II. Valós függvénytan

Alapvetően ebben a fejezetben is elemi matematikai ismeretekről lesz szó, de az ismeretek alapos, készségszintű begyakorlása (mely esetleg túlmegy az itt közölt feladatok megoldásán) elengedhetetlennek tűnik a továbbiakban tárgyalandó fogalmak és példák megértéséhez.

<u>*Fogalmak, definíciók*</u>

(a) $x \to$ recept/szabály $\to y = f(x)$; legegyszerűbben azt lehet mondani, hogy a **függvény**, melyet f reprezentál, egy számhoz egy másik számot rendel

(b) a függvények a következő módokon írhatók le, adhatók meg:
formula, $y = f(x)$
ábra, $f(x) - x$
rendezett pár, $\{(x, y) : y = f(x)\}$
$x \in \mathbb{R}$ valós számok leképezése az $f(x) \in \mathbb{R}$ csoportra
függvény mint előírás, pl. $y = |x|$ azt jelenti, hogy $x = \begin{cases} x, \text{ha} x > 0 \\ -x, \text{ha} x < 0 \end{cases}$

(c) **értelmezési tartomány**: x (független változó) lehetséges értékeinek halmaza
értékkészlet: y (függő változó) lehetséges értékeinek halmaza
egyértékű függvény: minden egyes x értékhez csak egyetlen y tartozik
többértékű függvény: több mint egy y érték tartozhat x-hez
páros függvény: $f(-x) = f(x)$
páratlan függvény: $f(-x) = -f(x)$ (nem minden függvény páros vagy páratlan, de minden függvény felírható, mint páros és páratlan függvények összege)

(d) **polinomok**: az n-ed rendű polinomok általános alakja $f(x) = a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n$, ahol $a_0, a_1, ..., a_n$ állandók (lehetnek nullák is, a legnagyobb nemnulla együttható határozza meg a polinom **fokát**), míg n pozitív egész (n = 0 esetén konstans függvényről, n = 1 esetén lineáris függvényről (a jól ismert alak $y = mx + b$), n = 2 esetén kvadratikus függvényről (pl. harmonikus oszcillátor energiája $E = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} kx^2$) beszélünk), míg a polinomok rövidített felírása $f(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$, valamint igaz, hogy az algebra alaptételének értelmében $f(x) = a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n = a_n (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$, azaz az n-ed rendű polinom mindig n lineáris tényező szorzatára bontható, ahol az $x_1, x_2 ..., x_n$ komplex számokat a polinom **gyökeinek** nevezzük.

(e) **algebrai** (**racionális** és **irracionális**) **függvények**: polinomegyenletek megoldásai, a racionális függvény általános alakja $y = f(x) = \dfrac{P(x)}{Q(x)} = \dfrac{a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n}{b_0 + b_1 x + ... + b_m x^m}$
transzcendens függvény: nem polinomegyenlet megoldásai (pl. exponenciális, logaritmus, trigonometrikus és hiperbolikus függvények ilyenek)

(f) **exponenciális** függvények, pl. $y(x) = b^x$, természetes módon lépnek fel növekedési és bomlási folyamatokban (továbbá, például a H-atom elektron alapállapotában az 1s atompálya alakja gömbi polárkoordinátákban felírva $\psi_{1s}(r) = e^{-r}$ alakú, míg a statisztikában a **normál eloszlás valószínűségi sűrűségfüggvénye** $p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right]$ alakú, ahol μ az eloszlás **átlaga**, míg σ az **eloszlás szórását** jellemzi)

(g) **logaritmus** függvények (például a vizes oldatok H^+-ion koncentrációját is ennek segítségével definiáljuk: pH = $-\log_{10}[H^+]$, azaz a semleges (7-es) pH esetén $[H^+]$ = 10^{-7} mol dm^{-3}):

két fontos alap: 10 (log) és e (ln), azaz $\log \equiv \log_{10}$ és $\ln \equiv \log_e$

tulajdonságok: $\log_b(xy) = \log_b x + \log_b y$; $\log_b(x^n = n\log_b x)$;

$\log_b(x/y) = \log_b x - \log_b y$

(h) **inverz** függvény, f^{-1}: x és y felcserélésével egymásba alakíthatóak, pl. inverz párt alkot az $y = e^x$ exponenciális és az $x = \ln y$ logaritmus függvény (ábráik szimmetrikusak az $x = y$ egyenesre); ha egy függvény két helyen is felveszi ugyanazt az $f(x)$ értéket, akkor nincs inverze, legfeljebb csak egy intervallumra megszorítva

(i) **trigonometrikus** és **inverz trigonometrikus** függvények

trigonometrikus azonosságok:

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y$$

$$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y$$

$$\mathrm{tg}(x \pm y) = \frac{\mathrm{tg}\, x \pm \mathrm{tg}\, y}{1 \mp \mathrm{tg}\, x\, \mathrm{tg}\, y}$$

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1$$

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x$$

$$\sin 2x = 2\sin x \cos x$$

$$\mathrm{cosec}\, x = \frac{1}{\sin x} \text{ és } \sec x = \frac{1}{\cos x}$$

az inverz trigonometrikus függvények (pl. $\arcsin x$) megkaphatók x és y felcserélésével, továbbá megjegyzendő, hogy míg pl. a sin függvény az egész R-en értelmezve van, addig inverze csak a [−1,+1] intervallumon

(j) **hiperbolikus** függvények

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \text{ és } \operatorname{cosech} x = \frac{1}{\sinh x}$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \text{ és } \operatorname{sech} x = \frac{1}{\cosh x}$$

$$\tanh x = \frac{1-e^{-2x}}{1+e^{-2x}} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \text{ és } \tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x}$$

$$\coth x = \frac{1-e^{-2x}}{1+e^{-2x}} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \text{ és } \coth x = \frac{\cosh x}{\sinh x}$$

a következő azonosságok igazak esetükben:

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$$

$$\sinh(x \pm y) = \sinh x \cosh y \pm \cosh x \sinh y$$

$$\cosh(x \pm y) = \cosh x \cosh y \pm \sinh x \sinh y$$

(k) speciális függvények

szorzatfüggvény, $x_1 \cdot x_2 \cdot \ldots \cdot x_n = \prod_{i=1}^{n} x_i$

Kronecker-delta: $\delta_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$

Γ-függvény: $\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} \mathrm{d}t$

<u>*Mintafeladatok*</u>

- Jellemezzük az $y = f(x) = x^2$ függvényt a $-2 \le x \le +2$ tartományon.
  Megoldás: Az f függvény egyértékű, f értelmezési tartománya [–2,+2] (zárt intervallum), *f* értékkészlete [0,+4] (zárt intervallum).
- Mi az $y(x) = x^2$ függvény inverz függvénye?
  Megoldás: $y = f(x) \Rightarrow x = \pm\sqrt{y}$. A két kifejezést külön kell tekinteni, az értelmezési tartományt is meg kell adni.
- Mutassuk meg, hogy $\arcsin x = \mathrm{tg}^{-1}\dfrac{x}{\sqrt{1-x^2}}$, ha $x < 1$.
  Megoldás: Egységnyi befogójú derékszögű háromszög esetén könnyen megmutatható, hogy $\sin\alpha = \dfrac{x}{1}$ és $\mathrm{tg}\alpha = \dfrac{x}{\sqrt{1-x^2}}$, azaz $\alpha = \sin^{-1} x = \mathrm{tg}^{-1}\dfrac{x}{\sqrt{1-x^2}}$.
- A gömb térfogata r sugár esetén $V = g(r) = \frac{4}{3}\pi r^3$. Fejezzük ki a sugarat a térfogat függvényében.
  Megoldás: $\underline{\underline{r = (3V/4\pi)^{1/3}}}$.
- Bizonyítsuk be, hogy minden $f(x)$ függvény felírható, mint páros és páratlan függvények összege.
  Megoldás: $\underline{\underline{f(x) = \dfrac{f(x)+f(-x)}{2} + \dfrac{f(x)-f(-x)}{2}}}$
- Számítsuk ki az $\mathbf{e}_i$ egységvektorok **bázisán** értelmezett **x** és **y** vektorokra vonatkozó $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle$ **skalárszorzatot** a **Dirac-féle bra-ket jelöléstechnika** segítségével, amennyiben ismerjük a vektorok komponenseit egy adott bázison.
  Megoldás: $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle = \sum_{ik} x_i^* y_k \langle \mathbf{e}_i|\mathbf{e}_k\rangle = \sum_{ik} x_i^* y_k \delta_{ik} = \sum_i x_i^* y_i$

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy $\sum_j \delta_{ij}\delta_{jk} = \delta_{ik}$.
- Adja meg a $g(x) = \left(x^2 - 9\right)^{1/2}$ függvény értelmezési tartományát és számítsa ki $g(4)$-t.
- Mi az $f(x) = \exp(-(|x| + 1)$ függvény értelmezési tartománya és értékkészlete?
- Mutassa meg, hogy (a) $\tanh^2 x + \mathrm{sech}^2 x = 1$, és (b) $\coth^2 x - \mathrm{cosech}^2 x = 1$.
- Egyszerűsítse a következő kifejezést: $\ln(1 - x^2) + \ln(1 + x)^{-1} - \ln(1 - x)$.
- Írja fel az $f(x) = x^3 - 6x^2 + 11x - 6$ polinomot szorzattényezői segítségével.
- Egyszerűsítse az alábbi algebrai kifejezéseket (racionális polinomokat): (a) $\dfrac{x}{3x^2 + 2x}$; (b) $\dfrac{x+2}{x+4}$; (c) $\dfrac{x^2 - 4}{x - 2}$; (d) $\dfrac{x^2 + 3x + 2}{x + 2}$; (e) $\dfrac{x^2 + 3x + 2}{x^2 + x + 2}$; (f) $\dfrac{2x^2 - 3x + 1}{x^2 - 3x + 2}$.
- Mutassa meg, hogy amennyiben elfogadjuk az $\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)$, valamint az $\exp(iA) = \cos A + i \sin A$ (Euler-formula) azonosságokat, úgy könnyen beláthatjuk a két szög összegének szinuszára, illetve koszinuszára vonatkozó trigonometriai azonosságokat.
- Mi az $x^n = \left(e^{\ln x}\right)^n = e^{n \ln x}$ függvény inverz függvénye?
- A reakciókinetika ún. **Arrhenius-egyenlete**, $k = Ae^{-E/RT}$, esetében mi a kapcsolat $\ln k$ és T^{-1} között?
- A nemideális gázok állapotegyenlete alacsony nyomáson az alábbi alakkal közelíthető: $pV_\mathrm{m} = RT\left(1 + \dfrac{B}{V_\mathrm{m}}\right)$, ahol p a nyomás, V_m a moláris térfogat, T a hőmérséklet, R a gázállandó és B a második viriál koefficiens. Fejezze ki B-t a többi változó explicit függvényeként.
- A **barometrikus formula**, $p = p_0 e^{-Mgh/RT}$, megadja az M moláris tömegű gáz nyomását h magasságban, amennyiben a tengerszinten a nyomás p_0. Fejezze ki h-t a többi változó függvényében.
- A **Langmuir adszorpciós izoterma**, $\theta = \dfrac{Kp}{1 + Kp}$, megadja a felület betöltöttségét az adszorbeált gáz által p nyomáson, ahol K egy állandó. Adja meg a $p(\theta)$ függvényt.

- A pozitív x irányba haladó harmonikus hullámot a $\phi_+(x,t) = A\sin 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)$ egyenlet (vagy az ekvivalens koszinusz egyenlet) írja le, ahol λ a hullámhossz (a legrövidebb távolság a hullámgörbe két ekvivalens pontja között), a hullám terjedési sebessége $v = \lambda\nu$, ahol ν a frekvencia (az időegység alatti oszcillációk száma), A az amplitúdó. A negatív irányba haladó hullám egyenlete $\phi_-(x,t) = A\sin 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} + \nu t\right)$. A hullámok interferenciája miatt az eredő hullám $\psi = a\phi_+ + b\phi_-$. Az **állóhullámok** speciális esetében $a = b = 1$. Jellemezze az így előálló hullámot.
- Adja meg azon pont (r,θ) síkbeli polárkoordinátáit, melynek Descartes koordinátái $(x,y) = (-1,2)$.
- Az atommagok közelítően gömb alakúak, sugarukra fennáll, hogy $R = r_0 A^{1/3}$, ahol A a tömegszám és $r_0 \cong 1,2\times 10^{-13}$ cm. Bizonyítsa be, hogy ez azt jelenti, hogy a magban a nukleonok sűrűsége állandó.
- Alacsony hőmérsékletű fémek **hőkapacitása** $C_\mathrm{V} = aT + bT^3$ alakban írható, ahol T a termodinamikai hőmérséklet, a és b anyagi állandók. (Megjegyzés: a T-ben köbös tag a fémek rácsrezgéseitől, a T-ben lineáris tag pedig a szabad elektronoktól származik.) (a) Mi a hőkapacitás határértéke nulla hőmérsékleten? (b) Adja meg a hőkapacitásnak T-ben első-, másod- és harmadrendű alakját!
- Egy p nyomású és T hőmérsékletű gáz **kémiai potenciálját** a $\mu = \mu^\mathrm{o} + RT\ln\frac{f}{p^\mathrm{o}}$ kifejezés adja meg, ahol $f = \gamma p$ a **fugacitás** és γ a fugacitási együttható. Fejezze ki p-t a többi változó fügvényeként.
- N azonos molekulából álló rendszer esetében a **Boltzmann-féle eloszlás**, $\frac{n_i}{N} = \exp(\varepsilon_i / kT)$, megadja az ε_i energiájú molekulák relatív gyakoriságát a T hőmérséklet függvényében. Mutassa meg, hogy a populációk n_i / n_j hányadosa adott hőmérsékleten a két állapot energiájának különbségétől függ.
- Az adott E_i energiájú állapotban lévő molekulák száma, n_i, arányos $\exp(-E_i / k_\mathrm{B}T)$-vel, ahol k_B a Boltzmann-állandó, valamint T a termodinamikai hőmérséklet. Másképpen, $n_i = A\exp(E_i / kT)$, ahol A konstans. N molekulából álló, két energiaállapottal (E_1 és E_2, $E_1 < E_2$) rendelkező rendszer esetére mutassa meg, hogy a felső állapotban lévő molekulák részaránya, $n_2/(n_1+n_2)$, az $\frac{\exp(\Delta / k_\mathrm{B}T)}{1+\exp(\Delta / k_\mathrm{B}T)}$ egyenlettel írható le, ahol $\Delta = E_2 - E_1$. Ábrázolja $\Delta / k_\mathrm{B} = 5\,\mathrm{K}$ esetre $n_2/(n_1+n_2)$ változását $k_\mathrm{B}T/\Delta$ függvényében a $T \in [0,100]$ K tartományon.

- Az **ekvipartíció tétele** alapján ideális gázt alkotó részecskék v átlagos sebessége és a T termodinamikai hőmérséklet között az alábbi összefüggés áll fenn: $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT$, ahol k a Boltzmann-állandó, m a részecskék tömege. Adja meg a $v(T)$ és a $T(v)$ függvényeket.
- Mi történik egy **harmonikus oszcillátor** rezgési periodusidejével, ha a rezgő test tömegével tartunk a nullához? Mi történik, ha a rugóállandóval tartunk a nullához?
- A száraz levegő n refrakciós indexe 15ºC-on és 760 torr nyomáson az ún. Candy-formula segítségével a következőképpen határozható meg:

$$10^7(n-1) = 2726,43 + 12,288\frac{10^8}{\lambda^2} + 0,3555\frac{10^{16}}{\lambda^4},$$

  ahol λ Å-ben került megadásra. Határozza meg a levegő refraktív indexét 4000, 6000 és 8000 Å-nél.
- Az NMR spektroszkópiában gyakori a feles spinű magok (pl. protonok) vizsgálata. A z irányú külső homogén mágneses tér alkalmazása esetén a mag két lehetséges energiával rendelkezhet, ennek megfelelően két állapotról (α és β) szokás beszélni, ez a térhez képest két beállást (lefelé, illetve felfelé) jelöl (a „spin-le” az alacsonyabb energiájú állapot). Ha a spin-le és spin-fel beállást N_1, illetve N_2 mag követi és az energiakülönbség $\Delta = E_2 - E_1$, úgy a Boltzmann-eloszlás értelmében $N_2 = N_1 \exp(-\Delta / k_B T)$. Amennyiben az összes mag száma $N = N_1 + N_2$, mutassa meg, hogy (a) $N_1 = N / \left(1 + \exp(-\Delta / k_B T)\right)$, (b) $N_2 = N \exp(-\Delta / k_B T) / \left(1 + \exp(-\Delta / k_B T)\right)$, és (c) a spin-le állapotú extra magok száma $N\left(\frac{1 - \exp(-\Delta / k_B T)}{1 + \exp(-\Delta / k_B T)}\right)$. Végezetül számolja ki az NMR mérések intenzitását meghatározó $\left(N_1 - N_2\right) / \left(N_1 + N_2\right)$ hányadost szobahőmérséklet (T = 300 K) és tetszőleges Δ esetére.

II.1 Határérték

Ebben az alfejezetben a határral és a határértékkel kapcsolatos fogalmakat elevenítjük fel.

Fogalmak, definíciók

(a) **sorozaton** lazán egy olyan listát értünk, ahol a tagok sorrendje rögzített, pontosabban pedig véges sorozaton a természetes számok egy véges részhalmazán, végtelen sorozaton pedig a természetes számok halmazán értelmezett függvényt értünk; sorozatok tagjainak leggyakoribb jelölései: $(a_1, a_2, ...)$ illetve $\{a_n\}$

(b) a valós A szám ($A \in \mathrm{R}$) pontosan akkor a **határértéke** a végtelen $\{x_n\}$ sorozatnak, ha minden $\varepsilon > 0$ esetén létezik olyan $N(\varepsilon)$ természetes szám ($N(\varepsilon) \in \mathrm{N}$), melyre minden $n > N(\varepsilon)$ esetén $|x_n - A| < \varepsilon$; a határérték jelölése: $\lim\limits_{n \to \infty} x_n = A$

(c) függvénynek egy $x = a$ pontban akkor létezik határértéke, ha a bal és jobboldali határértékek abban a pontban azonosak

(d) határérték tételek ($\lim\limits_{x \to a} f_1(x) = l_1$, $\lim\limits_{x \to a} f_2(x) = l_2$, valamint α, β és r valós számok):

$$\lim_{x \to a}[\alpha\, f_1(x) \pm \beta\, f_2(x)] = \alpha \lim_{x \to a} f_1(x) \pm \beta \lim_{x \to a} f_2(x) = l_1 \pm l_2$$

$$\lim_{x \to a}[f_1(x) \cdot f_2(x)] = \lim_{x \to a} f_1(x) \cdot \lim_{x \to a} f_2(x) = l_1 l_2$$

$$\lim_{x \to a} \frac{f_1(x)}{f_2(x)} = \frac{\lim\limits_{x \to a} f_1(x)}{\lim\limits_{x \to a} f_2(x)} = \frac{l_1}{l_2}, \text{ ha } l_2 \neq 0$$

$$\lim_{x \to a} x^r = a^r \ (a > 0)$$

(e) egy gyakran felhasznált határérték: $\lim\limits_{x \to 0} \frac{\sin x}{x} = 1$

(f) a nem jól meghatározott alakú (0/0, $0 \cdot \infty$, ∞ / ∞, illetve hasonló) határértékek számításánál jó szolgálatot tehet a l'Hopital szabály, amely kimondja, hogy amennyiben a jobb oldal létezik, úgy $\lim \frac{f(x)}{g(x)} = \lim \frac{f'(x)}{g'(x)}$.

Gyakorló feladatok

- Adja meg a következő kifejezések határértékét, amennyiben $n \to \infty$: (a) $\frac{n}{n+1}$, (b) $\frac{n}{n^2+1}$, és (c) $\frac{n^2}{n+1}$.
- Számítsa ki a következő határértékeket: (a) $\lim_{x\to 1}\frac{x^5-1}{x^4-1}$, (b) $\lim_{x\to\infty}\sin x$, (c) $\lim_{x\to\infty}\frac{x^2+8x-1}{x^3-1000x}$.
- A következő kifejezés vizsgálatával adja meg annak határértéket: $\lim_{x\to 0}\frac{1}{x}\left(\frac{1}{x+3}-\frac{1}{3}\right)$.
- Adja meg a $\lim_{x\to 2}\left(\frac{x^2-4}{x-2}\right)$ kifejezés értékét.
- Adja meg a következő határértéket: $\lim_{x\to 0}\frac{\sin 2x}{x}$.
- Határozza meg az alábbi sorozatok végtelenben vett határértékét, amennyiben az létezik:

1. $a_n = \frac{(n+1)(2n+1)(3n+1)}{(4n+1)(5n+1)(6n+1)}$ (megoldás: 1/20)
2. $a_n = \frac{n^2+2n}{n+3} - \frac{n^3+3n^2}{n^2-2}$ (megoldás: -4)
3. $a_n = \frac{2^{n-2}+2}{2^{n+2}-2}$ (megoldás: 1/16)
4. $a_n = \frac{n^3+4^n}{n^5-4^n}$ (megoldás: -1)
5. $a_n = \frac{(1+2n^2)^3}{(1+3n^3)^2}$ (megoldás: 8/9)
6. $a_n = \frac{4\cdot 2^{n-1}+3\cdot(-7)^n}{2\cdot 3^{n+1}+5\cdot 4^{2n-1}}$ (megoldás: 0)
7. $a_n = \frac{n^2+1}{2n+1} - \frac{3n^2+1}{6n+1}$ (megoldás: -1/6)
8. $a_n = \frac{n(n+1)}{n^2+1}$ (megoldás: 1)
9. $a_n = \frac{\frac{1}{n^2}+\frac{1}{n}}{\frac{2}{n^2}+\frac{3}{n}}$ (megoldás: 1/3)
10. $a_n = \frac{3n^2-2n^3+8}{2n^2-7}$ (megoldás: -∞)

- Határozza meg az alábbi határértékeket!

  1. $\lim_{x\to 2} \frac{1}{3x-4}$ (megoldás: 1/2)
  2. $\lim_{x\to\infty} \frac{3x-1}{x+2}$ (megoldás: 3)
  3. $\lim_{x\to-\infty} \frac{x^3+5}{4x^3-x^2+1}$ (megoldás: 1/4)
  4. $\lim_{x\to 3} \frac{x^2+2x}{3x-2}$ (megoldás: 15/7)
  5. $\lim_{x\to 16} \frac{x-16}{\sqrt{x}-4}$ (megoldás: 8)

- Határozza meg az alábbi határértékek bal es jobb oldali értékét!

  - $\lim_{x\to 2} \frac{2}{x-2}$ (megoldás: bal: $-\infty$, jobb: $+\infty$)
  - $\lim_{x\to 1} \frac{x^2+4x+3}{x^2-1}$ (megoldás: bal: $-\infty$, jobb: $+\infty$)
  - $\lim_{x\to 3} \frac{|x-3|}{x-3}$ (megoldás: bal: -1, jobb: 1)
  - $\lim_{x\to 0} \frac{\sqrt{x+4}-2}{x^2}$ (megoldás: bal: $-\infty$, jobb: $+\infty$)
  - $\lim_{x\to 0} \frac{1}{x^4-|x|}$ (megoldás: bal: $-\infty$, jobb: $-\infty$)

- A reális gázok leírására használatos a $\left(p+\frac{a}{V_\mathrm{m}^2}\right)(V_\mathrm{m}-b)=RT$ **van der Waals-egyenlet**, ahol p a nyomás, T a termodinamikai hőmérséklet és V_m a moláris térfogat. Mi a $Z=\frac{pV_\mathrm{m}}{RT}$ ún. **kompresszibilitási tényező** határértéke, amennyiben $p\to 0$?
- A klasszikus mechanikában a sebességek nagyságának összeadására megszoktuk, hogy $v=v_1+v_2$. A relativitáselmélet viszont azt mondja, hogy $v=\frac{v_1+v_2}{1+\frac{v_1v_2}{c^2}}$, ahol c a fény sebessége vákumban. Vizsgálja meg, hogy mi lesz az eredő sebesség abban az esetben, ha (a) $v_1=v_2=c$, (b) $v_1=c^{-2}$, (c) $\lim_{\varepsilon\to 0} v$, amennyiben $v_2=c-\varepsilon$, illetve (d) $v_1=c$ és $v_2=c-\varepsilon$. Hasonlítsa össze a relativisztikus formulával számolt és a klasszikus eredményeket.

- A **Planck-féle sugárzási törvény** alapján a feketetest által a térfogategységre és egységnyi hullámhosszra eső energia $\rho = \dfrac{8\pi hc}{\lambda^5}\dfrac{1}{\exp(hc/\lambda kT)-1}$. Mutassa meg, hogy elegendően nagy λ esetén $\rho \to \dfrac{8\pi kT}{\lambda^4}$.
- Az állandó térfogaton vett moláris hőkapacitás, C_v, az Einstein-féle modell szerint $C_v = 3R\left(\dfrac{h\nu}{k_B T}\right)^2\left(\dfrac{\exp(h\nu 2k_B T)}{\exp(h\nu k_B T)-1}\right)$, ahol a szimbólumok a szokásos jelentésükkel rendelkeznek. Mutassa meg, hogy nagyon nagy T értékekre $C_v \to 3R$.

II.2 Folytonosság

Fogalmak, definíciók

(a) a valós függvények folytonossága lokális, helyi tulajdonság, a függvény értelmezési tartományának egy pontjában kerül meghatározásra (**pontbeli folytonosság**), de lehet a folytonosságot egy adott intervallumon is definiálni

(b) egy $f(x)$ valós függvény folytonos az a pontban, amennyiben a következő három feltétel egyszerre teljesül: 1. $f(x)$ a-ban definiálva van, 2. a $\lim_{x\to a} f(x)$ határérték létezik, és 3. $\lim_{x\to a} f(x) = f(a)$; a három tételt összefoglalva azt írhatjuk, hogy $\lim_{x\to a} f(x) = f\left(\lim_{x\to a} x\right) = f(a)$

(c) ha a fenti három feltétel nem teljesül, a függvényt nem-folytonosnak nevezzük és **szakadással** rendelkezik

(d) ha a szakadási helyen a függvény határértéke $\pm\infty$, akkor **szingularitásról** beszélünk

(e) amennyiben a függvény az a pontban nem definiált, de határértéke igen (pl. ez áll fenn az $f(x) = (x^2 - 1)/(x - 1)$ függvény esetében), akkor a függvény eltávolítható szakadással rendelkezik

(f) amennyiben az $f(x)$ és $g(x)$ függvények folytonosak a-ban, úgy $f(x) + g(x)$, $f(x)g(x)$ és $f(x)/g(x)$ is azok, amennyiben $g(a) \neq 0$

(g) az f függvény folytonos egy adott intervallumban, amennyiben annak minden pontjában az

(h) a **Heaviside-féle lépcsőfüggvény**, $H(x) = \begin{cases} 0, \text{ ha } x < 0 \\ 1, \text{ ha } x > 0 \end{cases}$, egyike azon függvényeknek, melyek nem folytonosak a teljes $(-\infty, +\infty)$ intervallumon

Mintafeladatok

- Folytonos-e az $f(x) = |x| - x$ függvény a $-\infty \le x \le +\infty$ intervallumon?

  Megoldás: Felírhatjuk, hogy $f(x) = 2x$, ha $x \le 0$ és $f(x) = 0$, ha $x \ge 0$. Azaz $f(x)$ folytonos a teljes x tengelyre.

II.3 Függvény rendje (ordo)

Fogalmak, definíciók

Rend: polinomiális függvények esetén gyakran élünk azzal a közelítéssel, hogy a függvény változását egy adott fokszámon felül nem vesszük figyelembe, ezt a levágási szintet $o(n)$-nel vagy $o(x^n)$-nel szokás jelölni; $o(n)$ azt szimbolizálja, hogy ezen rend alatt a függvény alakját explicite adjuk meg, ettől a fokszámtól kezdve azonban nincs konkrét függvényalak, csak a levágás (közelítés) rendjét jelöljük. A matematikában a növekedési függvények esetén az „ordo szimbolika” lényegesen kiterjedtebb fogalomkészlettel rendelkezik és számos alesete létezik, ezeket azonban nem tárgyaljuk.

Mintafeladatok

- Adjuk meg a $P(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4$ negyedrendű polinom nullad, illetve másodrendű közelítéseit (azaz az elhanyagolások első-, illetve harmadrendben kezdődjenek).

  Megoldás: $\underline{\underline{P(x) = a + o(1)}}$

  $\underline{\underline{P(x) = a + bx + cx^2 + o(3)}}$.

- Közelítsük az $F(x) = (a + x)^3 + (b + cx + dx^2)^2$ polinomot másodrendig (azaz hanyagoljuk el a harmad- és annál magasabb rendű tagokat).

  Megoldás: $\underline{\underline{F(x) = a^3 + 3a^2x + 3ax^2 + b^2 + c^2x^2 + 2bcx + 2bdx^2 + o(3)}}$.

Gyakorló feladatok

- Adja meg a $P(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4$ polinomfüggvény nullad- és másodrendű közelítéseit.
- Közelítse $o(3)$-ig a $Q(x) = (a + x)^3 + (b + cx + dx^2)^2$ polinomot.
- A Planck-függvény, $\rho = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}$, egyik határesete akkor áll elő, amikor $h\nu \ll kT$. Adja meg ekkor a sugárzási sűrűségre vonatkozó törvényt, mely a Rayleigh–Jeans nevet viseli.
- A Planck-függvény, $\rho = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}$, egy másik határesete akkor áll elő, amikor $h\nu \gg kT$. Adja meg az ekkor előálló sugárzási törvényt, mely a Wien-formula nevet viseli.
- A PH_3 wolframon történő bomlásának sebességét a $v = \frac{kKp}{1 + Kp}$ egyenlet írja le, ahol p a PH_3 nyomása, k a sebességi együttható, míg K az **adszorpció** és **deszorpció** sebességi együtthatóinak aránya (hányadosa) és K dimenziója nyomás^{-1}. Határozza meg a bomlás rendjét amikor p olyan, hogy (a) $Kp \ll 1$, illetve (b) $Kp \gg 1$.

- Bodenstein állapította meg, hogy gázfázisban a $Br_2 + H_2 \rightarrow 2\ HBr$ reakciót jellemző reakciósebesség $\frac{k\left[H_2\right]\left[Br_2\right]^{1/2}}{1+k'\left[HBr\right]/\left[Br_2\right]}$ alakú. Határozza meg, hogy a kezdeti reakciósebesség hogyan függ a $\left[Br_2\right]$ koncentrációtól a reakció megindulásakor, amennyiben (a) $k'\left[HBr\right]/\left[Br_2\right] \ll 1$, illetve (b) elegendő HBr-t adunk a reakcióelegyhez ahhoz, hogy $k'\left[HBr\right]/\left[Br_2\right] \gg 1$ fennálljon.

<u>*Javasolt irodalom*</u>

CRC Standard Mathematical Tables and Formulas