

Symmetrie und Topologie als Brücken zwischen den Skalen kondensierter Materie
B. Müller
Institut für Physikalische Chemie, Friedrich-Schiller-Universität Jena

In Erwartung des *Internationalen Jahres der Kristallographie 2014* soll auf die Symmetrie als Mittler zwischen Strukturen im atomaren Skalenbereich und makroskopischer Strukturen aufmerksam gemacht werden, die zuerst im *Korrespondenzprinzip* zwischen Kristallmorphologie und Netzebenen beobachtet wurde, was im 19. Jahrhundert einen großen Einfluß auf die Entwicklung der naturwissenschaftlichen Methodologie ausübte. Im *Neumann'schen Prinzip* wurde dieses später sehr allgemein zusammengefaßt. Es wird an strukturellen Beispielen der Einfluß der Punktgruppe auf vektorielle und tensorielle physikalisch-chemische Eigenschaften, auf den Habitus, aber auch auf die Diffraktogramme der Materialien aufgezeigt. So ist es folgerichtig, daß Kristallographie, kristallographische Betrachtungsweisen und kristallographische Methoden als Hilfsmittel zur Definition und Charakterisierung nichtkristalliner Strukturen in den letzten Jahren wieder zunehmende Bedeutung mit entsprechenden Erfolg erlangt haben. Es werden dafür Beispiele (SiO_2 -Modifikationen) vorgetragen wie die der Ähnlichkeit nichtkristalliner Strukturen in der Nächst-Nachbar-Umgebung mit kristallinen Strukturen, auch wie diese sich in Radialen Verteilungsfunktionen sowie Strukturparametern (*First-sharp-diffraction-peak*) äußern. Dabei wird die Hypothese favorisiert, daß der *First-sharp-diffraction-peak* ein *Quasi-Bragg-Reflex* ist.

Unter dem Eindruck der Strukturaufklärung von Quasikristallen wird auch versucht, nichtkristallographische Symmetrieelemente und -operationen in Gläsern und Schmelzen mit mehr und weniger Erfolg zu finden.

Die Topologie (hier als mathematische Disziplin und ihre Anwendung verstanden) kann zur Strukturbeschreibung kondensierter Materie noch einem Level unter der Symmetrie angewendet werden, am erfolgversprechenden durch raumfüllende minimale Polyederteilungen mit den Atomen (Molekülen u. ä.) als Ecken der Polyeder. Diese Polyederteilungen werden nicht nach der Voronoi- bzw. Dirichlet-Zerlegung durchgeführt, sondern mithilfe baryzentrischer Koordinatendarstellungen. Da sich die Resultate beider Teilungen unterscheiden können, sollen die erhaltenen Polyeder nicht Wirkungsbereichspolyeder, sondern Eigenbereichspolyeder genannt werden. Die zu den Eigenbereichspoldern dualen Polyeder charakterisieren die Hohlräume bzw. Lücken in den Strukturen. Mithilfe der Mittelwerte und Verteilungen sowie der Konnektionsmatrizen der Konnexionen können die Polyederteilungen eindeutig verifiziert werden. Für periodisch kristalline Strukturen erfolgt dies mit der topologischen Überlagerungstheorie für einen Fundamentaltyp, für nichtkristalline Strukturen müssen die Konnexionen für jedes Polyeder einzeln bestimmt und dann über alle gemittelt werden.

Der Vorteil der Polyederteilungen besteht darin, daß sie sowohl auf kristalline als auch auf nichtkristalline Strukturen anwendbar sind, daß sie eindeutig sind, so daß zu Berechnungen physikalisch-chemischer Eigenschaften gleiche Modelle und Näherungen für gleiche Polyederteilungen benutzt werden können, also wesentliche Brückeneigenschaften zwischen den Levels vermitteln. Insbesondere liefern sie einen engen Bezug zur *chemischen* Struktur. Ein wesentlicher Strukturparameter ist die mittlere Breite der Polyeder als lokales und globales Maß der Krümmung.

Anwendungen und Nutzen der raumfüllenden minimalen Polyederteilungen werden an kristallinen und nichtkristallinen Strukturmodellen von SiO_2 vorgetragen.