MITT.ÖSTERR.MINER.GES. 149 (2004)

GEOMETRISCHE STUDIEN ZU DEN PENTAGONALEN UND DEKAGONALEN DREIDIMENSIONALEN PUNKTGRUPPEN

von

Robert Krickl

Institut für Mineralogie und Kristallographie
Universität Wien, Geozentrum, Althanstrasse 14, A-1090 Wien

Summary
Geometrical studies on the pentagonal and decagonal 3-dimensional point groups. Stereograms of symmetry elements and poles of general equivalent faces of each of the seven pentagonal and five decagonal point groups are given. Descriptions of the faces with special and general forms are further topics of this article.

Zusammenfassung
Stereographische Projektionen der Symmetrieelemente und der Pole der allgemeinen Flächenformen von jeder der sieben pentagonalen und fünf dekagonalen Punktgruppen werden vorgestellt. Die Charakterisierung der Flächen der speziellen und allgemeinen Formen ist ein weiterer Teil dieses Artikels.

Einleitung
Wie Johann Friedrich Hessel (*1796, †1872) als Erster zeigen konnte, gibt es, resultierend aus der Kombination von makroskopischen Symmetrieelementen, nur 32 unterschiedliche dreidimensionale kristallographische Punktgruppen (HESSEL, 1830; vgl. auch SOHNCKE, 1891 und HESS, 1896). Als mögliche einfache, makroskopische Symmetrieelemente treten neben Inversionszentrum und Symmetrieebene(n), nur Drehachsen mit den Zähligkeiten (1), 2, 3, 4 und 6 (auch Mono-, Di-, Tri-, Tetra- und Hexagyre genannt) in der klassischen Kristallographie auf. Jene mit einer Zähligkeit von 5 (Pentagyre) ist hingegen nicht verwirklichbar. Der Grund für dieses Verbot liegt in der Unvereinbarkeit der fünfzähligen Symmetrie mit der translatorischen Wiederholung identer Baueinheiten - den Elementarzellen - durch die ein Kristall charakterisiert ist. Gleiches gilt auch für die n-zählige Symmetrie mit $n > 6$, wie zum Beispiel die zehnzählige, auf die hier auch des Weiteren eingegangen werden soll. Die durch Pentagyren und Dekagyren erzeugten Punktanordnungen erfüllen nicht die Bedingung für Netzebenen, die entlang von Gittergeraden eine Identität und gleich bleibenden Translationsabstand aufweisen müssen.

Eine anschauliche geometrische Erklärung für den zweidimensionalen Fall sieht so aus, dass man eine Ebene zwar in gleichseitige Drei-, Vier- und Sechsecke lückenlos translatorisch unterteilen kann, eine derartige lückenlose Unterteilung in gleichseitige Fünfecke, sowie auch in Polygone mit mehr als sechs Ecken, aber nicht möglich ist (Abb. 1).

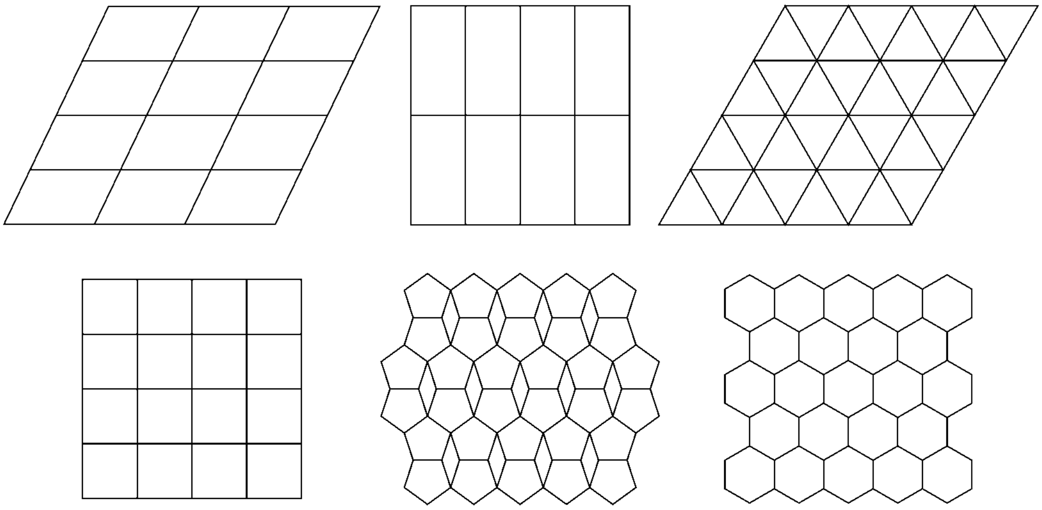

Abb. 1
Die Unterteilung einer Ebene ist nur mit Rechtecken, Parallelogrammen, gleichseitigen Drei-, Vier- und Sechsecken möglich, hingegen nicht mit gleichseitigen Fünfecken.

Obwohl demnach eine pentagonale Symmetrie für einen gesamten (Translations-)Kristall nicht in Frage kommt, ist die Beschreibung lokaler Symmetrien durch dreidimensionale pentagonale Punktgruppen möglich und durchaus sinnvoll (KOSTOV & KOSTOV, 1988). Im Folgenden sollen daher neben diesen Punktgruppen auch deren mögliche Flächenformen vorgestellt werden, durch die eine Beschreibung von Koordinationspolyedern und auch ganz allgemein von pentagonalen Körpern ermöglicht wird.
Analog zu Überschneidungen und Ähnlichkeiten zwischen den trigonalen und hexagonalen Punktgruppen werden zusätzlich zu den pentagonalen auch die dekagonalen Punktgruppen behandelt.

Phänomenologie der Pentagyre
Die Ableitung der dreidimensionalen pentagonalen Punktgruppen und die Zuordnung von internationalen Symbolen durch KOSTOV & KOSTOV (1988) basiert auf der Analogie zu den trigonalen Punktgruppen. Diese Autoren wollten gleichsam eine Lücke in der Zahlenreihe der dreidimensionalen Punktgruppen schließen, um eine Beschreibung lokaler Symmetrien zu erleichtern.
Ausgehend von der mathematischen Realisierbarkeit von Achsenkombinationen, sei auf die von Leonhard Euler (*1707, †1783) abgeleitete Formel

$$\cos(A \wedge B) = \frac{\cos(\gamma/2) + \cos(\alpha/2)\cos(\beta/2)}{\sin(\alpha/2)\sin(\beta/2)}$$

verwiesen, wobei $A \wedge B$ den Winkel zwischen den beiden Drehachsen A und B, α den Drehwinkel um A, β den Drehwinkel um B und γ die Ersatzdrehung um eine Achse C bezeichnet. Hieraus ergibt sich, dass lediglich die Kombination einer fünfzähligen oder zehnzähligen Achse mit zweizähligen Achsen eine endliche Wiederholung ermöglicht. Die Kombinationsmöglichkeiten der Symmetrieelemente sind in Tabelle 1 dargestellt und führen zu den sieben achsialen pentagonalen und fünf dekagonalen Punktgruppen.
Daneben existieren noch Punktgruppen, die mehr als eine fünfzählige Achse besitzen: Die Ikosaedergruppen 235 (I) und $2/m\bar{3}\bar{5}$ (I_h), auf die hier nicht näher eingegangen wird.

Punktgruppe	**Symbol nach**		**Symmetrieelemente**				
	Hermann-Mauguin	Schoenflies	Hauptachse	m parallel	m senkrecht	2 senkrecht	Inversions-zentrum
Pentagonal Pyramidal	5	C_5	5p	-	-	-	-
Pentagonal Streptoedrisch	$\bar{5}$	C_{5i} $\equiv S_{10}$	$\bar{5}$	-	-	-	Z
Pentagonal Trapezoedrisch	52	D_5	5	-	-	$5 \cdot 2$p	-
Dipentagonal Pyramidal	$5m$	C_{5v}	5p	$5 \cdot$m	-	-	-
Dipentagonal Skalenoedrisch	$\bar{5}\,2/m$ ($\bar{5}\,m$)	D_{5d}	$\bar{5}$	$5 \cdot$m	-	$5 \cdot 2$	Z
Pentagonal Dipyramidal	$5/m$ $\equiv \overline{10}$	C_{5h}	5	-	$1 \cdot$m	-	-
Dipentagonal Dipyramidal	$5/mm2$ $\equiv \overline{10}\,m2$	D_{5h}	5	$5 \cdot$m	$1 \cdot$m	$5 \cdot 2$p	-
Dekagonal Pyramidal	10	C_{10}	10p	-	-	-	-
Dekagonal Dipyramidal	$10/m$	C_{10h}	10	-	$1 \cdot$m	-	Z
Dekagonal Trapezoedrisch	1022	D_{10}	10	-	-	$10 \cdot 2$	-
Didekagonal Pyramidal	$10mm$	C_{10v}	10p	$10 \cdot$m	-	-	-
Didekagonal Dipyramidal	$10/m\,2/m\,2/m$ ($10/mmm$)	D_{10h}	10	$10 \cdot$m	$1 \cdot$m	$10 \cdot 2$	Z

Tabelle 1
Die Symmetrieelemente der sieben pentagonalen und fünf dekagonalen dreidimensionalen Punktgruppen.
Die Angaben parallel und senkrecht beziehen sich auf die Lage zur Hauptachse(p: .... polare Achse).

Diskussion

Die pentagonalen und dekagonalen Punktgruppen und ihre Flächenformen (Tabelle 2) korrespondieren mit den entsprechenden trigonalen und hexagonalen Punktgruppen. Zur Beschreibung der Flächenformen der nichtkristallographischen Punktgruppen können jedoch keine rationalen Millerschen Indizes verwendet werden. Der Unterschied der Millerschen Indizes in den mathematischen Punktgruppen liegt darin, dass sie aufgrund der fehlenden Translation nicht ganzzahlig sein können, wie es in den kristallographischen Punktgruppen der Fall ist. Stereographische Projektionen der allgemeinen Formen sind in Abb. 2 wiedergegeben.

Anzahl der Flächen	Name der Form	Punktgruppen											
		5	$\bar{5}$	52	5m	$\bar{5}\,2/m$ ($\bar{5}\,m$)	$5/m$ $\equiv\overline{10}$	$5/mm2$ $\equiv\overline{10}\,m2$	10	$10/m$	1022	10mm	$10/m\,2/m\,2/m$ ($10/mmm$)
1 ; o	Pedion	+			+				+			+	
2 ; o	Pinakoid		+	+		+	+	+		+	+		+
5 ; o	Pentagonales Prisma	+		+	+		+	+					
5 ; o	Pentagonale Pyramide	+			+								
10 ; o	Dipentagonales Prisma			+	+			+					
10 ; o	Dekagonales Prisma		+	+	+	+		+	+	+	+	+	+
10 ; o	Dipentagonale Pyramide				+								
10 ; o	Dekagonale Pyramide				+				+			+	
10 ; g	Pentagonale Dipyramide			+			+	+					
10 ; g	Pentagonales Streptoeder		+	+		+							
10 ; g	Pentagonales Trapezoeder			+									
20 ; o	Didekagonales Prisma					+					+	+	+
20 ; o	Didekagonale Pyramide											+	
20 ; g	Dipentagonale Dipyramide							+					
20 ; g	Dekagonale Dipyramide					+		+		+	+		+
20 ; g	Dipentagonales Skalenoeder					+							
20 ; g	Dekagonales Trapezoeder										+		
40 ; g	Didekagonale Dipyramide												+

Tabelle 2
Die speziellen und allgemeinen (möglichen) idealisierten Flächenformen der sieben pentagonalen und fünf dekagonalen dreidimensionalen Punktgruppen (o: offene Form, g: geschlossene Form).

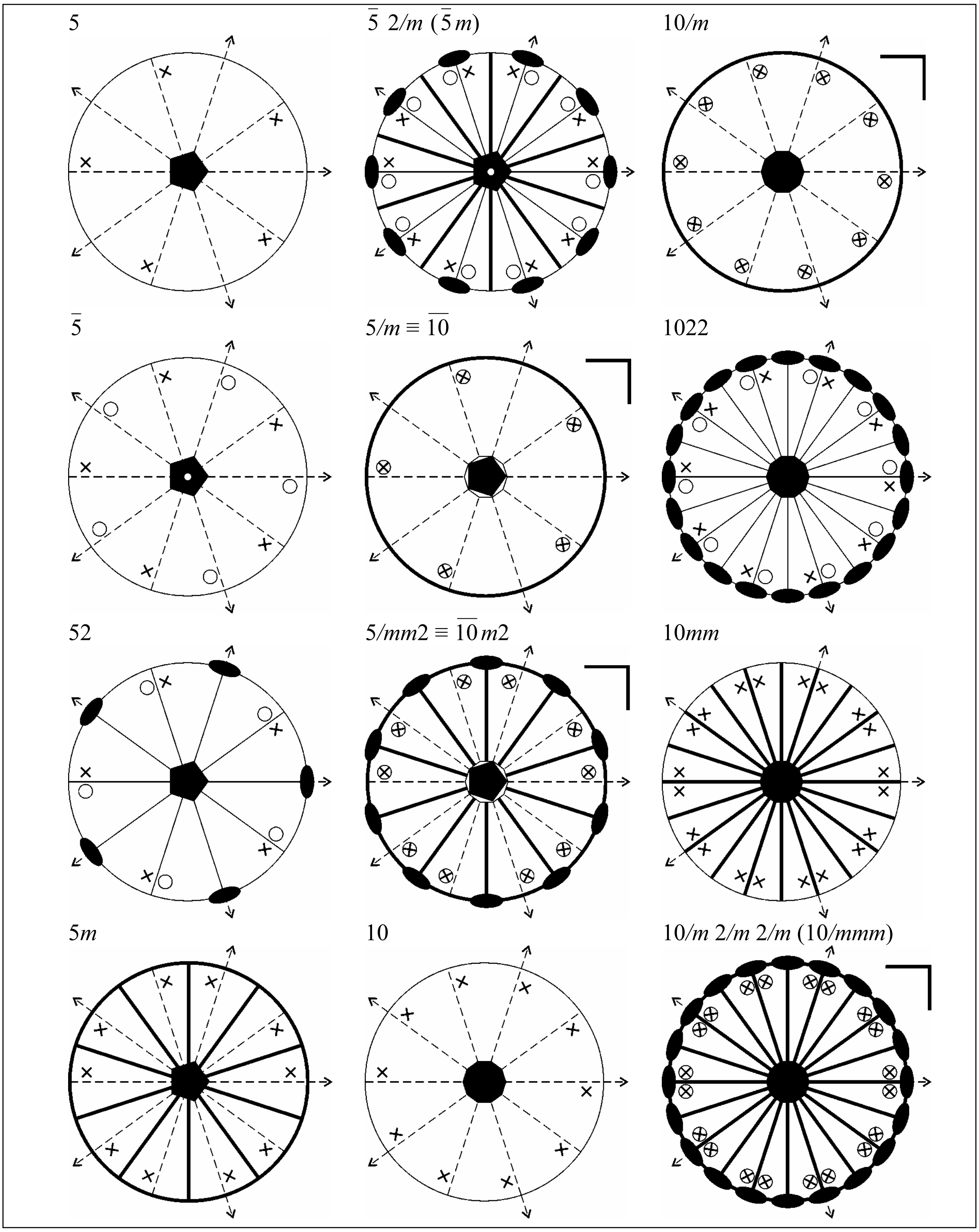

Abb. 2

Die sieben pentagonalen und fünf dekagonalen dreidimensionalen Punktgruppen: Symmetrieelemente und Pole der Flächen allgemeiner Lage in stereographischen Projektionen. Die fünfzählige oder zehnzählige Achse steht jeweils normal auf die Zeichenebene.

Hilfslinien zur Verdeutlichung der pentagonalen und dekagonalen Symmetrie

Symmetrieebenen normal zur Zeichenebene

zweizählige Achsen parallel zur Zeichenebene

× Flächenpole allgemeiner Lage oberhalb der Zeichenebene

Symmetrieebene parallel zur Zeichenebene

○ Flächenpole allgemeiner Lage unterhalb der Zeichenebene

Zu den trigonalen Punktgruppen werden üblicherweise auch jene zwei Gruppen gezählt, die als Charakteristikum eine dreizählige Achse normal auf eine Symmetrieebene aufweisen, wobei $3/m$ ident mit $\bar{6}$ ist (CORRENS, 1968). Zu bemerken ist, dass die Gruppen mit einer sechszähligen Inversionsachse und den internationalen Symbolen $\bar{6}$ und $\bar{6}m2$, in der Literatur unterschiedlich, auch zum hexagonalen Kristallsystem gezählt werden. In Analogie zu den von Correns angegebenen Kristallographischen Tabellen werden in vorliegender Arbeit jedoch die Klassen $\overline{10}$ ($\equiv 5/m$) und $\overline{10}m2$ ($\equiv 5/mm2$) zu den pentagonalen Gruppen gestellt.
Die Punktgruppe $\bar{5}$ steht in Analogie zur trigonal rhomboedrischen Punktgruppe $\bar{3}$. Das Rhomboeder ist allerdings ein definierter, von sechs kongruenten Rhomben begrenzter Körper des trigonalen Systems. Für das pentagonale Pendant wurde die Bezeichnung "Streptoeder" (="Gedrehtflächner") gewählt (NIGGLI, 1941) und daher die Punktgruppe auch "pentagonal streptoedrisch" genannt.

Dank

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen der im Sommersemester 2003 an der Universität Wien von Herrn Prof. Dr. Franz Pertlik angebotenen Lehrveranstaltung "Mineralmorphologie" erarbeitet. Für die Anregung zu diesem Artikel, sowie für weiterführende Diskussionen erlaubt sich der Autor neben dem Leiter dieser Lehrveranstaltung auch Frau Prof. Dr. Herta Effenberger und Herrn Prof. Dr. Manfred Wildner seinen Dank auszusprechen.

Literatur

CORRENS, C. W. (1968): Einführung in die Mineralogie. - Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.

HESS, E. (1896): J. F. C. Hessel. Zur Säcularfeier seines Geburtstages (27. April 1796). - Neues Jb. Miner., Geol. u. Palaeont., II, Jg.1896, 107-122.

HESSEL, J. F. (1830): Krystall. - In: Gehlers Physikalisches Wörterbuch II, Band 5, 1023-1340.

KOSTOV, R. I. & KOSTOV, I. (1988): On the fivefold cluster symmetry. - Cryst. Res. Technol. 23, 973-977.

NIGGLI, P. (1941): Lehrbuch der Mineralogie und Kristallchemie. - Verlag von Gebrüder Borntraeger Berlin-Zehlendorf.

SOHNCKE, L. (1891): Die Entdeckung des Eintheilungsprincips der Krystalle durch J. F. Hessel. Eine historische Studie. - Z. Kristallogr. 18, 486-498.

bei der Redaktion eingegangen: 3. März 2004

Manuskript angenommen: 7. März 2004