

Inhalt

1.	Anwendungsaspekte der Theorie	8
2.	Symmetriebetrachtungen	9
2.1.	Zielstellung	9
2.2.	Grundannahmen	9
2.2.1.	Zu Molekülen und Kristallen	9
2.2.2.	Zu Operationen an Molekülen und Kristallen	10
2.3.	Erarbeitung der Symmetriebegriffe (S) an Beispielen; Schönfließsymbolik; Symmetriemengen; Produkttafeln	10
2.3.1.	Symmetriestudien am Massenpunktsystem „Allen“	10
2.3.1.1.	Die Drehsymmetrien C_n	10
2.3.1.2.	Die Drehspiegelsymmetrien S_n	11
2.3.1.3.	Die Spiegelsymmetrien $\sigma_h, \sigma_d, \sigma_v$	12
2.3.1.4.	Die Identität E als Symmetrieoperation	13
2.3.1.5.	Die Gleichheit von Symmetrieoperationen	13
2.3.1.6.	Die Symmetriemenge D_{2d} des Allen-Moleküls	14
2.3.1.7.	Die Hintereinanderausführung „ \cdot “ von Symmetrieoperationen aus D_{2d}	14
2.3.1.8.	Die Produkttafel zu D_{2d}	14
2.3.1.9.	Die inversen Symmetrieoperationen in D_{2d}	15
2.3.2.	Die Symmetriemenge und Produkttafel des Wasserstoffperoxid-Moleküls (H_2O_2)	15
2.3.2.1.	Drehsymmetrie	16
2.3.2.2.	Spiegelsymmetrie	16
2.3.2.3.	Identität	16
2.3.2.4.	Die Drehspiegelung S_2 – Inversion	16
2.3.2.5.	Die Symmetriemenge C_{2h} des H_2O_2 -Moleküls	16
2.3.2.6.	Die Produkttafel zu C_{2h}	16
2.3.2.7.	Die inversen Elemente in C_{2h}	17
2.3.2.8.	Das Symmetriezentrum, Fixpunkte	17
2.3.3.	Die Translationssymmetrien des ebenen Natriumchloridgitters (NaCl)	17
2.3.4.	Symmetrieoperation mit und ohne Fixpunkt	18
3.	Elemente der Gruppentheorie	20
3.1.	Gruppenbegriff	20
3.1.1.	Beispiele von Symmetriegruppen	20
3.1.1.1.	Die Symmetriegruppe des Allen- bzw. des H_2O_2 -Moleküls	20
3.1.1.2.	Die Gruppe der Translationssymmetrien des ebenen NaCl-Gitters	20
3.1.2.	Abstraktion	20
3.1.3.	Gruppenaxiome	21
3.1.4.	Endliche Gruppe, Ordnung einer Gruppe	21
3.2.	Weitere Beispiele von Gruppen	21
3.2.1.	Gruppenstruktur verschiedener Zahlbereiche	22
3.2.2.	Moduln aus n -Tupeln reeller Zahlen und aus Vektoren	22
3.2.3.	Matrizengruppen	23
3.2.3.1.	Die allgemeine lineare Gruppe $GL(n, \mathbf{K})$	23
3.2.3.2.	Die orthogonale Gruppe $O(n)$	23
3.2.3.3.	Die eigentlich orthogonale Gruppe $O^+(n)$	23
3.2.3.4.	Die unitäre Gruppe $U(n)$	23
3.2.3.5.	Die eigentlich unitäre Gruppe $SU(n)$	23
3.2.3.6.	Die reelle und die komplexe spezielle lineare Gruppe $SL(n)$ und $SL(n, \mathbf{K})$	24

3.2.3.7.	Die Enthaltenseinsbeziehungen zwischen Matrizengruppen	24
3.2.4.	Permutationsgruppen	24
3.3.	Die Verknüpfung der Gruppenelemente	27
3.3.1.	Rechnen in multiplikativ geschriebenen Gruppen G	27
3.3.2.	Rechnen in additiv geschriebenen Gruppen G	28
3.3.3.	Gruppentafeln	28
3.3.4.	Isomorphie – abstrakte Gruppe – Homomorphie	29
3.4.	Untergruppen	31
3.4.1.	Komplexe, Komplexprodukt	31
3.4.2.	Begriff der Untergruppe, Beispiele	32
3.4.3.	Untergruppenkriterium	33
3.4.4.	Satz von Lagrange, Nebenklassenzerlegung	33
3.5.	Zyklische Gruppen und Systeme erzeugender Elemente	34
3.5.1.	Zyklische Gruppen	34
3.5.2.	Bemerkung zu additiv geschriebenen zyklischen Gruppen	36
3.5.3.	Systeme von Erzeugenden	36
3.6.	Klassen, Normalteiler, Faktorgruppen	36
3.6.1.	Zerlegung einer Gruppe in Klassen konjugierter Elemente	36
3.6.2.	Konjugierte Untergruppen	39
3.6.3.	Normalteiler	39
3.6.4.	Faktorgruppen	40
3.7.	Direktes Produkt	41
4.	Bewegungsgruppe	43
4.1.	Die Bewegungsgruppe des dreidimensionalen euklidischen Raumes E^3	43
4.1.1.	Die Seitzschen Raumgruppensymbole	43
4.1.2.	Die Bewegungsgruppe \mathfrak{B}_3 des Raumes	43
4.1.3.	Normalformen der Bewegungsgruppe \mathfrak{B}_3	44
4.2.	Untergruppen der Bewegungsgruppe \mathfrak{B}_3 des E^3	45
4.2.1.	Die Gruppe \mathfrak{B}_3^+ der eigentlichen Bewegungen	45
4.2.2.	Die Gruppe \mathfrak{D}_3^+ der eigentlichen Drehungen (eigentliche Drehgruppe)	45
4.2.2.1.	Parameterdarstellung der eigentlichen Drehgruppe mit Hilfe der Eulerschen Winkel	46
4.2.2.2.	Klassen konjugierter Drehungen in \mathfrak{D}_3^+	47
4.2.3.	Die Gruppe \mathfrak{D}_3 der Drehungen (vollständige Drehgruppe)	47
4.2.3.1.	Parameterdarstellung der Spiegelungen von \mathfrak{D}_3	47
4.2.3.2.	Die Inversion $i \in \mathfrak{D}_3$ bezüglich des Inversionszentrums $i = O \in E^3$	48
4.2.3.3.	Klassen konjugierter Drehungen von \mathfrak{D}_3	49
4.2.4.	Die Translationsgruppe \mathfrak{T}_3 des E^3 und Untergruppen	49
5.	Punktgruppen, Symmetriegruppen von Molekülen	52
5.1.	Begriff der Punktgruppe	52
5.2.	Achsen einer Gruppe	52
5.3.	Klassifikation der Punktsymmetriegruppen erster Art	53
5.3.1.	Die Gruppen C_n	53
5.3.2.	Die Gruppen D_n (Diedergruppen)	54
5.3.3.	Die Gruppen T (Tetraedergruppen)	55
5.3.4.	Die Gruppen O (Oktaedergruppen)	56
5.3.5.	Die Gruppen Y (Ikosaedergruppen)	56
5.3.6.	Die unendlichen Punktgruppen C_∞ und D_∞	56
5.3.7.	Klassifikationstabelle für Punktsymmetriegruppen erster Art	56
5.4.	Klassifikation der Punktsymmetriegruppen zweiter Art	57
5.4.1.	Die Gruppen S_n für $n = 2m$ und $n = 2m - 1$	57
5.4.2.	Die Gruppen C_{nh} und C_s	58
5.4.3.	Die Gruppen C_{nv}	59
5.4.4.	Die Gruppen D_{nh}	59

5.4.5.	Die Gruppen D_{nd}	60
5.4.6.	Die Gruppen T_h	60
5.4.7.	Die Gruppen T_d (volle Tetraedergruppe)	61
5.4.8.	Die Gruppen O_h (volle Oktaedergruppe)	61
5.4.9.	Die Gruppen Y_h (volle Ikosaedergruppe)	61
5.4.10.	Die Gruppen $C_{\infty h}$, $C_{\infty v}$, $D_{\infty v}$	61
5.4.11.	Klassifikationstafel für Punktsymmetriegruppen zweiter Art	62
5.5.	Flußschema für Punktsymmetriegruppen	62
6.	Die kristallographischen Gruppen	64
6.1.	Grundbegriffe der Kristallographie	64
6.1.1.	Der Begriff des Raumgitters	64
6.1.2.	Netzebenen im Raumgitter, Millersche Indizes	66
6.1.3.	Die Elementarzelle und die Symmetrie des Kristalls	67
6.1.4.	Raumgitter und Punktgruppen	68
6.1.5.	Die stereographische Projektion	69
6.2.	Die Symmetriegruppen der Kristalle	71
6.2.1.	Die Raumgruppen	71
6.2.2.	Die Bravais-Gitter	72
6.2.3.	Die 32 Punktgruppen als Kristallklassen	73
6.2.4.	Die 7 Kristallsysteme und die Bravais-Gitter	76
6.2.5.	Die kristallographischen Raumgruppen	78
6.2.6.	Die Raumgruppe des Diamantkristalls	79
6.2.7.	Internationale Symbolik der Raumgruppen der Kristallographie	80
6.2.8.	Reine Formen von Kristallen	81
7.	Darstellungen	85
7.1.	Begriff, Beispiele	85
7.1.1.	Eine Darstellung der Drehsymmetriegruppe D_2 des Allen-Moleküls	85
7.1.2.	Begriff der Darstellung	85
7.1.3.	Eine Darstellung der Symmetriegruppe D_{2d} des Allen-Moleküls	86
7.2.	Reguläre Darstellung	86
7.3.	Äquivalente Darstellungen	87
7.4.	Irreduzible Darstellungen	87
7.5.	Charaktere	89
7.5.1.	Charakter einer Darstellung, Eigenschaften	89
7.5.2.	Die Charaktertafel der Symmetriegruppe D_{2d} des Allen-Moleküls	90
7.6.	Zur Darstellung direkter Produkte	91
7.7.	Die Basis einer Darstellung	92
8.	Anwendung der Gruppentheorie in der Quantenmechanik	94
8.1.	Einführung quantenmechanischer Begriffe	94
8.2.	Anwendungsbeispiele aus der Quantenmechanik	95
8.2.1.	Aufhebung der Entartung	95
8.2.2.	Aufspaltung der Elektronenterme im Kristallfeld	97
8.2.3.	Auswahlregeln für Matrixelemente	98
8.2.4.	Klassifizierung der Molekülschwingungen	102
	Lösungen der Aufgaben	106
	Literatur	110
	Symbolverzeichnis	111
	Namen- und Sachregister	113