computersimulation ('Molekulardynamik') untersucht

Stichworte zur Vorbereitung

Kräftegleichgewicht, Bewegungsgleichung, Differentialgleichung,
Energieerhaltungssatz,
Freie Schwingung, Eigenfrequenz, Dämpfung,
Schwingfall, Kriechfall, aperiodischer Grenzfall
Erzwungene Schwingung, Resonanz, Phasenkurve
Lineare- und nicht-lineare Regression

Literatur zum Versuch

- P.A. Tipler : „Physik“, Spektrum-Verlag
- Bergmann / Schäfer, De Gruyter, „Lehrbuch der Experimentalphysik (Band 1)“
- H. Vogel: „Gerthsen Physik“, Springer
- W. Walcher; Teubner Verlag, "Praktikum der Physik"

I) THEORIE

1. Auftreten von Schwingungen in Natur und Technik

Schwingungen sind in unserer Umwelt auf vielfältige Weise präsent, etwa beim Pendel einer Standuhr (ebenso im Schwingquarz einer Quarzuhr), oder bei schwingenden Saiten bzw. Zungen von Musikinstrumenten. Ein weiteres Beispiel für in der Natur auftretende schwingfähige Systeme (Oszillatoren) sind die Gasmoleküle wie z.B. H_2, N_2, O_2,... Durch Messung der Schwingungsfrequenz lässt sich dem Molekül bei bekannter Masse eine „Federkonstante“ zuordnen und damit eine Aussage über die chemische Bindung machen.

Bei erzwungenen Schwingungen ist Resonanzverhalten zu beobachten, d.h. eine extrem starke Auslenkung des Oszillators, wenn die von außen wirkende Anregungsfrequenz mit der Eigenfrequenz des Systems übereinstimmt. Dies kann erwünscht sein und wird ausgenutzt beim Bau von bestimmten Musikinstrumenten mit Resonanzkörper (z.B. Violine), ist aber unerwünscht bei der Konstruktion von Gebäuden, Brücken usw.
Die Dämpfung von unerwünschten mechanischen Schwingungen hat große technische Bedeutung, etwa bei Autostoßdämpfern oder Zeigermessgeräten. Hier wird versucht eine Schwingung derart zu dämpfen, dass das System möglichst rasch, aber ohne durchzuschwingen seine Ruhelage erreicht (aperiodischer Grenzfall).

2. Schwingungen und deren Beschreibung

Eine Schwingung ist eine zeitlich periodische Änderung einer physikalischen Größe (z.B. Weg, elektrische Spannung oder Drehwinkel). Bei einer harmonischen Schwingung ändert sich die physikalische Größe nach einer Sinusfunktion. Alle anderen Schwingungsformen bezeichnet man als anharmonisch (Abb.1).

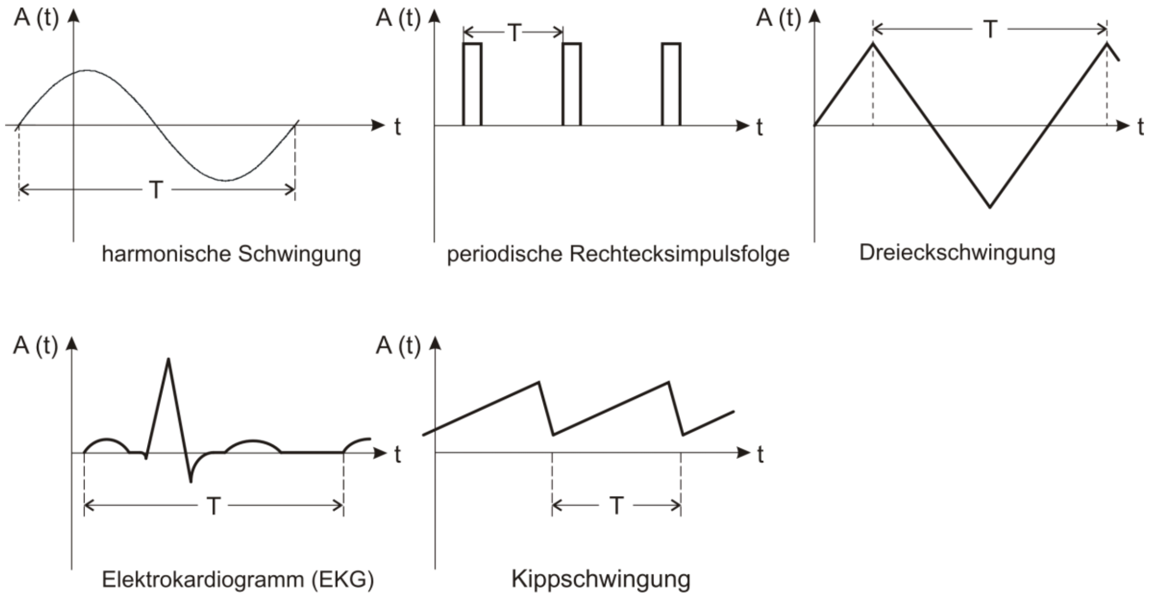


Abb.1: Verschiedene Schwingungsformen

Die für eine Schwingungsperiode benötigte Zeit T heißt ***Periodendauer***. Sie wird bestimmt durch die Messung der Zeit zwischen zwei benachbarten ‘ identischen Punkten’.
Die ***Frequenz*** $\boldsymbol{\nu}$ ist ein Maß dafür, wie oft eine Schwingung mit Periodendauer T in eine Zeiteinheit passt, eine Anzahl pro Zeit, somit der Kehrwert der Periodendauer $\nu = 1 / T$.

Eine Motorwelle, die sich 3000 mal in der Minute dreht, ($\nu = 3000 \frac{1}{\text{min}}$) durchläuft bei jeder Umdrehung einen Winkel von 2π (=360°). Bei 3000 Umdrehungen pro Minute also einen Winkel von $2\pi \cdot 3000$ pro Minute. Man nennt diese Größe die Winkelgeschwindigkeit oder Kreisfrequenz ω: $\omega = 2\pi\nu$ (hier: $\omega = 2\pi \cdot 3000 \frac{1}{\text{min}}$)
Man kann die Winkelgeschwindigkeit auch jeder anderen Schwingung zuordnen, wenn man einer Periodendauer den Winkel 2π zuordnet.

Eine harmonische Schwingung hat die mathematische Form:

$$x(t) = x_0 \cdot \sin(\omega t + \varphi)$$

$x(t)$:	momentane Auslenkung zum Zeitpunkt t
x_0 :	Amplitude; Betrag der maximalen Auslenkung
ω :	Kreisfrequenz; ‘staucht’ bzw. ‘dehnt’ die Sinusfunktion über der Zeitachse
φ :	Nullphasenwinkel; zeigt an, dass x(t) zum Zeitpunkt t=0 nicht Null ist

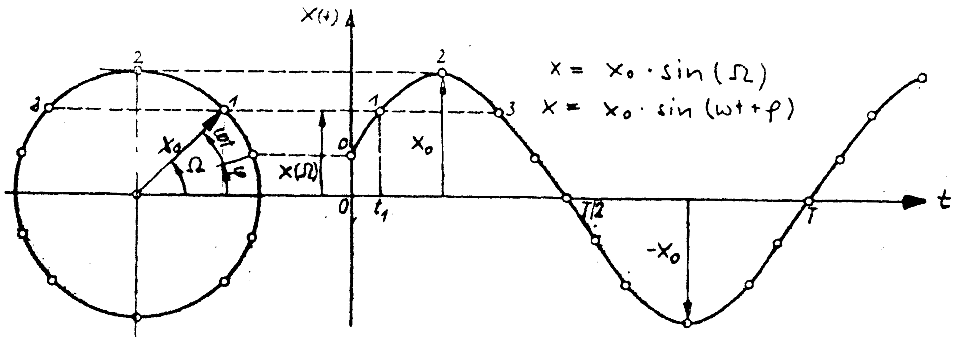


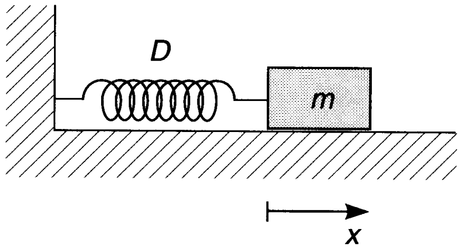
Abb.2: Zusammenhang zwischen einem auf einer Kreisbahn rotierenden Zeiger mit einer harmonischen Schwingung

Eine Veranschaulichung der Kreisfrequenz = Winkelgeschwindigkeit ω ist in Abb. 2 gezeigt: Der Abstand der Zeigerspitze x von der Abszisse entspricht genau dem Sinuswert für eine momentane Winkelstellung. Der Zeiger rotiert mit der konstanten Winkelgeschwindigkeit ω und ändert so diesen Abstand periodisch. Der Radius des Zeigers bestimmt die Amplitude x_0. Die Zeitdauer eines Umlaufs ist die Periodendauer T.

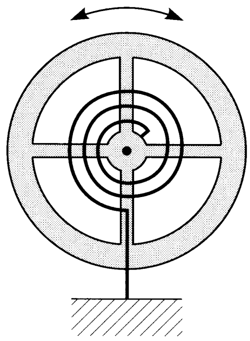
Zum Zeitpunkt t=0 befand sich der Zeiger beim Phasenwinkel $\Omega = \varphi$.
Der Phasenwinkel φ beschreibt auch die Phasenverschiebung zwischen der betrachteten Schwingung und einer 'Referenzschwingung' gleicher Frequenz, deren Sinusfunktion im Zeitnullpunkt begann.

3. Lineare Schwingungen und Drehschwingungen

Federpendel
Eine Masse ist an einer Zug- und Druckfeder befestigt. Die Feder hängt an einer festen Wand.



Drehpendel
Ein Ring ist an einer Drehfeder befestigt. Das andere Ende der Drehfeder hängt an der festen Achse um die sich der Ring dreht.



Zwischen Federpendel und Drehpendel besteht eine formale Analogie in den Gleichungen, die beide Schwingsysteme beschreiben. Man braucht nur die folgenden Größen entsprechend auszutauschen:

Auslenkung	x	⇔	α	Drehwinkel
Kraft	F	⇔	M	Drehmoment
Federkonst.	D	⇔	D^*	Drehfederkonstante
Masse	m	⇔	J	Massenträgheitsmoment
Dämpfung	β	⇔	β	Dämpfung

4. Freie, ungedämpfte Schwingung

Für die physikalische Beschreibung der Schwingung betrachtet man beim Federpendel die Kräfte, die auf die Masse wirken, beim Drehpendel die Drehmomente, die auf den Ring wirken. Wegen der formalen Analogie reicht es aus, die Kräftebilanz am Federpendel durchzuführen.
Wird die Masse aus ihrer Ruhelage ausgelenkt, so versucht die Feder die Masse in ihre Ruhelage zurückzuziehen. Die Kraft wird umso größer, je größer die Auslenkung ist. Im so genannten Hook`schen Bereich besteht eine Proportionalität zwischen Federkraft und Auslenkung:

$$F_{Feder} = -Dx$$

Wird die Masse in die positive x-Richtung ausgelenkt, so wirkt die Rückstellkraft gerade in die negative x-Richtung - deshalb das Minuszeichen (Abb 3).

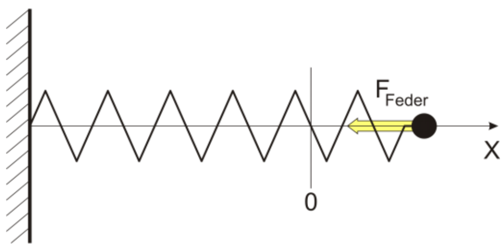


Abb.3: Richtung der Federkraft bei Auslenkung

Die Proportionalitätskonstante D gibt an, ob die Feder hart (D groß) oder weich (D klein) ist.

Nach der Newton'schen Bewegungsgleichung verursacht eine Kraft F, die auf einen Körper wirkt, eine Beschleunigung a:

$$F = ma = m\ddot{x} = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

In unserem Fall wird die Masse m durch die Federkraft F_{Feder} beschleunigt, d.h. wir müssen die Federkraft in die Newton'sche Bewegungsgleichung einsetzen:

$$m\ddot{x} = F_{Feder} = -Dx \qquad \rightarrow \qquad \ddot{x} + \frac{D}{m}x = 0$$

Drehfederpendel:

$$\ddot{\alpha} + \frac{D^*}{J}\alpha = 0$$

Wir haben nun eine Differentialgleichung zweiter Ordnung erhalten (eine zweite Ableitung kommt vor).

Nun soll diese Differentialgleichung zweiter Ordnung betrachtet werden, deren Lösung keine Zahl ist, sondern eine Funktion der Zeit. Um nachzuprüfen ob eine Funktion eine Lösung ist, setzt man diese Funktion und ihre zweite Ableitung in die Differentialgleichung ein. Lässt sich die Gleichung mit diesem „Ansatz" erfüllen, so ist diese Funktion eine Lösung.
Wer schon einmal ein Federpendel schwingen sah, könnte auf die Vermutung kommen, dass das Federpendel eine Sinusschwingung ausführt. Mit dem Ansatz der allgemeinen Sinusschwingung können wir das leicht nachprüfen.

Ansatz:

$$x(t) = x_0 \cdot \sin(\omega t + \varphi) \qquad (1)$$

$$\dot{x}(t) = \omega x_0 \cdot \cos(\omega t + \varphi) \qquad (2)$$

$$\ddot{x}(t) = -\omega^2 x_0 \cdot \sin(\omega t + \varphi) \qquad (3)$$

$$\ddot{x} \qquad + \qquad \frac{D}{m}x \qquad = 0$$

$$-\omega^2 \cdot x_0 \sin(\omega t + \varphi) + \frac{D}{m} \cdot x_0 \sin(\omega t + \varphi) = 0 \qquad \text{nur erfüllt für } \omega^2 = \frac{D}{m}$$

Die Differentialgleichung ist dann für jeden Zeitpunkt erfüllt.

Mit der Abkürzung $\omega_0 = \sqrt{\frac{D}{m}}$ bzw. $\omega_0 = \sqrt{\frac{D^*}{J}}$

erhalten wir als Lösung der Differentialgleichung:

Federpendel	Drehpendel
$\underline{x(t) = x_0 \cdot \sin(\omega_0 t + \varphi)}$	$\underline{\alpha(t) = \alpha_0 \cdot \sin(\omega_0 t + \varphi)}$

Die Eigenfrequenz ω_0 ist eine charakteristische Größe für das Schwingsystem. Sie ist umso größer (schnelle Schwingung), je härter die Feder und je kleiner die Masse ist (bzw. das Massenträgheitsmoment).
Die beiden Konstanten x_0 bzw. α_0 und φ bestimmt man durch die Anfangsbedingungen. (Amplitude und Phase sind keine festen Eigenschaften des Pendels, sondern sie hängen von der Durchführung des Experiments ab.)

5. Freie, gedämpfte Schwingung

Eine zusätzliche Reibungskraft bringt eine freie Schwingung zum Abklingen. Bei der Bewegung eines Körpers in Luft oder in einer Flüssigkeit ist die Reibungskraft proportional zur Geschwindigkeit (bei laminarer Umströmung, siehe Versuch Viskosität).
Bewegt sich der Körper nicht, so wirkt auch keine Reibungskraft.

$$F_{\mathrm{Reib}} = -b\dot{x} \qquad , \qquad M_{\mathrm{Reib}} = -b^{*} \cdot \dot{\alpha}$$

Das Minuszeichen drückt aus, dass die Reibungskraft entgegen der Bewegungsrichtung wirkt. Natürlich hängt die Reibungskraft von der Art des Mediums ab. Ein zähflüssiges (hochviskoses) Medium verursacht eine größere Reibungskraft (großes b, z.B. Honig) als ein dünnflüssiges (kleines b, z.B. Wasser).
Setzen wir zusätzlich zur Federkraft nun die Reibungskraft in die Newton'sche Bewegungsgleichung ein, so erhalten wir die Differentialgleichung für die gedämpfte Schwingung:

$$m\ddot{x} = -Dx - b\dot{x}$$
$$m\ddot{x} + b\dot{x} + Dx = 0$$

Federpendel: $$\ddot{x} + \underbrace{\frac{b}{m}}_{=2\beta}\dot{x} + \underbrace{\frac{D}{m}}_{=\omega_0^2}x = 0$$

Drehpendel: $$\ddot{\alpha} + \underbrace{\frac{b}{J}}_{=2\beta}\dot{\alpha} + \underbrace{\frac{D^{*}}{J}}_{=\omega_0^2}\alpha = 0$$

Die Dämpfung β und die Eigenfrequenz des ungedämpften Systems ω_0 sind hier die charakteristischen Größen. Je nachdem, ob β größer, kleiner oder gleich ω_0 ist, erhält man eine andere Lösungsfunktion. Da man bei diesem System auch nichtperiodische Lösungen vermutet, macht man einen Ansatz in Form einer e-Funktion: $x(t) = e^{pt}$
Dieser Ansatz liefert bei reellem p nichtperiodische und bei imaginärem p periodische Lösungen. Wegen der Linearität der Differentialgleichung sind bei mehreren Lösungsfunktionen auch Summen von Lösungsfunktionen sowie das Vielfache einer Lösungsfunktion wieder Lösungen der Differentialgleichung.

Man erhält für p: $p_{1,2} = -\beta \pm i\sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}$

Es müssen folgende Fälle unterschieden werden (Abb. 4):

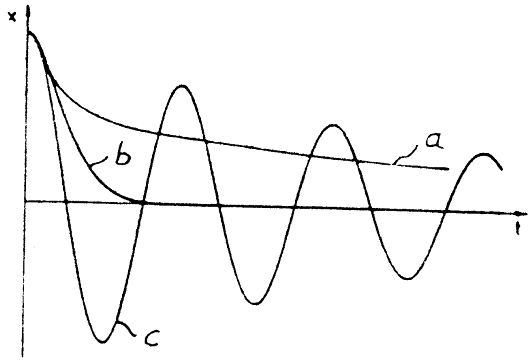


Abb.4: Skizze der verschiedenen Lösungsformen der Schwingungs-Differentialgleichung

a) ***Kriechfall*** $\beta > \omega_0$ (z.B. Kugel in Honig)

Die Dämpfung ist so groß, dass nach einer Anfangsauslenkung ein langsames Zurückgleiten in die Gleichgewichtslage auftritt.

$$x(t) = Ae^{p_1 t} + Be^{p_2 t}$$

b) ***aperiodischer Grenzfall*** $\beta = \omega_0$ (z.B. Kugel in Wasser)

Die Dämpfung ist so gerade so groß, dass noch kein Schwingen auftritt. Wird sie nur wenig kleiner, so schwingt das System. Dieser Fall ist deshalb so interessant, weil man zwar oft eine schnelle Einstellung in einen Gleichgewichtszustand will, aber kein Schwingen (z.B. Zeigerausschlag bei Messinstrumenten).

$$x(t) = e^{-\beta t}(D + Et)$$

c) ***Schwingfall*** $\beta < \omega_0$ (z.B. Kugel in Luft)

Nach einer Anfangsauslenkung geht das System schwingend in die Gleichgewichtslage. Das gedämpfte System schwingt dabei mit einer etwas kleineren Frequenz als das Ungedämpfte. Die Amplitude nimmt exponentiell ab, Energie wird abgegeben.

$$\underline{x(t) = Ce^{-\beta t} \cdot \sin(\omega t + \varphi)} \quad ; \quad \underline{\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}}$$

A,B,C,D,E, φ sind Konstanten, die durch die Anfangsbedingungen bestimmt sind.

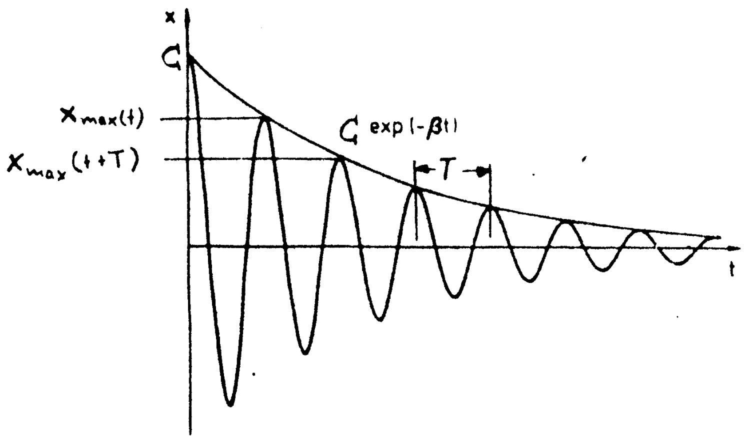


Abb.5: Skizze der Lösung für den Schwingfall

$C \cdot e^{-\beta t}$ bildet die Einhüllende der Maxima für die Sinusfunktion (Abb. 5). Das Verhältnis zweier Maxima (oder Minima) ist damit konstant und heißt das Dämpfungsverhältnis oder Dekrement K.
Die Amplitude nimmt immer um den gleichen Faktor ab. (Bei jedem Maximum ist der Wert der Sinusfunktion gleich 1)

$$\frac{x_{\max}(t)}{x_{\max}(t+T)} = \frac{e^{-\beta t} \cdot C \cdot \sin(\omega t + \varphi)}{e^{-\beta(t+T)} \cdot C \cdot \sin(\omega(t+T)+\varphi)} = e^{\beta T} = K$$

Das Dämpfungsverhältnis K beschreibt also die relative Veränderung der Amplitude innerhalb einer Periodendauer. Damit kann die Dämpfungskonstante berechnet werden:

$$\beta = \frac{\ln K}{T}$$

6. Erzwungene Schwingung

Bei der erzwungenen Schwingung wird das Schwingsystem nicht sich selbst überlassen, sondern von außen periodisch angeregt (Abb. 6). Beim Federpendel kann man z.B. die Federaufhängung periodisch bewegen und am Drehfederpendel die ansonsten feste Achse periodisch drehen.

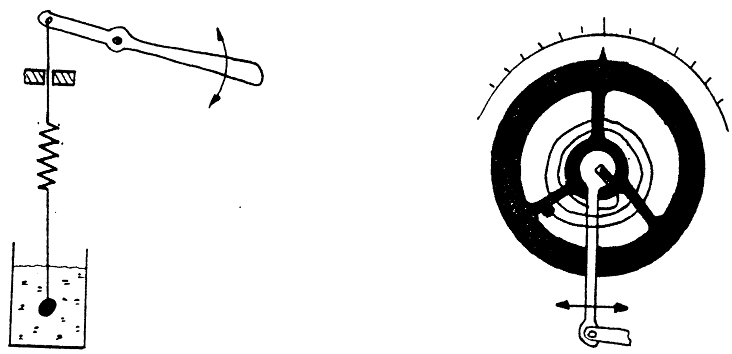


Abb.6: Realisierung erzwungener Schwingungen am Federpendel und Drehpendel

Die Kräftebilanz sieht jetzt so aus, dass die Summe der inneren Kräfte gleich der äußeren Kraft ist. Für eine sinusförmige Anregung erhält man:

$$\ddot{x} + 2\beta\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{F_0}{m}\cos\omega_a t$$

ω_a: äußere Kreisfrequenz

F_0 : äußere Kraftamplitude

analog: $$\ddot{\alpha} + 2\beta\dot{\alpha} + \omega_0\alpha = \frac{M_0}{J}\cos\omega_a t$$

Wir erwarten, dass nach einer gewissen Einschwingzeit das Schwingsystem mit der äußeren Anregungsfrequenz ω_a schwingt. Dementsprechend sieht auch der Ansatz zur Lösung dieser Differentialgleichung aus.

Folgender Ansatz wird durch Einsetzen bestätigt: $x(t) = x_0 \cdot \cos(\omega_a t - \varphi)$

$$x_0 = \frac{\frac{F_0}{m}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega_a^2)^2 + (2\beta\omega_a)^2}} \qquad \varphi = \arctan\frac{2\beta\omega_a}{\omega_0^2 - \omega_a^2}$$

Nachdem die Einschwingvorgänge abgeklungen sind, ist die Frequenz ω, mit der das System schwingt, dieselbe wie die Anregungsfrequenz ω_a. Allerdings besitzt diese erzwungene Schwingung eine andere Amplitude und eine Phasenverschiebung gegenüber der Anregungsschwingung.

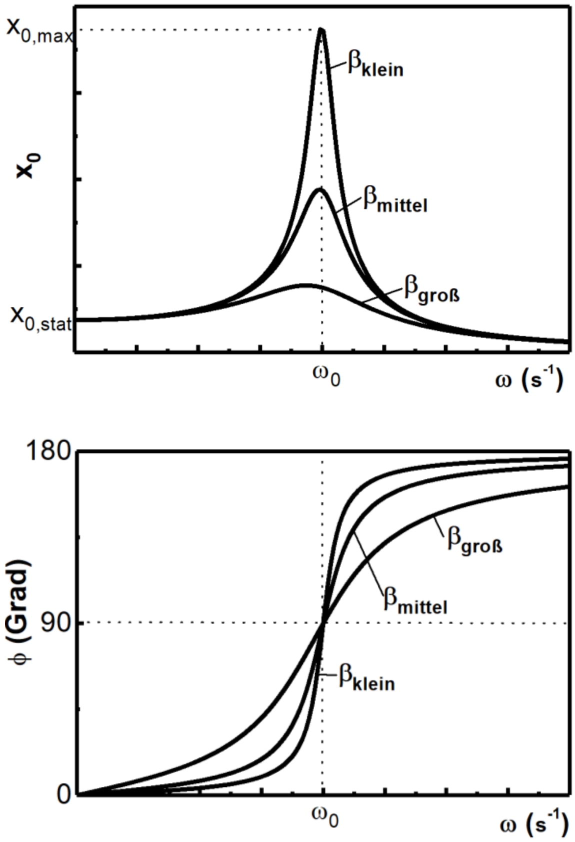


Abb.7: Amplituden- und Phasenkurve für erzwungene Schwingungen

Die Amplitude ist umso größer, je größer die Anregungsamplitude ist, je geringer die Dämpfung ist, und, was sehr wichtig ist, je näher die äußere Frequenz an der Eigenfrequenz des Systems liegt (Abb 7, oben). Die Resonanzfrequenz ist die Frequenz, bei der die größte Amplitude erreicht wird. Je größer die Dämpfung, desto breiter wird die Resonanzkurve. Außerdem verschiebt sich das Maximum zu niedrigeren Frequenzen hin.

Bei einer kleinen Anregungsfrequenz besteht kaum eine Phasenverschiebung (Abb7, unten). Das System folgt direkt der Anregung. Bei der Resonanzfrequenz, wenn die Phasenverschiebung gerade 90° beträgt, wird am meisten Energie in das Schwingsystem gepumpt, da die äußere Kraft immer in die augenblickliche Bewegungsrichtung des Schwingers wirkt. Bei 180° Phasenverschiebung wirkt die äußere Kraft teilweise bremsend. Ist die Erregerfrequenz sehr hoch, wird die Amplitude praktisch Null.

Für die Resonanzfrequenz und die Amplitude im Resonanzfall gilt:

$$\boldsymbol{\omega_{res} = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}} \quad , \qquad \boldsymbol{x_{0,max} = \frac{F_0/m}{2\beta\omega_0}}$$

Ist die Dämpfung β klein, kann man sie aus der Halbwertsbreite bestimmen.
Die Halbwertsbreite H ist die Breite der Resonanzkurve, bei der sie die halbe maximale Energie hat (Abb. 8). Die Maximalamplitude verringert sich dabei um den Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

Aus der Halbwertsbreite kann die Dämpfungskonstante bestimmt werden: $\beta = \frac{H}{2}$

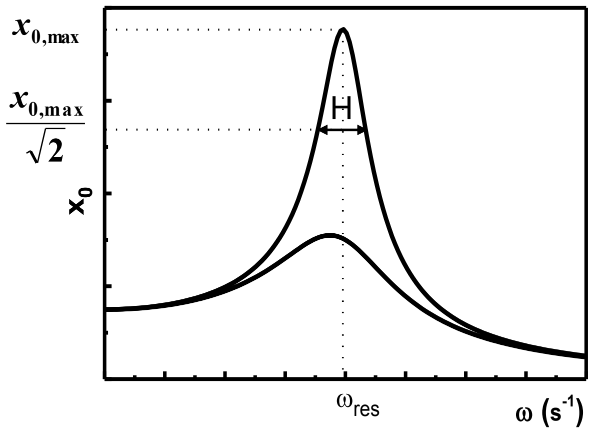


Abb.8: Resonanzkurven für zwei verschiedene Dämpfungen

Einschwingvorgang

Greift an einem zunächst ruhenden Schwingsystem von außen plötzlich eine periodische Kraft an, so wird sich sie erzwungene Schwingung nicht sofort einstellen; dazu ist Zeit notwendig (Abb 9). „Das Schwingsystem hat seine Eigenfrequenz noch nicht vergessen.“ Der Eigenschwingung überlagert sich die Fremdschwingung. Es entsteht eine Schwebung, die mit $e^{-\beta t}$ abklingt.

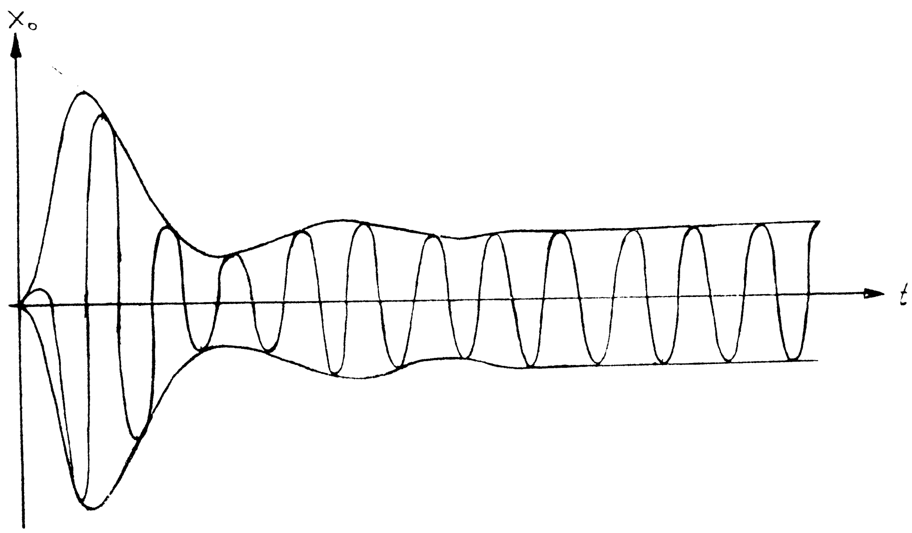


Abb.9: Einschwingvorgang nach Beginn einer periodischen Anregung

7. Lineare und nicht-lineare Regression

Regressionen (oder auch Ausgleichsrechnung/Fit) werden in wissenschaftlichen Auswertungen oft benutzt, wenn eine Datenreihe durch eine bekannte Theoriefunktion beschrieben werden kann. Die Parameter dieser bekannten Funktion werden variiert, bis die Funktion bestmöglich zu den vorhandenen Daten "passt". Bei einem linearen Zusammenhäng (z.B. Kraft-Auslenkung: $F = -D \cdot x$) kann dies auch sehr einfach mit Lineal und Bleistift gelöst werden. Mit Hilfe des Steigungsdreiecks der eingezeichneten Geraden können dann die Daten ausgewertet werden (im Beispiel: Federkonstante *D*). Geht man etwas weiter, und möchte dieses „reinlegen“ einer Gerade nicht mit dem Auge sondern mit einem Computeralgorithmus lösen, dann wendet man die **Methode der kleinsten Quadrate** an. Dabei wird die Summe der quadratischen Abweichungen der Modellfunktion von den Messdaten berechnet und minimiert. Die kleinste mögliche Summe der Quadrate entspricht dann also der Funktion, die die Messdaten am besten beschreibt.

Lineare Regression

Für wenige Messdaten und ein lineare Modellfunktion (z.B. $y = a \cdot x + b$) kann diese Optimierung noch "von Hand" ausgeführt werden. Jedoch bietet es sich an, eine allgemeinere Form zu finden, die ein Computeralgorithmus verarbeiten kann. Mit „Optimierung“ sollte man in der Mathematik immer die Nullstellen einer Ableitungsfunktion assoziieren. Man leitet also die Summe der kleinsten Quadrate nach jedem Parameter ab (im Beispiel: a, b) und setzt die Ableitungen gleich null. Das Resultat ist ein lineares Gleichungssystem (LGS), das mit bekannten Verfahren gelöst werden kann (siehe auch Anleitung 'Viskosität').

Mit jeder Polynomfunktion $y = a_1 + a_2 \cdot x^1 + a_3 \cdot x^2 + \cdots$ kann die Optimierung (≙Lösung des LGS) in einem Schritt durchgeführt werden. Außerdem gibt es linearisierbare Funktionen wie z.B. $y = A \cdot e^{-\beta x} \leftrightarrow \ln(y) = \ln(A) - \beta x$, die nach einer Umformung mit dem linearen Verfahren optimiert werden können.

Nicht-lineare Regression

Für eine beliebige Funktion (z.B. Resonanzkurve der erzwungenen Schwingung $x_0(\omega)$) müssen die Fehler-Quadrate werden in einem schrittweisen (iterativen) Verfahren (z.B. mittels **Levenberg-Marquardt-Algorithmus**) optimiert werden. Eine Schwäche der iterativen Optimierung sind die Notwendigkeit plausible Startwerte der Parameter anzugeben. Veranschaulichen kann man dies mit einer Berg- und Tal-Landschaft, bei der ein Wanderer das tiefste Tal sucht – dafür aber nur einen Tag Zeit hat. So kann es passieren, dass er an einer ungünstigen Stelle abgesetzt wurde, und innerhalb eines Tages eine Stelle gefunden hat, die er fälschlicherweise für das tiefste Tal hält. Dem Optimierungsalgorithmus der nicht-linearen Regression müssen daher Startwerte vorgegeben werden, die nicht zu weit von den tatsächlichen Werten entfernt sind, um zuverlässige Ergebnisse zu erhalten.

Fitting-Tools

Es gibt eine Vielzahl von Programmen, mit denen man diese Datenanalysen. ausführen kann. Welches Tool benutzt wird, hängt von persönlichen Vorlieben und der Verfügbarkeit ab (siehe nebenstehende Tabelle). MATLAB und Origin sind an der Universität Ulm über das KIZ verfügbar.

Programm	**Lizenz**	**Bedienung**
gnuplot	frei	Konsole/Skript
fityk (v0.9.8)	frei	graphisch
MATLAB	kommerziell	Konsole/Skript
Origin	kommerziell	graphisch
GraphPad Prism	kommerziell	Konsole/Skript

8. Computersimulation physikalischer Systeme

Neben der Durchführung des Experiments am Versuchsaufbau werden Sie auch die physikalische Realität in „Computerexperimenten“ simulieren. Die Basis dieser Simulationen ist die Lösung von Differentialgleichungen, die mit Hilfe eines Computers schrittweise berechnet und grafisch dargestellt werden. Wichtig ist dies zum Beispiel bei Molekulardynamik-Simulationen mit deren Hilfe z.B. Beweglichkeiten von Molekülteilen, Konformationsänderungen von Makromolekülen oder Ligandenbindung untersucht werden können.
Während für diese Untersuchungen komplizierte gekoppelte Systeme von Differentialgleichungen benötigt werden, soll hier nur kurz das Prinzip anhand einer einfachen linearen Differentialgleichung (Dgl) gezeigt werden.

Differentialgleichungen und deren Lösung

Eine typische Dgl 1. Ordnung, wie z.B. die Wachstumsgleichung für Zellkulturen oder das Zerfallsgesetz für radioaktive Stoffe, lautet:

$$\frac{dn}{dt} = kn$$

In diesem Fall ist n(t) die Anzahl der Zellen bzw. der verbliebenen radioaktiven Atome nach der Zeit t, k ist die (positive) Wachstumsrate bzw. die (negative) Zerfallsrate.
Diese sehr einfache Dgl ist exakt lösbar. Die Anzahl vorhandener Zellen bzw. Atome nach der Zeit t ist:

$$n(t) = n(0)e^{kt}$$

Für kompliziertere Dgln lassen sich Lösungsfunktionen wie oben oft nicht, oder nur schwer finden. Man kann dann durch numerische Integration den Verlauf der Funktion näherungsweise berechnen.

Numerische Integration einer Dgl

Am Beispiel der folgenden Dgl soll das Lösungsprinzip erläutert werden:

$$\frac{dy}{dx} = f(y)$$

Es soll der Funktionsverlauf y(x) gefunden werden, der, ausgehend von den Startwerten x_0,y_0 die obige Dgl erfüllt.

für praktische Berechnungen muss die Steigung $\frac{dy}{dx}$ aus einem Differenzenquotienten

berechnet werden: $$\frac{\Delta y}{\Delta x} \approx \frac{dy}{dx} = f(y)$$

Vom Startpunkt x_0, y_0 aus kann jetzt der y-Wert an der Stelle $x+\Delta x$ berechnet werden nach

$$y(x+\Delta x) = y_1 \approx y_0 + f(y_0)\Delta x$$

Mit dem jetzt bekannten y-Wert an der Stelle $x_1 = x+\Delta x$ kann wiederum der nächste y-Wert berechnet werden, usw.

Führt man dieses Verfahren fort, so erhält man den genäherten Funktionsverlauf y(x) an einer Reihe von Stützstellen x_i. Diese Näherungslösung wird umso exakter, je kleiner die Schrittweite Δx gewählt wird, allerdings steigt damit auch der Rechenaufwand.

Das beschriebene Verfahren (Euler-Methode) ist anschaulich, aber in der Praxis werden kompliziertere und effizientere Verfahren verwendet.

II) Experimentelles

1. Das Drehpendel

Das Drehpendel (Abb 10) besteht aus einem flachen, um eine horizontale Achse (A) drehbaren Kupferring R. Eine Spiralfeder (SF) verbindet den Kupferring mit einem ebenfalls um die Achse drehbaren Hebel (H). Für die Betrachtung von freien Schwingungen steht dieser Hebel fest, für eine erzwungene Schwingung lässt sich durch dessen periodische Bewegung (über die Stange S) eine äußere Kraft mit sinusförmigem Verlauf auf den Kupferring ausüben. Für die Dämpfung des Systems wird eine Wirbelstrombremse verwendet Dazu läuft der Kupferring zwischen den Polschuhen P eines Elektromagneten EM. Die Stärke der Dämpfung kann durch den Spulenstrom des Elektromagneten eingestellt werden. Dabei ist die Dämpfung proportional zum Quadrat der Spulenspannung.
Die Amplitude der Schwingungen kann mit Hilfe des Zeigers Z an der Skala Sk abgelesen werden.

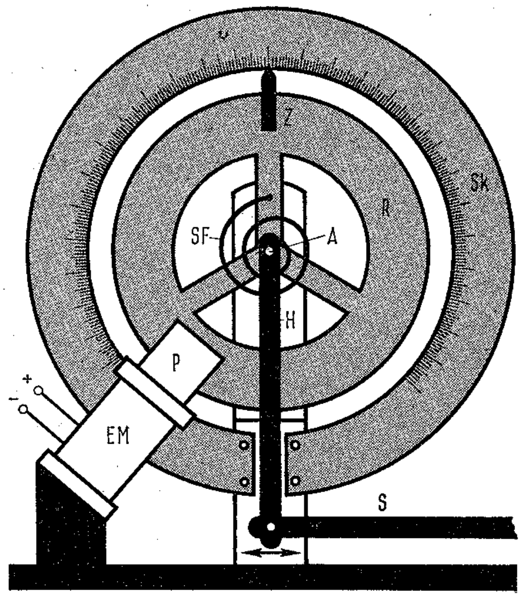


Abb.10: Drehpendel (Pohl'sches Rad) zur Untersuchung von Drehschwingungen
(Quelle: Walcher, W: Praktikum der Physik, Teubner, Stuttgart 1971, S.79)

Die Eigenfrequenz bzw. Periodendauer des Pendels hängt ab von der Drehfederkonstante D^* sowie dem Massenträgheitsmoment J des Rings: $T = 2\pi\sqrt{\frac{J}{D^*}}$

Die Periodendauer ist unabhängig von der Amplitude der Auslenkung.

III) Versuchsdurchführung und Auswertung

Machen Sie sich zunächst mit dem Drehpendel vertraut, indem Sie es bei verschiedenen Dämpfungsspannungen auslenken und beobachten. Notieren Sie Ihre Beobachtungen.

1. Frequenz und Dämpfung der freien Schwingung

1.1) Eigenfrequenz

Bestimmen Sie die Frequenz (**Eigenfrequenz**) der freien Schwingung des Drehpendels ohne zusätzliche Dämpfung. Messen Sie dazu mit Hilfe einer Stoppuhr die Schwingungsdauer über 10 Perioden und wiederholen Sie die Messung 5 Mal. Bestimmen Sie den **Größtfehler $\Delta\omega_0$**.

1.2) Dämpfung

Beobachten Sie die **Abnahme der Amplitude** der Schwingung bei verschiedenen Dämpfungsspannungen zwischen 0 und 5V. Führen Sie dann Messungen **bei 2 V und 4 V Dämpfungsspannung** durch, indem Sie die Amplitude bei geeignet vielen aufeinander folgenden Schwingungsperioden (ca. 10) notieren. Tragen Sie anschließend die Amplituden über der Zeit auf und bestimmen Sie jeweils die **Dämpfungskonstante β** mit Hilfe einer exponentiellen Regression in Excel (*Tipp: Rechtsklick auf einen Punkt im Diagramm → Trendlinie hinzufügen*) und berechnen Sie daraus das **Dämpfungsverhältnis K**.

2. Computersimulation

2.1) Erzwungene Schwingungen

Verwenden Sie eine vorbereitete Matlab-Applikation auf den Notebooks im Praktikum. Versuchen Sie zunächst durch Eingabe verschiedener Anregungsfrequenzen anhand der grafisch dargestellten '**Resonanzkurve**' die Resonanzfrequenz des simulierten Pendels zu finden (*Hinweis: Sie müssen als Dezimaltrennzeichen einen Punkt verwenden!*).
Beobachten Sie auch die '**Phasenkurve**': Bei welchen Frequenzen sind erzwungene Schwingung und Erregung etwa phasengleich, wann gegenphasig?
Wiederholen Sie die Simulation mit einer geringeren bzw. größeren Dämpfungskonstante und speichern Sie die Grafik der Amplituden- und Phasenkurven für Ihren Bericht (*Befehle "Print Amplitude" und "Print Phase"*).
Diskutieren Sie den **Einfluss der Dämpfungskonstante** auf die Resonanz- und die Phasenkurve. Bestimmen Sie aus der Resonanzfrequenz mit Hilfe der gegebenen Federkonstante die **Masse** des simulierten Federpendels.

2.2) Infrarotspektroskopie

Molekülschwingungen können durch elektromagnetische Wellen im infraroten Spektralbereich resonant angeregt werden. Untersuchen Sie in einer Computersimulation den Zusammenhang zwischen den **Molekülschwingungen und** dem **Infrarotspektrum** eines Acetophenon-Moleküls. Nutzen Sie hierfür die Webapplikation, die Sie unter folgendem Link aufrufen können: http://wwwchem.uwimona.edu.jm/spectra/jsmol/demos/acetophenone.html Finden Sie (durch Anklicken eines Peaks im IR-Spektrum und Beobachtung der damit verbundenen Schwingung im Molekül) die **Wellenzahlen für** folgende **Schwingungsmoden**:
- C-H-Streckschwingungen der Methylgruppe
- C-H-Streckschwingungen des aromatischen Rings
- C-O-Streckschwingung der Carbonylgruppe

Können Sie die unterschiedlichen Resonanzfrequenzen der einzelnen Schwingungsmoden mit dem einfachen Modell eines **Federpendel**s nachvollziehen? Welche **Analogie** lässt sich für die Modellgrößen (Federkonstante D und Masse m) herstellen?
Dokumentieren Sie ihre Arbeit mit der Simulation für Ihren Versuchsbericht durch einen kommentierten Screenshot.

3. Erzwungene Schwingungen

3.1) Resonanzfrequenz

Stellen Sie eine Dämpfungsspannung von 2 V ein und beobachten Sie wie das Pendel auf die äußere Motorfrequenz reagiert. **Suchen Sie die Resonanzfrequenz** des Drehpendels und notieren Sie den Wert des Motorpotentiometers. Bestimmen Sie den **Phasenwinkel für den Resonanzfall** und überprüfen Sie ob dieser mit Ihrer Erwartung übereinstimmt.

3.2) Resonanz- und Phasenkurve

Messen Sie bei einer Dämpfungsspannung von 2V die **Amplitude** und bestimmen Sie die **Phasendifferenz** der erzwungenen Schwingung bei **verschiedenen Erregerfrequenzen** ω_a durch Einstellung des Motorpotentiometers auf Werte im Bereich um die Resonanz (± 20 %).
Tragen Sie Ihre Messwerte **bereits während der Messreihe in eine Excel-Tabelle** ein und lassen Sie mittels **Tabellenkalkulation jeweils sofort** aus den gemessenen Zeiten die gesamte Periodendauer (Summe aus rechter und linker Halbperiode), Anregungsfrequenz und Phasenwinkel berechnen. Nutzen Sie hierfür die **Tabellenvorlage** aus dem Anhang. Lassen Sie die **Resonanz- und Phasenkurve** gleich über der Kreisfrequenz auftragen, sodass Sie die Dichte Ihrer Messpunkte (ähnlich wie bei der Simulation 2.1) entsprechend dem Kurvenverlauf verändern können.

3.3) Auswertung der Resonanzkurve

Für Chemiker, Biochemiker, Informatiker:

Schätzen Sie zunächst anhand des in 3.2) erstellten Diagramms der Resonanzkurve bzw. der zugehörigen Messtabelle die **Startwerte der Modellparameter F_0/m, β und ω_0** für die nichtlineare Regression, die mit dem **Programmpaket Origin** durchgeführt wird, grob ab.
Erstellen Sie eine geeignete **Modellfunktion für die Resonanzkurve** in Origin. Bestimmen Sie die **Dämpfungskonstante β, die Eigenfrequenz ω_0** und die Beschleunigung der Anregung F_0/m durch **nichtlineare Regression** (Optimierung der Modellparameter).
Berechnen Sie aus den erhaltenen Parametern der nichtlinearen Regression, inklusive Fehler, die **Resonanzfrequenz ω_{res}**.

Für Molekularmediziner:

Ermitteln Sie, wie oben unter Punkt 6 beschrieben, die **Eigenfrequenz ω_0** und die **Dämpfungskonstante β** aus den Diagrammen für Resonanz- und Phasenkurve.

Vergleichen Sie zum Schluss die aus der Resonanzkurve bestimmte **Dämpfungskonstante β** und Eigenfrequenz ω_0 mit den Ergebnissen für die **freie gedämpfte Schwingung** aus 1.2).

Anhang:

Beispielhafte Tabellenvorlage für Versuchsteil 3.2):

Bem: Die verschiedenen Drehpendel haben keine identischen Eigenschaften. Die gewählten Einstellungen des Motor-Reglers müssen ggf. so angepasst werden, dass der Resonanzfall etwa in der Mitte des Messbereichs vorliegt. Dort sollten die Messpunkte, wegen der größeren Steilheit der Resonanzkurve, dichter gewählt werden als am Rand des Messbereichs.

Motor (Skt)	$T_{links}/2$ (s)	$T_{rechts}/2$ (s)	T (s)	ω_a (1/s)	Amplitude (a.u.)	Phasenzeit (s)	φ (°)
350							
370							
380							
390							
400							
410							
415							
420							
425							
430							
435							
440							
445							
450							
455							
460							
465							
470							
480							
490							
500							
510							