

# Kémiai matematika

## 11. gyakorlat

Busai Ágota

agota.busai@gmail.com

www.math.bme.hu/~bgotti

2016.12.01.

### Az előző gyakorlatról megmaradt feladatok:

**15.** Határozd meg az alábbi elsőrendű inhomogén lineáris KDE-k megoldását az *állandók variálásának módszerével!*

(a)  $y'(t) = \frac{y(t)}{t} + t$

(b)  $\dot{x}(t) + 2x(t) = e^t, x(0) = 0$

**16.** Határozd meg az  $\dot{x}(t) + 2x(t) = 10 + \cos(5t), x(0) = 0$  kezdetiérték-probléma megoldását *próbafüggvény módszerrel!*

**17.** Oldjuk meg az alábbi kezdetiérték-problémákat!

(a)  $\dot{x}(t) = x(t) + y(t), \dot{y}(t) = 4y(t) - 2x(t), x(0) = 0, y(0) = -1$

**HF** (b)  $\dot{x}(t) = y(t) + 2e^t, \dot{y}(t) = x(t) + t^2, x(0) = 1, y(0) = 1$

**HF** (c)  $\dot{x}_1(t) = x_2(t), \dot{x}_2(t) = x_1(t), \dot{x}_3(t) = x_3(t) + x_4(t), \dot{x}_4(t) = 4x_4(t) - 2x_3(t)$   
 $x_1(0) = 1, x_2(0) = 1, x_3(0) = -2, x_4(0) = 4$

**HF** (d)  $\dot{x}(t) = x(t) + y(t) + 1, \dot{y}(t) = 4y(t) - 2x(t) - 2, x(0) = 0, y(0) = 0$

**HF\*** **18.** Határozd meg az alábbi másodrendű differenciálegyenletek általános megoldását!

(a)  $\ddot{x}(t) + 9x(t) = 0$

(b)  $\ddot{x}(t) - 8\dot{x}(t) + 7x(t) = 0$

(c)  $\ddot{x}(t) - 6\dot{x}(t) + 10x(t) = 0$

**HF ♥** **19.** Határozd meg az alábbi másodrendű inhomogén differenciálegyenlet általános megoldását!

$$\ddot{x}(t) - 5\dot{x}(t) + 6x(t) = te^t$$

**20.** Szeparálással oldjuk meg az  $f(x, y)$  függvényre vonatkozó alábbi parciális differenciálegyenletet!

**HF** (a)  $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial f}{\partial y} = 0$

(a)  $2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{y^2} \frac{\partial f}{\partial y}$  (**HF\*** ellenőrizni)

**HF\*** **21.** Oldjuk meg Laplace-transzformáció segítségével az alábbi kezdetiérték-problémákat!

(a)  $\dot{x}(t) = x(t), x(0) = 3$

(b)  $2\dot{x}(t) - x(t) = 0, x(0) = \frac{1}{2}$

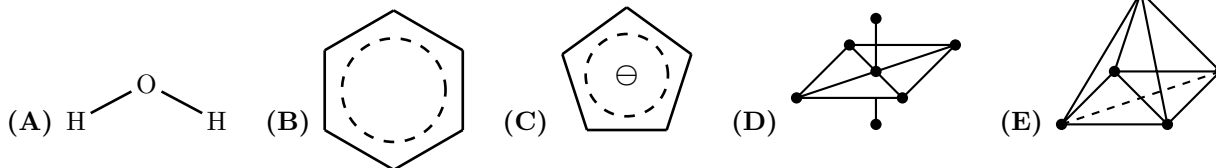
(c)  $\ddot{x}(t) = -x(t), x(0) = 0, \dot{x}(0) = -2$

(d)  $2\dot{x}(t) + x(t) = e^{2t}, x(0) = 1$

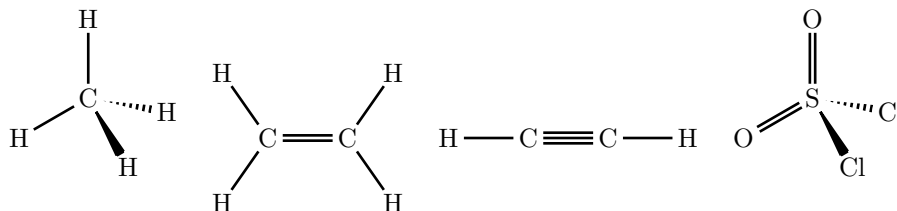
(e)  $\dot{x}(t) = x(t) + 3y(t), \dot{y}(t) = -x(t) + 5y(t), x(0) = 1, y(0) = 0$

$f(t)$	$F(s) = (\mathcal{L}f)(s)$	$f(t)$	$F(s) = (\mathcal{L}f)(s)$
1	$\frac{1}{s}$	$t^n$	$\frac{n!}{s^{n+1}}$
$e^{\alpha t}$	$\frac{1}{s - \alpha}$	$t^n e^{\alpha t}$	$\frac{n!}{(s - \alpha)^{n+1}}$
$\sin(\omega t)$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$	$e^{\alpha t} \sin(\omega t)$	$\frac{\omega}{(s - \alpha)^2 + \omega^2}$
$\cos(\omega t)$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$	$e^{\alpha t} \cos(\omega t)$	$\frac{s - \alpha}{(s - \alpha)^2 + \omega^2}$
$e^{\alpha t} f(t)$	$F(s - \alpha)$	$t^n f(t)$	$(-1)^n F^{(n)}(s)$
$f'(t)$	$sF(s) - f(0)$	$f^{(n)}(t)$	$s^n F(s) - \sum_{i=0}^{n-1} s^{n-1-i} f^{(i)}(0) =$ $= s^n F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} f'(0) - \dots - s f^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0)$

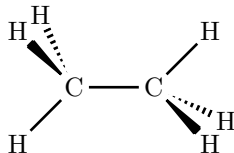
1. Csoportot alkot-e a  $G = \{1, -1, i, -i\}$  halmaz a szorzással?
2. Határozd meg a fenti  $G$  csoport részcsoportjait!
3. Határozd meg a fenti  $G$  csoport elemeinek rendjét!
4. Az alábbi molekulák közül melynek van inverziós pontja?



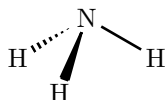
5. A  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{SO}_2\text{Cl}_2$  molekulák közül melyeknek van inverziós centruma?



6. Milyen szimmetriaelemei vannak az etánnak ( $\text{C}_2\text{H}_6$ )?



**HF** Milyen szimmetriaelemei vannak az ammóniának?



**HF** A  $\text{H}_2\text{O}$  molekula szimmetria-pontcsoportja  $\text{C}_{2v}$ .

	E	$\text{C}_2$	$\sigma$	$\sigma'$
E				
$\text{C}_2$				
$\sigma$				
$\sigma'$				

- (a) Egészítsd ki a csoport szorzótábláját!
- (b) Abel-csoport-e ez a csoport? A választ indokold!
- (c) Mennyi a csoport rendje?
- (d) Határozd meg a  $\text{C}_{2v}$  csoport részcsoportjait!
- (e) Határozd meg a csoport elemeinek rendjét!

7. (a) Szerkesszük meg a  $C_{3v}$  csoport szorzótábláját (tipp: ammónia)!
- (b) Határozd meg a  $C_{3v}$  csoport részcsoportjait!
- (c) Keressük meg  $C_{3v}$ -ben a konjugáltosztályokat!
- (d) Ábrázoljuk a  $C_{3v}$  csoportot!
- (e) Adjuk meg a fenti  $\Gamma$  ábrázolás karaktereit!
- (f) Redukálható-e a  $\Gamma$  ábrázolás? Ha igen, bontsuk fel  $\Gamma$ -t irreducibilis reprezentációk direkt összegére!

$C_{3v}$	$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$		
$A_1$	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$	
$E$	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

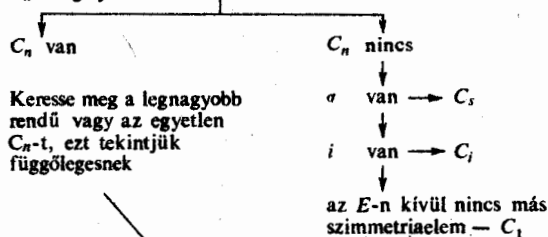
### A molekulák pontcsoportba sorolásának módszere

$C$  = forgástengely  $i$  = inverziós pont  
 $S$  = tükrözéses forgástengely  $\sigma$  = szimmetriásík

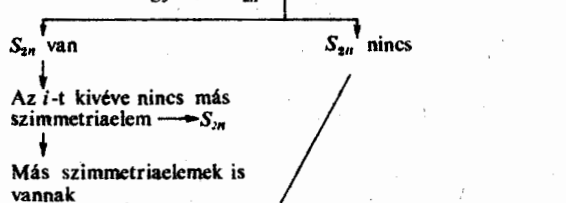
#### 1. Speciális csoportok keresése

- A molekula lineáris, nincs a molekula tengelyére merőleges  $\sigma - C_{\infty v}$
- A molekula lineáris, van a molekula tengelyére merőleges  $\sigma - D_{\infty h}$
- A molekula tetraéderez -  $T_d$
- A molekula oktaéderez -  $O_h$
- A molekula dodekaéderez vagy ikozaéderez -  $I_h$

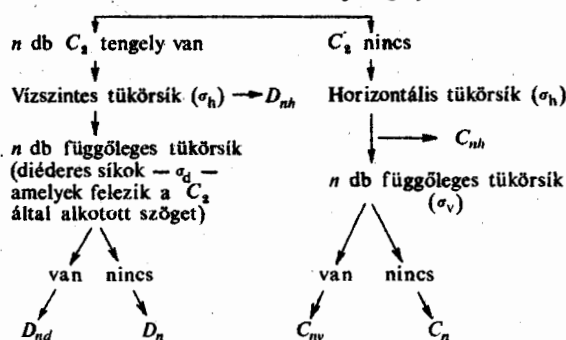
#### 2. $C_n$ tengely keresése



#### 3. Van-e a molekulában a $C_n$ -nel egybeeső $S_{2n}$ ?



#### 4. Vannak-e horizontális $C_2$ tengelyek?



Alan Vincent: Molekuláris szimmetria és csoportelmélet