

# 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 $C_\infty$ und $D_\infty$	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