

Kemiske knuder

Oplæg i matematik og kemi

Jan Egballe

20. marts 2007

Dette oplæg handler om brugen af knudeteori i kemien. Vægten vil blive lagt på matematikken da denne er mere udviklet (selvom der dog stadig er tale om en meget ung matematisk disciplin.) Jeg har således forestillet mig at der vil være tale om matematik på A-niveau og kemi på B-niveau.

Matematik

Det forudsættes at eleverne kender de basale elementer i knudeteorien. Hermed forstås først og fremmest at de kender definitionen på en knude, og det er nok lettest at betragte den som en lukket kæde af liniestykker i det 3-dimensionelle rum. Knudediagrammer er det næste, og herefter følger Reidemeisters sætning. Beviset for denne kan med fordel gøres til en del af opgaven, da det er relativt enkelt. Desuden kan simple invarianter nævnes: trefarvning, vridetal (egentlig en pseudo-invariant og krydsningstal).

Mål: Eleverne skal opnå et middelniveau i teorien (det højeste niveau er nok for svært). Hermed menes at:

De skal kende til de to regnemetoder *splejsning* og *disjunkt forening*.

De kender til *pindetallet* for en knude (*stick-number*)

De kender til definitionen af Jones-polynomiet

De kan udregne Jones-polynomiet for givne *simple* knuder

De kan finde ikke-isotope knuder med samme Jones-polynomium

De kender til de *grundlæggende* idéer i Vasiliev-invarianter

Matematikken i disse punkter kræver at man holder tungen lige i munden. Det er en glimrende øvelse i brugen af et CAS-værktøj at automatisere udregningerne af Jones-polynomier (der er tale om en rekursiv udregning ved brug af en såkaldt *garnnøglerelation*).

(Et alternativ kan være at bruge fletninger i stedet for knuder, da disse dækker over mange af de samme begreber. Fordelen ved fletninger er blot at de besidder en gruppestruktur: den fri gruppe med $n-1$ frembringere, hvor n er antallet af snore i fletningen).

Kemi

Eleverne skal kende til de grundlæggende principper i organisk kemi og kende til den strukturelle opbygning af DNA.

Mål: Eleverne skal bruge knudeteorien som modelleringsværktøj. Et eksempel kan være at give eksempler på cykliske molekyler og beskrive hvor mange forskellige måder de kan forgrenes på (her kommer pindetallet ind i billedet) og hvilket kemisk betydning knuden har.

En anden mulighed er at sammenligne DNA-molekylets mutationer med splejsning af knuder.

Litteratur

Internetlinks er høstet 20 marts 2007.

1) Kenneth Hansen, *Knudeteori*, Systime 1998.

En fantastisk og uomgængelig lille bog. Er på dansk og skrevet med henblik på netop gymnasiet. Et glimrende sted at starte for eleven.

2) Alexei Sossinsky, *Knots – mathematics with a twist*, Harvard UP 2002.

En anden lille hyggelig bog. Letlæselig og meget pædagogisk. Kommer vidt omkring uden at fordybe sig i den tunge del af matematikken. Nævner fletninger og Vasiliev-invarianter.

3) <http://pass.maths.org.uk/issue15/features/knots/index.html>

En side om brugen af knuder i kemi. Let og underholdende læsning. Nævner pindetallet og torusknuder.

4) <http://www.ams.org/featurecolumn/archive/knots-dna.html>

En side om Jones-polynomiet og dets brug. Mange illustrative figurer og referencer til bøger om generel knudeteori og om brugen i kemi og biologi.

5) http://mw01.oglethorpe.edu/faculty/~j_nardo/knots/today.htm

En side om knuder i DNA-molekylet.