




Mathematik des Planeten Erde

Essays

Karlstorbahnhof Heidelberg | 5. Juli - 2. August 2015

www.mpe.hlff.de



Heidelberg Laureate Forum Foundation
Schloss-Wolfsbrunnenweg 33
69118 Heidelberg
06221/533-380
info@heidelberg-laureate-forum.org
www.heidelberg-laureate-forum.org

Inhalt

Essays

Kristalle und Mathematik <i>von Gert-Martin Greuel</i>	4
Die Entwicklung der Gletscher <i>von Guillaume Jouvét</i>	24
Katzengold <i>von Stephan Klaus und Bianca Violet</i>	36

Veröffentlicht von Heidelberg Laureate Forum Foundation (HLFF)
in Zusammenarbeit mit Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach (MFO)
Layout: Stephan Hölz, HLFF
Erdkugel: Romolo Tavani - Fotolia.com
Heidelberg, Juli 2015

Kristalle und Mathematik

von Gert-Martin Greuel

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

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

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

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

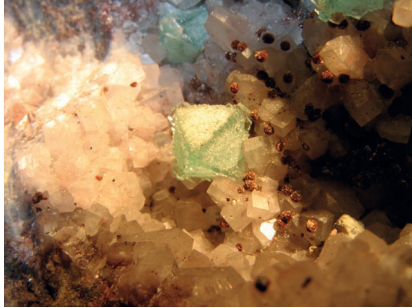


Fig.1 Fluoritoktaeder auf Calcit



Fig.2 Flussspatkristall

1. Anfänge der Kristallforschung

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

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

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

2. Kristallformen und Polyeder

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

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



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

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

Für die Kristallographie noch wichtiger sind die catalanischen oder dual-archimedischen Körper, die aus nur einer Flächenart bestehen. Sie haben aber verschiedene Eckenarten, denn die Dualität besagt, dass an einer Ecke eines archimedischen Körpers die Fläche eines catalanischen Körpers entsteht. Z. B. ist das Rhombendodekaeder ein catalanischer Körper, der dual zum Kubooktaeder ist. Das Rhombododekaeder ist eine typische Kristallform und kommt in der Natur als Kristallform bei Mineralien der Granatgruppe vor. Weitere häufige Kristallformen sind Prismen, die aus zwei parallelen, deckungsgleichen, regulären Vielecken und den sie verbindenden Mantelflächen bestehen.

3. Kristalle und griechische Mathematik

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

Hierin ist die griechische Philosophie in mancher Beziehung ähnlich zu Teilen der modernen, insbesondere der reinen Mathematik, die zweckfrei nach

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

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

4. Kepler und die Schneeflocke

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

Die Beziehung von Kepler zu Kristallen finden wir in seiner kleinen Abhandlung zur Symmetrie von Schneeflocken ([4]). Er entdeckte, dass natürliche

Kräfte die Entstehung der einzigartigen Geometrie und die sechszählige Symmetrie der Schneeflocke bewirkten. Dabei konnte er zu seiner Zeit die genaue physikalische Begründung noch nicht geben. Nämlich, dass die Komponenten der Materie, also die Atome und Moleküle, stets so angeordnet sind, dass sie einen Zustand minimaler Energie realisieren. Dies führt bei Kristallen, aber auch bei der Schneeflocke zu wunderschönen symmetrischen Formen.



Fig.4 Schneeflocke

Keplers Versuch die sechseckige Form der Schneekristalle durch einen Aufbau aus kleinsten Teilchen minimalen Abstands zu erklären, führte ihn in derselben Arbeit dazu, die maximale Dichte von Kreis- und Kugelanordnungen zu studieren. Dabei vermutete er, dass die dichteste Kugelpackung, die Packung „auf Lücke“ sei, also diejenige, die wir bei einer Orangenpyramide auf dem Markt sehen. Diese Keplersche Vermutung wurde erst fast 400 Jahre später, nämlich im Jahr 2003, von dem amerikanischen Mathematiker Thomas Hales bewiesen, z. T. mit aufwändigen Computerprogrammen.

5. Beginn der Kristallographie

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

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

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

6. Moderne Kristallographie

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

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

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

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

Aus neuester Zeit sind besonders zwei Entdeckungen hervorzuheben. Das Graphen, als erstes Beispiel einer neuen Klasse von zweidimensionalen kristallinen Materialien mit einzigartigen elektronischen und mechanischen Eigenschaften (Nobelpreis für Physik an Andre Geim und Konstantin Novoselov 2010) sowie die Quasikristalle (Nobelpreis für Chemie an Daniel Shechtman 2011). Insbesondere die Entdeckung der Quasikristalle 1982 kam für die Kristallographie völlig überraschend. Es handelte sich um Materialien, deren Beugungsbilder wie bei gewöhnlichen Kristallen scharfe Punktmuster zeigten (amorphe Substanzen produzieren dagegen verwaschene Beugungsbilder), jedoch mit einer 5-zähligen Symmetrie, was aber bei der Gitterstruktur eines Kristalls nicht sein kann (s. Abschnitt 9 und 10).

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

7. Kristallgitter

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

Natürlich kommen ideale Kristalle nicht in der Wirklichkeit vor. Ein realer Kristall ist immer endlich ausgedehnt und hat Defekte, also Abweichungen von der Regelmäßigkeit. Trotzdem genügt es für viele Zwecke, insbesondere für die Klassifikation von Kristallen, ideale Kristalle zu betrachten. Jede Translation im dreidimensionalen euklidischen Raum wird durch einen Translationsvektor beschrieben, der sich als Kombination von Vielfachen dreier (einmal gewählter) unabhängiger Basisvektoren darstellen lässt. Die Menge aller Translationen, die die Grundeinheit eines Kristalls in andere Grundeinheiten verschieben und den (idealen) Kristall in sich überführen, besitzen drei unabhängige Basisvektoren, so dass sich jede dieser Translationen als Kombination von ganzzahligen Vielfachen der Basisvektoren darstellen lässt. Alle Translationsvektoren (bzw. deren Endpunkte), die den Kristall in sich überführen, bilden eine dreidimensionales Gitter im Raum, das Kristallgitter oder Raumgitter des Kristalls genannt wird.

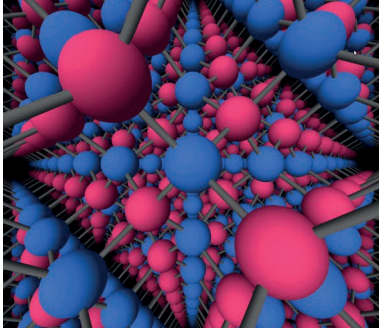


Fig.5 Gitterstruktur des Diamanten

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

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

Auguste Bravais (1811-1863) klassifizierte um 1843 die verschiedenen möglichen Kristallgitter, indem er sowohl primitive wie dem Kristall angepasste nicht-primitive Elementarzellen angab. Sie werden nach ihm heute Bra-

vais-Gitter genannt. In der Dimension drei gibt es genau 14 Bravais-Gitter, also genau 14 verschiedene Translationsgruppen aller möglichen idealen Kristalle.

8. Kristallographische Gruppen

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

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

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

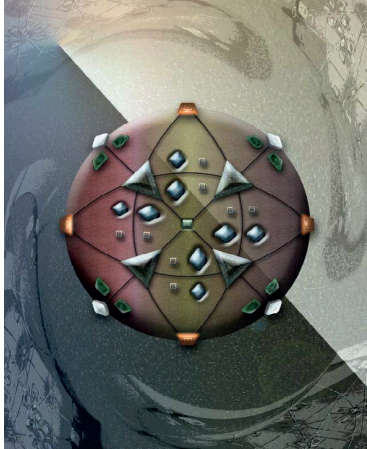


Fig.6 Beispiel einer Punktgruppe

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

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

Verschiedene Punktgruppen werden zu einem Kristallsystem zusammengefasst. Man unterscheidet heute die sieben Kristallsysteme triklin, monoklin, orthorhombisch, tetragonal, trigonal, hexagonal und kubisch. Die Kristallsysteme wurden von Christian Samuel Weiß (1780–1856) im Zusammenhang

mit der Übersetzung der Lehrbücher Haüys eingeführt. Sie beruhten auf der Analyse der Anordnung besonders auffälliger Richtungen der Kristalle, der Achsen, „um die herum alles gleichmäßig verteilt ist“. Die Kristallsysteme bilden somit eine symmetriebezogenen Klassifikation der Kristalle mit Hilfe eines kristallographischen Achsenkreuzes. Mit Hilfe der Achsen charakterisierte Weiß erstmals die Lage aller Kristallflächen bzw. Ebenen im Kristallgitter eindeutig durch die Verhältnisse ihrer Achsenabschnitte, die Weißschen Indizes. Heute werden vor allem die kleinsten ganzzahligen gemeinsamen Vielfachen der reziproken Achsenabschnitte, die Millerschen Indizes, verwendet.

9. Mathematische Gruppen

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

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

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

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

10. Die Unmöglichkeit des Ikosaeders

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

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

Wir zeigen jetzt, dass ein Kristall keine solche Drehung der Ordnung fünf besitzen kann. Betrachten wir dazu die Drehung eines Kristalls um eine beliebige Achse. Diese hat eine endliche Ordnung, sagen wir n , und überführt eine

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

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

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

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

11. Quasikristalle

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

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

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

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

Die Penrose-Parkettierung hat viele interessante mathematische Eigenschaften, z. B. kommt ein beliebiger Ausschnitt des Parketts beliebig oft vor (einerlei wie groß er ist), kann sich aber nicht periodisch wiederholen. Eine

verständliche Beschreibung vieler mathematisch interessanter Eigenschaften von Quasikristallen und von Penrose-Parkettierungen geben die Mathematiker Baake, Grimm und Moody in [9].

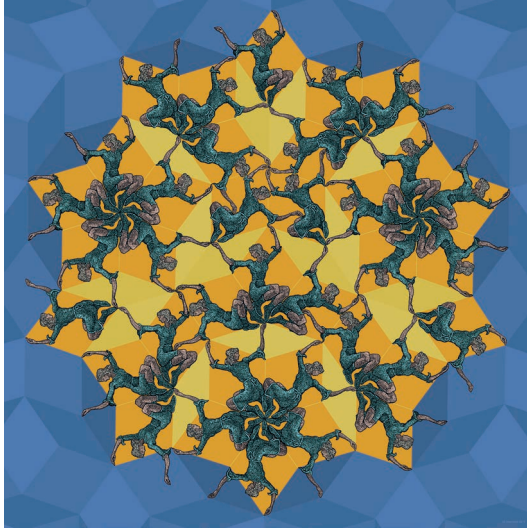


Fig.7 Quasiperiodische rhombische Penrose-Parkettierung

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

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

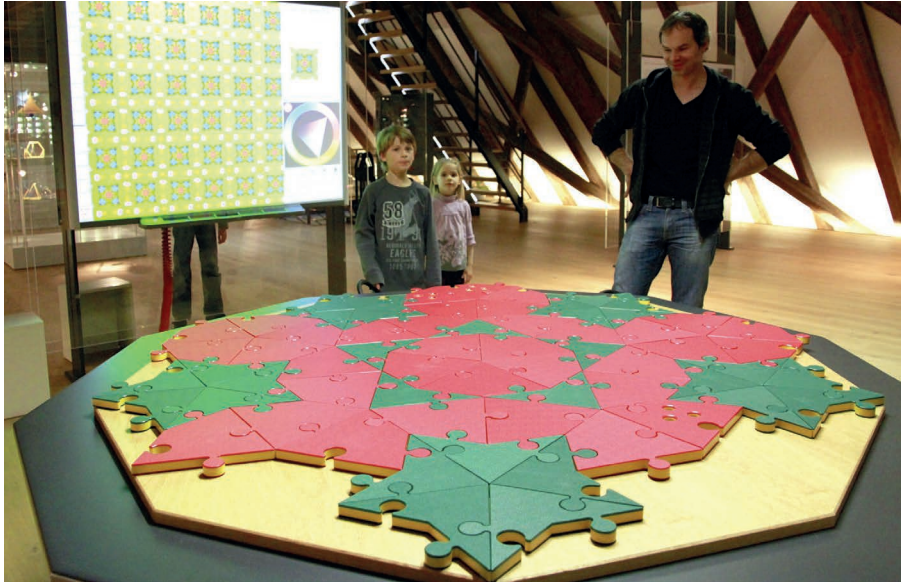


Fig.8 Puzzle einer Penrose Pflasterung im MiMa

Dank und Referenzen

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

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

- [1] Earle R. Caley, John F. C. Richards: Theophrastus: On Stones. Kommentierte Ausgabe mit griechischem Text und englischer Übersetzung, Ohio State University 1956. http://www.farlang.com/gemstones/theophrastus-on-stones/page_001
- [2] August Nies: Zur Mineralogie des Plinius. Mainz 1884. Buchdruckerei von H. Prickarts. Volltext: <https://archive.org/details/zurmineralogied-01niesgoog>
- [3] Egbert Brieskorn: Lineare Algebra, III. 13.7, Reguläre Polyeder, Einleitung Manuskript (demnächst auf imaginary.org). Die Seitenzahlen beziehen sich auf das unveröffentlichte Typoskript.
- [4] Johannes Kepler: *Strena seu de nive sexangula* (Über die sechseckige Schneeflocke), 1611. Keplers Gesammelte Werke, (Hrsg. M. Caspar, F. Hammer) Bd. IV (1941). Deutsche Übersetzung: D. Goetz, Ostwalds Klassiker Bd. 273, Leipzig 1987. Text in Latin and English by Colin Hardie, Oxford, Clarendon P., 1966.
- [5] Wikipedia Artikel: <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristall> und <http://de.wikipedia.org/wiki/Kristallmorphologie>
- [6] Kristallographie, na klar! Deutsche Übersetzung von „Crystallography matters!“ by UNESCO 2013. <http://dgk-home.de/veroeffentlichungen/kristallographie-na-klar/>
- [7] Kristallographie in Deutschland, Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e.V. www.kristall.ethz.ch/DGK/ und www.dgkristall.de
- [8] Gerhard Trageser: Kristalle mit unmöglicher Symmetrie, [Spektrum.de](http://www.spektrum.de). <http://www.spektrum.de/alias/nobelpreis-fuer-chemie/kristalle-mit-unmoeglicher-symmetrie/1129068>
- [9] Michael Baake, Uwe Grimm und Robert V. Moody: Die verborgene Ordnung der Quasikristalle, *Spektrum der Wissenschaft* 2/2002, Seite 64.
- [10] Vinzent Schönfelder: Das Geheimnis der Girih, [Spektrum.de](http://www.spektrum.de). <http://www.spektrum.de/alias/angewandte-mathematik/das-geheimnis-der-girih/866284>

Bildnachweise

Fig.1: Fluoritoktaeder auf Calcit, Foto: Werner Günter, Oberwolfach

Fig.2: Flussspatkristall - Grube Clara, Foto: Werner Günter, Oberwolfach

Fig.3: Platonische Körper, Foto: Zumthie at de.wikipedia, Quelle: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Platonische_Koerper_im_Bagno.jpg

Fig.4: Schneeflocke, Foto: Jochen Burger, Quelle: <http://www.natur-portrait.de/foto-26022-frau-holles-erster-gruss.html>

Fig.5: Gitterstruktur des Diamanten, Bildschirmphoto des Programms Crystal Flight, Quelle: <http://imaginary.org/program/crystal-flight>

Fig.6: Beispiel einer Punktgruppe, Autor: Jean Constant, Quelle: <http://imaginary.org/gallery/jean-constant-crystallographic-points-groups>

Fig.7: Quasiperiodische rhombische Penrose-Pflasterung, Autor: Uli Gaenshirt, Quelle: <http://imaginary.org/de/gallery/quasicrystalline-wickerwork>

Fig.8: Puzzle einer Penrose-Parkettierung, Mineralien- und Mathematikmuseum Oberwolfach (MiMa), Quelle: <http://mima.museum/mathematik-penrose.php>

Artikel zuvor veröffentlicht als:

Gert-Martin Greuel: Crystals and Mathematics. In: A Focus on Crystallography, FIZ Karlsruhe (2014), 37-43. (englisch)

Gert-Martin Greuel: Kristalle und Mathematik. Mitt. Dtsch. Math.-Ver. 22, No. 4 (2014), 212-217. (gekürzt)

Die Entwicklung von Gletschern



von Guillaume Jouvét

Die Entwicklung von Gletschern – Modellierung und Vorhersage

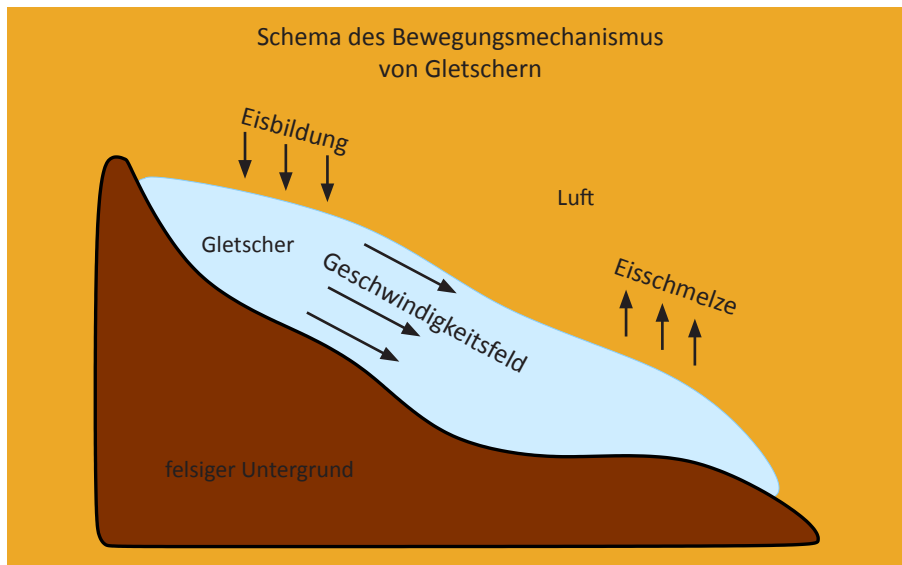
Seit mehr als einem Jahrhundert gehen die alpinen Gletscher zurück. Diese Tendenz wird sich bei zunehmender Klimaerwärmung unvermeidbar verstärken. Um die künftige Entwicklung der Gletscher vorherzusagen, benötigen wir ein mathematisches Modell, das Hydrologie, Klimatologie und Mechanik verbindet.

Die Gletscherbewegung resultiert aus der Kombination mehrerer Phänomene, wie das Schaubild rechts zeigt. Einerseits bauen Schneefall und Niederschlag Eis in den höheren Regionen auf (Zonen der Eisbildung) und verringern es in den niedrigeren Regionen (Schmelzzonen). Andererseits verschiebt und

verändert sich das Eis wie eine Flüssigkeit unter dem Einfluss der Erdanziehungskraft. Darüber hinaus wird die Geschwindigkeit der Eisteilchen durch die Verlagerung des Eises auf dem felsigen Untergrund beschleunigt. Die Bewegung des Eises wird daher gleichzeitig von den Gesetzen der Strömungsmechanik von Flüssigkeiten wie auch derer von Feststoffen beeinflusst.

Das Eis ist eine Flüssigkeit, die fließt

Obwohl die Bewegung von Gletschern seit dem 18. Jahrhundert bekannt ist, wurde erst im 20. Jahrhundert eingeräumt, dass das Fließverhalten des Eises dem einer viskosen Flüssigkeit entspricht. In den 50er Jahren führte der Glaziologe (Gletscherforscher) J. W. Glen Experimente mit Eisblöcken durch, um deren Deformierung unter dem Einfluss von Zugspannung, Komprimierung und Scherbelastung zu bestimmen. Das Urteil fiel: Das Verhältnis zwischen



Deformierung und Belastung (später das Glensche Fließgesetz genannt) ist nicht linear, was aus dem Eis eine Flüssigkeit macht, die als „nicht-Newton-sches Fluid“ bezeichnet wird, im Gegensatz zu Wasser. Als Flüssigkeit unterscheiden sich Eis und Wasser auch durch ihre Viskosität. Tatsächlich ist die Viskosität von Eis (ca. das 1016-fache des Wassers) derart, dass die Auswirkungen von Beschleunigung zu vernachlässigen sind. Demnach, im Gegensatz zu Wasser, hängt die Geschwindigkeit der Eisteilchen zu einem gegebenen Moment nur von der Geometrie des Gletschers (Dicke und Gefälle des Geländes) ab und nicht von der Geschwindigkeit eines Augenblicks in der Vergangenheit. Um das Glensche Fließgesetz zu vervollständigen, wird eine Beziehung zwischen Viskosität und Temperatur hergestellt. Tatsächlich deformiert sich ein kaltes Eis nicht so leicht wie ein Eis, das sich dem Schmelzpunkt nähert. Die Gleichungen der Eismechanik lassen sich in dem Stokes-Problem zusammenfassen:

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\sigma) &= \rho g \\ \varepsilon(u) &= A(T) \left((\sigma'_{II})^m - 1 + \sigma_0^m - 1 \right) \sigma' \\ \operatorname{div}(u) &= 0 \end{aligned}$$

Die oben genannten Gleichungen¹ drücken jeweils die Erhaltung der Anzahl der Bewegungen, das Glensche Fließgesetz und die Inkompressibilität des Eises aus. Der Vollständigkeit halber benötigt dieses Problem eine Bedingung an der Grenze des Gletscherbereichs, die die Verlagerung zwischen Eis und Fels beschreibt.

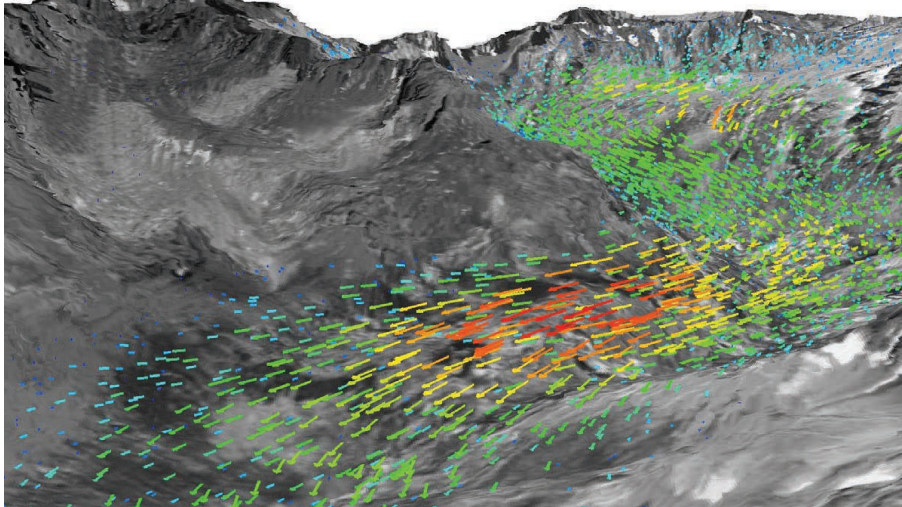
¹ u ist die Geschwindigkeit des Eises, ρ ist die Dichte des Eises, g ist die Konstante der Erdanziehungskraft, A , σ und m sind die Parameter der viskosen Eigenschaften des Eises und ε ist der symmetrische Teil des Gradienten von u .

Das Eis ist ein Feststoff, der rutscht

Die viskose Verformung des Eises erklärt nicht an sich alleine die Bewegung des Gletschers. In der Tat kann das Eis auch über den felsigen Untergrund rutschen, wenn vorhandenes Schmelzwasser als Gleitmittel dient. Dieses bildet sich vornehmlich an der Gletscherzunge, wo die Temperatur des Eises gegen Null geht, während in den höher gelegenen Regionen die Temperaturen ausreichend kalt sind, damit das Eis am Felsen „klebt“. Entgegen der Deformation des Eises, ist die Verlagerung (das Abrutschen) noch wenig bekannt und daher schwerer im Modell darzustellen. Tatsächlich hängt das Abrutschen direkt mit dem Wasserstand zusammen (ein Gletscher speichert Wasser wie ein Schwamm), der im Laufe eines Tages erheblich variieren kann. Darüber hinaus hängt das Abrutschen auch von der Rauigkeit des Geländes ab, das oft unbekannt ist. Des Weiteren ist es sehr schwierig an den Grund (Boden) des Gletschers heranzukommen, um Messungen durchzuführen. Entgegen dieser Unsicherheiten gibt es heute empirische Bewegungsmodelle, die recht gut an die Realität herankommen.

Die Rolle der Mathematiker

Es ist leider unmöglich, das Stokes-Problem aufgrund der Komplexität der Gleichungen und der Geometrien exakt zu lösen. Daher nimmt man in der Praxis eine Approximation des Problems mithilfe der „Diskretisierung“ von Raum und Zeit, was bedeutet, dass man versucht, der Lösung an bestimmten Punkten zu bestimmten Momenten näher zu kommen. Schließlich bedeutet die Lösung des diskretisierten Stokes-Problems die Lösung einer Folge von linearen Gleichungssystemen, was eine Anzahl bekannter Algorithmen sehr gut erledigen kann. Um einen Gletscher zu simulieren, muss man in der Lage sein, eine Reihe von Gleichungssystemen zu lösen, deren Größe leicht eine Million Unbekannte enthalten kann, was selbst für die neuesten Computer eine Rechenarbeit von mehreren Tagen bedeutet. Die Mathematiker können auf diverse Strategien zugreifen, diese Rechenzeit zu verkürzen. Eine



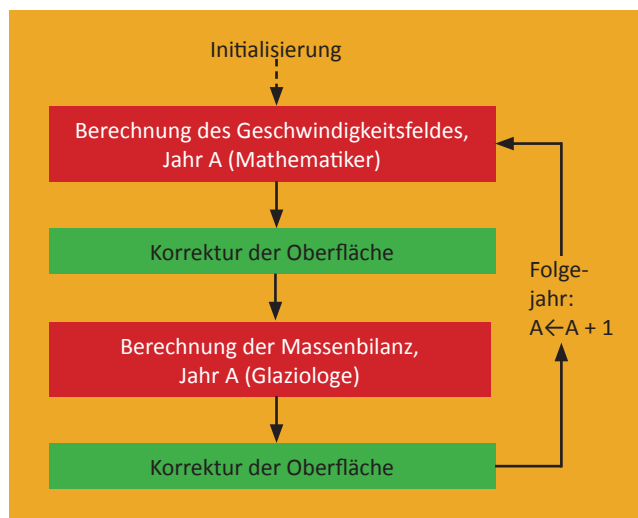
Berechnetes Geschwindigkeitsfeld des Rhône-Gletschers

dieser Strategien besteht darin, ihre Lösungsalgorithmen zu parallelisieren, das heißt, das Hauptproblem wird wirkungsvoll in Teilprobleme zerlegt, die individuell von verschiedenen Prozessoren behandelt werden können. Eine weitere wesentliche Rolle der Mathematiker ist es, sich der Konvergenz der angenäherten Lösung gegenüber der exakten Lösung zu vergewissern. In der Tat ist zu erwarten, dass die Lösung, die man durch unsere Berechnungen findet, der wahren Lösung viel näher kommt, wenn man die Anzahl der Diskretisierungspunkte erhöht.

Die Kombination der Berechnungen von Mathematikern und Glaziologen

Wenn die Berechnung der Eisbewegungen auf die Mathematiker zurückgeht, so ist die Auswertung der Auswirkungen von Schneefall und Schneeschmelze auf den Gletscher die Arbeit der Glaziologen. Diese beiden Wissenschaften

müssen also ihre Berechnungen miteinander verknüpfen, um die Entwicklung eines Gletschers über einen gewissen Zeitraum zu simulieren. Nehmen wir also an, die Oberfläche eines Gletschers wäre in einem bestimmten Jahr A bekannt. Zuerst berechnen die Mathematiker das Geschwindigkeitsfeld des Eises im Jahr A mithilfe der Stokes-Gleichungen und modifizieren als Folge die Oberfläche des Gletschers. Im Anschluss berechnen die Glaziologen an verschiedenen Punkten der Oberfläche die kumulierte Differenz zwischen Eisaufbau und Schmelze während des Jahres A und korrigieren als Folge die Oberfläche des Gletschers. Abschließend resultiert daraus eine Approximation (Annäherung) der Gletscheroberfläche für das Folgejahr A+1. Dieser Prozess wird so oft wiederholt, wie es zu simulierende Jahre gibt, wie das Schema unten zusammenfasst. Diese Methode erlaubt die Simulation eines Gletschers sowohl für einen vergangenen wie für einen künftigen Zeitraum.

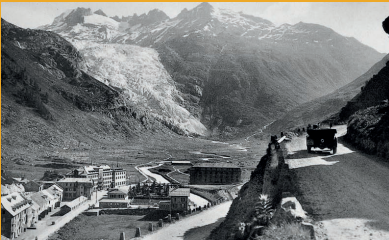




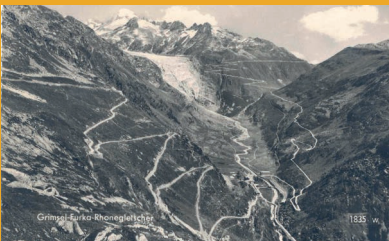
1874



1900



1932



1960

Fotos des Rhône-Gletschers (links)
und Simulation (rechts)

Simulation der Vergangenheit zur Validierung des Modells²

Unter Verwendung der Temperatur- und Niederschlagsdaten wurde der Rhône-Gletscher (Schweiz) von 1874 bis 2008 simuliert. Wir können das Resultat der Simulation in der Abbildung links mit den Archivbildern vergleichen. Wir stellen fest, dass die Resultate der Simulation der Realität entsprechen, was das Modell validiert.

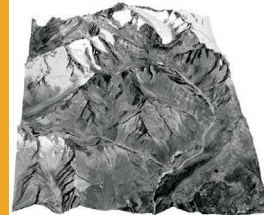
Simulation der Zukunft anhand der klimatischen Szenarien²

Selbstverständlich gibt es keine Klimadaten für die Zukunft. Folglich ziehen wir mehrere Klimaszenarien für das 21. Jahrhundert in Betracht. Die Abbildung rechts zeigt das Resultat der Simulation des Aletsch-Gletschers (Schweiz) im Jahr 2100 für die drei ausgewählten Szenarien. Szenario 1 basiert auf dem Temperaturanstieg von ca. 4 °C im Jahr 2100. Hierbei handelt sich um das zurzeit realistischste Szenario.

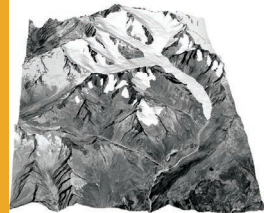
² Die Gletschersimulationen (außer denen in der Abbildung auf der letzten Seite) stammen aus den Arbeiten des Autors mit M. Huss (Universität Fribourg), J. Rappaz (EPFL), M. Picasso (EPFL), H. Blatter (ETHZ) und M. Funk (ETHZ).



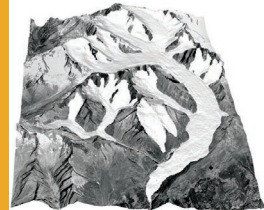
1999



2100 (Szenario 1)



2100 (Szenario 2)



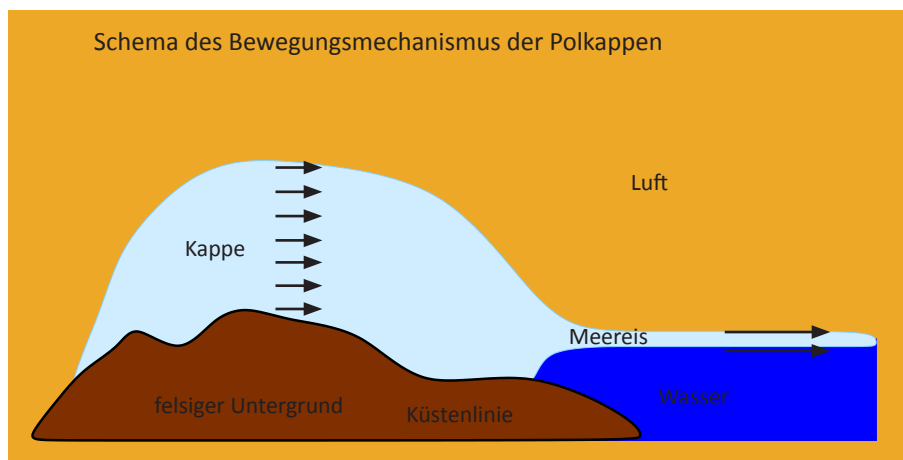
2100 (Szenario 3)

Aletsch-Gletscher 1999
und 2100 gemäß der klimatischen Szenarien 1, 2 und 3

Nach diesem Szenario würde der Gletscher bis zum Ende des Jahrhunderts quasi völlig verschwinden. Szenario 2 basiert auf dem Klima der letzten 20 Jahre mit einem Temperaturanstieg von ungefähr 0,5 °C. Nach diesem Szenario geht der Gletscher um mehr als 5 km zurück. Es handelt sich um den zu erwartenden Rückgang, wenn das Klima stagniert (keine weitere Temperaturerhöhung). Szenario 3 schließlich betrachtet eine unwahrscheinliche neue künftige Eiszeit. Gemäß diesem Szenario würde die Gletscherzunge erheblich wachsen und etwa den Zustand erreichen, wie er während der kleinen Eiszeit beobachtet wurde.

Lässt sich das Modell auf die Polkappen anwenden?

Ob im Gebirge oder an den Polen, das Eis unterliegt denselben Gesetzen der Mechanik. Theoretisch kann das Modell also verwendet werden, um die Dynamik der Polkappen von Grönland und der Antarktis zu simulieren. In der Praxis sind diese Kappen aber dermaßen groß (mehrere Tausend Kilometer lang), dass es einer beträchtlichen Anzahl an Punkten bedarf, um das Sto-

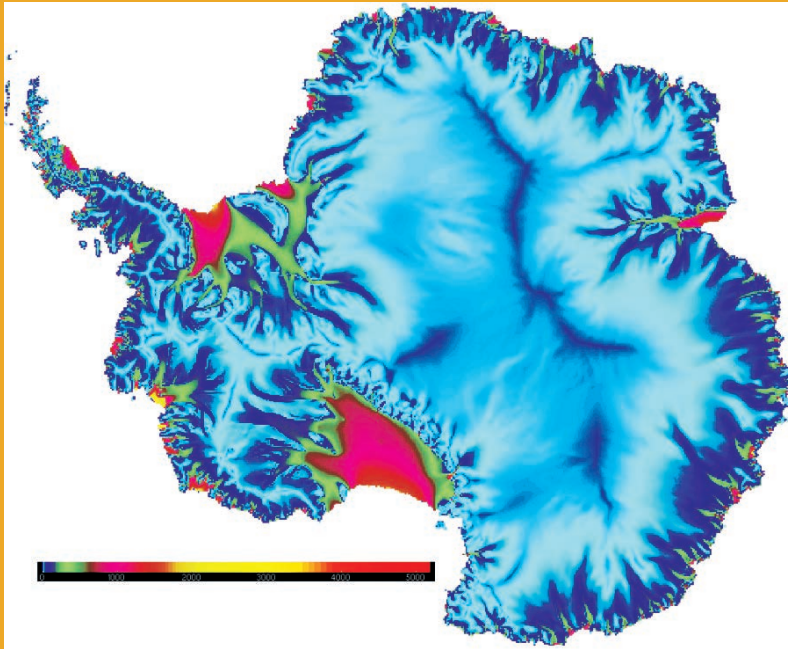


kes-Problem zu lösen. Folglich ist die Methode sehr kostspielig in Bezug auf die Berechnungszeit. Hingegen kann man beobachten, dass es sich bei den Polkappen um relativ „dünne“ Objekte handelt, die nur wenige Kilometer an Dicke messen. Daher kann man die vertikalen Geschwindigkeitsvariationen auf globaler Ebene vernachlässigen. Dies bedeutet, dass es nicht notwendig ist, ein so präzises (und kostspieliges) 3D-Modell wie das von Stokes zu verwenden. Stattdessen verwendet man ein vereinfachtes 2D-Modell, das man erhält, wenn man die Durchschnittsgeschwindigkeiten entlang der vertikalen Achse nimmt. Diese Vorgehensweise ist unmittelbar durch Ozeanmodelle „mit geringer Tiefe“ inspiriert, die man ebenfalls als „dünne“ Objekte betrachtet.

Eine weitere Besonderheit der Polkappen beruht auf der Tatsache, dass ein Teil davon auf dem Meer schwimmt, wie die Abbildung links zeigt. Aus mechanischer Sicht „reiben“ die schwimmenden Teile, die allgemein als Meereis bezeichnet werden, nicht gegen den felsigen Untergrund, wie es bei dem „irdischen“ Teil der Fall ist. Dieser Unterschied auf dem Grund der Kappe erzeugt eine sehr große Geschwindigkeitssteigerung des Eises bei nur wenigen Kilometern Küstenlinie. Diese Linie trennt den schwimmenden vom irdischen Teil. Die Abbildung auf der nächsten Seite zeigt sehr deutlich die beiden unterschiedlichen Regionen: sehr schnell bei den Teilen mit Meereis (rot) und an den anderen Stellen sehr langsam (blau). Um diese abrupten Beschleunigungen präzise zu reproduzieren und das vereinfachte Stokes-Problem zu lösen, muss man das Gitternetz direkt an der Küstenlinie verdichten und darauf verzichten, dass es sich andernorts ausdehnt, um das Problem auf eine vernünftige Größe zu bringen. Diese Techniken, auch „Verminderung des Gitternetzes“ genannt, stellen das Objekt intensiver Forschung dar, um die Modelle immer präziser zu machen, ohne dass sie zu kostspielig werden, was die Berechnungszeit angeht.

Was sind die Herausforderungen in der Antarktis?

Dank Radardaten wissen wir, dass das Felsbett der westlichen Partie der Antarktis-Kappe zum größten Teil unter dem Meeresspiegel liegt. Dieser Teil ist heute ausreichend schwer, um auf dem Großteil des Felsbetts zu bleiben (Abb. rechte Seite). Wohingegen der schwimmende Teil nach dem Prinzip von Archimedes an Oberfläche zunimmt, wenn die Polkappe weiterhin schmilzt und sich somit verdünnt. Des Weiteren würde das Wasser unter dem Eis die Polschmelze verstärken. Der Wandel von irdischen in schwimmende Zonen (oder gleichermaßen der Rückgang der Küstenlinie) ist somit ein instabiler Mechanismus. Der vorhandene Druck auf den Felssockel an der Küstenlinie ist eine weitere, den Glaziologen gut bekannte Quelle für die Instabilität. Die Kumulierung dieser Mechanismen kann ebenfalls den bereits bestehenden Rückgang der Antarktis-Kappe begünstigen und ihn irreversibel machen. Wenn dies andauert, hätte der Rückgang erhebliche Konsequenzen für den Meeresspiegel. Tatsächlich würde die Schmelze des westlichen Teils den Meeresspiegel um ca. 5 Meter anheben, während die Schmelze der gesamten Antarktis-Kappe ihn um ungefähr 70 Meter anheben würde, wodurch zurzeit bewohnte Regionen überflutet und Ökosysteme radikal verändert würden sowie die betroffene Bevölkerung umgesiedelt werden müsste.



Modellierte Geschwindigkeiten der Antarktis-Kappe
(Grafik entnommen aus: PISM, <http://www.pism-docs.org>)

Der Film zu diesem Thema wurde von der UNESCO im Rahmen des Wettbewerbs für Museumsmodule MPE 2013 ausgezeichnet und steht zur Verfügung auf:

<http://imaginary.org/de/film/die-zukunft-der-gletscher>

Der Film ist außerdem in deutscher Sprache verfügbar auf:

<http://player.vimeo.com/video/63666773>

Aus dem Französischen übersetzt von Ruth Wetzlar.

Katzengold

von Stephan Klaus und Bianca Violet

Katzengold: Pyrit, Platon und ein Polynom

Zusammenfassung

Was haben das Mineral Pyrit, der fünfte platonische Körper (genannt Dodekaeder) und ein Polynom vom Grad 16 gemeinsam? Dieser Artikel untersucht diesen Zusammenhang mit Hilfe der kostenlosen Software SURFER der Plattform „IMAGINARY – open mathematics“. Daraus entstehen faszinierende Bilder, die zeigen, wie ein Würfel sich nacheinander in einen Dodekaeder, einen Rhombendodekaeder und einen Oktaeder verwandelt, alles dank einer einzigen Formel. Es wird ein Überblick über die Ideen und die Mathematik hinter diesen Visualisierungen gegeben. In der Tat kann jeder mit Hilfe der SURFER-Software diese Formen in Echtzeit erkunden und selbst verändern. Ferner haben die Autoren einen Kurzfilm erstellt, der die einfache geometrische Schönheit dieser Zusammenhänge vor Augen führt.

Goldener Glanz und griechische Geometer

Seinen Populärnamen *Katzengold* hat das Mineral Pyrit wegen seiner oberflächlichen und trügerischen Ähnlichkeit zu Gold erhalten. Pyrit ist ein Eisensulfid mit der chemischen Formel FeS_2 und das häufigste der Sulfidminerale [1]. Es sind 60 verschiedene Kristallstrukturen des Pyrits bekannt. Das würfelförmige Pyrit-Kristall (Abbildung 1.a) wird am häufigsten gebildet. Pyrit kann aber auch in Gestalt oktaedrischer (Abbildung 1.b) oder sogar dodekaedrischer Kristalle (Abbildung 1.c) vorkommen – das ist eine seltene Eigenschaft für Mineralien. Man beachte, dass die dodekaedrische Struktur zwei unterschiedliche Kantenlängen aufweist und daher irregulär ist. Kristalle können sich nicht aus absolut regulären Dodekaedern zusammensetzen [2]. Unter den anderen bekannten Kristallstrukturen finden sich Kombinationen

der drei erwähnten. Selten und üblicherweise nur in Verbindung mit anderen Strukturen kommen auch Trapezoeder oder Rhombendodekaeder als Formen des Pyrits vor.

(a) würfelförmig



(b) oktaedrisch



(c) dodekaedrisch



Abbildung 1: Pyritkristalle

Wir machen einen kurzen Exkurs zu den fünf platonischen Körpern; dem Tetraeder, dem Hexaeder (oder Würfel), dem Oktaeder und dem Ikosaeder (Abbildung 2).

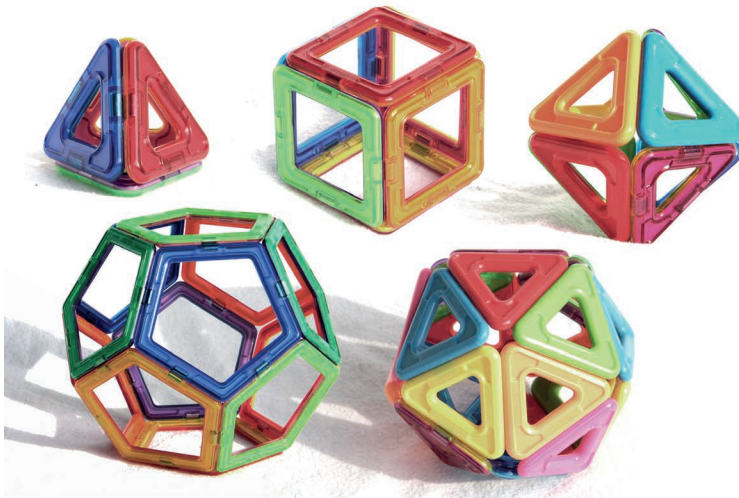


Abbildung 2: Die fünf platonischen Körper

Ein platonischer Körper ist ein konvexer Polyeder mit regulären Polygonen aus zueinander kongruenten Seitenflächen, wobei sich an jeder Ecke gleich viele Seitenflächen treffen. Es kann mathematisch gezeigt werden, dass es genau fünf platonische Körper gibt, und ihre griechischen Namen beziehen sich auf ihre Seitenanzahl (tetra = 4, hexa = 6, okta = 8, dodeka = 12, ikosa = 20). Griechische Geometer und Philosophen, insbesondere Platon, haben bereits vor mehr als 2000 Jahren ihre mathematische Schönheit und Symmetrie untersucht. Darüber hinaus sind vier der platonischen Körper den vier klassischen Elementen der Alchemie zugeordnet: Feuer = Tetraeder, Luft = Oktaeder, Wasser = Ikosaeder und Erde = Würfel. Aristoteles hat den Äther als fünftes Element ergänzt, aus dem himmlische, übernatürliche und durchscheinende Dinge bestehen, wie die Seele und die Himmelsphären, welche die Gestirne tragen. Das Symbol dieser *Quintessenz* ist der Dodekaeder [4], der einzige platonische Körper, der aus Fünfecken gebildet wird.

Algebraische Geometrie

Wenden wir uns nun der *algebraischen Geometrie* zu, genauer der reellen algebraischen Geometrie in drei Dimensionen. Nehmen wir an, wir haben eine einzige polynomielle Gleichung $p(x, y, z) = 0$ in den drei Variablen x , y und z gegeben. Eine Lösung dieser Gleichung zu finden, heißt, drei Werte für die Variablen anzugeben, und diese Werte können als Koordinaten eines Punktes im dreidimensionalen Raum interpretiert werden [5]. Mathematische Überlegungen zeigen, dass im Allgemeinen die Menge *aller* Lösungen eine gekrümmte Fläche bildet, möglicherweise mit Singularitäten wie Selbstdurchdringungen oder Spitzen. So erzeugt eine algebraische Gleichung $p(x, y, z) = 0$ eine Fläche bzw. ein geometrisches Objekt; d. h., eine Formel erzeugt eine Form [6]. Sehr oft ist es möglich, verblüffende und kunstvolle Flächen durch relativ einfache Gleichungen hervorzubringen [7], und es gibt grundlegende Verbindungen zwischen Formel und Form, die von der modernen mathematischen Forschung erst zum Teil verstanden werden.

Hier sollte man hervorheben, dass man mit Hilfe der kostenlosen Software SURFER [8] der Plattform „IMAGINARY – open mathematics“ [9] die algebraische Fläche zu einem gegebenen Polynom in Echtzeit visualisieren kann. Die Software lässt sich schnell installieren und kann auch von Nichtmathematikern sehr leicht bedient werden [5]; sie wurde während des deutschen Jahrs der Mathematik 2008 besonders für die breite Öffentlichkeit entwickelt.

Fangen wir mit einem Würfel an. Man kann ihn durch die einfache Gleichung $x^{16} + y^{16} + z^{16} = 1$ näherungsweise beschreiben. Man bemerke, dass dies ein dreidimensionales Analogon der Laméschen Kurve [10] ist, die auch in den Arbeiten des berühmten dänischen Wissenschaftlers, Künstlers und Designers Piet Hein eine Rolle spielt. Abbildung 3 zeigt ein Bild, das die Autoren mit Hilfe der SURFER-Software erstellt haben:



Abbildung 3: Näherung eines Würfels

Tatsächlich ist jede gerade Zahl $2n$ (ab $n = 2$) anstelle von 16 ebenfalls eine zulässige Wahl für den Exponenten. Je größer der Exponent, desto mehr ähnelt die algebraische Fläche dem Würfel. Das kann man sehen, indem man den Graphen der Funktion $x \mapsto x^{2n}$ betrachtet, der für große Werte von n immer eckiger aussieht (Abbildung 4). Man beachte, dass der Exponent 2 (d. h. $n = 1$) wegen des dreidimensionalen Satzes von Pythagoras die Oberfläche einer runden Kugel ergäbe.

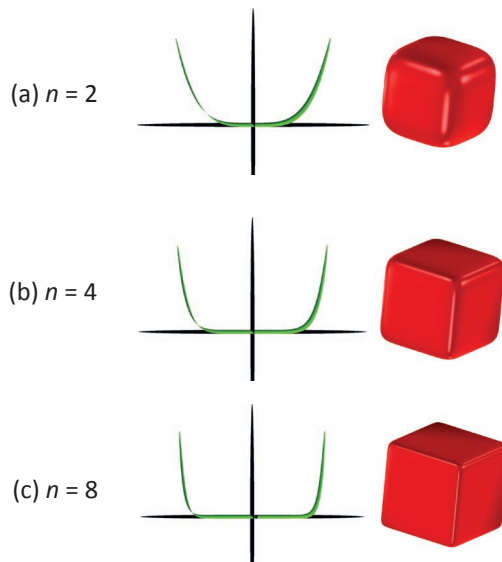


Abbildung 4: Der Graph von $x \mapsto x^{2n}$ und die algebraische Fläche $x^{2n} + y^{2n} + z^{2n} = 1$

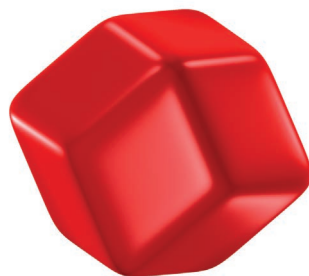
Als Nächstes möchten wir eine algebraische Fläche konstruieren, die einen Dodekaeder approximiert. Dafür beginnen wir mit drei *goldenen Rechtecken*. Deren 12 Ecken sind gegeben durch die Koordinaten $(\pm 1, \pm \phi, 0)$, $(0, \pm 1, \pm \phi)$, und $(\pm \phi, 0, \pm 1)$, wobei $\phi := \Phi - 1 = \Phi^{-1}$, and Φ der Goldene Schnitt ist [11], also $\phi \approx 0.62$. Es ist bekannt und kann durch einfaches Nachrechnen überprüft werden, dass diese 12 Ecken einen Ikosaeder aufspannen [12]. Der Dodekaeder und der Ikosaeder bilden ein *duales Paar*; Seiten und Ecken tauschen ihre Rollen [3]. Wir *dualisieren* also die beschriebene Konstruktion und verwenden die Koordinaten der Ecken als Koeffizienten in der einfachen Gleichung $ax + by + cz = d$, wobei a, b, c die Werte $0, \pm 1$ oder $\pm \phi$ annehmen können. Eine solche Gleichung beschreibt eine Ebene, die senkrecht zum jeweiligen Eckenvektor (a, b, c) ist, und ein Paar gegenüberliegender Ecken ergibt zwei parallele Ebenen. Wenn (a, b, c) ein Vektor der Länge 1 ist, misst d den Abstand der Ebene zum Koordinatenursprung. Wir erhalten schließlich 6 Ebenen, die parallel zu den 12 Seiten eines Dodekaeders verlaufen (jede Seite ist parallel zu der ihr gegenüberliegenden). Indem wir die Summe aus 6 solchen Gleichungen bilden und jede einzelne mit dem Exponenten $2n$ versehen (wobei wir $n = 8$ wählen), erhalten wir:

$$(ax+by+z)^{16}+(-ax+by+z)^{16}+(x+ay+bz)^{16}+(x-ay+bz)^{16}+(bx+y+az)^{16}+(bx+y-az)^{16}= 1$$

Für $a = 0$ und $b = 0$ ist das wieder die Gleichung des Würfels. Und für andere Werte der Koeffizienten a und b erhalten wir weitere glatte Flächen zum Beispiel in der Form eines Oktaeders (Abbildung 5.a), eines Rhombendodekaeders (Abbildung 5.b) und eines Dodekaeders (Abbildung 6).



(a) $a = 1; b = 1$



(b) $a = 1; b = 0$

Abbildung 5: Oktaeder und Rhombendodekaeder



Abbildung 6: $a = 0.62$ und $b = 0$ ergeben den Dodekaeder.

Wir können sogar in Echtzeit zwischen verschiedenen Formen interpolieren, indem wir in der SURFER-Software veränderliche Koeffizienten verwenden. Die Autoren haben auch einen Kurzfilm über diese Transformationen [13] erstellt, der beim Kurzfilmfestival der Bridges-Konferenz 2015 gezeigt wird.

Danksagung

Die Autoren möchten Gert-Martin Greuel, dem Gründer des IMAGINARY-Projekts, für sein visionäres Denken, sein Engagement und seine ansteckende Begeisterung bei der Sensibilisierung der Öffentlichkeit für die Schönheit der Mathematik danken.

Aus dem Englischen übersetzt von Sophia Jahns.

Verzeichnis der Fotografien

1 Würfelförmige, oktaedrische und dodekaedrische Pyrit-Kristalle, aus der Sammlung Brieskorn, Museum für Mineralien und Mathematik. Fotografiert von B. Violet.
Mit freundlicher Genehmigung des Vereins der Freunde von Mineralien und Bergbau Oberwolfach e. V.

2 Platonische Körper als Hohlformen aus Magnetformen für Kinder. Fotografiert von B. Violet.
Mit freundlicher Genehmigung von Fiona Violet.

Referenzen

- [1] "Pyrite", <http://en.wikipedia.org/wiki/Pyrite> (Stand 14.03.15)
- [2] Greuel, G.-M., "Crystals and Mathematics", In: *A Focus on Crystallography*, FIZ Karlsruhe 2014.
- [3] "Platonic solid", http://en.wikipedia.org/wiki/Platonic_solid (Stand 14.03.15)
- [4] "Platonischer Körper", http://de.wikipedia.org/wiki/Platonischer_K%C3%B6rper (Stand 14.03.15)
- [5] Greuel, G.-M., "Visualization of algebraic surfaces", http://imaginary.org/sites/default/files/surfer2012-manual-a1-index_sign_2014_0.pdf (Stand 14.03.15)
- [6] Hauser, H., "Die Auflösung von Singularitäten", <http://imaginary.org/sites/default/files/imaginary-herwig-hauser.pdf> (Stand 14.03.15)
- [7] Hartkopf, A. and Matt, A. D., "The art of an algebraic surface", <http://imaginary.org/sites/default/files/vismath-book-art-hartkopf-matt.pdf> (Stand 14.03.15)
- [8] "SURFER", *software*, <http://imaginary.org/program/surfer> (Stand 14.03.15)
- [9] "IMAGINARY - open mathematics", <http://imaginary.org/> (Stand 14.03.15)
- [10] Gridgeman, N. T., "Lamé Ovals", In: *Math. Gaz.* 54, 31-37, 1979.
- [11] "The golden ratio", http://en.wikipedia.org/wiki/Golden_ratio (Stand 14.03.15)
- [12] "The regular icosahedron", http://en.wikipedia.org/wiki/Regular_icosahedron (Stand 14.03.15)
- [13] Violet, B. und Klaus, S., "Katzengold", Kurzfilm, <http://imaginary.org/film/katzengold> (Stand: 15.05.15)

Heidelberg Laureate Forum



“Mathematik und Informatik durchdringen unser Leben und unseren Alltag. Sie stellen die Basis unseres modernen, hochtechnisierten Lebens dar und sind Teil unserer Kultur. Ihre Bedeutung wird weiter wachsen.”

Dr. h. c. Dr.-Ing. E. h. Klaus Tschira

Gründer der Heidelberg Laureate Forum Foundation und der Klaus Tschira Stiftung

Im Jahr 2013 hat die Klaus Tschira Stiftung (KTS) gemeinsam mit dem Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS) das Heidelberg Laureate Forum (HLF) ins Leben gerufen. Ein Treffen, das die Träger der renommiertesten Auszeichnungen in Mathematik und Informatik, des Abelpreises, der Fields-Medaille (einschließlich des Nevanlinna-Preises) und des ACM A.M. Turing Award, mit 200 Nachwuchswissenschaftlern dieser Fachgebiete zusammenbringt.

Das Heidelberg Laureate Forum feierte im Jahr 2013 seine erfolgreiche Premiere und findet nun vom 23. bis 28. August 2015 zum dritten Mal in Heidelberg statt. Organisiert wird es von der Stiftung Heidelberg Laureate Forum Foundation (HLFF). Ein weiterer Fokus der Stiftung liegt darauf, die öffentliche Aufmerksamkeit auf die beiden Disziplinen Mathematik und Informatik zu lenken, das Interesse daran zu wecken und nachhaltig zu stärken.

Anlässlich des 20-jährigen Jubiläums der Klaus Tschira Stiftung zeigt die HLFF vom 5. Juli bis 2. August 2015 im Kulturhaus Karlsruhbahnhof Heidelberg die Ausstellung „Mathematik des Planeten Erde“.

www.heidelberg-laureate-forum.de

HEIDELBERG
LAUREATE FORUM
FOUNDATION



Klaus Tschira Stiftung
gemeinnützige GmbH



Heidelberg Institute for
Theoretical Studies









HEIDELBERG
LAUREATE FORUM
FOUNDATION



Mathematisches
Forschungsinstitut
Oberwolfach

IMAGINARY



Klaus Tschira Stiftung

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



www.mpe.hlff.de