



Die Mathematik des Kristallwachstums

Spielerisch modellieren wie Kristalle zusammenwachsen



Wie kommt es, dass in Kristallen geordnete Strukturen entstehen? Wie verändern sich diese Strukturen mit der Zeit?

Diese faszinierenden Prozesse kannst Du in diesem Forschungsauftrag mithilfe von Spielsteinen auf einem Spielbrett erkunden.

In Kürze



Zeitraumen: 45 - 60 min.



Zielgruppe: Besonders empfohlen für die Unter- und Mittelstufe.



Benötigte Materialien:

- Bastelkarton
- Bastelschere
- 5 - 6 Bücher
- *Optional: runde Spielsteine mit verschiedenfarbigen Seiten*

Autoren

Autoren dieses Forschungsauftrags sind Fabian Weidt, Stefan Hartmann und Prof. Dr. Tim Laux vom Hausdorff Center for Mathematics (HCM) der Universität Bonn. Wenn Du mehr über die Forschung in der Mathematik erfahren möchtest, kannst Du über diesen Link die Internetseite des HCM besuchen: <https://www.hcm.uni-bonn.de/>.

Hinweis

Wir weisen darauf hin, dass die Durchführung der Forschungsaufträge einschließlich der damit verbundenen Risiken in eigener Verantwortung erfolgt. Die Universität Bonn übernimmt keine Haftung für eventuell im Rahmen der Durchführung entstehende Schäden. Minderjährige sollten die Experimente nur nach Rücksprache mit volljährigen Personen durchführen.

Einleitung

Kristalle gehören zu den faszinierendsten natürlichen Strukturen unserer Erde. Ihr Wachstum erfolgt nicht nach Belieben, sondern folgt klaren mathematischen und physikalischen Gesetzmäßigkeiten. Bei diesem Forschungsauftrag handelt es sich um ein kompetitives Spiel für **zwei Personen**. Auf einem Spielbrett werden Spielsteine, die die Atome und deren Bindungsenergien symbolisieren, ausgelegt, sodass eine energetisch optimale Konstellation, das Kristallgitter, entsteht. Weitere wissenschaftliche Informationen findet Ihr weiter unten im Abschnitt "Mathematisch-physikalischer Hintergrund des Spiels".

Los geht's

Vorbereitung:

Ihr benötigt 5-6 Bücher, die zu einem unregelmäßigen Vieleck zusammgelegt werden (**Abb. 1**). Dies bildet euer Spielbrett, welches im Verlauf des Spiels mit Spielsteinen gefüllt wird. Für die Vorbereitung der Spielsteine druckt Ihr die beiliegende Abbildung „Spielstein-Schablone“ (**Abb. 2**) zweimal aus und klebt sie auf möglichst dicken Bastelkarton. Dann schneidet Ihr die kreisförmigen Spielsteine aus der Schablone aus. Nun werden die ausgeschnittenen Spielsteine markiert. Ihr könnt eine Seite rot und die Andere blau anmalen oder auch einfach beispielsweise die Zahlen 0 und 1 groß auf die verschiedenen Seiten schreiben. Alternativ können auch zweifarbige, kreisförmige Spielsteine im Internet bei verschiedenen Herstellern bestellt werden.

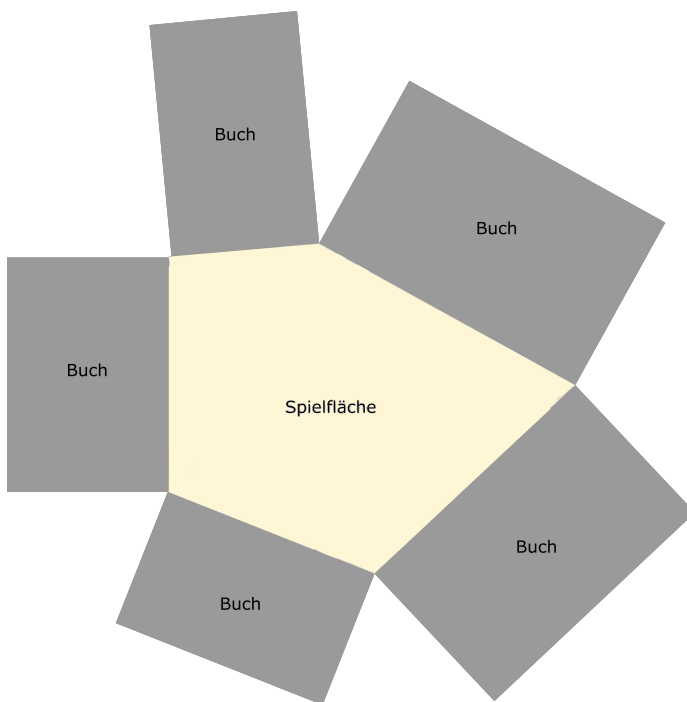


Abbildung 1: Spielvorbereitung.

Die Bücher können beliebig angeordnet werden, Hauptsache sie begrenzen eine nicht allzu große Spielfläche.

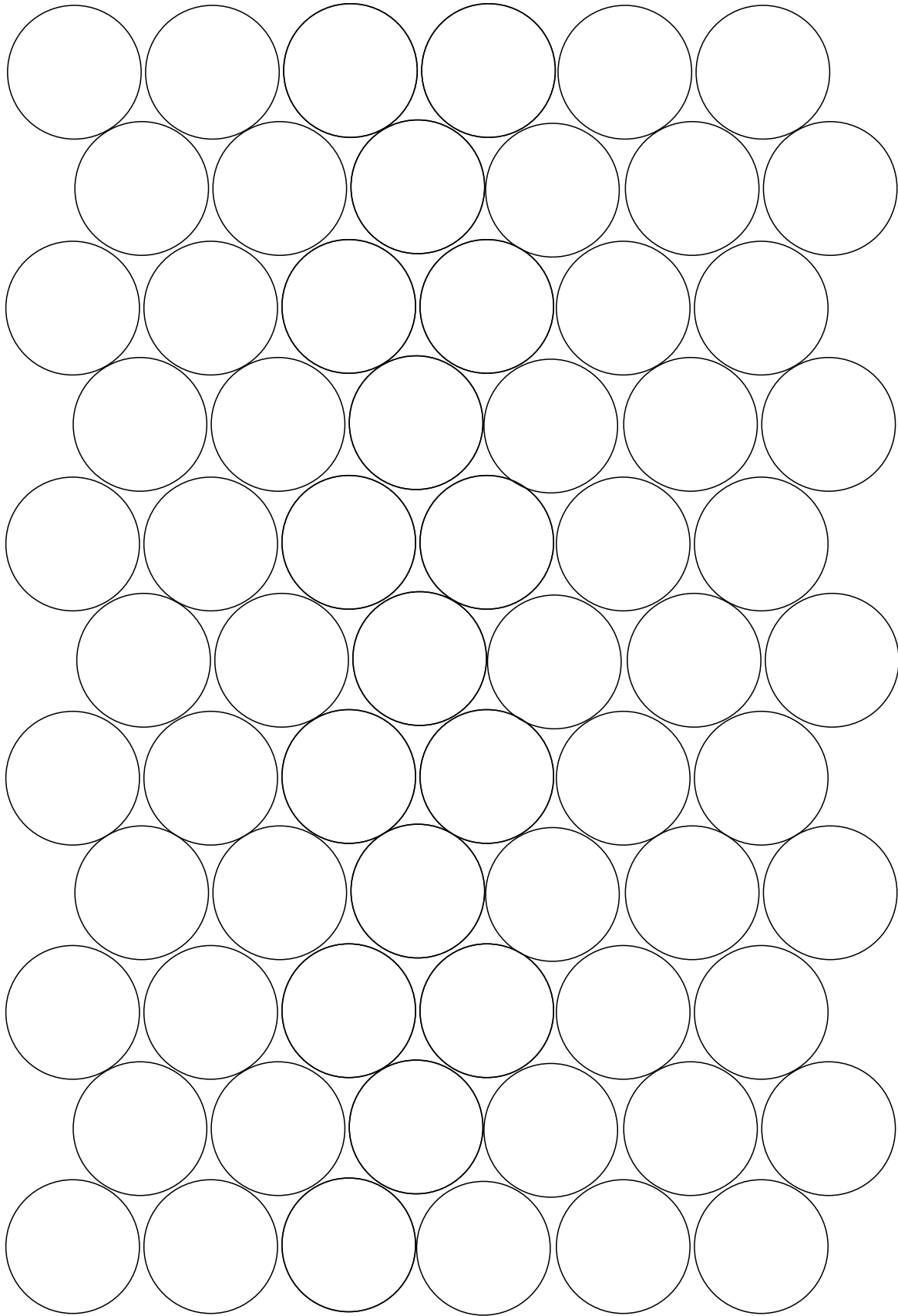


Abbildung 2: Spielstein-Schablone zum Ausschneiden.

Durchführung:

Phase 0. Zu Beginn des Spiels sucht sich jede*r Spieler*in eine Seite der Spielsteine (rot/blau oder 0/1 etc...) aus, dreht die Steine auf die entsprechende Seite und legt den Rand des Spielbretts, der ihm*ihr am nächsten ist, mit Spielsteinen aus (**Abb. 3**). Die Anzahl der Spielsteine sollte auf beiden Seiten identisch sein.

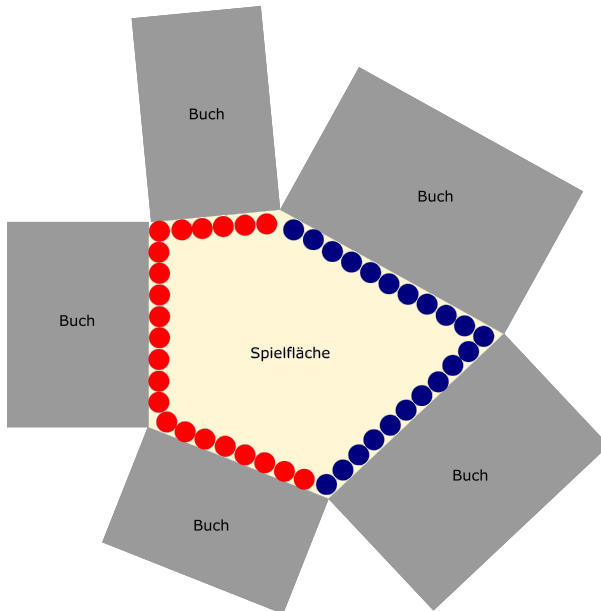


Abbildung 3: Phase 0.

*Es sollten identisch viele Steine von beiden Spieler*innen an die Ränder gelegt werden.*

Phase 1. Ist der Rand ausgelegt, beginnt Ihr abwechselnd Spielsteine an euren Bereich so anzulegen, dass sie den minimalen Abstand zueinander haben und möglichst viele direkte Nachbarn (d.h. Steine berühren sich) besitzen. So wächst euer Bereich in die Mitte des Spielbretts hinein. Ihr legt so lange abwechselnd Steine, bis Ihr so nah an den Bereich Eurer Mitspielerin bzw. Eures Mitspielers kommt, dass keine Steine mehr auf das Spielbrett passen. Nun sollte etwa in der Mitte des Spielfeldes eine Grenze mit einer kleinen Lücke zwischen den zwei Steingruppen (**Abb. 4**) entstehen.

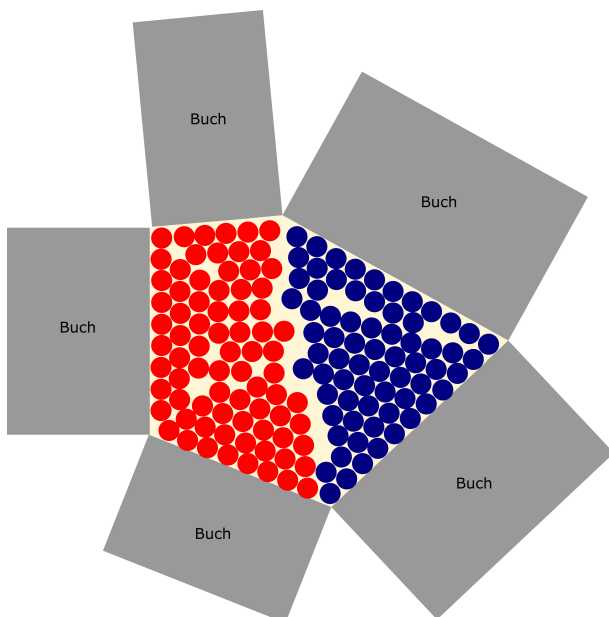


Abbildung 4: Mögliches Ende von Phase 1.

In der Mitte ist eine Grenze zwischen den Steingruppen entstanden.



Phase 2. Nun schaut Ihr Euch abwechselnd die Steine an der Grenze genauer an. Wählt dazu einen Stein an der Grenze auf der Seite eures Mitspielers*eurer Mitspielerin aus. Zählt die direkten Nachbarn, die dieser Stein besitzt. Nun schaut ihr Euch Eure Seite an: Könnt ihr auf eurer Seite eine Position finden, an der der Stein mehr direkt angrenzende Nachbarn hätte, dürft Ihr den ausgewählten Stein umdrehen und an dieser Position auf Eurer Seite anlegen (**Abb. 5**).

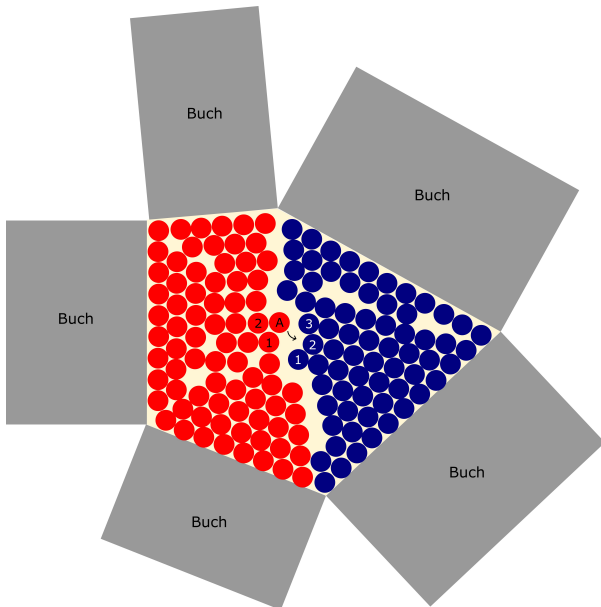


Abbildung 5: Phase 2a.

*Spieler*in Blau wählt Stein A auf der Gegenseite aus. Er/Sie zählt zwei direkte Nachbarn. Auf der blauen Seite könnte der Stein drei Nachbarn erhalten. Der Stein darf somit umgedreht und bei Blau angelegt werden.*

Könnt Ihr auf eurer Seite eine Position finden, an der der ausgewählte Stein gleich viele direkte Nachbarn hätte (**Abb. 6**) nehmt Ihr einen ungenutzten Spielstein und führt mit ihm einen Münzwurf durch. Zeigt der „Münzstein“ Eure Seite an, dürft Ihr den vorher ausgewählten Stein ebenfalls umdrehen und bei euch an der passenden Position anlegen.

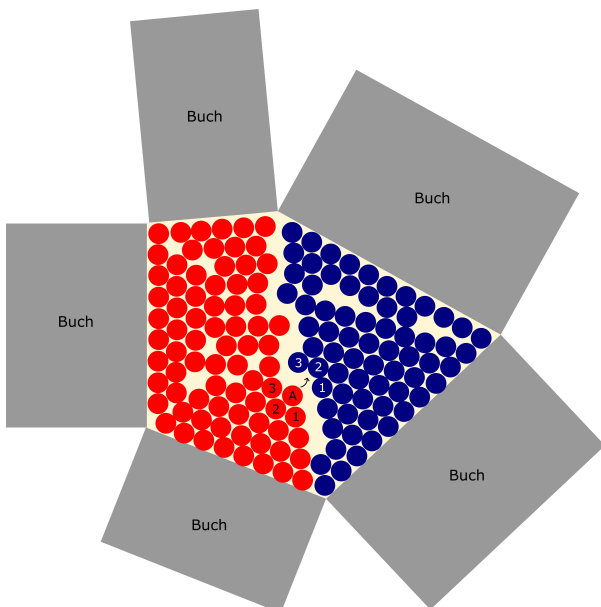


Abbildung 6: Phase 2b.

Spieler Blau erkennt auf der roten Seite Stein A mit 3 Nachbarn. Auf Seite Blau könnte er ebenso 3 Nachbarn besitzen. Es kann somit ein Münzwurf über die künftige Position des Steins durchgeführt werden.

In Phase 2 werden 20 Runden gespielt. In einer Runde ist jede*r einmal an der Reihe. Wer nach 20 Runden einen größeren Bereich, also mehr Steine besitzt als der*die Mitspieler*in, hat gewonnen.

Hinweise zum Spielablauf:

- Berührt ein Spielstein den Rand des Spielfeldes, zählt der Rand ebenfalls als ein Nachbar.
- Es dürfen keine Steine übereinandergestapelt werden.
- Auch an der Grenze zwischen beiden Steingruppen muss ein Stein, der die Seite wechselt, immer in die Lücke passen, ansonsten darf er nicht angelegt werden.
- Es dürfen nach Lust und Laune auch mehr als 20 Runden gespielt werden. Wichtig ist aber, dass es ein vorher festgelegtes Limit an Runden gibt, da es kaum möglich ist, dass das Spiel auf natürliche Weise endet.

Mathematisch-physikalischer Hintergrund des Spiels

Kristalle sind feste Körper, die aus vielen einzelnen Bausteinen, den Atomen bestehen. Diese ordnen sich nach festen, mathematischen Regeln zu einem dreidimensionalen Kristallgitter an. Das Kristallgitter modellieren wir in diesem Spiel zweidimensional mit den Spielsteinen auf dem Spielbrett. Jedes Atom sitzt in der Mitte eines Spielsteins. Zwischen zwei oder mehreren Atomen existiert eine Bindungsenergie, die abhängig von der Entfernung der Atome zueinander ist. Bei einer bestimmten Entfernung der Atome ist diese Energie minimal. Da Atome dazu bestrebt sind, sich möglichst energieminimal zueinander anzuordnen, nehmen die Atome diese „optimale Entfernung“ zueinander an (r_{\min} in **Abb. 7**). Im Spiel entspricht diese dem Durchmesser eines Steins, sodass bei direktem Kontakt zweier Steine die „optimale Entfernung“ erreicht wird. Im zweidimensionalen Raum können maximal drei Atome im minimalen Abstand zueinander angeordnet werden (**Abb. 7**).

Kristalle können ausgehend von verschiedenen „Kristallisationskeimen“ wachsen und sich zu größeren, zusammengesetzten Polykristallen zusammenschließen. Wir modellieren zwei Wachstumsbereiche mit den beiden verschiedenen Farben der Steine. Wir legen zu Beginn des Spiels die Ränder mit Steinen aus. Dies simuliert, dass bereits zwei Kristallbereiche vorliegen, die nun während des Spiels noch weiterwachsen. Im Spielverlauf kommt es dann zu dem Punkt an dem die zwei Farben sich in die Quere kommen und kein weiterer Stein mehr angelegt werden kann. Nun können Steine im Spiel die Farbe wechseln, wie auch Atome in einem Polykristall den Bereich wechseln können.

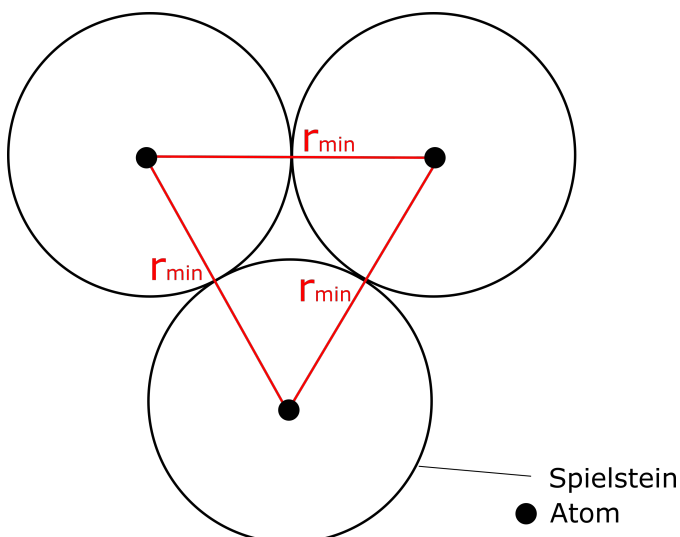


Abbildung 7: Energieoptimale Anordnung dreier Atome.

Wie schon beim Wachstum sind die Atome dazu bestrebt, den energie günstigsten Zustand zu erreichen. Kann ein Atom zu mehr Atomen im angrenzenden Bereich den energie optimalen Abstand r_{\min} annehmen als an seiner bisherigen Position, wechselt es die Position. Ist die Anzahl der direkten Nachbarn gleich, so entscheidet im Spiel der Münzwurf über den Verbleib des Steines. Auch in einem Kristall ist dieser Prozess zufallsbasiert und findet nur bei hohen Temperaturen statt. Durch diese Prozesse ist es möglich, dass ein Bereich auf Kosten des anderen Bereiches wächst, sich aber insgesamt ein energie günstigerer Zustand des Gesamtsystems einstellt. Somit sind am Spielende auch eigentlich beide Parteien gemeinsam siegreich und nicht nur die Partei mit mehr Spielsteinen.

Das Lennard-Jones-Potenzial:

Das Lennard-Jones-Potenzial ist ein mathematisches Modell, das die Wechselwirkungen zwischen Atomen oder Molekülen in einer Substanz beschreibt. Es wird üblicherweise zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den Atomen oder Molekülen in einem Kristall verwendet. Im Zusammenhang mit dem Kristallwachstum spielt das Lennard-Jones-Potenzial eine wichtige Rolle bei der Bestimmung der Stabilität und Struktur des Kristalls.

Wenn Atome oder Moleküle zusammenkommen, um einen Kristall zu bilden, ändert sich die potenzielle Lennard-Jones-Energie zwischen ihnen. Die Abhängigkeit der potenziellen Energie U vom Abstand R zweier Teilchen kann durch

$$U(R) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right)$$

beschrieben werden. Die Parameter σ und ε sind dabei experimentell zu bestimmende Materialparameter. Das Potential nimmt bei einem Gleichgewichtsabstand r_{\min} ein globales Minimum an (siehe **Abb. 8**). Die potenzielle Energie ist somit am geringsten, wenn sich die Teilchen (Atome oder Moleküle) in ihrer Gleichgewichtsposition im Kristallgitter befinden, und sie nimmt zu, wenn sich die Teilchen weiter voneinander entfernen. Das bedeutet, dass die Atome oder Moleküle dazu neigen, in Positionen zu bleiben, in denen die potenzielle Lennard-Jones-Energie am geringsten ist, was zur Stabilität des Kristalls beiträgt. Atome ordnen sich demnach mit diesem Abstand $r_{\min} = 1.12\sigma$ in einem Kristallgitter an [1].

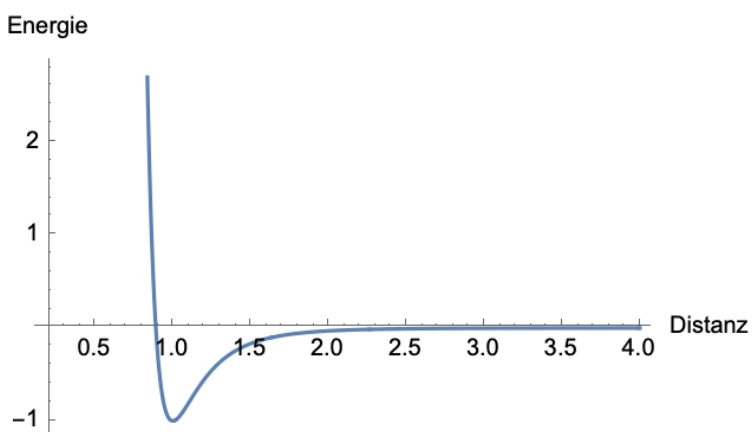


Abbildung 8: Abhängigkeit der Energie U von der Distanz R zweier Teilchen zueinander.



Im Forschungsauftrag des HCM wird der Gleichgewichtsabstand r_{\min} mit dem Durchmesser eines Spielsteins modelliert. Die Mitte des Spielsteins symbolisiert ein einzelnes Atom. Ordnet man die Spielsteine in ihrer dichtesten Packung an, so simuliert dies zweidimensional somit die Atome eines Kristallgitters, die sich im Abstand r_{\min} zueinander anordnen. Man erkennt, dass sich im zweidimensionalen euklidischen Raum maximal drei Atome mit paarweise minimalem Abstand zueinander anordnen können. Es gilt:

$$U(x, y, z) = e(|x - y|) + e(|y - z|) + e(|z - x|)$$

Wachsen nun, ausgehend von mehreren Kristallisationskeimen, die einzelnen Wachstumsbereiche mit homogener kristallographischer Ausrichtung zu einem Polykristall zusammen, können an den Grenzflächen komplexe Phasenübergänge stattfinden. Die Untersuchung der Verschiebung dieser Grenzflächen ist Gegenstand aktueller mathematischer Forschung. Oft werden diese komplexen Systeme durch einfachere makroskopische Modelle beschrieben. Interessante Fragestellungen sind die Entwicklung und Analyse effizienter Algorithmen, um das Verhalten numerisch zu simulieren [2] und der Vergleich zwischen verschiedenen makroskopischen Modellen, die die Anisotropie des mikroskopischen Kristallgitters berücksichtigen [3].

Vereinfacht werden die Phasenübergänge im HCM-Projekt durch zwei verschiedene Prozesse dargestellt. Kann ein Spielstein in einem anderen Bereich mehr direkte Nachbarn erhalten als in der bisherigen Phase, so wechselt er in den angrenzenden Bereich. Physikalisch gesehen bieten mehr direkte Nachbarn aufgrund des geringeren Lennard-Jones-Potenzials eine energetisch günstigere Konstellation. Kann kein „günstigerer Anknüpfungspunkt“ gefunden werden, wird nach „gleichstarken“ Positionen, also Positionen mit gleich vielen Nachbarn gesucht. Da physikalisch in diesem Falle stochastische Prozesse eine Rolle spielen, wird mit einem Spielstein ein Münzwurf durchgeführt, dessen Ausgang über den Verbleib des vakanten Steines entscheidet.

Es fällt auf, dass das Spiel in zwei Spielphasen unterteilt ist. Die erste Phase ist die „Wachstumsphase“, in der die Spielsteine, abwechselnd von verschiedenen Seiten und mit verschiedenen Farben auf das Spielbrett gelegt werden. Die zweite Phase ist die „Übergangsphase“, in der die Spielsteine die Bereiche wechseln können. Diese dauert für gewöhnlich länger als die erste Spielphase. Dies stimmt mit dem physikalischen Hintergrund überein, da die Phase des Kristallwachstums auch mit einer höheren Geschwindigkeit abläuft als die des Phasenwechsels.



Wie geht es weiter?

Angebote für Schulklassen und Kurse:

Im Anschluss an diesen Forschungsauftrag laden wir besonders interessierte Schulklassen und Kurse dazu ein, noch tiefer in die Materie einzusteigen. Wir freuen uns über eingereichte Erfahrungsberichte und Feedback zu diesem Forschungsauftrag. Dafür haben wir eine Kurzanleitung und weiterführende Informationen für Interessierte unter <https://www.faszination.uni-bonn.de/schule> veröffentlicht.

Nach Möglichkeit und Kapazität vermittelt das Argelander-Institut für Astronomie gemeinsam mit diversen Partner*innen individuelle Angebote (z.B. *Meet a Scientist*) für einzelne Einreichungen, um die Faszination unseres Universums live zu erleben. Diese Follow-Up-Aktionen finden ab 2024 beispielsweise vor Ort an der Schule oder im Umfeld der Universität Bonn statt.

Literaturverzeichnis

- [1] Kersten, P., Wagner, J., Tipler, P. A. & G. Mosca (2019): Moleküle. In: Tipler, P. A. et al. (Hrsg.) (2019). Physik für Studierende der Naturwissenschaften und Technik. Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 1293.
- [2] Laux, T. & Lelmi, J. (2022): De Giorgi's inequality for the thresholding scheme with arbitrary mobilities and surface tensions. Calc. Var. 61, 35. <https://doi.org/10.1007/s00526-021-02146-8>.
- [3] T. Laux, K. Stinson & C. Ullrich (2022): Diffuse-interface approximation and weak-strong uniqueness of anisotropic mean curvature flow, <https://arxiv.org/abs/2212.11939>.

Bildnachweise

Abbildung 1: Spielvorbereitung. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 2: Spielstein-Schablone. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 3: Phase 0. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 4: Ende Phase 1. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 5: Phase 2a. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 6: Phase 2b. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 7: Energieoptimale Anordnung dreier Atome. Abbildung von Fabian Weidt, Universität Bonn.

Abbildung 8: Abhängigkeit der Energie U von der Distanz R zweier Teilchen zueinander. Abbildung von Tim Laux, Universität Bonn.

Icon Kopfzeile und Seite 1: Kristall. Abbildung von Ulrike Syrakas, Universität Bonn.

Icons Seite 1: Uhr, Ausrufezeichen & Fragezeichen, Schere. Abbildungen von Lara Becker, Universität Bonn.



Impressum

„Die Mathematik des Kristallwachstums“ – ein Forschungsauftrag für Schüler*innen. Veröffentlichung der Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn im Rahmen des Wissenschaftsjahres 2023 „Unser Universum“ als Beitrag zum Exponat „Dem Universum auf der Spur“.

Stand: Juli 2023

Herausgeber:

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Regina-Pacis-Weg 3

53113 Bonn

Telefon: +49 (0) 228 73-0

E-Mail: kommunikation@uni-bonn.de

Internet: <https://www.uni-bonn.de>

Die Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn ist eine Körperschaft des öffentlichen Rechts. Sie wird durch den amtierenden Rektor gesetzlich vertreten. Der amtierende Rektor ist Prof. Dr. Dr. h. c. Michael Hoch.

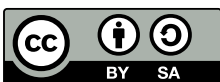
Zuständige Aufsichtsbehörde: Ministerium für Kultur und Wissenschaft des Landes Nordrhein-Westfalen, Völklinger Straße 49, 40221 Düsseldorf.

Umsatzsteuer-Identifikationsnummer gemäß § 27 a Umsatzsteuergesetz: DE 122119125.

Lizenzhinweis:

Soweit nicht anders angegeben, unterliegt dieses Dokument einschließlich Texten und Abbildungen der Lizenz Creative Commons Namensnennung-Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International (CC BY-SA 4.0, <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/legalcode>).

Eine vereinfachte Fassung ist verfügbar unter <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>.



Zitervorschlag:

„Die Mathematik des Kristallwachstums“ – ein Forschungsauftrag für Schüler*innen. Universität Bonn (Fabian Weidt, Stefan Hartmann und Tim Laux);

<https://www.faszination.uni-bonn.de/kristallwachstum>.

CC BY-SA 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/legalcode>).

Download:

<https://www.faszination.uni-bonn.de/kristallwachstum>