Postadresse: Institut: Telefon: Telefax:

 $\begin{array}{l} \hbox{D-52056 Aachen, Germany} \\ \hbox{J\"{a}gerstra} \hbox{Be } 17\text{-}19, \, \hbox{D-52066 Aachen} \\ ++49 \,\, 241 \,\, 80 \,\, 96900 \\ ++49 \,\, 241 \,\, 80 \,\, 92184 \\ \hbox{http://www.xtal.rwth-aachen.de} \end{array}$

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

Lösung zur 13. Übung: Kristallphysik

Aufgabe 1:

Kristallklasse	Kristallsystem	spontane Polarisation erlaubt in Richtung
$\overline{mm2}$	orthorhombisch	[001]
$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	kubisch	_
$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	tetragonal	_
2	monoklin	[010]
$\bar{3}m$	trigonal	_
6mm	hexagonal	[001]
$\bar{1}$	triklin	_
m	monoklin	[u0w]

Aufgabe 2:

Die Wärmekapazität und Dichte sind skalare Größen; isotherme Kompressibilität, Piezoelektrizität und Elastizitätsmodul sind vektorielle bzw. tensorielle Größen.

Aufgabe 3:

Ein Tensor 2. Stufe ist symmetrisch, wenn $t_{ij}=t_{ji}$ für alle seine Tensorkomponenten t_{ij} gilt.

Aufgabe 4:

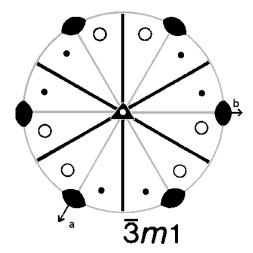
Tensor	Kristallklassen	Begründung
$\vec{T}_1 = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{pmatrix}$	$4mm, \frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m},$ 32	Die tetragonale, hexagonale und trigonale Symmetrie erzwingt, dass die ersten beiden Elemente der Hauptdiagonalen gleich sein müssen. In allen Kristallsystemen gilt $a=b\neq c$, sowie im tetragonalen $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ und im hexagonalen und trigonalen $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$
$\vec{T}_2 = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{22} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{pmatrix}$	mm2	Die orthorhombische Symmetrie bewirkt, dass nur auf der Hauptachse von Null verschiedene Elemente stehen. Es gilt $a\neq b\neq c$, sowie $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$.
$\vec{\vec{T}}_3 = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{11} \end{pmatrix}$	432, 23	In kubischen Kristallklassen sind alle Hauptdiagonalenelemente gleich. Es gilt $a=b=c$, sowie $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$.
$\vec{T}_4 = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{12} & t_{22} & t_{23} \\ t_{13} & t_{23} & t_{33} \end{pmatrix}$	$ar{1}$	Der Tensor besitzt an allen Positionen von Null verschiedene Werte. Somit kommen nur die Kristallklassen 1 und $\bar{1}$ in Frage. Im triklinen Fall gilt $a\neq b\neq c$, sowie $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^{\circ}$.
$\vec{T}_5 = \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & t_{13} \\ 0 & t_{22} & 0 \\ t_{13} & 0 & t_{33} \end{pmatrix}$	$\frac{2}{m}$	Im monoklinen Kristallsystem gibt es eine ausgezeichnete Richtung. Entsprechend steht dort in einem Tensor 2. Stufe ein Hauptdiagonalenelement "isoliert" (also jeweils auf seine Spalte und Zeile bezogen von Nullen umgeben) da. Es gilt $a \neq b \neq c$, sowie $\alpha = \beta = 90^{\circ} \neq \gamma$

Aufgabe 5:

a) Es ergibt sich folgender Tensor:

$$\vec{\vartheta} = \begin{pmatrix} 20, 8 & 0 & 0\\ 0 & 20, 8 & 0\\ 0 & 0 & 21, 3 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6} \cdot K^{-1}$$

- b) Die Kristallklasse von Korund ist $\bar{3}\frac{2}{m}1$ (Kurzschreibweise: $\bar{3}m$).
- c) Die stereographische Projektion für einen Flächenpol allgemeiner Lage der Kristallklasse $\bar{3}\frac{2}{m}1$:



d) Das Auftreten von Pyroelektrizität ist in Korund aus Symmetriegründen nicht erlaubt, da die Kristallklasse $\bar{3}\frac{2}{m}1$ ein Inversionszentrum enthält und somit nicht zu den pyroelektrischen Kristallklassen gehört.