Matematika 1 i 2 za kemičare

rješenja 5. zadataka od 28. kolovoza 2024.

- **Matematika 1** Baza $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ prostora $V^3(O)$ zadana je parametrima $a = 1\,\mathrm{cm}$, $b = 2\,\mathrm{cm}$, $c = 3\,\mathrm{cm}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Dana je jedna jednadžba $x+y+z = 1$ jedne ravnine Π u koordinatnom sustavu određenom s ishodištem O i bazom $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$.

  (a) Odredite koordinate jednog vektora $\vec{n}$ normale te ravnine u zadanom koordinatnom sustavu i izračunajte iznos tog vektora.

  (b) Odredite jednadžbu ravnine Π i koordinate vektora $\vec{n}$ u Kartezijevom koordinatnom sustavu određenom istim ishodištem O, te ortonormiranim vektorima $\vec{i} = \vec{a}$, $\vec{j}$ koji je istog smjera i obrnute orijentacije od $\vec{c}$, a $\vec{k} = \vec{i} \times \vec{j}$.

  Rješenje.

  (a) Koordinate vektora normale ravnine Π su $\vec{n} = [1, 1, 1]^*$, ali one se odnose na recipročnu bazu, dakle i recipročni koordinatni sustav. Budući da je zadani (direktni) sustav ortogonalan, znamo da je takav i recipročni te da su vektori recipročne baze istog smjera i orijentacije kao vektori direktne baze. Drugim riječima, $\vec{a}^* = x\,\vec{a}$, $\vec{b}^* = y\,\vec{b}$, $\vec{c}^* = z\,\vec{c}$, za neke pozitivne skalare x, y i z. Ako $\vec{a}^* = x\,\vec{a}$ skalarno pomnožimo s $\vec{a}$, dobit ćemo $1 = x\,a^2$, dakle je $x = 1\,\mathrm{cm}^{-2}$. Analogno se dobije $y = \frac{1}{4}\,\mathrm{cm}^{-2}$ i $z = \frac{1}{9}\,\mathrm{cm}^{-2}$. Stoga je

  $$\vec{n} = [1, 1, 1]^* = \vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^* = (\vec{a} + \frac{1}{4}\vec{b} + \frac{1}{9}\vec{c})\,\mathrm{cm}^{-2},$$

  odnosno koordinate od $\vec{n}$ u zadanom koordinatnom sustavu su

  $$\vec{n} = \left[1\,\mathrm{cm}^{-2}, \frac{1}{4}\,\mathrm{cm}^{-2}, \frac{1}{9}\,\mathrm{cm}^{-2}\right].$$

  Po definiciji je (uočimo da je zbog ortogonalnosti baze $V = a\,b\,c$)

  $$a^* = \frac{1}{V}|\vec{b} \times \vec{c}| = \frac{b\,c\,\sin\alpha}{V} = \frac{b\,c}{a\,b\,c} = \frac{1}{a} = 1\,\mathrm{cm}^{-1}.$$

  Analogno se zbog ortogonalnosti baze dobije $b^* = \frac{1}{b} = \frac{1}{2}\,\mathrm{cm}^{-1}$ i $c^* = \frac{1}{c} = \frac{1}{3}\,\mathrm{cm}^{-1}$. Stoga je:

  $$|\vec{n}| = \sqrt{\vec{n} \cdot \vec{n}} = \sqrt{(\vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*) \cdot (\vec{a}^* + \vec{b}^* + \vec{c}^*)} =$$

  $$= \sqrt{(a^*)^2 + (b^*)^2 + (c^*)^2} = \sqrt{1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9}}\,\mathrm{cm}^{-1} = \frac{7}{6}\,\mathrm{cm}^{-1}.$$

  (b) Sad gledamo Kartezijev koordinatni sustav određenom istim ishodištem, te ortonormiranim vektorima $\vec{i} = \vec{a}$, $\vec{j}$ koji je istog smjera i obrnute orijentacije od $\vec{c}$, a $\vec{k} = \vec{i} \times \vec{j}$. Dakle, $\vec{j} = -u\vec{c}$ za neki pozitivan broj u i mora biti $|\vec{j}| = |-u\vec{c}| = u\,c = 1\,\mathrm{cm}$, dakle $u = \frac{1}{3}$, odnosno $\vec{j} = -\frac{1}{3}\vec{c}$. Naposlijetku, $\vec{k} = \vec{i} \times \vec{j}$ mora biti, po definiciji vektorskog produkta i vektora $\vec{i}$ i $\vec{j}$, istog smjera i orijentacije kao $\vec{b}$. Dakle, $\vec{k} = v\vec{b}$ za neki pozitivan broj v i mora biti $|\vec{k}| = |v\vec{b}| = v\,b = 1\,\mathrm{cm}$, dakle $v = \frac{1}{2}$, odnosno $\vec{k} = \frac{1}{2}\vec{b}$.

Ravnina Π koordinatne osi zadanog sustava siječe u točkama $(1,0,0)$, na udaljenosti $1\,\mathrm{cm}$ od ishodišta, $(0,1,0)$, na udaljenosti $2\,\mathrm{cm}$ od ishodišta i $(0,0,1)$, na udaljenosti $3\,\mathrm{cm}$ od ishodišta. Stoga u sustavu određenom bazom $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ siječe koordinatne osi redom u točkama $(1,0,0)$, $(0,-3,0)$ i $(0,0,2)$, pa joj je jednadžba u tom koordinatnom sustavu

$$\frac{x}{1} + \frac{y}{-3} + \frac{z}{2} = 1.$$

Iz prethodnog vidimo da su sad koordinate od $\vec{n}$ jednake

$$\vec{n} = 1\,\mathrm{cm}^{-2}\vec{a} + \frac{1}{4}\,\mathrm{cm}^{-2}\vec{b} + \frac{1}{9}\vec{c} = 1\,\mathrm{cm}^{-2}\vec{i} + \frac{1}{4}\,\mathrm{cm}^{-2} \cdot 2\vec{k} + \frac{1}{9}\,\mathrm{cm}^{-2} \cdot (-3\vec{j}) =$$

$$= \left[1\,\mathrm{cm}^{-2}, -\frac{1}{3}\,\mathrm{cm}^{-2}, \frac{1}{2}\,\mathrm{cm}^{-2}\right].$$

- **Matematika 2** Mladi fizikalni kemičar™ u udžbeniku fizikalne kemije pronašao je definiciju jedne termodinamičke veličine:

$$\pi_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T.$$

U istom je udžbeniku pronašao i sljedeću jednadžbu:

$$\pi_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p.$$

Uz tu jednadžbu našao je bilješku da se njezin izvod nalazi u trećem poglavlju dotičnog udžbenika i da se u njemu koristi veličina definirana s $A = U - T\,S$, no neki zaljubljenik (ili -ica) u kemijsku termodinamiku istrgnuo je cijelo treće poglavlje iz primjerka udžbenika kojeg posjeduje naš mladi fizikalni kemičar™. S druge strane, s obzirom da je naš fizikalni kemičar mlad, nije tako davno položio matematiku te se odlučio sâm okušati u izvodu. Formula koje se sâm uspio sjetiti je kombinacija diferencijalnih oblika prvog i drugog zakona termodinamike s definicijom volumnog rada:

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V + T\,\mathrm{d}S.$$

Također, on zna da su sve veličine (varijable) u gornjim formulama (T, p, V, U, A, S, π_T) funkcije stanja. Kako je mladi fizikalni kemičar™ iz definicije π_T izveo jednadžbu $\pi_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p$?

Rješenje:

U je funkcija stanja, dakle je $\mathrm{d}U = -p\ \mathrm{d}V + T\ \mathrm{d}S$ egazktan pa po definiciji egzaktnog diferencijala dobijemo $p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S$, $T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V$.

Iz definicije A je $\mathrm{d}A = -p\ \mathrm{d}V - S\ \mathrm{d}T$. To je isto egzaktan diferencijal, pa iz Eulerovog uvjeta dobijemo $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T$.

Slijedi $\pi_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = \{$ promjena varijabli funkcije U s T i V na S i V, lančano pravilo $\} = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p$.