

Symmetrie in physikalischen Eigenschaften des Festkörpers

Jörg Ihringer

Institut für Kristallographie der Universität Tübingen
Auf der Morgenstelle 10
72076 Tübingen

Vorlesung im Sommersemester 2001 mit Übungen

1	Grundbegriffe zu Vektoren	3
1.1	Abbildungen, Transformation der Koordinaten	3
1.2	Linearer Vektorraum	4
1.3	Das Skalarprodukt	5
1.4	Das Vektorprodukt	5
1.5	Das Spatprodukt	6
2	Vektoren in unterschiedlichen Koordinatensystemen	6
2.1	Das kartesische Koordinatensystem	6
2.2	Beliebige Koordinatensysteme	7
2.3	Zerlegung eines Vektors in Richtung eines vorgegebenen Koordinatensystems	9
2.3.1	Beziehung zwischen den Transformationskoeffizienten	9
2.3.1.1	Beispiel: Ausführliche Berechnung des Koeffizienten a_1^{01}	11
2.4	Das ko- und kontravariante Koordinatensystem	12
2.4.1	Die Metrik-Koeffizienten	13
2.4.2	Beziehungen zwischen den ko- und kontravarianten Vektorkomponenten	16
2.5	Transformation der ko- und kontravarianten Komponenten bei Wechsel des Bezugssystems	16
3	Tensoren höherer Stufe	20
3.1	Tensoren 2. Stufe	20
3.1.1	Transformation der Komponenten eines Tensors 2. Stufe bei Wechsel des Bezugssystems	22
3.1.2	Der Metriktensor	23
3.1.3	Der Spannungstensor (Stress Tensor)	24
3.1.4	Die Hauptachsentransformation	29
3.1.5	Der Dehnungstensor (Strain Tensor)	31
	Die physikalischen Komponenten eines Tensors	34
3.2	Tensoren höherer als zweiter Stufe	35
3.2.1	Rechenregeln für Tensoren	35
3.2.2	Der Elastizitätstensor	36
4	Analyse physikalischer Eigenschaften mit Hilfe der Gruppentheorie	38
4.1	Begriffe zur Darstellungstheorie	39
4.1.1	Symmetrie angepasste Basisvektoren	39
4.1.2	Operatoren, von Neumannsches Prinzip	40
4.1.2.1	Operator im Vektorraum der Atomlagen	40
4.1.2.2	Operator im Vektorraum „Atomare Auslenkung“:	41
4.1.2.3	Operator im Vektorraum des Dehnungstensors (thermische Ausdehnung)	46
4.2	Homomorphe Abbildung	48
4.3	Aufbau der reduziblen Darstellung:	50
4.4	Zerlegung nach irreduziblen Darstellungen	51
4.4.1	Zerlegung des Dehnungstensors nach irreduziblen Darstellungen	53
4.4.2	Basisvektoren zum Dehnungstensor, Symmetrie 4	54

1 Grundbegriffe zu Vektoren

1.1 Abbildungen, Transformation der Koordinaten

$$x'_i = t_{ik} x_k$$

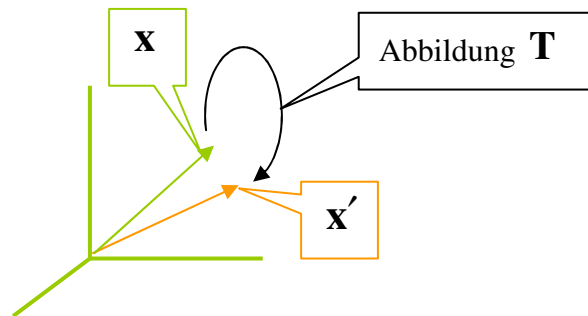
$$\mathbf{x}' = \mathbf{T} \cdot \mathbf{x}$$

Transformation eines Vektors bei einem orthogonalen Koordinatensystem, wobei der Ursprung identisch bleibe.

Diese **Transformationseigenschaft definiert einen Vektor** (einen Tensor 1. Stufe)- unabhängig von der Dimension des Raumes

T

Die Matrix **T** beschreibt die **Abbildung** des Vektors **x** auf **x'**, die Zahlen in der Matrix beziehen sich auf das vorgegebene Koordinatensystem.



1.2 Linearer Vektorraum

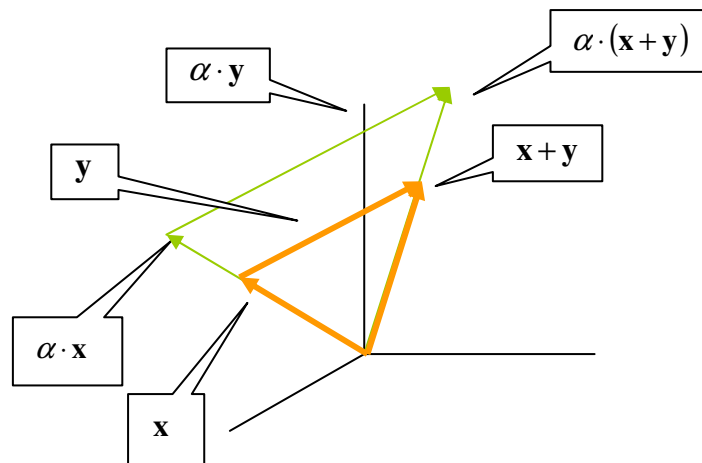
Ein linearer Vektorraum (L) ist ein Satz von Objekten $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \dots$ mit der Eigenschaft, dass die Objekte mit komplexen Zahlen multipliziert und addiert werden können.

1. Sind $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in L$, dann ist $\alpha \cdot \mathbf{x} \in L$ und $\mathbf{x} + \mathbf{y} \in L$, α sei eine komplexe Zahl.
2. Es gilt das Distributiv-Gesetz:

$$(\alpha + \beta) \cdot \mathbf{x} = \alpha \cdot \mathbf{x} + \beta \cdot \mathbf{x}$$

$$(\alpha \cdot \beta) \cdot \mathbf{x} = \alpha \cdot (\beta \cdot \mathbf{x})$$

$$\alpha \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \alpha \cdot \mathbf{x} + \alpha \cdot \mathbf{y}$$
3. L enthält einen Nullvektor 0 , so dass $\mathbf{x} + 0 = \mathbf{x}$



Objekte des Vektorraums in der Festkörperphysik:

1. Vektoren des Orts-Raums $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$
2. $n \cdot n$ Matrizen oder Tensoren $\mathbf{x} = (x_{ik}), i = 1 \dots n, k = 1 \dots n$

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} = (x_{ik} + y_{ik})$$
3. Funktionen einer reellen oder komplexen Veränderlichen z :

$$\mathbf{x} = \sum_r x_r \cdot f_r(z), \quad \mathbf{x} + \mathbf{y} = \sum_r (x_r + y_r) \cdot f_r(z)$$
4. Atomare Auslenkungsfelder, bei N Teilchen $3N$ dimensional

1.3 Das Skalarprodukt

$U = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A \cdot B \cdot \cos(A, B)$	Das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren \mathbf{A}, \mathbf{B} ist ein Skalar U . Es gilt das Kommutativ- und Distributivgesetz.
(A, B)	Winkel zwischen den Vektoren \mathbf{A}, \mathbf{B}

Ein Beispiel für die Anwendung des Skalarprodukts ist die mechanische Arbeit bei Kraftwirkung entlang eines Wegs: Die Arbeit ist das Skalarprodukt aus dem Kraftvektor Kraft- und dem Vektor entlang des Wegs.

Besonders wichtig ist das Skalarprodukt, um den Winkel zwischen zwei Vektoren zu berechnen. Sind das Skalarprodukt und die Beträge nicht bekannt, dann müssen, zu ihrer Berechnung, die Komponenten der Vektoren bekannt sein:

$\cos(A, B) = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}{A \cdot B}$	Berechnung des Winkels zwischen den Vektoren \mathbf{A}, \mathbf{B} mit Hilfe des Skalarprodukts
--	--

1.4 Das Vektorprodukt

$\mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B} = A \cdot B \cdot \sin(A, B) \cdot \mathbf{C}_0$	Das Vektorprodukt zwischen den Vektoren \mathbf{A}, \mathbf{B} ist ein Vektor, der senkrecht zu der von \mathbf{A}, \mathbf{B} aufgespannten Ebene steht. Seine Richtung wird so gewählt, dass die Vektoren $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ ein Rechtssystem bilden.
\mathbf{C}_0	Einheitsvektor in Richtung von \mathbf{C}

Der Betrag des Vektorprodukts von zwei Vektoren im dreidimensionalen Raum zeigt die Fläche des von den Vektoren aufgespannten Parallelogramms.

Ein Beispiel für das Vektorprodukt ist die Berechnung des Vektors des Drehmoments als Vektorprodukt aus dem Vektor der Kraft und dem vom Bezugspunkt für das Drehmoment ausgehenden Ortsvektor bis zum Angriffspunkt der Kraft.

1.5 Das Spatprodukt

$V = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$	Das Spatprodukt zeigt das Volumen des von den Vektoren $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ aufgespannten Körpers („Spat“).
$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = [\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}]$ ($= [\mathbf{C}, \mathbf{A}, \mathbf{B}] = [\mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{A}]$)	Das Spatprodukt behält bei zyklischer Vertauschung der Komponenten seinen Wert. Deshalb wählt man ein spezielles Symbol, das die zyklische Reihenfolge der Vektoren zeigt. Vertauschung von nur zwei Vektoren ändert das Vorzeichen!

Das Spatprodukt ist Null, wenn es linear abhängige Vektoren enthält. Es ist anschaulich klar, dass in diesem Fall drei Vektoren kein Volumen aufspannen.

Das Spatprodukt wird im Folgenden eingesetzt, um die Längen der Komponenten eines Vektors auf die Längen der Basisvektoren des zugrunde gelegten Koordinatensystems anzupassen.

2 Vektoren in unterschiedlichen Koordinatensystemen

2.1 Das kartesische Koordinatensystem

Ein Koordinatensystem, das der Isotropie und Homogenität des Raums entspricht, ist das kartesische, dessen Basisvektoren gleich lange Einheitsvektoren sind, die orthogonal zueinander stehen. Es ist zur Rechnung besonders angenehm, weil die Skalar- und Spatprodukte zwischen den Basisvektoren nur entweder 1 oder 0 ergeben.

$\mathbf{g}_{01}, \mathbf{g}_{02}, \mathbf{g}_{03}$	Basisvektoren eines orthogonalen Koordinatensystems. Der Index o vor der Nummer des Basisvektors kennzeichne das kartesische Koordinatensystem.
$\mathbf{g}_{0k} \cdot \mathbf{g}_{0l} = \delta_{0k 0l}$	Das Skalarprodukt zwischen unterschiedlichen Basisvektoren ist Null, zwischen zwei gleichen Eins.
$\mathbf{g}_{01} \times \mathbf{g}_{02} = \mathbf{g}_{03}$ $\mathbf{g}_{03} \times \mathbf{g}_{01} = \mathbf{g}_{02}$ $\mathbf{g}_{02} \times \mathbf{g}_{03} = \mathbf{g}_{01}$	Das Vektorprodukt zwischen zwei Basisvektoren ergibt jeweils den im Produkt fehlenden dritten (zyklische Vertauschung)
$[\mathbf{g}_{01}, \mathbf{g}_{02}, \mathbf{g}_{03}] = 1$	Das Spatprodukt, gebildet aus den Basisvektoren, ist 1.

Tabelle 1 Skalar- Vektor- und Spatprodukt für ein kartesisches Koordinatensystem

2.2 Beliebige Koordinatensysteme

Für das Folgende werden, zur Verkürzung der Schreibweise, zwei Vereinbarungen getroffen:

Buchstabenindizes	Jeder Buchstabenindex kann die Werte 1,2,3 annehmen
Summationskonvention	Wenn ein Buchstabenindex gleichzeitig als oberer und unterer Index auftritt, soll über diesen Index eine Summation von 1 bis 3 erfolgen

Die Basisvektoren eines beliebigen Koordinatensystems kann man als Linearkombinationen kartesischer Basisvektoren darstellen:

$\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$	Basisvektoren eines beliebigen Koordinatensystems.
$\mathbf{g}_1 = a_1^{01} \mathbf{g}_{01} + a_1^{02} \mathbf{g}_{02} + a_1^{03} \mathbf{g}_{03}$ $\mathbf{g}_2 = a_2^{01} \mathbf{g}_{01} + a_2^{02} \mathbf{g}_{02} + a_2^{03} \mathbf{g}_{03}$ $\mathbf{g}_3 = a_3^{01} \mathbf{g}_{01} + a_3^{02} \mathbf{g}_{02} + a_3^{03} \mathbf{g}_{03}$	Aufstellung des beliebigen Koordinatensystems im kartesischen. Die neun Transformationskoeffizienten $a_1^{01}, a_1^{02}, a_1^{03}, \dots, a_3^{03}$ definieren das beliebige Koordinatensystem.
$\mathbf{g}_k = a_k^{0l} \mathbf{g}_{0l}$	Schreibweise mit Buchstabenindizes und Summationskonvention

Tabelle 2 Basisvektoren eines beliebigen Koordinatensystems als Linearkombination aus Basisvektoren eines kartesischen Systems

$\mathbf{g}_{01} = a_{01}^1 \mathbf{g}_1 + a_{01}^2 \mathbf{g}_2 + a_{01}^3 \mathbf{g}_3$ $\mathbf{g}_{02} = a_{02}^1 \mathbf{g}_1 + a_{02}^2 \mathbf{g}_2 + a_{02}^3 \mathbf{g}_3$ $\mathbf{g}_{03} = a_{03}^1 \mathbf{g}_1 + a_{03}^2 \mathbf{g}_2 + a_{03}^3 \mathbf{g}_3$	Umkehrung: Die kartesischen Basisvektoren werden durch die des beliebigen Koordinatensystems ausgedrückt
$\mathbf{g}_{0k} = a_{0k}^l \mathbf{g}_l$	Schreibweise mit Summationskonvention, $k=1,2,3$.

Tabelle 3 Basisvektoren eines kartesischen Koordinatensystems als Linearkombination aus Basisvektoren eines beliebigen Systems

Beispiel:	
$\mathbf{g}_1 = \mathbf{g}_{01}$ $\mathbf{g}_2 = \mathbf{g}_{01} + \mathbf{g}_{02}$ $\mathbf{g}_3 = \mathbf{g}_{01} + \mathbf{g}_{02} + \mathbf{g}_{03}$	Aufstellung eines Koordinatensystems (Beispiel 1) als Linearkombination aus kartesischen Basisvektoren
$\mathbf{g}_{01} = \mathbf{g}_1$ $\mathbf{g}_{02} = -\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$ $\mathbf{g}_{03} = -\mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3$	Umkehrung dazu

Tabelle 4 Zahlenbeispiel zur Aufstellung eines beliebigen Koordinatensystems aus den Basisvektoren eines kartesischen Systems

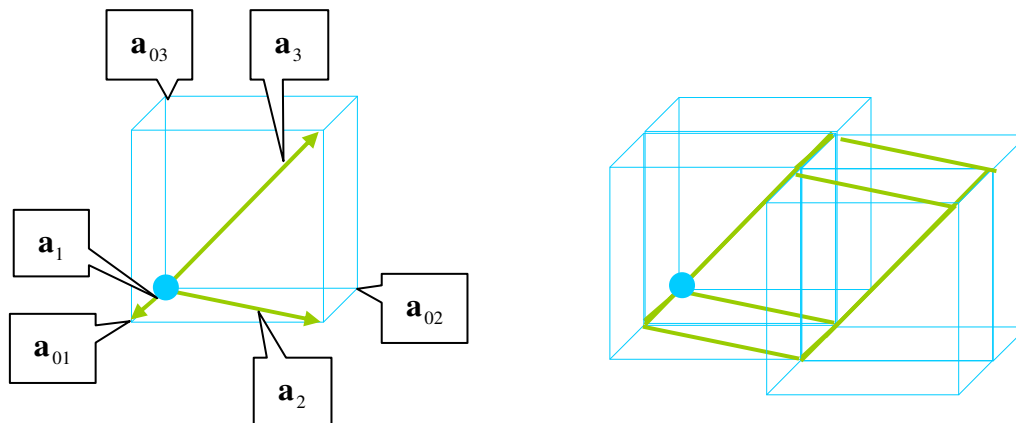


Abbildung 1 Basisvektoren des Koordinatensystems des Beispiels (grün) und Basisvektoren eines kartesischen Systems (blau, sie bilden die Kanten der Würfel, die Kantenlänge sei 1). Rechts: „Spat“ aus den grünen Basisvektoren. Der Punkt zeigt den Ursprung der Koordinatensysteme.

Im Folgenden dient dieses System als Realisierung eines kovarianten Koordinatensystems. Das dazu kontravariante Koordinatensystem zeigt *Abbildung 2*, es wird im Folgenden eingeführt.

2.3 Zerlegung eines Vektors in Richtung eines vorgegebenen Koordinatensystems

Kennt man die Vektorprodukte zwischen den Basisvektoren, dann kann ein beliebiger Vektor unmittelbar in seine Komponenten zerlegt werden:

$\mathbf{A} = A^1 \mathbf{g}_1 + A^2 \mathbf{g}_2 + A^3 \mathbf{g}_3$	Vektor in einem beliebigen Koordinatensystem. Die Komponenten A^k , $k = 1, 2, 3$ sollen ermittelt werden
$\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$	Basisvektoren eines beliebigen Koordinatensystems.
$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = A^1 \mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)$	Zur Berechnung von A^1 wird die ganze Gleichung von rechts mit dem Vektorprodukt $\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3$ multipliziert. Man erhält unmittelbar:
$A^1 = \frac{[\mathbf{A}, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}$	Aufgelöst nach A^1 , formuliert mit Spatprodukten
$A^k = \frac{[\mathbf{A}, \mathbf{g}_l, \mathbf{g}_m]}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}, \quad (k, l, m) = \text{zykl.} (1, 2, 3)$	Komponenten A^1, A^2, A^3

Tabelle 5 Berechnung der Koordinaten eines Vektors in einem beliebigen Koordinatensystem

2.3.1 Beziehung zwischen den Transformationskoeffizienten

Eine Beziehung zwischen den Transformationskoeffizienten von einem beliebigen- zu einem kartesischen System folgt, wenn man in $\mathbf{g}_k = a_k^{0l} \mathbf{g}_{0l}$ (Tabelle 2), wie in der „Umkehrung“ in Tabelle 3 formuliert, \mathbf{g}_{0l} durch $\mathbf{g}_{0l} = a_{0l}^m \mathbf{g}_m$ ersetzt.

$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 &= a_1^{01} (a_{01}^1 \mathbf{g}_1 + a_{01}^2 \mathbf{g}_2 + a_{01}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_1^{02} (a_{02}^1 \mathbf{g}_1 + a_{02}^2 \mathbf{g}_2 + a_{02}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_1^{03} (a_{03}^1 \mathbf{g}_1 + a_{03}^2 \mathbf{g}_2 + a_{03}^3 \mathbf{g}_3) \\ \mathbf{g}_2 &= a_2^{01} (a_{01}^1 \mathbf{g}_1 + a_{01}^2 \mathbf{g}_2 + a_{01}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_2^{02} (a_{02}^1 \mathbf{g}_1 + a_{02}^2 \mathbf{g}_2 + a_{02}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_2^{03} (a_{03}^1 \mathbf{g}_1 + a_{03}^2 \mathbf{g}_2 + a_{03}^3 \mathbf{g}_3) \\ \mathbf{g}_3 &= a_3^{01} (a_{01}^1 \mathbf{g}_1 + a_{01}^2 \mathbf{g}_2 + a_{01}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_3^{02} (a_{02}^1 \mathbf{g}_1 + a_{02}^2 \mathbf{g}_2 + a_{02}^3 \mathbf{g}_3) \\ &\quad + a_3^{03} (a_{03}^1 \mathbf{g}_1 + a_{03}^2 \mathbf{g}_2 + a_{03}^3 \mathbf{g}_3) \end{aligned}$	Aus dem Vergleich der Koeffizienten für \mathbf{g}_k folgen neun Gleichungen, aus denen ein Satz aus dem jeweils anderen berechnet werden kann.
--	---

Tabelle 6 Basisvektoren eines beliebigen Koordinatensystems als Linearkombination der substituierten kartesischen Basisvektoren

$1 = a_1^{01} a_{01}^1 + a_1^{02} a_{02}^1 + a_1^{03} a_{03}^1$ $0 = a_1^{01} a_{01}^2 + a_1^{02} a_{02}^2 + a_1^{03} a_{03}^2$ $0 = a_1^{01} a_{01}^3 + a_1^{02} a_{02}^3 + a_1^{03} a_{03}^3$ $0 = a_2^{01} a_{01}^1 + a_2^{02} a_{02}^1 + a_2^{03} a_{03}^1$ $1 = a_2^{01} a_{01}^2 + a_2^{02} a_{02}^2 + a_2^{03} a_{03}^2$ $0 = a_2^{01} a_{01}^3 + a_2^{02} a_{02}^3 + a_2^{03} a_{03}^3$ $0 = a_3^{01} a_{01}^1 + a_3^{02} a_{02}^1 + a_3^{03} a_{03}^1$ $0 = a_3^{01} a_{01}^2 + a_3^{02} a_{02}^2 + a_3^{03} a_{03}^2$ $1 = a_3^{01} a_{01}^3 + a_3^{02} a_{02}^3 + a_3^{03} a_{03}^3$	<p>Inhomogenes Gleichungssystem mit 9 unbekanntem a_l^{0k}, $k=1,2,3$, $l=1,2,3$</p>
$a_k^{01} a_{01}^l + a_k^{02} a_{02}^l + a_k^{03} a_{03}^l = \delta_k^l$	<p>Verkürzte Schreibweise, $k=1,2,3$, $l=1,2,3$</p>
$a_k^{0i} a_{0i}^{0l} = \delta_k^l$	

Tabelle 7 Gleichungssystem für die Transformationskoeffizienten zwischen einem kartesischen- und einem beliebigen Koordinatensystem

$\mathbf{g}_{01} = \mathbf{A}_{01} \cdot a_1^{01} + \mathbf{A}_{02} \cdot a_1^{02} + \mathbf{A}_{03} \cdot a_1^{03}$	<p>Die ersten drei Gleichungen werden als Vektorsumme in einem kartesischen Koordinatensystem interpretiert.</p>
$\ a_{0l}^k\ = \begin{vmatrix} a_{01}^1 & a_{02}^1 & a_{03}^1 \\ a_{01}^2 & a_{02}^2 & a_{03}^2 \\ a_{01}^3 & a_{02}^3 & a_{03}^3 \end{vmatrix}$	<p>Die drei Vektoren $\mathbf{A}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}$ sind Zeilenvektoren der Matrix $\ a_{0l}^k\$</p>
$a_1^{01} = \frac{[\mathbf{g}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}]}{[\mathbf{A}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}]}$	<p>Die Lösungen für die Koeffizienten, z. B. für a_1^{01}, ergeben sich aus dem Verfahren in Tabelle 5.</p>

Tabelle 8 Berechnung eines Koeffizienten aus den ersten drei Gleichungen. (Analog werden die Gleichungen 4 bis 6 und 7 bis 9 interpretiert).

Die allgemeine Lösung für die Komponenten der Basisvektoren ist:

$a_l^{0k} = \frac{1}{ a_{0l}^k } (-1)^{k+l} U(a_{0k}^l)$	Komponenten des Basisvektors \mathbf{g}_l im kartesischen Koordinatensystem \mathbf{g}_{0l}
$U(a_{0k}^l)$	Unterdeterminante der Matrix $\ a_{0l}^k\ $ zum Element a_{0k}^l
$ a_{0l}^k $	Determinante der Matrix $\ a_{0l}^k\ $
$a_{0l}^k = \frac{1}{ a_l^{0k} } (-1)^{k+l} U(a_k^{0l})$	Umkehrung: Komponenten des kartesischen Basisvektors \mathbf{g}_{0l} im Koordinatensystem der Basisvektoren \mathbf{g}_l

Tabelle 9 Matricelemente der Transformationsmatrizen zwischen einem kartesischen und einem beliebigen Koordinatensystem

2.3.1.1 Beispiel: Ausführliche Berechnung des Koeffizienten a_1^{01}

Weil das Koordinatensystem <i>kartesisch</i> ist, gilt:	
$[\mathbf{A}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}] = a_{0l}^k $	Das Spatprodukt zwischen den drei Vektoren $[\mathbf{A}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}]$ ist die Determinante $ a_{0l}^k $ der drei Vektoren
$\mathbf{A}_{02} \times \mathbf{A}_{03} = \begin{pmatrix} a_{02}^2 a_{03}^3 - a_{03}^2 a_{02}^3 \\ -a_{01}^2 a_{03}^3 + a_{03}^2 a_{01}^3 \\ a_{01}^2 a_{02}^3 - a_{02}^2 a_{01}^3 \end{pmatrix}$	Berechnung des Vektorprodukts $\mathbf{A}_{02} \times \mathbf{A}_{03}$ aus der Unterdeterminanten
$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ a_{01}^2 & a_{02}^2 & a_{03}^2 \\ a_{01}^3 & a_{02}^3 & a_{03}^3 \end{vmatrix}$	Man bildet dazu eine Matrix mit 1,-1,1 in der ersten, und den beiden zu multiplizierenden Vektoren in der zweiten und dritten Zeile.
$[\mathbf{g}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}] = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{02}^2 a_{03}^3 - a_{03}^2 a_{02}^3 \\ -a_{01}^2 a_{03}^3 + a_{03}^2 a_{01}^3 \\ a_{01}^2 a_{02}^3 - a_{02}^2 a_{01}^3 \end{pmatrix} = a_{02}^2 a_{03}^3 - a_{03}^2 a_{02}^3$	Das Spatprodukt mit dem kartesischen Einheitsvektor wählt die entsprechende Komponente aus dem Vektorprodukt.
$U(a_{01}^1) = a_{02}^2 a_{03}^3 - a_{03}^2 a_{02}^3$	Unterdeterminante der Matrix $\ a_{0l}^k\ $ zum Element a_{01}^1
$a_1^{01} = \frac{[\mathbf{g}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}]}{[\mathbf{A}_{01}, \mathbf{A}_{02}, \mathbf{A}_{03}]} = \frac{1}{ a_{0l}^k } U(a_{01}^1)$	Lösung für die Komponente a_1^{01}

Tabelle 10 Berechnung der Komponente a_1^{01} mit Hilfe der Regeln für Produkte zwischen Vektoren in einem kartesischen Koordinatensystem

2.4 Das ko- und kontravariante Koordinatensystem

Zu jedem Koordinatensystem, mit beliebigen Längen der Basisvektoren und beliebigen Winkeln zwischen ihnen, kann man ein zweites einführen, mit der Eigenschaft, dass sich die Skalarprodukte, die aus den Basisvektoren des einen mit denen des anderen gebildet werden, so verhalten, als wären es Skalarprodukte zwischen kartesischen Einheitsvektoren. Zwei Koordinatensysteme mit dieser Eigenschaft nennt man ko- und kontravariant.

Skalarprodukte sind in der Physik wichtig, z. B. ist die Phase einer ebenen Welle an einem bestimmten Ort das Skalarprodukt aus dem Wellenvektor, der die Ausbreitungsrichtung der Welle zeigt, und dem Ortsvektor von einem Ursprung zum Ort der Beobachtung. Wenn die Verteilung der Orte die Wahl eines nicht kartesischen Koordinatensystems nahe legt, dann ist es sinnvoll, z. B. die Ortsvektoren im ko- und den Ausbreitungsvektor im kontravarianten Koordinatensystem zu formulieren. Schiefwinklige Koordinatensysteme werden z. B. eingeführt, um die der Orte der Teilchen in nicht kubischen Kristallen zu beschreiben.

$\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$	Basisvektoren des kovarianten Koordinatensystems, erkennbar an tiefgestellten Indizes
$\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^2, \mathbf{g}^3$	Basisvektoren des kontravarianten Koordinatensystems, erkennbar an hochgestellten Indizes
$\mathbf{g}^l \cdot \mathbf{g}_k = \delta_k^l$	Diese Forderung für das Skalarprodukt zwischen den ko- und kontravarianten Basisvektoren definiert den Zusammenhang zwischen beiden Basissystemen.

Tabelle 11 Ko- und kontravariante Basisvektoren

$\mathbf{g}^k = \frac{\mathbf{g}_l \times \mathbf{g}_m}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]} \quad (k, l, m) = (1, 2, 3) \text{ zykl.}$	Berechnung der kontravarianten Basisvektoren aus den kovarianten
$\mathbf{g}^1 = \frac{\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}$ $\mathbf{g}^2 = \frac{\mathbf{g}_3 \times \mathbf{g}_1}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}$ $\mathbf{g}^3 = \frac{\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]}$	Ausführlich
$\mathbf{g}_k = \frac{\mathbf{g}^l \times \mathbf{g}^m}{[\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3]} \quad (k, l, m) = (1, 2, 3) \text{ zykl.}$	Umkehrung dazu: Berechnung der kovarianten Basisvektoren aus den kontravarianten

Tabelle 12 Berechnung der kontravarianten Basisvektoren aus den kovarianten und umgekehrt

Für beide Systeme gilt:

- Sind die Basisvektoren des kovarianten Koordinatensystems linear unabhängig, dann sind es auch die des kontravarianten Systems.
- Bilden die Basisvektoren des kovarianten Koordinatensystems ein Rechtssystem, dann bilden es auch die des kontravarianten Systems
- Für die Spatvolumina in beiden Koordinatensystemen gilt:

$[\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^2, \mathbf{g}^3] \cdot [\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3] = 1$	Das Spatprodukt im kovarianten Basissystem ist der Kehrwert des Spatprodukts im kontravarianten Basissystem
---	---

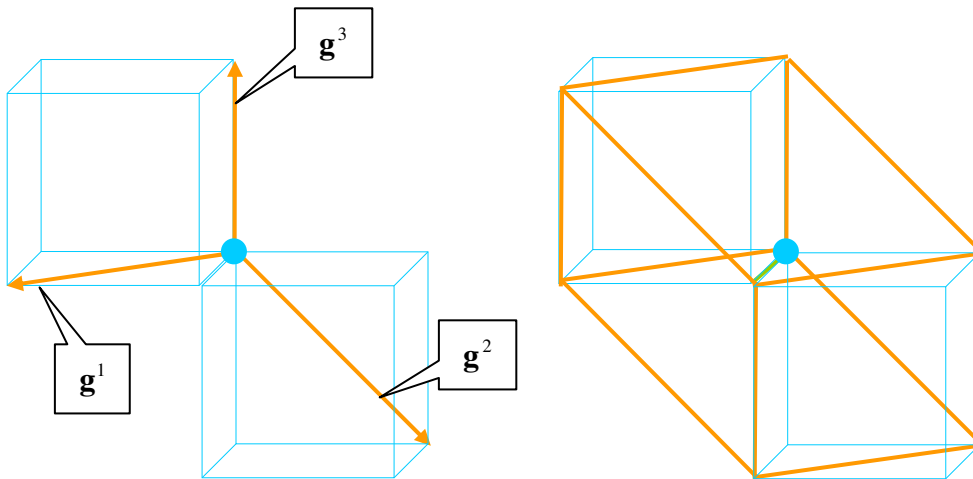


Abbildung 2 Basisvektoren des kontravarianten Koordinatensystems zum kovarianten Koordinatensystem der Abbildung 1. Die Kanten der Würfel entsprechen wieder den kartesischen Basisvektoren. Rechts: „Spat“ aus den kontravarianten Basisvektoren.

2.4.1 Die Metrik-Koeffizienten

Zur Erweiterung der Definition der ko- und kontravarianten Basisvektoren auf Räume mit Dimension größer als drei beschreibt man die kontravarianten Basisvektoren als *Linearkombination* aus den kovarianten. Die Transformationskoeffizienten heißen „Metrik-Koeffizienten“.

$\mathbf{g}^l \cdot \mathbf{g}_k = \delta_k^l$	Definition der ko- und kontravarianten Basisvektoren
$\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^2, \mathbf{g}^3$	Basisvektoren des kontravarianten Koordinatensystems.
$\mathbf{g}^1 = g^{11} \mathbf{g}_1 + g^{12} \mathbf{g}_2 + g^{13} \mathbf{g}_3$ $\mathbf{g}^2 = g^{21} \mathbf{g}_1 + g^{22} \mathbf{g}_2 + g^{23} \mathbf{g}_3$ $\mathbf{g}^3 = g^{31} \mathbf{g}_1 + g^{32} \mathbf{g}_2 + g^{33} \mathbf{g}_3$	Aufstellung des kontravarianten Koordinatensystems im kovarianten. Die neun Transformationskoeffizienten $g^{11}, g^{12}, g^{13}, \dots, g^{33}$ definieren das beliebige Koordinatensystem.
$\mathbf{g}^k = g^{kl} \mathbf{g}_l$	Schreibweise mit Buchstabenindizes und Summationskonvention

Tabelle 13 Basisvektoren des kontravarianten Koordinatensystems als Linearkombination aus Basisvektoren eines kovarianten Systems

Nach skalarer Multiplikation der Gleichungen mit den kovarianten Basisvektoren folgen die Metrik-Koeffizienten, wenn man für die Skalarprodukte zwischen ko- und kontravarianten Basisvektoren gemäß der Definition null oder eins einsetzt:

$\mathbf{g}^1 \mathbf{g}^1 = g^{11}$	$\mathbf{g}^1 \mathbf{g}^2 = g^{12}$	$\mathbf{g}^1 \mathbf{g}^3 = g^{13}$	Die Skalarprodukte sind kommutativ, deshalb ist die Matrix $\ g^{kl}\ $ symmetrisch, mit sechs unabhängigen Komponenten.
$\mathbf{g}^2 \mathbf{g}^1 = g^{12}$	$\mathbf{g}^2 \mathbf{g}^2 = g^{22}$	$\mathbf{g}^2 \mathbf{g}^3 = g^{23}$	
$\mathbf{g}^3 \mathbf{g}^1 = g^{13}$	$\mathbf{g}^3 \mathbf{g}^2 = g^{23}$	$\mathbf{g}^3 \mathbf{g}^3 = g^{33}$	

Tabelle 14 Kontravariante Metrik-Koeffizienten

Aus der Definition der Skalarprodukte folgt, dass die kontravarianten Metrik-Koeffizienten die Information über die Beträge der kontravarianten Basisvektoren und die Winkel zwischen ihnen enthalten:

$ \mathbf{g}^1 = \sqrt{g^{11}}$	$\cos(\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^2) = \frac{g^{12}}{\sqrt{g^{11} \cdot g^{22}}}$	$\cos(\mathbf{g}^1, \mathbf{g}^3) = \frac{g^{13}}{\sqrt{g^{11} \cdot g^{33}}}$
	$ \mathbf{g}^2 = \sqrt{g^{22}}$	$\cos(\mathbf{g}^2, \mathbf{g}^3) = \frac{g^{23}}{\sqrt{g^{22} \cdot g^{33}}}$
		$ \mathbf{g}^3 = \sqrt{g^{33}}$

Tabelle 15 Beträge der kontravarianten Basisvektoren und die Winkel zwischen ihnen

Die analogen Gleichungen gelten bei Formulierung der kovarianten Basisvektoren im kontravarianten System, aus beiden Gleichungen, ineinander eingesetzt wie in bei der Berechnung der Matrixelemente zur Transformation auf orthogonale Koordinaten.

$\mathbf{g}_k = g_{kl} \mathbf{g}^l$	kovariante Basisvektoren im kontravarianten System
$\mathbf{g}^k = g^{kl} \mathbf{g}_l$	kontravariante Basisvektoren im kovarianten System

Analog zu Tabelle 7 und Tabelle 9 gilt für den Zusammenhang zwischen beiden Komponenten:

$g^{kl} \cdot g_{lm} = \delta_m^k$	Orthogonalitätsrelation zwischen den ko- und kontravarianten Metrik-Koeffizienten
$g^{kl} = \frac{1}{ g_{kl} } (-1)^{k+l} U(g_{kl})$	Kontravariante Metrik-Koeffizienten, berechnet aus den kovarianten
$g_{kl} = \frac{1}{ g^{kl} } (-1)^{k+l} U(g^{kl})$	Kovariante Metrik-Koeffizienten, berechnet aus den kontravarianten

Tabelle 16 Zusammenhang zwischen der ko- und kontravarianten Metrik-Koeffizienten

Die Metrik Koeffizienten sind deshalb so wichtig, weil sie die Information über die Längen der Basisvektoren und der Winkel zwischen ihnen enthalten. Sie ersetzen somit die Angabe der Koordinaten der drei kovarianten Basisvektoren in einem orthonormierten Koordinatensystem, die auch neun Zahlen erfordern würde.

Wenn in der Anwendung oft Skalarprodukte zu bilden sind, dann ist in schiefwinkligen oder orthogonalen, aber nicht normierten Koordinatensystemen die Formulierung der Vektoren in ko- bzw. kontravarianten Basen der Angabe der kartesischen Koordinaten vorzuziehen. Die Berechnung der Skalarprodukte wird, mit Nutzung der Metrik Koeffizienten, besonders einfach.

2.4.2 Beziehungen zwischen den ko- und kontravarianten Vektorkomponenten

Multiplikation mit einem passenden Metrik Koeffizienten wandelt, für einen beliebigen Vektor, eine kovariante in eine kontravariante Komponente um:

$\mathbf{A} = A^1 \mathbf{g}_1 + A^2 \mathbf{g}_2 + A^3 \mathbf{g}_3 = A_1 \mathbf{g}^1 + A_2 \mathbf{g}^2 + A_3 \mathbf{g}^3$	Vektor \mathbf{A} im ko- und kontravarianten Koordinatensystem
$\mathbf{A} = A^k \mathbf{g}_k = A_k \mathbf{g}^k$	
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{g}^l = A^k \mathbf{g}_k \cdot \mathbf{g}^l = A_k \mathbf{g}^k \cdot \mathbf{g}^l$	Skalare Multiplikation mit dem kontravarianten Basisvektor $\cdot \mathbf{g}^l$ zeigt, wegen der Orthogonalität der ko- und kontravarianten Basisvektoren, die Beziehung zwischen den ko- und kontravarianten Komponenten
$A^k \cdot \delta_k^l = A_k g^{kl}$	
$A^l = g^{lk} A_k$	Multiplikation mit einem entsprechenden Metrik-Koeffizienten wandelt eine kovariante in eine kontravariante Komponente um, „zieht den Index herauf“
$A_l = g_{lk} A^k$	Anlog: Umwandlung einer Kontra- in eine kovariante Komponente, der Index wird „heruntergezogen“.

Tabelle 17 Herauf- und Herabziehen eines Index: Übergang von ko- zu kontravarianten Komponenten durch Multiplikation mit Metrik-Koeffizienten

2.5 Transformation der ko- und kontravarianten Komponenten bei Wechsel des Bezugssystems

Die Transformationseigenschaften bei Wechsel des Koordinatensystems für ko- und kontravarianten Basisvektoren ist eine charakteristische Eigenschaft dieser Basissysteme. Die Form des Transformationsgesetzes für die Komponenten eines Vektors dient schließlich zur Definition eines Tensors.

Ein beliebiger Vektor werde zunächst im kovarianten Koordinatensystem formuliert. Dann wird das Koordinatensystem gewechselt. Aus dem Transformationsgesetz für die kovarianten Basisvektoren folgt das Transformationsgesetz für die kontravarianten Komponenten des Vektors. Man erkennt, dass sich die kontravarianten Basisvektoren wie die kontravarianten Komponenten transformieren.

Die Basisvektoren und Komponenten bei Aufstellung eines Vektors im neuen Koordinatensystem, \bar{B} , werden durch einen Querstrich gekennzeichnet. Das ursprüngliche Koordinatensystem sei mit B bezeichnet

Aufstellung in kovarianten Basisvektoren:

Vektor A aufgestellt in kovarianten Basisvektoren, kontravarianten Komponenten	
$\mathbf{A} = A^k \mathbf{g}_k$	aufgestellt im Koordinatensystem B .
$\mathbf{A} = \bar{A}^k \bar{\mathbf{g}}_k$	aufgestellt im Koordinatensystem \bar{B}

Tabelle 18 Aufstellung eines beliebigen Vektors in zwei Koordinatensystemen B und \bar{B}

Transformation der kovarianten Basisvektoren	
$\mathbf{g}_k = \bar{a}_k^l \bar{\mathbf{g}}_l$	Aufstellung der kovarianten Basisvektoren im System B in kovarianten Basisvektoren im Koordinatensystem \bar{B}
$\bar{\mathbf{g}}_k = \underline{a}_k^l \mathbf{g}_l$	Aufstellung der kovarianten Basisvektoren im Koordinatensystem \bar{B} in Richtung der kovarianten Basen im Koordinatensystem B : Transformationsgesetz der kovarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}

Tabelle 19 Aufstellung der kovarianten Basisvektoren in zwei Koordinatensystemen B und \bar{B}

Analog zu dem in Tabelle 6 und Tabelle 7 gezeigten Weg erhält man eine Beziehung zwischen den Transformationskoeffizienten der Basisvektoren, wenn man in $\bar{\mathbf{g}}_k = \underline{a}_k^l \mathbf{g}_l$ $\mathbf{g}_l = \bar{a}_l^m \bar{\mathbf{g}}_m$ einsetzt:

$\bar{\mathbf{g}}_k = \underline{a}_k^l \mathbf{g}_l = \underline{a}_k^l \bar{a}_l^m \bar{\mathbf{g}}_m$	Aus dem Vergleich der Koeffizienten vor gleichen Basisvektoren folgt:
$\underline{a}_k^l \bar{a}_l^m = \delta_k^m$	Neun Gleichungen für $k, m = 1, 2, 3$
Lösungen dieses Gleichungssystem für die Koeffizienten der Transformationsmatrix der Basisvektoren	
$\underline{a}_l^k = \frac{1}{ \bar{a}_l^k } (-1)^{k+l} U(\bar{a}_{0k}^l)$	Koeffizienten der kovarianten Basisvektoren aus \bar{B} bei Aufstellung im System B
$\bar{a}_l^k = \frac{1}{ \underline{a}_l^k } (-1)^{k+l} U(\underline{a}_{0k}^l)$	Koeffizienten der kovarianten Basisvektoren aus B bei Aufstellung im System \bar{B}

Tabelle 20 Transformationsmatrix für die kovarianten Basisvektoren

Das Transformationsgesetz für die kontravarianten Komponenten eines beliebigen Vektors folgt

$\mathbf{A} = A^k \mathbf{g}_k$	Vektor \mathbf{A} in kovarianten Basisvektoren, aufgestellt im System Koordinatensystem B .
$\mathbf{A} = A^k \bar{a}_k^l \bar{\mathbf{g}}_l$	$\mathbf{g}_k = \bar{a}_k^l \bar{\mathbf{g}}_l$ eingesetzt
$\mathbf{A} = \bar{A}^k \bar{\mathbf{g}}_k$	Vektor \mathbf{A} in kovarianten Basisvektoren, aufgestellt im System Koordinatensystem \bar{B} .
Der Vergleich der Koeffizienten vor gleichen Vektoren $\bar{\mathbf{g}}_k$, $k=1,2,3$, zeigt:	
$\bar{A}^k = \bar{a}_l^k A^l$	Transformationsgesetz für die kontravarianten Komponenten eines Vektors beim Übergang in das Koordinatensystem \bar{B}

Tabelle 21 Aufstellung eines beliebigen Vektors und seiner kovarianten Basisvektoren in zwei Koordinatensystemen B und \bar{B}

Aufstellung in kontravarianten Basisvektoren:

Transformation der kontravarianten Basisvektoren	
$\mathbf{g}^k = \underline{b}_l^k \bar{\mathbf{g}}^l$	Aufstellung der kontravarianten Basisvektoren im System B in kontravarianten Basen im Koordinatensystem \bar{B}
$\bar{\mathbf{g}}^k = \bar{b}_l^k \mathbf{g}^l$	Aufstellung der kontravarianten Basisvektoren im Koordinatensystem \bar{B} in Richtung der kontravarianten Basen im Koordinatensystem B :
	Transformationsgesetz für die kontravarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}

Tabelle 22 Aufstellung der kovarianten Basisvektoren in zwei Koordinatensystemen B und \bar{B}

Es wird nun gezeigt, dass die - zunächst noch unbekannt - Koeffizienten \bar{b}_l^k und die Koeffizienten \bar{a}_k^l der Transformation der kontravarianten Komponenten (Tabelle 21) identisch sind:

$\bar{\mathbf{g}}^k = \bar{b}_m^k \mathbf{g}^m$	Aufstellung der kontravarianten Basisvektoren im Koordinatensystem \bar{B} in Richtung der kontravarianten Basen im Koordinatensystem B .
Multiplikation mit dem kovarianten Basisvektor $\cdot \bar{\mathbf{g}}_l$	
$\bar{\mathbf{g}}^k \cdot \bar{\mathbf{g}}_l = \bar{b}_m^k \mathbf{g}^m \cdot \bar{\mathbf{g}}_l = \delta_l^k$	ko- und kontravariante Basisvektoren sind in allen Koordinatensystemen orthogonal.
$\bar{b}_m^k \mathbf{g}^m \cdot \underline{a}_l^n \mathbf{g}_n = \bar{b}_m^k \underline{a}_l^n \delta_m^n = \delta_l^k$	Mit Substitution $\bar{\mathbf{g}}_l = \underline{a}_l^n \mathbf{g}_n$, wegen $\mathbf{g}^m \cdot \mathbf{g}_n = \delta_n^m$
$\bar{b}_m^k \underline{a}_l^m = \delta_l^k$	
$\bar{a}_m^k \underline{a}_l^m = \delta_l^k$	Vergleich mit der Beziehung zwischen den kontravarianten Komponenten der kovarianten Basisvektoren (Tabelle 20, mit geeigneter Wahl der Indizes)
Aus dem Koeffizientenvergleich für \underline{a}_l^m in den beiden letzten Gleichungen folgt:	
$\bar{b}_m^k = \bar{a}_m^k$	Bei Übergang in das System \bar{B} transformieren sich die kontravarianten Basisvektoren wie die kontravarianten Komponenten eines Vektors (Tabelle 21)

Tabelle 23 Transformation der kontravarianten Basisvektoren.

Zusammenfassend: Die Bezeichnung ko- bzw. kontravariant zeigt das Transformationsverhalten bei Wechsel des Koordinatensystems. Es gilt:

$\bar{A}^k = \bar{a}_l^k A^l$	Die kontravarianten Komponenten eines Vektors transformieren sich wie die kontravarianten Basisvektoren
$\bar{\mathbf{g}}^k = \bar{a}_l^k \mathbf{g}^l$	
$\bar{A}_k = \underline{a}_k^l A_l$	Die kovarianten Komponenten eines Vektors transformieren sich wie die kovarianten Basisvektoren
$\bar{\mathbf{g}}_k = \underline{a}_k^l \mathbf{g}_l$	

Tabelle 24 Definition von ko- und kontravarianten Größen durch ihr Transformationsverhalten bei Wechsel des Koordinatensystems.

(Man beachte aber, dass eine Aufstellung in kontravarianten Koordinaten eine kovariante Basis voraussetzt und umgekehrt.)

Transformiert sich eine einfach indizierte Größe nach diesen Gesetzen, dann sind A^l die kontravarianten Komponenten eines Tensors 1. Stufe, analog A_l die kovarianten Komponenten. Dieses Transformationsverhalten ist eine für Tensoren charakteristische Eigenschaft.

3 Tensoren höherer Stufe

Die Eigenschaft, Objekte durch ihre Transformationseigenschaft bei Wechsel des Koordinatensystems zu charakterisieren, dehnt den Begriff des Tensors sowohl auf Skalare (z. B. Änderung einer Längenangabe), Vektoren aus R^2 und R^3 aus. Bei geeigneter Konstruktion lässt sich die oben angegebene Transformationsvorschrift auf Vektoren eines höher-dimensionalen Vektorraums ausdehnen. Diese Vektoren werden als „Tensoren höherer Stufe“ bezeichnet. Der folgende Abschnitt zeigt die Konstruktionsvorschrift, zunächst für Tensoren zweiter Stufe.

3.1 Tensoren 2. Stufe

Im R^3 seien zwei Vektoren gegeben. Für diese wird ein neues Produkt, das „tensorielle Produkt“ eingeführt. Es ist das Ziel bei der im folgenden angegebenen Vorschrift, dass das Produkt die Eigenschaften eines Elements eines Vektorraums trägt.

\mathbf{x}, \mathbf{y}	Vektoren aus R^3
$\mathbf{T} = \mathbf{xy}$	Tensorielles Produkt
Das tensorielle Produkt genüge dem Distributivgesetz:	
$\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$	Vektoren aus R^3
$\mathbf{x}(\mathbf{y} + \mathbf{z}) = \mathbf{xy} + \mathbf{xz}$	Distributivgesetz
$(\mathbf{x} + \mathbf{y})\mathbf{z} = \mathbf{xz} + \mathbf{yz}$	
Außerdem gelte das Assoziativgesetz:	
\mathbf{x}, \mathbf{y}	Vektoren aus R^3
α	Skalar
$(\alpha\mathbf{x})\mathbf{y} = \mathbf{x}(\alpha\mathbf{y}) = \alpha\mathbf{xy}$	Assoziativgesetz

Tabelle 25 Definition des tensoriellen Produkts

Das tensorielle Produkt kann auf Produkte zwischen Basisvektoren zurückgeführt werden, wenn die Vektoren \mathbf{x} , \mathbf{y} in einer Basis aufgestellt sind:

$\mathbf{x} = x^k \mathbf{g}_k$ $\mathbf{y} = y^l \mathbf{g}_l$	Linearkombinationen für \mathbf{x} und \mathbf{y} aus kovarianten Basisvektoren eines gemeinsamen Koordinatensystems. (Die Basisvektoren, z. B. für beide oder nur für einen, könnten aber auch zum kontravarianten System gehören. s. u.)
\mathbf{g}_k	$k=1,2,3$ Basisvektoren für \mathbf{x} , \mathbf{y}
$\mathbf{T} = \mathbf{xy} = (x^k \mathbf{g}_k)(y^l \mathbf{g}_l) = x^k y^l \mathbf{g}_k \mathbf{g}_l = x^k y^l \gamma_{kl}$	Linearkombination aus neun tensoriellen Produkten der Basisvektoren, umgeformt nach den Gesetzen in Tabelle 25.
$\gamma_{kl} = \mathbf{g}_k \mathbf{g}_l$	Diese Produkte bilden eine doppelt indizierte kovariante Basis für den Raum von \mathbf{T}
$\gamma^{kl} = \mathbf{g}^k \mathbf{g}^l$	kontravariante Basis, falls \mathbf{x} und \mathbf{y} in kontravarianten Basisvektoren geben sind
$\gamma_k{}^l = \mathbf{g}_k \mathbf{g}^l$	Gemischte Basis, falls nur die Basisvektoren von \mathbf{y} oder
$\gamma_l{}^k = \mathbf{g}^k \mathbf{g}_l$	nur von \mathbf{x} zum kontravarianten System gehört
$(\gamma_{kl}) = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{pmatrix}$	Die Produkte können zu einem quadratischen Schema zusammengefasst werden
Formulierung des Tensors bei unterschiedlicher Wahl der Basis:	
$\mathbf{T} = t^{kl} \mathbf{g}_k \mathbf{g}_l = t_l{}^k \mathbf{g}^k \mathbf{g}_l = t_k{}^l \mathbf{g}_k \mathbf{g}^l = t_{kl} \mathbf{g}^k \mathbf{g}^l$	Beliebiges Element des Vektorraums, die Formulierung zeigt das Transformationsverhalten der gewählten Basis, ko- oder kontravariant.

Tabelle 26 Formulierung eines Tensors 2. Stufe

Bei praktischen Anwendungen kann das Koordinatensystem z. B. durch die Richtung einer Feldstärke (etwa der Gravitationskraft) vorgegeben sein. Es sei z. B. die Verformung eines Körpers in einer bestimmten Lage im Feld von Interesse.

3.1.1 Transformation der Komponenten eines Tensors 2. Stufe bei Wechsel des Bezugssystems

Bei Wechsel des Bezugssystems werden die Basisvektoren eines Tensors im neuen Koordinatensystem formuliert. Der Tensor selbst bleibt unverändert, deshalb ändern sich seine Koordinaten. Die Transformation der Komponenten erhält man analog zu der Transformation der ko- und kontravarianten Komponenten bei Wechsel des Bezugssystems für Vektoren durch bei Vergleich der Koeffizienten des im alten und neuen System formulierten Tensors. Man formuliert die dazu alten Basisvektoren im neuen Bezugssystem:

Transformation der kovarianten Basisvektoren	
$\bar{\mathbf{g}}_i = \underline{a}_i^j \mathbf{g}_j$	Transformationsgesetz der kovarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}
$\mathbf{g}_i = \bar{a}_i^j \bar{\mathbf{g}}_j$	Rücktransformation
$\bar{\mathbf{g}}^k = \bar{a}_l^k \mathbf{g}^l$	Transformationsgesetz für die kontravarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}
$\mathbf{g}^k = a_l^k \bar{\mathbf{g}}^l$	Rücktransformation

Tabelle 27 Transformationsgesetz ko- und kontravarianter Basisvektoren (vgl. Tabelle 24)

$\mathbf{T} = \bar{t}^{ij} \bar{\mathbf{g}}_i \bar{\mathbf{g}}_j = t^{kl} \mathbf{g}_k \mathbf{g}_l$	Tensor 2. Stufe in beiden Koordinatensystemen formuliert
$\bar{t}^{ij} \bar{\mathbf{g}}_i \bar{\mathbf{g}}_j = t^{kl} \bar{a}_k^i \bar{a}_l^j \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j$	Die Basisvektoren $\bar{\mathbf{g}}_i$ im System \bar{B} werden mit \mathbf{g}_j aus dem Koordinatensystem B formuliert.

Tabelle 28 Transformation eines Tensors 2. Stufe mit „oberen Indizes“

Das Transformationsgesetz für die Komponenten folgt aus dem Koeffizientenvergleich vor gleichen Produkten $\bar{\mathbf{g}}_i \bar{\mathbf{g}}_j$:

$\bar{t}^{ij} = \bar{a}_k^i \bar{a}_l^j t^{kl}$	Jeder obere Index transformiert sich wie ein kontravarianter Vektor
Mit analogen Rechnungen folgt:	
$\bar{t}_{ij} = \underline{a}_i^k \underline{a}_j^l t_{kl}$	Jeder untere Index transformiert sich wie ein kovarianter Vektor
$\bar{t}^i_j = \bar{a}_k^i \underline{a}_j^l t^k_l$	Gemischte Indizes:
$\bar{t}_i^j = \underline{a}_i^k \bar{a}_l^j t^l_k$	Jeder obere Index transformiert sich wie ein kontravarianter Vektor und jeder untere wie ein kovarianter

Tabelle 29 Transformation der Komponenten eines Tensors 2. Stufe mit unteren, oberen und gemischten Indizes bei Wechsel zum System \bar{B}

Die Umkehrung dazu:	
$t_{ij} = \bar{a}_i^k \bar{a}_j^l \bar{t}_{kl}$	Komponenten des Tensors im alten Koordinatensystem B als Funktion der Komponenten des Tensors im neuen Systems \bar{B}
$t^{ij} = \underline{a}_k^i \underline{a}_l^j \bar{t}^{kl}$	
$t^i_j = \underline{a}_k^i \bar{a}_j^l \bar{t}^k_l$	
$t_i^j = \bar{a}_i^k \underline{a}_l^j \bar{t}_k^l$	

Tabelle 30 Rücktransformationen bei Wechsel des Koordinatensystems

Diese Beziehungen werden bei Tensoren höherer Stufe entsprechend erweitert.

3.1.2 Der Metriktensor

Die verjüngende Multiplikation eines beliebigen Vektors mit dem Metriktensor von links oder von rechts reproduziert den Vektor: Der Metriktensor verhält sich also, bezüglich dieser Multiplikation, wie ein Eins-Element.

$\mathbf{E} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{a}$	Das verjüngende Produkt des Metriktensors \mathbf{E} mit einem Vektor \mathbf{a} von links oder von rechts ergibt den Vektor \mathbf{a}
Beweis:	
$\mathbf{E} = g^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j$	Metriktensor in kontravarianten Komponenten, „kontravarianter Metriktensor“
$\mathbf{a} = a^k \mathbf{g}_k$	Vektor in kontravarianten Komponenten
Wegen der Orthogonalitätsrelation zwischen den Metrik-Koeffizienten (Tabelle 16) gilt:	
$\mathbf{E} \cdot \mathbf{a} = g^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \cdot a^k \mathbf{g}_k = g^{ij} a^k \mathbf{g}_i g_{jk}$ $= a^k \mathbf{g}_i \delta_k^i = a^k \mathbf{g}_k = \mathbf{a}$	Verjüngende Multiplikation des Vektors \mathbf{a} von rechts (\cdot)
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{E} = a^k \mathbf{g}_k \cdot g^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j = g^{ij} a^k g_{ki} \mathbf{g}_j$ $= g^{ij} a^k g_{ik} \mathbf{g}_j = a^k \mathbf{g}_j \delta_j^k = a^k \mathbf{g}_k = \mathbf{a}$	Verjüngende Multiplikation des Vektors \mathbf{a} von links

Tabelle 31 Multiplikation des Metriktensors mit einem Vektor

Analoges gilt für den Metriktensor in kovarianten Komponenten, den „kovarianter Metriktensor“. Der gemischte Metriktensor ist das Kronecker Symbol, er wird auch „Kronecker Tensor“ genannt.

3.1.3 Der Spannungstensor (Stress Tensor)

Ein Körper ist durch seine Oberfläche nach außen abgegrenzt. Wenn auf den Körper Kräfte wirken, dann gibt es zwei Fälle zu unterscheiden:

- Die Kräfte entstehen durch die Massen im Innern des Körpers, bei der Gravitationskraft und den Trägheitskräften bei beschleunigter Bewegung. Die Kräfte sind, bei Annahme konstanter Dichte, zum Volumen proportional.
- Die Kräfte werden durch das den Körper umgebende Material auf den Körper übertragen, und das geht nur über die Oberfläche. Diese Kräfte sind proportional zur Oberfläche. Bezogen auf die Fläche vom Betrag eins werden sie als Spannung (Stress) bezeichnet.

Der Spannungstensor formuliert die durch die Oberflächen übertragenen Kräfte. Homogen wird die Spannung genannt, wenn die Kräfte auf die Oberflächen eines Probe-Elements unabhängig vom Ort dieses Elements sind.

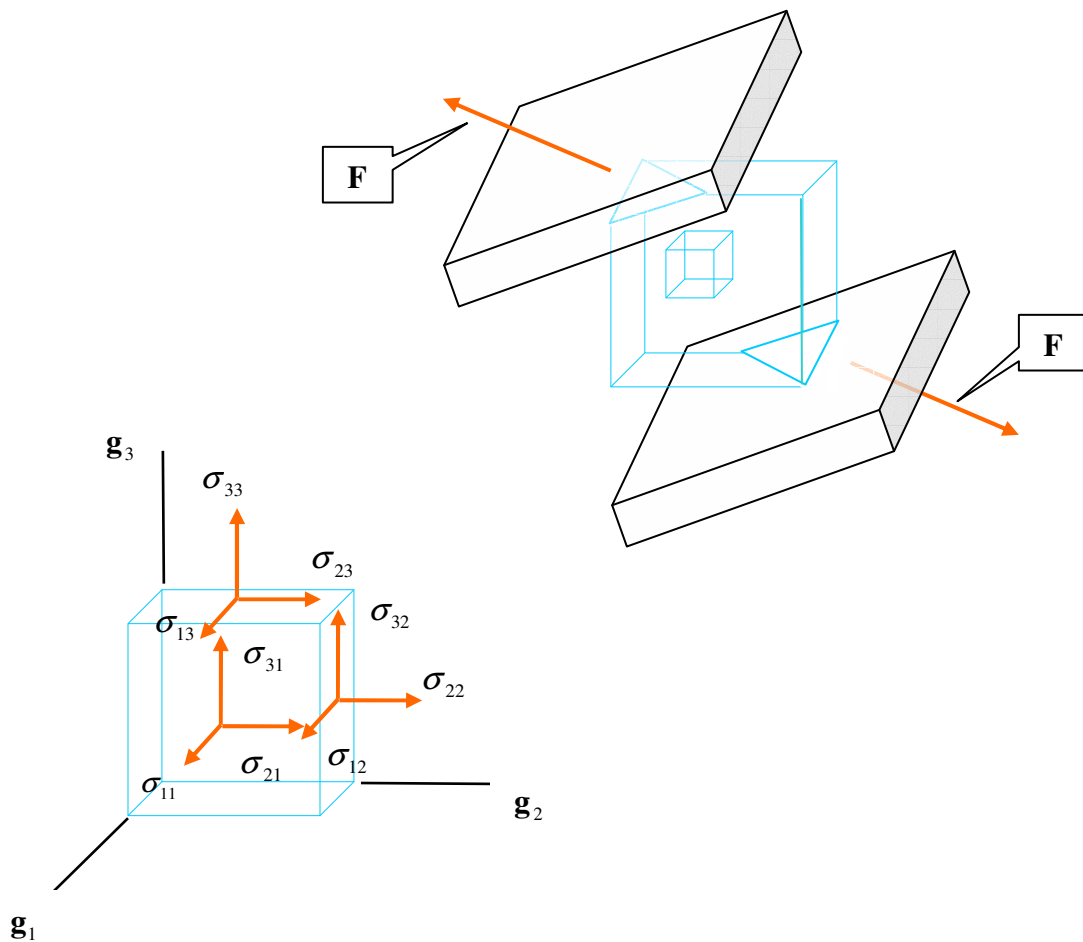


Abbildung 3 Oben rechts: Eingespannter Körper, auf die Platten wirke die Kraft \mathbf{F} (die Platten seien an den Körper geklebt). Klein eingezeichnet ist der Probe-Würfel. Unten links: Kräfte auf

den Probewürfel, seine Kantenlängen seien eins. Die eingezeichneten Kraftkomponenten σ_{ik} auf die Flächen vom Betrag eins sind die Komponenten des Spannungstensors.

Zur Veranschaulichung kann man sich vorstellen, dass die oben eingezeichneten Vektoren für σ_{ik} die Auslenkung von Federwaagen anzeigen, mit denen die entsprechenden Flächen in den Ruhelagen gehalten werden. Ohne äußere Kräfte zeigen alle null.

Setzt man den Ursprung des Koordinatensystems in die Mitte des Probewürfels, dann zeigt ein positives Vorzeichen von σ_{ik} , dass an der Fläche senkrecht zu \mathbf{g}_k das Material außerhalb des Würfels das Material innerhalb in Richtung von $+\mathbf{g}_i$ zieht. Das gilt für die Flächen an Achsenabschnitten mit positiven Koordinaten. An Flächen mit negativen Achsenabschnitten werden die Vorzeichen so gewählt, dass bei homogener Dehnung die am Würfel angreifenden Kräfte kein resultierendes Drehmoment oder eine in einer Richtung beschleunigende Kraft erzeugen.

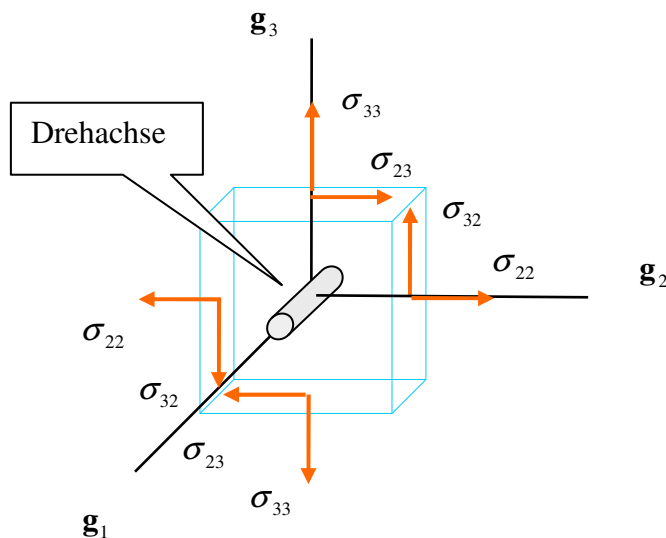


Abbildung 4 Spannungskräfte bei positivem Vorzeichen aller Tensorkomponenten. Die Spannung sei homogen, der Probewürfel sei bezüglich der eingezeichneten Achse Drehmoment frei, es gilt also $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$.

Aus der Abbildung erkennt man, dass Tensorkomponenten mit positivem Vorzeichen eine Dehnung des Volumenelements beschreiben. Die Elemente außerhalb der Diagonalen werden so gewählt, dass auch bei inhomogener Spannung, im Grenzfall verschwindenden Volumens des Probewürfels, die Drehmomente zu vernachlässigen sind. Dazu definiert man:

$\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$	Bedingung für verschwindende Drehmomente
-----------------------------	--

Tabelle 32 Der Spannungstensor ist symmetrisch

Im gezeichneten Beispiel in Abbildung 3 ist die Spannung nur in der Mitte des eingespannten Körpers einigermaßen homogen, nach außen, weit entfernt von den die Spannung verursachenden Auflagen, nehmen die Komponenten des Spannungstensors zu Null ab.

Der Spannungstensor wird meistens mit einem orthonormierten Basissystem formuliert. Ko- und kontravariante Komponenten sind dann identisch, man schreibt gewöhnlich beide Indizes nach unten, σ_{ik} , formal also kovariante Komponenten.

Ein Tensor zweiten Grades verknüpft mit einem verjüngenden Produkt zwei vektorielle Eigenschaften. Diese Eigenschaft muss für die in der Abbildung eingeführten Spannungskomponenten σ_{ik} nachgewiesen werden. Man prüft deshalb für eine gegebene Fläche dA , ob sich der Vektor der Spannung als verjüngendes Produkt des Spannungstensors mit der Flächennormalen formulieren lässt.

Zur Nomenklatur: Für die Kräfte pro Fläche wird das Symbol \mathbf{t} („tensile“) gewählt, \mathbf{F} („force“) steht für die Kraft, \mathbf{A} („area“) für die Normale zur Fläche, \mathbf{n} für die auf eins normierte Flächennormale.

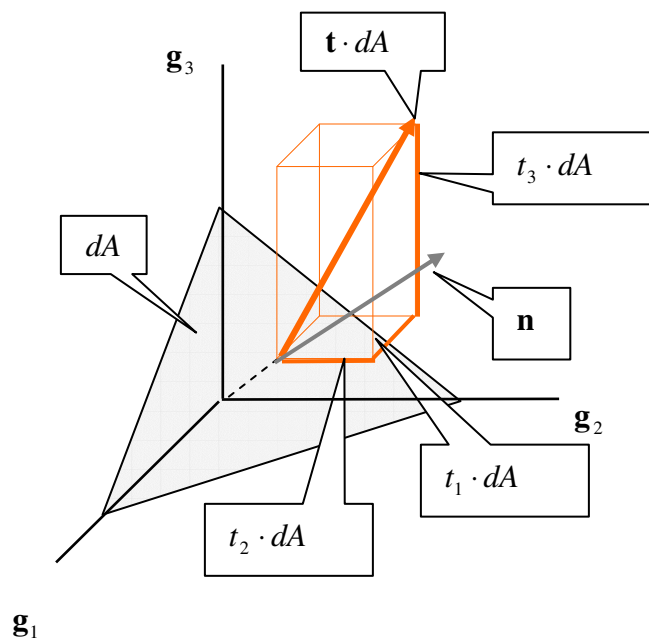


Abbildung 5 An einem Flächenelement dA mit Normale \mathbf{n} wirkende Kraft $\mathbf{t} \cdot dA$ und ihre orthogonalen Komponenten $t_1 \cdot dA$, $t_2 \cdot dA$ und $t_3 \cdot dA$

Man betrachtet ein Volumenelement mit Tetraeder-Form und zerlegt die Kraft auf eine durch ihren auf eins normierten Normalenvektor \mathbf{n} gegebene Fläche dA zunächst nach Komponenten in Richtung der Basisvektoren. Jede dieser Komponenten wird dann als Summe von Kräften

formuliert, die an den drei orthogonalen Flächen $\cdot dA_1, dA_2, dA_3$ angreifen. Schließlich werden alle Flächenelemente in Komponenten n_1, n_2, n_3 der Normalen \mathbf{n} zur Fläche dA formuliert.

$t_1 \cdot dA = \sigma_{11} \cdot dA_1 + \sigma_{12} \cdot dA_2 + \sigma_{13} \cdot dA_3$ $t_2 \cdot dA = \sigma_{21} \cdot dA_1 + \sigma_{22} \cdot dA_2 + \sigma_{23} \cdot dA_3$ $t_3 \cdot dA = \sigma_{31} \cdot dA_1 + \sigma_{32} \cdot dA_2 + \sigma_{33} \cdot dA_3$	Zerlegung der Kraft-Komponente $t_1 \cdot dA$ an der Fläche dA nach Kräften, die an den drei orthogonalen Flächen $\cdot dA_1, dA_2, dA_3$ angreifen. Analoges gilt für $t_2 \cdot dA$ und $t_3 \cdot dA$
---	---

Tabelle 33 Zerlegung der Kraft-Komponenten an der Fläche dA .

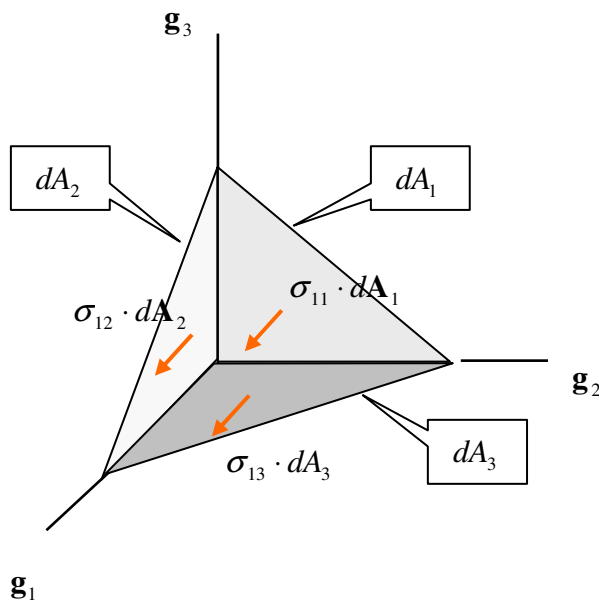


Abbildung 6 Zerlegung der Kraft-Komponente $dt_1 \cdot dA$ an der Fläche dA nach Kräften, die an den drei orthogonalen Flächen $\cdot dA_1, dA_2, dA_3$ angreifen

n_1, n_2, n_3	Komponenten der auf eins normierten Normalen zur Fläche dA
$dA_1 = \frac{1}{2n_2n_3}, dA_2 = \frac{1}{2n_1n_3}, dA_3 = \frac{1}{2n_1n_2}$	Flächen der orthogonalen, rechtwinkligen Dreiecke im orthonormierten Koordinatensystem n_1, n_2, n_3 als Funktion
$dA = \frac{1}{2} \left \left(\frac{1}{n_1} \cdot \mathbf{g}_1 - \frac{1}{n_3} \cdot \mathbf{g}_3 \right) \times \left(\frac{1}{n_2} \cdot \mathbf{g}_2 - \frac{1}{n_3} \cdot \mathbf{g}_3 \right) \right $	Die Fläche dA ist die Hälfte des Betrags des Vektorprodukts aus den Vektoren zweier Seiten
$dA = \frac{1}{2} \left \frac{1}{n_1n_2} \mathbf{g}_3 + \frac{1}{n_1n_3} \mathbf{g}_2 + \frac{1}{n_2n_3} \mathbf{g}_1 \right $	

$dA = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{n_3^2 + n_2^2 + n_1^2}{(n_1 n_2 n_3)^2}} = \frac{1}{2 n_1 n_2 n_3}$

Tabelle 34 Flächeninhalte als Funktion der Komponenten n_1, n_2, n_3 der Normalen zur Fläche dA

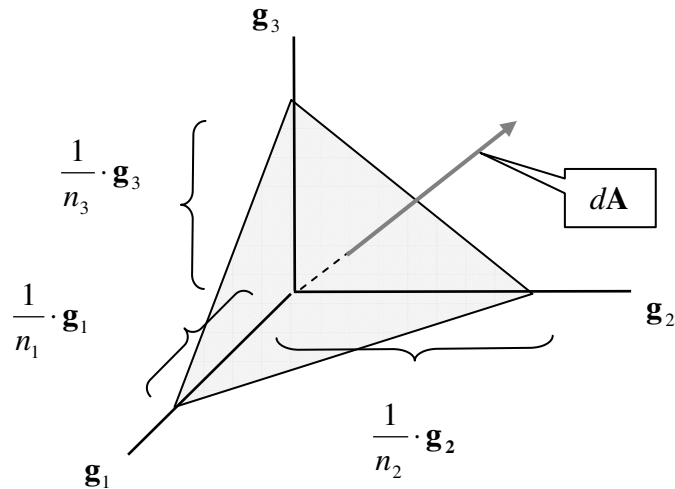


Abbildung 7 Durch die Tetraederfläche mit Normale (n_1, n_2, n_3) erzeugte Achsenabschnitte

Setzt man die Flächeninhalte als Funktion der Komponenten n_1, n_2, n_3 der Normalen in Tabelle 33 ein, so erkennt man, dass der Spannungsvektor \mathbf{t} tatsächlich als verjüngendes Produkt des Normalenvektors \mathbf{n} mit dem Spannungstensor \mathbf{S} aufgefasst werden kann:

$dt_1 \cdot \frac{1}{n_1 n_2 n_3} = \sigma_{11} \cdot \frac{1}{n_2 n_3} + \sigma_{12} \cdot \frac{1}{n_1 n_3} + \sigma_{13} \cdot \frac{1}{n_1 n_2}$ $dt_2 \cdot \frac{1}{n_1 n_2 n_3} = \sigma_{21} \cdot \frac{1}{n_2 n_3} + \sigma_{22} \cdot \frac{1}{n_1 n_3} + \sigma_{23} \cdot \frac{1}{n_1 n_2}$ $dt_3 \cdot \frac{1}{n_1 n_2 n_3} = \sigma_{31} \cdot \frac{1}{n_2 n_3} + \sigma_{32} \cdot \frac{1}{n_1 n_3} + \sigma_{33} \cdot \frac{1}{n_1 n_2}$	<p>Kraftkomponenten der Tabelle 33, die Flächeninhalte sind mit den Komponenten n_1, n_2, n_3 formuliert</p>
$dt_1 = \sigma_{11} \cdot n_1 + \sigma_{12} \cdot n_2 + \sigma_{13} \cdot n_3$ $dt_2 = \sigma_{21} \cdot n_1 + \sigma_{22} \cdot n_2 + \sigma_{23} \cdot n_3$ $dt_3 = \sigma_{31} \cdot n_1 + \sigma_{32} \cdot n_2 + \sigma_{33} \cdot n_3$	<p>Der Spannungsvektor \mathbf{t} ist das verjüngende Produkt des Normalenvektors \mathbf{n} mit dem Spannungstensor \mathbf{S}</p>
$\mathbf{t} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$	

Tabelle 35 Der Spannungstensor in Komponenten-Schreibweise

Man erkennt das verjüngende Produkt, wenn man mit Basisvektoren formuliert. Bei orthonormalen Koordinatensystemen sind die ko- und kontravariante Basen identisch, die Indizes können oben oder unten stehen. Um an die Schreibweise für die allgemeinen Sätze im Tensorkalkül anzuschließen, wird hier mit kovarianter Basis formuliert:

$\mathbf{S} = \sigma^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j$	Spannungstensor
$\mathbf{n} = n^k \mathbf{g}_k$	Normale zur ausgewählten Ebene
$\mathbf{t} = \sigma^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \cdot n^k \mathbf{g}_k$	Spannungsvektor: Verjüngendes Produkt des Tensors mit dem Normalenvektor
$\mathbf{t} = \sigma^{ij} \mathbf{g}_i n^k (\mathbf{g}_j \cdot \mathbf{g}_k)$	Multiplikation mit \mathbf{g}_k zieht den Index k herunter (Tabelle 17)
$\mathbf{t} = \sigma^{ij} n_j \mathbf{g}_i$	
$t^i = \sigma^{ij} n_j$	Komponente des Spannungsvektors

Tabelle 36 Der Spannungstensor in Basis-bezogener Schreibweise

3.1.4 Die Hauptachsentransformation

Der Spannungstensor zeigt, mit welcher Richtung und welchem Betrag eine Kraft an einer durch \mathbf{n} gegebenen Ebene angreift, wenn der Körper auf irgendeine Art von außen unter Spannung gesetzt wird.

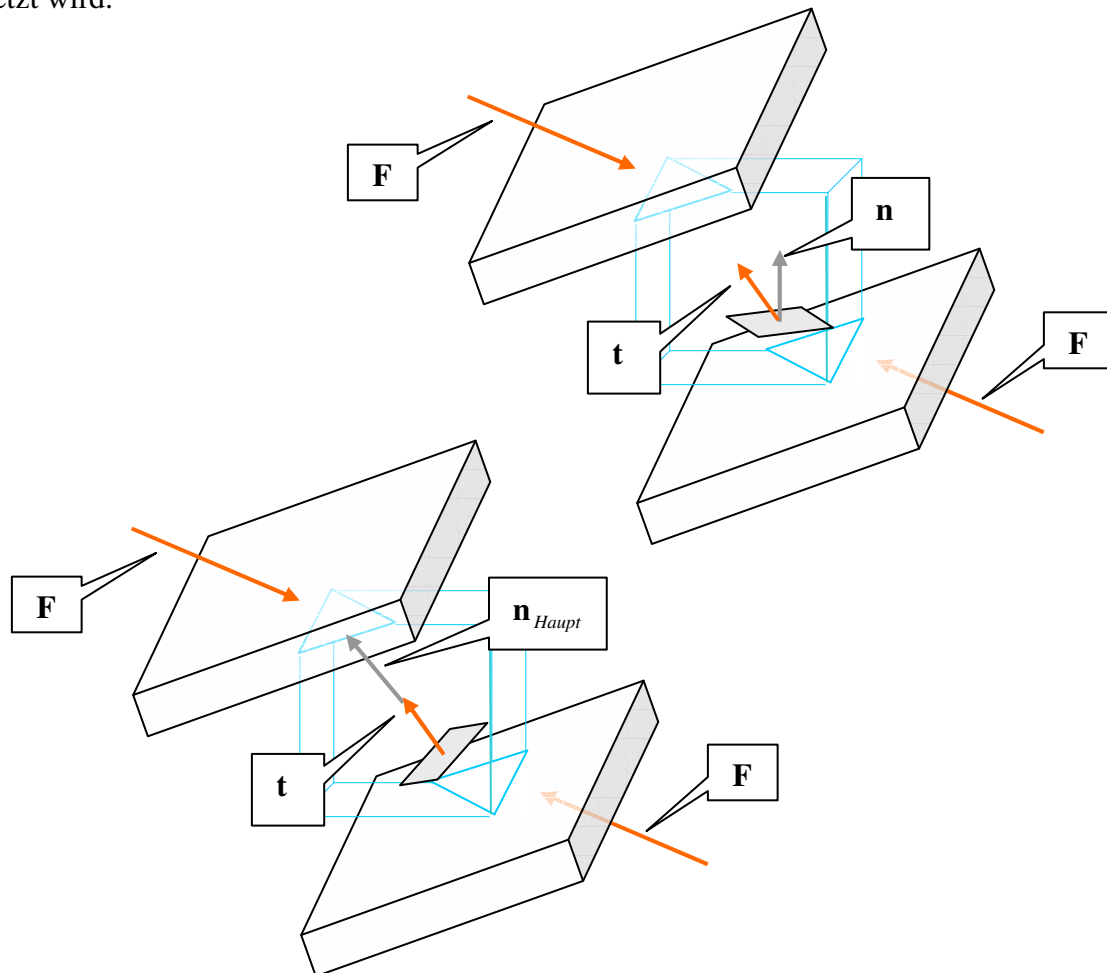


Abbildung 8 Spannung in unterschiedlichen Ebenen. Oben: beliebige Ebene, unten: Hauptspannungsebene

Die Komponenten des Spannungstensors sind vom Spannungszustand abhängig. Bei gleichbleibender Spannvorrichtung und Kraft bleiben sie unverändert. Für jeden Spannungszustand kann man aber an jedem Ort eine Ebene finden, zu der die Richtung der Spannung senkrecht steht. Diese Ebene heißt „Hauptspannungsebene“.

$\mathbf{t} = \lambda \cdot \mathbf{n}$	Bedingung für die Hauptspannungsebene
$\mathbf{t} = \lambda n^j \mathbf{g}_j = \sigma^{ij} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \cdot n^k \mathbf{g}_k$	Verknüpfung von Spannung und Normale durch den Tensor
$\lambda n^j \mathbf{g}_j = \sigma^{ij} n_i \mathbf{g}_j$	
$n^j = g^{ji} n_i$	Nach Herabziehen des Index folgt:
$\lambda g^{ji} n_i \mathbf{g}_j = \sigma^{ij} n_i \mathbf{g}_j$	Aus dem Koeffizientenvergleich für \mathbf{g}_j folgt, in orthonormierten Koordinatensystemen, wegen $g^{ij} = \delta^{ij}$:
$n_i (\sigma^{ij} - \lambda \delta^{ij}) = 0$	Homogenes Gleichungssystem für n_1, n_2, n_3
$\begin{vmatrix} \sigma_{11} - \lambda & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} - \lambda & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} - \lambda \end{vmatrix} = 0$	Das Gleichungssystem ist nur lösbar, wenn diese Determinante null ist. Aus dieser Bedingung folgen die drei „Eigenwerte“ $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$

Tabelle 37 Aufbau der charakteristischen Gleichung zur Hauptachsentransformation

Für jeden Eigenwert liefert die Lösung des homogenen Gleichungssystems eine Richtung, die, im gegebenen Spannungszustand, auch die der Spannung ist. Für diese Eigenvektoren gilt:

$\sigma^{ij} n_i = \lambda n_j$	Homogenes Gleichungssystem für n_1, n_2, n_3 , liefert für die drei Eigenlösungen $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ drei Eigenvektoren
$\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j = \delta_{ij}$	Die Eigenvektoren $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ sind orthogonal

Tabelle 38 Eigenvektoren zur Hauptachsentransformation

Die drei orthogonalen Vektoren $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ können als Basis eines neuen Koordinatensystems betrachtet werden. Der Übergang von der Basis $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ auf die Basis der Eigenvektoren heißt

„Hauptachsentransformation“. Ist $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ schon orthonormiert, wie oben angenommen, dann entspricht die Hauptachsentransformation lediglich einer Drehung oder Spiegelung des Koordinatensystems, also einer orthogonalen Transformation. Die Hauptachsentransformation führt aber aus beliebigen Basissystemen auf orthogonale Basisvektoren.

3.1.5 Der Dehnungstensor (Strain Tensor)

Zur Formulierung der Ausdehnung in einem dreidimensionalen Körper, z. B. in einem Kristall, betrachtet man an der interessierenden Stelle einen kleinen Würfel mit Kantenlänge eins, und richtet ihn nach den Koordinatenachsen aus. Wird der Körper verformt, dann verformt sich auch der Würfel. Die Änderung in Länge und Richtung der Kanten sind die Komponenten eines Tensors $[e_{ij}]$, der die Deformation angibt. Eine Verschiebung des Elements bleibt also unberücksichtigt.

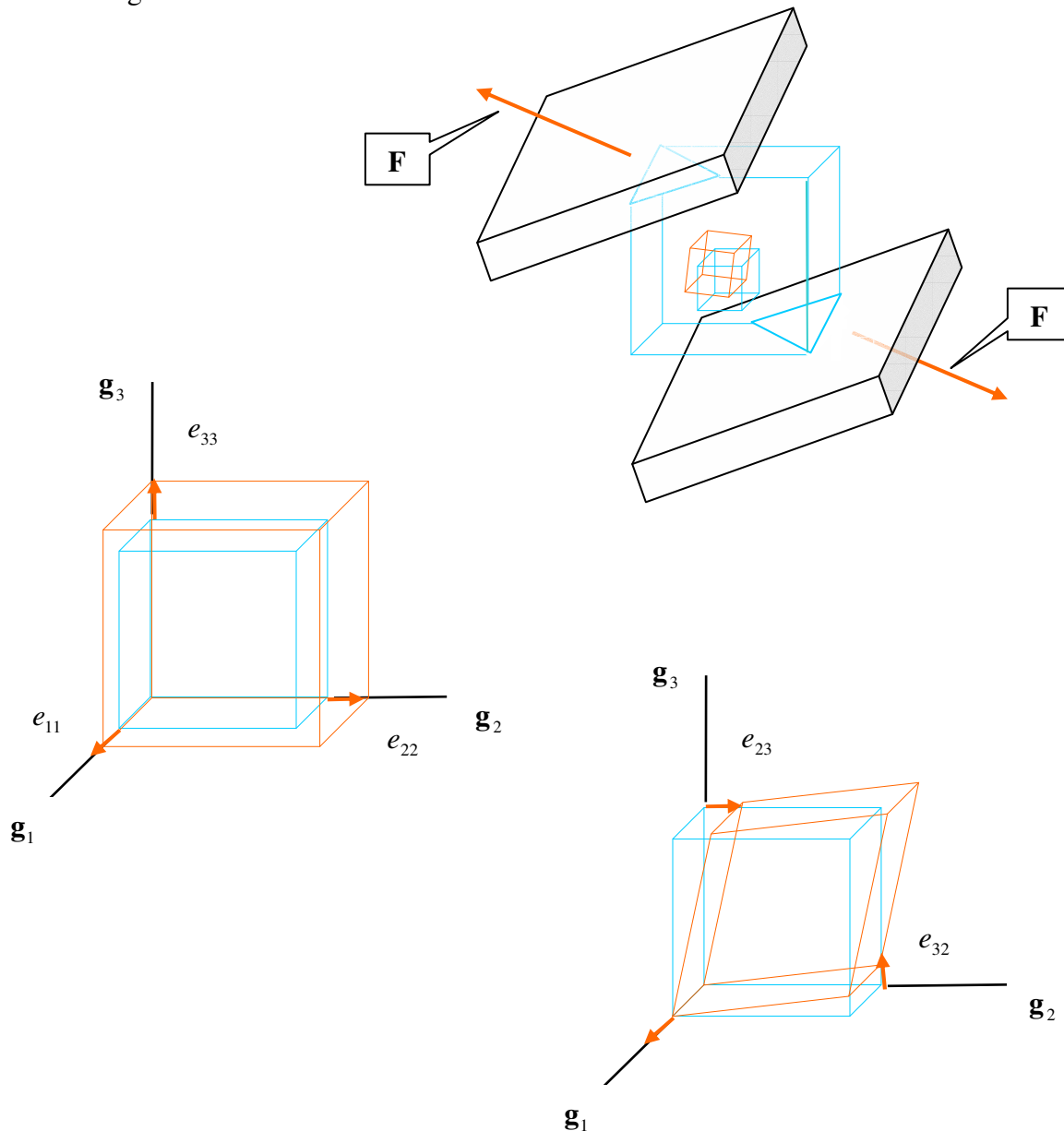


Abbildung 9 Oben links: Deformation, Drehung und Verschiebung eines Volumenelements bei der Dehnung. Darunter: Definition der Tensorkomponenten zur Beschreibung der Deformation. Der Winkel zwischen den Kanten in Richtung $\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ ändert sich um $e_{32} + e_{23}$.

$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$	Komponenten des Deformationstensors $[e_{ij}]$
$\mathbf{u} = [e_{ij}] \cdot \mathbf{x}$	Auslenkung eines Vektors bei homogener Dehnung
$u_i = e_{ij} \cdot x_j$	

Tabelle 39 Der Deformationstensor

Bei Drehungen des Probevolumens wird der Deformationstensor antisymmetrisch:

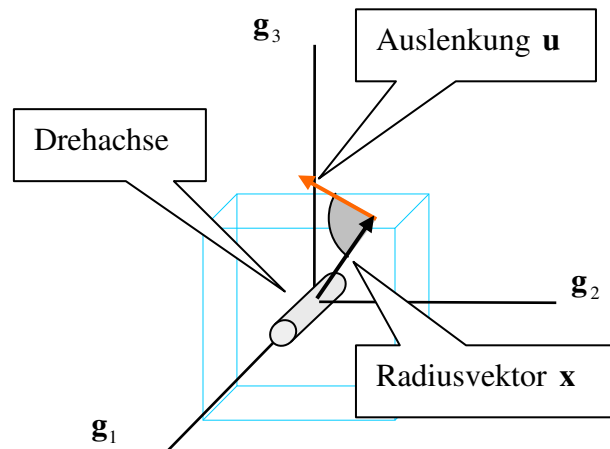


Abbildung 10 Auslenkung und Vektor stehen bei Drehung des Körpers senkrecht zueinander

$\mathbf{u} \cdot \mathbf{x} = 0$	Die Auslenkung \mathbf{u} steht bei Drehung des Körpers senkrecht zum beliebigen Ortsvektor \mathbf{x}
$u_i \cdot x_i = 0$	
$e_{ij} \cdot x_i \cdot x_j = 0$	
$e_{11}x_1^2 + e_{21}x_2x_1 + e_{31}x_3x_1 + e_{12}x_1x_2 + e_{22}x_2^2 + e_{32} \cdot x_3 \cdot x_2 + e_{13}x_1x_3 + e_{23}x_2x_3 + e_{33} \cdot x_3^2 = 0$	Für die Auslenkung \mathbf{u} Ortsvektor \mathbf{x} und Deformationstensor $[e_{ij}]$ eingesetzt
Aus dem Vergleich der Koeffizienten von $x_i x_j$ folgt :	

$e_{ii} = 0$	Für $i = j$
$e_{ij} = -e_{ji}$	Für $i \neq j$ ($[e_{ij}]$ antisymmetrisch)

Tabelle 40 Bei reiner Drehung ist der Deformationstensor antisymmetrisch

Mit dem symmetrischen Teil des Deformationstensors wird der „Dehnungstensor“ als symmetrischer Tensor formuliert, so dass eine Drehung des Volumenelements als ganzes nicht zum Ausdruck kommt.

$[\varepsilon_{ij}]$	Der symmetrische Dehnungstensor
$\varepsilon_{ii} = e_{ii}$	Ausdehnung („Tensile Strain“)
$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji})$	Die Änderung des Winkels zwischen Vektoren in Richtung $\mathbf{g}_i, \mathbf{g}_j$ ist $2\varepsilon_{ij}$ (vgl. Abbildung 9)
$[\varpi_{ij}]$	Der antisymmetrische Rotationstensor
$\varpi_{ii} = 0$	Der Drehwinkel des Elements ist $2\varpi_{ij}$
$\varpi_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji})$	
$[e_{ij}] = [\varepsilon_{ij}] + [\varpi_{ij}]$	Die Summe aus dem Rotations- und dem Dehnungstensor ergibt den Deformationstensor.

Tabelle 41 Symmetrischer Dehnungstensor, antisymmetrischen Rotationstensor und Deformationstensor

Analog zum Spannungstensor gibt es für den Dehnungstensor drei ausgezeichnete Richtungen, die man durch Hauptachsentransformation erreicht (vgl. Tabelle 37). Die Richtung der Hauptachsen ist dadurch ausgezeichnet, dass sie bei Deformation senkrecht zueinander bleiben. Die Auslenkung muss also immer in Richtung dieser ausgezeichneten Vektoren liegen:

$$\mathbf{u} = \lambda \cdot \mathbf{x}_{\text{Haupt}}$$

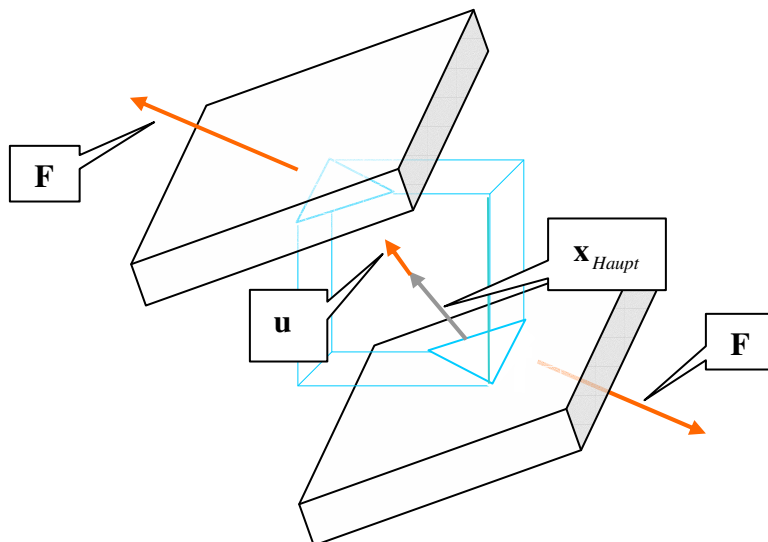


Abbildung 11 Eine Hauptdehnungsachse. Die beiden anderen stehen senkrecht dazu.

Die physikalischen Komponenten eines Tensors

Die Komponenten eines Tensors beziehen sich auf die Basisvektoren, aus denen die tensoriellen Produkte gebildet wurden (vgl. Tabelle 26). Bei einem Kristall z. B. kann es sinnvoll sein, als Basisvektoren die Translationsvektoren einer Elementarzelle zu wählen. Die Verschiebung um „eins“ entspricht dann der Verschiebung um eine Gitterkonstante, in metrischen Einheiten z. B. 1,4 nm. Soll ein Tensor diese metrischen Eigenschaften wiedergeben, dann muss er in „physikalischen Komponenten“ angegeben werden. Zur Umrechnung ist der Metrik-tensor nützlich: Bei Division der Komponenten durch die Wurzeln der entsprechenden Metrik-Koeffizienten erhält man die physikalischen Komponenten.

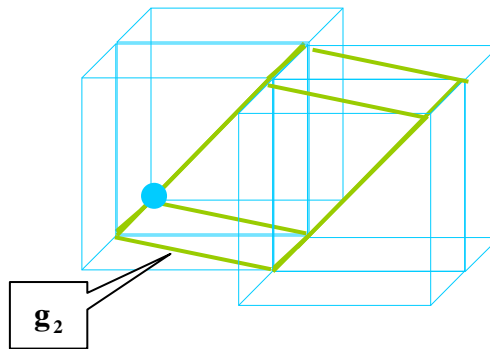


Abbildung 12 Die Verschiebung um eine Einheit \mathbf{g}_2 im schiefwinkligen Basissystem entspricht 1,4 nm (die Würfelkanten zeigen die Länge 1 nm)

Physikalische Komponenten	
$t^{*ij} = t^{ij} \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}}$	Umrechnung der Komponenten eines Tensors auf seine physikalischen Komponenten (mit Stern) durch Multiplikation mit den entsprechenden Metrik-Koeffizienten.
$t^{*i}_j = t^i_j \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}}$	
$t^{*j}_i = t_i^j \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}}$	
$t_{ij}^* = t_{ij} \sqrt{g^{(ii)}} \sqrt{g^{(jj)}}$	

Tabelle 42 Umrechnung der kontra- ko- und gemischt-varianten Komponenten eines Tensors auf physikalische Komponenten.

3.2 Tensoren höherer als zweiter Stufe

Das in Tabelle 25 definierte tensorielle Produkt lässt sich um weitere Vektoren erweitern. Man definiert deshalb einen Tensor N-ter Stufe als eine unter Koordinatentransformationen invariante Größe. Wie beim Tensor 2. Stufe können die Basen aus ko- oder kontravarianten Vektoren oder aus einer Mischung aus beiden bestehen.

$\mathbf{T}^{(N)} = T^{ijk\dots l} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_k \dots \mathbf{g}_l$		Ein Tensor N-ter Stufe ist eine invariante Größe, deren Basis ein Produkt aus N Grundvektoren ist.
$\bar{T}^{ijkl} = \bar{a}_m^i \bar{a}_n^j \bar{a}_p^k \bar{a}_q^l T^{mnpq}$		Transformationsgesetz beim Wechsel des Bezugssystems (vgl. 3.1.1 für Tensoren 2. Stufe). Auch jetzt gilt: Jeder obere Index transformiert sich wie ein kontravarianter Vektor und jeder untere wie ein kovarianter
	$\bar{\mathbf{g}}^k = \bar{a}_i^k \mathbf{g}^i$	Transformationsgesetz für die kontravarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}
	$\bar{\mathbf{g}}_i = \underline{a}_i^j \mathbf{g}_j$	Transformationsgesetz der kovarianten Basisvektoren bei Übergang in das System \bar{B}

Tabelle 43 Transformation der Komponenten eines Tensors höherer Stufe bei Wechsel des Bezugssystems

Man kann mit diesem Transformationsgesetz einen Tensor definieren: Eine N-fach indizierte Größe, die sich nach diesem Gesetz transformiert, bezeichnet man als Tensor N-ter Stufe.

3.2.1 Rechenregeln für Tensoren

Neben dem oben angewandten tensoriellen Produkt ist Addition von Tensoren gleicher Stufe und das verjüngende Produkt von Tensoren unterschiedlicher Stufe besonders wichtig.

$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{w}$		Addition von Tensoren gleicher Stufe
$w^{ijk} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_k = u^{ijk} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_k + v^{ijk} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_k$		
$w^{ijk} = u^{ijk} + v^{ijk}$		
$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u} = \mathbf{w}$		Die Addition ist kommutativ

Tabelle 44 Addition von Tensoren gleicher Stufe, am Beispiel von Tensoren 3. Stufe

Das verjüngende Produkt entsteht durch skalare Multiplikation der dazugehörigen Grundvektoren.

$(u^{ijk} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_k) \cdot (v^{lm} \mathbf{g}_l \mathbf{g}_m) = u^{ijk} v^{lm} g_{kl} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_m$	Verjüngendes Produkt: Skalare Multiplikation von zwei Grundvektoren
$= u^{ijk} v_k^m \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_m$	Die Metrik-Koeffizienten ziehen in v^{lm} einen Index herunter
$= w^{ijm} \mathbf{g}_i \mathbf{g}_j \mathbf{g}_m$	Summation über k ausgeführt
$w^{ijm} = u^{ijk} v_k^m$	Transformationsgesetz für die Indizes: „Überschiebung“

Tabelle 45 Verjüngendes Produkt zweier Tensoren, am Beispiel eines 3- und 2-stufigen Tensors

Es gilt der Satz: Die Überschiebung eines Tensors M-ter Stufe mit einem Tensor N-ter Stufe ergibt einen Tensor (M+N-2)-ter Stufe.

3.2.2 Der Elastizitätstensor

Die Dehnungen und die Spannungen in einem Festkörper sind über den Elastizitätstensor, ein Tensor 4. Stufe, miteinander verknüpft. Er entspricht dem Hookeschen Gesetz, das die Verformung (hier: Dehnung) als lineare Funktion der Kraftwirkung (hier: Spannung) zeigt.

$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}$	Hookesches Gesetz bei Verformung eines 3-dimensionalen Körpers. s_{ijkl} Komponenten des Elastizitätstensors
$\mathbf{t} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$	Der Spannungstensor \mathbf{S} (Komponenten σ_{kl}) zeigt den Spannungsvektor \mathbf{t} an einer Fläche mit Normale \mathbf{n} bei äußerer Kraftwirkung auf den Körper
$\mathbf{u} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{x}$	Der Dehnungstensor \mathbf{D} (Komponenten ε_{ij}) zeigt die Änderung \mathbf{u} eines auf dem Körper angebrachten Vektors \mathbf{x} bei Verformung des Körpers

Tabelle 46 Definition des Elastizitätstensors

Die Transformationseigenschaften bei Wechsel des Koordinatensystems zeigen, dass s_{ijkl} Komponenten eines Tensors sind, entsprechend den Regeln im Abschnitt Transformation der Komponenten eines Tensors 2. Stufe bei Wechsel des Bezugssystems.

$\bar{\epsilon}_{ij} = \bar{a}_{ik} \bar{a}_{jl} \epsilon_{kl}$	Transformation der Komponenten des Dehnungstensors
$\bar{\sigma}_{op} = \bar{a}_{om} \bar{a}_{pn} \sigma_{mn}$	Transformation der Komponenten des Spannungstensors und ihre Rücktransformation
$\sigma_{mn} = (\bar{a})^{-1}_{mo} (\bar{a})^{-1}_{np} \bar{\sigma}_{op}$	
$\sigma_{mn} = \bar{a}_{om} \bar{a}_{pn} \bar{\sigma}_{op}$	Gilt, weil die Inverse gleich der Transponierten ist (orthonormale Basis)
$\bar{\epsilon}_{ij} = \bar{s}_{ijop} \bar{\sigma}_{op}$	Hookesches Gesetz im transformierten System
$\bar{\epsilon}_{ij} = \bar{a}_{ik} \bar{a}_{jl} \epsilon_{kl} = \bar{a}_{ik} \bar{a}_{jl} s_{klmn} \sigma_{mn} = \bar{a}_{ik} \bar{a}_{jl} s_{klmn} \bar{a}_{om} \bar{a}_{pn} \bar{\sigma}_{op}$	Die Transformierte des Dehnungstensors und des Spannungstensors eingesetzt
$\bar{s}_{ijop} = \bar{a}_{ik} \bar{a}_{jl} \bar{a}_{om} \bar{a}_{pn} s_{klmn}$	Aus dem Koeffizientenvergleich für $\bar{\epsilon}_{ij}$ und $\bar{\sigma}_{op}$ im Hookeschen Gesetz folgt die Transformation der Komponenten des Elastizitätstensors
$\bar{s}_{ijkl} = \bar{a}_{im} \bar{a}_{jn} \bar{a}_{ko} \bar{a}_{lp} s_{mnop}$	

Tabelle 47 Transformation der Komponenten des Elastizitätstensors

Weil sowohl der Spannungs-(Tabelle 32) als auch der Dehnungstensor (Tabelle 41) symmetrisch sind, ändert die Permutation von i und j bzw. von k und l die Komponenten s_{ijkl} nicht. Anstelle von 81 Komponenten gibt es also nur 36. Zu jeder der sechs Kombinationen für ij gehören sechs Kombinationen für kl .

i	1	2		3		
j	1	1	2	1	2	3

Tabelle 48 Die sechs Index Kombinationen ij , die zu unterschiedlichen Elementen des Dehnungstensors führen (Analoges gilt für kl des Spannungstensors)

Diese 36 Elemente kann man schließlich in „Matrix Schreibweise“ anordnen. Konventionen dazu in Nye, S.134.

Zeigt der Körper Symmetrie, dann reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Komponenten noch weiter, weil dieser Tensor – im Gegensatz zum Spannungs- oder Dehnungstensor - eine innere Eigenschaft des Körpers zeigt, die gegenüber den Symmetrietransformationen des Körpers invariant ist (von Neumannsches Prinzip 4.1.2).

$s_{ijkl} = \bar{a}_{im} \bar{a}_{jn} \bar{a}_{ko} \bar{a}_{lp} s_{mnop}$	Gleichung für die Komponenten des Elastizitätstensors bei einer Symmetrie Transformation
\bar{a}_{im}	Element der Matrix einer Symmetrie-Transformation des Körpers

Tabelle 49 Bedingung für die Komponenten des Elastizitätstensors bei einer Symmetrieeoperation

4 Analyse physikalischer Eigenschaften mit Hilfe der Gruppentheorie

Symmetrien in der Anordnung der Komponenten eines realen Körpers wirken auf seine physikalischen Eigenschaften. Die Gesamtheit der Symmetrieeoperationen eines Körpers sind eine Realisierung einer abstrakten Gruppe, sie wird hier Symmetriegruppe genannt. Betrachtet man nur die Drehungen und Spiegelungen, dann ist die Gruppe endlich. Wirken auch die Translationen des idealen, unendlichen Gitters auf die physikalischen Eigenschaften, etwa auf die Phase der Auslenkung eines Teilchens, das durch eine harmonische Welle angeregt sei, dann muss die unendliche Raumgruppe betrachtet werden.

Eine Symmetrieeoperation ist zunächst unmittelbar im Ortsraum definiert, indem sie die Ortsvektoren spiegelt, dreht oder verschiebt. Denkt man sich den Ortsvektor festgehalten, dann entspricht eine Symmetrieeoperation dem Übergang in ein transformiertes Koordinatensystem. Die Auswirkung einer Symmetrieeoperation auf eine von den Ortskoordinaten abhängige physikalische Eigenschaft richtet sich deshalb nach ihrer Transformationsvorschrift bei Wechsel des Koordinatensystems. Ein Tensor 2. Stufe, z. B., transformiert sich auf andere Weise wie ein Tensor 4. Stufe.

Viele physikalische Eigenschaften, z. B. Tensoren, atomare Auslenkungsfelder, bestimmte Funktionen einer reellen oder komplexen Veränderlichen, zeigen die Eigenschaft von Elementen eines Vektorraums. Dessen Dimension richtet sich nach der Eigenschaft, sie ist z. B. 9 bei Tensoren 2. Stufe, 81 bei Tensoren 4. Stufe.

Ist die physikalische Eigenschaft ein Element eines Vektorraums, dann kann die Wirkung der Symmetrieeoperationen mit den Methoden der Darstellungstheorie formuliert werden. Man ordnet jeder Symmetrieeoperation im Ortsraum eine Transformation im Vektorraum zu, die einen Eigenschafts-Vektor auf einen anderen abbildet. Diese Abbildung stellt man sich durch einen – für die Eigenschaft spezifischen – „Operator“ bewirkt vor. Die zu allen Symmetrieeoperationen gehörenden Transformationsmatrizen des Vektorraums bilden auch eine Gruppe, die, im mathematischen Sinn, eine Darstellung der Symmetriegruppe ist.

Zu jedem n-dimensionalen Vektorraum gehört ein Satz von n Basisvektoren. Bezüglich der Symmetrie bevorzugt ist eine Basis, wenn möglichst viele ihrer Vektoren bei Anwendung der Symmetrieeoperationen entweder unverändert bleiben oder nur mit einem Faktor multipliziert werden. Mit anderen Worten: Wenn durch Anwendung der Symmetrieeoperationen möglichst wenig Basisvektoren durchmischt werden.

Ist die in diesem Sinn optimierte Basis gefunden, dann bilden die Matrizen, mit denen sich die einzelnen Basisvektoren bei Anwendung einer Symmetrieeoperation transformieren, eine irreduzible Darstellung der Symmetriegruppe.

Stellt eine Tabelle oder Abbildungen unterschiedliche Räume dar, dann gilt folgender Farbcode: Blau, was den Ortsraum betrifft, gelb, den Vektorraum der physikalischen Objekte betreffendes, grün, was zu seinen Basen nach irreduziblen Darstellungen gehört.

4.1 Begriffe zur Darstellungstheorie

4.1.1 Symmetrie angepasste Basisvektoren

Unter der Transformation durch eine Matrix \mathbf{T} wird ein Vektor gedreht und, im allgemeinen, auch in der Länge verändert. Zu jeder Transformation \mathbf{T} gibt es aber spezielle Vektoren \mathbf{v}_i , die nur ihre Länge bzw. ihr Vorzeichen ändern. Legt man die Basisvektoren eines Koordinatensystems in diese ausgezeichneten Richtungen, dann erhält man ein dieser Transformation angepasstes Koordinatensystem.

Wenn die Transformationen, d. h. die Matrizen \mathbf{T} in \mathbb{R}^3 , eine Gruppe bilden, wenn sie z. B. zu *Symmetrieelementen* gehören, dann können mit Hilfe der *Darstellungstheorie der Symmetrie angepassten Richtungen eines Vektorraums* ermittelt werden.

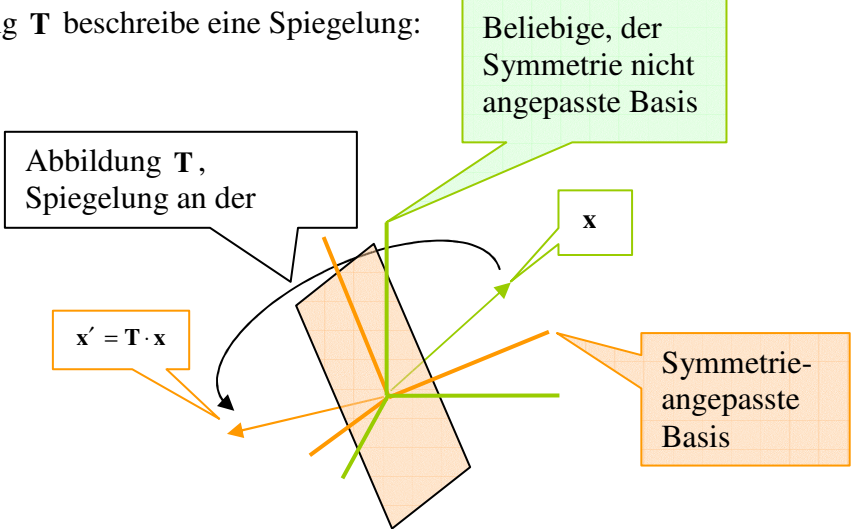
$\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}_i = \lambda_i \cdot \mathbf{v}_i$	Im allgemeinen findet man λ_i und \mathbf{v}_i durch Lösung des durch diese Forderung formulierten Gleichungssystems (vgl. 3.1.4)
$\mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_i = \lambda_i \cdot \mathbf{e}_i$	Bezüglich \mathbf{T} Symmetrie angepasste Basisvektoren (orange im Bild)
<p>Die Abbildung \mathbf{T} beschreibe eine Spiegelung:</p>  <p>Abbildung \mathbf{T}, Spiegelung an der</p> <p>$\mathbf{x}' = \mathbf{T} \cdot \mathbf{x}$</p> <p>Beliebige, der Symmetrie nicht angepasste Basis</p> <p>\mathbf{x}</p> <p>Symmetrie-angepasste Basis</p>	

Tabelle 50 Einer Spiegelebene angepasste Basisvektoren (orange) und ein beliebiges Koordinatensystem (grün)

4.1.2 Operatoren, von Neumannsches Prinzip

Eine Koordinatentransformation \mathbf{T} im Ortsraum wirkt auf alle Koeffizienten, die auf **Ortskoordinaten bezogene physikalische Eigenschaften** beschreiben. Die mathematische Formulierung der Wirkung hängt von der Anwendung ab. Man verbindet eine Abbildung im Ortsraum deshalb mit einem **Operator**, der die zur Anwendung passende Abbildung im Vektorraum der Objekte (Vektoren des Ortsraums, atomare Auslenkungen, Tensoren, Funktionen) bewirkt.

Für die physikalischen Eigenschaften eines Kristalls gilt das „**Von Neumannsche Prinzip**“: „Die Symmetrieelemente jeder physikalischen Eigenschaft enthalten die Symmetrieelemente der Punktgruppe des Kristalls“

4.1.2.1 Operator im Vektorraum der Atomlagen

Die Transformation der Ortsvektoren erfolgt unmittelbar mit den 3×3 Drehmatrizen der Symmetrieeoperationen.

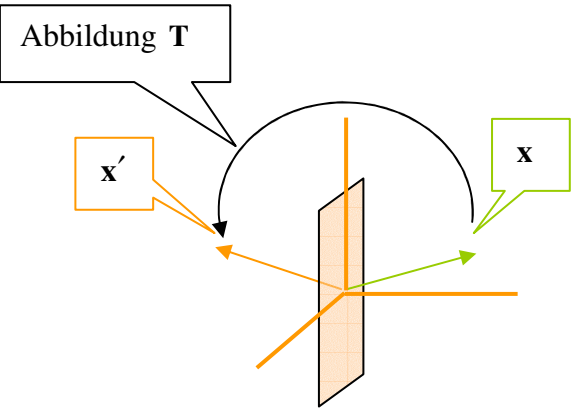
<p>Der Operator ist die Drehmatrix \mathbf{T}</p> $\mathbf{x}' = \mathbf{T} \cdot \mathbf{x}$	<p>Dimension des Vektorraums: 3</p> 
$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \bar{\mathbf{1}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{bmatrix}$	

Tabelle 51 Operator zur Abbildung im 3-dimensionalen Ortsraum

Von besonderem Interesse zur Analyse struktureller Phasenumwandlungen sind die atomaren Auslenkungen und die thermische Ausdehnung, die durch den Dehnungstensor gegeben wird.

4.1.2.2 Operator im Vektorraum „Atomare Auslenkung“:

Die Dimension dieses Vektorraums ist das Produkt aus der Anzahl der Freiheitsgrade pro Teilchen und der Teilchenzahl. Die Anwendung einer Symmetrieoperation im Ortsraum bewirkt im Vektorraum der Auslenkungen im allgemeinen eine Vertauschung der Teilchen und eine Drehung des Auslenkungsvektors. Beides kann man als Wirkung des dem Gruppenelement zugeordneten Operators \mathbf{O}_T betrachten. Die durch den Operator symbolisierte Transformationsvorschrift zeigt das Verhalten eines beliebigen Auslenkungsmusters aller Teilchen, das die Symmetrie der Teilchen in der Ruhelage *nicht* berücksichtigt. Es ist deshalb ein realistisches Bild einer Momentaufnahme der durch ihre Temperaturbewegung ausgelenkten Teilchen:

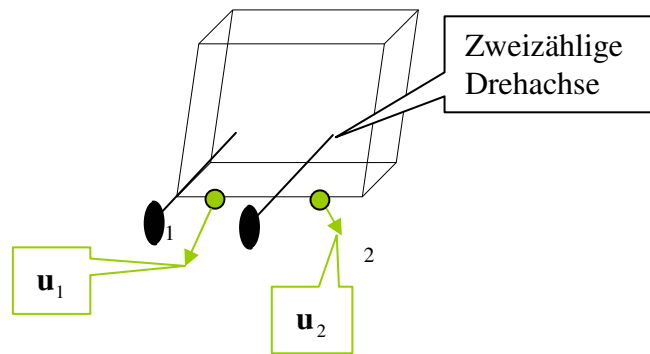


Abbildung 13 Auslenkungen $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ für zwei durch eine zweizählige Achse verknüpften Teilchen Nr. 1, 2

Bei einer Symmetrieoperation, z. B. der Anwendung der zweizähligen Achse, bildet der Operator \mathbf{O}_T die Vektoren der Auslenkung wie folgt ab:

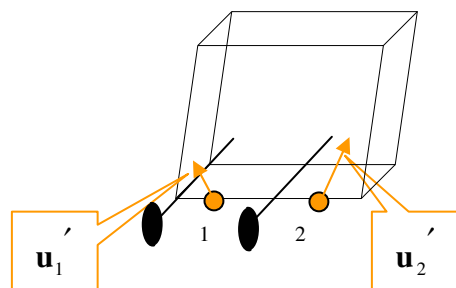


Abbildung 14 Auslenkungen $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2$ nach der Drehung um die zweizählige Achse

Die Wirkung des Operators \mathbf{O}_T ist im Einzelnen:

$\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \bar{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$	Drehung: Drehmatrix aus R^3 zur 2-zähligen Drehung des Auslenkungsvektors \mathbf{u}
$\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$	Permutation: Teilchen Nr. $\kappa = 1$ wird auf $\kappa' = 2$ abgebildet.
$\{g v(g)\}^{-1} \mathbf{r}(\kappa) - \mathbf{r}(\kappa')$	Translation des Teilchens:
$\{g v(g)\}$	Element der Raumgruppe: Punktgruppenelement g mit Translationsanteil $v(g)$ (Seitz Notation)
$\mathbf{r}(\kappa), \mathbf{r}(\kappa')$	Ortsvektoren der Teilchen Nr. κ, κ'

Tabelle 52 Transformationsvorschrift für die Auslenkungen von Teilchen bei einer Symmetrieoperation

Bei einigen Symmetrie Elementen in nicht symmorphen Raumgruppen ist $v(g)$ ungleich null:

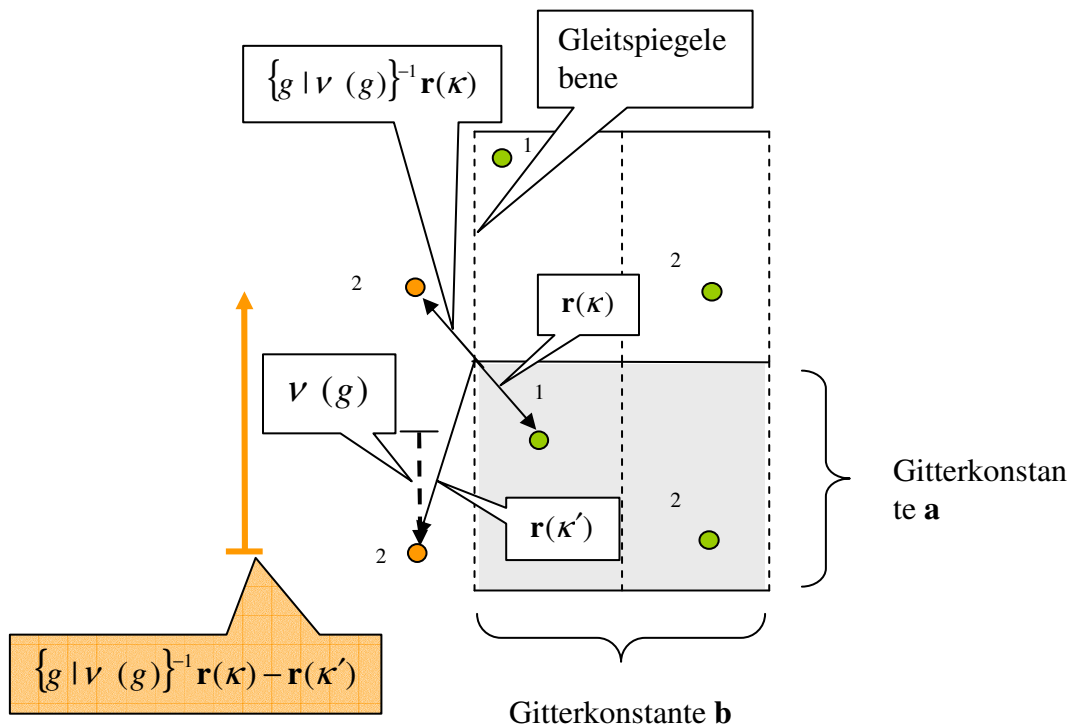


Abbildung 15 Translationsanteil bei Transformation des Teilchens $\kappa = 1$ zu Teilchen $\kappa = 2$ durch eine Gleitspiegelebene mit Gleitrichtung \mathbf{a} .

Ein Translationsanteil, der sich auf die Phase der Auslenkung auswirkt, entsteht auch bei einer Operationen der Punktgruppe, also $\nu(g) = \mathbf{0}$, wenn durch sie die Zelle verlassen wurde

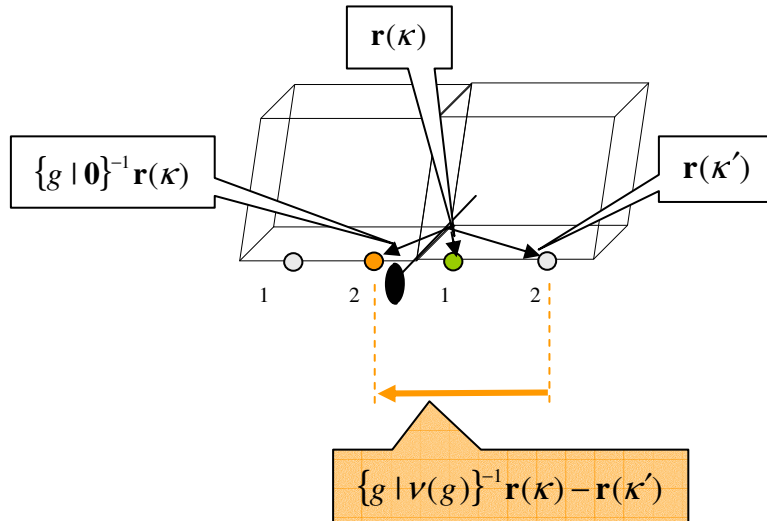


Abbildung 16 Zweizählige Drehung, bei der das Teilchen 1 in das Teilchen 2 der Nachbarzelle transformiert wird

Die Translation bei der Symmetrieoperation trägt, in Verbindung mit Raumgruppen, zur Phase φ der Auslenkungen bei:

$\varphi = \left(\{g \nu(g)\}^{-1} \mathbf{r}(\kappa) - \mathbf{r}(\kappa') \right) \cdot \mathbf{k}$	Phase der Auslenkung
\mathbf{k}	Wellenvektor der Welle der Auslenkung
$\{g \nu(g)\}^{-1} \mathbf{r}(\kappa) - \mathbf{r}(\kappa')$	Translationsanteil des Teilchens κ (s.u.)
$\mathbf{u}(\kappa) = \mathbf{u}_0 \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}(\kappa) + \varphi)}$	Auslenkung des Teilchens κ unter einer ebenen Welle mit Wellenvektor \mathbf{k} mit Phase φ

Tabelle 53 Phase und Auslenkung eines Teilchens nach einer Transformation $\{g | \nu(g)\}$, bei der ein Translationsanteil entsteht.

Die vollständige Matrix im $3p$ dimensionalen Raum (p Anzahl der permutierten Teilchen) besteht aus der Kombination der Permutations- mit der Rotationsmatrix: sie repräsentiert den Operator \mathbf{O}_T zur Transformation \mathbf{T} im Ortsraum. Für jede „1“ in der Permutationsmatrix wird die 3×3 Drehmatrix eingesetzt, die Stellen mit „0“ werden durch eine 3×3 Null-Matrix ersetzt.

Für jedes Symmetrie Element entsteht eine Matrix dieser Art, die Gesamtheit dieser Matrizen für alle Gruppenelemente bilden bezüglich der Multiplikation eine Gruppe, die der reduzierten Darstellung der Symmetriegruppe.

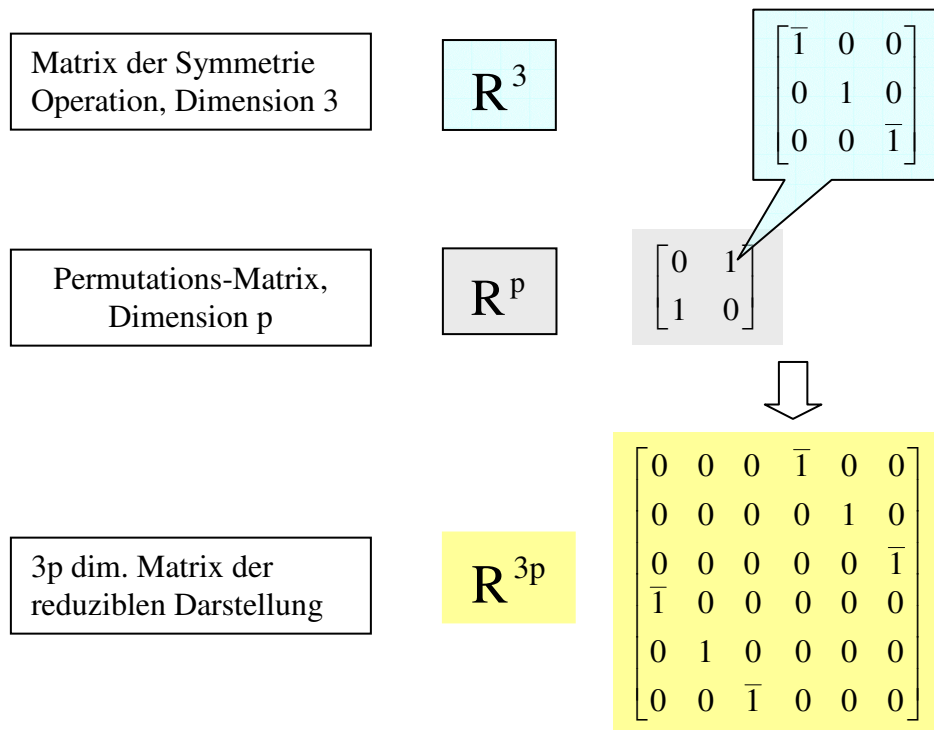


Abbildung 17 Beispiel für die Entstehung der Transformationsmatrix für die Auslenkungen (Matrix der reduzierten Darstellung) bei zwei Teilchen unter der Wirkung einer zweizähligen Drehachse

Bei der Transformation eines speziellen atomaren Auslenkungsfelds unter einer vierzähligen Achse, die in Richtung \mathbf{c} verlaufe, erkennt man, dass die Gruppe der Transformationsmatrizen für die Auslenkungen eine Untergruppe der Symmetriegruppe ist (vgl. Homomorphe Abbildung, 4.2):

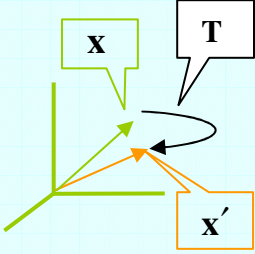
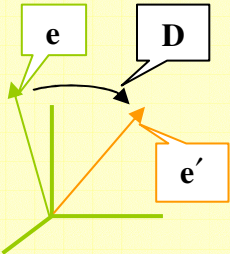
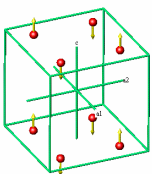
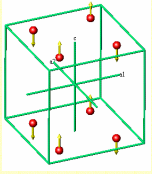
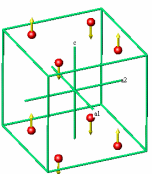
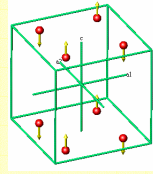
G		e	4_z	2_z	4_z^3
R^3	$\mathbf{x}' = \mathbf{T}(g) \cdot \mathbf{x}$				
		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
R^{12}					
	$\mathbf{e}' = \mathbf{D}(g) \cdot \mathbf{e}$				
G_D		e	2_z	e	2_z

Tabelle 54 Beispiel für eine homomorphe Abbildung der Symmetriegruppe in R^3 auf die Gruppe der reduziblen Darstellung in R^{12} .

4.1.2.3 Operator im Vektorraum des Dehnungstensors (thermische Ausdehnung)

Der Dehnungstensor (vgl. 3.1.5) formuliert die Antwort eines Festkörpers auf eine von außen wirkende Kraft, er muss deshalb nicht der Symmetrie des freien Kristalls genügen. Ändert sich die Form aber als Folge einer Temperaturänderung, dann erscheint die Dehnung als innere Eigenschaft des sonst freien Körpers, die der Symmetrie des Körpers genügt:

$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} \cdot \Delta T$	Bei der thermischen Ausdehnung sind die Komponenten des Dehnungstensors zur Temperaturänderung proportional
α_{ij}	Koeffizienten der thermischen Ausdehnung
$\varepsilon_{ij} = a_{ik} a_{jl} \varepsilon_{kl}$	Gleichung für die Komponenten des Tensors zur thermischen Ausdehnung bei einer Symmetrie Transformation (vgl. Tabelle 29)

Tabelle 55 Komponenten des Tensors und Koeffizienten der thermischen Ausdehnung

Für das Folgende wird der Dehnungstensor als Vektor eines sechs-dimensionalen Raumes aufgefasst:

$[\varepsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix}$ $\mathbf{e} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{bmatrix}$	
--	--

Tabelle 56 Vektorielle Schreibweise des Dehnungstensors, geometrische Deutung der Komponenten

Bei Anwendung einer Symmetrieoperation mit Matrix \mathbf{T} transformieren sich die Komponenten des Dehnungstensors nach Tabelle 55. Im sechsdimensionalen Raum entspricht die Symmetrieoperation der Transformation mit der Matrix \mathbf{D} :

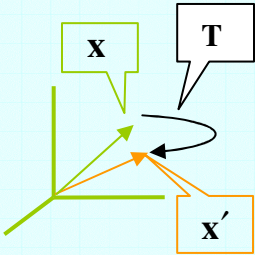
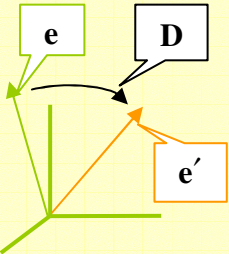
\mathbf{G}		e	4_z	2_z	4_z^3
\mathbf{R}^3	$\mathbf{x}' = \mathbf{T}(g) \cdot \mathbf{x}$				
		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
\mathbf{R}^6		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$
	$\mathbf{e}' = \mathbf{D}(g) \cdot \mathbf{e}$				
\mathbf{G}_D		e	4_z	2_z	4_z^3

Tabelle 57 Transformation des Dehnungstensors unter einer 4-zähligen Achse in Richtung c

4.2 Homomorphe Abbildung

Eine Abbildung einer Gruppe G auf eine Gruppe G_D mit der Multiplikationsregel

$$a' \cdot b' = (a \cdot b)'$$

mit

$$a', b' \in G'$$

$$a, b \in G$$

heißt **homomorph**, wenn - im Gegensatz zur isomorphen Abbildung - unterschiedliche Elemente aus G auf das gleiche Element in G_D abgebildet werden.

Beispiel:

$$G = \{ e, 4^1, 2, 4^3 \}$$

$$G_D = \{ e, 2 \}$$

In Worten: „**Das Produkt der Bilder ist das Bild des Produkts**“. Diese Abbildung ist, im Unterschied zur isomorphen Abbildung, nicht umkehrbar eindeutig.

Produkt der Bilder

Bild des Produkts

$$a' \cdot b' = (a \cdot b)'$$

Wenn eine Gruppe G homomorph auf die Operatorgruppe G_D abbildbar ist, dann ist G_D eine Darstellung der Gruppe G im Darstellungsraum L . Ist L von der Dimension n , dann ist die Darstellung auch von der Dimension n oder „vom Grad n “

Von der Definition zur Rechenvorschrift:

1. Am Anfang steht die abstrakte Gruppe G , hier als Symmetriegruppe realisiert.
2. Das physikalische Problem wird mit einem Zustandsvektor \mathbf{e} aus einem mehrdimensionalen Vektorraum \mathbb{R}^n beschrieben.
3. Die Transformation der Ortskoordinaten in \mathbb{R}^3 unter der Wirkung der $g \in G$ ändert den Zustandsvektor \mathbf{e} , abhängig vom physikalischen Problem. Ein Operator, realisiert durch eine Matrix $\mathbf{D}(g)$, beschreibt die Transformation von \mathbf{e} .
4. Die zu $g \in G$ gehörenden Operatoren bilden selbst eine Gruppe: Die Gruppe der Darstellung G_D .
5. *Symmetrie* angepasst ist die Basis, wenn unter der Wirkung von $g \in G$ möglichst viele Basisvektoren \mathbf{e} invariant bleiben. In diesem Fall sind die Transformationsmatrizen von **minimaler Dimension: Ihre Gruppe G_D ist eine irreduzible Darstellung der Gruppe G .**

4.3 Aufbau der reduzierten Darstellung:

Zum Aufbau der reduzierten Darstellung benötigt man die Symmetriegruppe \mathbf{G} , die auf die Ortsvektoren im R^3 wirkt, und ein Objekt der physikalischen Eigenschaft, das als Vektor eines Vektorraums R^N verstanden wird. Die Dimension N richtet sich nach dem Objekt. Bei Tensoren oder atomaren Auslenkungsfeldern ist die Dimension unmittelbar gegeben.

Ist das Objekt aber eine Funktion und ist die Dimension N nicht unmittelbar ersichtlich, dann transformiert man eine Ausgangsfunktion zu jedem $g \in \mathbf{G}$. Aus den so erzeugten Funktionen wählt man die linear unabhängigen, ihre Anzahl zeigt die Dimension N . Jede dieser Funktionen wird als eine Komponente eines Vektors in R^N geschrieben.

Ordnungsprinzip:

Symmetrie-Gruppe \mathbf{G}

Transformation in R^3 :

$$\mathbf{x}' = \mathbf{T}(g) \cdot \mathbf{x}$$

Aufbau des Vektorraums,
spezifisch für die Anwendung:
(Transformation in R^N)

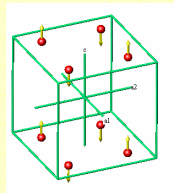
$$\mathbf{e}' = \mathbf{D}(g) \cdot \mathbf{e} \quad \forall g \in \mathbf{G}$$

Anwendung:

Atomare Auslenkung

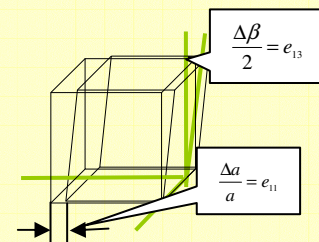
Dehnungstensor

Atomare Auslenkung



Permutations- und Drehmatrix für den 3^p dimensionalen Raum der Auslenkungsvektoren (p Teilchenzahl)

Dehnungstensor



Transformationsmatrix für den 6-dim. Vektor aus Tensorkomponenten

Tabelle 58 Schema zum Aufbau der reduzierten Darstellung

Zu jedem Element $g \in \mathbf{G}$ wird nun die Transformationsmatrix $\mathbf{D}(g)$ für einen beliebigen Vektor aus R^N bestimmt. Die Gesamtheit der Transformationen bildet die Gruppe einer reduzierten Darstellung der Symmetriegruppe \mathbf{G} .

4.4 Zerlegung nach irreduziblen Darstellungen

$\mathbf{D}(g_1 \cdot g_2) = \mathbf{D}(g_1) \cdot \mathbf{D}(g_2)$	Die Matrizen $\mathbf{D}(g)$ sind (im Allgemeinen reduzible) Darstellungen der Gruppe G :
---	---

Der Aufbau der reduziblen Darstellung repräsentiert die Physik des Systems. Die Zerlegung nach irreduziblen Darstellungen erfolgt nach einem für alle Anwendungen identischen Formalismus:

$m_j = \frac{1}{ G } \sum_{g \in G} \chi(g) \cdot \chi^{j*}(g)$	Vielfachheit m_j einer irreduziblen Darstellung j
$\chi(g)$	Charakter der Matrix $\mathbf{D}(g)$ der reduziblen Darstellung
$\chi^j(g)$	Charakter der Matrix $\mathbf{D}^j(g)$ der irreduziblen Darstellung j . Der Stern (*) steht für „konjugiert komplex“.
$ G $	Ordnung der Gruppe G

Tabelle 59 Berechnung der Vielfachheit einer irreduziblen Darstellung (Die Summation erfolgt über alle Gruppenelemente) aus den Charakteren der reduziblen Darstellung

$\mathbf{P}^j_{rs} = \frac{d_j}{ G } \sum_{g \in G} \mathbf{D}^j_{rs}{}^*(g) \cdot \mathbf{D}(g)$	Projektionsoperatoren \mathbf{P}^j_{rs} enthalten die Basisvektoren zu allen irreduziblen Darstellungen j .
$\mathbf{D}^j_{rs}(g)$	Matrizelement rs zum Gruppenelement g der irreduziblen Darstellung j .
d_j	Dimension der irreduziblen Darstellung j

Tabelle 60 Berechnung des Projektionsoperators zu einem Matrizelement einer irreduziblen Darstellung aus den Matrizen der reduziblen Darstellung

Die Basisvektoren zu den irreduziblen Darstellungen folgen aus dem Produkt des Projektionsoperators mit einem allgemeinen Vektor des Darstellungsraums. Diese Basisvektoren transformieren sich bei Anwendung einer Symmetrietransformation nach der im Projektionsoperator verwendeten irreduziblen Darstellung.

$\mathbf{e}_r^j = \sum_s \mathbf{D}_{rs}^j(\mathbf{g}) \mathbf{e}_s^j$		Transformation eines Basisvektors bei der Symmetrieoperation g
	j	Nummer der Darstellung
	r, s	Nummer der Basisvektoren zur Darstellung j
	$\mathbf{D}_{rs}^j(\mathbf{g})$	Matrizelement r, s zur irreduziblen Darstellung j zum Gruppenelement g

Tabelle 61 Transformation eines Basisvektors zu einer irreduziblen Darstellung

Bei eindimensionalen Darstellungen wird der Vektor bei der Transformation lediglich mit dem Matrizelement multipliziert, bei zwei- und dreidimensionalen Darstellungen geht er in eine Linearkombination von 2 bzw. 3 Basisvektoren über. Für den Vektorraum der Objekte ist auf diese Weise die Symmetrie optimal angepasste Basis gefunden.

4.4.1 Zerlegung des Dehnungstensors nach irreduziblen Darstellungen

G	e	4_z	2_z	4_z^3		
\mathbb{R}^6	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix}$		
χ	6	0	2	0		
					$m_j =$ $\frac{1}{4} \sum_g \chi \chi_j^*$	$\mathbf{P}_{rs}^j =$ $\frac{d_j}{4} \sum_{g \in G} \mathbf{D}_{rs}^j \mathbf{D}^g$
A	1	1	1	1	2	$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
B	1	-1	1	-1	2	$\begin{bmatrix} 2 & \bar{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{2} & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$
E_{11}	1	i	-1	$-i$	1	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\bar{i} & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
E_{22}	1	$-i$	-1	i	1	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2\bar{i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

Tabelle 62 Beispiel: Projektionsoperatoren zum Dehnungstensors bei Symmetrie einer vierzähligen Drehachse in Richtung \mathbf{c}

4.4.2 Basisvektoren zum Dehnungstensor, Symmetrie 4

Produkt des Projektionsoperators mit dem Dehnungstensor	Komponente des Tensors	Symmetrie
$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ e_{23} \\ e_{13} \\ e_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} + e_{22} \\ e_{11} + e_{22} \\ e_{33} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$	$\frac{\Delta a}{a} + \frac{\Delta b}{b}$	A
	$\frac{\Delta c}{c}$	
<p>Berechnung analog zu der für A. Bei E_{11}, E_{22} wählt man den Realteil aus dem Ergebnisvektor.</p>	$\frac{\Delta a}{a} - \frac{\Delta b}{b}$	B
	$\Delta \gamma$	
	$\Delta \alpha$	E_{11}
	$\Delta \beta$	E_{22}

Tabelle 63 Berechnung der Anteile des Dehnungstensors zu irreduziblen Darstellungen

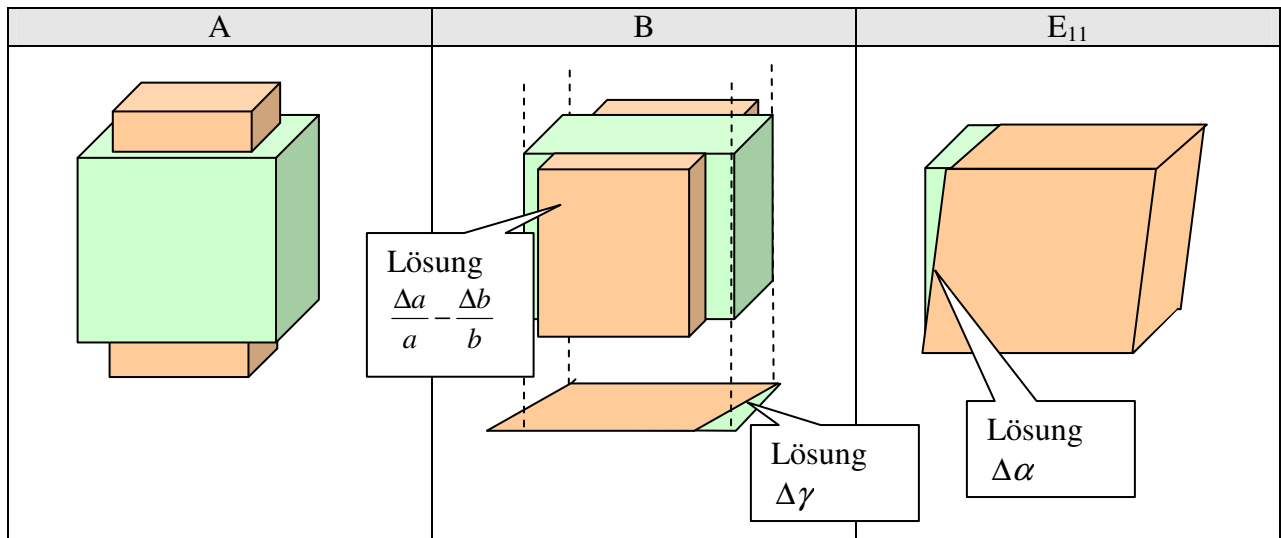


Tabelle 6465 Interpretation der Projektionsoperatoren zum Dehnungstensor: Der Tensor ist eine Summe von Anteilen, deren Symmetrieeigenschaft durch ihre irreduzible Darstellung gegeben ist

Literatur:

Autor	Titel	Verlag / Zeitschrift	Erscheinungsjahr
Siegfried Kästner	Vektoren, Spinoren, Tensoren	Akademie Verlag Berlin	1964
Eberhard Klingbeil	Tensorrechnung für Ingenieure	Bibliographisches Institut Mannheim/Wien/Zürich	1966
A. A. Maradudin, S. H. Vosko	Symmetry Properties of the Normal Vibrations of a Crystal	Review of Modern Phys- ics, Vol. 40, Number 1	1968
Morton Hamermesh	Group Theory and its Application to Physical Problems	Dover Publications, Inc. 31 East 2 nd Street, Mineola, N. Y. 11501	1989
C. J. Bradley A. P. Cracknell	The Mathematical The- ory of Solids	Clarendon Press, Oxford	1972