

Matematika 2 za kemičare

pismeni ispit, 23. studeni 2011.

Franka Miriam Brückler & Slaven Kožić

Rješenja prva četiri zadatka pišite i predajte odvojeno od rješenja petog zadatka.

1. Riješite sustav linearnih jednadžbi

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 + x_3 &= 2 \\x_2 + x_3 + x_4 &= -1 \\x_1 + x_3 + x_4 &= -2 \\x_1 + x_2 + x_4 &= 1.\end{aligned}$$

2. U ovisnosti o parametru λ ispitajte ekstreme funkcije $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$,

$$f(x, y, z) = \lambda x^2 + y^2 + 2xy + \frac{z^2}{2}.$$

3. Ispitajte konvergenciju sljedećih redova

$$\begin{aligned}\text{(a)} \quad & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\ln |n+1|}{n}, \\ \text{(b)} \quad & \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n^2 - n + 1}{2n^2 + 3n - 1} \right)^{3n+1}.\end{aligned}$$

4. Neka je sa C označena gornja polukugla jedinične kugle sa centrom u ishodištu, tj.

$$C = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 \leq 1 \text{ i } z \geq 0\}.$$

Izračunajte integral

$$\int \int \int_C \cos(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}} dx dy dz.$$

5. Molekulske orbitale su linearne kombinacije atomskih orbitala. Jedna od metoda određivanja koeficijenata u tim linearnim kombinacijama i pripadnih energija (za π -elektrone) je Hückelova metoda. Njome se moguće energije molekulskih orbitala određuju kao svojstvene vrijednosti matrice H , koja sadrži određene konstantne parametre¹ $\alpha < 0$ i $\beta \leq 0$. Koeficijenti molekulske orbitale kojoj pojedina energija odgovara su koordinate pripadnih svojstvenih vektora, pri čemu biramo svojstveni vektor norme 1 (dakle takav da mu je skalarni produkt samog sa sobom jednak 1).

Za molekulu 1,3-butadijena ($\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$) matrica H je

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Preko α i β izrazite moguće energije π -elektrona 1,3-butadijena te ih poredajte po veličini od najmanje do najveće. Za najmanju od tih energija nađite koeficijente pripadne molekulske orbitale.

¹Za slučaj da razmatramo veze među istovrsnim atomima.