

Zeitschrift: Bulletin de la Société Fribourgeoise des Sciences Naturelles = Bulletin der Naturforschenden Gesellschaft Freiburg
Herausgeber: Société Fribourgeoise des Sciences Naturelles
Band: 79 (1990)
Heft: 1-2

Artikel: Eine neue Geometrie für neuen Kristalle : Einladung zu einer Gratwanderung zwischen Kristallographie und Geometrie
Autor: Nickel, Andreas
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-308697>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 12.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Eine neue Geometrie für neue Kristalle: Einladung zu einer Gratwanderung zwischen Kristallographie und Geometrie

von ANDREAS NICKEL,
3065 Bolligen, Eisengasse 7

Inhalt	Seite
1. Vorwort: Geordnete Raumerfüllung – was ist das?	129
2. Kristalle – Aufstieg und Krisis einer Theorie	130
2.1. Der klassische Kristall ...	130
2.2. ... und die Renegaten	137
3. Belegungen	138
3.1. Belegungen und Basen	138
3.2. Symmetrien	140
3.3. Symmetrien in Belegungen	143
3.4. Lokale Automorphie und Isomorphie	150
3.5. Zwangsläufige Aperiodizität	150
4. Aperiodische Belegungen	152
4.1. Ammann-Tesselationen	153
4.2. Penrose-Tesselationen	155
4.3. Mackay-Tesselationen	167
5. Erzeugungsmethoden für aperiodische Belegungen	168
5.1. Multigitter- oder Dualmethoden	168
5.2. H-Projektion	172
6. Diffraktogramme	174
6.1. Die Fouriertransformation	174
6.2. Die vier Ordnungsklassen	175
6.3. Einige Probleme	181
7. Zusammenfassung – Résumé – Summary	182
8. Literaturverzeichnis	183

1. Vorwort: Geordnete Raumerfüllung – was ist das?

Vor nun gerade 7 Jahren wurde die Kristallographie von einer Verunsicherung erfaßt, deren Ursache in einigen merkwürdigen Meßergebnissen lag. Sie standen in eklatantem Widerspruch zur lange etablierten Theorie. So herrschte zunächst Ratlosigkeit, doch zeigte sich bald – wie schon manches Mal in der Geschichte der Wissenschaften –, daß die Trickkiste der Mathematik bereits die Lösung enthielt. Was bis dahin eher wie eine nutzlose Spielerei erschien, nur gerade amüsant für ein paar Mathematiker, brachte Licht in den Bau dieser *nichtperiodischen Festkörper*. Zur Abgrenzung von den «klassischen» Kristallen erhielten sie die Bezeichnung *Quasikristalle*.

Die klassische Definition der Kristalle bezieht sich bekanntlich auf ihre Struktur: sie sind aus atomaren Komponenten *periodisch* aufgebaut – mit diesem Begriff meint der Kristallograph, daß eine Grundeinheit *translatorisch raumfüllend gestapelt* ist. Dies führt zu einer abgeschlossenen Theorie, in welcher 230 *Raumgruppen* den Kristall als Diskontinuum beschreiben. Makroskopisch reduziert sich diese Vielfalt auf 32 *Klassen* oder *Punktgruppen*, die sich auf die 6 bzw. 7 Kristallsysteme (je nach Darstellung) verteilen.

Da sich bislang alle bekannten Festkörper – anorganische wie organische Kristalle – in diese Theorie fügten, dachte kein Kristallograph daran, daß – rein geometrisch betrachtet – raumfüllende Stapelungen auch *nicht-translatorisch* erfolgen können. Nun aber wurde es nötig, von der sehr speziellen Vorgabe der translatorischen Stapelung abzusehen und zunächst einmal festzustellen, wie sich Raumerfüllung mit beliebig erdachten Bausteinen gestalten läßt – *ohne daß dabei jedoch alle Ordnung verloren geht*. Sonst nämlich fielen wir in den altbekannten Glaszustand zurück, und mit ihm haben die Quasikristalle, wie noch auszuführen ist, wenig gemein!

Als Fazit dieser Untersuchungen erscheint heute der klassische Kristall – Regelfall der Natur – als mathematischer Sonderfall einer weitergefaßten Kategorie von Strukturen, die teilweise äußerst fremdartige Eigenschaften besitzen.

In den Jahren nach 1984 jagten sich die Veröffentlichungen über neue Meßergebnisse und theoretische Ansätze zu immer detaillierteren Erklärungen, internationale Symposien fanden statt; ein neues Spezialgebiet zwischen Kristallographie, Festkörperphysik und Geometrie entstand binnen weniger Jahre. Leider ist diese Literatur für Nicht-Spezialisten fast unzugänglich, da sie oft komplizierte mathematische Formalismen verwendet, und – wie bei jedem in rascher Entwicklung befindlichen Gebiet – auch (vorläufige) Widersprüche aufweist. Außerdem klafft weitgehend eine Lücke zwischen zwei beteiligten Gebieten: In geometrisch orientierten Werken (wie in dem von mir oft zitierten Buch von GRÜNBAUM & SHEPHARD, 1987)

wird nur ganz am Rande auf physikalische Fragestellungen hingewiesen: es geht um materielle Strukturen. In der kristallographischen Literatur andererseits wird die Geometrie nur insofern berücksichtigt, als sie für die Beschreibung experimenteller Befunde anwendbar scheint.

Dieser Artikel verfolgt somit eine doppelte Absicht: Als einführendes Kompendium auf elementarer Basis soll er interessierten Nichtspezialisten den Zugang zu einem faszinierenden Forschungsgebiet öffnen. Als «Brückenschlag» zwischen zwei Disziplinen möge er dem Mathematiker ein Fenster auf die Anwendung eines fundamentalen geometrischen Konzeptes öffnen, den Kristallographen zu einem Blick in die phantasievolle, ja gar phantastische Welt der Mathematik verlocken, die – jenseits aller Anwendung – Geburtsort seiner geistigen Werkzeuge («Denkzeuge») ist.

Schließlich sei darauf hingewiesen, daß die Idee, mich mit dieser Materie zu beschäftigen, auf eine Anregung meines Vaters, ERWIN NICKEL, anläßlich seiner Abschiedsvorlesung «Symmetrie – Schönheit und Notwendigkeit» zurückgeht. In *Civitas* (1989) erschienen Gedanken zu dieser Vorlesung, und ich ergänzte diese Veröffentlichung mit einem Kapitel «Subversive Ideen für die Kristallographie». Anregungen und Literaturhinweise dazu erhielt ich von Herrn H.-U. Nissen (ETH Zürich), dem ich für seine Hilfe danke. Nach kritischer Diskussion mit meinem Vater liegt nun die ausführliche Darstellung der betreffenden Probleme vor, und wir beide hoffen, der Text habe eine lesbare Form gefunden!

2. Kristalle – Aufstieg und Krisis einer Theorie

2.1. Der klassische Kristall ...

Leider gehören – im Gegensatz zu beispielsweise Zoologie und Botanik – die Fächer Geologie und Mineralogie nicht oder kaum zum Unterrichtsstoff der allgemeinbildenden Schulen. Nur in den Fächern Physik und Chemie einerseits, Mathematik andererseits wird in geringem Umfang auf die Strukturen der festen Materie hingewiesen. Daher bleibt, obschon doch jeder sie kennt, das Verständnis der Kristalle mangelhaft, dieser faszinierenden Gebilde, die als höchste ästhetische Ausformung der unbelebten Natur geheimnisvoll verborgene Ordnung offenbaren.

2.1.1. Die Entwicklung des klassischen Kristallbegriffs – Verzerrung, kristallographische Formen, Winkelkonstanz

Der Weg zum «klassischen» Kristallbegriff war lang, denn die sogenannte *Verzerrung* der Kristalle verschleiert die innere Ordnung. Kristalle wachsen ja durch Anlagerung ihrer chemischen Substanz auf der Oberfläche; daher ist

die Ausbildung der polyedrischen Gestalt sehr von der Stoffzufuhr abhängig, die nur selten homogen und isotrop erfolgt. Dies bewirkt, daß theoretisch gleichwertige Elemente des Kristalls im allgemeinen unterschiedlich entwickelt vorliegen. «Verzerrung» bedeutet ein nichtideales Wachstum aufgrund der äußeren Bedingungen.

Im Reich der Lebewesen ist dies anders. Gleiche Elemente entwickeln sich hier stets mehr oder weniger gleich: zum Beispiel die zwei Beine des Menschen. Und weiter sind auch die Beine aller Menschen recht ähnlich – zumindest vom biologischen Standpunkt her.

Einem möglichen Mißverständnis sei noch vorgebeugt: Der Ausdruck «Verzerrung» suggeriert eine Art von Verbiegung des Kristalls. Dies ist aber nicht der Fall! Die Abweichung von der idealen Gestalt kommt nur durch verdrehungsfreie Verschiebungen der Flächen zustande, senkrecht zu ihren Flächenloten, die man sich durch die Mitte des Kristalls denkt.

Kristalle bedürfen also einer konstruktiven *Entzerrung*. Erst wenn gleichwertige Flächen am Individuum die gleiche Größe haben – und damit auch den gleichen Umriß –, zeigt sich die *wahre Symmetrie* des Körpers. Nur so können die diversen Kristallindividuen der gleichen Kristallsorte verglichen werden.

Alle gleichwertigen Flächen werden zu kristallographischen Formen¹ zusammengefaßt, z. B. die 6 Flächen des Würfels, die 8 Flächen des Oktaeders, die 6 Flächen des Rhomboeders usw. Ein Kristall besteht demnach aus einer *einfachen (kristallographischen) Form* oder aus einer *Kombination* (von Formen). Ein Fluoritkristall kann z. B. Würfel und Oktaeder kombinieren. Aber vielleicht sind am gegebenen Individuum nur zwei der 6 Oktaederecken «abgeschnitten» – d. h., die Form des Würfels *zeigt* sich nur durch 2 Flächen! Bei der Entzerrung muß man aber davon ausgehen, daß an allen 6 Oktaederspitzen (gleich große) Würfelflächen sitzen.

Theoretische Grundlage aller Entzerrungen bildet das *Gesetz der Winkelkonstanz* (Nicolaus Steno, 1669), das besagt: Für jede Kristallsorte haben die Winkel zwischen entsprechenden Flächen feste Werte, unabhängig von der Größe der Flächen. Damit ließen sich die Flächenlagen leicht auf Achsenkreuze beziehen, die man der Symmetrie der betreffenden Kristallsorte

¹ Man beachte, daß somit «Form» in der Kristallographie eine ganz andere Bedeutung als in der Geometrie hat. Hier ist «Form» ein sehr allgemeiner Ausdruck: Form eines Dreiecks, einer Kurve usw. – «Form» im geometrischen Sinn kann kristallographisch etwa als «Gestalt» bezeichnet werden.

In den weiteren Kapiteln benütze ich den Begriff «Form» immer in diesem allgemeineren Sinn der Geometrie, wenn ich von der Form einer Kachel oder Zelle usw. spreche.

anpaßte. Dabei erkannte man folgende erstaunliche Gesetzmäßigkeit: Die Lage einer Fläche relativ zum Achsenkreuz ergibt sich aus dem *Verhältnis der Achsenabschnitte*. Normiert man nun eine (beliebige) Fläche des Kristalls so, daß ihr Verhältnis 1:1:1 ist, so zeigen die anderen Flächen Verhältnisse wie 2:1:1 oder 4:∞:3 usw. Dies verweist deutlich auf eine quantisierte innere Ordnung!

In reziproker Notation bilden diese Verhältnisse die *Indizes* der Flächen. Es ist klar, daß alle Flächen der selben kristallographischen Form gleiche Indizes besitzen müssen, bis auf die Vorzeichen. So lauten z. B. die 8 Oktaederflächen-Indizes: (111), ($\bar{1}11$), ($1\bar{1}1$), ($11\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($1\bar{1}\bar{1}$), ($\bar{1}1\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), als *Form* notiert: {111}.

2.1.2. Die Symmetrien der Kristalle – Kristallklassen, das translatorische Konzept, Raumgruppen

Zunächst aber führte die Betrachtung an entzerrten, also idealisierten Kristallen zur vollständigen *Symmetrieanalyse im Kontinuum*. Gefunden wurden bestimmte Symmetrie(dreh)achsen, Spiegelebenen und das Symmetriezentrum sowie gewisse Kombinationen dieser Symmetrieelemente. Insgesamt können 32 sogenannte Punktgruppen definiert werden: die 32 *Kristallklassen* als abgeschlossenes Ordnungssystem der makroskopisch betrachteten Kristallwelt.

Warum aber bildet die feste Materie gerade diese Formen, besitzt sie diese Symmetrien, diese konstanten Winkel? Warum tritt beispielsweise keine Punktgruppe mit fünfzähliger Drehachse auf? Grund dafür ist, wie oben angedeutet, der Feinbau der Kristalle, also die Anordnung von Materieteilchen im Raum. Schon Haüy hatte um 1780 versucht, die große Mannigfaltigkeit der äußeren Gestalt durch einen Stapelbau aus einfachen «Ziegeln» zu erklären – d. h. durch ein *translatorisches Konzept* aus kleinsten Einheiten.

Heute beschreiben wir den Feinbau durch die Anordnung der atomaren Bausteine im Kristall. Da diese Anordnung translatorisch ist, läßt sich die Materieverteilung als Repetition einer kleinsten Einheit, der sogenannten *Elementarzelle*, beschreiben: Der Gesamtkristall entsteht durch lückenlose Stapelung solcher Parallelepipede².

In einfachen Strukturen «belegt» man die 8 Ecken der Elementarzelle mit atomaren Bausteinen und «füllt» dann weiter auf. So läßt sich z. B. CsCl als Struktur mit dem Schwerpunkt des Cäsium-Ions an den Ecken eines Würfels

² Parallelepipede sind die räumlichen Äquivalente der ebenen Parallelogramme; sie bestehen aus sechs Flächen, von denen je zwei gegenüberliegende zueinander parallel sind.

und dem des Chlor-Ions im Würfelzentrum beschreiben (oder umgekehrt, je nach Wahl des Nullpunktes der Elementarzelle). Bravais hat gezeigt, daß es nur 14 Bautypen gibt, die dem translatorischen Bauprinzip genügen.

A priori ist es natürlich möglich, einen gegebenen Kristall auf sehr unterschiedliche Weise in gleiche Parallelepipede zu zerlegen. Der Kristallograph wählt aber seine Elementarzellen mit Rücksicht auf die Materiefüllung des Raumes: so nämlich, daß sie der gesamten vorhandenen Symmetrie entsprechen und damit das Kristallsystem wiedergeben. In diesem Falle laufen die Kanten der Parallelepipede parallel zu den 3 kristallographischen Achsen. Dies ergibt folgende 7 Zuordnungen:

- (a) Triklin; beliebig schiefes Parallelepiped.
- (b) Monoklin; in einer Richtung schiefes Parallelepiped.
- (c) Orthorhombisch; Quader («Ziegelstein» mit 3 verschieden langen Kanten).
- (d) Tetragonal; Quader, dessen Kanten in 2 Richtungen gleich lang sind.
- (e) Kubisch; Würfel (= Quader mit 3 gleichwertigen Richtungen).
- (f) Trimetrisch; 2 Möglichkeiten der Darstellung:
 - (i) Rhomboeder, das ist ein entlang einer Raumdiagonalen gewissermaßen «gestauchter» oder «gezerter» Würfel.
 - (ii) Parallelepiped mit Basiswinkel 60° und einer 3. Richtung senkrecht dazu. (3 solche Elemente zusammengestellt bilden eine hexagonale Säule!)

Die Betrachtung der *Symmetrien* auf diesem atomaren Niveau führte (u. a. durch Einbezug kombinierter Symmetrieelemente wie Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen) zur Differenzierung der 32 Klassen in 230 sogenannte *Raumgruppen*. Damit war die Theorie der Kristalle auch bezüglich ihrer Feinstruktur zu einem Abschluß gekommen.

1912 konnten von Laue, Friedrich und Knipping die experimentelle Bestätigung dieser Strukturauffassung liefern: Aufgrund des translatorischen Stapelbaus atomarer Komponenten wirken Kristalle für Wellen geeigneter Länge als räumliche Beugungsgitter. Meistens werden – wie schon im klassischen Versuch – Röntgenstrahlen verwendet, doch sind heute auch Elektronenstrahlen möglich. Die gewonnenen *Beugungsbilder* enthalten die Informationen zum Feinbau des durchstrahlten Kristalls in verschlüsselter Form (siehe 6.).

Ich fasse zusammen: In klassischer kristallographischer Sicht stellt der Kristall ein aus Elementarzellen aufgebautes Diskontinuum dar, das durch atomare Kräfte zusammengehalten wird. Die parallelepipedische Gestalt der Elementarzellen sowie ihre lücken- und verdrehungsfreie Stapelung im Raum – und folglich translatorische Anordnung – entspricht der Kristallsymmetrie. Jede Elementarzelle des selben Kristalls enthält die gleiche Mate-

riefüllung, die aus einigen wenigen bis mehreren tausend Atomen bestehen kann. Für die Beschreibung einer bestimmten Kristallsorte ist immer die selbe Sorte von Parallelepipeden vorzusehen.

Zum leichteren Verständnis soll hier ein zweidimensionales Beispiel betrachtet werden (Abb. 1). Auch in der Folge werde ich oft die Überlegungen auf die Ebene reduzieren, wo immer die räumliche Darstellung zu schwierig wird und das betreffende Prinzip solche Vereinfachung zuläßt.

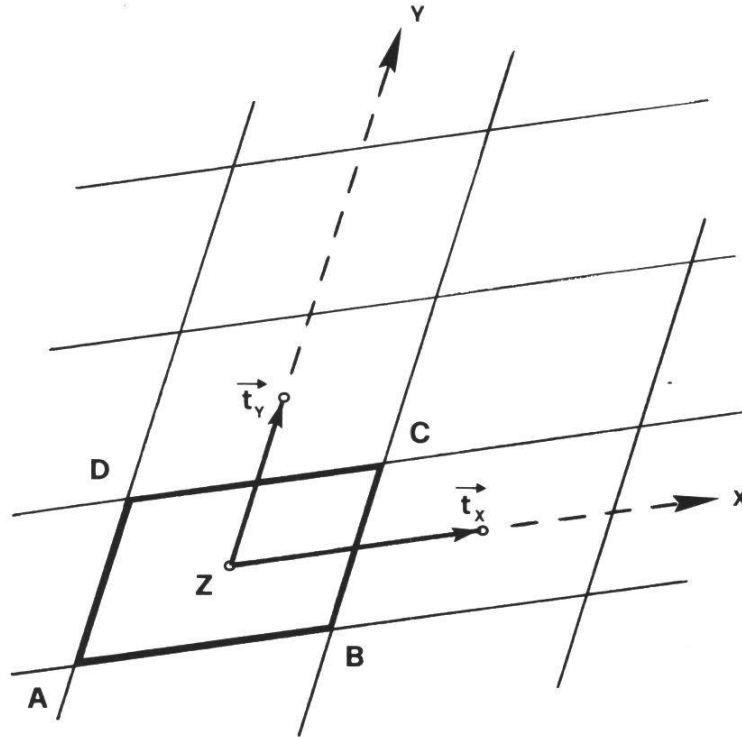


Abb. 1: Schema einer ebenen Kristallstruktur.

x und y bezeichnen die beiden Translationsrichtungen (Achsen), \vec{t}_x und \vec{t}_y die entsprechenden Translationsvektoren. Z ist der Mittelpunkt der Baueinheit («Kachel»), die in der Ebene ein Parallelogramm $ABCD$ ist. Das Aneinanderlegen der Kacheln erfüllt die Ebene lückenlos.

2.1.3 Begriffe und Anmerkungen – Zellen, Symmetrieelemente, Gitter

Da ich in den folgenden Kapiteln statt der kristallographischen Sicht eine rein geometrische Betrachtungsweise verwenden werde, sind noch einige Begriffe zu präzisieren sowie einige Hinweise anzubringen.

Im weiteren werden folgende Begriffe verwendet:

- (i) E^n bezeichnet den euklidischen Raum mit n Dimensionen; E^2 ist also die Ebene, E^3 unser gewöhnlicher Raum, E^1 die Gerade. Ein E^n kann wahlweise als Punkt- oder als Vektorraum beschrieben werden.

- (ii) Die Baueinheit wird *Zelle* oder *Kachel* genannt (engl. cell bzw. tile); der Nicht-Mathematiker verwendet den Ausdruck «Kachel» eher im E^2 , «Zelle» eher im E^3 .
- (iii) Da diese Zellen durch translatorischen Bau den Kristall bilden, bezeichne ich sie als *Translationszellen* (tZ).
Ich verwende hier nicht den kristallographischen Begriff *Elementarzellen*, da die Zellen in der Folge rein geometrisch und somit allgemeiner als in der Kristallographie verwendet werden sollen. Beispielsweise wird zugelassen, daß man für die translatorische Beschreibung andere als die kristallsystembezogenen Zellen (s.o.) wählt.
- (iv) So, wie die repetitive materielle Füllung des Kristalls zur (Translations-) Zelle abstrahiert wird, können die «Kräfte zwischen den Zellen» als geometrische *Passungsregeln* beschrieben werden: sie legen fest, wie die Zellen räumlich zusammenzufügen sind.
- (v) Wenn nötig, kann – z.B. für Betrachtungen der Symmetrie einer Einzelzelle – der Zell-Inhalt geometrisch als *Muster* (auch *Motiv* oder *Dekoration* genannt) berücksichtigt werden.

Die rein geometrische Betrachtungsweise erlaubt es, uns bei den *Symmetrien* auf die Makro-Elemente zu beschränken, also auf: (1) Symmetrie-Ebenen (Spiegelebenen), (2) Symmetrie-Zentrum (Inversionszentrum), (3) Symmetrie-Achsen (Rotationssymmetrien, Gyren). Bei translatorischem Aufbau sind nur *zwei-, drei-, vier- und sechszählige* Achsen möglich d.h. Di-, Tri-, Tetra- und Hexagyren. Außerdem können diese Symmetrieelemente nur in bestimmten Richtungen auftreten, und nur bestimmte Kombinationen sind möglich. Insbesondere sind anderszählige Achsen ausgeschlossen – dies ist besonders wichtig im Hinblick auf die Quasikristalle.

Diese Symmetrieanalyse liefert, wie oben erwähnt, insgesamt 32 Kombinationen, die *kristallographischen Punktgruppen* – rein geometrisch gesehen diejenigen Punktgruppen, die mit dem translatorischen Aufbau kompatibel sind. Alle anderen Punktgruppen – es gibt deren unendlich viele – sind kristallographisch «verboten».

Auch hier soll wieder eine kristallographisch mögliche Symmetrie, auf zwei Dimensionen reduziert, die Verhältnisse verdeutlichen (Abb. 2).

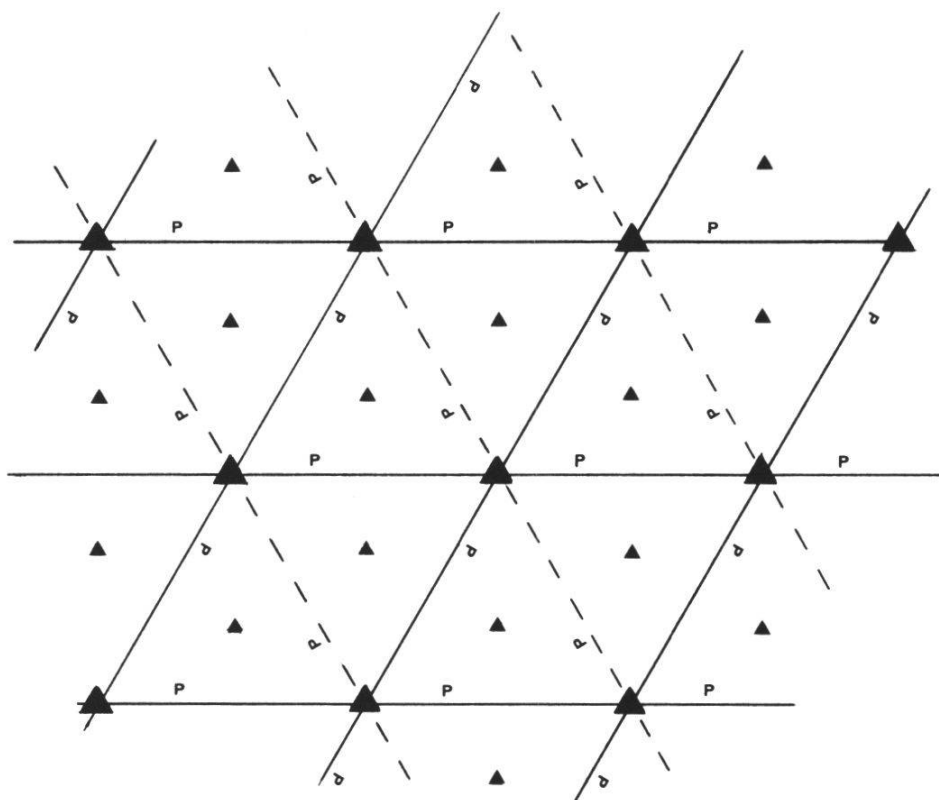


Abb. 2: Eine ebene Symmetrie.

Die Baueinheit ist in diesem Fall ein Rhombus, dessen spitzer Winkel 60° mißt; somit kann man die Kachel in zwei gleichseitige Dreiecke zerlegen. Man gibt eine *3zählige Achse* (Trigyre, Symbol ▲) an der spitzen Ecke der Kachel vor. Infolge des translativen Aufbaus tritt sie an allen Kachelecken auf. Setzt man nun einen *Punkt in allgemeiner Lage* (P) in die Ebene, so bringen Translation und Drehung ihn an alle angegebenen Stellen. In der Folge sieht man, daß zwangsläufig *weitere Trigyre* (▲) auftreten: im Zentrum jeder Halbkachel.

Schließlich muß der Begriff des *Gitters* kurz diskutiert werden: Leider verwendet der Kristallograph diesen Ausdruck in einem anderen Sinn als der Mathematiker.

Das *kristallographische Gitter* (gemäß einem der 14 Bravais'schen Translationstypen gebaut) enthält alle Informationen über die Symmetriebeziehungen; es ist die übliche Darstellung einer Kristallstruktur. Gemeint ist dabei der repetitive «punktförmige» Aufbau: Kugeln werden im Modell durch Stäbe verbunden; diese Kugeln zeigen entweder direkt die Verteilung der Materie (als Schwerpunkte der atomaren Partikel) im Kristall an, oder sie markieren Fixpunkte, relativ zu denen (mit gegebenen Parametern) die Partikel lägen.

Das *physikalische Gitter* nimmt eine gewisse Zwitterstellung ein. Einerseits bezieht es sich natürlich auf die Massenschwerpunkte im Kristall und

suggeriert somit Identität mit dem Bravaisgitter. Tatsächlich ist es aber so, daß das *Beugungsgitter*, welches Wellennatur und gegebenenfalls Wellenlänge einer Strahlung zu untersuchen ermöglicht, im ebenen Fall ein *Linien-gitter* ist ³ – im räumlichen Fall entspricht diesem aber ein *Ebenengitter*! Dies ist nun tatsächlich die geometrische Gitterdefinition im E^3 , wie ich in 5.1.1. näher ausführen werde. Physikalisch maßgeblich ist nämlich, daß die Massenschwerpunkte sich auf Ebenen anordnen (im klassisch-translatorischen Fall!) – es sind die «Netzebenen» der Kristallographie. Wenn es die begriffliche Klarheit erfordert, werde ich die Gitter im kristallographischen Sinn als *Punktgitter* bezeichnen: Ein Punktgitter besteht aus den *Knoten* (Vertizes) eines Gitters im geometrischen Sinn (cf. 5.1.1.).

2.2. ... und die Renegaten

2.2.1. Die «verbotenen» Symmetrien

In den Jahren seit 1984 stellten Kristallographen bei (auf spezielle Weise erzeugten) Legierungen das Auftreten von Kristallen fest, deren Elektronenbeugungsdiagramme «verbotene» Symmetrien zeigten! Beobachtet wurden seither Fälle mit (je einer) 8-, 10-, 12-zähligen Achse sowie solche mit 6 Pentagynen, die derart im Raum angeordnet sind, daß die gesamte Beugungsstruktur ikosaedrische Symmetrie besitzt. Da die Symmetrie dieser Beugungsstrukturen – wie in Teil 6 erörtert wird – auf bestimmte Weise der Symmetrie der betreffenden Kristalle entspricht, war klar, daß man neuartige Kristalle gefunden hatte, die *keinen translatorischen Aufbau* besitzen können; sie wurden bald *Quasikristalle* genannt. Man sprach von einem «experimentellen Dilemma», bis sich herausstellte, daß die Kristallographen nur nicht aufgepaßt hatten: Das Dogma, ausschließlich translatorische Verteilungen von (Massen-)Punkten könnten «gute» Beugungsmuster erzeugen, stimmte nicht! Tatsächlich war den Mathematikern seit langem bekannt, daß auch zwei andere Arten von Punktverteilungen – *nahezu periodische* und *quasiperiodische* – ähnliche Beugungsfiguren ergeben mußten; dies werde ich in 6.2. näher ausführen.

Andererseits kannte man in der Geometrie nichttranslatorische Strukturen, *aperiodische Belegungen* oder *Tesselationen* genannt, die sich als Modelle für die Zellen der Quasikristalle anboten!

³ Es ist entweder ein pseudo-eindimensionales paralleles Strichgitter oder ein echt zweidimensionales Kreuzgitter.

2.2.2. Die aufgeworfenen Probleme

Somit ergaben sich folgende 4 Fragenkomplexe:

- (i) Welches sind jene aperiodischen Belegungen, denen nahezu periodische oder quasiperiodische Punktgitter zugeordnet sind?
- (ii) Wie kann man diese Belegungen finden bzw. erzeugen?
- (iii) Wie sind sie – als Quasikristall – materiell realisiert («Dekorationsproblem»)?
- (iv) Gibt es noch andere aperiodische Punktverteilungen als die oben erwähnten, welche ebenfalls «gute» Beugungsbilder erzeugen?

Den letzten und vorletzten Punkt werde ich nur kurz streifen, da hier eine Vielzahl von Problemen noch keineswegs geklärt ist!

Zur Abklärung dieser vier Punkte muß nun zunächst von den klassisch-kristallographischen Strukturen Abstand genommen werden, um ganz allgemein zu untersuchen, welche periodischen und aperiodischen Belegungen (der Ebene oder des Raumes) möglich sind. Dabei werden wir übrigens sehen, daß Aperiodizität nicht einmal mit «verbotenen» Symmetrien zusammenhängen muß!

3. Belegungen (Parkettierungen, engl. tilings)

In diesem Teil wird gezeigt, wie, ausgehend von wenigen Grundbegriffen, ein n -dimensionaler Raum E^n mit Zellen ausgefüllt werden kann, bzw. wie eine solche Ausfüllung analysiert wird.

3.1. Belegungen und Basen

Nehmen wir – als Modell eines zweidimensionalen euklidischen Raumes E^2 – ein Blatt Papier und zeichnen darauf beliebige Linien, so entsteht eine Belegung dieses Raumes mit Zellen bestimmter, mehr oder weniger willkürlicher Form (cf. Fußnote 1 in 2.1.1!): jedes von einer Linie umschlossene Flächenstück ist eine solche Zelle. Gemeinsam erfüllen sie das ganze Blatt, andererseits überlappen sie sich nirgends. Auch die vorliegende Druckseite zeigt eine Belegung des E^2 : Eine riesige, kompliziert gebaute Zelle erfüllt den größten Teil davon, etliche kleine – die Innenflächen von Buchstaben wie a,

e, g usw. – teilen sich in den Rest ⁴. Ein «kariertes» Blatt Papier andererseits zeigt eine sehr regelmäßige Erfüllung mit lauter gleichen Zellen (wenn wir von den am Rand angeschnittenen absehen – die Ebene müßte sich ja unendlich weit erstrecken).

Eine einfache Belegung des E^3 ist seine Ausfüllung mit lückenlos gestapelten Würfeln oder beliebigen «Ziegeln», wie schon in der Einleitung ausgeführt.

Wir können nun die allgemeine *Definition der Belegung* so formulieren: ⁵

Eine Belegung \mathbf{T} des E^n ist eine nicht-überlappende, lückenlose Überdeckung von E^n mit abzählbar vielen abgeschlossenen Teilmengen T_i , die Zellen oder Kacheln genannt werden; $\mathbf{T} = \{T_0, T_1, T_2, \dots\}$.

Die zwei obigen Beispiele des E^2 zeigen einen bedeutenden Unterschied nicht nur in der Regelmäßigkeit der Belegung, sondern auch in der Mannigfaltigkeit der Grundformen. Beim karierten Blatt kommt nur eine einzige *Zellenform* vor, bei der Druckseite sind es etliche: a, b, d, e, g, ... sowie A, B, D usw. Die Menge der in einer Belegung auftretenden Zellenformen kann als *Basis* der Belegung bezeichnet werden; das karierte Blatt hat also die Basis: $\mathbf{B}_2 = \{\square\}$, diese Druckseite: $\mathbf{B}_1 = \{a, A, b, B, d, e, g, \dots, R, \square, \mathbf{B}, \dots\}$, wobei die Reihenfolge der Aufzählung nicht wesentlich ist.

Die allgemeine *Definition der Basis einer Belegung* heißt:

Eine Menge \mathbf{B} von Zellen ist eine Basis der Belegung \mathbf{T} , wenn \mathbf{B} ein Exemplar jeder in \mathbf{T} auftretenden Zellensorte enthält. Genauer: \mathbf{B} enthält ein Element jeder Kongruenzklasse von \mathbf{T} , wobei direkte und indirekte Kongruenz zulässig ist. Die Elemente in \mathbf{B} heißen *Basiszellen* (engl. prototiles).

Dies bedeutet aber nicht, daß *jede* Basiszelle in *jeder* von dieser Basis erzeugten \mathbf{T} auftreten muß; insbesondere ist es nicht erforderlich, daß \mathbf{T} Zellen enthält, die zu den Basiszellen *indirekt* kongruent sind. Dies ist gut an unserem ersten Beispiel zu sehen: Kein Leser wird erwarten, daß die zu den Buchstaben a, d und anderen Basiszellen spiegelbildlichen Formen auftre-

⁴ In diesem Beispiel sollen also reine Linienstücke – insbesondere die Randlinien der Zellen – nicht als Zellen gelten; genau gesagt werden nur Teilmengen des E^2 mit von Null verschiedenem Flächenmaß zugelassen. Diese Einschränkung wird indes durch die nachstehend gegebene Definition nicht allgemein gefordert – Leser mit entsprechenden Mathematikkenntnissen wissen, zu wie exotischen Belegungen dies führen kann. Meine Darstellung vereinfacht hier stillschweigend, um einigermaßen anschaulich zu bleiben.

⁵ Genau: (i) $\mathbf{T} = \{T_i\}_{i \in \mathbf{N}}$
(ii) $T_i \subset E^n \ \forall \ i \in \mathbf{N}; \bigcup_{i \in \mathbf{N}} T_i = E^n$
(iii) $\text{Int } T_i \cap \text{Int } T_j = \emptyset \ \forall \ (i, j) \in \mathbf{N} \times \mathbf{N} \text{ mit } i \neq j$

ten! Auch wird die Basiszelle \square z. B. nicht auf jeder dieser Seiten vorkommen; dennoch kann man sagen, B_1 sei Basis von jeder Druckseite: Auswahl ist zulässig. Wie groß man eine Basis wählt, hängt dabei natürlich von den Belegungen ab, die irgendwie gemeinsam erzeugt oder analysiert werden sollen: Zellen, die dabei nirgends vorkommen, sind überflüssiger Ballast!

Umgekehrt kann man untersuchen, welche Vielfalt von Belegungen entsteht, wenn man von irgendeiner gegebenen Zellenmenge (als Basis) ausgeht. Dabei muß natürlich beachtet werden, ob sich die gegebene Menge von Zellen überhaupt als Basis verwenden läßt. So bildet z. B. das reguläre Fünfeck, allein genommen, keine Basis des E^2 : Die Ebene kann damit bekanntlich nicht lückenlos ausgelegt werden!

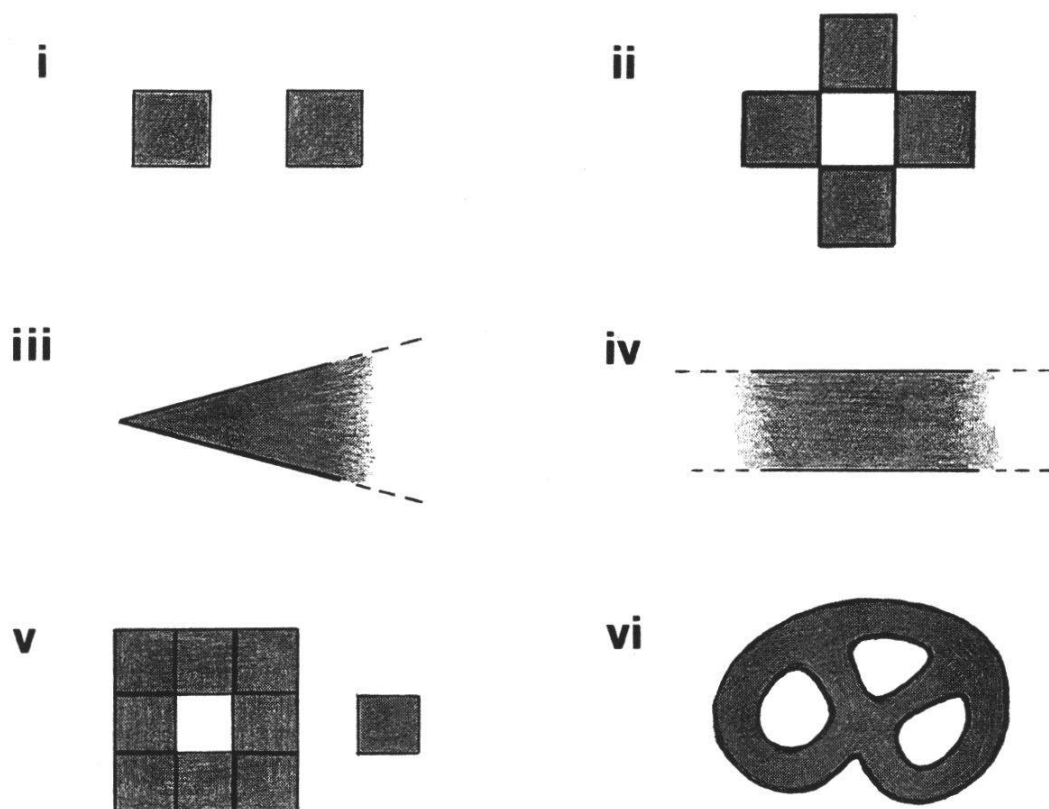


Abb. 3: Zellenformen, die keine topologischen Scheiben sind.

(i) Zelle aus zwei getrennten Quadraten, im Abstand einer Quadratseite. (ii) Zelle aus 4 Quadraten; in der Mitte ergibt sich ein Loch gleicher Größe wie ein Quadrat. (iii) Zelle ist ein (unbegrenzter) Keil. (iv) Zelle ist ein (unbegrenzter) Streifen. (v) Die Zelle besteht aus einem einzelnen Quadrat und einem aus 8 ebensolchen Quadraten zusammengesetzten Teil, in passendem Abstand. (vi) Zelle in Brezelform (3 Löcher).

Man mache sich Stempel aus den Zellen (i), (ii) und (v): Mit (i) und (v) läßt sich die Ebene vollständig belegen, bei (ii) jedoch scheitert das Unternehmen! Ebenso ist keine Belegung mit (vi) möglich. (iii) und (iv) erlauben ohne weiteres eine Flächenbelegung (der Winkel des Keils mißt 30°).

Bei dieser Beschreibungsart müssen im E^2 die Symmetrieachsen und -ebenen senkrecht zur Ebene stehen. Stattdessen kann man die Symmetrioperationen für den E^2 auch so definieren («innere» Beschreibung): Drehung um einen Punkt (Element: Drehzentrum); Spiegelung an einer Geraden (Element: Spiegelachse); sonst wie oben.

3.2.2. Symmetriegruppen

Die Menge aller dieser Symmetrioperationen, mit der Verknüpfung \circ , bildet eine *Gruppe*, die (volle) *Symmetriegruppe des E^3* bzw. des E^2 . Aber auch nach Weglassen der Translationen bilden die anderen Symmetrioperationen noch eine Gruppe! Diese einfache mathematische Tatsache indes ist die Wurzel der ganzen hier behandelten Problematik: Belegungen *mit* Translationssymmetrie stehen solche *ohne* sie gegenüber.

3.2.3. Symmetrieklassen

Nimmt man eine bestimmte Symmetrioperation oder eine mögliche («kompatible») Kombination von Operationen, so erhält man – mathematisch ausgedrückt – eine *Symmetrieklasse*. «Bestimmte Symmetrioperation» heißt dabei, daß alle Parameter festgelegt sind: Lagen von Spiegelebenen, Rotationszentren usw., Beträge von Drehwinkeln und Translationen, etc.

Allgemein werden Symmetrieklassen, die keine Translationen enthalten, als *Punktgruppen* bezeichnet, solche mit mindestens einer Translation als *Raumgruppen*.

Welche Symmetrioperationen kompatibel sind, hängt ganz wesentlich davon ab, ob eine Translation mitberücksichtigt werden muß: sie bedeutet eine starke Einschränkung der Möglichkeiten, wie schon in der Einleitung erwähnt. Betreffs der Bezeichnungsweise muß beachtet werden, daß in der Literatur gewöhnlich die Ausdrücke *periodisch* für *t-symmetrisch* und entsprechend *aperiodisch* für *nicht-t-symmetrisch* verwendet werden. Auch hier werde ich meistens diese Kurzbezeichnungen benutzen.

3.2.4. Kristallographische vs. mathematische Begriffe

Verwirrend im gesamten Zusammenhang ist, daß die Begriffe Punkt- und Raumgruppe von Kristallographen und Mathematikern nicht genau gleich verwendet werden:

(a) Kristallklassen

Die 32 Kristallklassen sind tatsächlich Symmetrieklassen, wenn man den Feinbau unberücksichtigt läßt, nämlich Punktgruppen. Es handelt sich aber

um ganz spezielle Punktgruppen: jene, die mit drei Translationen ⁶ *verträglich* sind! Andere Punktgruppen treten eben an (klassischen) Kristallen nicht auf.

(b) Kristallographische Raumgruppen

Die Raumgruppen der Kristallographie wiederum berücksichtigen nicht nur Translationen als Gruppenoperation – sie führen zusätzlich Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen ein; daher die große Anzahl von 230 solcher Raumgruppen. Im Sinne der Definition von 3.2.3. müßte man in der Kristallographie nur 32 *Typen* von Raumgruppen zählen. Zum selben Typus gehören in diesem Falle Strukturen mit unterschiedlichen Längen der Translationsvektoren bei sonst gleicher Symmetrie.

3.3. Symmetrien in Belegungen

3.3.1. Muster

Als Muster oder Motive werden auf den Kacheln bzw. in den Zellen befindliche «Markierungen» irgendwelcher Art bezeichnet. Dies darf durchaus im naiv-geometrischen Sinn aufgefaßt werden: Wir alle kennen aus dem Alltag gemusterte Kacheln. In der Kristallographie bildet – als geometrische Abstraktion – die atomare Besetzung (*Dekoration*) der Zellen das Muster.

3.3.2. Symmetrie-Niveaux

Kehren wir wieder zur Betrachtung einer nicht allzu unregelmäßigen Belegung zurück (s. 3.1.): Beispiel 1 war eine Heftseite mit Schriftsatz, Beispiel 2 ein kariertes Blatt. Die Heftseite ist zwar als ganzes symmetrielos, weist aber dennoch Teile mit gewissen Symmetrien auf: z. B. den Buchstaben A, der eine Spiegelebene besitzt. Ein Ausschnitt aus dem zweiten Beispiel, dem karierten Blatt, zeigt auch weiterreichende Symmetrien: diverse Drehachsen und Spiegelebenen, alle senkrecht zur Blattebene stehend. Doch auch die Heftseite des Beispiels 1 zeigt andere als ganz lokal begrenzte Symmetrien: so stehen die Buchstaben nicht irgendwie verdreht auf dem Blatt; alle gleichen Buchstaben hängen durch reine Translationen (mit variablen Längen) zusammen.

Wir unterscheiden folgende drei Symmetrieniveaux: Zellsymmetrie, globale und lokale Symmetrien, Infrasympmetrie.

⁶ Da bei Kristallen (im E^3) der Stapelbau in drei Richtungen repetitiv ist, weist jede einen Kristall beschreibende Raumgruppe – sowohl nach dem Sprachgebrauch der Kristallographen als auch nach dem der Mathematiker – *drei* Translationsvektoren auf.

3.3.2.1. Kachel- bzw. Zell-Symmetrie

Dies ist die Symmetrie einer *einzelnen* Kachel oder Zelle, unabhängig von ihrer Umgebung, wobei die Umrißform sowie das Kachelinnere zu berücksichtigen sind. A priori ist hier jedes Symmetrieelement einzeln möglich, dazu alle kompatiblen Kombinationen. Nicht kompatibel wäre z. B. im E^2

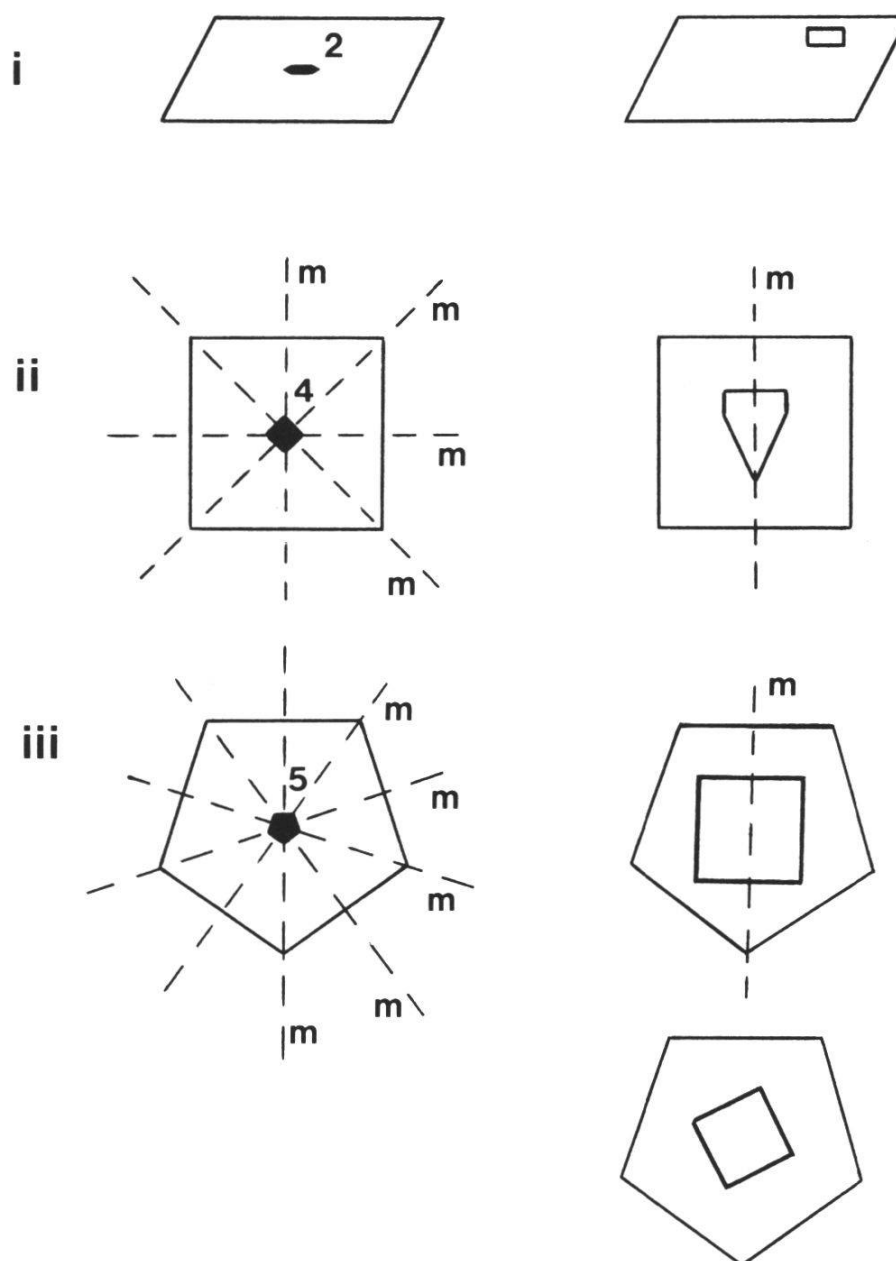


Abb. 4: Symmetrierniedrigung durch Muster.
Ohne Muster (linke Skizzen) ergeben sich die eingetragenen Gesamtsymmetrien (Symmetrieachsen: 2, 4, 5; Symmetrieebenen m). Je nach aufgemaltem Muster (rechts) reduziert sich die Symmetrie auf die eingetragenen Elemente.

eine 3- mit einer 4-zähligen Achse: Hätte eine Kachel beide Symmetrien, so besäße sie effektiv eine 12-zählige Symmetrieachse! Nur so kann sie beim Drehen sowohl um 120° als auch um 90° jeweils identisch mit sich selbst sein.

Man beachte, daß durch ein Muster die Gesamtsymmetrie einer Kachel erniedrigt werden kann (Abb. 4).

3.3.2.2. Lokale und globale Symmetrien einer Belegung

Dies sind Symmetriestrukturen, die *mehr als eine* Kachel betreffen, somit auch mit der *Anordnung* der Kacheln zu tun haben. Entsprechend der oben gemachten Unterteilung liegen periodische (t-symmetrische) oder aperiodische Belegungen vor, mit den beschriebenen Kombinationsmöglichkeiten der Symmetrieelemente.

Zu unterscheiden ist weiter, ob eine Symmetrie den gesamten Raum betrifft oder nur einen Teil davon. So zeigt Abb. 5 einen Ausschnitt aus einer Belegung des E^2 mit einer Pentagyre im Punkt Z, die für den ganzen E^2 gilt und daher *global* genannt wird. Im Gegensatz dazu wird das Beschränktsein einer Symmetriestruktur auf ein Teilgebiet des Raumes als *Lokalität der Symmetrie* bezeichnet. Lokale Punktsymmetrien werden sich als eine zentrale Eigenheit der aperiodischen Belegungen erweisen (siehe 4., z.B. Abb. 12).

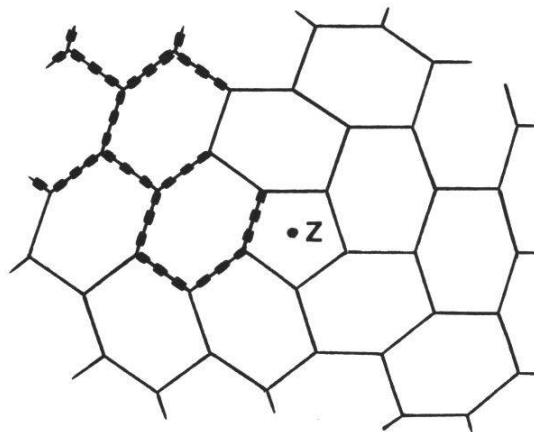


Abb. 5: Globale Pentagyre.

Die Belegung besteht aus zwei Kacheltypen, einem Hexagon und einem regulären Pentagon; diese Kacheln bilden die Basis **B** der Belegung. Durch Z geht eine Pentagyre (senkrecht zur Ebene), welche für die ganze Belegung gilt. Rotation mit (ganzen) Vielfachen von 72° erzeugt aus dem punktiert hervorgehobenen Teil das gesamte Belegungsnetz. Modifiziert nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

3.3.2.3. Infrasymmetrie

Mit diesem Begriff bezeichne ich eine Eigenschaft, welche ganz allgemein für Strukturen in einem Raum E^n definiert werden kann, in denen ein Teilbereich («Musterelement») wiederholt auftritt. Es handelt sich dabei um eine *Lagebedingung* der Musterelemente bezüglich der *Rotation*. Dies sei zunächst an den Beispielen der Abb. 6 gezeigt.

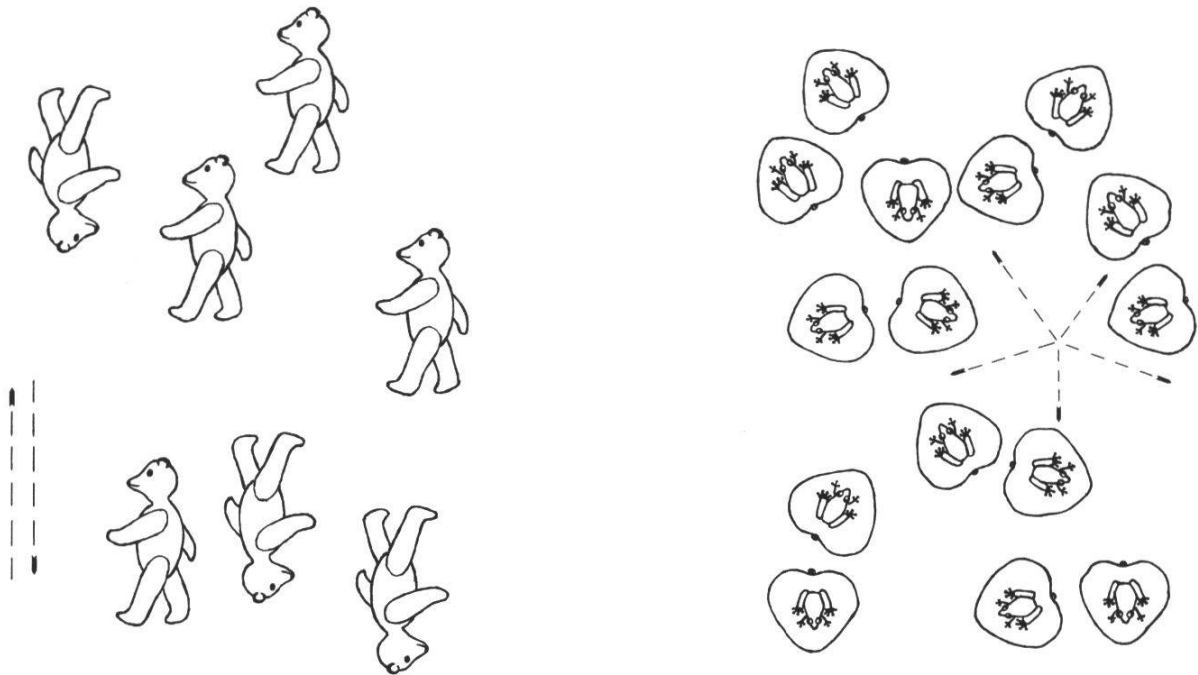


Abb. 6: Infrasymmetrie: Bärenmarsch und Fröscheteich. Links ein Muster (Musterelement: Bär) mit 2zähliger, rechts eines (Musterelement: Frosch auf Seerose) mit 5zähliger Infrasymmetrie. Ihre Richtungen sind gestrichelt angedeutet. In solchen Fällen drängt sich der Eindruck einer Zwei- bzw. Fünzfähigkeit «spontan» auf.

Geometrisch hängen bei einer n-zähligen Infrasymmetrie alle gleichen Musterelemente durch die Kombination einer entsprechenden Rotation mit einer (beliebigen) Translation zusammen.

Betrachtet man nun statt eines solchen (lockeren) *Musters* eine (geschlossene) *Belegung*, so ist klar, daß entsprechende Richtungseigenschaften für die Lagen der verschiedenen Zellen bestehen. Bei periodischen Belegungen fallen jedoch Infrasymmetrie und effektive Symmetrie zusammen; erst bei den aperiodischen Belegungen erlangt die Infrasymmetrie eigenständige Bedeutung.

Für die *Analyse* der Infrasymmetrie einer Belegung⁷ in E^2 kann man folgendermaßen vorgehen: Man markiert die Basiskacheln mit je einer Strecke; in \mathbf{T} liegen diese Strecken dann parallel zu bestimmten Richtungen. Die mit diesen Richtungen korrespondierende Punktsymmetrie ist die Infrasymmetrie der Belegung. Wenn insbesondere die Kacheln Polygone sind, erfüllen die Seiten selbst bereits die Rolle der Markierungen. Beispiele dazu finden sich in den Abbildungen zu 4.

Für den E^3 kann das Prinzip entsprechend formuliert werden. Ein Beispiel für eine 1-zählige Infrasymmetrie kann man nach dem Start eines Ballonfahrer-Treffens beobachten: alle Gondeln weisen nach unten!

3.3.3. Translationssymmetrische Belegungen

3.3.3.1. Definition und Beschreibung

Da dies später von Bedeutung ist, sei kurz die mathematische Beschreibung einer translationssymmetrischen Belegung angegeben (Abb. 7): Eine Belegung \mathbf{T} im E^n ist *t*-symmetrisch, wenn n linear unabhängige Vektoren \vec{t}_j derart existieren, daß jede \mathbf{Z} -Linearkombination dieser Vektoren eine Kongruenzabbildung auf E^n definiert (\mathbf{Z} bedeutet die Menge der ganzen Zahlen: $0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Anschaulich ausgedrückt für E^2 : verschiebt man die Belegung um ganzzahlige Vielfache von \vec{t}_1 und/oder \vec{t}_2 , so kommt sie mit sich selbst zur Deckung; \vec{t}_1 und \vec{t}_2 dürfen nicht parallel zueinander sein.

Der *Translationsoperator* ist $t = (\vec{t}_1, \vec{t}_2, \dots, \vec{t}_n)$. Werden die \vec{t}_j so gewählt, daß *nur* \mathbf{Z} -Linearkombinationen Kongruenzabbildungen ergeben, so ist t ein *minimaler* Translationsoperator. Es ist zu beachten, daß für jede gegebene *t*-symmetrische Belegung unendlich viele minimale t definiert werden können, wie in Abb. 7 gezeigt.

Der gewählte minimale *t*-Operator definiert ein *t-Parallelotop* (Parallelogramme im E^2 , Parallelepipede im E^3), das, wie in der Einleitung definiert, als Translationszelle (tZ) bezeichnet werden soll (Abb. 7).

⁷ In der englischsprachigen Literatur findet sich dafür der unschöne Term «underlying symmetry».

3.3.3.2. Translationszellen

Schließlich ist es nötig, die Beziehungen zwischen allgemeinen Zellen und Translationszellen zu untersuchen. Wie z. B. in Abb. 7 ersichtlich, besteht bei translationssymmetrischen Belegungen eine besondere Situation insofern, als – nach dem Festlegen des t -Operators – die Translationszelle als Bauelement der Belegung aufgefaßt werden kann, anstelle der ursprünglichen Zellen also; deren Grenzlinien bilden nun ein Muster der neuen Zelle. Im Fall der Abb. 8 wird dies noch deutlicher: aus den 5- und 7-eckigen Zellen baut sich eine periodische Belegung auf, die am einfachsten mit der angegebenen tZ beschrieben wird. Diese kann, mit dem entsprechenden Muster versehen, genauso gut (und einfacher!) dazu verwendet werden, das betreffende Bild zu legen (unendliche Ausdehnung wie immer vorausgesetzt).

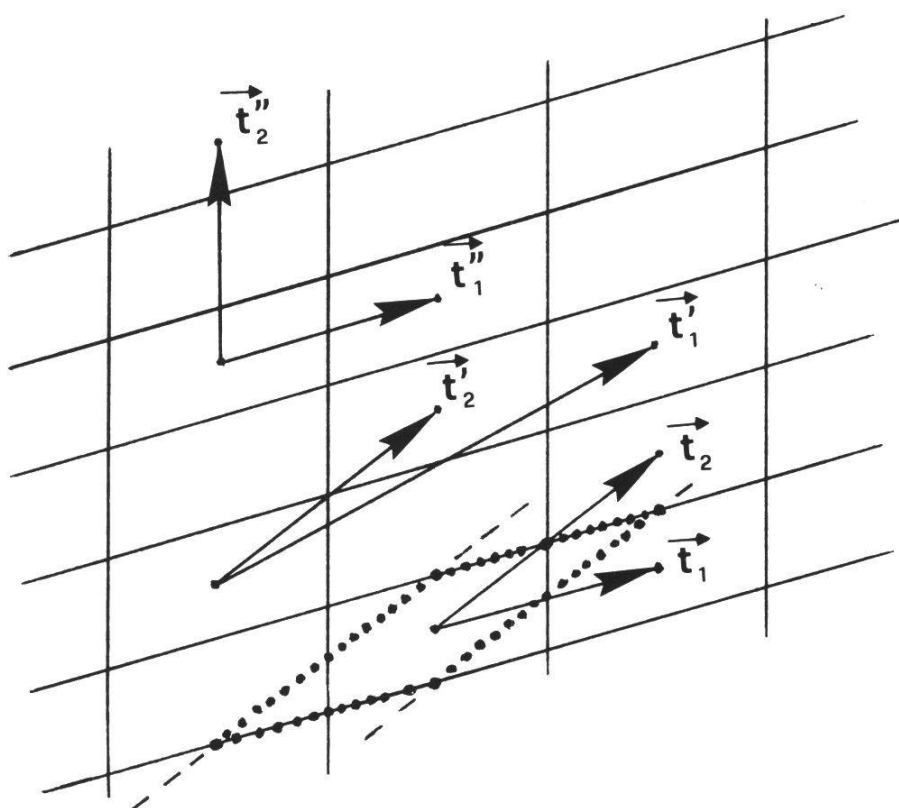


Abb. 7: t -Operatoren im E^2 für die ausgezogene Parallelogramm-Kachelung; die Punkte bezeichnen die Kachelzentren.

Die Translationsoperatoren $t = (\vec{t}_1, \vec{t}_2)$ und $t' = (\vec{t}'_1, \vec{t}'_2)$ sind minimal, $t'' = (\vec{t}''_1, \vec{t}''_2)$ jedoch nicht: Kongruenz der Belegung mit sich selbst entsteht bereits bei Verschiebung mit $\frac{1}{2} \vec{t}''_2$ (sowie mit $\frac{3}{2} \vec{t}''_2, \frac{5}{2} \vec{t}''_2$ usw.), d. h. mit nicht-ganzzahligen Vielfachen von \vec{t}''_2 .

Wählt man $t = (\vec{t}_1, \vec{t}_2)$ als Operator dieser Belegung, so ist die tZ (Translationszelle) nicht mit der ursprünglichen Kachel identisch, sondern besteht aus dem punktiert umrandeten Gebiet. Entsprechendes gilt für t' .

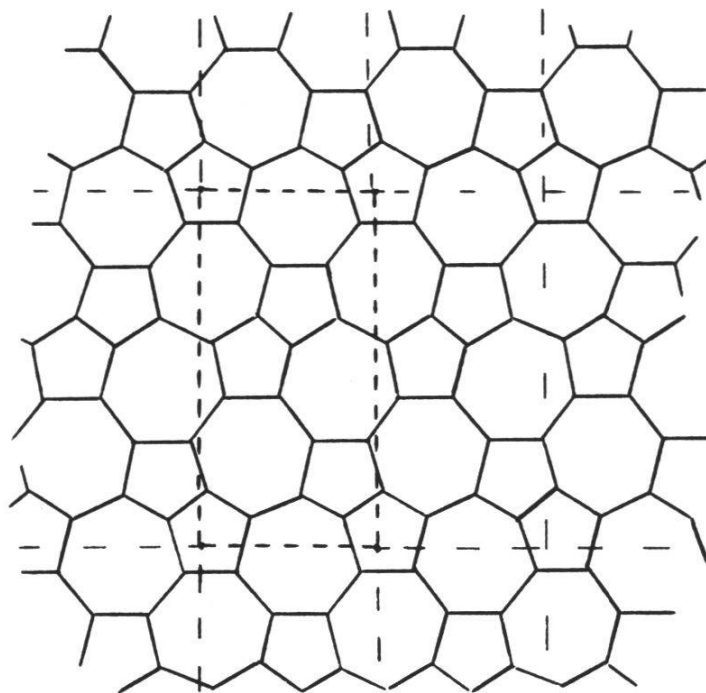


Abb. 8: Allgemeine Zellen und Translationszelle (tZ).
Diese Belegung hat zwei Basiskacheln, ein Penta- und ein Heptagon. Dennoch ist sie periodisch: eine mögliche tZ ist gestrichelt eingetragen. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

Allgemein kann *jede translationssymmetrische Struktur eines Raumes* so beschrieben werden, daß sie eine *Belegung mit genau einer Basiszelle* ist.

Dies ist eine in der Kristallographie übliche Situation, in der die Gitterstruktur eines Körpers zwar Konfigurationen unterschiedlicher Symmetrie aufweist (z. B. Tetraeder, Oktaeder usw.), diese «Teilzellen» aber so gestapelt sind, daß ein translatorischer Bau entsteht (Zusammenfassen zur tZ).

Ein Extremfall sind die *Frank-Kasper-Phasen* gewisser intermetallischer Verbindungen, bei denen ikosaedrische (!) Haufen ⁸ schichtweise so gestapelt sind (bei ähnlicher Orientierung der Haufen), daß sich eine tZ ergibt, die weit über 1000 Atome enthalten kann: In der sogenannten pentagonalen FK-Phase von Cu_4Cd_3 sind es 568 Ikosaederhaufen!

⁸ Ein Zentralatom besitzt darin 12 Atome als erste Koordinationsschale.

3.4. Lokale Automorphie und Isomorphie

Alle periodischen, aber auch viele aperiodische Belegungen besitzen folgende Eigenschaft der *lokalen Automorphie*: Jedes (beliebig große, aber endliche) Gebiet aus \mathbf{T} ist zu unendlich vielen anderen Gebieten aus \mathbf{T} kongruent; anders gesagt: Jede (endliche) Zellenanordnung tritt in \mathbf{T} unendlich oft auf.

Bei periodischen Belegungen ist diese Eigenschaft trivial. Abb. 5 zeigte indes eine aperiodische Belegung, die offenbar *nicht* lokal automorph ist: Jeder Ausschnitt, der das Pentagon enthält, kommt nur genau 5 mal vor (entsprechend der Pentagyre!). Aperiodische Belegungen, welche die Eigenschaft besitzen, werden wir in 4. finden.

Entsprechend heißen zwei Belegungen \mathbf{T}_1 und \mathbf{T}_2 *lokal isomorph*, wenn jedes (endliche!) Gebiet der einen auch in der anderen auftritt. Daß dies tatsächlich möglich ist, ohne daß die beiden Belegungen identisch sind, ist ein fundamentaler Satz aus der Theorie aperiodischer Belegungen! Beispiele dafür finden sich in 4.

Sei \mathbf{B} eine Basis, $\{\mathbf{T}_\mu\}$ die Familie aller von \mathbf{B} erzeugten Belegungen, dann ist die lokale Isomorphie eine Äquivalenzrelation in $\{\mathbf{T}_\mu\}$ und teilt somit diese Belegungsfamilie in Klassen ein: Belegungen der selben Klasse sind lokal isomorph; man spricht von *LI-Klassen*. Eine Folge ist, daß zwei Belegungen mit gleicher Basis – d. h. aus gleichen Kacheln –, die nicht derselben LI-Klasse angehören, *lokal unterscheidbar* sind: Dies heißt, daß in einer (oder auch wechselseitig in beiden) dieser Belegungen gewisse Zellenanordnungen auftreten, die in der anderen nicht vorkommen. Umgekehrt bedeutet es natürlich, daß zwei zwar verschiedene, jedoch lokal isomorphe Belegungen *nicht* unterschieden werden können, solange man nur einen *endlichen* Bereich betrachtet, gleichgültig, wie groß er sei – was natürlich in praxi immer der Fall ist! Zu wissen, ob zwei solche Belegungen identisch sind oder nicht, bedingt somit Kenntnis der verwendeten Erzeugungsvorschrift (siehe 4).

3.5. Zwangsläufige Aperiodizität

Eine aperiodische Belegung kann durchaus eine Basis besitzen, welche *auch* periodische Belegungen erzeugt. Dies war in Abb. 5 der Fall: wird nur das Hexagon verwendet, so ist die Konstruktion einer t-symmetrischen Belegung trivial. Abb. 9 zeigt einen Fall, in dem mit einer einzigen Basiskachel sowohl periodische als auch aperiodische Belegungen erzeugt werden können.

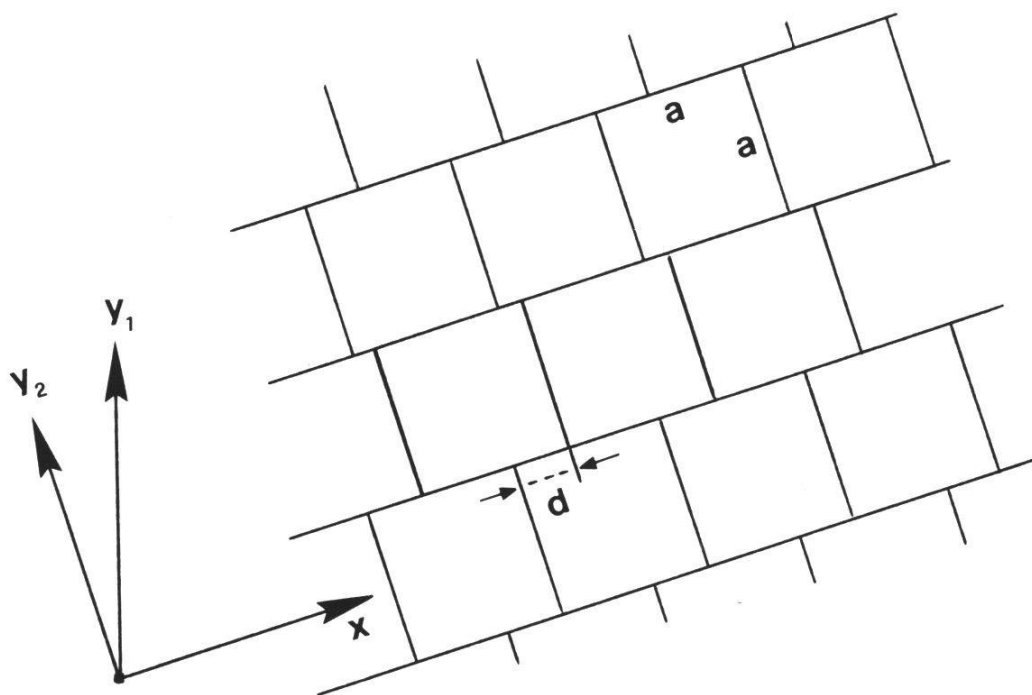


Abb. 9: Periodische und aperiodische Belegungen \mathbf{T} mit derselben Basis. Schema für Belegungen des E^2 mit Quadraten der Seitenlänge a ; d ist die jeweilige Versetzung einer Reihe gegen die nächste.

- (i) d ist konstant, mit d/a *rational*. In diesem Fall ist \mathbf{T} translatorisch in x und y_1 (bei geeigneter Schrägstellung von y_1), aber auch in x und y_2 (mit entsprechend großer Periode in y_2).
- (ii) d ist konstant, d/a jedoch *nicht rational*. \mathbf{T} ist nur in x und y_1 (bei entsprechender Neigung) translatorisch, nicht aber in x und y_2 .
- (iii) d ist von einer Reihe zur anderen *nichtperiodisch variabel* (z. B. den Dezimalziffern von π proportional). \mathbf{T} ist nur in x translatorisch, d. h. insgesamt nicht periodisch in E^2 .

Es gibt jedoch Basen, die derart gestaltet sind, daß sich aus ihnen *ausschließlich* aperiodische Belegungen aufbauen lassen – sogar dann, wenn man nur bestimmte Zellen der Basis für die Belegung verwendet, d. h. nur eine Teilbasis tatsächlich benützt. (Daß derartiges Auswählen erlaubt ist, wurde schon in 3.1. erwähnt.) Eine solche Basis heißt *aperiodische Basis*. Die Basis von Abb. 5 beispielsweise genügt dieser Bedingung nicht, wie eben gezeigt, ebensowenig jene von Abb. 9. Hingegen besitzen alle Belegungen, die ich in 4. vorstellen werde, derartige aperiodische Basen.

Anzumerken ist, daß in der englischsprachigen Literatur der Ausdruck *aperiodic prototiles* verwendet wird. Dies ist insofern unglücklich, als alle bekannten aperiodischen Basen mehr als eine Zelle aufweisen. Somit kommt die Eigenschaft «aperiodisch» eigentlich nicht der einzelnen Basiszelle zu, sondern nur der Basis als Ganzem.

Auf dem Gebiet der Belegungen und ihrer Basen gibt es zahlreiche offene Fragen, wie z. B.: Gibt es eine allgemeine Methode, um zu bestimmen, ob eine vorgegebene Kachel (allein genommen) Basiszelle einer Belegung ist (monoedrische **T**) – siehe Abb. 10? Oder: Gibt es aperiodische Basen mit einer einzigen Zelle (aperiodische monoedrische Basis)?

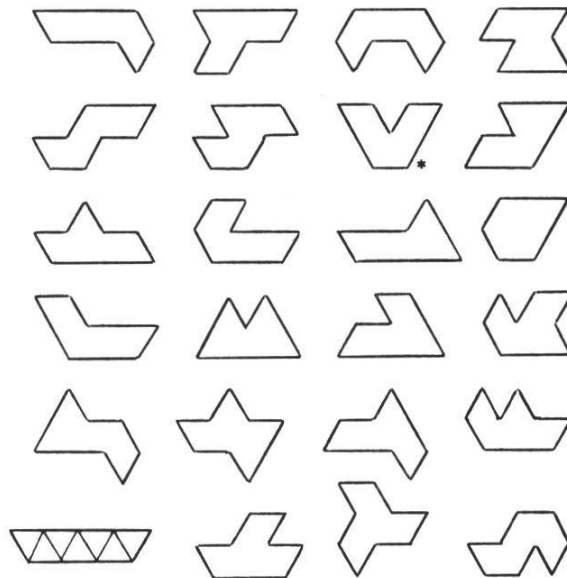


Abb. 10: Die 24 *Heptiamonds*.

Jedes ist aus 7 gleichseitigen Dreiecken zusammengesetzt; bei einem Heptiamond ist die Zerlegung angedeutet. Jede dieser Kacheln kann für sich allein Basis mindestens einer Belegung des E^2 sein – außer einer (*). Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

4. Aperiodische Belegungen = Tesselationen

In diesem Teil werden – dem historischen Ansatz folgend – einige mit direkten topologisch-metrischen Verfahren erzeugte, gewissermaßen schon klassische aperiodische Belegungen vorgestellt und dabei ein Einblick in jene Methoden gegeben.

Neben den schon in 2.1.3. erwähnten *Passungsregeln* stützen sich diese Verfahren ganz wesentlich auf Prozesse, welche unterschiedlich bezeichnet worden sind; Begriffe wie *Rekombination*, *Inflation* usw. treten auf. Da es sich immer um eine Generationenabfolge handelt, schlage ich als generellen Terminus den Ausdruck *Deszendenz* vor, bzw. *Azpendenz* für die Umkehrung. Nachteil dieser Verfahren ist der Mangel an Systematik: Um auf diese Weise Belegungen zu erzeugen, ist man weitgehend auf intelligentes Probieren angewiesen. Andererseits aber sind sie von höchstem theoretischem Interesse: Sie erlauben nämlich, viele metrische wie topologische Eigenschaften eines gegebenen Belegungstyps zu beweisen.

4.1. Ammann – Tesselationen

Im Zusammenhang mit den Quasikristallen steht immer wieder das Auftreten kristallographisch «verbotener» Rotationsachsen im Zentrum, namentlich von Pentagynen. Daß Aperiodizität indes nicht an exotische Infrasympmetrien gebunden ist, zeigen die folgenden drei Tesselationen von Ammann (nach GRÜNBAUM & SHEPHARD, 1987). Eine vierte Ammann-Tesselation, der Typ AP, wird im Zusammenhang mit den Penrose-Tesselationen zu erwähnen sein.

4.1.1. A1 (ohne Abb.)

Diese Tesselation verwendet 6 quadratische (!) Kacheln mit kleinen Auswüchsen, die in entsprechende Einkerbungen passen müssen. Statt der Auswüchse können Markierungen auf den Kacheln verwendet werden, welche die selben Passungen festlegen.

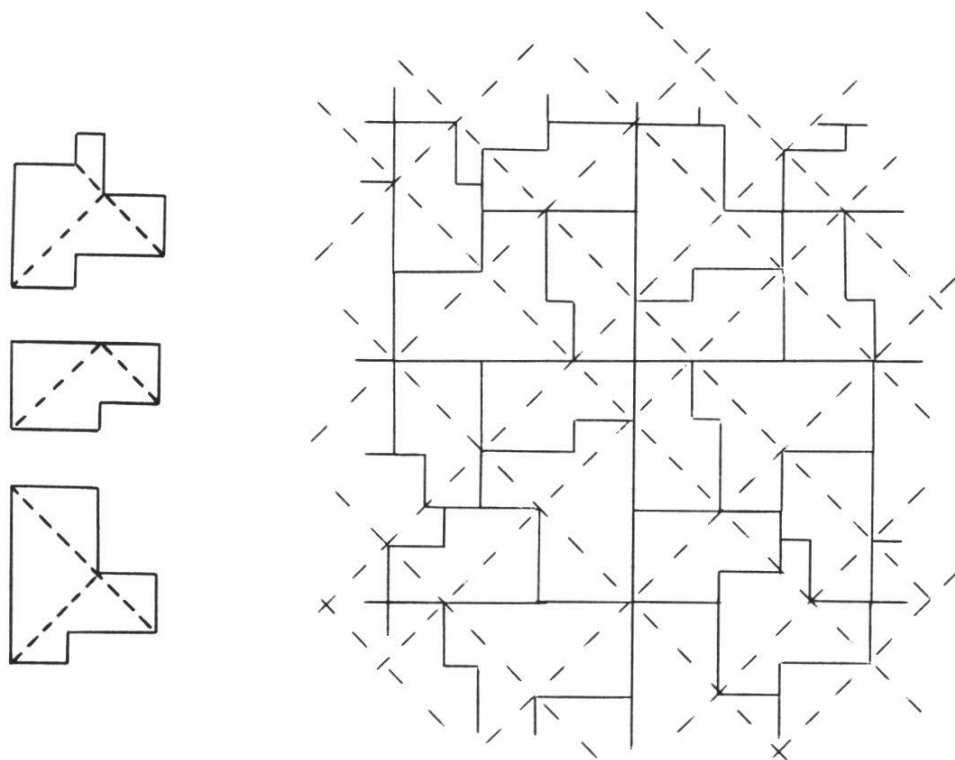


Abb. 11: Ammann-Tesselationen A3.

Links die 3 Basiskacheln der A3 mit ihren Ammann-Linien (es gibt noch eine zweite Variante), rechts eine A3-Belegung, welche das Durchlaufen der Ammann-Linien und die 4zählige Infrasympmetrie zeigt: die Kacheln nehmen im E^2 4 Lagen ein, die durch 90°-Rotationen zusammenhängen. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

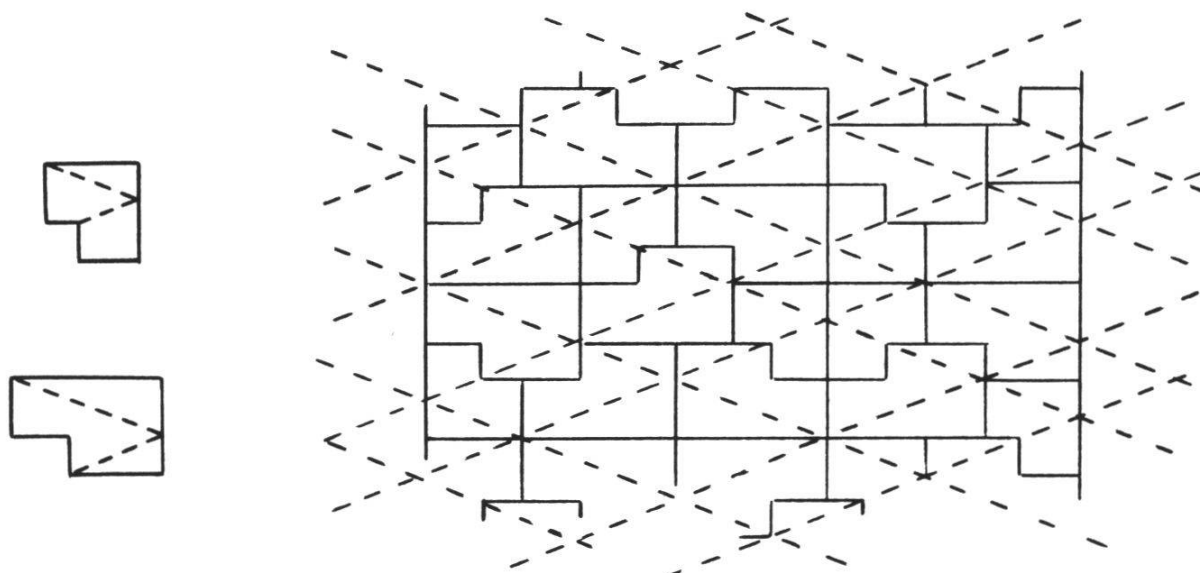


Abb. 12: Ammann-Tessellationen A2.

Links die zwei Basiskacheln mit den Ammann-Linien (auch hier existiert eine zweite Variante), rechts eine A2-Belegung. Hier ist die nur 2zählige Infrasympmetrie ersichtlich: Zwar nehmen auch in dieser **T** die Kacheln 4 Lagen ein, doch hängen nur je zwei davon durch eine 180°-Drehung zusammen; die anderen zwei Lagen sind indirekt kongruent zu jenen. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

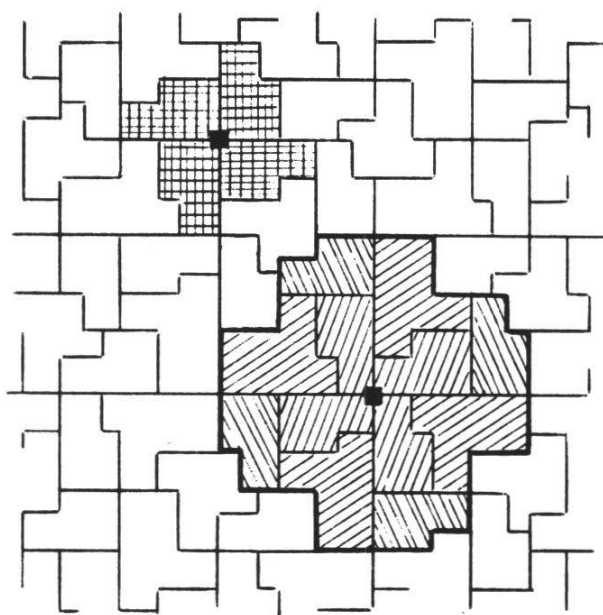


Abb. 13: Lokale Tetragyen in A3.

Dieselbe Belegung wie in Abb. 11, nun ohne Ammann-Linien. Stattdessen sind zwei lokale Tetragyen mit ihren Symmetriebereichen eingetragen (Symbole ■; Schraffuren). Modifiziert nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

4.1.2. A2, A3 (Abb. 11, 12, 13)

Diese Tessellationstypen verwenden 2 bzw. 3 polygonale Kacheln, deren Seiten zueinander rechte Winkel bilden. Ihre Passungen können auf verschiedene Weise festgelegt werden, insbesondere durch Muster in Form sogenannter *Ammann-Linien*. Diese sind ein spezieller Fall jener Markierungen, die in Teil 3 zur Definition der Infrasyymmetrie verwendet wurden. Jede Ammann-Linie besteht aus Strecken, welche den (Basis-) Kacheln derart aufgemalt sind, daß sie von Rand zu Rand laufen. Abb. 11 zeigt links die drei Basiskacheln der A3 mit ihren Ammann-Linien. Die Passungsregel lautet nun: Setze die Kacheln so zusammen, daß die Linien sich von Kachel zu Kachel ohne Knick fortsetzen! Diese Anweisung garantiert den Bau einer entsprechenden Tessellation.

Wie die Abb. 11 und 12 zeigen, besitzt A3 eine vierzählige Infrasyymmetrie, A2 eine zweizählige: die Geradenscharen nehmen nach Drehungen um 90° bzw. 180° wieder die selben Richtungen ein.

Abb. 13 zeigt lokale Tetragiren in P3. In der ganzen Ebene gibt es unendlich viele davon, mit mehr oder weniger großen Gültigkeitsbereichen.

4.2. Penrose-Tessellationen

R. Penrose konstruierte anfangs der 70er Jahre drei miteinander zusammenhängende Tessellationen, deren Infrasyymmetrie *pentagonal* ist; nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987) sollen sie als P1, P2, P3 bezeichnet werden. P1 ist die komplizierteste, dafür dekorativ, und wird hier nicht vorgestellt; ihre Basiskacheln sind 6 Polygone: ein *Stern*, ein *Boot* usw.

4.2.1. P2 und P3

Für uns interessanter sind hier P2 und P3; ihre Basen zeigt Abb. 14. Wie man sieht, benötigt P2 weniger Passungsregeln, was damit zusammenhängt, daß ihre Kacheln von niedrigersymmetrischem Umriß sind. Ersetzt man – sowohl bei P2 als auch bei P3 – die geraden Polygonseiten durch geeignet geschwungene Linien, so kann auf zusätzliche Regeln überhaupt verzichtet werden: die Bedingung, lückenlos zu legen, genügt dann schon! Mit entsprechenden Motiven auf den zwei Kacheln entstehen Tessellationen im Stil M.C. Eschers; Penrose selbst gab ein derartiges *Hühnchen-Motiv* an (siehe GRÜNBAUM & SHEPHARD, 1987).

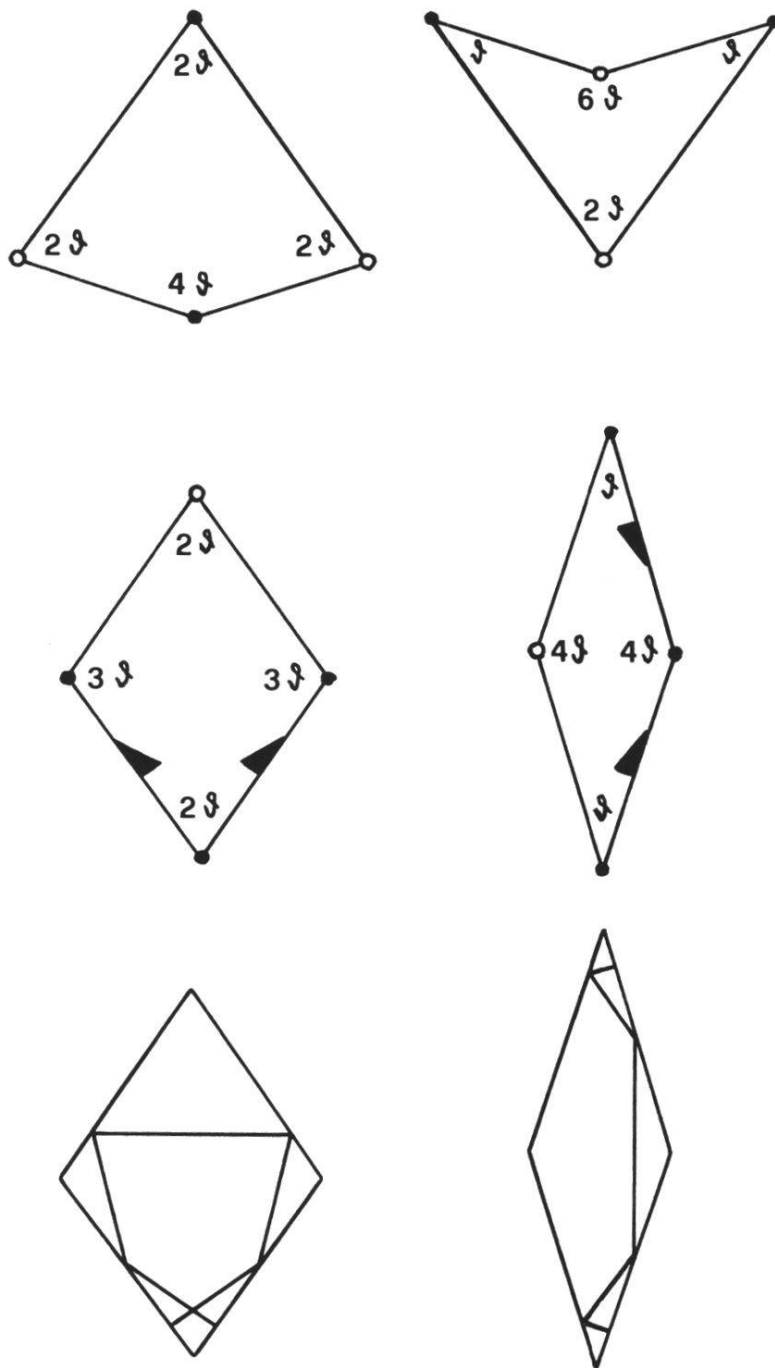


Abb. 14: Penrose-Tessellationen P2 und P3.

Oben: Basis von P2; *Drachen* und *Pfeil*. Passungsregel: Ecken gleicher «Farbe» (hier: schwarze und weiße Kreise) zueinander.

Mitte: Basis von P3; *spitzer* und *stumpfer* Rhombus. Passungsregel: Ecken gleicher «Farbe» zueinander, und die halben Pfeile (▴) müssen sich zu ganzen zusammensetzen.

$\vartheta = \pi/5$; die Seiten bei P2 verhalten sich wie 1 zu $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

Unten: Basis von P3, statt mit «Farben» und Pfeilen mit den Ammann-Linien; auch sie garantieren das richtige Zusammensetzen, wenn sie ohne Knick von einer Kachel zur nächsten weiterlaufen (siehe Abb. 24). Nach KRAMER (1985).

Statt durch Eckenfarben (meistens als «schwarz» und «weiß» wiedergegeben, siehe Abb. 14ff) und Halbpfeile können die Passungsregeln auch durch geeignete Muster auf den Kacheln festgelegt werden. Ein derartiger Vorschlag verwendet 2 Arten von Kreisbögen, die sich über die Kachelgrenzen hinweg verbinden müssen; dabei entstehen verschieden große und unterschiedlich komplexe geschlossene Linienzüge, deren jeder pentagonale Symmetrie besitzt!

Eine wichtige Möglichkeit, die Passungsregeln auszudrücken, besteht hier wieder in *Ammann-Linien* (Abb. 14). Es ergeben sich 5 Scharen von Geraden, deren Richtungen jene der Seiten des regulären Pentagons sind und die somit die pentagonale Infrasympmetrie nachzeichnen. Die Abstände innerhalb jeder Schar bilden eine Fibonacci-Folge (dazu siehe 5.1.).

4.2.2. Erzeugung von Penrose-Tesselationen: die Deszendenzmethode

Das Konstruieren von Ammann- und Penrose-Tesselationen wurde oben durch eine « naive » *Anlegemethode* beschrieben: Es hieß, sie garantiere den Bau der Belegung. Dies ist nun leider nur bedingt richtig: Tatsächlich garantiert sie, daß jede so entstehende Belegung des E^2 aperiodisch ist und zum entsprechenden Typ gehört – sie garantiert aber im allgemeinen nicht, daß überhaupt eine Belegung entsteht! Auch regelgerechtes Anlegen kann nicht verhindern, daß Situationen auftreten, in denen der *Weiterbau unmöglich* ist (Abb. 15).

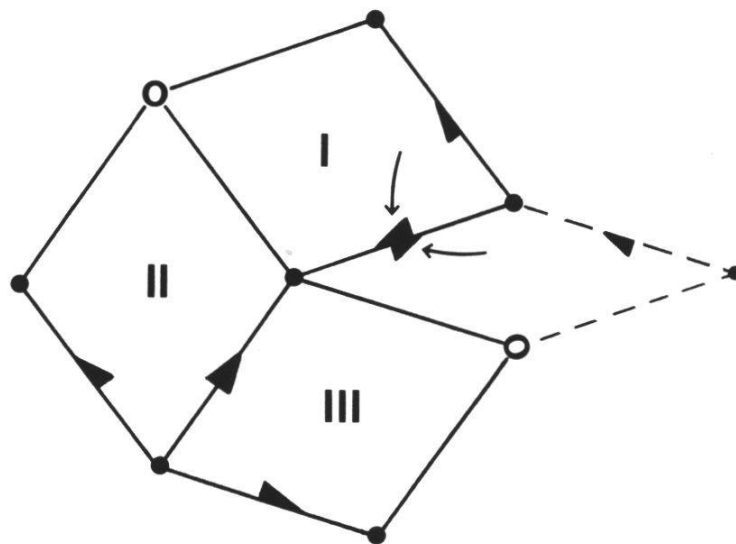


Abb. 15: Baufehler in P3.

Die Passungsregeln gestatten die Anordnung der drei Rhomben I, II, III. Die Lücke zwischen I und III kann jedoch nicht gefüllt werden: entweder passen die Eckenfarben oder die Halbpfeile nicht! Skizziert ist dieser zweite Fall. Andererseits kann die Konstellation I, II, III gar nicht entstehen, wenn die Deszendenzmethode verwendet wird.

Hier beschreibe ich nun (nach GRÜNBAUM & SHEPHARD, 1987) eine Methode, welche erstens diesen unendlichen Bau immer ermöglicht, zweitens eindeutig ist und drittens eine Vielzahl von metrischen und topologischen Implikationen erschließt, die für die Theorie der Tesselationen von zentraler Bedeutung sind. Wie in der Einleitung zu diesem Teil definiert, handelt es sich um eine *Deszendenzmethode*, deren wesentlicher Schritt eine *Rekomposition* der Kacheln ist.

Allgemein wird als *Rekomposition* jedes Verfahren bezeichnet, bei dem – definiert auf den Basiskacheln – eine Belegung in eine andere verwandelt wird, indem die Kacheln zerteilt werden, worauf man die Teile in bestimmter Weise zu neuen Kacheln zusammensetzt.

Abb. 16 zeigt, wie die *P3-Kacheln* aus jenen der *P2* entstehen und umgekehrt. Diejenigen Teile, welche jeweils über den ursprünglichen Rand hinaus ergänzt werden müssen, stehen in jeder Tesselation stets zur Verfügung: dafür sorgen die Passungsregeln!

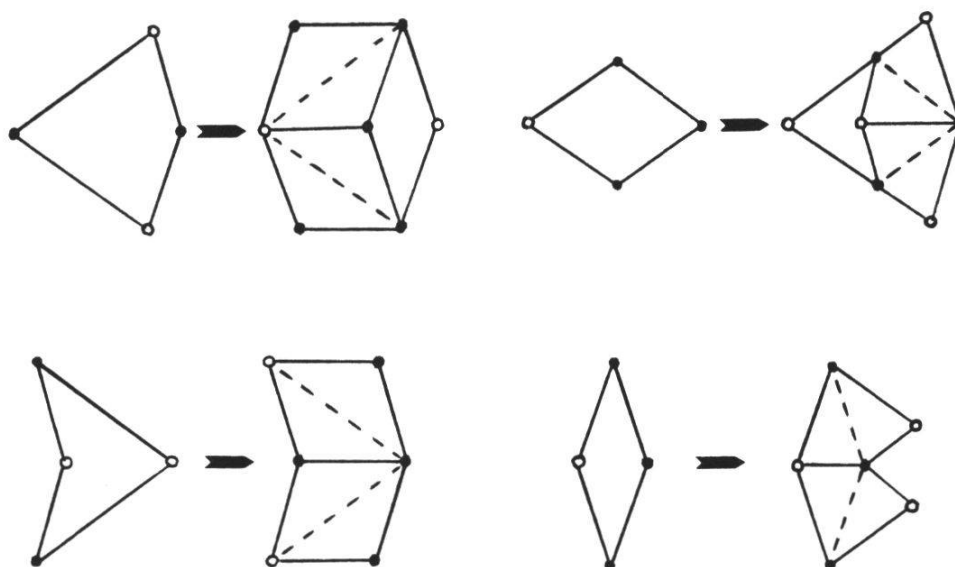


Abb. 16: Rekombination der P2-Kacheln zu P3-Kacheln und umgekehrt. Bei jedem Rekombinationsschritt werden halbe Kacheln «außen» zu vollständigen ergänzt; die Passungsregeln garantieren, daß diese Teile immer verfügbar sind. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

Abb. 17 stellt den Tesselationstyp *AP* von *Ammann* dar: Er entsteht als eine Rekomposition aus P3. Außer der Grundbedingung, lückenlos zu sein, benötigt AP keine Passungsregeln, obwohl seine Kacheln keine komplizierten Formen besitzen, sondern recht einfache Polygone sind!

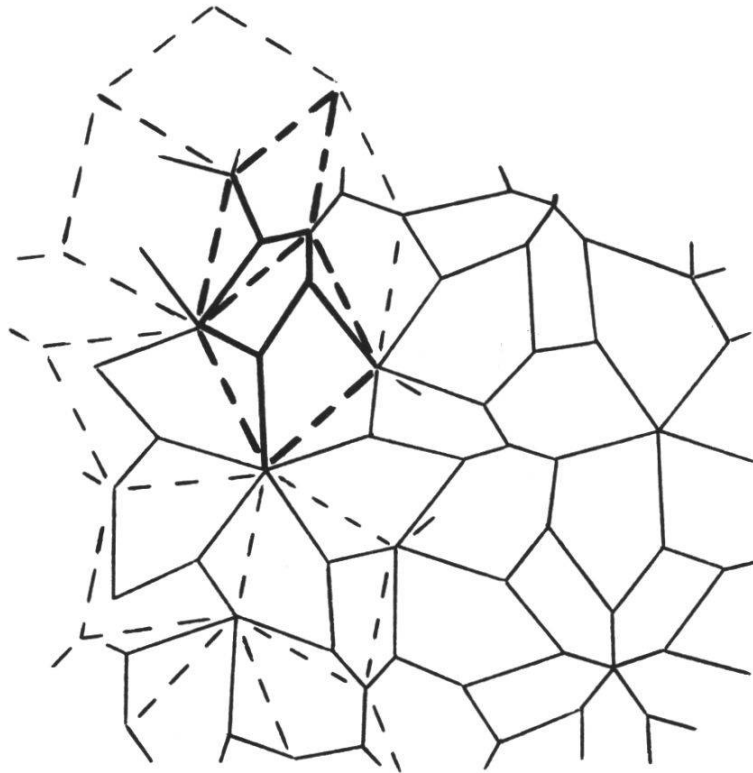


Abb. 17: Ammann-Tessellation AP.

Eine Belegung mit drei Basiskacheln, die ohne Passungsregeln auskommt. Im linken Teil ist angedeutet, wie die AP-Tessellation aus einer P3-Tessellation (gestrichelt) entsteht: Die AP-Kachelgrenzen können als Muster auf den P3-Kacheln aufgefaßt werden! Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

Es ist jedoch auch möglich – und damit komme ich zum Kernpunkt dieser Ausführungen! –, durch *Rekomposition einer Belegung eine andere zu erzeugen, die zum selben Typ gehört*. Abb. 18 zeigt die Teilungsvorschrift für die P3-Basiskacheln.

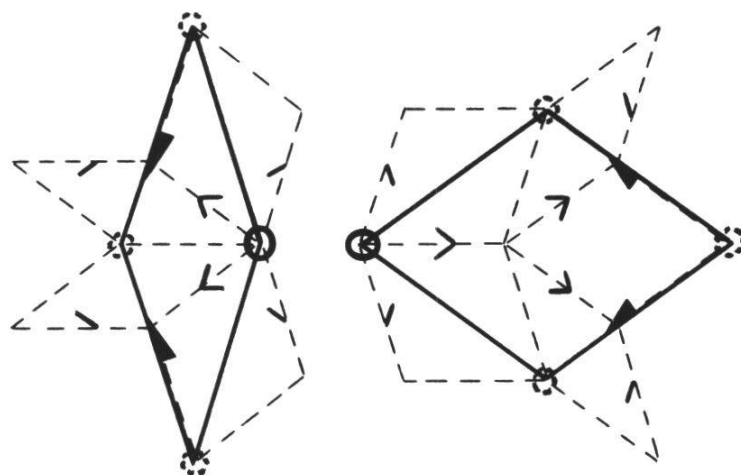


Abb. 18: P3-Rekomposition.

Aus jeder P3-Kachel entstehen durch Teilen und Zusammensetzen neue (kleinere) P3-Kacheln, jene der folgenden Generation. ► Pfeile der Mutter-, > Pfeile der Tochtergeneration. Nur die weißen Ecken sind markiert, mit ○ bzw. ◯. Man sieht, daß von einer Generation zur nächsten alle schon existierenden Ecken ihre «Farbe» wechseln.

Sehen wir nun, wie mit diesem Prinzip irgendeine der unendlich vielen möglichen P3-Tesselationen erzeugt wird! *Ausgangsmaterial* ist eine erlaubte Anordnung von Kacheln – und damit stehen wir vor dem ersten Problem: Wie kann ich das feststellen? Die Antwort darauf wollen wir vorläufig zurückstellen; in Kürze werden wir sie mit Leichtigkeit beantworten. Abb. 19 zeigt links zwei erlaubte Anordnungen; dies ist die Figur der 0. Generation. Nun wird die Rekomposition entsprechend Abb. 18 durchgeführt; wir erhalten die 1. Generation. Als zusätzliche Regel gilt dabei, daß die außen fehlenden Teile jeweils hinzugefügt werden müssen – hier sind ja keine Nachbarkacheln vorhanden, die sie liefern könnten. – Abermals wird rekomponiert, und die 2. Generation entsteht; usw. Die ursprüngliche Figur wird also immer weiter unterteilt, die Größe der Kacheln schwindet immer mehr, geht im Grenzfall gegen Null.

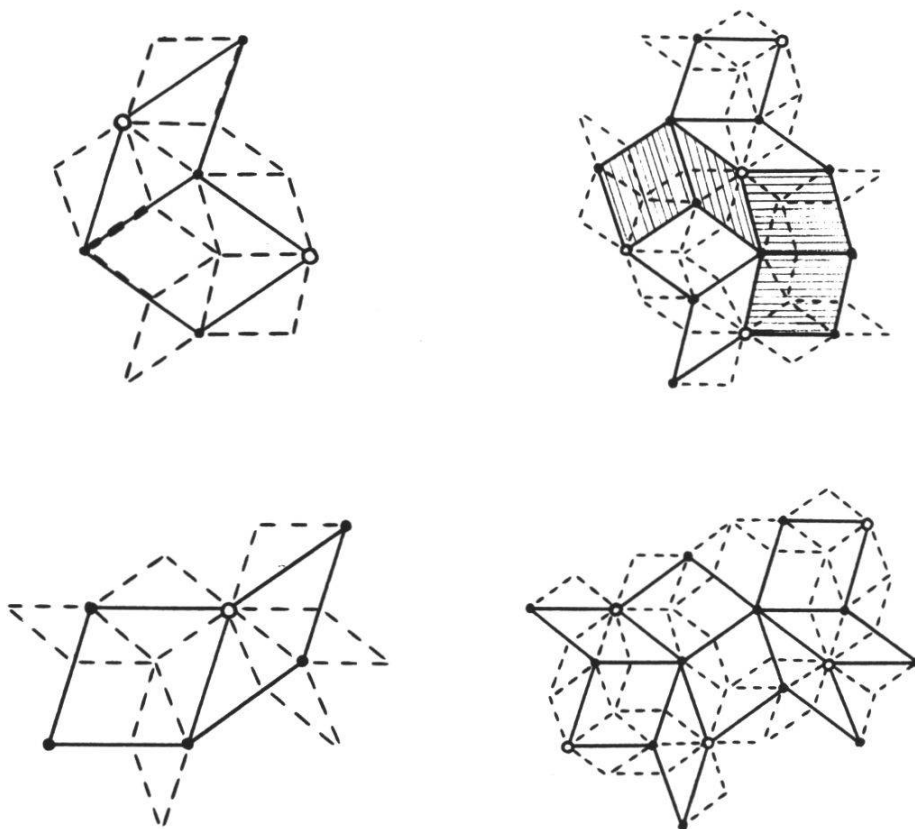


Abb. 19: P3-Deszendenz.

Links zwei Kachelanordnungen der 0. Generation (ausgezogen) sowie die 1. Tochtergeneration (gestrichelt), entsprechend Abb. 18. Rechts jeweils wieder die 1. Generation (ausgezogen) und die folgende 2. Generation (gestrichelt). – Zur Schraffur siehe Abb. 20.



Abb. 20: Aszendenz in P3.

Die hier dargestellte 3-Kachel-Konfiguration (ausgezogen) kann auf zwei Arten aus der vorangehenden Generation (gestrichelt) entstehen: entweder aus zwei stumpfen Rhomben oder aus einem stumpfen und einem spitzen Rhombus. Beide Fälle treten in Abb. 19 rechts oben auf (schraffiert).

Nun ist natürlich die «absolute» Größe eine reine Normierungssache der Metrik. Die Relationen der Kacheln zueinander – sowohl topologisch als auch metrisch – sind nicht betroffen, wenn wir nach jedem Rekombinationsschritt eine *Inflation* einschalten. Darunter versteht man eine Ähnlichkeitsabbildung des E^2 mit einem Vergrößerungsfaktor, der hier so gewählt ist, daß jede Kachel der Folgegeneration wieder so groß wie ihre entsprechenden Vorgänger wird. Nun sieht der Vorgang anders aus: die Figur verändert sich mit jeder Generation und wächst dabei – ähnlich einem knospenden Polypen – immer weiter nach außen ... dem unendlich fernen Rand der Ebene zu, den sie im Grenzfall – nach unendlich vielen Generationen – erreichen wird.

Dieser *iterative* oder *rekursive Erzeugungsprozeß* einer Tesselation ist, wie oben erwähnt, immer *ad infinitum* durchführbar und dabei eindeutig: Nirgends gibt es die Möglichkeit einer Wahl der Fortsetzung!

Nun können wir auch das *Problem der erlaubten Anordnungen* lösen. Führen wir zunächst den eben beschriebenen Prozeß aus, indem wir von einer einzigen Kachel ausgehen! Wir erhalten eine spezielle P3-Tesselation. Andererseits kann man beweisen (aufgrund der Rekombinationsregel), daß die *P3-Tesselationen lokal isomorph* sind. Dies aber hat zur Folge, daß in unserer speziellen Belegung schon alle überhaupt möglichen endlichen Kachelanordnungen vorkommen! Jedes aus ihr herausgeschnittene Stück ist also eine erlaubte Anordnung, und andere gibt es nicht.

Verblüffend daran ist allerdings, daß auf diese Weise nicht jedesmal die selbe Tesselation erzeugt wird – wieso ergeben Stücke aus *einer* Belegung bei der Weiterverarbeitung verschiedene Anordnungen, statt sich wieder zu jener zu «regenerieren», aus der sie entnommen wurden? Solches Verhalten indes ist für lokal isomorphe Strukturen normal: wir sind es nur nicht gewöhnt. Doch lehrt uns der bloße Augenschein auf Abb. 19, daß es sich tatsächlich so verhält: Die beiden Anfangsanordnungen links können gewiß aus der selben Tesselation geschnitten werden (es genügt, sich die nächste Generation rechts daneben anzusehen), doch zeigen die letzten dargestellten Generationen keine Angleichung aneinander – ihre Ränder sind eben ganz verschieden, und so entwickeln sie sich in durchaus unterschiedliche Richtungen.

Wie schon oben erwähnt, ist bei unserem Verfahren die Deszendenz eindeutig: betrachte ich irgendeine Kachelanordnung, so ist völlig festgelegt, was aus ihr in der Folgegeneration entsteht. Die Umkehrung des Prozesses jedoch, die *Aszendenz*, ist mehrdeutig: Eine gegebene Kachelanordnung kann aus verschiedenen Anordnungen hervorgegangen sein. So zeigt z. B. Abb. 20, wie die selbe 3-Kachel-Anordnung auf zwei Arten entsteht. Nun kann man natürlich einwenden, es genüge, die Umgebung der gezeigten Anordnung zu betrachten: Sie würde sofort zeigen, wie die Muttergeneration

aussah. Das ist zwar richtig, doch verschiebt man damit einfach das Problem, denn die nun berücksichtigte, größere Anordnung hat wieder einen Rand, an dem die Abstammung nicht eindeutig festgelegt ist. Es bleibt dabei: Der Weg durch die Generationen abwärts ist eindeutig, der Weg aufwärts nicht. Der nahezu triviale Grund dafür ist, daß (wie Abb. 18 zeigt) die zwei Rhombentypen der Tochtergeneration auf mehr als eine Art aus den Rhomben der Muttergeneration entstehen.

4.2.3. Die Penrose-LI-Klasse

Wie schon oben (erlaubte Anordnungen) erwähnt, sind alle P3-Tesselationen lokal isomorph; jeder – beliebig große, aber endliche – Ausschnitt aus jeder kommt in jeder anderen vor, und zwar sogar unendlich oft! Nach der Definition in 3.4. heißt dies, daß alle P3-Tesselationen zur selben LI-Klasse gehören. Dabei ist zu beachten, daß «P3» meint: Kacheln *und* Passungsregeln. Tesselationen *anderer LI-Klassen* erhält man nämlich, indem zwar die selben zwei Basiskacheln verwendet werden, jedoch *andere Passungsregeln*. In diesen Belegungen finden sich Kachelanordnungen, die in P3 verboten sind: Sie können lokal unterschieden werden. Ein Beispiel zeigt Abb. 23 in 5.1.

Eine Folge der lokalen Isomorphie aller P3-Tesselationen ist, daß jede dieser Belegungen lokal automorph ist (der Beweis ist trivial!). Diese Tatsache wird im folgenden oft verwendet werden.

Da weiter P3 und P2 durch Rekombination zusammenhängen, gelten entsprechende Konstruktionsmethoden und Eigenschaften auch für die P2-Tesselationen. Mit einer gewissen einleuchtenden Definitionserweiterung sagt man, P2 gehöre zum selben LI-Typ wie P3.

4.2.4. Globale und lokale Pentagyren

In P2 und P3 gibt es je genau zwei Tesselationen, die eine *globale Pentagyre* besitzen. Sie entstehen durch Deszendenz aus den in Abb. 21 gezeigten Kachelanordnungen. Die für P3 dargestellte erste Generation zeigt übrigens, wie sich – in der Folge mit jeder Generation – die beiden Fälle ineinander umwandeln! Die nullte Generation der einen Belegung hat das selbe Zentrum wie die erste der anderen und umgekehrt. Nach erfolgter Iteration (mit unendlich vielen Schritten!) ist das «Zentrum» – d.h. der Ort der globalen Pentagyre – in jeder der zwei Belegungen wieder gleich ihrer Anfangsanordnung.

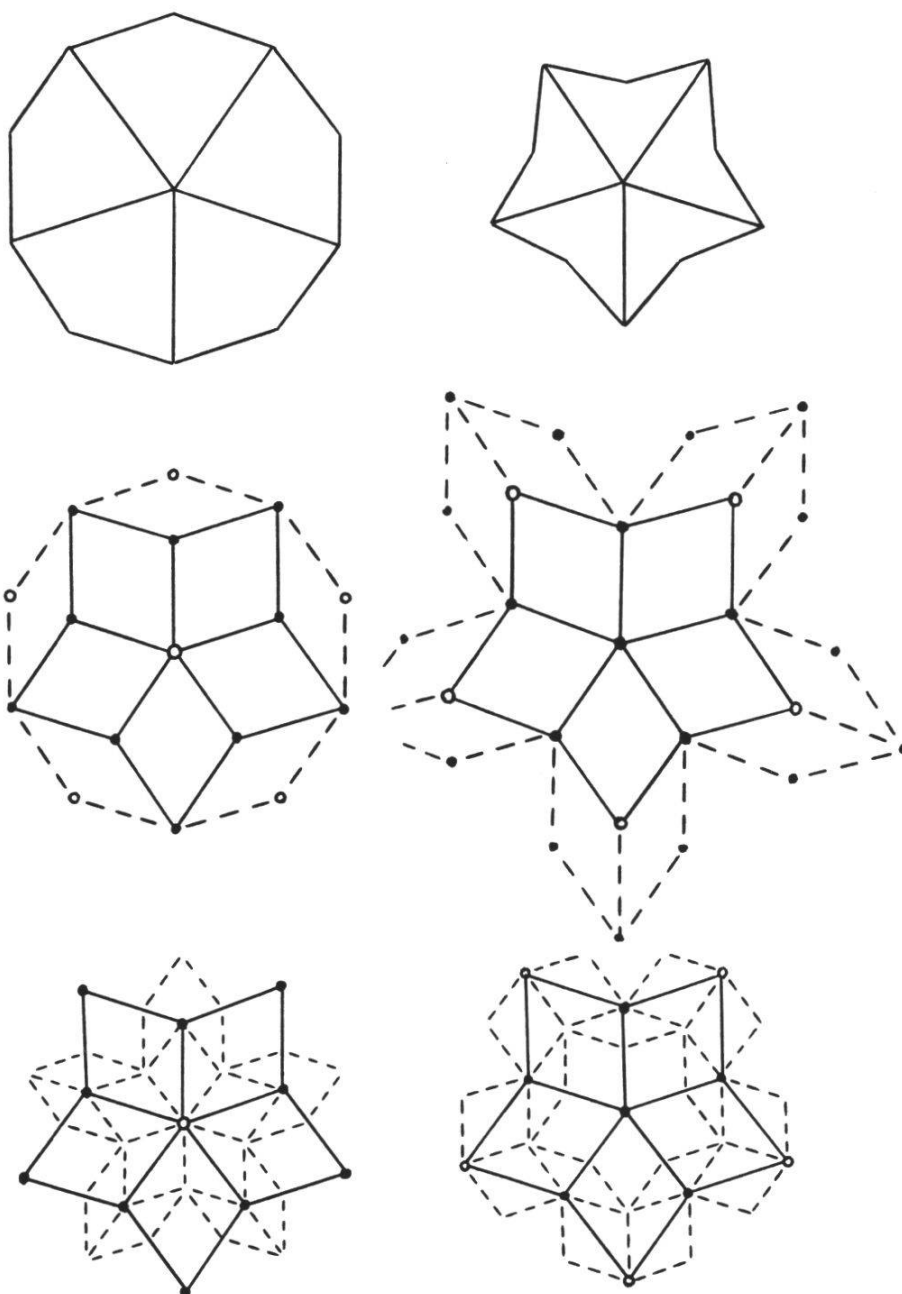
Die Existenz dieser speziellen Fälle hat unmittelbar eine erstaunliche Konsequenz: In *jeder* P2-bzw. P3-Tessellation existieren *lokale Pentagyren* mit verschiedenen, ja sogar *beliebig großen Reichweiten*, und jede von ihnen kommt unendlich oft vor! Dies garantieren die lokale Isomorphie und Automorphie der LI-Klasse, wonach jeder – beliebig große, aber endliche – Ausschnitt aus den betrachteten speziellen Belegungen in jeder anderen und in ihnen selbst unendlich wiederkehrt. Somit findet man auch beliebig große Ausschnitte, die symmetrisch um die globale Pentagyre herum vorgenommen worden sind, in endloser Vielfalt vor.

Betrachten wir nun einen Ausschnitt aus einer der vier speziellen Belegungen, in dem pentagonale Symmetrie besteht. Es ist uns *nicht möglich zu entscheiden, ob es sich dabei um die globale Pentagyre handelt* – genauso könnte es eine der lokalen sein, deren Bereich eben über das betrachtete Gebiet hinausragt. Vergrößern des Ausschnittes kann uns bestenfalls zeigen, daß es sich *nicht* um die globale handelt – dann nämlich, wenn wir das Aufhören der Symmetrie finden. Im Symmetriebereich selbst unterscheiden sich natürlich (aufgrund der oben gegebenen Ableitung) lokale und globale Pentagyren nicht; in jeder der vier speziellen Belegungen kommen jeweils beide entsprechenden Pentagyrentypen (lokal) vor. Der ausgezeichnete Punkt («Zentrum») jener vier Tessellationen ist also nicht *a posteriori* an der fertigen Belegung feststellbar – außer durch Betrachten der ganzen unendlich ausgedehnten Ebene.

Abb. 21: Globale Pentagyren in P2 und P3.

Oben: Ausgangsanordnungen für die zwei P2-Belegungen, die eine globale Pentagyre besitzen; die linke heißt *Sonne*, die rechte *Stern*. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

Mitte: Anfangsanordnungen für die zwei P3-Belegungen, die eine globale Pentagyre besitzen (ausgezogene Linien). Wird die Belegung durch *Anlagerung* erzeugt, so kann dies symmetrisch erfolgen (auf je genau eine Art). Die erste derartige Anlagerungsphase ist gestrichelt eingetragen. Man beachte, daß sich die zwei Anfangsanordnungen nur durch die Lage der Eckfarben unterscheiden: einmal ist das Zentrum weiß, einmal schwarz. Der Weiterbau ergibt aber ganz verschiedene Verhältnisse.



Unten: Wie Mitte, doch erfolgt jetzt der Weiterbau durch *Deszendenz*; die erste Generation ist gestrichelt eingetragen (ohne ihre Eckfarben). Da die Farbe der bestehenden Ecken sich jeweils ändert (cf. Abb. 18), wird aus dem Typ 1 (weißes Zentrum) der Typ 2 (schwarzes Zentrum) und umgekehrt. In jeder geraden Generation ist der Zentrumsbereich der entstehenden Belegung wieder mit der Anfangsanordnung identisch.

4.2.5. Die Wagenrad-Tesselation

Eine weitere spezielle Tesselation ist die Wagenrad- **T** (engl. cartwheel) des Typs P2. Sie wird vom *As* (ace) erzeugt, einer Kombination aus 2 Drachen und einem Pfeil; siehe Abb. 22. Die folgende Beschreibung ist leicht vereinfacht (cf. GRÜNBAUM & SHEPHARD, 1987). Das *As* (0. Generation) hat

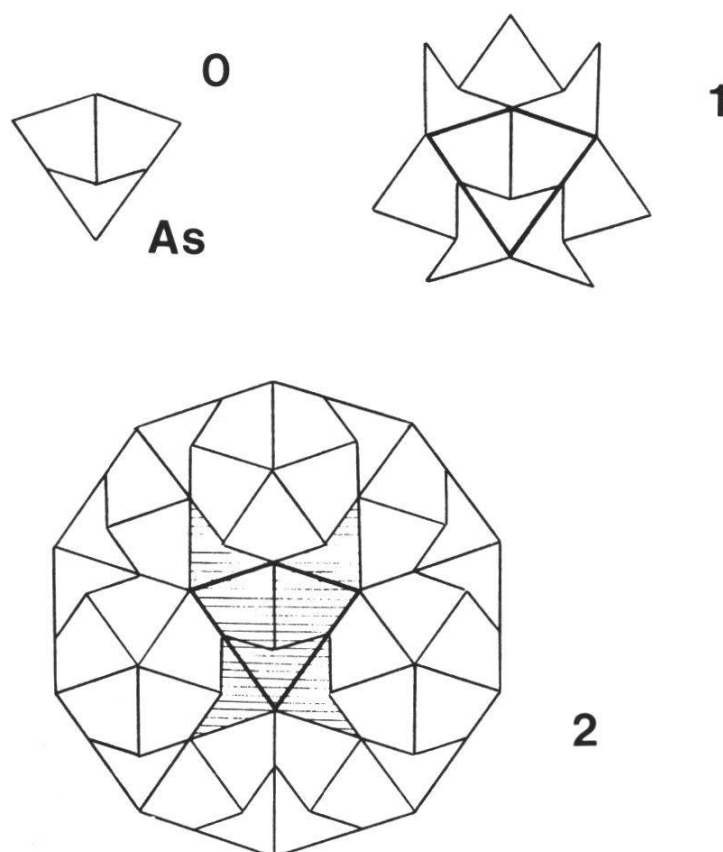


Abb. 22: Wagenrad-Tesselation.

Dargestellt sind die Generationen 0 bis 2; Beschreibung siehe Text. Nach GRÜNBAUM & SHEPHARD (1987).

keinen Umriß mit fünfzähliger Symmetrie, ebensowenig die nächste (1.) Generation. Die 2. Generation, genannt Wagenrad 1. Ordnung, besitzt jedoch diese Eigenschaft! In der 3. Generation fehlt sie wieder, um abermals in der 4. aufzutreten (Wagenrad 2. Ordnung), und so fort. Das Innere jedes Wagenrads hat natürlich keine 5-zählige Symmetrie; hingegen besteht eine vom *As* geerbte Spiegelebene. In der Wagenrad- **T** gehört *fast jede* Kachel zu irgend-einem Bereich, der fünfzählige Symmetrie besitzt – daß es unendlich viele solche (beliebig große) Bereiche geben *muß*, ist uns mittlerweile ja genügend vertraut. «Fast jede» Kachel heißt dabei: *jede* außer den 7 in Abb. 22 schraffierten! In allen *anderen* P2-Tesselationen gibt es *überhaupt keine*

Kacheln, die nicht in einem Bereich fünfzähliger Symmetrie liegen. Schließlich gibt es – immer aufgrund der lokalen Isomorphie – in jeder P2-Tessellation *Überdeckungen* mit Wagenrädern jeder (!) Ordnung (wobei die überdeckenden Wagenräder sich selbstverständlich überlappen dürfen).

4.2.6. Imperien

Interessant ist die Existenz von Imperien in den P2-Tessellationen: Gegebene Anordnungen von Kacheln können, wenn von ihnen aus *durch Anlagerung* weitergebaut wird – was ja unendlich vieldeutig ist – dennoch die Lage weiterer Kacheln in der *gesamten* Tessellation erzwingen, d.h. *über beliebig große Distanzen*. Einfach einzusehen ist dies natürlich für anliegende Kacheln, infolge der Passungsregeln. Bei entfernten Kacheln verblüfft die Tatsache zunächst, kann aber mittels der oben besprochenen Ammann-Linien bewiesen werden. Hier zeigt sich also, daß *die rein lokal definierten Passungsregeln eine Fernwirkung besitzen!* Die Imperien verschiedener Ausgangsanordnungen sind übrigens sehr unterschiedlich: *As* und *Sonne* erzwingen überhaupt keine Kacheln, der *Daus* (deuce; eine 4-Kachel-Anordnung) hat ein Imperium, das sich nur entlang einer Geraden erstreckt. Die Imperien des *Königs* und des *Sterns* bedecken jedes einen großen Teil des E^2 – nur für die dazwischenliegenden verbleibenden Felder sind verschiedene Ausfüllungen möglich.

4.2.7. Verallgemeinerungen

Während ich auf die Existenz anderer LI-Klassen schon zuvor hingewiesen habe, sei abschließend eine Verallgemeinerung anderer Art erwähnt. Gähler und Rhyner (in RIVIER, 1986) erzeugten mittels der unten zu besprechenden Multigittermethode einen ebenen Tessellationstyp, der 8 verschieden dicke Rhomben verwendet und 17-zählige Infrasympmetrie besitzt (17-Gitter, Anzahl Rhomben = $(17 - 1)/2 = 8$).

4.3. Mackay-Tessellationen

Der ursprünglich von Mackay (1982, siehe LEVINE, 1986) konstruierte Tessellationstyp ist das E^3 -Äquivalent der ebenen P 3: 4 *Rhomboeder* (2 Formen mit je zwei unterschiedlichen Passungsmarkierungen) ergeben eine *ikosaedrische Infrasympmetrie*. Daher fand dieser Fall besondere Beachtung bei den Kristallographen, bei denen er weithin als *das* Modell eines Quasikristalls schlechthin gilt. Die Rekombinationsregeln sind recht kompliziert.

Eine bestimmte Rekombination der Mackay-Rhomboeder – analog der AP-Rekombination von Abb. 17 – ergibt einen neuen Tesselationstyp des E^3 mit wieder 4 Basiszellen: eines der ursprünglichen Rhomboeder, ein Rhombentriakontaeder, ein Rhombenikosaeder, ein Rhombendodekaeder. Für die komplexere Form der Basiszellen wird man durch wesentlich einfachere Rekombinationsregeln entschädigt.

Da beide Mackay'sche Tesselationstypen im Aufbau enge Analogien zu den Penrose-Tesselationen besitzen, bezeichnet man auch sie, in abermaliger Verallgemeinerung des Begriffs, als «vom Penrose-Typ».

5. Erzeugungsmethoden für aperiodische Belegungen

Im Laufe der Zeit wurden im wesentlichen folgende drei Verfahren entwickelt:

- (i) Die Konstruktion mit *Passungs-* bzw. *Deszendenzregeln* wurde anhand einiger Fälle in Teil 4 gezeigt, in dem ich eingangs ihre Vor- und Nachteile erwähnte.
- (ii) Geometrisch am allgemeinsten ist die *Multigitter-* oder *Dualmethode*, mit der man sämtliche überhaupt möglichen Belegungen mit vorgegebenen Symmetrieelementen erzeugen kann, d. h. alle LI-Klassen mit bestimmter Infrasympmetrie. Für die kristallographische Anwendung indes besitzt diese Methode einen wesentlichen Nachteil: Die so wichtige Fouriertransformierte (siehe 6.1.) ist nicht allgemein berechenbar, d. h. die Bestimmung des Diffraktogrammes bereitet Schwierigkeiten.
- (iii) Bei der *H-Projektionsmethode* gewinnt man eine aperiodische Belegung in einem n -dimensionalen Raum E^n aus einer periodischen Belegung eines geeigneten höherdimensionalen Raumes E^h ($h > n$) durch Orthogonalprojektion unter Verwendung eines *Projektionsfensters*. Diese Methode liefert die Fouriertransformierte unmittelbar, bietet dafür aber, wie nachher auszuführen ist, gewisse konstruktive Probleme. – Es muß erwähnt werden, daß die Idee, gewisse aperiodische Funktionen (nämlich die «nahezu periodischen», siehe 6.2.1.) durch periodische in einem höherdimensionalen Raum darzustellen, in der Mathematik schon altbekannt ist: sie wurde von H. Bohr (einem Bruder Niels Bohrs) eingeführt.

Ich werde nun die Dual- und die Projektionsmethode näher darstellen, ohne jedoch viel mathematischen Formalismus zuzuziehen. Dennoch kann dieser Teil vom Leser notfalls ausgelassen werden, ohne daß dadurch in Kapitel 6. wesentliche Verständnisschwierigkeiten entstünden.

5.1. Multigitter- oder Dual-Methoden

5.1.1. Multigitter

In der allgemeinsten Form ist ein Multigitter Γ^m im E^n ($m \geq n$) eine *Familie* von $(n-1)$ -Ebenen, allgemein *H-Ebenen* genannt, welche gewissen Bedingungen genügen

(die hier nicht näher beschrieben werden sollen). Wie schon in 2.1.3. erwähnt, sind die «Gitter» der Kristallographie nicht Gitter in diesem mathematischen Sinn, sondern die Knoten (Vertizes) solcher Gitter. Falls der Klarheit halber nötig, bezeichne ich die kristallographischen Gitter als Punktgitter.

Im *gewöhnlichen Raum* E^3 besteht also ein Multigitter aus Ebenen, die sich teils schneiden können, teils zueinander parallel sind; sie zerteilen den E^3 im Normalfall in verschiedene Polyeder. In der *Ebene* E^2 sind die Gitterelemente Geraden; sie zerlegen die Ebene in diverse Polygone.

Gewöhnlich faßt man die oben erwähnten Bedingungen noch wesentlich enger und berücksichtigt nur Fälle, in denen das Multigitter Γ^m aus m Scharen von H-Ebenen besteht.

Γ^m wird also zerlegt in m Unterfamilien $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_j, \dots, \Gamma_m$; jedes Γ_j besteht aus (unendlich vielen) zueinander parallelen H-Ebenen. Wenn speziell die *Abstände* innerhalb jeder Schar *konstant* sind, liegt ein de Bruijn-Gitter vor, bilden sie hingegen *Fibonacci-Folgen*, so handelt es sich um ein Ammann-Gitter.

Als *Beispiel* zeigt Abb. 23 ein Multigitter Γ^5 (also ein Pentagitter) des de Bruijn-Typs in der Ebene. Hier bilden 5 Geradenscharen $\Gamma_1, \dots, \Gamma_5$ untereinander Winkel, die ganze Vielfache von $2\pi/5$ sind; den in 3.3.2.3. definierten Begriff anwendend, besitzt also dieses Gitter eine 5zählige Infrasympmetrie. Die Versetzungen der 5 Scharen gegeneinander sind numerisch festgelegt, und zwar derart, daß sich (in ganz E^2 !) immer nur zwei Gerade an einem Punkt schneiden.

Solche Gitter heißen regulär. Dabei kann natürlich der Abstand zweier Schnittpunkte *beliebig klein* werden – aber eben nicht Null! Auch hier wird deutlich, wie Aperiodizität mit (infinitesimalen) Irrationalitätsbedingungen zusammenhängt (vgl. H-Projektion in 5.2).

5.1.2. Dualität

Die Dualität zweier Räume E_α^n, E_β^n ist ein rein topologisches Konzept, das keine Rücksicht auf metrische Verhältnisse nimmt. In diesem Sinne ist Dualität immer symmetrisch: E_α^n ist dual zu E_β^n und umgekehrt. Wo, wie in unserem Falle, die metrischen Bezüge wesentlich sind, ist diese Symmetrie natürlich nicht mehr direkt erkennbar.

Allgemeine *Verfahren des Dualisierens* können hier nicht dargestellt werden; das Prinzip sei vielmehr (nach KRAMER, 1985) anhand eines sehr einfachen Beispiels gezeigt (Abb. 23). Hier ist die duale Konstruktion geometrisch elementar durchführbar und gibt uns gleichzeitig Gelegenheit, eine Belegung zu konstruieren, die – bei Verwendung der «Penrose-Rhomben», aber mit anderen Passungsregeln – einer anderen LI-Klasse als P3 zugehört. – Jeder *Masche* (Polygon) im Multigitter-Raum E_α^2 entspricht ein *Vertex* (Ecke) im Belegungs-Raum E_β^2 , z.B. der Masche $X_1 = A_1A_2A_3A_4A_5$ der Vertex $\hat{X}_1 = B_1$. Umgekehrt entspricht der Masche $Y_1 = B_1B_2B_3B_4$ (in E_β^2) der Vertex $\hat{Y}_1 = A_3$ (in E_α^2). Weiter entspricht jeder *Maschenseite* im einen Raum eine ebensolche im anderen, und es sollen (in unserem speziellen Fall) die *zueinander dualen Maschenseiten zueinander senkrecht* stehen. Beispielsweise sind $\overline{A_2A_3}$ und $\overline{B_1B_2}$ einander dual, und $\overline{A_2A_3} \perp \overline{B_1B_2}$.

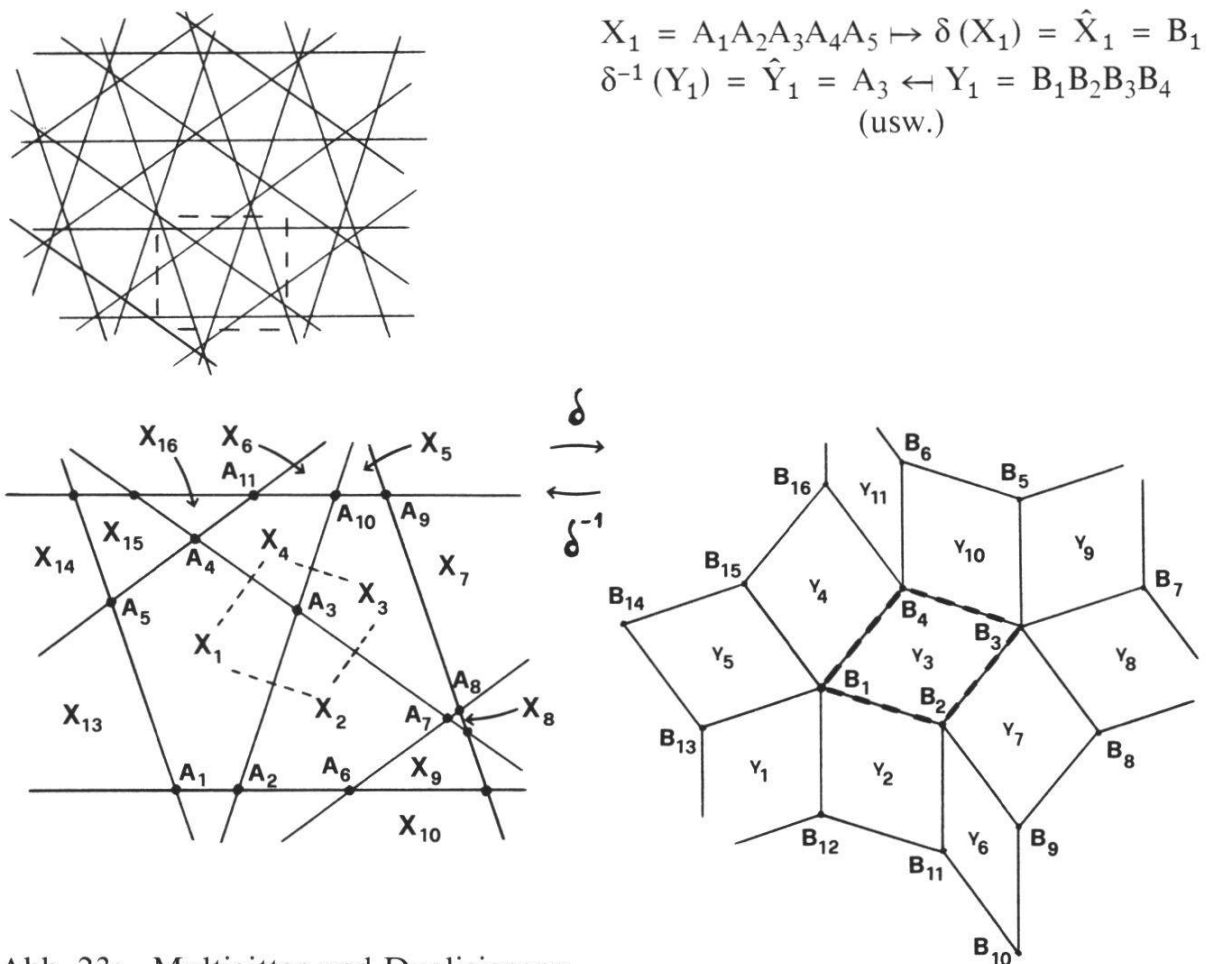


Abb. 23: Multigitter und Dualisierung

Oben: Teil eines de Bruijn-Pentagitters im Multigitter-Raum E_α^2 . Nach KRAMER (1985).

Unten links: Multigitter-Raum E_α^2 ; Ausschnitt aus obigem Pentagitter. A_i sind die Schnittpunkte der Geradenscharen Γ_1 bis Γ_5 , d. h. die Knoten (Vertizes) des Pentagitters; X_i sind seine Maschen.

Unten rechts: Belegungsraum E_β^2 ; der gezeigte Teil ist dual zum E_α^2 -Ausschnitt links. δ bedeutet die Dualisierungsabbildung, δ^{-1} ihre Umkehrung. B_i sind die Ecken der Belegung \mathbf{T} ; $B_i = \delta(X_i) = \hat{X}_i$. Y_i sind die Maschen bzw. Kacheln von \mathbf{T} . Konstruktionsbeschreibung siehe Text; die gestrichelten Linien deuten an, wie aus 4 Maschen (X_1 bis X_4) in E_α^2 eine Kachel mit den Ecken B_1 bis B_4 in E_β^2 entsteht.

Die Konstruktion der Belegung aus dem Pentagitter geht also folgendermaßen vor sich: Nehmen wir zuerst die Masche $\hat{B}_1 = A_1 A_2 A_3 A_4 A_5$ und zeichnen Punkt B_1 ; von ihm gehen 5 Kachelkanten aus, deren Richtungen nach obigem Prinzip gegeben sind: je senkrecht zu den fünf Seiten $\overline{A_1 A_2}$, $\overline{A_2 A_3}$, ..., $\overline{A_5 A_1}$. Nun legt man auf einer dieser Richtungen den nächsten Vertex fest, z. B. B_2 , und wiederholt von hier aus die Richtungskonstruktion, diesmal bezüglich der Masche \hat{B}_2 : 4 Richtungen. Wählen wir – als einfachsten Fall – alle Kantenlängen der Kacheln gleich lang, so erhalten wir eine penroseähnliche Belegung aus «dicken» und «schlanken» Rhomben.

Wie Abb. 23 zeigt, ist es nicht möglich, die *Belegung in das Pentagitter einzubetten*, d. h. die Konstruktion direkt auf dem Gitter durchzuführen: die metrischen Verhältnisse verbieten dies. Diese Möglichkeit besteht hingegen bei den (nicht-aequidistanten) Ammann-Gittern, wie aus den Beispielen in Teil 4 ersichtlich ist: Bei Abb. 11 und 13 ist das 2-Gitter in die Tessellation eingebettet bzw. umgekehrt. Hier wird auch klar, daß obige Konstruktion nicht allgemein ist: Bei Abb. 11 und 13 stehen die dualen Maschenseiten offensichtlich nicht zueinander senkrecht. Auch sind dort die Zuordnungen Masche/Vertex komplexer als in unserem obigen Beispiel.

Ein weiteres Beispiel zur Verwendung der Ammann-Gitter gibt Abb. 24. Wie auch in Abb. 11 und 13 drückt sich die Dualität so aus, daß einerseits das Ammann-Gitter als Dekoration der Penrose-Kacheln aufgefaßt werden kann (d. h. als Muster auf diesen, siehe Abb. 14), umgekehrt aber auch die Kachelumrisse als Dekoration der Maschen des Ammann-Gitters!

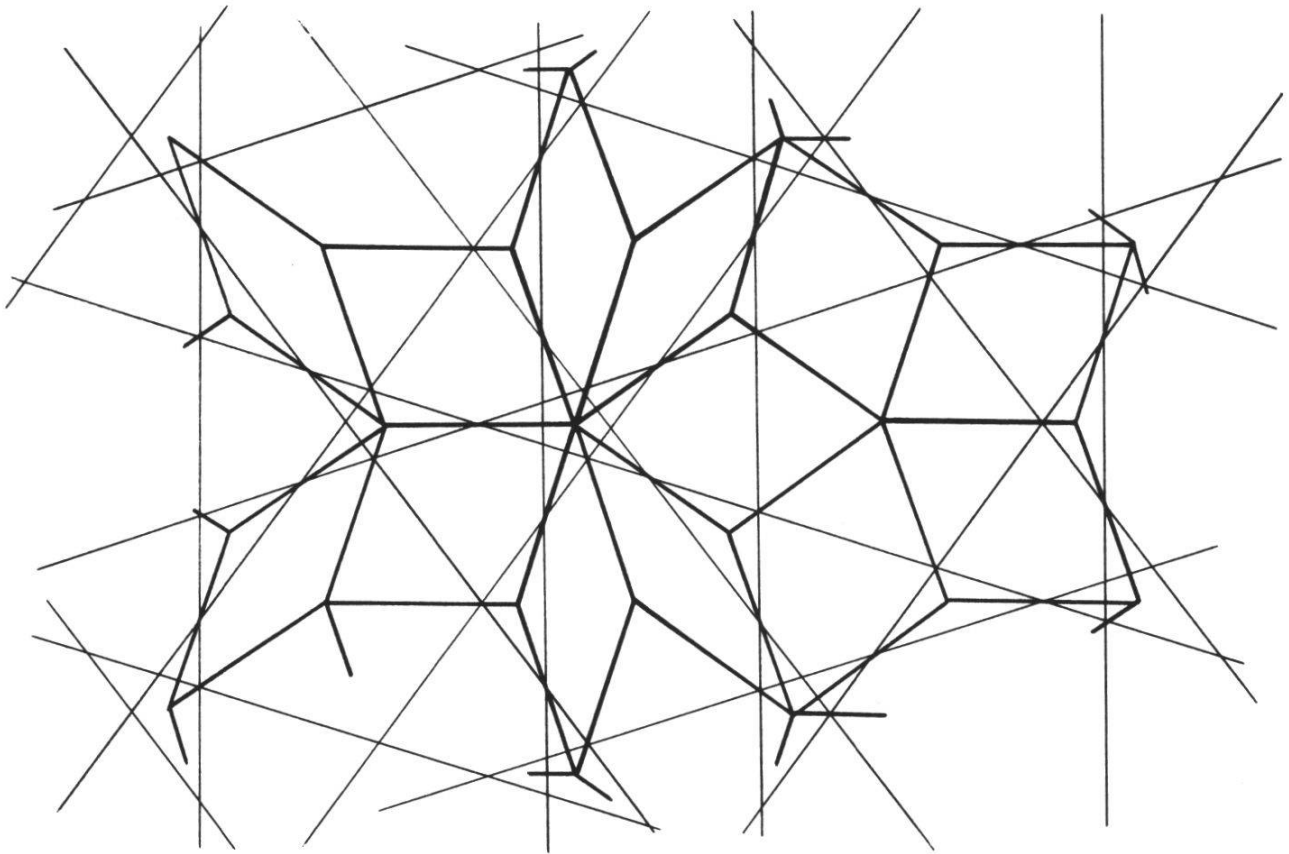


Abb. 24: P3-Tessellation mit Ammann-Gitter.

Der gezeigte Ausschnitt besitzt eine von links nach rechts verlaufende Spiegelebene. Man sieht die Geradenscharen Γ_1 bis Γ_5 des Ammann-Pentagitters (dünne Linien) und die daraus abgeleiteten Penrose-Kacheln (dicke Linien). Umgekehrt entsteht das Pentagitter, wenn die Kacheln korrekt angelegt werden – so nämlich, daß sich ihre Ammann-Linien (siehe Abb. 14) knickfrei von einer Kachel zur nächsten fortsetzen. Modifiziert nach NICKEL & NICKEL (1989).

Geht die Dualisierung von einem de Bruijn-Gitter aus (wie im Beispiel der Abb. 23), so bestimmen die gegenseitigen Versetzungen der H-Ebenen-Scharen (im Beispiel: der 5 Geradenscharen), welcher *LI-Klasse* die erzeugte Belegung angehört. So ist, wie oben bemerkt, die Tessellation der Abb. 23 nicht vom Penrose-Typ: Die Kombination Y_1, Y_2, Y_3 ist in der Penrose-LI verboten – siehe Abb. 15!

5.2. H – Projektion

5.2.1. Prinzip

Diese Methode basiert darauf, daß mit Hilfe von Verfahren der Vektorrechnung gewissen nicht-periodischen Punktgittern Z^n im E^n periodische Punktgitter Z^h in einem geeigneten E^h ($h > n$) zugeordnet werden können und daß das ursprüngliche Gitter aus dem höherdimensionalen durch orthogonale Projektion $p: E^h \rightarrow E^n$ zurückgewonnen werden kann, wenn man p auf ein geeignetes Gebiet (Projektionsfenster) des E^h beschränkt.

Die *Symmetriegruppe* eines derartigen Gitters Z^n , die keine Raumgruppe des E^n ist, wird somit durch eine Raumgruppe des E^h beschrieben.

Man kann nun das *Problem umkehren* und ein periodisches Gitter Z^h im E^h vorgeben. E^h wird zerlegt in irgendeinen Unterraum E^n und dessen orthogonales Komplement: $E^h = E^n \oplus E^{h-n} = E_{\parallel} \oplus E_{\perp}$. Die Projektion von Z^h auf E_{\parallel} (mit geeignetem Fenster, siehe unten) ergibt im allgemeinen ein nicht-periodisches Z^n , bei spezieller Wahl der Projektionsrichtung aber ein periodisches.

Folglich können die periodischen Punktgitter im Raum, und somit die Bravaisgitter, als *Grenzfälle* aperiodischer Gitter angesehen werden, der klassische Kristall als Grenzfall eines allgemeineren Kristallbegriffes!

Das periodische Punktgitter Z^h besteht aus den Ecken *irgendeiner* translatorischen Belegung des E^h (mit *einer* Polytop-Art). Tatsächlich wurden aber bisher fast nur hyperkubische Gitter in maximal 6 Dimensionen verwendet: alle experimentell beobachteten Fälle können so beschrieben werden. Bedenkt man aber, daß h beliebig groß sein kann und daß schier unendliche Variationen des Projektionsfensters möglich sind, so wird klar, daß – rein geometrisch – dieses interessante Gebiet bisher nur eben angekratzt wurde!

5.2.2. Probleme der Projektionsmethode

Das wesentliche Problem der Projektionsmethode liegt nun gerade in der Fenster-Wahl. Es ist nämlich kein Verfahren bekannt, mit dem man zum voraus feststellen könnte, ob ein gegebenes Fenster überhaupt eine \mathbf{T} ergibt, und noch weniger, ob diese von einer Art ist, die ein diskretes Diffraktogramm erzeugt. Andererseits sind Fälle bekannt (siehe z. B. DIVINCENZO, 1986), in denen das durch eine Projektion erzeugte Punktgitter Z^n zwar aperiodisch ist und ein diskretes Diffraktogramm erzeugt, jedoch gar nicht als Ecken-Menge einer \mathbf{T} interpretiert werden kann. Dies impliziert eine noch weiter gehende Verallgemeinerung des Kristallbegriffs: ein solcher Körper ist *überhaupt nicht als Packung irgendwelcher Zellen beschreibbar* und besitzt dennoch einem klassischen Kristall ähnliche Diffraktionseigenschaften.

5.2.3. Beispiel 1 (Abb. 25)

$h = 2$, $n = 1$, Z^2 ist ein Quadratgitter mit Kantenlänge 1. Projektionsfenster ist der Streifen, der durch Parallelverschieben eines Einheitsquadrates entlang E_{\parallel} entsteht (1 Freiheitsgrad). Man projiziert die Gitterpunkte in diesem Streifen auf E_{\parallel} und erhält so die Ecken einer (eindimensionalen) T_1 von $E^1 = E_{\parallel}$ mit zwei Kacheln (d. h. Strecken) der Längen l_1 und l_2 (das sind die Projektionen der «horizontalen» bzw. «vertikalen» Quadratseiten). Verschiebt man das *gesamte Fenster* parallel zu sich selbst (in Richtung E_{\perp}), so erhält man andere Tessellationen der selben LI-Klasse. Die *Neigung* von E_{\parallel} bestimmt das Verhältnis l_1/l_2 ; wenn $\text{tg } \vartheta = \tau = (1 + \sqrt{5})/2$, so wird T_1 durch eine Fibonacci-Folge beschrieben.

Weiter ist leicht zu sehen, daß T_1 *periodisch* wird, wenn $\text{tg } \vartheta = n_1/n_2$ ist, d. h. rational, da sich dann eine bestimmte Projektionsfolge periodisch wiederholen muß. Die Periode ist um so länger, je größer die (teilerfremden, ganzen) Zahlen n_1 und n_2 sind.

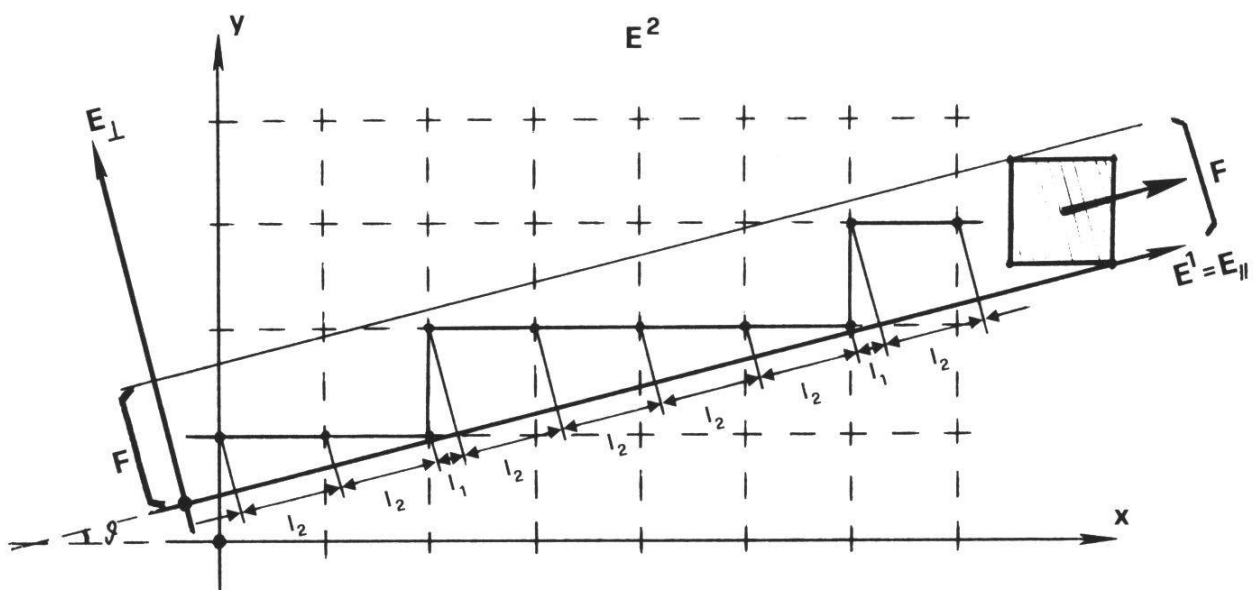


Abb. 25: H-Projektion $E^2 \rightarrow E^1$; Fibonacci-Tessellation.

Beschreibung im Text. Der «Hyperraum» E^h ist hier E^2 , der «gewöhnliche Raum» E^n ist E^1 . Der Streifen F ist das Projektionsfenster; es entsteht durch Verschieben des eingezeichneten Einheitsquadrates entlang E_{\parallel} . Nach KATZ & DUNEAU (1986).

5.2.4. Beispiel 2

Die Punktgitter Z^2 , welche aus den Ecken von P3-Tessellationen bestehen, gewinnt man aus einer Projektion $p: E^4 \rightarrow E^2$ (mit einem einfachen Fenster); das periodische Gitter Z^4 besitzt eine Struktur mit 5 Pentagonen. Abermals entsprechen verschiedene Tessellationen (alle P3 gehören zur selben LI-Klasse) den Parallelverschiebungen des Fensters.

5.2.5. Beispiel 3

Die Mackay-Tesselationen (4 Rhomboeder im E^3) entstehen mit einer Projektion $E^6 \rightarrow E^3$. Dabei sind die 12 Vektoren $\pm \vec{e}_1, \dots, \pm \vec{e}_6$, welche im E^3 vom Zentrum eines regulären Ikosaeders zu seinen Ecken weisen, die Projektionen von 12 Vektoren $\pm \vec{e}_1, \dots, \pm \vec{e}_6$ des E^6 , welche dort auf den Koordinatenachsen liegen, d. h. alle sechs \vec{e}_j bilden untereinander rechte Winkel.

Der Einheits-H-Kubus des E^6 wird dabei auf ein *rhombisches Triakontaeder* des E^3 projiziert; von dessen 32 Ecken entsprechen 12 jenen des regulären Ikosaeders, die anderen 20 denen eines gleich orientierten Dodekaeders.

Das gesamte hyperkubische Gitter Z^6 besitzt 20 Klassen von 3-Flächen (d. h. Körpern im gewöhnlichen E^3) je gleicher Form, aber unterschiedlicher Orientierung. Diese 3-Flächen fallen bei der Projektion auf nur 2 unterschiedlich geformte Körper: auf 2 verschiedene Rhomboeder (bestehend aus lauter gleichen Flächen!) – die beiden Mackay-Rhomboeder.

Um eine vollständige Mackay-T zu erhalten (bzw. ein ikosaedrisches Quasigitter des E^3), wird (analog Beispiel 1) ein Fenster verwendet, das dadurch entsteht, daß ein 6-Kubus K^6 parallel zu sich selbst *entlang E^3 verschoben* wird (3 Freiheitsgrade!).


6. Diffraktogramme

6.1. Die Fouriertransformation

Wie in der Einleitung erwähnt, entstehen beim Durchstrahlen eines Kristalls mit geeigneten Wellenlängen (wie Röntgenlicht oder Elektronen) die jedem Kristallographen bekannten *Beugungsbilder*: gewissermaßen verschlüsselte Blicke in den Kristall, aus denen mit mathematischen Methoden Informationen über seinen Aufbau erhalten werden können – insbesondere über die Symmetrien seines inneren Baues. Diese Beugungsbilder können als Schnitte – je nach der gewählten Durchstrahlungsrichtung – durch ein Gebilde im *reziproken Raum* aufgefaßt werden, das die gesamte überhaupt mögliche Beugungsinformation des gegebenen Kristalls enthält. Im folgenden wird dieses Gebilde als das *Diffraktogramm* des Kristalls bezeichnet.

Eine *Fouriertransformation* beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Kristall im Normalraum, der daher *Kristallraum* genannt wird (mit Koordinaten x, y, z) und dem Diffraktogramm im reziproken Raum, der deswegen als *Fourierraum* bezeichnet wird (mit Koordinaten x^*, y^*, z^*).

Folgendes Schema faßt die wichtigsten Begriffe zusammen:

Realer Raum (x, y, z) = Kristallraum	Reziproker Raum (x*, y*, z*) = Fourierraum
Dichtefunktion (Materieverteilung)	Diffraktogramm = Beugungsfunktion (Intensitätsverteilung)
$\rho(x, y, z)$	$I(x^*, y^*, z^*)$
 Fourier- transformation	

Dieses Konzept kann selbstverständlich ohne weiteres auf euklidische Räume E^n mit mehr oder weniger Dimensionen als $n = 3$ angewendet werden; in den Beispielen werden wir Fälle in E^1 und E^2 sehen.

6.2. Die vier Ordnungsklassen

Die klassische Kristallographie unterschied bezüglich der Diffraktogramme nur zwei Klassen: *amorphe Körper*, die (im Idealfall) kein Beugungsbild erzeugen (siehe unten), und Kristalle mit *translationsperiodischen Gittern*, die «gute» Diffraktogramme besitzen. «Gut» bedeutet in diesem Fall, daß das Diffraktogramm *diskret* ist, d. h. aus voneinander getrennten Punkten besteht, deren jeder eine bestimmte Intensität besitzt, also in einem $I(x^*, y^*, z^*)$ -Diagramm mit einem *Delta-Peak* besetzt ist. Tatsächlich entstehen mehr oder weniger eng begrenzte Flecke, da ja auch die Gitter«punkte» nicht ausdehnungslos sind, sondern aus Atomen bestehen. Auf *eine* Dimension bezogen sieht ein derartiges Diffraktogramm somit z. B. wie in Abb. 26 a aus.

Im Gegensatz dazu ist das Diffraktogramm eines *amorphen* Körpers *kontinuierlich*: selbst wenn die Atome auf Punkte reduziert wären, erfüllte es den gesamten (reziproken) Raum lückenlos stetig. Die in fast allen realen Fällen zu beobachtenden Intensitätsvariationen – siehe Abb. 26 c – rühren daher, daß selten ein Stoff ideal amorph vorliegt (Spannungszustände usw.).

Zwischen diesen beiden Fällen stehen nun die zwei Kategorien der *nahezu periodischen* und der *quasiperiodischen Gitter*. Erstaunlich dabei ist, daß die nahezu periodischen, auch *inkommensurabel modulierte* genannt, schon seit einiger Zeit in der Kristallographie durchaus akzeptiert waren. Der Grund dafür ist wohl, wie wir gleich sehen werden, daß man solche Gitter als «gestörte» normale Gitter auffassen kann: Sie sind Randerscheinungen, gefährden jedoch als solche die abgeschlossene Welt der 32 Kristallklassen nicht. Ganz anders dagegen die echten quasiperiodischen Gitter: Sie können

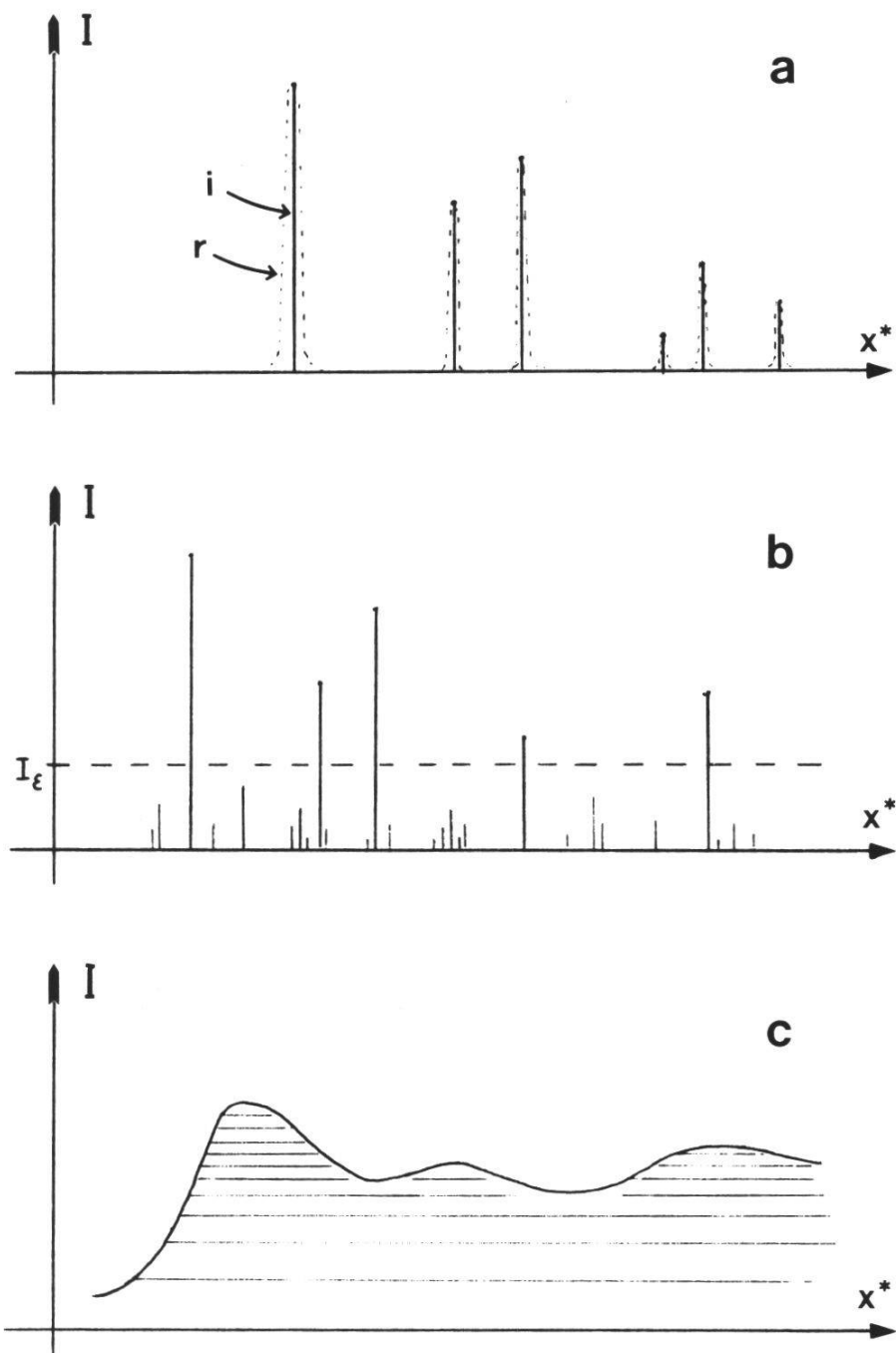


Abb. 26: Diffraktogramme in einer Raumrichtung (Schema).

a Für einem Kristall mit normalem Gitter; i ideal (punktförmige Atome), r real (ausgedehnte Atome).

b Für einen Kristall mit inkommensurabel modulierte oder Quasi-Gitter. I_ϵ ist eine frei gewählte Schwellenintensität; nur einige der schwächeren Peaks sind abgebildet.

c Für einen (nicht-ideal) amorphen Körper.

in keiner vernünftigen Weise als gestörte Normalgitter interpretiert werden, bedeuten also mathematische Subversion für das etablierte System.

6.2.1. Nahezu periodische Gitter

Bei nahezu periodischen Gittern (almost periodic lattices) sind die Funktionswerte der Raumdichte – gegeben durch Art und Lage der Atome – im wesentlichen periodisch, d. h. es liegt ein *mittleres Gitter* vor. Dieses ist aber mit einer im Kristallraum periodischen Funktion *moduliert* – die Atome sind ein bißchen aus ihrer «Normallage» verschoben. Dabei muß die Modulationslänge (die Periode der Modulationsfunktion) in mindestens einer Raumrichtung *inkommensurabel* zur entsprechenden Gitterkonstante (der Translationslänge des «mittleren Gitters») sein – daher die Bezeichnung «inkommensurabel moduliert». Wäre nämlich die Modulationslänge in allen Raumrichtungen kommensurabel zu den Abständen des mittleren Gitters, so ergäbe sich insgesamt wieder ein t-symmetrisches Gitter mit einer größeren tZ, deren Kantenlängen Vielfache der Perioden der Modulationsfunktion wären. Abb. 27 zeigt die beiden Fälle an einem willkürlichen zweidimensionalen Beispiel.

Dabei ist es prinzipiell bedeutungslos, *wie groß* die Amplituden der Modulationsfunktion sind: Wesentlich ist allein, daß die Abweichungsfunktion *nicht divergiert*; kein Knoten des effektiven Gitters kann sich weiter als eine vorbestimmte Distanz von «seinem» Knoten des periodischen Gitters entfernen.

Die oft als eindimensionaler Paradefall eines Quasigitters demonstrierte Fibonaccifolge, wie sie in Abb. 25 gezeigt wurde, ist tatsächlich nur nahezu periodisch (siehe AUBRY & GODRECHE, 1986): Man kann zu ihr ein mittleres (eindimensionales) Gitter konstruieren.

6.2.2. Quasiperiodische Gitter

Bei quasiperiodischen Gittern (Quasigittern) ist die Dichtefunktion – allgemeiner als im vorigen Fall – eine beliebige Summe periodischer (Dichte-) Funktionen, deren Perioden wieder wenigstens teilweise inkommensurabel sind. Der Hauptunterschied zum nahezu periodischen Fall ist jedoch folgender: Wählt man irgendein «mittleres Gitter», so entsteht eine zugehörige Abweichungsfunktion. Diese divergiert jedoch prinzipiell! Ganz gleich, wie das mittlere Gitter gewählt wurde, entfernen sich die effektiven Gitterknoten *beliebig weit* von «ihrem» mittleren Knoten; diese Distanz ist unbeschränkt. In irgendeinem begrenzten Gebiet kann man das effektive Gitter tatsächlich durch ein «mittleres» Gitter annähern, nicht aber im gesamten Raum. Somit ist es gar nicht mehr sinnvoll, überhaupt von einem mittleren Gitter zu sprechen, es sei denn lokal.

Vor allem von den Kristallographen, die es gegen «richtige» Gitter abgrenzen möchten, wird das Gitter des quasiperiodischen Falls oft als *Quasigitter* bezeichnet.

Abb. 27a: Nahezu periodisches Gitter (Schema).

Die ausgezogenen Linien bilden ein periodisches Gitter mit Translationsoperator $t = (\vec{t}_x, \vec{t}_y)$, das *mittlere Gitter*; l_x und l_y sind die Längen der Vektoren \vec{t}_x und \vec{t}_y .

Die gestrichelten Linien bilden das *nahezu periodische Gitter*. Es entsteht durch die unten und links skizzierten *Modulationsfunktionen* (mit Intensitäten I_m^x und I_m^y) aus dem mittleren Gitter. Die Perioden der Modulationsfunktionen sind m_x und m_y ; ihre Amplituden betragen $(+d_x; 0)$ und $(+d_y; -d_y)$; die Lagemodulation der Gitterpunkte ist durch die Werte δ_x und δ_y gegeben. Die Atome (o) sitzen an den Knoten des so erzeugten nahezu periodischen Gitters. Die Abweichung der Knoten des modulierten Gitters von denen des mittleren Gitters ist kleiner als $d_x + d_y$, also beschränkt im ganzen Raum E^2 .

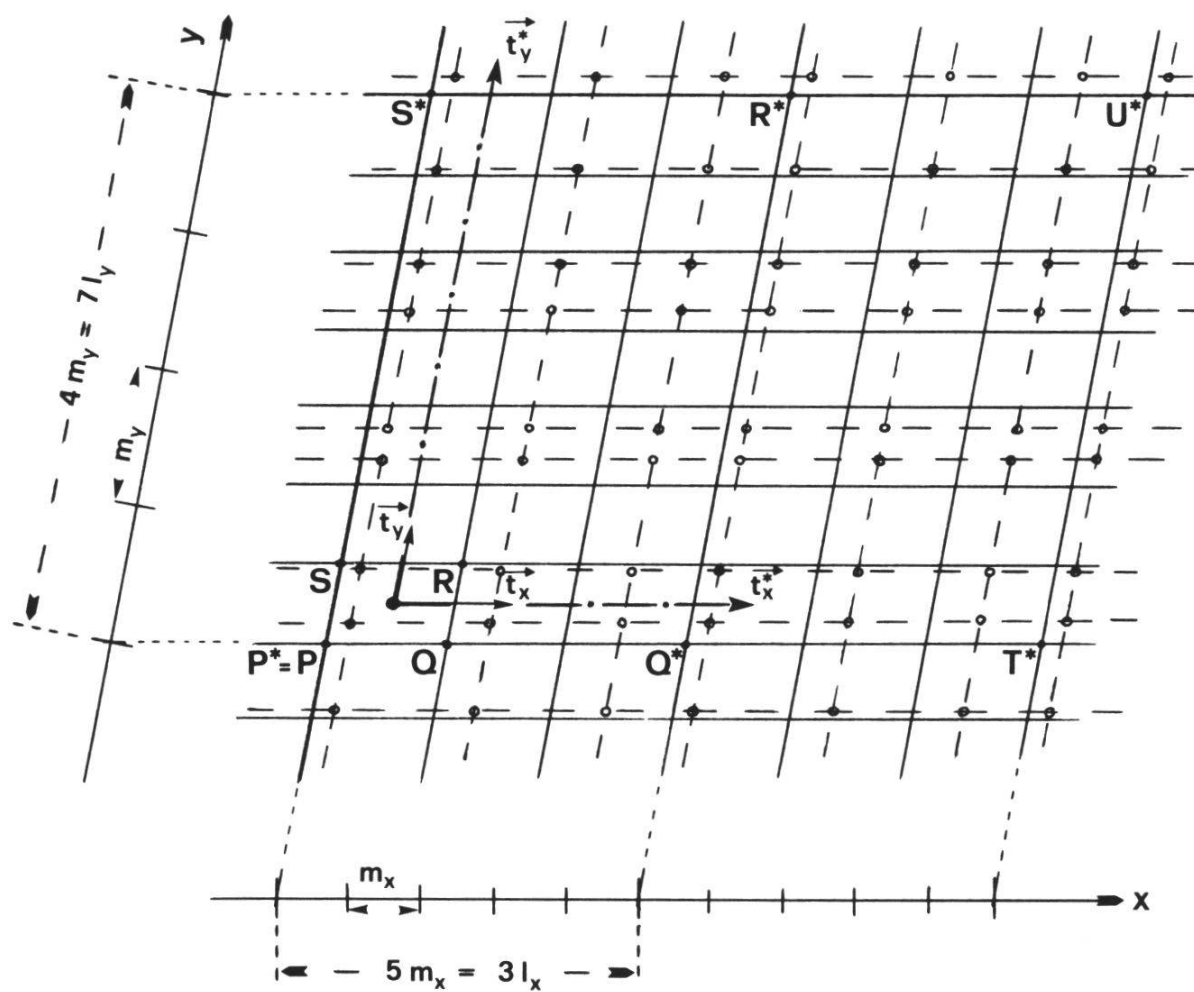
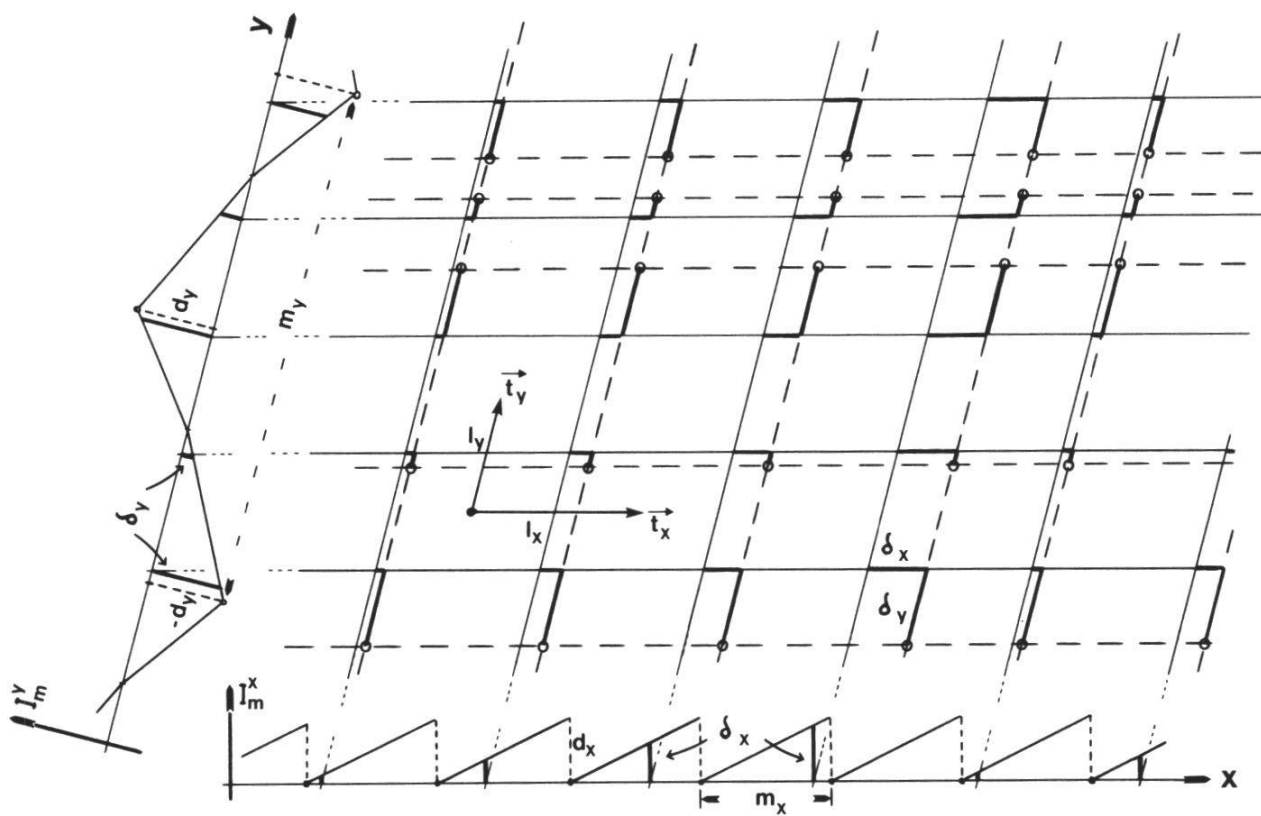
Die *Inkommensurabilitätsbedingung* lautet: $\frac{l_x}{m_x}$ sowie $\frac{l_y}{m_y}$ sind keine rationalen Zahlen.

Abb. 27b: Kommensurabel modulierte Gitter (Schema).

Auch hier bilden die ausgezogenen Linien ein periodisches Gitter mit dem Translationsoperator $t = (\vec{t}_x, \vec{t}_y)$, die gestrichelten Linien das daraus durch Modulation entstandene Gitter. Die Modulationsfunktionen selbst sind nicht dargestellt; es wird aber angenommen, daß die Modulationslängen mit den Periodenlängen des mittleren Gitters wie folgt kommensurabel sind:

$$\frac{l_x}{m_x} = \frac{5}{3} \text{ (d. h. } 3 l_x = 5 m_x), \quad \frac{l_y}{m_y} = \frac{4}{7} \text{ (d. h. } 7 l_y = 4 m_y).$$

Damit ergibt sich, daß die Verschiebungen in der Zelle $Q^*T^*U^*R^*$ denen in der Zelle $P^*Q^*R^*S$ gleich sind (usw.); somit ist diese Zelle *Translationszelle* (tZ) des *kommensurabel modulierten Gitters*, mit Translationsoperator $t^* = (\vec{t}_x^*, \vec{t}_y^*)$.



6.2.3. Beispiele

Beispiel 1: In AUBRY & GODRECHE (1986) (cf. 6.2.1.) wird eine Modifikation des eindimensionalen Falls angegeben, welche statt der Fibonacci-Folge eine quasiperiodische Funktion erzeugt. Diese divergiert logarithmisch gegenüber jedem mittleren Gitter, und die Fibonacci-Folge ist ein Grenzfall von ihr.

Beispiel 2: Im E^2 werden die Ecken einer Penrose-Tessellation – diese sind also die Knoten des Quasigitters – durch eine quasiperiodische Ortsfunktion beschrieben. – Dasselbe gilt im E^3 für die Mackay-Tessellationen. – Die Knotenabstände von Penrose- wie Mackay-Gittern sind – in jeder der «ausgezeichneten» Richtungen – durch Fibonacci-Folgen festgelegt. Es ist daher interessant, daß – siehe oben – der eindimensionale Fall nahezu periodisch ist, die zwei- und mehrdimensionalen Fälle jedoch quasiperiodisch: Die quantitative Überlagerung erzeugt eine neue Qualität!

6.2.4. Diffraktogramme der nahezu periodischen und quasiperiodischen Gitter

Die Beugungsmuster dieser Gittertypen weichen einerseits auf charakteristische Weise von jenen der periodischen Gitter ab, gleichen einander andererseits völlig! Die Fouriertransformation zieht also die Grenze zwischen «normal» («klassische» Gitter und «gestörte klassische» Gitter) und «abartig» (Quasigitter) nicht dort, wo es die Kristallographen wohl gern gesehen hätten.

Diese Diffraktogramme stehen in der Art logischerweise zwischen denen der klassischen Kategorien «kristallisiert» und «amorph». Im Idealfall (Atome punktförmig) bestehen sie zwar aus δ -Peaks, aber diese liegen dicht im reziproken Raum⁹. Die für den Nicht-Mathematiker merkwürdigste Eigenschaft schließlich ist diese: Wähle ich für die Intensität einen – beliebigen – Schwellenwert, so gibt es nur abzählbar viele δ -Peaks, die ihn übertreffen, und diese sind diskret verteilt (Abb. 26 b) – Eigenschaften wie bei einem normalen Gitter! Die üblichen aperiodischen Gitter weisen dazu auch noch einen anfänglich raschen Intensitätsabfall auf, das heißt, nur wenige Peaks sind stark und heben sich so deutlich von einem dichten, schwachen «Grund» ab.

Diese Beugungseigenschaften von Quasigittern kann man *anschaulich* so begreifen: Betrachtet man z. B. die Penrose-Tessellation der Abb. 24, so sieht man, daß die Kachelränder nur in bestimmten Richtungen liegen, und zwar in genau fünf. Und geht man senkrecht zu einer dieser Richtungen durch die

⁹ Es besteht somit eine gewisse Analogie: periodische Gitter/aperiodische Gitter/amorph *versus* ganze Zahlen/rationale Zahlen/reelle Zahlen.

Belegung, so trifft man die Kachelgrenzen nur in einer bestimmten Auswahl von Abständen an. Diese Umstände genügen, ein «gutes» Diffraktogramm zu erzeugen, das selbstverständlich die fünf ausgezeichneten und unter sich gleichwertigen Richtungen zeigt. Allgemein: *Das Diffraktogramm eines aperiodischen Gitters besitzt die Symmetrien, welche im Quasikristall (lokal) vorkommen!* Mit anderen Worten: Die Fouriertransformation unterscheidet (leider) nicht grundsätzlich zwischen lokalen und globalen Symmetrieachsen. Zeigt also das Diffraktogramm eines Kristalls «verbotene» Symmetrieelemente, so ist ohne weiteres klar, daß aperiodischer Bau vorliegen muß. Umgekehrt aber kann Aperiodizität vorliegen, ohne daß sie sich derart verhält: Ein Kristall, dessen Basis wie in Abb. 12 aufgebaut wäre (der Bau senkrecht dazu dürfte translatorisch sein), ergäbe im Diffraktogramm eine gewöhnliche Tetragyre senkrecht zu dieser Basis!

6.3. Einige Probleme

6.3.1. Tessellationen versus Quasigitter

Ein weiteres rein mathematisches Problem betrifft den Zusammenhang zwischen Belegungen und Quasigittern. Es ist nämlich keinesfalls so, daß die Eckpunkte einer im E^n nichttranslatorischen (aperiodischen) Belegung notwendigerweise ein Quasigitter des E^n (im oben definierten Sinn) bilden müßten! Wir sahen, daß dies für Penrose- und Mackay-Belegungen der Fall ist. Tatsächlich muß für jede vorgegebene Belegung die Fouriertransformierte ihrer Ecken berechnet werden, um festzustellen, ob das Diffraktogramm die entsprechende Darstellung besitzt (wie Abb. 26 b). Umgekehrt wurden, wie schon in 5.1. erwähnt, Fälle aufgezeigt, in denen das Diffraktogramm vom Typ der Quasigitter ist, die Gitterknoten jedoch nicht als Ecken einer (aperiodischen) Belegung interpretiert werden können.

Diese Feststellungen zeigen, daß die Beziehungen zwischen Belegungen und Quasigittern viel komplexer sind, als man zunächst anzunehmen geneigt war – und beide Objektkategorien darüber hinaus ein Eigenleben führen, das noch wenig erforscht ist.

6.3.2. Dekoration und Kräfte

Zum Schluß sei kurz auf einige physikalische Probleme hingewiesen – hier erst beginnt die eigentliche Arbeit der Kristallographie und der Festkörperphysik!

Ein realer Quasikristall erfordert eine *Dekoration* der zugrundegelegten aperiodischen T , d.h. eine Besetzung der Zellen mit Atomen oder Atomgruppen. Wie kann diese Dekoration aus dem Diffraktogramm ermittelt werden?

Welche *Kräfte* bewirken, daß die Zellen über große Distanzen immer wenige gleiche relative Lagen einnehmen, d.h. eine Art Fernordnung besteht? Genügt dafür eine sogenannte BOO (bond orientational order)?

Wie verhindert der wachsende (Quasi-)Kristall, daß beim Weiterbau *unmögliche Situationen* auftreten? Nach Ansicht der meisten Forscher kann er dies tatsächlich nicht verhindern, da rein lokale Passungsregeln dafür nicht genügen; somit wäre kein Quasikristall ohne Baufehler möglich. Ich vermute indes, daß globale quantenmechanische Effekte¹⁰ *doch* eine Art Fernkontrolle bewirken könnten. In diesem Zusammenhang sind auch die als *Polytypie* bekannten *Stapelordnungen überlanger Reichweite* auffällig, bei denen ebenfalls irgendeine Art von Fernwirkung erforderlich scheint.

7. Zusammenfassung – Résumé – Summary

Zusammenfassung

Bis vor kurzem fügten sich alle bekannten Kristalle in die klassische Theorie der translativen Raumordnung. Seit dem Jahre 1984 jedoch zwang die Entdeckung von Kristallen, deren Röntgenbeugungsbilder «verbotene» Symmetrien zeigen, zur Erweiterung dieser Theorie: Den Kristallographen wurde bewußt, daß neben dem «klassischen» Kristall Raumordnungen möglich sind, die ebenfalls «gute» Röntgenbeugung erzeugen, obwohl sie «aperiodisch» sind. In der mathematisch-physikalischen Theorie war dies seit Jahrzehnten bekannt, und die Geometrie befaßte sich seit einiger Zeit mit «aperiodischen Belegungen».

Der Artikel erläutert, meistens an anschaulichen zweidimensionalen Beispielen:

- grundlegende geometrische Eigenschaften translativer und nichttranslativer Belegungen des Raumes, wobei die sog. Penrose-Belegungen besonders berücksichtigt werden;
- die wichtigsten Erzeugungsmethoden für nichttranslative Belegungen;
- die Zusammenhänge zwischen Raumordnung und Beugungsbildern.

Résumé

Pendant longtemps tous les cristaux connus se conformaient à la théorie classique: son concept central est l'ordre translatif dans l'espace. Depuis 1984 cependant la découverte de cristaux dont les images de diffraction aux rayons X montrent des symétries «interdites» exigea une extension de cette théorie: Les cristallographes devenaient conscients du fait qu'il existe, outre celui des cristaux «classiques», des types d'ordre spatial qui donnent lieu à de «bons» diffractogrammes tout en étant

¹⁰ Man bedenke, daß die entdeckten Quasikristalle allesamt metallischen Bindungscharakter besitzen!

«apériodiques». En théorie physico-mathématique ceci fut connu depuis des décennies, et la géométrie s'occupait depuis quelque temps déjà, de «pavages apériodiques».

L'article explique, en utilisant autant que possible des exemples en deux dimensions:

- des propriétés géométriques fondamentales de pavages translatifs et non-translatifs, en considérant particulièrement les pavages dits de Penrose;
- les méthodes les plus importantes qui permettent de construire des pavages non-translatifs;
- les relations entre l'ordre spatial et les diffractogrammes.

Summary

Until a short time ago all known crystals agreed with the classical theory of translative space order. Since 1984 however the discovery of crystals the X-ray diffractograms of which show «forbidden» symmetries forced an extension of this concept: Crystallographers became aware of the fact that, besides the «classical» crystal order, other types of space order despite of being «aperiodic» also generate «good» diffractograms. In physico-mathematical theory this was known since several decades, and geometry dealt with «aperiodic tilings» for some time already.

This paper explains, using as far as possible examples in two dimensions:

- fundamental geometrical properties of translative and non-translative tilings of the space, with particular consideration of the so-called Penrose tilings;
- the most important construction methods for non-translative tilings;
- the relationship between space order and diffractograms.

8. Literaturverzeichnis

- AUBRY, S., & GODRECHE, C.: Incommensurate structure with no average lattice: an example of one dimensional quasi-crystal. (*)
- DIVINCENZO, D.P.: Perfect and imperfect icosahedral solids and the projection method. (*)
- GRAMLICH, V.: Quasikristalle: zur Kristallographie von Strukturen mit «nichtkristallographischer» Symmetrie. Fortschr. Miner. 65, 161–171 (1987).
- GRÜNBAUM, B., & SHEPHARD, G.C.: Tilings and patterns. Freeman: New York 1987.
- KATZ, A., & DUNEAU, M.: Quasiperiodic structures obtained by the projection method. (*)
- KRAMER, P.: Nichtperiodische Kristalle mit fünfzähliger Symmetrie. Phys. Bl. 41, Nr. 4. Physik-Verlag GmbH: Weinheim 1985.
- LEVINE, D.: Local isomorphism, Landau theory, and matching rules in quasicrystals. (*)
- NICKEL, E., & NICKEL, A.: Symmetrie: Schönheit und Notwendigkeit. Civitas 11, 330–339. Schweizerischer Studentenverband: Luzern 1989.

RIVIER, N.: A botanical quasicrystal. (*)

(*) Diese Artikel erschienen in:

International Workshop on Aperiodic Crystals. Journal de physique, tome 41, juillet 1986. Les éditions de physique: Les Ulis, France.