

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 (*kry-stallos* 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 in der modernen Kristallografie mithilfe der Beugungsmuster bei der Bestrahlung mit Röntgenstrahlen oder anderen Strahlenquellen.

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

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 *Περὶ λίθων*, „Über die Steine“ (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

wurden den Kristallen und Steinen unter anderem auch heilende Kräfte zugeschrieben – was auch heute noch gelegentlich in der Esoterik vorkommt.

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.

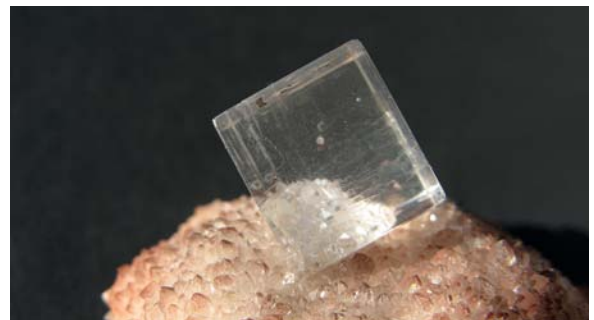


Abbildung 1. Flussspatkristall, Grube Clara (Foto: Werner Günter, Oberwolfach)



Abbildung 2. Fluoritoktaeder auf Calcit (Foto: Werner Günter, Oberwolfach)

3 Kristalle und griechische Mathematik

Tatsächlich gibt es Mineralien, deren Kristalle fast exakte reguläre Tetraeder, Hexaeder (siehe Abb. 1) oder Oktaeder (siehe Abb. 2) 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 Pentagondodekaeders haben, das äußerlich leicht mit dem regulären Dodekaeder verwechselt werden kann. Jede der zwölf 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, sodass sich jede Ecke durch eine Symmetrie des Körpers (also durch eine Drehung oder Spiegelung) in eine beliebige andere Ecke 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 regelmäßige Fläche entsteht (beim Würfel z. B. ein gleichseitiges Dreieck).

Für die Kristallografie 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. Beispielsweise ist das Rhombendodekaeder ein Catalanischer Körper, der dual zum Kuboktaeder ist. Das Rhombendodekaeder 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.

Ganz sicher waren den griechischen Mathematikern die Kristallformen und ihre Symmetrien bekannt. Es ist jedoch nicht so, dass ihre Studien 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, S. 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, S. 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. Man mag dies als Indiz dafür werten, dass Idee und Wirklichkeit nicht zu trennen sind.

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).



Abbildung 3. Platonische Körper (Foto: Zumthie, de.wikipedia, http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Platonische_Koerper_im_Bagno.jpg)



Abbildung 4. Schneeflocke (Foto: Jochen Burger, www.natur-portrait.de/foto-26022-frau-holles-erster-gruss.html)

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, S. 342]. Die Harmonie der Platonischen Körper war für Johannes Kepler (1571–1630) der Grund, die Harmonie der Himmelsphären mit ihrer Hilfe zu beschreiben. Sein Versuch, zu beweisen, dass die Abstände der Planeten durch ein Schalenmodell aus Umkugeln 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.

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 Kristallografie

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 Kristallografie, also der Wissenschaft von den Kristallen.

Die allgemeine Gültigkeit der Winkelkonstanz wurde 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 den 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 Kristallografie fundamental. Daraus lässt sich z. B. die Winkelkonstanz leicht erklären. Haüy wird deshalb heute auch als „Vater der Kristallografie“ bezeichnet.

6 Moderne Kristallografie

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

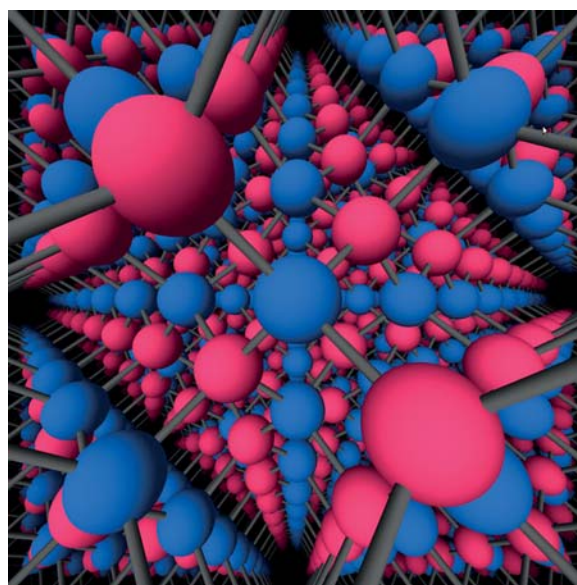


Abbildung 5. Gitterstruktur des Diamanten (Bildschirmfoto des Programms Crystal Flight, <http://imaginary.org/program/crystal-flight>)



Abbildung 6. Puzzle einer Penrose Pflasterung im Mineralien- und Mathematikmuseum Oberwolfach, <http://mima.museum/mathematik-penrose.php>

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 Kristallografie vorgeherrscht hatte, wird in der modernen Kristallografie fast ausschließlich die Strukturanalyse mit Röntgenstrahlen oder anderen Strahlenquellen zur Untersuchung der Beugungsmuster verwendet. So sind heute einige Hunderttausend solcher Strukturen – von kleinen anorganischen und organischen Verbindungen bis hin zu großen Biomolekülen – in Datenbanken gespeichert, die stetig ergänzt werden.

Die Röntgenkristallografie verfeinerte ihre Methoden immer weiter, sodass 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 Wilkens den Nobelpreis für Physiologie oder Medizin erhielten.

Aus neuester Zeit sind besonders zwei Entdeckungen hervorzuheben. Das Graphen, als erstes Beispiel einer neuen Klasse zweidimensionaler kristalliner 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 Kristallografie völlig überraschend. Es handelte es 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). Ein geeigneter Schnitt durch einen

Quasikristall führt zu einer quasiperiodischen Pflasterung der Ebene, die von dem britischen Mathematiker Roger Penrose bereits in den siebziger Jahren entdeckt worden war. Sie heißt daher auch Penrose-Parkettierung.

Es ist zu erwähnen, dass neben der mathematischen Kristallografie (also der Klassifikation der Kristalle durch Symmetrie), auf die wir gleich näher eingehen werden, heute natürlich eine Vielzahl weiterer Aspekte der Kristallografie eine große Bedeutung haben. Dazu gehören die mineralogische und biologische Kristallografie 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 Kristalle sich 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, sodass 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, besitzt drei unabhängige Basisvektoren, sodass sich jede dieser Translationen als Kombination von ganzzahligen Vielfachen der Basisvektoren darstellen lässt. Alle Translationsvektoren (bzw. ihre Endpunkte), die den Kristall in sich überführen, bilden ein dreidimensionales Gitter im Raum, das Kristallgitter oder Raumgitter des Kristalls genannt wird.

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 Parallelepiped wird Einheitszelle oder primitive Elementarzelle genannt.

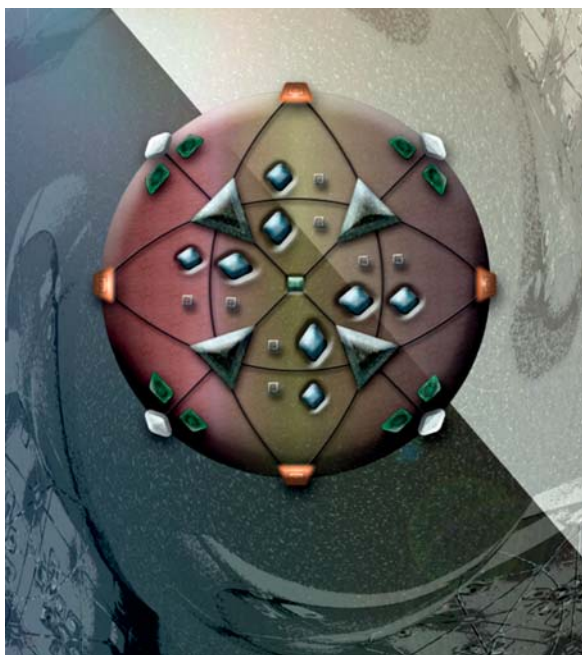


Abbildung 7. Beispiel einer Punktgruppe
(Autor: Jean Constant, <http://imaginary.org/gallery/jean-constant-crystallographic-points-groups>)

Die Wahl der Basis eines Gitters ist nicht eindeutig und deshalb versucht man, eine Basis zu finden, sodass 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 als auch dem Kristall angepasste, nicht-primitive Elementarzellen angab. Sie werden heute nach ihm Bravais-Gitter genannt. In der Dimension drei gibt es genau 14 Bravais-Gitter, also genau 14 verschiedene Translationsgruppen aller möglichen idealen Kristalle.

8 Kristallografische 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 kristallografische Gruppe oder (kristallografische) Raumgruppe.

Natürlich gehören die Translationen des Gitters zur kristallografischen 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 kristallografischer 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.

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 (Kristallgittern) gibt es also 32 kristallografische Punktgruppen (Kristallklassen). Insgesamt gibt es 230 verschiedene kristallografische 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 Häuys 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 symmetriebezogene Klassifikation der Kristalle mithilfe eines kristallografischen Achsenkreuzes. Mithilfe der Achsen charakterisierte Weiß erstmals die Lage aller Kristallflächen bzw. Ebenen im Kristallgitter eindeutig durch die Verhältnisse ihrer Achsenabschnitte, die Weißschen Indizes. Heute werden vor allem die kleinsten ganzzahligen gemeinsamen Vielfachen der reziproken Achsenabschnitte, die Millerschen Indizes, verwendet.

9 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 der Punktgruppe des Kristalls bedeutet.

An jeder Ecke des Ikosaeders stoßen fünf gleichseitige Dreiecke aneinander. Betrachtet man die Drehung 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° , 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. Alle Ecken dieses n -Ecks sind Eckpunkte von Elementarzellen, werden also durch Translation des Kristallgitters ineinander überführt. Jede Translation bewegt die Drehachse, sodass bei Drehung um die verschobene Drehachse ein angrenzendes n -Eck in derselben Ebene entsteht. Diesen Prozess kann man beliebig oft wiederholen, sodass 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 $360^\circ/n$, 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.

Dank.

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.

Literatur

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 englischer Übersetzung, Ohio State University 1956.
- [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). 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 Press, 1966.
- [5] Wikipedia Artikel: <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristall> und <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristallmorphologie>
- [6] Kristallographie, na klar! Deutsche Übersetzung von *Cystallography 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/ und www.dgkristall.de

Prof. Dr. Dr. h.c. Gert-Martin Greuel, Technische Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik, Postfach 3049, 67653 Kaiserslautern. greuel@mathematik.uni-kl.de

Gert-Martin Greuel ist Seniorprofessor an der TU Kaiserslautern mit Arbeitsgebiet Algebraische Geometrie, Singularitätentheorie und Computeralgebra, Mitentwickler des Computeralgebra Systems SINGULAR. 2002–2013 Direktor des Mathematischen Forschungsinstituts Oberwolfach (MFO), zur Zeit Wissenschaftlicher Berater des IMAGINARY-Projekts am MFO; 2010–2013 Chair der European Research Centres on Mathematics (ERCOM); seit 2013 Mitglied im Executive Committee der European Mathematical Society (EMS); seit 2012 Chefredakteur des Zentralblatt MATH (zbMATH).



Der Beitrag ist zuerst in englischer Sprache erschienen: Gert-Martin Greuel, *Crystals and Mathematics*. In: A Focus on Crystallography, FIZ Karlsruhe 2014. Eine vollständige Fassung des hier gekürzt wiedergegebenen deutschsprachigen Artikels findet man unter <http://imaginary.org/background-materials>.