

Ordnungsprinzipien der Kristallwelt

Von PAUL NIGGLI †, Zürich

Redaktionelle Vorbemerkung: Wir freuen uns, die letzte Arbeit aus dem Nachlass von Prof. PAUL NIGGLI † publizieren zu können. Sie ist das Manuskript eines Vortrages von allgemeinem Interesse, der vor der Basler Naturforschenden Gesellschaft und Studentenschaft hätte gehalten werden sollen.

Die Mineralogie, eingeschlossen die Kristallkunde, ist eine relativ junge Wissenschaft, deren innere Problematik sich im allgemeinen nur den Fachkundigen offenbart, obgleich die Bedeutung der mineralischen Rohstoffe für die Technik und diejenige des Kristallaufbaues für die Struktur der Materie unbestritten ist. Ihre Stellung im Gesamtgebäude der Naturwissenschaften ist dadurch gekennzeichnet, dass sie erstens die grundlegenden Kenntnisse der Festkörper im Gegensatz zum flüssigen und gasförmigen Zustand entwickeln half, zweitens bei der Gliederung unserer Umwelt die Aufgabe zu erfüllen hatte, das Reich des Leblosen zu kennzeichnen, und dass ihr drittens von Anbeginn an eine Mittelstellung zwischen sogenannten beschreibenden und exakten Wissenschaften zukam. In sich enthalten diese Standortsbestimmungen auch heute noch aktuelle und offene Fragestellungen, wie über Abgrenzung und Wesen des sogenannten festen Aggregatzustandes, über die zum Beispiel in der Virenforschung zutage tretenden Grenzfälle zwischen lebender und lebloser Materie und über die besonders von Biologen diskutierten Beziehungen verschiedener Methoden wissenschaftlicher Forschung. Wie andere Naturforscher ist auch der Mineraloge zum Spezialisten geworden, der sich scheut, über sein Fachgebiet hinaus Aussagen zu machen, von denen dann gilt, dass sie nicht mehr sein wollen als Äusserungen rein persönlicher Ansichten. Vielleicht ist es am ehesten möglich, Missdeutungen dadurch entgegenzutreten, dass man versucht, im Fachgebiet selbst die massgebenden Prinzipien, soweit man glaubt, sie überblicken zu können, herauszuschälen und sich anschliessend darauf beschränkt, auf Analogien in anderen Gebieten aufmerksam zu machen.

Ein erstes Anliegen der im 17. und 18. Jahrhundert Wissenschaftsrang erhaltenen Mineralogie war es, das Naturgegebene so zu gliedern und begrifflich festzulegen, dass sinnvolle Weiterforschung ermöglicht wurde. Ein Vergleich der verschiedenen Versuche der Systematik und ihrer Entwicklung macht auf die grossen hiebei auftretenden Schwierigkeiten aufmerksam.

sam. Während in der Biologie LINNÉS Klassifikation und Nomenklatur in den Grundprinzipien bis auf die Gegenwart erhalten blieben und nur der durch die Fortschritte bedingten Revision und Korrektur anheimfielen, gilt dies kaum für die Kennzeichenlehre der Mineralien eines WERNER, LINNÉ, WALLERIUS u. a. der zweiten Hälfte des 18. und der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts. Nicht selten haben Unsicherheit und verschiedene Möglichkeiten der Zusammenfassung von Gleichartigem zur irrgigen Auffassung Veranlassung gegeben, es sei vom wissenschaftlichen Standpunkte aus im Gebiet der abiologischen Wissenschaften die Gliederung des Seins überhaupt von geringer Bedeutung. Man suchte hiefür nach Gründen, wobei Fehlen von Organen, Teilbarkeit der Mineralien ohne Verlust ihres Gesamtcharakters, Ganzheitsbegriffe herangezogen wurden. Und trotz der Unterschiede zwischen biologischen und abiologischen Individuen und Sachverhalten setzt beiderorts derjenige Teil der Wissenschaft, der im buntschillernden Gewand der sogenannten Ursachenforschung auftritt, voraus, dass sich die Mannigfaltigkeit des Seinsbestandes in Teilinhalten gliedern und in Allgemeinbegriffen zusammenfassen lässt. In manchen Weltbildern von Naturforschern ist von diesen Primärergebnissen der Naturforschung nur deshalb nicht die Rede, weil man mindestens in vorläufiger Weise die Kenntnisse voraussetzt. Man experimentiert mit Kalzit, Steinsalz oder Quarz oder mit bestimmten Pflanzen oder Tieren, deren lateinische Bezeichnungen gegeben werden, und glaubt, dass es sich hiebei um selbstverständliche, scharf umgrenzte, invariable Einzelkörper oder Sachverhalte handelt. Man versucht, atomares und molekulares Geschehen in komplexen Naturkörpern aufzuhellen, ohne die Grundgesetze des Stufenbaus der Welt zu erwähnen, die erst hiefür die Berechtigung ergeben. Und eine Grosszahl wichtiger Fortschritte der Naturerkenntnis resultieren, wenn Experimente dartun, dass die angenommenen Vorstellungen vom Aufbau Widersprüche ergeben, die nur beseitigt werden können entweder durch Umbau dieser Vorstellungen oder durch Falllassen bis jetzt als genügend angesehener dynamischer Hauptgesetze.

Der derzeitige Stand der Atomkernforschung ist nur eines von vielen Beispielen dieser Art: die Einführung des Mesonenbegriffes ist besonders kennzeichnend. Das

Vorgehen, die Eigenschaften des Naturgegebenen auf Grund bestimmter, mühsam erarbeiteter Aufbauprinzipien durch Spezifizierung und Generalisierung dem menschlichen Verständnis zu erschliessen, ist einerseits eine Vorbedingung weiterer wissenschaftlicher Forschung und bietet andererseits nach Läuterung der Vorstellungen durch Überprüfung der Konsequenzen ein zusammenfassendes Abbild des Seins und damit auch seiner Manifestation im Geschehen. So rechtfertigt die Darstellung der Tektonik, Struktur und Formenprägung der Welt also die Aufdeckung der Ideen, nach der sie geformt erscheint, eine Darstellung komplementär derjenigen, die Grundgesetze kausaler Zusammenhänge beschreibt. Beide Tendenzen der Naturforschung stehen jedoch nicht beziehungslos nebeneinander, sondern müssen sich ständig gegenseitig befrieten, wie das in der Mineral- und Kristallkunde von jeher der Fall war.

Das Studium des Stoffbestandes der festen Erdkruste, der Lithosphäre, führte zum Begriff der Mineralien, das heisst der verschiedenen Teileinheiten, die nach den jeweiligen zur Verfügung stehenden Untersuchungsmethoden in sich einheitlich gebaut erscheinen. Sie sind die Einzelbestandteile oder Individuen der als Aggregate oder Assoziationen zu bezeichnenden Minerallagerstätten und Gesteine. Der Raumerfüllung nach handelt es sich um kleine Einheiten, und nach Einführung mikroskopischer Methoden erwies sich vieles noch als zusammengesetzt oder heterogen, das für das blosse Auge nicht mehr gliederbar war. Allein gleichzeitig wurde festgestellt, dass viele Einzeldividuen im gleichen Aggregat oder an verschiedenen Fundorten der Erde soviel Gemeinsames besitzen, dass sich die Zusammenfassung unter einem Begriff aufdrängte. In der Mannigfaltigkeit zeigte sich, wie überall in der Natur, ein Beharrendes, eine Beschränkung, ein Parallelismus, eine innere Verwandtschaft. Wie in analogen Fällen, denken Sie an die Pflanzen, Tiere, Moleküle, Atome, Elementarteilchen, entstand die Frage der zweckmässigen Zusammenfassung der Individuen zu Spezien oder Arten. Dabei bedeutet in wissenschaftlichem Sinne zweckmässig eine Zusammenfassung, die weiteren Fortschritt der Erkenntnis ermöglicht, also Aussagen gestattet, die innerhalb eines Bereiches des Verhaltens, mindestens in erster Annäherung für alle Individuen gelten, die im Oberbegriff zusammengefasst sind. Nur so lassen sich ja auch experimentell Verhaltensgesetze aufstellen, lässt sich Ursachenforschung betreiben, da in beiden Fällen ein gefundenes Einzelergebnis in Serienversuchen verifiziert werden muss.

Auf Grund dieses Ziels ist der Begriff der Spezies eigentlich ein Begriff *a posteriori*, der erst aufgestellt werden kann, wenn an allen Individuen die gesamte Reaktionsfähigkeit durchprobiert und die Variationsbreite dessen, was als gleiches Verhalten bezeichnet werden darf, abgeklärt ist. Es ist jedoch offensichtlich, dass eine derartig strenge Fassung für die Forschung

entwicklungs hemmend wäre. Gleicher gilt etwa, wenn für die Zusammenfassung zu einer Art von den lebenden Individuen mit geschlechtlicher Fortpflanzung stets der unmittelbare Nachweis verlangt würde, dass sie untereinander eine zur Fortpflanzung befähigte Gemeinschaft bilden. Es müssen (zu einem grossen Teil intuitiv) verschiedene Eigenschaften auf ihre Brauchbarkeit zur Kennzeichnung eines engeren Verwandtschaftsgrades bzw. einer natürlichen Gliederung und Zusammenfassung bewertet werden, so dass frühzeitig eine ihrem Wesen nach provisorische, das heisst stets revisionsfähige Klassifikation aufgestellt werden kann. Das ist eine schwierige, jedoch für die Weiterforschung absolut notwendige Aufgabe. Auf Grund zunächst weniger Erfahrungen gilt es somit, für die Systematik wesentliche von unwesentlicheren Eigenschaften zu trennen und Prinzipien zu finden, die sich bei weiterer Anwendung zur Gliederung der vorgegebenen Mannigfaltigkeit brauchbar erweisen und eine sinngemässes Ursachenforschung ermöglichen.

Für die Mineralienklassifikation konnte es sich offenbar nur darum handeln, physikalische, chemische und morphologische Aspekte nach ihrer Bedeutung für die Systematik richtig zu bewerten und in der hiefür besonders charakteristischen Kombination als Artkennzeichen zu benutzen. Nichts könnte den notwendigen geistigen Arbeitsaufwand so gut verdeutlichen wie eine kurze Geschichte der Mineralienkunde von 1650 bis zur Gegenwart mit ihren vielen Irrwegen, aber auch mit den mannigfaltigen Impulsen, die gerade dadurch der Forschung als Ganzes verliehen wurden. Alle auf physikalischen Einzeleffekten aufgebauten Systeme, alle nur die analytisch-chemischen Teile umfassenden Gliederungen versagten, führten jedoch gleichzeitig zu Ergebnissen und Begriffen, wie etwa der Isomorphie und Polymorphie, die fundamentale Bedeutung erlangten. Und schliesslich war es doch möglich, übersichtliche Zusammenfassungen zu erhalten, die so erkenntnisträchtig waren, dass sie nicht nur der gesamten physikalisch-chemischen Forschung freie Bahn schafften, sondern auch darzutun vermochten, dass es möglich ist, Urbilder des Aufbaues der Natur zu deduzieren.

Lassen Sie mich, wenn auch nur skizzenhaft, einen Abschnitt herausgreifen, der dem Begriff Kristall gewidmet ist, da es sich gerade hiebei um etwas handelt, das nicht nur für die Mineralien, sondern für viele natürliche und künstliche Gegenstände des Alltags von Bedeutung ist.

Von altersher haben die gewissen Bestandteilen der Erdkruste zukommenden eigenartigen Formen die Aufmerksamkeit erregt, doch erst im 17. Jahrhundert wurden versuchsweise und zunächst ohne bestimmtes Prinzip Naturgebilde mit regelmässigen geometrischen Umrissen abgetrennt und näher untersucht. In einem Neujahrsbrief 1610/1611 behandelte JOHANNES KEPLER die Gestalt der Schneekristalle mit folgender hübschen Einleitung:

«Wie ich so grübelnd und sorgenvoll über die Brücke gehe und mich über meine Armseligkeit ärgere und darüber, zu Dir ohne Neujahrsgabe zu kommen, wenn ich nicht immer dieselben Töne anschlage, nämlich dieses Nichts angebe oder das finde, was ihm am nächsten kommt und woran ich die Schärfe meines Geistes übe, da fügt es der Zufall, dass durch die heftige Kälte sich der Wasserdampf zu Schnee verdichtet und vereinzelte Flocken auf meinen Rock fallen, alle sechseckig und mit gefiederten Strahlen. Ei, beim Herakles, das ist ja ein Ding kleiner als ein Tropfen, dazu von regelmässiger Gestalt. Ei, das ist eine höchst erwünschte Neujahrsgabe für einen Freund des Nichts! (*Atque en fatala nomen. O rem Wachherio gratissimam Nihilamanti. Nam si a Germano quaeras Nix quid sit, respondebit Nihil, si quidem Latine possit.*) Und auch passend als Geschenk eines Mathematikers, der Nichts hat und Nichts kriegt, so wie es da vom Himmel herabkommt und den Sternen ähnlich ist.»

In den Abhandlungen zweier Dänen, NIKOLAUS STENO und ERASMUS BARTHOLINUS, findet man 1669 erste Hinweise auf Eigenschaften sogenannter *Corpora angulata*, die ermöglichen, das Gestaltliche näher zu präzisieren. 1688 erfolgte durch den Italiener DOMENICO GUGLIELMINI eine schärfere Fassung der durch diese Arbeiten bereits angetönten Gesetze, bezogen auf die künstliche Salzbildung, und von den zwei Schweizern JOHANN HEINRICH HOTTINGER und MORITZ ANTON CAPPELLER erschienen 1688 und 1723 die ersten Kristallographien (*Krystallologia und Prodromus crystallographiae*). Auch heute noch wirksame Schwierigkeiten galt es zu überwinden: Erstens aus der Fülle der oft nur als zufällige Naturspiele angesehenen Formen eine Gruppe innerer Zusammenhänge herauszugreifen, eben das, was man heute Kristallgestalten nennt, und zweitens das Wesentliche dieser in Grösse und äusserem Aspekt so wechselvollen Erscheinungen zu erkennen. KEPLER ist am Schneestern vor allem die Sechsstrahligkeit, das heisst eine gewisse Symmetrie aufgefallen, die indessen nur annäherungsweise voll entwickelt ist. STENO stellt unabhängig von der Grösse beim Bergkristall ebenflächige Begrenzung fest mit Winkelkonstanz zwischen einigen Flächen verschiedener Kristallindividuen und BARTHOLINUS misst die Flächenwinkel an Kalzittrhomboedern von Island und erwähnt, dass gleiche Winkel zwischen diesen Flächen nicht nur dem unverletzten Körper, sondern beim Zerkleinern auch den Spaltstücken zukommen. Zugleich stellt er gesetzmässige optische Effekte fest, die dann CHRISTIAN HUYGHENS weiterverfolgte.

Aus den experimentellen Untersuchungen über Salzkristallisationen folgte GUGLIELMINI:

«Und in Wahrheit, wenn man nur eines der Salze beobachtet in seiner immer gleichartig gebildeten Form, so muss man die Meisterschaft der Natur bewundern, die zwar an die Einfachheit gebunden ist, aber nur wie ein Geometer zu arbeiten versteht, indem sie den reinsten Teilen der Materie bald die eine, bald eine andere Form beschreibt... Man darf indessen nicht glauben, dass man nun auch öfters dazukommt, bei den Salzen die Formen, die ich bisher beschrieben habe, in einem gewissen Masse

der Vollkommenheit zu sehen. Vorhanden sein müssten sie an jedem Kristalle, obgleich diese vielfach entweder unvollständig hinsichtlich der Ecken sind... Konstant ist dessen ungeachtet, vorausgesetzt, dass es zum Beginn einer Kristallisation kommt, immer die Neigung der Flächen und der Winkel, woran man an den nicht sehr gut ausgebildeten Kristallen gut erkennt, wo sie endigen müssten, weil davon notwendig die Begrenzung der Form abhängt, und man erkennt darin die Absicht der Natur sowie die Neigung der Materie, sich soviel als möglich in ihrer natürlichen Form anzuordnen.»

Aus diesen Hinweisen ersehen Sie folgendes: Aus der Fülle der geometrisch denkbaren Beschreibungselemente der Kristallgestalten, umfassend Gesamtgrösse, Oberflächenbeschaffenheit, Grösse der einzelnen Oberflächenelemente usw., wurden für die Charakterisierung herausgegriffen: Tendenz zu bestimmten Wiederholungen, also Symmetrie, Tendenz, ebene Grenzflächen zu entwickeln, und als Wesentliches und Beharrendes Gesetze der Winkelbeziehungen, also der Positionen dieser ebenen Kristallflächen zueinander. Sehr deutlich geht aus den Arbeiten hervor, dass das wirkliche Verhalten in mannigfachen Widersprüchen zu den Annahmen stund. Symmetrie der äusseren Gestalt wird stets unvollkommen erreicht, und ebenflächige Begrenzung sowie Winkelkonstanz der Kristallflächen seien streng aus der genauen Beschreibung deduzierbar. Intuitiv wurde jedoch aus den Beobachtungen gefolgt, dass trotz aller Abweichungen vom Ideal diese Annahme, es sollte so sein, den *Wesenskern* erfasse. Diese Bewertung der Faktizität, diese Trennung von wesentlichen und von für eine erste Charakterisierung nebensächlichen Erscheinungen war die grosse wissenschaftliche Leistung. Es wurde die Idee einer normativen Kristallmorphologie geboren, an Stelle ungeordneter reiner Beschreibung trat eine bewusst geordnete und schematisch idealisierte Darstellung, von der man erhoffte, dass sie die Absicht der Natur am besten erkennen lasse und Aufbaugesetze widerspiegle, die nur durch mannigfache Nebenumstände dem unkritischen Beobachter verborgen bleiben. Hielt dies weiterer Nachprüfung stand, so war zugleich bewiesen, dass der kristallisierenden Substanz ein auf inneren Gesetzen beruhendes Form- und Gestaltungsstreben zukommt, das sich in dem resultierenden Wachstumskörper zu manifestieren sucht. Von Anbeginn hat man natürlich den Ursachen dieses eigen-tümlichen Verhaltens nachgeforscht und glaubte dabei, wie das noch heute häufig der Fall ist, durch Rückführung auf Strukturellmorphologisches bereits Ursachenforschung zu treiben. Einige Zitate aus CAPPELLERS *Prodromus*, 1723, mögen dies bezeugen.

«Wenn man nun schon die verborgene Art, wie die Natur arbeitet, das heisst den Mechanismus, durch den die Kristallformen erzeugt werden, zu durchschauen und zu erkunden wünscht, wie das eine mehr als bloss oberflächliche Kenntnis der Naturkörper erfordert, so muss man vor allem mit angestrengter Sorgfalt und Anwen-

dung stereometrischer Methoden die vollständige Konfiguration der Salzkörper erforschen und erwägen. Als dann ist durch Ausführung analytischer Versuche nicht nur die Art, sondern auch die Grösse aller Kristalle zusammensetzenden Teile zu erforschen, denn auf diese Weise werden wir nicht nur die Gestalt der Teilchen möglichst angenähert erhalten, sondern auch die Anordnung und Lage, nach der sie gegenseitig aneinandergefügt sind, wird dem Auge des Geistes offenbar werden.

In Kürze lässt sich die Kristallisation und das Ergebnis derselben, das Kristallisationsprodukt, folgendermassen beschreiben: In irgendeiner nicht zu zähen Flüssigkeit seien Partikelchen, die mit bestimmten und eigentümlichen Formen versehen sind, aufgelöst und schwimmen darin umher, oder auch Moleküle, die aus Partikelchen zusammengesetzt sind und Gestalt besitzen. Diese sollen nun dichter zusammengebracht werden, entweder durch ständige Vermehrung dieser Partikelchen oder durch Einengung der Flüssigkeit infolge Verdampfung oder sonstwie. So werden die einzelnen Teilchen durch die innere Bewegung der Flüssigkeit selbst und des sie ständig durchdringenden Äthers bewegt und an verschiedene Stellen getrieben; alsdann werden sie mit ihren Aussenseiten je nach ihrer Gestalt verbunden, hängen sich aneinander und bilden schliesslich durch fortschreitende Vermehrung feste Körper mit bestimmter Gestalt, die bald mehr, bald weniger vollkommen ist, je nach der Art der Bewegung, die bald sanft, bald zu heftig, bald behindert ist. Diese Gestalt hängt vor allem von den ursprünglichen Formen der zusammensetzenden Teilchen ab und ergibt sich daraus.

Dieser Vorgang der Kristallisation mag nun wohl nur einer sein, was die Vereinigung der Teilchen anlangt, kann aber darin verschieden sein, dass bei einer anderen Flüssigkeit ein Unterschied in Erscheinung tritt und mehr oder weniger vollkommen ausgelöst wird. Wir haben hier nicht diejenigen Unvollkommenheiten im Auge, die gewissermassen als von aussen her kommende und nebensächliche Ursachen die Kristallisationen stören und mit Ungleichheiten behaften, sondern jene, die durch die Arten der Kristallisationen selbst zustande kommen, wenn diese entweder zu stark wirken oder überhaupt rasch auftreten, und die aufs nächste an die Koagulation heranreichen. »

Es sind Fragen der Genesis, die hier angeschnitten wurden. Doch bevor die diesbezüglichen Ansichten näher präzisiert werden konnten, war es notwendig, die Idealvorstellung vom Wachstumskörper der Kristalle weiterzuentwickeln und in ihren Konsequenzen nachzuprüfen. War es richtig, in den ebenen Grenzflächen freigewachsener Kristalle eine durch Binnengesetze bedingte Erscheinung zu vermuten, so lag es nahe, die idealisierten Kristallgestalten als besonders typische Kennzeichen eines bestimmten Kristallzustandes der Systematik dienstbar zu machen. Dadurch, dass man die Kristallflächen durch ihre Normalenrichtungen ersetzte und durch Errichtung eines von irgendeinem Punkt aus konstruierten Flächennormalenbündels das Gestaltliche schematisierte, wurde dem vermuteten Vorrang der Ebenenpositionen über alle anderen morphologischen Grössen Rechnung getragen. Auf Grund einfacher mathematischer Beziehungen ordnete sich dem Flächennormalenbündel ein Geradenbündel zu,

das in ihrer gegenseitigen Lage zueinander die Schnittkanten der Polyeder bildenden Wachstumsebenen veranschaulichte, das Zonenbündel.

Das Problem der Verwertung morphologischer Daten zur Körpersystematik wäre nun ein sehr einfaches gewesen, wenn alle Einzelkristalle, die man aus physikalischen und chemischen Gründen gezwungen war als Individuen der gleichen Kristallart anzusehen, mindestens bei freier, von Ausseneffekten ungestörter Bildung zum gleichen Flächennormalen – bzw. gleichen Zonenbündel geführt hätten. Das Auftreten analoger Winkel zwischen Flächennormalen hat dies vermuten lassen. Allein die genaue Untersuchung, an der sich im 18. und 19. Jahrhundert viele Forscher beteiligten, ergab ein wesentlich komplexeres Bild, das zunächst den Wert dieser Schematisierungen fraglich erscheinen liess. An verschiedenen Individuen der gleichen Kristallisations- oder vermuteten Artgenossenschaft wurden in den zugeordneten Richtungsbündeln neben positionsmässig gleichen zusätzliche weitere Richtungen festgestellt, ja es gab manche Fälle, bei denen sich keinerlei Richtungen miteinander zur Deckung bringen liessen. Bestätigten die Wiederholungen (eben das, was man zunächst Winkelkonstanz genannt hat) das *Gesetzmässige*, so wiesen die zuletzt genannten Phänomene auf eine *Freiheit der Gestaltungsmöglichkeit* bei gleicher Grundsubstanz hin. Den Forschern schien es jedoch kaum glaublich, dass einerseits in ganz bestimmter Beziehung zueinander stehende Richtungen bzw. Flächenlagen viele Kristallgestalten beherrschen und daneben andere nur Zufallsgesetzen unterworfen Elemente hinzukommen sollten. Sie suchten, ob zwischen den verschiedenen vermutungsweise artgleichen Richtungen der Normalen- oder Zonenbündel nicht engere Beziehungen erkennbar seien. Ihre Bemühungen wurden durch Auffinden einfacher mathematischer Beziehungen gekrönt.

Wählt man drei nicht koplanare Richtungen des Flächennormalen- oder des Zonenbündels zu Grundvektoren, deren Länge durch einen vierten Vektor als Einheitsvektor bestimmt wird, so ergeben sich daraus alle übrigen je beobachteten Richtungen der zugeordneten Bündel einer einheitlichen Kristallisation durch vektorielle Zusammensetzung. Normalerweise ist es möglich, die vier Hauptvektoren so zu wählen, dass nur einfachste vektorielle Zusammensetzungen mit niedrigen ganzen Zahlen die Gesamtheit der beobachteten Richtungen abzuleiten gestatten (sog. Rationalitätsgesetz oder Grundgesetz der Kristallmorphologie). Abgesehen davon, dass aus diesen Eigenschaften eine mathematisch einfache Kennzeichnung der Kristallflächen und Kristallkanten resultiert (unter Verwendung von Konstanten und Indizes), löst diese Erkenntnis für den Begriff der idealen Kristallmorphologie eine der wichtigsten Aufgaben jeglicher morphologischen Betrachtungsweise. Es sind die geeigneten Methoden zur Erforschung eines variablen Tatbestan-

des gefunden worden, eine dem Gegenstand angepasste *Mathematik*.

Für die Grenzelemente des freien Wachstums lässt sich ein jeder Kristallsubstanz eigenständliches *Rahmengesetz* ableiten, das alle denkbaren Möglichkeiten normaler Grenzflächenentwicklung umfasst. Innerhalb dieses Rahmengesetzes ist ein *Spielraum* vorhanden, in welchem, wie Naturbeobachtung und Experiment dartun, besondere Milieueinflüsse beim Wachstum die eine oder andere Kombination aussondern. Die Summe der möglichen ebenen Wachstumskanten oder Kantenrichtungen bildet eine scharf definierte Ganzheit. Das die Ganzheit charakterisierende Gesetz wurde gefunden.

Nun können aber den Vektorfiguren, den Strahlbündeln gewisse Symmetrien zukommen, die bei Herrschaft des Rationalitätsgesetzes zu einer endlichen, mathematisch leicht ableitbaren Mannigfaltigkeit von 32 grundsätzlich verschiedenen Fällen führen. Die Feststellung, dass gerade diese 32 Punktsymmetriegruppen den beobachteten, auch physikalisch unterscheidbaren Kristallsymmetrien, den sogenannten Kristallklassen, entsprechen, bewies, dass tatsächlich ein Grundgesetz des Kristallseins aus der Wachstumsmorphologie bzw. deren Idealisierung erschlossen war.

Nochmals muss betont werden, dass diese fundamentalen Ergebnisse das Resultat einer höchste Konzentration erfordernden kritischen Durchmusterung des Naturgegebenen war, mit intuitiv richtiger, das heisst neue Einsichten vermittelnder Bewertung der Beobachtungen. Es sei daran erinnert, dass ebene Flächen und geradlinige Kanten als morphologisch Wesentliches der Wachstumskörper herausgegriffen wurden und dass deren Lagebeziehungen zueinander als primär wichtig dem Studium unterworfen wurden. Wir kennen heute viele Kristallgestalten, die, wären sie zum Ausgangspunkt der Forschungen gewählt worden, nie gestattet hätten, die erwähnten Gesetze aufzufinden. Der Forscher muss nicht nur wahrheitsgemäß und exakt beschreiben, er muss, um Grundgesetze oder Grundideen zu entdecken, bewerten, die Phantasie walten lassen, intuitiv erkennen, dass gewisse Erscheinungen anderen untergeordnet sind. So wie der begnadete Künstler nicht die photographische Wiedergabe anstrebt, sondern zur Erfassung einer Idee Nebensächliches eliminiert, anderes heraushebt, hat auch die Wissenschaft, handle es sich um beschreibende Darstellungen oder Ursachenforschung, zunächst das Komplexe durch Einfacheres zu ersetzen. Nur so konnte sich die Überzeugung festsetzen, in einer Teilerscheinung des Kristallwachstums ein beherrschendes Grundprinzip gefunden zu haben.

Doch die übrigen auftretenden Phänomene wurden keineswegs unterschlagen, das wäre ja vollkommen unwissenschaftlich gewesen, sie wurden nur durch folgende Argumentation in einen weiteren Problemkreis einbezogen. Zeigt die ebenflächig polyedrische und durch das Rationalitätsgesetz näher bestimmte

Umgrenzung des Wachstumskörpers der Kristalle die deutlichste Manifestation wirksamer Innenfaktoren, so lassen sich auch Umstände denken und experimentell verwirklichen, die zu keinen ebenen, sondern gekrümmten Grenzflächen führen, die keine konvexe Polyeder, sondern wie beim Schneestern dendritische oder skelettartige Bildungen ergeben, die Grenzflächen erzeugen, deren Zugehörigkeit zum Rationalitätskörper zweifelhaft ist. Ja, die Begrenzung während eines Wachstumsstadiums kann so vollständig von Aussenfaktoren bestimmt werden, dass sich das von innen nach aussen wirkende Formbestreben gar nicht mehr durchzusetzen vermag. Dass es jedoch der Kristallsubstanz an sich zukommt und es sich in allen anderen genannten Fällen wissenschaftlich gesprochen um sekundäre Phänomene handelt, zeigen nicht nur Erscheinungen der Spaltbarkeit und der physikalischen Eigenschaften als Ganzes, sondern Wachstumserscheinungen und Regenerationsphänomene an künstlichen Ausgangskörpern. Schneiden wir aus einem grösseren Kristall eine Kugel und bringen diese in eine Dampf- oder Lösungsphase, die unter den vorhandenen Bedingungen die Weiterbildung der gleichen Kristallverbindung allseitig ermöglicht, so stellen wir fest, dass der Stoffansatz in verschiedenen Richtungen mit verschiedener Geschwindigkeit erfolgt, und dass unter Auftreten von gesetzmässig orientierten Ebenenbereichen über mannigfache Zwischenstadien schliesslich ein konvexer polyedrischer Wachstumskörper entsteht. Bei freiem Wachstum kommt somit dieser *Formwillen* zur Geltung und erreicht damit die zwingende Vorstellung, dass den Kristallen ganz bestimmte innere Baugesetze eigen seien. Aber nicht nur das Kugelexperiment bestätigt, dass es sich hier um eine natürliche, dem Stoff innewohnende Formgebung handelt. Verstümmeln wir ein solches eigengestaltiges Kristallindividuum und lassen wir das Bruchstück unter den ursprünglichen Bedingungen weiterwachsen, so regeneriert sich seine Gestalt. Die Bruchform besitzt ein *Regenerations- und Ausheilungsvermögen*.

Offenbar bedingen somit eine innere Metrik und eine gesetzmässige Binnenstruktur das aussengestaltliche Verhalten bei der Kristallbildung, soweit es sich den Ausseneinflüssen gegenüber durchzusetzen vermag.

Noch handelt es sich zunächst um keine eigentliche Ursachenforschung, sondern um einen Korrelationsversuch, wenn man nach den strukturellen Gesetzen forscht, die das phänomenologische Verhalten verständlich machen. Dabei ist von der atomaren Struktur der Materie auszugehen und es müssen über den Aufbau Vorstellungen entwickelt werden, die zwingend zu den als grundlegend erkannten äusseren Kristallgesetzen führen.

Auch dieser morphologische Versuch war so erfolgreich, dass es gelang, die Gesamtheit aller wesentlichen Erscheinungen auf eine einzige Arbeitshypothese zurückzuführen, auf die Raumgitterstruktur kristalliner

Materie, die, nachdem sie rein theoretisch schon vollständig entwickelt war, mit Hilfe neuer experimenteller Methoden in ihrem ganzen Umfang bestätigt werden konnte. Wiederum lag dem Vorgehen eine *Idee* zugrunde, die durch Schematisierung, beispielsweise Ersatz der atomaren Teilchen durch Punkte, als einfaches mathematisches Problem so lösbar wurde, dass die gesamte damit verträgliche Mannigfaltigkeit überblickt werden konnte. Es handelt sich um den Teil einer grösseren Aufgabe, nämlich derjenigen, sich darüber Rechenschaft zu geben, was für Möglichkeiten in Raum und Zeit der atomaren Teilchen bei der Bildung distinkter Atomverbände zur Verfügung stehen und nach welchen Prinzipien diese zweckmässig zu gliedern sind. Es mussten die geometrischen Grundlagen der Stereochemie entwickelt werden.

Gehen wir von einem idealisierten Zustande aus, wie er nur angenähert in den Edelgasen verwirklicht ist, einem Zustand, in welchem die zwischen den Einzelatomen wirksamen Kräfte so geringfügiger Natur sind, dass sie eine freie Beweglichkeit und völlig ungeordnete Verteilung ermöglichen, so wird offensichtlich, dass jeder als chemisch zu bezeichnende Vorgang einen Ordnungsprozess darstellt. Bereits in den normalen Gasen und Flüssigkeiten tritt er ein, indem die von der diskontinuierlichen Struktur der Materie geforderten Atome infolge von Kräften, die sie aufeinander ausüben, zu sogenannten molekularen chemischen Verbindungen zusammentreten. Von letzteren sprechen wir ja, wenn gut definierte Atomverbände in gewissen Bereichen bestandfähig werden, als Ganzes reagieren und neue stoffliche Eigenschaften bedingen. Im gleichen Sinne ist die Kristallisation ein Aussonderungs- und Ordnungsprozess, sei es, dass derartige Moleküle oder mehratomige Radikale durch gegenseitige Kräfteeinwirkungen zu Verbänden höherer Ordnung, den Molekülkristallen, zusammentreten oder von Anfang an Konfigurationen bilden, deren Bauprinzip keinen endlichen Abschluss gestattet. Die geometrische Behandlung, wobei zunächst die Atomarten durch ihre Schwerpunkte ersetzt werden, so dass für die mathematische Behandlung Punktconfigurationen entstehen, zeigt nämlich, dass es zwei Typen von Punktanordnungen gibt, solche mit endlicher Zahl der Punkte und natürlichem Abschluss im endlich umgrenzten Raum und solche, die sich dem Baumotiv nach ein-, zwei- oder dreidimensional ins Unendliche erstrecken müssen. Kann man den am Verband beteiligten Punkten bzw. Teilchen bestimmte Koordinationszahlen und Koordinationsschemata zuordnen (das heisst bestimmte Zahlen der an sie gebundenen Teilchen und bestimmte Motive der Anordnung), so bestimmen diese bei gleichartiger Wiederholung des Vorganges, ob ein ungeordnetes Haufwerk molekularer Teilchen oder ein in sich zusammenhängender Verband entsteht, der wie ein Tapetenmuster sich unbegrenzt fortsetzen lässt. Im letzteren Fall entstehen als Deckoperationen Trans-

lationen, und diese müssen eindimensional eine Kettengruppe, zweidimensional eine Netzgruppe, dreidimensional eine Raumgruppe oder ein Raumgitter bilden. Ihnen aber kommen alle Attribute zu, die den kristallinen Aufbau kennzeichnen. In den Kristallverbindungen wird der Prozess der Bildung der Verbindung zum Wachstumsprozess, der sich so lange fortsetzt, als Material zur Verfügung steht. Und die dreidimensionalen kristallinen Konfigurationen zerfallen aufbaugemäss in Netzebenenfolgen und Gittergeraden, die zueinander im gleichen Verhältnis des Rationalitätsgesetzes stehen wie natürliche Kristallflächen und Kristallkanten. Zugleich sind sie in bezug auf Teilchenanordnung die ausgezeichneten zwei- bzw. eindimensionalen geometrischen Elementen, die man durch die Kristallstruktur als Innen- oder Randelemente legen kann. Es verwundert daher nicht, dass sie beim Wachstum zu bevorzugten und wiederholbaren Grenzelementen werden. Da zudem die so charakterisierte Raumgitterstruktur nur eine beschränkte Zahl von Symmetriefällen zulässt, die sich für die phänomenologische Betrachtung auf die 32 Kristallklassen reduzieren, vermag diese Vorstellung vom Aufbau der Kristalle alle Grundgesetze des Kristallseins abzuleiten, so dass der Kristallograph bereits vor der Möglichkeit des experimentellen Nachweises mittels Röntgenstrahlen überzeugt war, die für das Kristallsein massgebenden Strukturgesetze gefunden zu haben. Ohne irgend etwas über die Natur der Kräfte zu wissen, ohne eigentliche Ursachen angeben zu können, gelang so den Kristallographen die Aufstellung von Strukturgesetzen der Materie, die Schöpfung von Urbildern des Kristallzustandes oder, wie wir heute sagen müssen, des Idealkristallzustandes. Denn wenn wir bedenken, dass sich beispielsweise in einem Steinsalzwürfel von einem halben Zentimeter Kantenlänge die Baumotive bereits tausendtrillionenfach wiederholen müssen, wird evident, dass schon zur Bildung kleinster sichtbarer Kristalle eine ungeheure Zahl von Einzelschritten der Einordnung und Anlagerung notwendig ist, so dass es ein Wunder wäre, wenn sich bei diesem Ein- und Aufbauprozess nicht Fremdteilchen einlagern, nicht Fehlstellen sich ergeben würden und die strenge Periodizität sich nicht häufig auf kleine Einzelblöcke oder Lamellen beschränken würde. Der Realkristall wird kaum je den Idealzustand erreichen. Anderseits werden, da sich in merklicher Intensität die von den Teilchen aufeinander ausgeübten Kräfte nur über wenige Teilchenabstände bemerkbar machen, schon in relativ kleinen Kristallen viele Millionen Teilchen praktisch sich verhalten wie in einem sich ins Unendliche erstreckenden Kristall; die Randstörungen, erzeugt durch die Unabgesättigtheit der Grenzflächen, haben nur sehr geringe Tiefenwirkung. So wird verständlich, dass man in endlichen Kristallbereichen oder an kleinen Kristallbruchstücken bereits die richtungsabhängigen physikalischen Eigenschaften studieren kann, wie sie dem Kristallzustand

als Ganzes zukommen, wobei sich Fehlordnungen für gewisse Effekte statistisch kompensieren oder verstärken können. Dem Idealkristall ist somit der Realkristall mit allen seinen Abweichungen oder pathologischen Veränderungen des Normativen oder idealen Verhaltens entgegenzustellen, und viele Eigenschaften sind auf «Strukturfehler» rückführbar. Doch das darf uns ebensowenig wie in der Lehre von der äusseren Kristallgestalt daran hindern, zunächst die gefundenen fiktiven Idealstrukturgesetze weiterzuverfolgen, und den durch sie gegebenen Inhalt voll auszuschöpfen. Der Ausbau führte zu einer Neufassung des Begriffes Kristall bzw. kristalliner Zustand der Materie. Das geht schon daraus hervor, dass vom strukturellen Standpunkt aus der Begriff unabhängig vom Aussengestaltlichen der Wachstumskörper wurde und zur einfachen Charakterisierung von den Randbedingungen absah, da wie im Phasenbegriff an sich ins Unendliche sich ausdehnende Raumerfüllung vorausgesetzt wurde. Das ermöglichte die innenmorphologische Kennzeichnung eines bestimmten Kristallzustandes ohne Kenntnis der angestrebten Wachstumsformen. Die Gliederung der verschiedenen Kristallverbindungen wurde zu einer Systematik der verschiedenen Kristallstrukturen. Trotzdem blieb die Korrelation der bei freiem Wachstum auftretenden Erscheinungen mit den strukturellen Eigenschaften eine erste wichtige Problemstellung. Die Erkenntnis, dass die Grenzflächen der Wachstumsstadien normalerweise Netzebenen, die Kanten Gittergeraden parallel gehen, stellte nur den Anfang eines in ständiger Entwicklung befindlichen Kapitels der Forschung dar, das neben experimentellen Untersuchungen eine statistische Bearbeitung des Formenmaterials verlangte. Die angestrebte äussere polyedrische Form mit ebenen Flächen und gradlinigen Kanten als Begrenzungselementen ist ein Abbild der raumgitterartigen Struktur. Bei freiem Kristallwachstum entwickeln sich parallel wichtigen Gittergeraden und Netzebenen die Kristallflächen und ihre Schnittkanten oder Zonen. Innerhalb des Rahmengesetzes werden Kristallflächen und Kristallkanten nach ihrer dem Strukturtypus zukommenden Wichtigkeit geordnet, wie aus einer Häufigkeitsstatistik klar hervorgeht. Die für die Kristallmorphologie massgebenden Wachstumsebenen gehen den bei der Kristallbildung wichtigsten (das heisst neu hinzukommenden) Bindungs- bzw. Koordinationsrichtungen parallel, liegen also in den Zonen dieser Richtungen. Innerhalb dieser Zonenverbände treten diejenigen Flächen besonders hervor, welche Netzebenen relativ dichter Belastung mit Massenteilchenschwerpunkten oder Netzebenenserien relativ einfachen Baues entsprechen. Die vorkristallinen Zustände in Lösungen, Schmelzen oder Dämpfen, die manchmal bereits als quasikristallin beschreibbar sind, und die Milieueigenschaften beeinflussen die Kinetik der Aufbauprozesse und variieren die Bedeutung der hierbei zu besonderer Geltung kommenden Struktur-

richtungen. Dadurch entsteht die Mannigfaltigkeit von Habitus und Tracht, allgemein der äusseren Kristallausbildung, so dass neben den jeder Struktur zukommenden statistisch erfassbaren Hauptgesetzen der äusseren Kristallmorphologie die auf ihre Spezialursachen rückführbare Variation, der Spielraum, verständlich wird.

Von viel grundsätzlicherer Bedeutung war nun jedoch die Frage, ob es bei gegebenem Ausgangsmaterial innerhalb des strukturellen Rahmengesetzes möglich ist, unter Zuhilfenahme relativ weniger und nicht spezielle Kraftgesetze verlangender Annahmen über die Eigenschaften der Bausteine die zu erwartenden Strukturtypen abzuleiten und ihrer Verschiedenheit nach zu gliedern. Ein einfaches Beispiel möge die Problemstellung veranschaulichen. Es seien zweierlei Bausteine, *A* und *B*, gegeben, die im Verhältnis 1:1 eine bestandfähige Verbindung ergeben. Ist es möglich, aus der Fülle der denkbaren Kristallstrukturen diejenigen anzugeben, die sich besonders häufig einstellen, und sie durch gleichfalls morphologische Eigenschaften so zu charakterisieren, dass wenige Aussagen über die Bausteine selbst die zu erwartende Zuordnung gestatten? Mit anderen Worten: gelingt es, innerhalb des allgemeinen strukturellen Rahmengesetzes die wirksamen Selektionen zu erkennen und die Beziehungen verschiedener Strukturtypen zueinander abzuklären? Es ist dies in der Tat durchführbar, wobei unter anderem ein Prinzip wegleitend ist, das Symmetriprinzip, und wobei eine Eigenschaft der Bausteine, das Koordinationsvermögen, in erster Linie eine Rolle spielt. Das Symmetriprinzip lässt sich wie folgt fassen:

1. Die unter gegebenen Bedingungen und Ausgangsmaterialien höchstmöglichen Anordnungen und Verbandsverhältnisse sind bevorzugt.

2. Eine durch Symmetriqualitäten gekennzeichnete Struktur besitzt innerhalb eines bestimmten Bereiches eine Haltbarkeit oder Persistenz, derartig, dass alle durch isotrope Bedingungsänderungen erzeugten Veränderungen den Grundplan der Symmetrie nicht stören.

Es ist nun durchaus möglich, bei gegebener Koordinatenzahl und gegebenen stöchiometrischen Verhältnissen die Koordinationsschemata, das heisst Bausteine und deren Anordnungsmöglichkeiten ihrer Symmetrie nach zu gliedern, die höchstsymmetrischen herauszugreifen und nach verschiedenen Qualitäten, beispielsweise den Verhältnissen der Teilchenabstände einander in Reihen zuzuordnen. Die Erfahrung bestätigt, dass auf diese Weise tatsächlich die beobachtbaren, idealen Strukturpläne erhalten werden, und dass es oft schon aus den Eigenschaften der Bausteine ableitbar ist, welcher speziellen Struktur die Kristallverbindung angehören wird. Relativ wenige Strukturtypen mit ihren durch besondere Umstände bedingten Abweichungen beherrschen den gesamten Kristallaufbau. Ihre Beziehungen zueinander gestatten Zusammenfassungen verschiedenster Verwandtschafts-

grades, also eine vergleichende Strukturlehre, und führen zu einer Fülle von Fragen, die der Ursachenforschung verpflichtet sind. Was sind die Gründe für rein metrische Änderungen bei gleichem Strukturplan, von Deformationen oder Abweichungen vom Höchstsymmetrischen bei gegebenem Ausgangsmaterial usw.? Unter Benützung der erwähnten Methoden und ihrer Ergebnisse konnte nun von neuem die Frage nach dem Wesen der Kristall- oder Mineralart behandelt werden. Alle Forschungen haben bestätigt, dass im Kristallreich, genau so wie im Reich der Atome und Moleküle oder der Lebewesen, eine diskrete Mannigfaltigkeit besteht. Es kommen bestimmte Aufbauprinzipien in einer angebaren Variationsbreite zur Geltung. Die Natur ist heterogen, sie enthält verschiedenartige Gebilde, die als neue Einheiten in die wissenschaftlichen Untersuchungen eingehen. In ähnlicher Ausbildung wiederholt sich Gleichartiges und gestattet Generalisierungen und Zusammenfassungen von Individuellem zur gleichen Art. Zur gleichen Kristallart sind zum Beispiel diejenigen kristallinen Konfigurationen zu rechnen, die sich innerhalb der Fehlergrenzen experimenteller Untersuchung phänomenologisch kontinuierlich ineinander überführen lassen oder doch miteinander eine kontinuierlich zusammenhängende Serie bilden, die von anderen trennbar ist.

Der Versuch, die Arten zu charakterisieren, ihre innere Variabilität zu erforschen, die Effekte der Ausseneinflüsse auf die speziellen Eigenschaften zu ergründen, ihre Stellung im Gesamtbild der entsprechenden Disziplin aufzudecken, Auswahlprinzipien zu erkennen, wird so zur Wissenschaft der Kristalle überhaupt. Wiederum sind es die eingangs erwähnten Eigenschaften der Kristalle und die relativ einfachen Beziehungen zwischen Phänotypus und Genotypus (Strukturplan), welche die Kristall- und Mineralienkunde befähigen, einen Beitrag zur Artenlehre im allgemeinen zu liefern. Es steht fest, dass die Merkmale einer Art innerhalb gewisser Bereiche erhalten bleiben, oder mit anderen Worten, dass es sich um Komplexe zusammengehöriger Erscheinungen handelt, die ein ausgesprochenes Beharrungsvermögen besitzen, eine sich nach aussen und innen manifestierende *Ganzheit, Selbständigkeit und Eigengesetzlichkeit*. Bildet sich aus Lösungen, Schmelzen oder Gasen durch Wachstumsprozesse die Kristallart einer bestimmten Strukturplan, so kann diese sich trotz Änderungen der Bedingungen durchsetzen. Das einmal Gegebene passt sich innerhalb bestimmter Grenzen den veränderten Außenbedingungen an, ohne den Artcharakter zu verlieren. Diese Anpassung erfolgt nach formulierbaren Prinzipien, beispielsweise bei veränderten chemischen Bedingungen des Milieus, durch Mischkristallbildung in Form von Substitution oder Einlagerung oder in Form gesetzmässiger Ausfallserscheinungen usw. Kommt zum Beispiel FeO eine bestimmte Kristallstruktur zu, so bleibt bei nur leichter Oxydation zu

höherer Wertigkeitsstufe der Strukturplan bestehen unter Austritt von etwas Fe bis zum nun wirksamen stöchiometrischen Verhältnis Fe zu O. Ändert die Schmelze oder Lösung, aus der sich ein Kristall bildet, die Zusammensetzung, so findet bis zu bestimmten Grenzen ein Stoffwechsel statt, wodurch sich durch Abgabe und Aufnahme von Bestandteilen der Strukturplan den veränderten chemischen Bedingungen anpasst. Ausgezeichneten Strukturen kommen somit Stabilitäts- und Haltbarkeitsfelder zu, innerhalb deren sie durch oft sehr komplexe Austauschvorgänge ihre Eigengesetzlichkeit bewahren. Ebenso deutlich sichtbar wird diese Eigenschaft bei Druck- und Temperaturänderungen, die zu Lageverschiebungen der Teilchen führen, hiebei aber wiederum innerhalb bestimmter Grenzen die Symmetrie oder das symmetriegemäss Wesentliche des Bauplans bewahren.

Es sei beispielhaft irgendeine Kristallstruktur, zum Beispiel diejenige des trigonal enantiomorphen Quarzes, gegeben. Die Teilchenschwerpunkte, also in diesem Falle die Schwerpunkte der Si- und O-Atome, müssen, damit die Symmetrie resultiert, in bestimmten Lagebeziehungen zueinander stehen. Mathematisch lassen sich die Veränderungsmöglichkeiten der Positionen angeben, die dem Prinzip der Symmetriehaltung verpflichtet sind. Beim Quarzkristall zum Beispiel muss die Verschiebung eines O-Teilchens gegenüber einem Si, an das es gebunden ist, Verschiebungen aller O-Teilchen in ganz gesetzmässiger Weise zur Folge haben. In Abhängigkeit von der Lage der Teilchen zueinander kommen bei symmetriehaltenden Deformationen diesen nur bestimmte Freiheitsgrade der Lagenänderung zu und ausserdem bestimmte Koppelungen der Verschiebungsvektoren. Beobachten wir nun, dass Quarz in einem relativ grossen Temperatur-Druckbereich trigonal enantiomorph bleibt, sich hierbei ausdehnt oder komprimiert unter deutlich nachweisbaren Änderungen der Gitterkonstanten, Teilchenlagen und Teilchenabstände, so ist das identisch mit der Aussage: *alle Strukturdeformationen werden durch die Grundsymmetrie gesteuert*. Sie erfolgen, anthropomorph gedacht, so als ob sie gezwungen würden, die Symmetrieganzheit zu bewahren. Es ist ihnen normalerweise vorgeschrieben, nur diejenigen Möglichkeiten auszunützen, die den Gesamtcharakter der Symmetrie nicht zerstören. Es kann sein, wie dies beispielsweise gerade beim Quarz zutrifft, dass sich bei Änderungen während des Erhitzen die Teilchen Positionspunkten nähern, die, sobald sie erreicht werden, höhere Gesamtsymmetrie erzeugen. Dann erfolgt (bei Quarz ist dies unter gewöhnlichem Druck bei 573° der Fall) die letzte Änderung sprunghaft und bei weiterem Erhitzen bleibt, unter Herabsetzung des Freiheitsgrades der Lagenänderung, diese neue Symmetrie wiederum erhalten. Es hat ein Modifikationswechsel stattgefunden. Somit ist der Kristallraum anisotrop und eigengesetzlich, es kommt ihm (und allen Verbindungen, die wir als solche

studieren können) eine innere *Metrik* zu, die das Gesamtverhalten bestimmt.

Die grössten Triumphe hat diese Erkenntnis in neuester Zeit bei der Durchforschung spektroskopischer Erscheinungen der Molekular- und Kristallchemie gefeiert. Und das ist sehr wichtig, weil es beweist, dass es sich nicht um etwas handelt, das nur mit der Geometrie starrer, durch weitgehende Abstraktion gewonnener Gebilde verknüpft ist. Die spektroskopischen Beobachtungen werden in einem gewissen Bereich als Effekte von Vibrationen (Bewegungszuständen) innerhalb der Verbindungen, seien sie nun molekularer oder kristalliner Art, zu deuten versucht. Die Erfahrung hat bis heute bestätigt, dass diese Erklärung möglich ist, wenn man von der Annahme ausgeht, auch die Schwingungszustände in einem Teilchenverband seien symmetriebedingt und können normalerweise nur so erfolgen, dass im höheren Sinne die Symmetrie bewahrt bleibt. *Die Symmetrie steuert auch die Schwingungsmöglichkeiten.* Mathematisch handelt es sich um eine sehr interessante Aufgabe, vergleichbar derjenigen, die von der Punkt- zur Raumsymmetrie überführt. Man hat die geometrischen Bedingungen aufzustellen, die von den Schwingungszuständen gefordert werden müssen, damit man sie mit der starren Symmetrie einer Punktkonfiguration als verträglich ansehen darf. Die so formulierbaren Schwingungssysteme zerfallen in Rassen oder Klassen, die einer gegebenen Verbandssymmetrie von Teilchen äquivalent oder isomorph sind, so wie die 230 Raumsysteme den 32 Kristallklassen. Der einmal gebildete Kristall verhält sich somit Bedingungsänderungen gegenüber als etwas Ganzes und erleidet unter Bewahrung der Grundbaupläne *gesteuerte Deformationen*. Ja, selbst wenn einseitige mechanische Beanspruchungen erfolgen, er scheinbar plastisch deformiert wird, geschieht dies vorzugsweise nach Mechanismen, die bewirken, dass grössere Strukturbereiche möglichst ihre Eigenart bewahren.

Entstehen bei derartigen mechanischen Deformationen trotzdem Unstetigkeitsbereiche oder werden diese durch bereits vorhandene Baufehler erzeugt, so haben sie die Tendenz zur Rückbildung der Störungen. Der im Bau gestörte Kristall ist weniger stabil. Es finden Erholungs-, Gesundungs- und Rekristallisationsprozesse, Selbstregulationen statt, sofern es uns zum Beispiel durch Tempern gelingt, die innere, den Platztausch und die Neuordnung begünstigende Beweglichkeit zu steigern. Da Kristalle mit primären oder sekundären Baufehlern andere Eigenschaften besitzen als diejenigen, die dem Idealkristalle nahestehen, ist es zu einer wichtigen Aufgabe der Technik (zum Beispiel der Metalltechnik) geworden, zu ergründen, wie sich durch besondere Kristallzüchtung die primären Fehler vermeiden oder durch nachträgliche Behandlung die sekundär erworbenen beseitigen lassen. Die Analogie mit einem ähnlichen Vorgehen in der Biologie ist offensichtlich.

Überblicken wir zum Schluss das Vorgehen in der mineralogischen Wissenschaft, so macht sich ein ständiger und sich gegenseitig befriedigender Wechsel oder *Dualismus* der Betrachtungsweise bemerkbar. Man sucht einerseits die Mannigfaltigkeit des Naturgegebenen durch Ideengesetze oder Aufbauprinzipien zu umreissen und schärfer zu fassen, und wird anderseits durch Vergleich dieser Idealgesetze mit der Wirklichkeit zur Beantwortung immer neuer Fragestellungen mit Hilfe des Experiments und der «kausal» funktionalen Theorien angeregt. Das Suchen nach Gesetzen und Prinzipien, die den Seinszustand in seiner Beharrung und Veränderlichkeit beschreiben, hat öfters Anlass gegeben, den exakten Wissenschaften die beschreibenden gegenüberzustellen. Aber es handelt sich hier ebensowenig um eine blosse Protokollierung oder Beschreibung wie in den dynamischen Gesetzeswissenschaften. Wirklich wesentliche Aufbauprinzipien zu finden, verlangt, wie erläutert, kritische Sichtung und Intuition, das Auffinden einer Idee, einer idealen Vergleichsmöglichkeit, die von vielen Einzelheiten zunächst absehen muss. Auch mit «mehr oder weniger exakt» im üblichen Sinne haben die beiden Betrachtungsweisen nichts zu tun. Nimmt man hiefür die Mathematisierung als Maßstab, so kann ja gerade der Kristallograph zeigen, dass die von ihm gefundenen Aufbaugesetze als Idealgesetze streng mathematisch behandelt werden können. Es sind im allgemeinen nur besondere Zweige der mathematischen Wissenschaften wie Topologie, Vektoranalysis, Geometrie, Gruppentheorie, Matrizenrechnung usw., die er zu benützen hat und die früher in Physik und Chemie weniger bedeutsam schienen als Integral- und Differentialrechnungen. Nun, das hat sich auch in diesen Wissenschaften grundlegend geändert, man könnte fast sagen: Physik und Chemie haben sich in diesem Sinne kristallographiert, so wie in der Quantentheorie die kristallin-diskontinuierliche Struktur der Materie auf energetische Verhältnisse übertragen wurde.

Erstaunlich bleibt, dass eine Fülle von Einsichten und Zusammenhängen erhalten wurde ohne Einführung der dynamisch-energetischen Betrachtungsweise, lediglich unter Benützung gewisser als morphologisch zu bezeichnender Prinzipien, wie vor allem des Systemprinzips. Man hat die Strukturmöglichkeiten des kristallinen Zustandes und die massgebenden Kristallstrukturtypen ableiten können, ohne die Daten zu besitzen, diese als ausgezeichnete energetische Gleichgewichtszustände zu berechnen. Auch heute noch finden sich in gitterenergetischen Untersuchungen Annahmen, die für einen Strukturtypus höchst unbefriedigend sind, weil der gleiche Typus unter Umständen auftritt, bei denen die angenommenen Voraussetzungen sicher nicht gelten. Damit soll gegen die irgendwie als kausal zu bezeichnende Forschung selbstverständlich nichts eingewendet werden, der Mineraloge benutzt sie ja weitgehend. Aber er sieht aus seiner Wissenschaft

mit grosser Deutlichkeit, dass *beide* Methoden geeignet sind, Fortschritte zu erzielen, dass es rein wissenschafts-historisch falsch ist, die eine als vorläufig oder weniger wichtig zu erklären als die andere. Sie sind zueinander komplementär, das heisst, sie ergänzen sich. Nicht selten findet man die Bemerkung, dass der Teil der Wissenschaft, welcher von (im erläuterten Sinne) morphologischen Prinzipien ausgeht, nur eine transitorische Rolle spielt. Doch wenn es auch möglich ist, morphologische Gesetze mit Hilfe einer kausalen Betrachtung als Folgen bestimmter Annahmen verständlich zu machen, wird das morphologische Element nie verflüchtigt. Es steckt letzten Endes in der Struktur der Welt, dem heterogenen Aufbau, der Bildung von Gleichartigem, dem Symmetrie- und Polaritätsprinzip, den sogenannten Naturkonstanten, der Tektonik unserer Welt. Man hat den Versuch, aus Beobachtungen, Wahrnehmungen und Wertungen die Wahrheit über die Beschaffenheit der Welt in Form von Ideen, nach denen sie *gebaut* ist, in Erfahrung zu bringen, etwa *Urbildforschung* im Gegensatz zu *Ursachenforschung* genannt.

Der Mineraloge ist nicht der Meinung, dass die eine die andere völlig ersetzen könne; ihm erscheinen beide Betrachtungsweisen *notwendig* zu sein, sich gegenseitig ergänzend. Er selbst bindet im allgemeinen lediglich mehr als der atektonische, reine Ursachenforscher seine Methodik an die vorgegebene Struktur, die Zustandsform- und -gemeinschaft, und entkleidet sie so eines sonst sich leicht einschleichenden Absolutismus. Auch die mehr morphologische Betrachtungsweise, wenn

wir sie so nennen dürfen, führt zu Analogien, die Wissenszweige miteinander verbinden, also zu *allgemeinen Prinzipien*, deren Kenntnis ebenso befriedigt wie die Kenntnis dynamischer Gesetze. Dass hierbei bei aller grundsätzlichen Gleichartigkeit in verschiedenen Disziplinen verschiedene Wege und Formulierungen sich aufdrängen, ist selbstverständlich. So wird im Bereich des Kleinsten, zum Beispiel in der Atom- und Kernphysik, die bei Kristallen noch weitgehend mögliche Darstellung durch die gewöhnlichen Anschauungsformen versagen müssen (so wie der Begriff Teilchen und Individualität eine Umdeutung erfährt), und bei komplizierten, der Biologie zugehörigen Individuen erhält der Begriff Ganzheit eine neue Bedeutung. Auch der Biologe wird gut tun, sich über die Erscheinungen im Kristallbereich zu orientieren, die so manche Analogien mit den Tatbeständen seiner Forschungen besitzen, denn nur dann wird die Frage nach dem, was wirklich die Besonderheit der Lebewesen bestimmt, richtig beantwortet werden können.

Summary

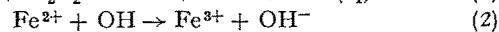
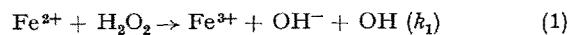
The author discusses the governing principles for the world of crystals, and sketches the development of the conception of crystal. The morphological investigations of mineralogists have led, by way of critical ordering and intuition, to principles and laws which make the spatial structure (Raumgitterstruktur) of crystalline material necessary. This working hypothesis was later confirmed by new experimental methods. The author points out the numerous analogies to other natural systems.

Brèves communications - Kurze Mitteilungen Brevi comunicazioni - Brief Reports

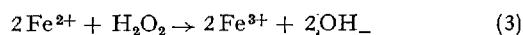
Les auteurs sont seuls responsables des opinions exprimées dans ces communications. — Für die kurzen Mitteilungen ist ausschliesslich der Autor verantwortlich. — Per le brevi comunicazioni è responsabile solo l'autore. — The editors do not hold themselves responsible for the opinions expressed by their correspondents.

The Rate Constant of the Bimolecular Reaction between Hydrogen Peroxide and Ferrous Ion

It has been shown by HABER and WEISS¹ that the reaction between hydrogen peroxide and ferrous ions can, under certain conditions, be described by the following two consecutive reactions:



which correspond to the simple stoichiometry:



This holds when $([\text{Fe}^{2+}]/[\text{H}_2\text{O}_2]) \gg 10^{-1}$, as then the primarily formed OH radicals react only with the ferrous ions and the other reactions of hydrogen peroxide, e.g. those leading to the evolution of oxygen, can be neglected.

¹ F. HABER and J. WEISS, Proc. Roy. Soc. (London) A 147, 332 (1934).