

KTH Matematik
Olle Stormark

SF2718 Matematik för kemister, 6 hp, för CL, ht 2010.

I år kommer denna kurs att handla om

MOLEKYLSYMMETRIER OCH GRUPPTEORI

I läroboken *Shriver & Atkins': Inorganic Chemistry* finns ett kapitel om *Molecular Symmetry*, där man bland annat kan läsa följande:

That some molecules are 'more symmetrical' than others is intuitively obvious. Our aim though, is to define the symmetries of individual molecules precisely, not just intuitively, and to provide a scheme for specifying and reporting these symmetries. It will become clear in later chapters that symmetry analysis is one of the most persuasive techniques in inorganic chemistry.

Syftet med föreliggande kurs är att *förklara den matematiska bakgrunden* till denna teori. Huvudpunkterna är följande:

- Symmetrigrupper för molekyler och lite allmän gruppteori.
- Representationsteori för grupper; målet är att förstå de karaktärtabeller som delas ut vid första lektionen.
- Egenfunktionerna hörande till samma energinivå bildar en bas för en irreducibel representation – så genom att bestämma de irreducibla representationerna får man reda på hur många energinivåer det finns, och hur degenererade de är.
- Molekylära vibrationer.

Förkunskaper. Framför allt krävs det en mycket god förtrogenhet med den *lineära algebran*. Den *gruppsteori* 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. Av den anledningen är det bra om man från differentialekvationskursen kommer ihåg hur man löser partiella differentialekvationer med hjälp av variabelseparation.

Undervisningen omfattar 14 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. *Föreläsningssanteckningar* kommer att delas ut under kursens gång. För den som vill läsa mera rekommenderas

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

J.S. Ogden *Introduction to Molecular Symmetry*, Oxford 2001.

P. Atkins, R. Friedman *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford 2005.

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 *munlig kontroll* av att man verkligen förstått de lösningar man lämnat in.

Betyg: Godkänt eller underkänt.

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.