

Zur Geometrie der Mikrocluster

Autor(en): **Schneebeli, H.R.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Elemente der Mathematik**

Band (Jahr): **48 (1993)**

PDF erstellt am: **20.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-44621>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Zur Geometrie der Mikrocluster

Für Prof. Dr. Beno Eckmann zum 75. Geburtstag

H.R. Schneebeli

Hans Rudolf Schneebeli studierte Mathematik an der ETH Zürich und am Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel. Es folgten Promotion und verschiedene Arbeiten zur Gruppentheorie und zur Homologischen Algebra unter der Leitung von Prof. B. Eckmann. Seit 1979 ist Hans Rudolf Schneebeli Mathematiklehrer an der Kantonsschule Baden. Eines seiner besondern Anliegen ist es, Bezüge zwischen Mathematik und andern Erfahrungsbereichen etwa aus Naturwissenschaft und Technik aufzuzeigen und zur Motivation im Unterricht zu nutzen. Das hier dargestellte Thema bildete neulich die Grundlage für Schülerarbeiten im Rahmen einer Studienwoche "Mathematik" der Stiftung "Schweizer Jugend forscht".

Was haben Fussball, Euler, Kohlenstoff und Buckminster Fuller miteinander zu tun? Um 1985 vermuteten die Chemiker H. Kroto und R.E. Smalley die Existenz eines "grossen", sehr stabilen Kohlenstoffmoleküls C_{60} . Sie stellten sich die 60 Kohlenstoffatome als kugelförmige Struktur bestehend aus Fünf- und Sechsecken vor, deren Anordnung derjenigen der schwarzen und weissen Lederstücken auf einem Fussball (siehe Abb.1) entspricht. Für diese und weitere, noch grössere Kohlenstoffmoleküle schlugen sie den Namen Fullerene vor, nach dem Architekten Richard *Buckminster Fuller*, der bekannt war für seine eindrucksvollen aus Fünf- und Sechsecken bestehenden Gewölbe. Und Euler? Bereits die Entdecker der Fullerene stellten fest, dass der *Eulersche Polyeder-*satz für ein Fulleren die Anzahl der vorkommenden Fünfecke festlegt, nämlich 12. Die Anzahl der Sechsecke hingegen wird durch Eulers Formel nicht eingeschränkt, so dass man sich neben C_{60} auch weitere Fullerene, C_{70} und noch grössere, vorstellen konnte. Das Fulleren C_{60} konnte 1990 durch W. Krätschmer, et al. direkt nachgewiesen und in makroskopischen Mengen hergestellt werden.

Im vorliegenden Beitrag beschäftigt sich Hans Rudolf Schneebeli mit der "kombinatorischen Struktur" der Fullerene. Einfache geometrische Betrachtungen, die sich bewusst beschränken und zum Beispiel die verschiedenen Bindungslängen im Molekül unberücksichtigt lassen, erlauben es, interessante Aussagen über die Struktur der möglichen Fullerene zu erhalten. usf

1 Einleitung

Seit einiger Zeit beschäftigen sich Festkörperphysiker und Chemiker mit Mikroclustern. Das sind Aggregate von einigen wenigen bis zu einigen hundert Atomen. Im Vergleich zu den makroskopischen Erscheinungsformen der Materie bilden Mikrocluster also ausgesprochene Wenigteilchensysteme. Eine Besonderheit der Mikrocluster ist der überaus hohe Anteil an Atomen, die auf der Oberfläche des Verbandes liegen. Seit 1985 sind reine Kohlenstoffcluster bekannt. Der berühmteste Vertreter dieser Gattung ist das Molekül C_{60} , das "Fussballmolekül" (vergleiche auch [2], [3]). Das Gerüst des Fussballmoleküls ist ein Netz auf der Kugel, das aus 12 Fünfecken und 20 Sechsecken besteht, wobei in jeder Ecke drei Kanten zusammentreffen.

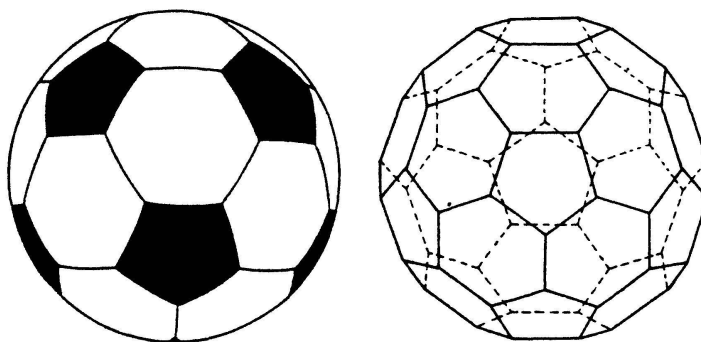


Fig. 1 Fussball und Fussballmolekül

Typische Fragen, die sich zur Struktur der Kohlenstoffcluster aufdrängen, lauten etwa:

- Ist die Struktur von C_{60} (oder allgemein von C_n) eindeutig festgelegt, oder gibt es mehrere Isomere?
- Für welche Zahlen n gibt es Kohlenstoffcluster C_n ? Gibt es wirklich Cluster mit 45 Atomen (vgl. die Abbildung in [1], S. 61) oder mit 92 Atomen (gemäss Messungen mit dem Massenspektrometer)?

Solche Fragen lassen sich meist nicht ohne eingehende Fachkenntnisse aus der Chemie beantworten. Sie waren für mich jedoch ein Anlass für die Beschäftigung mit einigen rein geometrischen Problemen, die sich in diesem Zusammenhang stellen. Um den Unterschied zum Vorbild aus der Chemie deutlich zu machen, soll von *geometrischen Clustern* die Rede sein. Dieser Begriff ist noch zu definieren. Er soll nur die kombinatorischen und qualitativen Eigenschaften der Gerüste von Kohlenstoffclustern erfassen. Grob gesprochen, handelt es sich bei einem geometrischen Cluster um ein konvexes Polyeder, dessen Randflächen lauter Fünfecke oder Sechsecke sind und in dessen Ecken jeweils drei Kanten enden. Es war mein Ziel, einen Gegenstand, der in der chemischen Grundlagenforschung gegenwärtig besondere Beachtung findet (das Fussballmolekül C_{60} wurde zum "Molekül des Jahres 1991" gewählt), ins Blickfeld der Schulmathematik zu rücken. Mit elementaren Methoden sollen Fragen über die Existenz und Eindeutigkeit geometrischer Cluster untersucht werden.

Die folgenden Überlegungen werden in drei Abschnitte aufgeteilt. Zuerst wird der Übergang vom chemischen Vorbild zum geometrischen Modell vollzogen. Dazu müssen Definitionen für geometrische Cluster und für die beiden Äquivalenzrelationen "isomer" und

“isomorph” formuliert werden. In einem zweiten Schritt werden einige Verfahren angegeben, um aus bekannten geometrischen Clustern neue solche Cluster zu erzeugen. Es gelingt mit diesen Konstruktionen im letzten Schritt, für jede Isomerieklasse von geometrischen Clustern einen Vertreter zu erzeugen. Die Aufzählung aller möglichen Clustergerüste bis auf Isomorphie scheint erheblich schwieriger zu sein. Wir begnügen uns einstweilen mit dem Hinweis, dass unsere Konstruktionen gelegentlich mehrere geometrische Cluster mit derselben Eckenzahl aber echt verschiedenen Gerüsten liefern. Interessant ist auch die Konstruktion eines geometrischen Clusters mit einer rechtshändigen und einer linkshändigen Variante. Die allgemeinen Clusterkonstruktionen spielen die Rolle einer Formengrammatik. Es ist mir nicht geglückt zu zeigen, dass die Transformationsregeln dieser Grammatik ausreichen, um eine Liste *aller* Isomorphietypen zu erzeugen, wobei allenfalls einige wenige “primitive” Cluster (das Dodekaeder?) als Grundformen zulässig wären. Einem Chemiker würde eine solche Liste insofern dienen, als alle Gerüste von Kohlenstoffclustern auch geometrische Cluster sind. Allerdings ist die Existenz eines geometrischen Clusters mit n Ecken eine notwendige aber gewiss keine hinreichende Bedingung dafür, dass Kohlenstoffcluster vom Typ C_n in der Natur vorkommen.

2 Vom Kohlenstoffcluster zum geometrischen Cluster

Die experimentelle Untersuchung der Struktur von Kohlenstoffclustern erfordert den Einsatz von Massenspektrometern, Röntgenstrukturanalyse und anderen, modernsten spektroskopischen Methoden. Erschwerend für solche Untersuchungen ist der Umstand, dass Cluster wie C_{60} mit einer Frequenz im Gigahertzbereich um eine Achse rotieren. Erstaunlicherweise weiss man aber einiges über die Gestalt gewisser C_n -Moleküle. Man stellt sie sich im allgemeinen als domartige, geschlossene Gerüste vor, die aus Fünfecken und Sechsecken aufgebaut sind. Dieser Vorstellung verdanken sie auch den Namen *Fulleren*, in Anlehnung an den Namen des Architekten und Erfinders geodätischer Dome, Buckminster Fuller. Im C_{60} -Molekül sind alle Bindungslängen untereinander gleich und alle Bindungswinkel gleich gross. Das stereometrische Gerüst von C_{70} ist im metrischen Sinne nicht konvex. Es weist eine taillenartige Einschnürung auf, ist aber im kombinatorischen Sinn äquivalent zum Gerüst eines konvexen Polyeders. Die Bindungslängen und Bindungswinkel in diesem Molekül schwanken etwas von Ort zu Ort. Es ist also anzunehmen, dass sich die exakten metrischen Daten der C_n -Moleküle nur in Ausnahmefällen bestimmen lassen. Wir überspielen deshalb fehlende Information durch Abstraktion bei der Modellbildung und betrachten von nun an bloss qualitative geometrische Modelle der C_n -Moleküle. Ein *geometrischer Cluster* ist ein Polyeder, das aus lauter fünfeckigen oder sechseckigen Randflächen aufgebaut ist, bei dessen Ecken jeweils drei Kanten zusammenstossen und das vom gleichen kombinatorischen Typ ist wie ein konvexer Körper. Die geometrische Darstellung des Fulleren C_{60} zeigt, dass es geometrische Cluster gibt. Auch das Dodekaeder ist ein geometrischer Cluster. Ein zugehöriges Kohlenstoffmolekül C_{20} ist jedoch noch nicht bekannt. Womöglich kann es wegen der starken Krümmung des Gerüstes aus “physikalischen” Gründen gar nicht existieren. Es gibt aber Berichte über die Entdeckung von clusterartigen Anordnungen von Wassermolekülen nach dem Muster des Dodekaeders.

Unser Ziel ist eine möglichst weitgehende Klassifikation der geometrischen Cluster. Dabei lassen wir uns von zwei Klassifikationsmustern leiten. Zwei geometrische Cluster

(gedacht als Verbindungen aus lauter gleichartigen Atomen) heissen *isomer*, wenn sie dieselbe Eckenzahl aufweisen. Zwei geometrische Cluster heissen (kombinatorisch) *isomorph*, wenn es eine bijektive Abbildung vom einen auf den andern gibt, wobei Ecken in Ecken, Kanten in Kanten und Flächen in Flächen so abgebildet werden, dass alle Inzidenzbeziehungen (das kombinatorische Schema) erhalten bleiben. Mit dem Massenspektrometer lässt sich die Anzahl der Atome eines wirklichen Clusters bestimmen. Die Isomerieklasse ist damit bekannt. Es ist also naheliegend, für geometrische Cluster die folgenden Fragen zu stellen:

- Welche Eckenzahlen treten in geometrischen Clustern auf? (Welche Isomerieklassen gibt es?)
- Wie lässt sich ein vollständiges Repräsentantensystem für die Isomorphieklassen der geometrischen Cluster eines bestimmten Isomers algorithmisch und effizient erzeugen?

Von nun an werden wir auch die Kurzbezeichnung "Cluster" für geometrische Cluster verwenden, wenn der Zusammenhang Verwechslungen ausschliesst.

2.1 Einige kombinatorische Eigenschaften geometrischer Cluster

Geometrische Cluster zeichnen sich durch eine Reihe von bekannten Eigenschaften aus, die sich entweder unmittelbar aus dem kombinatorischen Schema ablesen lassen oder aber sofort aus dem Polyedersatz von Euler folgen.

1. Enthält ein geometrischer Cluster E Ecken, K Kanten, F Flächen, so gilt

$$E - K + F = 2, \quad \text{und} \quad 3E = 2K.$$

Insbesondere ist die Eckenzahl E stets gerade und die Kantenzahl K ist stets durch 3 teilbar. Die beiden linearen Beziehungen zwischen E, K, F zeigen, dass jede der Zahlen E, K, F die beiden andern eindeutig festlegt, also auch die Isomerieklasse bestimmt, welcher der entsprechende Cluster angehört.

2. Es sei f die Anzahl der Fünfecke und s die Anzahl der Sechsecke in einem Cluster. Dann gelten die Beziehungen $5f + 6s = 3E$ und $f + s = F$. Setzen wir dies in der Polyederformel ein mit $6E = 10f + 12s$, $6K = 15f + 18s$, und $6F = 6f + 6s$, so folgt $f = 12$. Für s ergibt sich zunächst keine Einschränkung. Jeder geometrische Cluster enthält also genau zwölf Fünfecke. Deshalb gilt für die Eckenzahl $E \geq 20$.

2.2 Konstruktion von Clusternetzen im Netz eines Polyeders

Wir geben hier weitere Beispiele für geometrische Cluster an, die im Netz eines Polyeders konstruiert werden. Das erste Verfahren geht vom Netz eines Tetraeders aus, das zweite führt fünfkantige oder sechskantige Prismen in geometrische Cluster über.

2.2.1 Clusternetze im Netz des Tetraeders

Die folgenden Beispiele werden durch Abbildungen des Clusternetzes in einem Tetraedernetz beschrieben. Dabei wird die (kombinatorische) Symmetrie des Tetraedergerüsts auf die Symmetrie des Clusters übertragen werden.

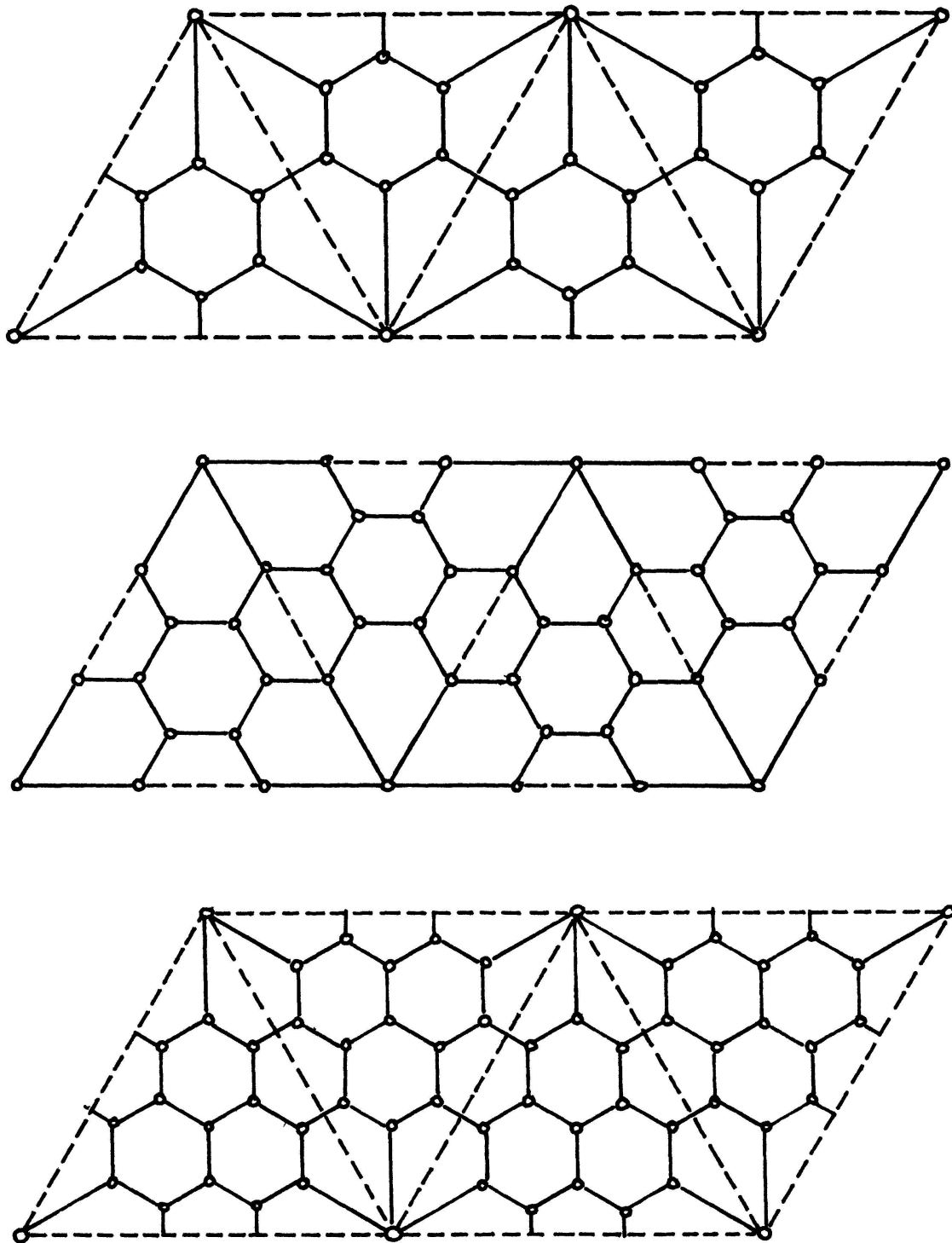


Fig. 2 Cluster mit 28, 40, 56 Ecken im Netz eines Tetraeders

2.2.2 Prismatische Cluster

Der Grundgedanke für die Konstruktion dieser Cluster besteht darin, den Mantel eines Prismas mit einem Netz aus Fünfecken und Sechsecken zu überziehen.

1. Fünfecksprisma

Wir wählen je ein Fünfeck als Grund- und Deckfläche eines Prismas. Am oberen

und am untern Rand des Mantels werden nun je fünf Fünfecke angeordnet. Im Zwischenraum lassen sich $n \geq 0$ Ringe mit $5n$ Sechsecken einfügen. Die Anordnung wird schematisch in der folgenden Abbildung gezeigt.

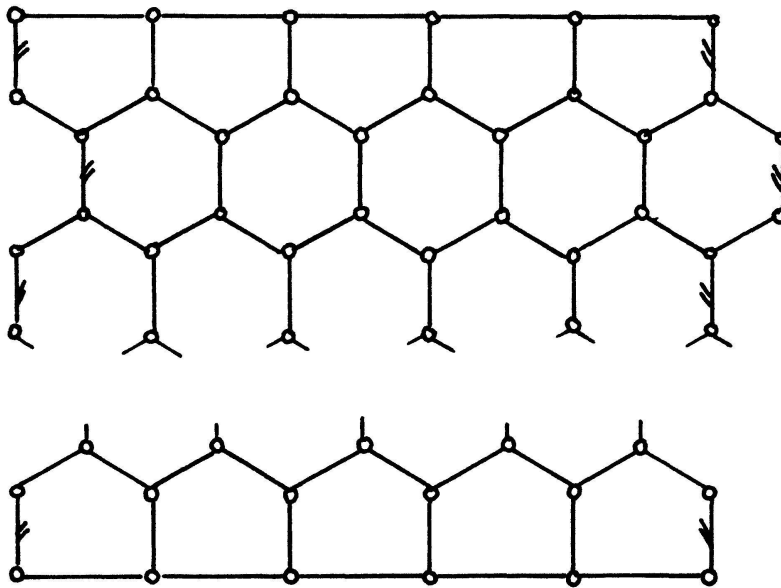


Fig. 3 Abwicklung des Mantels eines fünfkantigen Prismas mit dem Netz aus Fünfecken und Sechsecken

Im allgemeinen entstehen so Cluster mit $20 + 10n$ Ecken und $5n$ Sechsecken. Der Fall $n = 0$ entspricht dem Dodekaeder. Der Fall $n = 4$ liefert ein Isomer zum Fulleren C_{60} , das aber einer andern Isomorphieklasse angehört. Das Beispiel $n = 2$ liefert ein Isomer mit fünfzähliger Symmetrie zum Cluster mit 40 Ecken, der im Tetraedernetz angegeben wurde und eine andere Symmetrie aufweist.

2. Sechseckprisma

Entsprechend zu den vorangehenden Beispielen lassen sich am obern und am untern Rand des Mantels eines sechskantigen Prismas je sechs Fünfecke anordnen. Der Zwischenraum wird gemäss folgendem Schema mit $6n$ Sechsecken aufgefüllt.

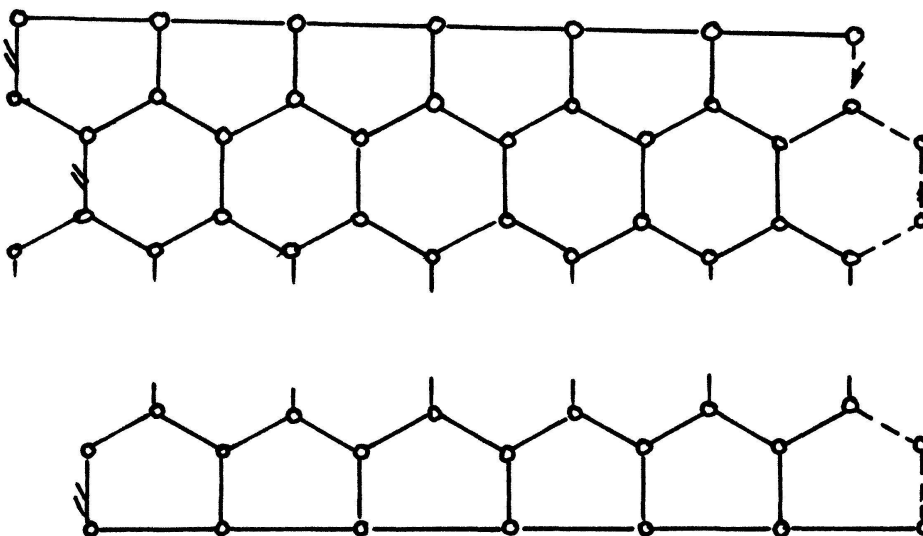


Fig. 4 Abwicklung des Mantels eines sechskantigen Prismas mit dem Netz aus Fünfecken und Sechsecken.

Es entstehen Cluster mit $24 + 12n$ Ecken und $6n + 2$ Sechsecken. Im Falle $n = 3$ entsteht ein weiteres Isomer zum Fulleren C_{60} .

3. Ein isolierter Sonderfall mit sechszähliger Symmetrie

Eine Variante der eben ausgeführten Konstruktion liefert ein Isomer zum sechskantigen prismatischen Cluster mit 48 Ecken. Je zwei Hauben aus sieben Sechsecken werden durch einen Kranz von zwölf Fünfecken verbunden.

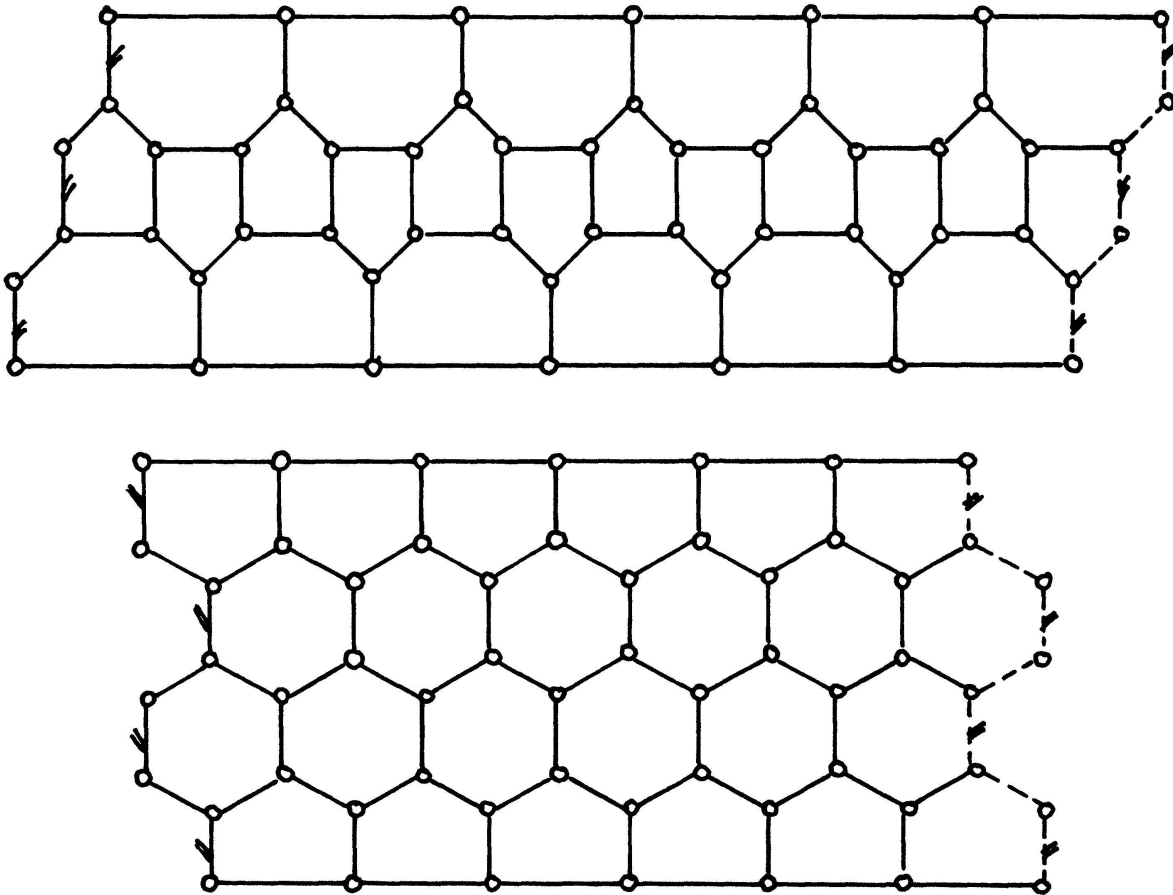


Fig. 5 Schematische Darstellung von zwei Isomeren mit 48 Ecken

3 Allgemeine Clusterkonstruktionen

Ausgehend von bereits bekannten geometrischen Clustern sollen neue solche Cluster konstruiert werden. In einem anderen Zusammenhang wurden in [4] bereits Konstruktionen zur Erzeugung regulärer Kreisnetze verwendet, die nach unserer Sprechweise zu den allgemeinen Clusterkonstruktionen gehören. Wir unterscheiden globale und lokale Modifikationen.

3.1 Globale Modifikationen von Clustern

Die globalen Modifikationen sind auf beliebige Cluster anwendbar und liefern neue Cluster, indem im gegebenen Cluster *alle* Ecken, Kanten oder Flächen nach demselben Verfahren umgewandelt werden. Im Zusammenhang mit dem Isomorphieproblem ist es interessant zu bemerken, dass die (kombinatorische) Symmetriegruppe eines Clusters

auch auf allen Clustern operiert, die aus ihm durch globale Modifikationen hervorgehen. Die (kombinatorischen) Symmetrien eines Clusters vererben sich bei globalen Modifikationen.

3.1.1 Kanten transformation

Denkt man sich ein Polyeder aus Holz hergestellt, so liessen sich alle Kanten abhebeln und in zusätzliche Flächen verwandeln. Die Kanten transformation beruht auf dieser Vorstellung. Sie ersetzt alle ursprünglichen Kanten eines geometrischen Clusters durch Flächen. Eine genauere Betrachtung der Verhältnisse an den Ecken zeigt, dass diese neuen Flächen Sechsecke sind und dass die ursprünglichen Seitenflächen in verkleinerter Gestalt aber sonst unverändert im neuen Cluster eingebettet sind.

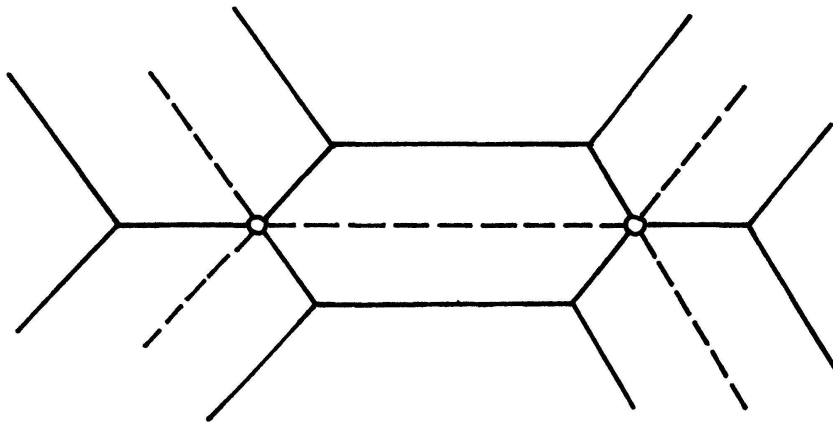


Fig. 6 Kanten transformation

Bezeichnen E' , K' , F' die Anzahlen der Ecken, Kanten, Flächen nach der Kanten transformation und E , K , F die ursprünglichen Anzahlen, so gilt

$$\begin{aligned} E' &= E + 2K , \\ K' &= 3E + 2K , \\ F' &= K + F . \end{aligned}$$

Mit den Beziehungen $2K = 3E$ und $E - K + F = 2$ folgt daraus

$$\begin{aligned} E' &= 4E , \\ K' &= 4K . \end{aligned}$$

Beispiel: Die Anwendung der Kanten transformation auf ein Dodekaeder liefert einen geometrischen Cluster mit 80 Ecken, nochmalige Kanten transformation ergibt einen Cluster mit bereits 320 Ecken.

3.1.2 Eckent transformation

Bei dieser Operation werden alle Ecken eines geometrischen Clusters durch Sechsecke ersetzt; dazu sind zwei Schritte nötig:

1. Wir wählen eine Ecke A aus. Auf den drei Kanten, die in A enden, werden die Mittelpunkte markiert und untereinander verbunden. Dadurch entsteht zunächst ein Dreieck,

in dessen Innerem A liegt. Entsprechende Dreiecke werden in allen Ecken gebildet so, dass in jeder Kantenmitte je zwei Dreiecke aneinanderstossen. Die ursprünglichen Kanten werden nun entfernt und es entsteht ein Polyeder, das nicht vom Typ eines geometrischen Clusters sein kann, da es vierzählige Ecken und Dreiecksflächen enthält. Dieser Mangel wird im folgenden Schritt korrigiert.

2. In den vierzähligen Ecken werden neue Kanten nach dem Muster der folgenden Abbildung eingeführt.

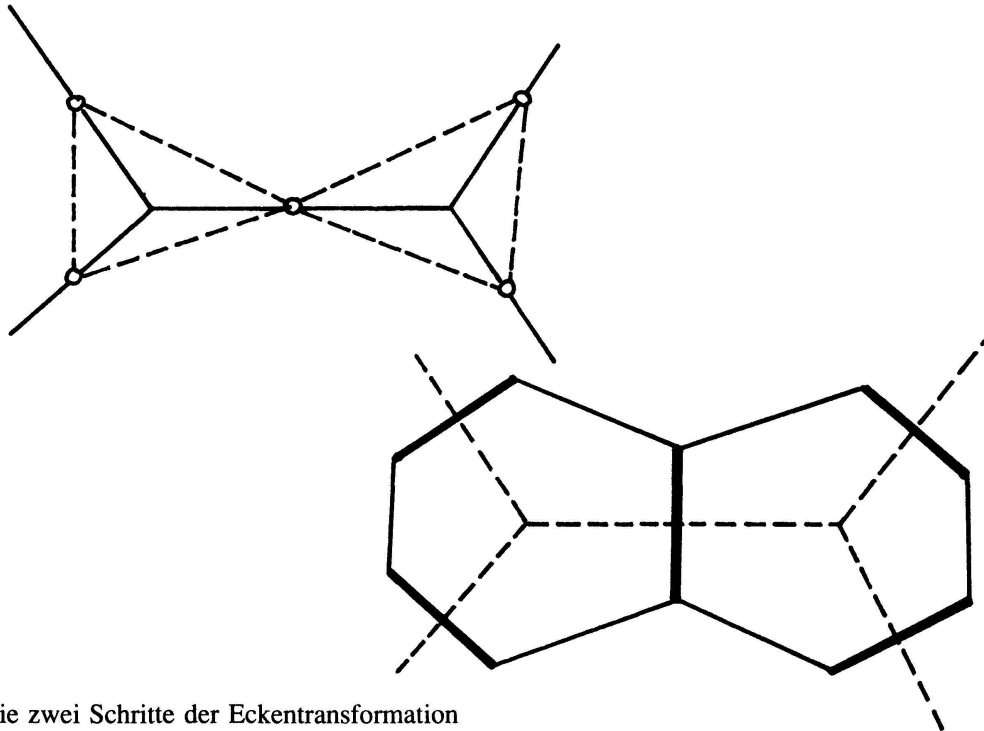


Fig. 7 Die zwei Schritte der Eckentransformation

Mit den gleichen Bezeichnungen wie bei der Kanten transformation lässt sich die Auswirkung der Eckentransformation auf die Anzahlen der Ecken, Kanten und Flächen durch folgende Formeln beschreiben:

$$\begin{aligned} E' &= 3E , \\ K' &= 3E + K , \\ F' &= E + F . \end{aligned}$$

Mit den Beziehungen $2K = 3E$ und $E - K + F = 2$ folgt daraus

$$\begin{aligned} E' &= 3E , \\ K' &= 3K . \end{aligned}$$

Beispiel: Die Anwendung der Eckentransformation auf das Dodekaeder liefert den zu C_{60} gehörigen Cluster, eine weitere Eckentransformation erzeugt einen Cluster mit 180 Ecken.

3.2 Lokale Modifikationen von Clustern

Es gibt Konstruktionen, die ausgehend von einem Cluster wieder einen Cluster ergeben, dabei aber im Gegensatz zu den globalen Modifikationen nur einen Teilbereich des ur-

sprünglichen Clusters erfassen. Eine Modifikation eines Clusters C heisst *lokal*, wenn es einen einfach geschlossenen Kantenweg Γ in C gibt, der C in zwei nichtleere Gebiete teilt, von denen eines samt dem Kantenweg Γ als Rand unverändert bleibt. Bei jeder lokalen Clustermodifikation bleibt die Zahl der Fünfecke in *jedem* der beiden Teilgebiete mit gemeinsamem Rand Γ notwendigerweise erhalten. Symmetrien von Clustern können durch lokale Modifikationen gebrochen werden. Das Einfügen eines Kranzes von Sechsecken beim Verlängern eines prismatischen Clusters ist ein Beispiel für eine lokale Modifikation. In den folgenden Beispielen treten lokale Modifikationen von Clustern auf, bei denen Fünfecke beteiligt sind. Die jeweiligen Modifikationen werden durch die Abbildungen erklärt. Im Stile chemischer Formeln geben wir grob die Art der Modifikation wieder. Eine Konfiguration aus r Fünfecken und s Sechsecken wird notiert als $p_r h_s$.

1. Erzeugung von Isomeren durch Bewegung von Fünfecken

a) Bewegung eines Paares von Fünfecken: $p_2 h_2 \mapsto p_2 h_2$

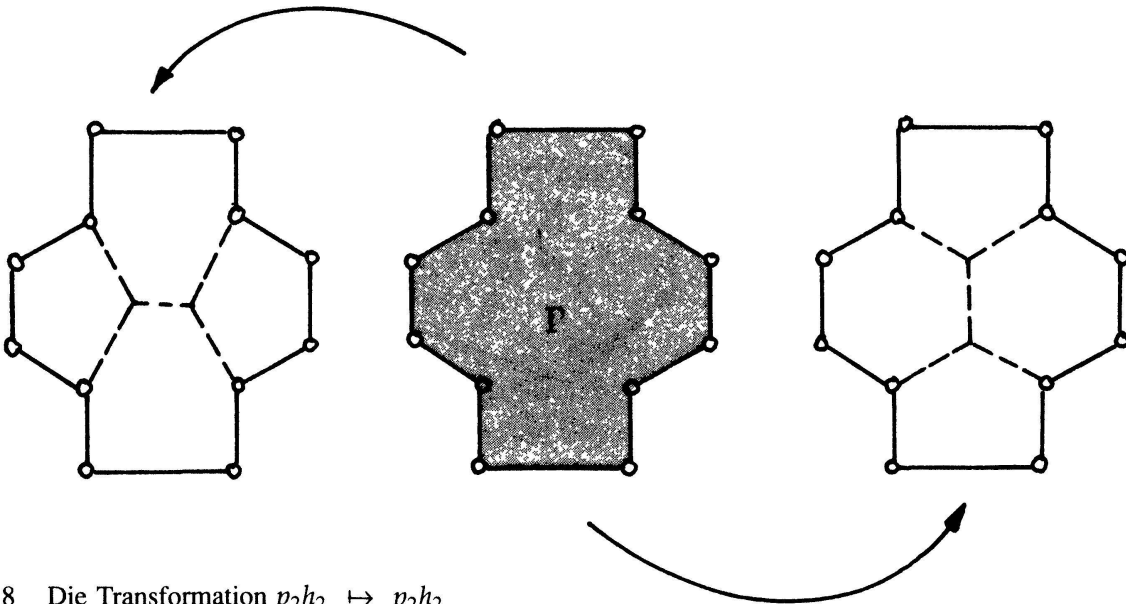


Fig. 8 Die Transformation $p_2 h_2 \mapsto p_2 h_2$

b) Bewegung eines Paares von Fünfecken: $p_2 h_4 \mapsto p_2 h_4$

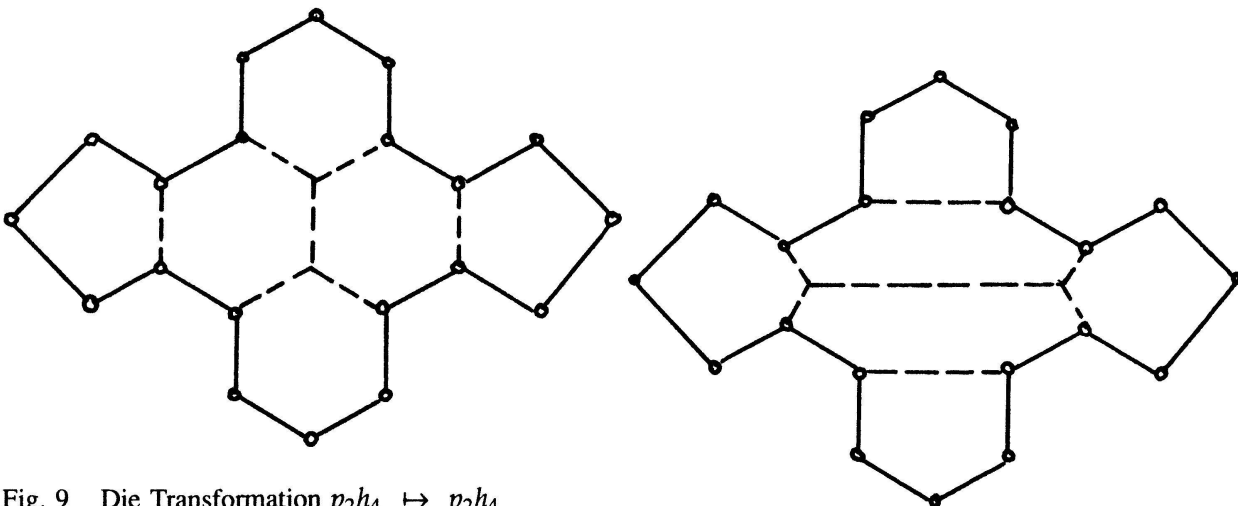


Fig. 9 Die Transformation $p_2 h_4 \mapsto p_2 h_4$

2. Erzeugen eines Sechsecks: $p_2h_1 \mapsto p_2h_2$

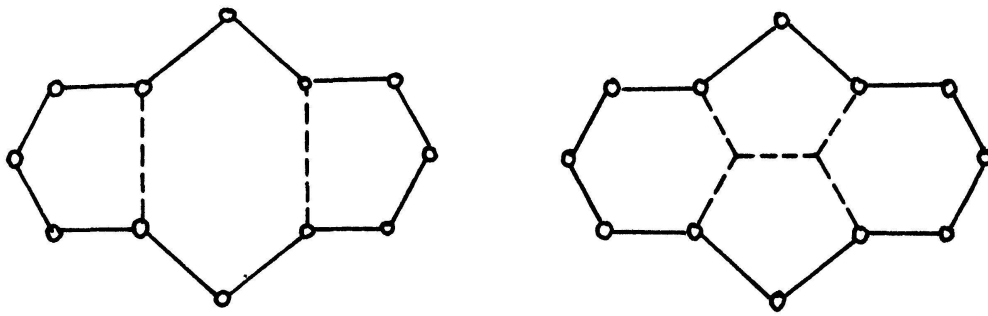


Fig. 10 Die Transformation $p_2h_1 \mapsto p_2h_2$

3. Erzeugen von zwei Sechsecken: $p_3h_1 \mapsto p_3h_3$

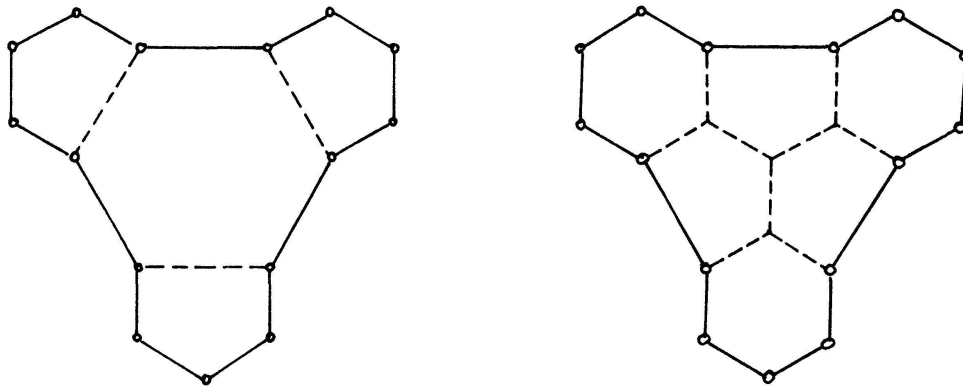


Fig. 11 Die Transformation $p_3h_1 \mapsto p_3h_3$

4. Erzeugen von drei Sechsecken: $p_4h_1 \mapsto p_4h_4$

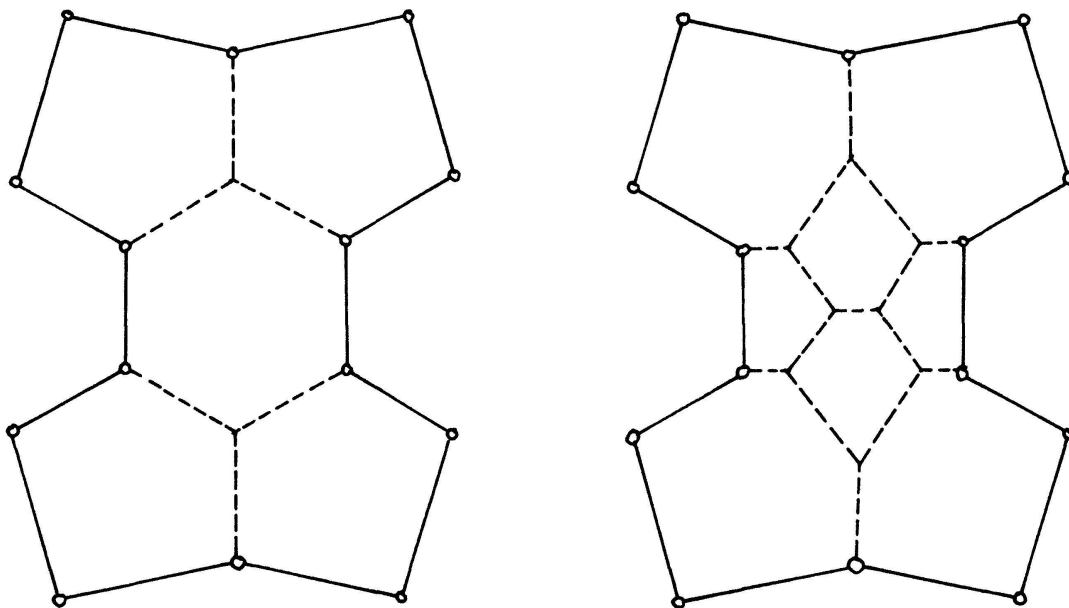
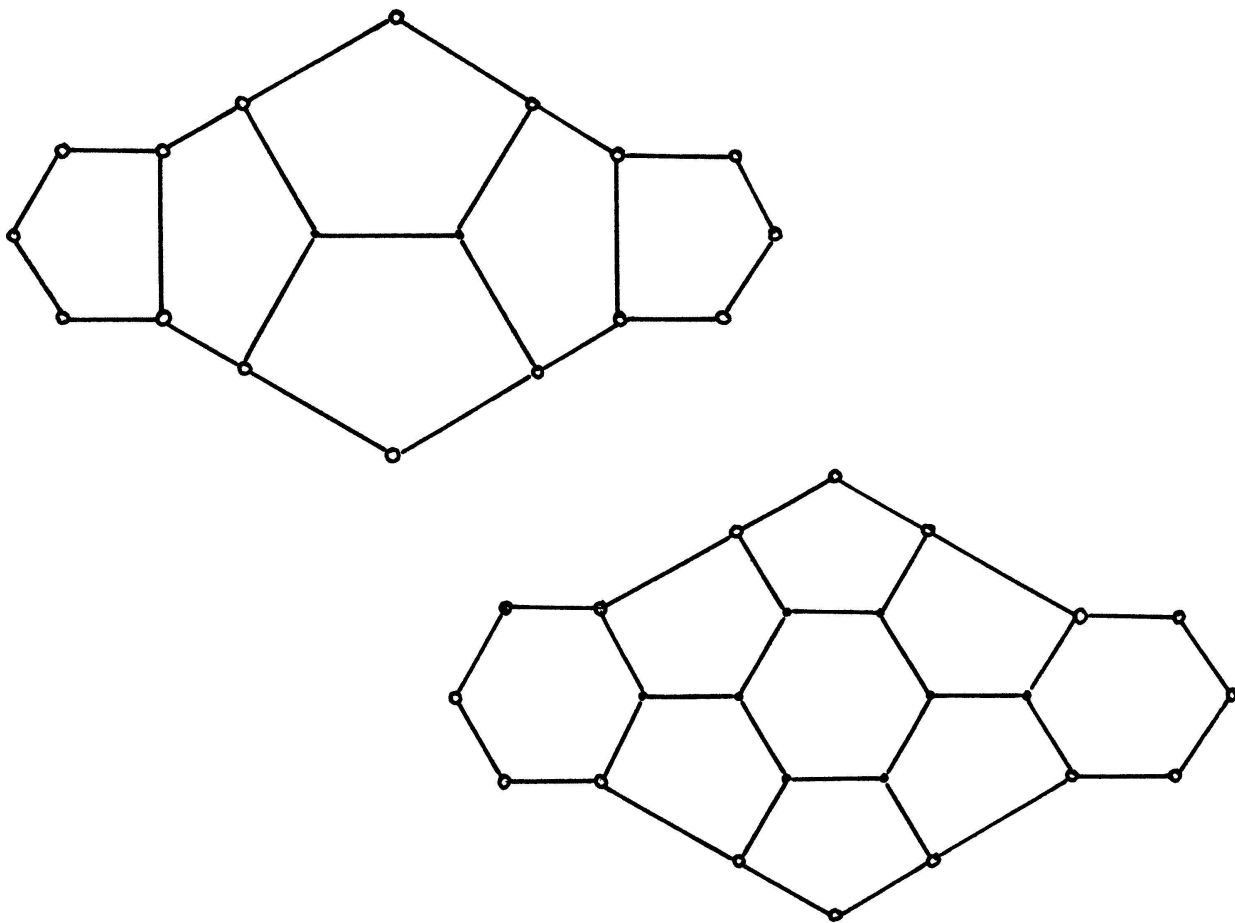


Fig. 12 Die Transformation $p_4h_1 \mapsto p_4h_4$

5. Erzeugen von drei Sechsecken: $p_6 \mapsto p_6h_3$ Fig. 13 Die Transformation $p_6 \mapsto p_6h_3$

Es fällt auf, dass sich die Eckenzahlen additiv ändern, wenn eine lokale Modifikation vorgenommen wird, während eine globale Modifikationen durch Multiplikation mit einer Konstanten auf den Eckenzahlen wirkt. Für die Konstruktion geometrischer Cluster sind die lokalen Konstruktionen interessanter als die globalen, denn sie erlauben die Konstruktion von Isomeren und das Anfügen von kleinen Zahlen neuer Ecken. Die Konstruktionsvorschriften für lokale Modifikationen lassen sich auch rückwärts lesen.

4 Konstruktionen von Clustern, Isomerie und Isomorphie

Lokale Modifikationen werden benutzt, um weitere Beispiele für geometrische Cluster zu konstruieren. Dabei stehen zwei Absichten im Vordergrund: In (4.1) wird ein Verfahren beschrieben, das je einen Vertreter für jeden Isomerietyp der geometrischen Cluster liefert. Damit wird das Isomerieproblem konstruktiv gelöst. Viel schwieriger ist das Isomorphieproblem für geometrische Cluster. Es verlangt die Angabe einer vollständigen Liste der Cluster bis auf Isomorphie und eines Verfahrens, das zu zwei vorgelegten Clustern entscheidet, ob sie zueinander (kombinatorisch) isomorph seien. Isomorphe Cluster sind notwendigerweise isomer. In (4.2) werden einige Beispiele für nicht isomorphe Isomere angegeben. Im Falle von C_{28} werden einige der Probleme beleuchtet, die beim Klassifizieren von Isomeren bis auf Isomorphie auftreten.

4.1 Isomerie

Es gibt Cluster mit E Ecken für $E = 20$ und für alle geraden Zahlen $E \geq 24$. Diese Aussage wird in den folgenden drei Schritten begründet.

1. Wir wissen bereits, dass $E \geq 20$ und gerade ist. Zuerst wird $E = 22$ ausgeschlossen: Es gibt keinen Cluster mit 22 Ecken.
 Begründung: In einem solchen Cluster gibt es genau ein Sechseck. Um dieses Sechseck lassen sich die notwendigerweise auftretenden 12 Fünfecke auf genau eine Art so anordnen, dass von jeder Ecke drei Kanten ausgehen. Dabei entsteht jedoch ein Netz mit 24 Ecken, es gehört zum einfachsten Fall eines Clusters vom Typ der "Sechseckprismen".
2. Wird die lokale Modifikation $p_6 \mapsto p_6h_3$ auf ein Dodekaeder angewendet, so entsteht ein Cluster C_{26} . Mit $p_2h_2 \mapsto p_2h_1$ wird dieses in einen prismatischen Cluster mit 24 Ecken umgewandelt.
3. Wir betrachten den prismatischen Cluster mit 24 Ecken und wählen eines der beiden Sechsecke mit allen seinen unmittelbar angrenzenden Fünfecken aus. Diese Konfiguration nennen wir Polarkappe. In jedem prismatischen Cluster, der vom sechskantigen Prisma gemäss den Verfahren aus (2.2.2) konstruiert wurde, treten zwei solche isomorphe Polarkappen auf. Die folgenden drei lokalen Modifikationen werden auf die Polarkappen angewandt und liefern die Beispiele der Form $E = 24 + 12n + 2k$ für $k = 1, 2, 3$. Da jede der beiden Kappen für Modifikationen zur Verfügung steht und am Ende der Konstruktion wieder zwei Polarkappen gebildet werden, folgt dann die Behauptung mit Induktion.

$k = 1$
 Anwendung von $p_2h_1 \mapsto p_2h_2$
 gemäss der nebenstehenden Figur:

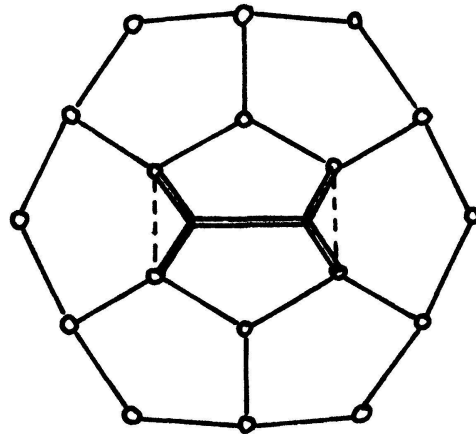


Fig. 14

$k = 2$
 Anwendung von $p_3h_1 \mapsto p_3h_3$
 gemäss der nebenstehenden Figur:

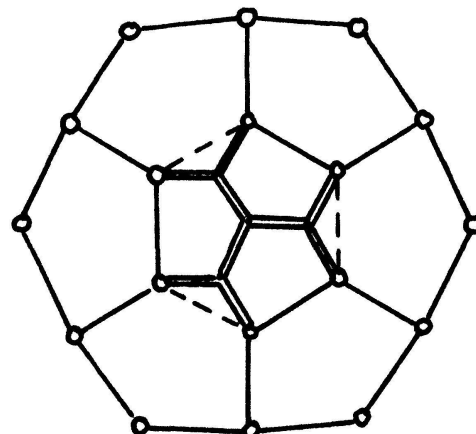


Fig. 15

$$k = 3$$

Anwendung von $p_4h_1 \mapsto p_4h_4$
gemäss der nebenstehenden Figur:

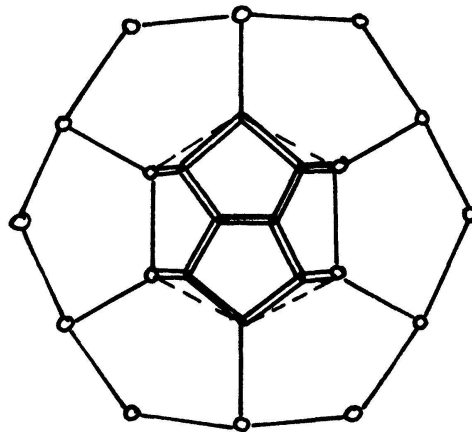


Fig. 16

4.2 Isomorphie

Der Cluster C_{40} von Abb.2 besitzt die Symmetrie eines Tetraeders. Er ist also nicht isomorph zum Fünfecksprisma mit 40 Ecken. Ein weiteres Beispiel lässt sich konstruieren durch wiederholte Anwendung der lokalen Modifikation $p_2h_1 \mapsto p_2h_2$ ausgehend vom prismatischen Cluster mit 30 Ecken. Dabei wird ein Cluster mit 40 Ecken aufgebaut, bei dem 10 Fünfecke in einem Ring angeordnet sind und zwei weitere davon getrennt nur von Sechsecken berandet sind. Damit haben wir mindestens drei nicht isomorphe Isomere zu C_{40} gefunden.

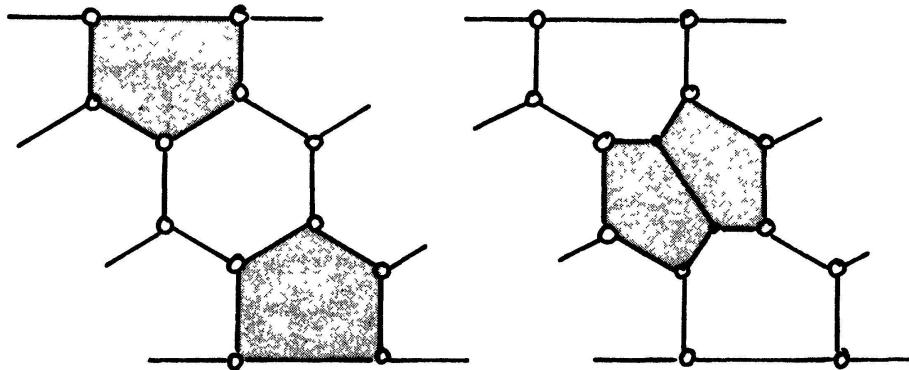


Fig. 17 Zur Konstruktion eines Isomers von C_{40}

Aus Abb.5 kennen wir auch bereits zwei nicht isomorphe Isomere zu C_{48} .

Durch jede lokale Modifikation mit konstanter Eckenzahl, wie etwa $p_2h_2 \mapsto p_2h_2$, lassen sich Fünfecke und Sechsecke auf geeigneten Clustern bewegen. Aber der Umfang der Bewegung ist offensichtlich beschränkt. Es ist also nicht zu erwarten, dass solche Bewegungen ausreichen, um alle Isomorphietypen eines Isomers zu erzeugen. Im folgenden Beispiel wird das Tetraedernetz von C_{28} aus Abb.2 als Ausgangspunkt einer Konstruktion benutzt. In einem ersten Zwischenschritt (Abb.18 a) wird die Eckenzahl erniedrigt, damit im darauf folgenden Übergang von C_{26} zu C_{28} an einer neuen Stelle mit $p_2h_1 \mapsto p_2h_2$ ein Sechseck eingefügt werden kann (Abb.18 b). Mit $p_2h_2 \mapsto p_2h_2$, an geeigneter Stelle angewendet, finden wir ein weiteres Muster vom Typ C_{28} (Abb.18 c). Es zeigt sich nun bereits in diesen eher einfachen Fällen, dass die Zuordnung der gefundenen Beispiele zu ihren Isomorphietypen nicht mehr offensichtlich ist.

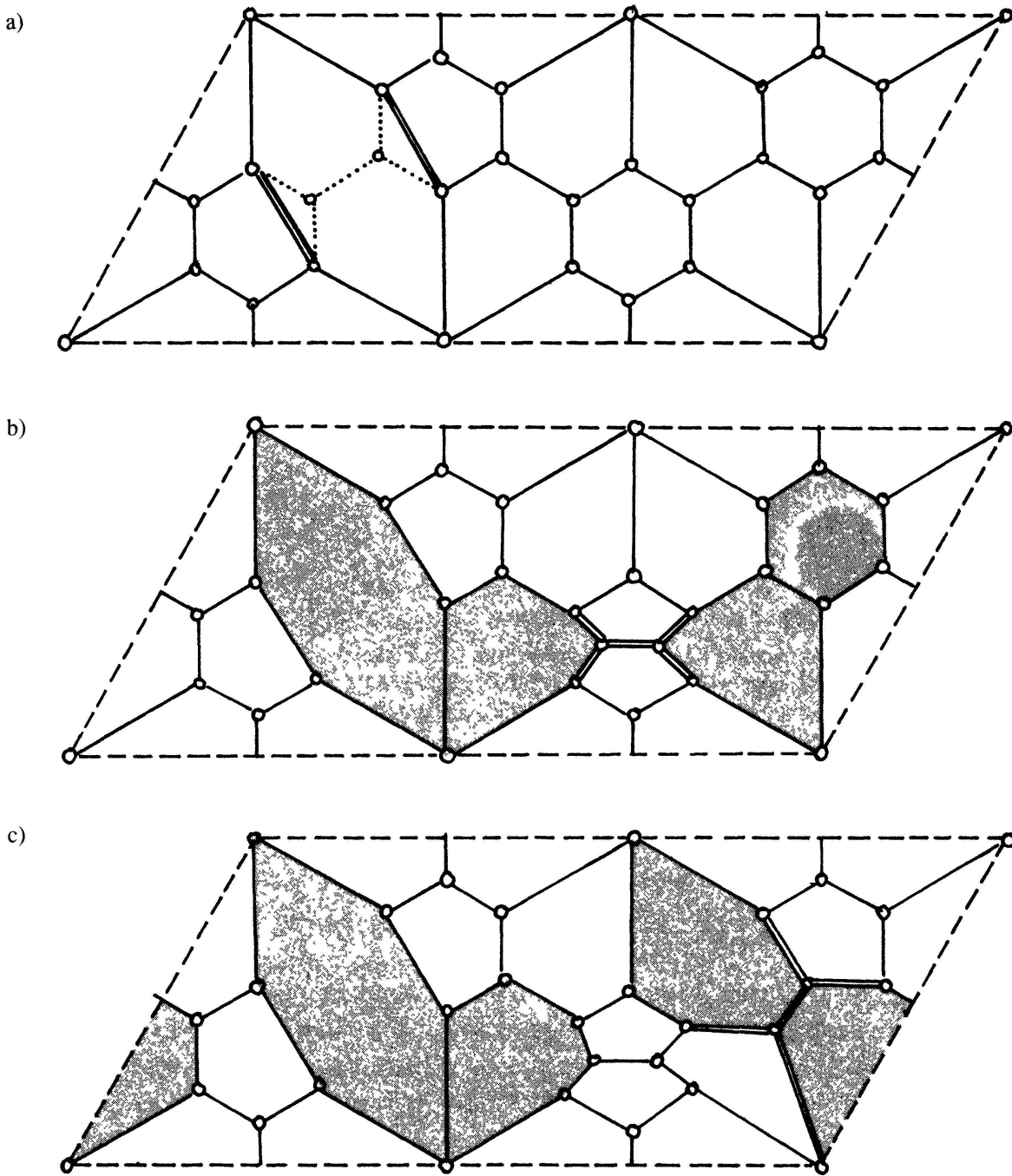


Fig. 18 Konstruktion von Isomeren zu C_{28}

Die beiden Netze (b, c) gleichen sich stark. Sie sind jedoch nicht isomorph, wie die folgende Überlegung zeigt. In beiden Clustern treten zwei Paare von Sechsecken auf, die sich längs einer Kante berühren. Darum ist der Umriss jeder der beiden Teilfiguren ein Zehneck. Zwischen den beiden Zehneckern gibt es genau zwei verbindende Kanten ("Brücken"). Der Rand der Zehnecke werde so orientiert, dass das Innere zur Linken liegt. Startet man nun in einem Randpunkt, von dem aus eine "Brücke" abzweigt und zählt die Zahl der Kanten bis zur Abzweigung der inneren Kante, welche das Zehneck in zwei Sechsecke teilt, so sind es im einen Fall zwei, im andern drei Kanten. Diese Zahlen sind Invarianten des Isomorphietyps.

Es ist bemerkenswert, dass es für C_{28} zwei spiegelsymmetrische Isomere gibt, die nicht isomorph sind (Chiralität). Insgesamt wurden also drei nicht isomorphe Isomere für C_{28} gefunden. Es ist mir aber bisher nicht gelungen nachzuweisen, dass es keine andern als diese gibt.

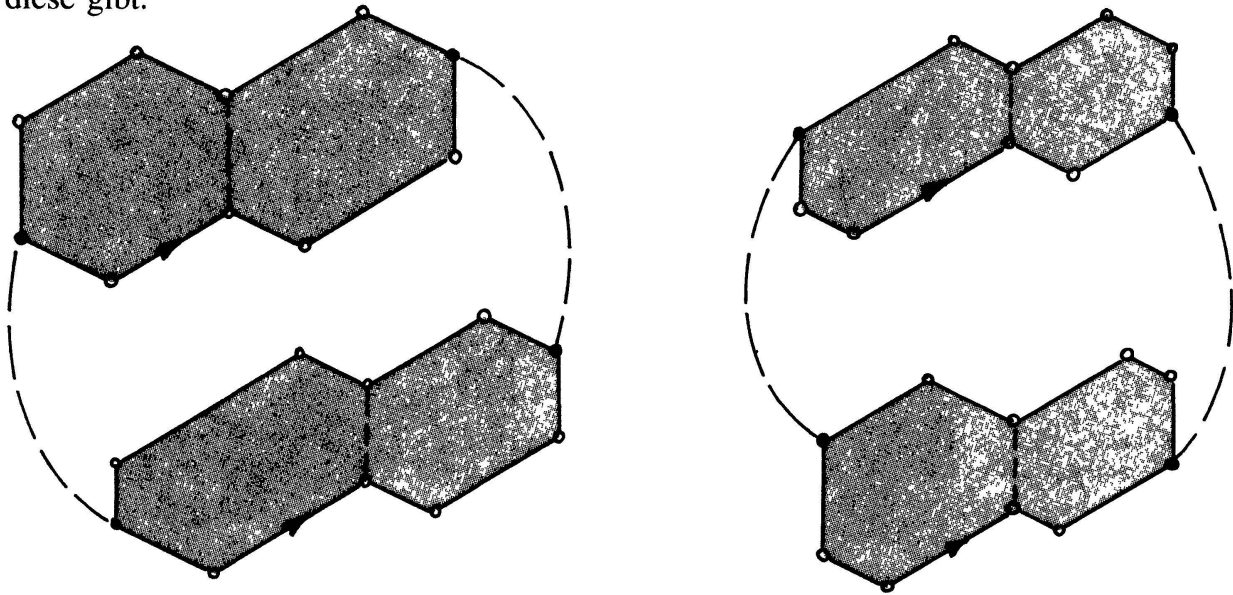


Fig. 19 Chirale Isomere bei C_{28}

Offene Fragen

1. Lassen sich alle Isomorphietypen von Clustern aus dem Dodekaeder durch lokale Modifikationen gewinnen?
2. Angenommen, zwei Cluster haben dieselbe Eckenzahl. Gibt es eine Folge von lokalen Modifikationen (mit nicht notwendig gleichbleibender Eckenzahl), die den einen in den andern Cluster transformieren?
3. Wir nennen zwei Cluster bewegungsäquivalent, wenn es eine Folge von lokalen Modifikationen gibt, die den einen Cluster in den andern überführt, wobei die Anzahl der Ecken in jedem Schritt unverändert bleibt. Welches sind die Klassen bewegungsäquivalenter Cluster? Sind es die Isomerieklassen?

Eine positive Antwort auf (1) würde auch (2) beantworten, da sogar jeder Cluster mittels lokaler Modifikationen auf dem Umweg über das Dodekaeder in jeden andern transformiert werden könnte.

Literatur

- [1] M. A. Duncan, D. H. Rouvray, Microclusters, Scientific American, Dec 89, Vol 261, Nr 6, pp 60–65.
- [2] R. F. Curl, R. E. Smalley, Fullerenes, Scientific American, Oct 1991, Vol 256, No 4, pp 32–41.
- [3] W. Krätschmer, Fullerite, Sterne und Weltraum, 12/1991, pp 736–738.
- [4] H. Walser, Reguläre Kreis-Netze, Didaktik der Mathematik 2, 1975, pp 121–133.

H.R. Schneebeli
Kantonsschule Baden
Seminarstr. 3
5400 Baden