

---

# Inhaltsverzeichnis

---

<b>Vorwort</b> . . . . .	V
<b>1. Hilfsmittel der Beschreibung von Kristalleigenschaften</b> . . . . .	1
1.1. Physikalische Größen . . . . .	1
1.1.1. Größengleichungen . . . . .	1
1.1.2. Einheiten und ihre Darstellung . . . . .	3
1.1.3. Klassifizierung physikalischer Größen . . . . .	3
1.2. Koordinatensysteme . . . . .	5
1.3. Skalare, Vektoren, Tensoren . . . . .	7
1.3.1. Skalare . . . . .	10
1.3.2. Vektoren . . . . .	11
1.3.3. Tensoren . . . . .	12
1.3.3.1. Tensoren 2. Stufe . . . . .	13
1.3.3.2. Tensoren höherer Stufe . . . . .	14
1.3.3.3. Transformationsverhalten . . . . .	15
1.3.3.4. Symmetrische und antisymmetrische Tensoren zweiter Stufe . . . . .	18
1.3.3.5. Eigenvektoren und -werte bzw. Hauptrichtungen und -werte . . . . .	19
1.3.3.6. Tensorflächen . . . . .	21
1.3.3.7. Äußere Symmetrie von Tensoren . . . . .	23
1.3.3.8. Beschreibung der inneren Symmetrie . . . . .	27
1.3.3.9. Matrixschreibweise . . . . .	27
1.4. Kontinuierliche Punktgruppen . . . . .	28
<b>2. Symmetrieprinzipien</b> . . . . .	32
2.1. Neumannsches Prinzip . . . . .	32
2.2. Curiesches Prinzip . . . . .	33
2.3. Onsager-Prinzip . . . . .	34
<b>3. Eigenschaftstensoren nullter Stufe</b> . . . . .	36
3.1. Symmetrie von Skalaren . . . . .	36
3.2. Massendichte . . . . .	36
3.2.1. Definition . . . . .	36
3.2.2. Meßprinzip und experimentelle Ergebnisse . . . . .	36
3.2.3. Atomistische Interpretation . . . . .	38
3.3. Wärmekapazität . . . . .	38
3.3.1. Experimenteller Befund und Definition . . . . .	38
3.3.2. Thermodynamische Beziehung zu anderen Eigenschaften . . . . .	41
3.3.3. Atomistische Interpretation . . . . .	43
3.3.3.1. Temperaturabhängigkeit . . . . .	43
3.3.3.2. Gekoppelte Schwingungen . . . . .	44
3.3.3.3. Phononen . . . . .	47

3.3.3.4.	DEBYESche Theorie . . . . .	47
3.3.3.5.	Weitere Beiträge zur Wärmekapazität . . . . .	49
3.4.	Drehung der Polarisationssebene . . . . .	50
3.4.1.	Experimenteller Befund . . . . .	50
3.4.2.	Symmetrieeinfluß . . . . .	51
3.4.3.	Atomistische Interpretation . . . . .	52
<b>4.</b>	<b>Eigenschaftstensoren erster Stufe . . . . .</b>	<b>53</b>
4.1.	Pyroelektrizität . . . . .	53
4.1.1.	Experimentelles . . . . .	53
4.1.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	55
4.1.3.	Atomistische Interpretation . . . . .	56
4.1.4.	Anwendungen . . . . .	57
4.2.	Elektrokalorischer Effekt . . . . .	57
4.3.	Pyromagnetismus . . . . .	58
4.3.1.	Magnetisches Moment und Antisymmetrie . . . . .	58
4.3.2.	Magnetische Punktgruppen . . . . .	60
4.3.3.	Experimentelles . . . . .	62
4.3.4.	Phänomenologische Beschreibung und Symmetrieeinfluß . . . . .	64
4.3.5.	Atomistische Interpretation . . . . .	67
4.4.	Magnetokalorischer Effekt . . . . .	68
<b>5.</b>	<b>Deformation und Spannung . . . . .</b>	<b>69</b>
5.1.	Beschreibung des verformten Zustandes . . . . .	69
5.1.1.	Definitionen . . . . .	69
5.1.2.	Geometrische Eigenschaften des Verzerrungszustandes . . . . .	71
5.2.	Beschreibung des Spannungszustandes . . . . .	73
5.3.	Matrixschreibweise . . . . .	75
<b>6.</b>	<b>Eigenschaftstensoren zweiter Stufe . . . . .</b>	<b>77</b>
6.1.	Thermische Ausdehnung . . . . .	77
6.1.1.	Experimenteller Befund . . . . .	77
6.1.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	78
6.1.2.1.	Tensor der linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten . . . . .	78
6.1.2.2.	Tensorflächen . . . . .	82
6.1.2.3.	Winkeländerung . . . . .	84
6.1.3.	Atomistische Interpretation . . . . .	85
6.1.3.1.	Wärmeschwingungen . . . . .	85
6.1.3.2.	Andere Einflüsse . . . . .	89
6.1.4.	Anwendungen . . . . .	89
6.1.5.	Vielkristalle . . . . .	90
6.2.	Thermoelastizität . . . . .	91
6.2.1.	Einführung der Materialgrößen . . . . .	91
6.2.2.	Inhomogene Temperaturverteilung . . . . .	92
6.3.	Umkehreffekte . . . . .	94
6.4.	Dielektrizitätskonstante . . . . .	94
6.4.1.	Experimentelles . . . . .	94
6.4.1.1.	Dielektrische Polarisierung . . . . .	94
6.4.1.2.	Doppelbrechung . . . . .	97
6.4.1.3.	Starke Absorption . . . . .	99
6.4.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	101
6.4.3.	Optik bei schwacher Absorption (Kristalloptik) . . . . .	103

6.4.3.1.	Grundgleichung der Kristalloptik . . . . .	103
6.4.3.2.	Lösung der Grundgleichung für eine spezielle Orientierung $\vec{e}_k$ . . . . .	105
6.4.3.3.	Lösung für beliebige Wellennormalenrichtung $\vec{e}_k$ . . . . .	107
6.4.3.4.	Strahlausbreitung . . . . .	109
6.4.3.5.	Tensorflächen und Symmetrieeinfluß . . . . .	111
6.4.3.6.	Reflexion und Brechung . . . . .	116
6.4.3.6.1.	Einfallende Welle . . . . .	116
6.4.3.6.2.	Reflektierte und gebrochene Wellen . . . . .	119
6.4.4.	Optik bei starker Absorption . . . . .	120
6.4.4.1.	Lösung der MAXWELLSchen Gleichungen . . . . .	120
6.4.4.2.	Symmetrieeinfluß . . . . .	123
6.4.4.3.	Reflexion und Brechung . . . . .	123
6.4.5.	Mikroskopische Interpretation . . . . .	125
6.4.5.1.	Schwache Absorption . . . . .	125
6.4.5.2.	Starke Absorption . . . . .	127
6.4.6.	Anwendungen . . . . .	132
6.5.	Magnetische Polarisierung . . . . .	132
6.5.1.	Experimenteller Befund . . . . .	132
6.5.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	135
6.5.3.	Atomistische Betrachtung . . . . .	136
6.6.	Magnetoelektrische Polarisierung . . . . .	138
6.6.1.	Experimenteller Befund . . . . .	138
6.6.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	139
6.7.	Drehung der Polarisations ebene und Doppelbrechung . . . . .	142
6.7.1.	Experimenteller Befund . . . . .	142
6.7.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	143
6.7.2.1.	Gyrationstensor . . . . .	143
6.7.2.2.	Lösung der Grundgleichung . . . . .	144
6.7.2.3.	Symmetrieeinfluß . . . . .	146
6.8.	Elektrische Leitfähigkeit . . . . .	148
6.8.1.	Erfahrungstatsachen . . . . .	148
6.8.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	150
6.8.3.	Ströme in Platten und Stäben . . . . .	152
6.8.4.	Atomistische Betrachtung des Elektronentransports . . . . .	154
6.8.4.1.	Elektronen als Wellenpakete . . . . .	154
6.8.4.2.	Energiespektrum . . . . .	155
6.8.4.3.	Dynamik von Kristallelektronen . . . . .	156
6.8.4.4.	Bewegung im elektrischen Feld . . . . .	158
6.8.4.5.	Leiter — Halbleiter — Nichtleiter . . . . .	158
6.8.4.6.	Elektrischer Widerstand . . . . .	159
6.8.4.7.	Temperaturabhängigkeit in Metallen . . . . .	161
6.8.4.8.	Temperaturabhängigkeit in Halbleitern . . . . .	162
6.8.5.	Ionenleitung . . . . .	163
6.8.6.	Supraleitung . . . . .	163
6.8.6.1.	Experimenteller Befund . . . . .	163
6.8.6.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	165
6.8.6.3.	Mikroskopische Beschreibung . . . . .	165
6.8.7.	Anwendungen . . . . .	166
6.9.	Thermische Leitfähigkeit . . . . .	167
6.9.1.	Erfahrungstatsachen . . . . .	167
6.9.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	170
6.9.3.	Grundgleichung des Wärmeleitungsproblems . . . . .	170
6.9.4.	Einfache Lösungen . . . . .	171
6.9.5.	Umkehrreffekt . . . . .	173

---

## Inhaltsverzeichnis

---

6.9.6.	Mikroskopische Interpretation . . . . .	173
6.9.6.1.	Elektronenanteil . . . . .	173
6.9.6.2.	Zusammenhang mit Wärmekapazität . . . . .	176
6.9.6.3.	Wärmeschwingsanteil . . . . .	176
6.9.7.	Anwendungen . . . . .	177
6.10.	Thermoelektrische Effekte . . . . .	178
6.10.1.	SEEBECK-Effekt . . . . .	178
6.10.1.1.	Erfahrungstatsachen . . . . .	178
6.10.1.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	182
6.10.2.	PELTIER-Effekt . . . . .	183
6.10.2.1.	Erfahrungstatsachen . . . . .	183
6.10.2.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	184
6.10.3.	THOMSON-Effekt . . . . .	185
6.10.3.1.	Erfahrungstatsachen . . . . .	185
6.10.3.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	187
6.10.4.	BRIDGMAN-Effekt . . . . .	188
6.10.5.	Thermodynamische Beschreibung und Zusammenspiel aller thermoelektrischen Effekte . . . . .	189
6.10.5.1.	Homogene isotrope Substanzen . . . . .	189
6.10.5.2.	Inhomogene isotrope Substanzen . . . . .	190
6.10.5.3.	Anisotrope Substanzen . . . . .	191
6.10.6.	Atomistische Interpretation der thermoelektrischen Effekte . . . . .	193
6.10.6.1.	BOLTZMANN-Gleichung . . . . .	193
6.10.6.2.	Kinetische Koeffizienten . . . . .	195
6.10.6.3.	SEEBECK-Koeffizient . . . . .	196
6.10.6.4.	Einfluß der elektronischen Struktur . . . . .	197
6.10.7.	Anwendungen . . . . .	198
6.11.	Diffusion . . . . .	200
6.11.1.	Experimentelle Tatsachen . . . . .	201
6.11.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	204
6.11.2.1.	Ficksche Gesetze . . . . .	204
6.11.2.2.	Einfache Lösungen . . . . .	206
6.11.3.	Atomistische Vorgänge bei der Diffusion . . . . .	207
6.11.3.1.	Punktfehlerbewegung . . . . .	207
6.11.3.2.	Kinetik der Diffusion . . . . .	208
6.11.3.3.	Korrelationseffekt . . . . .	210
6.11.4.	Anwendungen . . . . .	213
<b>7.</b>	<b>Eigenschaftstensoren dritter Stufe . . . . .</b>	<b>214</b>
7.1.	Piezoelektrizität . . . . .	214
7.1.1.	Experimenteller Befund . . . . .	214
7.1.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	218
7.1.3.	Matrixdarstellung von $\overset{3}{\rightarrow}d$ . . . . .	220
7.1.4.	Wirkung der Symmetrie des Materials auf die Form der Materialkonstantenmatrix . . . . .	223
7.1.5.	Charakteristische Tensorflächen . . . . .	225
7.1.6.	Atomistische Interpretation . . . . .	227
7.2.	Reziproker piezoelektrischer Effekt . . . . .	228
7.2.1.	Experimentelles . . . . .	228
7.2.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	229
7.2.3.	Atomistische Beschreibung . . . . .	231
7.3.	Anwendungen . . . . .	231
7.3.1.	Elektromechanische Kopplung . . . . .	232
7.3.2.	Orientierungsabhängigkeit . . . . .	235

---

## Inhaltsverzeichnis

---

7.3.3.	Piezoelektrische Texturen . . . . .	236
7.3.4.	Resonator . . . . .	237
7.4.	Piezomagnetismus . . . . .	238
7.4.1.	Experimenteller Befund . . . . .	238
7.4.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	239
<b>8.</b>	<b>Eigenschaftstensoren vierter Stufe am Beispiel der elastischen Eigenschaften . . . . .</b>	<b>243</b>
8.1.	Experimenteller Befund . . . . .	243
8.2.	Phänomenologische Beschreibung . . . . .	246
8.3.	Symmetrieeinfluß auf die elastischen Materialgrößen . . . . .	247
8.4.	Spezielle Spannungs- und Verzerrungszustände . . . . .	252
8.5.	Übergang Einkristall – Vielkristall . . . . .	258
8.6.	Elastische Wellen in Kristallen . . . . .	260
8.7.	Zum Tensorflächenproblem . . . . .	262
8.8.	Mikroskopische Deutung elastischer Konstanten . . . . .	265
<b>9.</b>	<b>Effekte höherer Ordnung . . . . .</b>	<b>268</b>
<b>10.</b>	<b>Zusammenfassung aller Materialgleichungen . . . . .</b>	<b>271</b>
10.1.	Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht . . . . .	271
10.2.	Systeme im stationären Zustand . . . . .	273
	<b>Literaturverzeichnis . . . . .</b>	<b>274</b>
	<b>Anhang . . . . .</b>	<b>286</b>
	Konstanten und Umrechnungsbeziehungen . . . . .	286
	Tabellen A1 bis A6 und Abbildungen A1 bis A4 . . . . .	288
	Quellenverzeichnis . . . . .	319
	Sachverzeichnis . . . . .	320