Punktgruppen und Kristalle

Naoki Pross, Tim Tönz

Hochschule für Technik OST, Rapperswil

10. Mai 2021

Einleitung

2D Symmetrien

Algebraische Symmetrien

3D Symmetrien

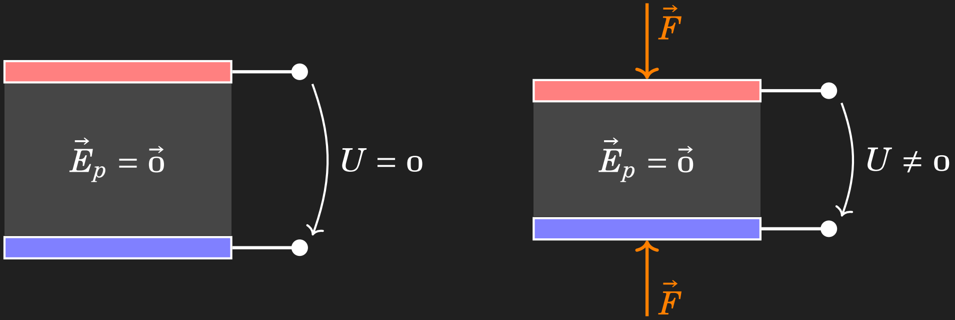
Matrizen

Kristalle

Anwendungen

Einleitung

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



2D Symmetrien

Algebraische Symmetrien

3D Symmetrien

Matrizen

Symmetriegruppe

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

Matrixdarstellung

$$\Phi : G \longrightarrow O(3)$$
$$g \mapsto \Phi_g$$

Orthogonale Gruppe

$$O(n) = \left\{Q \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R}) : QQ^t = Q^tQ = I\right\}$$

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

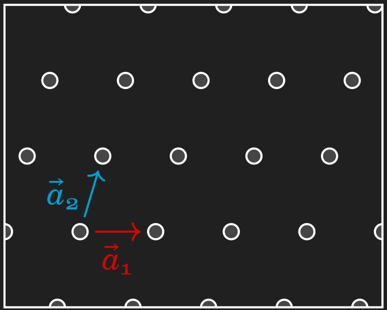
$$\Phi_\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

Kristalle

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

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

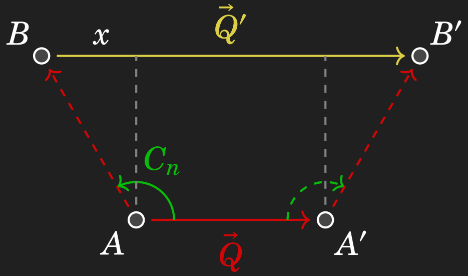


Invariant (symmetrisch) unten Translation

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

Mögliche Kristallstrukturen

Wie kombiniert sich Q_i mit der anderen Symmetrien?



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

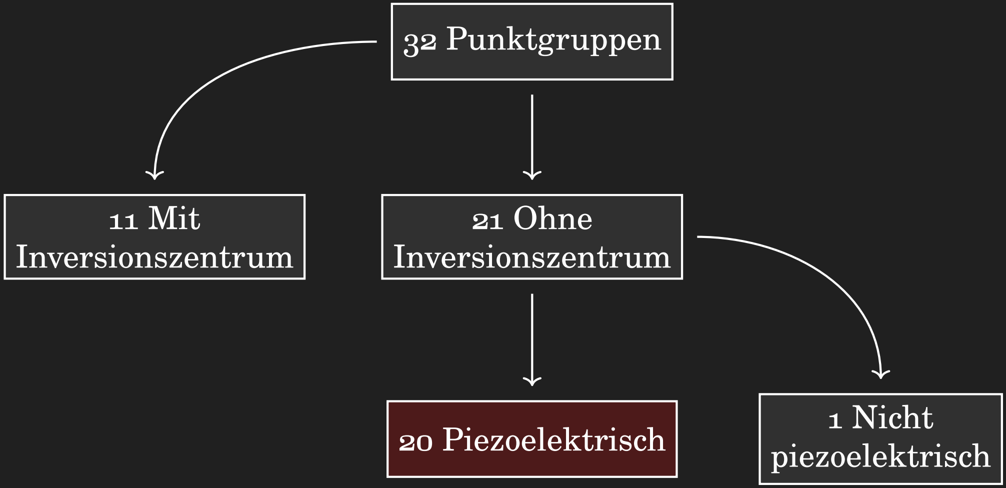
$$
\begin{aligned}
q' = nq &= q + 2x \\
nq &= q + 2q\sin(\alpha - \pi/2) \\
n &= 1 - 2\cos\alpha
\end{aligned}
$$

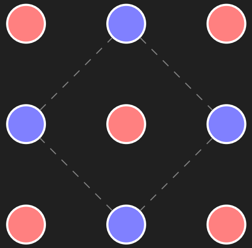
Somit muss

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

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

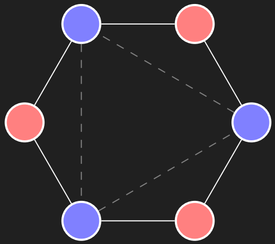
Anwendungen

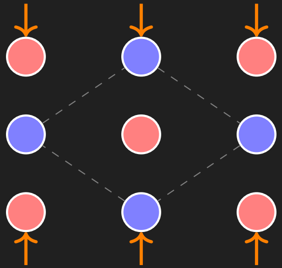

32 Punktgruppen
11 Mit Inversionszentrum
21 Ohne Inversionszentrum
20 Piezoelektrisch
1 Nicht piezoelektrisch

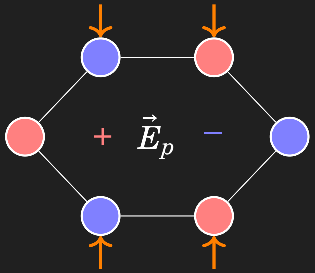


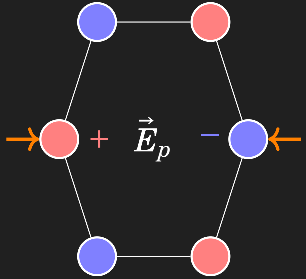
Mit und Ohne Symmetriezentrum

Polarisation Feld $\vec{E}_p$









Licht in Kristallen

Symmetriegruppe und Darstellung

$$G = \{\mathbb{1}, r, \sigma, \dots\}$$
$$\Phi : G \to O(n)$$

$$\begin{aligned} U_\lambda &= \{v : \Phi v = \lambda v\} \\ &= \mathrm{null}\,(\Phi - \lambda I) \end{aligned}$$

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

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

$$\vec{E} \in U_\lambda \implies (K\varepsilon)\vec{E} = \lambda\vec{E}$$

Ähenlich auch in der Mechanik

$$\vec{F} = \kappa\vec{x} \quad \text{(Hooke)}$$