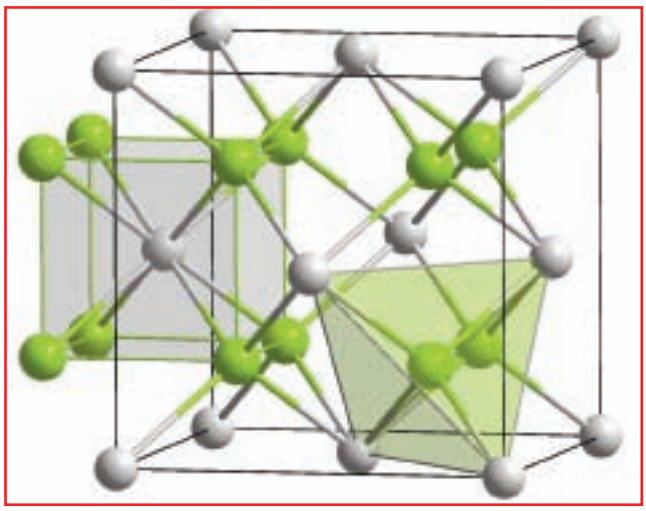
Die ganze Welt ist verrückt nach Kristallen

Aus mathematischer Sicht ist eine Kristallstruktur „einfach“ ein diskretes und geordnetes Punktsystem. Kristallografie wendet Symmetrien in der Kristallstruktur als ein Klassifikationskriterium an.

Seit Jahrhunderten sind Menschen von geordneten Kristallstrukturen fasziniert. Der „Sage“ nach, ist die moderne Kristallografie, – basierend auf der Idee, dass diese Ordnung auf eine modulare Struktur zurück zuführen ist – auf der Arbeit des Abts R.J. Haüy begründet: Angeblich, als ihm bei einer Untersuchung zufällig ein Kristall aus der Hand gerutscht und zerbrochen ist, hat der Abt bemerkt, dass die neuen Bruchstücke dieselbe Form wie die des Urkristalls haben. Er hat daraus den Schluss gezogen, dass der Kristall aus kleinen, identischen, in Reihen geordneten und übereinander gelagerten Blöcken oder Bausteinen besteht. Anschließend hat der Abt gezeigt, dass aus einer entsprechenden Anordnung von recht einfachen Bausteinen eine Vielfalt von drei dimensionalen Strukturen gebildet werden kann.



FLUORIT KIRSTALLSTRUKTUR

QUARZ KRISTALL (FOTO VON DIDIER DESCOUENS)

Seine ursprüngliche Idee war, dass die Bausteine Polyeder sind, welche sich selbstständig einander annähern können, was dazu führt, dass der gesamte Raum, der von einem Kristall ausgefüllt wird, ohne Löcher und Überlappungen bleibt. Er fing daher an, alle Polyeder mit diesen Eigenschaften zu suchen und sie zusammenzubauen. Diese Bedingung schränkte die Menge aller zu untersuchenden Polyeder jedoch stark ein, weil nur wenige davon den Raum tatsächlich ausfüllen können. Deswegen wurde glücklicher Weise auch bald andere Formen, wie z. B. Kugel oder geordnete Kugelpakete, gründlich analysiert.

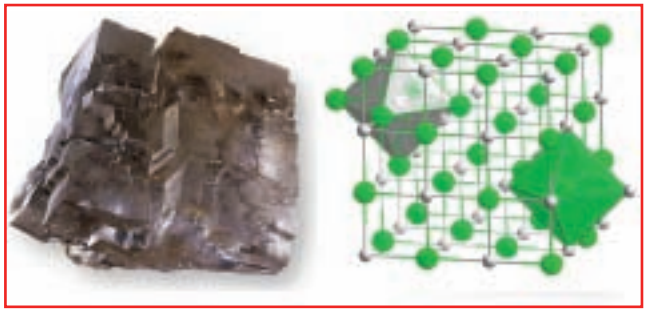
Normalerweise wird eine Kristallstruktur durch *Punktsysteme*, deren Punkte sich als Polyeder- oder Kugelzentren (mit an-

deren Worten Blockzentren) interpretieren lassen, beschrieben. Damit sich ein solches System für die Beschreibung von Kristallen eignet, muss es erstens diskret sein – das heißt, dass jeder Punkt einen Block darstellen muss und zwei Punkte nicht zu nah beieinanderliegen dürfen (um damit zu vermeiden, dass ein Block weitere Punkte enthält) – und zweitens, müssen die Blöcke den Raum ohne dabei Löcher zu bilden komplett ausfüllen.

TURMALIN KRISTALL (FOTO VON MARCO DEL TORCHIO)

Solch ein Punktsystem kann sehr ungeordnet sein. Allerdings, um Kristalle beschreiben zu können, müssen die Blöcke in dem Punktsystem, entlang von Reihen und parallelen Ebenen liegen. Deswegen werden wir uns auf ein einfaches geordnetes Punktsystem, das *dreidimensionale Gitter*, beschränken.
Wir können es uns als die Gesamtheit der Abbilder der Systempunkte, die bei Translationen (Verschiebung) entlang drei unabhängigen Richtungen, d. h. entlang von Richtungen, die nicht dieselbe Ebene bestimmen, vorstellen.
Dies besagt, dass für jeden Punkt *P* des Systems seine Abbilder, die aus der ersten Translation gewonnen wurden, betrachtet werden. Alle diese neuen Punkte befinden sich auf derselben Linie, auf der sich auch *P* befindet. Wenn wir noch zwei weitere Translationen auf demselben Punkt *P* durchführen, können wir die zwei Geraden, die dadurch bestimmt wurden, ablesen. Wenn wir diese Operation für alle Punkte des Systems wiederholen, bekommen wir ein *Gitter*, das quasi ein „kariertes Papier" des Raumes darstellt, wobei die „Karos" nicht unbedingt Würfeln sein müssen.
Das Gitter hat ausschließlich eine geometrische Bedeutung; um einen Kristall aufbauen zu können, müssen Atome, Ionen oder Moleküle auf den entsprechenden Gitterpunkten liegen.

Aber Kristalle lassen sich nicht durch Gitter allein beschreiben. Man benötigt auch andere Punktsysteme, die eine Regularitätshypothese befriedigen, wonach – unabhängig von der Punktwahl – eine Raumsymmetrie existiert, in der ein Punkt mit einem anderen getauscht werden kann und das System unverändert beleibt und somit in sich selbst transformiert. Solch eine Isometrie wird nach der *Symmetrie des Punktsystems* benannt.



NATRIUMCHLORID KRISTALL UND STRUKTUR (FOTO VON DIDIER DESCOUENS)

Zwei Thesen folgen aus der Regularitätshypothese: Erstens, falls eine Rotation, die das System in sich selbst verwandelt existiert, wird diese unendlich viele Zentren haben, die durch Translation erzeugt werden; zweitens, dass, die Rotationen nicht um jeden beliebigen Winkeln möglich sind. Genau genommen sind nur Rotationssymmetrien zweiter, dritter, vierter und sechster Ordnung möglich.

Um die Kristallstruktur zu untersuchen, muss man dann – unter anderem – die Kristallsymmetrien und dessen Zusammensetzung verstehen. Mit der Begrifflichkeit eines Mathematikers ausgedrückt, muss man also die generierte Gruppenstruktur begreifen.

FLUORIT KRISTALL (FOTO VON GIOVANNI DALL'ORTO)

Aus mathematischer Sicht wird ein gesamter Kristall durch Translationsoperationen ausgehend aus einer sogenannten *Einheitszelle* aufgebaut. Dieser Begriff wurde als Erstes von C. Huygens (1629-1695) eingeführt, um die optischen Eigenschaften von Kalzitkristallen aufzuzeigen.
Falls die einzigen Gitterpunkte der Einheitszelle ihre Ecken sind, wird sie *Primitivzelle* genannt. Die Kristall generierenden Translationen werden aus den sogenannten *primitiv Vektoren* definiert, die entlang drei linear unabhängigen Richtungen der Einheitszelle liegen.
Aber Gittersymmetrien bestehen nicht nur aus Translationen: die ganze Gruppe besteht auch aus all den Isometrien, die, durch einen festen Punkt, das Gitter in sich selbst umwandelt. Diese neue Gruppe wird *Punktgruppe* genannt und liefert ein erstes Klassifizierungsprinzip von Kristallen. Entsprechend seiner Eigenschaften, werden Gitter in 7 Klassen, die sogenannte *Bravaisgitter* (s. u.), einordnet. In der folgenden Klassifizierung bedeutet das Beiwort „zentriert", dass ein Symmetriezentrum vorhanden ist:

1) Monometrisches oder kubisches Kristallsystem. Die Einheitszelle kann entweder kubisch-primitiv, kubisch-raumzentriert oder kubisch-flächenzentriert sein. Die zugehörige Symmetriegruppe ist die kubische Punktgruppe.

BERYLL KRISTALL (FOTO VON GIA.COSSA)

2) Tetragonales Kristallsystem. Die Einheitszelle ist ein gerades Prisma mit quadratischer Grundfläche, die entweder primitiv oder flächenzentriert sein kann. In der Punktgruppe dieser Zelle sind die Spiegelebenen senkrecht zu den Drehachsen.

3) Hexagonales Kristallsystem. Die Einheitszelle ist ein gerades Prisma mit einer rhomboedrischer Grundfläche die ,60° und 120° Winkel hat. Die Punktgruppe enthält vier Drehachsen: eine sechster Ordnung, senkrecht zur Grundfläche und sechs zweiter Ordnung. Jede Achse ist senkrecht zu einer Spiegelebene.

ARAGONIT KRISTALL (FOTO VON DIDIER DESCOUENS)

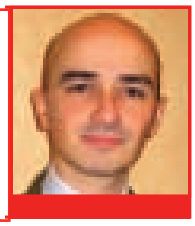
4) Trigonales oder rhomboedrisches Kristallsystem. Die Einheitszelle dieses Kristallsystems entsteht aus einer Verzerrung der hexagonalen Einheitszelle. Allerdings ist sie ein Rhomboeder mit zwei gleichen Kanten und Winkeln ungleich 90° sowie 60° oder 120°. Die Punktgruppe des Prismas mit dreieckiger Grundfläche hat Spiegelebene, die senkrecht zu den Drehachse zweiter Ordnung sind.

5) Orthorhombisches Kristallsystem. Die orthorhombische Einheitszelle ist ein rechteckiges Parallelepiped, das vier mögliche Strukturen haben kann: primitiv, flächenzentriert, raumzentriert und basiszentriert. Die Symmetrieelemente bestehen aus drei orthogonalen Drehachsen zweiter Ordnung und drei Spiegelebenen, von denen jede einzelne zwei Achsen enthält.

6) Monoklines Kristallsystem. Die Einheitszelle ist ein gerades Prisma, dessen Grundfläche ein primitives oder flächenzentriertes Parallelogramm ist. Das einzige Symmetrieelement ist eine Drehachse zweiter Ordnung.

7) Triklines Kristallsystem. Die Einheitszelle ist ein Parallelepiped und die Symmetriegruppe wird von der Inversion am Zentrum der Zelle erzeugt.

Dieser Artikel wurde durch das Mathematics Translations in Europe (MaTiE) Projekt von Mathematics in Europe in Kollaboration mit IMAGINARY übersetzt. Das Projekt hat Unterstützung von der Münchner Rück. Sie können alle übersetzten Artikel auf www.mathematics-in-europe.eu finden. Der Artikel wurde von Eduardo Fertitta übersetzt und von Antonia Mey editiert.

Über den Autor:

Iacopo Frattini
Studierte Mathematik an der Universität von Mailand, arbeitet im Finanzbereich bei einer Bank in Mailand. Email: iacopo81@gmail.