

# PUNKTGRUPPEN UND KRISTALLE

Naoki Pross, Tim Tönz

Hochschule für Technik OST, Rapperswil

10. Mai 2021

Slides: [s.0hm.ch/ctBsD](https://s.0hm.ch/ctBsD)

2D Symmetrien

Algebraische Symmetrien

3D Symmetrien

Matrizen

Kristalle

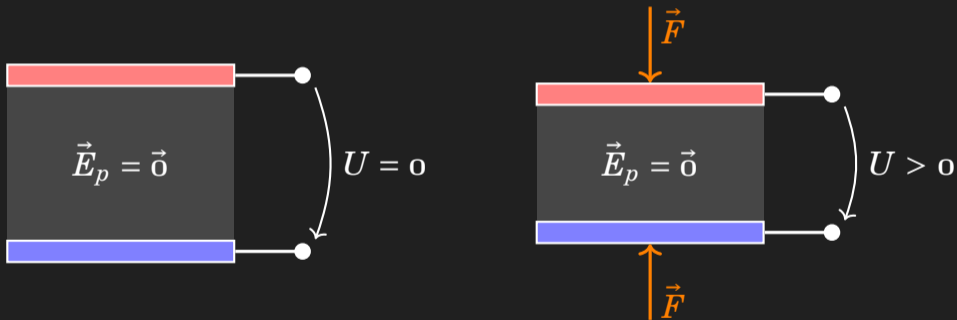
Anwendungen

▶ Was heisst *Symmetrie* in der Mathematik?

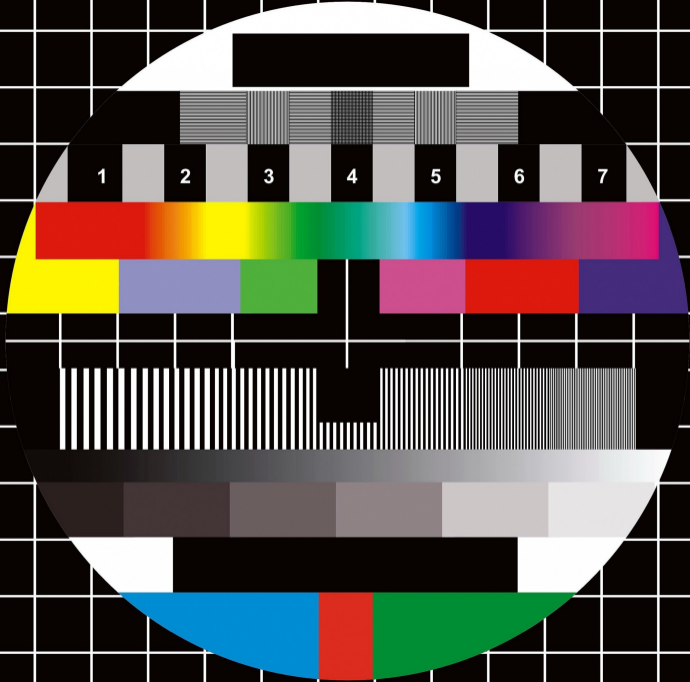
- ▶ Was heisst *Symmetrie* in der Mathematik?
- ▶ Wie kann ein Kristall modelliert werden?

- ▶ Was heisst *Symmetrie* in der Mathematik?
- ▶ Wie kann ein Kristall modelliert werden?
- ▶ Aus der Physik: Piezoelektrizität

- ▶ Was heisst *Symmetrie* in der Mathematik?
- ▶ Wie kann ein Kristall modelliert werden?
- ▶ Aus der Physik: Piezoelektrizität



# 2D Symmetrien





# Algebraische Symmetrien

## Produkt mit $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Produkt mit  $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Gruppe

$$G = \{1, i, -1, -i\}$$

$$= \{1, i, i^2, i^3\}$$

$$C_4 = \{1, r, r^2, r^3\}$$

Produkt mit  $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Darstellung  $\phi : C_4 \rightarrow G$

$$\phi(1) = 1 \quad \phi(r^2) = i^2$$

$$\phi(r) = i \quad \phi(r^3) = i^3$$

Gruppe

$$G = \{1, i, -1, -i\}$$

$$= \{1, i, i^2, i^3\}$$

$$C_4 = \{1, r, r^2, r^3\}$$

Produkt mit  $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Gruppe

$$G = \{1, i, -1, -i\}$$

$$= \{1, i, i^2, i^3\}$$

$$C_4 = \{1, r, r^2, r^3\}$$

Darstellung  $\phi : C_4 \rightarrow G$

$$\phi(1) = 1 \quad \phi(r^2) = i^2$$

$$\phi(r) = i \quad \phi(r^3) = i^3$$

Homomorphismus

$$\begin{aligned} \phi(r \circ 1) &= \phi(r) \cdot \phi(1) \\ &= i \cdot 1 \end{aligned}$$

Produkt mit  $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Gruppe

$$G = \{1, i, -1, -i\}$$

$$= \{1, i, i^2, i^3\}$$

$$C_4 = \{1, r, r^2, r^3\}$$

Darstellung  $\phi : C_4 \rightarrow G$

$$\phi(1) = 1 \quad \phi(r^2) = i^2$$

$$\phi(r) = i \quad \phi(r^3) = i^3$$

Homomorphismus

$$\begin{aligned} \phi(r \circ 1) &= \phi(r) \cdot \phi(1) \\ &= i \cdot 1 \end{aligned}$$

$\phi$  ist bijektiv  $\implies C_4 \cong G$

Produkt mit  $i$

$$1 \cdot i = i$$

$$i \cdot i = -1$$

$$-1 \cdot i = -i$$

$$-i \cdot i = 1$$

Gruppe

$$G = \{1, i, -1, -i\}$$

$$= \{1, i, i^2, i^3\}$$

$$C_4 = \{1, r, r^2, r^3\}$$

Darstellung  $\phi : C_4 \rightarrow G$

$$\phi(1) = 1 \quad \phi(r^2) = i^2$$

$$\phi(r) = i \quad \phi(r^3) = i^3$$

Homomorphismus

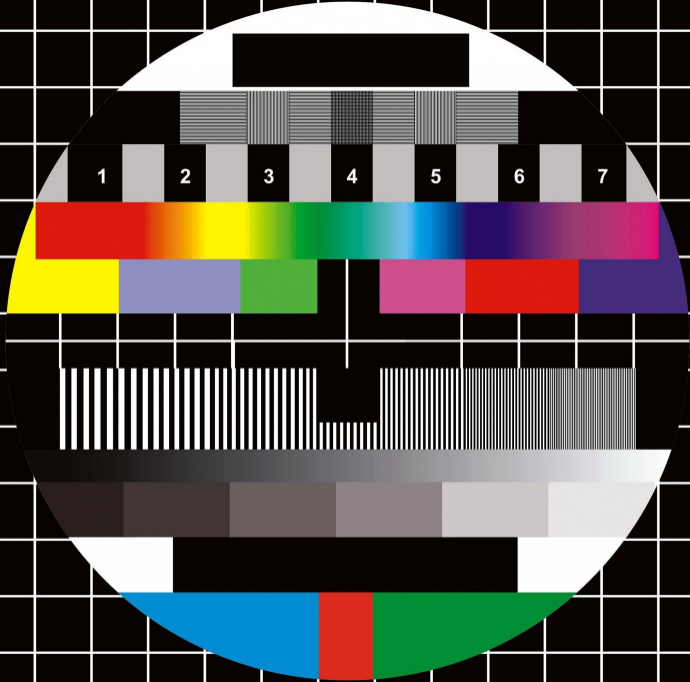
$$\begin{aligned} \phi(r \circ 1) &= \phi(r) \cdot \phi(1) \\ &= i \cdot 1 \end{aligned}$$

$\phi$  ist bijektiv  $\implies C_4 \cong G$

$$\begin{aligned} \psi : C_4 &\rightarrow (\mathbb{Z}/4\mathbb{Z}, +) \\ \psi(1 \circ r^2) &= 0 + 2 \pmod{4} \end{aligned}$$

# 3D Symmetrien





# Matrizen

## Symmetriegruppe

$$G = \{1, r, \sigma, \dots\}$$

## Symmetriegruppe

$$G = \{1, r, \sigma, \dots\}$$

## Matrixdarstellung

$$\Phi : G \rightarrow O(3)$$

$$g \mapsto \Phi_g$$

## Symmetriegruppe

$$G = \{1, r, \sigma, \dots\}$$

## Matrixdarstellung

$$\Phi : G \rightarrow O(3)$$

$$g \mapsto \Phi_g$$

## Orthogonale Gruppe

$$O(n) = \{Q : QQ^t = Q^tQ = I\}$$

## Symmetriegruppe

$$G = \{1, r, \sigma, \dots\}$$

## Matrixdarstellung

$$\begin{aligned}\Phi : G &\rightarrow O(3) \\ g &\mapsto \Phi_g\end{aligned}$$

## Orthogonale Gruppe

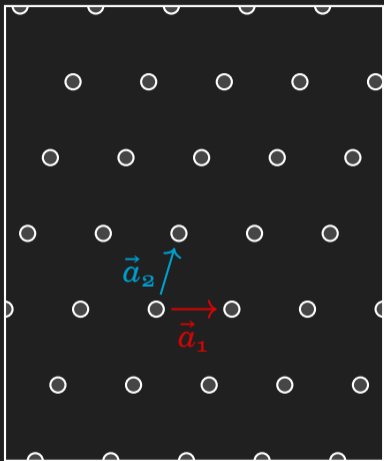
$$O(n) = \{Q : QQ^t = Q^tQ = I\}$$

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

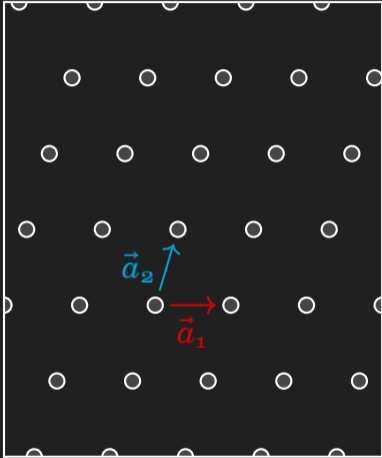
$$\Phi_\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Phi_r = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Kristalle

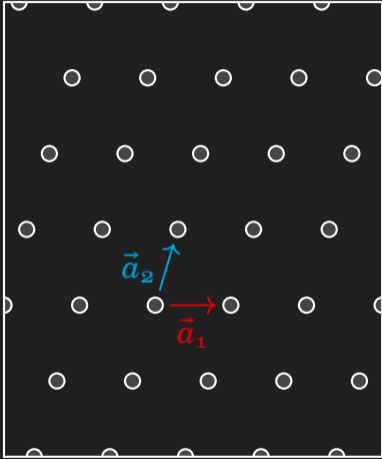






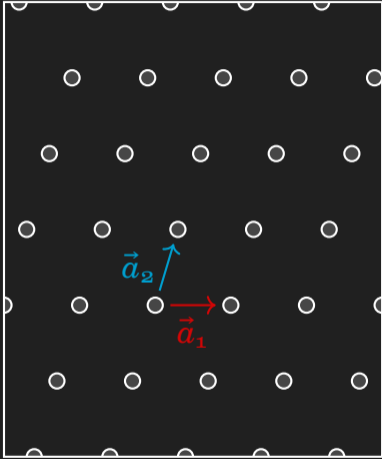
Kristallgitter:  $n_i \in \mathbb{Z}$ ,

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$$



Kristallgitter:  $n_i \in \mathbb{Z}$ ,  $\vec{a}_i \in \mathbb{R}^3$

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$



Kristallgitter:  $n_i \in \mathbb{Z}$ ,  $\vec{a}_i \in \mathbb{R}^3$

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Invariant unter Translation

$$Q_i(\vec{r}) = \vec{r} + \vec{a}_i$$

Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?

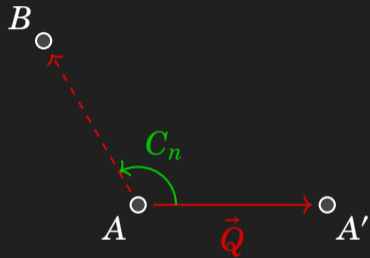
Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?

$A^\circ$

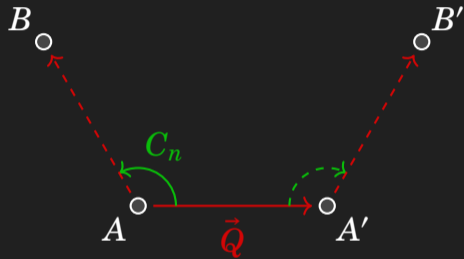
Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?



Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?

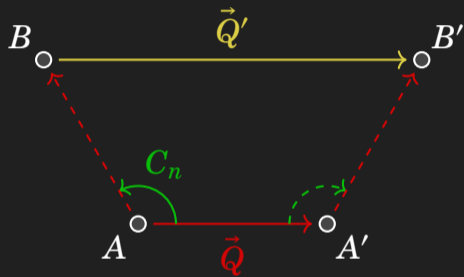


Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?



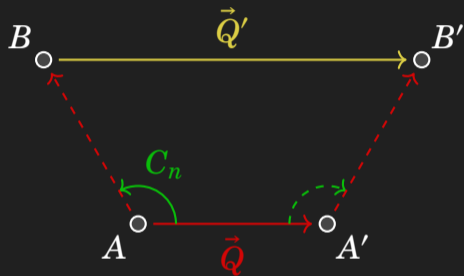


Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der  
anderen Symmetrien?



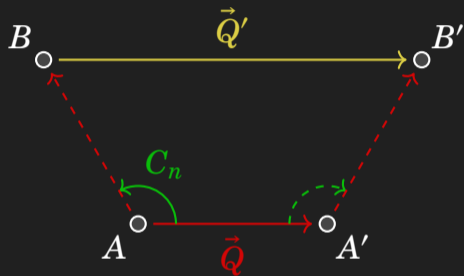
Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?

Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

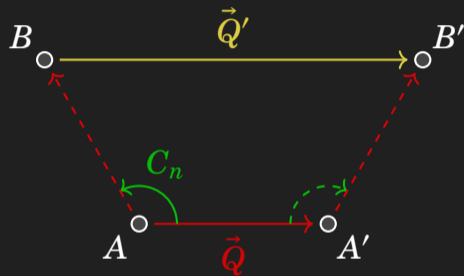


Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?

Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$



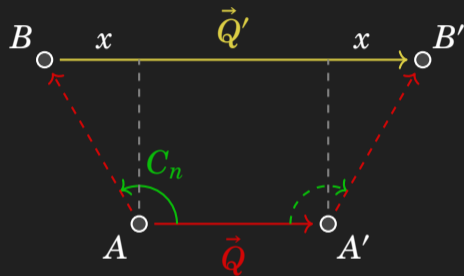
Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?



Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$q' = nq$$

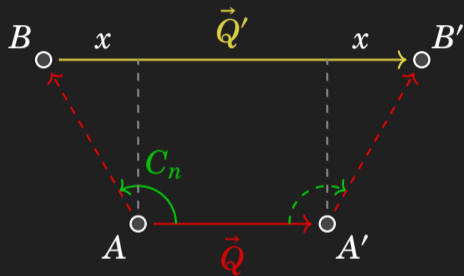
Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?



Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$q' = nq = q + 2x$$

Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?

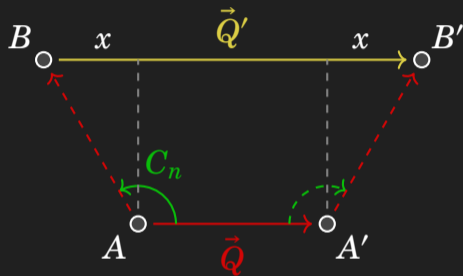


Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$q' = nq = q + 2x$$

$$nq = q + 2q \sin(\alpha - \pi/2)$$

Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?



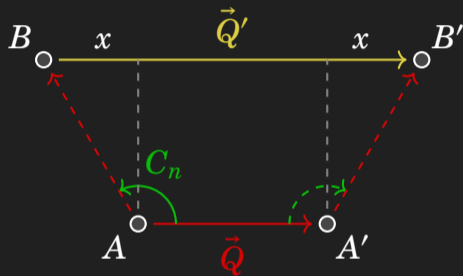
Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$q' = nq = q + 2x$$

$$nq = q + 2q \sin(\alpha - \pi/2)$$

$$n = 1 - 2 \cos \alpha$$

Wie kombiniert sich  $Q_i$  mit der anderen Symmetrien?



Sei  $q = |\vec{Q}|$ ,  $\alpha = 2\pi/n$  und  $n \in \mathbb{N}$

$$q' = nq = q + 2x$$

$$nq = q + 2q \sin(\alpha - \pi/2)$$

$$n = 1 - 2 \cos \alpha$$

Somit muss

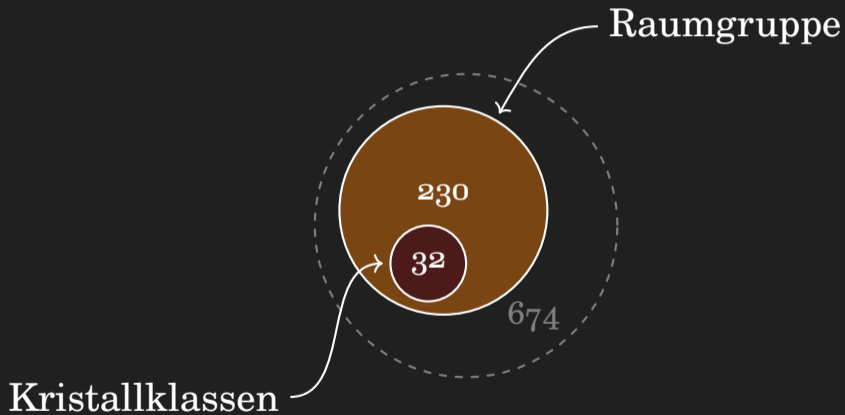
$$\alpha = \cos^{-1} \left( \frac{1-n}{2} \right)$$

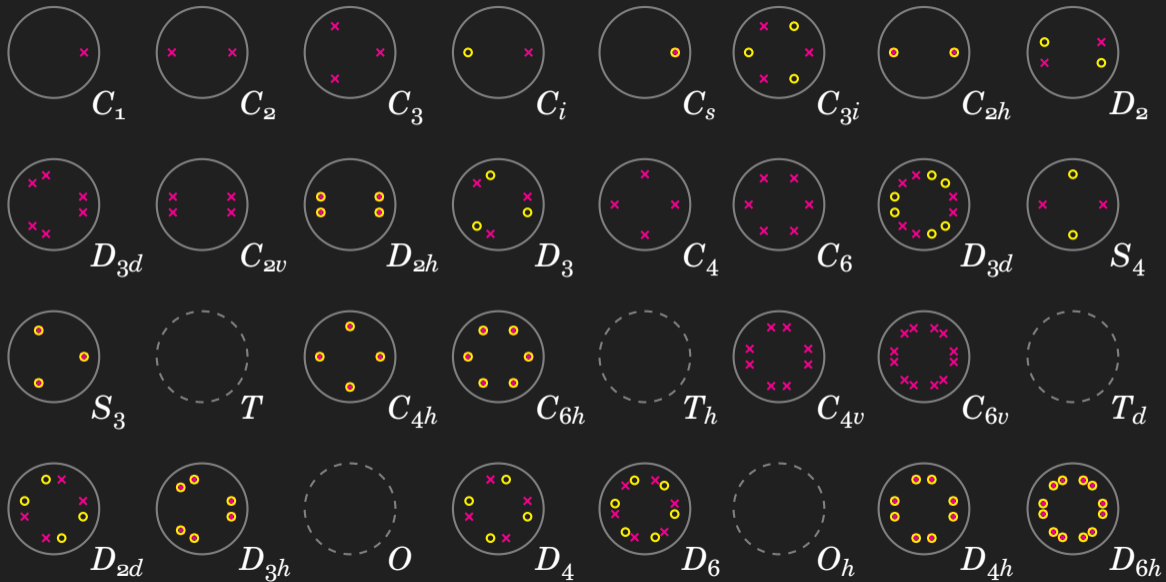
$$\alpha \in \{0^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ\}$$

$$n \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$$

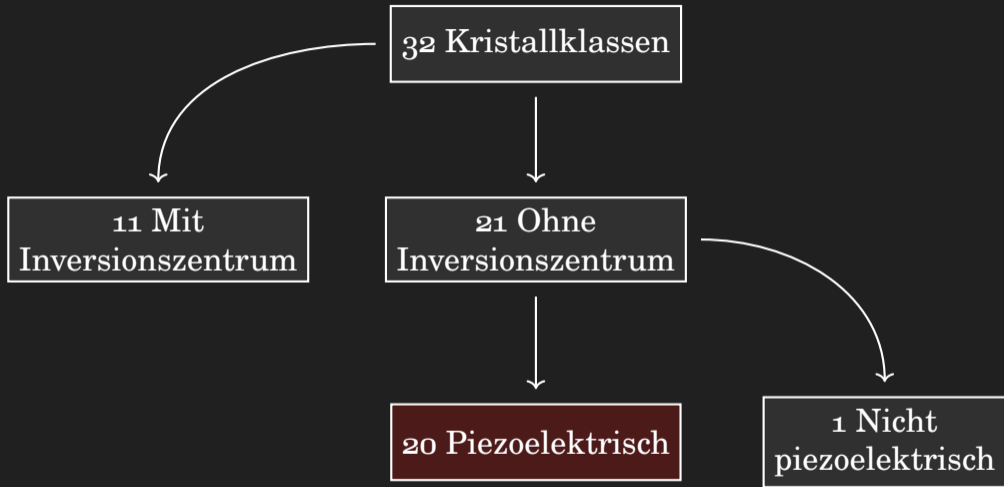


# Mögliche Kristallstrukturen

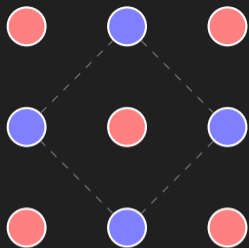




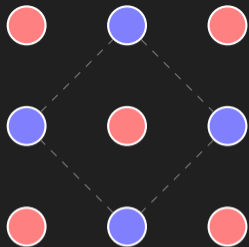
# Anwendungen



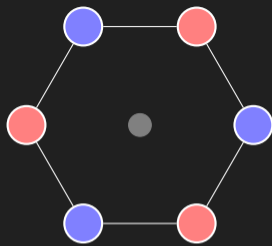
# Mit und Ohne Symmetriezentrum

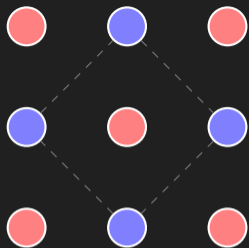


**Mit und Ohne  
Symmetriezentrum**



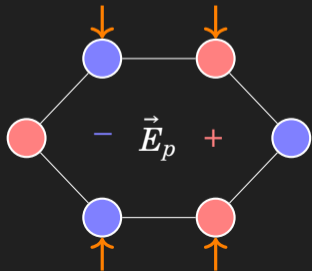
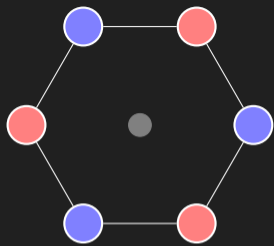
**Mit und Ohne  
Symmetriezentrum**



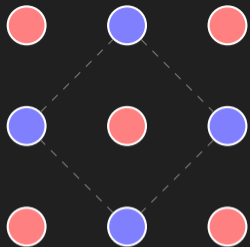


**Mit und Ohne  
Symmetriezentrum**

Polarisation Feld  $\vec{E}_p$

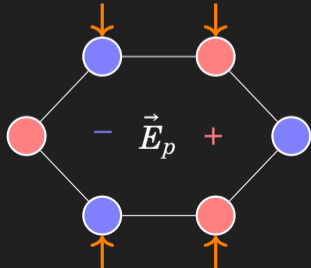
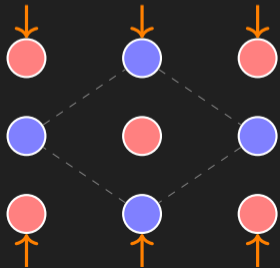
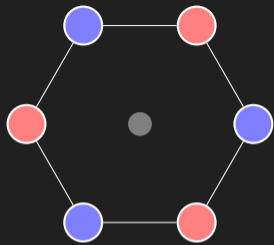


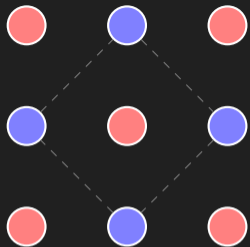




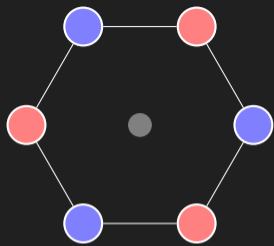
**Mit und Ohne  
Symmetriezentrum**

Polarisation Feld  $\vec{E}_p$

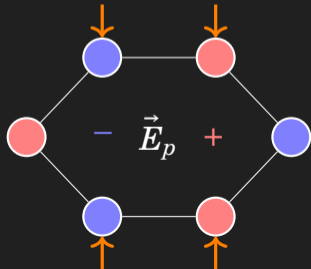
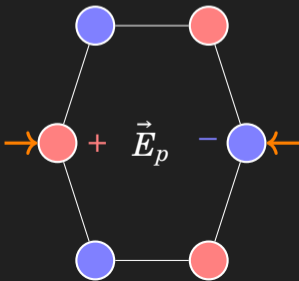
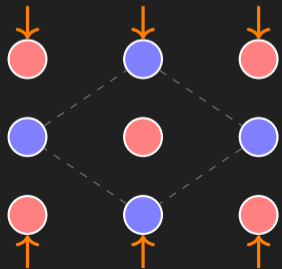


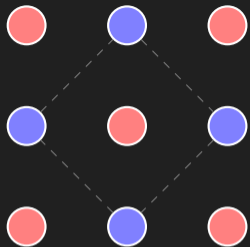


Mit und Ohne  
Symmetriezentrum

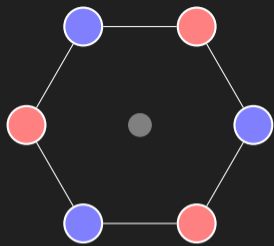


Polarisation Feld  $\vec{E}_p$

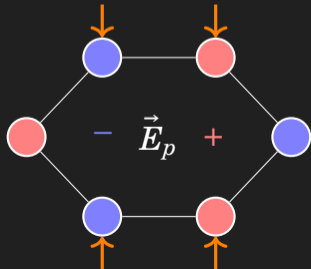
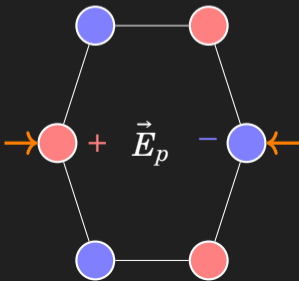
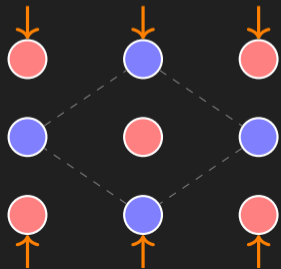




Mit und Ohne  
Symmetriezentrum



Polarisation Feld  $\vec{E}_p$



# Licht in Kristallen

Helmholtz Wellengleichung

$$\nabla^2 \vec{E} = \varepsilon \mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}$$

Ebene Welle

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp \left[ i \left( \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t \right) \right]$$

Anisotropisch Dielektrikum

$$(K\varepsilon)\vec{E} = \frac{k^2}{\mu\omega^2}\vec{E}$$

Symmetriegruppe und Darstellung

$$G = \{ \mathbb{1}, r, \sigma, \dots \}$$

$$\Phi : G \rightarrow O(n)$$

$$U_\lambda = \{ v : \Phi v = \lambda v \}$$

$$= \text{null} (\Phi - \lambda I)$$