

# Inhaltsverzeichnis

<b>I. Vektoren und Matrizen</b>	<b>1</b>
<b>A. Vektoren</b>	<b>1</b>
1. Vektoralgebra	1
1.1 Vektoraddition	1
1.2 Vektormultiplikation	3
2. Vektoranalysis	7
2.1 Vektordifferentiation	7
2.2 Vektorintegration	17
3. Krummlinige Koordinaten	25
<b>B. Matrizen</b>	<b>34</b>
4. Typen von Matrizen	34
5. Determinanten	41
6. Rang einer Matrix	45
6.1 Elementare Transformationen	45
6.2 Inverse Matrix	47
6.3 Lineare Abhängigkeit	50
7. Lineare Gleichungen	52
7.1 Inhomogene Gleichungen	54
7.2 Homogene Gleichungen	55
7.3 Allgemeine Lösungen	56
8. Vektorräume	57
8.1 Dimension eines Vektorraumes	57
8.2 Basis und Koordinaten	58
9. Lineare Transformationen	59
9.1 Basistransformation	59
9.2 Vektortransformation	60
9.3 Äquivalenztransformationen	63
9.4 Vektoren mit reellen und komplexen Komponenten	63
10. Eigenwertgleichungen	65
10.1 Eigenwerte und Eigenvektoren	65
10.2 Ähnlichkeit mit einer Diagonalmatrix	68
11. Orthogonalisierungsverfahren	70
11.1 Gram-Schmidt-Orthogonalisierung	70
11.2 Löwdin-Orthogonalisierung	73
12. Anwendung	74

12.1	Thermodynamische Kreisprozesse	74
12.2	Hückel-Methode	78
<b>C.</b>	<b>Aufgaben</b>	<b>80</b>
<b>II.</b>	<b>Gruppentheorie</b>	<b>86</b>
<b>A.</b>	<b>Abstrakte Gruppen</b>	<b>86</b>
1.	Grundlagen	86
1.1	Mengen	86
1.2	Abbildungen	87
1.3	Binäroperationen	88
2.	Gruppen	89
2.1	Eigenschaften von Gruppen	89
2.2	Konstruktion von Gruppen	92
3.	Untergruppen	96
4.	Konjugierte Elemente	100
4.1	Klassen	100
4.2	Invariante Untergruppen	102
5.	Homomorphismus und Isomorphismus	102
5.1	Homomorphismus	102
5.2	Isomorphismus	104
<b>B.</b>	<b>Molekülsymmetrie</b>	<b>105</b>
6.	Symmetrieoperationen	105
6.1	Symmetrieoperationen und Permutationen	105
6.2	Bestimmung von Symmetrieoperationen	108
6.3	Koordinatensysteme	110
6.4	Sukzessive Symmetrieoperationen	111
7.	Punktgruppen	112
7.1	Klassifizierung von Punktgruppen	113
7.1.1	Die Gruppen $C_n$	113
7.1.2	Die Gruppen $C_{nv}$	114
7.1.3	Die Gruppen $C_{nh}$	115
7.1.4	Die Gruppen $S_{2n}$	116
7.1.5	Die Gruppen $D_n$	117
7.1.6	Die Gruppen $D_{nd}$	118
7.1.7	Die Gruppen $D_{nh}$	119
7.1.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen	120
7.1.9	Die Ikosaedergruppen	121
7.1.10	Die Gruppen linearer Moleküle und Atome	121
7.2	Eigenschaften von Punktgruppen	122
7.2.1	Generatoren	122
7.2.2	Untergruppen	123
7.3	Bestimmung von Punktgruppen	124
<b>C.</b>	<b>Darstellungstheorie</b>	<b>126</b>
8.	Matrixdarstellung von Punktgruppen	126

8.1	Lagevektoren und Koordinaten	126
8.2	Darstellung endlicher Gruppen	128
9.	Reduzible und irreduzible Darstellungen	132
9.1	Basen für reduzible Darstellungen	132
9.2	Globale und lokale reduzible Darstellungen	134
9.3	Klassifizierung irreduzibler Darstellungen	136
10.	Eigenschaften irreduzibler Darstellungen	139
10.1	Charakter einer Darstellung	139
10.2	Orthogonalität und Entwicklung	141
10.3	Direkte Produkte	144
10.4	Auswahlregeln	146
10.5	Korrelation von Gruppen und Untergruppen	147
11.	Anwendung	148
11.1	Schwingungen	148
11.2	Molekülorbitaltheorie	149
11.3	Ligandenfeldtheorie	153
11.4	Spinzustände	156
<b>D.</b>	<b>Aufgaben</b>	<b>157</b>
<b>III.</b>	<b>Differentialgleichungen und spezielle Funktionen</b>	<b>163</b>
<b>A.</b>	<b>Gewöhnliche Differentialgleichungen</b>	<b>163</b>
1.	Einführung	163
2.	Differentialgleichungen erster Ordnung	166
2.1	Separation von Variablen	166
2.2	Exakte Differentialgleichungen	168
2.3	Homogene Differentialgleichungen	169
2.4	Variation von Konstanten	170
3.	Differentialgleichungen höherer Ordnung	171
3.1	Operatorenmethode	171
3.2	Potenzreihenentwicklung	175
3.3	Fourierreihen	177
4.	Integraltransformationen	181
4.1	Fouriertransformation	181
4.2	Laplacetransformation	186
4.3	Faltungssatz	189
5.	Numerische Lösung von Differentialgleichungen	192
5.1	Konversion einer Differentialgleichung $n$ -ter Ordnung	192
5.2	Taylorreihenentwicklung	193
5.3	Runge-Kutta-Methoden	194
<b>B.</b>	<b>Spezielle Funktionen</b>	<b>197</b>
6.	Integraldarstellung von Funktionen	197
6.1	Gammafunktion	197
6.2	Fehlerfunktion	198
7.	Spezielle Funktionen aus Differentialgleichungen	200
7.1	Hypergeometrische Differentialgleichung	200

7.1.1	Legendresche Polynome . . . . .	201
7.1.2	Zugeordnete Legendresche Funktionen . . . . .	205
7.2	Kummersche Differentialgleichung . . . . .	206
7.2.1	Hermiteische Polynome und Funktionen . . . . .	208
7.2.2	Laguerresche Polynome und Funktionen . . . . .	210
7.2.3	Besselfunktionen . . . . .	212
<b>C.</b>	<b>Partielle Differentialgleichungen . . . . .</b>	<b>215</b>
8.	Eigenschaften . . . . .	215
8.1	Separation von Variablen . . . . .	216
8.2	Substitution von Variablen . . . . .	217
8.3	Doppelreihenentwicklung . . . . .	218
9.	Spezielle partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung . . . . .	219
9.1	Laplacegleichung . . . . .	219
9.2	Wellengleichung . . . . .	220
9.3	Diffusionsgleichung . . . . .	221
9.4	Schrödingergleichung . . . . .	223
10.	Rand- und Eigenwertprobleme . . . . .	224
11.	Anwendungen . . . . .	228
11.1	Reaktorsysteme . . . . .	228
11.2	Wellenbewegung . . . . .	231
11.3	Wärmeleitung . . . . .	233
11.4	Harmonischer Oszillator . . . . .	236
<b>D.</b>	<b>Aufgaben . . . . .</b>	<b>237</b>
<b>IV.</b>	<b>Anhang . . . . .</b>	<b>243</b>
1.	Komplexe Zahlen und Funktionen . . . . .	243
1.1	Komplexe Zahlen . . . . .	243
1.2	Komplexe Funktionen . . . . .	244
2.	Charaktertabellen von Punktgruppen . . . . .	250
2.1	Die Gruppen $C_n$ . . . . .	250
2.2	Die Gruppen $C_{nv}$ . . . . .	251
2.3	Die Gruppen $C_{nh}$ . . . . .	252
2.4	Die Gruppen $S_n$ . . . . .	254
2.5	Die Gruppen $D_n$ . . . . .	255
2.6	Die Gruppen $D_{nd}$ . . . . .	256
2.7	Die Gruppen $D_{nh}$ . . . . .	258
2.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen . . . . .	260
2.9	Die Ikosaedergruppen . . . . .	262
2.10	Die Gruppen linearer Moleküle . . . . .	263
3.	Korrelationstabellen von Punktgruppen . . . . .	264
3.1	Die Gruppen $C_n$ . . . . .	264
3.2	Die Gruppen $C_{nv}$ . . . . .	264
3.3	Die Gruppen $C_{nh}$ . . . . .	265
3.4	Die Gruppen $S_n$ . . . . .	265
3.5	Die Gruppen $D_n$ . . . . .	265

3.6	Die Gruppen $D_{nd}$	266
3.7	Die Gruppen $D_{nh}$	267
3.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen	268
4.	Laplacetransformierte	269
5.	Aufgabenlösungen	271
5.1	Lösungen zu Kapitel I	271
5.2	Lösungen zu Kapitel II	280
5.3	Lösungen zu Kapitel III	286
<b>Literaturverzeichnis</b>		<b>298</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>		<b>300</b>
<b>Sachverzeichnis</b>		<b>304</b>