

Institut für Theoretische Chemie:  
 Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Benedikt Weggler

## Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, H21

Die Übungsblätter können von <http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre> heruntergeladen werden.

### Übungsblatt 3, Übung am 09. 11. 2012

#### Aufgabe 1: Frage aus der Vorlesung

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

#### Aufgabe 2: Lineare gewöhnliche homogene Differentialgleichungen zweiter Ordnung: Gedämpfte Schwingung

Fullerene sind aus Kohlenstoff bestehende sphärische Moleküle hoher Symmetrie. Neben Diamant und Graphit sind sie zusammen mit den eng verwandten Kohlenstoff-Nanoröhren die dritte elementare Form, in der Kohlenstoff vorliegen kann. Für die Entdeckung der Fullerene (erste Veröffentlichung 1985) wurde 1996 der Nobelpreis für Chemie verliehen.

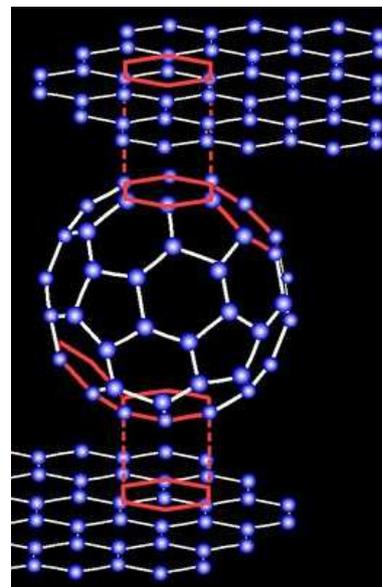
Das vermutlich wichtigste und stabilste Fulleren ist das  $C_{60}$ -Molekül. Es ähnelt einem "Fußball" in Nanogröße (Durchmesser  $\approx 0.7\text{nm} = 0.7 \times 10^{-9}\text{m}$ ), wobei die C Atome durch  $sp^2$ - und teilweise  $sp^3$ -hybridisierte Elektronen gebunden werden. Wir betrachten ein  $C_{60}$ -Molekül, das zwischen zwei Graphitschichten liegt und dadurch komprimiert wird. Wir modellieren nun das  $C_{60}$  als Feder mit einem Dämpfer:

$$\ddot{x}(t) + \alpha \dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

Hierbei sind die Schwingungskreisfrequenz  $\omega_0$  ( $\approx 5 \times 10^{13}$  [1/s]) des  $C_{60}$  und die von der Temperatur des Graphites abhängige Dämpfungskonstante  $\alpha$  positive von  $x$  und  $t$  unabhängige Konstanten. Zur Zeit  $t = 0$  werden die Graphitschichten entfernt, so dass das Fulleren frei schwingen kann, d.h.  $x(0) = x_0$  und  $\dot{x}(0) = 0$ . Bestimmen Sie  $x(t)$  für die folgenden Bedingungen:

$$(a) \alpha^2 < 4\omega_0^2 \quad (b) \alpha^2 = 4\omega_0^2 \quad (c) \alpha^2 > 4\omega_0^2$$

Bemerkung: Nomalerweise beschreibt man die molekulare Schwingung mittels Quantenmechanik. Jedoch beträgt die Quantenzahl in unsrem Fall ungefähr  $n \approx \frac{E}{\hbar\omega_0} = \frac{m\omega_0^2 x_0^2}{2\hbar\omega_0} \approx 3000$  für  $|x_0|=0.1\text{nm}$  ( $C_{60}$  ist außergewöhnlich elastisch) und immer noch 30 für nur  $|x_0|=0.01\text{nm}$ ! Wegen der großen Quantenzahl ist die Beschreibung im Rahmen der klassischen Mechanik eigentlich nicht so unrealistisch.



" $C_{60}$  Sandwich" N. Sasaki *et al.*

#### Aufgabe 3: Lineare gewöhnliche inhomogene Differentialgleichungen zweiter Ordnung

Bestimmen Sie die allgemeine Lösung  $y(x)$  folgender linearer Differentialgleichungen:

$$(a) \quad y'' - 2y' + 2y = e^{-3x}$$

$$(b) \quad y'' + 4y' + 4y = 9e^{-2x}$$

$$(c) \quad y'' + 4y' + 4y = 9xe^{-2x}$$

#### Aufgabe 4: Differentialgleichungen zweiter Ordnung

Bestimmen Sie die allgemeine Lösung  $y(x)$  folgender Differentialgleichungen:

$$a) \quad y'' - y' - 6y = 6x^2 + e^x \quad b) \quad y'' - 3y' + 2y = 10x \sin x$$