Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Andreas Steinau

Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Fr 10-12: N24/H16

Übungsblatt 2, Übung am 27. 10. 2017

Aufgabe 1: *Differentialgleichungen* **(2 Punkte)**

Lösen Sie die folgenden Differentialgleichungen:

(a) $(\sin y - y\cos x) + (x\cos y - \sin x)y' = 0$

(b) $y\cos(xy) + (x\cos(xy) + 2y)y' = 0$

Betrachten Sie dazu, ob es sich um ein totales Differential handelt.

Aufgabe 2: *Gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung*

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

$$y'' + 2y' = 4x$$

Aufgabe 3: *Lineare gewöhnliche homogene Differentialgleichungen zweiter Ordnung*

Lösen Sie folgende Differentialgleichungen zweiter Ordnung.
Hinweis: Verwenden Sie den $e^{\lambda x}$ Ansatz. Beachten Sie den Sonderfall der bei einer doppelten Nullstelle des charakteristischen Polynoms eintritt. λ kann auch die Wurzel einer negativen Zahl sein.

(a) $y'' + 3y' + 2y = 0$

(b) $y'' - 4y' + 3y = 0$

(c) $y'' + 6y' + 9y = 0$

(d) $y'' - 16y = 0$

(e) $y'' + 16y = 0$

Aufgabe 4: *Differentialgleichungen* **(2 Punkte)**

Lösen Sie folgende Differentialgleichungen jeweils ohne/mit Anfangsbedingung:

$$\begin{aligned} y'' + 3y' - 10y &= 0 \\ y'' + 25y &= 0 \quad ; \quad y\left(\frac{\pi}{5}\right) = 1 \quad ; \quad y\left(\frac{\pi}{10}\right) = 1 \end{aligned}$$

Aufgabe 5: *Gedämpfte Schwingung* **(4 Punkte)**

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 $\approx 0.7\text{nm} = 0.7\times10^{-9}\text{m}$), 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 ω_0 ($\approx 5 \times 10^{13}$ [1/s]) des C_{60} und die von der Temperatur des Graphites abhängige Dämpfungskonstante α 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) $\alpha^2 < 4\omega_0^2$ (b) $\alpha^2 = 4\omega_0^2$ (c) $\alpha^2 > 4\omega_0^2$

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