

KTH Matematik
Olle Stormark

SF2718 Matematik för kemister, 6 hp, för CL, ht 2008.

I år kommer denna kurs att handla om

KEMISKA TILLÄMPNINGAR AV REPRESENTATIONSTEORI FÖR GRUPPER

Huvudpunkterna är följande:

- Symmetrigrupper för molekyler.
- Representationsteori för grupper.
- Tillämpningar på molekylvibrationer.
- Tillämpningar på energinivåer, erhållna som egenvärden till Schrödingerooperatoren.

Förkunskaper. Framför allt krävs det förtrogenhet med den *lineära algebran*. Den *gruppteori* som vi behöver kommer att gås igenom från början, men det skadar inte om man minns det som ingår i kursen i diskret matematik. Vidare bör man känna till Newtons kraftekvation från den klassiska mekaniken. *Schrödingerekvationen* spelar en helt fundamental roll inom kemin, och kan inte undvikas här heller. Därför är det bra om man från differentialekvationskursen åtminstone kommer ihåg hur man löser partiella differentialekvationer med hjälp av variabelseparation.

Undervisningen omfattar 8 stycken 2-timmarslektioner. Tanken är att svårighetsgraden ska anpassas till studenternas nivå – så det är viktigt att säga ifrån om någonting är för svårt (eller för banalt).

Kurslitteratur Det finns åtskilliga böcker som förklarar hur man använder gruppteori inom fysiken och kemin, men tyvärr är de flesta rätt svåra. Här kommer vi att dela ut valda delar av

Roy McWeeny, SYMMETRY An Introduction to Group Theory
and its Applications, Dover, 2002,

som förhoppningsvis ska uppfattas som begriplig – åtminstone med lektionernas hjälp.

Examinationen består av ett antal (rätt så omfattande) *hemuppgifter*, som delas ut under kursens gång. Samarbete uppmuntras givetvis, men för att få godkänt betyg krävs en avslutande *mundlig kontroll* av att man verkligen förstått de lösningar man lämnat in.

Kursledare Olle Stormark, som har e-postadressen olles@math.kth.se; den vanliga adressen är rum 3653 i Klocktornet, Lindstedtsvägen 25, KTH, och telefonnumret är 790 7206.

Kurssekreterare Rose-Marie Jansson, jansson@math.kth.se. Rose-Marie ansvarar för registrering och betygsrapportering.

Vidareläsning En allmän uppfattning bland kemister är att "the oldest, the best and the most expensive book" inom det här området är

F.A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 3rd edn.,
Interscience, 1990

– som dock är rätt svår att få tag på.

För den som är mera intresserad av fysikaliska tillämpningar är

S. Sternberg, Group Theory and Physics, Cambridge University
Press, 1994

en oerhört spännande bok, som inte kräver några speciella förkunskaper förutom en god portion matematisk mognad.