

Inhalt

1	Einleitung	1
2	Gruppentheorie	2
2.1	Gruppen und ihre Teilmengen	2
2.1.1	Mengen und Gruppen	2
2.1.2	Abelsche Gruppen	3
2.1.3	Ordnung einer Gruppe	4
2.1.4	Zyklische Gruppen, Ordnung eines Elements	4
2.1.5	Gruppentafeln, Erzeugende Elemente	5
2.1.6	Abstrakte Gruppen, Cayley-Graphen	6
2.1.7	Punktgruppen, Raumgruppen	9
2.1.7.1	Symmetrieelemente und Symmetrieoperationen	10
2.1.7.2	Vertauschbarkeit	20
2.1.7.3	Koppelung, Kombination, Zusatzsymmetrieoperationen	25
2.1.7.4	Klassifikation von Punktgruppen	28
2.1.7.5	Bestimmung der Punktgruppe eines Moleküls	35
2.1.8	Untergruppen	36
2.1.9	Permutationsgruppen, Symmetrische Gruppen	39
2.1.10	Komplexe, Nebenklassen	41
2.1.11	Konjugierte Elemente, Klassen	43
2.1.12	Konjugierte Untergruppen, Normalteiler	45
2.1.13	Faktorgruppen	49
	Zusammenfassung zu Abschnitt 2.1	50
2.2	Zuordnungen der endlichen Gruppen	51
2.2.1	Isomorphismus	51
2.2.2	Homomorphismus	52
2.2.3	Automorphismus	54
	Zusammenfassung zu Abschnitt 2.2	57
2.3	Produktbildungen bei Gruppen	58
	Zusammenfassung zu Abschnitt 2.3	63
	Aufgaben	64
3	Darstellungstheorie	67
3.1	Darstellungen von Gruppen, Reduktion von Darstellungen	67
3.1.1	Darstellung einer Gruppe	67
3.1.2	Äquivalente Darstellungen	67
3.1.3	Konstruktion von Darstellungen	69
3.1.4	Reduzibilität	72
3.1.5	Charaktere	73
3.1.6	Charaktertafeln	74
	Zusammenfassung zu Abschnitt 3.1	78

3.2	Das große Orthogonalitätstheorem und Folgerungen	80
3.2.1	Das große Orthogonalitätstheorem	80
3.2.2	Regeln über irreduzible Darstellungen und ihre Charaktere	82
3.2.3	Reduktionsformel und Projektionsoperator	84
	Zusammenfassung zu Abschnitt 3.2	89
3.3	Produktbildungen bei Darstellungen	90
	Zusammenfassung zu Abschnitt 3.3	97
	Aufgaben	98
4	Anwendungen	99
4.1	Aufstellung von Charaktertafeln	99
4.2	Herleitung von irreduziblen Darstellungen für die kristallographischen Punktgruppen	113
4.3	Auswahlregeln für isolierte Moleküle	115
4.4	Auswahlregeln für Festkörper	125
4.5	Herleitung der Korrelationstabellen	135
4.6	Aufstellung von Symmetriekoordinaten	138
4.7	Herleitung der Raumgruppen	143
4.8	Kristallchemische Beziehungen zwischen Festkörpern	146
4.9	Optische Aktivität	150
4.10	Dipolmoment	151
4.11	Woodward-Hoffmann-Regeln	152
	Aufgaben	157
5	Lösungen	159
5.1	Lösungen zu Kapitel 2	159
5.2	Lösungen zu Kapitel 3	168
5.3	Lösungen zu Kapitel 4	171
6	Anhang	203
6.1	Matrizen für die Symmetrieoperationen	203
6.2	Untergruppen der Raumgruppe	206
6.3	Gruppenstruktur der Raumgruppe und ihrer Untergruppen	207
6.4	Physikalische Beispiele für Vektoren und Tensoren	209
6.5	Koordinaten in der Molekülspektroskopie	210
6.6	Bestimmung der Typen und Zahl der inneren Koordinaten eines Moleküls	212
6.7	Redundanz	215
6.8	Bestimmung der Struktur eines Moleküls	216
6.8.1	Auswahlregeln	217
6.8.2	Normalkoordinatenanalyse	218
6.8.3	Aufsuchen der g- und f-Matrix	219
6.8.4	Berechnung der Eigenwerte aus Schwingungswellenzahlen	220
6.9	Matrizenrechnung	221

7	Literatur	224
7.1	Zitierte Literatur	224
7.2	Zusätzliche Literatur	228
8	Register	231