Topologische Grundlagen einer Klassifikation anorganischer Strukturen

Olaf Delgado Friedrichs
Universität Bielefeld
Fakultät für Mathematik
Postfach 100131
33501 Bielefeld

E-Mail: delgado@mathematik.uni-bielefeld.de

24. April 1998

1 Einleitung

Im folgenden soll es darum gehen, wie man *Pflasterungen*, also Zerlegungen einer Kugel, einer Ebene oder eines Raumes, deren Symmetrien eine kristallographische Punkt-, Ebenen- bzw. Raumgruppe bilden, durch die von Andreas Dress entwickelten Delaney-Symbole (siehe auch [Dre84], [DS84], [Dre86], [DS86], [Dre87], [DH87], [DH91], [DHM93]) beschreiben kann. Diese Beschreibung durch Delaney-Symbole ermöglicht es zum Beispiel, effiziente Datenstrukturen für die Verwaltung von Pflasterungsdaten mit dem Computer zu konstruieren und hat damit eine ganze Kategorie von Aufzählungssproblemen, die vorher kaum zu bewältigen waren, praktisch auf Knopfdruck lösbar gemacht. Solche Datenstrukturen wären aber beispielsweise auch als nützliches Werkzeug zur Suche in kristallographischen Datenbanken vorstellbar.

Als Einstieg möchte ich anhand von zwei „einfachen“ Beispielen einige der Anforderungen aufzeigen, die eine allgemein verwendbare Strukturbeschreibung für Pflasterungen erfüllen sollte.

Jeder, der sich ein bisschen mit Geometrie beschäftigt hat, kennt natürlich die sogenannten platonischen Körper. Das sind genau die Polyeder, die entstehen, wenn man eine Anzahl gleicher regelmässiger Vielecke so zusammenfügt, daß an jeder Ecke gleichviele dieser Vielecke anstossen. Wie schon die alten Griechen wussten, gibt es nur genau fünf Möglichekeiten, diese Aufgabe zu lösen, die zu den bekannten Körpern, nämlich Tetraeder, Würfel, Oktaeder, Dodekaeder und Ikosaeder, führen. Etwas weniger bekannt sind die sogenannten archimedischen Körper, welche sozusagen die naheliegendste Verallgemeinerung der platonischen Körper darstellen. Man erlaubt nun nämlich verschiedene Arten von regelmässigen Vielecken, verlangt aber, daß alle Ecken gleich aussehen müssen. Dies führt zu den bekannten dreizehn archimedischen Körpern und ausserdem zur unendlichen Folge der regulären Prismen und Antiprismen.

Soweit, so gut! Man betrachte sich aber einmal die zwei Polyeder in Abbildung 1. Beide bestehen offensichtlich aus jeweils 18 Quadraten und 8 gleichseitigen Dreiecken, wobei um jede Ecke herum jeweils drei Quadrate und ein Dreieck vorkommen. Der Polyeder auf der rechten Seite entsteht aus dem auf der linken, dem sogenannten Rhombenkuboktaeder, sozusagen durch Verdrehen der oberen Kappe, die aus einem Quadrat und dem umgebenden Ring aus Quadraten und Dreiecken besteht. Er erfüllt ebenfalls die Forderung, daß alle seine Ecken von der gleichen Gestalt sind. Aber natürlich sind nicht alle diese Ecken symmetrieäquivalent. Während der Rhombenkuboktaeder ja durch „Abschneiden“ von Ecken und Kanten aus dem Würfel hervorgeht, also dessen Symmetriegruppe $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ erbt, besitzt der „verdrehte Rhombenkuboktaeder“ die Symmetriegruppe $\overline{8}2m$ mit nur 16 Symmetrieoperationen, aber wie sein Verwandter natürlich immer noch 24 Ecken. Da er im allgemeinen nicht zu den archimedischen Körpern gezählt wird, schließen wir messerscharf, daß hier mit dem oben so salopp geforderten „gleich Aussehen“ wohl gemeint war, daß alle Ecken eines archimedischen Körpers symmetrieäquivalent sein müssen.

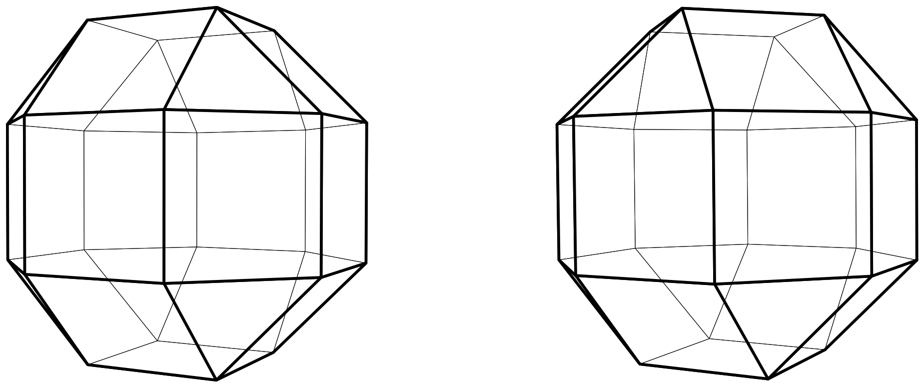

Abbildung 1: Der Rhombenkuboktaeder und eine pseudo-archimedische Variante

Mehr als die Definition der archimedischen Körper interessiert uns an diesem Beispiel aber die Tatsache, daß schon bei so einfachen Beispielen lokale Charakterisierungen nicht mehr ausreichen. Die Vorschrift „Baue einen Polyeder aus Quadraten und gleichseitigen Dreiecken, wobei immer drei Quadrate und ein Dreieck eine Ecke bilden“ ist schon nicht eindeutig. In diesem Beispiel war natürlich mit blossem Auge schnell zu sehen, daß die beiden Polyeder verschieden waren. So einfach ist aber auch das im allgemeinen nicht. Für eine Strukturbeschreibung einer Pflasterung möchte man ja von unwesentlichen Aspekten der tatsächlichen geometrischen Ausprägung absehen. So hindert keine globale Symmetriebedingung die Quadrate im äquatorialen Ring unseres pseudo-archimedischen Beispielpolyeders daran, sich alle gleichmässig ein wenig zu recken und damit zu Rechtecken zu werden. Die Kanten müssten auch nicht vollkommen gerade sein, sondern könnten, freilich immer im Einklang mit den vorgegebenen Symmetrien, gebogen, geschlängelt oder gar geknickt sein, ohne daß man gleich von einem völlig neuen und anderem Körper sprechen würde.

Etwas mathematischer formuliert: zwei Pflasterungen, zu denen in unserer Terminologie immer eine fest vorgegebene Symmetriegruppe dazugehört, heißen *kombinatorisch äquivalent*, wenn es eine Verformung (für der Topologie Kundige: einen Homöomorphismus) der einen in die andere gibt, welche auch die Symmetriegruppe der einen Pflasterung in die Symmetriegruppe der anderen übergehen läßt. Insbesondere müssen also die beiden Symmetriegruppen vom gleichen geometrischen Typ sein.

Für zwei gegebene Pflasterungen eine solche Verformung der einen in die andere zu finden, kann unter Umständen sehr schwer sein. Noch schwerer kann es sein, zu beweisen, daß eine solche Verformung nicht existiert. Die zwei Pflasterungen in Abbildung 2 wurden uns vor einigen Jahren von dem Mathematiker Professor Collatz geschickt, der uns bat, mit Hilfe unserer Methoden zu testen, ob sie kombinatorisch äquivalent im Sinne der obigen Definition seien.

Man kann natürlich zunächst versuchen, diese Aufgabe mit Hilfe der offensichtlichen Invarianten anzugehen. Es zeigt sich dann beispielsweise, daß in jeder der beiden Pflasterungen nur Vierecke und Achtecke vorkommen, (als Ecken zählen alle Punkte, an denen mindestens drei Pflastersteine aufeinandertreffen), daß immer alle Achtecke und alle Vierecke zueinan-

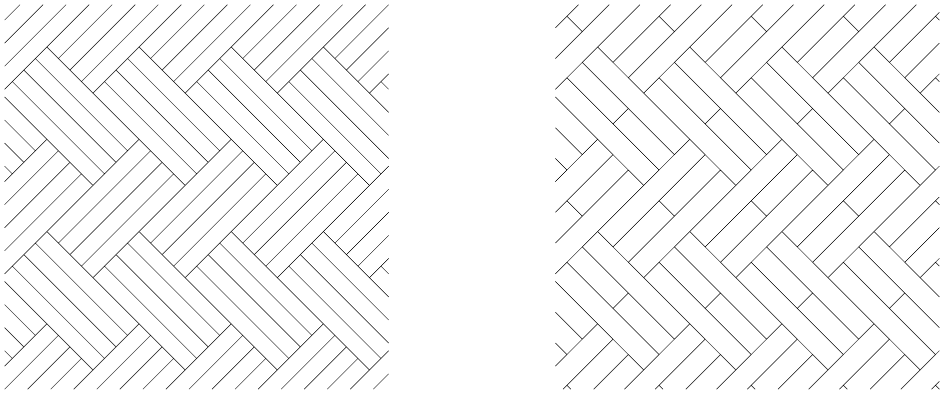

Abbildung 2: Sind diese zwei Pflasterungen (von Prof. Collatz) kombinatorisch äquivalent?

der symmetrieäquivalent sind, und so weiter. Collatz fand jedenfalls keine Invarianten, mit Hilfe derer er die beiden Pflasterungen voneinander unterscheiden konnte. Aber sind sie nun kombinatorisch äquivalent oder nicht? Wie kann man eine Verformung finden, die das linke in das rechte Bild überführt oder beweisen, daß keine solche Verformung existieren kann?

Wir werden zu dieser konkreten Frage später zurückkehren und sehen, wie sie mit Hilfe von Delaney-Symbolen praktisch gelöst werden kann.

2 Delaney-Symbole

Die Konstruktion des Delaney-Symbols einer vorgegebenen Pflasterung soll am Beispiel der in Abbildung 3 dargestellten „archimedischen" bzw. „keplerschen" Pflasterung der Ebene erläutert werden. Sie ist aus gleichseitigen Dreiecken und Sechsecken so zusammengesetzt, daß wieder alle Ecken unter der Operation der Symmetriegruppe äquivalent sind. Solche Analoga der archimedischen Körper in der Ebene sind erstmals von Kepler untersucht und vollständig aufgezählt worden.

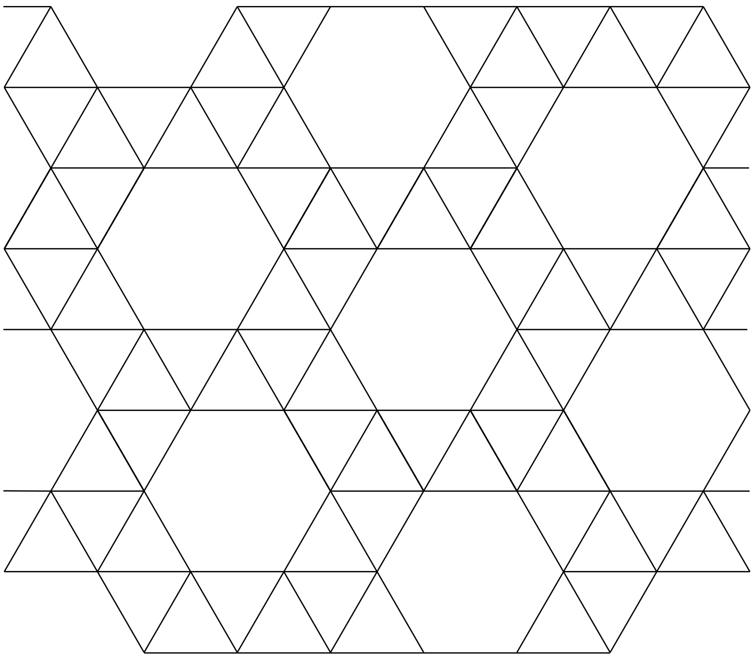

Abbildung 3: Eine „archimedische" Pflasterung aus gleichseitigen Dreiecken und Sechsecken

Der erste und grundlegende Schritt für die Konstruktion des Delaney-Symbols ist das sogenannte baryzentrische Unterteilen der vorgegebenen Pflasterung. Man kann ganz allgemein definieren, was unter einer Unterteilung einer Pflasterung zu verstehen sein soll, nämlich eine neue Pflasterung, deren Pflastersteine jeweils ganz in Pflastersteinen der alten enthalten sein müssen und die mit den gegebenen Symmetrien der alten Pflasterung verträglich ist. Letzteres bedeutet, daß das Bild jedes Pflastersteins der Unterteilung unter einer Symmetrie der alten Pflasterung wieder ein Pflasterstein der Unterteilung ist.

Die baryzentrische Unterteilung gewinnt man auf sehr einfache Weise, nämlich, indem man je einen Punkt im Innern jedes Pflastersteins und je einen Punkt auf jeder Kante der Pflasterung wählt und dann jeden Pflasterstein unterteilt, indem man den gewählten Punkt in seinem Inneren mit den Ecken und den gewählten Punkten auf seinen Kanten verbindet. Dies läßt sich anhand eines Bildes sicher viel einfacher klarmachen als mit Worten. In Abbildung 4 zeigen wir daher nochmals einen Ausschnitt unserer Beispielpflasterung zusammen mit einer baryzentrischen Unterteilung. Zu beachten ist, daß die neuen Punkte in den Pflastersteinen und auf den Kanten sowie die neuen Kanten so gewählt wurden, daß die gewonnene Unterteilung mit den Symmetrien der ursprünglichen Pflasterung verträglich ist.

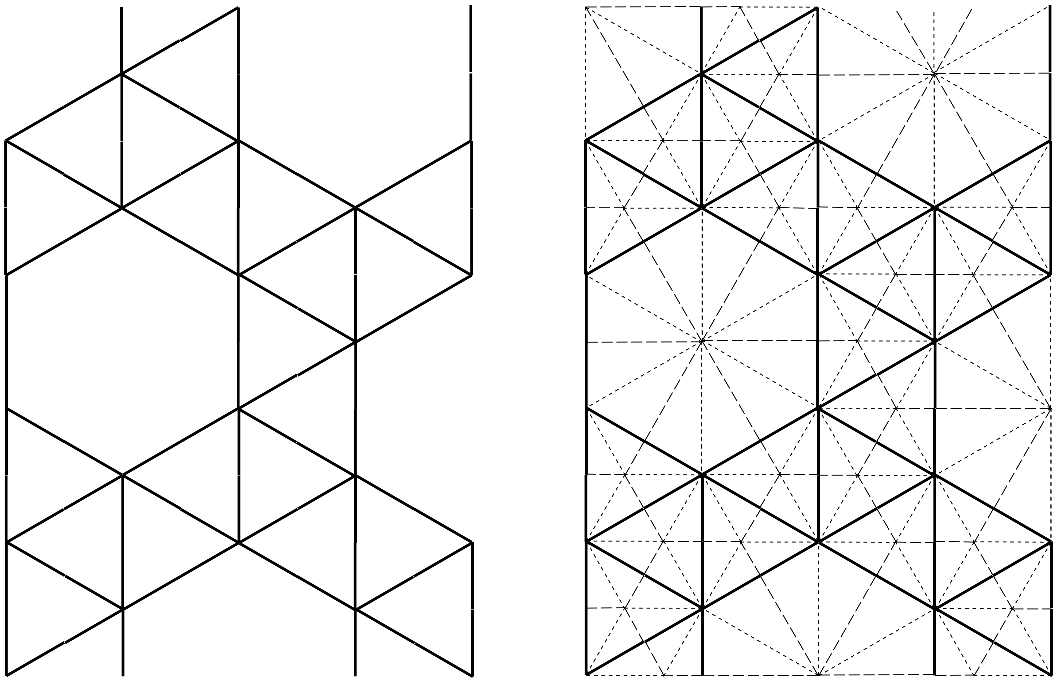

Abbildung 4: Konstruktion der baryzentrischen Unterteilung

Noch eine kurze Bemerkung zum Begriff „Ecke“: in unserer Betrachtungsweise von Pflasterungen sind Ecken immer topologisch definiert. Eine Ecke einer Pflasterung ist jeder Punkt, der auf dem Rand von mindestens drei Pflastersteinen liegt. Die bekannte „Ziegelsteinpflasterung“ zum Beispiel, die aus Schichten gegeneinander versetzter Rechtecke besteht, ist topologisch gesehen eine Pflasterung durch Sechsecke, nicht durch Vierecke. Es ist wichtig, dies so zu definieren, denn nur so ist sichergestellt, daß bei einer Verformung nicht plötzlich Ecken entstehen oder verschwinden.

Die im Bild gewählten unterschiedlichen Linientypen für die Kanten der baryzentrischen Unterteilung sind nicht zufällig. Durchgezogene Kanten stammen von der ursprünglichen Pflasterung, während Kanten, die eine Ecke mit einem Flächen-„zentrum“ verbinden, gepunktet und solche, die ein Kanten-„zentrum“ mit einem Flächenzentrum verbinden, gestrichelt dargestellt sind. Man erkennt dann, daß die Pflastersteine der baryzentrischen Unterteilung sämtlichst Dreiecke sind und jedes dieser Dreiecke genau eine durchgezogene, eine gepunktete und eine gestrichelte Randkante besitzt. Diese Eigenschaft ist sehr nützlich, denn sie ermöglicht es, die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Dreiecken sehr einfach anzugeben. Jedes Fläche der baryzentrischen Unterteilung hat eben je genau einen Nachbarn entlang einer gestrichelten, gepunkteten und durchgezogenen Kante. Um Verwechslungen zu vermeiden, werden wir diese Flächen von nun an als Kammern bezeichnen.

Man sieht sehr leicht, daß keine nichttriviale Symmetrie der ursprünglichen Pflasterung eine Kammer auf sich selbst abbilden kann. Jede Kammer grenzt ja per Konstruktion an genau eine Ecke, genau eine Kante und genau eine Fläche dieser Pflasterung, und die Symmetrien müssen jeweils Ecken auf Ecken, Kanten auf Kanten und Flächen auf Flächen abbilden. Es bliebe der angenommen Symmetrie dann keine andere Möglichkeit, als jede der drei Ecken der Kammer auf sich selbst abzubilden, was unter den möglichen Symmetrien natürlich nur die identische Abbildung vermag.

Auf ähnliche Weise kann man sich klarmachen, daß die Nachbarschaftsbeziehungen mit den Symmetrien verträglich sind, das heißt, daß zwei Kammern, die entlang einer gestrichelten, gepunkteten oder durchgezogenen Kante benachbart sind, durch jede Symmetrie wieder auf entlang einer Kante der gleichen Art benachbarte Kammern abgebildet werden.

Wir wollen nun mit Hilfe der baryzentrischen Unterteilung eine kompakte Beschreibung der ursprünglichen Pflasterung gewinnen. Dazu teilen wir zunächst die Menge der Kammern in Äquivalenzklassen bezüglich der gegebenen Symmetriegruppe ein. Wir bezeichnen also alle vorkommenden Kammern mit Buchstaben, wobei Kammern, die durch eine der Symmetrieoperationen ineinander überführt werden können, den gleichen Buchstaben erhalten. War die Symmetriegruppe, wie wir anfangs vorausgesetzt haben, eine Raumgruppe bzw. im Fall von Pflasterungen der Kugel eine Punktgruppe und können die Pflastersteine nicht beliebig klein werden, so kommen wir immer mit endlich vielen Buchstaben aus.

Abbildung 5 zeigt am bekannten Beispiel die oben beschriebene Klasseneinteilung. Man kann übrigens immer eine (zusammenhängende) asymmetrische Einheit finden, die aus lauter ganzen Kammern zusammengesetzt ist, wie zum Beispiel die in der Abbildung grau unterlegte.

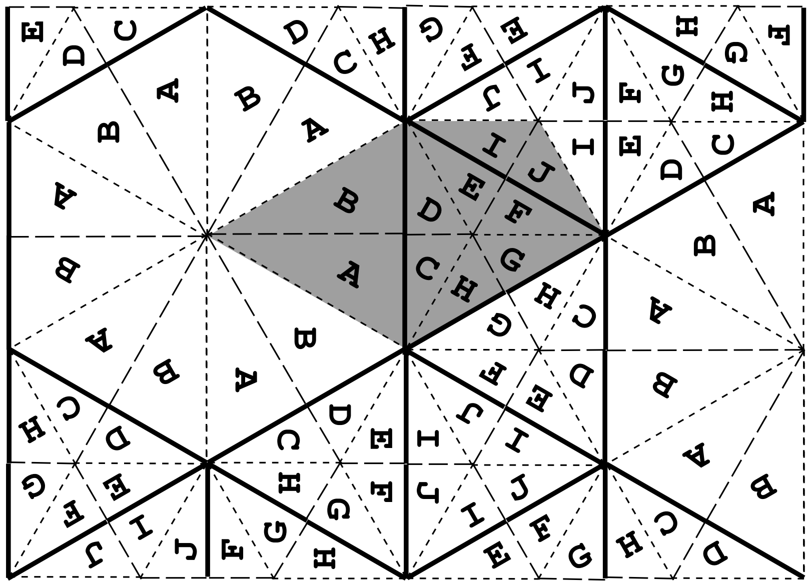

Abbildung 5: Klassen von Kammern und asymmetrische Einheit

Da die Kammern und ihre Nachbarschaftsbeziehungen mit den Symmetrien verträglich sind, kann man diese Symmetrien sozusagen „herauskürzen“. Wir gehen, mathematisch gesprochen, zum Bahnen- oder Quotientenraum über, indem wir für jede Klasse von Kammern nur noch einen Repräsentanten betrachten und die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Kammern auf die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Klassen reduzieren. Der gepunktete Nachbar einer Kammer vom Typ A beispielsweise ist immer vom Typ B. Wir verkleben also die Repräsentanten der Klassen A und B entlang ihrer gepunkteten Kante. Man kann sich dies ganz gut verbildlichen, indem man die oben gezeigte asymmetrische Einheit betrachtet und sich diese, wie in Abbildung 6 angedeutet, als einen Schnittbogen vorstellt, an dem noch gewisse Randteile miteinander zu verkleben sind. Diese noch notwendigen Verklebungen sind durch die hellen „Laschen“ am Rand gekennzeichnet.

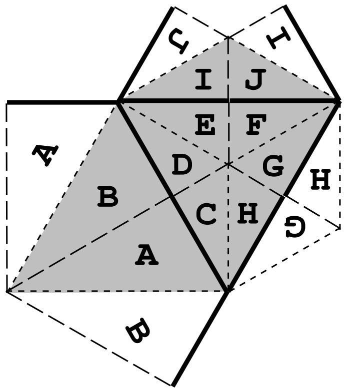

Abbildung 6: Ein „Bastelbogen“ für den Bahnenraum

Ein solches Bild ist sicher sehr anschaulich. Für die Darstellung im Rechner eignet sich aber eine symbolische Darstellung besser. Diese Darstellung, der sogenannte *Delaney-Graph*, beinhaltet die Aufzählung der vorhandenen Kammerntypen und die Angabe der drei jeweiligen Nachbartypen jedes Kammerntyps. Für unser Beispiel bekäme der Rechner also eine Tabelle wie in Abbildung 7 präsentiert.

	Nachbar an		
Kammer	gestrichelt	gepunktet	durchgezogen
A	B	B	C
B	A	A	D
C	D	H	A
D	C	E	B
E	F	D	I
F	E	G	J
G	H	F	H
H	G	C	G
I	J	J	E
J	I	I	F

Abbildung 7: Der Delaney-Graph in Tabellenform

Reicht nun eine solche Tabelle aus, um eine vorgegebene Pflasterung eindeutig zu beschreiben? Nein, noch nicht ganz! Dies wird deutlich, wenn man sich den in Abbildung 8 abgebildeten archimedischen Körper anschaut. Konstruiert man nämlich seinen Delaney-Graphen, so stellt sich heraus, daß dieser identisch zu dem unserer ebenen Beispielpflasterung ist. Vielleicht sollte man hier anmerken, daß beim Vergleich zweier Delaney-Graphen natürlich nicht einfach zwei Tabellen auf Gleichheit untersucht werden können. Man muß vielmehr nachsehen, ob die im ersten Delaney-Graphen vorkommenden Bezeichnungen für die Kammerntypen so auf die Kammerntypen des zweiten Delaney-Graphen verteilt werden können, daß sich nach entsprechender Anpassung der Zeilen der zweiten Tabelle eine Übereinstimmung mit der ersten ergibt. Ein Computer kann das ziemlich flott testen, denn es gibt tatsächlich nur wenig Freiheiten für diese Umbenennung. Um nicht allzu große Delaney-Graphen ohne Computer zu vergleichen, bietet es sich an, die Graphen, wie weiter unten gezeigt, als Diagramm hinzuzeichnen und dann zu vergleichen. Dabei ist allerdings große

Sorgfalt angebracht, denn der gleiche Graph kann unterschiedlich gezeichnet sehr verschieden aussehen.

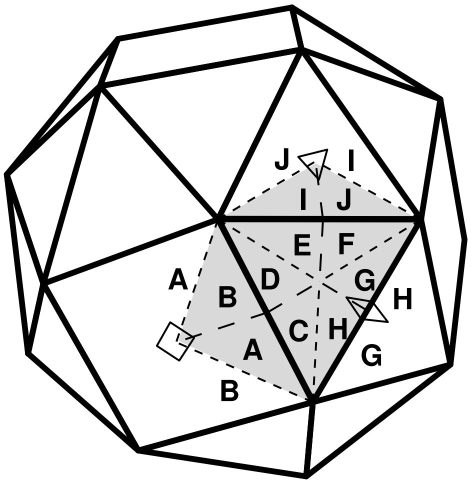

Abbildung 8: Ein archimedischer Körper mit baryzentrisch unterteilter asymmetrischer Einheit

Im Fall unserer zwei Beispielspflasterungen haben wir natürlich die Kammernbezeichnungen gleich „richtig“ gewählt, so daß wir die Gleichheit ihrer Delaney-Graphen unmittelbar erkennen können. Es fehlt also noch ein Quentchen Information, um diese beiden Pflasterungen zu unterscheiden. Nun, ein Unterschied fällt sofort ins Auge. Wo wir in der ebenen Pflasterung Sechsecke sehen, enthält der archimedische Körper Quadrate. Die Beispiele unterscheiden sich also durch einige ihrer Flächengrade. Durch einfaches Dualisieren sieht man, daß ein Unterschied der Eckengrade ebenso denkbar wäre. Dies wird berücksichtigt, indem man im Delaney-Graphen zu jedem Kammerntyp noch den Grad der Fläche, die einen Vertreter dieses Kammerntyps enthält sowie den Grad (also die Anzahl der angrenzenden Flächen) der Ecke notiert, an den dieser Vertreter angrenzt. Wir können dies übrigens deshalb bedenkenlos tun, weil Flächen- wie Eckengrade wieder symmetrie-invariant sind.

Der ergänzte Delaney-Graph für die ebene Beispielpflasterung, den wir als deren *Delaney-Symbol* bezeichnen, ist in Tabellenform in Abbildung 9 zu sehen. Das Delaney-Symbol des sphärischen Beispiels sieht fast genau so aus, nur sind die Sechsen in den zwei obersten Zeilen durch Vieren zu ersetzen.

	Nachbar an				
Kammer	gestrichelt	gepunktet	durchgezogen	Flächengrad	Eckengrad
A	B	B	C	6	5
B	A	A	D	6	5
C	D	H	A	3	5
D	C	E	B	3	5
E	F	D	I	3	5
F	E	G	J	3	5
G	H	F	H	3	5
H	G	C	G	3	5
I	J	J	E	3	5
J	I	I	F	3	5

Abbildung 9: Das Delaney-Symbol in Tabellenform

Zur besseren Veranschaulichung bietet es sich an, Delaney-Symbole in Form von Diagrammen wie in Abbildung 10 darzustellen. Jeder Kammerntyp ist hier als Rechteck dargestellt, in dem der zugeordnete Flächen- und Eckengrad eingetragen sind. Die Nachbarschaftsbeziehung sind durch verbindenden Linien im entsprechenden Strichtyp dargestellt.

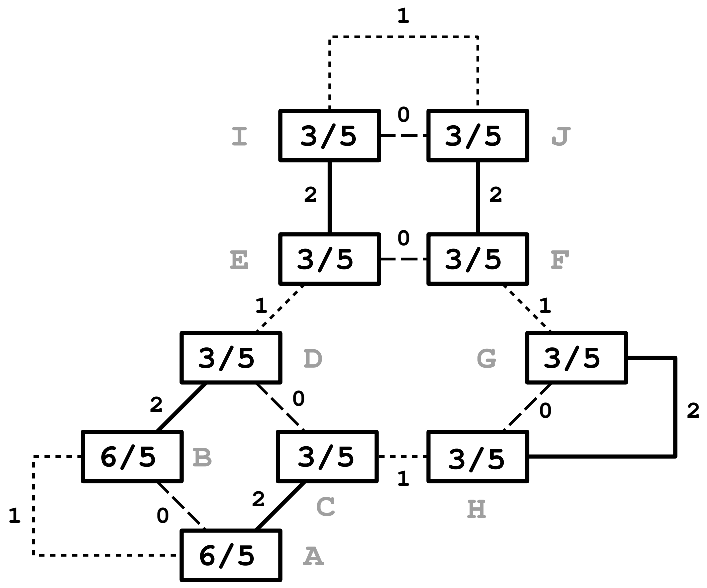

Abbildung 10: Das Delaney-Symbol als Diagramm

Es gibt eine Handvoll offensichtlicher Bedingungen, die jedes Delaney-Symbol einer Pflasterung erfüllen muß, und die wir darum in die Definition von Delaney-Symbolen mit aufnehmen:

- Geht man von irgendeinem Kammerntyp ausgehend zum Nachbarn entlang irgendeiner Kantenart und dann zu dessen Nachbarn entlang der gleichen Kantenart, so kommt man wieder bei der ursprünglichen Kammer an.
- Für jeden Kammerntyp ist der gestrichelte Nachbar des durchgezogenen Nachbarn identisch mit dem durchgezogenen Nachbarn des gestrichelten Nachbarn.
- Der Flächengrad jeder Kammerntyps ist identisch mit dem Flächengrad seiner gepunkteten und gestrichelten Nachbarn.
- Der Eckengrad jedes Kammerntyps ist identisch mit dem Eckengrad seiner gepunkteten und durchgezogenen Nachbarn.
- Läuft man in irgendeinem Kammerntyp los und geht wiederholt zum gepunkteten Nachbarn des gestrichelten Nachbarn über und zwar so viele Male, wie der für diesen Kammerntyp eingetragene Flächengrad beträgt, so kommt man schließlich wieder in der Ursprungskammer an.
- Entsprechendes gilt, wenn man gepunktete und durchgezogene Nachbarn und statt des Flächengrades den Eckengrad benutzt.

Jede Tabelle der in Abbildung 9 gezeigten Form, welche diese zusätzlichen Bedingungen erfüllt, wird als Delaney-Symbol bezeichnet.

3 Einige Eigenschaften von Delaney-Symbolen

Die brennendste Frage zuerst: reichen denn diese Delaney-Symbole nun aus, um Pflasterungen bis auf die oben definierte kombinatorische Äquivalenz eindeutig zu charakterisieren?

Ja, das tun sie. Dies ist natürlich die wichtigste Eigenschaft von Delaney-Symbolen überhaupt, die ihre weitreichende Anwendbarkeit garantiert. Es gilt das folgende mathematische Theorem:

Zwei Pflasterungen sind genau dann kombinatorisch äquivalent, wenn ihre Delaney-Symbole isomorph, d.h. gleich bis auf Umbenennung der Kammerntypen, sind.

Es gibt also eine ein-eindeutige Beziehung zwischen Delaney-Symbolen und Pflasterungen, oder zumindest kombinatorischen Typen von Pflasterungen.

Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß die oben beschriebene Konstruktion von Delaney-Symbolen auch in höheren Dimensionen in analoger Weise funktioniert und daß das obige Theorem auch für solche höherdimensionalen Symbole gültig bleibt.

Kann man nun einfach eine beliebige Tabelle mit Nachbarn, Flächengraden und Eckengraden aufschreiben, sicherstellen, daß sie den oben aufgezählten Bedingungen genügt und dann erwarten, daß diese Tabelle eine Pflasterung beschreibt? Anders ausgedrückt: ist jedes Delaney-Symbol das Delaney-Symbol einer Pflasterung? Die Antwort: bis auf ganz wenige Ausnahmen ist das für zweidimensionale Delaney-Symbole so. Um die Antwort zu präzisieren, müssen wir die sogenannte *Krümmung* eines (zweidimensionalen!) Delaney-Symbols definieren. Es sei $\mathcal{D}$ die Menge aller Kammerntypen und für einen Kammerntyp D bezeichne $f(D)$ den Flächengrad und $e(D)$ den Eckengrad. Dann gilt für die Krümmung K des Symbols:

$$K := \sum_{D \in \mathcal{D}} \frac{1}{f(D)} + \frac{1}{e(D)} - \frac{1}{2}$$

Es gilt nun folgendes:

Jedes Delaney-Symbol mit Krümmung 0 *kommt von einer Pflasterung der euklidischen Ebene (d.h. die Symmetrien sind Isometrien bezüglich der üblichen, euklidischen Metrik).*

Jedes Delaney-Symbol mit negativer Krümmung kommt von einer Pflasterung der hyperbolischen Ebene.

Ein Delaney-Symbol mit positiver Krümmung kommt genau dann von einer Pflasterung der Sphäre, wenn für jede im Delaney-Symbol kodierte Drehung vom Grad n der Wert

$$\frac{4}{K \cdot n}$$

eine natürliche Zahl ist. Alle Delaney-Symbole positiver Krümmung, welche diese Bedingung nicht erfüllen, kommen nicht von Pflasterungen.

Der Fall positiver Krümmung, genauer gesagt die Zusatzbedingung für Delaney-Symbole von sphärischen Pflasterungen (d.h. Pflasterungen einer Kugeloberfläche), bedarf einer näheren Erklärung. Wie genau sind Grade von Drehungen im Delaney-Symbol kodiert und welche Bewandnis hat es mit dem seltsamen Bruch, der eine ganze Zahl sein muß? Zunächst einmal: der Wert $4/K$ entspricht für sphärische Pflasterungen genau der Größe der Symmetriegruppe. Das Delaney-Symbol des Dodekaeders beispielsweise müßte demnach die Krümmung $K = 4/120 = 1/30$ haben. Dies ist auch der Fall, denn wie man sich leicht überlegt, hat dieses Symbol nur genau einen Kammerntyp, die Krümmung ist also $1/3 + 1/5 - 1/2 = 10/30 + 6/30 - 15/30 = 1/30$.

Da die von einer Drehung erzeugte Gruppe eine Untergruppe der vollen Symmetriegruppe ist, deren Größe genau mit dem Grad der Drehung übereinstimmt, muß nach bekannten

Gesetzen der Gruppenthoerie der Grad dieser Drehung ein Teiler der Gruppenordnung sein. Dies erklärt die Bedingung $4/(K \cdot n) \in \mathbb{N}$. Es bleibt die Frage, wie man aus dem Delaney-Symbol den Grad einer solchen Drehung abliest. Dies ist aber sehr einfach. Man schaue sich Abbildung 5 noch einmal genau an. Geht man von einer Kammer des Typs A zu deren gestrichelten Nachbarn, also B und von dort zum gepunkteten Nachbarn, landet man wieder bei Kammer A. Um den Flächenmittelpunkt einmal zu umrunden, muss man dies genau viermal tun, und dies bedeutet eben, daß dort ein Drehpunkt vom Grade vier vorliegt. Man teilt also jeweils die im Delaney-Symbol notierten Flächen- bzw. Eckengrade durch die Anzahl der „gepunktet-gestrichelt" bzw. „gepunktet-durchgezogen" Doppelschritte, die man braucht, um im Symbol wieder zum Ausgangspunkt zu gelangen und erhält dann den Grad der Drehung am entsprechenden Flächenzentrum bzw. an der entsprechenden Ecke. Um Drehungen an Kantenmittelpunkten aufzuspüren, teilt man entsprechend zwei durch die Anzahl der „gestrichelt-durchgezogen" Doppelschritte.

An der bekannten Beispielspflasterung aus Dreiecken und Sechsecken durchgeführt erhalten wir aus dem Symbol die Drehgrade 6 für die Fläche, in der A und B liegen, 3 für die Fläche, in der I und J liegen, und 1 für die dritte Fläche. Für die Ecken erhalten wir nur den Drehgrad 1, dafür aber für den Mittelpunkt der Kante, an der G und H liegen, den Grad 2. Man versuche nach Möglichkeit, sich dies anhand von Abbildung 10 klarzumachen und erst anschließend anhand der Pflasterung zu überprüfen.

Man könnte übrigens anstatt der Flächen- und Eckengrade diese Drehgrade im Delaney-Symbol verwenden, was mathematisch völlig gleichwertig wäre und sehr viel anschaulicher ist, wenn man modifizierte Pflasterungen mit gleicher Symmetrie konstruieren möchte. Die Verwendung der Flächen- und Eckengrade hat aber in anderer Fällen Vorteile und ist nicht zuletzt aus „historischen" Gründen in den meisten Texten zu Delaney-Symbolen zu finden.

4 Beispiele und Anwendungen

Wie versprochen, soll nun die Frage nach der Äquivalenz der beiden Collatzschen Pflasterungen aus Abbildung 2 beantwortet werden. Aufgrund des bisher Gesagten sollte es prinzipiell für niemanden mehr ein Problem sein, die Frage selbst zu beantworten. Man muß nur die Delaney-Symbole der zwei Pflasterungen ermitteln, was eine gewisse Sorgfalt, insbesondere bei der Einteilung der Kammern in Symmetrieklassen erfordert, und dann testen, ob die Delaney-Symbole äquivalent sind. Letzteres kann ein wenig mühsam werden, man kann sich allerdings die Arbeit wesentlich erleichtern, wenn man verschiedene Eigenschaften von Delaney-Symbolen ausnutzt.

Es soll ja eine Abbildung der Kammerntypen des ersten Symbols auf die Kammerntypen des zweiten Symbols gefunden werden, die Nachbarn entlang gestrichelter, gepunkteter bzw. durchgezogener Kanten auf Nachbarn entlang ebensolcher Kanten abbildet und die außerdem einen Kammerntyp immer nur auf einen solchen mit gleichem Ecken- und Flächengrad abbildet. Weil Delaney-Graphen immer zusammenhängend sind, man also durch wiederholtes Überqueren von Kanten von jedem Kammerntyp zu jedem anderen gelangen kann, reicht es, für eine fest gewählte Kammer des ersten Symbols alle Möglichkeiten zu testen, sie auf irgendeine Kammer des zweiten Symbols abzubilden. Die Bilder aller anderen Kammern sind dann erzwungen, und es ist zu testen, ob sich irgendwelche Konflikte, also Widersprüche zu den oben angegebenen Bedingungen für die Abbildung ergeben. Im vorliegenden Fall hätten beide Delaney-Symbole jeweils 24 Elemente, so daß man höchstens 24 mögliche Abbildungen testen muß. Es gibt aber zum Beispiel in jedem der Symbole nur genau einen Kammertyp, dessen Flächengrad vier ist und dessen durchgezogener identisch mit dem gestrichelten Nachbarn ist (was bedeutet, daß auf den Mittelpunkten der Kanten, zu der die Kammern dieses Typs gehören, Drehungen vom Grade zwei auftreten). Man muß also nur noch testen, ob man eine vernünftige Abbildung von Delaney-Symbolen erhält, wenn man diese Kammerntypen aufeinander abbildet.

Um es kurz zu machen: die Antwort ist Ja. Die zwei Collatzschen Pflasterungen sind tatsächlich äquivalent. Sobald wir dies sicher wußten, tauchte natürlich die Frage auf, wie eine Verformung konkret aussehen könnte, mit der die eine in die andere Pflasterung überführt wird. Zum Glück gab es damals bereits eine Vorform des Programms RepTiles. RepTiles läuft (inzwischen) auf Apple Macintosh Rechnern, kann zu vorgegebenen Delaney-Symbolen passende Pflasterungen konstruieren und erlaubt auch, diese nach dem eigenen Geschmack zu verformen und umzugestalten. Was RepTiles zunächst aus dem Delaney-Symbol der Pflasterung(en) von Collatz machte, sah ganz anders aus, nämlich ungefähr so wie in Abbildung 11.

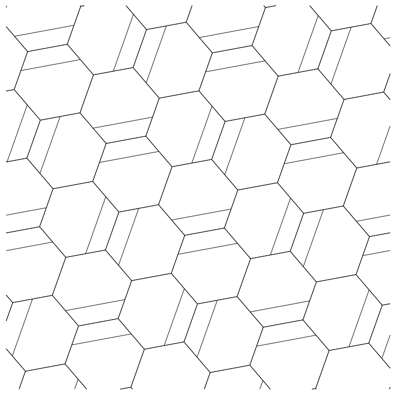

Abbildung 11: Die Collatzsche Pflasterung nach RepTiles

Der Versuch, mit Hilfe von RepTiles die eine Pflasterung freihändig in die andere zu verformen, führte zu scheußlichen Resultaten. Es wurde also ein neues kleines Programm geschrieben, das die Eckkoordinaten interpolierte und so beliebig viele Zwischenformen erzeugen konnte. Dies führte allerdings dazu, daß Kanten zu Ecken degenerierten, was natürlich nicht erlaubt war. Unter Zuhilfenahme der von RepTiles produzierten Variante der Pflasterungen und einer mit der Interpolation synchronisierten Drehung entstand schließlich die in Abbildung 12 gezeigte Sequenz. Um die Verformung einzelner Bildteile besser sichtbar zu machen, wurden einige der Pflastersteine unterschiedlich eingefärbt.

Eine wichtige Anwendung für die Delaney-Symbole waren und sind natürlich Aufzählungsfragen. Zunächst mal: kann man eigentlich alle Pflasterungen der Ebene vollständig aufzählen? Nein, zumindest nicht in Form einer Liste, denn es gibt, wie man sich schnell klarmachen kann, unendlich viele davon, selbst, wenn wir uns wie hier nur für die kombinatorischen Äquivalenzklassen interessieren. Man beginne beispielsweise mit irgendeiner Pflasterung, deren Pflastersteine asymmetrische Einheiten einer kristallographischen Ebenengruppe sind. Diese asymmetrischen Einheiten kann man fortgesetzt in beliebig viele Pflastersteine aufteilen und erhält so eine unendliche Schar von immer komplizierteren Pflasterungen, die alle unterschiedlich viele Typen, d.h. Äquivalenzklassen bzgl. der Symmetrieäquivalenz, von Flächen haben und damit offensichtlich alle wirklich verschieden voneinander sind.

Wir können aber diese unendliche Vielfalt von Möglichkeiten auf verschiedene Weisen strukturieren und zugänglich machen. Zunächst einmal unterscheiden wir Pflasterungen danach, wieviele verschiedene Typen von Pflastersteinen in ihnen vorkommen. Genauer: wir nennen eine Pflasterung *isohedral*, wenn alle ihre Pflastersteine untereinander symmetrieäquivalent sind. Wir nennen eine Pflasterung k*-isohedral* für eine natürliche Zahl k, wenn die Menge der Pflastersteine in genau k Äquivalenzklassen bezüglich der Symmetrieäquivalenz zerfällt, wenn es also k Pflastersteine gibt, von denen keiner durch eine Symmetrie der Pflasterung in irgendeinen der anderen überführt wird, jeder weitere Pflasterstein der Pflasterung

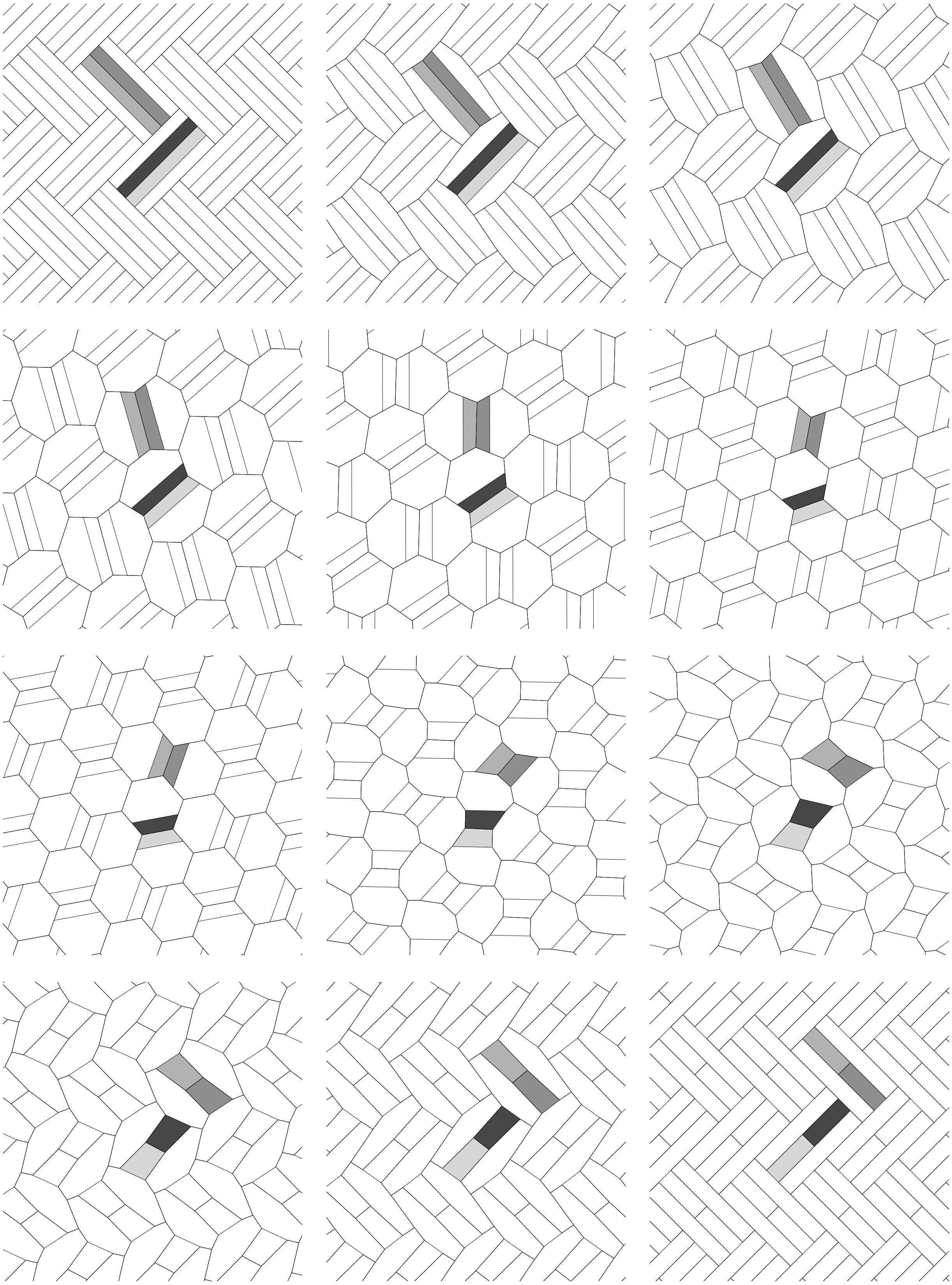

Abbildung 12: Die Metamorphose der Collatzschen Pflasterung

aber Bild eines dieser k Prototypen unter einer der Symmetrien ist.

Man kann mathematisch beweisen, daß das Delaney-Symbol einer k-isohedralen Pflasterung der (euklidischen) Ebene höchstens $12 \cdot k$ Elemente, also Kammerntypen, enthalten kann. Gibt man irgendeine natürliche Zahl, zum Beispiel 12, vor, so gibt es immer nur endlich viele Möglichkeiten, mit so vielen Elementen einen Delaney-Graphen zu konstruieren. Gibt man schließlich für einen gegebenen Graphen auch noch die Krümmung vor, so gibt es immer nur endlich viele Möglichkeiten, zu diesem Graphen Flächen- und Eckengrade so zu wählen, daß das entstehende Delaney-Symbol die richtige Krümmung besitzt. Zusammengefaßt bedeutet dies:

> *Zu jeder natürlichen Zahl k gibt es nur endlich viele kombinatorische Typen von k-isohedralen Pflasterungen der euklidischen Ebene.*

Für sphärische oder hyperbolische Pflasterungen bekommt man kein so schönes Ergebnis, was im wesentlichen daran liegt, daß hier jeweils unendlich viele Symmetriegruppen auftreten können. Der obige Satz gilt aber auch immer dann, wenn man eine andere Krümmung als 0 fest vorgibt. Da die Krümmung eine Invariante der Symmetriegruppe ist, bekommt man also zu jeder vorgegebenen Punktgruppe oder hyperbolischen kristallographischen Gruppe und jeder vorgegebenen Zahl von Flächentypen wieder nur endlich viele Typen von Pflasterungen.

Man kann diesen Endlichkeitssatz zum Beispiel ausnutzen, um mit Hilfe eines Computers alle Delaney-Symbole solcher Pflasterungen aufzählen zu lassen, wie Daniel Huson es in seiner Diplomarbeit [Hus86] für die 2-isohedralen Pflasterungen der Ebene getan hat. Es stellt sich heraus, daß es genau 1280 solcher Pflasterungen gibt. Leider verbringt selbst der schnellste und geschicktest programmierte Computer so viel Zeit mit der Konstruktion unbrauchbarer Teilsymbole, daß es kaum sinnvoll ist, mit dieser Methode noch größere Aufzählungsprobleme anzugehen. Es würde sich wohl auch kaum jemand für die vollständige Liste aller 3- oder gar 4-isohedralen Pflasterungen interessieren, möglicherweise aber für Teillisten mit gewissen interessanten Eigenschaften.

Etwas später hörten wir, daß eine Studentin in Moldavien, Elizaveta Zamorzaeva, die Klassifikation der 2-isohedralen Pflasterungen in jahrelanger Arbeit per Hand gelöst hatte. Sie hatte keine Delaney-Symbole benutzt, dafür aber sehr nützliche Erkenntnisse der Pflasterungstheorie, welche die Anzahl der zu untersuchenden Fälle ganz gewaltig reduzieren. Man kann nämlich aus den von Heesch klassifizierten 46 sogenannten „einfachen Zerlegungstypen“ (vgl. [Hee68]), die wir gerne als fundamentale Pflasterungen bezeichnen, nämlich jenen Pflasterungen, deren Flächen asymmetrische Einheiten (in der Mathematik als Fundamentalbereiche bezeichnet) bilden, durch systematische Anwendung einfacher geometrischer Operationen alle möglichen Pflasterungen der Ebene gewinnen. Diese Operationen kann man auch auf Delaney-Symbole übertragen und erhält dann automatisch nur Symbole gültiger Pflasterungen. Aufbauend auf dieser Grundidee lassen sich beliebig komplizierte Pflasterungen mit vorgegebenen euklidischen, hyperbolischen oder sphärischen Symmetrien systematisch aufzählen (vgl. [Hus93]). Allerdings kann der Speicherplatz schnell knapp werden, wenn man alle diese langen Listen wirklich aufbewahren möchte. In [DHZ92] finden sich immerhin Computerzeichnungen aller 1280 zwei-isohedralen Pflasterungen der Ebene.

Eine weiteres Beispiel für die Kombination von geometrischer Theorie und Computereinsatz via Delaney-Symbol ist Daniel Husons Aufzählung der sogenannten „vierfärbbaren Pflasterungen“ (vgl. [Hus94]). Dies sind 4-isohedrale Pflasterungen der Ebene mit der schönen Eigenschaft, daß nie zwei symmetrieäquivalente Flächen eine gemeinsame Kante haben. Man kann also solche Pflasterungen sehr schön grafisch darstellen, indem man jedem Flächentyp eine eigene Farbe gibt. Natürlich wäre es hier möglich gewesen, die vollständige Liste von wahrscheinlich etlichen Millionen 4-isohedralen Pflasterungen zu erzeugen und die vierfärbbaren anschließend herauszufiltern. Daniel fand aber eine elegantere Methode. Er ging von der Liste der (ungefähr 65000) 3-isohedralen Pflasterungen aus und benutzte spezielle Operationen, um daraus alle vierfärbbaren Pflasterungen zu erzeugen. Wie sich herausstellt, gibt es genau 4044 solcher Pflasterungen, von denen in Abbildung 13 einige wenige Beispiele zu sehen sind.

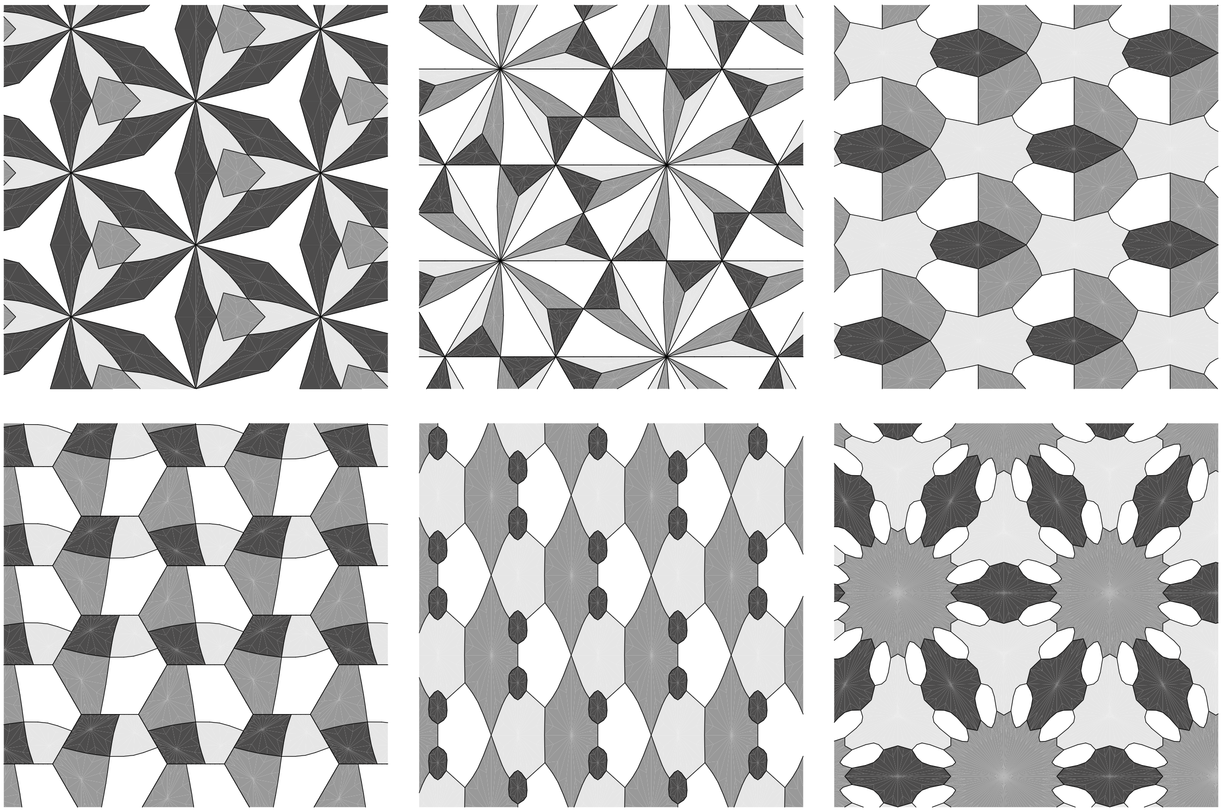

Abbildung 13: Sechs der 4044 vierfärbbaren Pflasterungen

Zum Abschluß soll nun auch von möglichen Anwendungen in der Chemie und Kristallographie die Rede sein. Eine offensichtliche Anwendung ist die Aufzählung topologisch möglicher Typen von sogenannten Käfigmolekülen wie beispielsweise Fullerenen oder Polyoxometallaten (vgl. [DDMP93]). Bei Fullerenen hat man es in ganz offensichtlicher Weise mit einer Kugelpflasterung zu tun, deren Ecken die Atompositionen, deren Kanten die Bindungskanten und deren Flächen oder Pflastersteine die von den Atomen gebildeten 5- und 6-Ringe bilden. Für die Aufzählung großer imaginärer Fullerenstrukturen mit wenig Symmetrie sind auf Delaney-Symbolen basierende Methoden bisher leider wenig geeignet. Sucht man aber speziell nach hochsymmetrischen Strukturen, so drängt sich diese Methode geradezu auf.

Anläßlich einer Konferenz in Exeter stellte der Fulleren-Spezialist Fowler an Andreas Dress die Frage nach der Existenz einer hypothetischen Fulleren-ähnlichen Struktur, die aus einer minimal möglichen Anzahl von Fünfecken und Siebenecken bestehen und deren Symmetrie die des Dodekaeders sein sollte. Eine solche Struktur müßte aus 72 Fünfecken und 60 Siebenecken bestehen und genau 260 Atome enthalten. Dieses Problem ist mit Hilfe von Delaney-Symbolen relativ schnell (zum Beispiel während einer Zugfahrt) per Hand zu lösen, wobei man aber, wie sich zeigte, vor Flüchtigkeitsfehlern nicht gefeit ist. So glaubten wir aufgrund einer fehlerhaften Berechnung, die niemand überprüft hatte, lange Zeit, es gäbe nur genau eine solche Struktur. Inzwischen wissen wir, daß es genau zwei gibt, die in Abbildung 14 gezeigt werden. Beide besitzen nur die eigentlichen (d.h. orientierungserhaltenden) Symmetrien des Dodekaeders.

Ich selbst beschäftige mich zur Zeit zusammen mit Daniel Huson und anderen mit der Frage, wie mit Hilfe von Pflasterungen und Delaney-Symbolen die topologische Struktur von Kristallen oder auch Molekülen besser verstanden werden kann. Es ist offensichtlich, daß eine

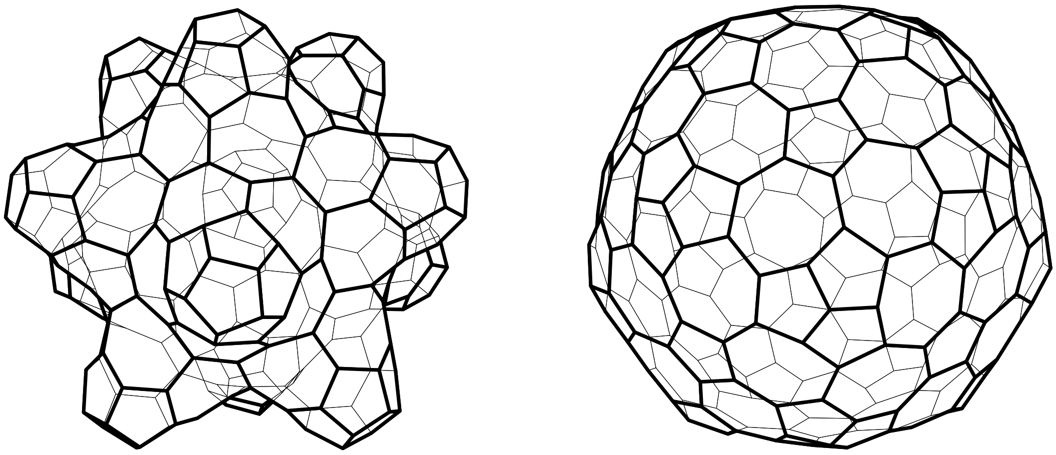

Abbildung 14: Die zwei Fowlerschen Fulleroide

Pflasterung eine wesentlich reichere topologische Struktur darstellt als ein Bindungsgraph. Wie aber kann, ausgehend von Atompositionen und eventuell -arten eines vorgegebenen Kristalls, in Anwendung einer allgemeine mathematische Regel eine Pflasterung konstruiert werden, welche die Strukturierung des Raumes durch diesen Kristall in natürlicher Weise wiederspiegelt? Es ist sicherlich vernünftig zu fordern, daß die Ecken einer solche Pflasterung genau die Atompositionen sein und daß die Bindungskanten zumindest alle unter den Kanten der Pflasterung vorkommen sollen.

Eine erste mögliche Antwort wäre dann die den Atompositionen zugeordnete sogenannte Delone-Pflasterung. Die Delone-Pflasterung entsteht einfach durch Dualisieren der Wirkungsbereichszerlegung. Zu jeder Ecke dieser Zerlegung betrachtet man alle Atome, deren Wirkungsbereiche diese Ecke berühren und konstruiert die konvexe Hülle aller ihrer Positionen. Die Gesamtheit aller so gewonnenen konvexen Hüllen bildet eine Pflasterung mit der besonderen Eigenschaft, daß die Ecken jedes Pflastersteins auf einer Kugel liegen, die keine weiteren Atompositionen enthält. Die Ecken der Delone-Pflasterung sind die Atompositionen, und es läßt sich zeigen, daß die kürzesten vorkommenden Strecken zwischen Atomen immer Kanten der Delone-Pflasterung sind, man also davon ausgehen kann, daß alle Bindungskanten auch Kanten dieser Pflasterung sind.

Leider stellt man bei der Berechnung von Delone-Pflasterungen beispielsweise von Zeoliten fest, daß diese sehr kompliziert und unüberschaubar werden. Gerade bei Zeoliten interessiert man sich ja für die in der Struktur enthaltenen Hohlräume und die diese verbindenden Ringe. In manchen Fällen wie beim Zeolit A oder beim Sodalit und vielen anderen sieht man anhand von Modellen mit bloßem Auge eine Pflasterung, und zumindest diese sollte von der gesuchten mathematischen Konstruktionsvorschrift rekonstruiert werden. Es sieht so aus, als ob durch geschicktes Zusammenfassen von Pflastersteinen hier die Delone-Pflasterung dennoch als Ausgangspunkt dienen kann. In einigen Fällen paßt sich die so entstehende „reduzierte“ Delone-Pflasterung in verblüffender Weise in das vorgegebene Kantengerüst des Zeolites ein.

In Abbildung 15 ist jeweils ein kleiner Ausschnitt der ABW-Struktur (nach dem Zeolit-Atlas von Meier und Olson), links mit der Delone-, rechts mit der reduzierten Delone-Pflasterung, gezeigt. Die Pflastersteine wurden in beiden Fällen erheblich verkleinert, um einen besseren Einblick in die Struktur zu gewähren.

Ich möchte nicht verhehlen, daß der hier verfolgte Ansatz in gewisser Weise sehr „naiv“ ist, da er einfach von gegebenen geometrischen Daten ausgeht, ohne irgendwelche chemischen oder physikalischen Eigenschaften der beteiligten Atome zu berücksichtigen. Letzteres wäre sicherlich eine notwendige Voraussetzung, um zu wirklich nützlichen Anwendungen zu

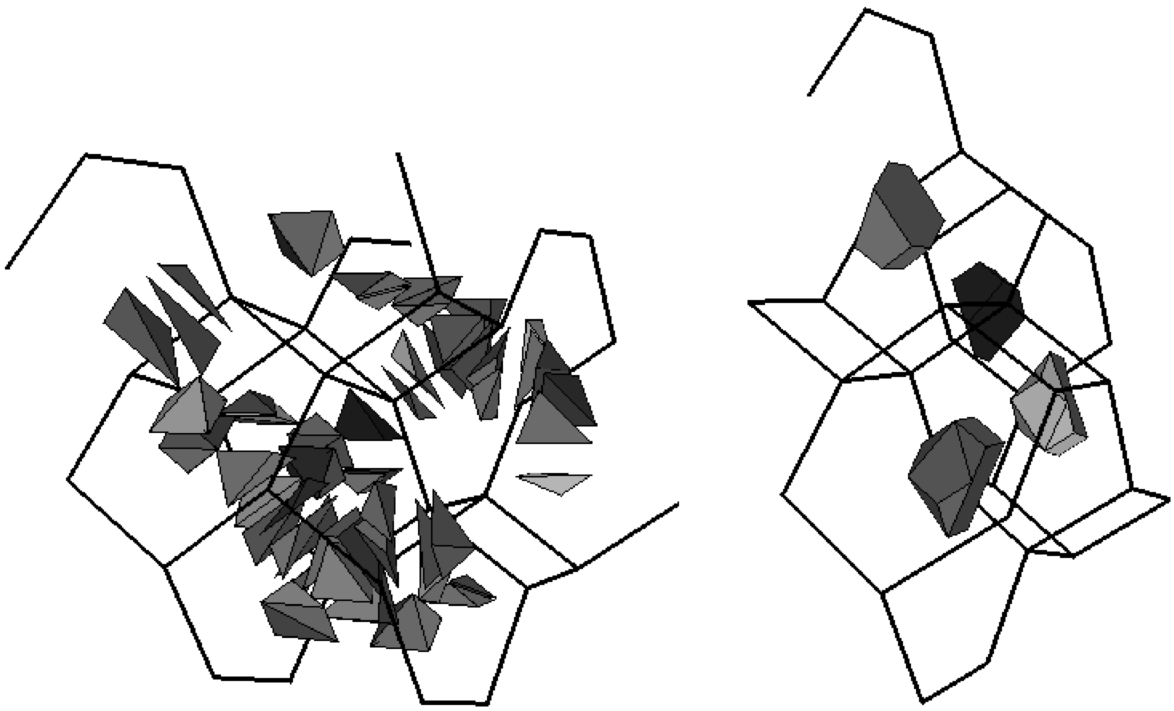

Abbildung 15: Delone-Pflasterung und reduzierte Delone-Pflasterung

kommen, insbesondere was mögliche Klassifizierungen von Zeolit-artigen Strukturen auf dem Rechner angeht, die als Hilfmittel für gezielte Synthetisierungsversuche denkbar wären.

Literatur

[DDMP93] O. Delgado Friedrichs, A.W.M. Dress, A. Müller, and M.T. Pope. Polyoxometalates: A class of compounds with remarkable topology. *Molecular Engineering*, 3:9–28, 1993.

[DH87] A.W.M. Dress and D.H. Huson. On tilings of the plane. *Geometriae Dedicata*, 24:295–310, 1987.

[DH91] A.W.M. Dress and D.H. Huson. Heaven and hell tilings. *Revue Topologie Structurale*, 17:25–42, 1991.

[DHM93] A.W.M. Dress, D.H. Huson, and E. Molnár. The classification of face-transitive 3d-tilings. *Acta Crystallographica*, A49:806–817, 1993.

[DHZ92] O. Delgado Friedrichs, D.H. Huson, and E. Zamorzaeva. The classification of 2-isohedral tilings of the plane. *Geometriae Dedicata*, 42:43–117, 1992.

[Dre84] A.W.M. Dress. Regular polytopes and equivariant tessellations from a combinatorial point of view. In *Algebraic Topology*, pages 56–72. SLN 1172, Göttingen, 1984.

[Dre86] A.W.M. Dress. The 37 combinatorial types of regular "heaven and hell" patterns in the euclidean plane. In H.S.M. Coxeter et al., editor, *M.C. Escher: Art and Science*, pages 35–43. Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland, 1986.

[Dre87] A.W.M. Dress. Presentations of discrete groups, acting on simply connected manifolds. *Adv. in Math.*, 63:196–212, 1987.

[DS84] A.W.M. Dress and R. Scharlau. Zur Klassifikation äquivarianter Pflasterungen. *Mitteilungen aus dem Math. Seminar Giessen*, 164:83–136, 1984.

[DS86] A.W.M. Dress and R. Scharlau. The 37 combinatorial types of minimal, non-transitive, equivariant tilings of the euclidean plane. *Discrete Math.*, 60:121–138, 1986.

[Hee68] H. Heesch. *Reguläres Parkettierungsproblem.* Westdeutscher Verlag, Köln-Opladen, 1968.

[Hus86] D.H. Huson. Die Klassifikation 2-isohedraler Pflasterungen der euklidischen Ebene. Master's thesis, University of Bielefeld, 1986.

[Hus93] D.H. Huson. The generation and classification of tile-k-transitive tilings of the euclidean plane, the sphere and the hyperbolic plane. *Geometriae Dedicata*, 47:269–296, 1993.

[Hus94] D.H. Huson. A four-color theorem for periodic tilings. *Geometriae Dedicata*, 51:47–61, 1994.