

# Raumteilungen und Gitter

H. ZIMMERMANN

*Institut für Angewandte Physik, Lehrstuhl für Kristallographie und Strukturphysik, Universität Erlangen-Nürnberg*

## 1. Punkte

Unabhängig von der Diskussion der Historiker, welche Aussagen in den Büchern des Erzmäthematikers EUKLID authentisch sind, treten uns die überlieferten Bücher mit diesem ersten Satz entgegen:

1. Ein **Punkt** ist, was keine Teile hat.

Wir stellen fest, dass der Punkt als ein „Mangelhaftes“ beschrieben wird, obwohl er so wichtig ist, dass er als Ausgangs-„punkt“ der EUKLIDischen Erörterung gewählt wird und nicht etwa der „Raum“. Diejenigen, die einmal versucht haben, sich durch den Reisbreiwall in das Schlaraffenland der Mathematik zu fressen, wissen natürlich, dass man heute eine solche „Definition“ nicht mehr verwendet, sondern axiomatische Aussagen der Art: „Gegeben sei eine Menge  $P \dots$ “, die dann als Menge von Punkten bezeichnet wird, wenn die Elemente untereinander und zu Elementen weiterer Mengen bestimmte wohldefinierte Beziehungen erfüllen.

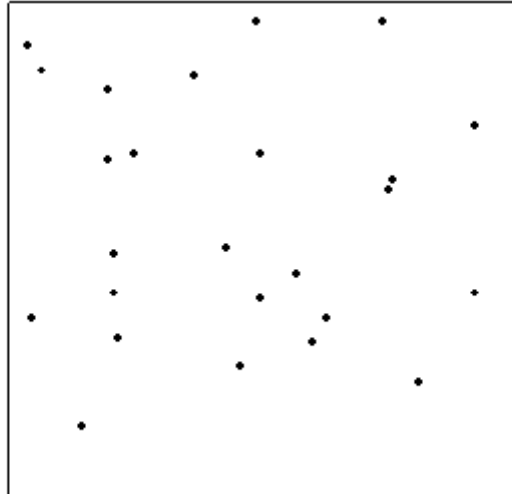
Die mathematische Umgangssprache der Physik lebt allerdings von sehr schlichten Vorstellungen, die der jeweiligen Situation angepasst werden können, etwa Messpunkte, die als Schnittpunkte zweier Koordinatenlinien vorgegeben sind, durch die Fehlerbalken aber zu erheblich ausgedehnten Gebilden werden können ähnlich wie der Brennpunkt, dessen Punkthaftigkeit von der Qualität der Linse abhängt. Atome sind so lange Punkte bis wir in die Kern- und Teilchenbetrachtung eintreten. Wir werden uns daher im folgenden auf den physikalischen Standpunkt stellen, dass ein Punkt ein räumliches Objekt ist, das unterhalb der Auflösungsgrenze des benutzten optischen Beobachtungsinstruments liegt, solange wir also keine Teilstrukturen erkennen können bezeichnen wir ein Objekt im Raum als Punkt, womit wir wieder am Ausgangs-„punkt“ angekommen sind: 1. Ein **Punkt** ist, was keine Teile hat.

## 2. Diskrete Punktmengen

Ein Punkt allein ist etwas Asoziales, das egozentrisch den ganzen umgebenden Raum beherrscht. Er eignet sich als Ursprung eines Koordinatensystems oder zur Verwendung im Sinne des HILBERTSchen Ausspruchs: „Es gibt Leute mit einem Gesichtskreis vom Radius null, den nennen sie ihren Standpunkt.“ Wir wollen uns mit Kollektiven von Punkten beschäftigen, bei denen jeder Punkt noch als Individuum erkennbar ist, die sich aber nicht einsam in der Unendlichkeit verlieren. Die für uns interessanten Punktmengen sind die *diskreten Punktmengen*:

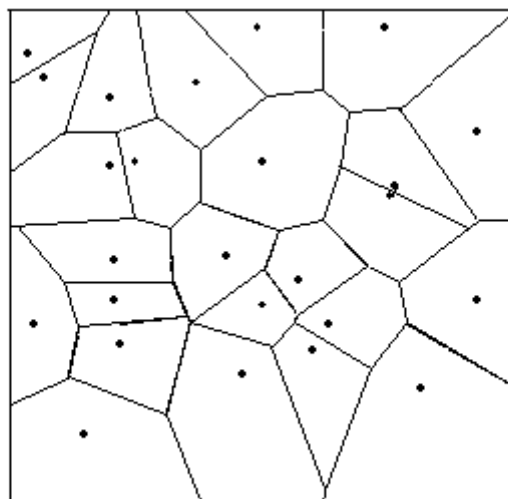
Eine Punktmenge  $P$  heißt *diskret*, wenn sie die Menge der Mittelpunkte einer Schar disjunkter Kugeln vom festen Radius  $r > 0$  ist.

Stattet man Punkte mit solcher Ellenbogenfreiheit aus, so beginnen sie sofort, ein Eigenleben in den sie umgebenden Raum hinein zu entfalten. Hier ein Beispiel:



**Abbildung 1**

Stellt man sich das Rechteck als Nährboden vor, auf dem die Punkte darauf verstreute Sporen darstellen, so darf man unter geeigneten Bedingungen erwarten, dass von den Sporen ausgehend nach allen Seiten gleichmäßig das Wachstum von Pilzkolonien beginnt. Wir ahnen natürlich aus unserer Schrebergartenerfahrung, dass mit Konflikten zu rechnen ist, sobald zwei Nahrungskonkurrenten aufeinander treffen. Gehen wir entgegen unserer menschlichen Lebenserfahrung aus den täglichen Nachrichtensendungen davon aus, dass Pilze vernunftbegabt sind und sich geometrisch (was nicht immer gerecht aber dafür friedlich ist) einigen, so erhalten wir zwangsläufig die Mittelsenkrechte der Verbindungslinie zweier Nachbarpunkte als Wachstumsgrenze. Jedes derartige Raumstück, das alle Punkte umfasst, die näher an dem ausgewählten Punkt als an allen anderen Punkten der diskreten Punktmenge liegen, heißt nach P. NIGGLI der *Wirkungsbereich* des entsprechenden Zentralpunkts. Aufgrund der Konstruktion als Durchschnitt von Halbräumen sind Wirkungsbereiche stets *konvexe* Punktmenge, d.h. sie enthalten mit je zwei ihrer Punkte auch deren Verbindungsstrecke.



**Abbildung 2**

Eine solche elementare Idee wie die des Wirkungsbereichs taucht in der Wissenschaftsgeschichte nicht nur einmal auf und da die Zahl der Drittbuchleser auch in den Naturwissenschaften spärlich ausfällt, können sich unterschiedliche Namen für die gleiche oder annähernd gleiche Sache über Jahrhunderte halten. In der Zahlentheorie spricht man von *DIRICHLET-Bereichen* bzw.

nach ihrer Klassifikation von *VORONOI-Polyedern*. Nach FRICKE & KLEIN spricht man in der Ebene von *Normalpolygonen* und im Raum entsprechend von *Normalpolyedern*, FEDOROV nannte sie *Stereoeder*, SCHOENFLIES *einfache Fundamentalbereiche*. In der Physik tauchen sie als *1. BRILLOUIN-Zonen* oder *WIGNER-SEITZ-Zellen* auf. Bei gründlichem Literaturstudium findet man sicher noch weitere Namen. Natürlich sind die Definitionen aufgrund des definitiven Umfelds nicht identisch, aber sie sind nur unterschiedliche Schatten derselben Idee.

Worin besteht nun der Gewinn beim Übergang von Abbildung 1 zu Abbildung 2? Da es sich um einen zufälligen Wurf von Punkten in ein Quadrat handelt, wird man statistische Beschreibungsgrößen suchen, die die vorliegende Punktverteilung charakterisieren.

In der Abbildung 1 fällt einem auf Anhieb die Punktedichte, also die mittlere Anzahl von Punkten pro Fläche ein. Das nächste ist sicher der mittlere Abstand, wobei man schon darüber philosophieren kann, ob man die Abstände aller Punktepaare in Betracht ziehen möchte (eine Anzahl die quadratisch mit der Punktzahl wächst) oder nur die zu den nächsten Nachbarn (mit linearem Wachstum), aber wie findet man diese?

Die Abbildung 2 bietet sofort einen viel größeren Wertevorrat an charakterisierenden Elementen. Natürlich ist die erste Beschreibungsgröße die Anzahl der  $n$ -Ecke. Betrachtet man nur diejenigen, die keine Kante mit dem Rand des Quadrats gemeinsam haben (sie erscheinen irgendwie singular), so sind dies 12 Polygone: 1 Achteck, 1 Siebeneck, 2 Sechsecke, 6 Fünfecke, 2 Vierecke. Im Mittel also 5,416-Ecke. Hier stößt man schon auf ein Problem der stochastischen Geometrie: Das Mittelwertgebilde selbst ist kein geometrisch interpretierbares Objekt. Natürlich muss man kapitulieren, wenn der kleine Prinz bittet: „Zeichne mir ein 5,416-Eck.“ Hier liegt ein grundsätzliches Problem für die Anwender der stochastischen Geometrie: „Wie sehen typische Modelle aus, die den statistischen Vorgaben genügen?“

Die Frage der Nachbarschaft eines Punktes lässt sich in Abbildung 2 leicht diskutieren. Die naheliegendste Lösung ist die Abzählung der Polygonkanten. Man kann aber auch einschränkende Bedingungen formulieren, indem man nur solche Kanten zählt, für die der Schnittpunkt mit der Verbindungslinie der Kantennachbarflächenmittelpunkte ein innerer Punkt der Kante ist.

Naheliegender ist auch eine Statistik der Verteilung der Kantenrichtungen und -längen über die Windrose. Man könnte sie zur Charakterisierung von Netzen von Lacksprüngen auf alten Gemälden heranziehen.

Schließlich kann man das Netzwerk selbst zum graphentheoretischen Untersuchungsgegenstand machen. In unserem Fall stellen wir fest, dass bis auf eine Ausnahme alle Knotenpunkte des Netzes den lokalen Grad 3 besitzen (also zu genau drei Kanten gehören). Kurz: In Abbildung 2 finden wir auf Anhieb einen großen Wertevorrat geeigneter Größen für die Charakterisierung der Punktverteilung. Dies ist typisch für die Wirkungsbereichsbetrachtung.

Es sei nicht verschwiegen, dass Methoden, die mit so friedlichen Gedanken entwickelt wurden, auch für die Optimierung von Bombenteppichen im Vietnamkrieg Verwendung fanden - Wissenschaft bewegt sich nie „im reinen Raum, in den die Blumen unendlich aufgehen. Immer ist es Welt und niemals nirgends ohne nicht.“ (RILKE)

### 3. Wirkungsbereiche von Gittern

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, welche Besonderheiten die Idee des Wirkungsbereichs aufweist, wenn man die zugrundeliegende diskrete Punktmenge spezialisiert. Ein besonders schönes Beispiel bieten die dreidimensionalen *Gitter*, deren diskrete Punktmenge durch die als Ortsvektoren interpretierten Menge aller ganzzahligen Linearkombinationen dreier Basisvektoren erzeugt werden können. Da alle Gitterpunkte untereinander translatorisch gleichwertig, also ununterscheidbar, sind, ist klar, dass alle Gitterpunkte kongruente, gleich orientierte Wirkungsbereiche besitzen müssen. Da der Wirkungsbereich jedenfalls in dem Parallelepipiped, das von den Mittelsenkrechten der Basisvektoren und ihrer Gegenvektoren aufgespannt wird, enthalten sein

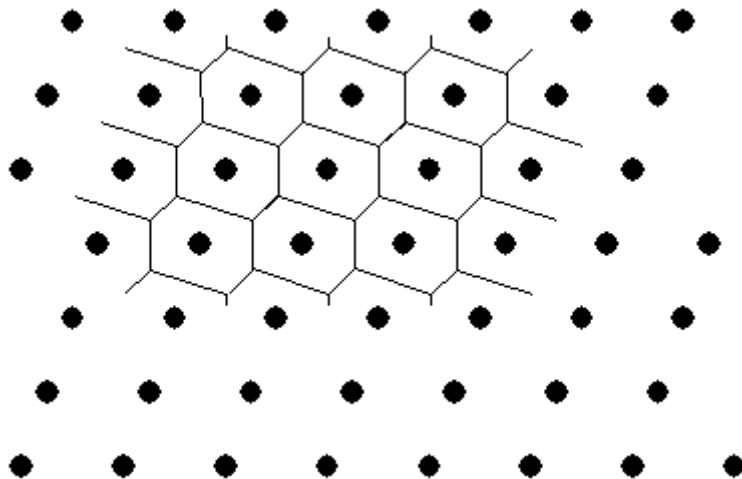
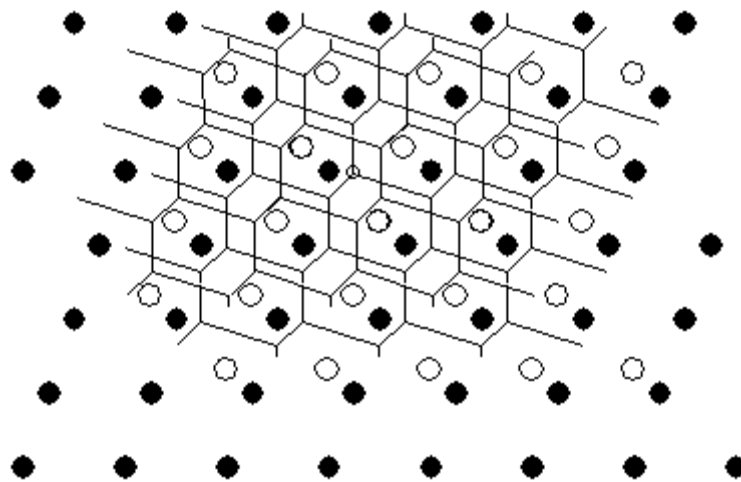


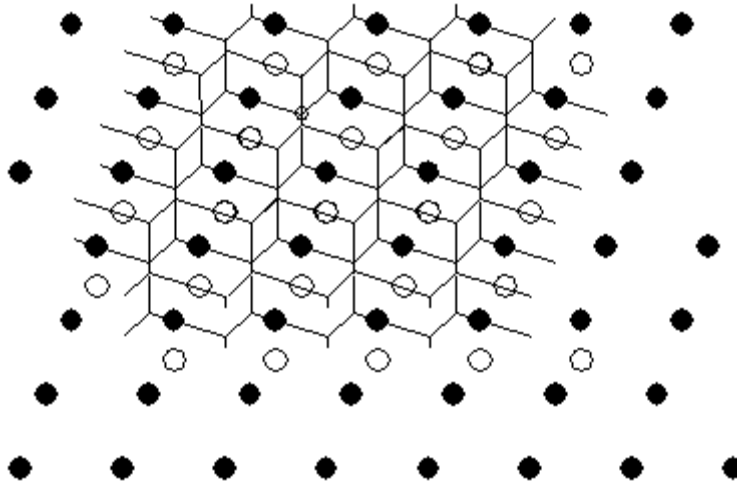
Abbildung 3

muss, können nur endlich viele weitere Ortsvektoren mit ihren Mittelsenkrechten Flächen am Wirkungsbereich bestimmen. Der Wirkungsbereich eines Gitterpunkts ist daher ein konvexes Polyeder. Da jeder Flächenmittelpunkt ein Inversionszentrum des Gitters enthält, muss wegen der Konvexität des Wirkungsbereichs der Flächenmittelpunkt innerer Punkt der Grenzfläche sein und Flächen müssen an kongruente Flächen eines Nachbarpolyeders grenzen, ebenso Kanten an Kanten und Ecken an Ecken. Die Kenntnis des Wirkungsbereichs legt damit auch das Gitter vollständig fest.

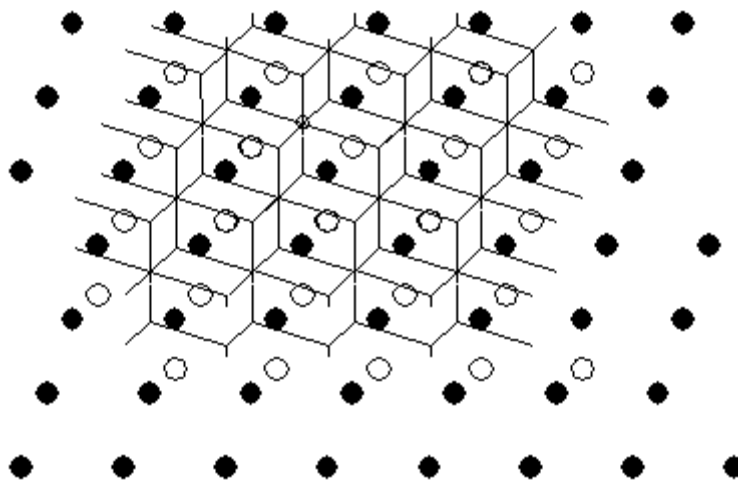


Von DELAUNAY (DELONE) wurde eine sehr schlichte Konstruktion für die Wirkungsbereiche der Gitter angegeben. Sie geht davon aus, dass das Problem für ebene Netze sehr einfach lösbar ist:

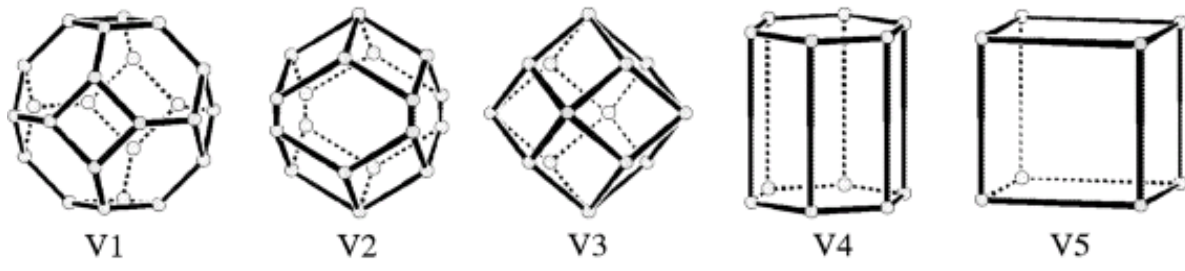
Der ebene Wirkungsbereich eines Netzpunkts ist entweder ein Sechseck mit parallelen Gegenkanten oder ein Rechteck. Wir wählen speziell ein Netz aus, das von zwei kürzesten nicht kollinearen Gittervektoren aufgespannt wird. Diese Wahl garantiert, dass senkrecht zum Netz eine Kante des Wirkungsbereichs existiert.



Hier soll nur der Sechseck-Fall behandelt werden, der Rechteck-Fall ist vergleichsweise trivial. Nach dieser Wahl wird das gesamte Gitter in Schichten paralleler Netze zerlegt. Die Polygone in der Ebene werden dabei zu hexagonalen Prismen. In der benachbarten Schicht ergibt sich dieselbe Konstruktion, sodass bei orthogonaler Stapelung hexagonale Prismen mit Pinakoid als Wirkungsbereichspolyeder entstehen. Bei nicht-orthogonaler Stapelung kann man die drei weiteren Fälle anhand der Lage des Knotens vom Grad 3 in der Projektion diskutieren:

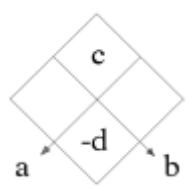


Aus diesen Bildern, die „Kopfbilder“ einer Parallelprojektion des Wirkungsbereichspolyeders zeigen, kann man zunächst feststellen, dass als Grenzflächen der Wirkungsbereichspolyeder nur Vierecke und Sechsecke auftreten. Außerdem kann man ablesen, wie diese Grenzflächen miteinander über Ecken und Kanten verknüpft sind, kurz man findet die fünf Typen der *VORONOI-Polyeder*, die in der folgenden Abbildung in ihrer jeweils höchstsymmetrischen Form dargestellt sind.



Hochsymmetrische Vertreter der fünf VORONOISchen Polyeder

An diesen Polyedern kann man ohne weitere metrische Betrachtungen kombinatorisch die möglichen Punktsymmetrien der VORONOI-Polyeder und damit die Punktsymmetrien der Gitter ablesen. Beispielsweise sieht man sofort, dass mit diesen Polyedern neben der Identität nur sechszählige, vierzählige, dreizählige und zweizählige Drehungen verträglich sind und man kann ihre möglichen Lagen am Wirkungsbereichspolyeder diskutieren. Beispiel:



Drehachsen des VORONOISchen Polyeders V2  
 Flächen :  $8v + 4s$  .                      2 senkrecht s  
 Kanten :  $8v^2 + 16vs + 4s^2$  .            2 senkrecht  $s^2$   
 Ecken :  $2v^4 + 8v^2s + 8vs^2$  .            4 durch  $v^4$

1	1	a	b	c	d	ac	ad	bc	bd	cd		1	1
2	4[c-d]	b	-a	a+b	-b-c	bc	bd	ad	ac	cd		4 2 2 $v^4 s s^2$	1 - 7
3	2[c-d]	-a	-b	-d	-c	ad	ac	bd	bc	cd		2 2 2 $v^4 s s$	1,3, 4,5
4	2[a]	a	-b	-a-c	b+c	ad	ac	bc	bd	cd		2 s	1,4
5	2[b]	-a	b	-b-c	a+c	ac	ad	bd	bc	cd			1,5
6	2[a+b]	b	a	d	c	bd	bc	ad	ac	cd		2 $s^2$	1,6
7	2[a-b]	-b	-a	-c	-d	bc	bd	ac	ad	cd			1,7

Die Basis (a,b,c) ist dabei durch Vektoren senkrecht zu Wirkungsbereichen gewählt und  $d = -a-b-c$ .

Führt man diese Diskussion systematisch und in Kombination mit der Basis kürzester Gittervektoren durch, so kann man auf diesem Weg sehr leicht die 7 Holoedrien und die 14 Typen der BRAVAIS-Gitter finden. Eigentlich findet man auf diesem Weg die 24 *symmetrischen Sorten* der Gitter, d.h. eine Klassifikation der fünf VORONOI-Polyeder nach ihren Symmetrien. Diese Klassifikation ist feiner als die der BRAVAIS-Gittertypen und erweist sich als besonders hilfreich bei der Lösung des Problems, für jedes Gitter eine standardisierte Basis zu finden. Nützlich ist in diesem Zusammenhang insbesondere die Tatsache, dass die Vektoren einer *Basis kürzester*

*Gittervektoren* stets Flächen am Wirkungsbereich erzeugen, so dass unter den Flächennormalen des Wirkungsbereichs nur eine Auswahl zu treffen ist.

Außerdem bildet der Wirkungsbereich eine asymmetrische Einheit der Translationsgruppe, die im Gegensatz zur Elementarzelle unter der Punktsymmetrie des Gitters invariant ist. Diese Eigenschaft war es vor allem, die WIGNER und SEITZ veranlasst haben, den Wirkungsbereich als Elementarzelle zu verwenden. Im reziproken Raum/Gitter taucht dieselbe Betrachtung als 1. BRILLOUIN-Zone auf. Hier und in der Darstellungstheorie zeigt sich aber auch eine gewisse Problematik: Während im kubischen Gitter allein die Symmetrie den Wirkungsbereich charakterisiert, kommen in niedersymmetrischen Systemen unterschiedliche VORONOI-Typen bei gleicher Symmetrie vor, was etwa bei der Klassifikation von irreduziblen Darstellungen zu metrikabhängigen Änderungen der Beschreibung bei gleicher Symmetrie führt. In der Regel bezieht man sich dann doch wieder auf das Parallelepiped der Elementarzelle.

DELONE hat gezeigt, dass sich die Klassifikation der VORONOI-Polyeder auch im vierdimensionalen Raum durchführen lässt. Die Netzwerke der Kanten lassen sich in den dreidimensionalen Raum projizieren und liefern unserer Anschauung eine Krücke auf dem Weg in den vierdimensionalen Raum. Jedem, der einmal ernsthaft in die Monographie von BROWN, BÜLOW, NEUBÜSER, WONDRAUSCHEK & ZASSENHAUS über die vierdimensionalen Raumgruppen geschaut hat, wird diese als nützliche Hilfestellung erscheinen.

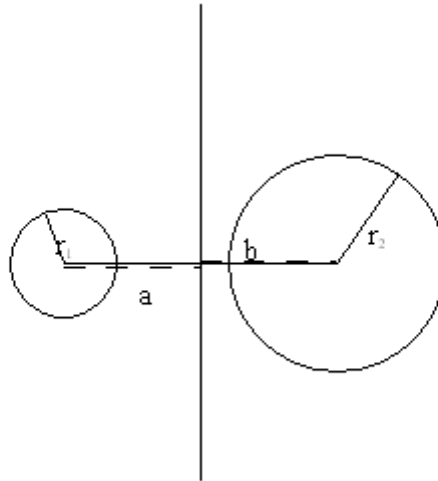
#### **4. Wirkungsbereiche in regulären Punktsystemen und Kristallstrukturen**

Was man mit Gittern tut, kann man natürlich in gleicher Weise mit allgemeinen *regelmäßigen Punktsystemen*, also Mengen von Punkten die unter den Operationen einer Raumgruppe äquivalent sind, tun. E. KOCH hat dies etwa 1972 in ihrer Dissertation für alle kubischen Punktlagen mit weniger als drei Freiheitsgraden durchgeführt. Angeregt wurden solche Untersuchungen nicht zuletzt durch Fragen, die aus der anorganischen Chemie kamen. So hielt etwa 1969 R. HOPPE einen Vortrag unter dem Titel: „Die Koordinationszahl - ein „anorganisches Chamäleon““, der 1970 publiziert wurde. In dieser Arbeit wird festgestellt, dass die alleinige Betrachtung der nächsten Nachbarn keine den Chemiker befriedigende Definition der Koordinationszahl liefert. Statt dessen entwickelte er auf der Basis der Wirkungsbereiche und der Flächengrößen nicht-notwendig ganzzahlige *effektive Koordinationszahlen*. Als triviales Beispiel sei hier nur der Wirkungsbereich von  $\alpha$ -Eisen, das ein kubisch innenzentriertes Gitter bildet, erwähnt. Die Koordinationszahl ist im formalen Sinn 8, die Nachbaratome gehören zu den Sechseckflächen des Wirkungsbereichs. Normiert man diese Flächeninhalte auf 1 und addiert die entsprechend normierten Werte für den Inhalt der 6 Vierecksflächen, so erhält man nach den Rechenvorschriften von HOPPE eine effektive Koordinationszahl von 10,31. Er hat in seiner Arbeit erläutert, warum dies aus chemischer Sicht eine sinnvolle Zahl sein kann.

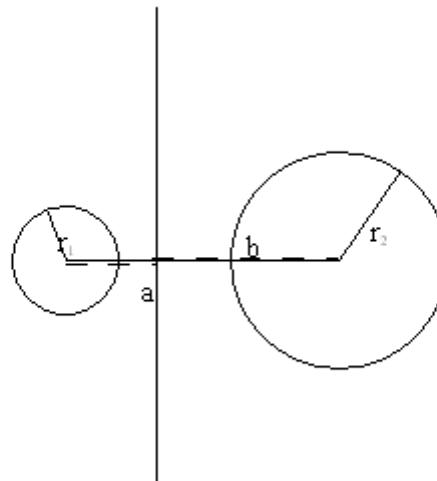
Es ist keineswegs so, dass diese Betrachtung ein historisch abgearbeitetes Feld ist. In neueren Arbeiten von PERESYPKINA & BLATOV (2000a,b), BLATOVA, BLATOV & SEREZHKIN (2000) werden Molekülpackungen und spezielle Seltenerd-Komplexe mit genau solchen Methoden untersucht.

Für die Untersuchung von Kugelpackungen bilden die Wirkungsbereiche ein besonders erhellen- des Hilfsmittel. Insbesondere findet man, dass die räumlichen Lücken in Packungen gerade durch die Eckpunkte der Wirkungsbereiche fixiert sind, denn die Ecken sind gerade diejenigen Punkte, die von mehreren Kugelmittelpunkten gleich weit entfernt sind. Die Kantenmitten kennzeichnen demgegenüber planare Lücken und die Flächenmitten lineare Lücken. Am  $\alpha$ -Eisen

kann man daher sofort ablesen, dass es dort keine „Oktaederlücke“ gibt (wie gelegentlich in der Literatur behauptet wird). Für eine Beschreibung von Kristallstrukturen vom Kugelpackungsstandpunkt aus erweist sich die Verwendung von Wirkungsbereichszellen als sehr hilfreich, diesen Ansatz hat CHUNG CHIEH in mehreren Arbeiten 1979, 1980 und 1982 verfolgt. Schon in der Frühzeit dieser Anwendungen des Wirkungsbereichskonzepts auf Kristallstrukturen fiel ein Problem auf, das sofort erscheint, wenn die Struktur aus mehr als einer Atomsorte besteht. Die klassische Theorie der Ionenradien sagt dann, dass Punkt nicht mehr gleich Punkt ist und man der größeren Kugel auch einen größeren Wirkungsbereich zubilligen muss. Hier zunächst die gewöhnliche Mittelsenkrechtenkonstruktion:



Die naheliegendste Idee ist natürlich, die mittelsenkrechten Ebenen wie gehabt zu konstruieren nur mit dem Unterschied, dass man sie die Verbindungslinie nicht in der Mitte sondern im Radienverhältnis teilen lässt. Man spricht dann von einer *Verhältnisebene*. Der Nachteil dieser Konstruktion liegt darin, dass in diesem Verfahren i.A. keine lückenlose Parkettierung entsteht.



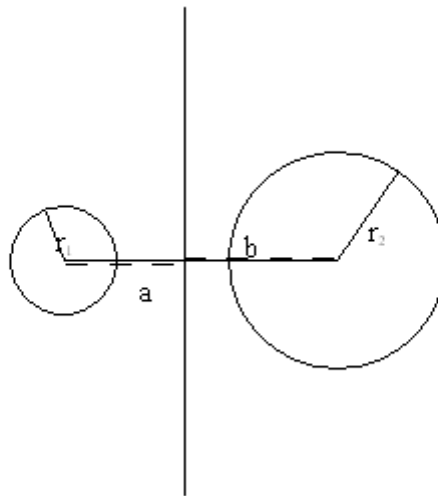
Um diese Randbedingung zu erfüllen, wurde die Idee der *Potenzebene* verwendet, die in gleicher Weise funktioniert, nur dass das Teilverhältnis der Strecke nach einer komplizierteren Formel ermittelt wird:

Dabei bezeichnet  $d$  den Abstand der Kugelmittelpunkte,  $r_1$  und  $r_2$  ihre Radien und  $a$  die zu  $r_1$

$$\frac{a}{b} = \frac{1 + \frac{r_1^2 - r_2^2}{d^2}}{1 - \frac{r_1^2 - r_2^2}{d^2}}$$

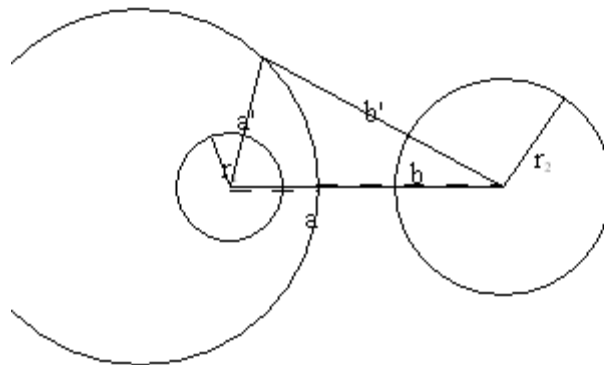


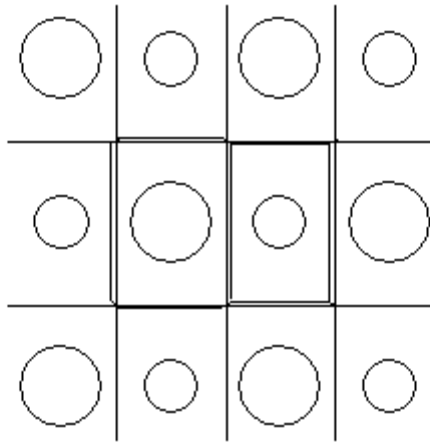
gehörige Teilstrecke sowie  $b$  die zu  $r_2$  gehörende,  $d = a + b$ . Für einander berührende Kugeln erhält man dieselbe Ebene wie im Fall der Verhältnisebenenkonstruktion. Falls sie sich nicht berühren, wird das Teilverhältnis jedoch untertrieben.



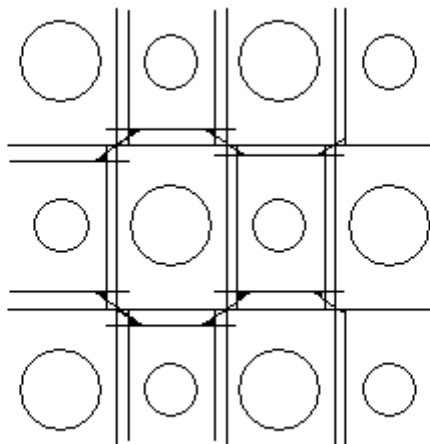
Eine weitere Möglichkeit der Konzepterweiterung bietet der Kreis des APOLONIUS, der in der folgenden Konstruktion skizziert ist. Das hierbei aufkommende Problem liegt in den nun gekrümmten Oberflächen und der Erscheinung, dass die so konstruierten Wirkungsbereiche nicht mehr konvex sein müssen.

Die drei konstruktiven Alternativen seien hier an einem ebenen Beispiel demonstriert:

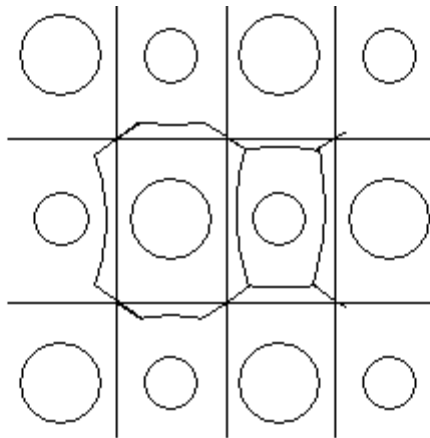




Potenzebenen

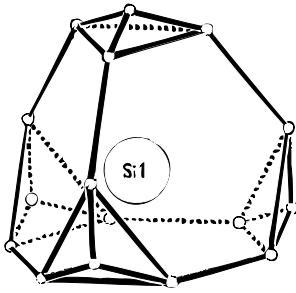


Verhältnisebenen

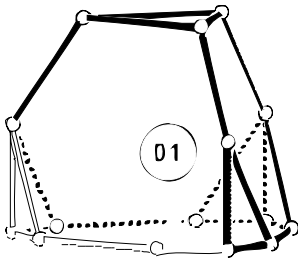


Appolonius

## 5. Prinzipielles und Zusammenfassendes

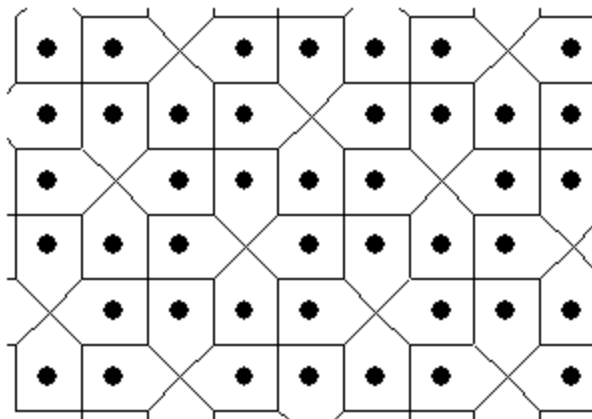


Aufgrund der Eindeutigkeit der Wirkungsbereichskonstruktion ist klar, dass die Wirkungsbereiche bei vorgegebener Punktmenge festgelegt sind. Insbesondere bei regulären Punktmenge stellt sich aber auch die umgekehrte Frage, ob bei vorgegebenem Wirkungsbereich auch die reguläre Punktmenge fixiert ist, d.h. ob die „Fernordnung“ aus der „Nahordnung“ folgt. Dabei stimmt einen etwa der Vergleich des Wirkungsbereichs der kubischen Diamantstruktur und des hexagonalen Diamanten (Wurtzit) recht hoffnungsfroh.



Im Kern sind beide Polyeder eckengestützte Tetraeder. Die unterschiedliche Symmetrie und Fernordnung drückt sich in den kleinen auf den Dreiecksflächen aufgesetzten Pyramiden aus, die man dann auch nur in der der Struktur entsprechenden Weise zusammensetzen kann. Trotzdem gibt es schon in zwei Dimensionen leicht konstruierbare Gegenbeispiele, etwa die Punktlage  $4d_{xy}$  in  $p4$  mit  $x = 2/5$ ,  $y = 1/5$ :

Bei der Behandlung als reines Parkettierungsproblem fallen einem sofort zahlreiche Lösungen ein, wie man aus diesen Bausteinen auch andere Muster basteln kann. Beispielsweise kann man alle Pentagone mit der Dachspitze nach oben aufreihen und die nächste Reihe mit der Dachspitze nach unten usw. Man erhält dann zwar eine Parkettierung aber keine Wirkungsbereichsteilung. Trotzdem liefert die obige Abbildung auch ein anderes unanfechtbares Gegenbeispiel. Man sieht, dass in dem Muster alle aus den Kanten gebildeten „Hakenkreuze“ im gleichen Drehsinn orientiert sind. Deshalb liefert das gespiegelte Muster sofort ein echtes Gegenbeispiel.



Schon DELONE hat gezeigt, dass bei Hinzunahme einer begrenzten Nachbarschaft die Parkettierung durch Wirkungsbereiche eindeutig wird. Von GALIULIN wurde vermutet, dass hierfür die *erste Korona* genügt, d. h. der Zellenkomplex, der alle Polyeder umfasst, die das Zentralpolyeder berühren. Als ich mich zuletzt mit dem Thema befasst habe, stand der Beweis dafür noch aus, aber P. ENGEL hat in einem Vortrag sehr überzeugende Begründungen dafür geliefert. Mir scheint, dass diese mathematisch hochinteressante Frage für die Nutzbarmachung der Wirkungsbereiche in der Strukturtheorie nur von bescheidenerem Gewicht ist, analog zur Problematik der homometrischen Strukturen, also verschiedenen Strukturen, für die die Menge der interatomaren Vektoren jedoch übereinstimmen, die in der RÖNTGENstrukturanalyse im Prinzip die Eindeutigkeit der Strukturbestimmung widerlegen, in der Praxis aber nur die Rolle eines verkorkten Flaschengeistes spielen. In der Regel können wir jedenfalls davon ausgehen, dass in den Details des Wirkungsbereichs auch wesentliche Charakteristika der Fernordnung codiert sind.

Zusammenfassend sei festgestellt, dass die Analyse diskreter Punktmenge durch Wirkungs-

bereichsteilungen ein sehr wirkungsvolles Hilfsmittel für die Beschreibung und Klassifikation darstellt, da sie

1. einen Satz geometrischer Parameter (Flächen, Kanten, Ecken, Netzwerke) bereitstellt, die zur Charakterisierung herangezogen werden können;
2. durch die Reduktion auf elementargeometrische Stücke eine kombinatorische Topologie und Gruppentheorie (etwa durch baryzentrische Teilung der Grenzflächen) entwickelt werden kann, die eine Alternative zur „geometrischen“ Gruppenbetrachtung liefert und eine Bearbeitung mit Rechnern erleichtert
3. und schließlich im Fall periodischer Punktmengen viele Eigenschaften des unendlich ausgedehnten Punktmusters in ein endliches Polyeder übersetzt.
4. eine lineare Näherung für Nullpotentialflächen darstellt.

### Literatur

BLATOVA, O. A., V. A. BLATOV & V. N. SEREZHKIN, Study of rare-earth -complexes by means of Voronoi-Dirichlet polyhedra. *Acta Cryst.* (2000/2001) ??

BROWN, H., BÜLOW, R., NEUBÜSER, J., WONDRATSCHEK, H. & ZASSENHAUS, H., Crystallographic Groups of Four-Dimensional Space. Wiley, 1978.

BURZLAFF, H. & ZIMMERMANN, H., Kristallsymmetrie, Kristallstruktur. Verlag Rudolf Merkel, Erlangen (1993)

CHUNG CHIEH, P., *Acta Cryst.* **A35** (1979) 946-952., *Acta Cryst.* **A36** (1980) 819-826., *Acta Cryst.* **A38** (1979) 346-349.

DELAUNAY, B., Neuere Darstellung der geometrischen Kristallographie, *Z. Kristallogr.* **84**, 109 ff.

ENGEL, B., Über Regularitätseigenschaften von diskreten Punktsystemen, Vortrag AGKr-Tagung Tübingen, 1983.

EUKLID, Die Elemente, Buch I-XIII, Ausgabe der Wissenschaftl. Buchges. Darmstadt, 1969

HOPPE, R., Die Koordinationszahl - ein „anorganisches Chamäleon“, *Angew. Chem.*, **82** (1970) 7-16

KOCH, E., Wirkungsbereichspolyeder und Wirkungsbereichsteilungen zu kubischen Gitterkomplexen mit weniger als drei Freiheitsgraden, Dissertation Marburg, 1972

PERESYPKINA, E. V. & V. A. BLATOV, Molecular coordination numbers in crystal structures of organic compounds, *Acta Cryst.* (2000), **B56**, 501-511.

PERESYPKINA, E. V. & V. A. BLATOV, Topology of molecular packing in organic crystals, *Acta Cryst.* (2000), **B56**, 1035-1045.