

Matematičke metode u kemiji 1
24. lipnja 2020.

1. Prikažite vektor $\vec{d} = (4, 8, 3)$ u bazi koja je ortonormirana i izvedena iz vektora $\vec{a} = (3, 1, 4)$ i $\vec{b} = (-1, 6, 2)$. Treći vektor ortonormirane baze odredite operacijom vektorskog produkta.

Za redoslijed vektora $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ prilikom izvoda ortonormirane baze

$$\vec{e}_a = 0,588 \hat{i} + 0,196 \hat{j} + 0,784 \hat{k}$$

$$\vec{e}_b = -0,376 \hat{i} + 0,925 \hat{j} + 0,051 \hat{k}$$

$$\vec{e}_c = -0,716 \hat{i} - 0,325 \hat{j} + 0,618 \hat{k}$$

$$\vec{d} = 6,276 \vec{e}_a + 6,048 \vec{e}_b - 3,611 \vec{e}_c$$

2. U matricu B izdvojite one stupce matrice A koji čine linearno nezavisan skup.

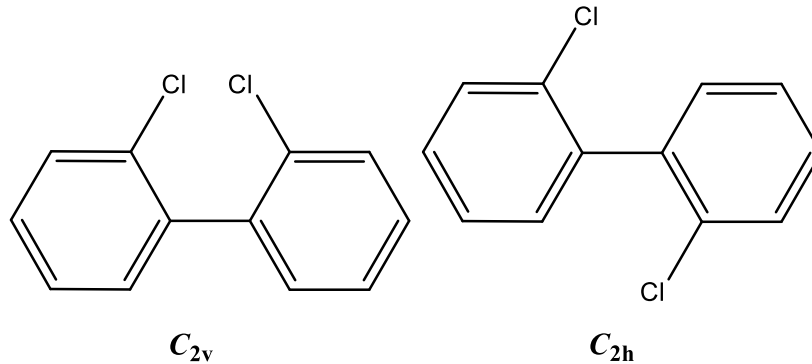
$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 4 \\ -1 & 3 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

Iz stupčanog nul-prostora matrice A

$$x_n = t \begin{bmatrix} 0,5 \\ -0,5 \\ -0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix} \text{ vidljivo je da se bilo koji stupac može izraziti kao linearna kombinacija}$$

preostalih stupaca. Stoga bilo koja tri stupca čine linearno nezavisan skup.

3. Nađite točkine grupe konformacija molekule disupstituiranog bifenila koje nastaju torzijskom rotacijom oko veze C–C koja povezuje dva benzenska prstena.



Ostale konformacije su C_2 simetrije.

4. Nađite kojoj točkinoj grupi odgovara presjek, a kojoj unija točkinih grupa C_{2h} i D_{2d} . Pritom imajte na umu da su elementi točkinih grupa operacije simetrije.

Odredbeni elementi C_{2h} : $C_2^{(z)}, \sigma_{xy}$

Odredbeni elementi D_{2d} : $C_2^{(x)}, C_2^{(z)}, C_2^{(z')}, \sigma_{xz,45^\circ}, \sigma_{xz,135^\circ}$

$$C_{2h} \cap D_{2d} = C_2$$

$$C_{2h} \cup D_{2d} = D_{2h}$$