



universität
wien

DIPLOMARBEIT

Titel der Diplomarbeit

Aperiodische Parkettierungen der Ebene und Beugungsbilder von Quasikristallen

angestrebter akademischer Grad

Magister der Naturwissenschaften (Mag. rer. nat.)

Verfasser: Patrick Fabian
Matrikel-Nummer: 9830186
Studienrichtung: Lehramt Mathematik
und Geographie und Wirtschaftskunde
Betreuer: Prof. Dr. Peter Schmitt

Wien, am 16. 06. 2010

Inhaltsverzeichnis

0	Zusammenfassung	4
1	Kristalle und Quasikristalle	6
1.1	Kristalle	6
1.1.1	Der klassische Fall	6
1.1.2	Paradigmenwechsel in der Kristallographie	10
1.1.3	Exkurs: Das Konzept des Paradigmas	11
1.2	Quasikristalle in der Festkörperphysik	13
1.2.1	Synthetisch hergestellte Quasikristalle	13
1.2.2	Erster Fund eines natürlich gewachsenen Quasikristalls . .	15
1.2.3	Modellierung von quasikristallinen Phasen	16
2	Quasikristalle aus geometrischer Sicht	18
2.1	Delone Mengen	18
2.2	Gitter und Duale Gitter	21
2.3	Symmetrie	24
2.3.1	Symmetriegruppen	27
2.3.2	Die Kristallographische Restriktion	28
2.4	Penrose-Muster	30
2.5	Algebraische Theorie der Penrose-Muster	33
2.5.1	Geometrische Interpretation von deBruijn	37
2.5.2	Pinwheel-Tiling und Quaquaiversal-Tiling	38
2.6	Theorie der Distributionen	39

3	Beugung	42
3.1	Einführung in die Beugungsgeometrie	42
3.1.1	Ein-Punkt Beugung	43
3.1.2	Zwei-Punkt Beugung	45
3.1.3	N-Punkt Beugung	47
3.2	Fouriertransformationen	47
3.2.1	Das Wiener Diagramm	49
3.2.2	Dirac Deltas	50
3.3	Die Beugungs-Bedingung	53
4	Parkettierungen	57
4.1	Periodische Parkettierungen	62
4.2	Aperiodische Parkettierungen	63
4.3	Ähnliche Parkettierungen	65
4.4	Wang-Tiles	66
4.5	Entscheidbarkeit des Parkettierungsproblems	69
5	Fraktale	73
5.1	Iterierte Funktionensysteme	73
5.1.1	Kontraktionen	73
5.1.2	Kompakte Mengen	75
5.1.3	IFS	76
5.2	Beispiele von fraktalen Mengen	77
5.2.1	Die Cantor-Menge	77
5.2.2	Das Sierpinski Dreieck	78
5.2.3	Die Koch-Kurve	80
5.3	Maß und Dimension von Fraktalen	82
5.3.1	Das Hausdorff - Maß	83
5.3.2	Die Hausdorff-Dimension	87
6	Ein Kubische Selbstähnliche Struktur	89
6.1	Der etwas andere Zusammenhang von Würfel und Ikosaeder	91
6.2	Kubische Geometrie der 5-zähligen Beugungsbilder	96
6.2.1	Weitere Ansichten	98

6.2.2 Ein 3D - Modell 99

Kapitel 0

Zusammenfassung

1984 publizierten Dany Shechtman und seine Kollegen ihre Ergebnisse über neuartige metallische Legierungen, deren atomare Struktur die übliche Periodizität fehlte, obwohl ein hohes Maß an Ordnung feststellbar war.¹ Diese neuartigen Materialien wurden daraufhin *Quasikristalle* genannt. Der Ausdruck "quasi" ist dabei bezeichnend für die Irritation der Wissenschaftsgemeinde, denn bis zu diesem Zeitpunkt teilte man Festkörper in zwei Klassen ein: solche mit periodischer Struktur (also Kristalle) und jene, denen jegliche Ordnung fehlt (z.B. Glas). Quasikristalle konnten nun weder der einen, noch der anderen Klasse zugeordnet werden, und sprengten damit den wissenschaftlichen Rahmen.

Über 20 Jahre der Forschung folgten, viele Eigenschaften wurden entdeckt, doch die Frage, was denn nun ein Quasikristall ist, wurde nicht befriedigend beantwortet. So gibt Marjorie Senechal, eine der führenden WissenschaftlerInnen auf diesem Gebiet, 2003 in einem Artikel darauf folgende Antwort: "The long answer is: no one is sure. But the short answer is straightforward: a quasicrystal is a crystal with forbidden symmetry."² Was es mit dieser "verbotenen Symmetrie" auf sich hat, wollen wir im folgenden klären.

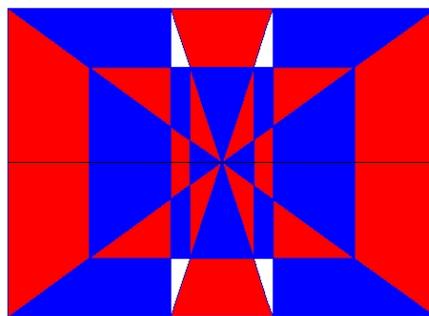
Dazu wollen wir zunächst auf die klassische Situation in der Kristallographie eingehen, und dann auf die Auswirkungen der Entdeckung von Quasikristallen auf

¹vgl. [SBGC84]

²vgl. [Sen06]

die Wissenschaftsgemeinde eingehen. Dannach werden Aspekte der mathematischen Theorien mit besonderem Augenmerk auf geometrische Ansätze behandelt. Da zur Strukturbestimmung von Festkörpern Beugungstechniken wie Elektronenmikroskopie zum Einsatz kommen werden wir uns auch der Beugungstheorie und Fouriertheorie beschäftigen. Die Beschäftigung der MathematikerInnen mit Quasikristallen rührt von der Fragestellung der Aperiodischen Parkettierungen her, weshalb diesen ein Kapitel gewidmet ist. Um das Bild abzurunden, ist ein Kapitel Fraktalen gewidmet, da das Phänomen der Selbstähnlichkeit auf diesem Gebiet besondere Bedeutung hat.

Zum Schluss steht der Versuch einer 3D-Modellierung der Beugungsbilder mithilfe von Würfeln. Als Nebenprodukt wird ein interessanter und wenig beachteter Zusammenhang zwischen kubischen und ikosaedrischen Strukturen aufgezeigt.



Kapitel 1

Kristalle und Quasikristalle

1.1 Kristalle

1.1.1 Der klassische Fall

Nach klassischer Definition spricht man von Kristallen, wenn die atomaren Bausteine eines festen Stoffes eine Fernordnung in allen drei Raumrichtungen aufweisen.¹ Zur Beschreibung des Aufbaus des Kristalls genügt die Kenntnis um die *Elementarzelle* sowie der drei *Basisvektoren* $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Die Basisvektoren spannen ein Translationsgitter auf, wobei jeder Punkt im Gitter durch den Vektor

$$\vec{p} = n_1 \cdot \vec{a} + n_2 \cdot \vec{b} + n_3 \cdot \vec{c} \quad (1.1)$$

beschreibbar ist mit $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$. Die Elementarzelle wird durch die *Gitterkonstanten* (Beträge der Basisvektoren) und die von den Basisvektoren aufgespannten Winkel charakterisiert.

Mit der regelmäßigen Anordnung der Elementarzelle anhand des Translationsgitters erhalten wir *Periodizität*.

Untersucht man Translationsgitter auf *Symmetrie*, so kann man sie in sieben Klassen einteilen.² Das Vorhandensein von Symmetrien beeinflusst natürlich das

¹vgl. dazu [Mas07] S. 15ff.

²Die 7 Klassen: Kubisch, Tetragonal, Hexagonal, Trigonal, Rhombisch, Monoklin, Triklin.

Translationsgitter. Zum Beispiel findet man im hexagonalen System entlang der z -Achse eine dreizählige Drehachse vor, weshalb die Winkel zwischen den Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 120° sein müssen.

Wie in Abb. 1.1 A für den zweidimensionalen Fall zu sehen, ist die Elementarzelle nicht eindeutig definiert. Alle vier Elementarzellen sind bei kleinstmöglichem Volumen repräsentativ für das Gitter. Bei der Klassifikation der Kristalle

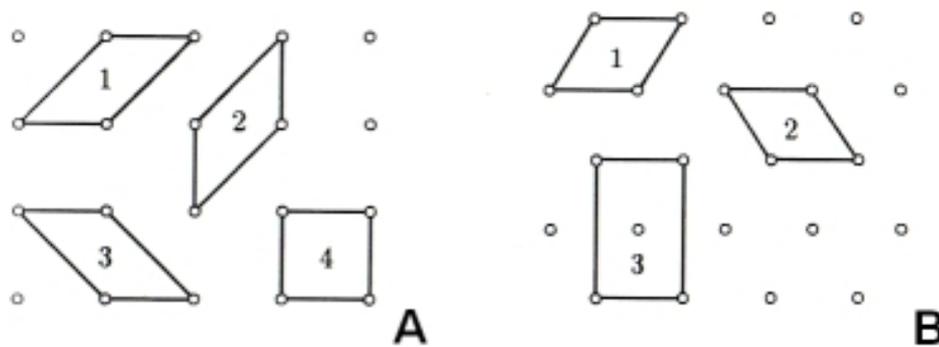
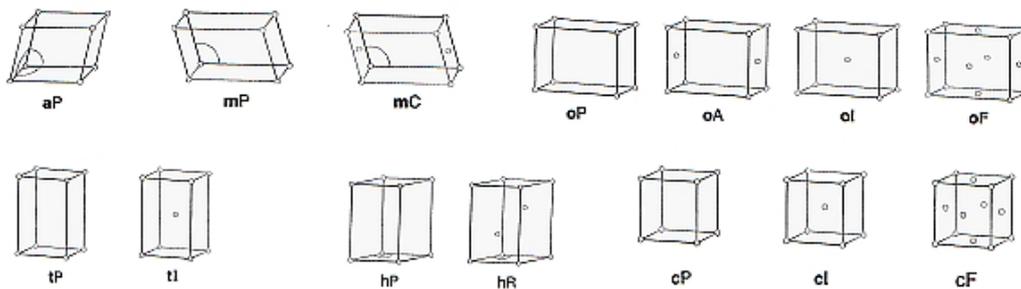


Abbildung 1.1: A: Verschiedene Elementarzellen in einem Translationsgitter
 B: Zentriertes Translationsgitter bei Wahl von Zelle 3
 nach [Mas07] S.19.

ist es hilfreich, die Elementarzelle so zu wählen, dass sie mit der größtmöglichen Symmetrie vereinbar ist. Der Mittelpunkt soll dabei in möglichen Symmetriezentren liegen. Häufig treten Symmetrien in Kristallen auf, bei denen die Elementarzelle in allen Varianten schiefwinkelig ist (Abb. 1.1 B), wo jedoch eine Zelle mit größerem Volumen die Beschreibung in einem höhersymmetrischen Kristallsystem erlaubt. Diese Zellen enthalten in ihrem Inneren zusätzliche Punkte des Translationsgitters und man nennt sie *zentrierte Zellen*. Beschreibt man Translationsgitter mit diesen der Symmetrie angepassten größeren Zellen erhalten wir weitere sieben zentrierte Gitter, wodurch man die 14 *Bravais-Gitter* erhält (siehe Abbildung 1.2).

Die Kenntnis über die Symmetrie in einem Kristall ist wesentlich für die exakte Strukturbestimmung eines Kristalls und Symmetrieeigenschaften haben Einfluss auf seine physikalischen, wie etwa die optischen oder elektrischen Eigen-



aP triklin; **mP** monoklin primitiv; **mC** monoklin C-zentriert, auch in **mI** transformierbar; **oP** orthorhombisch primitiv; **oA** orthorhombisch A-zentriert, auch **oC** üblich; **oI** orthorhombisch innen- (raum-) zentriert; **oF** orthorhombisch allseits flächenzentriert;

tP tetragonal primitiv; **tI** tetragonal innen- (raum-) zentriert; **hP** trigonal oder hexagonal primitiv; **hR** rhomboedrisch, hexagonal aufgestellt; **cP** kubisch primitiv; **cI** kubisch innen- (raum-) zentriert; **cF** kubisch allseits flächenzentriert

Abbildung 1.2: Die 14 Bravais-Gitter nach [Mas07] S.22.

schaften. *Symmetrieelemente* beschreiben eine räumliche Beziehung im Sinne einer Bewegung eines Körpers, ihre Anwendung wird als *Symmetrieeoperation* bezeichnet, die zu einer Anordnung führt, die von der Ausgangslage nicht zu unterscheiden ist. Wir halten uns bei der Bezeichnung und Symbolik an die Notation der "International Tables for Crystallography", die wichtigsten Symbole sind in Abbildung 1.3 zu sehen. Mit $\bar{1}$ wird das *Inversionszentrum* bezeichnet, das ebenso wie die *Spiegelebene* m ein Spiegelbild erzeugt. Die Symbole 2, 3, 4 und 6 bezeichnen die 2-, 3-, 4- und 6-zähligen *Drehachsen*.

Die *Kopplung* von Symmetrieelementen ist eine Hintereinanderausführung, bei der die *Zwischenzustände nicht* realisiert werden. Die Kopplung einer Drehachse mit einem auf dieser Achse liegenden Inversionszentrum nennt man *Drehinversion*. Es entstehen die neuen Symmetrieelemente $\bar{3}$, $\bar{4}$ und $\bar{6}$, die sogenannten *Inversionsdrehachsen*. Im 2-zähligen Fall entsteht kein neues Element, da die zweifache Inversionsdrehachse der Spiegelebene m entspricht.

Bei der *Kombination* von Symmetrieelementen werden auch die *Zwischenzustände* realisiert. Kombiniert man eine Drehachse mit einer senkrecht dazu stehenden Spiegelebene, so schreibt man als Symmetriesymbol z.B. $3/m$ (sprich "drei über m"). Mit Hilfe der Gruppentheorie kann man zeigen, dass es 32 unterscheidbare Kombinationsmöglichkeiten solcher einfacher und gekoppelter Symmetrie-

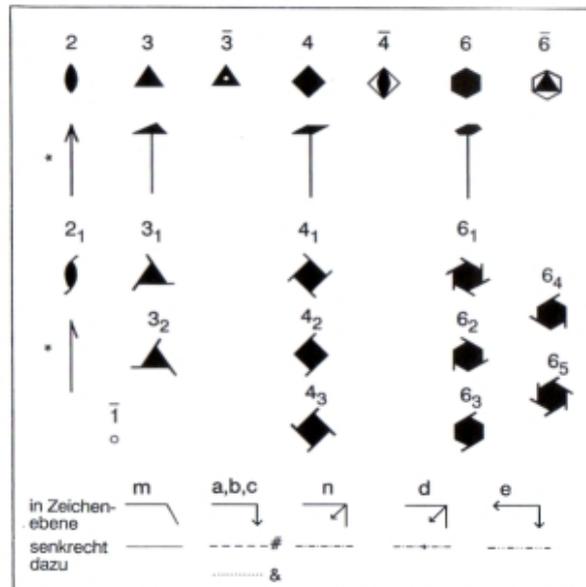


Abbildung 1.3: Symbole der wichtigsten Symmetrieelemente nach [Hah01]

elemente gibt, die sogenannten *Punktgruppen*.³

Ein weiteres einfaches Symmetrieelement ist die *Translation* entlang eines Basisvektors, welche man mit den *Punktsymmetrien* kombinieren und koppeln kann. Bei der *Kombination* von Translation und Inversionszentrum, Spiegelebene und (Inversions-)Drehachsen entstehen weitere Inversionszentren. Wichtige neue Symmetrieelemente entstehen bei der *Kopplung* einer Translation mit Spiegelungen und/oder Drehachsen. Eine weitverbreitete Symmetrie in Kristallen ist die *Gleitspiegelung*, die eine günstige Packung von Molekülen ermöglicht. In diesem Fall handelt es sich um eine Kopplung von einer Translation mit einer Spiegelung. Analog kann man auch Translation und Drehachsen koppeln, und erhält *Schraubenachsen*. Für eine Beschreibung von Symmetrien auch für Dimensionen $n > 3$ siehe Kapitel 2.

Auf Basis der genannten Symmetrieelemente entwickelte sich eine ausgereiftes Theoriegebäude, das Generationen von WissenschaftlerInnen für ihre Forschungen diente. Der Anspruch uneingeschränkter Gültigkeit geriet erst vor ca. 25 Jahren ins Wanken.

³In der Kristallographie spricht man von *Kristallklassen*

1.1.2 Paradigmenwechsel in der Kristallographie

Nachdem Dany Shechtman und seine Kollegen 1984 eine Aluminium-Mangan Legierung synthetisierten, und diese mittels eines speziellen Verfahrens sehr schnell abkühlten, fanden sie eine ikosahedrale Symmetrie vor. Diese 5- bzw. 10-zählige Symmetrie war ja bis dahin undenkbar, sogar ausgeschlossen, und wurde daher nicht einmal theoretisch berücksichtigt.⁴ Die Auswirkung dieser Entdeckung auf die Kristallographie glich einem Erdbeben: bis dahin wurden Ordnung und Periodizität synonym verwendet. Periodizität war das zugrundeliegende Paradigma, ein Fundament, das ins Wanken geriet, da das Phänomen "Quasikristall" keinen Platz innerhalb des Klassifikationssystem hatte. Es dauerte acht Jahre bis die neu eingesetzte Kommission für Aperiodische Kristalle 1992 eine neue Definition für Kristalle bestimmte: ein Kristall sei demnach "ein Festkörper, der ein im wesentlichen diskretes Beugungsbild hat". Im Falle, dass eine "dreidimensionale Gitter-Periodizität als fehlend angesehen werden kann", spricht man von einem "aperiodischen Kristall"⁵. Die Kommission hat diese vage Definition bis heute beibehalten. Viele aperiodische Kristalle wurden in den letzten Jahrzehnten in den Labors erzeugt⁶, eine konsistente Theorie über ihre Strukturen gibt es noch nicht. Nicolas de Bruijn, der maßgeblich an der Erforschung geometrischer Eigenschaften von Quasikristallen beteiligt war, drückt es 1986 so aus: "Die Quasikristalle können nicht gleichzeitig periodisch und symmetrisch sein: Sie zwingen uns, diese Notationen aufzuweichen."⁷ Diese Konfusion in der Wissenschaftsgemeinde ist möglicherweise ein Anzeichen für einen Kuhnschen Paradigmenwechsel.⁸

⁴Für diesen Aspekt siehe 2.3.2.

⁵für den Originalwortlaut vgl. <http://www.iucr.org/iucr-top/iucr/cac.html>

⁶einen Überblick bietet z.B. ICQ9: <http://www.icq9.ameslab.gov/index.html>

⁷vgl. [Bru86]

⁸vgl. [Lif07]

1.1.3 Exkurs: Das Konzept des Paradigmas

Die Reflexion von WissenschaftlerInnen, ihrer Arbeit und der eingenommenen Standpunkte ist ein sowohl wichtiger, wie auch sehr oft vernachlässigter Bestandteil des Wissenschaftsbetriebs. Das Konzept des *Paradigmas* spielt dabei eine zentrale Rolle. Im wissenschaftlichen Kontext wurde der Begriff ursprünglich im Sinne von "Musterbeispiel" verwendet. Thomas S. Kuhn definiert ihn in seiner hervorragenden Arbeit⁹ als eine "forschungsleitende Perspektive, die für eine bestimmte Zeit und Gruppe von Wissenschaftern konsensbildend ist". Die Funktion eines Paradigmas sieht er in der Ausbildung eines Dogmas, das gegen Einwände abgesichert ist. Dieses "Basiskonzept" soll auch nicht in Frage gestellt werden, um einen konstruktiven Wissenschaftsbetrieb zu ermöglichen, ein Paradigma stellt sozusagen ein gemeinsames Weltbild dar. Die Minimalbestandteile eines Paradigmas sind dabei symbolische Verallgemeinerungen in Form von Abkürzungen u.ä., ontologische und heuristische Modelle und normative Festlegungen. Paradigmen

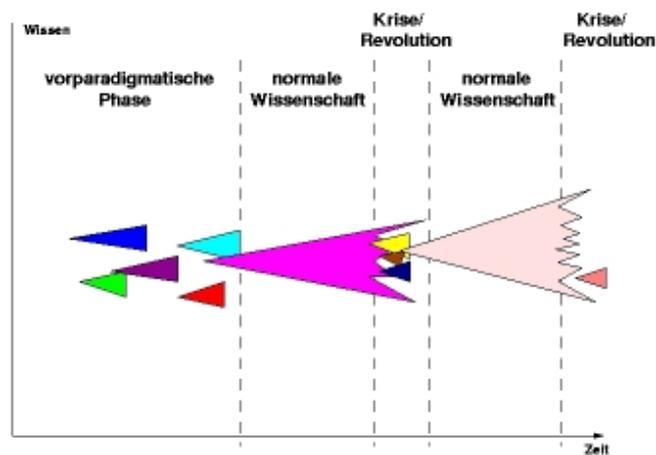


Abbildung 1.4: Die Phasen des wissenschaftlichen Fortschritts nach Kuhn

entstehen, entwickeln sich, und können auch durch andere Basiskonzepte ersetzt werden, sie sind also einem zeitlichen Wandel unterworfen. Das Kuhn'schen Modell des Paradigmenwandels (siehe Abb. 1.4 nach [Kuh81]) bezeichnet als "normalwissenschaftliche" Phase den Zeitraum, in dem es Konsens bezüglich des Basiskonzepts gibt. Widersprüchliche Forschungsergebnisse und nicht zufriedenstel-

⁹siehe [Kuh81]

lende Erklärungsmodelle können intensive methodisch-konzeptionelle Diskussionen auslösen. Das Paradigma kommt in die Krise und eine Wissenschaftliche Revolution kann stattfinden.

Da es sich bei einem Paradigmenwandel um eine Veränderung der (wissenschaftlichen) Weltsicht handelt, und dessen Vorzüge nicht immer mit rationalen Argumenten begründbar sind, kann es zu Konflikten innerhalb der Wissenschaftsgemeinschaft kommen.

1.2 Quasikristalle in der Festkörperphysik

1.2.1 Synthetisch hergestellte Quasikristalle

Das erste beobachtete Beispiel war eine sehr schnell abgekühlte Legierung aus Aluminium (Al) und Mangan (Mn). Seit diesem Zeitpunkt wurden über 100 Exemplare identifiziert, die alle in Labors und unter kontrollierten Bedingungen synthetisiert wurden. Eine entscheidende Rolle spielt dabei die mehr oder weniger schnelle Abkühlung der Schmelze, die überwiegende Anzahl der Proben haben ikosahedrale Symmetrie. Die ikosahedrale Phase einer Legierung aus Aluminium, Kupfer und Eisen (i-AlCuFe) wurde unter verschiedensten stöchiometrischen Bedingungen, Temperaturen und Abkühlungsbedingungen untersucht und ist die am besten erforschte.

Quasikristalle zeichnen sich durch eine Reihe besonderer Eigenschaften aus. Obwohl sie ausschließlich aus metallischen Elementen aufgebaut sind, entsprechen ihre Eigenschaften nicht immer dem metallischen Charakter, den man für intermetallische Legierungen erwarten würde. Zu Beginn der Quasikristall-Forschung standen lediglich Proben metastabiler Phasen zur Verfügung. Sie waren von minderer Qualität und wiesen zudem einen hohen Anteil an Fremdphasen auf. Die Untersuchung der physikalischen Eigenschaften konnte zu diesem Zeitpunkt nur eingeschränkt erfolgen.

Mit der Entdeckung der ersten thermodynamisch stabilen Phasen Ende der 1980er Jahre bestand zum ersten Mal die Möglichkeit, die besonderen physikalischen Eigenschaften quasikristalliner Phasen sinnvoll zu untersuchen. Bis dahin war man der Ansicht, die physikalischen Eigenschaften würden zwischen denen der kristallinen und amorphen Metalle der entsprechenden Zusammensetzungen liegen. Mit der Verfügbarkeit der ersten thermodynamisch stabilen Quasikristalle musste dieses Bild jedoch revidiert werden. Mittlerweile ist der Grad der strukturellen Perfektion der Quasikristalle mit dem von guten Metallkristallen vergleichbar, und die physikalischen Eigenschaften können ohne störende Faktoren wie z.B. Fremdphaseneinschlüsse untersucht werden. Dabei wurde deutlich, dass die besonderen Eigenschaften der Quasikristalle keineswegs ein Bindeglied zwischen

amorphen und kristallinen Zuständen bilden. Für die richtige Interpretation und das Verständnis der ungewöhnlichen Eigenschaften fehlen jedoch bis heute die theoretischen Grundlagen.

Die auf dem Prinzip der Translationsinvarianz kristalliner Materialien beruhenden Ansätze werden durch die bei quasikristallinen Materialien vorliegende Quasiperiodizität ausgeschlossen. Hier fehlen adäquate theoretische Ansätze. Ein Hilfsmittel stellen die jeweiligen Approximationen dar. Eine Sonderstellung nehmen die axialen Quasikristalle ein. Aufgrund ihres Aufbaus aus entlang einer periodischen Achse gestapelter quasiperiodischer Ebenen ergibt sich an z.B. dekadonalen Quasikristallen die Möglichkeit, den Einfluss quasiperiodischer Ordnung auf Transportvorgänge im direkten Vergleich mit den Vorgängen entlang einer periodischen Achse zu messen. Hier sollen nur Beispiele von interessanten physikalischen Eigenschaften quasikristalliner Materie gegeben werden. Eine ausführliche Darstellung physikalischer Eigenschaften quasikristalliner Phasen findet man bei [Sta99].

- Quasikristalle zeigen ein für metallische Legierungen ungewöhnliches Verhalten des *elektrischen Widerstandes*. Zum einen ist der spezifische Widerstand einiger quasikristalliner Phasen sehr hoch. Zum anderen zeigt sich in quasikristallinen Materialien ein negativer Temperaturkoeffizient des elektrischen Widerstandes. Diese Zunahme der Leitfähigkeit bei steigender Temperatur steht ganz im Gegensatz zu dem Verhalten von metallischen Systemen. Vergleichende Messungen an Quasikristallen und Approximanten zeigen ein gleiches Verhalten mit nur geringem quantitativem Unterschied. Dies rührt daher, dass die lokale Ordnung beider Strukturen einander sehr ähnlich ist. Bei steigendem Ordnungsgrad der Struktur des Quasikristalls nimmt die elektrische Leitfähigkeit ab.
- Mechanische Eigenschaften: Quasikristalle sind bei Raumtemperatur sehr hart und gleichzeitig spröde. Bei erhöhten Temperaturen ändern sich die Eigenschaften: Das Bruchverhalten wechselt von spröde zu plastisch. Bei noch höherer Temperatur weisen Quasikristalle eine hohe Verformbarkeit auf.

- Aufgrund der Pseudo-Bandlücken weisen quasikristalline Beschichtungen ein Benetzungsverhalten ähnlich dem von Teflon auf. Dabei sind diese Beschichtungen wesentlich abriebfester. Sie haben sich jedoch als wenig korrosionsbeständig erwiesen.

1.2.2 Erster Fund eines natürlich gewachsenen Quasikristalls

Im Juni 2009 erschien ein Artikel in der Zeitschrift "Science", der den ersten Fund eines natürlich gewachsenen Quasikristalls bekanntgab.¹⁰



Abbildung 1.5: Natürlich gewachsener Quasikristall nach [BSYL09].

Paul J. Steinhardt von der Princeton University und seine Kollegen untersuchten die Gesteinsprobe aus der Sammlung des Museo di Storia Naturale der Università degli Studi di Firenze, welche 1990 katalogisiert wurde. Demnach stammt sie aus dem Korjakengebirge auf der russischen Halbinsel Kamtschatka. Dem Gestein, das eine komplexe Ansammlung verschiedener mineralischer Phasen aufweist, wurden Mikroproben der Zusammensetzung $Al_{65}Cu_{20}Fe_{15}$ entnommen.

Die mittels Transmissionselektronenmikroskop (TEM) entstandenen Beugungsbilder haben die charakteristischen 5-, 3- und 2-zähligen Symmetrien eines ikosaedralen Quasikristalls, wie in Abbildung 1.6 aus [BSYL09] gut zu sehen ist. Die invertierte Fouriertransformierte¹¹ des TEM-Bilds zeigt, dass die räumliche Struktur aus einem homogenen, quasiperiodischen Muster mit 5-zähliger Symmetrie besteht (siehe Abbildung 1.7).

¹⁰vgl. [BSYL09]

¹¹zur Fouriertheorie siehe 3.2.

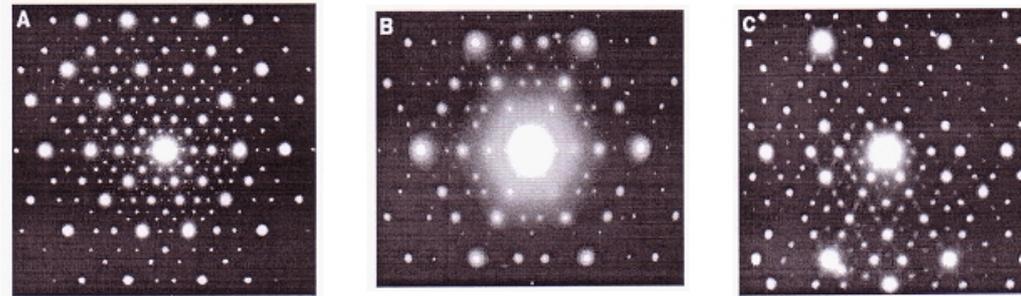


Abbildung 1.6: TEM-Beugungsbilder des natürlich gewachsenen Quasikristalls nach [BSYL09].

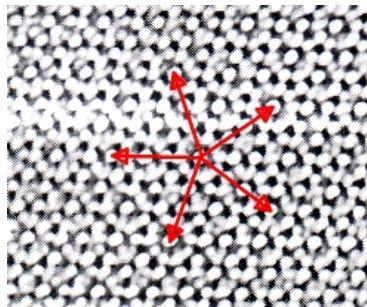


Abbildung 1.7: Die Fouriertransformierte des Beugungsbildes. Die roten Pfeile veranschaulichen ein lokales 5-zähliges Symmetriezentrum. Nach [BSYL09].

1.2.3 Modellierung von quasikristallinen Phasen

Modelle, die das Phänomen "Quasikristall" beschreiben, beruhen meist auf Penrose-Mustern, ein Beispiel sehen wir in Abbildung 1.8.

Bei der Betrachtung der Penrose-Parkettierung fällt sogleich die lokale 5-zählige bzw. die "statistische 10-zählige Symmetrie" auf. Das bedeutet, dass jeder Patch¹² des Tilings in 10 verschiedenen Drehrichtungen auftaucht und die Häufigkeit für alle Richtungen gleich ist.¹³ Die Penrose-Tiles können mittels dreier im wesentlichen unterschiedlichen Methoden produziert werden: mithilfe von Anlegeregeln, durch Anwendung einer Projektionstechnik, oder durch einen Inflationsprozess. Auf die Penrosemuster werden wir im Kapitel 2 genauer eingehen.

Ein frühes Modell zur Beschreibung von Festkörpern mit 10-zähliger Symme-

¹²Ein Patch ist ein Ausschnitt aus einer Parkettierung, welche im Kapitel 4 behandelt werden.

¹³vgl. [Rad99b]

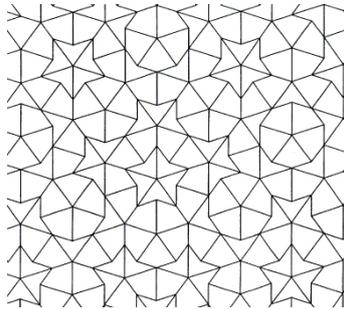


Abbildung 1.8: Beispiel für ein Penrose-Muster: Die "Kites and Darts".

trie wurde von Levine und Steinhardt präsentiert.¹⁴ Es beruht auf der Beobachtung, dass eine Anordnung von Massepunkten, die von einer 3-dimensionalen Version einer ebenen Penrose-Parkettierung abgeleitet ist, Beugungsbilder mit gerade dieser Symmetrie erzeugen würde. Beugung ist nur sensibel auf Häufigkeiten. Die Übertragung einer Symmetrie einer räumlichen Verteilung von Beugungsobjekten auf die Symmetrie in der Beugungsintensität ist ein Spezialfall davon.¹⁵ Ein anderes Kernmerkmal von Modellen basierend auf Penrose-Tilings ist, dass diese Anlegeregeln haben. Nur mit diesen erhält man die gewünschten aperiodischen Parkettierungen. Anlegeregeln können als Bindungen im chemischen Sinn interpretiert werden.

¹⁴vgl. [LS84].

¹⁵vgl. [Rad99a]

Kapitel 2

Quasikristalle aus geometrischer Sicht

2.1 Delone Mengen

Wir haben in Kapitel 1 schon darauf hingewiesen, dass 1992 von Seiten der IUC eine neue Definition des Kristalls formuliert wurde:

Definition 2.1 *Ein Kristall ist ein Festkörper mit einem im wesentlichen diskreten Beugungsbild.*

Diese sehr weit gefasste Formulierung sagt nichts über Symmetrien oder andere Regelmäßigkeiten aus, der Fokus liegt auf dem Erscheinungsbild der Struktur. Sie schließt periodische Kristalle als Spezialfälle mit ein. Kristalle sind Punktmen- gen mit genügender lokaler Gleichmäßigkeit, sodass sie scharfe Bereiche in den Beugungsbildern erzeugen. Die Symmetrie eines Kristalls ist die Symmetrie des dazugehörigen Beugungsbildes.¹

Definition 2.2 *Eine Punktmenge $\Lambda \subset E^n$ ist diskret, wenn eine positive reelle Zahl r_0 existiert, sodass für alle $x, y \in \Lambda$ gilt: $|x - y| \geq 2r_0$.*

Definition 2.3 *Eine Punktmenge Λ ist relativ dicht in E^n , wenn es eine positive reelle Zahl R_0 gibt, sodass jede Kugel mit Radius $R \geq R_0$ mindestens einen Punkt von Λ enthält.*

¹vgl.Senechal:1995

Definition 2.4 Eine Punktmenge $\Lambda \subset E^n$ ist eine Delone Menge, wenn sie diskret und relativ dicht ist.

Satz 2.1 Eine Delone Menge ist abzählbar unendlich.

Beweis Wir können E^n füllen mit einer abzählbaren Menge von kongruenten Würfeln. Da Λ diskret ist, kann jeder Würfel nur eine endliche Menge von Punkten aus Λ beinhalten. Deshalb ist Λ abzählbar. Λ ist relativ dicht, d.h. es gibt eine reelle Zahl R_0 sodass jede Kugel mit Radius $R \geq R_0$ mindestens einen Punkt von Λ enthält. Sei nun E^n mit einer Kugelpackung gefüllt, z.B. mit der hexagonal dichtesten Kugelpackung mit Radius R_0 . Die Anzahl der Kugeln ist unendlich und damit auch Λ .

Die n -dimensionale Kugel wird mit B^n bezeichnet (englisch: ball, Ball). Der Ball kann abgeschlossen sein (mit Oberfläche oder Rand), oder offen (ohne Oberfläche oder Rand).

Definition 2.5 Sei $\bar{B}_x(r)$ die abgeschlossene Kugel mit Zentrum x und Radius $r > 0$. Der r -Stern bei $x \in \Lambda$ ist die endliche Punktmenge $\bar{B}_x(r) \cap \Lambda$.

Definition 2.6 Eine Delone Menge Λ ist ein reguläres System von Punkten, wenn die r -Sterne der Punkte kongruent sind für alle $r > 0$.

Die Kongruenz der r -Sterne kann auch durch die Bedingung ersetzt werden, dass Λ der Orbit einer Kristallografischen Gruppe ist.² Wir benutzen dies für folgendes lokale Ordnungs-Kriterium nach Delone:

Satz 2.2 Es gibt einen kritischen Radius $r_c > 0$, sodass gilt: wenn die r_c -Sterne einer Delone Menge $\Lambda \subset E^n$ kongruent sind, dann sind die r -Sterne kongruent für alle $r > 0$. Dann ist Λ ein reguläres System von Punkten.

Wir stellen uns die r -Sterne als Kopien einer Menge von "Protosternen" vor. Mit einer geeigneten Bewegungsgruppe M , um alle r -Sterne erzeugen zu können, machen wir folgende Definition:

²Für eine Menge M und eine Transformationsgruppe G ist der Orbit von $x \in M$ die Menge $O_G(x) = \{gx \in M \mid g \in G\}$.

Definition 2.7 Die Menge aller r -Sterne von Λ (bis auf M -Äquivalenz) wird r -Atlas genannt.

Nachdem aperiodische Kristalle nicht durch ein reguläres System von Punkten modelliert werden können, muss deren r -Atlas mehr als einen r -Stern beinhalten. Um Kristalle durch r -Atlasse beschreiben zu können, müssen Restriktionen getroffen werden, wobei die genaue Formulierung ein ungelöstes Problem darstellt. Jedoch sollte Λ auf jeden Fall repetitiv sein.

Definition 2.8 Eine Delone Menge Λ ist repetitiv, wenn für alle $r > 0$ gilt, dass die Elemente eines r -Atlases relativ dicht in Λ sind.

Nachdem wir nun wissen, dass ein Kristall eine Delone Menge Λ mit ausreichender Gleichmäßigkeit ist, um Beugungsbilder mit scharfen Bereichen zu erzeugen, wollen wir noch Definitionen der verschiedenen Kristalltypen geben.

Definition 2.9 Ein n -dimensionaler periodischer Kristall ist ein n -dimensionales reguläres System von Punkten. Es erlaubt Translationen in n unabhängige Richtungen.

Definition 2.10 Ein n -dimensionaler aperiodischer Kristall ist eine Delone Menge ohne Translationssymmetrie.

Definition 2.11 Eine Delone Menge die in k unabhängigen Richtungen periodisch ist, mit $0 < k < n$, und aperiodisch in den anderen $(n - k)$ Richtungen nennt man subperiodisch.

Ein Spezialfall von aperiodischen Kristallen sind Quasikristalle:

Definition 2.12 Ein n -dimensionaler Quasikristall ist ein Kristall dessen Beugungsbild eine verbotene Symmetrie bezüglich der Kristallographischen Beschränkung für E^n aufweist.

Nach der Kristallographischen Restriktion (siehe Abschnitt 2.2.) sind für $n = 2$ und $n = 3$ nur 2-, 3-, 4- und 6zählige Symmetriezentren möglich. Bei Quasikristallen finden sich z.B. auch 5- und 8zählige Symmetriezentren.

2.2 Gitter und Duale Gitter

Wir arbeiten im n -dimensionalen Euklidischen Raum E^n mit den orthonormalen Basisvektoren $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n$. Eine Menge von k Vektoren in E^n ist linear unabhängig genau dann, wenn für reelle c_1, \dots, c_k gilt:

$$c_1 \vec{b}_1 + \dots + c_k \vec{b}_k = 0 \Rightarrow c_1 = \dots = c_k = 0. \quad (2.1)$$

Jeder Vektor $\vec{x} \in E^n$ steht für eine Translationsbewegung, jede Menge von Vektoren $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_k$ generiert mit der Addition eine abzählbare unendliche Gruppe genannt *Z-Modul*. Jedes Element der Gruppe hat die Form

$$\vec{x} = m_1 \vec{b}_1 + \dots + m_k \vec{b}_k \quad (2.2)$$

mit ganzzahligen m_i als Koeffizienten. Der Orbit eines Z -Moduls sei Ω . Für $x \in \Omega$ ist der (unendliche große) Stern von x der Grenzwert seines r -Sterns, wenn r gegen ∞ geht. Die Sterne von Ω sind Translationen voneinander, da ja Ω der Orbit einer Translationsgruppe ist.

Satz 2.3 *Jeder Punkt $y \in \Omega$ ist ein Symmetriezentrum von Ω , sowie auch jeder Mittelpunkt von zwei beliebigen Punkten von Ω .*

Beweis Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit $y = 0$ setzen. Das jeder Punkt Symmetriezentrum ist, folgt aus dem Umstand, dass Ω alle ganzzahligen Linearkombinationen seiner Punkte beinhaltet. Seien nun $x, y, z \in \Omega$. Der Mittelpunkt m von x und y ist $m = 1/2(x+y)$ und das Bild von z unter der Punktspiegelung um m ist $x+y-z \in \Omega$. Siehe auch Abbildung 2.1.³

Die Anzahl der unabhängigen Vektoren eines Z -Moduls ist dessen *Rang*.

Definition 2.13 *Wenn der Rang von Ω gleich der Anzahl der Basisvektoren ist, die dessen Unterraum aufspannen, dann wird Ω ein Gitter genannt.*

Definition 2.14 *Ein Z -Modul $\in E^n$ ist ein Gitter der Dimension n , wenn es durch n linear unabhängige Vektoren generiert wird.*

³nach [Sen] S. 37.

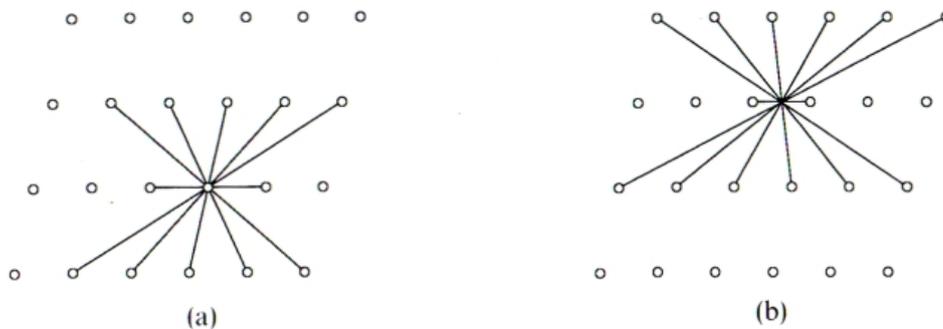


Abbildung 2.1: (a) Jeder Punkt von Ω ist Symmetriezentrum.
 (b) Jeder Mittelpunkt von zwei Punkten ist Symmetriezentrum

Den Orbit eines \mathbb{Z} -Moduls wollen wir Punktgitter nennen, und damit können wir obige Aussage umformulieren: Der Orbit eines \mathbb{Z} -Moduls ist ein Punkt-Gitter genau dann, wenn er diskret ist.

Definition 2.15 Jede Menge von n linear unabhängigen Vektoren, die ein Gitter L generieren, sind eine Basis von L .

Jedes Gitter L hat ein zugehöriges Duales Gitter L^* .

Definition 2.16 Das duale Gitter L^* zu L ist die Menge der Vektoren $\vec{y} \in E^n$ mit der Eigenschaft

$$\vec{y} \in L^* \leftrightarrow \vec{y} \cdot \vec{x} \in \mathbb{Z} \quad \forall \vec{x} \in L.$$

Duale Gitter spielen eine Schlüsselrolle in der Kristallographie, da Beugungsbilder den Orbit des dualen Gitters zeigen. Sie werden dort meist Reziproke Gitter genannt, weil die Abstände der Orbits umgekehrt proportional zueinander sind.

Um eine Parkettierung des Raums zu schaffen, kann man von Gittern auf Einheitszellen schließen, deren Kanten parallel zu den Basisvektoren dieses Gitters sind. Für jedes Punktgitter gibt es dabei unendlich viele Möglichkeiten, solche Polytope zu finden, genau eine für jede Wahl der Basis. Hat man eine Zelle, kann man das ganze Punktgitter rekonstruieren. Allerdings kann man im allgemeinen von der Einheitszelle nicht direkt auf die Symmetrie des Gitters schließen. Allerdings gibt es ein anderes Polytop, mit dem gleichen Volumen wie die Ein-

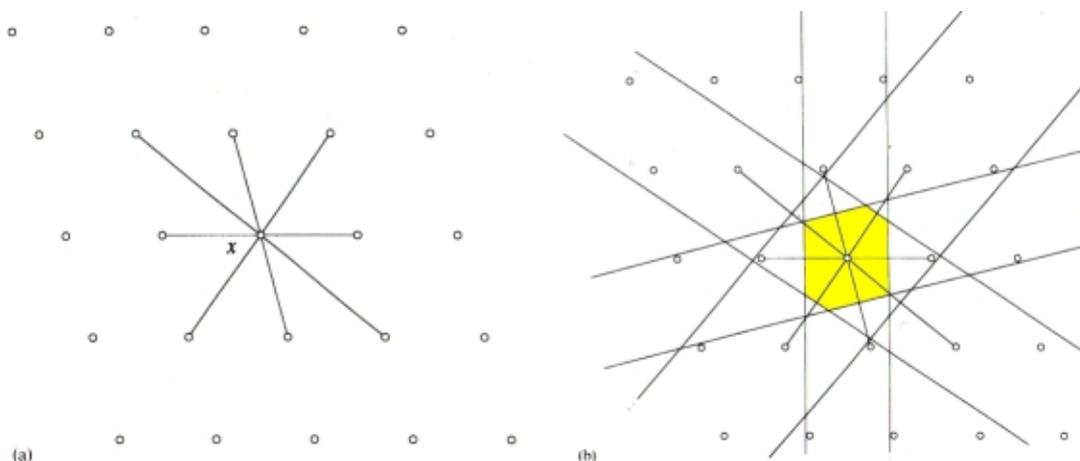


Abbildung 2.2: Die Konstruktion der Voronoi-Zelle.

heitszelle, welches unabhängig von der Wahl der Basis ist, und somit eindeutig in Bezug auf ein Punktgitter, nämlich die Voronoi-Zelle.⁴

Definition 2.17 Sei $\Lambda \in E^n$ eine Delone Menge bzw. eine beliebige endliche Punktmenge. Die Voronoi-Zelle eines Punktes $x \in \Lambda$ ist gegeben durch:

$$V(x) = \{u \in E^n \mid |x - u| \leq |y - u|, \forall y \in \Lambda\}.$$

In Abb. 2.2 sehen wir, wie die Voronoi-Zelle im zweidimensionalen Fall konstruiert wird: Zuerst verbindet man x mit all seinen Nachbarn, dannach werden die Mittelsenkrechten gezogen. $V(x)$ ist dann die kleinste konvexe Region begrenzt durch die Mittelsenkrechten.

Die Voronoi-Parkettierung einer Delone Menge $\Lambda \in E^n$ hat folgende Eigenschaften:

- (i) Die Zellen sind konvex und liegen entlang ganzer Seiten an, wobei sie sich nicht überschneiden.
- (ii) Für die Punkte von Λ , deren Voronoi-Zellen einen Knoten v gemeinsam haben gilt: Sie liegen auf einer Kugel mit Mittelpunkt v , in deren Inneren keine weiteren Punkte von Λ sind.

Wenn Λ der Orbit einer Gruppe ist, dann sind die Sterne aller seiner Punkte kongruent und auch ihre Voronoi Zellen. Dann können wir von "der" Voronoi - Zelle $V(0)$ des Gitters L sprechen. Für alle $x \in L^p$ ist dann $V(x) = V(0) + \vec{x}$.

⁴vgl. [Sen95], S. 42 ff.

Die $(n - 1)$ -dimensionalen Seiten einer Voronoï -Zelle sind seine *Facetten*, und die Vektoren zu den Gitterpunkten mit denen $V(x)$ eine Facette teilt, sind die *Facettenvektoren*. Die Menge der Facettenvektoren von L sind F_L . Die Voronoï-Zelle eines jeden Punktgitters hat mindestens $2n$ Facettenvektoren und maximal $2(2^n - 1)$.⁵ Um herauszufinden, ob ein Punkt $x \in E^n$ zu $V(0)$ zu einem Gitters L gehört, können wir eine einfache Abschätzung machen:

$$x \in V(0) \Leftrightarrow \vec{x} \cdot \vec{f} \leq \frac{|\vec{f}|^2}{2} \quad \forall \vec{f} \in F_L. \quad (2.3)$$

Nachdem jeder Gitterpunkt Symmetriezentrum ist, sind die Voronoï-Zellen zentrosymmetrisch und die Facetten bilden parallele Paare. Im zweidimensionalen Fall sind die Voronoï-Zellen rechteckig, falls die Basisvektoren des Gitters orthogonal sind. Weichen sie auch nur geringfügig vom rechten Winkel ab, werden die Voronoï-Zellen hexagonal. Die fünf kombinatorischen Arten von Voronoï-Zellen für dreidimensionale Punkt-Gitter sind die Parallelehedra von Fedorov. Im E^4 gibt es 52 Arten⁶, die exakte Anzahl für höherdimensionale Räume ist nicht bekannt. Bemerkenswert ist auch, dass es keine einfache Relation zwischen den Voronoï-Zellen von L und L^* gibt, vor allem sind sie keine dualen Polytope.

2.3 Symmetrie

Die Symmetriegruppe $S(L)$ eines Gitters L ist die Gruppe der Isometrien, die einen Punkt des Punktgitters auf sich selbst abbilden.

Definition 2.18 *Eine Isometrie ϕ von E^n ist eine Transformation, welche die Abstände zwischen den Punkten bewahrt:*

$$\forall x, y \in E^n : |\phi(x) - \phi(y)| = |x - y|.$$

Ein Punkt x mit $\phi(x) = x$ wird *Fixpunkt* genannt. Wenn ϕ den Ursprung als Fixpunkt hat, dann ist ϕ eine *Lineare Isometrie*. Sei ϕ eine lineare Isometrie von E^n auf sich selbst. Wenn ϕ die Abstände erhält, dann erhält es auch die Winkel und

⁵Dieses Ergebnis geht auf Minkowski (1907) zurück.

⁶Dies wurde von von Delone schon 1929 bewiesen.

umgekehrt. Somit gilt für ein $\phi : E^n \longrightarrow E^n$ mit $\phi(0) = 0$:

$$\phi \text{ ist Isometrie} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{x} \cdot \vec{y} = \phi(\vec{x}) \cdot \phi(\vec{y}) \quad \forall \vec{x}, \vec{y} \in E^n. \quad (2.4)$$

Nachdem eine lineare Isometrie ein Parallelogramm mit Eckpunkten $0, a, b$ und $a + b$ auf ein kongruentes Parallelogramm abbildet, ist

$$\phi(a + b) = \phi(a) + \phi(b) \quad (2.5)$$

Eine lineare Isometrie auf E^n kann repräsentiert werden durch eine quadratische ganzzahlige Matrix (d.h. $\det = \pm 1$). Nachdem die Determinante unabhängig von der Wahl der Basis von E^n ist, ist jede lineare Isometrie eindeutig "positiv" oder "negativ". Eine Isometrie ohne Fixpunkte ist entweder eine Translation oder eine Komposition einer Translation und einer Isometrie die konjugiert zu einer linearen Isometrie ist. Man kann leicht sehen, dass die Menge der Fixpunkte von ϕ ein Teilraum von E^n ist.

Definition 2.19 *Der Teilraum aller Fixpunkte einer linearen Isometrie ϕ ist sein fixer Teilraum. Ein geeigneter Teilraum von E^n , welcher von ϕ auf sich selbst abgebildet wird, aber nicht notwendigerweise fixer Teilraum ist, ist sein stabiler Teilraum.*

Lineare Isometrien können wir für Dimensionen 2 und 3 leicht beschreiben durch ihre fixen und stabile Teilräume. Zum Beispiel hat eine Rotation in E^2 einen einfachen Fixpunkt, jedoch keinen echten stabilen Teilraum. Währenddessen hat eine Rotation in E^3 die Drehachse als fixen Teilraum, und die Ebene normal auf die Drehachse durch den Ursprung als stabilen Teilraum. Eine Spiegelung in E^2 hat eine fixe Gerade und eine stabile Gerade orthogonal darauf. Eine Spiegelung in E^n hat eine fixe Ebene und eine stabile Gerade orthogonal darauf. Sei ϕ lineare Transformation von E^n auf sich selbst. Bei wiederholter Anwendung von ϕ und ϕ^{-1} können wir eine zyklische Gruppe von Transformationen mit den Elementen $I, \phi^{\pm 1}, \phi^{\pm 2}, \phi^{\pm 3}, \dots$ erzeugen. Gibt es ein ganzzahliges $k \neq 0$ sodass $\phi^k = I$ und keine kleinere ganze Zahl hat diese Eigenschaft, dann hat die Gruppe k Elemente und ϕ hat die Ordnung k . Zum Beispiel hat eine Spiegelung die Ordnung 2, eine Rotation um $2\pi/k$ ist eine Isometrie der Ordnung k , und eine Translation hat un-

endliche Ordnung. Wir wollen nun höherdimensionale Isometrien betrachten. Sei E^n mit $n > 3$. Mit einer geeigneten Basis kann jede lineare Isometrie dargestellt werden durch eine $n \times n$ -Matrix der Form

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & & & & \\ & A_2 & & & \\ & & A_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & A_m \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

wobei jedes A_j entweder 1, -1 oder eine 2×2 Matrix von der Form

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

ist, und alle anderen Einträge 0 sind. Diese Matrix beschreibt die Anwendung von ϕ auf eine orthonormale Basis von E^n . Wenn $A_j = \pm 1$, dann ist der korrespondierende Basisvektor fix (+1) oder stabil (-1), wenn A_j die genannte 2×2 Matrix ist, dann definieren die zwei Basis Vektoren eine stabile, aber nicht fixe Ebene. Wir sprechen von ϕ als eine Rotation, genau dann, wenn $\det A > 0$. Zum Beispiel kann jede Rotation in E^4 mit dem Ursprung als Fixpunkt folgendermaßen dargestellt werden:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

wobei ϕ und θ die Rotationswinkel sind. Die beiden Ebenen sind stabile Mengen, sie sind die Eigenräume der Rotation. Einziger Fixpunkt ist der Ursprung. Die

Blockstruktur von A wird bei Potenzierung der Matrix erhalten:

$$A^k = \begin{pmatrix} A_1^k & & & & \\ & A_2^k & & & \\ & & A_3^k & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & A_m^k \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Die Ordnung von ϕ ist dabei das kleinste gemeinsame Vielfache der Ordnungen von A_1, \dots, A_m .⁷

2.3.1 Symmetriegruppen

Definition 2.20 Die Symmetriegruppe eines Objekts ist die maximale Gruppe der Isometrien, welche das Objekt stabilisieren.

Das bedeutet, dass das Objekt unter der Isometrie invariant ist. Obwohl jede lineare Isometrie in der Form von 2.6 in Bezug auf *eine bestimmte* Basis dargestellt werden kann, bedeutet das *nicht*, dass alle Isometrien der Symmetriegruppe bezüglich der *gleichen* Basis derartig dargestellt werden können. Wenn alle Stabilisatoren eines Objekts in der gleichen Matrizen-Blockform bezüglich einer einzigen Basis geschrieben werden können, also

$$\begin{pmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

wobei B_1 aus $k \times k$ und B_2 aus $m \times m$ Elementen besteht mit $k > 0, m = n - k > 0$, dann ist die Symmetriegruppe *reduzibel*, sonst ist sie *irreduzibel*. Die Fixmenge einer irreduziblen Gruppe ist allein der Ursprung, irreduzible Gruppen haben keine echte stabilen Mengen.

Die linearen Isometrien von E^n bilden die *orthogonale Gruppe* $O(n)$, welche wir uns als die n -dimensionale Einheitskugel vorstellen können. $O(2)$ enthält z.B. zwei unendliche Familien von Gruppen: die zyklische Rotationsgruppe C_n und

⁷vgl. [Sen95] S. 48.

die Diedergruppe D_n . Die reduziblen Untergruppen von $O(3)$ stabile Ebenen und stabile oder fixe Geraden orthogonal darauf. Es gibt einige unendliche Familie, welche Verallgemeinerungen von C_n und D_n darstellen. Die Familie der irreduziblen Gruppe ist endlich: sie enthält nur die Symmetriegruppen der regulären Polyeder und bestimmte Untergruppen von diesen. Die Symmetriegruppe G eines regulären Systems von Punkten ist eine Kristallographische Gruppe. Für G ist T die maximale abelsche Untergruppe der Translationen mit endlichem Index. Die Quotientengruppe G/T ist isomorph zu einer endlichen Gruppe P der linearen Isometrien die T auf sich selbst abbilden. Jedes Element P korrespondiert mit einer anderen Isometrie. Nachdem jede Gruppe von linearen Isometrien den Ursprung als Fixpunkt hat, wird P die *Punktgruppe* des Gitters genannt. Die Punkte eines Gitters haben ganzzahlige Koordinaten in Bezug auf jede Basis $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n$ von L und P kann als endliche Untergruppe von $GL_n(\mathbb{Z})$ dargestellt werden.

2.3.2 Die Kristallographische Restriktion

Wir wollen hier den Grundstein der klassischen Kristallographie darstellen:

Satz 2.4 Die Kristallographische Restriktion. *Ist R ein Element der Punktgruppe eines zwei- oder drei-dimensionalen Gitters L , dann hat es die Ordnung 2, 3, 4 oder 6.*

Beweis. R kann wie in 2.6 als Matrix dargestellt werden, oder durch ein Element von $GL_n(\mathbb{Z})$. Nachdem diese Matrizen die gleiche Bewegung repräsentieren in Bezug auf unterschiedliche Basen, sind sie konjugiert. Konjugierte Matrizen haben die selbe Spur, und die Spuren der Elemente von $GL_n(\mathbb{Z})$ sind ganzzahlig, da es die Einträge auch sind. Das heißt, wenn $n = 2$, dann ist

$$2 \cos \theta \in \mathbb{Z}. \quad (2.11)$$

Aber $|\cos \theta| \leq 1$ und somit ist dies nur möglich für $\cos \theta \in \{0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1\}$. Vorausgesetzt $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ist dies nur möglich für

$$\theta \in \left\{0, \pi, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{6}\right\} \quad (2.12)$$

Das gleiche Argument kommt für $n = 3$ zu tragen. \square

Wenn wir die Restriktion auf die Liste der endlichen Untergruppe von $O(3)$ anwenden, sehen wir, dass alle bis auf eine kleine Anzahl von Gruppen der unendlichen Gruppen eliminiert werden, darunter auch die Ikosahedralen Gruppen. Es bleiben die 32 Raumgruppen übrig. Die anderen Punktgruppen enthalten die Rotationen der Ordnung 5 und 7,8,... Diese wurden als *nichtkristallographisch* bezeichnet. Marjorie Senechal schlägt vor, diese nun *quasikristallographisch* zu nennen.⁸ Es gibt nur zwei endliche quasikristallische irreduzible Untergruppen von $O(3)$: die volle ikosahedrale Gruppe und deren Untergruppe der Rotationen. Deshalb müssen dreidimensionale Quasikristalle entweder *ikosahedral* oder *im wesentlichen zweidimensional* sein. Um das Analogon der Kristallographischen Restriktion für Gitter in E^n zu formulieren, sei $n(k)$ der kleinste Wert von n für den ein Element der Ordnung k in $GL(n, \mathbb{Z})$ erscheint. Wir benötigen die *Euler-sche ϕ Funktion*: $\phi(n)$ ist die Anzahl der positiven ganzen Zahlen, die kleiner als n sind und relativ prim zu n . Wir definieren nun

$$\Phi(n) = \begin{cases} \phi(n) & \text{wenn } n = p^\alpha, \text{ wobei } p \text{ prim ist und } \alpha \in \mathbb{N} \\ \Phi(n_1) + \Phi(n_2) & \text{wenn } n = n_1 n_2 \text{ und } (n_1, n_2) = 1. \end{cases} \quad (2.13)$$

Satz 2.5 $n(k) = \Phi(k)$

Für einen Beweis siehe z.B. Senechal (1992). Somit erscheinen Rotationen der Ordnung 5 erstmals für $n = 4$. In diesem Fall begegnen wir Gittern, deren Punktgruppen Elemente der Ordnung 8,10 und 12 enthalten. Zum Beispiel ist das Standard Gitter I_4 invariant unter der Rotation der Ordnung 8. Dieses Gitter hat acht Vektoren mit Norm 1: $(\pm 1, 0, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0, 0)$, $(0, 0, \pm 1, 0)$ und $(0, 0, 0, \pm 1)$. Diese sind genau die Facettenvektoren der Voronoi-Zelle. Die Punktgruppe P von

⁸vgl. [Sen95] S. 51.

I_4 ist die Symmetriegruppe des Hyperwürfels Q_4 . Er enthält das Element

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

welches eine Rotation der Ordnung 8 darstellt. Allgemeiner gesprochen enthält die Punktgruppe von I_n immer ein Element der Ordnung $2n$. Ikosahedrale Symmetrie - mit den Rotationen der Ordnung 5,3 und 2 - ist erst möglich für $n \geq 6$.

2.4 Penrose-Muster

Die Beschäftigung der Mathematiker mit Quasikristallen hängt eng mit der Fragestellung von aperiodischen Parkettierungen der Ebene zusammen.⁹ Ende der 1970er Jahre gelang es Roger Penrose zwei Kacheln (oder Tiles) zu finden, die mit entsprechenden Anlegeregeln die gesamte euklidische Ebene bedecken, und zwar nur aperiodisch.¹⁰ Anhand der Abb. 2.3 sei die Herangehensweise gezeigt.

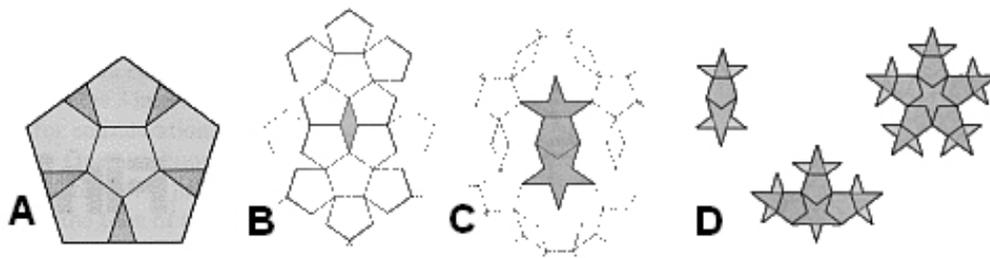


Abbildung 2.3: Die Konstruktion von 6 aperiodischen Kacheln nach Penrose.

Startpunkt ist ein Pentagon, das in 6 Kleinere unterteilt werden (A), wobei noch 5 Lücken verbleiben. Wenn dieser Prozess sehr oft wiederholt wird, erhält man Lücken verschiedener Gestalt. Im zweiten Stadium entstehen diamantförmige Lücken (B), im dritten Stadium wachsen diesen Diamanten "Stachel", jedoch findet man in der Mitte Platz für ein Pentagon(C). Somit bleiben ein Pentagramm und ein

⁹Diesen "Pflasterungen" ist das Kapitel 4 gewidmet.

¹⁰vgl. [Pen78]

”Papierschiff ” übrig. Im vierten Stadium bekommen das ”Papierschiff ” und das Pentagramm auch ”Stachel” und es findet sich wiederum Platz für neue Pentagons (D). Es tauchen keine neuen Formen bei Weiterführung dieser Unterteilung auf, und man kann daraus schließen, dass dieser Prozess unendlich oft wiederholt werden kann. Um nun die ganze Ebene mit den Pentagons, Diamanten, Pentagrammen und Schiffen aperiodisch parkettieren zu können, müssen noch Anlegeregeln bestimmt werden, und man erhält die 6 Prototiles¹¹ in Abbildung 2.4.

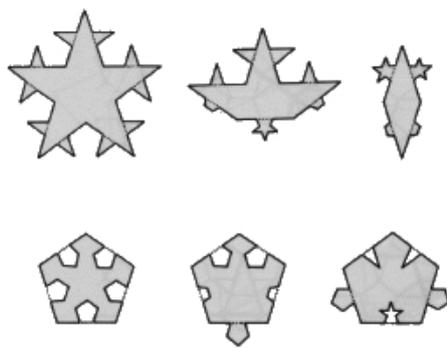


Abbildung 2.4: Die Aperiodische Protomenge nach Penrose.

Penrose konnte danach die Anzahl der Prototiles auf 5 und 4 und schlussendlich auf 2 reduzieren, die sogenannten *Kites and Darts*, wobei die Anlegeregeln hier durch die Pfeile gekennzeichnet sind. In Abbildung 2.5 sehen wir die beiden Prototiles und den Ausschnitt eines Penrosemuster mit den Kites und Darts.

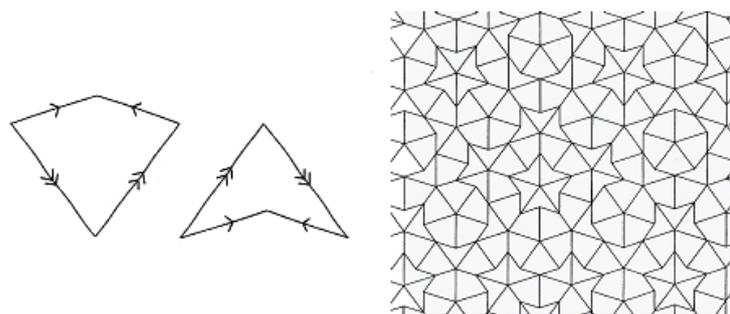


Abbildung 2.5: Die 2-elementige Protomenge der ”Kites and Darts”.

Um eine Parkettierung der Ebene mit den Kites and Darts zu erzeugen, können wir entweder mit den Anlegeregeln per ”trial and error” immer größere Bereiche

¹¹Dieser Ausdruck bezeichnet die Grundformen von Kacheln, siehe Kapitel 4.

überdecken. Oder aber wir nehmen einen Inflationsprozess zu Hilfe: dabei wird ein endlicher Bereich eines Kite-and-Dart-Musters in ein anders Kite-and-Dart-Muster mit kleineren Kacheln verwandelt. Die Größe der neuen Kites und Darts ist τ mal die Größe der Alten mit $\tau = \frac{-1+\sqrt{5}}{2} = 0.6188033989$. In Abb. 2.6 sehen wir, wie dies vonstatten geht.



Abbildung 2.6: Der Inflationsprozess für die Kites und Darts

Der Inflationsprozess liefert ein Statistisches Argument für Nichtperiodizität: Man erzeugt ein beliebig große Parkettierung mit d Darts und k Kites mithilfe des Inflationsprozesses. Das Verhältnis $\frac{k}{d}$ wird sich bei größer werdenden "Flecken" $\frac{1+2x}{1+x}$ nähern, da ein Dart und zwei Kites einen größeren Kite bilden, während ein Dart und ein Kite einen größeren Dart bilden. Dies ergibt das Verhältnis des Goldenen Schnitts $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Diese irrationale relative Dichte ist unmöglich für periodische Tilings.

Penrose-Parkettierungen haben viele erstaunliche Eigenschaften, wir wollen hier einige davon anführen:

- Es gibt unendlich viele verschiedenen Penrose-Parkettierungen, oder anders gesagt: die beiden Protokacheln erlauben unendlich viele unterschiedliche Parkettierungen.
- Die Symmetriegruppe der Penrose-Parkettierungen enthält keine Translationen.
- Jede endliche Region einer Penrose-Parkettierung kann man unendlich oft in dieser Parkettierung wiederfinden. Diese Region findet man sogar in *jeder* beliebigen Penrose-Parkettierung unendlich oft.

2.5 Algebraische Theorie der Penrose-Muster

Die Algebraische Theorie der aperiodischen Penrose-Parkettierungen der Ebene wurde von de Bruijn ausgearbeitet.¹² Es gibt eine Eins-zu-Eins-Übereinstimmung der Kite-and-Dart-Muster und Mustern bestehend aus Rhomben, welche wie die Kites und Darts mit Pfeilen versehen sind, um die Anlegeregeln zu bestimmen. Die dünnen Rhomben haben Winkel von $\frac{\pi}{5}$ und $\frac{4\pi}{5}$, und die dicken Rhomben haben Winkel von $\frac{2\pi}{5}$ und $\frac{3\pi}{5}$, alle Kantenlängen sind gleich 1. In Abb. 2.7 sehen wir die Prototiles und ein Beispiel einer Parkettierung mit diesen. Diese Parkettierungen werden *Arrowed-Rhombus-Patterns* oder kurz *AR-Muster* genannt und sind für die algebraische Beschreibung gut geeignet.

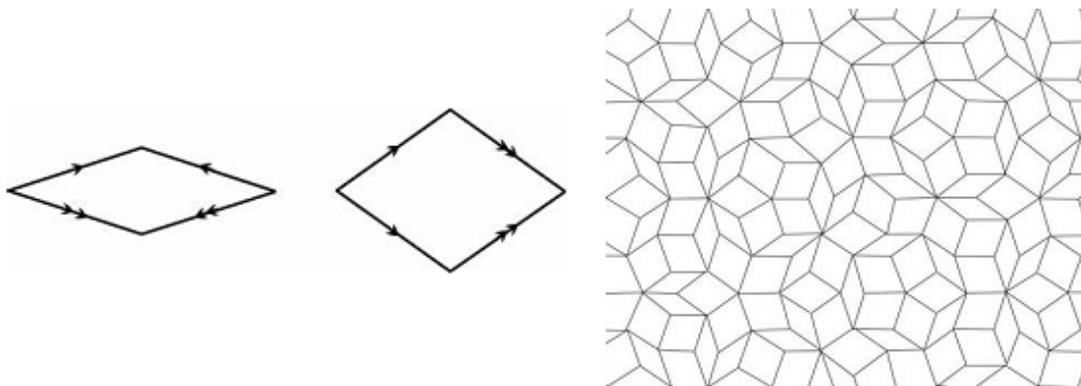


Abbildung 2.7: Eine Penrose-Parkettierung mit Rhomben.

Die Basis der algebraischen Beschreibung stellen die sogenannten *Pentagrids* dar. Unter einem *einfachem Gitter* verstehen wir an dieser Stelle eine Menge von Punkten, deren Distanz zu einer bestimmten Gerade ein ganzzahliges Vielfaches ist von einer positiven Zahl p . Ein einfaches Gitter ist hier also eine äquidistante Schar von Geraden mit Abstand p . Ein *Pentagrid* ist eine Überlagerung von 5 einfachen Grids mit gleicher Äquidistanz, welche sich durch die Drehung um Vielfache von $\frac{2\pi}{5}$ unterscheiden. In diesem Abschnitt sei j immer aus der Menge $0, 1, 2, 3, 4$. Wir addieren modulo 5 in dieser Menge. "Für alle j " bedeutet für $j = 0, \dots, 4$. \sum_j steht für $\sum_{j=1}^4$. Sei

$$\zeta = e^{2\pi i/5} \quad (2.15)$$

¹²vgl. [Bru81]

Seien $\gamma_0, \dots, \gamma_4$ reelle Zahlen, für die gilt:

$$\gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4 = 0 \quad (2.16)$$

Für alle j können wir ein einfaches Gitter in der komplexen Ebene \mathbb{C} definieren als die Menge

$$\{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z\zeta^{-j}) + \gamma_j \in \mathbb{Z}\}. \quad (2.17)$$

Das *Pentagrid* bestimmt durch $\gamma_0, \dots, \gamma_4$ ist die Vereinigung von (2.17) für alle j . Ein Pentagrid wird *singulär* genannt, wenn es Punkte in der Ebene gibt, wo sich drei oder mehr Gitterlinien schneiden, ansonsten ist es *regulär*. Seien $\gamma_0, \dots, \gamma_4$ wie in (2.16), dann können wir jedem Punkt $z \in \mathbb{C}$ fünf ganze Zahlen $K_0(z), \dots, K_4(z)$ zuordnen mit

$$K_j(z) = \lceil \Re(z\zeta^{-j}) + \gamma_j \rceil. \quad (2.18)$$

Dabei ist von einer reellen Zahl x $\lceil x \rceil$ die kleinste ganze Zahl k mit $k \geq x$. Seien r und s ganzzahlig mit $0 \leq r \leq s \leq 4$, und seien $k_r, k_s \in \mathbb{Z}$. Dann ist der Punkt z_0 definiert durch

$$\Re(z\zeta^{-r}) + \gamma_r = k_r, \quad \Re(z\zeta^{-s}) + \gamma_s = k_s \quad (2.19)$$

der Schnittpunkt einer Linie des r -ten Gitters und einer Linie des s -ten Gitters. In einer kleinen Umgebung von z_0 nimmt der Vektor $(K_0(z), \dots, K_4(z))$ vier verschiedene Werte an, diese vier Vektoren erhalten wir aus

$$(K_0(z_0), \dots, K_4(z_0)) + \varepsilon_1(\delta_{0r}, \dots, \delta_{4r}) + \varepsilon_2(\delta_{0s}, \dots, \delta_{4s}) \quad (2.20)$$

mit $(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = (0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)$.

Wir weisen nun jedem Vektor $(k_0, \dots, k_4) \in \mathbb{Z}^5$ die komplexe Zahl

$$k_0 + k_1\zeta + k_2\zeta^2 + k_3\zeta^3 + k_4\zeta^4 \quad (2.21)$$

zu. Die vier Punkte aus 2.20 bilden die Eckpunkte eines Rhombuses. Wenn wir voraussetzen, dass das Pentagrid, welches durch $\gamma_0, \dots, \gamma_4$ bestimmt ist, regulär ist, dann können wir jedem Schnittpunkt des Pentagrids einen solchen Rhombus

zuordnen. Wir wollen nun zeigen, dass wir damit eine Parkettierung der Ebene mit dünnen und dicken Rhomben bilden können. Dazu beschreiben wir die Menge der Knoten der Rhomben mit

$$f(z) = \sum_j K_j(z) \zeta^j \quad (2.22)$$

mit $z \in \mathbb{C}$. Zu jeder Masche des Pentagrids gehört genau ein $f(z)$, und die vier Maschen, die einen Schnittpunkt von zwei Gitterlinien umgeben, definieren die Eckpunkte eines Rhombus. Diese Rhomben überlappen einander nicht (bis auf den Rand), und alle Punkte der Ebene sind von einem Rhombus überdeckt.

Nun zeigen wir, dass die Rhomben derartig mit farbigen Pfeilen ausgestattet werden können, dass wir ein AR-Muster erhalten. Zuerst definieren wir den Index eines Knoten im Rhomben-Muster. Für jedes $z \in \mathbb{Z}$ sind höchstens zwei der $\lambda_0(z), \dots, \lambda_4(z)$ gleich 0, und damit $0 < \lambda_0(z) + \dots + \lambda_4(z) < 5$. Aus

$$\lambda_j(z) = K_j(z) - \Re(z\zeta^{-j}) - \gamma_j \quad (2.23)$$

mit $0 \leq \lambda_j(z) < 1$ und (2.16) erhalten wir

$$\sum_j K_j(z) = \sum_j \lambda_j(z) \quad (2.24)$$

und nachdem die linke Seite ganzzahlig ist, muss sie aus der Menge $\{1, 2, 3, 4\}$ sein. Somit kann jeder Knoten des Rhomben-Musters in der Form $k_0 + k_1 \zeta + \dots + k_4 \zeta^4$ dargestellt werden mit $k_0 + \dots + k_4 \in \{1, 2, 3, 4\}$. Der Wert von $k_0 + \dots + k_4$ ist der *Index* dieses Knotens.

Folgt man den Kanten der Rhombuse in Richtung $1, \zeta, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4$, nimmt der Wert des Indizes um 1 zu, während er in Richtung $-1, -\zeta, -\zeta_2, -\zeta_3, -\zeta_4$ um 1 abnimmt. Daraus folgt, dass ein dicker Rhombus entweder Indexwerte 1 und 3 an den $\frac{2\pi}{5}$ -Winkeln und Indexwert 2 an den $\frac{3\pi}{5}$ -Winkeln hat, oder er hat 2 und 4 an den $\frac{2\pi}{5}$ -Winkeln und 3 an den $\frac{3\pi}{5}$ -Winkeln. Für die dünnen Rhomben erhalten wir entweder 1 oder 3 an den $\frac{4\pi}{5}$ -Winkeln und 2 an den $\frac{2\pi}{5}$ -Winkeln, oder 2 oder 4 an den $\frac{4\pi}{5}$ -Winkeln und 3 an den $\frac{2\pi}{5}$ -Winkeln.

Nun färben wir die Kanten derart, dass die Kanten zwischen Punkten mit Index 2 und jenen mit Index 3 rot sind, Kanten zwischen 1 und 2 oder 3 und 4 seien

grün. Die Orientierung der grünen Pfeile sei von 2 nach 1 und von 3 nach 4. Nun bleibt noch die Orientierung der roten Kanten festzulegen. Dazu beweisen wir folgendes: Sei PQ eine rote Kante. Die beiden Rhomben, welche PQ gemeinsam haben, haben die Winkel α und β am Punkt P. *Dann sind α und β entweder beide kleiner $\frac{\pi}{2}$ oder beide größer $\frac{\pi}{2}$.* In Bezug auf das Pentagrid bedeutet dies: Sei l eine Linie des 0-ten einfachen Gitters und A und B zwei aufeinanderfolgende Schnittpunkte mit des p -ten und j -ten Gitters (p und q aus $\{1, 2, 3, 4\}$). Aus der obigen Aussage über die Winkel α und β wird: *Ist die Strecke AB rot, dann ist $p + q$ ungerade.* AB ist ja rot, wenn $\sum_j K_j(z)$ auf einer Seite von AB 2 und auf der anderen 3 ist. Wir reduzieren das Problem auf den Fall dass $\gamma_0 = 0$ ist und l der imaginären Achse entspricht. Für $\gamma \in \mathbb{R}$ haben wir

$$K_1(iy) = \lceil y \sin(2\pi/5) + \gamma_1 \rceil, \quad K_2(iy) = \lceil y \sin(4\pi/5) + \gamma_2 \rceil,$$

$$K_3(iy) = \lceil -y \sin(4\pi/5) + \gamma_3 \rceil, \quad K_4(iy) = \lceil -y \sin(2\pi/5) + \gamma_4 \rceil.$$

Nachdem das Pentagrid regulär ist, sind $\gamma_1 + \gamma_4$ bzw. $\gamma_2 + \gamma_3$ nicht ganzzahlig. Lläuft y von $-\infty$ nach ∞ springt $K_1(iy) + K_4(iy) - \lceil \gamma_1 + \gamma_4 \rceil$ an den Punkten, wo $(\lceil \gamma_4 + \gamma_1 \rceil - \gamma_1) / \sin(2\pi/5)$ ganzzahlig ist von 0 nach 1. Dasselbe gilt, wenn wir $K_1, K_4, \gamma_1, \gamma_4, \sin(2\pi/5)$ durch $K_2, K_3, \gamma_2, \gamma_3, \sin(4\pi/5)$ ersetzen. Nachdem die Schnittpunkte mit der ersten und vierten Linienschar alternieren, und dies auch für die zweite und dritte Linienschar gilt, muss $p \neq q$ sein. Nehmen wir an, $p + q$ ist gerade. Dann ist $\{p, q\}$ entweder $\{1, 3\}$ oder $\{2, 4\}$. Nachdem $\gamma_0 = 0$ ist $\gamma_1 + \dots + \gamma_4 = 0$, wobei $\lceil \gamma_1 + \gamma_4 \rceil + \lceil \gamma_2 + \gamma_3 \rceil = 1$. Damit ist ersichtlich, dass $K_1(iy) + K_2(iy) + K_3(iy) + K_4(iy) = 1$ oder 3 zwischen den Punkten A und B. Also ist $K_0(iy) + \dots + K_4(iy) = 1$ auf der linken Seite und 2 auf der rechten, oder 3 auf der linken und 4 auf der rechten. Das bedeutet, dass die Strecke AB grün ist, und wir haben folgenden Satz gezeigt:

Satz 2.6 *Die Rhomben konstruiert aus den Schnittpunkten eines regulären Pentagrids (gegeben durch $\gamma_0, \dots, \gamma_4$), definiert durch 2.20 können derartig mit Pfeilen und Farben versehen werden, sodass sie ein AR-Muster ergeben. Damit führen sie auch zu einem Kite-and-Dart-Muster.*

2.5.1 Geometrische Interpretation von deBruijn

Seien $\gamma_0, \dots, \gamma_4$ reelle Zahlen mit $\gamma_0 + \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4 = 0$ die ein reguläres Pentagrid definieren. Die Knoten des daraus abgeleiteten Rhomben-Musters kann geometrisch wie folgt beschrieben werden: Man nehme den 5-dimensionalen Raum \mathbb{R}^5 , und teile diesen in Einheitswürfel. Die Eckpunkte der Würfel sind die Punkte mit ganzzahligen Koordinaten. Jeder Würfel kann indiziert werden mit fünf ganzen Zahlen k_0, \dots, k_4 sodass das Innere des Würfels die Menge der Punkte (x_0, \dots, x_4) ist, mit $k_0 - 1 < x_0 < k_0, \dots, k_4 - 1 < x_4 < k_4$. Wir nennen diese Menge den *Offenen Einheits-Würfel des Vektors k* . Nun definieren wir eine zweidimensionale Ebene durch die folgenden Gleichungen

$$\sum_j x_j = 0, \quad (2.25)$$

$$\sum_j (x_j - \gamma_j) \Re \zeta^{2j} = 0, \quad (2.26)$$

$$\sum_j (x_j - \gamma_j) \Im \zeta^{2j} = 0. \quad (2.27)$$

Satz 2.7 *Die Knoten eines AR-Musters, das von einem regulären Pentagrid (mit Parametern $\gamma_0, \dots, \gamma_4$) erzeugt wird, sind diejenigen Punkte $k_0 + k_1 \zeta + \dots + k_4 \zeta^4$ für die (k_0, \dots, k_4) durch jene Elemente von \mathbb{Z}^5 geht, deren offener Würfel eine nicht offene Schnittmenge mit der durch 2.25 - 2.27 gegebenen Ebene hat.*

Wir wollen den Beweis dieses Theorems kurz skizzieren: Die Gleichungen 2.25 - 2.27 besagen, dass der Vektor $(x_0 - \gamma_0, \dots, x_4 - \gamma_4)$ orthogonal auf den Einheitsvektor, $(1, \zeta^2, \zeta^4, \zeta^6, \zeta^8)$ und $(1, \zeta^{-2}, \zeta^{-4}, \zeta^{-6}, \zeta^{-8})$ ist. Daraus folgt, dass $(x_0 - \gamma_0, \dots, x_4 - \gamma_4)$ eine Linearkombination von $(1, \zeta, \zeta^2, \zeta^3, \zeta^4)$ und $(1, \zeta, \zeta^2, \zeta^3, \zeta^4)$ ist, wobei es ein $z \in \mathbb{Z}$ gibt, sodass $x_j - \gamma_j = \Re(z\zeta^{-j})$ ist. In (x_0, \dots, x_4) liegt der Würfel von k_0, \dots, k_4 , und wir erhalten $k_j = \lceil \Re(z\zeta^{-j}) + \gamma_j \rceil$. Das selbe Argument kann man auch in die andere Richtung verwenden. Man beachte, dass die Regularität des Pentagrids garantiert, dass wenn $k_j = \lceil \Re(z\zeta^{-j}) + \gamma_j \rceil$, $k_j = \Re(z\zeta^{-j}) + \gamma_j$ für höchstens zwei verschiedene j . Wir können damit z etwas variieren, um einen Punkt im Inneren des Würfels zu erhalten.¹³

¹³vgl. [Bru81].

Bei Singuläre Pentagrids liegt die Sache etwas anders: Sie können als Grenzwerte von regulären Pentagrids gesehen werden und erzeugen entweder 2 oder 10 verschiedene Muster.

2.5.2 Pinwheel-Tiling und Quaquaversal-Tiling

Strukturen, die nicht mittels Projektionmethoden erzeugt werden können, sind z.B. "Pinwheel"-Tilings, welche wie Penrose-Tilings eine hierarchische Struktur aufweisen. Die Inflationsregel ist dabei folgende: man startet mit einem rechtwinkligen Dreieck der Seitenlängen 1, 2 und $\sqrt{5}$, unterteilt dieses in 5 ähnliche Dreiecke und vergrößert um den Faktor $\sqrt{5}$, siehe Abbildung 2.8

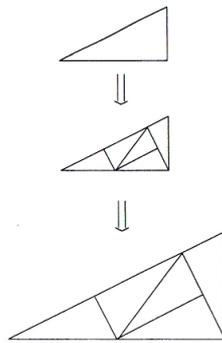


Abbildung 2.8: Inflationsregel zur Konstruktion des Pinwheel-Tilings nach [Rad99b]

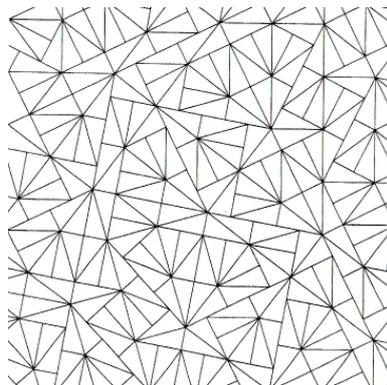


Abbildung 2.9: Ausschnitt aus einem Pinwheel-Tiling nach [Rad99b]

Dann wird die Regel auf jedes der 5 Dreiecke angewandt, und man erhält 25

Dreiecke und so weiter. Das 3-dimensionale Analogon dazu sind die "Quaquaversal"-Tilings.

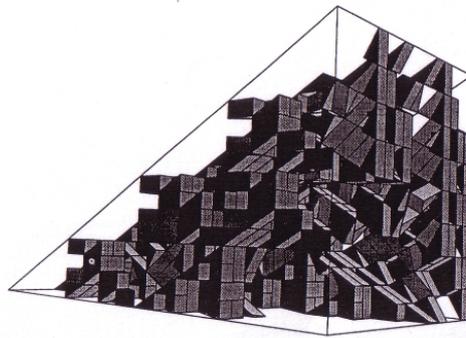


Abbildung 2.10: Teil des dreidimensionalen Quaquaversal Tilings nach [Rad99b]

Die Besonderheit von Pinwheel- bzw. Quaquaversal- Tilings ist, dass sie zu Beugungsbildern führen, die völlig rotationsinvariant sind. Die Beugungsbilder bestehen aus einheitlichen Ringen anstatt isolierter Punkte hoher Intensität, wobei es unklar ist, ob die Ringe scharf oder diffus sind. Jede endliche Struktur in einem solchen Tiling erscheint in der gleichen Häufigkeit in allen Rotationsrichtungen. Vor dieser Entdeckung nahm man an, dass derartige Beugungsbilder nur von einem Konglomerat aus zufällig angeordneten Partikeln (z.B. ein Pulver) oder einem gefrorenen Flüssigkeit (z.B. Glas) entstanden sein können. Diese neuen Modelle zeigen, dass es sich bei einem solchen Material auch um einen Quasikristall handeln kann, also um eine sehr bestimmte Struktur. ¹⁴

2.6 Theorie der Distributionen

Wir wollen an dieser Stelle auf die Theorie der Distributionen eingehen. Wir werden sie brauchen, wenn wir im Kapitel Beugung das Wiener Diagramm und die Summationsformel von Poisson behandeln, und verwenden die Notation von de Bruijn(1973). Eine Theorie von allgemeinen Funktionen baut auf eine Klasse von bestimmten "gutartigen" Funktionen aus. De Bruijn nennt sie in seiner Theorie "smooth", wir wollen hier den Ausdruck "gleichmäßig" verwenden.

¹⁴vgl. Radin:1999b

Definition 2.21 Eine komplex-analytische Funktion f ist gleichmäßig, wenn es positive Zahlen A, B, M gibt, sodass für alle $x, y \in \mathbb{R}$ gilt:

$$|f(x + iy)| \leq M \exp(-Ax^2 + By^2) \quad (2.28)$$

Die Menge der gleichmäßigen Funktionen sei S und ist ein metrischer Raum mit dem inneren Produkt

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \overline{g(x)} dx \quad (2.29)$$

und der Norm

$$\|f\| = (f, f)^{1/2} \quad (2.30)$$

Die Konvergenz von Folgen und Reihen in S ist auf die übliche Weise definiert. S ist abgeschlossen unter der Fourier Transformation. Ist $f \in S$ dann ist auch $\hat{f} \in S$ und

$$\hat{f}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-2\pi ixs) dx \in S. \quad (2.31)$$

Sei N_α eine Halbgruppe von Operatoren auf S parametrisiert auf \mathbb{R}^+ , welche

$$N_\alpha N_\beta = N_{\alpha+\beta} \quad (2.32)$$

erfüllen. Die N_α sind definiert durch

$$(N_\alpha f)(z) = \int_{-\infty}^{\infty} K_\alpha(z, t) f(t) dt \quad (2.33)$$

wobei

$$K_\alpha(z, t) = (\sinh \alpha)^{-1/2} \exp\left(\frac{-\pi}{\sinh \alpha} ((z^2 + t^2) \cosh(\alpha) - 2zt)\right). \quad (2.34)$$

Dieser Ausdruck leitet sich aus der Theorie der Hermiteschen Funktionen ab. Die Operatoren N_α kommutieren mit der Fouriertransformation: $N_\alpha \mathcal{F} = \mathcal{F} N_\alpha$.

Jedes $f \in S$ definiert eine Abbildung

$$F : \mathbb{R}^+ \rightarrow S \text{ mit } F(\alpha) = N_\alpha f. \quad (2.35)$$

Diese Abbildung hat die Eigenschaft dass

$$N_\beta F(\alpha) = F(\alpha + \beta) \quad \forall \alpha > 0, \beta > 0. \quad (2.36)$$

Eine Abbildung F , die 2.36 erfüllt, nennen wir *Spur*. Wenn F definiert ist durch ein $f \in S$, dann nennen wir F die *Spur von f* .

Definition 2.22 *Eine Allgemeine Funktion ist eine Spur.*

Wenn F und G allgemeine Funktionen sind mit $F(\beta) = G(\beta)$ für alle $\beta > 0$, dann ist $F = G$. Die Menge der allgemeinen Funktionen sei S^* , welche ein linearer Raum ist. Es gibt kein inneres Produkt auf S^* , jedoch eine Art von inneren Produkt von Elementen aus S^* mit Elementen aus S . Sei $g = N_\alpha h$ für ein α . Wir definieren

$$(F, g) = (F(\alpha), h). \quad (2.37)$$

Wir wollen nun zwei Beispiele von allgemeinen Funktionen geben:

- Jede Funktion von S kann in S^* eingebettet werden mit der Regel:

$$emb f : \alpha \longrightarrow N_\alpha f.$$

Dies ist eine Spur mit $emb(S) \subset S^*$ und diese Einbettung ist echt, da $emb(S) \neq S^*$

- Die Abbildung $F(\alpha) = K_\alpha(b, t)$ ist eine allgemeine Funktion.

Definition 2.23 *Eine Folge von allgemeinen Funktionen F_n konvergiert gegen eine allgemeine Funktion F , wenn für jedes $g \in S$ die Folge der inneren Produkte (F_n, g) gegen (F, g) konvergiert. Eine Reihe von allgemeinen Funktionen $\sum F_n$ konvergiert (absolut) gegen eine allgemeine Funktion, wenn die Folge der Teilsummen (absolut) konvergiert.*

Kapitel 3

Beugung

3.1 Einführung in die Beugungsgeometrie

Beugung ist die Bezeichnung für die Streuung von Wellen, die auf ein Objekt treffen. Die Wellen breiten sich aus, überlagern einander, und fügen sich wieder zusammen. Die Größe des Objekts relativ zur Wellenlänge bestimmt diesen Effekt (siehe Abb. 3.1).

Beugung von Schallwellen an Gebäuden ist z.B. eine alltägliche Erfahrung: Wir können uns auch um Ecken herum unterhalten. Die Beugung von Licht an einer solchen Gebäudeecke ist jedoch nur mit aufwendigen optischen Apparaturen messbar. Röntgenstrahlen verhalten sich analog zu Schall- und optischen Wellen, sind de facto auch Lichtwellen mit sehr kurzer Wellenlänge und dadurch geeignet, am Atomgitter gebeugt zu werden. In unseren grundlegenden Überlegungen

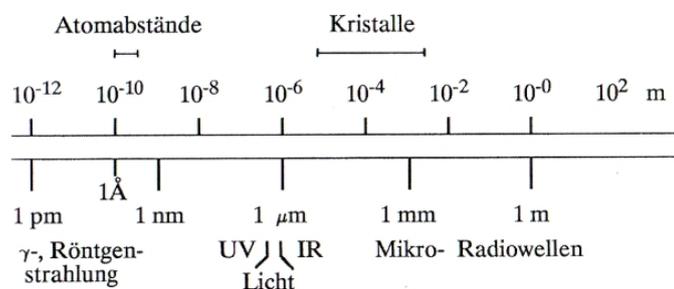


Abbildung 3.1: Die Abstandsverhältnisse von Beugungsobjekt und Wellen aus [Mas07] S.13.

können wir uns an die Gesetze der Optik halten. Die Intensität der gebeugten Wellen kann auf photographischen Schirmen sichtbar gemacht, bzw. sensorisch erfasst werden. Solcherart erzeugte Bilder wollen wir "Beugungsbilder" nennen, um den sperrigen Begriff "durch Beugung erzeugte Interferenz-Muster" zu vermeiden. Bei bestimmten regelmäßigen Anordnungen der Gitter werden die Wellen derartig gebeugt, dass sie (annähernd) gleichphasig in bestimmte Richtungen verlaufen. Dadurch entstehen am Bild mehr oder weniger scharfe, helle Punkte, die sogenannten „Bragg-Peaks“.

Wir halten uns in diesem Kapitel an die Notation von [Sen95] ¹ und verwenden das Modell der Fraunhofer-Beugung, bei der die Distanz von der Lichtquelle zum Beugungsobjekt und von diesem zum Schirm "sehr groß" ist. Im Gegensatz zur Fresnel-Beugung kann man dieses Modell relativ einfach durch Fourier Transformationen berechnen, wir treffen dabei folgende (vereinfachende) Annahmen:

- Wir stellen uns das Beugungsobjekt als Maske vor: eine Ebene mit Öffnungen, die eine allgemeine Delone-Menge sind (diskret und relativ dicht).
- Die Wellen einer punktförmigen Quelle treffen in parallelen Strahlen die Maske.
- Parallele Strahlen des gebeugten Lichts, die den gleichen Winkel zur Maske haben, treffen im selben Punkt auf den Schirm.
- Es gibt nur eine Wellenlänge λ , das Licht ist also monochromatisch.

3.1.1 Ein-Punkt Beugung

Beugt man Licht an einer Maske mit einer kreisförmigen Öffnung, ist das Beugungsbild auch kreisförmig, und besteht aus einer Scheibe mit konzentrischen Ringen ringsum. Die Radien der Maske und des Bildes sind dabei umgekehrt proportional, geht der Radius der Blende gegen 0, geht die helle Scheibe am Beugungsbild gegen ∞ . In diesem Grenzfall wäre der ganze (unendlich große) Schirm mit gleicher Intensität beleuchtet. Wenn nun die Blende punktförmig ist, dann sei $J(\vec{s})$ der Wert der Intensität der Wellenfront in der Richtung \vec{s} . Nachdem $J(\vec{s})$ gleich

¹vgl. [Sen95, S.74 ff. von]

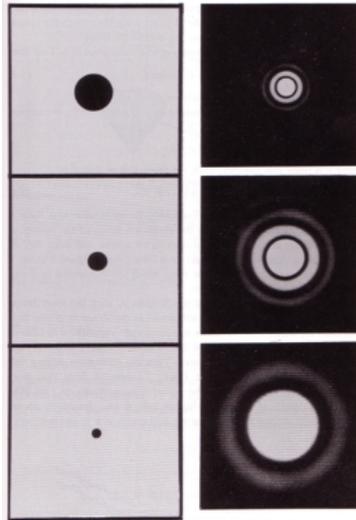


Abbildung 3.2: Bei Verkleinerung der Blendenöffnung (links) vergrößert sich der Radius des Beugungsbildes.

groß ist für alle \vec{s} , setzen wir $J(\vec{s}) \equiv 1$. Der Wert von $J(\vec{s})$ ist daher unabhängig von der Position der Öffnung der Blende in der Maske. Aus der Physik wissen wir, dass $J(\vec{s})$ das Quadrat der Amplitudenfunktion $A(\vec{s})$ ist:

$$J(\vec{s}) = |A(\vec{s})|^2 \quad (3.1)$$

Wir können daraus schließen, dass $A(\vec{s})$ eine komplexwertige Wellenfunktion mit Betrag 1 ist:

$$A(\vec{s}) = \exp(-2\pi i f(\vec{s})) \quad (3.2)$$

wobei f eine reellwertige Funktion von \vec{s} ist.

In der Abbildung 3.2 sehen wir links Punktblenden und rechts das zugehörige Beugungsbild.²

²aus [HTW75].

3.1.2 Zwei-Punkt Beugung

Nun haben wir eine Maske mit zwei punktförmigen Blenden an den Punkten P_1 und P_2 mit dem Vektor \vec{d} von P_1 nach P_2 (siehe Abbildung 3.3).

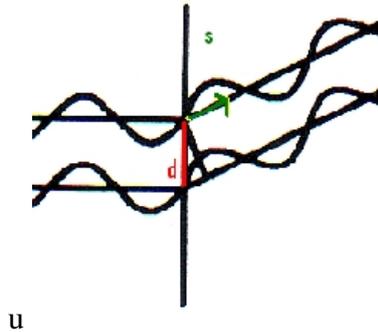


Abbildung 3.3: Zwei Punktblenden mit Abstand \vec{d} beugen das Licht in Richtung \vec{s} .

Nun werden die Wellen interferieren und die Intensität $J(\vec{s})$ ist abhängig von \vec{d} . Die elektromagnetischen Wellen sind in Phase, wenn sie auf die Maske treffen, im allgemeinen jedoch nicht, wenn sie den Schirm erreichen. Der Abstand σ , mit der eine Phase der anderen hinterherhinkt, ist die Projektion von \vec{d} auf \vec{s} . Nachdem $|\vec{s}| = 1$ ist, erhalten wir

$$\sigma = \vec{d} \cdot \vec{s} = d \cdot \cos \theta \quad (3.3)$$

mit $d = |\vec{d}|$ und θ als Winkel zwischen \vec{s} und \vec{d} . \vec{s} ist dabei nicht eindeutig definiert. Im 3-dimensionalen Raum gibt es unendlich viele Vektoren die die Bedingung erfüllen. Sie liegen auf einem Kegel um \vec{d} und haben alle die gleiche Länge, weshalb sie auf dem Schirm auf eine einfache Gerade projiziert werden. Wenn σ ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ ist, werden die beiden Wellen den Schirm gleichphasig erreichen und wir erhalten ein Intensitätsmaximum. Bei $\sigma = n\lambda/2$ mit ungeradem n löschen sich die Amplituden aus und die Intensität $J(\vec{s}) = 0$. Deshalb wird das Beugungsbild aus kontinuierlichen unendlichen Familien von parallelen Linien bestehen, die periodisch von hell zu dunkel variieren. Die Amplituden sind additiv, also

$$A(\vec{s}) = A_0(\vec{s}) + A_d(\vec{s}) \quad (3.4)$$

Nachdem die Quadrate der Beträge der Amplituden = 1 ist, muss

$$A_d(\vec{s}) = z_d A_0(\vec{s}) \quad (3.5)$$

für die komplexe Zahl $z_d = z_d(\vec{s})$ mit $|z_d| = 1$. Wir erkennen, dass die Verschiebung der Blenden eine Phasenverschiebung der Amplitude zur Folge hat, welche $(\vec{d}) * (\vec{s})$ ist. Die Multiplikation mit z_d transformiert $A_0(\vec{s})$ auf eine Art und Weise, die gegensätzlich zu \vec{d} ist:

$$A_d(\vec{s}) = \exp(2\pi i \vec{d} \cdot \vec{s}) A_0(\vec{s}) \quad (3.6)$$

In 3.4 eingesetzt erhalten wir

$$A(\vec{s}) = A_0(\vec{s}) (1 + \exp(2\pi i \vec{d} \cdot \vec{s})) \quad (3.7)$$

Damit können wir die Intensität berechnen:

$$\begin{aligned} J(\vec{s}) &= A(\vec{s}) \overline{A(\vec{s})} = \\ &= |A_0(\vec{s})|^2 (1 + \exp(2\pi i \vec{d} \cdot \vec{s})) (1 + \exp(-2\pi i \vec{d} \cdot \vec{s})) = \\ &= 2(1 + \cos(2\pi \vec{d} \cdot \vec{s})). \end{aligned} \quad (3.8)$$

$J(\vec{s})$ hat Maxima, wenn $\cos(2\pi \vec{d} \cdot \vec{s}) = 1$, also wenn $\vec{d} \cdot \vec{s}$ ganzzahlig ist. $J(\vec{s})$ ist minimal, wenn $\cos(2\pi \vec{d} \cdot \vec{s}) = -1$, diese (dunklen) Streifen sind genau in der Mitte der Maxima. Der Abstand der Maxima ist umgekehrt proportional zu d .³

³vgl. [Sen95] S.82

3.1.3 N-Punkt Beugung

Wir berechnen die Amplitudenfunktion für eine endliche Menge von Punkten:

$$\begin{aligned} A(\vec{s}) &= A_0(\vec{s}) + A_1(\vec{s}) + \dots + A_N(\vec{s}) \\ &= A_0(\vec{s}) \left(1 + \sum_{j=0}^N \exp(2\pi i \vec{d}_j \cdot \vec{s}) \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

mit $d_0 = 0, d_1, \dots, d_N \in \mathbb{R}$ als Abstände der $N + 1$ Punktblenden. Weiters ist die Intensitätsfunktion

$$\begin{aligned} J(\vec{s}) &= |A(\vec{s})|^2 = \sum_{j=0}^N \sum_{k=0}^N \exp(2\pi i (\vec{d}_j - \vec{d}_k) \cdot \vec{s}) \\ &= N + 1 + 2 \sum_{j=1}^N \sum_{k < j} \cos(2\pi (\vec{d}_j - \vec{d}_k) \cdot \vec{s}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Anhand von 3.10 ist ersichtlich, dass Beugungsbilder zentrosymmetrisch sind: da $J(\vec{s}) = J(-\vec{s})$ für alle \vec{s} . Ausserdem hängt der Wert der Summe in (3.10) nur von der relativen Position der Punktblenden ab. Erhöhen wir die Anzahl der Blenden, verändert dies nicht die Anzahl oder Positionen der Intensitätsmaxima. Der Effekt ist, dass das Beugungsbild kontrastreicher wird, die Bragg-Peaks also heller werden und schärfere Konturen haben.

3.2 Fouriertransformationen

Fourier Transformationen spielen eine zentrale Rolle bei der Fraunhofer-Beugung. In der klassischen Optik wird gezeigt, dass die Amplitudenfunktion $A(\vec{s})$ die Fourier Transformierte einer Funktion $\rho(\vec{x})$ ist. $\rho(\vec{x})$ beschreibt die Natur und die Anordnung des Beugungsobjekts und ist keine Funktion im klassischen Sinn. Die "Maske" mit ihren "Blenden" ist ja ein geometrisches Objekt, eine Punktmenge, und da $\rho(\vec{x})$ die relative Lage der Punkte beschreibt, wird sie auch Dichtefunktion genannt. Wir wollen nun die wichtigsten Fourierrelationen zwischen ρ, A und der Intensitätsfunktion J beschreiben. Die Fouriertransformation einer Funktion f in

n Variablen ist die Funktion \hat{f} definiert durch das Integral

$$\hat{f}(\vec{s}) := \int_{\mathbb{R}^n} f(\vec{x}) \exp(-2\pi i \vec{x} \cdot \vec{s}) d\vec{x} \quad (3.11)$$

\hat{f} existiert nur, wenn das Integral konvergiert (was im allgemeinen nicht zutrifft). Sei nun f die charakteristische Funktion einer beschränkten, abzählbaren Menge C , das heisst

$$f(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für alle } \vec{x} \in C, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Dann existiert die Transformation. An dieser Stelle sei auf den Unterschied zwischen der Fourier Transformation und dem Fourier Operator \mathcal{F} hingewiesen. Dieser verbindet eine Funktion f mit der dazugehörigen Fouriertransformierten \hat{f} :

$$\mathcal{F} f = \hat{f} \quad (3.13)$$

Mit f und g als komplexwertige Funktionen auf E^n hat \mathcal{F} folgende Eigenschaften:⁴

\mathcal{F} ist linear:

$$\mathcal{F}(f + g) = \mathcal{F}f + \mathcal{F}g. \quad (3.14)$$

mit a als Skalar ist

$$\mathcal{F}af = a\mathcal{F}f. \quad (3.15)$$

Zu \mathcal{F} gibt es den inversen Operator \mathcal{F}^{-1} :

$$f(\vec{x}) = \mathcal{F}^{-1}\hat{f}(\vec{s}) = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\vec{s}) \exp(2\pi i \vec{s} \cdot \vec{x}) d\vec{s}. \quad (3.16)$$

Aufgrund diesen Zusammenhangs werden f und \hat{f} Fourier-Paar genannt.

Eine Verschiebung von f bewirkt eine Rotation von \hat{f} .

$$\mathcal{F}f(\vec{x} + \vec{c}) = \exp(2\pi i \vec{s} \cdot \vec{c}) \hat{f}(\vec{x}). \quad (3.17)$$

⁴vgl. [Sen95] S. 89 ff.

Ist A eine lineare isometrische Abbildung, dann gilt:

$$\mathcal{F} f(A\vec{x}) = \hat{f}(A\vec{s}), \quad (3.18)$$

$$\overline{\mathcal{F} f(-\vec{x})} = \overline{\hat{f}(\vec{s})}, \text{ und} \quad (3.19)$$

Die Faltung von f und g ist

$$f * g(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\vec{t})g(\vec{x} - \vec{t}). \quad (3.20)$$

Die Fourier Transformation einer Faltung ist dann das gewöhnliche Produkt einer Fouriertransformation und umgekehrt:

$$\mathcal{F}(f * g) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g) \text{ und } \mathcal{F}(fg) = \mathcal{F}(f) * \mathcal{F}(g); \quad (3.21)$$

wobei $*$ die Faltung von f und g ist, und auf der anderen Seite das übliche Produkt steht.

3.2.1 Das Wiener Diagramm

Falls $g(\vec{x}) = \overline{f(-\vec{x})}$, dann ist die Faltung $f(\vec{x}) * \overline{f(-\vec{x})}$ die *Autokorrelationsfunktion* von f . Mit (3.19) und (3.21) ist die Fouriertransformierte der quadrierte Betrag von \hat{f} . Diese Zusammenhänge kann man im folgenden Diagramm zusammenfassen:

$$\begin{array}{ccc}
 f(\vec{x}) & \xrightarrow{\text{Faltung}} & f(\vec{x}) * \overline{f(-\vec{x})} \\
 \Downarrow & & \Downarrow \\
 \hat{f}(\vec{s}) & \xrightarrow{\text{quadrieren}} & |\hat{f}(\vec{s})|^2
 \end{array}$$

Setzen wir $f(\vec{x}) = \rho(\vec{x})$ und $\gamma(\vec{x}) = f(\vec{x}) * \overline{f(-\vec{x})}$ erhalten wir das *Wiener Diagramm*:

$$\begin{array}{ccc} \rho(\vec{x}) & \implies & \gamma(\vec{x}) \\ \Downarrow & & \Downarrow \\ A(\vec{s}) = \hat{\rho}(\vec{s}) & \implies & J(\vec{s}) = \hat{\gamma}(\vec{s}) \end{array}$$

Das Diagramm nach Norbert Wiener benannt, auch aufgrund seiner Arbeit zur verallgemeinerten harmonischen Analysis.⁵ Die zentrale Schwierigkeit in der Interpretation der Beugungsbilder ist, dass $J(\vec{x})$ keinerlei Informationen über die Phasen enthält. Um die Kristallstruktur zu finden, müssen wir einen Weg von $J(\vec{s})$ nach $\rho(\vec{x})$ finden. Diese passiert meist über sogenannte "Ent-Faltung", was eine gewisse Unsicherheit bezüglich des Wahrheitsgehalts des Wiener Diagramms mit sich bringt.⁶

3.2.2 Dirac Deltas

Wir wollen die "Funktion" $\rho(\vec{x})$, die das Beugungsobjekt beschreibt, finden. $\rho(\vec{x})$ definiert die Dichte von $N + 1$ Punktblenden an den Stellen x_0, \dots, x_N in der Maske, und ist die inverse Fouriertransformation von $A(\vec{s})$.

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}) &= \mathcal{F}^{-1}(A_0(\vec{s})(1 + \sum_{j=1}^N \exp(-2\pi i \vec{x}_j \cdot \vec{s}))) = \\ &= \mathcal{F}^{-1}(A_0(\vec{s})) * (\mathcal{F}^{-1}(1) + \sum_{j=1}^N \mathcal{F}^{-1}(\exp(-2\pi i \vec{x}_j \cdot \vec{s}))). \end{aligned} \quad (3.22)$$

wobei der rechte Faktor

$$\int_{R^n} 1 \exp(2\pi i \vec{x} \cdot \vec{s}) d\vec{s} + \sum_{j=1}^N \int_{R^n} \exp(-2\pi i (\vec{x} - \vec{x}_j) \cdot \vec{s}) d\vec{s} \quad (3.23)$$

⁵vgl. [Wie30]

⁶vgl. [Sen95], S. 91.

ist. Der Einfachheit halber betrachten wir Funktionen in einer Variablen. Die Integrale konvergieren nicht, aber wir können sie interpretieren, wenn wir sie auf ein Intervall $[-T, T]$ beschränken und ausserhalb des Intervalls 0 setzen. Die Fouriertransformation der konstanten Funktion 1 ist dann gegeben mit

$$\int_{-T}^T 1 \exp(2\pi ixs) ds. \quad (3.24)$$

Für endliche T existiert das Integral und hat den Wert

$$\rho_T(x) = \frac{\sin(2\pi Tx)}{\pi x}. \quad (3.25)$$

Die inverse Fouriertransformierte von f ist der Grenzwert

$$\rho(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sin(2\pi Tx)}{\pi x}. \quad (3.26)$$

In Abbildung 3.4 sehen wir die Graphen von $\rho_T(x)$ für $T = 2, 10, 50$.

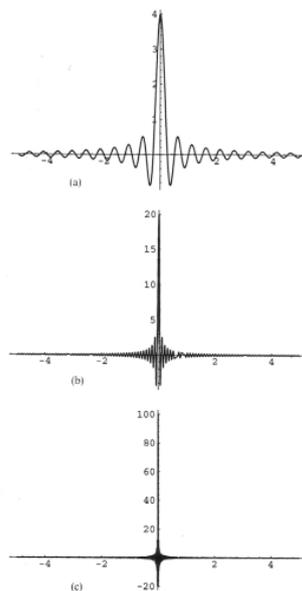


Abbildung 3.4: Die Funktionen $\rho_T(x)$ für verschieden T .

Die Funktionen werden schmaler und steiler für größere T , der Grenzwert ist

das Dirac Delta, also

$$\mathcal{F}^{-1}(1) = \delta. \quad (3.27)$$

Das Dirac Delta ist charakterisiert durch folgende Eigenschaft:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)g(x) dx = g(0) \quad (3.28)$$

Für $g(x) = \exp(-2\pi ixs)$ erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \exp(-2\pi ixs) dx = 1. \quad (3.29)$$

Mithilfe der Theorie der Allgemeinen Funktionen (vgl. Kapitel 2) kann gezeigt werden, dass deren Raum abgeschlossen ist unter der Fouriertransformation, und es gilt

$$\delta(x-d) \quad \text{und} \quad \exp(2\pi ids) \quad \text{sind Fourierpaare.} \quad (3.30)$$

Das Dirac Delta kann verallgemeinert werden für Räume beliebiger Dimension. Wir können auch die inverse Fouriertransformation von 3.4 bilden mit $\delta(\vec{x}) + \delta(\vec{x} - \vec{d})$. Verallgemeinert sind auch die folgenden Funktionen für jede Delone Menge Fourierpaare:

$$\rho(\vec{x}) = \sum_{d_k \in \Lambda} \delta(\vec{x} - \vec{d}_k) \quad \text{und} \quad \hat{\rho}(\vec{s}) = \sum_{d_k \in \Lambda} \exp(-2\pi i \vec{d}_k \cdot \vec{s}) \quad (3.31)$$

Wenn Λ ein eindimensionales Punktgitter ist, sieht $\rho(x)$ wie ein Kamm mit unendlich langen Zähnen aus, deswegen wird jede abzählbare unendliche Summe von Deltas Dirac-Kamm genannt. Mit den komplexen Zahlen $c(k)$ können wir folgende Definition machen:⁷

Definition 3.1 *Der Dirac-Kamm einer Menge Γ ist die Summe $\sum_{d_k \in \Gamma} c(k)\delta(\vec{x} - \vec{d}_k)$.*

⁷Vgl. [Sen95] S. 95.

3.3 Die Beugungs-Bedingung

Sei Λ eine Delone Menge in E^n mit den Punkten $d_k, k \in \mathbb{Z}$. Dann ist

$$\rho_\Lambda(\vec{x}) = \sum_{d_k \in \Gamma} \delta(\vec{x} - \vec{d}_k) \quad (3.32)$$

eine Dirac-Kamm. Wir möchten wissen, wie sein Beugungsbild aussieht, vor allem ob es scharfe, helle Flecken aufweist und damit "im wesentlichen" diskret ist. Dies hängt von der Position der Punkte in Λ ab, bzw. was auf das gleiche hinausläuft, vom Verhalten der Fouriertransformierten $\hat{\gamma}$ der Autokorrelationsfunktion γ . Wir schränken Λ auf ein Intervall ein, $\Lambda_T = \Lambda \cap [-T, T]^n$ und definieren

$$\hat{\gamma}(\vec{s}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{(2T)^n} \left| \sum_{d_k \in \Gamma_T} \exp(-2\pi i \vec{d}_k \cdot \vec{s}) \right|^2. \quad (3.33)$$

Definition 3.2 Sei Λ eine Delone Menge $\in E^n$ mit Dichte ρ und Autokorrelation γ . Das Spektrum von Λ ist seine "Intensitätsfunktion" $\hat{\gamma}$ wie in 3.33.

$\hat{\gamma}(\vec{s})$ ist in jedem Fall positiv, und wir können es eindeutig zerlegen in zwei Summanden, wobei der erste diskret und der zweite kontinuierlich ist:

$$\hat{\gamma}(\vec{s}) = \sum_{s^* \in S} c(\vec{s}) \delta(\vec{s} - \vec{s}^*) + \hat{\gamma}_c(\vec{s}), \quad (3.34)$$

wobei die Koeffizienten $c(\vec{s})$ aus \mathbb{R} sind. Die Menge S ist immer abzählbar, ist S unendlich groß, dann ist die erste Komponente in 3.34 ein Dirac-Kamm. Die kontinuierliche Komponente des Spektrums kann selbst aus einer Summe von mehr oder weniger kontinuierlichen Komponenten bestehen. Es gilt immer: $0 \in S$, wenn $S = 0$, dann nennen wir $\hat{\gamma}$ *rein kontinuierlich*, wenn $\hat{\gamma}_c \equiv 0$, dann ist $\hat{\gamma}$ *rein diskret*. Wenn das Spektrum rein diskret ist, dann ist $\hat{\gamma}$ selbst ein Dirac-Kamm. Eine Delone Menge Λ *beugt*, wenn es abzählbar unendliche Deltas in seinem Spektrum hat, also wenn die Menge S abzählbar unendlich ist.

Definition 3.3 Die Beugungsbedingung: Λ ist ein Kristall, wenn sein Spektrum abzählbar unendliche diskrete Komponenten hat.

In Kapitel 2 haben wir festgestellt, dass die Symmetrie eines Kristalls die Symmetrie seines Beugungsbildes ist. Dies können wir schärfer ausformulieren:

Definition 3.4 Die Symmetriegruppe von Λ ist die Gruppe G der Isometrien, die invariant bezüglich der Intensitätsfunktion sind:

$$\phi \in G \iff \hat{\gamma}(\phi \vec{s}) = \hat{\gamma}(\vec{s})$$

Trotz der vielen Fragezeichen wollen wir hier das Wiener Diagramm als richtig erachten und suchen Richtungen \vec{s}^* , für welche alle Ausdrücke $\vec{d}_k \cdot \vec{s}^*$, die in (3.31) auftauchen, annähernd identisch modulo 1 sind. Für diese Richtungen können wir mit

$z_d = \exp(-2\pi i \vec{d}_k \cdot \vec{s}^*)$ approximieren:

$$\hat{\rho}(\vec{s}^*) = z_d \sum_{d_k \in \Lambda} 1. \quad (3.35)$$

Im Beugungsbild werden an den Stellen \vec{s}^* helle Flecken sein. Es gibt immer mindestens einen solchen Punkt $s^* \in \Lambda$, nämlich $s^* = 0$. Deshalb ist der Ursprung eines Beugungsbildes immer ein Fleck mit maximaler Helligkeit. Nachdem $\vec{d}_k \cdot \vec{s}^* \in \mathbb{Z}$, ist auch jeder Punkt s^* des dualen Gitters L^{p^*} eines Gitters L ein Punkt mit maximaler Helligkeit. Wenn $\Lambda = L^p$ ist, dann ist $S = L^{p^*}$ und $\hat{\gamma}_c(\vec{s}) \equiv 0$. Dies ist auch Teil der *Poisson-Summations-Formel*:

Satz 3.1 Seien L und L^* duale n -dimensionale Gitter. Dann gilt:

$$F\left(\sum_{l \in L} \delta(\vec{x} - \vec{l})\right) = \sum_{l^* \in L^*} \delta(\vec{s} - \vec{l}^*). \quad ^8$$

Anders ausgedrückt besagt der Satz, dass das Beugungsbild eines Punktgitters das duale Punktgitter ist. Allerdings gilt diese Aussage nur innerhalb eines verallgemeinerten Rahmens. Für endliche Summen gibt es Regionen mit unterschiedlichen Intensitäten, wie in Abbildung 3.5 zu sehen.⁹

Wir können uns die Dichte $\rho_t(\vec{x})$ der Punktmenge mit dreieckiger Abgrenzung als Produkt der Dichte $\rho(\vec{x})$ des Gitters und der charakteristischen Funktion χ des

⁸Für einen Beweis siehe [Sen95] S.270.

⁹vgl. [Sen95] S.98.

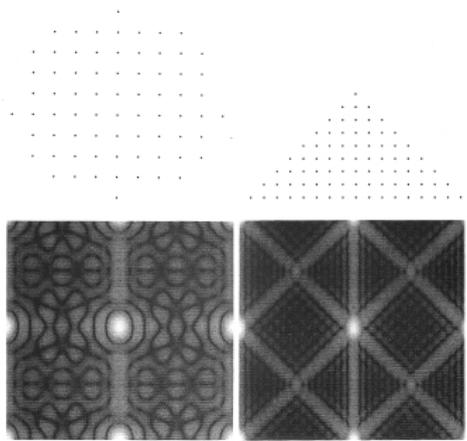


Abbildung 3.5: Der sogenannte "finite size effect": ein kreisförmiger und ein dreieckiger Ausschnitt des selben Punktgitters und deren zugehörigen Beugungsbilder.

Dreiecks vorstellen, und können schreiben:

$$\hat{\rho}_t(\vec{s}) = \hat{\rho}(\vec{s}) * \hat{\chi}(\vec{s}) \quad (3.36)$$

Der Faktor $\hat{\chi}(\vec{s})$ ist dabei ein sozusagen ein "Echo" der Form der begrenzten Region.

Sei L^p eine Punktgitter in E^n und Λ eine Teilmenge von L^p . Die zu Λ gehörende Dichte ρ hat die Form

$$\rho(\vec{x}) = \sum_{l \in \Lambda} \delta(\vec{x} - \vec{l}). \quad (3.37)$$

Nach der Definition des Dualgitters L^* haben wir $\forall \vec{l}^* \in L^*$

$$\vec{l} \cdot \vec{l}^* \in \mathbb{Z} \quad (3.38)$$

und damit

$$\hat{\rho}(\vec{s}) = \sum_{l \in \Lambda} \exp(-2\pi i \vec{l} \cdot \vec{s}) = \sum_{l \in \Lambda} 1. \quad (3.39)$$

für jedes $\vec{s} \in L^*$. Nachdem L^* abzählbar unendlich ist, ist Λ ein Kristall.

Wenn ρ und $\hat{\rho}$ Dirac-Kämme sind, dann ist $\hat{\gamma}(\vec{s}) \equiv 0$ und

$$\mathcal{F}\left(\sum_{\vec{d}_k \in \Lambda} \delta(\vec{x} - \vec{d}_k)\right) = \sum_{\vec{s}^* \in S} c(\vec{s}) \delta(\vec{s} - \vec{s}^*). \quad (3.40)$$

Da diese Gleichung große Ähnlichkeit mit der Poisson-Summations-Formel 3.1 hat, nennen wir ρ und $\hat{\rho}$ *Poisson Kämmen*. Sei Λ eine Menge von Punkten auf dem reellen Zahlenstrahl definiert durch

$$x_n = \alpha n + g(n), n \in \mathbb{Z} \quad (3.41)$$

Dann gilt:

Satz 3.2 (*Bombieri and Taylor*) *Die Delone Menge Λ aus 3.41 ist ein Poisson Kamm.*

Kapitel 4

Parkettierungen

Die Kunst der Parkettierung oder Kachelung hat ihre Ursprünge früh in der Geschichte der Menschheit. Kieselsteine wurden schon in vorchristlichen Jahrhunderten verwendet, um Böden und Wände zu schmücken. Dabei haben Menschen seit jeher versucht, entweder ein für das Auge angenehmes Muster zu erzeugen (das sich wiederholen kann), oder ein Objekt ihrer Realität bildhaft festzuhalten. Sobald der menschliche Geist eine Regelmäßigkeit in der Anordnung der Steine erkennen konnte, versuchte er dies auch zu beschreiben und Konstruktionsregeln aufzustellen. Diese geometrischen Aspekte wie Symmetrie und Periodizität waren immer wieder Gegenstand der Untersuchungen von herausragenden Persönlichkeiten wie Pythagoras, Euklid und Kepler.

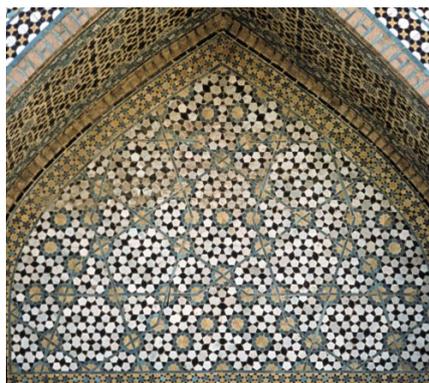


Abbildung 4.1: Bogengang eines Schreins in Isfahan, Iran, erbaut 1453.

Und obwohl islamische Handwerker schon im 15.Jhd. religiöse Bauwerke mit sogenannten „quasiperiodischen“ Mustern schmückten, blieben diese in der west-

lichen Welt bis vor etwa 30 Jahren „unentdeckt“. Bevor wir uns mit den speziellen Eigenschaften der aperiodischen Parkettierungen beschäftigen können, soll die notwendige Terminologie eingeführt werden. Wir halten uns hierbei an das Standardwerk von Grünbaum und Shephard [1987].¹

Definition 4.1 *Ein ebene Parkettierung \mathcal{T} ist eine abzählbare Familie aus abgeschlossenen Mengen $\mathcal{T} = \{T_1, T_2, T_3, \dots\}$, welche die Ebene ohne wesentliche Lücken und Überlappungen bedeckt (bis auf die Ränder).*



Abbildung 4.2: Straßenpflaster

Solche Objekte begegnen uns im Alltag immer wieder: bei gepflasterten Straßen, den Fliesen unseres Badezimmers oder natürlich dem Parkettboden. Sie bestehen aus zu Mustern zusammengesetzten „Bausteinen“, die nebeneinandergelegt den Boden bedecken, und im Idealfall keine Zwischenräume zulassen (siehe Abbildung 4.2)

Die Steine aus denen eine Parkettierung gebildet wird, heißen Kacheln, Pflastersteine oder Mosaiksteine. Wir wollen diese „Bausteine“ T_1, T_2, T_3, \dots nach dem englischen Ausdruck die *Tiles* von \mathcal{T} nennen. Tiles sind topologische Scheiben, d.h. durch einfach geschlossene Kurven begrenzt.

Die Vereinigung aller Tiles bildet die Parkettierung, wobei je zwei Tiles paarweise disjunkt sind. Zwei Parkettierungen \mathcal{T}_1 und \mathcal{T}_2 sind *kongruent*, wenn \mathcal{T}_1 mit Translationen und Spiegelungen in \mathcal{T}_2 übergeführt werden kann. Zwei Parkettierungen heißen *äquivalent*, wenn sie nur im Maßstab verschieden sind.

¹In der Literatur werden als Synonyme für Parkettierung auch *Kachelung*, *Pflasterung*, *Mosaik*, *Felderung*, *Teilung*, *Zerlegung* und in englischen Texten *Tiling* verwendet.

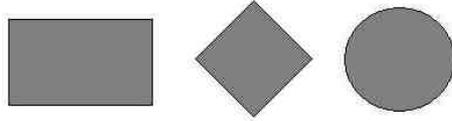


Abbildung 4.3: Topologische Scheiben

Bei der Beschreibung und Untersuchung von Parkettierungen nimmt man immer wieder Bezug auf einen sogenannten *Patch*². Darunter versteht man eine endliche Menge von Tiles einer Parkettierung mit der Eigenschaft, dass ihre Vereinigung einfach zusammenhängend ist.

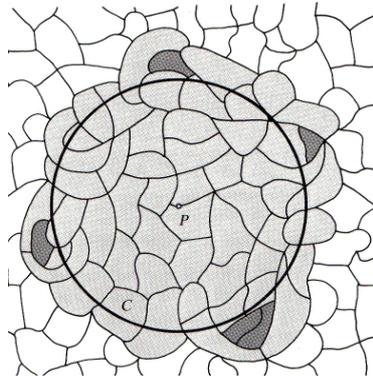


Abbildung 4.4: Ein Patch

Abbildung 4.4 zeigt einen Patch, der durch einen Kreis entstanden ist. Zu diesem gehören nun alle Tiles, die innerhalb des Kreises liegen, oder vom Kreis geschnitten werden, in der Abbildung hellgrau eingefärbt. Die dunkelgrau eingefärbten Tiles werden dem Patch auch noch zugeschrieben, um die Vereinigung *einfach zusammenhängend* zu machen.

Die Tiles einer Parkettierung gehören in unserem Zusammenhang stets einer endlichen Menge von Äquivalenzklassen an. Die Repräsentanten dieser Äquivalenzklassen werden *Prototiles* genannt und die Menge der Prototiles einer Parkettierung \mathcal{T} heißt *Protomenge* T . Wenn es möglich ist, mit einer gegebenen Protomenge T eine bestimmte Parkettierung \mathcal{T} zu konstruieren, *gestattet* T die *Parkettierung* \mathcal{T} . Man spricht von einer *monohedralen* Parkettierung, falls die Proto-

²Fleck wäre wohl der beste deutsche Ausdruck.

menge nur aus einem Prototile besteht, d.h. $|T| = 1$. Zum Beispiel gestattet jedes Dreieck und jedes Viereck eine monohedrale Parkettierung der Ebene. Zusätzlich gibt es noch drei Klassen von Sechsecken und mindestens 14 Klassen von Fünfecken, die dies auch zulassen. Mit der Anzahl der Prototiles wachsen auch die Kombinationsmöglichkeiten und dies wirft die Frage auf, unter welchen Bedingungen eine Protomenge T eine Parkettierung \mathcal{T} gestattet. Das Erweiterungstheorem liefert uns das notwendige Kriterium.

Satz 4.1 (Erweiterungssatz) *Sei $T = \{T_i\}_1^n$ eine endliche Protomenge, und seien die Protokacheln T_i topologische Scheiben. Wenn T beliebig große Kreisscheiben überkachtet, dann gestattet T auch eine Parkettierung der Ebene.*

Für einen Beweis siehe z.B. [GS87].

Wenn beliebig große Kreisscheiben mit endlichen Radien in einer Parkettierung nur endlich viele Tiles beinhalten und schneiden, spricht man von einer *lokal endlichen Parkettierung*. Um den in diesem Zusammenhang trivialen Fall von unbegrenzten Prototiles zu vermeiden, noch folgende Definition:

Definition 4.2 (Normale Parkettierung) *Eine Parkettierung \mathcal{T} heißt normal, wenn die Prototiles topologische Scheiben und „einheitlich begrenzt“ sind (es gibt ein $r > 0$ und ein $R > 0$ sodass jedes Prototile eine Kreisscheibe mit Radius r enthält und in einer Kreisscheibe mit Radius R enthalten ist).*

Eine normale Parkettierung ist notwendigerweise lokal endlich. Wir wollen der Definition noch eine gebräuchliche Eigenschaft hinzufügen: Der Durchschnitt jedes Paares von Prototiles einer normalen Parkettierung sei zusammenhängend.³

Sei \mathcal{T} eine normale Parkettierung von E^2 , und seien $t(r,s)$, $e(r,s)$ und $v(r,s)$ die Anzahl der Tiles, Kanten und Eckpunkte im kreisförmigen Patch $P(r,s)$. Sei

$$e(\mathcal{T}) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e(r,s)}{t(r,s)} \text{ und} \quad (4.1)$$

$$v(\mathcal{T}) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{v(r,s)}{t(r,s)}. \quad (4.2)$$

³vgl. [SS04] S.54

Satz 4.2 (Satz von Euler für Parkettierungen der Ebene) *Existiert einer der beiden Grenzwerte $e(\mathcal{T})$ oder $v(\mathcal{T})$, dann existiert auch der andere, und*

$$v(\mathcal{T}) - e(\mathcal{T}) + 1 = 0. \quad (4.3)$$

Zur Beschreibung von Parkettierungen sind 2-dimensionale Gitter oft hilfreich. Diese *Netze* bestehen aus einer 2-dimensionalen Elementarzelle, die von den beiden Basisvektoren b_1, b_2 aufgespannt wird. Durch die Translationsgruppe $T = \{b \mid b = n_1 * b_1 + n_2 * b_2; n_1, n_2 \in \mathbf{Z}\}$ ist jeder Gitterpunkt bestimmt.

Viele wichtige Eigenschaften von Parkettierungen beruhen auf Symmetrieen. Die Isometrien oder Kongruenztransformationen wurden in Kapitel 2 behandelt.

4.1 Periodische Parkettierungen

Die Untersuchung von periodischen Parkettierungen hat eine lange Tradition und ist in der einschlägigen Literatur ausführlich beschrieben. Die Anwendungen reichen von Ornamentmustern zu Dekorzwecken bis hin zur Kristallographie, die periodische Molekularstruktur idealer Kristalle kann z.B. als Parkettierung des dreidimensionalen euklidischen Raums angesehen werden. Die Methoden zur Untersuchung waren und sind vielfältig und beinhalten sowohl algebraische und geometrische Techniken sowie auch kombinatorische. Die wichtigsten Begriffe und Resultate seien an dieser Stelle beschrieben.⁴

Definition 4.3 Eine Parkettierung \mathcal{T} von E^2 heißt periodische Parkettierung, wenn deren Symmetriegruppe ein 2-dimensionales Gitter beinhaltet.

Äquivalent dazu kann man sagen, dass eine Parkettierung periodisch ist, wenn ihre Symmetriegruppe zumindest zwei nicht parallele Translationen beinhaltet. In einer solchen Parkettierung findet man immer eine Teilmenge von E^2 genannt *Erzeugendengebiet*, dessen Orbit unter der Symmetriegruppe der Parkettierung die ganze Parkettierung erzeugt. Das minimale Erzeugendengebiet wollen wir hier *Fundamentbereich* nennen und dies kann ein Tile oder eine Teilmenge von einem oder mehreren Tiles sein. Es sei die *Fahne* einer Parkettierung das geordnete Tripel (X_0, X_1, X_2) , wobei X_2 ein Tile, X_1 eine Strecke und X_0 ein Punkt ist mit $X_0 \subset X_1 \subset X_2$.

Definition 4.4 Eine Parkettierung \mathcal{T} , deren Symmetriegruppe transitiv auf die Fahnen von \mathcal{T} wirkt, ist eine Reguläre Parkettierung.

Periodische Parkettierungen werden meist durch ihren Symmetriegruppen klassifiziert und sind unter dem Namen *Kristallographische Gruppen* bekannt. Bereits 1910 hatte Ludwig Bieberbach bewiesen, dass die Anzahl der Symmetriegruppen einer periodischen Parkettierung im E^n endlich sind. Im E^2 werden bis auf Isomorphie 17 verschiedene Gruppen unterschieden.

Eine Parkettierung, deren Symmetrie-Gruppe transitiv auf alle Tiles wirkt, nennt man *isohedral*. Dabei weisen alle Tiles die gleiche Umgebung auf. Davon

⁴vgl. [SS04] S.60ff

gibt es (wieder bis auf Isomorphie) 11 Klassen im E^2 , welche durch die sogenannten *Laves-Netze* typisiert sind, die in Abbildung 4.5 zu sehen sind.

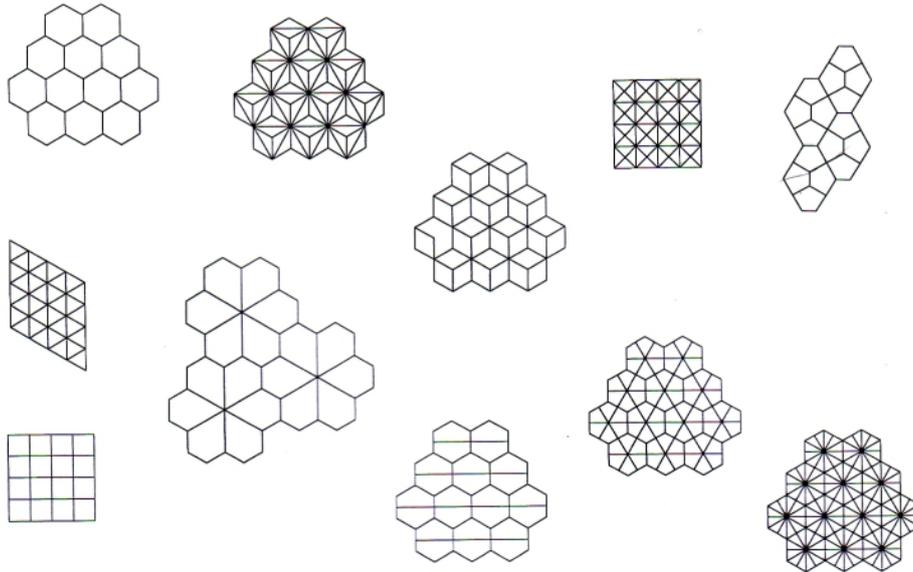


Abbildung 4.5: Die 11 Laves Netze. Die drei Figuren zur Linken bilden die Untergruppe der regulären Parkettierungen des E^2 (aus [SS04] S.63).

4.2 Aperiodische Parkettierungen

Wie wir gesehen haben, gibt es unendlich viele Formen (wie z.B. alle Vierecke), die eine periodische Parkettierung zulassen. Unendlich viele Formen lassen sowohl eine periodische, als auch eine *nichtperiodische* Parkettierung zu. In Abbildung 4.6 sehen wir dies am Beispiel eines gleichschenkeligen Dreiecks (Schenkelwinkel = $\frac{\pi}{5}$).

Eine weitere Art von nichtperiodischen Parkettierungen erhält man von Tiles, die zusammengefügt größere Kopien von sich selbst ergeben. In der Abbildung 4.7 sehen wir, wie sich eine größere Sphinx aus 4 Sphinxen erster Generation zusammenfügt. Auch hier lässt das Prototile eine periodische Parkettierung zu, wenn man zwei Sphinxen zu einem Parallelogramm zusammenfügt.

Dies führt uns zur Frage, ob es Protomenge gibt, die nur nichtperiodisch ka-

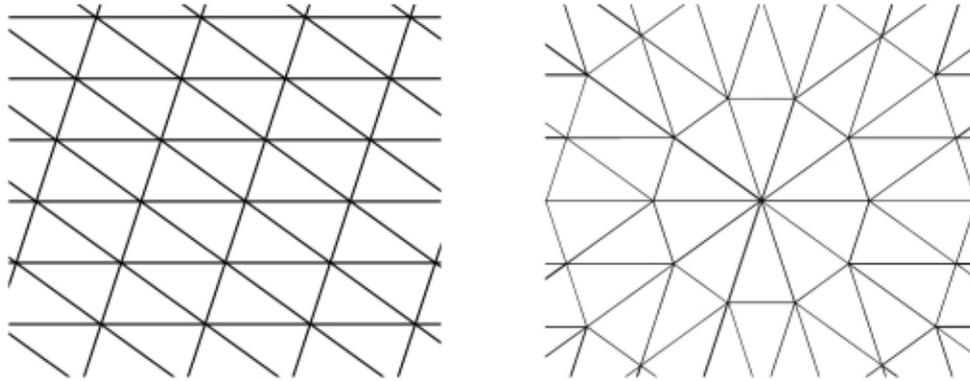


Abbildung 4.6: Eine periodische (rechts) und eine nichtperiodische Parkettierung mit der gleichen Protokachel.

cheln.

Definition 4.5 Eine Protomenge T heißt *aperiodisch*, wenn weder T noch eine Teilmenge \tilde{T} von T eine periodische Parkettierung der Ebene zulassen, und T eine nichtperiodische Parkettierung zulässt.

Lange Zeit schätzte man die Chance, dass eine solche Menge existiert, als eher gering ein. Im Zusammenhang mit seiner Arbeit am Entscheidungsproblem gelang es Berger 1966, eine solche zu konstruieren, wobei er 20426 sogenannter Wang-Dominos verwendete.⁵ Er selbst reduzierte die Anzahl der nötigen Prototiles bald auf 104 und im Laufe der Jahre wurden immer kleinere Protomengen gefunden. Derzeit scheint die kleinste Protomenge aperiodischer Wang-Dominos 16 Stück zu umfassen.⁶ Raphael M. Robinson konnte von den Wang-Dominos eine 6-teilige aperiodische Protomenge ableiten, und auch Robert Ammann fand 1977 eine andere 6-teilige aperiodische Protomenge die als Grundform Quadrate haben. Es war dann das Verdienst von Roger Penrose, Protomengen mit 5-zähligen Symmetrien zu erstellen, wobei er die Anzahl der Prototiles schließlich auf zwei reduzieren konnte.⁷ Hinzugefügt sei noch, dass die Existenz einer monohedralen aperiodischen Parkettierung der euklidische Ebene stark angezweifelt wird.

⁵siehe Abschnitt 4.4.

⁶vgl. [GS87] S.584

⁷Auf die Penrosemuster wurde schon in Kapitel 2 eingegangen.

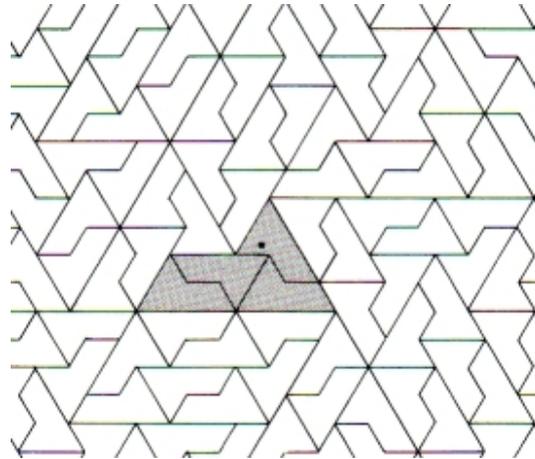


Abbildung 4.7: Die Sphinx kachelt die Ebene sowohl periodisch als auch nicht-periodisch.

4.3 Ähnliche Parkettierungen

Definition 4.6 Seien \mathcal{T}_1 und \mathcal{T}_2 Parkettierungen der Ebene. Ist jede Kachel aus \mathcal{T}_2 eine Vereinigung von Kacheln aus \mathcal{T}_1 , dann ist \mathcal{T}_2 durch Komposition aus \mathcal{T}_1 hervorgegangen. Sind die Tiles aus \mathcal{T}_2 eine Vereinigung von k Tiles aus \mathcal{T}_1 , dann ist \mathcal{T}_2 eine k -Komposition von \mathcal{T}_1 .

Eine Parkettierung kann natürlich auch eine Komposition von sich selbst sein, und wird dann *Ähnlichkeitparkettierung* genannt.

Definition 4.7 Eine Parkettierung \mathcal{T} mit einer einzigen Protokachel wird k -Ähnlichkeitsabbildung genannt, wenn \mathcal{T} eine k -Komposition von sich selbst ist.

Die Sphinx-Parkettierung aus Abbildung 4.7 ist zum Beispiel ein 4-Ähnlichkeitsparkettierung .

Satz 4.3 Wenn die k -Komposition einer monohedralen k -Ähnlichkeitsparkettierung eindeutig ist, dann ist \mathcal{T} nicht-periodisch.

Beweis. Sei \mathcal{T} periodisch, dann gäbe es eine Translation t mit Abstand d . Die Eindeutigkeit der Komposition impliziert, dass t auch Symmetrieelement der k -komponierten Parkettierung sein muss. Wenn wir dieses Argument wiederholt auf k -Kompositionen anwenden, erhalten wir Parkettierungen mit beliebig großen

Tiles. Damit müsste aber t ein Symmetrieelement einer Parkettierung sein, in welcher jedes Tile eine Kreisscheibe mit Durchmesser $D > d$ enthält. Da dies unmöglich ist, haben wir die Aussage durch Widerspruch bewiesen.

4.4 Wang-Tiles

Wang-Tiles sind quadratische Kacheln mit gefärbten Kanten, die Kante an Kante angeordnet werden müssen. Die Farben von angrenzenden Kanten müssen übereinstimmen und es sind nur Translationen der Protokacheln erlaubt. Wang-Tiles haben große Bedeutung für die mathematische Logik, da sie das Verhalten von Turing-Maschinen beschreiben. Die von Berger 1966 entdeckten Wang-Tiles waren die erste aperiodische Protomenge. Die Anzahl der notwendigen Prototiles konnte im Laufe der Zeit auf 16 reduziert werden. Die grundlegende Idee ist dabei, dass man eine Anzahl von aufeinander bezogenen Parkettierungen überlagert. Dazu brauchen wir die Protokacheln von Abbildung 4.8.⁸ Die ersten vier (bezeichnet mit α, β, γ und δ) tragen die "Farben" 1, 2, 3 und 4 und erlauben nur *eine* mögliche Parkettierung, nämlich \mathcal{T}_1 aus Abbildung 4.9. Betrachten wir nun die Struktur der Parkettierungen, die von den restlichen 17 Tiles zusammen mit einem "leeren" Tile gebildet werden können. Rechts eines a-Tiles kann eine beliebige Anzahl von R-Tiles anschließen und diese Reihe wird von einem K-Tile abgeschlossen. Nach dem K-Tile kann eine beliebige Anzahl von L-Tiles anschließen, worauf dann ein b-Tile kommt. Dann eine Reihe von P-Tiles (oder auch gar keine), jedoch sicher wieder ein a-Tile. Die gleichen Überlegungen kann man für die Reihen mit einem c-Tile anstellen, bzw. auch für die Spalten. Die einzigen möglichen Parkettierungen, welche die a-, b-, c- und d-Tiles benutzen sind ähnlich zu den Parkettierungen der *zweiten Art* $\mathcal{T}_2, \mathcal{T}_3$ und \mathcal{T}_4 , die wir in Abbildung 4.10 und 4.11 sehen. Es können sogar *alle* möglichen Parkettierungen von diesen drei abgeleitet werden, in dem die Längen der Zeilen und Spalten variiert wird.⁹ Nehmen wir nun an, dass wir eine Parkettierung der zweiten Art mit der Parkettierung \mathcal{T}_1 überlagern. Damit meinen wir, dass jedes Tile eine Markierung α, β, γ oder δ von \mathcal{T}_1 trägt und möglicherweise auch eine Marke

⁸nach [GS87] S.589

⁹nach [GS87] S.586

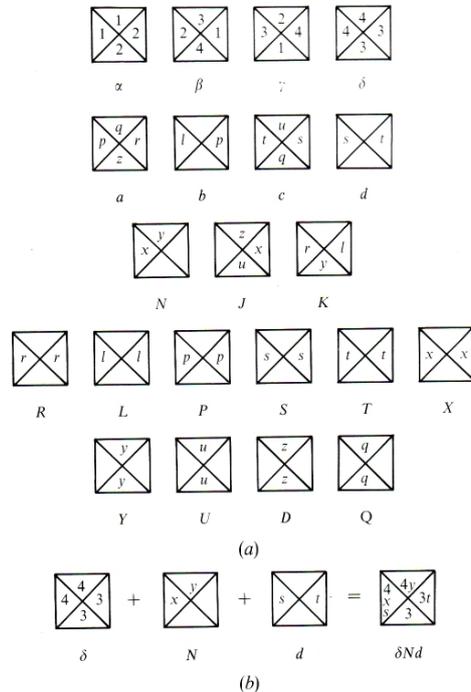


Abbildung 4.8: Wang-Tiles (nach [GS87] S.589).

$a, b, c, d, N, J, K, R, L, P, S, T, X, Y, U, D$ oder Q von der zweiten Parkettierung. Wir führen noch die Bedingung ein, dass die Tiles, welche *nur* mit a, b, c oder d markiert sind, mit α -Tiles aus \mathcal{T}_1 überlagert werden, was die Anzahl der Möglichkeiten für die zweite Parkettierung verringert. Diese muss nun gleich \mathcal{T}_2 zwei sein wie in Abbildung 4.10 oder um eine vertikal oder horizontal Verschoben um eine gerade Anzahl von Kantenlängen.¹⁰ Nun legen wir noch eine dritte Parkettierung der zweiten Art über die gerade konstruierte Parkettierung, wobei nun jedes Tile bis zu 3 Marken trägt. Hier ist die Bedingung, dass die Tiles der dritten Parkettierung, welche mit a, b, c oder d markiert sind, mit einem N-tile von \mathcal{T}_2 zusammenfallen. Wieder gibt es nur vier Möglichkeiten für die dritte Parkettierung, nämlich \mathcal{T}_3 aus Abbildung 4.11 links und die Parkettierungen, die man durch vertikale oder horizontale Verschiebungen um Vielfache von vier Kantenlängen erhält. Eine vierte Parkettierung der zweiten Art wird über die ersten drei Objekte gelagert mit der Bedingung dass a, b, c oder d mit einem N-Tile von \mathcal{T}_3 zusammenfällt

¹⁰nach [GS87] S.587

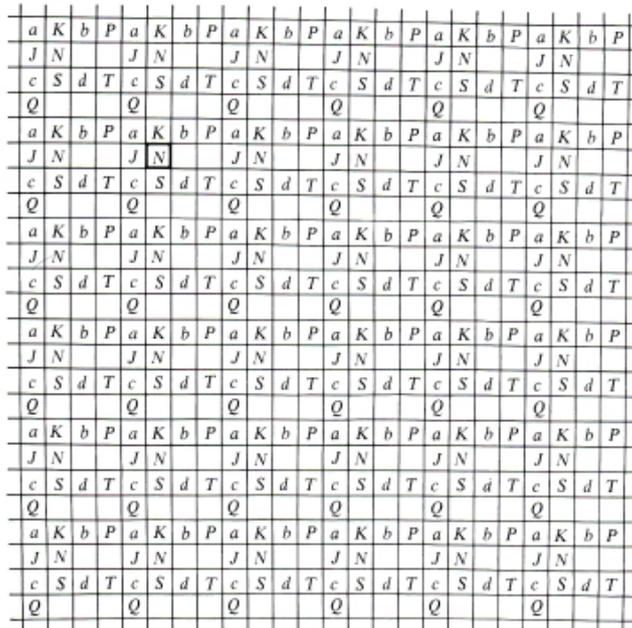


Abbildung 4.10: Die Parkettierung \mathcal{T}_2 .

Überlagerung einer unendlichen Folge von Parkettierungen, und die Symmetrie von \mathcal{T} muss notwendigerweise eine Symmetrie einer jeden Komponente sein. Da wir Gitter mit beliebig großen Quadraten erzeugen, an deren Knoten Tiles, die mit a, b, c, d markiert sind liegen, kann \mathcal{T} keine Translationen enthalten und ist nicht-periodisch. Damit sind die 92 Wang-Tiles aperiodisch.¹²

4.5 Entscheidbarkeit des Parkettierungsproblems

Wir haben schon die Problematik der Entscheidbarkeit, ob eine gegebene Protomenge eine Parkettierung erlaubt angesprochen. In der Literatur¹³ wird dabei von dem *Parkettierungsproblem* gesprochen:

Sei T eine Menge von Prototiles. Gibt es einen Algorithmus, um zu entscheiden, ob T eine Parkettierung erlaubt?

Das Parkettierungsproblem ist *entscheidbar*, wenn es einen Algorithmus mit endlich vielen Schritten gibt, der eine Lösung liefert. Anfang der 1960er Jahre

¹²vgl. [GS87] S. 583 ff.

¹³z.B. bei [GS87]

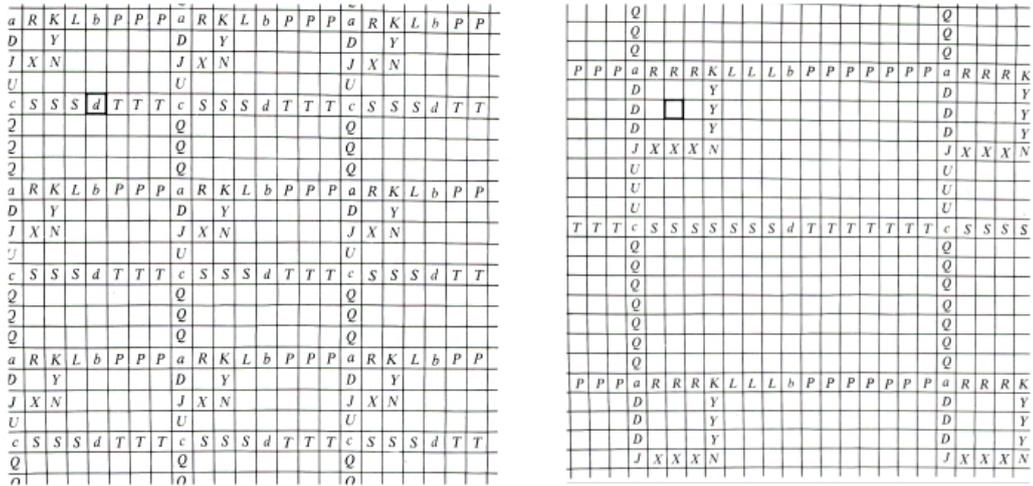


Abbildung 4.11: Die Parkettierung \mathcal{T}_3 und \mathcal{T}_4 nach [GS87] S.586.

beschäftigte sich Hao Wang mit der Möglichkeit, die Ebene mit Quadraten zu kacheln, deren Kanten unterschiedlich gefärbt sind. Dabei suchte er nach einem Verfahren, um für Mengen dieser „Wang-Dominos“ entscheiden zu können, ob sie eine Parkettierung zulassen, oder nicht. Er beobachtete, dass eine Protomenge T eine Parkettierung erlaubt, dann muss eine der drei folgenden Aussagen zutreffen:

1. T erlaubt nur periodische Parkettierungen, wie es zum Beispiel passiert, wenn die Protomenge nur aus einem regelmäßigen Sechseck besteht.
2. T erlaubt sowohl periodische auch als nicht-periodische Parkettierungen.
3. T erlaubt nur nicht-periodische Parkettierungen, ist also eine aperiodische Menge.

Wang zeigte daraufhin, dass das Parkettierungsproblem entscheidbar ist für Mengen die 1. oder 2. erfüllen. Er ging dabei von der Vermutung aus, dass die Möglichkeit 3. nicht eintreffen kann. 1964 gelang es Robert Berger¹⁴ in seiner Dissertation Wangs Vermutung zu widerlegen und bewies, dass es kein allgemeines Entscheidungsverfahren gibt.

Es sei nun T eine Menge von Wang-Tiles. Wir machen eine Folge von „Versuchen“, jeder davon bestehend aus einem $m \times m$ Block von Tiles für $m = 1, 2, 3, \dots$

¹⁴vgl. [Ber66]

$\alpha \begin{Bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{Bmatrix}$	(4)	$\beta Y \begin{Bmatrix} - \\ U \\ Q \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} P \\ T \end{Bmatrix}$	(6)	$\beta \begin{Bmatrix} - \\ U \\ D \\ Q \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} P \\ S \\ T \end{Bmatrix}$	(12)
$\beta K \begin{Bmatrix} - \\ U \\ Q \end{Bmatrix}$	(3)	$\gamma \begin{Bmatrix} - \\ X \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L \\ P \\ S \\ T \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} - \\ Q \end{Bmatrix}$	(16)	$\gamma R \begin{Bmatrix} - \\ Q \end{Bmatrix}$	(2)
$\gamma J \begin{Bmatrix} L \\ P \\ S \\ T \end{Bmatrix}$	(4)	$\delta X \begin{Bmatrix} L \\ P \\ S \\ T \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} - \\ Q \end{Bmatrix}$	(8)	$\delta Y \begin{Bmatrix} - \\ U \\ Q \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} P \\ T \end{Bmatrix}$	(6)
$\delta N \begin{Bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{Bmatrix}$	(4)	$\delta J \begin{Bmatrix} L \\ P \\ S \\ T \end{Bmatrix}$	(4)	$\delta K \begin{Bmatrix} - \\ U \\ Q \end{Bmatrix}$	(3)
$\delta \begin{Bmatrix} R \\ L \\ P \\ S \\ T \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} - \\ U \\ D \\ Q \end{Bmatrix}$	(20)				

Abbildung 4.12: Die Symbole der 92 Wang-Tiles (nach [GS87] S.589).

sowie für alle Möglichkeiten für jedes m . Wir testen nun jede Anordnung wie folgt (vgl. auch Abbildung 4.13)¹⁵

1. Wenn angrenzende Kanten der Tiles nicht in ihren Farben zusammenpassen, dann wird die Anordnung ausgeschlossen, und wir fahren fort.
2. Wenn alle Anordnungen für ein m ausgeschlossen sind wegen 1., dann wissen wir, dass keine Parkettierung der Ebene möglich ist.
3. Für jede Anordnung welche von 1. zugelassen ist überprüfen wir, ob die Farben der linken Seite (bzw. oben) mit den Farben der rechten Seite (bzw. unten) zusammenpassen. Wenn dies der Fall ist, parkettiert der Block periodisch. Wenn nicht, schließen wir den Block aus und fahren fort.

Wäre Wang's Vermutung richtig, würde der Prozess nach einer endlichen Anzahl von Schritten abbrechen, da es für jedes m nur eine endliche Anzahl von Anordnungen gibt. Wir würden dann entweder bei der Situation 1 oder 3 anlangen, und eine periodische Parkettierung würde existieren. Wenn wir den Algorithmus

¹⁵vgl. [GS87] S.603.

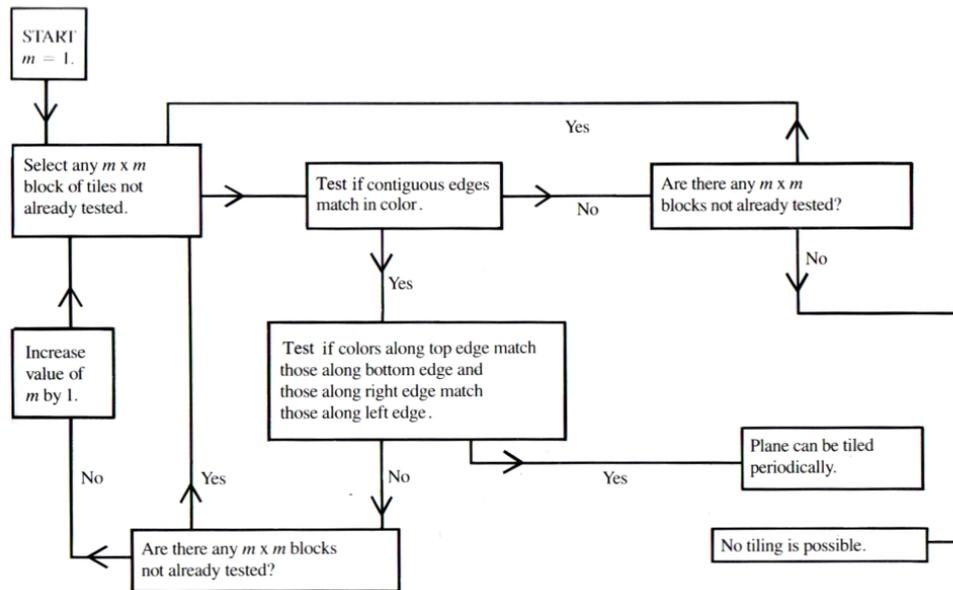


Abbildung 4.13: Das Fließdiagramm des Algorithmus zur Entscheidung, ob eine gegebene Menge von Wangtiles eine Parkettierung der Ebene erlaubt.

mus auf eine aperiodische Wang-Menge anwenden, dann wird der Prozess nicht abbrechen.

Kapitel 5

Fraktale

5.1 Iterierte Funktionensysteme

5.1.1 Kontraktionen

Sei d eine Metrik auf den Raum Ω , d.h. d bildet je zwei Punkte von Ω derartig auf \mathbb{R}_0^+ ab, sodass die Eigenschaften der *Positivität* und *Symmetrie*, sowie die *Dreiecksungleichung* erfüllt sind.¹

Definition 5.1 Sei (Ω, d) ein vollständiger metrischer Raum und $D \subseteq \Omega$.

$f : D \rightarrow \Omega$ heißt Kontraktion, wenn es eine reelle Zahl λ mit $0 \leq \lambda \leq 1$ gibt, welche die Lipschitz-Bedingung

$$d(f(x), f(y)) \leq \lambda \cdot d(x, y) \tag{5.1}$$

erfüllt für alle $x, y \in D$. λ heißt Kontraktionsfaktor.

Ein Punkt ξ heißt *Fixpunkt* von f wenn $f(\xi) = \xi$ ist. ξ ist dabei der Grenzwert einer einer Folge $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ welche durch die Iterationsvorschrift $x_{k+1} = f(x_k)$ gebildet wird mit beliebigen Startwert x_0 .

¹wir halten uns hier vorerst an [Bar95].

Satz 5.1 (Banachscher Fixpunktsatz) Sei $f : \Omega \rightarrow \Omega$ eine Kontraktion auf dem vollständigen metrischen Raum (Ω, d) . Dann hat f genau einen Fixpunkt ξ , den man bei beliebig vorgegebenem Startwert $x_0 \in \Omega$ als Grenzwert der Iterationsfolge $x_{k+1} = f(x_k)$ erhält.

Beweis: Laut Voraussetzung ist Ω vollständig. Wir zeigen zuerst, dass die Folge $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Cauchyfolge ist. Aus $d(x_2, x_1) \leq \lambda d(x_1, x_0)$ folgt $d(x_3, x_2) \leq \lambda^2 d(x_1, x_0)$, daraus folgt $d(x_4, x_3) \leq \lambda^3 d(x_1, x_0)$ usw. Mithilfe von Induktion erhalten wir

$$d(x_{k+1}, x_k) \leq \lambda^k d(x_1, x_0) \quad (5.2)$$

Wir wenden nun die Dreiecksungleichung an:

$$d(x_k, x_{k+1}) \leq \sum_{i=0}^{n-1} d(x_{k+1}, x_{k+i+1}) = d(x_1, x_0) \sum_{i=k}^{k+n-1} \lambda^i \leq d(x_1, x_0) \sum_{i=k}^{\infty} \lambda^i. \quad (5.3)$$

Da $\sum_{i=k}^{k+n-1} \lambda^i$ nach der geometrischen Summenformel gleich $\lambda^k \frac{1}{1-\lambda}$ erhalten wir

$$d(x_k, x_{k+1}) \leq \frac{d(x_1, x_0)}{1-\lambda} \lambda^k \quad (5.4)$$

Geht $k \rightarrow \infty$, konvergiert 5.4 in n gleichmäßig gegen 0, da $\lambda < 1$ ist. Damit ist $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Cauchyfolge und konvergiert gegen einen Punkt ξ . und wir erhalten für die stetige Funktion f :

$$f(\xi) = f(\lim_{k \rightarrow \infty} x_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1} = \xi \quad (5.5)$$

ξ ist also Fixpunkt von f . Für die Eindeutigkeit nehmen wir an, dass $f(\xi) = \xi$ und $f(\bar{\xi}) = \bar{\xi}$. Nun muss laut Voraussetzung

$$d(\xi, \bar{\xi}) = d(f(\xi), f(\bar{\xi})) \leq \lambda d(\xi, \bar{\xi}) \quad (5.6)$$

gelten. Da λ ungleich 0 ist, muss gelten: $\xi = \bar{\xi}$. \square

5.1.2 Kompakte Mengen

Der Abstand zweier Mengen $A, B \subseteq \Omega$ (Ω ist wieder ein metrischer Raum) ist definiert durch

$$d(A, B) = \inf\{d(a, b) : a \in A, b \in B\}. \quad (5.7)$$

Für die Mengen A, B wie oben definieren wir den *Exzess von A über B* durch

$$e(A, B) = \sup\{d(x, B), x \in A\}. \quad (5.8)$$

Der Hausdorff-Abstand zwischen der beiden Mengen A und B ist dann

$$h(A, B) = \max(e(A, B), e(B, A)). \quad (5.9)$$

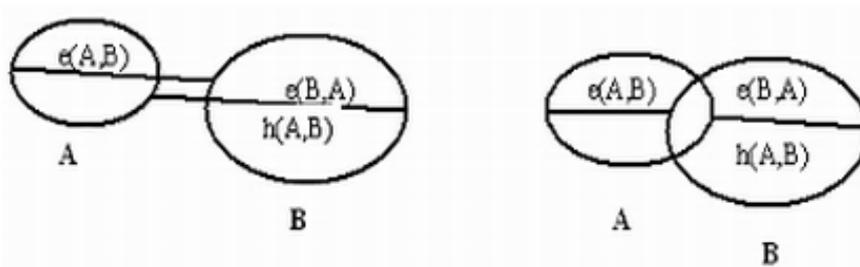


Abbildung 5.1: Exzess und Hausdorff-Abstand.

Sei $\mathcal{K}(\Omega)$ das System aller nicht-leeren kompakten Teilmengen des metrischen Raums (Ω, d) . $\mathcal{K}(\Omega)$ bildet mit dem Hausdorff-Abstand den *Raum der kompakten Mengen* $(\mathcal{K}(\Omega), h)$, welcher wieder ein metrischer Raum ist. Bestimmte Eigenschaften von (Ω, d) übertragen sich auf $(\mathcal{K}(\Omega), h)$:²

- Ist (Ω, d) ein vollständiger metrischer Raum, so ist dies auch $(\mathcal{K}(\Omega), h)$.
- Ist f eine stetige Abbildung von Ω auf Ω , dann bestimmt f eine stetige Abbildung F_f auf $\mathcal{K}(\Omega)$.
- Ist f eine Kontraktion auf Ω mit Kontraktionsfaktor λ , dann ist F_f eine Kontraktion auf $\mathcal{K}(\Omega)$ mit selben Kontraktionsfaktor λ .

²vgl. [Bar95] S. 90 ff.

5.1.3 IFS

Definition 5.2 Sei (Ω, d) ein vollständiger metrischer Raum. Eine endliche Familie von Kontraktionen $\{f_1, \dots, f_N\}$ mit $N \geq 2$ auf Ω mit Kontraktionsfaktoren $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ und

$$d(f_i(x), f_i(y)) \leq \lambda_i \cdot d(x, y) \quad \forall f_i, i = 1, \dots, N \quad \text{und} \quad \forall x, y \in \Omega \quad (5.10)$$

heißt Iteriertes Funktionensystem (IFS) und kann durch $F = (f_1, \dots, f_N)$ dargestellt werden.

Satz 5.2 Sei $F = (f_1, \dots, f_N)$ ein iteriertes Funktionensystem auf dem vollständigen metrischen Raum Ω und $K(\Omega)$ der Raum der kompakten Mengen von Ω . Dann ist $F : K(\Omega) \rightarrow K(\Omega)$ mit

$$F(M) = \bigcup_{i=1}^N f_i(M) \quad \forall M \in K(\Omega)$$

eine Kontraktion und es gilt:

$$h(F(B), F(C)) \leq \lambda \cdot h(B, C) \quad \forall B, C \in K(\Omega)$$

mit $\lambda = \max\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$.

Definition 5.3 Eine Menge $A \in K(\Omega)$ heißt invariant bzgl. des IFS $F = (f_1, \dots, f_N)$, wenn

$$F(A) = \bigcup_{i=1}^N f_i(A) = A$$

gilt.

Die Menge A ist dabei der "Fixpunkt" von F und wird auch als *Attraktor* bezeichnet und ist wiederum von der Anfangsmenge der Iteration unabhängig.

5.2 Beispiele von fraktalen Mengen

5.2.1 Die Cantor-Menge

Diese Menge wird auch als Cantor-Staub oder als Cantor'sches Diskontinuum bezeichnet, in Abbildung 5.2³ sehen wir, wie sie durch Herausschneiden aus einem Intervall $C_0 = [0,1]$ konstruiert werden kann.

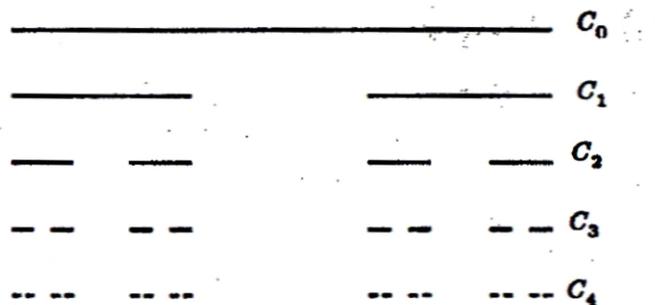


Abbildung 5.2: Die Cantor-Menge, auch Cantor-Staub genannt.

Schneidet man das offene mittlere Intervall $]\frac{1}{3}, \frac{2}{3}[$ heraus, bleibt $C_1 = [0, \frac{1}{3}] \cup [\frac{2}{3}, 1]$ übrig. Analog schneidet man aus den beiden Intervallen von C_1 wieder jeweils das mittlere Drittel heraus und erhält $C_2 = [0, \frac{1}{9}] \cup [\frac{2}{9}, \frac{1}{3}] \cup [\frac{2}{3}, \frac{7}{9}] \cup [\frac{8}{9}, 1]$. Bei Fortsetzung dieses Verfahrens erhält man die Mengenfolge $(C_n)_{n \in \mathbb{N}}$, deren Grenzwert C die Cantormenge ist. Da $C_0 \supseteq C_1 \supseteq C_2 \supseteq \dots$ gilt:

$$C = \bigcap_{k \in \mathbb{N}} C_k. \quad (5.11)$$

Wir wollen die Cantor-Menge nun mittels eines IFS konstruieren.

$$F = \{f_1, f_2\} \quad \text{mit} \quad f_1(x) = \frac{x}{3} \quad \text{und} \quad f_2(x) = \frac{x}{3} + \frac{2}{3} \quad (5.12)$$

³aus [Edg90]

Für die Cantor-Menge gilt dann:⁴

$$C = F(C) = f_1(C) + f_2(C) \quad (5.13)$$

Nun wollen wir ein Beispiel eines Fraktals in der Euklidischen Ebene betrachten:

5.2.2 Das Sierpinski Dreieck

In Abbildung 5.3 sehen wir die Konstruktion durch Herausschneiden:

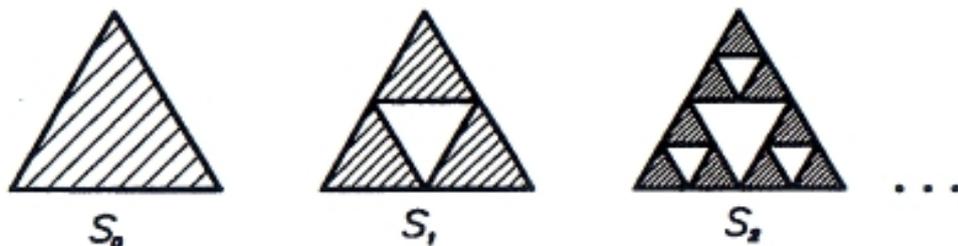


Abbildung 5.3: Konstruktion des Sierpinski Dreiecks

Ein gleichseitiges Dreieck S_0 mit Seitenlänge 1 wird in vier kleinere gleichseitige Dreiecke geteilt, indem die Mittelpunkte der Seiten verbunden werden. Das mittlere Dreieck wird bis auf den Rand entfernt, und es entsteht die Menge S_1 . Nun wird analog jedes der vier Dreiecke mit Seitenlänge $\frac{1}{2}$ wiederum in vier Dreiecke geteilt und wir erhalten S_2 . Setzt man diesen Vorgang fort, erhält man die Folge

$$S_0 \supseteq S_1 \supseteq S_2 \supseteq \dots \quad (5.14)$$

Das Sierpinski Dreieck ist der Grenzwert S dieser Folge:

$$S = \bigcap_{k \in \mathbb{N}} S_k. \quad (5.15)$$

⁴für einen Beweis siehe [Edg90]

Das Iterierte Funktionensystem F besteht aus den drei Ähnlichkeitsabbildung f_1, f_2, f_3 mit Verkleinerungsfaktor $\frac{1}{2}$:

$$f_1 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

$$f_2 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0,5 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

$$f_3 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0,25 \\ \frac{\sqrt{3}}{4} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

Die Startmenge S_0 ist gegeben durch:

$$S_0 = (x, y) \in \mathbb{R} : \begin{cases} y \leq \sqrt{3}x & \text{für } 0 \leq x \leq 0,5 \\ y \leq -\sqrt{3}x + \sqrt{3} & \text{für } 0,5 < x < 1 \end{cases} \quad (5.19)$$

Wir wollen nun auch die *Konstruktion durch Translation* für das Sierpinski Dreieck betrachten. Seien M_0 die einpunktige Startmenge und \vec{a}_1 und \vec{a}_2 Vektoren, die 60° einschließen und die Einheitsvektoren unseres Koordinatensystems darstellen:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und} \quad (5.20)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Wir definieren die Folge $(M_k)_{k \in \mathbb{N}}$ rekursiv mithilfe der Zahlenfolge $(q_k)_{k \in \mathbb{N}}, q_k = \frac{1}{2^{k+1}}$:

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

$$M_1 = M_0 \cup \left\{ M_0 + \frac{1}{2} \cdot \vec{a}_1, M_0 + \frac{1}{2} \cdot \vec{a}_2 \right\}$$

$$M_2 = M_1 \cup \left\{ M_1 + \frac{1}{4} \cdot \vec{a}_1, M_1 + \frac{1}{4} \cdot \vec{a}_2 \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \vdots \\
M_{k+1} &= M_k \cup \{M_k + q_k \cdot \vec{a}_1, M_k + q_k \cdot \vec{a}_2\} \\
& \vdots
\end{aligned}$$

Die Mengenfølge $(M_k)_{k \in \mathbb{N}}$ ist streng monoton wachsend mit $M_0 \subset M_1 \subset M_2 \subset \dots$.
Der Grenzwert der Folge ist die Vereinigung aller M_k :

$$M = \bigcup_{k \in \mathbb{N}} M_k \tag{5.23}$$

und M liegt dicht in S .

5.2.3 Die Koch-Kurve

Wir konstruieren die Kochkurve mithilfe von Polygonen wie in Abbildung 5.4. Die Strecke P_0 der Länge 1 wird in drei gleiche Teile geteilt. Anstatt des mittleren Drittels werden die zwei Seiten des zugehörigen gleichseitigen Dreiecks errichtet und wir erhalten Polygon P_1 . Wendet man dieses Verfahren wiederum auf jede der vier Teilstrecken von P_1 an, entsteht P_2 usw.

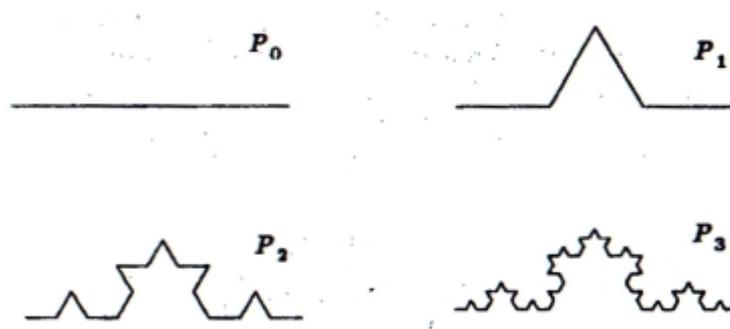


Abbildung 5.4: Die Konstruktion der Koch-Kurve mithilfe von Polygonen aus [Edg90]

Wir leiten davon ein IFS ab. Sei die Startmenge K_0 das Intervall $[0, 1]$. Wir erhalten die vier neuen Streckenabschnitte durch folgende System von Transfor-

mationen:

$$f_1(X) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$f_2(X) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi}{3}) & -\sin(\frac{\pi}{3}) \\ \sin(\frac{\pi}{3}) & \cos(\frac{\pi}{3}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$f_3(X) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \cos(\frac{-\pi}{3}) & -\sin(\frac{-\pi}{3}) \\ \sin(\frac{-\pi}{3}) & \cos(\frac{-\pi}{3}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \end{pmatrix}$$

$$f_4(X) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die Kochkurve ist dann die invariante Menge K bezüglich $F = (f_1, f_2, f_3, f_4)$.

5.3 Maß und Dimension von Fraktalen

Zur mathematischen Beschreibung von Fraktalen müssen wir Maße in irgendeiner Form mit einbeziehen. Einfach gesagt ist ein Maß eine Art, wie man Mengen eine zahlenmäßige Größe zuordnen kann.⁵

Definition 5.4 Ein Maß auf \mathbb{R}^n ist eine Zuordnung

$$\mu : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^+ \text{ sodass gilt:}$$

$$\mu(\emptyset) = 0$$

$$\mu(A) \leq \mu(B), \text{ falls } A \subset B.$$

ist A_1, A_2, \dots eine abzählbare Folge von Mengen, dann gilt:

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i). \quad (5.24)$$

Gleichheit ist in 5.24 gegeben, wenn die Mengen A_i disjunkte Borel-Mengen sind.⁶ Eigenschaften von Maßen auf Borelmengen:

$$\text{Ist } A \subset B, \text{ dann gilt: } \mu(A \setminus B) = \mu(A) - \mu(B). \quad (5.25)$$

Für wachsende Mengen von Borelmengen gilt:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \mu(A_i) = \mu\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) \quad (5.26)$$

Ein bekanntes Maß ist das *Lebesgue-Maß*, welches den Volumenbegriff ausbaut auf eine große Menge von Teilmengen von \mathbb{R}^n , unter anderem Borelmengen.

⁵Wir halten uns hier an [Fal93], S. 11 ff.

⁶Die von einem System von offenen Teilmengen erzeugte σ -Algebra des \mathbb{R}^n heißt Borelalgebra, ihre Elemente heißen Borelmengen.

Sei $A = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n : a_1 \leq x_1 \leq b_1, \dots, a_n \leq x_n \leq b_n\}$ ein "koordinatenparalleles Quader" in \mathbb{R}^n . Das n -dimensionale Volumen von A ist dann gegeben durch:

$$\text{Vol}^n(A) = (b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \cdots (b_n - a_n). \quad (5.27)$$

Vol^1 ist dabei die vertraute Länge einer Strecke, Vol^2 ist die Fläche, und Vol^3 das gewöhnliche 3-dimensionale Volumen. Wir definieren das n -dimensionale Lebesgue-Maß \mathcal{L}^n auf \mathbb{R}^n durch

$$\mathcal{L}^n(A) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \text{Vol}^n(A_i) : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right\} \quad (5.28)$$

Um die Intuition zu unterstützen schreiben wir für $\mathcal{L}^2(A)$ die Fläche von A und für $\mathcal{L}^3(A)$ das Volumen von A .⁷

5.3.1 Das Hausdorff - Maß

Der Durchmesser einer nicht-leeren Teilmenge U des n -dimensionalen Euklidischen Raumes \mathbb{R}^n ist definiert durch $|U| = \sup\{|x - y| : x, y \in U\}$. Ist $\{U_i\}$ eine abzählbare Auswahl von Mengen, deren Durchmesser maximal δ ist, und die eine Menge F überdecken, d.h.

$$F \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} U_i \quad \text{mit } 0 < |U_i| \leq \delta \quad (5.29)$$

für jedes i , dann heißt U_i eine δ -Überdeckung von F . Mit $F \subset \mathbb{R}^n$ und $s > 0$ ist für jedes $\delta > 0$

$$\mathcal{H}_\delta^s(F) = \inf \sum_{i=1}^{\infty} |U_i|^s : U_i \text{ ist } \delta\text{-Überdeckung von } F. \quad (5.30)$$

⁷vgl. [Fal93] S. 14.

Nimmt δ ab, reduziert sich die Klasse zulässiger Überdeckungen von F , das Infimum $H_\delta^s(F)$ nimmt zu und nähert sich für $\delta \rightarrow 0$ dem Grenzwert

$$\mathcal{H}^s(F) = \lim_{\delta \rightarrow 0} H_\delta^s(F) \quad (5.31)$$

Dieser Grenzwert existiert für jedes $F \subset \mathbb{R}^n$, kann auch 0 und ∞ sein, und wird *s-dimensionales Hausdorff-Maß von F* genannt.



Abbildung 5.5: Eine Menge F mit zwei möglichen δ -Überdeckungen von F aus [Fal93] S. 29.

\mathcal{H}^s ist ein Maß, es gilt insbesondere:

$$\mathcal{H}^s(\emptyset) = 0, \tag{5.32}$$

und wenn E Teilmenge von F ist gilt

$$\mathcal{H}^s(E) \leq \mathcal{H}^s(F). \tag{5.33}$$

Ist $\{F_i\}$ eine abzählbare Menge disjunkter Borel-Mengen, so gilt:

$$\mathcal{H}^s\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} F_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathcal{H}^s(F_i). \tag{5.34}$$

Wie die Lebesgue-Maße verallgemeinern die Hausdorff-Maße die bekannte Vorstellung von Länge, Fläche und Volumen, wobei das n -dimensionale Hausdorff-Maß ein konstantes Vielfaches des n -dimensionalen Lebesgue-Maßes ist. Ist F eine Borel-Teilmenge von \mathbb{R}^n , dann gilt

$$\mathcal{H}^n = c_n \text{Vol}^n(F). \tag{5.35}$$

Die Konstante c_n ist dabei das Volumen des n -dimensionalen Balls mit Durchmesser 1:

$$c_n = \frac{\pi^{\frac{1}{2}n}}{2^n (\frac{1}{2}n)!}. \quad (5.36)$$

So wie bei der Vergrößerung um einen Faktor λ die Länge einer Kurve um den Faktor λ zunimmt und die Flächeninhalt einer Fläche um den Faktor λ^2 zunimmt, skaliert das s -dimensionale Hausdorff-Maß mit einem Faktor λ^s . Wir können daher die *Skalierungseigenschaft* von \mathcal{H}^s formulieren:

Wenn $F \subset \mathbb{R}^n$ und $\lambda > 0$, dann gilt:

$$\mathcal{H}^s(\lambda F) = \lambda^s \mathcal{H}^s(F), \quad (5.37)$$

wobei $\lambda F = \{\lambda x : x \in F\}$ ist, die Menge F wird also mit dem Faktor λ skaliert.⁸

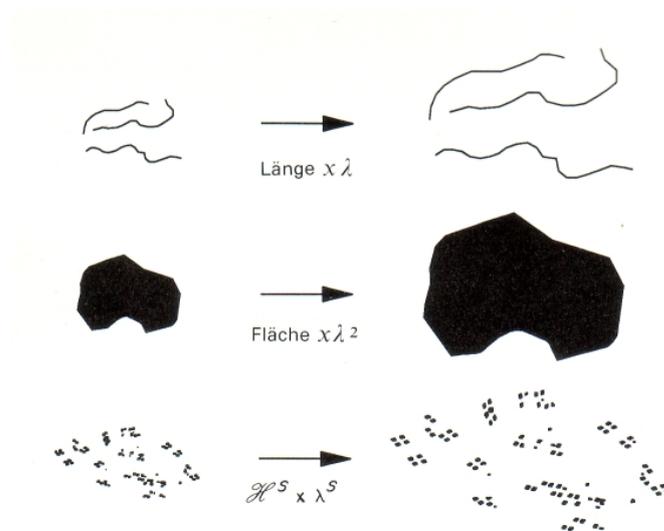


Abbildung 5.6: Skaliert man Mengen mit dem Faktor λ , vergrößert sich die Länge um den Faktor λ , die Fläche um den Faktor λ^2 und das s -dimensionale Hausdorff Maß um den Faktor λ^s (aus [Fal93] S.30).

⁸vgl. [Fal93] S. 30.

5.3.2 Die Hausdorff-Dimension

Aus 5.30 ist ersichtlich, dass \mathcal{H}_δ^s für jede gegebene Menge F und $\delta < 1$ nicht wachsend mit s ist. Dies gilt ebenso für $\mathcal{H}^s(F)$ wegen 5.31. Ist $t > s$ und $\{U_i\}$ eine δ -Überdeckung von F , dann erhalten wir

$$\sum_i |U_i|^t \leq \delta^{t-s} \sum_i |U_i|^s. \quad (5.38)$$

Nehmen wir die Infima, ergibt sich

$$\mathcal{H}_\delta^t(F) \leq \delta^{t-s} \mathcal{H}_\delta^s(F). \quad (5.39)$$

Aus $\mathcal{H}^s(F) < \infty$ folgt mit $\delta \rightarrow 0$:

$$\mathcal{H}^t(F) = 0 \quad \text{für } t > s \quad (5.40)$$

Der Graph von $\mathcal{H}^s(F)$ gegen s zeigt also, dass es einen kritischen Wert s gibt, bei dem $\mathcal{H}^s(F)$ von ∞ nach 0 springt (siehe Abbildung 5.7). Genau dieser kritische Wert s heisst *Hausdorff-Dimension* von F , für welche wir $\dim_H F$ schreiben.

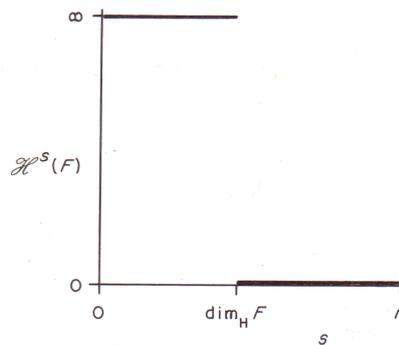


Abbildung 5.7: Der Graph von $\mathcal{H}^s(F)$ gegen s mit dem kritischen Wert von s , bei dem wir die Sprungstelle finden.

Wir definieren damit formal

$$\dim_H F = \inf\{s : \mathcal{H}^s(F) = 0\} = \sup\{s : \mathcal{H}^s = \infty\}, \quad (5.41)$$

wobei

$$\mathcal{H}^s = \begin{cases} \infty, & \text{falls } s < \dim_H F \\ 0, & \text{falls } s > \dim_H F \end{cases} \quad (5.42)$$

ist.⁹

Für ein einfaches Beispiel sei F eine Kreisscheibe im \mathbb{R}^n mit Radius 1. Aus den bekannten Eigenschaften wissen wir:

$$\mathcal{H}^1(F) = \text{Länge}(F) = \infty$$

$$0 < \mathcal{H}^2(F) = \frac{1}{4}\pi \cdot \text{Fläche}(F) < \infty$$

$$\mathcal{H}^3(F) = \frac{1}{6}\pi \cdot \text{Volumen}(F) = 0$$

Damit ist die

$$\dim_H F = 2 \text{ mit } \mathcal{H}^s(F) = \infty \text{ für } s < 2 \text{ und } \mathcal{H}^s(F) = 0 \text{ für } s > 2.$$

⁹vgl. [Fal93] S. 32.

Kapitel 6

Ein Kubische Selbstähnliche Struktur

Ausgangspunkt unserer Überlegungen sind die TEM-Beugungsbilder mit ikosaedraler Struktur, wie zum Beispiel in Abbildung 6.1 zu sehen. Der Ikosaeder

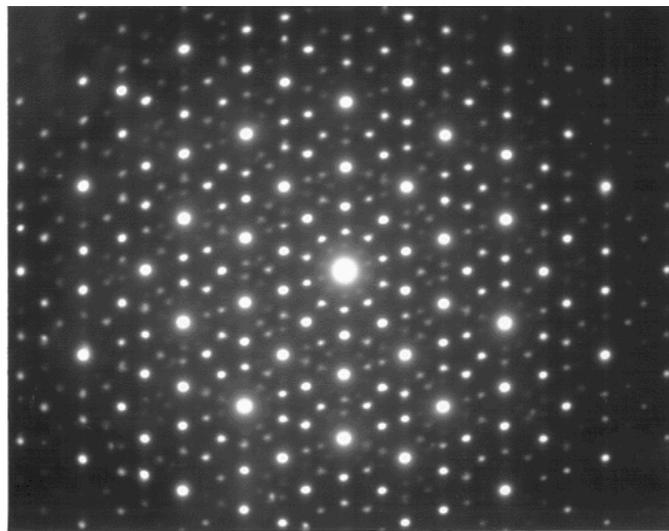


Abbildung 6.1: Die typische 5-zählige Symmetrie im Beugungsbild eines Quasi-kristall.

ist einer der 5 platonischen Körper (siehe Abbildung 6.2), wie sie schon seit der Antike bekannt sind.

Die Beziehungen der platonischen Körper sind ausführlich in der Literatur



Abbildung 6.2: Die 5 Platonischen Körper: Würfel, Tetraeder, Oktaeder, Dodekaeder und Ikosaeder.

beschrieben.¹ Zum Beispiel kann man den Würfel in den Oktaeder einschreiben, indem man die Eckpunkte in die Flächenmittelpunkte setzt und vice versa. Der Ikosaeder ist mit dem Dodekaeder auf gleiche Weise assoziiert, und die Kanten des Tetraeders kann man z.B. als Flächendiagonalen des Würfels sehen.

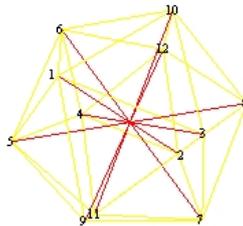


Abbildung 6.3: Der Ikosaeder mit seinen Hauptdiagonalen

Der Ikosaeder hat 12 Eckpunkte, 20 gleichseitige Dreiecke als Flächen und 30 Kanten. Die 6 Diagonalen sind in der Abbildung 6.3 rot gezeichnet.

¹siehe z.B. [Cro97]

6.1 Der etwas andere Zusammenhang von Würfel und Ikosaeder

Wir nehmen eine der sechs Hauptdiagonalen eines Ikosaeders als Projektionsachse und erhalten Abbildung 6.4 der Kanten und Ecken unter einer orthogonalen Parallelprojektion. Dabei entsteht ein 5- bzw. 10-zähliges Rotationszentrum, typisch für Beugungsbilder von Quasikristallen.

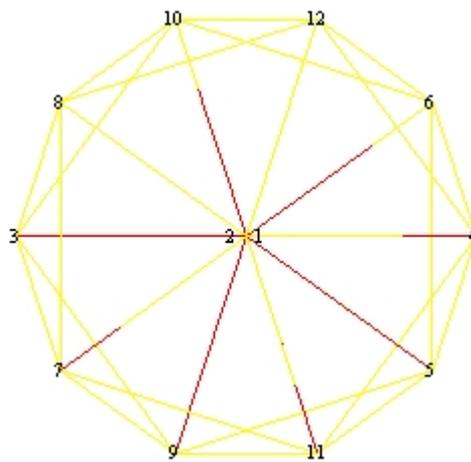


Abbildung 6.4: Ansicht des Ikosaeders mit einer projizierenden Hauptdiagonale.

Nun betrachten wir die Inneinanderschachtelung von zwei Würfeln:

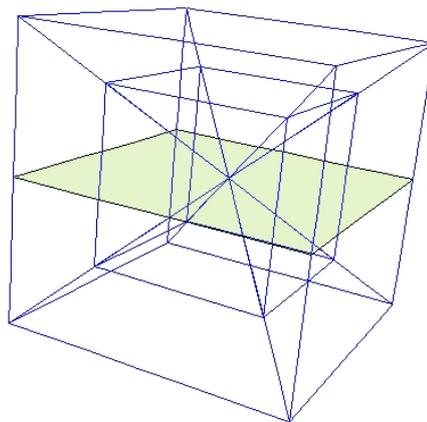


Abbildung 6.5: Inneinanderschachtelung von zwei Würfeln.

Die Seitenlängen a_1 und a_2 der beiden konzentrische Hexaeder stehen im Verhältnis des Goldenen Schnitts.

$$a_2 = \frac{a_1}{\phi} \quad \text{mit} \quad \phi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.618 \quad (6.1)$$

Wir sehen noch eine Symmetrieebene und die Raumdiagonalen.

In der nächsten Graphik sehen wir die gleiche Figur, jedoch in orthogonaler Parallelprojektion (die Symmetrieebene ist dabei projizierend) und um den Winkel α gedreht mit

$$\alpha = \arctan(\phi) \approx 58.28^\circ. \quad (6.2)$$

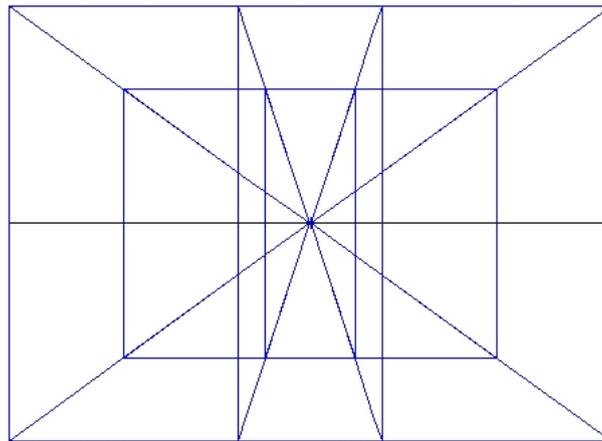


Abbildung 6.6: Die Ineinanderschachtelung von zwei Würfeln gedreht um α .

In diesem 2-dimensionalen Bild sind die von den Diagonalen bzw. der projizierenden Symmetrieachse eingeschlossenen Winkel alle gleich und betragen $\frac{\pi}{5}$. Dies sei nun durch elementargeometrische Überlegungen gezeigt.

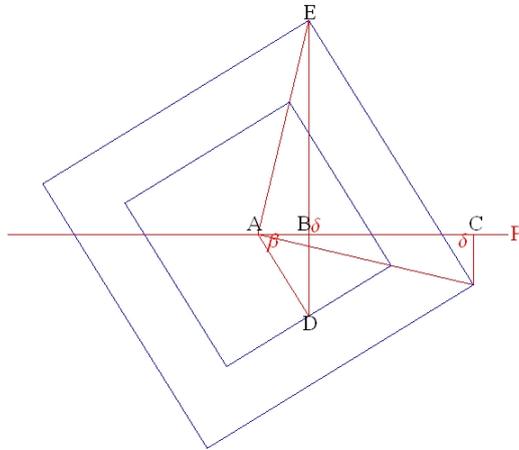


Abbildung 6.7: Grundriss der Würfel.

In der Abbildung 6.7 sehen wir die Inneinerschachtelung der Würfel im Grundriss um den Winkel β zur Aufrissebene P gedreht. Alle rot gezeichneten Strecken liegen in einer Ebene parallel zur Grundrissebene, δ ist der rechte Winkel. Sei die Strecke $\overline{AD} = 1$. Da die Abmessungen der Hexaeder im Verhältnis des Goldenen Schnitts stehen, ist die Strecke $\overline{AE} = \sqrt{2} \cdot \phi$, mit $\phi \approx 1.61803$. β ist der Arcustangens von ϕ in Grad:

$$\beta = \arctan(\phi) \approx 58.2825^\circ. \quad (6.3)$$

Das heisst, dass das Verhältnis \overline{AB} zu \overline{BD} dem ϕ -Quotienten entspricht. Dann ist

$$\overline{AB} = \cos(\arctan(\phi)) \quad (6.4)$$

und

$$\overline{AC} = \cos\left(\beta - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \sqrt{2} \cdot \phi = \cos\left(\arctan(\phi) - \frac{\pi}{4}\right) \cdot \sqrt{2} \cdot \phi. \quad (6.5)$$

Die numerischen Werte sind

$$\overline{AB} = 0.525731 \text{ und } \overline{AC} = 2.22703. \quad (6.6)$$

Nun betrachten wir den Aufriss: Wieder sind die roten Strecken in Hauptlage.

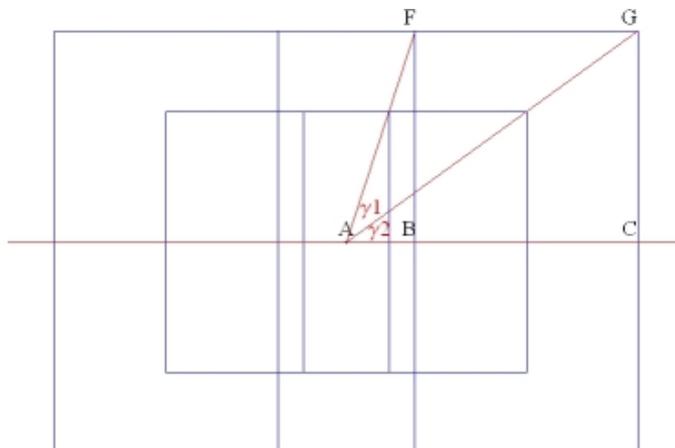


Abbildung 6.8: Aufriss der Würfel.

Die Strecken \overline{BF} und \overline{CG} haben die Länge $\phi = 1.681$. Damit können wir die beiden Winkel berechnen:

$$\gamma_2 = \angle GAC = \arctan(\overline{CG}/\overline{AC}) = \arctan(\phi/\overline{AC}) \quad (6.7)$$

und

$$\gamma_1 = \angle FAB - \gamma_2 = \arctan(\overline{BF}/\overline{AB}) - \gamma_2. \quad (6.8)$$

Wir erhalten

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{\pi}{10}. \quad (6.9)$$

Aus Symmetriegründen sind damit alle Winkel, die die Raumdiagonalen mit einander oder mit der Symmetrieebene einschließen in dieser Projektion Vielfache von $\frac{\pi}{10}$. \square

Wir legen nun Abbildung 6.4 und Abbildung 6.6 übereinander und erhalten folgendes Bild:

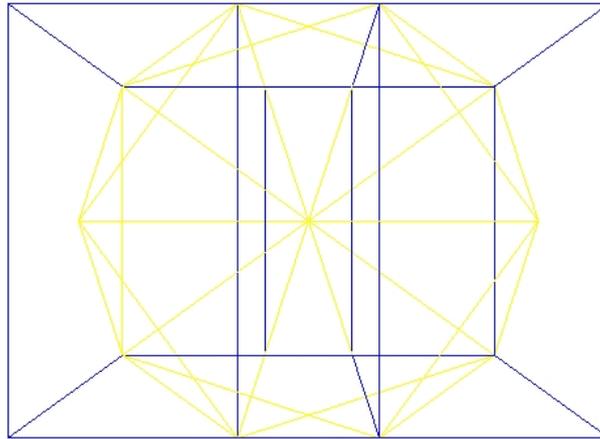


Abbildung 6.9: Überlagerung der Bilder des Ikosaeders und der gedrehten Würfel.

Wir sehen: Anstatt des Ikosaeders können wir als Grundform zur Beschreibung der Beugungsmuster mit 10-zähligen Symmetrien, die im Zusammenhang mit dem Goldenen Schnitt geschaffenen Projektionen der Inneinandergeschachtelten Würfel verwenden. Dass dieser Zusammenhang keineswegs trivial ist, zeigt z.B. die Abbildung 6.10

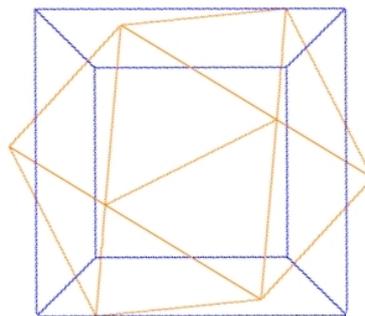


Abbildung 6.10: Die Lage des Ikosaeders und der Würfel zueinander im "Grundriss".

6.2 Kubische Geometrie der 5-zähligen Beugungsbilder

Wir wollen in diesem Abschnitt die *Lage* der Punkte des Beugungsbildes mithilfe der Kuben beschreiben. Auf die Intensitäten nehmen wir hier *keine* Rücksicht.

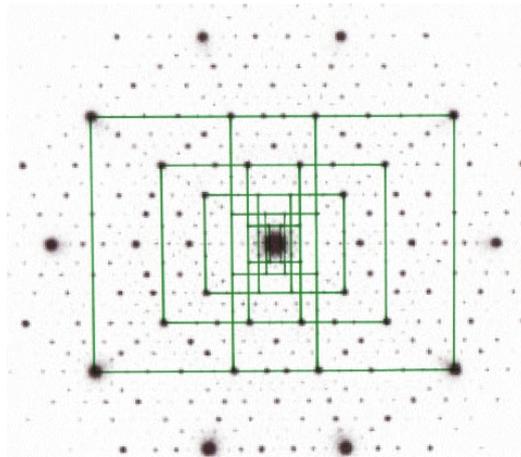


Abbildung 6.11: Zentrierte Ineinanderschachtelung.

Wie in Abbildung 6.11 erkennbar, können wir um das Zentrum des Beugungsbildes eine Ineinanderschachtelung von Würfeln erzeugen. Diese ist theoretisch unendlich fortsetzbar, und damit ist die Folge der Kantenlängen a_i definiert durch

$$\{a_i\}_{i \in \mathbb{Z}} = \{\phi^i\}_{-\infty}^{\infty} \quad (6.10)$$

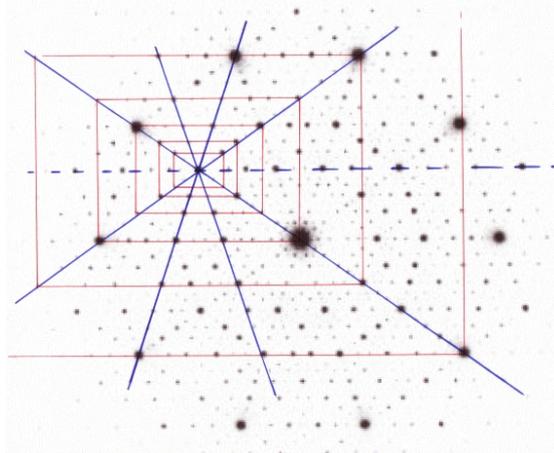


Abbildung 6.12: Nicht zentrierte Ineinanderschachtelung.

In Abbildung 6.12 sehen wir, dass diese Ineinanderschachtelung auch für weitere Punkte gilt, und wir stellen die folgende These auf:

These 1: *Jeder Punkt des Beugungsbildes ist Zentrum einer unendlichen Ineinanderschachtelung von Würfeln mit Seitenlängen wie in 6.10.*

6.2.1 Weitere Ansichten

Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten, Eckpunkte von Würfeln im Beugungsbild zu finden, Abbildung 6.13 ist ein Beispiel dafür.

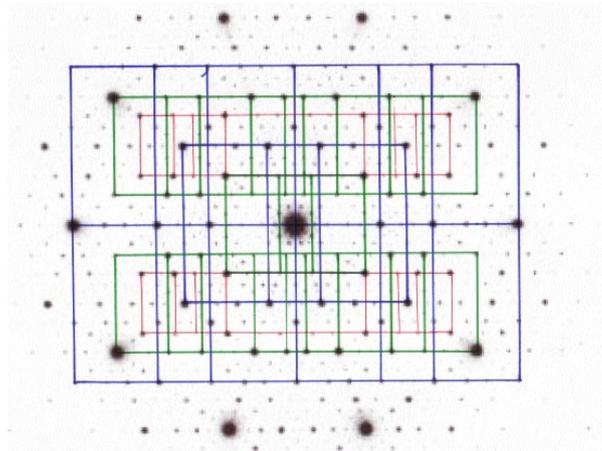


Abbildung 6.13: Beispiel für eine Würfelanordnung.

Besonders hervorzuheben ist die Möglichkeit, periodische Gitter zu finden. In Abbildung 6.14 sehen wir einen Teil eines periodischen Gitters (blau) mit Kuben der Seitenlänge a . Bei Verschiebung um den Vektor $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ ergibt dies das rote Gitter.

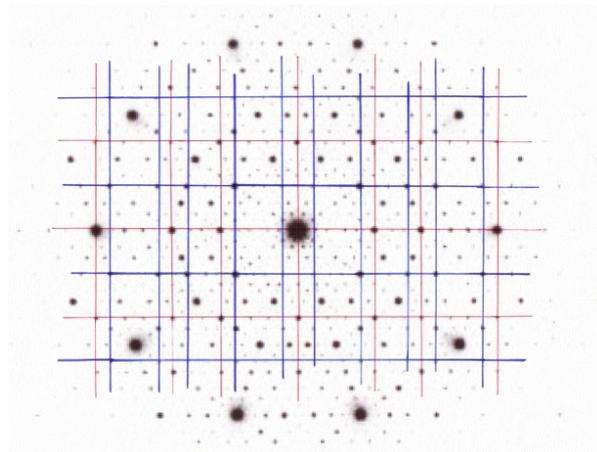


Abbildung 6.14: Einheitsgitter

These 2: Wir können für jede Kantenlänge a mit $a = \phi^k$, $k \in \mathbb{Z}$ ein periodisches Gitter finden.

Damit können wir versuchen, ein 3D-Modell aus periodischen Würfelgittern und Ineinanderschachtelungen von Würfeln zu entwerfen.

6.2.2 Ein 3D - Modell

In Abbildung 6.15 sehen wir ein auf *Mathematica* programmiertes 3D-Modell, welches auf obigen Überlegungen beruht. Die Anzahl der Iterationsschritte für die Ineinanderschachtelung ist 4.

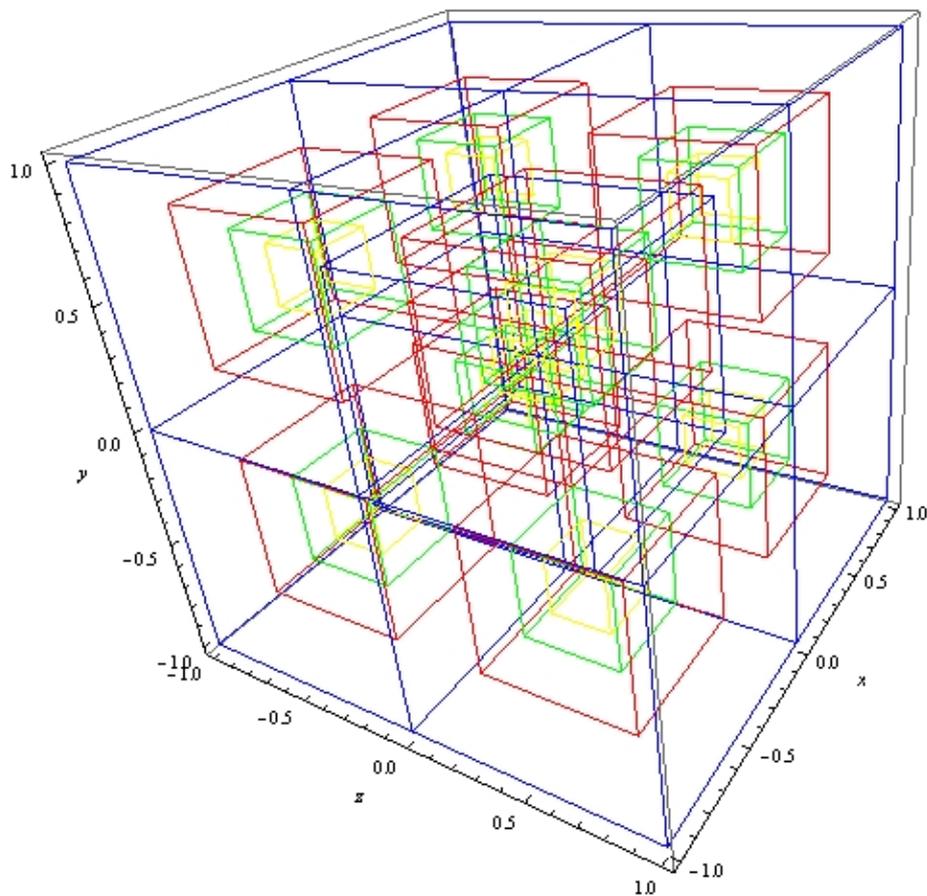


Abbildung 6.15: 3D-Modell

Mit projizierender z-Achse erhalten wir die Abbildung 6.16.

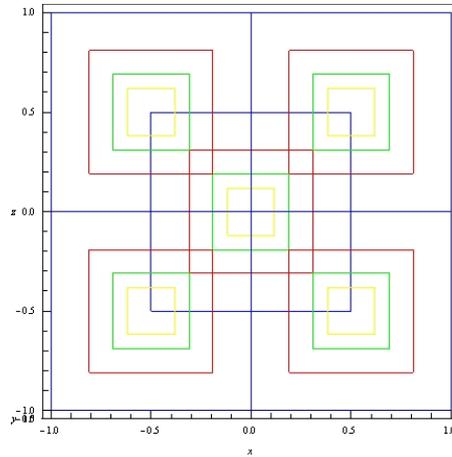


Abbildung 6.16: Das 3D-Modell mit projizierender z-Achse

Dreht man nun um die z-Achse um den Winkel $\alpha = \arctan(\phi) \approx 58.28^\circ$ erhalten wir Abbildung 6.17. Die grünen Punkte sind erst nachträglich eingezeichnet und sollen Aufschluss über die Lage im Beugungsbild geben.

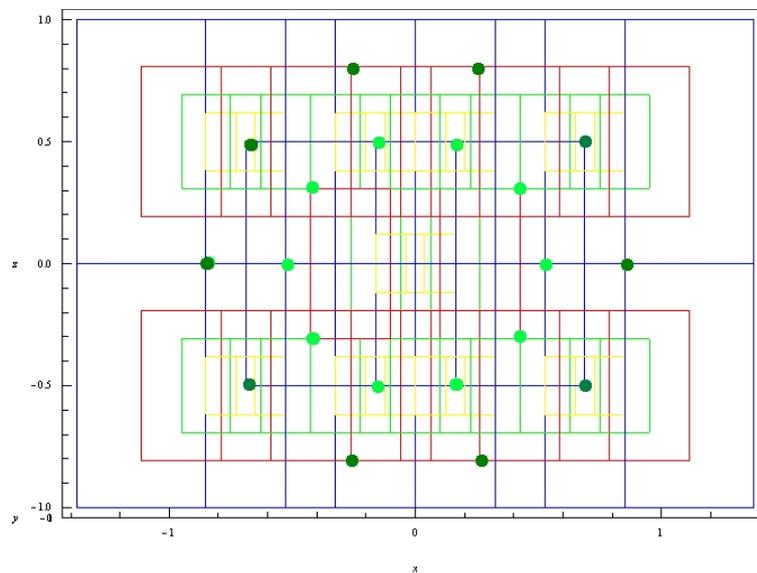


Abbildung 6.17: Das gedrehte 3D-Modell.

Abbildungsverzeichnis

1.1	A: Verschiedene Elementarzellen in einem Translationsgitter B: Zentriertes Translationsgitter bei Wahl von Zelle 3 nach [Mas07] S.19.	7
1.2	Die 14 Bravais-Gitter nach [Mas07] S.22.	8
1.3	Symbole der wichtigsten Symmetrieelemente nach [Hah01]	9
1.4	Die Phasen des wissenschaftlichen Fortschritts nach Kuhn	11
1.5	Natürlich gewachsener Quasikristall nach [BSYL09].	15
1.6	TEM-Beugungsbilder des natürlich gewachsenen Quasikristalls nach [BSYL09].	16
1.7	Die Fouriertransformierte des Beugungsbildes. Die roten Pfeile veranschaulichen ein lokales 5-zähliges Symmetriezentrum. Nach [BSYL09].	16
1.8	Beispiel für ein Penrose-Muster: Die "Kites and Darts".	17
2.1	(a) Jeder Punkt von Ω ist Symmetriezentrum. (b) Jeder Mittel- punkt von zwei Punkten ist Symmetriezentrum	22
2.2	Die Konstruktion der Voronoï-Zelle.	23
2.3	Die Konstruktion von 6 aperiodischen Kacheln nach Penrose. . . .	30
2.4	Die Aperiodische Protomenge nach Penrose.	31
2.5	Die 2-elementige Protomenge der "Kites and Darts".	31
2.6	Der Inflationsprozess für die Kites und Darts	32
2.7	Eine Penrose-Parkettierung mit Rhomben.	33
2.8	Inflationsregel zur Konstruktion des Pinwheel-Tilings nach [Rad99b]	38
2.9	Ausschnitt aus einem Pinwheel-Tiling nach [Rad99b]	38
2.10	Teil des dreidimensionalen Quaquaversal Tilings nach [Rad99b] .	39

3.1	Die Abstandsverhältnisse von Beugungsobjekt und Wellen aus [Mas07] S.13.	42
3.2	Bei Verkleinerung der Blendenöffnung (links) vergrößert sich der Radius des Beugungsbildes.	44
3.3	Zwei Punktblenden mit Abstand \vec{d} beugen das Licht in Richtung \vec{s}	45
3.4	Die Funktionen $\rho_T(x)$ für verschieden T	51
3.5	Der sogenannte "finite size effect": ein kreisförmiger und ein dreieckiger Ausschnitt des selben Punktgitters und deren zugehörigen Beugungsbilder.	55
4.1	Bogengang eines Schreins in Isfahan, Iran, erbaut 1453.	57
4.2	Straßenpflaster	58
4.3	Topologische Scheiben	59
4.4	Ein Patch	59
4.5	Die 11 Laves Netze. Die drei Figuren zur Linken bilden die Untergruppe der regulären Parkettierungen des E^2 (aus [SS04] S.63).	63
4.6	Eine periodische (rechts) und eine nichtperiodische Parkettierung mit der gleichen Protokachel.	64
4.7	Die Sphinx kachelt die Ebene sowohl periodisch als auch nicht-periodisch.	65
4.8	Wang-Tiles (nach [GS87] S.589).	67
4.9	Die Parkettierung \mathcal{T}_1 durch die Wang-Tiles α, β, γ und δ (nach [GS87] S.585).	68
4.10	Die Parkettierung \mathcal{T}_2	69
4.11	Die Parkettierung \mathcal{T}_3 und \mathcal{T}_4 nach [GS87] S.586.	70
4.12	Die Symbole der 92 Wang-Tiles (nach [GS87] S.589).	71
4.13	Das Fließdiagramm des Algorithmus zur Entscheidung, ob eine gegebene Menge von Wangtiles eine Parkettierung der Ebene erlaubt.	72
5.1	Exzess und Hausdorff-Abstand.	75
5.2	Die Cantor-Menge, auch Cantor-Staub genannt.	77
5.3	Konstruktion des Sierpinski Dreiecks	78

5.4	Die Konstruktion der Koch-Kurve mithilfe von Polygonen aus [Edg90]	80
5.5	Eine Menge F mit zwei möglichen δ -Überdeckungen von F aus [Fal93] S. 29.	85
5.6	Skaliert man Mengen mit dem Faktor λ , vergrößert sich die Länge um den Faktor λ , die Fläche um den Faktor λ^2 und das s -dimensionale Hausdorff Maß um den Faktor λ^s (aus [Fal93] S.30.	86
5.7	Der Graph von $\mathcal{H}^s(F)$ gegen s mit dem kritischen Wert von s , bei dem wir die Sprungstelle finden.	87
6.1	Die typische 5-zählige Symmetrie im Beugungsbild eines Quasikristall.	89
6.2	Die 5 Platonischen Körper: Würfel, Tetraeder, Oktaeder, Dodekaeder und Ikosaeder.	90
6.3	Der Ikosaeder mit seinen Hauptdiagonalen	90
6.4	Ansicht des Ikosaeders mit einer projizierenden Hauptdiagonale.	91
6.5	Inneinanderschachtelung von zwei Würfel.	91
6.6	Die Inneinanderschachtelung von zwei Würfel gedreht um α	92
6.7	Grundriss der Würfel.	93
6.8	Aufriss der Würfel.	94
6.9	Übereinanderlegung der Bilder des Ikosaeders und der gedrehten Würfel.	95
6.10	Die Lage des Ikosaeders und der Würfel zueinander im "Grundriss".	95
6.11	Zentrierte Inneinanderschachtelung.	96
6.12	Nicht zentrierte Inneinanderschachtelung.	97
6.13	Beispiel für eine Würfelanordnung.	98
6.14	Einheitsgitter	98
6.15	3D-Modell	99
6.16	Das 3D-Modell mit projizierender z -Achse	100
6.17	Das gedrehte 3D-Modell.	100

Literaturverzeichnis

- [Bar95] M.F. Barnsley. *Fraktale - Theorie und Praxis Deterministischer Geometrie*. Spektrum Akademischer Verlag, 1995.
- [Ber66] Robert Berger. *The undecidability of the domino problem*. Memoires of the Am.Math.Soc.66, 1966.
- [Bru81] N.G. Bruijn. Algebraic theory of penroses non-periodic tilings of the plane. pages 39–66, 1981.
- [Bru86] N.G. Bruijn. Symmetry and quasisymmetry. *Symmetrie in Geistes- und Naturwissenschaften*, R. Wille (Hrsg.), pages 217–233, 1986.
- [BSYL09] L. Bindi, P.J. Steinhardt, N. Yao, and P.J. Lu. Natural quasicrystals. *Science vol. 324*, pages 1306–1309, 2009.
- [Cro97] Peter R. Cromwell. *Polyhedra*. Cambridge Univ. Press, 1997.
- [Edg90] G.A. Edgar. *Measure, Topology, and Fractal Geometry*. Springer, 1990.
- [Fal93] Kenneth J. Falconer. *Fraktale Geometrie*. Spektrum, Akad.Verl., 1993.
- [GS87] B. Grünbaum and G.C. Shepherd. *Tilings and patterns*. Freeman, 1987.
- [Hah01] Theo (Hrsg.) Hahn. *International Tables for Crystallography*. Reidel u.a., 2001.

- [HTW75] G. Harburn, C.A. Taylor, and T.R. Welberry. *Atlas of Optical Transforms*. G.Bell and Sons, 1975.
- [Kuh81] T. S. Kuhn. *Die Struktur wissenschaftlicher Revolutionen*. Suhrkamp, 1981.
- [Lif07] Ron Lifshitz. What is a crystal? *Condensed Matter Physics*, pages 114–36, 2007.
- [LS84] D. Levine and P.J. Steinhardt. Quasicrystals *i*. definition and structure. *Physical Review B, Vol.34*, pages 596–615, 1984.
- [Mas07] Werner Massa. *Kristallstrukturbestimmung*. Teubner Verlag, 2007.
- [Pen78] R. Penrose. Pentaplexity - a class of non-periodic tilings of the plane. *Eureka 39 (1978)*, pages 32–37, 1978.
- [Rad99a] C. Radin. Symmetries of quasicrystals. *Journal of statistical physics vol 95*, pages 827–833, 1999.
- [Rad99b] Charles Radin. *Miles of Tiles*. American Mathematical Society, 1999.
- [SBGC84] Shechtman, Blech, Gratias, and Cahn. Metallic phase with longrange orientational order and no translational symmetry. *Physical review letters vol. 53 (20)*, pages 1951–1953, 1984.
- [Sen] Marjorie Senechal. *The Mathematica Journal Vol.4*, pages 10–15.
- [Sen95] Marjorie Senechal. *Quasicrystals and geometry*. Cambridge University Press, 1995.
- [Sen06] Marjorie Senechal. What is a ... quasicrystal? *Notices of the Am. Math. Soc. Vol. 53*, pages 886–887, 2006.
- [SS04] Doris Schattschneider and Marjorie Senechal. Tilings. *Handbook of discrete and computational geometry*, pages 53–73, 2004.
- [Sta99] Z.M. Stadnik. *Physical properties of quasicrystals*. Springer series in solid-state sciences , 126, 1999.

[Wie30] Norbert Wiener. Generalized harmonic analysis. *Acta Mathematica*,
Vol.55, pages –, 1930.

Lebenslauf

Patrick Fabian

Landstrasser Hauptstraße 173-175 / 11 / 5, 1030 Wien

Geboren am: 22.12.1979 in Feldbach (österr. Staatsbürgerschaft)

e-mail: patrick.fabian@gmx.at

Ausbildung

- Seit 2004: Zweiter Abschnitt Studium Lehramt Mathematik und Geographie und Wirtschaftskunde Universität Wien
- 2000 - 2003: Erster Abschnitt Studium Lehramt Mathematik und Wirtschaftskunde K.F.-Universität Graz
- 1999 - 2000: Zivildienst im Jugendzentrum Spektrum - Feldbach
- 1994 - 1998: Bundesoberstufenrealgymnasium Feldbach

Berufserfahrung

- Seit Februar 2010: Unterrichtstätigkeit mit jugendlichen Migranten beim Verein UKI
- Seit 1998: Privatunterricht Mathematik für alle Schulstufen
- 2006 - 2010: Organisation der Kinderbetreuung am Weihnachtsmarkt Karlsplatz Wien
- 2004 - 2006: Outdoortrainer bei "Degis Abenteuerschule", Müritzsteg Stmk.
- 2004: Unterrichtstätigkeit beim Sozialprojekt Parajuru ,Brasilien.

Besondere Kenntnisse

- Englisch in Wort und Schrift, Portugiesisch Grundkenntnisse
- EDV-Kenntnisse: MS-Office, HTML, Latex, Mathematica