MATHEMATISCH-ASTRONOMISCHE BLÄTTER
NEUE FOLGE

Band 21

Herausgegeben von der Mathematisch-Astronomischen Sektion
der Freien Hochschule für Geisteswissenschaft
am Goetheanum, Dornach (Schweiz)

Begründet von Louis Locher und Georg Unger

Redaktion: *Renatus Ziegler*

RENATUS ZIEGLER

Morphologie von Kristallformen und symmetrischen Polyedern

Kristall- und Polyedergeometrie im Lichte von Symmetrielehre
und projektiver Geometrie

Kap. 1–4

VERLAG AM GOETHEANUM

Themen und Schlagworte

Polyeder, Platonische Körper, Archimedische Körper, Dualarchimedische Körper
Symmetrie, Symmetriegruppen, kristallographische Punktgruppen
Kristallgeometrie, Kristallmorphologie, Kristallsymmetrie, Quasikristalle
Projektive Geometrie, Diskrete Geometrie, Konfigurationen

American Mathematical Society Subject Classification

52-02 (research exposition, survey)
52B10 (three-dimensional polytopes, polyhedra)
52B15 (symmetry properties)

20H15 (crystallographic groups)
51A05 (linear incidence geometry: general theory and projective geometry)
51F15 (reflection groups)
51N05 (descriptive geometry)
51N30 (geometry of classical groups)
82D25 (crystals)

Einbandgestaltung: Martin Diethelm, Renatus Ziegler

© Copyright 1998 Philosophisch-Anthroposophischer Verlag am Goetheanum
CH-4143 Dornach

Alle Rechte vorbehalten

Satz und Layout: Renatus Ziegler

Herstellung: Freiburger Graphische Betriebe

ISBN 3-7235-1003-5

INHALT

Vorwort VIII

1. *Einführung*

1.1 Kristallformen und Polyeder 1

Kristalle 1
Polyeder 1

1.2 Morphologie von Kristallformen und symmetrischen Polyedern 2

1.3 Kristallographische Gesichtspunkte 2

Morphologie und Strukturtheorie 2
Deutungen des Kristallographischen Grundgesetzes 2
Kristallmorphologische Hypothese und projektive Geometrie 3
Warum projektive Geometrie? 3
Kristallformengesetz 4

1.4 Inhaltsübersicht 5

2. *Projektive Geometrie des dreidimensionalen Raumes*

2.1 Erweiterung des euklidischen Raumes durch Fernelemente 6

Grundgebilde der projektiven Geometrie 6
Parallelität und Fernelemente 6
Axiome und Urphänomene 7
Einige Konsequenzen 7

2.2 Duale Gestaltung des Raumes und harmonische Grundfigur 8

Dualität 8
Der Satz von Desargues 8
Ebene harmonische Grundfigur 9
Zentrische und ebene harmonische Grundfigur 9
Möbiusnetze und Möbiusblüten 10

2.3 Polyeder 11

Kern und Hülle 11
Konvexe Punktpolyeder und konkave Ebenenpolyeder 12

2.4 Projektive Transformationen 13

2.5 Affine Geometrie und affine Transformationen 14

2.6 Einbettung euklidischer Bewegungen in projektive Transformationen 15

2.7 Projektive Koordinaten 16

Einführung projektiver Koordinaten ohne Zugrundelegung einer Metrik 16
Vektorgeometrische Deutung homogener projektiver Bündelkoordinaten 16

Literaturhinweise 17

3. *Kristallgeometrie: Kristallgesetze und Kristalldarstellungen*

3.1 Idealkristall und Realkristall 18

3.2 Kristallographische Grundgesetze 19

Gesetz der Winkelkonstanz 19
Flächenindizes 20
Zonen und Zonenindizes 21
Zonenverbandsgesetz 22
Vektorgeometrische Darstellung der Flächen- und Zonenindizes 24
Mathematische Abhängigkeiten der kristallographischen Grundgesetze 24

3.3 Kristallographische Symmetriegesetze 25

Tangentialpolyeder und Idealgestalt 25
Ableitung der kristallographischen Einschränkung 26
Zonenverband und Symmetriegerüst 28
Unabhängigkeit des Kristallographischen Grundgesetzes vom Kristallsymmetriegesetz 28
Das Kristallformengesetz 28

3.4 Kristallographische Symmetrieachsenrichtungen und Flächenlagetypen ... 29

Kristallographische Symmetrieachsenrichtungen: Die sieben Kristallsysteme 29
Kanonisches Koordinatensystem des trigonalen Systems 32
Gesetz der Zonen und Indizes: Metrische Fassung 33
Indizesklassen und Flächenlagetypen 33
Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie 34
Flächenlagen und Indizesklassen der hexagonalen Kristallfamilie 36

3.5 Zweidimensionale Darstellungen von Kristallen und Polyedern 38

Einfache Darstellungen von Kristallen und Polyedern 38
Mehrfache Darstellungen von Kristallen und Polyedern 41
Abwicklungsdarstellung von Kristallen und Polyedern 45

Literaturhinweise 45

4. *Kristall- und Polyedersymmetrien*

4.1 Symmetrieoperationen und Symmetrieelemente 46

4.2 Gruppen von Symmetrieoperationen 48

Der Gruppenbegriff 48
Bestimmung von Gruppen 49
Symmetriegruppen als Modelle von abstrakten Gruppen 49
Spezielle Eigenschaften von Gruppen 49
Verschiedene Ableitungen der 32 kristallographischen Punktgruppen 50

4.3 Punktgruppen als Gruppen von Deckoperationen der Sphäre 51

A) Kontinuierliche Gruppen 51
Zylinder- oder Kegelgruppen 51
Kugelgruppen 52
B) Diskrete Gruppen 52
Endliche Gruppen gleichsinniger Deckoperationen der Sphäre 53
Endliche Gruppen ungleichsinniger Deckoperationen der Sphäre 54
Direkte Produkte 54
Gemischte Gruppen 55

4.4 Kristallklassen, Kristallsysteme und Kristallfamilien 60

Kristallographische Punktgruppen 60
Symmetrieoperationen und Symbolik der kristallographischen Punktgruppen 60
Untergruppenbeziehungen der kristallographischen Punktgruppen 60
Kristallographische Blickrichtungen: Symmetrieachsenrichtungen und Kristallsysteme 63
Hermann-Mauguin-Symbole oder Internationale Symbole 66
Kristallfamilien 67

4.5 Kristallographische Symmetriegerüste und Fundamentalbereiche 68

Kristallographische Symmetriegerüste und deren Darstellungen 68
Punktgruppen, Transformationsgruppen, Fundamentalbereiche 72

4.6 Punktgruppen und Fundamentalbereiche 74

Diskrete Gruppen aus Spiegelungen 74
Elementardreiecke sind Fundamentaldreiecke 77
Verschiedene Modelle einer abstrakten Gruppe 78

Literaturhinweise 80

5. *Morphologie für symmetrische Polyeder*

5.1 Fundamentaldreieck und Lagetypendreieck 81

Fundamentaldreiecke 81
Symmetrielage 82
Lagetypendreieck 83
Flächen- und Punktlagetypen 84

5.2 Symmetrische Polyeder 85

Konvexe Polyeder 85
Punktbahnen und Ebenenbahnen bezüglich einer Sphäre 85
Symmetrische Polyeder 85
Punktgruppenpolyeder, Flächenformen und Punktformen 86
Duale Polyeder und Formen 87
Flächenkombinationspolyeder 88

5.3 Kristallographische Flächenformen 89

Das Kristallformengesetz 89
Die 47 Klassen von kristallographischen Flächen- und Punktformen und die 56 Klassen von Flächen- und Punktformen der 32 kristallographischen Punktgruppen 94
Erläuterungen zu den Tabellen 5.3, 5.4 und 5.5ab 95
Flächenkombinationsformen und Kombinationsarten 96
Vollformen oder Holoeder 96
Hemieder und Tetartoeder 97

5.4 Symmetrische Polyeder der Ikosaedergruppe 106

Die Symmetriegruppen des Ikosaeders 106
Symmetrieachsenrichtungen, Lagetypen, Flächen- und Punktformen des Ikosaedersystems und des pentagonalen Systems 109

5.5 Punktgruppenformen der Diedersysteme 116

Die Gruppen der Diedersysteme 116
Fundamentaldreieck und Lagetypendreieck 118
Flächen- und Punktformen der Diedersysteme 121

5.6 Kontinuierlicher Zusammenhang von Punktgruppenpolyedern 127

Rückblick und Ausgangspunkt 127
Zweidimensionale Polyedermannigfaltigkeiten im Bereich des Lagetypendreiecks 127
Kontinuierlicher Zusammenhang der Polyeder des Ikosaedersystems 128
Kontinuierlicher Zusammenhang der Polyeder des kubischen Systems 131
Zusammenfassung: Die Polyedermannigfaltigkeit des kubischen Systems und des Ikosaedersystems 138
Kontinuierlicher Zusammenhang der Polyeder der Diedersysteme 140
Oktagonales System 140
4N-gonales System 145
(4N+2)-gonales System 146
(2N+1)-gonales System 146

5.7 Flächen- und Eckenkombinationen von Polyedern 147

Flächenkombinationen von Polyedern 147
Eckenkombinationen von Polyedern 147
Kombinationen von Polyedern mit variablen und invariablen Lagetypen 148
Flächenkombinationsreihendreieck 148
Eckenkombinationsreihendreieck 154
Kombinationsreihendreieck 154
Dualformendreieck 155
Struktur von Kombinationsreihendreieck und Dualformendreieck 155

5.8 Klassifizierung von symmetrischen Polyedern 156

Isoedrische und isogonale konvexe Polyeder und deren Teilklassen 156
Kombinationspolyeder 160
Nicht-konvexe symmetrische Polyeder 161
Nicht-konvexe reguläre Polyeder: reguläre Sternpolyeder 162

5.9 Symmetrische Polyederverbände 164

5.10 Topologisch, projektiv und affin reguläre konvexe Polyeder 165

Topologisch reguläre konvexe Polyeder 165
Topologisch halbreguläre konvexe Polyeder 165
Projektiv oder affin reguläre konvexe Polyeder 166
Projektiv oder affin isoedrische und isogonale konvexe Polyeder 167
Elliptisch oder hyperbolisch reguläre, isoedrische und isogonale konvexe Polyeder 167

Literaturhinweise 168

6. *Projektive Darstellungen von Symmetrien und Polyedern*

6.1 Projektive Darstellung von Symmetrien der Sphäre 169

Linearprojektionen von Symmetriegerüsten und Polyedern 169
Rationale Konstruktionen 170
Ableitung der kristallographischen Einschränkung 173

6.2 Projektive Darstellung von kristallographischen Symmetrien und Polyedern 174

Projektive Darstellungen von Symmetriegerüsten 174
Beispiele projektiver Darstellungen von kristallographischen Flächenformen 175

6.3 Konstruktion kristallographischer Flächen- und Punktlagen in Linearprojektion 180

Linearprojektionen von kubischen und hexagonalen Flächen- und Punktlagen 180
Linearprojektionen von Symmetriegerüsten sowie Flächen- und Punktlagen 183

6.4 Projektive Charakterisierung der Kristallformungsgesetze 185

Projektive Klassifikation der Kristallsysteme 185
Symmetrien der Linearprojektion von Kristallpolyedern 186
Verschiedene Einteilungen der Kristallsysteme 187

6.5 Projektive Darstellungen nichtkristallographischer Symmetrien 188

Projektive Darstellungen des Symmetriegerüstes der Ikosaedergruppe 188
Projektive Darstellungen von Flächenformen der Ikosaedergruppe 190
Linearprojektionen von Flächen- und Punktlagen 195
Projektive Darstellungen der Diedersymmetrien 197

6.6 Projektive Konfigurationen 199

Ebene und bündelige projektive Konfigurationen 199
Räumliche projektive Konfigurationen 199
Die Konfigurationen der platonischen Körper 199
Die Reye-Konfiguration 200
Die Hess-Konfiguration 201

Literaturhinweise 202

7. ***Ergebnis und Konsequenzen für die Kristallographie: Zum komplementären Verhältnis von Morphologie und Strukturtheorie***

7.1 Geometrische Kristallmorphologie: Eine Zusammenfassung 204

Geometrische Kristallmorphologie 204
Kristallographische Gesetze 206
Kristallformengesetz und Kristallmorphologische Hypothese 206
Rationale Konstruktionen und ganzzahlige Indizes 206
Symmetrien der Beugungsbilder 207

7.2 Projektive und affine Geometrie der Gitter 208

Projektive Geometrie der Gitter: Möbiusnetze und Möbiusgitter 208
Affine Geometrie der Netze und Gitter 211
Netzebenen und kleine ganzzahlige Indizes 212
Gitter und Translationsgruppen 212

7.3 Metrische Geometrie der Netze und Gitter als Grundlage der Kristallstrukturtheorie 213

Die fünf metrischen Netztypen 213
Metrische Gittertypen: Die 14 Bravais-Gitter-Typen 214
Punktdichte und Netzebenenabstände 214
Gittergruppen, Punktgruppen und Raumgruppen 216
Einfache und mehrfache Gitter 216
Kristallographische Strukturmorphologie 218
Reguläre Punktsysteme 218

7.4 Kristallstrukturtheorie 219

Gitterstrukturhypothese 219
Vom Gitter zur polyedrischen Gestalt 219

7.5 Zum Zusammenhang von Kristallformengesetz, Kristallmorphologischer Hypothese und Gitterstrukturhypothese 221

7.6 Synthese von Kristallmorphologie und Kristallstrukturtheorie 223

Integration der Gitterstrukturhypothese in die Kristallmorphologische Hypothese 223
Formsynthese 224
Ein Kristallformungsprinzip 224

7.7 Kristallgenese 226

Strukturgenese von Kristallen 226
Morphogenese von Kristallen 227
Genetische Synthese 227

7.8 Aperiodische regelmäßige Strukturen: Quasikristalle 228

Literaturhinweise 229

Anhang

Literaturverzeichnis 230

A: Mathematik (Polyedergeometrie, Symmetrietheorie, Projektive Geometrie) 230
B: Kristallographie (theoretisch, physikalisch, historisch) 232

Nachweis der Abbildungsvorlagen 234

Symbolverzeichnis 234

Verzeichnis der Tabellen 235

Index der Polyedernamen in Deutsch und Englisch 236

Sachregister 238

VORWORT

In diesem Buch wird der Versuch unternommen, zwei Intentionen miteinander zu verbinden, die sich meiner Auffassung nach gegenseitig befruchten. Einerseits wird gezeigt, in welchem Sinne der Lehre von den Kristallformen (Kristallmorphologie) eine eigenständige mathematische Grundlage zukommt. Andererseits wird das Gebiet der symmetrischen konvexen Polyeder in möglichst anschaulicher und doch strenger Form gründlich behandelt. Und dies mit vielen sorgfältig ausgewählten und gestalteten Figuren und Tabellen.

Mit der dabei entwickelten Art der Morphologie wird eine Brückenbildung zwischen den detaillierten und konkreten Gestaltuntersuchungen der Kristallographen und den zur Verallgemeinerung hindrängenden Symmetrielehren der Mathematiker angestrebt. Dabei gewinnen einerseits die durch die geometrische Kristallmorphologie erarbeiteten Details eine strenge Ordnung und offenbaren sich als Spezialfälle allgemeinerer und umfassenderer Formmöglichkeiten. Andererseits erfahren die mathematischen Symmetrielehren durch kristallographisch motivierte Begriffe konkrete Anschaulichkeit und Vielfalt. Daraus ergibt sich eine umfassende Morphologie für symmetrische konvexe Polyeder.

Vom mathematischen Gesichtspunkt aus finden sich in diesem Buch keine grundlegend neuen Ergebnisse oder Methoden. Eine umfassende und zugleich gründliche Darstellung der Morphologie symmetrischer konvexer Polyeder gibt es meines Wissens bisher jedoch nicht, wenn man von der Darstellung verschiedenster Einzelheiten in nicht immer leicht zugänglichen und vor allem in englischer Sprache abgefaßten Spezialaufsätzen oder -monographien absieht. Meistens stehen bei der lehrbuchmäßigen Behandlung der konvexen, in irgendeinem Sinne regelmäßigen oder halbregelmäßigen Polyeder nicht deren symmetrische Eigenschaften und damit auch nicht der gruppentheoretische Aspekt im Vordergrund, sondern topologische, kombinatorische oder elementargeometrische Aspekte. Demzufolge werden oft nur die archimedischen und dualarchimedischen bzw. catalanischen Polyeder behandelt, und nicht deren symmetrische Verallgemeinerungen (isogonale oder gleicheckige und isoedrische oder gleichflächige Polyeder).

In diesem Buch steht nun die Symmetrie ganz im Zentrum und es werden von ihr ausgehend die meisten der heute bekannten Klassen von konvexen symmetrischen Polyedern behandelt.

Im weiteren wird in diesem Buch großen Wert auf verschiedenste Verwandlungs- und Metamorphosereihen solcher Polyeder gelegt, welche andernorts, falls überhaupt, nur in ausgewählten Einzelfällen dargestellt werden.

Was die Darstellung der Morphologie von Kristallen in kristallographischen Monographien oder Lehrbüchern betrifft, so wird dieser entweder sehr wenig Raum gegeben oder sie ist vom mathematischen Gesichtspunkt aus unbefriedigend und/oder unvollständig. Zudem wird meist von der Gitterstruktur ausgegangen, und damit kommt der eigenständige Charakter der Morphologie nicht zur Geltung.

Die Morphologie hat nicht nur ihren ästhetischen, praktischen und/oder mathematischen Reiz, sondern ist auch ein notwendiger Bestandteil einer umfassenden wissenschaftlichen Erkenntnis der Kristallwelt. In naturphilosophischem Sinne bedeutet dies, daß Kristallmorphologie und Kristallstrukturtheorie (Gittertheorie), auch in ihrer genetischen Deutung, komplementären Charakter haben, also das eine Gebiet das andere ergänzt und keines der beiden Gebiete das andere ersetzen kann.

Für das Zustandekommen dieses Buches waren Anregungen verschiedenster Art notwendig. Die erste intensive Auseinandersetzung mit der Kristallographie geht auf meine Diplomarbeit [1981a] im Rahmen des Studiums der Mathematik und Physik an der ETH in Zürich sowie einige sich daran anschließende Seminare im Rahmen der Herbststudienwochen an der Mathematisch-Astronomischen Sektion am Goetheanum zurück. Die erneute Beschäftigung wurde durch eine Ende 1995 an mich herangetretene Anfrage von Joseph Arnoth zur Mitarbeit an der Sonderausstellung *Kristallform – Kristallgestaltung* des Naturhistorischen Museums in Basel (Oktober 1997 bis Juni 1998) in Gang gebracht.

Für klärende Gespräche oder Korrespondenz bin ich folgenden Personen dankbar: Cornelis Bockemühl, Dankmar Bosse, Hellmut Fischmeister, Stefan Graeser, Peter Gschwind, Dieter Kötter, Georg Maier, Hans-Ude Nissen, Erich Offermann.

Einige Personen und eine Stiftung haben unter anderen den Druck dieses Buches durch einen finanziellen Beitrag gefördert: Dieter Roth, Alfred Hoehn, SAMPO.

Neben dem detaillierten Inhaltsverzeichnis finden sich in der Einführung, insbesondere im Abschnitt 1.4, ausführlichere Angaben zum Inhalt und Aufbau des Buches.

Grundlegende oder weiterführende Literatur, die sich im Laufe dieser Arbeit bewährt hat, wird jeweils am Ende eines Kapitels in Kurzform mit Autornamen und Jahreszahl angeführt. Nähere Details finden sich im Literaturverzeichnis.

Renatus Ziegler, im Sommer 1998

1. EINFÜHRUNG

1.1 *Kristallformen und Polyeder*

Kristall und Kristallsystem

Vom makroskopischen chemisch-physikalischen Gesichtspunkt aus sind kristalline Körper feste Stoffe, die eine durchgängig einheitliche Zusammensetzung sowie richtungsabhängige Eigenschaften haben.

Das Ergebnis einer sinnes-orientierten phänomenologischen Bestandesaufnahme kann etwa folgendermaßen festgehalten werden:

(i) Bezüglich elementaren Seh- und Tasterlebnissen wie Oberflächenfarbigkeit bzw. Oberflächentextur sowie Geruch, Geschmack, Klang etc. zeigen sich dem denkenden Verbinden der verschiedenen Erfahrungen kristalline Körper (im Gegensatz zu den meisten Gesteinen) als einheitliche Gebilde.

(ii) Bei spezifischeren Untersuchungen, etwa durch Vergleichen von Flächenlagen bei frei gewachsenen oder frisch gebrochenen Kristallkörpern sowie unter Lichteinfluß, zeigen sich richtungsabhängige Eigenschaften.

Die unter (i) genannten Eigenschaften betreffen die chemische *Homogenität* des kristallinen Stoffes und die unter (ii) genannten die *Anisotropie* der physikalischen Verhaltensweisen. Dies sind insbesondere Eigenschaften, die von Raumrichtungen bezüglich des kristallinen Körpers abhängig sind, wie elektrische Leitfähigkeit, elastische Schwingungen, Ritzhärte, Spaltflächen etc. Außer bei kubischen Kristallen verhalten sich auch Lichtbrechung und Lichtpolarisierung bei allen kristallinen Körpern anisotrop.

Vom geometrischen Gesichtspunkt aus zeigt sich die Anisotropie bei kristallinen Stoffen an folgenden Tatsachen. (1) Sich frei in einer gesättigten Lösung entwickelnde Kristalle oder etwa durch Spaltbruch aus kristallinen Stoffen hervorgehende Gebilde sind im allgemeinen ebenflächig begrenzte Körper.

Kristalline Körper, welche diese Eigenschaften nicht haben oder bei welchen diese aus irgendeinem Grunde nicht phänomenologisch erkennbar sind, sind nicht Gegenstand der vorliegenden geometrisch-morphologischen Untersuchungen. Unter *Kristallen, Kristallkörpern, Kristallindividuen* etc. werden im folgenden also feste Körper, die in natürlicher Weise mit ebenen Begrenzungsflächen auftreten, verstanden. In diesem Fall spricht man auch von *Kristallpolyedern.*

Kristallpolyeder, welche in einem bestimmten Sinne geometrisch verwandt sind, gehören ein und demselben *Kristallsystem* an. Der Begriff des Kristallsystems

wird hier zunächst nur implizit eingeführt. Eine genaue Erklärung erfolgt im Abschnitt 3.4.

(2) Die relative Position der den anisotropen Eigenschaften zugrunde liegenden Raumrichtungen ist für Kristallkörper (Kristallindividuen) ein und desselben Kristallsystems dieselbe.

(3) Es ist ein charakteristisches Merkmal von Kristallpolyedern, daß im allgemeinen sowohl ein «Mittelpunkt» fehlt wie auch kein eindeutiger Orientierungsbezug zur Umgebung feststellbar ist. Dies bedeutet, daß zur geometrischen Bestimmung einerseits ein Bezugspunkt eingeführt werden muß und andererseits nur die geometrischen Eigenschaften des entsprechenden Kristallpolyeders selbst in Betracht kommen.

Trotz der verwirrenden Vielgestaltigkeit der äußeren Formen von Kristallen, insbesondere auch der Kristallpolyeder ein und desselben Kristallsystem, erkennt man eine den ganzen Kristallkörper bis in die kleinsten erfahrbaren Teile durchdringende *Form.* Es erscheint so die äußere Gestalt mit ihren akzidentellen Eigenschaften «nur» wie ein Hinweis auf die *innere* Formung, auf die wesentlichen Formprinzipien eines Kristallsystems. Um zu diesen Formprinzipien vorzustoßen, müssen die erscheinenden Gestalten auf ihre charakteristischen «Urformen» zurückgeführt werden, an welchen sich die Formprinzipien in reinster Art ausdrücken.

Es zeigt sich, daß die wesentlichen geometrischen Formprinzipien innere *Symmetrien* sind, die für ein Kristallsystem charakteristisch sind, aber an den äußeren Gestalten nur verborgen zum Ausdruck kommen. Ist die äußere Gestalt vollkommener Ausdruck der entsprechenden Symmetrien, so kann man von «Urformen» sprechen; in der Kristallographie heißen sie *einfache Flächenformen* oder *Idealformen.*

Die folgenden Untersuchungen betreffen also nur die *allgemeine Kristallmorphologie,* das heißt die allen Kristallpolyedern jedes Kristallsystems zugrunde liegenden Gesetzmäßigkeiten, und nicht die spezielle Morphologie konkreter Kristalle. Letztere untersucht die spezifischen Entstehungsbedingungen von Realkristallen.

Polyeder

Unter Polyeder werden konvexe ebenflächig begrenzte Körper des dreidimensionalen euklidischen Raumes verstanden, das heißt Körper ohne einspringende Ecken oder Kanten (für genaue Definitionen, siehe Abschnitt 2.3 und 5.2). Symmetrische Polyeder haben einen wohlbestimmten Mittelpunkt; sie können durch gewisse Spiegelungen und Drehungen mit festem Winkel $360°/n$ (n = 2, 3, 4, ...), welche diesen Mittelpunkt invariant lassen, in sich übergeführt werden.

Die folgenden Untersuchungen beschäftigen sich in erster Linie mit Polyedern im oben genannten Sinn. Es werden weder die zweidimensionale Kristallographie und die entsprechenden Vielecke und Vielseite noch Verallgemeinerungen für nichtkonvexe Formen oder für Räume von mehr als drei Dimensionen miteinbezogen.

1.2 *Morphologie von Kristallformen und symmetrischen Polyedern*

Unter *geometrischer Kristallmorphologie* wird die vergleichende Untersuchung anschaulicher Kristallformen bezüglich ihrer relativen Flächenlagen unter dem Gesichtspunkt der *Symmetrie* verstanden. Physikalische oder chemische Gesichtspunkte kommen in diesem Zusammenhang nicht in Betracht. Es handelt sich dementsprechend um geometrische Untersuchungen der «Urformen» von Kristallpolyedern, an denen sich die inneren Gestaltungsprinzipien bis in alle Einzelheiten der äußeren Gestalt manifestieren.

Unter *Morphologie von symmetrischen Polyedern* wird eine vor allem mit anschaulichen Methoden arbeitende systematische Untersuchung aller Typen von solchen (konvexen) Polyedern verstanden. Im Zentrum steht die Erzeugung von Polyedern als «Bahnen» von Ebenen oder Punkten bezüglich einer Symmetriegruppe sowie verschiedene Arten von Metamorphosen- und Kombinationsreihen solcher Polyeder.

Die Mathematisierung der geometrischen Kristallographie oder Kristallgeometrie ist so weit fortgeschritten, daß ein beträchtlicher Teil des hier vorgeführten Materials auch in modernen Lehrbüchern und Monographien der Kristallographie da und dort auftaucht. Und doch fehlt es bisher an einer durchgreifenden und zusammenhängenden Darstellung, welche vermittels der Symmetrielehre den Bogen von der Systematik kristallographischer Flächen- und Punktformen zur Lehre von den regelmäßigen sowie halbregelmäßigen Körpern und einigen Verallgemeinerungen derselben spannt.

Die verschiedenen Schritte der morphologischen Untersuchung symmetrischer Polyeder werden jeweils motiviert durch eine gründliche geometrische Betrachtung möglicher Kristallformen und dann von da ausgehend auf die übrigen Klassen von symmetrischen Polyedern verallgemeinert. Dadurch zeigt sich einerseits der streng systematische Charakter der Lehre von den Kristallformen, andererseits wird die Theorie der symmetrischen Polyeder Schritt für Schritt anschaulich durchschaubar gemacht. – Wer sich nur am Rande für Kristallographie interessiert, kann Abschnitt 1.3 sowie Kapitel 3 überschlagen. Im daran anschließenden Text wird nur selten darauf zurückgegriffen.

1.3 *Kristallographische Gesichtspunkte*

Morphologie und Strukturtheorie

Man unterscheidet in der Kristallographie zwei Gesichtspunkte, den anschaulich-morphologischen und den strukturellen. Unter dem morphologischen oder makroskopischen Gesichtspunkt werden Kristalle als *kontinuierliche* Körper von *endlicher* Größe aufgefaßt und vom strukturellen oder (sub)mikroskopischen Gesichtspunkt aus als *diskontinuierliche Aggregate*. Im letzteren Fall geht man in der Kristallographie und der Festkörperphysik davon aus, daß die Anzahl der das Diskontinuum bildenden Elementarteilchen (geometrisch: Punkte; physikalisch: Atome, Ionen, Moleküle) relativ zur makroskopischen Dimension sehr groß ist. Man nimmt deshalb meist an, daß sie ohne weiteres *unendlich* gesetzt werden kann.

Eines der wesentlichen kristallographischen Ziele dieses Buches ist, darauf aufmerksam zu machen, daß diese beiden Gesichtspunkte jeweils einen voneinander unabhängigen Kern haben, jedoch in einem komplementären Verhältnis stehen und auf präzise Weise miteinander vereinigt werden können, ohne daß der eine durch den anderen ersetzt werden kann oder sich als überflüssig herausstellt (Kapitel 7).

Deutungen des Kristallographischen Grundgesetzes

Grundlegend für die gesamte Kristallographie ist das aufgrund umfassender empirischer Untersuchungen von Realkristallen in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts entdeckte *Gesetz der kleinen ganzzahligen Flächenindizes*, auch *Kristallographisches Grundgesetz* genannt (Abschnitt 3.1):

GESETZ DER KLEINEN GANZZAHLIGEN FLÄCHENINDIZES: *Die Indizes aller Flächenlagen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines Kristallsystems haben kleine ganzzahlige Werte, wenn sie auf vier ein Tetraeder bildende Flächen eines der Kristallpolyeder dieses Kristallsystems bezogen werden.*

Die oben angeführten zwei Gesichtspunkte in der Kristallographie führen auf zwei unterschiedliche Deutungen dieses Gesetzes.

Vom in der gegenwärtigen Kristallographie im Vordergrund stehenden *strukturellen Gesichtspunkt* wird folgende Hypothese nahegelegt (Abschnitt 7.4):

GITTERSTRUKTURHYPOTHESE: *Kristallkörper bestehen aus endlich vielen untereinander kongruenten Bildungseinheiten (Elementarzellen), die in drei verschiedenen Richtungen translationsperiodisch angeordnet sind. Die Bildungseinheiten*

selbst bestehen aus endlich vielen Elementarteilchen (geometrisch: Punkte; physikalisch: Atome, Ionen, Moleküle) von endlicher Größe und endlichem Abstand.

Es wird hier bezüglich der Interpretation des Kristallographischen Grundgesetzes durch die Gitterstrukturhypothese, wie auch bezüglich der weiter unten eingeführten Kristallmorphologischen Hypothese Wert auf den Begriff der «Deutung» oder «Interpretation» im Gegensatz zu «Erklärung», «Ursache» oder Ähnlichem gelegt. Es kommt vor allem auf begriffliche *Beziehungen* zwischen den konkreten Phänomenen bzw. geometrisch-kristallographischen Gestalten und nicht auf «Erklärungen», «Ableitungen», «Rückführungen» oder «Reduktionen» etc. derselben an.

Methodisch geht es also darum, in der Theorie- und Hypothesenbildung möglichst nahe an den unmittelbaren Phänomenen zu bleiben, ohne bestimmten Denk- oder Anschauungsweisen von vornherein den Vorzug zu geben. Dies ist genau im Sinne des wissenschaftlichen Prinzips, möglichst keine Voraussetzungen einzuführen, die nicht der begrifflichen Bestimmung unmittelbarer Erfahrungen entstammen. Entscheidend ist dabei nicht die Plausibilität einer Hypothese oder ihre Vereinbarkeit mit etablierten Theorien, sondern ihre Sachgemäßheit, das heißt ihr den Phänomenen angemessener, diese weder unter- noch überrepräsentierender begrifflicher Gehalt.

Der *morphologische Gesichtspunkt* führt naturgemäß auf eine ganz andere Deutung des Kristallographischen Grundgesetzes. Das ist nicht selbstverständlich, wird doch heutzutage meist die Morphologie von Kristallformen von vornherein in Zusammenhang mit der Gitterhypothese dargestellt. Es ist jedoch gerade eines der Hauptanliegen dieses Buches, zu zeigen, wie eine systematische Morphologie von Kristallformen ohne Rückgriff auf die Gitterstrukturhypothese entwickelt werden kann. Dazu muß erst eine für die geometrische Kristallmorphologie geeignete Deutung des Kristallographischen Grundgesetzes entwickelt werden. Erst wenn das Gebiet der geometrischen Kristallmorphologie auf eigene Beine gestellt worden ist, kann in sachgerechter Weise das Problem angegangen werden, in welcher Weise Morphologie und Gitterstrukturtheorie zu einer einheitlichen Lehre von Kristallform und Kristallstruktur zusammengebracht werden können. Dies ist Thema des Kapitels 7.

Kristallmorphologische Hypothese und projektive Geometrie

Das Kristallographische Grundgesetz ist vom geometrischen Gesichtspunkt aus äquivalent zur Tatsache, daß jede mögliche Flächenlage eines Kristallpolyeders eines Kristallsystems sich aus vier ein Tetraeder bildenden Kristallflächen eines solchen Kristallpolyeders durch bloßes Schneiden der Flächen und Verbinden der Schnittgeraden durch weitere Flächen gewinnen läßt (Abschnitt 3.2). Dies ist das sogenannte *Zonenverbandsgesetz*.

Da beim Zonenverbandsgesetz nur Lagebeziehungen von Punkten, Ebenen und Geraden eine Rolle spielen und keine metrischen Verhältnisse, führt dieses Gesetz unmittelbar in den Bereich der projektiven Geometrie. Durch vier Ebenen ist zudem eine harmonische Grundfigur in jeder beliebigen Ebene, insbesondere der Fernebene des dreidimensionalen euklidischen Raumes, festgelegt (Abschnitt 2.1 und 2.2). Wird die harmonische Grundfigur mit den Symmetrien des euklidischen Raumes verknüpft, so ergibt sich aus der Gestalt dieser Figur das Kristallsystem des entsprechenden Kristallkörpers (Abschnitt 6.4). Jede (sogenannte rationale) konstruktive Erweiterung der harmonischen Grundfigur durch Verbinden von Punkten und Schneiden von Geraden führt auf Schnittgeraden bzw. -punkte von möglichen Kristallflächen bzw. -kanten.

Diese Vorbetrachtungen ermöglichen nun eine exakte Formulierung der Kristallmorphologischen Hypothese:

KRISTALLMORPHOLOGISCHE HYPOTHESE: *Kristallkörper sind kontinuierliche Gebilde, insbesondere konvexe Polyeder, die durch endlich viele Ebenen (Flächen) begrenzt werden; die Ebenen und Kanten dieser Polyeder treffen sich in den Geraden bzw. Punkten einer durch wenige Schritte rational ergänzten harmonischen Grundfigur in der Fernebene.*

Man beachte, daß im hier untersuchten Zusammenhang an dieser Hypothese nur deren *geometrischer* Gehalt von Bedeutung ist. Eine zur traditionellen strukturgenetischen Deutung komplementäre morphogenetische Deutung wird im Abschnitt 7.7 eingeführt. Ob mit ihr auch Konsequenzen hinsichtlich bisher in der Physik nicht beachteter oder nicht zur Physik im engeren Sinne gehöriger Kräfte verbunden sind, soll an dieser Stelle ausdrücklich offen gelassen werden.

Warum projektive Geometrie?

Unter dreidimensionaler «projektiver Geometrie» versteht man im allgemeinen Begriffe und Relationen, welche Punkte, Geraden und Ebenen bzw. deren Lagebeziehungen beinhalten ohne jeglichen Bezug auf Parallelität oder metrische Begriffe und Beziehungen. Dieses mathematische Gebiet soll hier als selbständiges Begriffs- und Relationensystem behandelt werden, das durch eine eigene Axiomatik bestimmt wird (Abschnitt 2.1).

Für die hier entwickelte Auffassung der geometrischen Kristallographie dient der dreidimensionale projektive Raum als «Hintergrund», als die allen Einzelbeziehungen zugrunde liegende Struktur. In diesem Sinne *wird der Ausdruck «projektive Geometrie» auch für die Einbettung der euklidischen oder affinen Geometrie in den Rahmen der projektiven Geometrie verwendet.* Es soll dadurch die Qualität der

Erweiterung der sich meist an der euklidischen Geometrie orientierenden Gesichtspunkte gekennzeichnet werden. (In diesen Überlegungen liegt auch der Grund, weshalb nicht an die übliche Auffassung des projektiven Raumes als eines bestimmten Punktraumes über einem Vektorraum angeknüpft wird.)

Die Einbeziehung der projektiven Geometrie des dreidimensionalen Raumes in die kristallmorphologischen Untersuchungen kann durch verschiedene Gründe gerechtfertigt werden:

(a) *Mathematischer Grund*: Wie oben erwähnt, läßt sich das Gesetz der kleinen ganzzahligen Indizes durch Begriffe der projektiven Geometrie deuten und damit in einen umfassenden mathematischen Zusammenhang einbetten. Damit wird die projektive Geometrie, neben der Symmetrietheorie (Symmetriegruppen), zur entscheidenden mathematischen Grundlage des morphologischen Gesichtspunktes und demzufolge der geometrischen Kristallmorphologie. Zusammenfassend läßt sich sagen: *Die projektive Geometrie spielt für die Morphologie der Kristallformen eine ähnlich fundamentale Rolle wie die Gittergeometrie für die Strukturtheorie.*

(b) *Historischer Grund*: Die projektive Geometrie spielte in der Kristallgeometrie des 19. Jahrhunderts eine große Rolle und hat viel zum anschaulich-geometrischen Reiz dieses Gebietes sowie zur konkreten Anwendbarkeit projektiver Methoden in der Kristalldarstellung beigetragen, so daß es sich auch heute noch lohnt, sich damit auseinanderzusetzen. In der sogenannten gnomonischen Darstellung von Kristallen (Abschnitt 3.3) lebt sie heute noch fort.

Die im 19. Jahrhundert entwickelten Bezüge der geometrischen Kristallographie zur projektiven Geometrie sind Anfang dieses Jahrhunderts stillschweigend aus den einschlägigen Lehrbüchern verschwunden. Dies hatte vor allem zwei Gründe: erstens den Rückgang der Pflege der projektiven Geometrie im Laufe der ersten Hälfte dieses Jahrhunderts und zweitens den durch die Erfolge der Röntgenstrukturanalyse beförderten Siegeszug der Gitterstrukturhypothese und damit der Gittergeometrie. Stellvertretend für Lehrbücher der Kristallographie des «alten Stils» sollen die Bücher von Liebisch [1881] und [1896] genannt werden.

Da die projektiv-geometrischen Grundlagen der Kristallmorphologischen Hypothese kaum mehr als bekannt vorausgesetzt werden können, kommen sie in Kapitel 6 ausführlich zur Darstellung. Dort und abschließend in den Abschnitten 7.6 und 7.7 wird gezeigt, wie diese Hypothese zwanglos in den Aufbau der geometrischen Kristallographie integriert werden kann, genauso wie dies für die Gitterstrukturhypothese der Fall ist.

(c) *Naturphilosophischer Grund*: Es soll gezeigt werden, daß eine vollständige Morphologie der Kristallformen aller Kristallsysteme, das heißt eine Einsicht in deren geometrische Gestaltungsprinzipien, möglich ist auch ohne Voraussetzung der Gitterstrukturhypothese. Hierfür und insbesondere für das Folgende spielen die Begriffe der projektiven Geometrie eine entscheidende Rolle. In einem weiteren Schritt soll dazu angeregt werden, die Gesetzmäßigkeiten der Mikrostruktur ebenso als Ausdruck, als mögliche Konsequenz der Makrostruktur, das heißt der phänomenologischen Gestalt, von Kristallkörpern zu *denken*, wie man sich normalerweise die Makrogestalt aus der Mikrostruktur hervorgehend vorstellt. Aufgrund dieser Überlegungen ist es sinnvoll, beide Gesichtspunkte zu einer Synthese zu vereinigen (Abschnitte 7.5 bis 7.7).

Kristallformengesetz

In den systematischen Untersuchungen der Kapitel 3 bis 5 geht es in erster Linie darum, das *Kristallformengesetz* aufzustellen, welches eine vollständige Übersicht des geometrischen Aufbaus aller möglichen Kristallformen beinhaltet (Abschnitt 5.4). Die Untersuchung des genauen Zusammenhangs der Kristallmorphologischen Hypothese mit der üblicherweise im Vordergrund stehenden, dem strukturellen Gesichtspunkt entspringenden *Gitterstrukturhypothese* (Atom-, Ionen- oder Molekülgitter) sowie deren Beziehungen zum Kristallformengesetz ist Gegenstand des Kapitels 7.

Es wird sich herausstellen (Abschnitt 7.5), daß weder die Gitterstrukturhypothese noch die Kristallmorphologische Hypothese für sich genommen hinreichend zur Bestimmung des Kristallformengesetzes sind. Im weiteren schließen sich diese beiden Hypothesen auch nicht aus, sondern ergänzen sich *komplementär* in dem Sinne, daß die eine begriffliche Komponenten enthält, welche aus der anderen nicht ableitbar sind. Sie können demzufolge zu einer beide umfassenden Synthese im *Kristallformungsprinzip* und im *Kristallgenetischen Prinzip* vereinigt werden (Abschnitte 7.6 und 7.7).

Auf neuere Entwicklungen, die es notwendig machten, auch aperiodische regelmäßige Strukturen, sogenannte Quasikristalle, in die geometrische Kristallographie miteinzubeziehen, wird im Abschnitt 7.8 eingegangen.

1.4 *Inhaltsübersicht*

In *Kapitel 2: Projektive Geometrie des dreidimensionalen Raumes* werden in knapper, anschaulicher Weise (meist ohne Beweise) einige Grundelemente der projektiven Geometrie entwickelt, die in den Abschnitten 3.3 (Zweidimensionale Kristalldarstellungen), 5.2 (Symmetrische Polyeder) und insbesondere im Kapitel 6 Anwendung finden. Beim ersten Lesen kann das Kapitel überschlagen werden.

Kapitel 3: Kristallgeometrie: Kristallgesetze und Kristalldarstellungen bringt zunächst die für die Kristallmorphologie notwendigen geometrisch-kristallographischen Gesetzmäßigkeiten, die den Kern der phänomenologischen Kristallographie ausmachen. Dazu gehört insbesondere das Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes und dazu äquivalente Gesetze (Abschnitt 3.2: Kristallographische Grundgesetze), sowie das Symmetriegesetz (Abschnitt 3.3) zusammen mit den kristallographischen Symmetrieachsenrichtungen und Flächenlagetypen (Abschnitt 3.4). Im Abschnitt 3.5 (Zweidimensionale Kristall- und Polyederdarstellungen) findet sich eine Übersicht üblicher Darstellungsmethoden von Kristallformen und Polyedern unter rein geometrischen Aspekten. Auch dieser Abschnitt kann beim ersten Lesen überschlagen werden.

Kapitel 4: Symmetriegruppen und kristallographische Symmetrien. Hier wird die mathematische Symmetrielehre entwickelt, das heißt die Theorie der endlichen Gruppen euklidischer Symmetrieoperationen mit Fixpunkt in engem Bezug zu den kristallographisch relevanten Symmetrien. Dieses Standardmaterial der geometrischen Kristallographie wird mit verschiedenen Tabellen und mannigfachen Figuren sowie ausführlichen Erläuterungen der entsprechenden Gruppen vorgestellt. Im Abschnitt 4.5 (Fundamentalbereiche und Symmetriegerüste) werden Begriffe eingeführt, die zu den Untersuchungen von Kapitel 5 überleiten. Der Abschnitt 4.6 (Diskrete Gruppen aus Spiegelungen) bringt ergänzende mathematische Ausführungen, die für das Folgende nicht unbedingt notwendig sind.

Kapitel 5: Morphologie von symmetrischen Polyedern ist das zentrale Kapitel der geometrischen Kristallmorphologie sowie der Morphologie der Polyeder. Hier werden die Kristallformen in ihrem gegenseitigen Verhältnis auf der Grundlage der Symmetrielehre entwickelt und in Beziehung zu anderen symmetrischen Raumkörpern gestellt. In den Abschnitten 5.1 (Fundamentalbereiche und Flächenlagen) und 5.2 (Symmetrische Polyeder) werden einige für alles weitere grundlegende Begriffe entwickelt. In den Abschnitten 5.3 bis 5.5 werden dann die begrifflichen Mittel der geometrischen Kristallmorphologie für die Theorie der symmetrischen Polyeder fruchtbar gemacht sowie die Symmetrielehre zur Vereinheitlichung der Systematik eingesetzt. Abschnitt 5.3 beginnt mit einer Diskussion kristallographischer Flächen- und Punktformen, die im *Kristallformengesetz* kulminiert; die entsprechenden Überlegungen werden in natürlicher Weise fortgesetzt für nichtkristallographische Flächen- und Punktformen in den Abschnitten 5.4 und 5.5.

Die Abschnitte 5.6 (Kontinuierlicher Zusammenhang von Punktgruppenpolyedern), 5.7 (Flächen- und Eckenkombinationsreihen von Polyedern) und 5.8 (Klassifizierung von symmetrischen Polyedern) bringen die Morphologie allgemeiner symmetrischer Polyeder zu einem gewissen Abschluß. Im Abschnitt 5.6 werden in elementarer Weise die topologischen Zusammenhangsverhältnisse der Klassen von Polyedern, die durch Punktgruppen erzeugt werden, abgeleitet. Es zeigt sich dort, wie alle Klassen von solchen Polyedern durch geeignete stetige Deformationen ineinander übergeführt werden können, wobei jeweils das Pentagondodekaeder für die Flächenformen und das Ikosaeder für die Punktformen eine Schlüsselrolle spielt. Im Abschnitt 5.7 wird die kristallographische Flächenkombination aufgegriffen und durch den Begriff der Eckenkombination ergänzt. Abschnitt 5.8 bringt eine Übersicht fast aller heute bekannter Klassen von symmetrischen Polyedern. Schließlich werden im Abschnitt 5.9 (Symmetrische Polyederverbände) Zusammensetzungen von Polyedern aus regulären Polyedern behandelt und im Abschnitt 5.10 (Topologische, projektiv und affin reguläre konvexe Polyeder) verschiedene Verallgemeinerungen des Begriffs des symmetrischen Polyeders.

In *Kapitel 6: Projektive Darstellungen von Symmetrien und Polyedern* werden die für das Verständnis der weiter oben erwähnten Kristallmorphologischen Hypothese notwendigen Zusammenhänge ausführlich entwickelt und illustriert. Dabei geht es insbesondere um die Einbettung der geometrischen Symmetrietheorie in den durch die projektive Fernebene ergänzten euklidischen Raum. Der Beginn wird im Abschnitt 6.1 gemacht mit allgemeinen Überlegungen zu den Symmetrien einer Sphäre und wird spezialisiert sowie ergänzt für die kristallographisch relevanten Fälle in den Abschnitten 6.2 und 6.3. Abschnitt 6.4 (Projektive Charakterisierung der Kristallformungsgesetze) faßt die entscheidenden projektiven Gesichtspunkte zur Kristallographie zusammen. Das Kapitel schließt mit der Erweiterung der vorangehenden Betrachtungen auf nichtkristallographische Symmetrien (Abschnitt 6.5).

In *Kapitel 7: Ergebnis und Konsequenzen für die Kristallographie: Zum komplementären Verhältnis von Morphologie und Strukturtheorie* werden die in den Abschnitten 1.2 und 1.3 angeführten Gedanken zu einer komplementären Begründung der Kristallographie ausführlich dargelegt und vertieft. Zunächst werden im Abschnitt 7.1 (Geometrische Kristallmorphologie: Eine Zusammenfassung) die entscheidenden Ergebnisse der geometrischen Kristallographie angeführt und mit zusätzlichen Gesichtspunkten ergänzt. In den Abschnitten 7.2 (Projektive und affine Geometrie der Gitter) und 7.3 (Metrische Geometrie der Gitter) werden die mathematischen Grundlagen für den Abschnitt 7.4 (Kristallstrukturtheorie) bereitgestellt. Schließlich wird im Abschnitt 7.5 (Zum Zusammenhang von Kristallformengesetz, Kristallmorphologischer Hypothese und Gitterstrukturhypothese) das komplementäre Verhältnis von Kristallmorphologie und Gitterstrukturtheorie aufgezeigt und im Abschnitt 7.6 (Synthese von Morphologie und Strukturtheorie) und 7.7 (Kristallgenese) die entsprechenden Synthesen vollzogen. Das Kapitel schließt mit einem Ausblick auf Morphologie und Struktur der Quasikristalle (Abschnitt 7.8).

2. PROJEKTIVE GEOMETRIE DES DREIDIMENSIONALEN RAUMES

Dieses Kapitel gibt eine knappe, jedoch anschaulich gehaltene Einführung in die dreidimensionale projektive Geometrie hinsichtlich ihrer Anwendung auf die geometrische Kristallographie und Polyedergeometrie. Es handelt sich um eine Skizze ohne Beweise oder detailreiche Ausführungen; für tiefergehende und breitere Behandlungen dieses schönen Gebietes wird auf die reichhaltige Literatur verwiesen. Beim ersten Lesen kann dieses Kapitel überschlagen werden und später bei Bedarf auf die einzelnen Abschnitte zurückgegriffen werden.

2.1 *Erweiterung des euklidischen Raumes durch Fernelemente*

Grundgebilde der projektiven Geometrie

Es wird hier davon ausgegangen, daß der dreidimensionale euklidische Raum zusammen mit seinen grundlegenden Eigenschaften wie die Existenz von rechten Winkeln, Parallelität, Längen- und Winkelmessung etc. bekannt sind.

Im folgenden stehen vor allem die Grundelemente Punkt, Gerade, Ebene und deren Beziehungen im Vordergrund. Falls nur *Inzidenzen*, das heißt das Schneiden, Verbinden, Durchstoßen, Ineinanderliegen etc. sowie die *Anordnung* dieser Elemente betrachtet wird, spricht man von *Lagebeziehungen*. Bei diesen spielen metrische Verhältnisse keine Rolle.

Die Gesamtheit aller Geraden, die durch einen Punkt gehen, heißt *Geradenbündel*, die Gesamtheit aller Ebenen, die durch eine Gerade oder einen Punkt gehen, *Ebenenbüschel* bzw. *Ebenenbündel*. Die Gesamtheit aller Geraden, die in einer Ebene liegen und durch einen Punkt derselben gehen, heißt *Geradenbüschel*. Die Gesamtheit aller Punkte oder Geraden in einer Ebene heißt *Punktfeld* bzw. *Geradenfeld* und schließlich die Gesamtheit aller Punkte in einer Geraden *Punktreihe*.

Punktreihe, Geradenbüschel und Ebenenbüschel werden *Grundgebilde erster Stufe*, und Geradenbündel, Ebenenbündel, Geradenfeld, Punktfeld *Grundgebilde zweiter Stufe* genannt.

Die Schnittgeraden der Ebenen eines Bündels bilden ein Geradenbündel mit demselben Zentrum und die Verbindungsebenen der Geraden eines Geradenbündels ein Ebenenbündel mit demselben Zentrum. Die Gesamtheit aller Punkte, Geraden und Ebenen heißt *Punktraum*, *Geradenraum* bzw. *Ebenenraum*.

Parallelität und Fernelemente

Der Übergang vom euklidischen zum projektiven Raum geschieht durch die Einschränkung auf Lagebeziehungen sowie die Einführung von Fernelementen, insbesondere von Fernpunkten und Ferngeraden, die in *der* Fernebene liegen. Die Hinzufügung dieser Elemente zum Bestand der euklidischen Punkte, Geraden und Ebenen geschieht mit Hilfe der (euklidischen) Parallelität. Dies setzt die Gültigkeit des Parallelenaxioms voraus: Zu jeder Ebene ε und einem nicht in dieser liegenden Punkt P gibt es genau eine Ebene durch P, die mit ε keinen (euklidischen) Punkt gemeinsam hat. Und für Geraden in einer Ebene: Zu jeder Geraden g und einem Punkt P gibt es genau eine durch P gehende und in der Ebene gP liegende Gerade, die keinen (euklidischen) Punkt mit g gemeinsam hat.

Für alles weitere wird eine Bekanntschaft mit der Erweiterung der euklidischen Geraden und Ebene zur projektiven Geraden bzw. projektiven Ebene vorausgesetzt. Es wird nur die Erweiterung dieser Überlegungen auf den Raum diskutiert.

Die Gesamtheit aller zu einer Ebene parallelen Ebenen bilden ein Parallelebenenbüschel und die Gesamtheit aller zu einer Geraden parallelen Ebenen oder Geraden ein *Parallelebenenbündel* bzw. *Parallelgeradenbündel*. Die Verbindungsebenen der Geraden eines Parallelgeradenbündels bilden ein Parallelebenenbündel mit derselben «Richtung» und die Gesamtheit aller Schnittgeraden eines Parallelebenenbündels bilden ein Parallelgeradenbündel derselben «Richtung».

Die Einführung der Fernelemente wird durch die Tatsache nahegelegt, daß die Lagebeziehungen von Parallelebenenbüscheln, Parallelebenenbündeln und Parallelgeradenbündeln sich von den Lagebeziehungen von Ebenenbüscheln, Ebenenbündeln bzw. Geradenbündeln im wesentlichen nicht unterscheiden. So haben etwa zwei Ebenenbündel ein gemeinsames (Parallel-)Ebenenbüschel, ob nun eines oder beide Bündel *Parallel*ebenenbündel sind oder nicht.

Man ordnet nun jedem Parallelebenen- oder Parallelgeradenbündel genau einen *Fernpunkt* und jedem Pararallelebenenbüschel genau eine *Ferngerade* zu. Man kann sich dann klarmachen, daß die so eingeführten Fernelemente untereinander genau die Lagebeziehungen von Punkten und Geraden einer projektiven Ebene erfüllen. So gibt es zum Beispiel zu zwei Parallelgeradenbündeln genau ein Parallelebenenbüschel, welches die Geraden beider Bündel enthält, das heißt, zu zwei Fernpunkten gibt es genau eine Ferngerade durch diese Punkte (Verbindungsgerade). Und weiter: zu zwei Parallelebenenbüscheln gibt es genau ein Parallelgeradenbündel, welches in beiden

Büscheln liegt, also gibt es zu zwei Ferngeraden genau einen Fernpunkt, der auf beiden Geraden liegt (Schnittpunkt).

Diese eindeutig bestimmte Ebene ist die sogenannte *Fernebene* des dreidimensionalen projektiven Raumes. Sie hat mit jeder Ebene dieses Raumes genau eine Gerade, die *Ferngerade* dieser Ebene, und mit jeder Geraden genau einen Punkt, den *Fernpunkt* dieser Geraden gemeinsam. Alle zu ein und derselben Ebene oder Geraden parallele Ebenen bzw. Geraden haben dieselben Fernelemente. Es ergibt sich auf diese Weise unter anderem, daß zwei Ebenen genau eine Schnittgerade haben und zwei in einer Ebene liegende Geraden genau einen Schnittpunkt.

Der am Anfang stehende, zum projektiven Raum erweiterte euklidische Raum kann nun umgekehrt als ein in natürlicher Weise *in den projektiven Raum eingebetteter euklidischer Raum* aufgefaßt werden. Dieser Gesichtspunkt wird vor allem bei der Anwendung der projektiven Geometrie auf die Kristall- und Polyedergeometrie eine besondere Rolle spielen.

Axiome und Urphänomene

Faßt man alle den Lagebeziehungen (Inzidenz- und Anordnungsbeziehungen) zugrunde liegenden Gesetze zusammen, so kommt man auf die *Axiome* (bei Locher *Urphänomene* genannt). Sie beinhalten die für das gesamte Gebiet der dreidimensionalen projektiven Geometrie hinreichenden elementaren Gesetzmäßigkeiten, mit deren Hilfe auch kompliziertere Lagebeziehungen durchschaubar gemacht werden können (für eine Aufzählung siehe etwa Locher [1940a], Kapitel 1 und Anhang, oder Ziegler [1996], Kapitel 1).

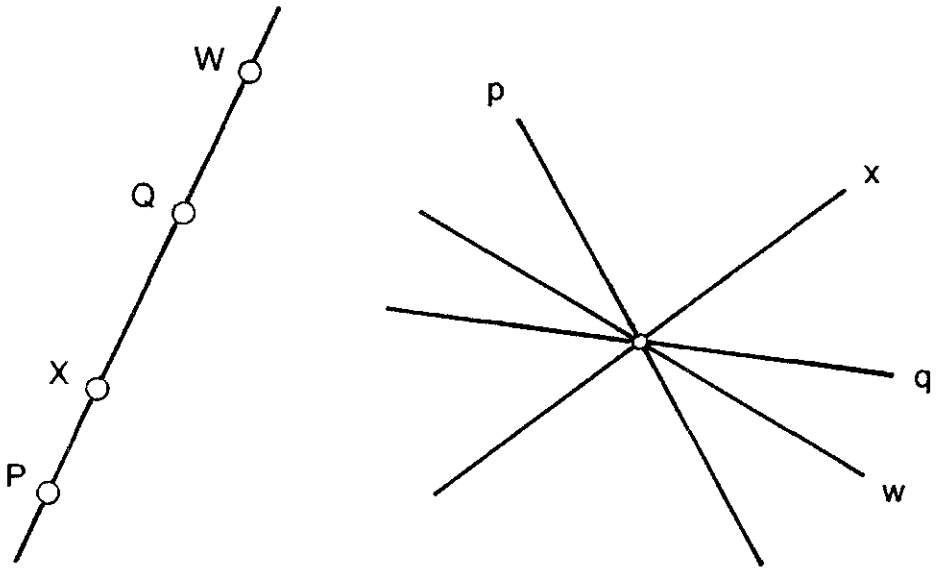
Einige Konsequenzen

Die Fernebene kommt in den Axiomen nicht vor: sie ist eine Ebene wie alle anderen und zeichnet sich im Rahmen der projektiven Geometrie nicht aus. Sie spielt in der projektiven Geometrie selbst keine Rolle, sondern nur in der Einbettung der euklidischen Geometrie in die projektive Geometrie. Im letzteren Falle ist sie ein bezüglich allen euklidischen Operationen unerreichbares und invariantes Element.

Eine Konsequenz der Aufhebung der Sonderrolle der Ferngeraden in der projektiven Geometrie ist die Tatsache, daß der Begriff des «Dazwischen-Liegens» seine naive Bedeutung verliert: Zu zwei Punkten P, Q auf einer projektiven Geraden g ist nicht bestimmt, welche Punkte «zwischen» P, Q liegen, genausowenig, wie es bestimmt ist, welche Geraden eines Geradenbüschels zwischen zwei beliebigen Geraden p, q liegen (**Figur 2.1** und **2.2**). Mit anderen Begriffen: die zwei durch zwei Punkte oder Geraden bestimmten *Segmente* (Intervalle, Mengen) auf einer Geraden g bzw. in einem Geradenbüschel G sind verschieden, aber nicht unterscheidbar.

In der in natürlicher Weise in die projektive Geometrie eingebetteten *euklidischen Geometrie* ist dagegen wegen der besonderen Rolle des Fernpunktes der Geraden g immer klar, welche Punkte «zwischen» P, Q liegen, da dafür nur dasjenige Segment, welches den Fernpunkt nicht enthält, in Frage kommt.

Erst wenn auch in der projektiven Geometrie explizit ein dritter Punkt W bzw. eine dritte Gerade w auf g bzw. in G eingeführt wird, der bzw. die genau in einem der Segmente liegen muß, ist eine Unterscheidung der Segmente auf eindeutige Art möglich. Man sagt dann, ein Punkt X liege *zwischen* P, Q bezüglich W, wenn er nicht im selben Segment wie W liegt. Ganz entsprechend lautet die Definition für Geraden oder Ebenen eines Büschels.



Figur 2.1 und 2.2: *«Zwischen»-Relation für Punktreihen und Geradenbüschel*

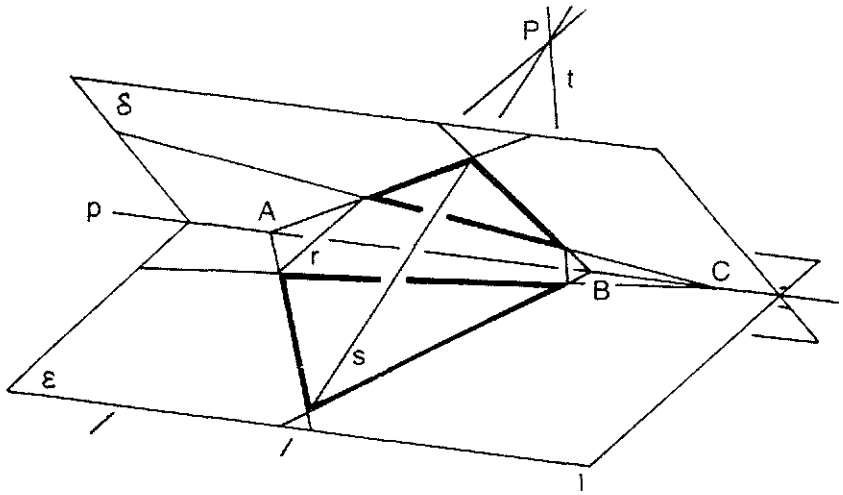
2.2 *Duale Gestaltung des projektiven Raumes und harmonische Grundfigur*

Dualität

Eine hervorstechende Eigenschaft der Axiome der projektiven Geometrie des Raumes ist ihre Dualität, das heißt ihre Invarianz gegenüber einer Vertauschung von «Punkt» und «Ebene», falls auch sinngemäß die Operationen «Schneiden» und «Verbinden» sowie gegebenenfalls die Lagebeziehungen «gehen durch» und «liegen in» ausgetauscht werden. Dies bedeutet, daß zu jeder konkreten Beziehung, das heißt zu jedem geometrischen Gebilde aus Punkten, Ebenen und Geraden eine eindeutig bestimmte duale Beziehung bzw. ein zu diesem duales Gebilde existiert. Dies ist das sogenannte *Dualitätsprinzip des projektiven Raumes*.

Daraus folgt, daß den Lagebeziehungen von Punkten und Geraden einer Ebene, der sogenannten *ebenen Geometrie*, eine *punktuelle Geometrie* oder *Bündelgeometrie* dual entspricht. Die sich daraus ergebenden Verhältnisse sollen zunächst am Beispiel des Satzes von Desargues demonstriert werden.

Beschränkt man sich auf die geometrischen Verhältnisse in einer Ebene oder in einem Punkt, so induziert das Dualitätsprinzip des Raumes ein *Dualitätsprinzip der ebenen Geometrie* bzw. ein *Dualitätsprinzip der Bündelgeometrie*.



Figur 2.3: *Dreiecke in perspektiver Lage*

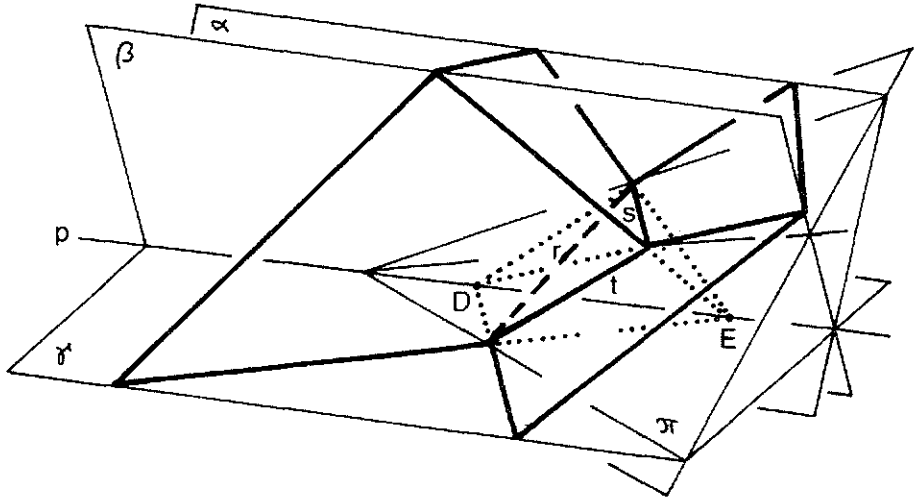
Der Satz von Desargues

Bei zwei Dreiecken in den Ebenen δ und ε (die auch in *einer* Ebene liegen können) liegen die Ecken paarweise auf drei Geraden *r*, *s*, *t* durch einen Punkt *P* genau dann, wenn entsprechende Seiten sich paarweise in drei Punkten *A*, *B*, *C* auf einer Geraden *p* schneiden (**Figur 2.3**).

Bei zwei Dreiflachen in den Punkten *D* und *E* (die auch in *einem* Punkte liegen können) gehen die Flächen paarweise durch drei Geraden *r*, *s*, *t* in einer Ebene π genau dann, wenn entsprechende Kanten paarweise in drei Ebenen α, β, γ liegen, die durch eine Gerade *p* gehen (**Figur 2.4**).

Man nennt die Dreiecke bzw. Dreiflache in diesem Falle *perspektiv*. Der Satz von Desargues für Dreiecke innerhalb einer Ebene ist nicht mit den Mitteln der ebenen projektiven Geometrie ableitbar: man muß die vollen räumlichen Verhältnisse miteinbeziehen, um ihn anhand der Axiome zu durchschauen (siehe dazu Locher [1940a], S. 48ff. oder [1937], Kapitel 5). Entsprechend ist der Satz von Desargues für Dreiflache innerhalb eines Bündels nicht rein innerhalb der (zweidimensionalen) Bündelgeometrie ableitbar.

Liegen die perspektiven Dreiecke und Dreiflache in einer Ebene bzw. in einem Punkt, so können die zwei zueinander dualen Sätze durch geometrische Figuren veranschaulicht werden, die durch Schneiden und Verbinden auseinander hervorgehen.



Figur 2.4: *Dreiflache in perspektiver Lage*

Ebene harmonische Grundfigur

Die harmonische Grundfigur ist eine der elementarsten und zugleich wichtigsten Figuren der gesamten projektiven Geometrie. Die ebene Version dieser Figur entsteht aus vier Punkten oder Geraden in allgemeiner Lage, das heißt von den vier Punkten oder vier Geraden liegen keine drei auf einer Geraden bzw. keine drei in einem Punkt.

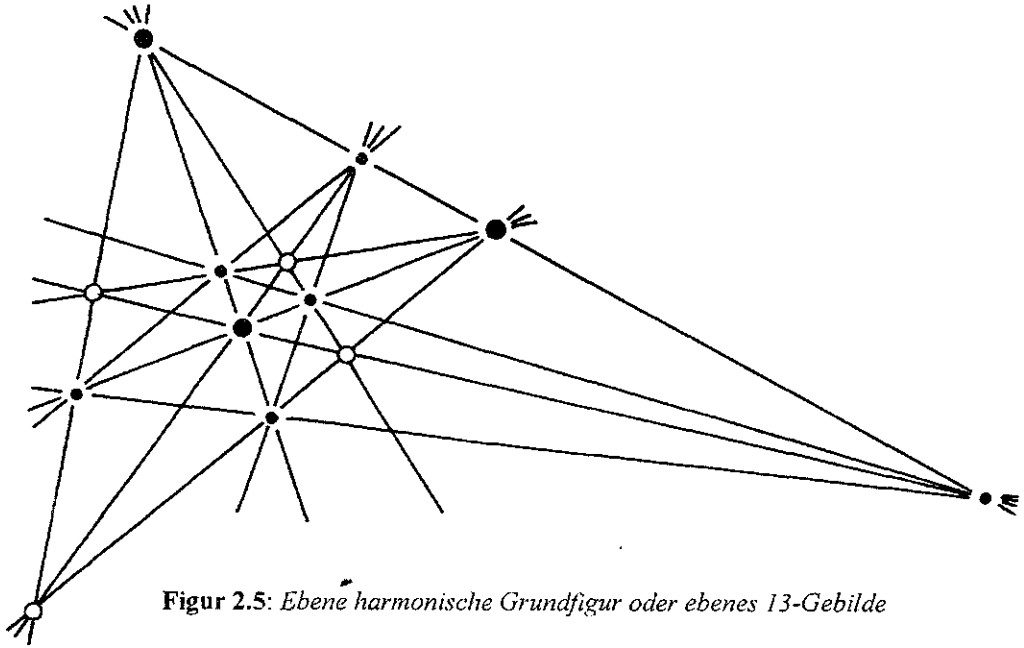
Vollständiges Viereck: Zu 4 Punkten in allgemeiner Lage (Ecken) gibt es 6 Verbindungsgeraden (Seiten). Diese schneiden sich in 3 weiteren Punkten (Nebenecken), die sich mit 3 Geraden verbinden lassen (Nebenseiten).

Die Nebenseiten schneiden die Seiten in 6 neuen Punkten, die zu je dreien auf 4 Geraden liegen. Dies ergibt die *ebene harmonische Grundfigur*.

Vollständiges Vierseit: Zu 4 Geraden in allgemeiner Lage (Seiten) gibt es 6 Schnittpunkte (Ecken). Diese lassen sich durch 3 weitere Geraden verbinden (Nebenseiten), die sich in 3 Punkten schneiden (Nebenecken).

Die Nebenecken verbinden sich mit den Ecken zu 6 neuen Geraden, die sich zu je dreien in 4 Punkten schneiden. Dies ergibt die *ebene harmonische Grundfigur*.

Trotz verschiedener Ausgangssituationen erhält man aus vier Punkten oder vier Geraden in allgemeiner Lage dieselbe Konfiguration von Punkten und Geraden: die sogenannte *ebene harmonische Grundfigur* (**Figur 2.5**). Es wird auch *ebenes 13-Gebilde* genannt, da es aus 13 Punkten und 13 Geraden besteht.



Figur 2.5: *Ebene harmonische Grundfigur oder ebenes 13-Gebilde*

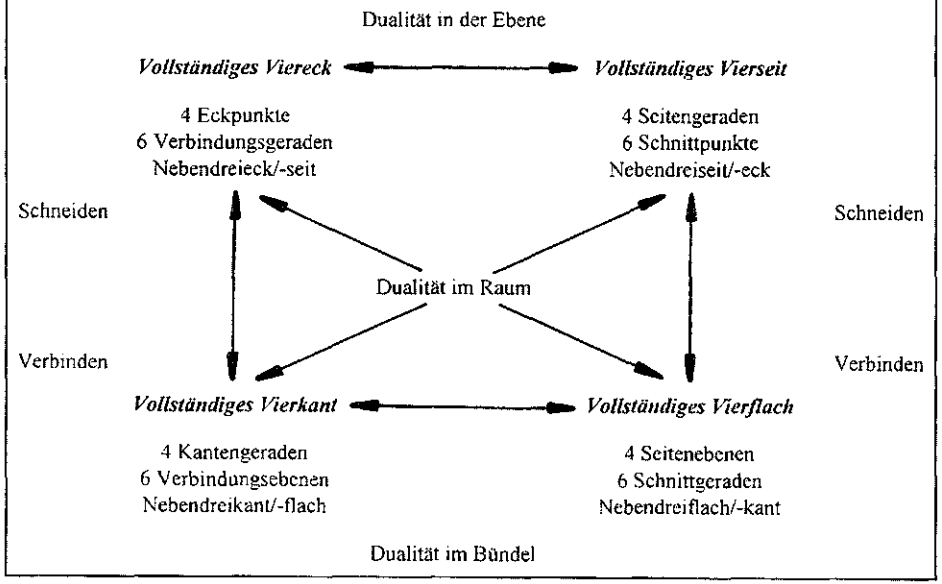
Zentrische und ebene harmonische Grundfigur

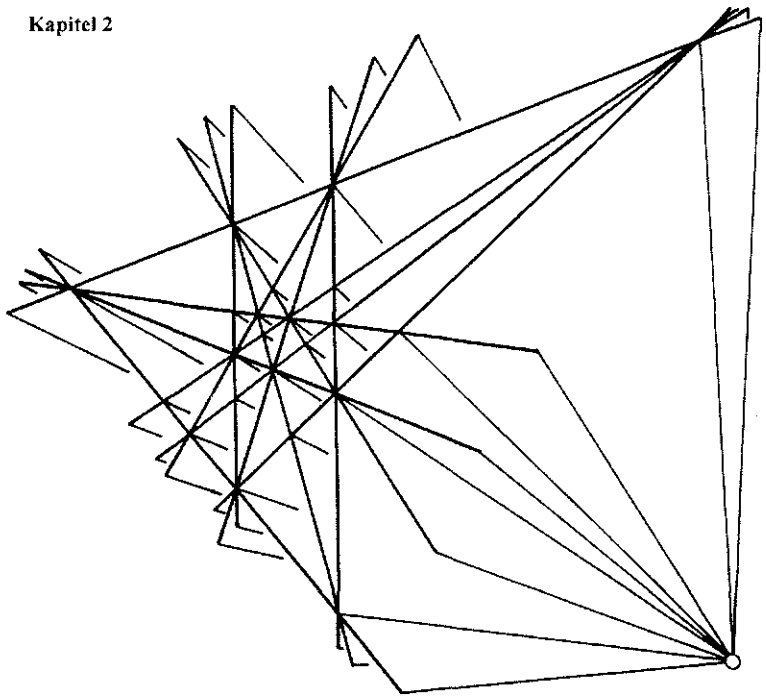
Vermöge des Dualitätsprinzips entspricht der ebenen harmonischen Grundfigur eine *zentrische harmonische Grundfigur*, die der Geometrie des Bündels angehört (**Figur 2.6**). So wie die ebene harmonische Grundfigur aus einer Zusammenfügung eines vollständigen Vierecks und Vierseits mit gemeinsamem Nebendreieck/-dreiseit besteht, so besteht die zentrische harmonische Grundfigur aus einer Zusammenfügung eines vollständigen Vierflachs mit einem vollständigen Vierkant mit gemeinsamem Nebendreikant/-dreiflach. Ein schrittweiser Aufbau des zentrischen 13-Gebildes aus dem Vierflach wird im Abschnitt 3.2 dargestellt (siehe Tabelle 3.1 und Figur 3.8 und 3.9).

Innerhalb einer Ebene ist die ebene harmonische Grundfigur gemäß dem Dualitätsprinzip der Ebene zu sich selbst dual oder *selbstdual*; in entsprechender Weise ist die zentrische harmonische Grundfigur selbstdual innerhalb eines Bündels.

In der folgenden **TABELLE 2.1** sind die entsprechenden Verhältnisse für die Vierergebilde zusammengefaßt. Sie zeigt zugleich verschiedene Erscheinungsweisen des Dualitätsprinzips. «Schneiden» bedeutet den Schnitt des zentrischen Gebildes mit einer Ebene außerhalb des Zentrums und «Verbinden» die Verbindung (Projektion) der ebenen Figur mit einem Punkt außerhalb der Ebene.

TABELLE 2.1: *Duale Gestaltung des Raumes am Beispiel der Vierergebilde*





Figur 2.6: *Ebener Schnitt einer zentrischen harmonischen Grundfigur*

Möbiusnetze und Möbiusblüten

Die Konstruktion eines vollständigen Vierseits oder Vierecks läßt sich so fortsetzen, daß schließlich (nach unendlich vielen Schritten) ein die ganze Ebene bedeckendes einfaches Muster entsteht (**Figur 2.7**), ein sogenanntes *Möbiusnetz*. Es entspricht der euklidischen Parkettierung der Ebene durch Parallelogramme, insbesondere Rechtecke, Quadrate und Rhomben. Beginnt man mit einem vollständigen Viereck *ABCD* mit seinen 6 Seiten und dem Nebendreieck/-seit *RST*, so wird eine Seite *s* des Nebendreiecks *RST* mit deren 4 Schnittpunkten *MRNT* mit den 6 Seiten festgehalten. Die Gerade *s* heißt dann die *Mittelgerade des Möbiusnetzes* und *S* der *Mittelpunkt des Vierecks ABCD*.

Die weiteren Konstruktionsschritte zur Vervielfältigung des Ausgangsvierecks ergeben sich aus den bereits vorhandenen oder neu konstruierten Schnittpunkten und deren Verbindungsgeraden sowie der Bedingung, daß alle neuen Geraden durch die Punkte *MRNT* gehen müssen. (Die entsprechende räumliche Konstruktion wird im Abschnitt 7.2 diskutiert.)

Ein Möbiusnetz ist folglich durch ein vollständiges Viereck eindeutig bestimmt. Jedes Viereck, welches ein und dasselbe Möbiusnetz festlegt, heißt *Elementarzelle* oder *Einheitszelle* dieses Möbiusnetzes. Einem Möbiusnetz liegen umgekehrt unendlich viele verschiedene Elementarzellen zugrunde. Diese haben dieselbe Mittelgerade *s*, aber unterschiedliche Anordnungen der vier Punkte auf derselben.

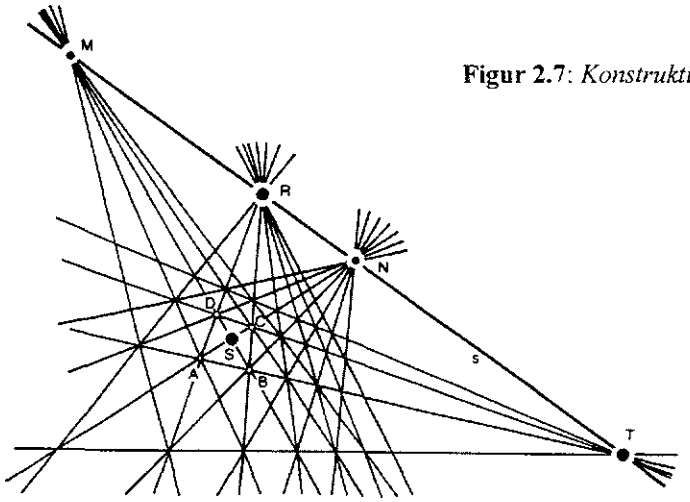
Anstatt eines vollständigen Vierecks kann auch ein vollständiges Vierseit als «Elementarzelle» zur Konstruktion eines Möbiusnetzes verwendet werden. Da der Konstruktion des Möbiusnetzes in beiden Fällen eine selbstduale harmonische Grundfigur zugrunde liegt, ergibt sich, daß Möbiusnetze ebenfalls innerhalb einer Ebene selbstdual sind.

Alle Möbiusnetze sind zueinander projektiv äquivalent. Denn jedes Möbiusnetz ist eindeutig festgelegt durch vier ein vollständiges Viereck bestimmende Punkte *ABCD*, das heißt eine seiner Elementarzellen. Zu vier solchen Punkten in allgemeiner Lage gibt es stets eine Projektivität, welche diese vier Punkte mit beliebigen vier anderen Punkten in allgemeiner Lage in Beziehung setzt (Abschnitt 2.4).

Alle Elementarzellen eines Möbiusnetzes sind zueinander projektiv äquivalent, denn jede Elementarzelle kann auf jede andere durch eine Projektivität bezogen werden, und da sie alle dasselbe Möbiusnetz bestimmen, bleibt dieses Netz bei dieser Projektivität unverändert.

Daraus ergibt sich: *Jedem Möbiusnetz liegen unendlich viele zueinander projektiv äquivalente Elementarzellen zugrunde. Das ganze Netz ist durch irgendeine seiner Elementarzellen eindeutig bestimmt und kann als projektive Vervielfältigung dieser Elementarzelle aufgefaßt werden.*

Die Projektion eines Möbiusnetzes aus einem Punkt außerhalb der Ebene des Netzes soll *Möbiusblüte* oder *Möbiusbündel* genannt werden (**Figur 2.6**). Eine solche Figur kann ganz innerhalb der Bündelgeometrie aufgebaut werden, ausgehend von einer zentrischen harmonischen Grundfigur. Ein Möbiusbündel ist selbstdual innerhalb der dazugehörigen Bündelgeometrie.



Figur 2.7: *Konstruktion eines Möbiusnetzes*

2.3 *Polyeder*

Kern und Hülle

Der projektive Punktraum oder Ebenenraum wird durch zwei Ebenen bzw. Punkte in zwei Ebenen- bzw. Punktbereiche gegliedert (eine Ebene bzw. ein Punkt haben im projektiven Raum noch keine Gliederung zur Folge). Drei Ebenen bzw. Punkte gliedern diese Räume in vier Bereiche, es entsteht aber noch keine «endliche» oder «geschlossene» Form. Dies ist erst bei vier Ebenen bzw. vier Punkten der Fall, das heißt beim «inneren» Punktbereich des Tetraeders (Kern) und dem entsprechenden «äußeren» Ebenenbereich des Tetraeders (Hülle). Eine räumliche konvexe Punktmenge (räumlicher Kern) bzw. eine räumliche konkave Ebenenmenge (räumliche Hülle) werden allgemein wie folgt definiert (**Figur 2.8ab**):

Eine Menge $\mathcal{M}$ von Punkten des projektiven Raumes heißt *konvexer Punktbereich* oder *Kernbereich*, wenn es eine Ebene ω gibt, so daß für alle Paare P, Q von Punkten aus $\mathcal{M}$ alle Punkte, die zwischen P, Q bezüglich des Schnittpunktes U von PQ mit ω liegen, zu $\mathcal{M}$ gehören.

Eine Menge $\mathcal{M}$ von Ebenen des projektiven Raumes heißt *konkaver Ebenenbereich* oder *Hüllbereich*, wenn es einen Punkt W gibt, so daß für alle Paare π, κ von Ebenen aus $\mathcal{M}$ alle Ebenen, die zwischen π, κ bezüglich der Verbindungsebene ν von $\pi\kappa$ mit W liegen, zu $\mathcal{M}$ gehören.

Die folgenden allgemeinen Begriffsbildungen sind insbesondere grundlegend für die Theorie konvexer Polyeder, wie sie im Abschnitt 5.2 entwickelt wird.

Ein konvexer Punktbereich $\mathcal{M}$ gliedert den Punktraum in einen Innenbereich, einen Randbereich und einen Außenbereich. Ein Punkt S heißt *innerer* oder *äußerer Punkt* bezüglich $\mathcal{M}$, je nachdem es auf jeder Geraden durch S Punkte X, Y mit S zwischen X, Y gibt, so daß alle Punkte zwischen X und Y zu $\mathcal{M}$ bzw. nicht zu $\mathcal{M}$ gehören.

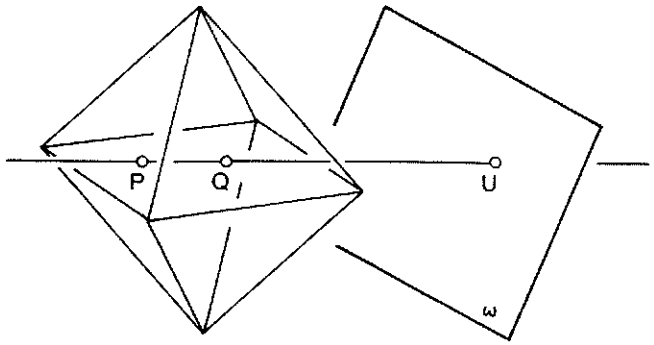
Ein Punkt S heißt *Randpunkt* bezüglich $\mathcal{M}$, wenn es auf einigen Geraden durch S Punkte X, Y mit S zwischen X, Y gibt, so daß alle Punkte zwischen S, X zu $\mathcal{M}$ gehören und alle Punkte zwischen S, Y nicht zu $\mathcal{M}$ gehören.

Aus der Definition der Konvexität des Punktbereichs ergibt sich, daß die Punkte der Ebene ω keine inneren Punkte sein können.

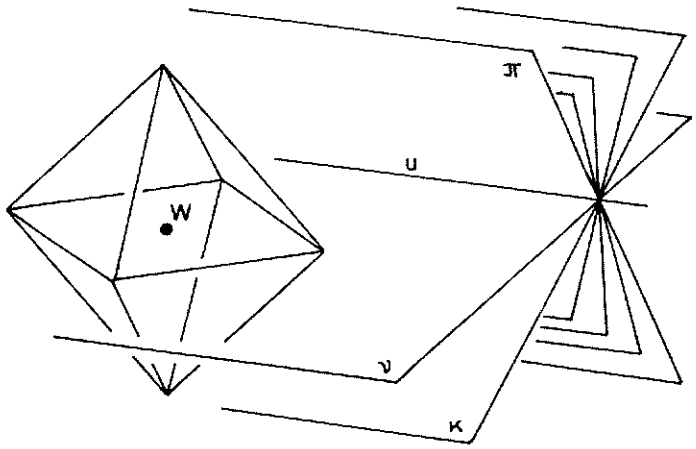
Ein konkaver Ebenenbereich $\mathcal{M}$ gliedert den Ebenenraum in einen Innenbereich, einen Randbereich und einen Außenbereich. Eine Ebene σ heißt *innere* oder *äußere Ebene* bezüglich $\mathcal{M}$, je nachdem es durch jede Gerade in σ Ebenen ξ, η mit σ zwischen ξ, η gibt, so daß alle Ebenen zwischen ξ und η zu $\mathcal{M}$ bzw. nicht zu $\mathcal{M}$ gehören.

Eine Ebene σ heißt *Randebene* bezüglich $\mathcal{M}$, wenn es in einigen Geraden durch σ Ebenen ξ, η mit σ zwischen ξ, η gibt, so daß alle Ebenen zwischen σ, ξ zu $\mathcal{M}$ gehören und alle Ebenen zwischen σ, η nicht zu $\mathcal{M}$ gehören.

Aus der Definition der Konkavität des Ebenenbereichs ergibt sich, daß die Ebenen des Punktes W keine inneren Ebenen sein können.



Figur 2.8a: *Konvexer Punktbereich*



Figur 2.8b: *Konkaver Ebenenbereich*

Konvexe Punktpolyeder und konkave Ebenenpolyeder

Eine Gerade heißt *Randgerade* von $\mathcal{M}$, wenn sie ein Segment von Randpunkten enthält. Eine Ebene heißt *Randebene* oder *Fläche* von $\mathcal{M}$, wenn sie ein ebenes konvexes Punktgebiet aus Randpunkten enthält. Eine Randgerade heißt *Kante* von $\mathcal{M}$, wenn sie in zwei Randebenen liegt. Ein Randpunkt heißt *Ecke* von $\mathcal{M}$, wenn er in mindestens zwei Kanten oder mindestens drei Flächen liegt.

Liegen alle Randpunkte in Randebenen (Flächen), so bildet der konvexe Punktbereich ein *konvexes Punktpolyeder* oder *Kernpolyeder*; es wird durch diese Ebenen *begrenzt*. Die in einer Ebene liegenden Randpunkte bilden die *Flächen*, die in zwei Flächen liegenden Randpunkte die *Kanten* und die in drei und mehr Flächen liegenden Randpunkte die *Ecken* des Polyeders. Die übrigen Punkte des konvexen Punktpolyeders sind *innere Punkte*: sie bilden seinen *Innenbereich*.

Jedem konvexen Punktpolyeder $\mathcal{P}$ entspricht genau ein konkaves Ebenenpolyeder Q:

Jede einen Randpunkt und keinen inneren Punkt des Polyeders $\mathcal{P}$ enthaltende Ebene ist eine *Randebene* und jede ein Segment von Randpunkten, aber keine inneren Punkte enthaltende Ebene ist eine *Kantenebene* des Polyeders Q; die Trägerebenen der Flächen von $\mathcal{P}$ bilden die *Flächen* von Q. Alle durch einen Randpunkt von $\mathcal{P}$ gehenden Randebenen, Kantenebenen und Flächen von Q bilden die *Ecken* und alle in einer Kante von $\mathcal{P}$ liegenden Kantenebenen und Flächen von Q die *Kanten* des Polyeders Q. Alle übrigen Ebenen, welche in keiner Ecke und in keinem inneren Punkt von $\mathcal{P}$ liegen, bilden die *inneren Ebenen* des Polyeders Q.

Das so bestimmte Polyeder Q bildet nun bezüglich jedem inneren Punkt des Punktpolyeders $\mathcal{P}$ tatsächlich ein konkaves Ebenenpolyeder. Denn seien ρ, σ irgendwelche Ebenen in Q, so liegt die Verbindungsebene α der Geraden $\rho\sigma$ mit einem (beliebigen) inneren Punkt A von $\mathcal{P}$ in einem der beiden durch ρ, σ bestimmten Segmente des Ebenenbüschels der Geraden $\rho\sigma$. Gäbe es nun einen weiteren inneren Punkt B des Punktpolyeders $\mathcal{P}$, welcher $\rho\sigma$ mit einer Ebene des anderen Segmentes verbinden würde, so müßte eines der beiden Punktsegmente AB wegen der Konvexität des Punktpolyeders $\mathcal{P}$ ganz aus inneren Punkten bestehen und damit entweder ρ oder σ enthalten. Dies ist aber ausgeschlossen, da keine Ebene von Q einen inneren Punkt von $\mathcal{P}$ enthält. Also liegt in keiner Ebene des die Ebene α nicht enthaltenden Segmentes ein innerer Punkt, folglich handelt es sich um innere Ebenen des Polyeders Q.

Aus einem gegebenen konvexen Punktpolyeder lassen sich auf einfache Weise weitere solche Polyeder gewinnen: *Jede Ebene, welche innere Punkte eines Punktpolyeders enthält, gliedert dieses in genau zwei konvexe Punktpolyeder.*

Dieses Resultat, dessen Beweis dem Leser überlassen bleibt, wird nun auf einen Spezialfall angewendet, der im Abschnitt 5.2 eine besondere Rolle spielen wird.

Eine Gerade heißt *Randgerade* von $\mathcal{M}$, wenn sie ein Segment von Randebenen enthält. Ein Punkt heißt *Randpunkt* oder *Ecke* von $\mathcal{M}$, wenn er ein zentrisches konkaves Ebenengebiet aus Randebenen enthält. Eine Randgerade heißt *Kante* von $\mathcal{M}$, wenn sie durch zwei Randpunkte geht. Eine Randebene heißt *Fläche* von $\mathcal{M}$, wenn sie mindestens zwei Kanten oder mindestens drei Ecken enthält.

Liegen alle Randebenen in Randpunkten (Ecken), so hüllt der konkave Ebenenbereich ein *konkaves Ebenenpolyeder* oder *Hüllpolyeder* ein; es wird durch diese Ecken *begrenzt*. Die durch einen Punkt gehenden Randebenen bilden die *Ecken*, die durch zwei Ecken gehenden Randebenen schneiden sich in den *Kanten* und die durch drei und mehr Ecken gehenden Randebenen bilden die *Flächen* des Polyeders. Die übrigen Ebenen des konkaven Ebenenpolyeders sind *innere Ebenen*: sie bilden seinen *Innenbereich*.

Jedem konkaven Ebenenpolyeder $\mathcal{P}$ entspricht genau ein konvexes Punktpolyeder Q:

Jeder auf einer Randebene und keiner inneren Ebene des Polyeders $\mathcal{P}$ liegende Punkt ist ein *Randpunkt* und jeder in einem Büschel von Randebenen, aber in keiner inneren Ebene liegende Punkt ist ein *Kantenpunkt* des Polyeders Q; die Trägerpunkte der Eckenbündel bilden die *Ecken* von Q. Alle in einer Randebene von $\mathcal{P}$ liegenden Randpunkte, Kantenpunkte und Ecken von Q bilden die *Flächen* und alle in einer Kante von $\mathcal{P}$ liegenden Kantenpunkte und Ecken von Q die *Kanten* des Polyeders Q. Alle übrigen Punkte, welche in keiner Fläche und in keiner inneren Ebene von $\mathcal{P}$ liegen, bilden die inneren Punkte des Polyeders Q.

Das so bestimmte Polyeder Q bildet nun bezüglich jeder inneren Ebene des Ebenenpolyeders $\mathcal{P}$ tatsächlich ein konvexes Punktpolyeder. Denn seien R, S irgendwelche Punkte in Q, so liegt der Schnittpunkt A der Geraden RS mit einer (beliebigen) inneren Ebene α von $\mathcal{P}$ in einem der beiden durch R, S bestimmten Segmente der Punktreihe der Geraden RS. Gäbe es nun eine weitere innere Ebene β des Ebenenpolyeders $\mathcal{P}$, welche RS in einem Punkt des anderen Segmentes schneiden würde, so müßte eines der beiden Ebenensegmente $\alpha\beta$ wegen der Konkavität des Ebenenpolyeders $\mathcal{P}$ ganz aus inneren Ebenen bestehen und damit entweder R oder S enthalten. Dies ist aber ausgeschlossen, da kein Punkt von Q auf einer inneren Ebene von $\mathcal{P}$ liegt. Also geht durch keinen Punkt des den Punkt A nicht enthaltenden Segmentes eine innere Ebene, folglich handelt es sich um innere Punkte des Polyeders Q.

Aus einem gegebenen konkaven Ebenenpolyeder lassen sich auf einfache Weise weitere solche Polyeder gewinnen: *Jeder Punkt, welcher innere Ebenen eines Ebenenpolyeders enthält, gliedert dieses in genau zwei konkave Ebenenpolyeder.*

Dieses Resultat, dessen Beweis dem Leser überlassen bleibt, wird nun auf einen Spezialfall angewendet, der im Abschnitt 5.2 eine besondere Rolle spielen wird.

Es seien $n \geq 4$ Ebenen, die tangential an eine Sphäre (oder allgemeiner: an eine Fläche 2. Grades) liegen und von denen mindestens vier nicht durch einen Punkt gehen, gegeben. Diese gliedern den Punktraum in ebenflächig begrenzte Gebiete. *Dasjenige Gebiet, welches die Punkte der Sphäre enthält, ist ein konvexes Punktpolyeder.*

Für den induktiven Beweis dieses Theorems wird auf die fundamentale Tatsache zurückgegriffen, daß vier nicht durch einen Punkt gehende Ebenen den Punktraum in 8 ebenflächig begrenzte konvexe Gebiete gliedern, also in 8 Punktpolyeder (Locher [1959], Kap. 8). Insbesondere ist also dasjenige Punktgebiet, welches die Punkte der Sphäre enthält, ein Punktpolyeder. Gemäß der weiter oben angeführten Tatsache schneidet (oder stumpft) jede weitere an die Sphäre tangentiale Ebene das konvexe Punktpolyeder so ab, daß wieder ein konvexes Punktpolyeder übrigbleibt, dessen Flächen zur Sphäre tangential sind, etc.

Damit läßt sich aus $n \geq 4$ Tangentialebenen an eine Sphäre (oder allgemeiner: an eine Fläche 2. Grades) ein konvexes Punktpolyeder gewinnen. Dieser Vorgang soll *konvexe Kernbildung* und das Resultat *konvexer Kern* genannt werden.

Daraus läßt sich, wie weiter oben ausgeführt, ein konkaves Ebenenpolyeder konstruieren. Der ganze Übergang kann dann als *konkave Kernbildung* und das Resultat als *konkaver Kern* bezeichnet werden.

Es seien $n \geq 4$ Punkte, die auf einer Sphäre (oder allgemeiner: auf einer Fläche 2. Grades) liegen und von denen mindestens vier nicht in einer Ebene sind, gegeben. Diese gliedern den Ebenenraum in punktbündelig begrenzte Gebiete. *Dasjenige Gebiet, welches die Tangentialebenen der Sphäre enthält, ist ein konkaves Ebenenpolyeder.*

Für den induktiven Beweis dieses Theorems wird auf die fundamentale Tatsache zurückgegriffen, daß vier nicht in einer Ebene liegende Punkte den Ebenenraum in 8 punktbündelig begrenzte konkave Gebiete gliedern, also in 8 Ebenenpolyeder (Locher [1959], Kap. 8). Insbesondere ist also dasjenige Ebenengebiet, welches die Tangentialebenen der Sphäre enthält, ein Ebenenpolyeder. Gemäß der weiter oben angeführten Tatsache ergänzt (oder erhebt) jeder weitere Punkt der Sphäre das konkave Ebenenpolyeder so, daß wieder ein konkaves Ebenenpolyeder übrigbleibt, dessen Ecken Punkte der Sphäre sind, etc.

Damit läßt sich aus $n \geq 4$ Punkten auf einer Sphäre (oder allgemeiner: auf einer Fläche 2. Grades) ein konkaves Ebenenpolyeder gewinnen. Dieser Vorgang soll *konkave Hüllenbildung* und das Resultat *konkave Hülle* genannt werden.

Daraus läßt sich, wie weiter oben ausgeführt, ein konvexes Punktpolyeder konstruieren. Der ganze Übergang kann dann als *konvexe Hüllenbildung* und das Resultat als *konvexe Hülle* bezeichnet werden.

Im Kapitel 5.2 werden nur noch konvexe Punktpolyeder oder Kernpolyeder betrachtet werden, die dort und im folgenden kurz *Polyeder* genannt werden.

2.4 *Projektive Transformationen*

Projektive Transformationen oder Abbildungen des projektiven Raumes in sich sind Beziehungen zwischen den Elementen dieses Raumes (Punkt, Gerade, Ebene), die erstens umkehrbar eindeutig und zweitens inzidenzerhaltend sind. Dies bedeutet, daß jedem Element genau ein anderes entspricht und umgekehrt, und daß zwei ineinanderliegenden Elementen ebensolche entsprechen. Mit anderen Begriffen: Einem Grundgebilde erster oder zweiter Stufe entspricht wieder ein Grundgebilde derselben Stufe.

Bei *Kollineationen* des projektiven Raumes gehen unter Beibehaltung der Inzidenz Punkte in Punkte, Ebenen in Ebenen und Geraden in Geraden über. Der *Fundamentalsatz der projektiven Geometrie des Raumes* besagt, daß eine Kollineation eindeutig bestimmt ist, wenn für fünf Punkte in allgemeiner Lage (das heißt fünf Punkte, von denen je vier ein Tetraeder bilden) die ihnen entsprechenden Punkte bekannt sind. Für die Festlegung einer ebenen oder zentrischen Kollineation, das heißt einer Kollineation einer Ebene oder eines Punktes in sich, genügen vier Paare von sich entsprechenden Elementen in allgemeiner Lage (das heißt keine drei gehören einem Grundgebilde erster Stufe an).

Bei *Korrelationen* gehen unter Beibehaltung der Inzidenz Punkte in Ebenen, Ebenen in Punkte und Geraden in Geraden über. Sie ist ebenfalls durch fünf einander entsprechende Elementepaare in allgemeiner Lage bestimmt.

Eine Transformation heißt *involutorisch*, wenn nach zweimaliger Anwendung alles wieder an seinem ursprünglichen Platz ist, das heißt, wenn die zweimalige Ausführung der Transformation gleich der Identität ist.

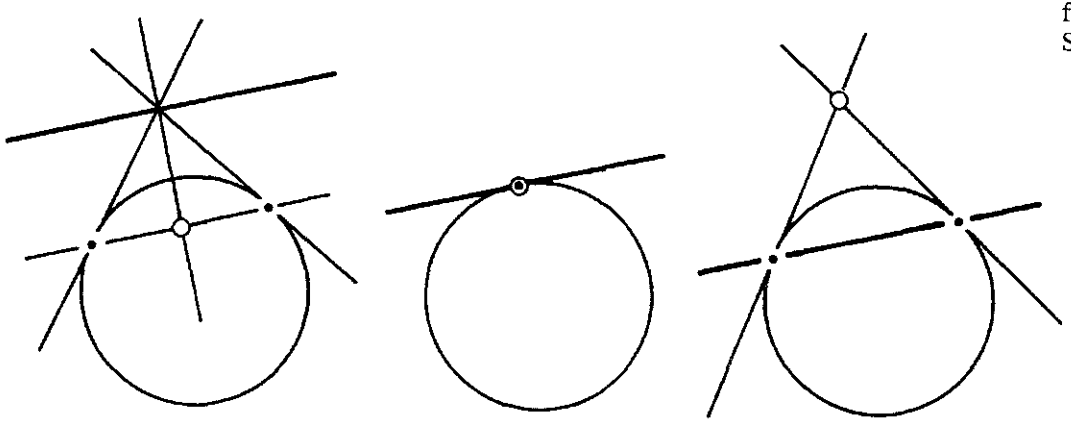
In der ebenen und zentrischen projektiven Geometrie heißen die involutorischen Korrelationen auch *Polaritäten*. Es gibt davon zwei Typen, die gleichsinnigen oder elliptischen Polaritäten und die ungleichsinnigen oder hyperbolischen Polaritäten. Bei den letzteren gibt es einander entsprechende Punkte und Geraden bzw. Ebenen und Geraden, die inzident sind: sie bilden im allgemeinen einen Kegelschnitt bzw. Kegel. Im ersteren Falle gibt es keine solchen Elemente.

Ein Beispiel für eine ungleichsinnige Polarität in der euklidischen Ebene ist die bekannte *Polarität am euklidischen Kreis* (oder allgemeiner: an einem reellen Kegelschnitt), bei welcher jedem Punkt der Ebene (Pol) eine Polare und umgekehrt jeder Geraden (Polare) ein Pol bezüglich des Kreises entspricht. Liegt der Punkt (Pol) auf der Kreisperipherie, so ist die Tangente seine Polare und umgekehrt (**Figur 2.9**). Projiziert man die Polarität am Kreis aus irgendeinem Punkte außerhalb der Ebene, so erhält man eine allgemeine ungleichsinnige Polarität im projektiven Bündel.

Ein Beispiel für eine gleichsinnige Polarität im euklidischen Bündel ist die sogenannte *zentrische Rechtwinkelinvolution* oder *zentrische Rechtwinkelpolarität*. Hier entspricht jeder Ebene die zu ihr senkrechte Gerade und umgekehrt jeder Geraden die zu ihr senkrechte Ebene. Offenbar gibt es hier keine einander entsprechenden Elemente, die ineinander liegen.

Schneidet man diese zentrische Rechtwinkelpolarität mit einer Ebene außerhalb des Bündels, so erhält man eine allgemeine gleichsinnige (elliptische) Polarität in der projektiven Ebene. Sie wird auch *ebene Rechtwinkelpolarität* genannt.

Als Beipiel einer räumlichen projektiven Beziehung, genauer: einer involutorischen Korrelation, wird die *Polarität an einer Sphäre* (oder allgemeiner: an einer nicht ausgearteten Fläche zweiten Grades) betrachtet. Jedem Punkt P (Pol) außerhalb der Sphäre entspricht die Ebene π (Polarebene) durch die Berührungspunkte des Tangentialkegels an die Sphäre mit Spitze in P, und umgekehrt entspricht der Ebene π der Punkt P. Jedem Punkt innerhalb der Sphäre entspricht diejenige (wohlbestimmte) Ebene π (Polarebene), welche alle Punkte enthält, deren Tangentialkegel die Sphäre in Kreisen in Ebenen durch P berühren, und umgekehrt entspricht der Ebene π der Punkt P. Durch Geraden oder Punkte gehende Ebenen und in Geraden oder Ebenen liegende Punkte entsprechen in Geraden bzw. Ebenen liegende Punkte und durch Geraden bzw. Punkte gehende Ebenen.



Figur 2.9: *Polarität am euklidischen Kreis*

2.5 *Affine Geometrie und affine Transformationen*

Wird eine Ebene im projektiven Raum ausgezeichnet und als *Fernebene* ausgesondert, so erhält man einen *affinen Raum*. Die Elemente der Fernebene heißen *Fernelemente*, und Geraden und Ebenen, welche sich in Fernelementen treffen, heißen *parallel*. Diejenigen projektiven Transformationen, welche die Fernebene eines affinen Raumes als Ganzes (nicht notwendigerweise elementweise) invariant lassen, heißen *affine Transformationen* oder *Affinitäten* dieses affinen Raumes.

Wählt man als Fernebene eines affinen Raumes die Fernebene der in den projektiven Raum eingebetteten euklidischen Geometrie, so nimmt der affine Raum einen Platz «zwischen» dem projektiven und dem euklidischen Raum ein. Entsprechend sind die affinen Transformationen «zwischen» den projektiven und den euklidischen Transformationen. Denn erstere lassen nur Inzidenzen invariant, letztere außerdem metrische Eigenschaften. Affine Transformationen erhalten neben den Inzidenzen nur die Parallelität, da Fernelemente wieder in Fernelemente übergehen.

Eine Affinität eines affinen Raumes ist eindeutig bestimmt, wenn für vier ein Tetraeder bildende Punkte oder Ebenen die vier entsprechenden Punkte bzw. Ebenen bekannt sind.

Eine *affine Ebene* erhält man, wenn in einer projektiven Ebene eine Gerade als Ferngerade ausgesondert wird (insbesondere die Ferngerade der entsprechenden euklidischen Ebene) und mit ihr alle ebenen projektiven Transformationen auf solche reduziert werden, welche diese Gerade als Ganzes invariant lassen. Damit ist garantiert, daß parallele Geraden in ebensolche übergehen, insbesondere gehen Parallelogramme in Parallelogramme über. Eine ebene Affinität ist eindeutig bestimmt, wenn für die Ecken oder Seitengeraden eines Dreiecks bekannt ist, welche Ecken bzw. Seitengeraden eines anderen Dreiecks ihnen entsprechen.

2.6 *Einbettung euklidischer Bewegungen in projektive Transformationen*

Dem Folgenden wird die Einbettung des euklidischen Raumes in den projektiven Raum zugrunde gelegt. Dies bedeutet unter anderem, daß im projektiven Raum eine Ebene ausgezeichnet wird, welche die Fernpunkte und Ferngeraden der euklidischen Geometrie enthält.

Unter euklidischen Transformationen werden hier Kongruenz- *und* Ähnlichkeitstransformationen des euklidischen Raumes in sich selbst verstanden. Diese lassen sich dadurch eindeutig charakterisieren, daß sie die Menge aller Sphären in sich überführen. Bei diesen Transformationen gehen offenbar Fernelemente in Fernelemente über, da parallelen Geraden bzw. Ebenen ebensolche entsprechen. Die Fernebene bleibt als Ganzes invariant. Nur bei Translationen ist sie auch elementweise invariant.

Die Polarität an einer Sphäre induziert eine zentrische Rechtwinkelpolarität (Abschnitt 2.4) vermöge der Beziehung des Pols eines Fernpunktes zu seiner Polarebene durch den Mittelpunkt der Sphäre. Diese Rechtwinkelpolarität zeigt sich im Schnitt mit der Fernebene als spezielle gleichsinnige Polarität. Sie ist für alle Sphären dieselbe und wird deshalb bei euklidischen Transformationen invariant gelassen; sie heißt *Kugelkreis* oder *absolute Polarität* der euklidischen Geometrie. Man kann die Situation umkehren und euklidische Tranformationen definieren als projektive Transformationen, welche den Kugelkreis invariant lassen.

Es werden nun insbesondere euklidische distanzerhaltende Transformationen mit einem Fixpunkt, das heißt Bewegungen einer Sphäre, betrachtet.

In der *sphärischen Geometrie* auf der Kugeloberfläche werden Winkel euklidisch gemessen und Distanzen durch Winkel ausgedrückt. Das sogenannte *sphärische Modell der (zweidimensionalen) elliptischen Geometrie* erhält man, wenn in der sphärischen Geometrie diametrale Punkte (Punkte auf Durchmessern der Sphäre) identifiziert, das heißt als jeweils ein Punkt aufgefaßt werden. Dies bedeutet, daß dieses Modell der elliptischen Geometrie durch eine Spiegelung am Mittelpunkt der Sphäre (Inversion) in sich selbst übergeht. Die «Geraden» dieser Geometrie sind die Großkreise (mit identifizierten Diametralpunkten). Daraus folgt, daß es in der elliptischen Geometrie keine parallelen, das heißt nichtschneidenden «Geraden» gibt, da sich Großkreise auf einer Sphäre immer schneiden.

Es werden nun Bewegungen im Rahmen des sphärischen Modells der elliptischen Geometrie anhand der bekannten euklidischen Bewegungen der Sphäre untersucht.

Da im sphärischen Modell der elliptischen Geometrie die Inversion nichts bewirkt, kann im Rahmen der elliptischen Geometrie jede euklidische Bewegung der Sphäre mit einer Inversion zusammengesetzt werden. Dies bedeutet, daß für die elliptischen Bewegungen nur die Drehungen übrigbleiben, denn jede Spiegelung wird durch die Zusammensetzung mit einer Inversion zu einer Drehung.

Damit bestehen die elliptischen Bewegungen im sphärischen Modell genau aus den euklidischen Drehungen der entsprechenden Sphäre. Diese haben alle eine Fixgerade (Drehachse) und eine Fixebene (senkrecht zur Drehachse).

Anstatt des sphärischen Modells der elliptischen Geometrie kann man auch das *Bündelmodell der elliptischen Geometrie* betrachten. Es entsteht aus dem ersteren durch Projektion aus dem Zentrum der Sphäre. Die im Abschnitt 2.4 erwähnte zentrische Rechtwinkelpolarität im euklidischen Bündel ist eine Polarität im elliptischen Bündel.

Projiziert man das sphärische Modell der elliptischen Geometrie aus dem Sphärenmittelpunkt auf die Fernebene, so erhält man das (ebene) *projektive Modell der (zweidimensionalen) elliptischen Geometrie*. Hier haben alle elliptischen Bewegungen einen Fixpunkt und eine Fixgerade.

Man kann dem obigen zufolge festhalten, daß die durch euklidische Drehungen einer Sphäre in der Fernebene induzierten Bewegungen sich als Bewegungen im projektiven Modell der elliptischen Geometrie auffassen lassen. Auch hier gibt es eine Umkehrung: Die projektiven Transformationen, welche einen Punkt des Raumes fest lassen und den Kugelkreis der Fernebene in sich überführen, sind genau die Bewegungen (inklusive gleichsinnige Ähnlichkeiten) einer Sphäre mit dem Mittelpunkt im invarianten Punkt.

2.7 *Projektive Koordinaten*

Einführung projektiver Koordinaten ohne Zugrundelegung einer Metrik

Projektive Koordinaten sind ein Mittel, die Anordnung von Punkten, Geraden und Ebenen in Zahlen auszudrücken. Das prinzipielle Vorgehen soll anhand der *ebenen projektiven Geometrie* illustriert werden. Die Übertragung auf die *Bündelgeometrie* erfolgt durch Projektion und auf den Raum durch entsprechende Verallgemeinerung.

Der bestimmende geometrische Faktor für Koordinatensysteme ist das Möbiusnetz. Entscheidend ist, daß durch eine fortgesetzte Ergänzung des Möbiusnetzes letztlich *jeder* Punkt und *jede* Gerade der Ebene umfaßt, das heißt konstruktiv, eventuell durch unendlich viele Schritte, erreicht werden kann.

Als Koordinatenachsen für Punktkoordinaten dienen die drei Geraden x, y, s und als Ursprung und Einheitspunkte die vier Punkte A, B, C, D (**Figur 2.10**). Man kann dann zeigen, daß durch fortgesetzte Verfeinerung des Möbiusnetzes *jedem* Punkt der Ebene ein Zahlenpaar $[x, y]$ zukommt und daß diese Zahlen projektive Invarianten sind, das heißt erhalten bleiben, wenn das ganze Koordinatensystem projektiv transformiert wird.

Bei einem Wechsel des Koordinatensystems (Koordinatentranformation) erhalten die Koordinaten die Form von Doppelverhältnissen, das heißt sie stellen ein Verhältnis von zwei Verhältnissen je zweier Differenzen da. Im weiteren lassen sich auf duale Weise Koordinaten für Geraden einführen.

Führt man gemäß $x = x_1 : x_3$ und $y = x_2 : x_3$ sogenannte *homogene projektive Koordinaten* ein, so kann jedem Punkt der projektiven Ebene ein Zahlentripel $[x_1, x_2, x_3]$ zugeordnet werden, wobei Zahlentripel mit demselben Verhältnis $x_1 : x_2 : x_3$ zueinander *äquivalent* sind, das heißt demselben Punkt zugeordnet werden. Dafür wird $P[x_1 : x_2 : x_3]$ geschrieben.

Insbesondere ergeben sich folgende Koordinaten für die obigen Punkte:

$$A[0:0:1],\ B[1:0:1],\ C[1:1:1],\ D[0:1:1]; \qquad R[0:1:0],\ T[1:0:0].$$

Reelle *Linearkombinationen* von Koordinaten zweier Punkte $P[x_1 : x_2 : x_3]$ und $[y_1 : y_2 : y_3]$ stellen die Punkte X der Verbindungsgeraden PQ dar. Das heißt, X liegt genau dann in PQ, wenn seine Koordinaten die Form haben:

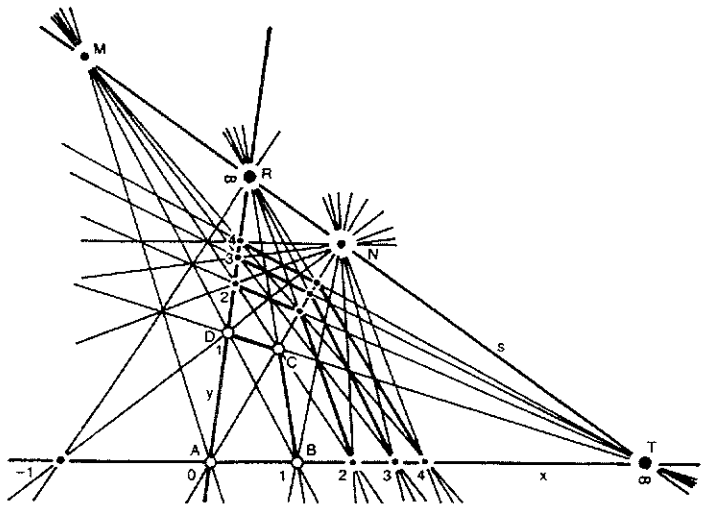
$$[ax_1 + by_1,\ ax_2 + by_2 + ax_3 + by_3],$$

wo a, b reelle Zahlen sind, die nicht beide zugleich Null sind.

Auf duale Weise können bezüglich desselben Koordinatendreiseits allen Geraden der Ebene homogene projektive Koordinaten zugeordnet werden. Sie werden in runde Klammern gesetzt. Bei geeigneter Wahl der Einheitsgeraden $c(1:1:1)$ gilt für ineinander liegende (inzidente) Punkte $P[x_1 : x_2 : x_3]$ und Geraden $q(u_1 : u_2 : u_3)$ die *Inzidenzgleichung*

$$u_1x_1 + u_2x_2 + u_3x_3 = 0.$$

Für das Folgende wird das in einer Ebene ε liegende Koordinatensystem der Figur 2.10 aus einem Punkt O außerhalb von ε projiziert. Dadurch erhält man ein projektives Koordinatensystem für die Geraden und Ebenen des Bündels O.



Figur 2.10: *Projektives Koordinatensystem*

Vektorgeometrische Deutung homogener projektiver Bündelkoordinaten

Die im folgenden skizzierte vektorgeometrische Interpretation homogener projektiver Koordinaten steht in den meisten Darstellungen der analytischen projektiven Geometrie am Ausgangspunkt: sie wird unter Zugrundelegung der linearen Algebra, insbesondere der Theorie der Vektorräume, entwickelt. Der Einfachheit halber denkt man sich hier Vektoren bezüglich eines rechtwinkligen euklidischen Koordinatensystems im dreidimensionalen Raum gegeben.

Hinsichtlich der Deutung projektiver Koordinaten kann man sich hier auf den Fall der Bündelgeometrie beschränken, da nur dieser in der Kristallographie eine besondere Rolle spielt. Zwei Vektoren **a**, **b** heißen *äquivalent*, wenn sie sich nur durch ihre Länge unterscheiden, wenn es also eine reelle Zahl $\lambda \neq 0$ gibt, so daß $\mathbf{a} = \lambda\mathbf{b}$; dies ist gleichbedeutend mit $a_1 : a_2 : a_3 = b_1 : b_2 : b_3$.

Die homogenen Koordinaten der Geraden p eines Bündels mit Zentrum O (oder einer Ebene ε) werden nun durch eine Klasse äquivalenter 3-er Vektoren $\mathbf{x}$ im Punkt O (Ortsvektoren; **Figur 2.11**) gedeutet. Dafür wird $p[\mathbf{x}]$ geschrieben und es werden die Komponenten von $\mathbf{x}$ ebenfalls in eckige Klammern gesetzt: $[\mathbf{x}] \equiv [x_1 : x_2 : x_3]$. Insbesondere entsprechen den beliebigen, nicht in einer Ebene liegenden Geraden a, r, t (die durch die Punkte A, R, T des Möbiusnetzes gehen) die Klassen von äquivalenten Vektoren

$$[\mathbf{a}] = [0:0:1],\ [\mathbf{r}] = [0:1:0],\ [\mathbf{t}] = [1:0:0].$$

Dies sind die sogenannten Basisvektoren des projektiven Bündelkoordinatensystems. Die Summe zweier Vektoren ergibt einen Vektor in der Verbindungsebene derselben. Dies bedeutet, daß die «Summe», das heißt die Linearkombination der Geraden $p[\mathbf{x}]$ und $q[\mathbf{y}]$, definiert durch

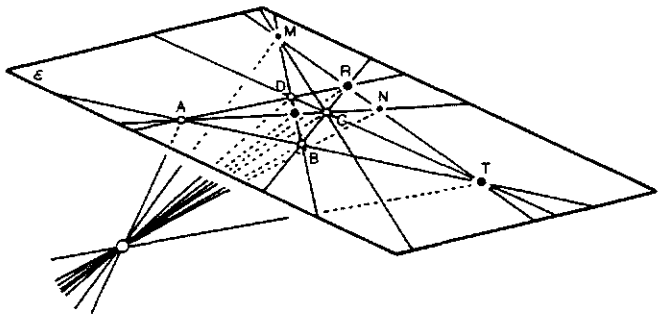
$$[a\mathbf{x}] + [b\mathbf{y}] := [\mathbf{x} + \mathbf{y}],$$

eine Gerade in der Verbindungsebene pq bestimmt.

Ebenen ξ können ebenfalls (Klassen von äquivalenten) Vektoren zugeordnet werden, und zwar deren Normalvektoren. Damit erhält man eine Koordinatenbestimmung für Ebenen bezüglich desselben Koordinatensystems. Vektoren, welche als Klassen von zueinander äquivalenten Normalenvektoren von Ebenen aufgefaßt werden sollen, werden in runde Klammern gesetzt. Damit ergibt sich, daß eine Gerade $p[\mathbf{x}]$ genau dann in einer Ebene $\xi(\mathbf{u})$ liegt, wenn das Skalarprodukt von $\mathbf{u}$ und $\mathbf{x}$ gleich Null ist, also wenn gilt:

$$\mathbf{u} \bullet \mathbf{x} = u_1x_1 + u_2x_2 + u_3x_3 = 0.$$

Die *Verbindungsebene* $\eta \equiv pq$ zweier Geraden $p[\mathbf{x}]$ und $q[\mathbf{y}]$ ist mit beiden inzident und deren Normalenvektor ist auf beiden Vektoren $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ senkrecht, also ist er gegeben durch das Vektorprodukt $\eta(\mathbf{x} \times \mathbf{y})$. Entsprechend ist die *Schnittgerade* $r \equiv \xi\eta$ zweier Ebenen $\xi(\mathbf{v})$ und $\eta(\mathbf{w})$ gegeben durch $r[\mathbf{v} \times \mathbf{w}]$.



Figur 2.11: *Vektoren und projektives Koordinatensystem des Bündels*

Die Linearkombination oder «Summe» zweier Ebenen $\xi(\mathbf{u})$ und $\eta(\mathbf{v})$ ergibt eine Ebene durch die Schnittgerade $\xi\eta$; umgekehrt sind die Koordinaten jeder Ebene durch eine Gerade r Linearkombinationen der Koordinaten irgend zweier Ebenen durch r.

Durch die drei Geraden a, r, t ist das Koordinatensystem noch nicht hinreichend festgelegt, das heißt die Koordinaten weiterer Geraden und Ebenen sind nicht eindeutig bestimmt. Insbesondere ist nicht klar, wohin die Gerade $c[1:1:1]$ mit den Koordinaten $[\mathbf{a}] + [\mathbf{r}] + [\mathbf{t}] = [\mathbf{a} + \mathbf{r} + \mathbf{t}]$ zu liegen kommt. Wird diese Gerade vorgegeben, so ist geometrisch alles weitere festgelegt, da dadurch das der Koordinatenbestimmung zugrunde liegende Möbiusbündel oder die Möbiusblüte feststeht, und damit jede Gerade und jede Ebene durch Schneiden und Verbinden auf eindeutige Weise erfaßt werden kann. Durch die entsprechenden algebraischen Operationen erhalten diese Elemente auch ihre entsprechend eindeutig bestimmten Koordinaten.

Anstatt die «Einheitsgeraden» c vorzugeben, kann man auch die absolute Länge der Vektoren $\mathbf{a}$, $\mathbf{r}$, $\mathbf{t}$ vorgeben; dann ist die Richtung der Einheitsgeraden gegeben durch $\mathbf{a} + \mathbf{r} + \mathbf{t}$. Daraus ergibt sich, daß jedes Tetraeder (auf vier Arten) ein Bündelkoordinatensystem bestimmt, indem ein Eckpunkt als Ursprung O und die durch diesen gehenden Kanten als Basisvektoren gewählt werden und der Einheitsvektor wie oben bestimmt wird. In diesem Falle spricht man auch von einem *Koordinatentetraeder für die Bündelgeometrie*.

Literaturhinweise

Abschnitt 2.1: Bernhard [1984], Kapitel 5–9; Coxeter [1965], Chapter II; Locher [1937], Kapitel 4, [1957], Kapitel 1–3. Eine ausführliche Behandlung der Erweiterung der euklidischen Geraden und Ebene zur projektiven Geraden bzw. Ebene sowie grundsätzliche Überlegungen zur Einführung von Fernelementen findet man in Ziegler [1992], Kapitel III.

Abschnitt 2.2: Bernhard [1984], Kapitel 18–21; Klein [1928], Kapitel V; Locher [1957], Kapitel 4, 18–19 und [1940a], Kapitel II 2.

Abschnitt 2.3: Locher [1957], Kapitel 4, 7, 8.

Abschnitt 2.4: Coxeter [1955], Kapitel 5; Locher [1940a], Kapitel II 7. Für räumliche Projektivitäten siehe Coxeter [1965], Klein [1928], Ziegler [1981b].

Abschnitt 2.5: Coxeter [1981], § 13.

Abschnitt 2.6: Coxeter [1965], Chapter IX; Klein [1928], Kapitel IV; Locher [1940a], Kapitel III–IV.

Abschnitt 2.7: Coxeter [1955], Kapitel 11, [1965], Chapter IV; Bachmann [1974], §21; Klein [1928], Kapitel I.1 und V; Locher [1940a], Kapitel II 8; Ziegler [1996], Kapitel 3.6.

3. KRISTALLGEOMETRIE: KRISTALLGESETZE UND KRISTALLDARSTELLUNGEN

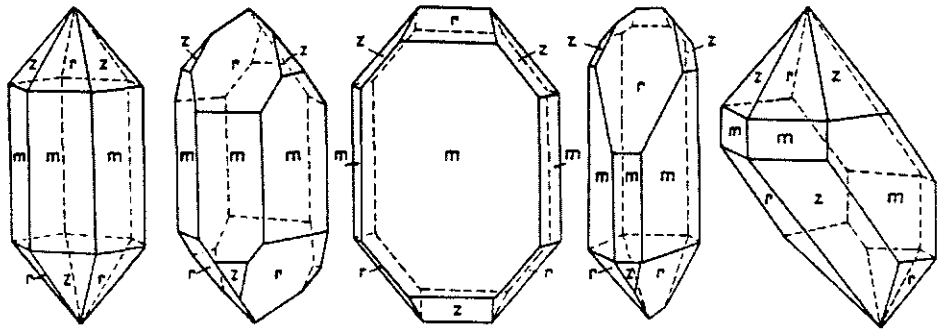
3.1 *Idealkristall und Realkristall*

Die geometrische Kristallographie oder Kristallgeometrie im Sinne der allgemeinen Kristallmorphologie beschäftigt sich nicht mit realen Kristallkörpern und deren mannigfaltigen spezifischen Gestaltmerkmalen, sondern nur mit idealisierten Formen. Insbesondere wird davon ausgegangen, daß Kristallkörper *allseitig* von *ebenen* Flächen begrenzte, mit wohlbestimmten *geraden* Kanten und Ecken versehene Raumkörper sind, *Kristallpolyeder* genannt (Abschnitt 1.1).

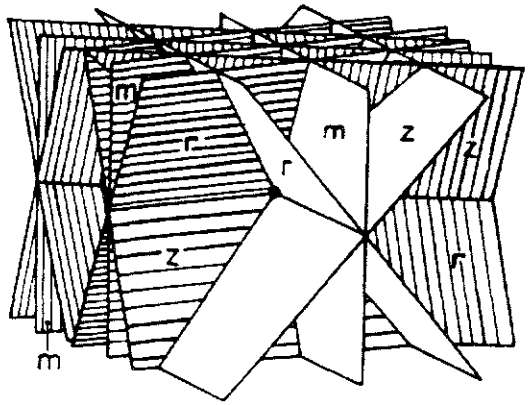
Wie **Figur 3.1** zeigt, läßt diese Einschränkung für die Gestaltmannigfaltigkeit der Kristalle einer einzigen Art, hier Quarz, noch viel Spielraum. Die fünf verschiedenen Individuen von Quarzkristallen unterscheiden sich jedoch nur durch die verschieden weit entwickelte Ausbildung ihrer Flächen. Man findet zu jeder Fläche an einem dieser Individuen eine entsprechende Fläche in paralleler Stellung, das heißt in derselben «Lage», an jedem anderen Individuum. Die bezüglich gewisser Symmetrien «gleichwertigen» Flächen sind mit denselben Buchstaben bezeichnet.

Es stellt sich heraus, daß für die Kristallkörper eines Kristallsystems (siehe unten) allein die *relativen Flächenlagen* wesentlich sind (Abschnitt 3.2). Charakteristisch ist im allgemeinen das Fehlen eines eindeutig bestimmten Mittelpunktes. Die Bedingungen für die Klassifizierung der Gestaltvielfalt bei an sich festgelegten Flächenlagen liegen nicht in den geometrischen Symmetrieverhältnissen, sondern in den konkreten Entstehungsbedingungen.

Zur *ersten* Idealisierung, der Beschränkung auf Kristall*polyeder*, gesellt sich für die geometrische Kristallographie demzufolge eine *zweite*: es kommen nur *relative Flächenlagen*, unabhängig von ihrem räumlichen Ort, in Betracht (in der Geometrie spricht man von Flächen*stellung*). In **Figur 3.2a** ist das für alle Kristalle der **Figur 3.1** gleiche Flächenbündel dargestellt, das durch Parallelverschiebung der den Kristallflächen zugrunde liegenden Ebenen in einen beliebigen Punkt entsteht. Die Flächen der Kristalle der Figur 3.1 bilden also unter sich tatsächlich dieselben Winkel.



Figur 3.1: *Fünf verschiedene Quarzkristalle*



Figur 3.2a: *Flächenbündel der Quarzkristalle der Figur 3.1*

3.2 *Kristallographische Grundgesetze*

Bei ungestört kristallisierenden Substanzen entstehen Oberflächen, die einen aus ebenen Flächen begrenzten Körper bilden, den hier so genannten *Kristallkörper* oder *Kristallpolyeder*.

Geometrisch in bestimmten Sinne verwandte Kristallpolyeder werden einem sogenannten *Kristallsystem* zugeordnet. Die Einführung dieses Begriffs erfolgt hier, wie schon im Abschnitt 1.1, implizit. Dies bedeutet, daß unter dem Begriff des Kristallsystems zunächst nichts anderes verstanden werden soll, als was die folgenden Gesetze implizieren. Eine genaue Erklärung findet sich im Abschnitt 3.4.

Durch vergleichendes Beobachten und Vermessen von Kristalloberflächen hat man zwei Gruppen von Gesetzen entdeckt, die den Kern der klassischen Kristallographie ausmachen:

Kristallographische Grundgesetze:

- Gesetz der Winkelkonstanz
- Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes
- Gesetz der ganzzahligen Zonenindizes
- Gesetz der Zonen oder Zonenverbandsgesetz

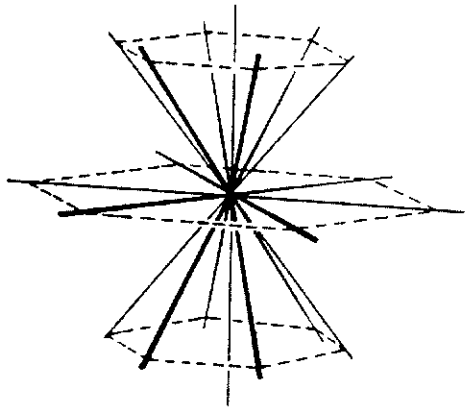
Kristallographische Symmetriegesetze

- Kristallsymmetriegesetz
- Kristallographische Einschränkung
- Kristallklassengesetz
- Ausgezeichnete Symmetrierichtungen: Kristallsysteme

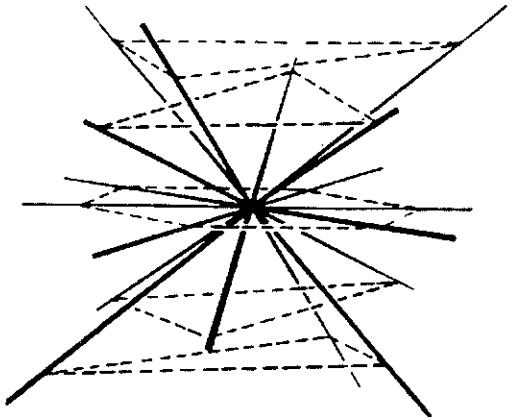
Gesetz der Winkelkonstanz

Aus der vergleichenden Beobachtung von verschiedenen Kristallen sowie von Kristallwachstum und Phantomkristallen ergibt sich, daß es bei entsprechender räumlicher Anordnung der Kristallindividuen solche Kristallpolyeder gibt, bei denen lauter Paare von parallelen Flächen auftreten (**Figur 3.1**). Solche Paare paralleler Flächen verschiedener Kristallindividuen heißen *korrespondierende Flächen*; man sagt, solche Flächen haben dieselbe *Lage*. Die entsprechenden Kristallindividuen werden demselben *Kristallsystem* zugeordnet. Für die Kristallgeometrie der verschiedenen Kristallkörper eines bestimmten Kristallsystems kommen nur die *relativen Lagen* der Kristallflächen (und nicht deren Größe, genauer Ort im Raum oder deren Begrenzungen) in Betracht. Dies ist eine Konsequenz des *Gesetzes der Winkelkonstanz*.

GESETZ DER WINKELKONSTANZ: *Die Winkel zwischen korrespondierenden Flächen verschiedener Kristallpolyeder ein und desselben Kristallsystems sind unter konstanten Bedingungen dieselben.*



Figur 3.2b: *Kantenbündel der Quarzkristalle der Figur 3.1*



Figur 3.2c: *Flächennormalenbündel der Quarzkristalle der Figur 3.1*

Dies bedeutet, daß man sich bei morphologisch-geometrischen Untersuchungen um die konkrete Gestalt der Kristallpolyederflächen nicht zu kümmern braucht, sondern sich nur eine Übersicht der Winkel- und Lageverhältnisse der jeweiligen Flächen verschaffen muß. Dazu dienen einerseits die *Tangentialdarstellungen* (Abschnitt 3.3) und andererseits die *zentrischen Flächendarstellungen und Flächennormalendarstellungen*, bei denen die geometrisch relevanten Elemente parallel zu sich selbst in einen beliebig gewählten Punkt verschoben werden (**Figur 3.2a, b, c**: die gestrichelten Linien sind Hilfslinien zur Verdeutlichung der räumlichen Gestalt; siehe dazu Abschnitt 3.5). Dadurch wird insbesondere die räumliche «Lage», nicht aber der genaue räumliche Ort und nicht die Form einer Fläche repräsentiert.

Flächenindizes

Drei Flächen α, β, γ eines Kristallpolyeders, welche genau einen gemeinsamen Schnittpunkt haben, bestimmen zusammen mit den im gemeinsamen Punkt zusammenlaufenden Flächenkanten *A*, *B*, *C* ein im allgemeinen schiefwinkliges Koordinatenachsensystem. Die Lage jeder nicht durch den gemeinsamen Punkt gehenden vierten Fläche ε ist dann durch das *Verhältnis* der *Achsenabschnitte* $a : b : c$ bezüglich der Achsen *A*, *B*, *C* bestimmt (**Figur 3.3**). Parallele Flächen, das heißt Flächen derselben Lage, erhalten demzufolge dieselben Achsenabschnittsverhältnisse.

Durch viele empirische Untersuchungen (goniometrische Kristallvermessungen) wurde festgestellt, daß für eine weitere Flächenlage δ mit den Achsenabschnittsverhältnissen $a' : b' : c'$ die Quotienten entsprechender Abschnitte

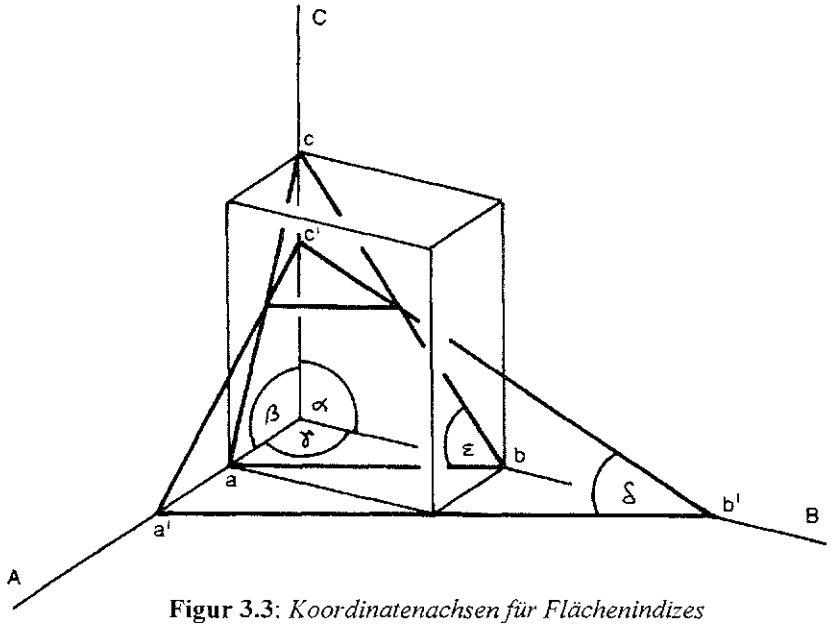
$$\frac{a}{a'} : \frac{b}{b'} : \frac{c}{c'}$$

sich im wesentlichen wie kleine ganze Zahlen (inklusive 0) verhalten. Wählt man die Achsenabschnitte der Fläche ε als Einheiten, so heißen die auf ganze und teilerfremde Zahlen erweiterten bzw. gekürzten Parameter *h*, *k*, *l* mit

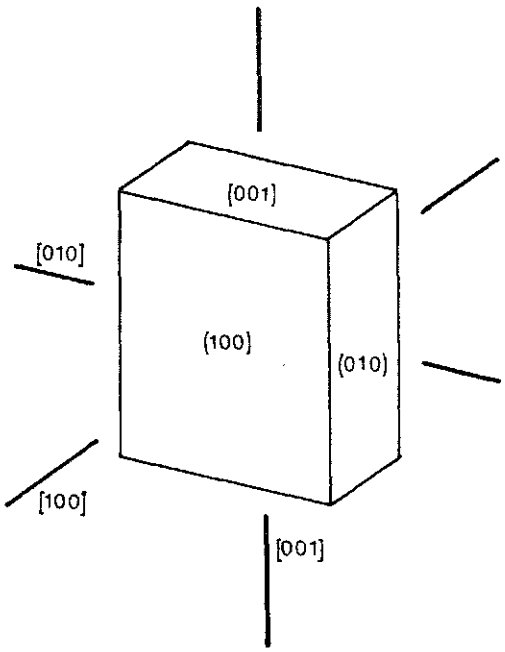
$$h:k:l = \frac{a}{a'} : \frac{b}{b'} : \frac{c}{c'}$$

die *Millerschen Indizes* der Flächenlage δ, geschrieben (*hkl*), auch kurz *ganzzahlige Flächenindizes* genannt.

Die vier ein *Koordinatentetraeder* oder *Elementartetraeder* bildenden *Koordinatenflächen* α, β, γ, ε und alle jeweils dazu parallelen Flächen haben die Indizes (100), (010), (001), (111) (**Figur 3.4**). Es zeigt sich nun insbesondere, daß diese Indizes für reale Kristalle selten größer als 6 oder gar 10 werden (**Figur 7.14b**).



Figur 3.3: *Koordinatenachsen für Flächenindizes*



Figur 3.4: *Indizes der Flächen und Zonen eines Quaders*

Aus der obigen Gleichung folgt, daß die Achsenabschnitte a', b', c' von δ ganzzahlige Vielfache der reziproken Werte der Indizes der Flächenlage δ sind:

$$a':b':c' = \frac{1}{h}a:\frac{1}{k}b:\frac{1}{l}c.$$

GESETZ DER KLEINEN GANZZAHLIGEN FLÄCHENINDIZES (projektive Fassung): *Die Indizes aller Flächenlagen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems haben kleine ganzzahlige Werte, wenn sie auf vier ein allgemeines Tetraeder bildende Flächen eines der Kristallpolyeder dieses Kristallsystems bezogen werden.*

Zonen und Zonenindizes

Eine auffallende Eigenschaft von Kristallpolyedern sind Scharen von Kanten, die untereinander parallel sind. Man nennt die Gesamtheit der Flächenlagen, die zu einer Richtung, der *Zonenrichtung* oder *Zonenachse*, parallel sind, eine *Zone von Flächen(lagen)*, eine *Flächenzone* oder einen *Zonenverband*; die Richtungen der Schnittkanten von Flächen einer Zone sind untereinander und zur Zonenrichtung parallel (**Figur 3.2b** und **3.5**). Flächenlagen, die derselben Zone angehören, heißen *tautozonal* (**Figur 3.6**).

Eine Zone, deren Flächen sich nicht am Kristallpolyeder schneiden, die sich also nicht durch Scharen von parallelen Kanten kund tun, heißt eine *versteckte Zone*. Die Flächen einer versteckten Zone können durch Erweiterung der Kristallflächen über das Polyeder hinaus zum Schnitt in parallelen Geraden gebracht werden.

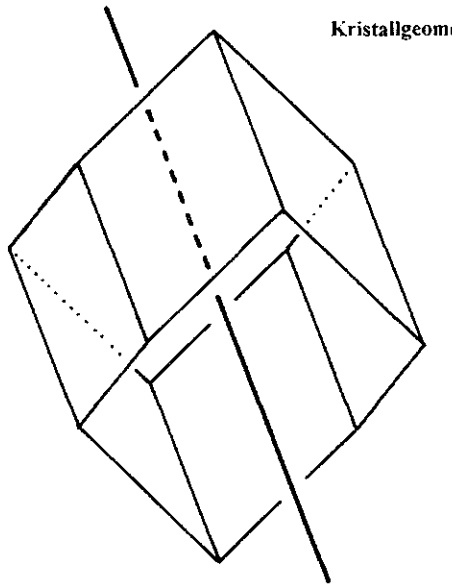
Entsprechend den Flächenindizes relativ zu einem Koordinatentetraeder kann man auch *Zonenindizes* relativ zu diesem allgemeinen Tetraeder aufstellen. Die Koordinaten einer Zonenachse werden durch das Verhältnis $X : Y : Z$ der parallel zu den (eventuell schiefwinkligen) Koordinatenachsen gemessenen Abstände X, Y, Z irgendeines Punktes P der Zonenachse von den drei Koordinatenebenen festgelegt (**Figur 3.7**).

Sind a, b, c die als Einheiten gewählten Koordinatenachsenabschnitte, so gilt:

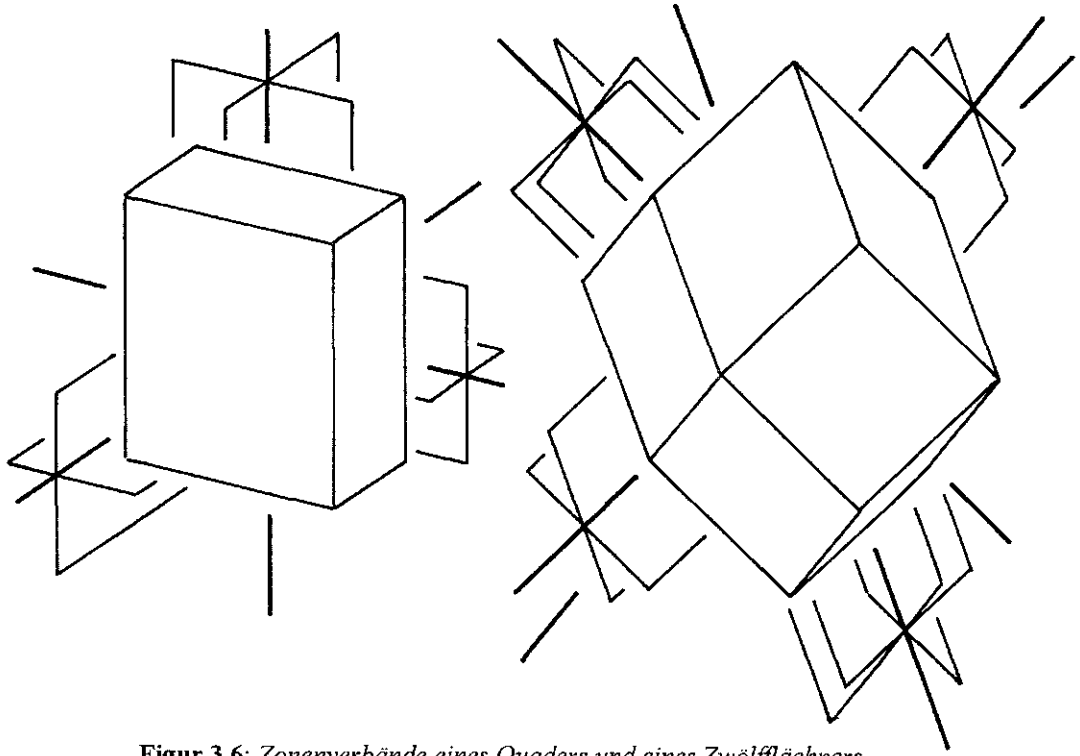
$$X : Y : Z = ua : vb : wc.$$

Die ganzzahlig und teilerfremd gemachten Koeffizienten u, v, w bilden das *Zonensymbol* oder die *Zonenindizes* $[uvw]$ (**Figur 3.6**).

GESETZ DER KLEINEN GANZZAHLIGEN ZONENINDIZES (projektive Fassung): *Die Indizes aller Zonen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems haben kleine ganzzahlige Werte, wenn sie auf vier ein allgemeines Tetraeder bildende Flächen eines der Kristallpolyeder dieses Kristallsystems bezogen werden.*



Figur 3.5: *Sechs Flächen eines Zonenverbandes mit drei Flächenlagen*



Figur 3.6: *Zonenverbände eines Quaders und eines Zwölfflächners*

Zonenverbandsgesetz

Eine Fläche, die zugleich in zwei Zonen liegt und Flächen dieser Zonen schneidet, wird in ihren Begrenzungen zwei Paare paralleler Kanten haben. Sind umgekehrt zwei Zonen gegeben, so läßt sich aus den beiden Kantenrichtungen eine zu diesen parallele Flächenlage ableiten. Die Erfahrung zeigt nun, daß diese Fläche eine mögliche Kristallfläche ist.

Es stellt sich nun die Frage: Lassen sich alle möglichen Flächenlagen von Kristallpolyedern eines bestimmten *Kristallsystems* aus einer gewissen Anzahl von Flächenlagen ableiten, in der Weise, daß jede neue Flächenlage durch zwei Zonen der schon vorhandenen Flächenlagen bestimmt wird? Vier Flächen, die ein allgemeines Tetraeder bilden (**Figur 3.8**), bestimmen offenbar ein minimales Repräsentantensystem von Flächenlagen, die eine solche Ableitung gestatten; bei drei Flächenlagen kann nichts Neues entstehen. Interessant ist nun, daß für Kristallpolyeder vier Flächen verschiedener Lage ausreichen. Dies ist das *Gesetz der Zonen* oder das *Zonenverbandsgesetz*:

ZONENVERBANDSGESETZ: *Die Lagen der Flächen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems lassen sich aus vier ein allgemeines Tetraeder bildenden Flächen eines Kristallpolyeders dieses Kristallsystems in wenigen Schritten ableiten: Jedes Paar von Schnittgeraden (Zonen) bereits vorhandener Flächen bestimmt eine neue Flächenlage; wird eine dieser Flächen mit den bereits vorhandenen Flächen geschnitten, so erhält man neue Zonen etc.*

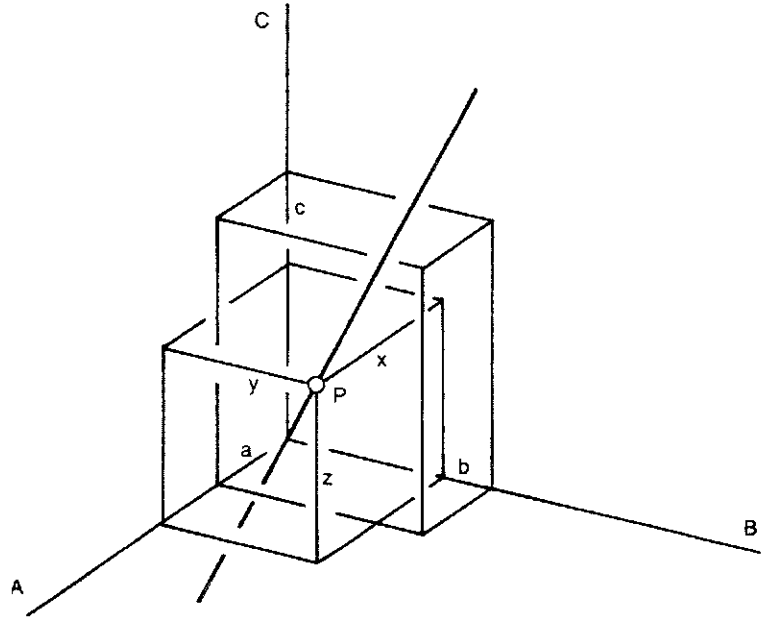
Um die Anordnung dieser Flächenlagen zu überblicken, kann man sich vorstellen, daß parallel zu den Tetraederflächen durch einen beliebig gewählten Punkt Z des Raumes vier Ebenen ε_1, ε_2, ε_3, ε_4 gelegt seien; diese bilden ein *Vierflach* (**Figur 3.8a**).

Diese weiter oben bereits erwähnte Darstellung von Lagen der Flächen eines Kristallpolyeders kann man *zentrische Flächendarstellung* nennen (Abschnitt 3.5). Die Schnittgeraden dieser vier Flächen bilden ein *Vierkant*.

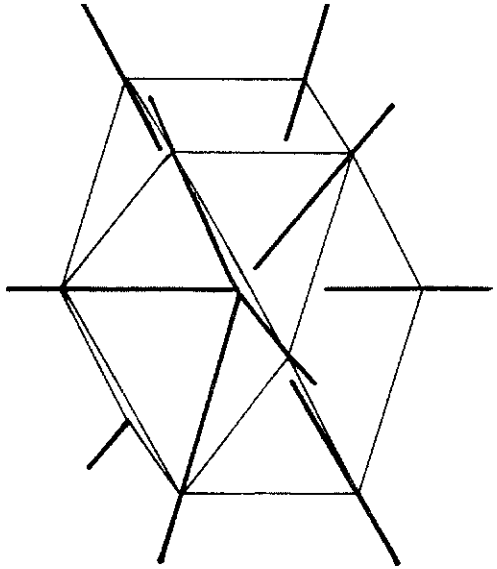
In **TABELLE 3.1** sind die projektiv-geometrischen Beziehungen des Vierkants zum Vierflach dargestellt (siehe dazu auch Tabelle 2.1 im Abschnitt 2.2).

Zur ebenen Darstellung dieser Verhältnisse schneidet man das durch Z gelegte Bündel von Ebenen und Geraden mit einer beliebigen, nicht durch Z gehenden Ebene ζ.

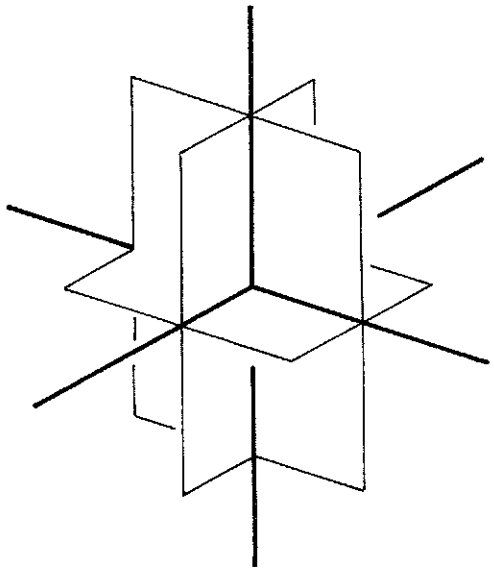
Die Schnittgeraden der Ebenen ε_1, ε_2, ε_3, ε_4 mit ζ werden mit e_1, e_2, e_3, e_4 bezeichnet (*Linearprojektion des Kristallpolyeders*: **Figur 3.9c**). Jede Verbindungsgerade von Schnittpunkten in ζ führt auf eine neue mögliche Kristallflächenlage. Die Konstruktion weiterer Kristallflächenlagen aus den gegebenen Repräsentanten ε_1, ε_2, ε_3, ε_4 der vier Lagen ist unmittelbar aus **Figur 3.9c** ersichtlich. Die so entstehende Figur nennt man in der projektiven Geometrie ein *Möbiusnetz* (Abschnitt 2.2).



Figur 3.7: *Koordinatenebenen für Zonenindizes*



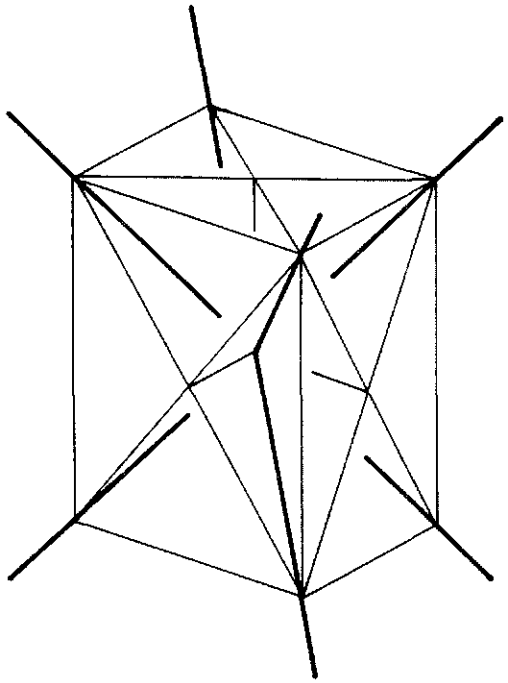
Figur 3.8a: *Vierflach mit 6 Schnittgeraden (Kanten)*



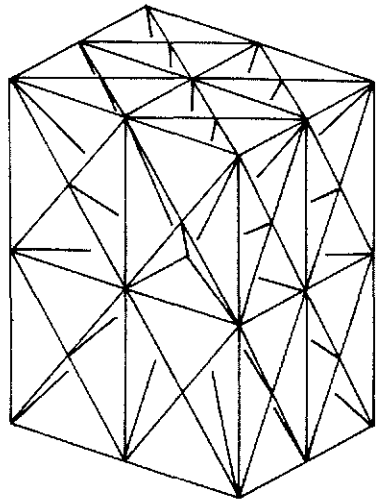
Figur 3.8b: *Nebendreiflach/-kant des vollständigen Vierflachs*

TABELLE 3.1: *Vierflach und Vierkant*

Die vier ein *Vierflach* bildenden Seitenflächen schneiden sich in drei Paaren von *Gegenkanten* (**Figur 3.8a**).	Die vier ein *Vierkant* bildenden Kanten lassen sich in drei Paaren von *Gegenflächen* verbinden.
Die sechs Kanten lassen sich außer durch die Flächen des Vierflachs noch in den drei *Nebenflächen* verbinden (**Figur 3.8b**).	Diese sechs Gegenflächen schneiden sich außer in den Kanten des Vierkants noch in den drei *Nebenkanten*.
Diese drei Flächen schneiden sich in den drei *Nebenkanten* des Vierflachs. Dies ergibt ein *vollständiges Vierflach*.	Durch je zwei dieser Kanten geht eine *Nebenfläche* des Vierkants. Dies ergibt ein *vollständiges Vierkant*.
Durch jede Nebenkante kann ein Paar von *Gegenflächen* nach den beiden mit ihr noch nicht verbundenen Gegenkanten gelegt werden (**Figur 3.9a**).	Auf jeder Nebenfläche erzeugen die drei Paare von Gegenflächen außer den Nebenkanten noch ein Paar von *Gegenkanten*.
Diese sechs Flächen schneiden sich zu je dreien in vier Kanten, die ein Vierkant bilden.	Diese sechs Kanten liegen zu je dreien auf vier Flächen, die ein Vierflach bilden.
Als Resultat ergibt sich eine *zentrische harmonische Grundfigur* (**Figur 3.9b**).	Als Resultat ergibt sich eine *zentrische harmonische Grundfigur* (**Figur 3.9b**).



Figur 3.9a: *Die 6 Verbindungsebenen der 3 Nebenkanten mit den 6 Kanten des vollständigen Vierflachs*

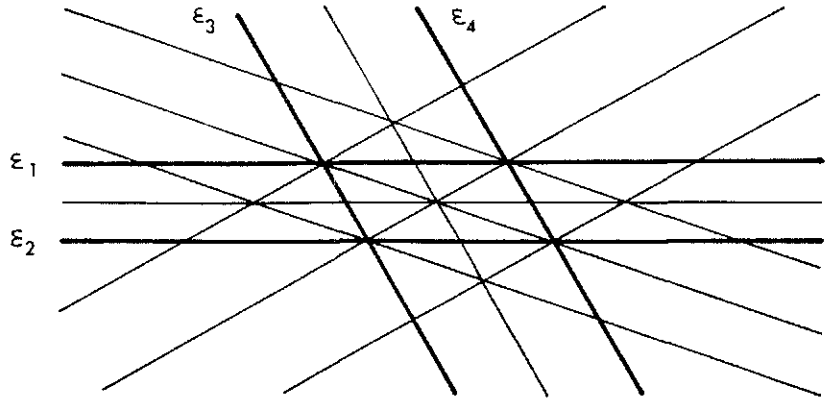


Figur 3.9b: *Zentrische harmonische Grundfigur oder 13-Gebilde*

Wählt man als Ebene ζ die Fernebene des dreidimensionalen euklidischen Raumes (Abschnitt 2.1), so legt jede Ferngerade einer Ebene genau eine Flächenlage fest. Bei vier Ausgangsebenen erhält man in der Fernebene ein Vierseit, dessen Schnittpunkte (Ecken) Schnittgeraden dieser Flächen repräsentieren und damit Zonenachsen darstellen. Hiermit läßt sich das Zonenverbandsgesetz in einer dazu äquivalenten Weise formulieren:

PROJEKTIVES ZONENVERBANDSGESETZ: *Die Flächenlagen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems lassen sich in wenigen Schritten aus beliebigen vier Flächen eines Kristallpolyeders dieses Kristallsystems, deren Ferngeraden ein Vierseit bilden, ableiten: Jeder Schnittpunkt der Ferngeraden bestimmt eine Zonenachse und jede Verbindungsgerade solcher Punkte eine neue Flächenlage.*

Geometrisch handelt es sich dabei um den Aufbau eines Möbiusnetzes ausgehend von vier Geraden und der damit zusammenhängenden harmonischen Grundfigur (Abschnitt 2.2).



Figur 3.9c: *Zonengesetz und Möbiusnetz*

Vektorgeometrische Darstellung der Flächen- und Zonenindizes

Es seien drei beliebige nicht in einer Ebene liegende Vektoren **a**, **b**, **c** im dreidimensionalen euklidischen Raum gegeben. Zusammen mit einem Punkt O (Ursprung) bestimmen sie ein (im allgemeinen schiefwinkliges) Koordinatensystem, wenn man festlegt, daß

$$\mathbf{a} = [1, 0, 0], \mathbf{b} = [0, 1, 0], \mathbf{c} = [0, 0, 1].$$

Eine Ebene δ sei durch einen Punkt $P_0(\mathbf{r}_0)$ und ihren Normalenvektor **n** gegeben. Alle auf ihr liegenden Punkte $P(\mathbf{r})$ erfüllen die Gleichung

$$\mathbf{n} \bullet (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = n_1x + n_2y + n_3z - k = 0,$$

wobei

$$k = -\mathbf{n} \bullet \mathbf{r}_0$$

proportional zum Abstand der Ebene δ vom Ursprung O ist. Parallele Ebenen unterscheiden sich demnach nur durch den Wert von k. Kommt es nur auf die Lage (oder Stellung) der Ebene an, so kann man $k = 0$ setzen. Dies bedeutet, daß die Lage einer Ebene durch die Richtung ihres Normalenvektors $\mathbf{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$ eindeutig bestimmt ist.

Für die Koordinatenebenen $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$, $\beta = (\mathbf{c}, \mathbf{a})$, $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$ ist $P_0 = O$, also

$$\mathbf{n} \bullet \mathbf{r} = 0.$$

Daraus ergeben sich die Normalenvektoren der Koordinatenebenen bzw. als (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1). Man beachte, daß die Komponenten der den Geraden des Bündels O entsprechenden *Vektoren* in eckige Klammern gesetzt werden und die Komponenten der den Ebenen des Bündels O entsprechenden *Normalenvektoren* in runde Klammern.

Die Achsenabschnitte einer beliebigen Ebene sind gegeben durch die Gleichungen

$$\mathbf{n} \bullet (\mathbf{a} - \mathbf{r}_0) = n_1x - k = 0,$$
$$\mathbf{n} \bullet (\mathbf{b} - \mathbf{r}_0) = n_2y - k = 0,$$
$$\mathbf{n} \bullet (\mathbf{c} - \mathbf{r}_0) = n_3z - k = 0,$$

sie verhalten sich also wie

$$\frac{1}{n_1} : \frac{1}{n_2} : \frac{1}{n_3}$$

und sind damit reziprok zu den Komponenten des Normalenvektors von δ.

Der Übergang zu *Flächenlagen* und *Zonenachsen* bedeutet, daß anstatt der absoluten Werte der Komponenten der Normalenvektoren $\mathbf{n} \equiv (n_1, n_2, n_3)$ bzw. der Vektoren $\mathbf{v} \equiv [v_1, v_2, v_3]$ nur deren Verhältnis $(n_1 : n_2 : n_3)$ bzw. $[v_1 : v_2 : v_3]$ betrachtet wird.

Damit ergibt sich: *Die Komponenten des Normalenvektors* $\mathbf{n} \equiv (n_1 : n_2 : n_3)$ *einer Ebene* δ *relativ zu einem Koordinatensystem* $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}; O\}$ *sind proportional den Millerschen Flächenindizes* (hkl) *dieser Ebene bezüglich den Ebenen* $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$, $\beta = (\mathbf{c}, \mathbf{a})$, $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$.

Vektoren $\mathbf{v} \equiv [v_1 : v_2 : v_3]$ bestimmen Zonenachsen: Für jede zur Zone **v** gehörige Ebene δ mit dem Normalenvektor **n** gilt

$$\mathbf{v} \bullet \mathbf{n} = v_1n_1 + v_2n_2 + v_3n_3 = 0,$$

da die Zonenachse auf dem Normalenvektor senkrecht steht. Dies ist die sogenannte *Zonengleichung*.

Aus zwei Ebenen mit den Normalenvektoren **m** und **n** ergibt sich die Zonenachse durch das Vektorprodukt $\mathbf{m} \times \mathbf{n}$ und aus zwei Zonenachsen **u** und **v** der Normalenvektor ebenfalls durch das Vektorprodukt $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$.

Damit ergibt sich: *Die Zonenindizes der Flächen eines Kristallpolyeders sind proportional zu den Komponenten der Vektorprodukte aus den Normalenvektoren der Flächen.*

Verschiebt man alle Flächen eines Kristallpolyeders parallel zu sich selbst in einen Punkt Z (zentrische Flächendarstellung des Kristallpolyeders), so ergibt sich zusammen mit den Überlegungen von Abschnitt 2.7, daß die *homogenen projektiven Bündelkoordinaten* einer Fläche dieses Kristallflächenbündels in Z relativ zu den jetzt durch Z gehenden vier Ebenen des ursprünglichen Koordinatentetraeders identisch sind mit den Flächenindizes. Das Koordinatensystem ist bestimmt durch die durch O gehenden Vektoren **a**, **b**, **c**, die das Koordinatentetraeder mit den Ebenen $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$, $\beta = (\mathbf{c}, \mathbf{a})$, $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$, $\varepsilon = (\mathbf{a}-\mathbf{c}, \mathbf{b}-\mathbf{a})$ festlegen.

Legt man durch einen Punkt Z Parallelen zu allen Zonenachsen eines Kristallpolyeders (zentrische Zonenachsendarstellung eines Kristallpolyeders), so gilt auch hier, daß die Zonenindizes gleich den projektiven Bündelkoordinaten einer Zonenachse relativ zu den jetzt durch Z gehenden Koordinatenebenen bzw. -achsen sind.

Den Konstruktionen des Schneidens und Verbindens innerhalb des Bündels entsprechen die angeführten vektoralgebraischen Operationen.

Mathematische Abhängigkeiten der kristallographischen Grundgesetze

Die Bedingung, daß eine Fläche (hkl) der Zone $[uvw]$ angehört, ist gegeben durch die homogene Inzidenzgleichung für Ebenen und Geraden eines Bündels, das heißt das Skalarprodukt des Flächenormalenvektors mit dem Zonenvektor. Die Gleichung heißt in der Kristallographie *Zonengleichung* und hat die Form

$$hu + kv + lw = 0.$$

Mit Hilfe der oben abgeleiteten algebraischen Bedingungen für Schneiden und Verbinden lassen sich nun aus den Indizes zweier Flächen leicht die Indizes der dazugehörigen Zone sowie aus den Indizes zweier Zonen die Indizes der gemeinsamen Fläche berechnen. Daraus ergibt sich, daß das *Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes* mit dem *Gesetz der ganzzahligen Zonenindizes* äquivalent ist.

Die Äquivalenz des *Zonenverbandsgesetzes* mit dem *Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes* ergibt sich folgendermaßen. Zunächst ist, wie bereits gezeigt, das Zonenverbandsgesetz mit dem projektiven Zonenverbandsgesetz äquivalent. Dann ist letzteres äquivalent mit dem Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes, wie nun gezeigt werden soll. Denn einerseits entspricht jedem auf vier Flächen basierenden ganzzahligen Flächenindizestripel (mit kleinen Indizes) ein projektives homogenes Koordinatentripel und damit eine Fläche im Rahmen der Konstruktion der Möbiusblüten aus denselben vier Flächen (mit wenigen Konstruktionsschritten). Umgekehrt führt jede Konstruktion einer Fläche (mit wenigen Schritten) aus vier Ausgangsflächen im Sinne des Aufbaus von Möbiusblüten auf Flächen mit (kleinen) ganzzahligen Indizes.

Als Folge dieser Äquivalenz ergibt sich die mathematische Fassung des *Gesetzes der Komplikation*. Dieses besagt anschaulich, daß man aus zwei Flächenlagen eines Kristallpolyeders eine weitere mögliche Flächenlage desselben Polyeders erhält, wenn man die Indizes der beiden Flächenlagen addiert. (Bei realen Kristallen führt jedoch die Fortsetzung dieses Verfahrens um weitere Schritte rasch zu sehr selten bis nie realisierten Flächenlagen.) Aus den projektiv-geometrischen Eigenschaften von Zonen folgt nämlich zusammen mit den im Abschnitt 2.7 abgeleiteten Gesetzen: *Die Linearkombination der Indizes zweier Flächenlagen ergibt eine Flächenlage derselben Zone; die Indizes einer Flächenlage einer Zone sind Linearkombinationen der Indizes irgend zweier Flächenlagen derselben Zone.*

Das Gesetz der Winkelkonstanz ist ein Spezialfall und damit eine Folge des Zonenverbandsgesetzes. Das Gesetz der Winkelkonstanz bezieht sich auf die Anordnung der Flächen verschiedener Kristallkörper desselben Typs von Kristallpolyedern eines Kristallsystems, während das Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes sowie das Zonenverbandsgesetz sich auf alle möglichen Flächenanordnungen jeglicher Art von Kristallpolyedern beliebiger Kristallsysteme beziehen.

Damit sind die folgenden Gesetze untereinander äquivalent: das Gesetz der kleinen ganzzahligen Flächenindizes, das Projektive Zonenverbandsgesetz sowie das Zonenverbandsgesetz. Ebenso ist das Gesetz der ganzzahligen Zonenindizes äquivalent zum Gesetz der ganzzahligen Flächenindizes.

Es bleibt also letztlich nur ein Grundgesetz übrig, und man kann von *dem Kristallographischen Grundgesetz* sprechen. Ob man dafür das Gesetz der ganzzahligen Indizes oder das Zonengesetz wählt, ist mathematisch nicht relevant. Vom morphologischen Gesichtspunkt aus liegt es nahe, das Zonengesetz in den Vordergrund zu rücken.

3.3 *Kristallographische Symmetriegesetze*

Tangentialpolyeder und Idealgestalt

Wählt man irgendeine Sphäre (Kugeloberfläche) im Innern eines Kristallpolyeders und verschiebt alle den Flächen zugrunde liegenden Ebenen parallel zu sich selbst, bis sie die Sphäre berühren, und bringt die Ebenen dort zum Schnitt, so erhält man ein Polyeder, das *Tangentialpolyeder* oder *Tangentialdarstellung* des allgemeinen Kristallpolyeders genannt werden soll. Der Mittelpunkt der Sphäre ist zugleich das *Zentrum* des Tangentialpolyeders. Aufgrund dieser Konstruktion hat natürlich jedes Tangentialpolyeder eine Inkugel und alle Abstände der Flächen vom Mittelpunkt (Zentraldistanzen) sind gleich groß.

Kristallographen bezeichnen die Tangentialpolyeder von konkreten Kristallpolyedern manchmal auch als *Idealgestalt*. Die am Anfang dieses Abschnitts angeführten Idealkristallformen, welche nur bis auf die Winkelverhältnisse der Flächen festgelegt sind (ohne daß diese alle denselben Abstand vom Mittelpunkt haben müssen), werden dann *Verzerrungen* der Idealgestalt genannt.

Es scheint nicht sinnvoll, die an sich schon idealisierten Kristallpolyeder als Verzerrungen einer noch «idealeren» Gestalt anzusprechen (Abschnitt 7.1). Deshalb wird hier weiterhin der Ausdruck Tangentialpolyeder beibehalten.

Es zeigt sich, daß das Tangentialpolyeder eines Kristallpolyeders bei ganz bestimmten geometrischen Transformationen in sich selbst übergeführt werden kann. Solche Transformationen heißen *Symmetrieoperationen*; dafür kommen Drehungen um eine Achse, Spiegelungen an Ebenen und Punkten und deren Verknüpfungen in Frage, alles Operationen, die das Zentrum des Tangentialpolyeders invariant lassen. Die bei diesen Operationen invariant bleibenden geometrischen Objekte (Punkt, Gerade, Ebene) heißen *Symmetrieelemente* und die Gesamtheit solcher Elemente *Symmetriegerüst*.

KRISTALLSYMMETRIEGESETZ: *Tangentialpolyeder von Kristallpolyedern sind symmetrisch bezüglich Operationen, die das Zentrum des Tangentialpolyeders invariant lassen.*

Ableitung der kristallographischen Einschränkung

Es wird gezeigt, daß mit dem Gesetz der ganzzahligen Indizes innerhalb der Symmetrieoperationen nur Drehungen mit den Winkeln 360°/2, 360°/3, 360°/4 und 360°/6 verträglich sind, das heißt Drehungen mit den Perioden 2, 3, 4 und 6 (Beweisidee nach Tertsch [1938]). Dies ist die sogenannte

KRISTALLOGRAPHISCHE EINSCHRÄNKUNG: *Die Drehanteile der Symmetrieoperationen der Tangentialpolyeder von Kristallpolyedern haben nur die Perioden 2, 3, 4, 6.*

Es sei C_n eine Drehachse der Zähligkeit n, das heißt mit dem Drehwinkel $360°/n$. Zur Vorbereitung des Beweises wird zuerst gezeigt, daß für $n > 3$ jede Drehachse C_n eine Zonenachse ist und daß alle Flächen senkrecht auf die Drehachse mögliche Kristallflächen sind. Dazu verwendet man insbesondere die weiter oben entwickelten geometrischen Tatsachen, daß die Verbindungsebenen zweier Zonenachsen eine mögliche Flächenlage bestimmen und zwei Flächenlagen eine mögliche Zonenachse eines Kristallpolyeders.

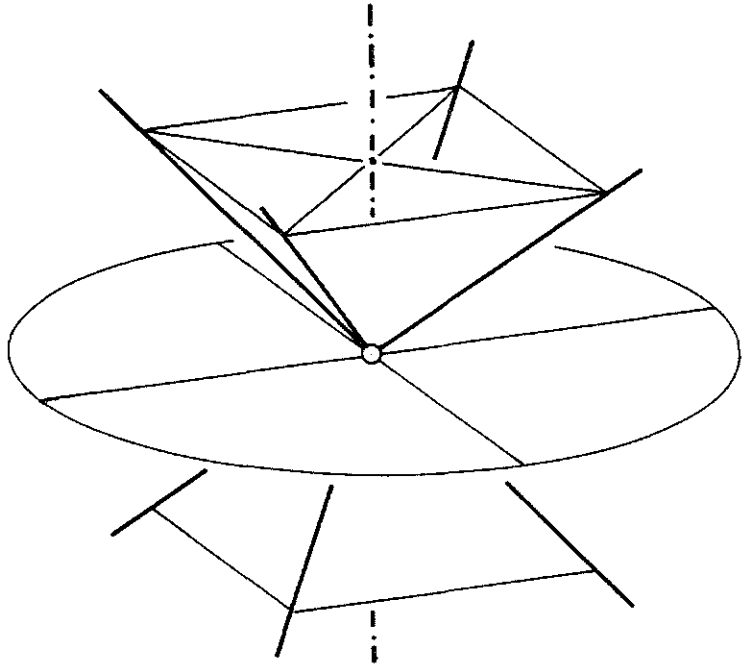
A) *Drehachsen sind Zonenachsen.* Entweder ist C_n alleinige Zonenachse oder es gibt Zonenachsen (oder Flächenlagen), die gemäß den Operationen von C_n verteilt sind.

Sei $n > 3$. Dann bestimmen diese Zonenachsen Flächenlagen und weitere Zonenachsen, zu denen C_n gehört (siehe die Beispiele für ungerades und gerades $n > 3$ in den **Figuren 3.10a** und **3.10b**). In der Linearprojektion, das heißt in einem Schnitt mit einer Ebene senkrecht zu C_n, bedeutet dies, daß für n gerade die Verbindungsgeraden gegenüberliegender Ecken des entsprechenden n-Ecks durch die Achse C_n gehen und im Falle n ungerade die Verbindungsgeraden der Ecken mit den gegenüberliegenden Sternecken.

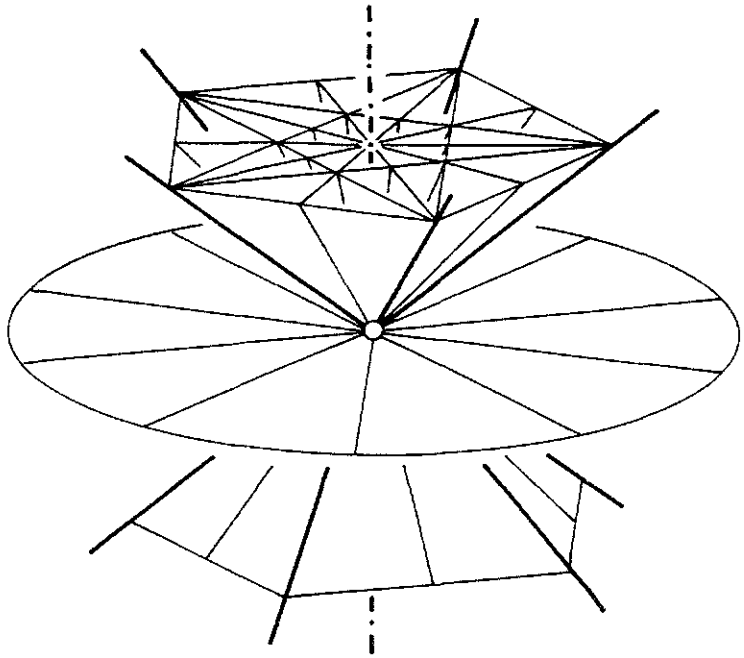
B) *Normalebenen zu Drehachsen gehören zu möglichen Flächenlagen.* Falls C_n die einzige Zonenachse ist, so können die Normalebenen zu C_n zu keiner möglichen Flächenlage gehören.

Sei $n > 3$. Falls es weitere Zonenachsen (oder Flächenlagen) gibt, so gibt es wie in A) gemäß C_n symmetrisch verteilte Zonenachsen. Verbindet man diese zu Flächenlagen, so ergeben sich unter anderem Zonenachsen, die senkrecht auf C_n stehen (**Figur 3.10a** und **3.10b**).

Man beachte, daß die Beweise von A) und B) keinen Gebrauch vom Zonenverbandsgesetz oder dem Gesetz der ganzzahligen Indizes machen, sondern nur rein geometrische Argumente verwendet werden. Deshalb treffen diese Tatsachen auch auf allgemeinere Polyederformen als die Kristallpolyeder zu. Aus diesem Grunde ist auch das Beispiel für $n = 5$ in Figur 3.10b kein Versehen, sondern zulässig. Diese Situation ist grundsätzlich anders in den folgenden Beweisführungen, für welche das Gesetz der ganzzahligen Indizes wesentlich ist.



Figur 3.10a: *Flächenlagen für Drehachsen C_4*

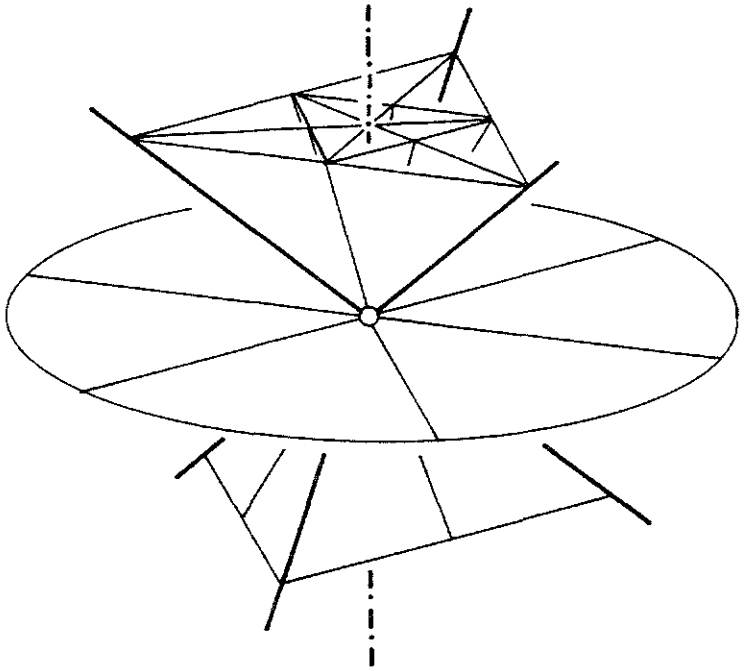


Figur 3.10b: *Flächenlagen für Drehachsen C_5*

C) *Für $n = 2, 3$ sind Zonenachsen durch C_n mit dem Zonenverbandsgesetz verträglich und es existiert eine Flächenlage senkrecht zu C_n.*

Sei $n = 2$. Ist C_2 Zonenachse, so gibt es neben den Flächenlagen der Zone C_2 mindestens eine weitere Flächenlage, die nicht dieser Zone angehört (sonst entstünde kein geschlossenes Polyeder). Falls diese nicht bereits senkrecht zu C_2 liegt, kommt vermöge der Drehung C_2 eine weitere Flächenlage hinzu, die sich mit den ursprünglichen Flächenlagen unter anderem in einer Zonenachse senkrecht zu C_2 schneidet.

Sei $n = 3$. Sei C_3 eine Zonenachse und es gebe mindestens eine Zonenachse oder Flächenlage außerhalb C_3 (sonst entstünde kein geschlossenes Polyeder). Aufgrund der Drehsymmetrie C_3 erhält man ein reguläres Dreikant, dessen «Mittelebenen» durch C_3 Flächenlagen repräsentieren (**Figur 3.10c**). Weitere Ergänzungen führen auf Ebenen, die sich paarweise in einer Ebene senkrecht zu C_3 schneiden. – In beiden Fällen bildet das entstehende Bündel eine Teilmenge einer zentrischen harmonischen Grundfigur, die hinzukommenden Zonen und Ebenen sind also mit dem Zonenverbandsgesetz verträglich.



Figur 3.10c: *Flächenlagen für Drehachsen C_3*

D) *Für Kristallpolyeder haben die Drehachsen C_n nur die Zähligkeiten $n = 2, 3, 4$ und 6.*

Für die folgende Beweisführung ist zu beachten, daß man es nur mit Flächen*lagen* zu tun hat, einzelne Flächen also beliebig parallel zueinander verschoben werden dürfen. Man betrachte die Drehachse C_n und ihre Normalebene η. (In **Figur 3.10d** ist η gleich der Zeichenebene und C ist der Durchstoßpunkt von C_n mit η.) Gemäß A) ist C_n eine Zonenachse und gemäß B) ist η eine mögliche Kristallfläche. Es wird nun gezeigt, daß mögliche Flächenlagen nur durch Drehungen mit den Perioden 2, 3, 4 und 6 wieder in mögliche Flächenlagen übergehen. Die Flächenlage κ_1 sei aus dem Zonenverband der Achse C_n und schneide η in der Zonenachse k_1. Durch eine Drehung um die Achse C_n mit dem Winkel $\alpha = 360°/n$ bzw. 2α geht die Flächenlage κ_1 nach κ_2 bzw. nach κ_3 und damit k_1 nach k_2 bzw. k_3.

Die Zonenachsenrichtungen k_1 und k_2 zusammen mit C_n als Koordinatenachsenrichtungen **a**, **b**, **c** mit $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| = a$ sind Schnittgeraden dreier nicht einer einzigen Zone angehörigen Kristallflächen. Anhand der den Lagen κ_1, κ_2, κ_3 angehörenden Flächen k_1', k_2', k_3' liest man aus der Figur folgende Achsenabschnittsverhältnisse ab:

$$(\infty : a : \infty),\ (a : \infty : \infty),\ (ma : a : \infty).$$

Im weiteren gilt aufgrund der in die Figur eingetragenen Winkel die Beziehung

$$(a/2) : ma = cos(180° - \alpha),$$

also

$$m = 1 : (-2\ cos\alpha).$$

Dieses m ist aber nur rational und damit die Indizes nur ganzzahlig für die Winkel $\alpha = 60°, 90°, 120°, 180°$ und deren Vielfache.

Die Aufstellung der theoretisch möglichen Symmetrieoperationen der Tangentialpolyeder von allgemeinen Kristallpolyedern führt zusammen mit der kristallographischen Einschränkung auf 32 verschiedene, bezüglich ihrer Zusammensetzung in sich abgeschlossene Mengen oder Klassen von Symmetrieoperationen (auch kristallographische Symmetriegruppen genannt), die 32 sogenannten *Kristallklassen*, die in den Abschnitten 4.2 bis 4.4 genauer besprochen werden:

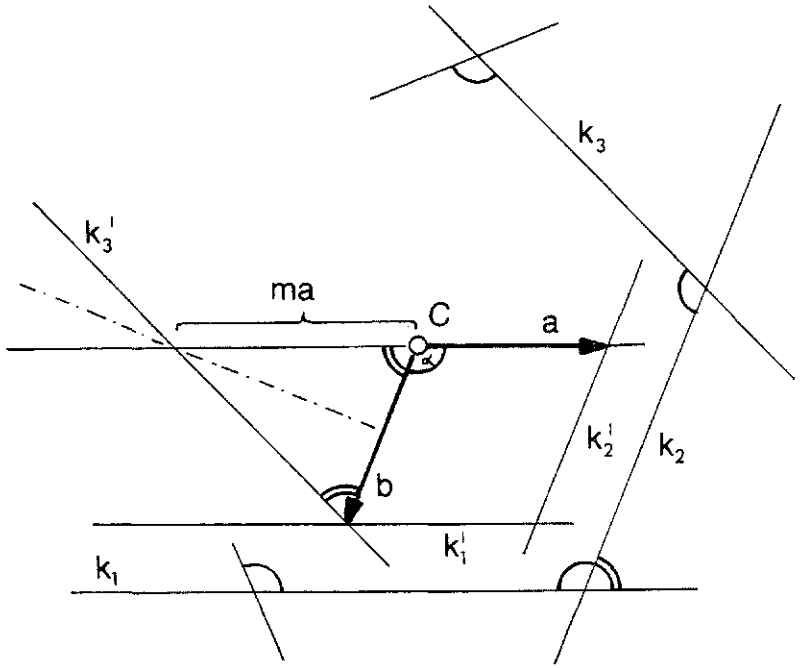
KRISTALLKLASSENGESETZ: *Die Symmetrien der Tangentialpolyeder von allgemeinen Kristallpolyedern gehören einer der 32 Kristallklassen an.*

Für eine andere Ableitung der kristallographischen Einschränkung, welche auf dem projektiven Zonenverbandsgesetz und der Theorie der geometrischen Konstruktionen beruht, siehe Abschnitt 6.1.

Zonenverband und Symmetriegerüst

Die gemäß dem Zonenverbandsgesetz konstruierbaren Zonenachsen und Flächenlagen enthalten alle Symmetrieachsen und Lagen von Symmetrieebenen: *das Symmetriegerüst ist Teilmenge der Menge der möglichen Zonenachsen und Flächenlagen.* Für die Symmetrieachsen wurde dies bei der Ableitung der kristallographischen Einschränkung bewiesen. Für Symmetrieebenen ergibt sich dies aus der Tatsache, daß jede nicht zu einer Symmetrieebene parallele Kristallfläche die gespiegelte Ebene in einer in der Symmetrieebene liegende Zonenachse schneidet. Für ein geschlossenes Polyeder mit Symmetrieebene gibt es aber mindestens zwei Flächen, die nicht parallel zu dieser Ebene sind. Zwei in einer Ebene oder in zwei parallelen Ebenen liegende Zonenachsen bestimmen aber eine Flächenlage.

Da demnach Symmetrieachsen und -ebenen Zonenachsen bzw. Flächenlagen darstellen, ergeben sich im Prinzip aus einem Symmetriegerüst durch die Operationen des Schneidens und Verbindens gemäß dem Zonenverbandsgesetz weitere Zonenachsen und Flächenlagen. Für die konstruktive Durchführung dieser Operationen, das heißt die Konstruktion von Flächenlagen und Zonenachsen aus dem Symmetriegerüst, wird auf Abschnitt 6.3 verwiesen.



Figur 3.10d: *Flächenlagen für Drehachsen C_n*

Unabhängigkeit des Kristallographischen Grundgesetzes vom Kristallsymmetriegesetz

Das Kristallographische Grundgesetz und das Kristallsymmetriegesetz stehen zwar in dem angeführten Zusammenhang, können aber nicht aus einander gefolgert werden.

Einerseits folgt aus dem Zonenverbandsgesetz oder dem Gesetz der ganzzahligen Indizes kein Hinweis auf eine symmetrische Konfiguration möglicher Begrenzungsebenen eines Kristallpolyeders. Es gibt jedoch keine Kristallpolyeder, welche nicht dem Kristallographischen Grundgesetz genügen. Mit anderen Begriffen: Jede Kristallform, welche diesem Gesetz genügt, genügt auch dem Symmetriegesetz. Daß es (vom mathematischen Gesichtspunkt aus) Kristallpolyeder für *jede* Kristallklasse gibt, und nicht etwa nur hochsymmetrische Kristallformen, wird gerade durch das Kristallsymmetriegesetz festgehalten.

Andererseits bezieht sich das Kristallsymmetriegesetz nur auf solche Flächen des Tangentialpolyeders eines Kristalls, die durch das Symmetriegesetz, das heißt durch Symmetrieoperationen einer Gruppe, miteinander verbunden sind, also auf mögliche Flächen ein und derselben *einfachen* Kristallform. In der Regel bestehen jedoch Kristalle aus Zusammensetzungen (Flächenkombinationen) mehrerer solcher einfacher Kristallformen. Über die gegenseitige Beziehung der Indizes von Kristallflächen, die verschiedenen einfachen Kristallformen angehören, kann das Symmetriegesetz daher nichts aussagen. Darüber hinaus gibt es auch schon bei denjenigen einfachen Flächenformen, die einer der 32 Kristallklassen zugehören, in Grenzfällen Polyeder, welche kristallographisch nicht erlaubte Symmetrien haben (insbesondere Achsen der Zähligkeiten 5, 8 und 12; siehe Tabelle 5.2d), falls die Beschränkung auf ganzzahlige Indizes nicht explizit gefordert wird.

Das Kristallformengesetz

Die Zusammenfügung des Kristallsymmetriegesetzes mit dem Kristallographischen Grundgesetz ergibt im Abschnitt 5.3 eine vollkommene Übersicht aller möglichen Kristallpolyeder.

KRISTALLFORMENGESETZ: *Es gibt 47 verschiedene einfache Kristallformen. Jede geschlossene Flächenform, das heißt jedes konvexe Polyeder, das aus einem durch Kombination einfacher kristallographischer Flächenformen gebildeten Polyeder durch Parallelverschiebung einer oder mehrerer Flächen («Verzerrung») hervorgeht, ist eine mögliche Kristallform, ein allgemeines Kristallpolyeder.*

3.4 *Kristallographische Symmetrieachsenrichtungen und Flächenlagetypen*

Kristallographische Symmetrieachsenrichtungen: Die sieben Kristallsysteme

Untersucht man die gegenseitigen Verhältnisse der Richtungen der hauptsächlichen Symmetrieachsen, oder, was nach Abschnitt 3.3 auf dasselbe hinausläuft, die Verhältnisse der Zonenrichtungen von Zonenverbänden, oder auch das Verhältnis der Kanten von Zonentetraedern im Zusammenhang mit dem Zonenverbandsgesetz, so stellt sich heraus, daß es für jeden Tangentialpolyeder eines Kristallpolyeders nur drei wesentliche verschiedene Arten von Symmetrie- bzw. Achsenrichtungen gibt. Diese können in sieben verschiedene Systeme, die sogenannten Kristallsysteme, eingeteilt werden:

GESETZ DER SIEBEN KRISTALLACHSENSYSTEME: *Die geometrische Anordnung der Symmetrie- oder Zonenachsenrichtungen von Kristallpolyedern lassen sich in sieben Systeme einteilen.*

Diese sieben Systeme von Kristallachsen heißen kurz die *sieben Kristallsysteme.*

TABELLE 3.2: *Die sieben Systeme von kristallographischen Symmetrieachsenrichtungen und die sieben kristallographischen Koordinatensysteme.* Die Achsenanordnungen sowie die dazugehörigen Koordinateneinheitszellen sind durch die in der Tabelle angeführten Eigenschaften charakterisiert (**Figur 3.11**). Man betrachtet drei Zonenrichtungen als Koordinatenachsenrichtungen in Form von drei Vektoren **a**, **b**, **c** mit den als Einheiten gewählten Längen $a = |\mathbf{a}|$, $b = |\mathbf{b}|$, $c = |\mathbf{c}|$ und den Zwischenwinkeln $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$, $\beta = (\mathbf{c}, \mathbf{a})$, $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$. Die *Koordinateneinheitszellen*, kurz *Koordinatenzellen*, werden durch diese drei Vektoren aufgespannt: es sind genau die Parallelepipede mit Flächen parallel zu (**b**, **c**), (**c**, **a**) und (**a**, **b**).

Außer beim trigonalen System (siehe weiter unten) fallen die Koordinatenzellen mit denjenigen *einfachsten* Körpern zusammen, deren Eigensymmetrien genau die Symmetrien des entsprechenden Kristallsystems sind.

Die Zahlen a, b, c sind zugleich die Achsenabschnitte der Referenzfläche ε (Abschnitt 3.2); sie sind bis auf einen gemeinsamen Faktor bestimmt, da es nicht auf die absolute Größe ankommt. Die drei Koordinatenflächen $\alpha = (\mathbf{b}, \mathbf{c})$, $\beta = (\mathbf{c}, \mathbf{a})$, $\gamma = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$ bilden zusammen mit der Referenzfläche ε das *Koordinatentetraeder* oder *Elementartetraeder* des entsprechenden Koordinatensystems. Durch die Vorgabe eines Koordinatentetraeders sind alle wesentlichen Parameter des Koordinatensystems festgelegt.

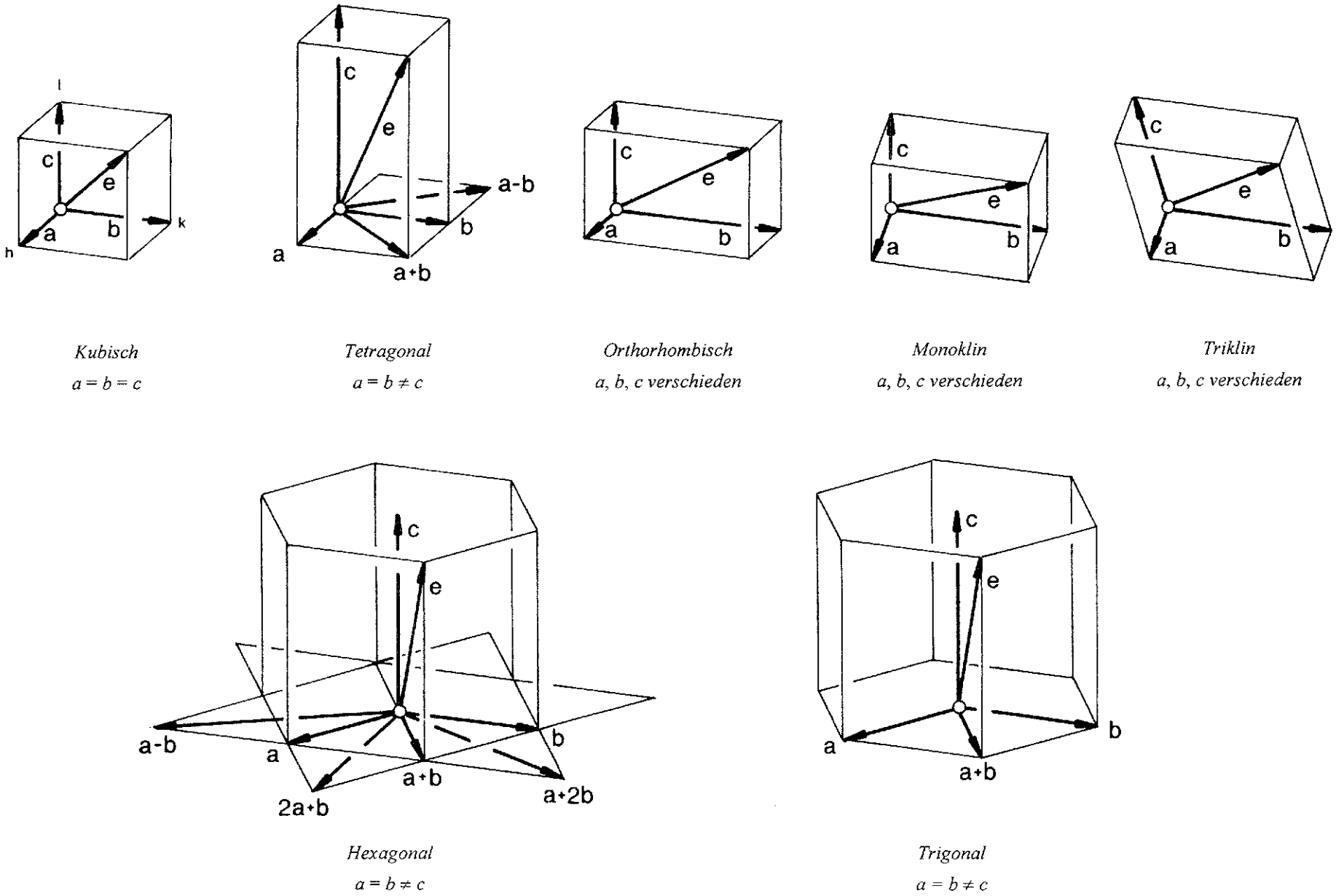
Die in den Tabellen 3.2 und 3.3 angeführte Anzahl von freien Parametern bezieht sich auf die innerhalb eines kristallographischen Koordinatensystems frei wählbaren Maße der Längenverhältnisse und Winkel der Achsenabschnitte, das heißt auf die Maße der Koordinatenzellen.

Die Einteilung der 32 Kristallklassen gemäß diesen sieben Systemen von Achsenanordnungen (Abschnitt 4.4) läßt sich nicht aus den Kristallklassen ableiten, ohne die genannten Bedingungen an die Achsenrichtungen einzuführen. In diesem Sinne ist das Gesetz über die sieben Kristallsysteme von dem Symmetriegesetz der Kristallklassen unabhängig.

Man faßt manchmal auf Grund ihrer verwandten Achsenrichtungen das kubische, tetragonale, orthorhombische, monokline und trikline System zur *kubischen Kristallfamilie* zusammen und das hexagonale und trigonale System zur *hexagonalen Kristallfamilie.*

TABELLE 3.2: ***Die sieben Kristallsysteme***: *Kristallographische Symmetrieachsenrichtungen und die sieben kristallographischen Koordinatensysteme*

KRISTALLSYSTEM	***Hauptsymmetrie-richtung(en)*** **I**	***Erste Nebenrichtung(en)*** **II**	***Zweite Nebenrichtung(en)*** **III**	***Einheitslängen*** *a, b, c* ***der Richtungen*** **a, b, c**	***Zwischenwinkel*** α, β, γ ***der Richtungen*** **a, b, c**	***Anzahl freie Parameter***
Kubisch [***Regulär, Isometrisch, Tesseral***]	3 Richtungen **a, b, c** mit Periode 4 oder 2	4 Richtungen **(Raumdiagonalen)** mit Periode 3	6 Richtungen **(Flächendiagonalen)** mit Periode 2	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	0
Tetragonal	1 Richtung **c** mit Periode 4	2 Richtungen **a, b** mit Periode 2	2 Richtungen **a+b, a–b** mit Periode 2	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	1
Orthorhombisch [***Rhombisch***]	1 Richtung **c** mit Periode 2	1 Richtung **a** mit Periode 2	1 Richtung **b** mit Periode 2	*a, b, c* verschieden	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	2
Monoklin	1 Richtung **c** mit Periode 2	keine	keine	*a, b, c* verschieden	$\beta \neq \alpha = \gamma = 90°$	2+1 = 3
Triklin	Keine, aber Symmetrie-Zentrum	keine	keine	*a, b, c* verschieden	α, β, γ verschieden	2+3 = 5
Hexagonal	1 Richtung **c** mit Periode 6 oder 3	3 Richtungen **a, a+b, b** mit Periode 2	3 Richtungen **a–b, 2a+b, a+2b** mit Periode 2	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	1
Trigonal [***Rhomboedrisch***]	1 Richtung **c** mit Periode 3	3 Richtungen **a, a+b, b** mit Periode 2	keine	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	1



Kubisch
$a = b = c$

Tetragonal
$a = b \neq c$

Orthorhombisch
a, b, c verschieden

Monoklin
a, b, c verschieden

Triklin
a, b, c verschieden

Hexagonal
$a = b \neq c$

Trigonal
$a = b \neq c$

Figur 3.11: *Symmetrieachsenrichtungen bzw. Koordinatenachsensysteme und Koordinateneinheitszellen der sieben Kristallsysteme gemäß Tabelle 3.1. Zusätzlich sind die einfachsten Körper angegeben, welche als Eigensymmetrien genau die Symmetrien des Kristallsystems besitzen (außer beim trigonalen System; siehe dazu Figur 3.12).*

Kanonisches Koordinatensystem des trigonalen Systems

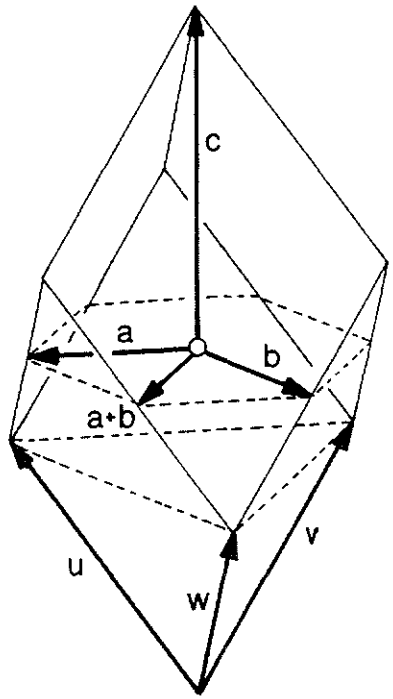
Zur einfacheren Bestimmung der Flächenlagen und Flächenlagetypen (siehe unten) wird für das *trigonale Koordinatensystem* dasselbe Koordinatengerüst und dieselbe Koordinateneinheitszelle verwendet wie für das hexagonale System. Dies hat zur Folge, daß diese Zelle als Eigensymmetrien die Symmetrien des hexagonalen Systems hat und nicht nur diejenigen des trigonalen Systems.

In den meisten Lehrbüchern der Kristallographie wird deshalb ein anderes Koordinatensystem, hier *kanonisches Koordinatensystem des trigonalen Kristallsystems* genannt, bevorzugt. Wenn die Basisvektoren dieses Systems mit **u**, **v**, **w** bezeichnet werden (**Figur 3.12**), so gilt:

a parallel **u** – **v**,
b parallel **w** – **u**,
c parallel **u** + **v** + **w**,
a + **b** parallel **w** – **v**.

Die Zwischenwinkel von **u**, **v**, **w** sind alle gleich groß und beliebig < 120°, jedoch ungleich 90°. Hier fällt dann die Koordinatenzelle mit dem einfachsten Körper, welcher als Eigensymmetrien nur die Symmetrien des trigonalen Systems besitzt, zusammen.

TABELLE 3.3: *Kanonisches Koordinatensystem und Symmetrieachsenrichtungen im trigonalen Kristallsystem*. Hier wird das Resultat für das kanonische Koordinatensystem des trigonalen Kristallsystems zusammengefaßt (man vergleiche diese Tabelle mit Tabelle 3.2).



Figur 3.12: *Kanonisches Koordinatensystem des trigonalen Kristallsystems*

TABELLE 3.3: *Kanonisches Koordinatensystem und Symmetrieachsenrichtungen im trigonalen Kristallsystem*

TRIGONALES KRISTALLSYSTEM	*Hauptsymmetrie-richtung*	*Erste Nebenrichtungen*	*Zweite Nebenrichtungen*	*Einheitslängen u, v, w der Richtungen* **u**, **v**, **w**	*Zwischenwinkel δ der Richtungen* **u**, **v**, **w**	*Anzahl freie Parameter*
Kanonisches Koordinatensystem	1 Richtung **u** + **v** + **w** mit Periode 3	3 Richtungen **u**–**v**, **w**–**v**, **w**–**u** mit Periode 2	keine	$u = v = w$	$\delta < 120°$ $\delta \neq 90°$	1

Gesetz der Zonen und Indizes: Metrische Fassung

Im Abschnitt 3.2 wurden die projektiven Fassungen des Kristallographischen Grundgesetzes, insbesondere des Gesetzes der kleinen ganzzahligen Indizes, besprochen. *Verknüpft man dieses Gesetz mit den Symmetriegesetzen*, insbesondere mit dem Gesetz der sieben Kristallachsensysteme, so ergibt sich für jedes Tangentialpolyeder eines Kristallpolyeders ein eindeutig bestimmter Typ von Koordinatenachsensystem. Das Gebilde bestehend aus den drei Koordinatenachsen, den drei Koordinatenebenen und der die Achsen in den Einheitslängen schneidenden vierten Ebene (Referenzebene) wurde *Koordinatentetraeder* oder *Elementartetraeder* genannt.

Insofern alle Koordinatenachsen Symmetrieachsen sind wie beim kubischen, tetragonalen, orthorhombischen, hexagonalen und trigonalen System, sind sie auch Zonenachsen, und damit repräsentieren auch die Koordinatenebenen kristallographische Flächenlagen (Abschnitt 3.2 und 3.3). Zur Festlegung der noch offenen Parameter (Verhältnisse der Einheitslängen der Koordinatenachsen im tetragonalen, orthorhombischen, hexagonalen und trigonalen System) kann irgendeine den entsprechenden Bedingungen genügende vierte Flächenlage des Kristallpolyeders gewählt werden. Damit ist das Koordinatentetraeder komplett. Bei den übrigen Kristallsystemen (monoklines und triklines System) können beliebige den angegebenen Bedingungen in Tabelle 3.2 genügende Zonenachsen des Kristallpolyeders als Koordinatenachsenrichtungen gewählt werden. Zusammen mit einer die Einheitslängen festlegenden vierten Kristallflächenlage sind dann die Koordinatenparameter eindeutig festgelegt und damit das Koordinatentetraeder vollständig.

Aus diesen Überlegungen zur Festlegung der kristallographischen Koordinatentetraeder folgt gemäß dem zum Gesetz der ganzzahligen Indizes äquivalenten Zonenverbandsgesetz, daß die bestimmenden Elemente des Koordinatensystems aus vier beliebigen ein allgemeines Tetraeder bildenden Flächen konstruktiv abgeleitet werden können und demzufolge auch ganzzahlige Indizes haben. Daraus ergibt sich auch die Umkehrung: Durch das Koordinatentetraeder eines Kristallpolyeders sind die möglichen Flächenlagen bestimmt und können in wenigen Schritten abgeleitet werden. Daraus ergeben sich die zueinander und – zusammen mit dem Gesetz der sieben Kristallachsensysteme – zu den projektiven Fassungen des Kristallographischen Grundgesetzes (Abschnitt 3.2) äquivalenten metrischen Fassungen.

METRISCHES ZONENVERBANDSGESETZ: *Die Flächenlagen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems lassen sich in wenigen Schritten aus dem Symmetriegerüst, insbesondere aus dem Koordinatentetraeder des Kristallsystems, ableiten: Jedes Paar von Schnittgeraden (Zonen) bereits vorhandener Flächen bestimmt eine neue Flächenlage; wird eine dieser Flächen mit den bereits vorhandenen Flächen geschnitten, so erhält man neue Zonen.*

METRISCHES GESETZ DER KLEINEN GANZZAHLIGEN FLÄCHENINDIZES: *Die Indizes aller Flächenlagen sämtlicher möglicher Kristallpolyeder eines bestimmten Kristallsystems haben kleine ganzzahlige Werte, wenn sie auf das Koordinatentetraeder des Kristallsystems bezogen werden.*

Indizesklassen und Flächenlagetypen

Vom arithmetischen Gesichtspunkt aus lassen sich die Flächenindizes folgendermaßen klassifizieren. Man beachte dabei, daß die Zahlenwerte nur bis auf einen gemeinsamen Faktor bestimmt sind.

Falls in den Indizes nur konstante Zahlenwerte vorkommen, so kommen folgende Klassen von Werteverteilungen in Betracht:

(100) (010) (001) (110) (101) (011) (111)

Falls variable Werte vorkommen, so gibt es im Falle einfacher Variabilität die Klassen:

$(mn0)$ $(m0n)$ $(0mn)$ wobei $|m| > |n|$ oder $|m| < |n|$,

(mmn) (mnm) (nmm) wobei $|m| > |n|$ oder $|m| < |n|$;

und im Falle zweifacher Variabilität die Klasse

(hkl) wobei $h \neq k \neq l \neq h$.

Es soll nun untersucht werden, inwiefern diesen verschiedenen Klassen von Werteverteilungen der Indizes, kurz *Indizesklassen*, auch wesentlich verschiedene Flächenlagen entsprechen. Dazu betrachtet man die entsprechenden Flächenlagen bezüglich der verschiedenen Koordinateneinheitszellen. Zwei Flächenlagen eines Kristallpolyeders heißen *symmetrieäquivalent*, wenn es eine Symmetrieoperation der Koordinateneinheitszelle gibt, welche die eine Flächenlage in die andere überführt.

Zwei Indizesklassen heißen *äquivalent*, wenn es zu jeder Flächenlage bezüglich einer Indizesklasse eine symmetrieäquivalente Flächenlage bezüglich der anderen Indizesklasse gibt und umgekehrt. Zwei Flächenlagen heißen von demselben Typ, *Flächenlagetyp* genannt, wenn sie symmetrieäquivalent sind oder derselben Indizesklasse oder äquivalenten Indizesklassen angehören.

Flächenlagetypen, in deren Indizes nur konstante Zahlenwerte vorkommen, heißen *Flächenlagetypen mit festen Indizes*, und solche, in denen auch variable Indizeswerte vorkommen, *Flächenlagetypen mit variablen Indizes*. Für Flächenlagetypen von möglichen *Kristallpolyedern* ist dabei das Kristallographische Grundgesetz zu berücksichtigen. Rein geometrisch gesehen, können die Variablen natürlich beliebige Werte annehmen (Kapitel 5). In Tabelle 3.6 ist gemäß obiger Klassifizierung für jeden Lagetyp in der letzten Zeile die Anzahl der frei wählbaren Parameter angegeben.

Als Grundlage für alles weitere gilt: Für alle sieben Kristallsysteme haben die von den Paaren (**b**, **c**), (**c**, **a**), (**a**, **b**) von Koordinatenachsenrichtungen **a**, **b**, **c** bestimmten Flächen die Flächenindizes (001), (010), (100) und die Zonenachsen **a**, **b**, **c** die Zonenindizes [100], [010], [001].

Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie

Es soll zunächst für die *kubische Familie* untersucht werden, welchen Flächenlagen die oben angeführten Indizesklassen entsprechen. Zur Veranschaulichung der verschiedenen Flächenlagetypen wird die durch die Vektoren **a**, **b**, **c** aufgespannte Koordinateneinheitszelle zugrunde gelegt, in welche die entsprechenden Flächen der jeweiligen Indizesklassen eingezeichnet wurden (**Figur 3.13**). Durch eine entsprechende «Verzerrung» der Koordinateneinheitszellen erhält man daraus auch die entsprechenden Flächenlagen für die übrigen Kristallsysteme, außer für das trigonale und hexagonale System, die separat behandelt werden.

TABELLE 3.4: *Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie.* Hier werden einige der den verschiedenen Indizesklassen entsprechenden Flächenlagen genauer charakterisiert. Die *Lagetypen* sowie die *Symmetrielagen* werden im Abschnitt 5.1 diskutiert.

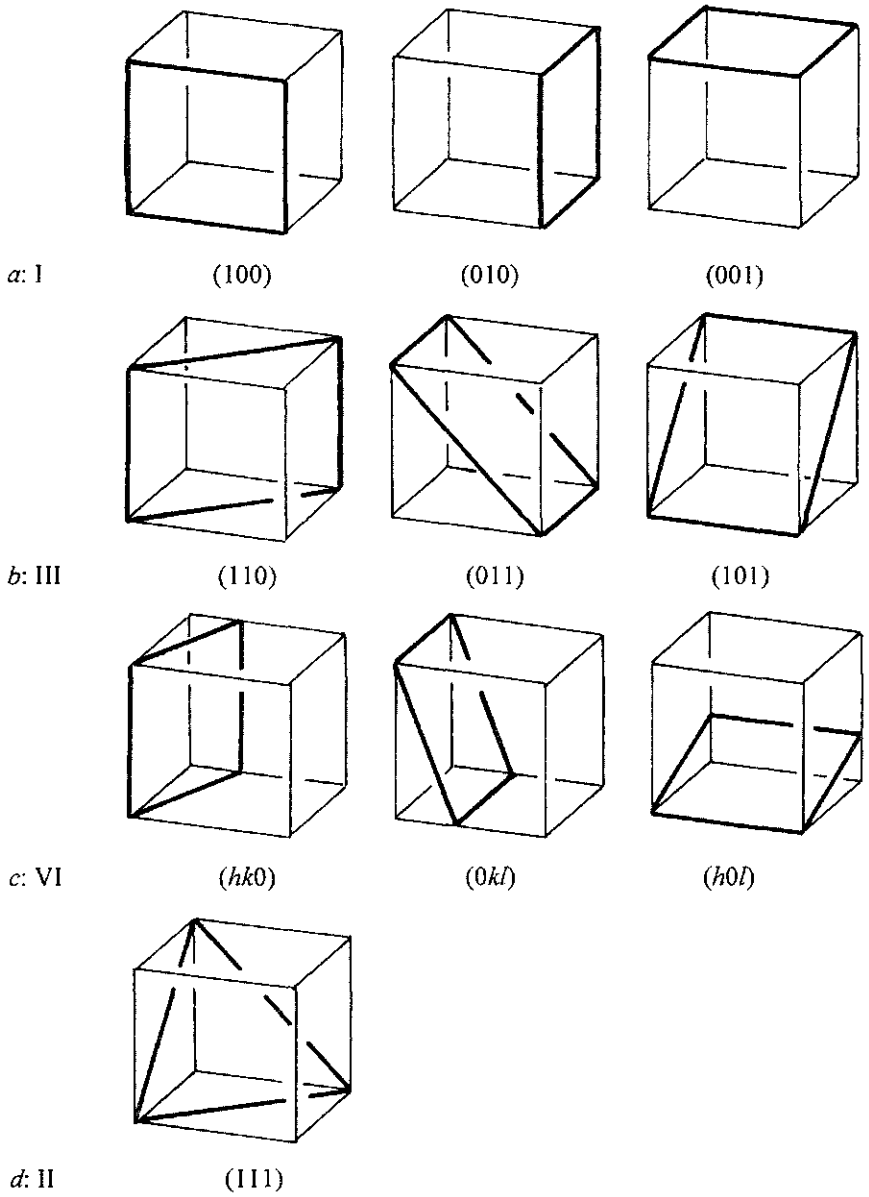
Im folgenden wird für die einzelnen Kristallsysteme angegeben, auf welche Flächenlage*typen* sich die verschiedenen Flächenlagen bzw. Indizesklassen reduzieren lassen. Das Resultat zeigt zusammenfassend:

TABELLE 3.6: *Flächenlagetypen und Indizesklassen der sieben Kristallsysteme.* Gesamtdarstellung aller Flächenlagetypen. Die *Lagetypen* sowie die *Symmetrielagen* werden im Abschnitt 5.1 diskutiert.

Für das *kubische System* sind die Flächenlagen (100), (010), (001) symmetrieäquivalent, so daß eine davon den entsprechenden Flächenlagetyp repräsentiert. Analoges gilt für die Flächenlagen (011), (101), (110). Im weiteren sind die Indizesklassen (0*kl*), (*h*0*l*), (*hk*0) äquivalent. Da im kubischen System die Länge der Einheitsachsenabschnitte, das heißt die Längen von **a**, **b**, **c**, alle gleich sind, so sind die Indizesklassen (*hhl*) mit $|h| > |l|$ und (*hhl*) mit $|h| < |l|$ *nicht* äquivalent; jedoch sind die Indizesklassen (*hll*) bzw. (*hkh*) mit je einer dieser Klassen äquivalent.

Für das *tetragonale System* sind die Flächenlagen (100), (010) sowie (011), (101) symmetrieäquivalent. Letztere Indizesklasse ist äquivalent mit (0*kl*) sowie mit (*h*0*l*). Von den Flächenlagetypen mit festen Indizes bleiben nur (001), (100) und (110) übrig. Bei den Indizesklassen mit variablen Indizes treten nur noch die Flächenlagetypen (*hhl*) und (*hkl*) auf, da hier der Unterschied $|h| > |l|$ und $|h| < |l|$ wegen $a = b \neq c$ keine Rolle spielt.

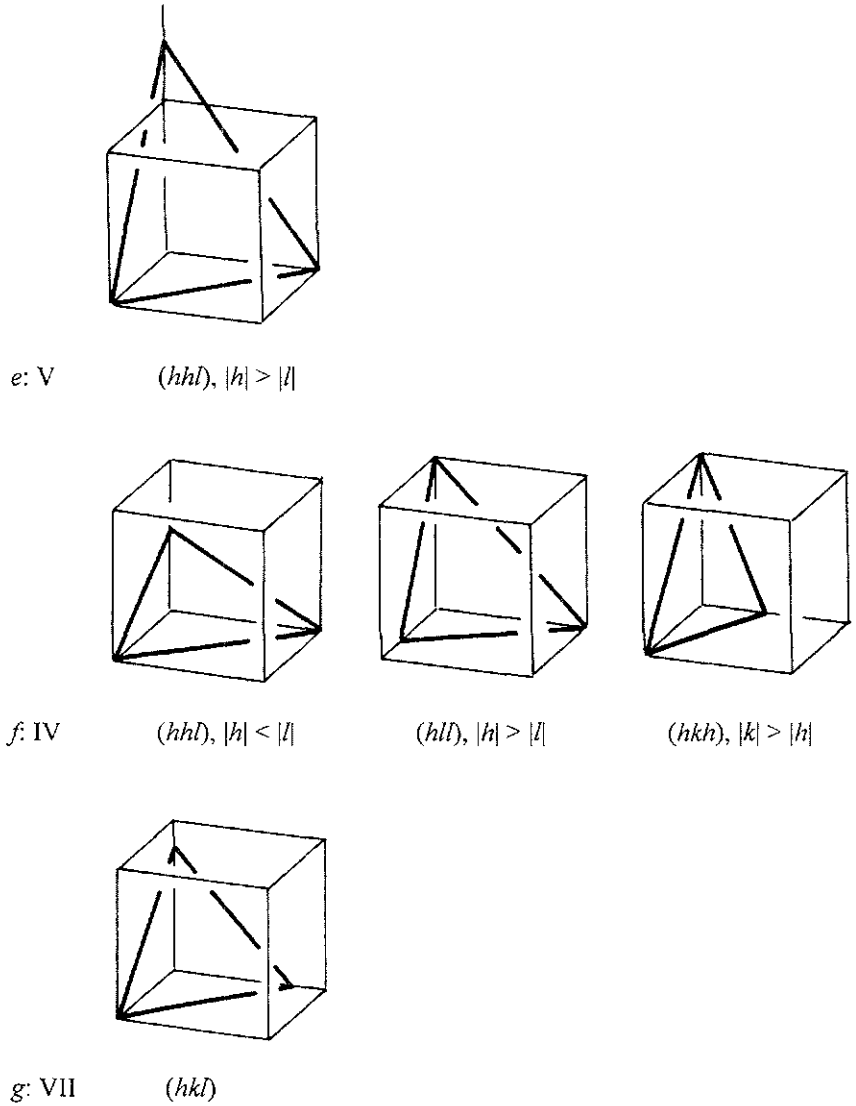
Für das *orthorhombische*, *monokline* und *trikline Kristallsystem* sind die Paare von Indizesklassen (110), (*hk*0) und (011), (0*kl*) und (101), (*h*0*l*) äquivalent wegen der frei wählbaren Einheitslängen *a*, *b*, *c*.



Figur 3.13: *Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie*

TABELLE 3.4: *Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie*

***Beschreibung der Flächenlage bezüglich der Koordinatenachsen-richtungen* a, b, c**	***Symmetrie-lage***	***Klasse der Flächenindizes***	***Lagetyp***	***Liegt in Zone(n)*** *(siehe Figur 3.4)*	***Figur***
parallel **b**, **c**	**4**	(100)	I	[010], [001]	3.13a
parallel **a**, **c**	**4**	(010)	I	[100], [001]	3.13a
parallel **a**, **b**	**4**	(001)	I	[100], [001]	3.13a
parallel **a**	**2**	(011)	III	[100]	3.13b
parallel **a**	**4–2**	(0*kl*)	VI	[100]	3.13c
parallel **b**	**2**	(101)	III	[010]	3.13b
parallel **b**	**4–2**	(*h*0*l*)	VI	[010]	3.13c
parallel **c**	**2**	(110)	III	[100]	3.13b
parallel **c**	**4–2**	(*hk*0)	VI	[100]	3.13c
senkrecht **a**+**b**+**c**	**3**	(111)	II	$[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$	3.13d
	3–2	(*hhl*), $\lvert h\rvert > \lvert l\rvert$	V	$[1\bar{1}0]$	3.13e
	4–3	(*hhl*), $\lvert h\rvert < \lvert l\rvert$	IV	$[1\bar{1}0]$	3.13f
	4–3	$\cong$ (*hll*), $\lvert h\rvert > \lvert l\rvert$	IV	$[01\bar{1}]$	3.13f
	4–3	$\cong$ (*hkh*), $\lvert k\rvert > \lvert h\rvert$	IV	$[10\bar{1}]$	3.13f
allgemeine Lage	**4–3–2**	(*hkl*)	VII		3.13g



Figur 3.13 *(Fortsetzung)*:
Flächenlagen und Indizesklassen der kubischen Kristallfamilie

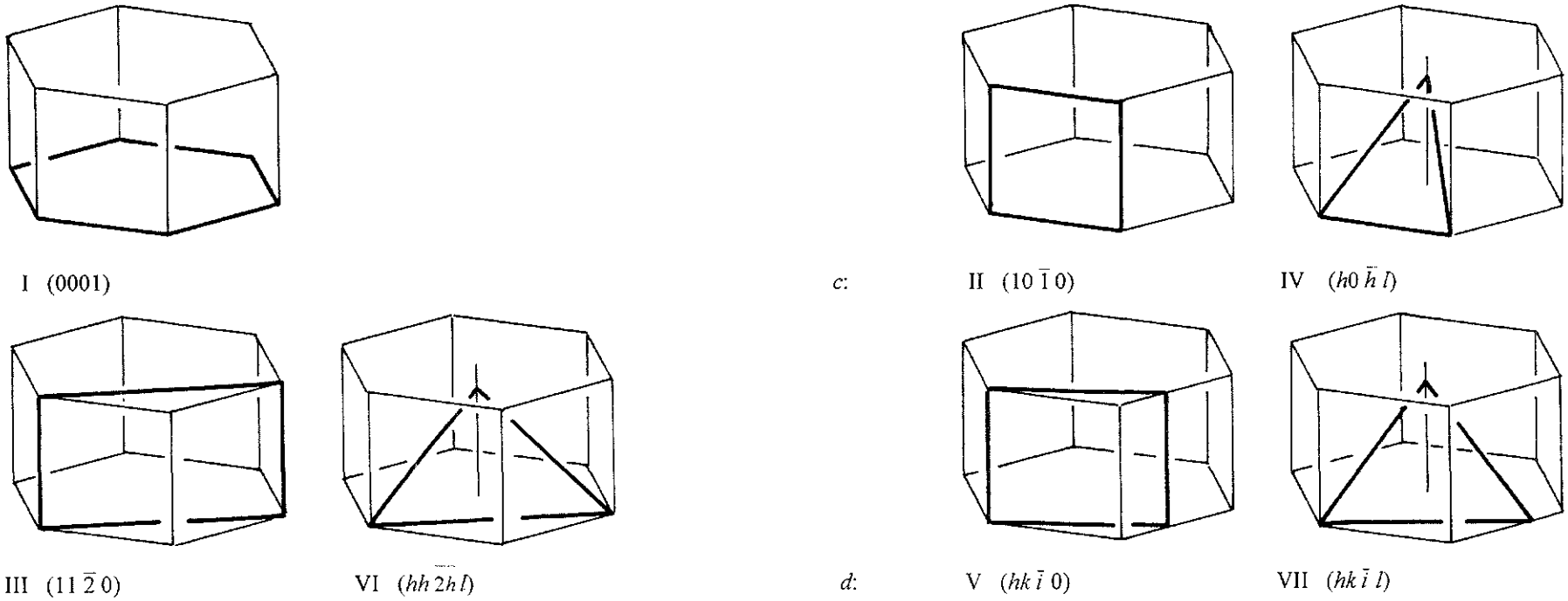
TABELLE 3.5: *Flächenlagen und Indizesklassen der hexagonalen Kristallfamilie*

Beschreibung der Flächenlage bezüglich der Koordinatenachsenrichtungen **a, b, c**	***Symmetrie-lage***	***Klasse der Flächen-indizes***	***Lagetyp***	***Liegt in Zone(n)***	***Figur***
senkrecht **c** und parallel **a**, **b**	**6**	(0001)	I	[1100]	3.14a
parallel **c** und senkrecht **a+b**	**2**	$(11\bar{2}0)$	III	[0001], $[11\bar{1}1]$	3.14b
parallel **a**–**b**	**6–2**	$(hh\overline{2h}l)$	VI	$[11\bar{1}0]$	3.14b
parallel **c** und parallel **b**	**2**	$(10\bar{1}0)$	II	[0001], [1010]	3.14c
parallel **b**	**6–2**	$(h0\bar{h}l)$	IV	[1010]	3.14c
parallel **c**	**2–2**	$(hk\bar{i}0)$	V	[0001], $[11\bar{1}1]$	3.14d
allgemeine Lage	**6–2–2**	$(hk\bar{i}l)$	VII	$[11\bar{1}0]$	3.14d

Flächenlagen und Indizesklassen der hexagonalen Kristallfamilie

Die Ableitung der Indizesklassen und Flächenlagen der hexagonalen Kristallfamilie (hexagonales und trigonales System) geht in entsprechender Weise wie für die kubische Familie vor sich. Es wird bloß das Resultat festgehalten.

In der hexagonalen Familie verwendet man aus Symmetriegründen vierstellige Indizes (*hkil*) zur Festlegung der Lage einer Fläche, obwohl drei ausreichen würden (**Figur 3.14**). Sie beziehen sich auf die Hauptrichtung **c** (*l*) sowie die drei ersten Nebenrichtungen **a**, **b**, **a+b** (*hki*). Dabei gilt aus geometrischen Gründen unter Berücksichtigung der entsprechenden Vorzeichen: $h + k + i = 0$. Negative Indizes werden in der Tabelle, wie in der Kristallographie üblich, durch einen Querstrich gekennzeichnet. Die *Lagetypen* sowie die *Symmetrielagen* werden im Abschnitt 5.1 diskutiert.



Figur 3.14: *Flächenlagen und Indizesklassen der hexagonalen Kristallfamilie*

TABELLE 3.6: *Flächenlagetypen und Indizesklassen der sieben Kristallsysteme*

KRISTALLSYSTEM	***FLÄCHENLAGETYPEN UND INDIZESKLASSEN***						
Kubisch	(100)	(110)	(111)	(hhl), $\|h\| > \|l\|$	(hhl), $\|h\| < \|l\|$	$(hk0)$	(hkl)
Symmetrielage	**4**	**2**	**3**	**3–2**	**4–3**	**4–2**	**4–3–2**
Tetragonal	(001)	(110)	(100)	$(hk0)$	$(h0l)$	(hhl)	(hkl)
Symmetrielage	**4**	**2**	**2**	**2–2**	**4–2**	**4–2**	**4–2–2**
Orthorhombisch	(001)	(010)	(100)	$(hk0)$	$(h0l)$	$(0kl)$	(hkl)
Symmetrielage	**2**	**2**	**2**	**2–2**	**2–2**	**2–2**	**2–2–2**
Monoklin	(001)	(010)	(100)	$(hk0)$	$(h0l)$	$(0kl)$	(hkl)
Symmetrielage	**2**						
Triklin	(001)	(010)	(100)	$(hk0)$	$(h0l)$	$(0kl)$	(hkl)
Symmetrielage							
Hexagonal	(0001)	$(11\bar{2}0)$	$(10\bar{1}0)$	$(hk\bar{i}0)$	$(h0\bar{h}l)$	$(hh\overline{2h}l)$	$(hk\bar{i}l)$
Symmetrielage	**6**	**2**	**2**	**2–2**	**6–2**	**6–2**	**6–2–2**
Trigonal	(0001)	$(11\bar{2}0)$	$(10\bar{1}0)$	$(hk\bar{i}0)$	$(h0\bar{h}l)$	$(hh\overline{2h}l)$	$(hk\bar{i}l)$
Symmetrielage	**3**	**2**				**3–2**	
Lagetypen (Abschnitt 5.1)	**I**	**III**	**II**	**V**	**IV**	**VI**	**VII**
Freie Parameter für Flächenlagen innerhalb eines Typs	**0**	**0**	**0**	**1**	**1**	**1**	**2**

3.5 *Zweidimensionale Darstellungen von Kristallen und Polyedern*

Für die zweidimensionale Darstellung von Kristallpolyedern oder deren Tangentialpolyedern (Parallelverschiebung aller Flächen an eine Sphäre im Innern des Kristallkörpers) gibt es verschiedene Verfahren, die je nach Verwendungszweck unterschiedliche Eigenschaften in den Vordergrund treten lassen. Da es sich sowohl bei den natürlichen Kristallpolyedern wie den entsprechenden Tangentialpolyedern um Polyeder handelt, werden diese in den nachfolgenden Untersuchungen nicht voneinander unterschieden und kurz *Polyeder* genannt.

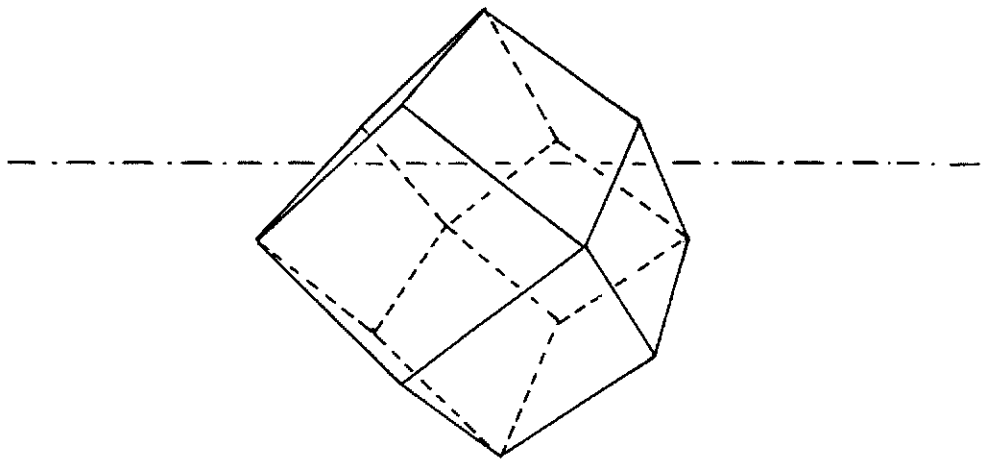
Die zweidimensionalen Darstellungen von Polyedern werden in *einfache* Darstellungen und *mehrfache* Darstellungen unterschieden, je nachdem eine oder zwei (oder mehrere) Operationen benötigt werden, um das Polyeder abzubilden. Eine Darstellung, bei welcher der Flächenzusammenhang nicht gewahrt bleibt, welche aber zur Modellkonstruktion notwendig ist, ist die *Abwicklung* der Oberfläche eines Polyeders in eine Ebene.

Zu den *einfachen Darstellungen* gehören die Zentral- und Parallelprojektionen von Polyedern auf eine Ebene (planare oder ebene Darstellungen) und die Darstellung durch ein Ebenenbündel oder Geradenbündel (zentrische Darstellungen).

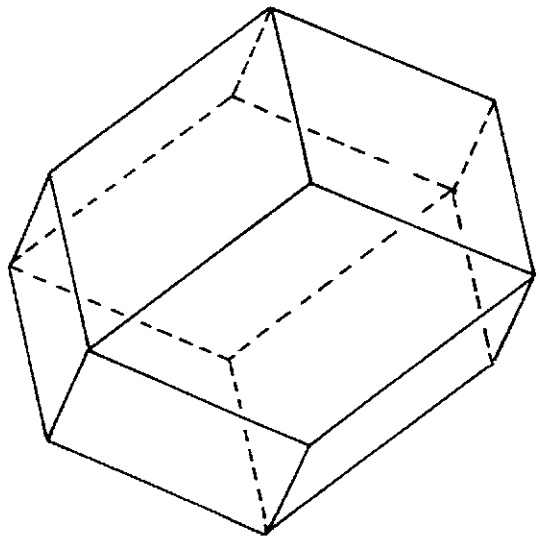
Die *mehrfachen Darstellungen* sind Verfahren, mit welchen nicht-planare Darstellungen auf eine Ebene projiziert und die zentrischen Darstellungen auf eine Sphäre projiziert (sphärische Darstellung) oder mit einer Ebene geschnitten werden. Für die ebene Darstellung von sphärischen Darstellungen kommt die stereographische Projektion, die gnomonische Projektion sowie die schiefe oder orthogonale Parallelprojektion der Sphäre in Frage.

Einfache Darstellungen von Kristallen und Polyedern

Zentralperspektive: In der zentralperspektivischen Darstellung wird das Polyeder von einem Zentrum Z (Augpunkt) auf eine für den Betrachter senkrecht stehende Ebene ζ projiziert; dabei laufen im allgemeinen die im Original parallelen Geraden in einen Fluchtpunkt zusammen. Die parallelen Schnittgeraden von Ebenen eines Zonenverbandes werden in Geraden abgebildet, die im allgemeinen durch einen Punkt gehen, das heißt ein Geradenbüschel bilden. Die durch den Augpunkt gehende, auf der Projektionsebene ζ senkrecht stehende Horizontalebene schneidet ζ in der *Fluchtgeraden* (Horizont). Ein Vorteil dieser Projektion ist die Anschaulichkeit, nachteilig sind die aufwendige Konstruktion und der Verlust der Parallelität (**Figur 3.15**).



Figur 3.15: *Rhombendodekaeder in zentralperspektivischer Darstellung*



Figur 3.16: *Rhombendodekaeder in schiefer Parallelprojektion*

Schiefe Parallelprojektion eines Koordinatenachsensystems (klinographische Projektion, schiefe Axonometrie): Projektion eines Koordinatenachsensystems aus einem Augpunkt «im Unendlichen» (Fernpunkt) mit parallelen Projektionsstrahlen, welche die Projektionsebene ζ schief treffen (**Figur 3.16**). Falls die Projektionsebene der Aufriß oder der Grundriß ist, wird die schiefe Parallelprojektion auch *Kavalierprojektion* bzw. «*Militärprojektion*» genannt.

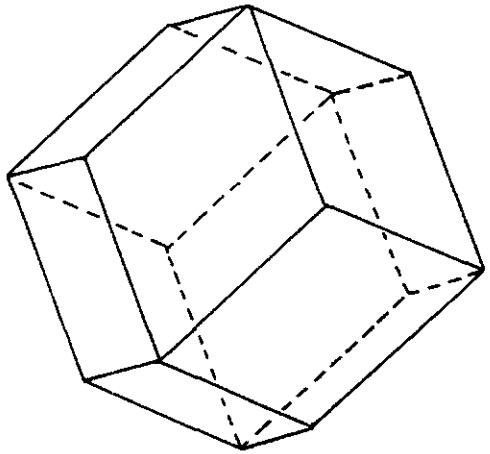
Orthogonale Parallelprojektion eines Koordinatenachsensystems (orthographische Projektion, orthogonale Axonometrie): Projektion eines Koordinatenachsensystems aus einem Augpunkt «im Unendlichen» (Fernpunkt) mit parallelen Projektionsstrahlen, welche die Projektionsebene ζ orthogonal (senkrecht) treffen (**Figur 3.17**).

Diese beiden Parallelprojektionen (Axonometrien) sind anschaulich und erhalten die Parallelität. In projizierenden Flächen liegende Kanten fallen jedoch alle in eine Gerade, und in parallelen projizierenden Ebenen liegende Kanten erscheinen parallel, auch wenn sie dies im Original nicht sind. Die parallelen Schnittgeraden von Ebenen eines Zonenverbandes werden in parallele Geraden abgebildet. (Manchmal wird in kristallographischen Zusammenhängen anstatt «Parallelprojektion» oder «Axonometrie» auch der Ausdruck «Perspektive» oder «Parallelperspektive» verwendet; dies ist jedoch mißverständlich, da eine Verwechslung mit der Zentralperspektive möglich ist.)

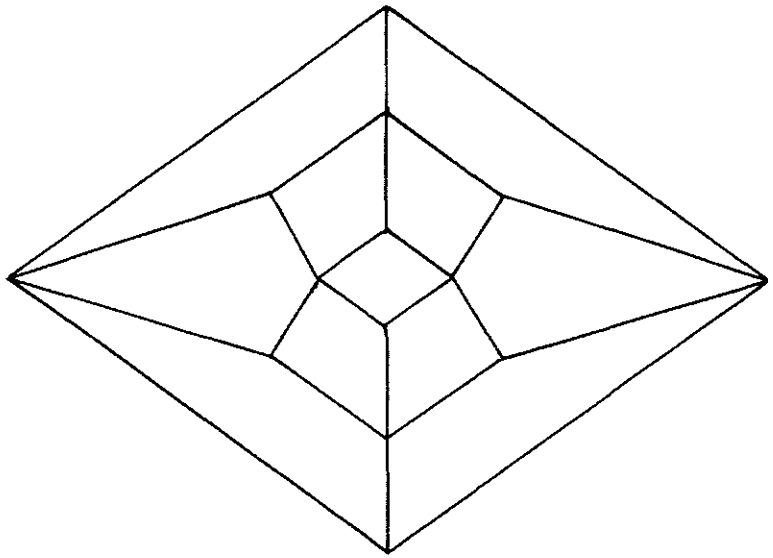
Zentralprojektion (Schlegeldiagramm): Eine in der Polyedergeometrie verwendete Projektionsart, die Zentralprojektion auf die Ebene einer Seitenfläche des Polyeders aus einem Punkt der Mittelpunktsnormalen. Sie wird in der Kristallographie nur selten verwendet. Sie dient insbesondere zur Veranschaulichung des (topologischen) Flächenzusammenhangs des Polyeders. Die parallelen Schnittgeraden von Ebenen eines Zonenverbandes werden in Geraden abgebildet, die im allgemeinen durch einen Punkt gehen (**Figur 3.18**).

Zentrische Flächendarstellung (Ebenenfigur, Flächenbündel): Für die zentrische Flächendarstellung eines Polyeders wird zu jeder Ebene des Polyeders eine Parallelebene durch einen frei gewählten Punkt, das Zentrum Z, gelegt. Parallelen Ebenen entspricht dadurch genau eine Ebene durch Z, und den Ebenen eines Zonenverbandes entsprechen Ebenen, die sich in einer Geraden in Z schneiden; sie bilden ein *Flächenbüschel* (**Figur 3.19** und **3.2a**). Die letztere Gerade ist die *Zonenachse* des entsprechenden Zonenverbandes.

Zentrische Zonenachsendarstellung (Geradenfigur, Zonenachsenbündel): Für die zentrische Zonenachsendarstellung eines Polyeders wird zu jeder Geraden (Kante) des Polyeders eine parallele Gerade durch einen frei gewählten Punkt, das Zentrum Z, gelegt. Diese Gerade ist die Zonenachse von Flächen, die sich in zu ihr parallelen Geraden schneiden. Die Gesamtheit der Zonenachsen durch Z bildet das *Zonenachsenbündel*, oder kurz *Zonenbündel*. Gibt es am Polyeder Flächen, die mehreren Zonen angehören, so liegen die entsprechenden Zonenachsen in einer Ebene und bilden ein *Zonenachsenbüschel*, oder kurz *Zonenbüschel* (**Figur 3.2b**).



Figur 3.17: *Rhombendodekaeder in orthogonaler Parallelprojektion*



Figur 3.18: *Rhombendodekaeder in Zentralprojektion (Schlegeldiagramm)*

Die zentrische Flächendarstellung und die zentrische Zonenachsendarstellung eines Kristallpolyeders gehen durch die projektiv dualen Operationen des Schneidens und Verbindens auseinander hervor, denn zwei Zonenachsen bestimmen durch ihre Verbindungsebene eine Kristallfläche, und zwei Flächen bestimmen durch ihre Schnittgerade eine Zonenachse.

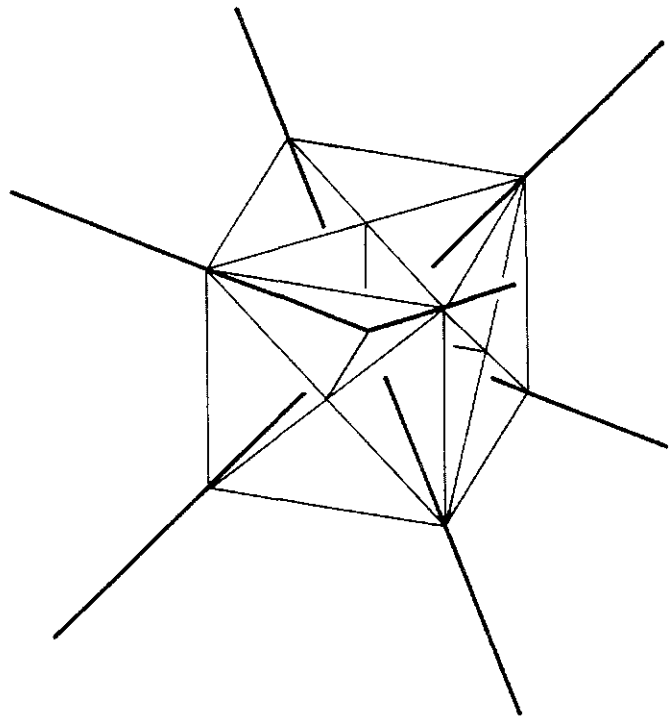
Die mit der zentrischen Flächendarstellung vereinigte zentrische Zonenachsendarstellung soll *zentrische Darstellung* eines Polyeders genannt werden.

Zentrische Flächennormalendarstellung (Polarfigur, Flächennormalenbündel): Für die zentrische Flächennormalendarstellung eines Polyeders wird durch einen frei gewählten Punkt, das Zentrum Z, zu jeder Ebene des Polyeders eine dazu senkrecht (normal) stehende Gerade gelegt (**Figur 3.20** und **3.2c**; für das Rhombendodekaeder sind dies die sechs Kantenhalbierenden des zugrunde liegenden Würfels). Jeder Fläche eines Polyeders wird dadurch genau eine Gerade in Z zugeordnet, parallelen Flächen entspricht genau eine Gerade, und Ebenen in einem Zonenverband entsprechen Geraden in einer Ebene durch Z, der *Zonenfläche* des Zonenverbandes (**Figur 3.21**). Die zu dieser Ebene senkrechte Gerade durch Z ist die *Zonenachse* dieses Zonenverbandes.

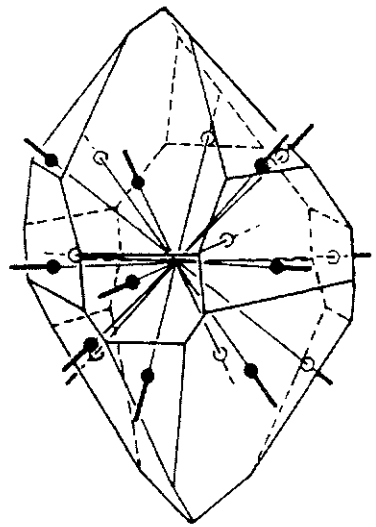
Zentrische Zonenachsennormalendarstellung oder *zentrische Zonenflächendarstellung* (Zonenflächenbündel): Für die zentrische Zonenachsennormalendarstellung eines Polyeders wird durch einen frei gewählten Punkt, das Zentrum Z, zu jeder Zonenachse des Polyeders eine dazu senkrecht liegende Ebene gelegt. Jeder Zonenachse entspricht dadurch genau eine Ebene durch Z, die *Zonenfläche*, *Zonennormale* oder *Zonenachsennormalebene*. Die Gesamtheit dieser Ebenen bilden das *Zonenflächenbündel*. Liegen mehrere Zonenachsen in einer Fläche, so bilden die entsprechenden Zonenflächen ein Büschel, das *Zonenflächenbüschel*, dessen Trägergerade eine Flächennormale ist.

Die zentrische Flächennormalendarstellung und die zentrische Zonenachsennormalendarstellung gehen durch die projektiv dualen Operationen des Schneidens und Verbindens auseinander hervor, denn zwei Zonenachsennormalebenen bestimmen durch ihre Schnittgerade eine Flächennormale, und zwei Flächennormalen bestimmen durch ihre Verbindungsebene eine Zonenachsennormalebene. Die mit der zentrischen Flächennormalendarstellung vereinigte zentrische Zonenachsennormalendarstellung soll *zentrische Normalendarstellung* eines Polyeders genannt werden.

Die zentrische Flächennormalendarstellung und die zentrische Zonenachsennormalendarstellung eines Polyeders sind polar bezüglich der Rechtwinkelinvolution im Bündel Z zur zentrischen Flächendarstellung bzw. zur zentrischen Zonenachsendarstellung desselben Polyeders und folglich jeweils *projektiv dual* zu denselben.



Figur 3.19: *Zentrische Flächendarstellung und Zonenachsendarstellung des Rhombendodekaeders der Figur 3.17*



Figur 3.20: *Zentrische Flächennormalendarstellung eines Quarzkristalls vom Typus der Figur 3.1*

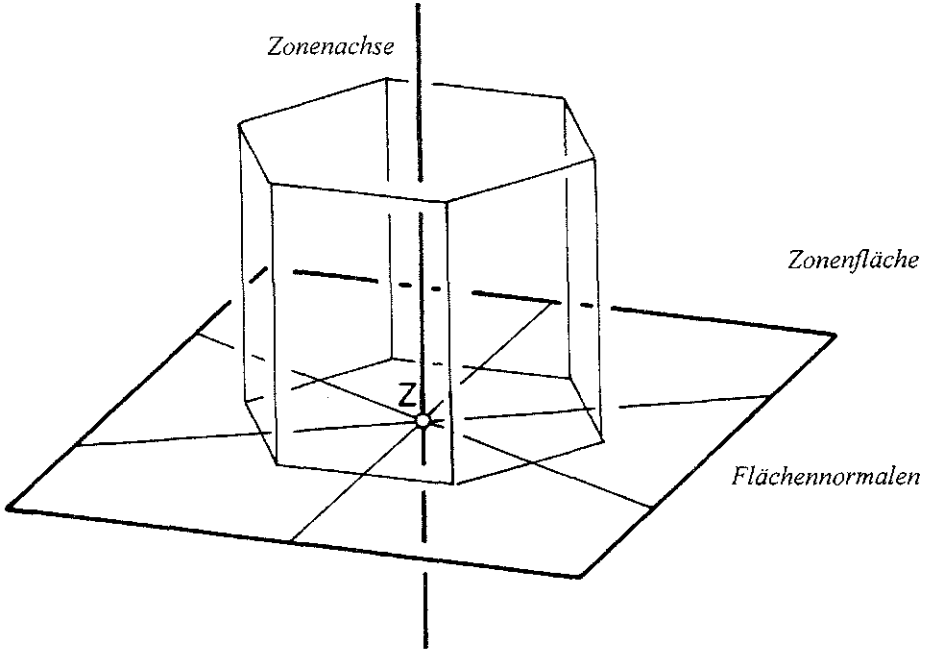
Mehrfache Darstellungen von Kristallen und Polyedern

Alle bisher genannten Projektionen haben den Nachteil, daß sie die vom geometrischen und kristallographischen Gesichtspunkt aus wichtigen Zonenverbände und Winkelverhältnisse nicht übersichtlich, eindeutig und direkt ausmeßbar auf einer Zeichenebene (oder Meßtisch) zum Ausdruck bringen. Aus diesem Grunde verwendet man in der Kristallographie und Polyedergeometrie meist mehrfache Darstellungen, die auch *schematische Darstellungen* genannt werden. Bei mehrfachen Darstellungen geht das Resultat, das Abbild, aus dem Original (Urbild) aus zwei (oder mehreren) hintereinander ausgeführten Darstellungsverfahren hervor.

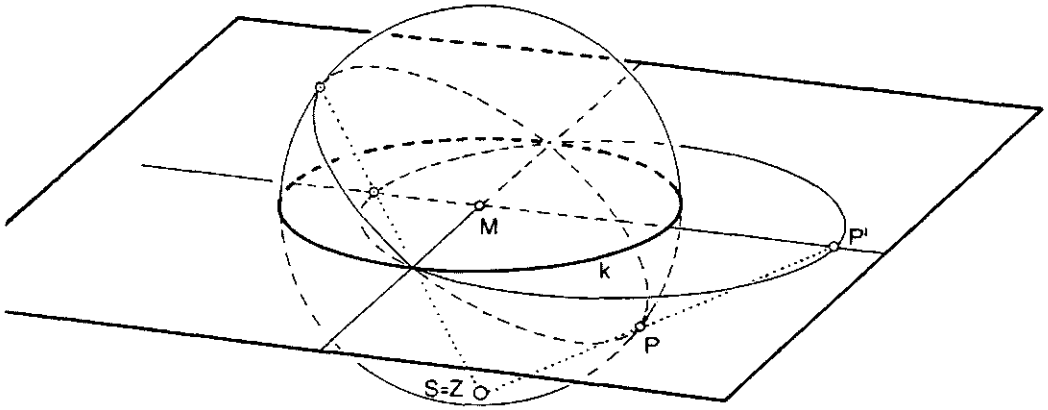
Sphärischer Schnitt der zentrischen Flächennormalendarstellung (Polfigur): Die Geraden der zentrischen Flächennormalendarstellung eines Polyeders werden mit einer Sphäre mit Zentrum Z geschnitten (**Figur 3.24**). Jeder Fläche des Polyeders wird dadurch genau ein Punkt auf der Sphäre zugeordnet. Dieser Punkt heißt der *Flächenpol* oder kurz der *Pol* der entsprechenden Polyederfläche. Die alle diese Pole enthaltende Sphäre heißt *Polkugel*. Parallelen Flächen entspricht ein Diametralpunktepaar, und einem Zonenverband entsprechen Punkte auf einem Großkreis, dem sogenannten *Zonenkreis*. Die *Zonenachse* ist senkrecht auf dem Zonenkreis und schneidet die Sphäre in den diametralen *Polen des Zonenkreises*. Diese Darstellung führt auf die sogenannte *Polfigur* eines Polyeders.

Sphärischer Schnitt der zentrischen Zonenachsennormalendarstellung: Die Geraden der zentrischen Zonenachsennormalendarstellung eines Polyeders werden mit einer Sphäre mit Zentrum Z geschnitten. Jeder Zonenachsennormalen, das heißt jeder Zonenfläche des Polyeders, wird dadurch genau ein Großkreis der Sphäre zugeordnet. Einem Zonenflächenbüschel entspricht ein Großkreisbüschel, dessen Trägerpunkte (Diametralpunkte) die Pole der auf der Trägergeraden des Zonenflächenbüschels normalen Polyederfläche sind.

Stereographische Projektion: Die Zentralprojektion einer Sphäre mit Mittelpunkt M aus einem Punkt Z der Sphäre auf eine nicht durch Z gehende Ebene heißt *stereographische Projektion* (**Figur 3.22**). Als Projektionsebene ζ wird meist die dem Projektionszentrum Z entsprechende Äquatorebene verwendet, das heißt diejenige Ebene durch den Mittelpunkt M der Sphäre, welche senkrecht auf MZ steht und die Sphäre im Äquatorkreis k schneidet; dabei liegt das Projektionszentrum «unter» der Zeichenebene im «Südpol» Z oder S. Dies bedeutet, daß M und der entsprechende Äquatorkreis k in der Projektionsebene ζ liegen sowie die «oberhalb» ζ liegende Sphäre «innerhalb» des Äquatorkreises k abgebildet wird. Letzterer heißt der *Grundkreis* der stereographischen Projektion. Jeder nicht durch Z gehende Großkreis der Sphäre bildet sich auf einen Kreis ab, der den Grundkreis in den Endpunkten eines Durchmessers schneidet. Dieser Durchmesser heißt *Sehne* des entsprechenden Kreises. Die Bilder der Großkreise durch Z sind die Durchmesser des Grundkreises.



Figur 3.21: *Zonenachse und Zonenfläche*



Figur 3.22: *Stereographische Projektion einer Sphäre*

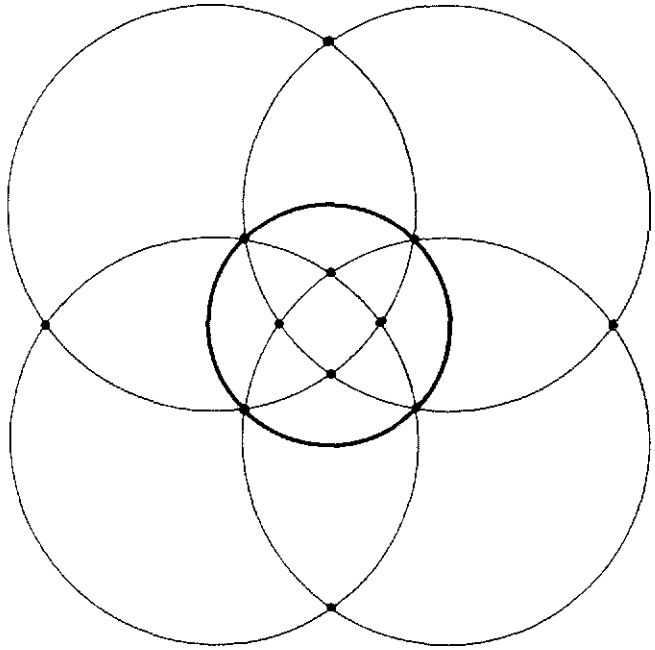
Die stereographische Projektion ist eine *konforme*, das heißt *winkeltreue* Abbildung der Sphäre auf die Projektionsebene ζ. Außerdem werden alle Kreise auf der Sphäre, außer den Kreisen durch Z, die zu Geraden werden, wieder in Kreise abgebildet. Großkreise durch Z werden in Geraden durch M abgebildet (ohne Beweis; siehe dazu Bigalke [1984], Kapitel 5.5).

Stereographische Projektion der Polfigur: Die stereographische Projektion der Polfigur eines Polyeders hat zur Folge, daß nicht durch Z gehende Zonenkreise wieder in Kreise abgebildet werden (**Figur 3.22**, **3.23**). Verschiedene Zonenkreise, die zu einer Polyederfläche gehören, bilden sich in ein Büschel von Zonenkreisen ab. Zonenachsen können durch Geraden repräsentiert werden, welche senkrecht zur Sehne des entsprechenden Zonenkreises sind. Großkreise durch Z bilden sich in Durchmessern des Grundkreises ab (**Figur 3.25**, **3.26**).

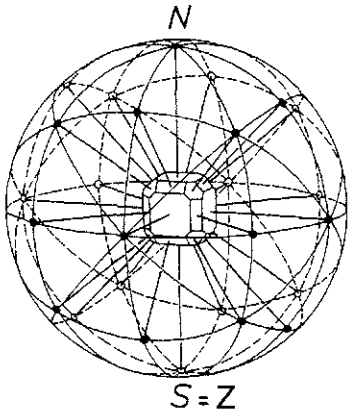
Die stereographische Projektion der Polfigur eines Polyeders ist die einzige ebene Polyederdarstellung, welche mindestens vom halben Polyeder ein in einem endlichen Teil der Ebene liegendes Abbild liefert.

Zur Darstellung des gesamten Polyeders wird in der Kristallgeometrie oftmals der «untere» Teil desselben aus dem «Nordpol» N und der «obere» Teil aus dem «Südpol» S projiziert, wobei dann beide Projektionen innerhalb des Grundkreises zu liegen kommen und zusammengehörige Großkreisteile sich in den Endpunkten eines Durchmessers des Grundkreises treffen (**Figur 3.25**, **3.26**).

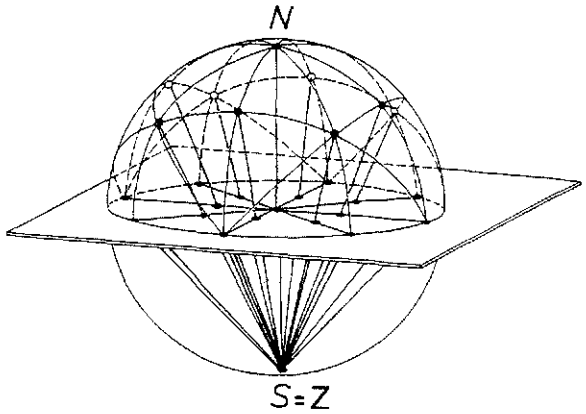
Manchmal wird in der Kristallographie auch die stereographische Projektion der Polfigur eines Kristallpolyeders abkürzend mit «stereographische Projektion des Kristallpolyeders» benannt.



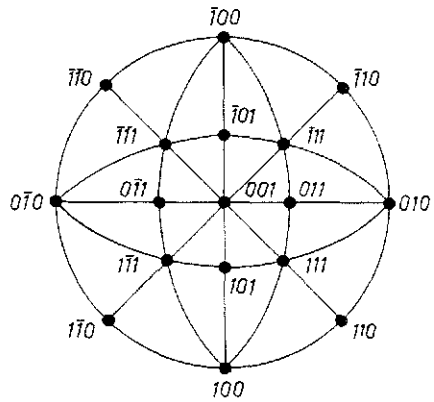
Figur 3.23: *Stereographische Projektion der Polfigur eines Rhombendodekaeders*



Figur 3.24: *Polyeder im Zentrum einer Sphäre. Die Flächennormalen schneiden die Sphäre in Flächenpolen*



Figur 3.25: *Stereographische Projektion der Flächenpole des Polyeders der Figur 3.24*



Figur 3.26: *Stereographische Projektion der Polfigur des Polyeders der Figur 3.24*

Verhältnis der stereographischen Projektion der Polfigur zur orthogonalen Parallelprojektion eines Polyeders: Die Kantenrichtungen (Zonenachsen) der orthogonalen Parallelprojektion eines Polyeders auf die Ebene der stereographischen Projektion desselben Polyeders stehen senkrecht auf den Sehnen des zu den Kantenrichtungen gehörigen Zonenkreises.

Gnomonische Projektion: Die Zentralprojektion einer Sphäre aus dem Mittelpunkt *M* der Sphäre auf eine Tangentialebene derselben heißt *gnomonische Projektion*. Der gemeinsame Berührungspunkt der Sphäre mit der Projektionsebene heißt *Pol* oder *Scheitel* der gnomonischen Projektion. Der Kreis mit Zentrum im Scheitel und mit demselben Radius wie die Sphäre heißt *Grundkreis* der gnomonischen Projektion. Alle Großkreise der Sphäre werden auf Geraden abgebildet; die Bilder der Großkreise durch den Scheitel heißen *Meridiane* oder *Radialzonen*. Die Breitenkreise werden auf konzentrische Kreise um den Zentralpunkt abgebildet. Alle übrigen Kleinkreise werden in Kegelschnitte abgebildet, und zwar in Ellipsen, wenn die Kleinkreise ganz in der «oberen» oder «unteren» Hälfte der Sphäre liegen, in Parabeln, wenn die Kleinkreise den «Äquator» der Sphäre berühren, und in Hyperbeln, wenn sie den «Äquator» in zwei Punkten schneiden.

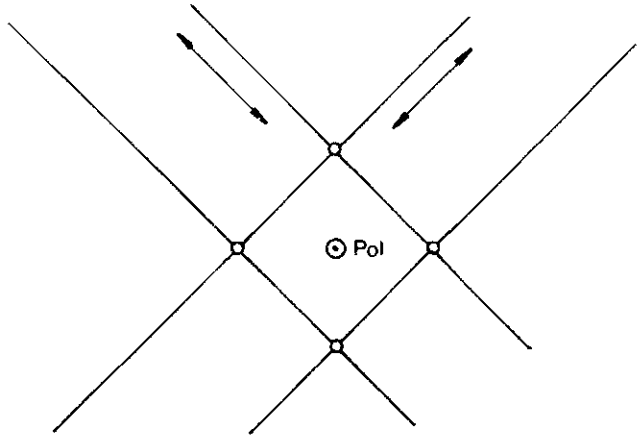
Gnomonische Projektion der Polfigur: Bei der gnomonischen Projektion der Polfigur (**Figur 3.24**) eines Polyeders werden alle Großkreise der Sphäre und damit alle Zonenkreise auf Geraden, die sogenannten *Zonenlinien*, abgebildet (**Figur 3.27**). Polyederflächen derselben Zone bilden sich ab als Punkte auf einer Geraden und verschiedene Zonen einer Polyederfläche als Büschel von Zonenlinien durch einen Punkt. Die Zonenachsen können als Geraden repräsentiert werden, die durch den Scheitelpunkt gehen und die entsprechende Zonenlinie senkrecht schneiden.

Die gnomonische Projektion teilt mit den übrigen Polyeder-Darstellungen den Nachteil, daß sie kein endlich begrenztes Abbild mindestens der einen Hälfte dieses Polyeders liefert.

Verhältnis der gnomonischen Projektion der Polfigur zur orthogonalen Parallelprojektion eines Polyeders: Die Kantenrichtungen (Zonenachsen) der orthogonalen Parallelprojektion eines Polyeders auf die Ebene der gnomonischen Projektion desselben Polyeders stehen senkrecht auf den zu den Kantenrichtungen gehörigen Zonenlinien.

Verhältnis der gnomonischen und der stereographischen Projektion der Polfigur eines Polyeders: Die Zonenkreise der Polfigur eines Polyeders werden gnomonisch auf Geraden (Zonenlinien) abgebildet, die parallel sind zu den Sehnen der stereographischen Bilder derselben Zonenkreise. Entsprechend sind die Repräsentierungen derselben Zonenachse in beiden Abbildungen ebenfalls zueinander parallel und senkrecht auf den entsprechenden Zonenlinien bzw. Sehnen.

Schiefe oder orthogonale Parallelprojektion der Polfigur: Bei einer schiefen oder orthogonalen Parallelprojektion einer Polfigur gehen Großkreise im allgemeinen in Ellipsen über, so daß Zonenkreisen in der Polfigur kein einfaches Abbild entspricht. Deshalb wird diese Projektion kaum verwendet.



Figur 3.27: *Gnomonische Projektion der Polfigur eines Rhombendodekaeders*

LINEARPROJEKTION: *Ebener Schnitt der zentrischen Flächendarstellung*: Der Schnitt einer zentrischen Flächendarstellung eines Polyeders mit einer Ebene, die nicht durch das Zentrum der zentrischen Darstellung geht, liefert ein lineares Liniengebilde, welches zusammen mit seinen Schnittpunkten (das ist der *ebene Schnitt der zentrischen Zonenachsendarstellung*) eine Teilmenge eines Möbiusnetzes bildet (Abschnitt 3.2 und **Figur 3.9c**). Den Ebenen eines Zonenverbandes entsprechen Geraden durch einen Punkt, dem Schnittpunkt der Zonenachse mit der Darstellungsebene (**Figur 3.28**). Verschiedenen Zonen, die einer Fläche angehören, entsprechen Punkte, die auf einer Geraden liegen.

Ebener Schnitt der zentrischen Flächennormalendarstellung: Der Schnitt einer zentrischen Flächennormalendarstellung eines Polyeders mit einer Ebene, die nicht durch das Zentrum der zentrischen Darstellung geht, liefert ein lineares Punktgebilde, welches zusammen mit seinen Verbindungsgeraden (das ist der *ebene Schnitt der zentrischen Zonenachsennormalendarstellung*) eine Teilmenge eines Möbiusnetzes bildet. Den Ebenen eines Zonenverbandes entsprechen Punkte auf einer Geraden, der Schnittgeraden der Zonenfläche mit der Darstellungsebene. Verschiedenen Zonen, die einer Fläche angehören, entsprechen Geraden eines Büschels durch einen Punkt, den Schnittpunkt der Flächennormalen.

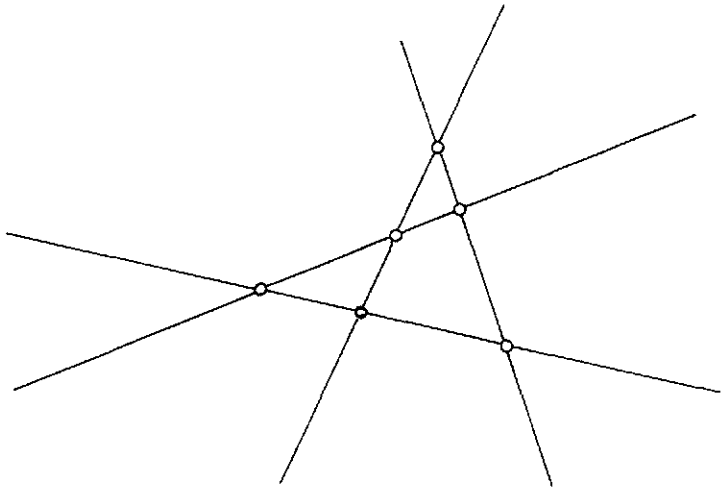
Der ebene Schnitt einer zentrischen Flächennormalendarstellung eines Polyeders ist zweidimensional *projektiv dual* zum ebenen Schnitt einer zentrischen Flächendarstellung desselben Polyeders.

Der ebene Schnitt einer zentrischen Flächennormalendarstellung eines Polyeders mit einer Ebene ζ ist *polar* zum Schnitt der zentrischen Flächendarstellung desselben Polyeders mit derselben Ebene ζ bezüglich der durch die Rechtwinkelinvolution im Zentrum Z induzierten elliptischen Geometrie in ζ.

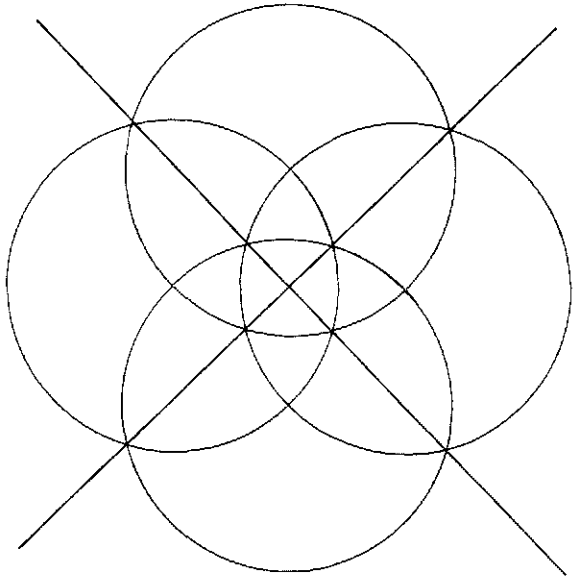
Der ebene Schnitt einer zentrischen Flächennormalendarstellung eines Polyeders ist gleichbedeutend mit der gnomonischen Projektion der Polfigur desselben Polyeders (**Figur 3.27**).

Sphärischer Schnitt der zentrischen Flächendarstellung: Der sphärische Schnitt der zentrischen Flächendarstellung liefert ein sphärisches Abbild der zentrischen Flächendarstellung. Den Ebenen eines Zonenverbandes, das heißt einem Flächenbüschel, entsprechen Großkreise eines Großkreisbüschels, dessen Kreise durch die Schnittpunkte (Diametralpunkte) der Sphäre mit der Zonenachse gehen.

Sphärischer Schnitt der zentrischen Zonenachsendarstellung: Der sphärische Schnitt der zentrischen Zonenachsendarstellung liefert ein sphärisches Abbild der zentrischen Zonenachsendarstellung, das heißt ein sphärisches Bild der Polyederkanten. Verschiedenen Zonen, die einer Fläche des Polyeders angehören, das heißt einem Zonenachsenbüschel, entsprechen Punkte auf einem Großkreis.



Figur 3.28: *Linearprojektion: Beliebiger ebener Schnitt der zentrischen Flächendarstellung eines Rhombendodekaeders*



Figur 3.29: *Stereographische Projektion des sphärischen Schnitts der zentrischen Flächendarstellung eines Rhombendodekaeders*

Diese sphärischen Darstellungen können mit Hilfe von Parallelprojektionen sowie stereographischen (**Figur 3.29**) oder gnomonischen Projektionen in eine Ebene abgebildet werden. Zweitere heißen in der geometrischen Kristallographie auch *zyklographische Projektionen*. Letztere Darstellung ist gleichbedeutend mit dem ebenen Schnitt der zentrischen Flächendarstellung bzw. dem ebenen Schnitt der zentrischen Zonenachsendarstellung, das heißt mit der Linearprojektion (**Figur 3.28**).

Der sphärische Schnitt der zentrischen Flächendarstellung heißt bezüglich der sphärischen Geometrie *sphärisch reziprok* (oder sphärisch polar) zum sphärischen Schnitt der zentrischen Flächennormalendarstellung.

Zentralprojektionen sphärischer Darstellungen einfacher Polyederdarstellungen auf eine Ebene mit einem nicht auf der Sphäre oder im Mittelpunkt der Sphäre liegenden Projektionszentrum liefern wenig brauchbare Abbilder, da Kreise auf der Sphäre im allgemeinen in Ellipsen abgebildet werden.

Abwicklungsdarstellung von Kristallen und Polyedern

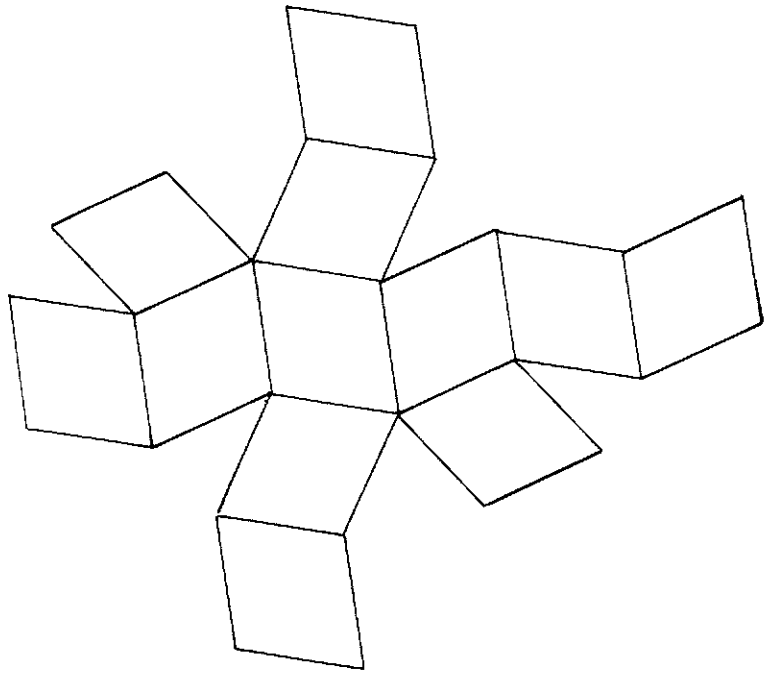
Durch Aufschneiden eines Polyeders entlang gewisser Kanten können die Flächen (Polygone) vollständig in eine Ebene gelegt werden. Dadurch erhält man eine *Abwicklung* oder ein *Netz* des Polyeders (**Figur 3.30**). Dies kann auf verschiedene Weisen geschehen, je nachdem, welche Kanten man aufschneidet. Es muß nur darauf geachtet werden, daß am Schluß alle Flächen miteinander zusammenhängen, das heißt, daß die Abwickelung nicht in mehrere Teile zerfällt. Diese Darstellung ist besonders für den Modellbau von Polyedern wichtig.

Literaturhinweise

Abschnitt 3.1: Eine kurze Diskussion der klassischen kristallographischen Grundgesetze findet sich in den einführenden Kapiteln jedes Lehrbuches der Kristallographie. Es soll insbesondere auf Borchardt-Ott [1997], Kleber [1990], Niggli [1924], [1941], Raaz/Tertsch [1958], Rösler [1991] verwiesen werden. – Besonders hervorzuheben in diesem Zusammenhang ist das in allen geometrischen Aspekten der Kristallmorphologie sehr präzise und gründliche Werk von Fischer [1955]. Siehe dazu auch Bigalke [1984], Kapitel 9. – Die Beziehungen zur projektiven Geometrie werden ausführlich diskutiert in Liebisch [1881], [1896] und Liebisch [1906].

Abschnitt 3.2: Siehe insbesondere Burzlaff/Zimmermann [1977], Kapitel II 2.2 und Fischer [1955], Kapitel IV. Einen sehr anschaulichen Zugang zu den Millerschen Indizes findet man in Offermann [1999]. Dort findet man auch Indizierungen mannigfaltiger Kristallpolyeder.

Abschnitt 3.3: Verschiedene Darstellungstechniken für (Kristall-)Polyeder werden zum Beispiel diskutiert in Bigalke [1984], Boeke [1911], [1913], Raaz/Tertsch [1958], Tertsch [1935], [1954]. Für die geometrischen Grundlagen siehe etwa Klix/Nickel [1990].



Figur 3.30: *Abwicklungs- oder Netzdarstellung eines Rhombendodekaeders*

4. KRISTALL- UND POLYEDERSYMMETRIEN

In diesem Kapitel geht es darum, die *Symmetrien eines Polyeders,* insbesondere die *Symmetrien von Kristallpolyedern,* in ein präzises und prägnantes mathematisches Kleid zu fassen. Für letztere müssen die Untersuchungen auf Tangentialpolyeder, das heißt auf Tangentialdarstellungen von allgemeinen Kristallpolyedern, also auf deren Flächen*lagen,* beschränkt und die realen Flächen eines konkreten Kristallkörpers außer acht gelassen werden. *Tangentialpolyeder* sind Polyeder, welche durch Parallelverschiebung aller Flächen eines Kristallpolyeders tangential an eine Sphäre im Innern des Kristallkörpers entstehen (Abschnitt 3.3).

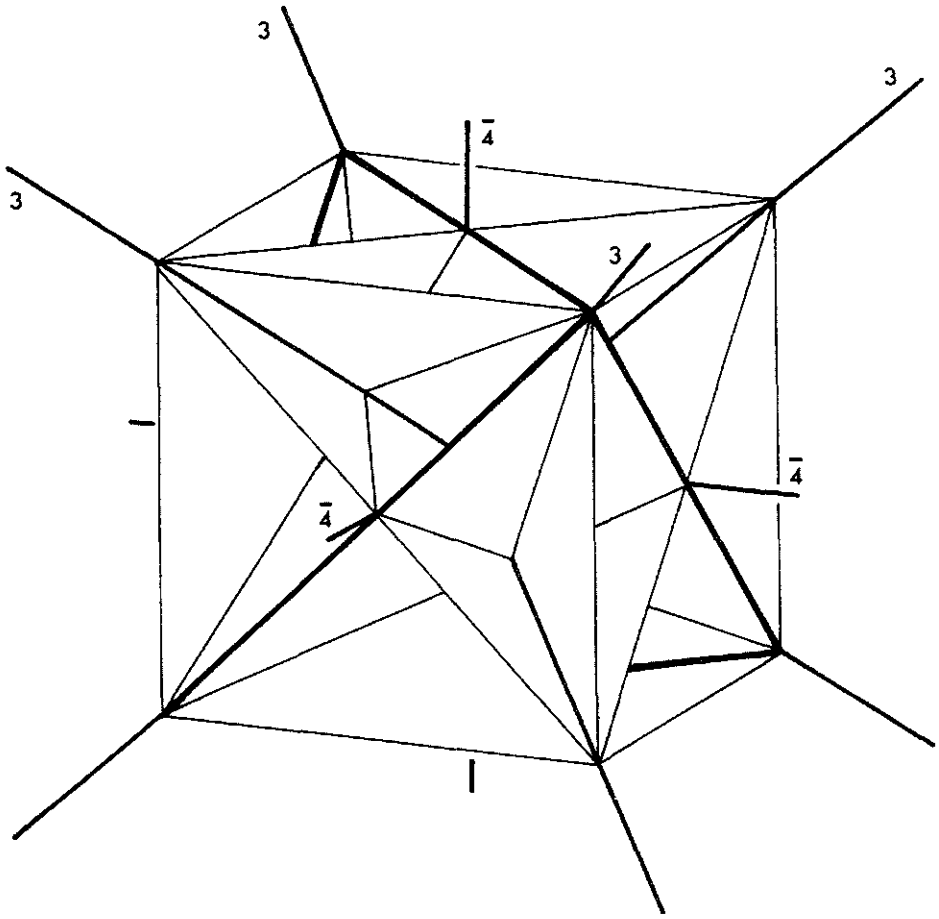
Im Falle der «Kristallpolyeder» ist im folgenden immer das entsprechende Tangentialpolyeder gemeint, falls das Kristallpolyeder nicht selbst schon eine Inkugel besitzt. Gemäß dem *Kristallsymmetriegesetz* sind solche Tangentialpolyeder symmetrisch bezüglich Operationen, die deren Mittelpunkt oder Zentrum, auch invarianter Punkt oder Fixpunkt genannt, fest lassen.

4.1 *Symmetrieoperationen und Symmetrieelemente*

Unter *Symmetrieoperationen* eines Polyeders (Tangentialpolyeder) versteht man abstands- und winkeltreue Bewegungen des Polyeders, welche dieses und damit auch seinen Mittelpunkt mit sich selbst zur Deckung bringen (Isometrien oder Deckbewegungen mit Fixpunkt). Diese Symmetrieoperationen sind *diskret* oder «plötzlich», also keine *kontinuierlichen,* stetigen Bewegungen. Als Symmetrieoperationen kommen in Frage: Identität, Drehung um eine Achse durch den Mittelpunkt mit festem Winkel, Spiegelung an einer Ebene oder einer Geraden durch den Mittelpunkt, Spiegelung am Mittelpunkt (Inversion) und deren Zusammensetzungen.

Eine nähere Untersuchung zeigt, daß man alle diese einen Punkt (Fixpunkt) invariant lassenden Symmetrieoperationen durch Drehungen mit festem Winkel und Drehinversionen mit festem Winkel in diesem Punkt (das heißt Zusammensetzungen von Drehungen mit festem Winkel und Inversionen im Fixpunkt) erzeugen kann. So ist eine Spiegelung an einer Geraden äquivalent mit einer Drehung um 180° und eine Spiegelung an einer Ebene äquivalent mit einer Drehinversion mit Drehwinkel 180° um eine auf der Spiegelebene senkrecht stehende Achse.

Es lassen sich zudem sämtliche Symmetrieoperationen durch Spiegelungen an Ebenen durch den Fixpunkt erzeugen. So erzeugt ein Spiegelebenenpaar mit Zwischenwinkel α eine Drehung um 2α um die Schnittgerade der beiden Ebenen, und drei paarweise senkrecht aufeinander stehende Ebenen erzeugen eine Inversion durch den gemeinsamen Punkt der drei Ebenen.



Figur 4.1a: *Symmetrieelemente des Tetraeders: Symmetriegerüst der Gruppe* **OT** $\equiv T_d$

Unter einem *Symmetrieelement* versteht man das den entsprechenden Symmetrieoperationen zugrunde liegende geometrische Element. Bei den Drehungen sind dies die Achsen und bei den Spiegelungen die spiegelnden Elemente Ebene, Gerade, Punkt. Die Gesamtheit der Symmetrieelemente aller möglichen Symmetrieoperationen eines Polyeders heißt *Symmetriegerüst.* In **Figur 4.1a** sind sämtliche Symmetrieelemente aller Symmetrien, eben das Symmetriegerüst, des regulären Tetraeders eingezeichnet, in **Figur 4.1b** nur die Symmetrieebenen und in **Figur 4.1c** die dazugehörige stereographische Projektion.

Die Symmetrieoperationen eines Polyeders sind *zyklisch*, das heißt, sie bringen das Polyeder nach einer endlichen Anzahl von Bewegungen in die Ausgangslage zurück. Diese Anzahl heißt *Periode* oder *Zähligkeit* der entsprechenden Bewegung.

Gemäß der aus dem Kristallographischen Grundgesetz folgenden kristallographischen Einschränkung (Abschnitt 3.1) kommen für Kristallpolyeder als Perioden nur die Zahlen 2, 3, 4 und 6 in Frage. Man bezeichnet dementsprechend die möglichen Drehachsen und ihre entsprechenden Operationen mit den Drehwinkeln 360°/2, 360°/3, 360°/4, 360°/6 beziehungsweise mit

$$\mathbf{2}, \mathbf{3}, \mathbf{4}, \mathbf{6}$$

und die Drehinversionen mit ihren Operationen und mit denselben Drehwinkeln mit

$$\bar{\mathbf{2}}, \bar{\mathbf{3}}, \bar{\mathbf{4}}, \bar{\mathbf{6}}.$$

Mit **1** wird die *Identität* ε und mit $\bar{\mathbf{1}}$ die *Inversion* an einem Zentrum **Z** bezeichnet. Weiter ist $\bar{\mathbf{2}}$ gleich der *Ebenenspiegelung* **m** (*mirror reflection*) um die auf der Drehinversionsachse von $\bar{\mathbf{2}}$ senkrecht stehende Ebene und **2** gleich der *Geradenspiegelung* an derselben Achse von **2**.

Bezeichnet man die Zusammensetzung von Symmetrieoperationen mit denselben Symmetrieelementen durch «Multiplikation» der entsprechenden Symbole, so erhält man für Drehungen etwa

$$\mathbf{4}^2 = \mathbf{4} \circ \mathbf{4} = \mathbf{2}$$

$$\mathbf{6}^2 = \mathbf{6} \circ \mathbf{6} = \mathbf{3}, \quad \mathbf{6}^3 = \mathbf{6} \circ \mathbf{6} \circ \mathbf{6} = \mathbf{2}, \quad \mathbf{6}^4 = \mathbf{6} \circ \mathbf{6} \circ \mathbf{6} \circ \mathbf{6} = \mathbf{3}^2$$

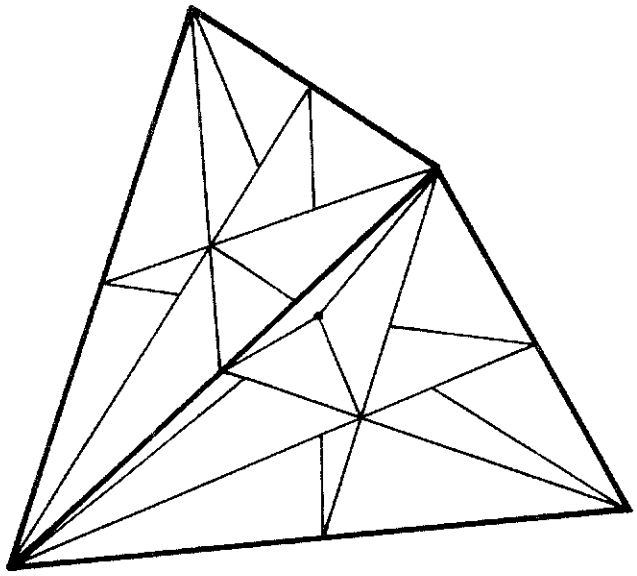
und weiter für Drehinversionen

$$\bar{\mathbf{3}}^2 = \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} = \mathbf{3}^2, \quad \bar{\mathbf{3}}^3 = \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} = \bar{\mathbf{1}}, \quad \bar{\mathbf{3}}^4 = \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} \circ \bar{\mathbf{3}} = \mathbf{3}$$

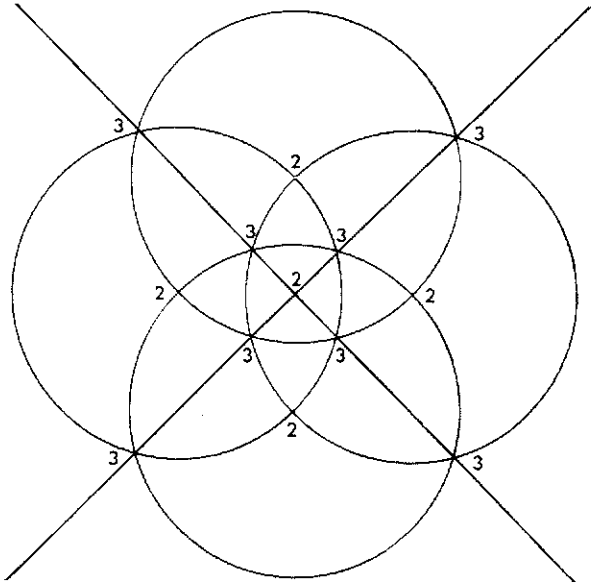
$$\bar{\mathbf{4}}^2 = \bar{\mathbf{4}} \circ \bar{\mathbf{4}} = \mathbf{2}$$

$$\bar{\mathbf{6}}^2 = \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} = \mathbf{3}, \quad \bar{\mathbf{6}}^3 = \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} = \bar{\mathbf{2}} = \mathbf{m}, \quad \bar{\mathbf{6}}^4 = \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} \circ \bar{\mathbf{6}} = \mathbf{3}^2.$$

Damit wird deutlich, daß Zusammensetzungen von Symmetrieoperationen mit denselben Symmetrieelementen wieder Symmetrieoperationen sind. Es läßt sich leicht einsehen, daß auch die Zusammensetzung von beliebigen Symmetrieoperationen mit einem Fixpunkt wieder solche Symmetrieoperationen sind. Diese Symmetrieoperationen bilden dann eine in sich *abgeschlossene Menge* von Operationen. Dies ist eine der wesentlichen Eigenschaften einer *Gruppe* von Symmetrieoperationen. Dieser Begriff wird im folgenden Abschnitt eingeführt und näher beleuchtet.



Figur 4.1b: *Tetraeder, geschnitten mit seinen Symmetrieebenen*



Figur 4.1c: *Stereographische Projektion der sphärischen Darstellung der Symmetrieelemente des Tetraeders*

4.2 *Gruppen von Symmetrieoperationen*

Der Gruppenbegriff

Der Gruppenbegriff ist einer der wichtigsten und weitreichendsten Begriffe der mathematischen Symmetrietheorie.

Die Zusammensetzung oder «Multiplikation» $\sigma_1 \circ \sigma_2 \circ \sigma_3 \circ \ldots$ zweier oder mehrerer Symmetrieoperationen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \ldots$ ist wieder eine Symmetrieoperation. Dies bedeutet, daß die Menge der Symmetrieoperationen $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \ldots\}$ bezüglich der Zusammensetzung *abgeschlossen* ist.

Die Zusammensetzung heißt auch das *Produkt* der Symmetrieoperationen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \ldots$. Dabei spielt es keine Rolle, ob zuerst $(\sigma_1 \circ \sigma_2)$ ausgeführt wird oder $(\sigma_2 \circ \sigma_3)$, das heißt, es gilt das Gesetz der *Assoziativität* für alle Symmetrie operationen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$:

$$(\sigma_1 \circ \sigma_2) \circ \sigma_3 = \sigma_1 \circ (\sigma_2 \circ \sigma_3) = \sigma_1 \circ \sigma_2 \circ \sigma_3.$$

Die *Identität* ε (Neutralelement, Einselement; hier bei den Symmetrieoperationen von Polyedern ist dies die Drehung **1** um $n \cdot 360°$ mit $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$) ist selbst eine Symmetrieoperation und es gilt für jede Symmetrieoperation σ :

$$\sigma \circ \varepsilon = \varepsilon \circ \sigma = \sigma.$$

Weiter gibt es zu jeder Symmetrieoperation σ eine *inverse* Symmetrieoperation σ^{-1} (inverses Element), so daß

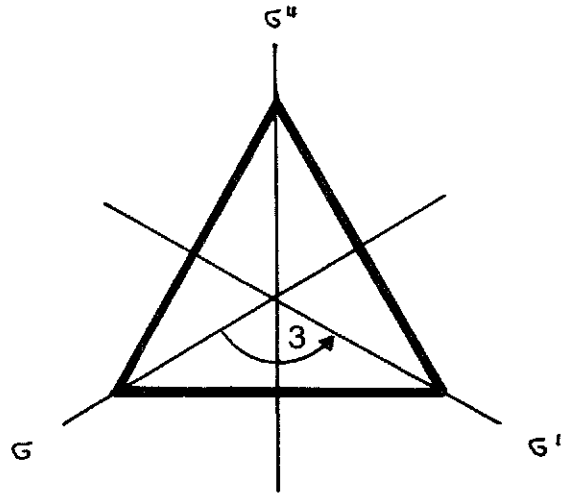
$$\sigma \circ \sigma^{-1} = \sigma^{-1} \circ \sigma = \varepsilon.$$

Eine Menge von Symmetrieoperationen $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \ldots\}$ mit diesen Eigenschaften heißt eine konkrete *Gruppe von Symmetrieoperationen*. Oft wird das Verknüpfungszeichen $\circ$ der Einfachheit halber weggelassen.

Zum Beispiel gilt in der Gruppe $\{\mathbf{1}, \mathbf{2}\}$ der Drehungen um 180° die Beziehung $\mathbf{2}^{-1} = \mathbf{2}$ und in der Gruppe $\{\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{3}^2\}$ der Drehungen um 120° $\mathbf{3}^2 = \mathbf{3}^{-1}$.

Ein weiteres Beispiel: die Gruppe aller Symmetrieoperationen eines gleichseitigen Dreiecks (**Figur 4.2**). Alle Symmetrieoperationen lassen den Mittelpunkt dieses Dreiecks invariant. Die Gruppe enthält (als Untergruppe) die *Drehungen* **1**, **3**, $\mathbf{3}^2$ sowie die *Spiegelungen* σ, σ', σ'' an den drei Geraden durch den Mittelpunkt und eine der drei Ecken des Dreiecks. Werden die Gruppenoperationen von links nach rechts gelesen, so gilt $\sigma' = \mathbf{3} \circ \sigma$ und $\sigma'' = \mathbf{3}^2 \circ \sigma$. Damit hat diese Gruppe die Elemente $\{\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{3}^2, \sigma, \mathbf{3} \circ \sigma, \mathbf{3}^2 \circ \sigma\}$.

Weiter gilt $\sigma \circ \mathbf{3} = \mathbf{3}^2 \circ \sigma$ und $\sigma^2 = \mathbf{1}$. Daraus ergibt sich **TABELLE 4.1**, die sogenannte *Gruppentafel* (das Verknüpfungszeichen $\circ$ wird weggelassen).



Figur 4.2: *Dreieck*

	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{3}^2$	σ	$\mathbf{3}\sigma$	$\mathbf{3}^2\sigma$
$\mathbf{1}$	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{3}^2$	σ	$\mathbf{3}\sigma$	$\mathbf{3}^2\sigma$
$\mathbf{3}$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{3}^2$	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}\sigma$	$\mathbf{3}^2\sigma$	σ
$\mathbf{3}^2$	$\mathbf{3}^2$	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{3}^2\sigma$	σ	$\mathbf{3}\sigma$
σ	σ	$\mathbf{3}^2\sigma$	$\mathbf{3}\sigma$	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}^2$	$\mathbf{3}$
$\mathbf{3}\sigma$	$\mathbf{3}\sigma$	σ	$\mathbf{3}^2\sigma$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{1}$	$\mathbf{3}^2$
$\mathbf{3}^2\sigma$	$\mathbf{3}^2\sigma$	$\mathbf{3}\sigma$	σ	$\mathbf{3}^2$	$\mathbf{3}$	$\mathbf{1}$

TABELLE 4.1: *Gruppentafel aller Symmetrieoperationen eines gleichseitigen Dreiecks*

Bestimmung von Gruppen

Eine sogenannte *abstrakte Gruppe* ist eine Menge von nicht weiter festgelegten Elementen (dies können Symmetrieoperationen, Zahlen etc. sein), für die eine Verknüpfung («Multiplikation», «Zusammensetzung», «Produkt») festgelegt ist, für welche gilt, daß die Verknüpfung zweier oder mehrerer Elemente der Menge wieder ein Element derselben Menge ist (Abgeschlossenheit); weiter gilt das Assoziativitätsgesetz und die Menge muß genau ein Einselement ε (auch Neutralelement genannt) und genau ein inverses Element σ^{-1} für jedes Element σ der Menge enthalten, so daß gilt $\sigma \circ \sigma^{-1} = \sigma^{-1} \circ \sigma = \varepsilon$.

Abstrakte Gruppen mit endlich vielen Elementen, sogenannte *endliche Gruppen*, können durch ihre *Gruppentafel*, das heißt durch die Angabe aller Elemente und deren Verknüpfungen eindeutig bestimmt werden. Betrachtet man im obigen Beispiel der Symmetriegruppe eines regulären 3-Prismas nur die Operationen ohne ihre geometrische Bedeutung (mit $\mathbf{1} \equiv \varepsilon$), so bestimmen diese durch ihre in der Gruppentafel festgelegten Beziehungen eindeutig eine spezielle abstrakte Gruppe. Sie heißt in der Gruppentheorie die *Diedergruppe* $\mathbf{D}_3$ oder auch die *symmetrische Gruppe* $\mathbf{S}_3$. Dieselbe abstrakte Gruppe liegt etwa auch der konkreten Gruppe der Permutationen (Vertauschungen) von 3 Elementen zugrunde.

Abstrakte (und diskrete) Gruppen können auch durch ein Erzeugendensystem bestimmt werden, das heißt durch Gruppenelemente

$$\sigma_1 \circ \sigma_2 \circ \ldots \circ \sigma_n,$$

so daß jedes Gruppenelement σ ein Produkt von Elementen dieses Erzeugendensystems ist. Jede solche Gruppe enthält mindestens ein solches Erzeugendensystem; «schlimmstenfalls» besteht dieses Erzeugendensystem aus allen Elementen der Gruppe und «bestenfalls» aus einem Element, wie bei den zyklischen Gruppen (siehe unten). Für die oben entwickelte Diedergruppe $\mathbf{D}_3$ bilden die Elemente $\mathbf{3}$ und σ ein Erzeugendensystem. Kennt man für ein Erzeugendensystem die Verknüpfung der darin enthaltenen Elemente, so kann man daraus durch sukzessives Multiplizieren sämtliche Elemente der Gruppe konstruieren. Die Elemente des Erzeugendensystems heißen *Erzeugende* und die für die Ableitung der übrigen Elemente hinreichenden Beziehungen zwischen ihnen *definierende Relationen*.

Als definierende Relationen der Diedergruppe $\mathbf{D}_3$ ergeben sich also:

$$\mathbf{3}^3 = \mathbf{1},\ \sigma^2 = \mathbf{1},\ \sigma\mathbf{3} = \mathbf{3}^2\sigma.$$

Symmetriegruppen als Modelle von abstrakten Gruppen

Die konkreten Gruppen von Symmetrieoperationen sind *geometrische Realisierung* einer *abstrakten Gruppe*. Sie heißen *Modell* einer abstrakten Gruppe, wenn jedem Gruppenelement genau eine Symmetrieoperation (und damit ein Symmetrieelement) entspricht und die Verknüpfungen der Gruppenelemente genau den Verknüpfungen der Symmetrieoperationen entsprechen. Jeder solchen Gruppe entspricht eindeutig ein *Symmetriegerüst* aus genau denjenigen Symmetrieelementen, welche den Symmetrieoperationen zugrunde liegen.

Einer abstrakten Gruppe liegt von vornherein keinerlei Realisierung oder Modell zugrunde. Zwei Realisierungen oder Modelle derselben abstrakten Gruppen heißen *isomorph* zueinander. So sind etwa die Gruppen $\{\mathbf{1}, \bar{\mathbf{1}}\}$ und $\{\mathbf{1}, \mathbf{2}\}$ geometrisch verschieden, obwohl ihnen dieselbe abstrakte Gruppe zugrunde liegt: sie sind isomorph. Dies sieht man hier an der Übereinstimmung der fundamentalen Relationen

$$\bar{\mathbf{1}}^2 = \mathbf{1} \text{ und } \bar{\mathbf{1}}^{-1} = \bar{\mathbf{1}}$$

sowie

$$\mathbf{2}^2 = \mathbf{1} \text{ und } \mathbf{2}^{-1} = \mathbf{2}.$$

Spezielle Eigenschaften von Gruppen

Eine Gruppe heißt *zyklisch*, wenn alle ihre Elemente durch Zusammensetzung, das heißt durch Produktbildung, aus einem einzigen Element der Gruppe gebildet werden können, wenn also das Erzeugendensystem nur aus einem einzigen Element besteht. Zum Beispiel ist die Gruppe $\{\mathbf{1}, \mathbf{4}, \mathbf{4}^2, \mathbf{4}^3\}$ der Drehungen um 90° eine zyklische Gruppe der Periode 4, denn sie wird von $\mathbf{4}$ erzeugt und es gilt $\mathbf{4}^4 = \mathbf{1}$.

Eine Gruppe heißt *kommutativ* oder *abelsch*, wenn für jedes Paar σ_1, σ_2 von Elementen der Gruppe gilt:

$$\sigma_1 \circ \sigma_2 = \sigma_2 \circ \sigma_1.$$

Zum Beispiel sind alle zyklischen Gruppen kommutativ, also insbesondere die Gruppe $\{\mathbf{1}, \mathbf{4}, \mathbf{4}^2, \mathbf{4}^3\}$, denn es ist etwa

$$\mathbf{4} \circ \mathbf{4}^2 = \mathbf{4}^2 \circ \mathbf{4} = \mathbf{4} \circ \mathbf{4} \circ \mathbf{4} = \mathbf{4}^3.$$

Andererseits ist die Diedergruppe $\mathbf{D}_3$ nicht kommutativ, denn es ist

$$\mathbf{3} \circ \sigma \neq \sigma \circ \mathbf{3} = \mathbf{3}^2 \circ \sigma.$$

Die Anzahl der verschiedenen Elemente einer endlichen Gruppe heißt *Ordnung* der Gruppe. Bei zyklischen Gruppen ist die Ordnung gleich der *Periode*, das heißt gleich der kleinsten natürlichen Zahl n, für welche für ein σ der Gruppe gilt $\sigma^n = \varepsilon$.

Ist **G** eine Gruppe, so heißt eine Teilmenge von **G** eine *Untergruppe* **U** von **G**, wenn sie mit den für die Elemente von **G** geltenden Verknüpfungsregeln eine Gruppe ist, das heißt, wenn die Verknüpfung zweier Elemente aus **U** ein Element aus **U** ist, **U** das Neutralelement ε enthält und das inverse Element jedes Elementes aus **U** auch in **U** liegt.

Es gilt nun der für endliche Gruppen fundamentale Satz von Lagrange.

Satz: *Die Ordnung m einer Untergruppe* **U** *einer endlichen Gruppe* **G** *ist ein Teiler i der Gruppenordnung n.*

Dies bedeutet, daß $n = ki$. Die Zahl i heißt der *Index der Untergruppe* **U** *in der Gruppe* **G**. (Zum Beweis siehe etwa Lang [1979], Kapitel II.4.)

Daraus folgt etwa, daß jede Gruppe von Primzahlordnung zyklisch sein muß; zudem kann eine solche Gruppe nur sich selbst und die triviale Gruppe {**1**} als Untergruppe besitzen. Ist zum Beispiel die Gruppenordnung gleich 12, so kann die Gruppe nur nichttriviale Untergruppen der Ordnung 6, 4, 3 und 2 besitzen. Die Untergruppen der Ordnung 3 und 2 sind zyklisch und haben selbst nur noch triviale Untergruppen.

So ist zum Beispiel die Gruppe {**1**, **2**} der Drehungen um 180° eine Untergruppe vom Index 2 der Gruppe $\{\mathbf{1}, \mathbf{4}, \mathbf{4}^2, \mathbf{4}^3\}$ der Drehungen um 90°, denn es ist $\mathbf{4}^2 = \mathbf{2}$ und $\mathbf{2}^2 = \mathbf{1}$.

Verschiedene Ableitungen der 32 kristallographischen Punktgruppen

Gemäß dem Kristallklassengesetz bilden die Symmetrieoperationen eines Kristallpolyeders eine abgeschlossene Menge von Symmetrieoperationen, das heißt eine Gruppe.

Zur systematischen Herleitung aller möglichen Gruppen von Symmetrieoperationen beliebiger Polyeder bzw. Tangentialpolyeder von Kristallpolyedern, der sogenannten 32 *kristallographischen Punktgruppen* oder *Kristallklassen*, gibt es im wesentlichen vier Vorgehensweisen.

Erstens kann man rein geometrisch die Zusammensetzung der kristallographischen Symmetrieoperationen untersuchen, das heißt Symmetrieoperationen mit Fixpunkt und mit Drehanteilen der Perioden 2, 3, 4, 6; man wird dabei feststellen, daß die Drehachsen und Drehinversionsachsen nur in ganz bestimmten Stellungen zueinander sein können und daß gewisse Gruppen von Symmetrieoperationen zueinander im Verhältnis von Untergruppen stehen. Dieser Weg ist zwar geometrisch sehr anschaulich, aber aufwendig und gibt wenig Einsicht in die gruppentheoretischen Aspekte (siehe dazu Niggli [1924], [1941], Buerger [1963], Fischer [1955], Kleber [1990],Vainshtein [1994]).

Zweitens kann man gruppentheoretisch die Zusammensetzungen der verschiedenen kristallographischen Dreh- und Drehinversions-Gruppen und deren Untergruppen studieren und daraus die Gesamtheit der kristallographischen Punktgruppen ableiten.

Man geht dabei von den kristallographisch erlaubten Gruppen von Drehungen und Drehinversionen mit Fixpunkt aus (Abschnitt 4.1) und baut mittels zwei Arten von Produktbildungen (direktes und semidirektes Produkt) aus diesen zyklischen Gruppen neue Gruppen auf und studiert deren Untergruppen. Dadurch erhält man alle 32 kristallographischen Punktgruppen, die sich auf 18 unterschiedliche abstrakte Gruppen verteilen. Dieser Weg ist relativ aufwendig und hilft der geometrischen Anschauung wenig. Zudem ist es relativ schwierig, nachzuweisen, daß man dadurch alle möglichen kristallographischen Punktgruppen erhält (siehe dazu Burzlaff/Zimmermann [1977], [1993] und die dort angegebene Literatur).

Drittens kann man die Gruppen von Deckoperationen einer Sphäre untersuchen und darin die Gruppen von diskreten, «plötzlichen» oder «ruckartigen», also nicht kontinuierlichen Deckoperationen – *diskrete Gruppen* genannt – aufsuchen. Beispiele solcher diskreten Symmetrieoperationen finden sich unter den im Abschnitt 4.1 angeführten Symmetrieoperationen. Man erhält dadurch die *endlichen Punktgruppen*. Da jede kristallographische Symmetrieoperation eine solche diskrete Deckoperation der Sphäre ist – aber nicht umgekehrt –, findet man auf diesem Wege sicher mehr Gruppen als die kristallographisch relevanten Symmetriegruppen. Verknüpft man die vollständige Aufzählung dieser diskreten Gruppen, eben der endlichen Punktgruppen, mit der kristallographischen Einschränkung, so erhält man genau die 32 *kristallographischen Punktgruppen*.

Dieser dritte Weg soll im folgenden Abschnitt 4.3 skizziert werden, da er sich sowohl geometrischer wie gruppentheoretischer Mittel bedient. Es wird an dieser Stelle auf eine Beweisführung, das ist eine lückenlose Ableitung aller diskreten Symmetriegruppen der Sphäre aus elementaren Prinzipien, verzichtet. Diese *Ableitung* ist in der Literatur an vielen Stellen zugänglich (siehe die Literaturangaben am Ende dieses Kapitels), wogegen die Behandlung der einzelnen Gruppen meist sehr knapp gehalten ist. Deshalb wird im folgenden eine relativ ausführliche Beschreibung des Resultats dieser Ableitung gegeben, insbesondere eine umfassende Charakterisierung der entsprechenden Gruppen und Symmetriegerüste – zunächst ohne Berücksichtigung der kristallographischen Einschränkung.

Viertens kann man die Gruppen von Spiegelungen studieren, die durch endlich viele Ebenen durch einen Punkt erzeugt werden. Da alle Symmetrieoperationen mit Fixpunkt durch Spiegelungen erzeugt werden können (Abschnitt 4.1), erhält man aus diesen Gruppen und ihren Untergruppen wieder genau die diskreten Gruppen des Raumes, welche einen Punkt invariant lassen, die sogenannten *endlichen Punktgruppen*. Dies wird im Abschnitt 4.5 näher ausgeführt und bewiesen. Verknüpft man dieses Resultat mit der kristallographischen Einschränkung, so erhält man genau die 32 *kristallographischen Punktgruppen*.

4.3 *Punktgruppen als Gruppen von Deckoperationen der Sphäre*

Für die Ableitung der Gruppen von Deckoperationen der Sphäre beginnt man mit den Deckoperationen des dreidimensionalen euklidischen Raumes (Isometriegruppe) und schränkt diese in einem ersten Schritt auf solche ein, welche einen Punkt invariant lassen. Dabei fallen alle Translationen, Gleitdrehungen (Schraubungen) und Gleitspiegelungen heraus. Es bleibt die Gruppe der Drehungen und Drehinversionen übrig, also genau die Gruppe derjenigen Operationen, die eine Sphäre in sich überführen. Im folgenden werden die kontinuierlichen Gruppen und die diskreten Untergruppen derselben vollständig angeführt, mit einer ausführlichen Charakterisierung aller beteiligten Gruppen (ohne Beweise).

Bei der Beschreibung des Symmetriegerüstes ist in eckigen Klammern [ ] jeweils die dazugehörige symbolische Abkürzung für die Symmetrieelemente und deren Anzahl angegeben (für die Anzahl von Geraden oder Ebenen in einem Büschel steht «∞»); man vergleiche damit die meist kristallographischen Spezialfälle in den entsprechenden Figuren und in Tabelle 4.4. Die Bezeichnung der Gruppen ist eine leichte Abwandlung der Notation von Coxeter [1981] und Weyl [1955] (siehe dazu die vergleichenden Tabellen 4.2 und 4.3).

A) KONTINUIERLICHE GRUPPEN

Es ergeben sich folgende (kontinuierliche) Gruppen von Deckoperationen der Sphäre (kontinuierliche Punktgruppen):

ZYLINDER- ODER KEGELGRUPPEN

$\mathbf{C}_\infty$ *Kontinuierliche Drehgruppe* um eine Achse.

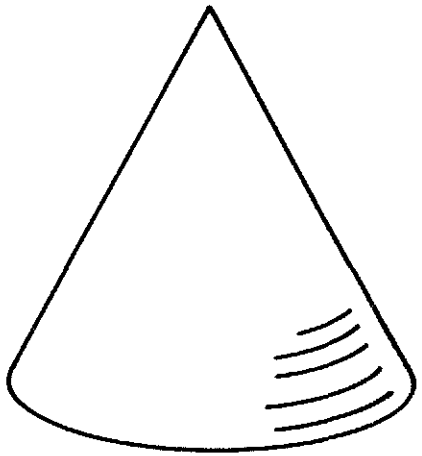
Symmetriegerüst: Achse [∞] (**Figur 4.3**).

$\mathbf{C}_\infty \times \mathbf{Z}$ Zusätzlich zu den Symmetrieelementen von $\mathbf{C}_\infty$ enthält diese Gruppe eine Symmetrieebene **m** senkrecht zur Achse von $\mathbf{C}_\infty$. Dies ist äquivalent zur Existenz eines Inversionszentrums **Z**.

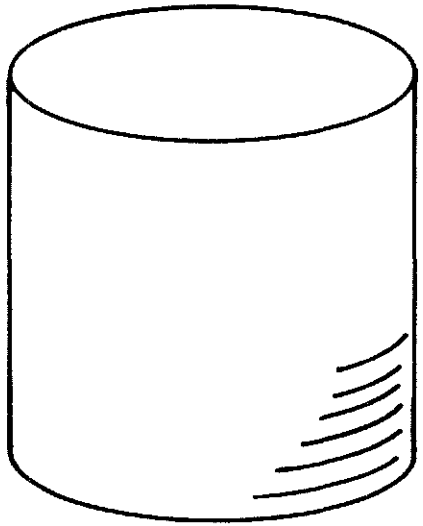
Symmetriegerüst: Achse [∞] + senkrechte Ebene [**m**] + Punkt [**Z**].

$\mathbf{D}_\infty\mathbf{C}_\infty$ Zusätzlich zu den Symmetrieelementen von $\mathbf{C}_\infty$ enthält diese Gruppe unendlich viele Spiegelebenen **m** durch die Achse von $\mathbf{C}_\infty$.

Symmetriegerüst: Achse [∞] + Ebenenbüschel durch Achse [∞ · **m**].



Figur 4.3: *Körper mit der Eigensymmetrie* $\mathbf{C}_\infty$



Figur 4.4: *Körper mit der Eigensymmetrie* $\mathbf{D}_\infty \times \mathbf{Z}$

$\mathbf{D}_\infty$ *Kontinuierliche Diedergruppe.* Sie enthält als Untergruppe die kontinuierliche Drehgruppe $\mathbf{C}_\infty$ sowie unendlich viele zyklische Untergruppen $\mathbf{C}_2$ mit Achsen senkrecht auf der Achse von $\mathbf{C}_\infty$.

Symmetriegerüst: Achse [∞] + senkrechtes Geradenbüschel [$\infty \cdot \mathbf{2}$].

$\mathbf{D}_\infty \times \mathbf{Z}$ Zusätzlich zu den Symmetrieelementen von $\mathbf{D}_\infty$ enthält diese Gruppe eine Symmetrieebene **m** senkrecht zur Achse von $\mathbf{D}_\infty$. Dies ist äquivalent zur Existenz eines Inversionszentrums **Z** (**Figur 4.4**).

Symmetriegerüst: Achse [∞] + senkrechte Ebene mit Geradenbüschel [$\mathbf{m} + \infty \cdot \mathbf{2}$] + Punkt [**Z**].

KUGELGRUPPEN

K *Kontinuierliche Kugeldrehgruppe.* Diese Gruppe enthält als Untergruppen alle kontinuierlichen Achsen-Drehgruppen $\mathbf{C}_\infty$ durch den invarianten Punkt (Kugelzentrum).

Symmetriegerüst: Geradenbündel [$\infty^2 \cdot \infty$].

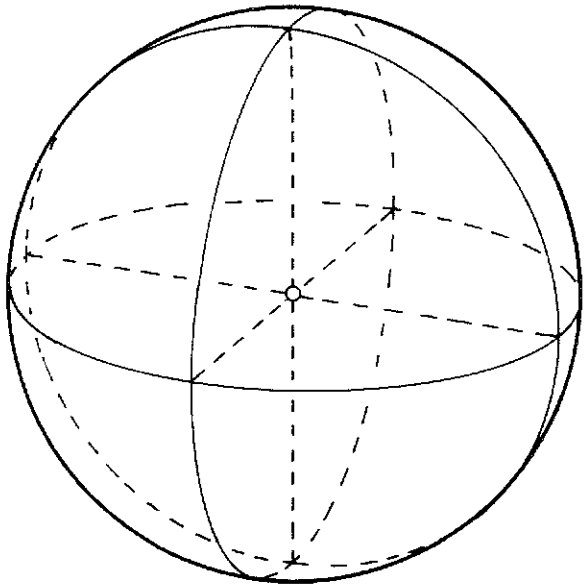
$\mathbf{K} \times \mathbf{Z}$ *Volle Kugelgruppe.* Diese Gruppe enthält zusätzlich zu den Symmetrieelementen von **K** alle Spiegelebenen **m** durch den invarianten Punkt. Dies ist äquivalent zur Existenz eines Inversionszentrums **Z** (**Figur 4.5**).

Symmetriegerüst: Ebenenbündel [$\infty^2 \cdot \mathbf{m}$] + Punkt [**Z**].

B) DISKRETE GRUPPEN

In einer weiteren Einschränkung betrachtet man die *diskreten* Untergruppen dieser Deckoperationen des euklidischen Raumes mit Fixpunkt, das heißt solche Gruppen, die nur diskrete Symmetrieoperationen, eben diskrete Deckoperationen der Sphäre, enthalten. Es stellt sich heraus, daß diese notwendigerweise von endlicher Ordnung sind.

Zur konkreten Bestimmung dieser endlichen Untergruppen der Gruppe, bestehend aus Drehungen und Drehinversionen einer Sphäre, beginnt man mit den endlichen Gruppen orientierungserhaltender, das heißt gleichsinniger Deckbewegungen. Denn alle restlichen Gruppen von Deckbewegungen ergeben sich durch geeignete Multiplikation der Elemente von Gruppen gleichsinniger Deckbewegungen mit der Inversion **Z**.



Figur 4.5: *Körper mit der Eigensymmetrie* $\mathbf{K} \times \mathbf{Z}$

ENDLICHE GRUPPEN GLEICHSINNIGER DECKOPERATIONEN DER SPHÄRE

C_n *Zyklische Gruppen der Ordnung n.* Diese Gruppen werden durch Drehungen um den Winkel $360°/n$ erzeugt. Sie enthalten n Elemente. Sie werden auch *Drehgruppen* der Ordnung n genannt.

Symmetriegerüst: Achse [**n**].

D_n *Diedergruppen der Ordnung n*, $n > 1$. Diese Gruppen enthalten eine zyklische Untergruppe $\mathbf{C}_n$ der Ordnung n und n zyklische Untergruppen $\mathbf{C}_2$ der Ordnung 2, haben also $2n$ Elemente. Die ersteren werden durch Drehungen um eine Achse um den Winkel $360°/n$ erzeugt und die letzteren sind Drehungen um 180° (zweizählige Achsen oder Achsenspiegelungen) um Achsen, die senkrecht zur Achse der Drehgruppe $\mathbf{C}_n$ sind und sich in Winkeln von $360°/2n$ schneiden.

Symmetriegerüst: Achse [**n**] + n dazu senkrechte Geraden [$n \cdot$ **2**] (siehe **Figur 4.6** für $n = 6$).

T *Tetraeder-Drehgruppe.* Gruppe der gleichsinnigen Deckbewegungen eines Tetraeders (Tabelle 4.4).

Symmetriegerüst: 7 Geraden (siehe die Geraden der **Figur 4.1a**).

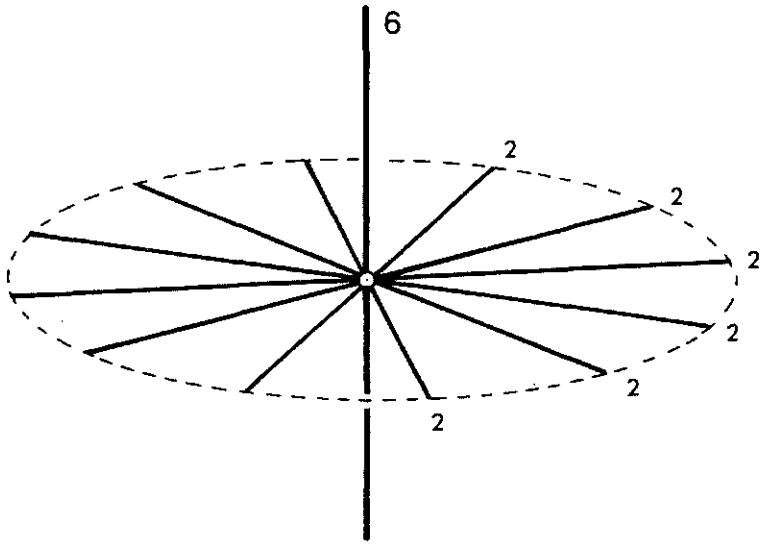
O *Oktaeder-Drehgruppe.* Gruppe der gleichsinnigen Deckbewegungen eines Oktaeders oder Würfels (für die Symmetrieelemente siehe Tabelle 4.4).

Symmetriegerüst: 13 Geraden (siehe die Geraden der **Figur 4.15a**).

I *Ikosaeder-Drehgruppe.* Gruppe der gleichsinnigen Deckbewegungen eines Ikosaeders oder eines Pentagondodekaeders (für die Symmetrieelemente siehe Tabelle 5.6).

Symmetriegerüst: 31 Geraden (siehe die Geraden der **Figur 5.11**).

Außer den Drehgruppen, die zyklisch und deshalb kommutativ sind, sind keine dieser Gruppen kommutativ. Dies bedeutet, daß (endliche) Drehungen im allgemeinen nicht miteinander vertauschbar sind.



Figur 4.6: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{D}_6$

ENDLICHE GRUPPEN UNGLEICHSINNIGER DECKBEWEGUNGEN DER SPHÄRE

Direkte Produkte

Direkte Produkte von Gruppen bestehen aus der Vereinigung der Elemente einer endlichen Gruppe **G** gleichsinniger Deckoperationen mit den mit der Inversion **Z** verknüpften Elementen derselben Gruppe; sie werden mit **G** × **Z** bezeichnet.

$\mathbf{C}_n \times \mathbf{Z}$ Zusätzlich zu den Symmetrieelementen von $\mathbf{C}_n$ enthält diese Gruppe einen Punkt **Z**.

(a) *n gerade*: Existenz einer Spiegelebene **m**.

Symmetriegerüst: Achse [**n**] + senkrechte Ebene [**m**] + Punkt [**Z**].

(b) *n ungerade*: Gruppe $\bar{\mathbf{n}}$ der Drehspiegelungen der Ordnung *n*.

Symmetriegerüst: Achse [$\bar{\mathbf{n}}$] oder Achse [**n**] + Punkt [**Z**].

$\mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$ Zusätzlich zu den Symmetrieelementen von $\mathbf{D}_n$ enthält diese Gruppe einen Punkt **Z**.

(a) *n gerade*: Existenz von *n* Spiegelebenen **m** durch die Achse von $\mathbf{D}_n$ und die zu dieser Achse senkrechten zweizähligen Achsen sowie einer Spiegelebene **m** senkrecht zur Achse.

Symmetriegerüst: Achse [**n**] + *n* Ebenen [*n* · **m**] + *n* Schnittgeraden [*n* · **2**] + 1 Punkt [**Z**] (siehe **Figur 4.16** für *n* = 6).

(b) *n ungerade*: Existenz von *n* Spiegelebenen **m** durch die Winkelhalbierenden der zur Achse von $\mathbf{D}_n$ senkrechten zweizähligen Achsen.

Symmetriegerüst: Achse [$\bar{\mathbf{n}}$] + *n* Ebenen [*n* · **m**] + *n* winkelhalbierende Geraden [*n* · **2**] + 1 Punkt [**Z**] (siehe **Figur 4.7** für *n* = 5).

T × **Z** *Pyritoedergruppe*: Tetraederdrehgruppe mit Inversion (Tabelle 4.4).

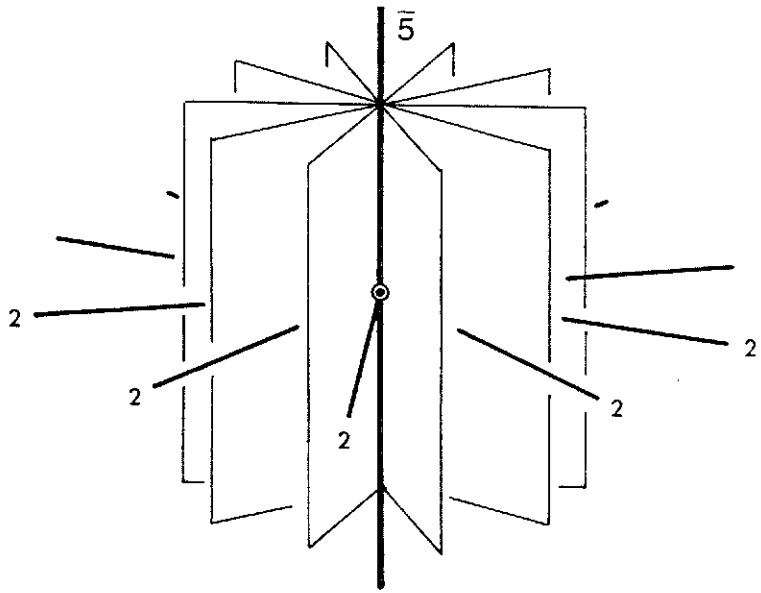
Symmetriegerüst: 7 Geraden + 3 Ebenen + 1 Punkt (**Figur 4.8**).

O × **Z** *Volle Hexaeder- oder Oktaedergruppe* (Tabelle 4.4). Meist nur *Oktaedergruppe* genannt.

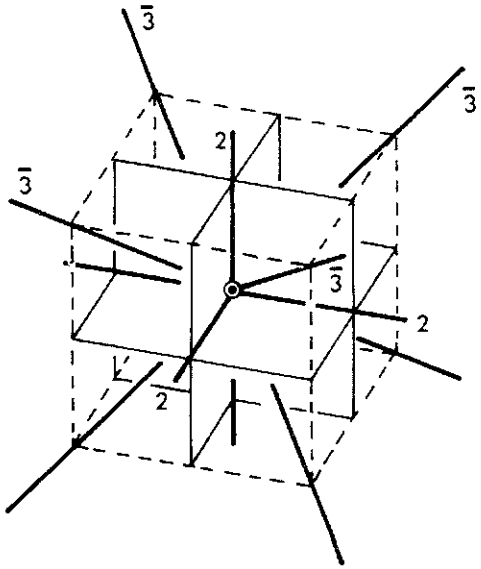
Symmetriegerüst: 13 Geraden + 9 Ebenen + 1 Punkt (**Figur 4.15a**).

I × **Z** *Volle Ikosaedergruppe* (Tabelle 5.6).

Symmetriegerüst: 31 Geraden + 15 Ebenen + 1 Punkt (**Figur 5.11ab**).



Figur 4.7: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{D}_5 \times \mathbf{Z} \equiv D_{5d}$



Figur 4.8: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{T} \times \mathbf{Z} \equiv T_h$

Gemischte Gruppen

Gemischte Gruppen sind endliche Gruppen von Deckbewegungen der Sphäre, welche zwar ungleichsinnige Elemente enthalten, nicht aber die Inversion **Z**. Diese Gruppen haben eine Untergruppe **H** vom Index 2 aus gleichsinnigen Deckbewegungen. Sie werden nach Weyl [1955] und Coxeter [1981] mit **GH** bezeichnet. Sie bestehen aus den Drehungen der kleineren Gruppe **H**, zusammen mit den *nicht* zu **H** gehörigen Drehungen aus **G**, multipliziert mit **Z**.

$\mathbf{C}_{2n}\mathbf{C}_n$ Diese Gruppe enthält alle n Drehungen aus $\mathbf{C}_n$ und alle diejenigen n Drehspiegelungen aus $\mathbf{C}_{2n} \times \mathbf{Z}$, deren Drehkomponenten aus $\mathbf{C}_{2n}$ stammen, aber nicht zu $\mathbf{C}_n$ gehören.

(a) *n gerade*: Gruppe der Drehspiegelungen der Ordnung $\overline{\mathbf{2n}}$.

Symmetriegerüst: Achse $[\overline{\mathbf{2n}}]$.

Beispiel: Die Gruppe $\mathbf{C}_4\mathbf{C}_2$ entsteht aus den Gruppen $\mathbf{C}_2 = \{\mathbf{1}, \mathbf{2}\}$ und $\mathbf{C}_4 = \{\mathbf{1}, \mathbf{4}, \mathbf{4}^2 = \mathbf{2}, \mathbf{4}^3\}$, also

$$\mathbf{C}_4\mathbf{C}_2 = \{\mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{4} \circ \mathbf{Z}, \mathbf{4}^3 \circ \mathbf{Z}\}.$$

Dies ist jedoch dieselbe Gruppe wie die Gruppe der Drehspiegelungen der Ordnung 4:

$$\{\mathbf{1}, \overline{\mathbf{4}} = \mathbf{4} \circ \mathbf{Z}, \overline{\mathbf{4}}^2 = \mathbf{2}, \overline{\mathbf{4}}^3 = \mathbf{4}^3 \circ \mathbf{Z}\}.$$

(b) *n ungerade*: Dies ergibt die Gruppe der Drehungen $\mathbf{C}_n$, multipliziert mit einer Spiegelung senkrecht zur Achse von $\mathbf{C}_n$. Dies entspricht der Gruppe der Drehspiegelungen der Ordnung $\overline{\mathbf{2n}}$; dies ist äquivalent mit der Gruppe der Drehungen der Ordnung **n** mit einem zusätzlichen Symmetrieelement **m**.

Symmetriegerüst: Achse $[\overline{\mathbf{2n}}]$ oder Achse $[\mathbf{n}]$ + senkrechte Ebene $[\mathbf{m}]$ (siehe **Figur 4.9** für $n = 3$).

Beispiel: Die Gruppe $\mathbf{C}_6\mathbf{C}_3$ entsteht aus den Gruppen

$$\mathbf{C}_3 = \{\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{3}^2\} \text{ und } \mathbf{C}_6 = \{\mathbf{1}, \mathbf{6}, \mathbf{6}^2 = \mathbf{3}, \mathbf{6}^3 = \mathbf{2}, \mathbf{6}^4 = \mathbf{3}^2, \mathbf{6}^5\},$$

also

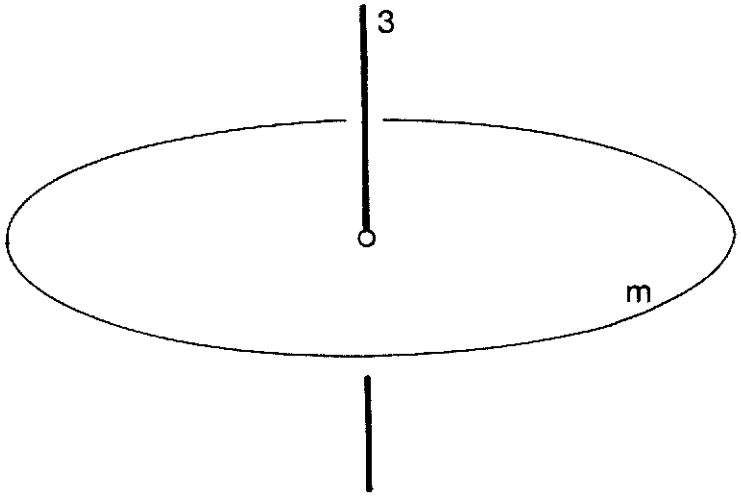
$$\mathbf{C}_6\mathbf{C}_3 = \{\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{3}^2, \mathbf{6} \circ \mathbf{Z} = \overline{\mathbf{6}}, \mathbf{6}^3 \circ \mathbf{Z} = \mathbf{2} \circ \mathbf{Z} = \mathbf{m}, \mathbf{6}^5 \circ \mathbf{Z} = \overline{\mathbf{6}}^5\}.$$

Dies ist jedoch dieselbe Gruppe wie die Gruppe der Drehspiegelungen der Ordnung 6:

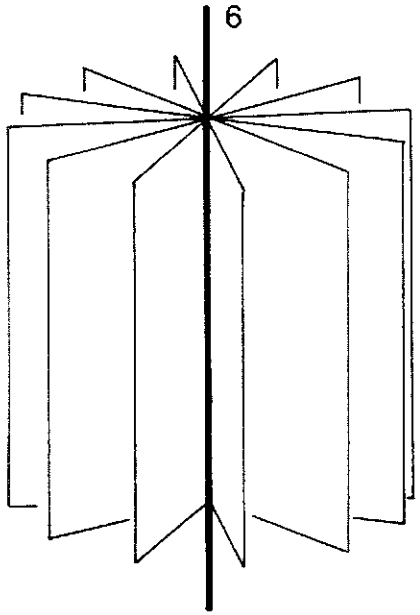
$$\{\mathbf{1}, \overline{\mathbf{6}}, \overline{\mathbf{6}}^2 = \mathbf{3}, \overline{\mathbf{6}}^3 = \mathbf{m}, \overline{\mathbf{6}}^4 = \mathbf{3}^2, \overline{\mathbf{6}}^5 = \mathbf{3} \circ \mathbf{m}\}$$

und wegen $\overline{\mathbf{6}} = \overline{\mathbf{6}}^7 = \overline{\mathbf{6}}^4 \circ \overline{\mathbf{6}}^3 = \mathbf{3}^2 \circ \mathbf{m}$ ist dies dieselbe Gruppe wie

$$\mathbf{C}_3 \cup \mathbf{C}_3 \times \mathbf{m} = \{\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{3}^2, \mathbf{m}, \mathbf{3} \circ \mathbf{m}, \mathbf{3}^2 \circ \mathbf{m}\}.$$



Figur 4.9: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{C}_6\mathbf{C}_3 \equiv C_{3h}$



Figur 4.10: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{D}_6\mathbf{C}_6 \equiv C_{6v}$

D_nC_n Diese Gruppe enthält alle n Drehungen aus $\mathbf{C}_n$ und Spiegelungen an n Ebenen.

(a) *n gerade*: Die n Spiegelebenen enthalten die Drehachse und die zweizähligen Achsen von $\mathbf{D}_n$.

Symmetriegerüst: Achse [**n**] + n Ebenen durch Achse [$n \cdot$ **m**] (siehe **Figur 4.10** für $n = 6$).

(b) *n ungerade*: Die n Spiegelebenen enthalten die Drehachse und halbieren die Zwischenwinkel der zweizähligen Achsen.

Symmetriegerüst: Achse [**n**] + n Ebenen durch Achse [$n \cdot$ **m**].

$D_{2n}D_n$ Diese Gruppe enthält alle n Drehungen aus $\mathbf{D}_n$ und die Spiegelungen an denjenigen n Ebenen, die durch die Drehachse von $\mathbf{D}_n$ und diejenigen n zweizähligen Achsen von $\mathbf{D}_{2n}$ aufgespannt werden, die nicht zugleich in $\mathbf{D}_n$ liegen.

(a) *n gerade*: Die n Spiegelebenen halbieren die Zwischenwinkel der n zweizähligen Achsen.

Symmetriegerüst: Achse [$\overline{\mathbf{2n}}$] + n Ebenen [$n \cdot$ **m**] + n winkelhalbierende Geraden [$n \cdot$ **2**] (siehe **Figur 4.11** für $n = 2$).

(b) *n ungerade*: Die n Spiegelebenen gehen durch die n zweizähligen Achsen.

Symmetriegerüst: Achse [$\overline{\mathbf{2n}}$] ≡ **n+m** + n Ebenen [$n \cdot$ **m**] + n Schnittgeraden [$n \cdot$ **2**] (siehe **Figur 4.12** für $n = 3$).

OT *Volle Tetraedergruppe*. Diese Gruppe besteht aus den Drehungen von **T** und denjenigen Drehspiegelungen **O** × **Z**, deren Drehkomponenten nicht in **T** liegen.

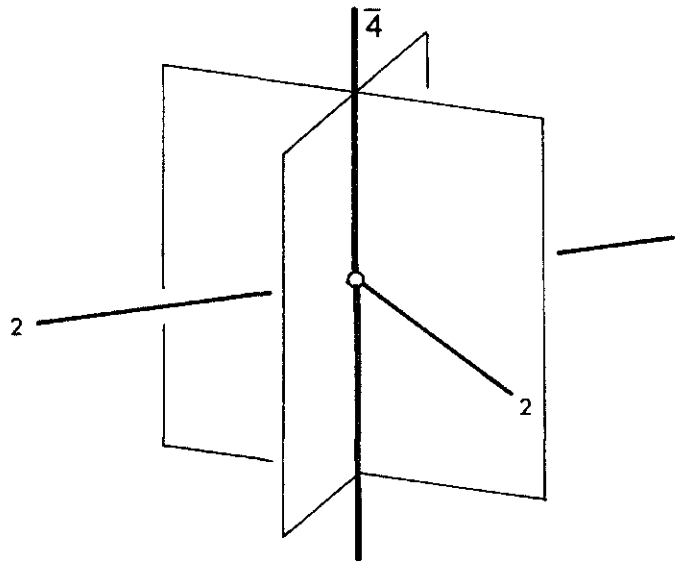
Symmetriegerüst: 7 Geraden und 6 Ebenen (**Figur 4.1a** und Tabelle 4.4).

TABELLE 4.2: *Punktgruppen: Gruppen von Deckoperationen der Sphäre; abstrakte Gruppen und deren geometrische Realisierungen.* Die hier aufgezählten Gruppen sind zum Teil verschiedene Realisierungen (Modelle) derselben abstrakten Gruppe. In der Tabelle sind unter «Sinn» Gruppen, die nur Drehungen enthalten, mit g = gleichsinnig markiert, und Gruppen, die Spiegelungen und/oder die Inversion enthalten, mit u = ungleichsinnig. – Die symbolischen Darstellungen dieser Gruppen nach Schönflies und Hermann-Mauguin werden im Abschnitt 4.4 erläutert, und diejenigen nach Coxeter-Moser werden im Abschnitt 4.6 aufgegriffen.

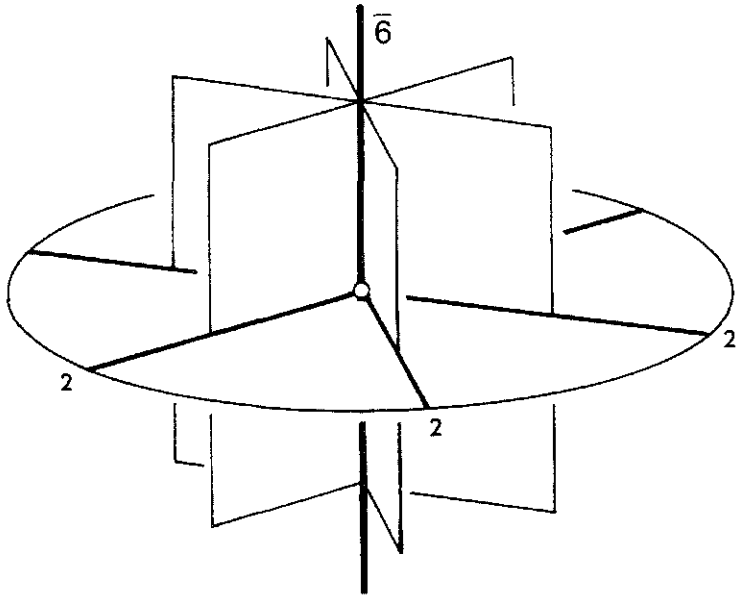
Das Symbol $\mathbf{S}_n$ bedeutet die *symmetrische* Gruppe vom Grad n mit der Ordnung

$$n! = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot \ldots \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1.$$

Sie kann realisiert werden durch die Gruppe aller Permutationen von n Elementen. Insbesondere ist $\mathbf{S}_2$ isomorph zu $\mathbf{C}_2$, und die Diedergruppe $\mathbf{D}_3$ ist isomorph zu $\mathbf{S}_3$.



Figur 4.11: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{D}_4\mathbf{D}_2 \equiv D_{2d}$

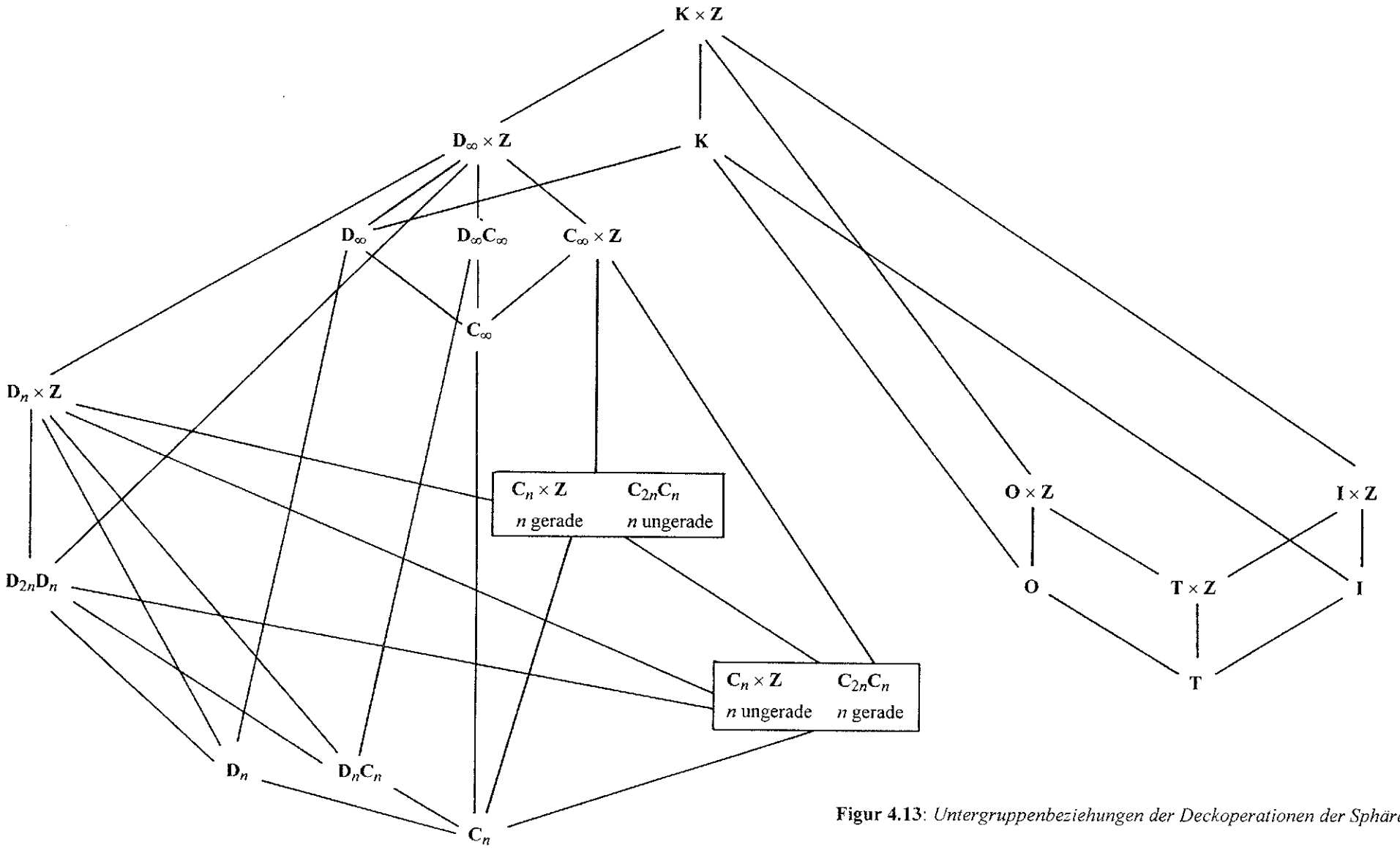


Figur 4.12: *Symmetrieelemente der Gruppe* $\mathbf{D}_6\mathbf{D}_3 \equiv D_{3h}$

Die Gruppe $\mathbf{A}_n$, $n > 1$, ist die *alternierende* Gruppe vom Grad n mit der Ordnung $n!/2$. Sie kann realisiert werden durch die aus allen geraden (das heißt ohne paarweise Vertauschung der Elemente) Permutationen bestehende Untergruppe der symmetrischen Gruppe. – Insbesondere ist $\mathbf{S}_1$ isomorph zu $\mathbf{A}_2$ und $\mathbf{C}_3$ isomorph zu $\mathbf{A}_3$. Die symmetrischen Gruppen $\mathbf{S}_n$ sind für $n > 2$ und die alternierenden Gruppen $\mathbf{A}_n$ für $n > 3$ nicht kommutativ.

Der Übergang zu den kristallographischen Punktgruppen oder Kristallklassen wird im Abschnitt 4.4 dargestellt.

Figur 4.13 zeigt einige Untergruppenbeziehungen der Punktgruppen, das heißt der kontinuierlichen und diskreten (endlichen) Gruppen von Deckoperationen der Sphäre in der Notation von Weyl-Coxeter. Für eine differenziertere Aufgliederung der Diedergruppen, siehe Figur 5.23 im Abschnitt 5.5.



Figur 4.13: *Untergruppenbeziehungen der Deckoperationen der Sphäre*

TABELLE 4.2: *Punktgruppen: Gruppen von Deckoperationen der Sphäre; abstrakte Gruppen und deren geometrische Realisierungen*

ABSTRAKTE GRUPPEN			*GEOMETRISCHE REALISIERUNGEN*						
Name	*Symbol*	*Ordnung*	*Sinn*	*Name*	*Symbol*				
					Weyl-Coxeter	*Bedingungen an n*	*Schönflies*	*Hermann-Mauguin*	*Coxeter-Moser*
Zyklisch	$\mathbf{C}_1$	1	g		$\mathbf{C}_1$		C_1	**1**	$[1]^+$
	$\mathbf{C}_2$	2	g		$\mathbf{C}_2 \equiv \mathbf{D}_1$		$C_2 \equiv D_1$	**2**	$[2]^+$
	$\mathbf{C}_2$	2	u		$\mathbf{C}_2\,\mathbf{C}_1$		$C_s \equiv C_{1h} \equiv C_{1v}$	$\bar{\mathbf{2}} \equiv \mathbf{m}$	$[1]$
	$\mathbf{C}_2$	2	u		$\mathbf{C}_1 \times \mathbf{Z} \equiv \mathbf{Z}$		$C_i \equiv S_2$	$\bar{\mathbf{1}}$	$[2^+, 2^+]$
	$\mathbf{C}_n$	n	g	Zyklische Drehgruppe	$\mathbf{C}_n$	$n > 2$	C_n	**n**	$[n]^+$
	$\mathbf{C}_{2n}$	$2n$	u		$\mathbf{C}_n \times \mathbf{Z}$	n ungerade	C_{ni}	$\bar{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{n} \times \mathbf{Z}$	$[2^+, 2n^+]$
	$\mathbf{C}_{2n}$	$2n$	u		$\mathbf{C}_n \times \mathbf{Z}$	n gerade	C_{nh}	**n/m**	$[2, n^+]$
	$\mathbf{C}_{2n}$	$2n$	u		$\mathbf{C}_{2n}\mathbf{C}_n$	n gerade, $n > 1$	S_{2n}	$\overline{\mathbf{2n}}$	$[2^+, 2n^+]$
	$\mathbf{C}_{2n}$	$2n$	u		$\mathbf{C}_{2n}\mathbf{C}_n$	n ungerade	C_{nh}	$\overline{\mathbf{2n}} \equiv \mathbf{n/m}$	$[2, n^+]$
Dieder	$\mathbf{D}_1$	2	g		$\mathbf{D}_1 \equiv \mathbf{C}_2$		C_2	**2**	$[2]^+$
	$\mathbf{D}_2$	4	g		$\mathbf{D}_2$		$V \equiv D_2$	**222**	$[2, 2]^+$
	$\mathbf{D}_2$	4	u		$\mathbf{C}_2 \times \mathbf{Z}$		C_{2h}	**2/m**	$[2, 2^+]$
	$\mathbf{D}_2$	4	u		$\mathbf{D}_2\mathbf{C}_2$		C_{2v}	**2mm**	$[2]$
	$\mathbf{D}_n$	$2n$	g	Dieder-Drehgruppe	$\mathbf{D}_n$	$n > 2$	D_n	**n22**	$[2, n]^+$
	$\mathbf{D}_n$	$2n$	u		$\mathbf{D}_n\mathbf{C}_n$	$n > 2$	C_{nv}	**nmm**	$[n]$
	$\mathbf{D}_{2n}$	$4n$	u	Volle Diedergruppe	$\mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$	n ungerade	D_{nd}	$\bar{\mathbf{n}}$ **2/m**	$[2^+, 2n]$
	$\mathbf{D}_{2n}$	$4n$	u		$\mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$	n gerade	D_{nh}	$\frac{\mathbf{n}}{\mathbf{m}}\,\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}\,\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}$	$[2, n]$
	$\mathbf{D}_{2n}$	$4n$	u		$\mathbf{D}_{2n}\mathbf{D}_n$	n gerade	D_{nd}	$\overline{\mathbf{2n}}$ **2m**	$[2^+, 2n]$
	$\mathbf{D}_{2n}$	$4n$	u		$\mathbf{D}_{2n}\mathbf{D}_n$	n ungerade	D_{nh}	$\overline{\mathbf{2n}}$ **2m** $\equiv$ **n/m2m**	$[2, n]$

TABELLE 4.2 (Fortsetzung): *Punktgruppen: Gruppen von Deckoperationen der Sphäre; abstrakte Gruppen und deren geometrische Realisierungen*

ABSTRAKTE GRUPPEN			*GEOMETRISCHE REALISIERUNGEN*						
Name	*Symbol*	*Ordnung*	*Sinn*	*Name*	*Symbol*				
					Weyl-Coxeter	*Schönflies*	*Hermann-Mauguin*	*Hermann-Mauguin (Abk.)*	*Coxeter-Moser*
Alternierend	$\mathbf{A}_4$	12	g	Tetraederdrehgruppe	**T**	T	**23**		$[3, 3]^+$
Symmetrisch	$\mathbf{S}_4$	24	g	Oktaederdrehgruppe	**O**	O	**432**		$[3, 4]^+$
	$\mathbf{S}_4$	24	u	(Volle) Tetraedergruppe	**OT**	T_d	$\bar{4}\,3\mathrm{m}$		$[3, 3]$
Alternierend	$\mathbf{A}_5$	60	g	Ikosaederdrehgruppe	**I**	I	**235**		$[3, 5]^+$
	$\mathbf{A}_4 \times \mathbf{Z}$	24	u	Pyritoeder-Gruppe	$\mathbf{T} \times \mathbf{Z}$	T_h	$2/\mathrm{m}\,\bar{3}$	$\mathrm{m}\,\bar{3}$	$[3^+, 4]$
	$\mathbf{S}_4 \times \mathbf{Z}$	48	u	(Volle) Oktaedergruppe	$\mathbf{O} \times \mathbf{Z}$	O_h	$\frac{4}{\mathrm{m}}\bar{3}\frac{2}{\mathrm{m}}$	$\mathrm{m}\,\bar{3}\,\mathrm{m}$	$[3, 4]$
	$\mathbf{A}_5 \times \mathbf{Z}$	120	u	(Volle) Ikosaedergruppe	$\mathbf{I} \times \mathbf{Z}$	I_h	$2/\mathrm{m}\,\bar{3}\,\bar{5}$	$\mathrm{m}\,\bar{3}\,\bar{5}$	$[3, 5]$
Spezielle orthogonale Gruppe	**SO(2)**	∞	g	Kreisdrehgruppe	$\mathbf{C}_\infty$	C_∞	∞		$[\infty]^+$
Orthogonale Gruppe	**O(2)**	∞	u	(Volle) Kreisgruppe	$\mathbf{C}_\infty \times \mathbf{Z}$	$C_{\infty i} \equiv C_{\infty h} \equiv S_\infty$	$\frac{\infty}{\mathrm{m}}$	$\bar{\infty}$	$[2, \infty^+]$
		∞	u		$\mathbf{D}_\infty\mathbf{C}_\infty$	$C_{\infty v}$	$\infty\,\mathrm{mm}$	$\infty\,\mathrm{m}$	$[\infty]$
		∞	u		$\mathbf{D}_\infty$	D_∞	$\infty\,2$		$[2, \infty]^+$
		∞	u		$\mathbf{D}_\infty \times \mathbf{Z}$	$D_{\infty h}$	$\frac{\infty}{\mathrm{m}}\frac{2}{\mathrm{m}}$	$\infty\,\frac{2}{\mathrm{m}}$	$[2, \infty]$
Spezielle orthogonale Gruppe	**SO(3)**	∞^2	g	Kugeldrehgruppe (Rotationsgruppe)	**K**	K	$\infty\,\infty$	$2\,\infty$	$[\infty, \infty]^+$
Orthogonale Gruppe	**O(3)**	∞^2	u	(Volle) Kugelgruppe	$\mathbf{K} \times \mathbf{Z}$	K_h	$\infty\,\infty\,\mathrm{m}$	$\frac{2}{\mathrm{m}}\,\bar{\infty}$	$[\infty, \infty]$

4.4 *Kristallklassen, Kristallsysteme und Kristallfamilien*

Kristallographische Punktgruppen

Verknüpft man die endlichen Punktgruppen, das heißt die endlichen Gruppen von Deckoperationen der Sphäre aus Abschnitt 4.3 (Tabelle 4.2), mit dem Prinzip der kristallographischen Einschränkung aus Abschnitt 3.3, so erhält man genau die 32 sogenannten *kristallographischen Punktgruppen*. Sie werden traditionellerweise als *Kristallklassen* bezeichnet.

TABELLE 4.3: *Die 32 kristallographischen Punktgruppen und deren 18 abstrakte Gruppen.* Für die Gliederung der *kristallographischen Punktgruppen* in die 18 abstrakten Gruppen vergleiche man Tabelle 4.2. Die Tabelle enthält zusätzlich ein System von definierenden Relationen von erzeugenden Elementen α, β, γ.

Symmetrieoperationen und Symbolik der kristallographischen Punktgruppen

Die restlichen Ausführungen dieses Abschnittes sind im wesentlichen Erläuterungen zum Aufbau der Tabelle 4.4.

TABELLE 4.4: *Symmetrieoperationen, Symmetrierichtungen und Symbolik der 32 kristallographischen Punktgruppen.* In dieser Tabelle wird für jede kristallographische Punktgruppe neben der Ordnung die Art der die Gruppe konstituierenden Symmetrieoperationen aufgelistet. Zum Beispiel hat die Gruppe $\mathbf{D}_4 \times \mathbf{Z}$ die Ordnung 16, eine 4-zählige Drehachse mit einer dazu senkrechten Symmetrieebene **m**, bezeichnet mit **4+m**, dann zweimal zwei 2-zählige Drehachsen mit jeweils einer dazu senkrechten Symmetrieebene, also $4 \cdot (\mathbf{2+m})$, sowie ein Inversionszentrum **Z**. In der Tabelle ist unter *Typ* angegeben, ob es sich um eine reine Drehgruppe, eine sogenannte *enantiomorphe* (e) Gruppe handelt, oder ob die Gruppe die *Inversion* **Z** enthält. Im weiteren bedeutet ein Index p zu einer Drehachsenrichtung, daß es sich um eine sogenannte *polare Achse* handelt, das heißt eine Achse, zu welcher es keine senkrechte Symmetrieebene (Spiegelebene) gibt. – Für die Erläuterung der *Symmetrieachsenrichtungen* und die *Einteilung in Kristallsysteme* siehe weiter unten.

Die *Namen der Kristallklassen* gehen auf Schönflies [1891] und Burckhardt [1966] sowie Groth [1926] zurück. – Für die *Bezeichnung der kristallographischen Punktgruppen* haben sich verschiedene Notationen etabliert, von denen einige hier angeführt sind. Die *Weyl-Coxeter*-Symbolik wurde weiter oben eingeführt (Abschnitt 4.3). Bei den *Schönflies*-Symbolen (nach Schönflies [1891] und Burckhardt [1966]) bedeuten C_n die zyklische Gruppe der Ordnung n und D_n die Diedergruppe der Ordnung $2n$.

Bei den zyklischen Gruppen und den Diedergruppen bedeutet ein Index h, also C_{nh} und D_{nh}, daß zusätzlich eine *horizontale* Symmetrieebene **m** vorhanden ist. Ein Index v, also C_{nv} und D_{nv}, bedeutet, daß durch die Hauptachse *vertikale* Symmetrieebenen **m** gehen, und der Index d, also C_{nd} und D_{nd}, daß diese Symmetrieebenen **m** die Winkel gewisser zweizähliger Achsen halbieren, das heißt *diagonal* stehen. Ist die Inversion **Z** die *einzige* ungleichsinnige Symmetrieoperation, so wird das durch einen Index i angezeigt. Für das Vorhandensein einer einzigen Symmetrieebene schreibt Schönflies C_s.

Die Hermann-Mauguin-Symbolik wird weiter unten erklärt.

Untergruppenbeziehungen der kristallographischen Punktgruppen

Eine nähere Untersuchung der kristallographischen Punktgruppen zeigt, daß sämtliche dieser Gruppen Untergruppen von zwei Gruppen sind, der vollen Oktaedergruppe $\mathbf{m\,\bar{3}\,m} \equiv \mathbf{O} \times \mathbf{Z}$ und der vollen hexagonalen Diedergruppe $\mathbf{6/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_6\ \mathbf{Z}$ In **Figur 4.14a** wird eine vollständige Übersicht aller Untergruppenbeziehungen dargestellt; die entsprechenden Gruppenordnungen sind am linken und rechten Rand der Figur aufgeführt. Hierbei zeigt sich, daß gewisse Gruppen sowohl Untergruppen der vollen Oktaedergruppe wie der vollen hexagonalen Diedergruppe sind.

Eine feinere Unterteilung der Menge der kristallographischen Punktgruppen erhält man, wenn man sie mit Hilfe der folgenden sieben Gruppen gliedert:

Oktaedergruppe: $\mathbf{m\,\bar{3}\,m} \equiv \mathbf{O} \times \mathbf{Z}$,

Diedergruppen:
$$\begin{aligned}
&\mathbf{6/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_6 \times \mathbf{Z},\\
&\mathbf{4/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_4 \times \mathbf{Z},\\
&\mathbf{\bar{3}\,2/m} \equiv \mathbf{D}_3 \times \mathbf{Z},\\
&\mathbf{2/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_2 \times \mathbf{Z},\\
&\mathbf{2/m} \equiv \mathbf{D}_1 \times \mathbf{Z} \equiv \mathbf{C}_2 \times \mathbf{Z},\\
&\mathbf{\bar{1}} \equiv \mathbf{C}_1 \times \mathbf{Z}.
\end{aligned}$$

Neben der Oktaedergruppe, welche Drehachsen der Zähligkeiten 2, 3 und 4 enthält, sind dies jeweils die größten Gruppen, welche Achsen der maximalen Zähligkeiten 6, 4, 3, 2 bzw. 1 enthalten. Sie werden *Holoedrien* genannt. Man erhält genau 7 verschiedene Systeme (Mengen) von Gruppen, *Kristallsysteme* genannt, wenn man fordert, daß eine kristallographische Punktgruppe genau dann einem der sieben Kristallsysteme angehört, wenn sie entweder mit einer der 7 genannten Gruppen zusammenfällt oder wenn sie erstens Untergruppe einer dieser Gruppen und zweitens nicht Untergruppe einer dieser Gruppen mit kleinerer Ordnung ist. Das Resultat dieser Unterteilung ist in **Figur 4.14a** dargestellt: dicke Linien verbinden Gruppen innerhalb desselben Kristallsystems.

TABELLE 4.3: *Die 32 kristallographischen Punktgruppen und deren 18 abstrakte Gruppen*

ABSTRAKTE GRUPPEN		*KRISTALLOGRAPHISCHE REALISIERUNGEN UND EINTEILUNG IN DIE SIEBEN KRISTALLSYSTEME*							*DEFINIERENDE RELATIONEN*
Symbol	*Ordnung*	*Triklin*	*Monoklin*	*Ortho-rhombisch*	*Tetragonal*	*Kubisch*	*Trigonal*	*Hexagonal*	*Erzeugende Elemente* α, β, γ ε = Identität
C_1	1	C_1							$\alpha = \varepsilon$
$C_2 \equiv Z$	2	$C_1 \times Z$	C_2 C_2C_1						$\alpha^2 = \varepsilon$
C_3	3						C_3		$\alpha^3 = \varepsilon$
C_4	4				C_4 C_4C_2				$\alpha^4 = \varepsilon$
C_6	6						$C_3 \times Z$	C_6 C_6C_3	$\alpha^6 = \varepsilon$
D_2	4		$C_2 \times Z$	D_2 D_2C_2					$\alpha^2 = \beta^2 = (\alpha\beta)^2 = \varepsilon$
D_3	6						D_3 D_3C_3		$\alpha^3 = \beta^2 = (\alpha\beta)^2 = \varepsilon$
D_4	8				D_4 D_4C_4 D_4D_2				$\alpha^4 = \beta^2 = (\alpha\beta)^2 = \varepsilon$
D_6	12						$D_3 \times Z$	D_6 D_6C_6 D_6D_3	$\alpha^6 = \beta^2 = (\alpha\beta)^2 = \varepsilon$
$C_4 \times Z$	8				$C_4 \times Z$				$\alpha^4 = \beta^2 = \alpha\beta\alpha^3\beta = \varepsilon$
$C_6 \times Z$	12							$C_6 \times Z$	$\alpha^6 = \beta^2 = \alpha\beta\alpha^5\beta = \varepsilon$
$D_2 \times Z$	8			$D_2 \times Z$					$\alpha^2 = \beta^2 = \gamma^2 = (\alpha\beta)^2 = (\alpha\gamma)^2 = (\beta\gamma)^2 = \varepsilon$
$D_4 \times Z$	16				$D_4 \times Z$				$\alpha^2 = \beta^2 = \gamma^2 = (\alpha\beta)^2 = (\alpha\gamma)^2 = (\beta\gamma)^4 = \varepsilon$
$D_6 \times Z$	24							$D_6 \times Z$	$\alpha^2 = \beta^2 = \gamma^2 = (\alpha\beta)^2 = (\alpha\gamma)^2 = (\beta\gamma)^6 = \varepsilon$
A_4	12					T			$\beta^2 = \alpha^3 = (\alpha\beta)^3 = \varepsilon$
S_4	24					O OT			$\alpha^4 = (\alpha\beta)^3 = \beta^2 = \varepsilon$
$A_4 \times Z$	24					$T \times Z$			$\beta^2 = \alpha^6 = (\alpha^2\beta\alpha\beta)^2 = \varepsilon$
$S_4 \times Z$	48					$O \times Z$			$\alpha^4 = \beta^6 = (\alpha\beta)^2 = \varepsilon$

TABELLE 4.4: *Symmetrieoperationen, Symmetrieachsenrichtungen und Symbolik der 32 kristallographischen Punktgruppen*

KRISTALL-SYSTEM	*Ordnung*	*SYMMETRIEOPERATIONEN UND SYMMETRIEACHSENRICHTUNGEN (Tabelle 3.2)*				*SYMBOLE DER KRISTALLKLASSEN*			*NAMEN DER KRISTALLKLASSEN*		*Symmetrie-gerüst*
		Haupt-achse(n)	*1. Neben-achse(n)*	*2. Neben-achse(n)*	*Typ*	*Weyl-Coxeter*	*Schönflies*	*Hermann-Mauguin*	*Schönflies-Burckhardt*	*Groth*	*Figur*
Triklin	1				e	$\mathbf{C_1}$	C_1	**1**	Hemiedrie	Pedial	
	2				**Z**	$\mathbf{C_1 \times Z}$	$S_2 \equiv C_i$	$\bar{\mathbf{1}}$	Holoedrie	Pinakoidal	
Monoklin	2	$\mathbf{2}_p$			e	$\mathbf{C_2}$	C_2	**2**	Enantiomorphe Hemiedrie	Sphenoidisch	
	2	$\bar{\mathbf{2}}$				$\mathbf{C_2C_1}$	$C_{1h} \equiv C_s$	$\bar{\mathbf{2}} \equiv \mathbf{m}$	Hemimorphe Hemiedrie	Domatisch	
	4	**2+m**			**Z**	$\mathbf{C_2 \times Z}$	C_{2h}	**2/m**	Holoedrie	Prismatisch	4.19
Ortho-rhombisch	4	**2**	**2**	**2**	e	$\mathbf{D_2}$	$D_2 \equiv V$	**222**	Enantiomorphe Hemiedrie	Disphenoidisch	
	4	$\mathbf{2}_p$	**m**	**m**		$\mathbf{D_2C_2}$	C_{2v}	**2mm**	Hemimorphe Hemiedrie	Pyramidal	
	8	**2+m**	**2+m**	**2+m**	**Z**	$\mathbf{D_2 \times Z}$	$D_{2h} \equiv V_h$	$\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}} \equiv \mathbf{2/m\ mm}$	Holoedrie	Dipyramidal	4.18
Tetragonal	4	$\mathbf{4}_p$			e	$\mathbf{C_4}$	C_4	**4**	Tetartoedrie	Pyramidal	
	4	$\bar{\mathbf{4}}$				$\mathbf{C_4C_2}$	S_4	$\bar{\mathbf{4}}$	Tetartoedrie II. Art	Disphenoidisch	
	8	**4+m**			**Z**	$\mathbf{C_4 \times Z}$	C_{4h}	**4/m**	Paramorphe Hemiedrie	Dipyramidal	
	8	**4**	$\mathbf{2 \cdot 2}$	$\mathbf{2 \cdot 2}$	e	$\mathbf{D_4}$	D_4	**422**	Enantiomorphe Hemiedrie	Trapezoedrisch	
	8	$\mathbf{4}_p$	$\mathbf{2 \cdot m}$	$\mathbf{2 \cdot m}$		$\mathbf{D_4C_4}$	C_{4v}	**4mm**	Hemimorphe Hemiedrie	Ditetragonal-pyramidal	
	8	$\bar{\mathbf{4}}$	$\mathbf{2 \cdot 2}$	$\mathbf{2 \cdot m}$		$\mathbf{D_4D_2}$	$D_{2d} \equiv V_d$	$\bar{\mathbf{4}}\mathbf{2m}$	Hemiedrie II. Art	Skalenoedrisch	4.11
	16	**4+m**	$\mathbf{2 \cdot (2+m)}$	$\mathbf{2 \cdot (2+m)}$	**Z**	$\mathbf{D_4 \times Z}$	D_{4h}	$\frac{\mathbf{4}}{\mathbf{m}}\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}} \equiv \mathbf{4/m\ mm}$	Holoedrie	Ditetragonal-dipyramidal	4.17a
Kubisch	12	$\mathbf{3 \cdot 2}$	$\mathbf{4 \cdot 3}_p$		e	$\mathbf{T}$	T	**23**	Tetartoedrie	Pentagondodekaedrisch	(4.1a)
	24	$\mathbf{3 \cdot (2+m)}$	$\mathbf{4 \cdot \bar{3}}$		**Z**	$\mathbf{T \times Z}$	T_h	$\mathbf{2/m\,\bar{3} \equiv m\,\bar{3}}$	Paramorphe Hemiedrie	Dyakisdodekaedrisch	4.8
	24	$\mathbf{3 \cdot 4}$	$\mathbf{4 \cdot 3}$	$\mathbf{6 \cdot 2}$	e	$\mathbf{O}$	O	**432**	Enantiomorphe Hemiedrie	Pentagonikositetraedrisch	(4.15a)
	24	$\mathbf{3 \cdot \bar{4}}$	$\mathbf{4 \cdot 3}_p$	$\mathbf{6 \cdot m}$		$\mathbf{OT}$	T_d	$\bar{\mathbf{4}}\mathbf{3m}$	Hemimorphe Hemiedrie	Hexakistetraedrisch	4.1a
	48	$\mathbf{3 \cdot (4+m)}$	$\mathbf{4 \cdot \bar{3}}$	$\mathbf{6 \cdot (2+m)}$	**Z**	$\mathbf{O \times Z}$	O_h	$\frac{\mathbf{4}}{\mathbf{m}}\bar{\mathbf{3}}\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}} \equiv \mathbf{m\,\bar{3}\,m}$	Holoedrie	Hexakisoktaedrisch	4.15a

TABELLE 4.4 (Fortsetzung): *Symmetrieoperationen, Symmetrieachsenrichtungen und Symbolik der 32 kristallographischen Punktgruppen*

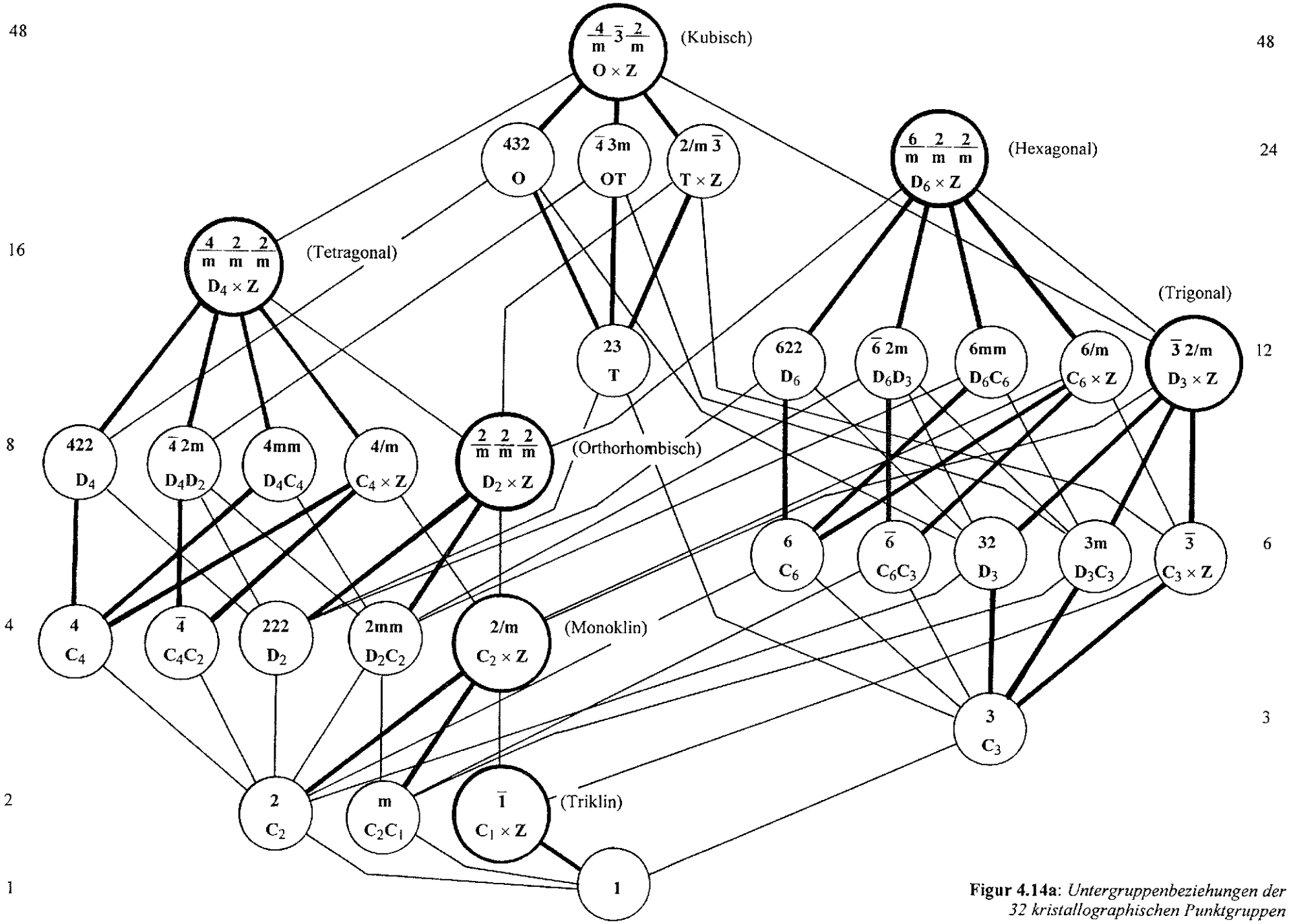
KRISTALL-SYSTEM	*Ordnung*	*SYMMETRIEOPERATIONEN UND SYMMETRIEACHSENRICHTUNGEN (Tabelle 3.2)*				*SYMBOLE DER KRISTALLKLASSEN*			*NAMEN DER KRISTALLKLASSEN*		*Symmetrie-gerüst*
		Haupt-achse	*1. Neben-achse(n)*	*2. Neben-achse(n)*	*Typ*	*Weyl-Coxeter*	*Schönflies*	*Hermann-Mauguin*	*Schönflies-Burckhardt*	*Groth*	*Figur*
Trigonal	3	3_p			e	$\mathbf{C}_3$	C_3	**3**	Tetartoedrie	Pyramidal	
	6	$\bar{3}$			**Z**	$\mathbf{C}_3 \times \mathbf{Z}$	$C_{3i} \equiv S_6$	$\bar{3}$	Paramorphe Hemiedrie	Rhomboedrisch	
	6	**3**	$3 \cdot 2_p$		e	$\mathbf{D}_3$	D_3	**32**	Enantiomorphe Hemiedrie	Trapezoedrisch	
	6	3_p	$3 \cdot \mathbf{m}$			$\mathbf{D}_3\mathbf{C}_3$	C_{3v}	**3m**	Hemimorphe Hemiedrie	Ditrigonal pyramidal	
	12	$\bar{3}$	$3 \cdot \mathbf{m}$	$3 \cdot 2$	**Z**	$\mathbf{D}_3 \times \mathbf{Z}$	D_{3d}	$\bar{3}\,2/\mathbf{m} \equiv \bar{3}\,\mathbf{m}$	Holoedrie	Ditrigonal skalenoedrisch	4.16
Hexagonal	6	6_p			e	$\mathbf{C}_6$	C_6	**6**	Tetartoedrie	Pyramidal	
	6	$\bar{6} = 3+\mathbf{m}$				$\mathbf{C}_6\mathbf{C}_3$	C_{3h}	$\bar{6} \equiv 3/\mathbf{m}$	Tetartoedrie II. Art	Trigonal dipyramidal	4.9
	12	**6+m**			**Z**	$\mathbf{C}_6 \times \mathbf{Z}$	C_{6h}	**6/m**	Paramorphe Hemiedrie	Dipyramidal	
	12	**6**	$3 \cdot 2$	$3 \cdot 2$	e	$\mathbf{D}_6$	D_6	**622**	Enantiomorphe Hemiedrie	Trapezoedrisch	4.6
	12	6_p	$3 \cdot \mathbf{m}$	$3 \cdot \mathbf{m}$		$\mathbf{D}_6\mathbf{C}_6$	C_{6v}	**6mm**	Hemimorphe Hemiedrie	Dihexagonal pyramidal	4.10
	12	$\bar{6} = 3+\mathbf{m}$	$3 \cdot 2_p$	$3 \cdot \mathbf{m}$		$\mathbf{D}_6\mathbf{D}_3$	D_{3h}	$\bar{6}\,2\mathbf{m}$ $\equiv 3/\mathbf{m}\,2\mathbf{m}$	Hemiedrie II. Art (mit trigonaler Achse)	Ditrigonal dipyramidal	4.12
	24	**6+m**	$3 \cdot (2+\mathbf{m})$	$3 \cdot (2+\mathbf{m})$	**Z**	$\mathbf{D}_6 \times \mathbf{Z}$	D_{6h}	$\frac{6}{\mathbf{m}}\,\frac{2}{\mathbf{m}}\,\frac{2}{\mathbf{m}}$ $\equiv 6/\mathbf{m}\,\mathbf{mm}$	Holoedrie	Dihexagonal dipyramidal	4.16

Kristallographische Blickrichtungen: Symmetrieachsenrichtungen und Kristallsysteme

Die verschiedenen innerhalb einer kristallographischen Punktgruppe oder deren Symmetriegerüst auftretenden symmetriebegabten Richtungen (Achsen von Drehungen oder Drehspiegelungen der Zähligkeiten 2, 3, 4 und 6) lassen sich in folgender Weise in Klassen einteilen. Zwei symmetriebegabte Richtungen einer Symmetriegruppe heißen *äquivalent*, gehören also zur selben *Klasse*, wenn sie sich durch eine Symmetrieoperation der Gruppe miteinander zur Deckung bringen lassen.

Eine genauere Betrachtung aller kristallographischen Punktgruppen zeigt, daß in jeder dieser Gruppen maximal drei Klassen von nichtäquivalenten *symmetriebegabten Richtungen* oder *Symmetrieachsen* auftreten können. Diese Klassen nennt man *kristallographische Blickrichtungen*.

Dies ergibt sich etwa aus einer systematischen Untersuchung aller Symmetriegerüste der 32 kristallographischen Punktgruppen. Da alle diese Gruppen Untergruppen der 7 größten Gruppen eines Kristallsystems, der sogenannten Holoedrien, sind, so genügt es, die Symmetriegerüste dieser Gruppen genauer zu untersuchen, da die Symmetriegerüste der entsprechenden Untergruppen Teilmengen davon sind (siehe die in Tabelle 4.4 oder 4.6 für diese Gruppen angegebenen Figuren der Symmetriegerüste).



Figur 4.14a: *Untergruppenbeziehungen der 32 kristallographischen Punktgruppen*

TABELLE 4.5: *Untergruppen-Beziehungen der kristallographischen Punktgruppen in einem Kristallsystem*

	Ordnung	***Triklin***	***Monoklin***	***Ortho-rhombisch***	***Tetragonal***	***Kubisch***	***Trigonal***	***Hexagonal***
Holoedrie	*n*							
	48					$\mathbf{O \times Z}$ $\mathbf{m\bar{3}m}$		
	24							$\mathbf{D_6 \times Z}$ **6/m mm**
	16				$\mathbf{D_4 \times Z}$ **4/m mm**			
	12						$\mathbf{D_3 \times Z}$ $\mathbf{\bar{3}2/m}$	
	8			$\mathbf{D_2 \times Z}$ **2/m mm**				
	4		$\mathbf{C_2 \times Z}$ **2/m**					
	2	$\mathbf{C_1 \times Z}$ $\mathbf{\bar{1}}$						
Hemiedrie	*n*/2							
paramorph					$\mathbf{C_4 \times Z}$ **4/m**	$\mathbf{T \times Z}$ $\mathbf{2/m\bar{3}}$	$\mathbf{C_3 \times Z}$ $\mathbf{\bar{3}}$	$\mathbf{C_6 \times Z}$ **6/m**
hemimorph			$\mathbf{C_2C_1}$ $\mathbf{\bar{2}}$	$\mathbf{D_2C_2}$ **2mm**	$\mathbf{D_4C_4}$ **4mm**	**OT** $\mathbf{\bar{4}3m}$	$\mathbf{D_3C_3}$ **3m**	$\mathbf{D_6C_6}$ **6mm**
enantiomorph		$\mathbf{C_1}$ **1**	$\mathbf{C_2}$ **2**	$\mathbf{D_2}$ **222**	$\mathbf{D_4}$ **422**	**O** **432**	$\mathbf{D_3}$ **32**	$\mathbf{D_6}$ **622**
II. Art					$\mathbf{D_4D_2}$ $\mathbf{\bar{4}2m}$			$\mathbf{D_6D_3}$ $\mathbf{\bar{6}2m}$
Tetartoedrie	*n*/4							
(I. Art)					$\mathbf{C_4}$ **4**	**T** **23**	$\mathbf{C_3}$ **3**	$\mathbf{C_6}$ **6**
II. Art					$\mathbf{C_4C_2}$ $\mathbf{\bar{4}}$			$\mathbf{C_6C_3}$ $\mathbf{\bar{6} = 3/m}$

TABELLE 4.5: *Untergruppen-Beziehungen der kristallographischen Punktgruppen in einem Kristallsystem*

Alle kristallographischen Gruppen in *einem* dieser Kristallsysteme sind Untergruppen von *geradem* Index der das Kristallsystem charakterisierenden Gruppe mit höchster Ordnung. Man nennt diese größten Gruppen des jeweiligen Kristallsystems *Holoedrien*, die Untergruppen vom Index 2 *Hemiedrien* und die Untergruppen vom Index 4 *Tetartoedrien*. Eine Hemiedrie, deren höchstzählige Achse polar ist, also keine zu ihr senkrechte Symmetrieebene besitzt, heißt *hemimorph*, eine solche, die nur Drehungen enthält, *enantiomorph*, und eine solche, welche die Inversion enthält, *paramorph*.

Man erkennt, daß bezüglich dieser 7 Gruppen die geometrischen Beziehungen der Klassen kristallographischer Blickrichtungen mit den dazugehörigen Drehachsenperioden genau übereinstimmen mit den in Tabelle 3.2 angeführten geometrischen Eigenschaften der Symmetrieachsenrichtungen und den entsprechenden Drehachsenperioden. Diese Übereinstimmung liegt der Gliederung der Symmetrieoperationen nach Symmetrieachsenrichtungen in Tabelle 4.4 zugrunde. Daraus folgt, daß die im Abschnitt 3.2 entwickelten 7 Systeme von kristallographischen Symmetrieachsenrichtungen genau zu derselben Gliederung der 32 kristallographischen Punktgruppen führen wie die eben durchgeführte Gliederung nach Untergruppen der sieben Gruppen, den *Holoedrien* der 7 Kristallsysteme:

Oktaedergruppe: $\mathbf{m\,\bar{3}\,m} \equiv \mathbf{O} \times \mathbf{Z}$,

Diedergruppen: $\mathbf{6/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_6 \times \mathbf{Z}$,
$\mathbf{4/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_4 \times \mathbf{Z}$,
$\mathbf{\bar{3}\,2/m} \equiv \mathbf{D}_3 \times \mathbf{Z}$,
$\mathbf{2/m\,mm} \equiv \mathbf{D}_2 \times \mathbf{Z}$,
$\mathbf{2/m} \equiv \mathbf{D}_1 \times \mathbf{Z} \equiv \mathbf{C}_2 \times \mathbf{Z}$,
$\mathbf{\bar{1}} \equiv \mathbf{C}_1 \times \mathbf{Z}$.

Dies etabliert die *Einteilung der 32 kristallographischen Punktgruppen in die 7 Kristallsysteme*; diese Gliederung liegt der dem Aufbau der Tabellen 4.3, 4.4 und 4.5 zugrunde.

Hermann-Mauguin-Symbole oder Internationale Symbole

Die Symbole von Hermann-Mauguin werden auch *Internationale Symbole* nach den Konventionen der «International Union of Crystallography» genannt (siehe dazu die *International Tables for Crystallography* [1995] und Hahn (ed.) [1996], Burzlaff/Zimmermann [1977], [1993]). In ihnen kommt eine Kombination von gruppentheoretischen mit geometrischen Gesichtspunkten zum Ausdruck. Sie richten sich einerseits nach den kristallographischen Blickrichtungen und andererseits nach den erzeugenden Elementen der jeweiligen Gruppen.

Entscheidend ist, daß sich wegen der eindeutigen Lage der Symmetrieoperationen relativ zu den drei Klassen von kristallographischen Blickrichtungen innerhalb eines Kristallsystems die jeweils in einer kristallographischen Punktgruppe eines Kristallsystems vorliegende Symmetrie in bezug auf diese Blickrichtungen durch Angabe der entsprechenden Symmetrieoperationen bestimmen lassen. – Dieser Sachverhalt ist die Grundlage der Benennung der Punktgruppen durch die Hermann-Mauguin-Symbolik. Jeder kristallographischen Punktgruppe werden im allgemeinen drei hintereinander stehende Symbole zugeordnet.

Diese Symbole haben eine Doppelbedeutung. Einmal geben sie zyklische Untergruppen an, aus denen sich die Gruppe erzeugen läßt, und zum anderen geben sie die Symmetrieoperationen relativ zu den drei kristallographischen Blickrichtungen an. Dabei wird aus der Menge der symmetrieäquivalenten Achsen oder Ebenen nur eine genannt. Ist eine mögliche Symmetrierichtung unbesetzt, so wird sie leer gelassen. Es werden dabei mindestens so viele zyklische Untergruppen, vertreten durch die entsprechenden Symmetrieoperationen, angegeben, wie zur Erzeugung der ganzen Gruppe nötig sind.

Wenn in einer Richtung sowohl eine Drehachse als auch die Normale einer Spiegelebene vorkommt, dann schreibt man beide Symbole übereinander und trennt sie durch einen horizontalen Strich:

$$\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{m}}$$

gelesen **2** über **m**. Daneben ist auch die Schreibweise **2/m** gebräuchlich. Unbesetzte Symmetrierichtungen werden nicht geschrieben. So bedeutet etwa **4/m**, daß in der Hauptrichtung **c** eine 4-zählige Drechachse existiert sowie eine dazu senkrechte Spiegelebene, aber in den beiden Nebenrichtungen **a**, **b** bzw. **a** + **b**, **a** – **b** gibt es keine Symmetrieelemente.

Bei den sogenannten *gekürzten* Hermann-Mauguin-Symbolen werden nur diejenigen Elemente geringster Ordnung angegeben, welche bereits ein Erzeugendensystem der entsprechenden Gruppe bilden.

Kristallsystem	*Volles Symbol*	*Gekürzte Symbole*
Orthorhombisch	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	**2/m mm, mmm**
Tetragonal	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	**4/m mm**
Kubisch	$\mathbf{2/m\,\bar{3}}$	$\mathbf{m\,\bar{3}}$
Kubisch	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$\mathbf{m\,\bar{3}\,m}$
Trigonal	$\mathbf{\bar{3}\,2/m}$	$\mathbf{\bar{3}\,m}$
Hexagonal	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	**6/m mm**

Kristallfamilien

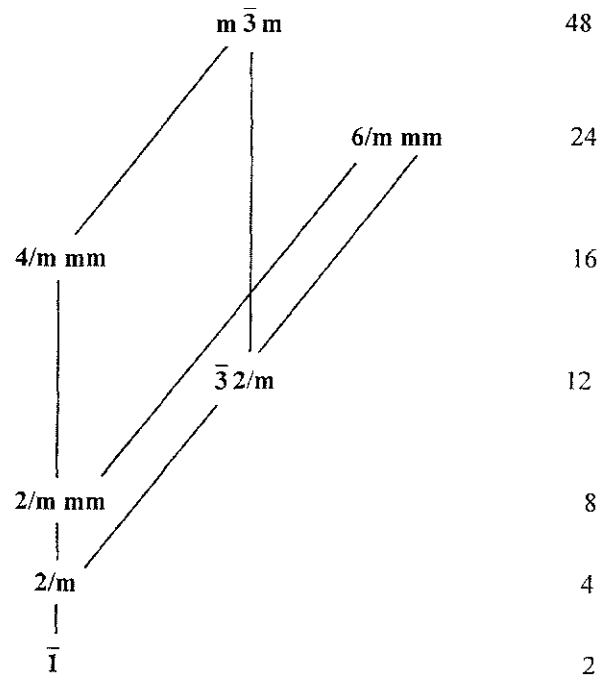
TABELLE 4.6: *Die 7 Kristallsysteme und 2 Kristallfamilien.* In derselben Kolonne stehende Gruppen sind in einem Untergruppenverhältnis (was auch durch die jeweilige Ordnung ersichtlich ist); siehe dazu auch **Figur 4.14b**.

Die 7 Kristallsysteme und damit die 32 Kristallklassen lassen sich in zwei Familien zusammenfassen vermöge ihrer Untergruppenbeziehungen. So ist die tetragonale Holoedrie eine Untergruppe vom Index 3 der kubischen Holoedrie (Hexaeder- oder Oktaedergruppe) und die trigonale Holoedrie eine Untergruppe vom Index 2 der hexagonalen Holoedrie etc.

Auf diese Weise lassen sich damit sämtliche 32 Kristallklassen entweder als Untergruppen der kubischen oder als Untergruppen der hexagonalen Holoedrie auffassen. Diese Holoedrien bilden die beiden *Kristallfamilien*, die *kubische* und die *hexagonale Familie.*

TABELLE 4.6: *Die 7 Kristallsysteme und 2 Kristallfamilien*

Ordnung	***Kubische Familie***	***Hexagonale Familie***	***Kristallsystem***	***Symmetriegerüst*** ***Figur***	***Darstellung in stereographischer Projektion***	***Projektive Darstellung***
48	$\mathbf{O} \times \mathbf{Z}$ **m $\bar{3}$ m**		Kubisch	4.15a	4.15c	6.6, 6.7
24		$\mathbf{D_6} \times \mathbf{Z}$ **6/m mm**	Hexagonal	4.16	4.16	6.14
16	$\mathbf{D_4} \times \mathbf{Z}$ **4/m mm**		Tetragonal	4.17a	4.17b	6.16
12		$\mathbf{D_3} \times \mathbf{Z}$ **$\bar{3}$ 2/m**	Trigonal	4.16	4.16	
8	$\mathbf{D_2} \times \mathbf{Z}$ **2/m mm**		Orthorhombisch	4.18	4.18	6.17
4	$\mathbf{C_2} \times \mathbf{Z}$ **2/m**		Monoklin	4.19		
2	$\mathbf{C_1} \times \mathbf{Z}$ **$\bar{1}$**		Triklin			



Figur 4.14b: *Untergruppenbeziehungen der 7 Kristallsysteme*

4.5 *Kristallographische Symmetriegerüste und Fundamentalbereiche*

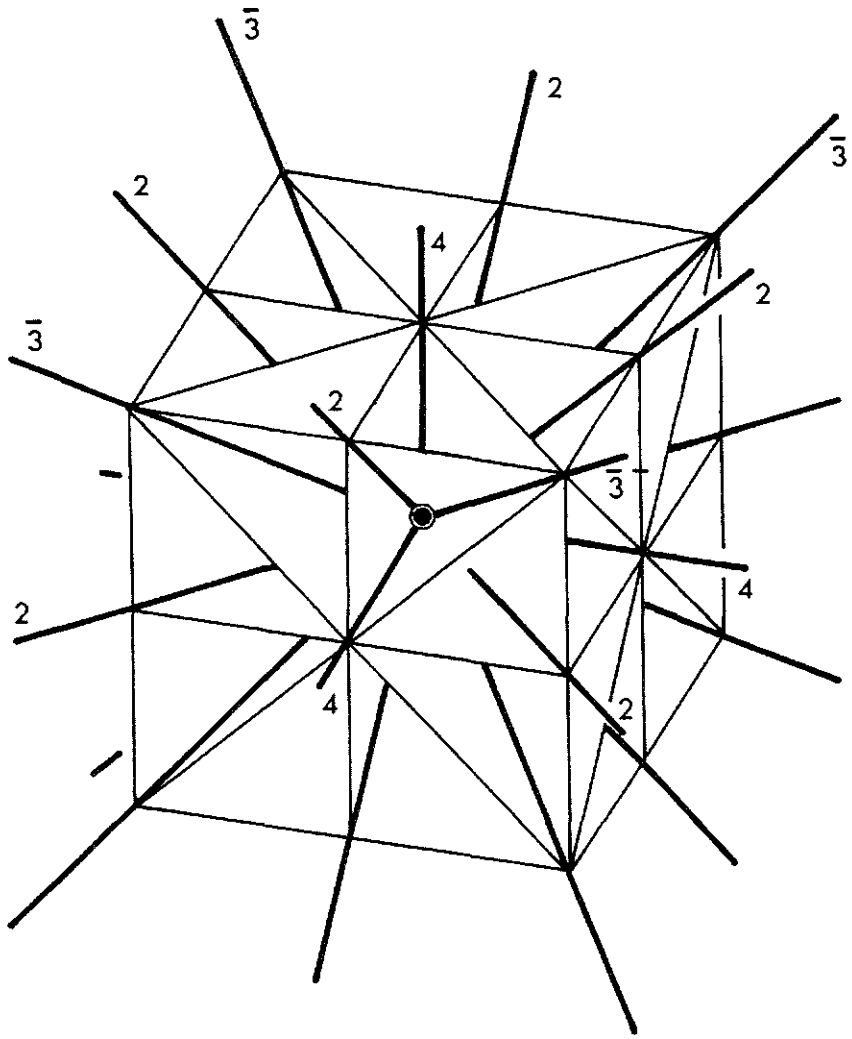
Kristallographische Symmetriegerüste und deren Darstellungen

Das *Symmetriegerüst* einer kristallographischen Punktgruppe besteht aus der Gesamtheit der den Symmetrieoperationen der Gruppe zugrunde liegenden Symmetrieelemente durch den invarianten Punkt *O*. Dies sind insbesondere die Dreh- und Drehinversionsachsen (Symmetrieachsen) sowie die Spiegelebenen (Symmetrieebenen) und das Inversionszentrum (Symmetriezentrum). Das Symmetriegerüst einer Punktgruppe ist die anschaulichste Repräsentation der entsprechenden Symmetrieoperationen. Alle notwendigen und hinreichenden Angaben zur Konstruktion des Symmetriegerüstes einer kristallographischen Punktgruppe finden sich in Tabelle 4.4 zusammen mit Tabelle 3.2.

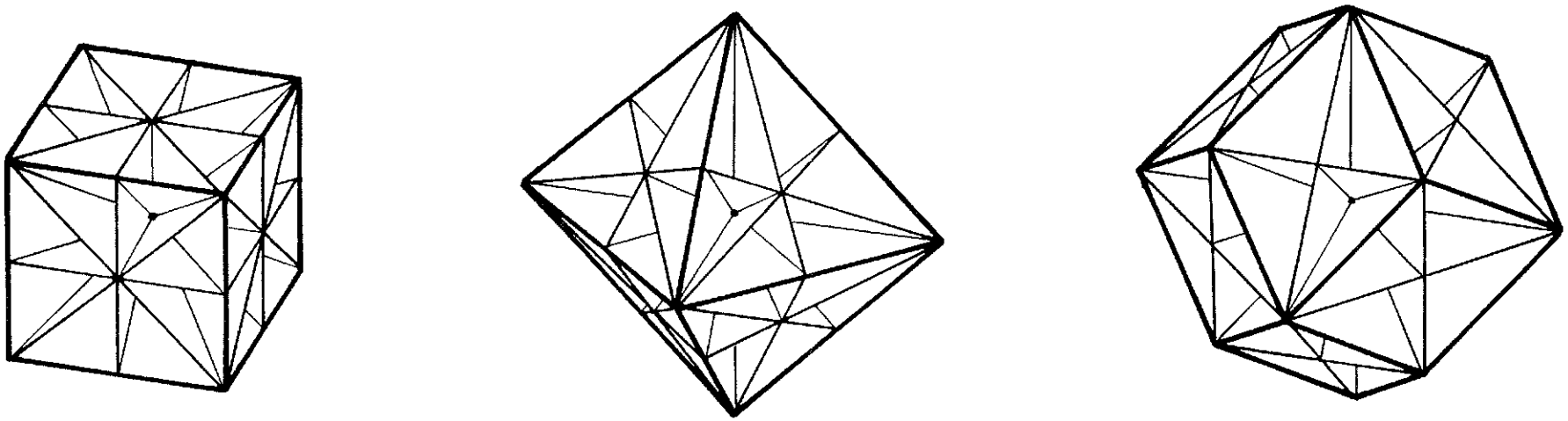
In den **Figuren 4.15 bis 4.19** sind die Symmetriegerüste der Holoedrien, das heißt der größten Symmetriegruppen von sechs Kristallsystemen, dargestellt. Die Holoedrie des triklinen Systems besitzt nur ein Symmetriezentrum **Z** und ist deshalb nicht abgebildet.

In der Kristallographie wird meist nur die stereographische Projektion der sphärischen Darstellung der Symmetrieelemente verwendet. Dies bedeutet, daß die Symmetrieachsen und -ebenen mit einer Sphäre geschnitten und diese Schnittfigur stereographisch in eine Ebene projiziert wird (Abschnitt 3.5). Symmetrieachsen erscheinen dann als Diametralpunkte auf stereographischen Bildern von Großkreisen und Symmetrieebenen als Kreise bzw. Geraden, welche den Grundkreis der stereographischen Projektion in diametralen Punkten schneiden.

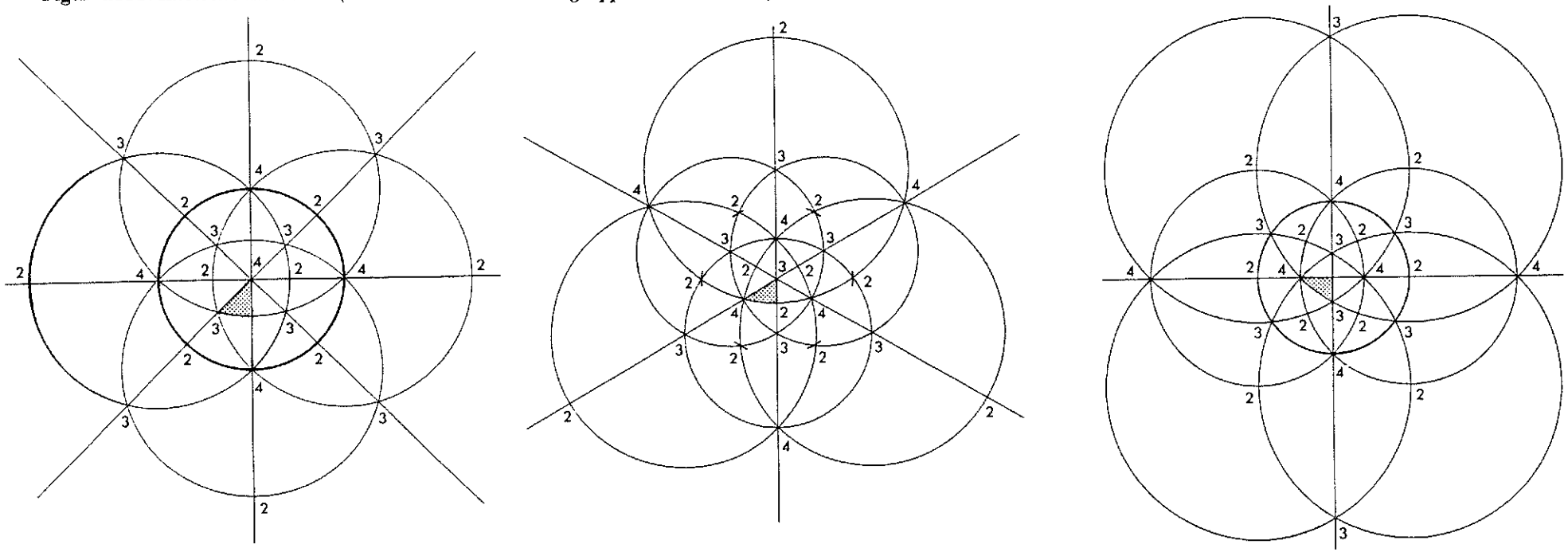
In den **Figuren 4.15 bis 4.19** sind zusätzlich die zu den Symmetriegerüsten der Holoedrien, das heißt der größten Gruppen der entsprechenden Kristallsysteme, gehörigen stereographischen Projektionen der jeweiligen sphärischen Darstellungen angegeben. Sämtlichen durchgezogenen Geraden und Kreisen entsprechen Symmetrieebenen. Die den Symmetrieachsen entsprechenden Punkte sind gemäß der Zähligkeit der Achsen markiert (dabei werden bei dem *einer* Achse entsprechenden Punkte*paar* beide Punkte markiert, so daß doppelt so viele Achsenmarkierungen erscheinen, als es Achsen gibt). Zur Förderung der anschaulich-geometrischen Einsicht wird die stereographische Projektion in der in der sphärischen Geometrie üblichen Weise dargestellt, und nicht wie in den meisten kristallographischen Lehrbüchern. In letzteren wird meist der «nördliche» Teil der Sphäre vom «Südpol» aus und der «südliche» Teil vom «Nordpol» aus projiziert, so daß alle Abbilder *innerhalb* des Grundkreises zu liegen kommen. Dabei wird in Kauf genommen, daß Großkreise in zwei Teilkreisen (bzw. Strecken) abgebildet werden, die sich in Diametralpunkten des Grundkreises treffen.



Figur 4.15a: ***Kubische Holoedrie (Oktaeder- oder Hexaedergruppe*** **m $\bar{3}$ m ≡ O × Z)**: *Projektion des Symmetriegerüstes*



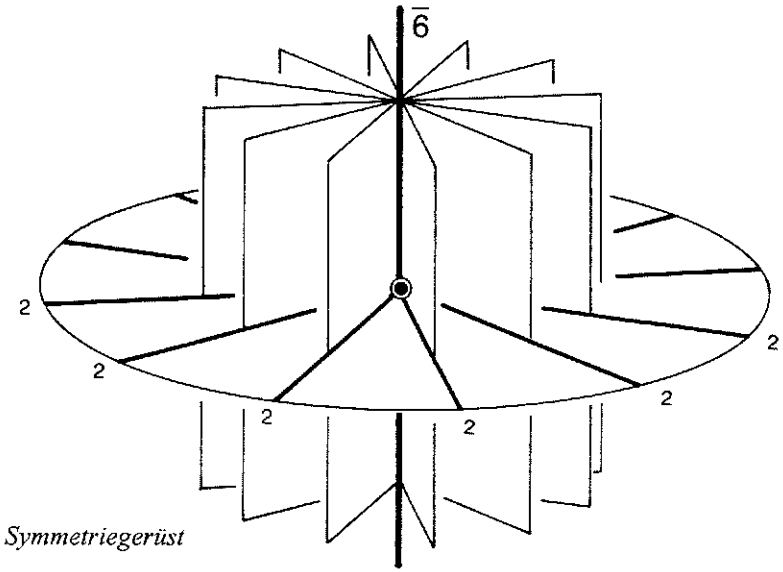
Figur 4.15b: ***Kubische Holoedrie (Oktaeder- oder Hexaedergruppe*** **m $\bar{3}$ m ≡ O × Z)**: *Hexaeder, Oktaeder und Rhombendodekaeder, geschnitten mit allen Symmetrieebenen*



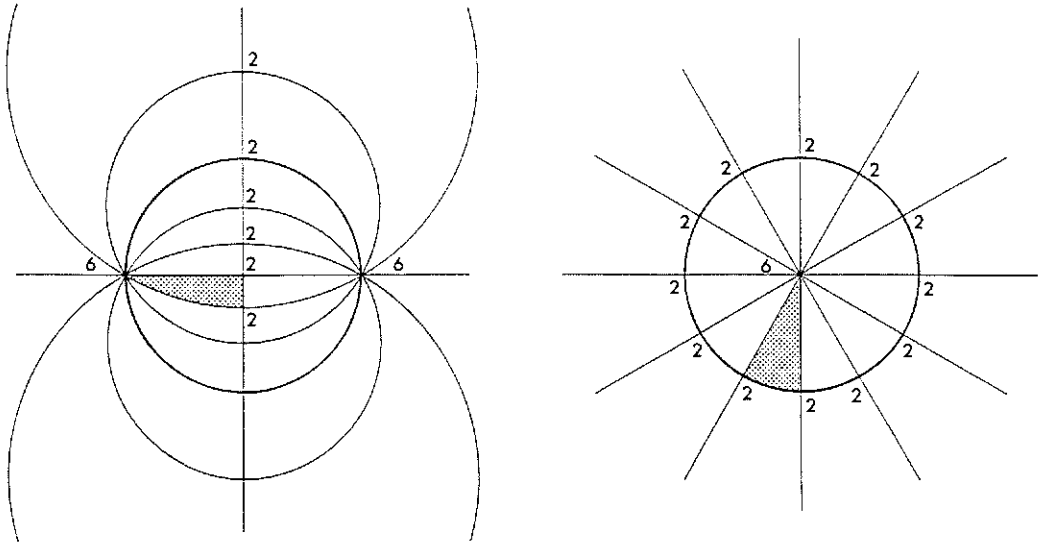
Projektion in Richtung einer 4-Achse *Projektion in Richtung einer 3-Achse* *Projektion in Richtung einer 2-Achse*

Figur 4.15c: ***Kubische Holoedrie (Oktaeder- oder Hexaedergruppe*** **m $\bar{3}$ m ≡ O × Z)**: *Stereographische Projektionen des Symmetriegerüstes*

HEXAGONALE HOLOEDRIE (**6/m mm** ≡ $\mathbf{D}_6 \times \mathbf{Z}$)

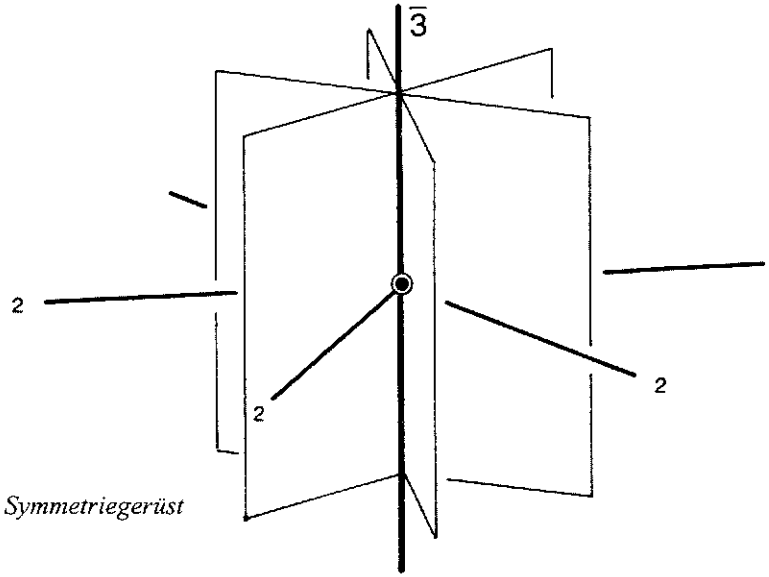


Symmetriegerüst

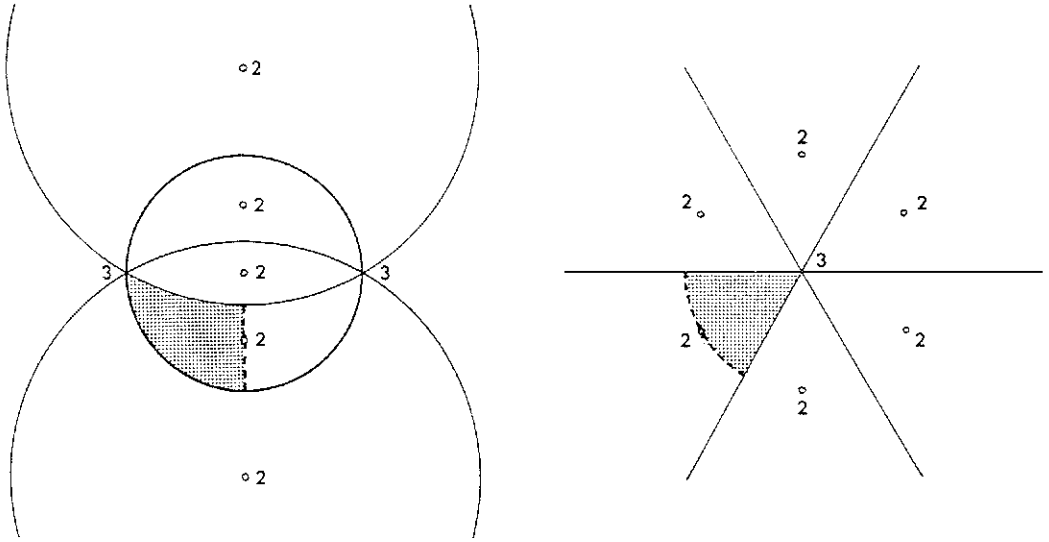


Stereographische Projektionen in Richtung der 2-Achse und in Richtung einer 6-Achse

TRIGONALE HOLOEDRIE ($\bar{3}$ **2/m** ≡ $\mathbf{D}_3 \times \mathbf{Z}$)



Symmetriegerüst



Stereographische Projektionen in Richtung der 2-Achse und in Richtung einer 3-Achse

Figur 4.16: ***Hexagonale und trigonale Holoedrie***: *Darstellungen des Symmetriegerüstes*

Die *gnomonische Darstellung* der sphärischen Darstellung (Abschnitt 3.5) des Symmetriegerüstes wird im Abschnitt 6.2 behandelt, da sie ein Spezialfall der projektiven Darstellung ist.

Vom Gesichtspunkt des Symmetriegerüstes der Holoedrie eines Kristallsystems bedeutet der Übergang zu den Hemiedrien und Tetartoedrien folgendes (siehe dazu Tabelle 4.5):

Hemiedrie II. Art: Wegnahme des Inversionszentrums, Existenz von $\bar{2}$, $\bar{4}$ oder **6** (Drehinversionsachsen der Zähligkeiten 2, 4 und 6).

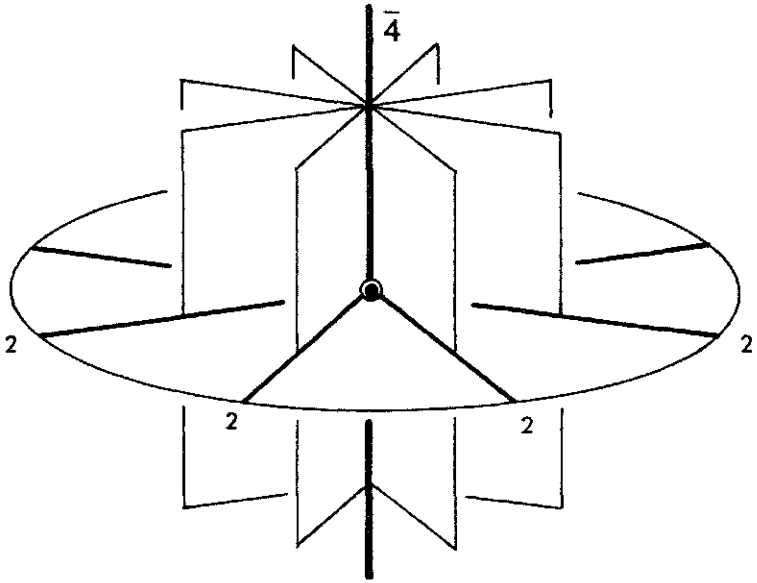
Hemimorphe Hemiedrie: Wegnahme der Symmetrieebene(n) senkrecht zu der (den) Hauptrichtung(en).

Enantiomorphe Hemiedrie: Wegnahme aller Symmetrieebenen und des Inversionszentrums; folglich bleiben nur reine Drehachsen übrig.

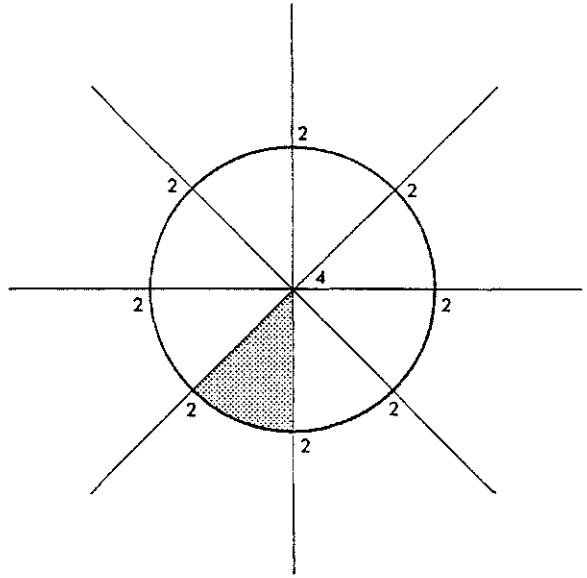
Paramorphe Hemiedrie: Wegnahme der Symmetrieebene(n), die durch die Hauptrichtung(en) gehen, aber nicht senkrecht zu einer Hauptrichtung sind.

Tetartoedrie (I. Art): Hemiedrie der Hemiedrie (zum Beispiel hemimorphe Hemiedrie der paramorphen Hemiedrie: Wegnahme der Symmetrieebene(n) senkrecht zu der (den) Hauptrichtung(en) sowie Wegnahme der Symmetrieebene(n), die durch die Hauptrichtung gehen).

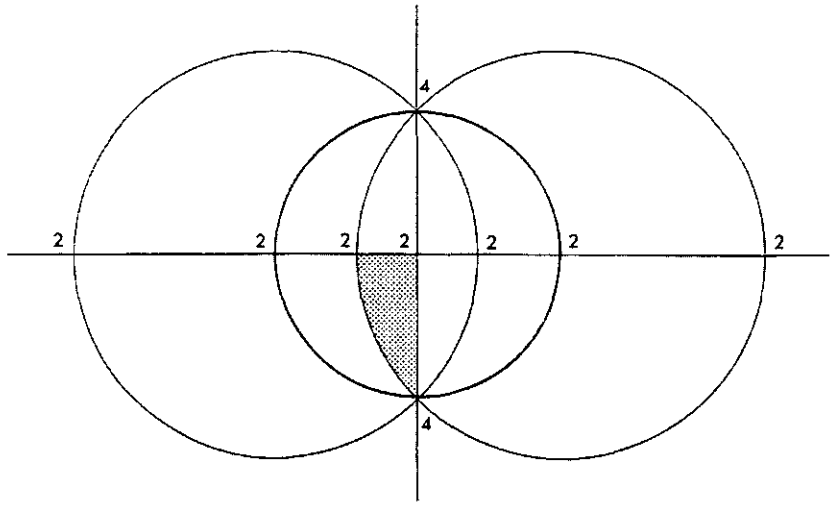
Tetartoedrie (II. Art): Wegnahme der Symmetrieebene(n) und **2**-Achse(n) einer Hemiedrie II. Art.



Figur 4.17a: ***Tetragonale Holoedrie*** **(4/m mm ≡ $D_4 \times Z$)**: *Projektion des Symmetriegerüstes*



*Stereographische Projektion in Richtung der **4**-Achse*



Stereographische Projektion in Richtung einer 2-Achse

Figur 4.17b: ***Tetragonale Holoedrie*** **(4/m mm ≡ $D_4 \times Z$)**: *Stereographische Projektionen des Symmetriegerüstes*

Punktgruppen, Transformationsgruppen, Fundamentalbereiche

Bisher wurde von bestimmten Polyedern, insbesondere von Kristallpolyedern bzw. von deren Tangentialpolyedern ausgegangen und nach abgeschlossenen Systemen von Deckbewegungen, das heißt Gruppen von Symmetrieoperationen, gesucht, welche diese Polyeder mit sich zur Deckung bringen. Auf diesem Wege wurde eine vollständige und detaillierte Übersicht aller endlichen Gruppen von Symmetrieoperationen mit Fixpunkt, die sogenannten Punktgruppen, gewonnen, die dann zu den 32 kristallographischen Punktgruppen spezialisiert wurden.

Im folgenden wird der bisherige Gesichtspunkt «auf den Kopf gestellt»: Es wird von den Symmetriegruppen als gegebenen Objekten ausgegangen und gefragt, was sie «bewirken» oder «transformieren», wenn man sie auf gewisse geometrische Gebilde des Raumes «anwendet». Symmetriegruppen, die auf bestimmte Bereiche angewendet werden, heißen bezüglich dieser Bereiche *Transformationsgruppen.* So können die Punktgruppen als Transformationsgruppen des gesamten dreidimensionalen Raumes aufgefaßt werden, oder auch nur als Transformationsgruppen einer Sphäre mit Mittelpunkt im invarianten Punkt oder als Transformationsgruppen einer Ebene.

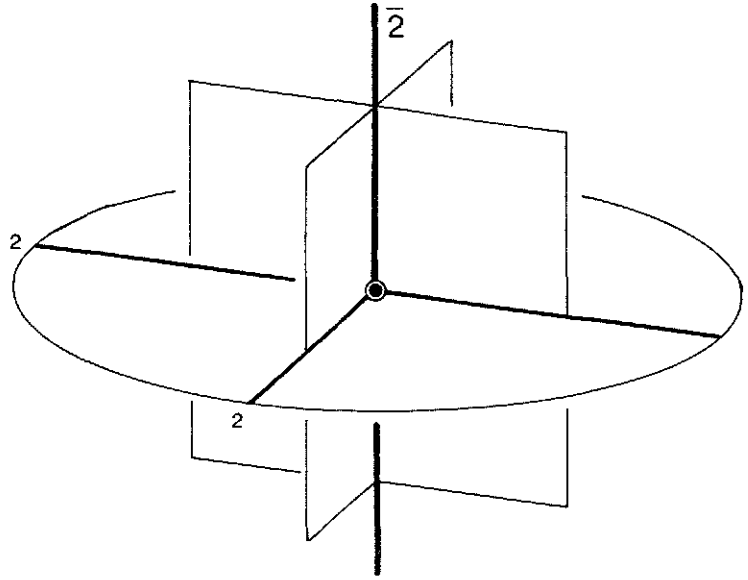
Bezieht man zum Beispiel die Symmetrieoperationen der Punktgruppe auf eine Sphäre mit Mittelpunkt im invarianten Punkt, so schneidet das Symmetriegerüst aus der Sphäre eine Anzahl von Großkreisen und Diametralpunktepaaren. Für die Holoedrien des kubischen, tetragonalen, orthorhombischen und hexagonalen Kristallsystems ergibt sich ein Netz von Großkreisen, welche die Sphäre in lauter kongruente sphärische Dreiecke einteilen (**Figur 4.23**, **4.17a**, **4.18**, **4.16**). Da das Symmetriegerüst bei allen Operationen der jeweiligen Gruppe invariant ist, trifft dies auch für dieses Netz von Großkreisen zu. Greift man jedoch irgendein sphärisches Dreieck heraus und unterwirft es einer Symmetrieoperation der entsprechenden Gruppe, so wird es in irgendein anderes sphärisches Dreieck transformiert: keines dieser Dreiecke wird (außer bei der Identität) in sich selbst transformiert.

Wie im nächsten Abschnitt 4.6 bewiesen werden soll, wird die Sphäre durch Vervielfältigung irgendeines dieser sphärischen Dreiecke durch die Symmetrieoperationen der jeweiligen Holoedrie genau einmal überdeckt. Diese Dreiecke heißen in der Kristallographie *charakteristische Dreiecke* oder *Elementardreiecke* der entsprechenden Punktsymmetriegruppe.

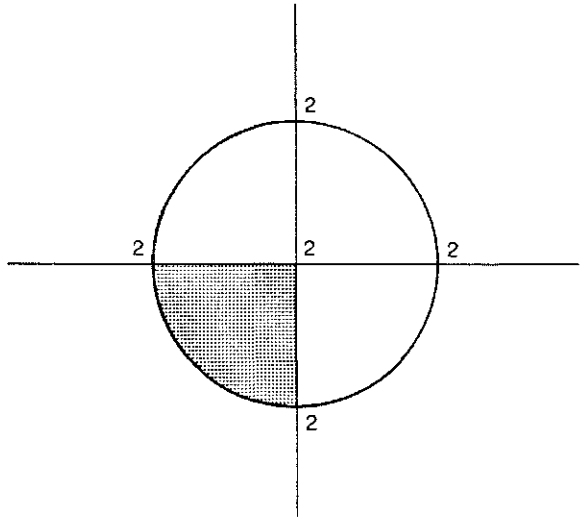
Bei den Hemiedrien und Tetartoedrien dieser Gruppen wird die Sphäre durch ein durch die Operationen dieser Gruppe vervielfältigtes Elementardreieck nur zur Hälfte bzw. zu einem Viertel bedeckt.

Als Spezialfall ergeben sich im Falle des monoklinen Systems die Halbsphäre und im Falle des triklinen Systems die ganze Sphäre als Elementarbereich.

Eine Sonderstellung nimmt die *Holoedrie des trigonalen Kristallsystems* ($\bar{3}\,2/m \equiv D_3 \times Z$) ein. Ihr Symmetriegerüst (**Figur 4.16**) schneidet aus der Sphäre sechs sphärische Zweiecke aus, welche durch die zweizähligen Achsen in sich selbst transformiert werden.



Projektion des Symmetriegerüstes



Stereographische Projektion des Symmetriegerüstes

Figur 4.18: ***Orthorhombische Holoedrie*** **(2/m mm ≡ $D_2 \times Z$):** *Darstellungen des Symmetriegerüstes*

Legt man durch diese zweizähligen Achsen eine Ebene senkrecht zur Hauptachse, so erhält man daraus zwölf sphärische Dreiecke, welche zwar Elementarbereiche im obigen Sinne, jedoch nicht allein durch die Elemente des Symmetriegerüstes bestimmt sind.

Hat man einmal den «Wirkungsbereich» oder «Transformationsbereich» einer Transformationsgruppe festgelegt, so kann man die *Bahnen* von geometrischen Elementen (Punkt, Gerade, Ebene) studieren, welche diese zurücklegen, wenn sie durch die Symmetrieoperationen der Gruppe «bewegt» oder «transformiert» werden. Man spricht dann von *Punktbahnen*, *Geradenbahnen* bzw. *Ebenenbahnen*.

Da es sich bei den Punktgruppen um endliche Gruppen handelt, das heißt um Gruppen, welche nur endlich viele Operationen enthalten, bestehen diese Bahnen jeweils auch nur aus endlich vielen Elementen.

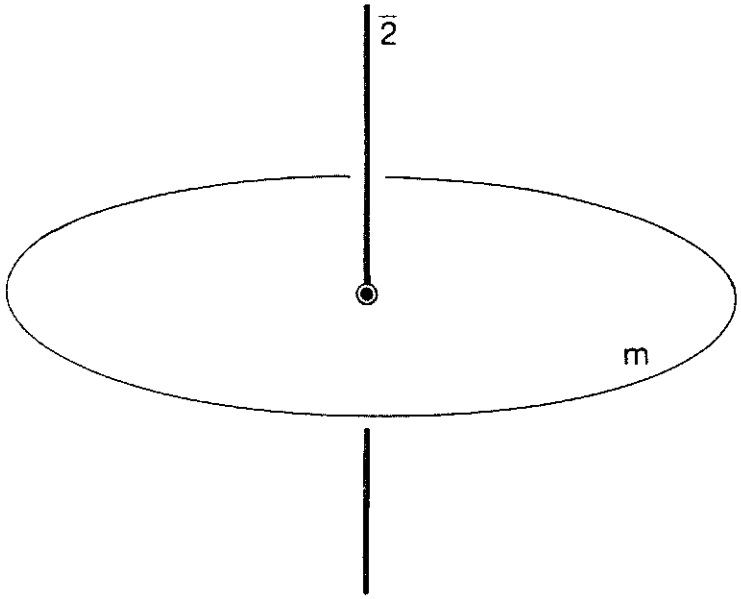
Punktbahnen und Ebenenbahnen der Punktgruppen bezüglich der Sphäre werden ausführlich im Kapitel 5 untersucht. Sie bilden die Grundlage einer systematischen Theorie symmetrischer Polyeder.

Ein *Punkt-Fundamentalbereich* einer Punktgruppe bezüglich ihres Transformationsbereiches ist eine beliebige Teilmenge dieses Bereiches, die genau einen Punkt aus jeder Punktbahn enthält. Dies bedeutet, daß aus irgendeinem Punkt-Fundamentalbereich F durch Anwendung aller Symmetrieoperationen der Gruppe der ganze Transformationsbereich überdeckt werden kann, ohne Überlappungen und Zwischenräume. Folglich ist jeder Punkt vermöge der Symmetrieoperationen der Gruppe äquivalent zu irgendeinem Punkt des Fundamentalbereichs F; dabei sind keine zwei Punkte von F symmetrieäquivalent, außer sie liegen auf dem Rand von F. Entsprechend werden *Ebenen-Fundamentalbereiche* und *Geraden-Fundamentalbereiche* definiert.

Ist der Transformationsbereich der Punktgruppen die Sphäre mit Mittelpunkt im invarianten Punkt, so sind die Elementardreiecke Punkt-Fundamentalbereiche. Sie heißen deshalb *Fundamentaldreiecke*. (In den stereographischen Projektionen der Figuren 4.15 bis 4.18 ist jeweils ein solches Fundamentaldreieck hervorgehoben.) Für Elementardreiecke, die eindeutig durch die Symmetrieebenen der jeweiligen Symmetriegerüste bestimmt sind, wird dies im Abschnitt 4.6 bewiesen. Wie bereits erwähnt, nimmt dabei die Holoedrie des trigonalen Systems (und allgemeiner des n-gonalen Systems für ungerades n, siehe Abschnitt 5.5) eine Sonderstellung ein.

Jedes solche Fundamentaldreieck enthält in einer Ecke die bzw. eine Achse der Hauptrichtung(en) sowie, außer im trigonalen System (und allgemeiner im n-gonalen System für n ungerade), in den weiteren Ecken eine Achse der ersten und der zweiten Nebenrichtung(en). Der Zusammenhang des Fundamentaldreiecks mit den Flächenlagetypen aus Abschnitt 3.4 wird im Abschnitt 5.1 behandelt.

Im Kapitel 6 werden die Aktionen der Punktgruppen bezüglich einer nicht durch den invarianten Punkt gehenden Ebene, insbesondere der Fernebene des dreidimensionalen euklidischen Raumes, studiert. Dies führt auf die sogenannten *Linearprojektionen des Symmetriegerüstes* und der entsprechenden Fundamentaldreiecke.



Figur 4.19: ***Monokline Holoedrie*** **(2/m ≡ $C_2 \times Z$)**: *Projektion des Symmetriegerüstes*

4.6 *Punktgruppen und Fundamentalbereiche*

Diskrete Gruppen aus Spiegelungen

Gemäß Abschnitt 4.1 und 4.2 lassen sich alle Symmetrieoperationen mit einem invarianten Punkt O durch Spiegelungen an Ebenen durch O erzeugen. Es liegt also nahe, die Gruppe diskreter Deckbewegungen der Sphäre mit Mittelpunkt O aus den überhaupt möglichen Gruppen von Spiegelungen an Ebenen durch O abzuleiten.

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß sich die größten diskreten Gruppen von Deckbewegungen der Sphäre aus höchstens drei Spiegelungen an Ebenen durch den Mittelpunkt der Sphäre erzeugen lassen. Im weiteren wird bewiesen, daß die Fundamentalbereiche dieser auf der Sphäre operierenden Gruppen, das heißt der durch Spiegelungen erzeugten Transformationsgruppen der Sphäre, sphärische Dreiecke sind.

Es sei eine endliche Menge von Spiegelungsebenen gegeben, die (1) alle durch einen Punkt gehen und (2) deren Anordnung bezüglich der Spiegelungen an diesen Ebenen symmetrisch ist. Letzteres bedeutet, daß die Anordnung der Spiegelebenen bezüglich der Operationen der Gruppe invariant ist. Gruppen aus solchen Spiegelungen sind durch Spiegelungen erzeugte endliche Gruppen; sie werden auch kurz *Spiegelungsgruppen* genannt, obwohl sie auch Drehungen enthalten können.

Erfüllt die Spiegelanordnung nicht die genannte Eigenschaft (2), so gibt es sogenannte *virtuelle Spiegel*, das heißt solche Spiegel, die vermöge der Symmetrieoperationen der übrigen Spiegel erzeugt werden, aber selbst nicht zu dieser Anordnung gehören. Solche Anordnungen werden im folgenden nicht miteinbezogen.

Legt man eine Sphäre um den gemeinsamen Punkt der Spiegelungsebenen, so ergibt sich, wie gleich gezeigt werden soll, daß diese Ebenen eine Anordnung von Großkreisen ausschneiden, welche die Sphäre in kongruente Bereiche gliedert, deren Winkel ganzzahlige Teile von π sind. Diese Bereiche werden *Elementarbereiche* genannt; weiter unten wird gezeigt, daß es sich um *Fundamentalbereiche* handelt.

Die Kongruenz dieser Elementarbereiche folgt aus der Tatsache, daß die Spiegelungen Kongruenztransformationen sind und der Voraussetzung (2), daß die Anordnung der Spiegel bezüglich aller Spiegelungen invariant sein soll.

Zunächst ist aus Symmetriegründen klar, daß alle Innenwinkel der Elementarbereiche in einem Punkt, etwa X, gleich groß sein müssen. Die möglichen Innenwinkel dieser kongruenten Bereiche ergeben sich ebenfalls aus der Invarianz der Spiegelanordnung: nur bei ganzzahligen Teilen von $180° \equiv \pi$, also $\pi/2$, $\pi/3$, $\pi/4$, ..., π/n, ... ist garantiert, daß die Elementarbereiche nicht durch virtuelle Spiegel weiter unterteilt werden.

Denn wäre etwa der Winkel im Punkt X ein rationales Vielfaches von π, etwa gleich $j\pi/p$ für teilerfremde natürliche Zahlen j, $p > 1$, so gibt es, wie aus der elementaren Zahlentheorie bekannt ist, natürliche Zahlen n und k mit $nj = kp + 1$ (siehe etwa Kowol [1995], Kapitel 2). Damit unterscheidet sich das Vielfache

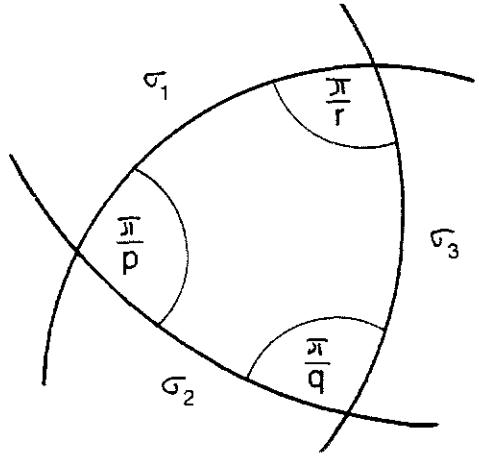
$$nj\pi/p = k\pi + \pi/p$$

des ursprünglichen Winkels in X um ein ganzzahliges Vielfaches $k\pi$ von π/p. Dies heißt aber nichts anderes, als daß es durch X einen virtuellen Spiegel gibt, der zu einem der gegebenen Spiegel in X den Winkel π/p besitzt – im Widerspruch zur Voraussetzung, daß es nur Spiegel im Winkelabstand von $j\pi/p$ gibt.

Daraus folgt unmittelbar, daß keine stumpfen Winkel, das heißt Winkel, die größer als $\pi/2$ sind, vorkommen können. Dies hat insbesondere zur Folge, daß es keine Elementarbereiche gibt mit mehr als drei Seiten oder Ecken. Denn die Winkelsumme eines sphärischen n-Ecks ist größer als diejenige des ebenen n-Ecks, die $(n-2)\pi$ beträgt. Also muß mindestens ein Winkel des sphärischen n-Ecks größer als $(n-2)\pi/n$ sein, was für $n \geq 4$ einen stumpfen Winkel ergeben würde. Also kommen für Elementarbereiche von Spiegelungsgruppen nur die *halbe Sphäre* (eine Spiegelebene), *sphärische Zweiecke* mit Ecken in Diametralpunten («Monde») und *sphärische Dreiecke* in Betracht (Figur 4.21 bis 4.24).

Die einfachste durch Spiegelungen erzeugte Gruppe ist $\mathbf{D}_1$. Sie hat die Ordnung 2 und wird durch *eine* Spiegelungsebene erzeugt. Ihre Elementarbereiche sind halbe Sphären.

Die Diedergruppen $\mathbf{p22} \equiv \mathbf{D}_p$ für $p > 1$ der Ordnung $2p$ sind diejenigen Spiegelungsgruppen, die durch *zwei* Spiegelungen σ_1, σ_2 mit $(\sigma_1)^2 = (\sigma_2)^2 = \varepsilon$ im Winkel von π/p erzeugt werden. Coxeter/Moser [1980] schreiben für diese Gruppe $[p]$. Total ergeben sich auf diese Weise p Spiegelebenen durch eine Gerade. Die Elementarbereiche sind Zweiecke mit Winkel π/p. Die Operation $\sigma_1 \circ \sigma_2$ ist eine Drehung um den Winkel $2\pi/p$, also gilt $(\sigma_1 \circ \sigma_2)^p = \varepsilon$. Damit sind alle Fälle von Spiegelungsgruppen erschöpft, die ein sphärisches Zweieck als Elementarbereich haben.



Figur 4.20: *Sphärisches Fundamentaldreieck*

Die Erzeugung endlicher Spiegelungsgruppen aus *drei* Spiegelebenen ergibt nichts Neues, falls diese Ebenen eine Gerade gemeinsam haben. Also kommen als erzeugende Spiegelungen σ_1, σ_2, σ_3 nur solche in Frage, die ein sphärisches Dreieck mit den Winkeln

$$\angle(\sigma_1, \sigma_2) = \pi/p,$$
$$\angle(\sigma_2, \sigma_3) = \pi/q,$$
$$\angle(\sigma_3, \sigma_1) = \pi/r$$

mit $p, q, r \geq 2$ aufspannen (**Figur 4.20**). Dabei gilt

$$(\sigma_1)^2 = (\sigma_2)^2 = (\sigma_3)^2 = \varepsilon$$
$$(\sigma_1 \circ \sigma_2)^p = (\sigma_2 \circ \sigma_3)^q = (\sigma_3 \circ \sigma_1)^r = \varepsilon.$$

Für die Winkelsumme eines sphärischen Dreiecks gilt

$$\pi\left(\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r}\right) > \pi$$

deshalb ist

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r} > 1.$$

Da bereits

$$\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1,$$

muß mindestens eine der drei Zahlen p, q, r gleich 2 sein, etwa $r = 2$. Damit ergibt sich schließlich als Bedingung an p und q:

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{2} > 1$$

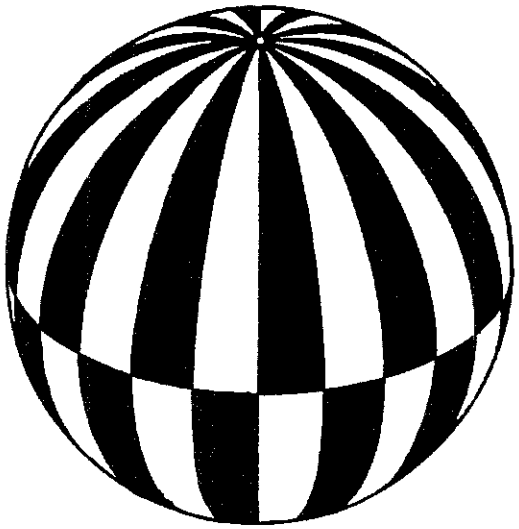
oder

$$(p - 2)(q - 2) < 4.$$

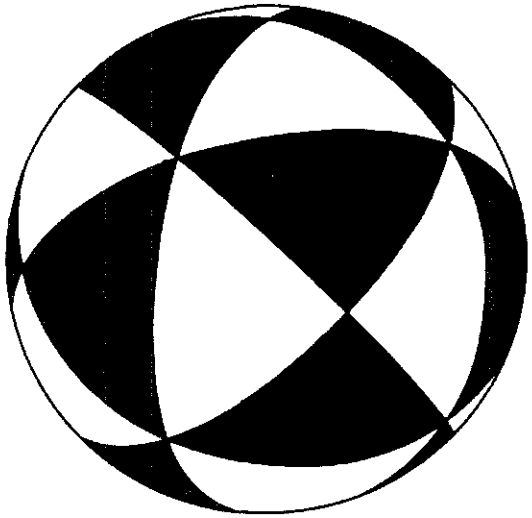
Schreibt man $[p, q]$ oder $[q, p]$ für die möglichen Werte sowie die entsprechenden Spiegelungsgruppen, so ergeben sich die vier Fälle:

$$[2, p] \quad [3, 3] \quad [3, 4] \quad [3, 5].$$

Ersteres entspricht einem sphärischen Dreieck mit zwei rechten Winkeln und einem Winkel π/p. Die übrigen Fälle sind sphärische Dreiecke, die einen rechten Winkel und einen Winkel von $\pi/3$ haben.



Figur 4.21: *Fundamentaldreiecke der Spiegelungsgruppe* [2, 12]: *Volle Diedergruppe* $\mathbf{D}_{12} \times \mathbf{Z}$



Figur 4.22: *Fundamentaldreiecke der Spiegelungsgruppe* [3, 3]: *Volle Tetraedergruppe* **OT**

Die Ordnung der diesen sphärischen Dreiecken entsprechenden Spiegelungsgruppen ist gleich der Anzahl solcher Dreiecke, welche die Einheitssphäre mit der Oberfläche 4π überdecken. Die Fläche des sphärischen Dreiecks mit den Winkeln π/p, π/q, $\pi/2$ auf der Einheitssphäre ist gleich dem sphärischen Exzess

$$\pi\left(\frac{1}{p}+\frac{1}{q}+\frac{1}{2}\right)-\pi=\left(\frac{1}{p}+\frac{1}{q}-\frac{1}{2}\right)\pi.$$

Daraus ergibt sich die Ordnung g zu

$$g=\frac{4}{\frac{1}{p}+\frac{1}{q}-\frac{1}{2}}=\frac{8pq}{4-(p-2)(q-2)}$$

Insbesondere erhält man für die vier obigen Fälle die Ordnungen $4p$, 24, 48, 120.

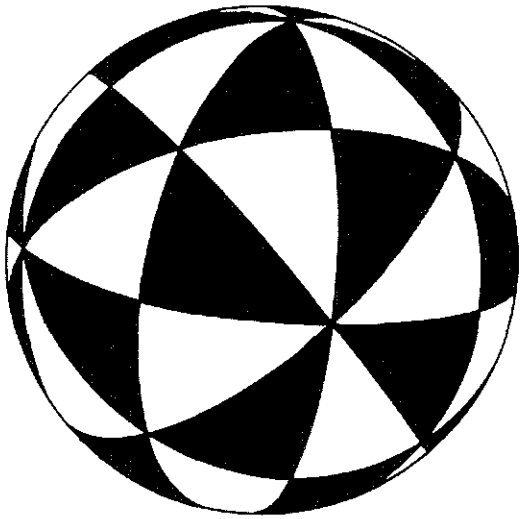
Gemäß den obigen Ausführungen hat eine Gruppe, die aus *vier oder mehr* Spiegelungen, deren Spiegelebenen durch einen Punkt, aber nicht durch eine Gerade gehen, erzeugt wird, ebenfalls ein sphärisches Dreieck als Elementarbereich. Damit ist diese Gruppe jedoch isomorph zu derjenigen Gruppe, welche aus den die Seiten dieses Dreiecks bildenden Spiegelebenen erzeugt wird.

Die den oben abgeleiteten sphärischen Dreiecken entsprechenden, aus drei Spiegelungen erzeugten endlichen Gruppen $[2, p]$, $[3, 3]$, $[3, 4]$, $[3, 5]$ sind genau die Gruppen $\mathbf{2p/m\ mm} \equiv \mathbf{D}_{2p} \times \mathbf{Z}$, $\bar{4}\,\mathbf{3m} \equiv \mathbf{OT}$, $\mathbf{m}\,\bar{3}\,\mathbf{m} \equiv \mathbf{O} \times \mathbf{Z}$, $\mathbf{m}\,\bar{3}\,\bar{5} \equiv \mathbf{I} \times \mathbf{Z}$, das heißt die vollen Diedergruppen $\mathbf{n/m\ mm} \equiv \mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$ für n gerade, die volle Tetraedergruppe, die volle Hexaeder- oder Oktaedergruppe und die volle Ikosaedergruppe. Dies ergibt sich aus der Übereinstimmung der Gruppenordnung sowie insbesondere aus der Übereinstimmung der Konfiguration der Spiegelungsebenen bzw. der Anordnung der Großkreise und Elementardreiecke auf der Sphäre bezüglich der jeweiligen Spiegelungsgruppen mit dem Symmetriegerüst der genannten Punktgruppen bzw. deren sphärischen Darstellungen oder stereographischen Projektionen.

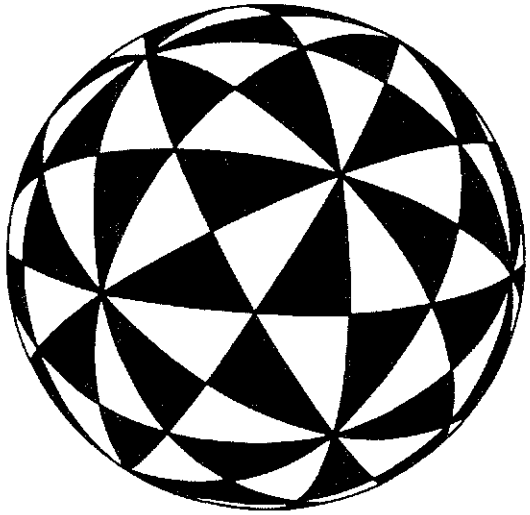
Für die vollen Diedergruppen $\mathbf{n/m\ mm} \equiv \mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$ für n gerade siehe die **Figuren 4.21**, **5.21** und **5.22a**, für die volle Tetraedergruppe die **Figuren 4.1ab** und **4.22**, für die volle Hexaeder- oder Oktaedergruppe die Figuren **4.15ab** und **4.23** und für die volle Ikosaedergruppe die **Figuren 4.24** und **5.11ab**.

Für die Bestimmung des Fundamentalbereichs der Diedergruppen $\bar{\mathbf{n}}\,\mathbf{2/m} \equiv \mathbf{D}_n \times \mathbf{Z}$ für ungerades n, insbesondere die Holoedrie des trigonalen Systems $\bar{3}\,\mathbf{2/m} \equiv \mathbf{D}_3 \times \mathbf{Z}$, siehe Abschnitt 5.5 und **Figur 5.22b** bzw. Abschnitt 4.5 und **Figur 4.16**.

Für die Ableitung der weiteren Punktgruppen durch Untergruppenbildung siehe Coxeter/Moser [1980], §4.4. Dort wird auch die in Tabelle 4.2 angeführte Notation, die auf der Theorie der Erzeugenden und Relationen von Gruppen basiert, genauer erklärt. Die Hinzufügung eines $^+$ zu einem Gruppensymbol bedeutet, daß zu einer Untergruppe vom Index 2 übergegangen wird.



Figur 4.23: *Fundamentaldreiecke der Spiegelungsgruppe* [3, 4]: *Volle Hexaeder- oder Oktaedergruppe* $\mathbf{O} \times \mathbf{Z}$



Figur 4.24: *Fundamentaldreiecke der Spiegelungsgruppe* [3, 5]: *Volle Ikosaedergruppe* $\mathbf{I} \times \mathbf{Z}$

Elementardreiecke sind Fundamentaldreiecke

Es steht noch der Beweis aus, daß die durch die Spiegelebenen der Spiegelungsgruppen ausgeschnittenen sphärischen Dreiecke, eben die Elementardreiecke, tatsächlich Fundamentalbereiche, das heißt Teilmengen der Sphäre sind, die aus jeder Punktbahn bezüglich der entsprechenden Spiegelungsgruppe genau einen Punkt enthalten. Man beachte dabei: bei Randpunkten kann es Ausnahmen geben.

Ist F_0 irgendein solches Fundamentaldreieck, so muß man demnach zeigen, daß aus $\sigma(F_0) = \sigma'(F_0)$ für irgendwelche zwei verschiedenen Operationen σ, σ' der Spiegelungsgruppe folgt $\sigma = \sigma''$.

Insbesondere transformieren die erzeugenden Spiegelungen σ_1, σ_2, σ_3 das Dreieck F_0 in die benachbarten Dreiecke $\sigma_1(F_0)$, $\sigma_2(F_0)$, $\sigma_3(F_0)$. Die Operation σ transformiert F_0 mit seinen Nachbardreiecken in das Dreieck $\sigma(F_0)$ mit seinen Nachbarn $\sigma_1 \circ \sigma(F_0)$, $\sigma_2 \circ \sigma(F_0)$, $\sigma_3 \circ \sigma(F_0)$. Überschreitet man also etwa die Seite σ_1 von $\sigma(F_0)$ aus, so kommt man in den Bereich $\sigma_1 \circ \sigma(F_0)$.

Jeder Darstellung von σ als Zusammensetzung von erzeugenden Operationen

$$\ldots \circ \sigma_k \circ \sigma_j \circ \sigma_i$$

kann in folgender Weise ein kontinuierlicher Weg von einem Punkt innerhalb F_0 zu einem Punkt innerhalb $\sigma(F_0)$ zugeordnet werden. Der Weg beginnt in F_0 mit einer Überschreitung von σ_i nach $\sigma_i(F_0)$, geht weiter mit einer Überschreitung von σ_j nach $\sigma_j \circ \sigma_i(F_0)$, dann von $\sigma_j \circ \sigma_i(F_0)$ nach $\sigma_k \circ \sigma_j \circ \sigma_i(F_0)$ über σ_k, etc. Insbesondere soll dabei kein Schnittpunkt zweier σ_l, σ_m überschritten werden.

Zwei verschiedene Wege σ, σ' von F_0 nach $\sigma(F_0)$ mit $\sigma(F_0) = \sigma'(F_0)$ können zu einem geschlossenen Weg

$$\sigma' \circ \sigma^{-1} = \sigma_a \circ \sigma_b \circ \ldots \circ \sigma_g$$

von F_0 nach F_0 vereinigt werden. Kann man zeigen, daß

$$\sigma_a \circ \sigma_b \circ \ldots \circ \sigma_g = \varepsilon$$

so ist der Beweis fertig, denn aus $\sigma' \circ \sigma^{-1} = \varepsilon$ folgt $\sigma' = \sigma$.

Da die Sphäre einfach zusammenhängend ist, kann grundsätzlich jeder kontinuierliche Weg auf einen Punkt zusammengezogen werden. Bei diesem Prozeß überschreitet eine Wegschleife entweder nur irgendein σ_i, und damit reduziert sich $\sigma' \circ \sigma^{-1}$ um $(\sigma_i)^2 = \varepsilon$ oder eine Ecke, wo sich etwa σ_1 und σ_2 treffen, und damit reduziert sich $\sigma' \circ \sigma^{-1}$ um $(\sigma_1 \circ \sigma_2)^p = \varepsilon$. Denn im ersten Fall tritt die Schleife zweimal hintereinander über σ_i und im zweiten umrundet sie den ganzen Punkt, trifft also genau p-mal abwechselnd auf σ_1 und σ_2.

Dem geometrischen Prozeß der Zusammenziehung des Weges auf einen Punkt entspricht also die sukzessive algebraische Reduktion des Ausdrucks $\sigma' \circ \sigma^{-1}$ vermöge der definierenden Relationen

$$(\sigma_1)^2 = (\sigma_2)^2 = (\sigma_3)^2 = \varepsilon$$

$$(\sigma_1 \circ \sigma_2)^p = (\sigma_2 \circ \sigma_3)^q = (\sigma_3 \circ \sigma_1)^2 = \varepsilon$$

bis zur Identität ε. Daraus folgt einerseits, daß diese Relationen zur Festlegung der Gruppe hinreichen, und andererseits, daß F_0 tatsächlich ein Fundamentaldreieck ist: Jeder Punkt der Sphäre, ob innerhalb oder auf dem Rand eines solchen Dreiecks, kann aus einem Punkt in F_0 durch eine Operation σ der Spiegelungsgruppe abgeleitet werden.

Verschiedene Modelle einer abstrakten Gruppe

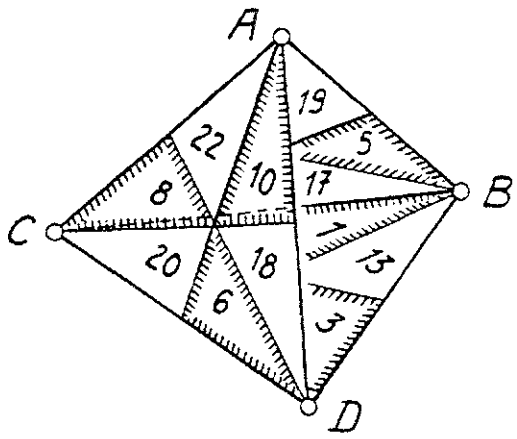
Zur Illustration des Verhältnisses von abstrakten Gruppen, Punktgruppen und Fundamentaldreiecken werden die beiden geometrischen Realisierungen der symmetrischen Gruppe S_4 der Ordnung 4 als Punktgruppen betrachtet. Zunächst kann diese Gruppe als Permutationsgruppe (Gruppe der Vertauschungen) von vier Elementen A, B, C, D dargestellt werden. Die 24 Operationen werden von **1** bis **24** numeriert; damit ergibt sich zum Beispiel für die Permutationen **17** und **18**, die A, B, C, D in D, B, C, A bzw. in B, D, A, C transformieren, einfach $DBCA$ bzw. $BDAC$. Zusätzlich wird die Darstellung der Permutationen durch Zyklen angegeben: $(AD)(B)(C)$ oder $(ABDC)$ bedeutet, daß A in D und D in A übergeht und B sowie C in sich selbst transformiert werden bzw. daß A in B, B in D, D in C und C in A übergeht.

Gruppe S_4 der Vertauschungen von vier Elementen A, B, C, D:

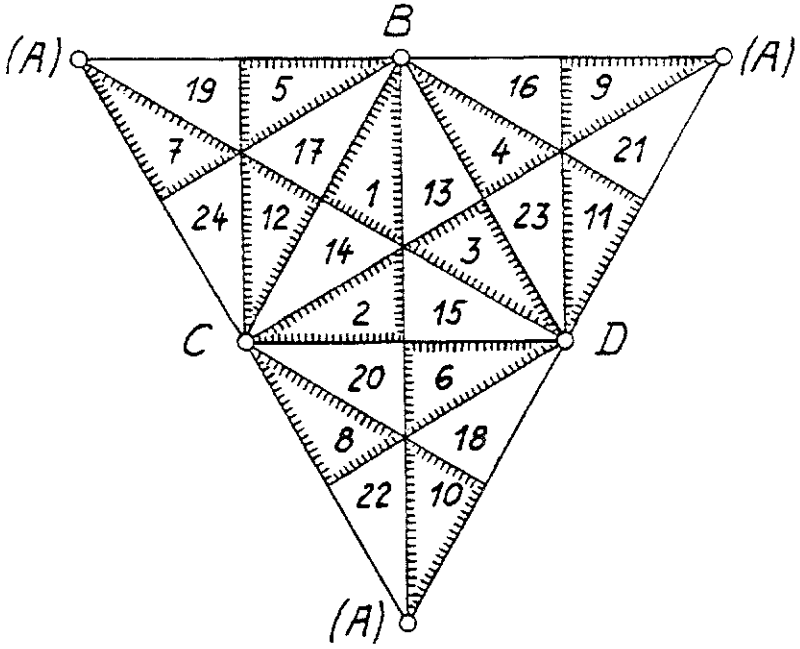
1	$ABCD \equiv (A)(B)(C)(D)$	**7**	$DACB \equiv (ADB)(C)$	**13**	$ABDC \equiv (A)(B)(CD)$	**19**	$DABC \equiv (ADCB)$
2	$ACDB \equiv (A)(BCD)$	**8**	$BCAD \equiv (ABC)(D)$	**14**	$ACBD \equiv (A)(BC)(D)$	**20**	$BCDA \equiv (ABCD)$
3	$ADBC \equiv (A)(BDC)$	**9**	$CABD \equiv (ACB)(D)$	**15**	$ADCB \equiv (A)(BD)(C)$	**21**	$CADB \equiv (ACDB)$
4	$CBDA \equiv (ACD)(B)$	**10**	$BADC \equiv (AB)(CD)$	**16**	$CBAD \equiv (AC)(B)(D)$	**22**	$BACD \equiv (AB)(CD)$
5	$DBAC \equiv (ADC)(B)$	**11**	$CDAB \equiv (AC)(BD)$	**17**	$DBCA \equiv (AD)(B)(C)$	**23**	$CDBA \equiv (ACBD)$
6	$BDCA \equiv (ABD)(C)$	**12**	$DCBA \equiv (AD)(BC)$	**18**	$BDAC \equiv (ABDC)$	**24**	$DCAB \equiv (ADBC)$

Interpretiert man A, B, C, D als die Ecken eines regulären Tetraeders, so erhält man gerade die volle Symmetriegruppe $\bar{4}\,3\mathbf{m} \equiv \mathbf{OT}$ des Tetraeders. Schneidet man die Oberfläche des Tetraeders mit seinen 6 Symmetrieebenen, so erhält man auf jeder Fläche 6 Dreiecke, insgesamt also 24 Dreiecke. Werden diese auf die Umkugel projiziert, so erhält man genau die Fundamentaldreiecke der entsprechenden Spiegelungsgruppe (**Figur 4.22**). Jede Operation dieser Gruppe transformiert ein beliebiges Dreieck in ein bestimmtes anderes. Dabei sind die Operationen **1** bis **12** gleichsinnige Deckoperationen (Drehungen) inklusive Identität, **13** bis **17** und **22** Spiegelungen und die übrigen Operationen Drehspiegelungen. **Figur 4.25a** zeigt, wohin einige der oben angegebenen Operationen das Ausgangsdreieck **1** auf dem Tetraeder transformieren. Dabei sind die Dreiecke gemäß den sie dorthin abbildenden Transformationen numeriert. **Figur 4.25b** zeigt eine Abwicklung der Oberfläche des Tetraeders, auf der *alle* Operationen angegeben sind.

Wird die symmetrische Gruppe der Ordnung 4 als Gruppe **432** ≡ **O** der gleichsinnigen Symmetrien eines Würfels bzw. Oktaeders interpretiert, so sind die Elemente A, B, C, D Raumdiagonalen des Würfels bzw. Verbindungsgeraden der Flächenmitten des Oktaeders (**Figur 4.26ab**). Die Geraden P, Q, R sind die Verbindungsgeraden der Flächenmitten des Würfels bzw. die Raumdiagonalen des Oktaeders.



Figur 4.25a: *Fundamentaldreiecke der vollen Tetraedergruppe* **OT**



Figur 4.25b: *Abwicklung der Fundamentaldreiecke der vollen Tetraedergruppe* **OT**

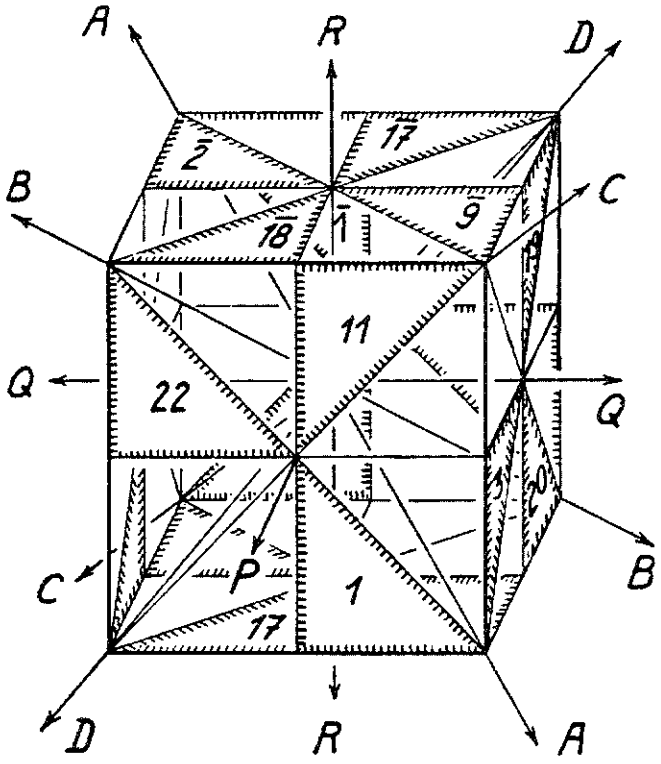
Die Operationen **1** bis **24** im Rahmen der Gruppe **432** ≡ **O** bedeuten dann im einzelnen folgendes:

2, **3** und **4**, **5** und **6**, **7** und **8**, **9** sind Drehungen von 120° bzw. 240° um die Achsen *A, B, C, D*;

23, **10**, **24** und **18**, **12**, **21** und **20**, **11**, **19** sind Drehungen von 90°,180° bzw. 270° um die Achsen *P, Q, R*;

13 bis **17** und **22** sind Drehungen von 180° um die sechs Verbindungsgeraden gegenüberliegender Kantenmitten.

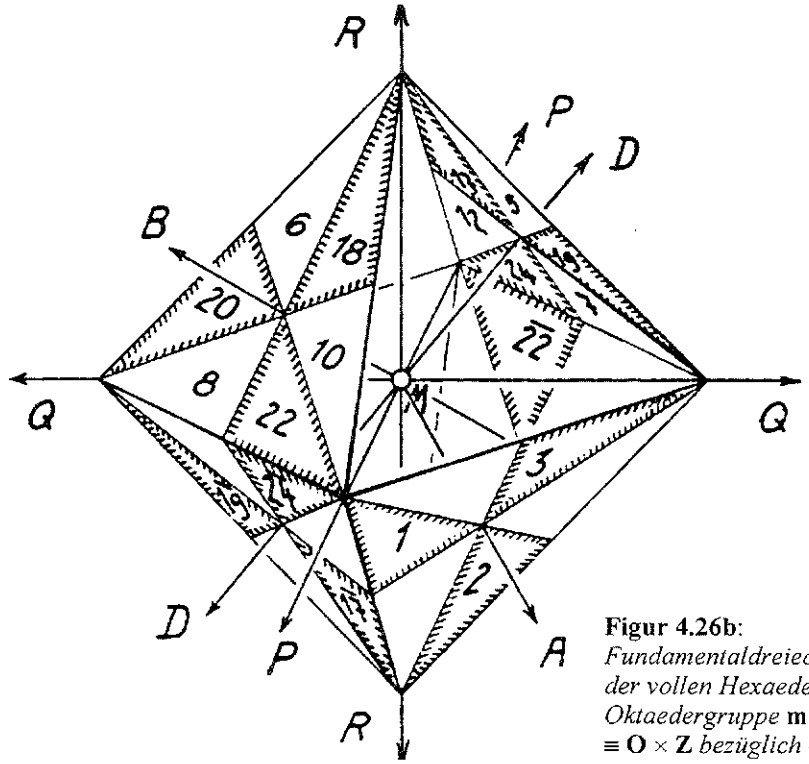
Schneidet man die Flächen des Würfels bzw. des Oktaeders durch die 9 Symmetrieebenen, so erhält man auf jeder Fläche 8, total 48 Dreiecke (**Figur 4.26a** und **4.26b**). Werden diese Dreiecke auf die Umkugel projiziert, so erhält man genau die Fundamentaldreiecke der entsprechenden Spiegelungsgruppe (**Figur 4.23**).



Figur 4.26a: *Fundamentaldreiecke der vollen Hexaeder- oder Oktaedergruppe* **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z** *bezüglich Hexaeder*

Transformiert man ein beliebiges Dreieck durch die Operationen der Gruppe **432** ≡ **O**, so wird nur der halbe Würfel (Oktaeder) bzw. die halbe Sphäre bedeckt, da **432** ≡ **O** eine Untergruppe vom Index 2 der vollen Symmetriegruppe des Würfels bzw. des Oktaeders **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z** ist. Nimmt man die Inversion **Z** hinzu, so wird durch die 48 Operationen der dadurch bestimmten vollen Symmetriegruppe des Oktaeders (oder Hexaeders), **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z**, ein beliebiges Ausgangsdreieck in alle übrigen Dreiecke transformiert. In **Figur 4.26ab** ist die Anwendung der Inversion durch einen Querstrich über der Nummer der jeweiligen gleichsinnigen Operation angegeben.

Dem Hexaeder sind zwei Tetraeder einbeschrieben und dem Oktaeder zwei Tetraeder umbeschrieben. Diese Tetraeder werden bei den Operationen **1** bis **12** in sich übergeführt und bei den Operationen **13** bis **24** vertauscht. Erstere ergeben die Gruppe **23** ≡ **T** der gleichsinnigen Deckoperationen (Drehungen) des Tetraeders (als Untergruppe vom Index 2 in **432** ≡ **O** oder vom Index 4 in **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z**) und letztere zusammen mit der Inversion **Z** die volle Symmetriegruppe **$\bar{4}$ 3m** ≡ **OT** des Tetraeders (als Untergruppe vom Index 2 in **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z**). Die Verknüpfung von **23** ≡ **T** mit der Inversion **Z** ergibt die Gruppe **2/m $\bar{3}$** ≡ **T** × **Z**, ebenfalls eine Untergruppe vom Index 2 in **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z**, aber keine Symmetriegruppe des Tetraeders.



Figur 4.26b: *Fundamentaldreiecke der vollen Hexaeder- oder Oktaedergruppe* **m $\bar{3}$ m** ≡ **O** × **Z** *bezüglich Oktaeder*

Literaturhinweise

Unentbehrlich für die Symmetriegruppentheorie sind die Ausführungen und Tabellen im Beitrag von Hahn/Klapper [1995] in den *International Tables for Crystallography* [1995]. Für die Gruppentheorie siehe auch die *Point-group Theory Tables* von Altmann/Herzig [1994].

Abschnitt 4.1, 4.2, 4.3: Für eine anschauliche und doch mathematisch präzise Einführung in die Geometrie der Symmetriegruppen, siehe Coxeter [1981], Kapitel 3, 4, 7, 15, Hilbert/Cohn-Vossen [1932], Kapitel 2 oder Quaisser [1994], Teil II. Im letzteren Buch findet sich zum Beispiel auch eine vollständige Ableitung der kristallographischen Gruppen in der *Ebene*. Für die Geometrie der euklidischen Bewegungen im Raum siehe etwa Quaisser/Sprengel [1989].

Vom geometrischen Gesichtspunkt aus sowie für eine Ableitung der Gruppen der Deckoperationen der Sphäre sind besonders zu empfehlen Yale [1968] sowie die entsprechenden Kapitel in Coxeter [1981], Miller [1972], Shubnikov/Koptsik [1974], Weyl [1955], Ziegler [1981a]. Siehe auch Bigalke [1984], Coxeter [1973], [1988] sowie Böhm/Quaisser [1991], Quaisser [1994]. Für eine weitere Darstellung siehe Knörrer [1996], Kapitel 1. – Viele Abbildungen von Symmetriegerüsten und ausführliche Beschreibungen der diskreten Symmetriegruppen der Sphäre gibt auch Verheyen [1996], Chapter 1–2.

Abschnitt 4.4 und 4.5: Für die Kristallgeometrie sowie Gruppentheorie hinsichtlich kristallographischer Gruppen ist insbesondere Bigalke [1984], Borchardt-Ott [1997], Burzlaff/Zimmermann [1977], [1993], Haussühl [1993], Vainshtein [1994] zu empfehlen. – Für die algebraischen Aspekte der hier behandelten Gruppen siehe insbesondere Coxeter/Moser [1980] und Burckhardt [1966] sowie für die elementare Gruppentheorie zum Beispiel Lang [1979].

Abschnitt 4.6: Coxeter [1973], § 5.4 [1974], Chapter 2; Coxeter/Moser [1980], § 4.3; Magnus [1974], Chapter II. – Das zuletzt angeführte Beispiel ist entnommen aus Locher [1940b].