

# **Kristalle und Mathematik**

**Gert-Martin Greuel**



# Kristalle und Mathematik

Gert-Martin Greuel

Kristalle haben die Menschen seit jeher fasziniert. Ihre regelmäßige Geometrie, ihre besondere Symmetrie, aber auch ihre geheimnisvolle Farbvielfalt überraschen und erfreuen immer wieder. In der Natur sind Mineralien häufig als Kristalle ausgebildet. Sie sind Bestandteile von Gesteinen, wobei ihre Kristallform wegen der unregelmäßigen Korngrenzen meist nicht zu erkennen ist. In Gesteinshohlräumen können die Mineralien frei auskristallisieren und zeigen dann ihre Kristallform. Diese kann man z.B. auch bei Schneeflocken, die im Wachstum nicht begrenzt werden, erkennen. Bekannt sind Kristalle als Ausstellungsstücke in Museen und Privatsammlungen oder geschliffen als Edel- und Schmucksteine. Weniger bekannt ist, dass der überwiegende Teil der festen Erde (etwa 98%) kristallin ist, was bedeutet, dass Kristalle einen stabilen Zustand der kondensierten Materie darstellen.

Der Begriff Kristall stammt aus dem Griechischen (krystallos bedeutet Eis) und er wurde zuerst im Zusammenhang mit Bergkristallen verwendet. Wahrscheinlich glaubte man, dass Kristalle in extremer Kälte entstehen, was allerdings nicht der Fall ist. Kristalline Mineralien entstehen vor allem unter hohem Druck und hoher Temperatur beim Abkühlen der Schmelze aus dem Erdinneren.

Unter Kristallen verstehen wir Festkörper, deren Bausteine (Atome, Ionen, Moleküle) regelmäßig in einer Kristallstruktur – mathematisch beschrieben durch ein Gitter mit einer Basis – geordnet sind. Die Definition was ein Kristall ist und die Beschreibung seiner geometrischen Struktur geschieht heute in der modernen Kristallographie mit Hilfe der Beugungsmuster bei der Bestrahlung mit Röntgenstrahlen oder anderen Strahlenquellen.

Im Folgenden gebe ich einen kurzen Überblick über die Geschichte der Kristallographie und über die mathematisch-geometrische Beschreibung der Kristallstrukturen.



Fig.1 Fluoritoktaeder auf Calcit



Fig.2 Flussspatkristall

## 1. Anfänge der Kristallforschung

Die erste uns bekannte systematische Abhandlung über Mineralien stammt von dem griechischen Naturforscher Theophrastos von Eresos (371-287 v.Chr.), einem Schüler von Platon und Aristoteles, und findet sich in seinem Werk „On Stones“ (s. [1]).

In der Enzyklopädie „Historia Naturalis“ von Plinius dem Älteren (23-79 n.Chr.), einem umfassenden naturkundlichen Werk von 37 Bänden, findet sich ebenfalls eine Abhandlung zu seltenen Steinen und mineralischen Substanzen (vgl. [2]), die bis ins hohe Mittelalter die Grundlage des Wissens der Mineralogie darstellte. Im Mittelalter wurde den Kristallen und Steinen unter anderem auch heilende Kräfte zugeschrieben, etwas, was man auch heute noch gelegentlich in der Esoterik findet.

Da bis zum Beginn des 19. Jahrhunderts weder Möglichkeiten zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung noch der optischen Eigenschaften der Kristalle bestanden, sind diese alten Untersuchungen heute nur noch wissenschaftshistorisch von Interesse.

## 2. Kristallformen und Polyeder

Die regelmäßigen Kristallformen erinnern den Mathematiker sofort an die regelmäßigen konvexen Polyeder, insbesondere an die *regulären Polyeder*, auch *platonische Körper* genannt, deren Seitenflächen alle aus denselben gleichseitigen Flächen bestehen und von denen in jeder Ecke gleich viele zusammenstoßen. Von den Platonischen Körpern gibt es genau fünf (Tetraeder, Hexaeder oder Würfel, Oktaeder, Dodekaeder und Ikosaeder), deren Seitenflächen jeweils gleichseitige Dreiecke, Vierecke oder Fünfecke sind. Die Klassifikation der regulären Polyeder (nämlich, dass es genau diese fünf regulären Polyeder und keine weiteren gibt) durch die griechischen Mathematiker, insbesondere durch Platon und Euklid, war vielleicht der erste strenge Klassifikationsansatz in der Mathematik.



Fig.3 Platonische Körper: Ikosaeder, Dodekaeder, Hexaeder, Oktaeder, Tetraeder

Tatsächlich gibt es Mineralien, deren Kristalle fast exakte reguläre Tetraeder, Hexaeder (siehe Fig.2) oder Oktaeder (siehe Fig.1) darstellen. Dodekaeder und Ikosaeder können hingegen keine Kristallformen sein (das ergibt sich aus der Translationssymmetrie, siehe Abschnitt 8), sie kommen aber in der belebten Natur vor (z.B. als Formen von Viren).

Nicht reguläre Dodekaeder und Ikosaeder kommen dagegen als Kristallformen vor. Zum Beispiel kann der Pyrit die Gestalt eines kubischen Pentagonododekaeders haben, das äußerlich leicht mit den regulären Dodekaeder verwechselt werden kann. Jeder der 12 Flächen ist ein Fünfeck, aber mit vier kürzeren und einer längeren Seite. Es besitzt eine kubische Symmetrie.

Neben den Platonischen Körpern spielen die *Archimedischen Körper* eine wichtige Rolle, deren Seitenflächen aus (verschiedenen) regelmäßigen Flächen bestehen, so dass sich jede Ecke in eine beliebige andere Ecke durch eine Symmetrie des Körpers (also durch eine Drehung oder Spiegelung) überführen lässt. Sie lassen sich alle als gestutzte Platonische Körper realisieren, d.h. es wird eine Ecke so abgeschnitten, dass an Stelle der Ecke des Polyeders eine reguläre Fläche entsteht (beim Würfel z.B. ein gleichseitiges Dreieck).

Für die Kristallographie noch wichtiger sind die *Catalanischen* oder *dual-Archimedischen Körper*, die aus nur einer Flächenart bestehen. Sie haben aber verschiedene Eckenarten, denn die Dualität besagt, dass an einer Ecke eines Archimedischen Körpers die Fläche eines Catalanischen Körpers entsteht. Z.B. ist das Rhombendodekaeder ein Catalanischer Körper, der dual zum Kubooktaeder ist. Das Rhombododekaeder ist eine typische Kristallform und kommt in der Natur als Kristallform bei Mineralien der Granatgruppe vor.

Weitere häufige Kristallformen sind Prismen, die aus zwei parallelen, deckungsgleichen, regulären Vielecken und den sie verbindenden Mantelflächen bestehen.

### 3. Kristalle und griechische Mathematik

Ganz sicher waren den griechischen Mathematikern die Kristallformen und ihre Symmetrien bekannt. Es ist jedoch nicht so, dass die Studien der griechischen Mathematiker zu den regelmäßigen Polyedern mit den Kristallen in Verbindung gestanden hätten oder gar durch diese motiviert worden wären. Jedenfalls gibt es dafür offenbar keine Belege ([3], p. 342). Im Gegenteil, die vollkommene Symmetrie der regulären Polyeder war für die platonische Philosophie der Ausdruck einer vollkommenen, ewigen Schönheit, unabhängig von vergänglichen irdischen Realisierungen (vgl. [3], p. 340).

Hierin ist die griechische Philosophie in mancher Beziehung ähnlich zu Teilen der modernen, insbesondere der reinen Mathematik, die zweckfrei nach innermathematischen Strukturen forscht. Sie ist nur ihren eigenen Axiomen und logischen Schlussfolgerungen verpflichtet, wozu weder Anschauung noch Erfahrung nötig oder erwünscht sind. Dennoch stellen wir fest, dass die Mathematik, auch die reine Mathematik, heute mehr denn je unverzichtbar für das Verständnis naturwissenschaftlicher Vorgänge und darüber hinaus zur Triebfeder industrieller und ökonomischer Innovation geworden ist. Die dahinter liegenden Gründe, dass Idee und Wirklichkeit nicht voneinander getrennt sind, sind uns auch heute weitgehend unbekannt.

Ganz sicher besteht aber ein Zusammenhang zwischen der von den Menschen als schön empfundenen Gestalt der Kristalle und der Tatsache, dass sich die griechischen Mathematiker mit den regelmäßigen Polyedern befassten. Sie hätten ja auch etwas anderes untersuchen können. Aber die Suche nach einer unvergänglichen Vollkommenheit, nach dem Guten, hängt laut Platon mit der Schönheit und der Regelmäßigkeit zusammen: „Nun ist alles Gute schön, das Schöne aber darf des Ebenmaßes nicht entbehren“ (Platon, *Timaios*, 87c, 4-5).

### 4. Kepler und die Schneeflocke

Die Verbindung der Untersuchungen zur Kristallgestalt mit den aus der Antike überlieferten Studien zu den mathematischen Formen der Polyeder scheint erst in der Renaissance stattgefunden zu haben ([3], p. 342). Die Harmonie der Platonischen Körper war für Johannes Kepler (1571-1630) der Grund, die Harmonie der Himmelskugeln mit ihrer Hilfe zu beschreiben. Sein Versuch, zu beweisen, dass die Abstände der Planeten durch ein Schalenmodell aus Kugeln um ineinander geschachtelter regulärer Polyeder gegeben sind, scheiterte jedoch. Er gab dieses Modell daher auf und entwickelte erstmals das heute noch gültige Modell der Ellipsen als Bahnen der Planeten um die Sonne.

Die Beziehung von Kepler zu Kristallen finden wir in seiner kleinen Abhandlung zur Symmetrie von Schneeflocken ([4]). Er entdeckte, dass natürliche Kräfte die Entstehung der einzigartigen Geometrie und die sechszählige Symmetrie der Schneeflocke bewirkten. Dabei konnte er zu seiner Zeit die genaue physikalische Begründung noch nicht geben. Nämlich, dass die Komponenten der Materie, also die Atome und Moleküle, stets so angeordnet sind, dass sie einen Zustand minimaler Energie realisieren. Dies führt bei Kristallen, aber auch bei der Schneeflocke zu wunderschönen symmetrischen Formen.



Fig.4 Schneeflocke

Keplers Versuch die sechseckige Form der Schneekristalle durch einen Aufbau aus kleinsten Teilchen minimalen Abstands zu erklären, führte ihn in derselben Arbeit dazu, die maximale Dichte von Kreis- und Kugelanordnungen zu studieren.

Dabei vermutete er, dass die dichteste Kugelpackung, die Packung „auf Lücke“ sei, also diejenige, die wir bei einer Orangenpyramide auf dem Markt sehen. Diese *Keplersche Vermutung* wurde erst fast 400 Jahre später, nämlich im Jahr 2003, von dem amerikanischen Mathematiker Thomas Hales bewiesen, z.T. mit aufwändigen Computerprogrammen.

## 5. Beginn der Kristallographie

Schon um 1669 entdeckte Nicolaus Steno (1638-1686) bei der Untersuchung von Quarz die Winkelkonstanz. Das bedeutet, dass die Winkel zwischen zwei gleichen Flächen eines Kristalls immer dieselben sind, unabhängig von Größe, Form und Bildungsbedingungen des Kristalls. Steno vermutete diese Winkelkonstanz für alle Kristalle und begründete mit seinen Untersuchungen den Beginn der Kristallographie, also der Wissenschaft von den Kristallen.

Die allgemeine Gültigkeit der Winkelkonstanz wurde später um 1783 von Jean Baptist Romé de L'Isle durch systematische Untersuchung und detaillierte Beschreibung von ca. 500 verschiedenen Kristallen empirisch nachgewiesen.

Einen Schritt weiter ging René-Just Haüy in seinem „*Traité de minéralogie etc.*“, Paris 1801. Dort beschrieb er den Aufbau der Kristalle aus kleineren Einheiten (er nannte sie „integrierende Moleküle“), die immer die gleiche Gestalt wie der Kristall selbst haben, was er aus dem Bruchstücken eines zu Boden gefallenen Kalkspats schloss. Die Entdeckung, dass sich die äußere Form von Kristallen aus der periodischen Anordnung elementarer Baugruppen ableiten lässt, ist für die Kristallographie fundamental. Daraus lässt sich z.B. die Winkelkonstanz leicht erklären. Haüy wird deshalb heute auch als „Vater der Kristallographie“ bezeichnet.

## 6. Moderne Kristallographie

Der Beweis, dass Kristalle tatsächlich aus regelmäßig arrangierten Einheiten bestehen, gelang jedoch erst Max von der Laue (1879-1960) und seinen Mitarbeitern 1912. Sie entdeckten die *Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen* und die dadurch erzeugten (vom Kristall abhängigen) regelmäßigen Punktmuster. Aufgrund dieser Entdeckung und deren theoretischer Begründung erhielt von der Laue 1914 den Nobelpreis für Physik.

Schon 1913 zeigten William Henry und sein Sohn William Lawrence Bragg, dass Röntgenstrahlen sogar dazu benutzt werden können, die Atompositionen innerhalb eines Kristalls genau zu bestimmen und damit seine dreidimensionale Struktur zu entschlüsseln. Beide erhielten dafür 1915 den Nobelpreis für Physik.

Während bis dahin die geometrische Optik in der Kristallographie vorgeherrscht hatte, wird in der modernen Kristallographie fast ausschließlich die *Strukturanalyse mit Röntgenstrahlen* oder anderen Strahlenquellen zur Untersuchung der Beugungsmuster verwendet. So sind heute einige hunderttausende solcher Strukturen - von kleinen anorganischen und organischen Verbindungen bis hin zu großen Biomolekülen - in Datenbanken gespeichert, die stetig ergänzt werden.

Die Röntgenkristallographie verfeinerte ihre Methoden immer weiter, so dass zwischen 1920 und 1970 auch die Struktur wichtiger biologischer Moleküle (z.B. Cholesterin, Penicillin, Insulin) mit großen Auswirkungen auf die Gesundheitsversorgung bestimmt werden konnte. Die wichtigste Entdeckung in diesem Zusammenhang war sicher die Entschlüsselung der DNA durch James Watson und Francis Crick durch die Analyse von Beugungsexperimenten, wofür sie 1962 zusammen mit Maurice Wilkins den Nobelpreis für Physiologie oder Medizin erhielten.

Aus neuester Zeit sind besonders zwei Entdeckungen hervorzuheben. Das Graphen, als erstes Beispiel einer neuen Klasse von zweidimensionalen kristallinen Materialien mit einzigartigen elektronischen und mechanischen Eigenschaften (Nobelpreis für Physik an Andre Geim und Konstantin Novoselov 2010) sowie die *Quasikristalle* (Nobelpreis für Chemie an Daniel Schechtman 2011). Insbesondere die Entdeckung der Quasikristalle 1982 kam für die Kristallographie völlig überraschend. Es handelte sich um Materialien,

deren Beugungsbilder wie bei gewöhnlichen Kristallen scharfe Punktmuster zeigten (amorphe Substanzen produzieren dagegen verwaschene Beugungsbilder), jedoch mit einer 5-zähligen Symmetrie, was aber bei der Gitterstruktur eines Kristalls nicht sein kann (s. Abschnitt 9 und 10).

Es ist zu erwähnen, dass neben der mathematischen Kristallographie (also die Klassifikation der Kristalle durch Symmetrie), auf die wir gleich näher eingehen werden, heute natürlich eine Vielzahl weiterer Aspekte der Kristallographie eine große Bedeutung haben. Dazu gehören die mineralogische und biologische Kristallographie aber auch die Kristallphysik, speziell die Beugungsphysik und die Kristallzüchtung, mit vielfältigen Anwendungen u.a. in Medizin und Materialforschung.

## 7. Kristallgitter

Die Entdeckungen von Steno, Romé und Haüy, dass sich Kristalle aus periodisch wiederholten Grundeinheiten zusammensetzen, die die gleiche Gestalt wie der Kristall selbst haben, führt zum Begriff des Kristallgitters. Allerdings betrachtet man dabei *ideale Kristalle*, die unendlich ausgedehnt und translationssymmetrisch sind. Das heißt, dass die Grundeinheiten, oder aus heutiger Sicht die Atompositionen, durch eine Verschiebung im Raum ineinander übergehen, so dass man den gesamten Kristall aus den Translationen einer Grundeinheit erhält.

Natürlich kommen ideale Kristalle nicht in der Wirklichkeit vor. Ein realer Kristall ist immer endlich ausgedehnt und hat Defekte, also Abweichungen von der Regelmäßigkeit. Trotzdem genügt es für viele Zwecke, insbesondere für die Klassifikation von Kristallen, ideale Kristalle zu betrachten.

Jede Translation im dreidimensionalen euklidischen Raum wird durch einen Translationsvektor beschrieben, der sich als Kombination von Vielfachen dreier (einmal gewählter) unabhängiger Basisvektoren darstellen lässt. Die Menge aller Translationen, die die Grundeinheit eines Kristalls in andere Grundeinheiten verschieben und den (idealen) Kristall in sich überführen, besitzen drei unabhängige Basisvektoren, so dass sich jede dieser Translationen als Kombination von ganzzahligen Vielfachen der Basisvektoren darstellen lässt. Alle Translationsvektoren (bzw. deren Endpunkte), die den Kristall in sich überführen, bilden eine dreidimensionale Gitter im Raum, das *Kristallgitter* oder *Raumgitter des Kristalls* genannt wird.

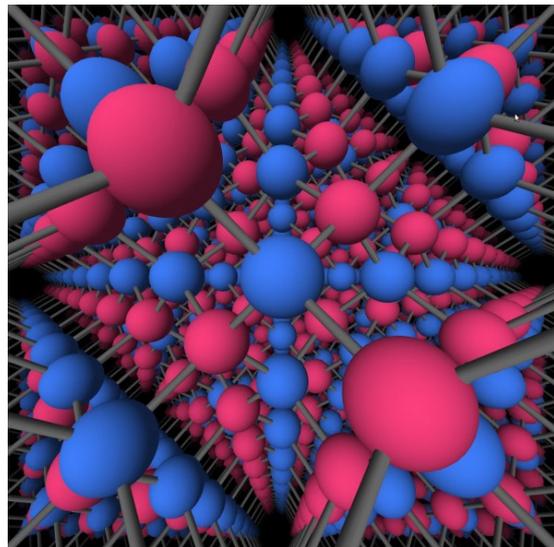


Fig.5 Gitterstruktur des Diamanten

Die Punkte dieses Gitters repräsentieren keine Atome sondern beschreiben nur die Periodizität der Kristallstruktur. Das Kristallgitter hängt natürlich von der äußeren Gestalt des Kristalls bzw. der Grundeinheit ab, aber da es die Grundeinheiten innerhalb des Kristalls verschiebt (in der Größenordnung von Atomradien), lässt sich von der äußeren Gestalt nicht auf das Kristallgitter schließen. Das durch die drei Basisvektoren aufgespannte Parallelepipid wird *Einheitszelle* oder *primitive Elementarzelle* genannt.

Die Wahl der Basis eines Gitters ist nicht eindeutig und deshalb versucht man, eine Basis zu finden, so dass die Elementarzelle die Gestalt des Kristalls möglichst genau widerspiegelt. Da das nicht immer möglich ist, es andererseits aber wichtig ist, die Symmetrie des Kristalls leicht zu sehen, verzichtet man auf die Forderung, dass die die Elementarzelle aufspannenden Vektoren eine Gitter-Basis sind und verwendet stattdessen drei Vektoren, die größere (nicht primitive) Elementarzellen bilden. Die Translationen des Kristallgitters lassen sich dann als Kombination rationaler Vielfacher dieser Vektoren darstellen und man nennt diese Vektoren auch eine nicht-primitive Basis des Gitters.

Auguste Bravais (1811-1863) klassifizierte um 1843 die verschiedenen möglichen Kristallgitter, indem er sowohl primitive wie dem Kristall angepasste nicht-primitive Elementarzellen angab. Sie werden nach ihm heute Bravais-Gitter genannt. In der Dimension drei gibt es genau 14 Bravais-Gitter, also genau 14 verschiedene Translationsgruppen aller möglichen idealen Kristalle.

## 8. Kristallographische Gruppen

Zur Klassifikation der Kristalle werden ihre Symmetrieeigenschaften verwendet. Das heißt, man betrachtet die Isometrien (längen- und winkelerhaltende Selbstabbildungen) des dreidimensionalen Euklidischen Raumes, die den Kristall oder - was dasselbe ist - das Kristallgitter in sich selbst überführen.

Die inverse Operation einer solchen Isometrie und beliebige Hintereinanderausführungen solcher Operationen sind wieder Isometrien des Kristallgitters und man spricht in der Mathematik dann von einer Gruppe. Die Isometriegruppe eines Kristallgitters heißt *kristallographische Gruppe* oder (*kristallographische*) *Raumgruppe*.

Natürlich gehören die Translationen des Gitters zur kristallographischen Gruppe, sie beschreiben die „Fernordnung“ des Kristalls. Es gibt aber auch Isometrien des Kristallgitters, die (mindestens) einen Punkt festhalten, z.B. Drehungen um eine Achse, Punktspiegelungen oder Spiegelungen an einer Ebene und Kombinationen davon. Diese Gruppe beschreibt die Symmetrie der Grundeinheit und damit der Gestalt des Kristalls selbst. Sie heißt *Punktgruppe des Kristalls*. Es gibt genau 32 solcher kristallographischer Punktgruppen, die auch *Kristallklassen* genannt werden. Diese Gruppen sind als abstrakte Gruppen mathematisch interessant, für uns ist aber wichtig, dass sie durch Isometrien auf den Kristallen operieren und dass damit die Kristalle - gemäß ihrer Punktgruppe - in verschiedene Kristallklassen aufgeteilt werden.

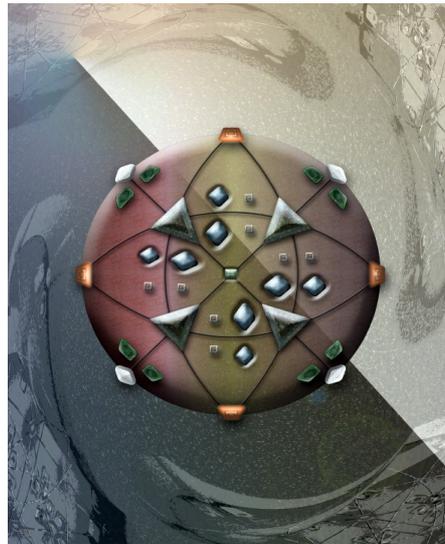


Fig.6 Beispiel einer Punktgruppe

Jedes Element der Punktgruppe eines Kristalls operiert auf dem Kristall mit endlicher Ordnung, d.h. nach endlich vielen Hintereinanderausführungen der Operation ist der Kristall wieder in der Ausgangsposition (denn es gibt ja nur endlich viele Positionen einer Ecke, Kante und Fläche eines Kristalls). Eine Spiegelung an einer Ebene hat z.B. die Ordnung 2, die Drehung eines Würfels um eine Achse durch gegenüberliegende Flächenmittelpunkte (bzw. Seitenmittelpunkten, bzw. Eckpunkte) hat die Ordnung vier (bzw. zwei, bzw. drei).

Neben den 14 Translationsgruppen (Kristallgitter) gibt es also 32 kristallographische Punktgruppen (Kristallklassen). Insgesamt gibt es 230 verschiedene kristallographische Gruppen, also Isometriegruppen von Kristallgittern (in der Dimension drei). Sie wurden 1891 unabhängig von Arthur Moritz Schoenflies und Jewgraf Stepanowitsch Fjodorow bestimmt.

Verschiedene Punktgruppen werden zu einem *Kristallsystem* zusammengefasst. Man unterscheidet heute die sieben Kristallsysteme *triklin*, *monoklin*, *orthorhombisch*, *tetragonal*, *trigonal*, *hexagonal* und *kubisch*. Die Kristallsysteme wurden von Christian Samuel Weiss (1780–1856) im Zusammenhang mit der Übersetzung der Lehrbücher Haüys eingeführt. Sie beruhen auf der Analyse der Anordnung besonders auffälliger Richtungen der Kristalle, der Achsen, "um die herum alles gleichmäßig verteilt ist". Die Kristallsysteme bilden somit eine symmetriebezogenen Klassifikation der Kristalle mit Hilfe eines kristallographischen Achsenkreuzes. Mit Hilfe der Achsen charakterisierte Weiss erstmals die Lage aller Kristallflächen bzw. Ebenen im Kristallgitter eindeutig durch die Verhältnisse ihrer Achsenabschnitte, die *Weisschen Indizes*. Heute werden vor allem die kleinsten ganzzahligen gemeinsamen Vielfachen der reziproken Achsenabschnitte, die *Millersche Indizes*, verwendet.

## 9. Mathematische Gruppen

Ganz allgemein kann man die Isometrien des Raumes betrachten, die einen beliebigen Körper in sich überführen und man spricht dann von der Isometriegruppe oder *Symmetriegruppe* des Körpers. Die meisten Körper in der Natur sind unregelmäßig oder unsymmetrisch und dann gibt es keine Isometrie außer der Identität (die alles fest lässt), die den Körper in sich überführt. Man nennt eine Gruppe, die nur aus der Identität besteht, *trivial*. Körper mit trivialer Isometriegruppe sind also unsymmetrisch und umgekehrt werden Körper mit nicht trivialer Isometriegruppe als symmetrisch bezeichnet. Je größer die Isometriegruppe eines Körpers ist, um so symmetrischer wird dieser empfunden.

Die Kugel als Sinnbild eines symmetrischen Körpers wird z.B. durch jede beliebige Isometrie in sich überführt und ihre Symmetriegruppe enthält überabzählbar unendlich viele Elemente, nämlich so viele wie es reelle Zahlen gibt (z.B. jede Drehung um einen beliebigen Winkel um eine beliebige Achse und jede Spiegelung an einer beliebigen Ebene durch den Mittelpunkt). Die Isometriegruppe eines Kristalls ist nicht trivial aber immer abzählbar, wobei die Punktgruppe selbst nur endlich viele Elemente enthält. Auf jeden Fall ist festzuhalten, dass die umgangssprachlichen Begriffe "symmetrisch" und "regelmäßig" mathematisch durch den Begriff der Gruppe beschrieben werden.

Hierbei ist eine (abstrakte) *Gruppe* in der Mathematik eine Menge zusammen mit einer Operation, die zwei Elementen der Menge wieder ein Element der Menge zuordnet. Dabei kann man bei Hintereinanderausführung mehrerer Operationen diese beliebig zu Zweieroperationen zusammenfassen (klammern). Außerdem existiert zu jeder Operation eine inverse Operation, so dass die Hintereinanderausführung die Identität ergibt, die immer ein Element jeder Gruppe ist.

Historisch ist der so definierte abstrakte Gruppenbegriff, den jeder Studierende heute im ersten Semester lernt, noch recht jung, und eine Abstraktion des Begriffs der Symmetriegruppe, der schon viel länger existiert. Dies ist ein anschauliches Beispiel, wie sich aus realen Erfahrungen (symmetrisch, regelmäßig) durch Abstraktion mathematische Begriffe entwickeln, die dann unabhängig von der ursprünglichen Anschauung durch abstrakte Axiome, und nur durch diese, definiert sind.

## 10. Die Unmöglichkeit des Ikosaeders

Woran liegt es nun, dass die regulären Ikosaeder und Dodekaeder nicht als Kristallformen auftreten? Wir werden sehen, dass dies an der Translationssymmetrie liegt, die eine starke Einschränkung an die Punktgruppe des Kristalls bedeutet.

An jeder Ecke des Ikosaeders stoßen fünf gleichseitige Dreiecke aneinander. Betrachtet man die Drehungen um eine Achse durch zwei gegenüberliegende Ecken, die das Ikosaeder in sich überführt und dabei jedes Dreieck in sein benachbartes, so hat diese Drehung die Ordnung fünf. Dieselben Überlegungen gelten für das Dodekaeder, wenn wir die Drehachse durch die Mittelpunkte zweier gegenüberliegender Seiten betrachten.

Wir zeigen jetzt, dass ein Kristall keine solche Drehung der Ordnung fünf besitzen kann. Betrachten wir dazu die Drehung eines Kristalls um eine beliebige Achse. Diese hat eine endliche Ordnung, sagen wir  $n$ , und überführt eine Elementarzelle des Kristalls in eine translatierte. Der Fall  $n = 2$ , also die Drehung um  $180^\circ$ , ist natürlich möglich und wir können daher bei den folgenden Überlegungen  $n \geq 3$  voraussetzen. Wir denken uns nun durch einen Eckpunkt der Elementarzelle, der nicht auf der Drehachse liegt, eine zur Drehachse senkrechte Ebene. Bei voller Umdrehung beschreibt der Eckpunkt ein reguläres  $n$ -Eck in der Ebene. Die Ecken dieses  $n$ -Ecks sind alle Eckpunkte von Elementarzellen, werden also durch Translation des Kristallgitters ineinander überführt. Jede Translation bewegt die Drehachse, so dass bei Drehung um die verschobene Drehachse ein angrenzendes  $n$ -Eck in derselben Ebene entsteht. Diesen Prozess kann man beliebig oft wiederholen, so dass die gesamte Ebene vollständig, lückenlos und nicht überlappend durch reguläre  $n$ -Ecke gepflastert wird.

Durch Winkelbetrachtung zeigen wir jetzt, dass dies nur für  $n = 3, 4$  oder  $6$  möglich ist. Nehmen wir an, dass an einem Punkt in der Ebene  $r$  reguläre  $n$ -Ecke zusammenstoßen, die eine Umgebung dieses Punktes lückenlos pflastern.

Der Winkel zwischen zwei benachbarten Kanten eines n-Ecks beträgt  $180^\circ - 360^\circ/n$  und es gilt daher  $r(180^\circ - 360^\circ/n) = 360^\circ$ . Teilen wir durch  $360^\circ$ , dann folgt  $r/2 - r/n = 1$  oder durch Umformung  $n(r - 2) = 2r$ . Setzen wir  $r - 2 = s$  so ergibt sich  $n = 2 + 4/s$ . Da  $n$  eine ganze positive Zahl ist, bleibt für  $s$  nur 1, 2 oder 4, für  $n$  also nur 6, 4 oder 3.

Das bedeutet, dass die Punktgruppe eines Kristalls nur Drehungen der Ordnung 2, 3, 4 oder 6 enthalten kann. Das Ikosaeder und das Dodekaeder können damit keine Kristallformen sein.

## 11. Quasikristalle

Wir haben gesehen, dass die Punktgruppe eines Kristalls nur Drehungen der Ordnung 2, 3, 4 oder 6 enthalten kann. Die Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen zeigen ein scharfes Punktmuster, aus dem man die Punktgruppe des Kristalls ablesen kann. Lange Zeit glaubte man, dass rein punktförmige Beugungsreflexe nur bei Kristallen auftauchen und verwendete dies zur Definition eines Kristalls. Entsprechend galt die Translationssymmetrie oder das Kristallgitter als äquivalent zur Existenz von punktförmigen Beugungsbildern.

Die Entdeckung scharfer, punktförmiger Beugungsbilder durch Daniel Schechtmann 1982 bei Materialien, die eine Drehsymmetrie des Ikosaeders, also der Ordnung 5, zeigten, traf die Kristallographie völlig unvorbereitet, gleichsam als Schock. Da diese neuen Materialien keine Kristalle im üblichen Sinne sein konnten, nannte man sie *Quasikristalle*.

Die Entdeckung der Quasikristalle führte dazu, dass man in der Kristallographie (klassische) Kristalle neu definierte, indem man die Translationssymmetrie als unabhängige Eigenschaft forderte. Quasikristalle besitzen scharfe Beugungspunkte, haben aber keine periodische translationssymmetrische Struktur. Einen informativen Übersichtsartikel über Quasikristalle anlässlich der Verleihung des Nobelpreises an Schechtmann findet man in [8].

Wenn man einen Quasikristall geeignet schneidet, zeigt die Schnittfläche z.B. bei der Aluminium-Mangan-Legierung von Schechtmann eine lokale fünfzählige Drehsymmetrie und eine Pflasterung der Ebene, die nicht periodisch, sondern „quasiperiodisch“ ist. Diese quasiperiodische Pflasterung der Ebene war schon vorher von dem britischen Mathematiker Roger Penrose in den siebziger Jahren entdeckt worden, sie heißt daher auch *Penrose-Parkettierung*.

Die Penrose-Parkettierung hat viele interessante mathematische Eigenschaften, z.B. kommt ein beliebiger Ausschnitt des Parketts beliebig oft vor (einerlei wie groß er ist) kann sich aber nicht periodisch wiederholen. Eine verständliche Beschreibung vieler mathematisch interessanter Eigenschaften von Quasikristallen und von Penrose-Parkettierungen geben die Mathematiker Baake, Grimm und Moody in [9].

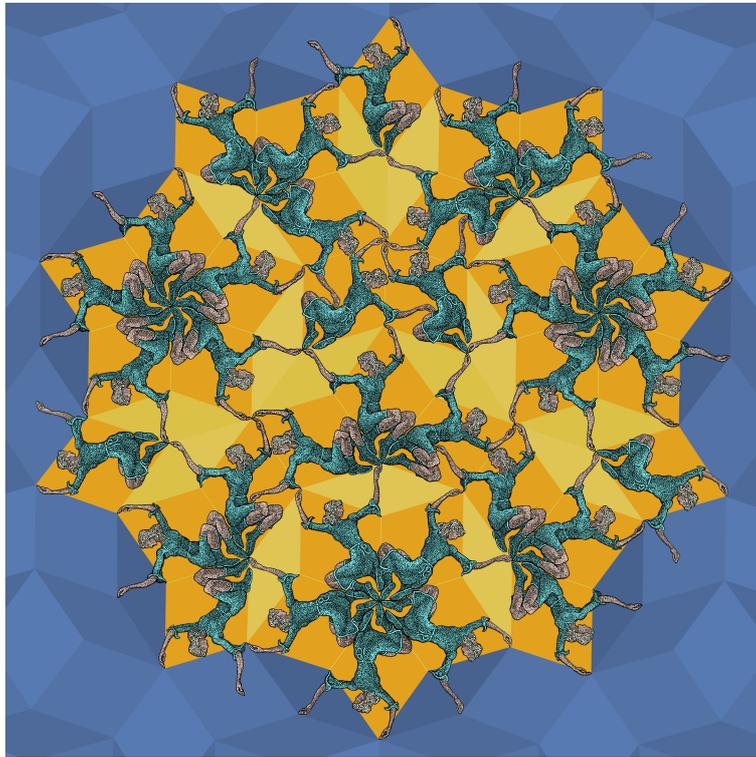


Fig.7 Quasiperiodische rhombische Penrose-Parkettierung

Quasikristalle haben eine zunehmende technische Bedeutung, da sie als Zusatzstoffe zu anderen Materialien diesen besondere Eigenschaften verleihen können.

Die Entdeckung der Quasikristalle hat den Penrose-Parkettierungen viel Aufmerksamkeit beschert. Überrascht stellte man dabei fest, dass sich ähnliche quasiperiodische Muster bereits in mittelalterlichen islamischen Ornamenten von Moscheen und Palästen fanden. Erst vor kurzem wurde entdeckt, wie diese wunderschönen aber komplizierten Muster konstruiert wurden (vgl. [10]).

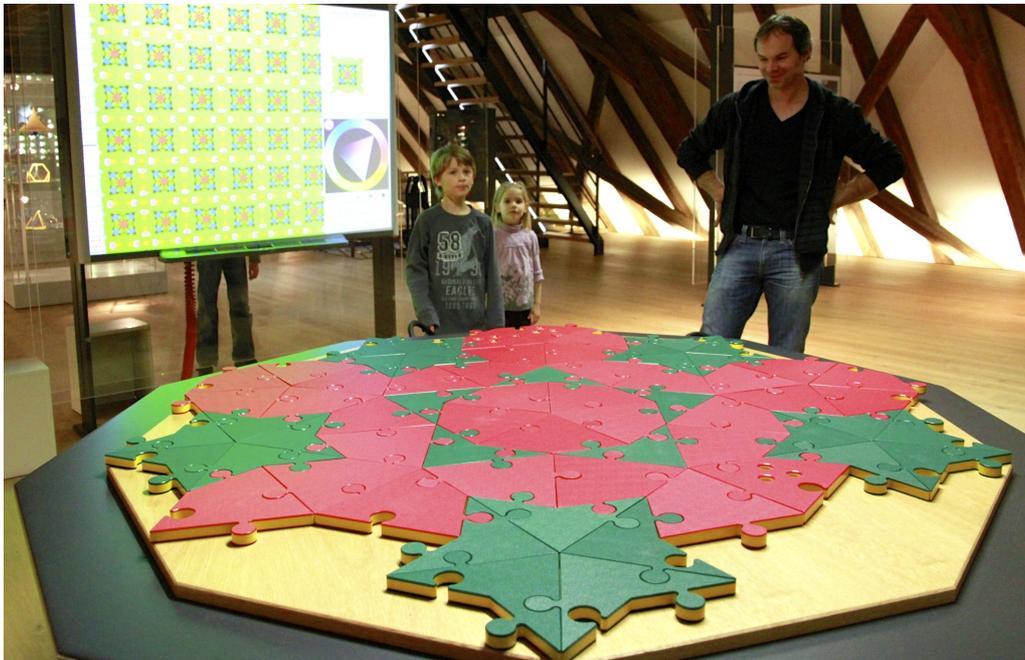


Fig.8 Puzzle einer Penrose Pflasterung im MiMa

## Dank und Referenzen

Ich danke Prof. Stephan Klaus vom Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach für nützliche Hinweise und Herrn Werner Günter, dem Vorsitzenden des Vereins der Freunde von Mineralien und Bergbau Oberwolfach, ebenfalls für Hinweise sowie für die freundliche Überlassung seiner Bilder von Kristallen.

Die folgenden Referenzen sind nur ein Teil der Quellen, derer ich mich bedient habe. Mir scheinen sie besonders nützlich für weitergehende Informationen zu dem Thema.

- [1] Earle R. Caley, John F. C. Richards: Theophrastus: On Stones. Kommentierte Ausgabe mit griechischem Text und und englischer Übersetzung, Ohio State University 1956. [http://www.farlang.com/gemstones/theophrastus-on-stones/page\\_001](http://www.farlang.com/gemstones/theophrastus-on-stones/page_001)
- [2] August Nies: Zur Mineralogie des Plinius. Mainz 1884. Buchdruckerei von H. Prickarts. Volltext: <https://archive.org/details/zurmineralogied01niesgoog>
- [3] Egbert Brieskorn: Lineare Algebra, III. 13.7, Reguläre Polyeder, Einleitung. Manuskript (demnächst auf [imaginary.org](http://www.imaginary.org)). Die Seitenzahlen beziehen sich auf das unveröffentlichte Typoskript.
- [4] Johannes Kepler: Strena seu de nive sexangula (Über die sechseckige Schneeflocke), 1611. Keplers Gesammelte Werke, (Hrsg. M. Caspar, F. Hammer) Bd. IV (1941). Deutsche Übersetzung: D. Goetz, Ostwalds Klassiker Bd. 273, Leipzig 1987. Text in Latin and English by Colin Hardie, Oxford, Clarendon P., 1966.
- [5] Wikipedia Artikel: <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristall> und <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristallmorphologie>
- [6] Kristallographie, na klar! Deutsche Übersetzung von "Crystallography matters!" by UNESCO 2013. <http://dgk-home.de/veroeffentlichungen/kristallographie-na-klar/>
- [7] Kristallographie in Deutschland, Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e.V. [www.kristall.ethz.ch/DGK/](http://www.kristall.ethz.ch/DGK/) und [www.dgkristall.de](http://www.dgkristall.de)
- [8] Gerhard Trageser: Kristalle mit unmöglicher Symmetrie, [Spektrum.de](http://www.spektrum.de). <http://www.spektrum.de/alias/nobelpreis-fuer-chemie/kristalle-mit-unmoeglicher-symmetrie/1129068>
- [9] Michael Baake, Uwe Grimm und Robert V. Moody: Die verborgene Ordnung der Quasikristalle, *Spektrum der Wissenschaft* 2 / 2002, Seite 64.
- [10] Vinzent Schönfelder: Das Geheimnis der Girih, [Spektrum.de](http://www.spektrum.de). <http://www.spektrum.de/alias/angewandte-mathematik/das-geheimnis-der-girih/866284>

## Bildnachweise

- Fig.1: Fluoritoktaeder auf Calcit, Foto: Werner Günter, Oberwolfach  
Fig.2: Flussspatkristall - Grube Clara, Foto: Werner Günter, Oberwolfach  
Fig.3: Platonische Körper, Foto: Zumthie at [de.wikipedia](http://de.wikipedia.org),  
Quelle: [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Platonische\\_Koerper\\_im\\_Bagno.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Platonische_Koerper_im_Bagno.jpg)  
Fig.4: Schneeflocke, Foto: Jochen Burger,  
Quelle: <http://www.natur-portrait.de/foto-26022-frau-holles-erster-gruss.html>  
Fig.5: Gitterstruktur des Diamanten, Bildschirmphoto des Programms Crystal Flight,  
Quelle: <http://imaginary.org/program/crystal-flight>  
Fig.6: Beispiel einer Punktgruppe, Autor: Jean Constant,  
Quelle: <http://imaginary.org/gallery/jean-constant-crystallographic-points-groups>  
Fig.7: Quasiperiodische rhombische Penrose-Pflasterung, Autor: Uli Gaenshirt  
Quelle: <http://imaginary.org/gallery/quasicrystalline-wickerwork>  
Fig.8: Puzzle einer Penrose Parkettierung, Mineralien- und Mathematikmuseum Oberwolfach (MiMa) Quelle: <http://mima.museum/mathematik-penrose.php>