

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
<b>I</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Elemente der Gruppentheorie</b>	<b>7</b>
2.1	Gruppenpostulate . . . . .	7
2.2	Gruppentafel . . . . .	8
2.3	Ordnung der Gruppe . . . . .	9
2.4	Periode eines Elements . . . . .	9
2.5	Abelsche Gruppen . . . . .	10
2.6	Konjugierte Elemente . . . . .	10
2.7	Klassen . . . . .	11
2.8	Multiplikation von Klassen . . . . .	12
2.9	Untergruppe . . . . .	12
2.10	Lagrange-Theorem . . . . .	12
2.11	Isomorphie . . . . .	13
2.12	Homomorphie . . . . .	13
2.13	Aufgaben zu Kapitel 2 . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Darstellungstheorie</b>	<b>17</b>
3.1	Darstellung einer Gruppe . . . . .	17
3.2	Äquivalente Darstellungen . . . . .	18
3.3	Unitäre Darstellung . . . . .	18
3.4	Reduzibilität einer Darstellung . . . . .	19
3.5	Das Große Orthogonalitätstheorem . . . . .	20
3.6	Charaktere . . . . .	21
3.7	Reduktion einer Darstellung . . . . .	23
3.8	Orthogonalität und Vollständigkeit der Charaktere . . . . .	23
3.8.1	1. Satz von Burnside . . . . .	24
3.8.2	Orthogonalitätsrelation der Charaktere . . . . .	24
3.8.3	Vollständigkeitsrelation der Charaktere (2. Orthogonalitätsrelation) . . . . .	24
3.8.4	Folgerungen . . . . .	25
3.8.5	2. Satz von Burnside . . . . .	25
3.8.6	Durchführung einer Reduktion . . . . .	26
3.9	Die reguläre Darstellung . . . . .	27
3.10	Konstruktion einer Charaktertafel . . . . .	29
3.11	Aufgaben zu Kapitel 3 . . . . .	31
	. . . . .	35

<b>4</b>	<b>Basisvektoren (Basisfunktionen)</b>	<b>35</b>
4.1	Invarianter Vektorraum . . . . .	35
4.1.1	Kartesische Einheitsvektoren und Ortsvektor . . . . .	35
4.1.2	Funktionen im Ortsraum . . . . .	37
4.2	Symmetriekonformen Punkten zugeordnete Vektoren und Koordinatensysteme . . . . .	40
4.3	Basis einer Darstellung . . . . .	42
4.4	Wigner-Formel . . . . .	44
4.5	Erzeugender Operator einer irreduziblen Basis . . . . .	49
4.6	Drehspiegelgruppe $SO(3) = \mathbb{R} \times C_i$ . . . . .	50
4.6.1	Rotationsgruppe $\mathbb{R}$ . . . . .	51
4.6.2	Drehspiegelgruppe $SO(3) = \mathbb{R} \times C_i$ . . . . .	55
4.7	Aufgaben zu Kapitel 4 . . . . .	58
<b>II</b>	<b>Einfache physikalische Anwendungen</b>	<b>63</b>
<b>5</b>	<b>Quantenmechanik</b>	<b>65</b>
5.1	Archetypische Problemstellungen . . . . .	65
5.1.1	Variationsverfahren: Irreduzible Versuchsfunktionen . . . . .	65
5.1.2	Molekulare Orbitale . . . . .	66
5.1.3	Aufspaltung von Energieeigenwerten . . . . .	70
5.2	Korrelationstabeln (Kompatibilitätstabeln) . . . . .	71
5.3	Entartete Störungstheorie . . . . .	72
5.3.1	Störungstheorie 1. Ordnung . . . . .	73
5.3.2	Störungstheorie 2. Ordnung . . . . .	78
5.3.3	Höhere Multiplizitäten . . . . .	79
5.4	Aufspaltung im homogenen elektrischen Feld . . . . .	79
5.4.1	Wasserstoffähnliche Atome (modifiziertes Coulomb-Potential) . . . . .	79
5.4.2	Quadratischer Stark-Effekt . . . . .	82
5.4.3	Linearer Stark-Effekt . . . . .	82
5.5	Aufgaben zu Kapitel 5 . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Potentialfelder in der Mechanik, Elektrodynamik und Quantenmechanik</b>	<b>87</b>
6.1	Multipolentwicklung . . . . .	88
6.1.1	Theoretisch-physikalischer Hintergrund . . . . .	88
6.1.2	Anwendung der Gruppentheorie . . . . .	90
6.2	Kristallfeldtheorie (Ligandenfeldtheorie) . . . . .	91
6.3	Aufgaben zu Kapitel 6 . . . . .	95
<b>7</b>	<b>Klassische Punktdynamik: Harmonische Schwingungen in symmetrischen Systemen</b>	<b>97</b>
7.1	Harmonische Schwingungssysteme . . . . .	97
7.2	Transformation des Ortsvektors und der Einheitsvektoren . . . . .	99
7.3	Invarianzen . . . . .	101
7.4	Symmetrievektoren und Symmetriekoordinaten . . . . .	103
7.5	Hamiltonfunktion in Symmetriekoordinaten . . . . .	105
7.6	Eigenvektoren und Eigenfrequenzen . . . . .	107
7.6.1	Darstellungen mit $a_\mu = 1$ . . . . .	107
7.6.2	Darstellungen mit $a_\mu > 1$ . . . . .	108

7.7	Prototypisches Lösungsbeispiel . . . . .	108
7.7.1	Wahl des Koordinatensystems . . . . .	109
7.7.2	Ausreduktion . . . . .	109
7.7.3	Symmetrievektoren mit Multiplizität $a_\mu = 1$ . . . . .	111
7.7.4	Symmetrievektoren mit Multiplizität $a_\mu > 1$ . . . . .	112
7.7.5	Eigenmoden der Multiplizität $a_\mu = 1$ . . . . .	115
7.7.6	Eigenmoden der Multiplizität $a_\mu > 1$ . . . . .	116
7.8	Aufgaben zu Kapitel 7 . . . . .	118

### III Fortgeschrittene physikalische Anwendungen 125

<b>8</b>	<b>Tensoren im Kristall</b> . . . . .	<b>127</b>
8.1	Energiedichte im Kontinuum mit lokaler Punktsymmetrie . . . . .	127
8.2	Reduktion durch Symmetrie . . . . .	129
8.3	Rechenprozedur . . . . .	130
8.4	Kristallsysteme, Kristallklassen . . . . .	132
8.5	Dielektrizitätstensor . . . . .	132
8.5.1	Rückblick auf die Wigner-Konvention . . . . .	132
8.5.2	Transformationseigenschaften . . . . .	134
8.6	Elastizitätstensor . . . . .	136
8.7	Piezoelektrizität . . . . .	138
8.8	Aufgaben zu Kapitel 8 . . . . .	141
<b>9</b>	<b>Absorption, Emission und Streuung von Licht</b> . . . . .	<b>143</b>
9.1	Dipolübergänge . . . . .	143
9.2	Kohärente Lichtstreuung und Raman-Streuung . . . . .	145
9.2.1	Dispersion („elastische Lichtstreuung“) . . . . .	145
9.2.2	Raman-Streuung . . . . .	147
9.3	Produktdarstellungen . . . . .	148
9.3.1	Reduktion von Produktdarstellungen . . . . .	148
9.3.2	Symmetrische und antisymmetrische Darstellung . . . . .	150
9.4	Standardisierte Produktreduktionen . . . . .	151
9.4.1	Kopplungskoeffizienten (Wigner-Koeffizienten) . . . . .	151
9.4.2	Multiplikationstafeln . . . . .	153
9.4.3	Kopplungstafeln . . . . .	154
9.4.4	Wigner-(Clebsch-Gordan)-Koeffizienten . . . . .	154
9.4.5	Wigner-Eckart-Theorem . . . . .	156
9.5	Prototypische Beispiele . . . . .	157
9.5.1	Dipolübergänge . . . . .	157
9.5.2	Raman-Übergänge . . . . .	159
9.6	IR- und Raman-Schwingungsspektren . . . . .	160
9.6.1	Grundschwingungen . . . . .	160
9.6.2	Kombinations- und Obertöne . . . . .	162
9.7	Aufgaben zu Kapitel 9 . . . . .	164
<b>10</b>	<b>Die Translationsgruppe <math>T</math></b> . . . . .	<b>167</b>
10.1	Periodische Randbedingungen . . . . .	167
10.1.1	Realisierung . . . . .	167

10.1.2	Implikationen für die Physik . . . . .	168
10.2	Blochfunktionen . . . . .	169
10.2.1	Reziprokes Gitter . . . . .	169
10.2.2	Basisfunktionen der irreduziblen Darstellungen . . . . .	169
10.2.3	Erste Brillouin-Zone (1. BZ) . . . . .	170
10.2.4	Konstruktion der 1. Brillouin-Zone . . . . .	171
10.2.5	Höhere Brillouin-Zonen . . . . .	171
10.3	Aufgabe zu Kapitel 10 . . . . .	173
<b>11</b>	<b>Darstellungstheorie der Raumgruppen</b>	<b>175</b>
11.1	Symmetrieoperationen der Raumgruppen . . . . .	175
11.2	Eigenfunktionen als Blochfunktionen . . . . .	177
11.3	Einelektronenbandstruktur . . . . .	178
11.4	Spezielle Punkte der 1. Brillouin-Zone . . . . .	180
11.4.1	Gruppe des $\vec{k}$ -Vektors (Kleine Gruppe) . . . . .	181
11.4.2	Sternoperationen von $\vec{k}$ („Stern von $\vec{k}$ “) . . . . .	181
11.4.3	Restoperationen . . . . .	182
11.5	Irreduziblen Darstellungen . . . . .	184
11.5.1	Aufbau der irreduziblen Darstellungen . . . . .	184
11.5.2	Bezeichnungsweise der irreduziblen Darstellungen . . . . .	184
<b>12</b>	<b>Energiebänder im Kristall</b>	<b>187</b>
12.1	Energieaufspaltung im Kristall . . . . .	187
12.2	Kompatibilitätsbeziehungen . . . . .	190
12.2.1	Wege zwischen besonderen $\vec{k}$ -Punkten . . . . .	190
12.2.2	Erzwungene Überschneidung (Zufällige Entartung) . . . . .	193
12.3	Aufgabe zu Kapitel 11 und 12 . . . . .	196
<b>IV</b>	<b>Lie-Gruppen</b>	<b>197</b>
<b>13</b>	<b>Die kontinuierliche Gruppe <math>R \times C_i \cong SO(3)</math></b>	<b>199</b>
13.1	Generatoren . . . . .	199
13.2	Irreduzible Darstellungen . . . . .	201
13.3	Lie-Algebra . . . . .	201
13.4	Operatordiagramm . . . . .	203
13.5	Multiplette . . . . .	204
13.6	Normierung und Matrixelemente . . . . .	204
13.7	Clebsch-Gordan-Koeffizienten . . . . .	206
<b>14</b>	<b>Lie-Algebra des Wasserstoffproblems</b>	<b>209</b>
14.1	Der Runge-Lenz-Vektor . . . . .	210
14.2	Multiplettstrukturen . . . . .	214
14.3	Aufbau der Eigenfunktionen . . . . .	215
14.4	Zusammenhang mit den konventionellen Eigenfunktionen von $H$ . . . . .	215
<b>15</b>	<b>Lie-Algebra der Elementarteilchen</b>	<b>217</b>
15.1	Isospin-Algebra . . . . .	217
15.2	Multipletts als Elementarteilchen . . . . .	218

15.3	$SU(3)$ -Algebra („Eighthfold way“)	219
15.3.1	Kommutatoralgebra	219
15.3.2	Operatoridiagramm der $SU(3)$	220
15.3.3	Irreduzible Multipletts der $SU(3)$ (Gell-Mann-Modell)	221
<b>16</b>	<b>Einführung in die Lie-Gruppen und deren Terminologie</b>	<b>225</b>
16.1	Vorbemerkungen	225
16.2	Kontinuierliche Gruppen	225
16.3	Lie-Gruppen	226
16.4	Realisierung von Lie-Gruppen als Transformationsgruppen	226
16.5	Die linearen Gruppen $GL(n)$ und $SL(n)$	227
16.5.1	Allgemeine Lineare Gruppe $GL(n)$	227
16.5.2	Spezielle Lineare Gruppe $SL(n)$ (Unimodulare Gruppe)	228
16.6	Exponentialdarstellung unitärer Matrizen	228
16.6.1	Determinante einer unitären Matrix	229
16.6.2	Determinanten-Spur-Beziehung	229
16.7	Die Familie der unitären Gruppen: $U(n), SU(n), O(n), SO(n)$	230
16.7.1	Die Unitäre Gruppe $U(n)$	230
16.7.2	Die Spezielle Unitäre Gruppe $SU(n)$	232
16.7.3	Die Orthogonale Gruppe $O(n)$	233
16.7.4	Die Spezielle Orthogonale Gruppe $SO(n)$	234
16.8	Weg zur Lie-Algebra	235
16.8.1	Generatoren der Lie-Gruppe	235
16.8.2	Lie-Algebra der Generatoren	236
16.9	Operatoren als Generatoren	240
<b>Anhang</b>		<b>245</b>
<b>A</b>	<b>Symmetrie</b>	<b>245</b>
A.1	Symmetrieoperationen/-elemente	245
A.2	Symmetriesätze	246
A.3	Kurzbeschreibung der Punktgruppen	246
A.3.1	Die Gruppen $C_n$	247
A.3.2	Die Gruppen $C_{nh}$	247
A.3.3	Die Gruppen $C_{nv}$	248
A.3.4	Die Gruppen $S_n$	248
A.3.5	Die Gruppen $D_n$	249
A.3.6	Die Gruppen $D_{nd}$	249
A.3.7	Die Gruppen $D_{nh}$	250
A.3.8	Die kubischen Gruppen: $T, T_d, T_h, O, O_h$	251
A.3.9	Die Ikosaeder-Gruppen: $I, I_h$	252
A.3.10	$R$ (Volle Rotationsgruppe)	252
A.3.11	$SO(3) = R \times C_i$ (Rotations-Inversionsgruppe)	252
<b>B</b>	<b>Charaktertafeln</b>	<b>255</b>
B.1	Zur Benennung der Darstellung	255
B.2	Isomorphien und Produktrelationen	255
B.3	Charaktertafeln	256

B.3.1	Die einfachsten Gruppen $C_1, C_s$ und $C_i$ . . . . .	256
B.3.2	Die Gruppen $C_n, n = 2, \dots, 8$ . . . . .	256
B.3.3	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	258
B.3.4	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	261
B.3.5	Die Gruppen $S_n, n = 4, 6, 8$ . . . . .	262
B.3.6	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	263
B.3.7	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	265
B.3.8	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	267
B.3.9	Die kubischen Gruppen: $T, T_d, T_h, O, O_h$ . . . . .	270
B.3.10	Die Ikosaeder-Gruppen: $I, I_h$ . . . . .	272
B.3.11	Die unendlichen Gruppen $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$ . . . . .	273
B.3.12	Die volle Rotationsgruppe $R$ . . . . .	274
B.3.13	Die Rotations-Inversionsgruppe $SO(3) = R \times C_i$ . . . . .	275

## C Korrelationstabeln 277

C.1	Hierarchische Ordnung der Gruppen . . . . .	277
C.2	Korrelationstabeln . . . . .	277
C.2.1	Die Gruppen $C_4$ und $C_6$ . . . . .	277
C.2.2	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	277
C.2.3	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	279
C.2.4	Die Gruppen $S_n, n = 4, 6, 8$ . . . . .	280
C.2.5	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	280
C.2.6	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	281
C.2.7	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	282
C.2.8	Die kubischen Gruppen: $T, T_d, T_h, O, O_h$ . . . . .	285
C.2.9	Die Ikosaeder-Gruppen: $I, I_h$ . . . . .	286
C.2.10	Die Gruppe $C_{\infty v}$ . . . . .	286
C.2.11	Die Gruppe $SO(3) = R \times C_i$ . . . . .	287
C.2.12	Spezialfälle . . . . .	288

## D Multiplikationstabeln 291

D.1	Grundregeln . . . . .	291
D.2	Symmetrische und antisymmetrische direkte Produkte . . . . .	292
D.3	Multiplikationstabeln . . . . .	293
D.3.1	Die einfachsten Gruppen $C_1, C_s$ und $C_i$ . . . . .	293
D.3.2	Die Gruppen $C_n, n = 2, \dots, 6, 8$ . . . . .	293
D.3.3	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	293
D.3.4	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	293
D.3.5	Die Gruppen $S_n, n = 2, 4, 6, 8, 12$ . . . . .	294
D.3.6	Die Gruppen $D_n, n = 2, \dots, 6, 8, 12$ . . . . .	294
D.3.7	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	296
D.3.8	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$ . . . . .	296
D.3.9	Die kubischen Gruppen . . . . .	296
D.3.10	Die Ikosaeder-Gruppen . . . . .	296
D.3.11	Die unendlichen Gruppen $C_{\infty v}$ und $D_{\infty h}$ . . . . .	297
D.3.12	Die Rotationsgruppe $R$ / Rotations-Inversionsgruppe $SO(3) = R \times C_i$ . . . . .	297

## E Kopplungskoeffizienten (Wigner-Koeffizienten für endliche Punktgruppen) 299

E.1	Definitionen und Regeln . . . . .	299
-----	-----------------------------------	-----

E.1.1	Zerlegung in irreduzible Bestandteile	299
E.1.2	Generierung durch Basisfunktionen	299
E.1.3	Unitäre Darstellungen und Standardisierung	299
E.1.4	Symmetrische und antisymmetrische Anteile	300
E.2	Kopplungstafeln	300
E.2.1	Die Gruppen $C_n, n = 3, 4, 6$	300
E.2.2	Die Gruppen $C_{nh}, n = 2, \dots, 6$	302
E.2.3	Die Gruppen $C_{nv}, n = 2, \dots, 6$	302
E.2.4	Die Gruppen $S_n, n = 2, 4, 6, 8, 12$	302
E.2.5	Die Gruppen $D_n, n = 3, 4, 6$	302
E.2.6	Die Gruppen $D_{nd}, n = 2, \dots, 6$	304
E.2.7	Die Gruppen $D_{nh}, n = 2, \dots, 6$	304
E.2.8	Die kubischen Gruppen: $T, T_d, T_h, O, O_h$	304
E.2.9	Die Ikosaeder-Gruppen: $I, I_h$	310
<b>F</b>	<b>Wigner–Clebsch–Gordan–Koeffizienten</b>	<b>329</b>
F.1	Allgemeines	329
F.2	Tafeln der Wigner–Clebsch–Gordan–Koeffizienten	333
F.2.1	Tafel für $D_1 \times D_1$	333
F.2.2	Tafel für $D_1 \times D_2$	334
F.2.3	Tafel für $D_1 \times D_3$	335
F.2.4	Tafel für $D_2 \times D_2$	337
<b>G</b>	<b>Optische Aktivität, Piezoelektrizität und Pyroelektrizität</b>	<b>339</b>
<b>H</b>	<b>Bravais-Gitter und Kristallsysteme</b>	<b>341</b>
H.1	Bravais-Gitter und Translationsgruppen	341
H.2	Raumgitter und Raumgruppe	344
H.3	Kristallsysteme und Kristallklassen	344
H.4	Höhere Raumgruppen	345
H.5	Zusammenfassung	348
<b>I</b>	<b>Brillouin-Zonen, Fermikörper und Fermiflächen</b>	<b>349</b>
I.1	Die 1. Brillouin-Zone und ihre speziellen Punkte	349
I.1.1	Quadratgitter	349
I.1.2	Kubisch primitives, kubisch flächenzentriertes und kubisch raumzentriertes Gitter	350
I.1.3	Hexagonales Gitter	351
I.1.4	Bemerkung	351
I.2	Fermikörper und Fermiflächen	352
<b>J</b>	<b>Elementarteilchen</b>	<b>355</b>
J.1	Bezeichnungen der Elementarteilchen	355
J.2	Quarks und Quarkstruktur der Elementarteilchen	356
<b>K</b>	<b>Lösungen der Übungsaufgaben</b>	<b>357</b>
K.1	Zu Kapitel 2	357
K.2	Zu Kapitel 3	361
K.3	Zu Kapitel 4	370

K.4	Zu Kapitel 5 . . . . .	392
K.5	Zu Kapitel 6 . . . . .	399
K.6	Zu Kapitel 7 . . . . .	402
K.7	Zu Kapitel 8 . . . . .	416
K.8	Zu Kapitel 9 . . . . .	423
K.9	Zu Kapitel 10 . . . . .	431
K.10	Zu Kapitel 11 und 12 . . . . .	432
<b>L</b>	<b>Johannes Kepler:</b>	
	„Über den hexagonalen Schnee“	<b>437</b>
L.1	Textauszug . . . . .	438
L.2	Kommentare . . . . .	439
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>443</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>445</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>447</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>451</b>
	<b>Sachwortverzeichnis</b>	<b>455</b>