

Werk

Titel: Zur Theorie massiver Knoten

Autor: KRÖTENHEERDT, O.; VEIT, S.

Jahr: 1976

PURL: https://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?301416052_0005|log12

Kontakt/Contact

[Digizeitschriften e.V.](#)
SUB Göttingen
Platz der Göttinger Sieben 1
37073 Göttingen

✉ info@digizeitschriften.de

Zur Theorie massiver Knoten

OTTO KRÖTENHEERDT und SIGRID VEIT

1. Problemstellung und Resultate

In den vergangenen Jahren gab es bei grundlagentheoretischen Untersuchungen in der Chemie wiederholt Hinweise auf Anwendungsmöglichkeiten der Knotentheorie. So wurden z. B. bei gewissen chemischen Verbindungen im Molekülaufbau spezielle Knoten- und Verkettungsstrukturen erkannt. Ein Zykloparaffin aus über 50 Kohlenstoffatomen kann beispielsweise als einfacher Ring oder als verknoteter Ring — etwa als Kleeblattschlinge — existieren (vgl. Abb. 1). H. L. FRISCH und E. WASSERMANN bezeichnen diese beiden Formen in ihrer Arbeit [1] als „topologische Isomere“ und stellen fest, daß sich diese in einigen, vorwiegend physikalischen Eigenschaften unterscheiden. Über mechanisch verknüpfte Moleküle — „Catenane“ und „Rotaxane“ — berichten G. SCHILL und C. ZÜRCHER in [5]. Ein einfachstes Catenan wird z. B. durch zwei kettengliedartig miteinander verbundene Ringe dargestellt (vgl. Abb. 2).

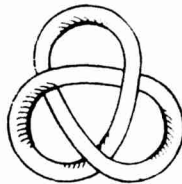


Abb. 1

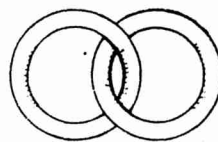


Abb. 2

In der klassischen Knotentheorie versteht man unter einem *Knoten* das topologische Bild einer Kreislinie im R^3 , also ein eindimensionales Gebilde; *Verkettungen* sind Vereinigungen von Knoten und somit ebenfalls eindimensional. Bei den eingangs erwähnten Beispielen aus der Chemie handelt es sich jedoch um dreidimensionale verknotete und verkettete Objekte, und auf diese sind die Betrachtungen der klassischen Knotentheorie nur bedingt anwendbar. Wir wollen im folgenden die verknoteten und verketteten dreidimensionalen Objekte, die bei gewissen Molekülen und Molekülverknüpfungen beobachtet wurden, als „massive Knoten“ bezeichnen. Beim Studium der geometrischen Eigenschaften solcher massiver Knoten und Verkettungen massiver Knoten spielen nun neben topologischen Fragen (etwa der Frage nach dem Knotentyp oder nach dem Isotopietyp) auch metrische Fragen eine Rolle. So muß z. B. ein massiver Knoten, der aus aneinandergereihten kongruenten

Bausteinen besteht, eine Mindestanzahl solcher Bausteine besitzen, wenn eine im Inneren des massiven Knotens gedachte „Seele“ – als Knoten im klassischen Sinne – einen speziellen Knotentyp (etwa eine Kleeblattschlinge oder einen speziellen Rosettenknoten R_n^m) darstellen soll.

In den nachfolgenden Untersuchungen werden wir zwei spezielle Arten massiver Knoten betrachten, die „massiven Knoten aus kongruenten Bausteinen“ in Abschnitt 3 und die „massiven Knoten konstanter Dicke“ in Abschnitt 4. In Vorbereitung dieser Untersuchungen wird in Abschnitt 2 ein Hilfssatz über spezielle Polygonknoten (im klassischen Sinne) behandelt. Wir beschränken uns dabei auf die Menge aller Torusknoten, die in [2] und [3] als Rosettenknoten zweiter Ordnung R_2^m ($m = 3, 5, \dots$) bezeichnet werden; der einfachste Vertreter dieser Rosettenknoten zweiter Ordnung ist die Kleeblattschlinge R_2^3 . Bezeichnen wir nun mit $n_0(R_2^m)$ die Mindestanzahl von Strecken, die zur Realisierung des Knotens R_2^m notwendig sind, so besagt der genannte Hilfssatz, daß die Zahl $m + 3$ eine obere Schranke für $n_0(R_2^m)$ ist; im Fall $m = 3$ gilt sogar $n_0(R_2^3) = 6$.

Wir erklären als *massiven Knoten aus kongruenten Bausteinen* jede Vereinigungsmenge endlich vieler kongruenter Körper B_i ($i = 1, \dots, n$) im R^3 mit den folgenden Eigenschaften:

- a) Es gibt einen Polygonknoten K – *Seele* des massiven Knotens genannt –, der mit jedem B_i gemeinsame Punkte im Inneren von B_i besitzt.
- b) Die B_i – als *Bausteine* bezeichnet – sind konvex und beschränkt.
- c) Keine zwei Bausteine besitzen einen gemeinsamen inneren Punkt, aber je zwei Bausteine B_i und B_{i+1} besitzen mindestens einen gemeinsamen Randpunkt (es sei $B_{n+1} := B_1$).
- d) Der Rand jedes B_i hat mit K genau zwei gemeinsame Punkte, von denen einer zugleich Randpunkt von B_{i-1} und der andere zugleich Randpunkt von B_{i+1} ist (es sei $B_0 := B_n$).
- e) Für jedes B_i bildet der zu B_i gehörende Teil von K , den man sich durch ein kürzestes Kurvenstück auf dem Rand von B_i zu einer geschlossenen Kurve ergänzt denken möge, einen trivialen Knoten.

Für derartige massive Knoten verwenden wir das Symbol $\mathbf{K}(K, B)$; mit B ist in diesem Symbol ein beliebiger Repräsentant der B_i gemeint, und in diesem Sinne wird im folgenden auch von „Bausteinen der Art B “ die Rede sein.

(Die in c) formulierte Teileigenschaft, wonach je zwei Bausteine B_i und B_{i+1} mindestens einen gemeinsamen Punkt besitzen, wurde wegen einer späteren Betonung gerade dieses geometrischen Sachverhaltes genannt, obwohl diese Teileigenschaft auch aus der Eigenschaft d) unmittelbar gefolgert werden kann.)

Wir bezeichnen mit $n_0(K; B)$ die Mindestanzahl kongruenter Bausteine der Art B , um mit diesen einen massiven Knoten $\mathbf{K}(K, B)$ zu realisieren, wenn für K ein spezieller Knotentyp vorgegeben ist. Es konnte gezeigt werden:

1. Mit $K := R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$), $B := W$ (Würfel) gilt $n_0(R_2^m, W) \leq 6m + 6$ (auch für die halbbregulären Polyeder $(3, 8, 8)$, $(4, 6, 6)$, $(4, 6, 8)$, $(3, 4, 3, 4)$, $(3, 4, 4, 4)$ gilt diese Abschätzung).
2. Mit $K := R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$), $B := K_u$ (Kugel) gilt $n_0(R_2^m, K_u) \leq 4m + 4$.
3. Mit $K := R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$), $B := K_a$ (Kalotte – als spezieller Kugelteil, der für die Anwendungen von Bedeutung ist und der in Abschnitt 3 näher beschrieben wird) gilt $n_0(R_2^m, K_a) \leq 13m + 9$.

Wir erklären als *massiven Knoten konstanter Dicke d* jede Vereinigungsmenge kongruenter Kugeln K_t ($0 \leq t \leq 1$) im R^3 mit den folgenden Eigenschaften:

- a) Es gibt einen Knoten K — Seele des massiven Knotens genannt —, auf dem die Mittelpunkte M_t der K_t liegen.
- b) Die K_t haben den Durchmesser d — als *Dicke* des massiven Knotens bezeichnet.
- c) Wenn t das Intervall von 0 bis 1 monoton durchläuft, durchläuft M_t den Knoten K einmal monoton und erreicht mit M_1 wieder den Anfangspunkt M_0 .
- d) Jede Kugel K_t hat mit dem Rand der Vereinigungsmenge der K_t genau die Punkte eines Großkreises gemeinsam.

Für derartige massive Knoten verwenden wir das Symbol $K(K, d)$ und dafür gelegentlich auch kurz das Symbol K .

(In der obigen Erläuterung spielt es keine Rolle, ob die K_t als Kugelkörper oder Kugel­flächen verstanden werden. — Auf Grund der Eigenschaft d) ist u. a. gewährleistet, daß die Knotenseele K keine Ecken besitzt und daß es auf dem Rand von $K(K, d)$ keine Selbstdurchdringungen gibt.)

Wir bezeichnen mit $l_0(K, d)$ die Mindestlänge der Seele K des massiven Knotens $K(K, d)$, wenn für K ein spezieller Knotentyp und eine Dicke d vorgegeben sind. Es konnte gezeigt werden:

Mit $K := R_2^m$ gilt

$$l_0(R_2^m, d) \leq \left(\frac{1 + 7m}{2} + \frac{11 + 5m}{2} \cdot \frac{\pi}{4} \right) \cdot d \quad (m = 3, 5, \dots).$$

Aus dieser Abschätzung folgt beispielsweise für die Kleeblattschlinge R_2^3

$$l_0(R_2^3, d) \leq \left(11 + 13 \cdot \frac{\pi}{4} \right) \cdot d = d \cdot 21, 210 \dots$$

In den Abschnitten 3 und 4 werden auch einige Ergebnisse der bereits durchgeführten Untersuchungen über Verkettungen massiver Knoten erwähnt; weitere Ausführungen darüber sind für eine spätere Veröffentlichung vorgesehen. — In weiterführenden Untersuchungen könnten andere spezielle Bausteine betrachtet werden; es könnten auch bessere Schranken für $n_0(K, B)$ und $l_0(K, d)$ und bei einigen speziellen Knotentypen exakte Werte für $n_0(K, B)$ bestimmt werden; auch die Übertragung der durchgeführten Überlegungen auf Rosettenknoten R_n^m der Ordnung n bzw. auf andere Knotenklassen erscheint möglich und wünschenswert.

2. Ein Hilfssatz über Polygonknoten

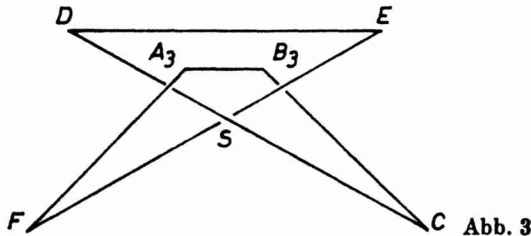
Stellt man einen Knoten K als Polygonknoten in regulärer Projektion dar, so existiert eine Mindestanzahl $n_0(K)$ von Strecken, die zu seiner Realisierung benötigt werden. Es gilt der folgende

Hilfssatz. *Jeder Polygonknoten vom Typ R_2^m ($m = 3, 5, \dots$) läßt sich durch $m + 3$ Strecken darstellen; es gilt also*

$$n_0(R_2^m) \leq m + 3. \tag{1}$$

Beweis. Eine Kleeblattschlinge R_2^3 ist durch sechs Strecken darstellbar, wie man aus der normierten regulären Projektion der Abb. 3 erkennen kann. (Die Punkte A_t und B_t im folgenden Text und in den Abbildungen 3 und 4 erhalten entsprechend dem

m der Rosettenknoten R_2^m die Indizes 3, 5, ...) Wir realisieren nun einen R_2^5 aus acht Strecken, indem wir die Strecke A_3B_3 durch einen Streckenzug $A_3A_5B_5B_3$ derart ersetzen, daß die Strecke A_3A_5 die Strecke DE unterkreuzt und die Strecke B_5B_3 die Strecke DE überkreuzt, während die Strecke A_5B_5 in der normierten regulären Projektion des Knotens R_2^5 parallel zu DE außerhalb des Dreiecks DES liegt und keine Strecke von R_2^5 kreuzt. R_2^5 ist also mit $6 - 1 + 3 = 5 + 3$ Strecken realisierbar, während R_2^3 durch $3 + 3$ Strecken dargestellt werden konnte.

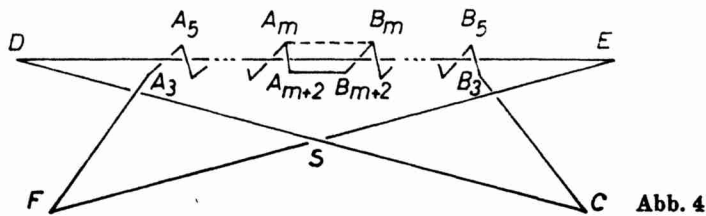


Durch vollständige Induktion folgt die Realisierbarkeit eines R_2^{m+2} aus

$$(m + 3) - 1 + 3 = (m + 2) + 3$$

Strecken, indem wir von der normierten regulären Projektion eines R_2^m (bestehend aus $m + 3$ Strecken) ausgehen und die Strecke A_mB_m durch einen Streckenzug $A_mA_{m+2}B_{m+2}B_m$ derart ersetzen, daß

- a) in den Fällen $m = 3, 7, \dots$ die Strecke A_mA_{m+2} die Strecke DE unterkreuzt und die Strecke $B_{m+2}B_m$ die Strecke DE überkreuzt, während die Strecke $A_{m+2}B_{m+2}$ in der normierten regulären Projektion des Knotens R_2^{m+2} parallel zu DE außerhalb des Dreiecks DES liegt und keine Strecke von R_2^{m+2} kreuzt;
- b) in den Fällen $m = 5, 9, \dots$ die Strecke A_mA_{m+2} die Strecke DE überkreuzt und die Strecke $B_{m+2}B_m$ die Strecke DE unterkreuzt, während die Strecke $A_{m+2}B_{m+2}$ in der normierten regulären Projektion des Knotens R_2^{m+2} parallel zu DE innerhalb des Dreiecks DES liegt und keine Strecke von R_2^{m+2} kreuzt (man vgl. Abb. 4).



Damit ist gezeigt, daß jeder Polygonknoten vom Typ R_2^m ($m = 3, 5, \dots$) mit $m + 3$ Strecken realisiert werden kann.

Bemerkung 1. Für die Kleeblattschlinge gilt sogar

$$n_0(R_2^3) = 6,$$

da für jeden Polygonknoten, der nicht zur Kreislinie äquivalent ist, mindestens sechs Strecken nötig sind (verknottete Vierecke und verknottete Fünfecke gibt es nicht).

Bemerkung 2. Für jedes $m = 2, 4, \dots$ ist R_2^m eine Verkettung von zwei trivialen Knoten. Die Abschätzungsformel (1) gilt auch für $m = 4, 6, \dots$, wie man durch ein entsprechendes Konstruktionsverfahren wie im Beweis des obigen Hilfssatzes zeigen kann; unter $n_0(R_2^m)$ ist dabei die Mindestanzahl der Summe der Streckenanzahlen der beiden trivialen Polygonknoten von R_2^m zu verstehen.

Im Fall $m = 2$ ist

$$n_0(R_2^2) = 6$$

(beide Komponenten dieser Verkettung sind Streckenzüge aus jeweils drei Strecken).

3. Massive Knoten aus kongruenten Bausteinen

In diesem Abschnitt werden wir uns der Untersuchung massiver Knoten aus kongruenten Bausteinen zuwenden. Verschärfen wir die Forderung, daß zwei aufeinanderfolgende Bausteine mindestens einen gemeinsamen Punkt haben, dahingehend, daß zwei aufeinanderfolgende Bausteine mit ebenflächigen Begrenzungsstücken genau ein gemeinsames Flächenstück besitzen sollen, so zeigt sich, daß z. B. von den regulären Polyedern die Würfel als geeignete Bausteine in Frage kommen.

Für massive Knoten aus kongruenten Würfeln beweisen wir den folgenden Satz.

Satz 1. Jeder massive Knoten aus kongruenten Würfeln W und mit der Seele $K = R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$) kann mit $6m + 6$ Würfeln realisiert werden; es gilt also für jeden $K(R_2^m, W)$ die Abschätzung

$$n_0(R_2^m, W) \leq 6m + 6 \quad (m = 3, 5, \dots). \tag{2}$$

Beweis. Jeder massive Knoten $K(R_2^3, W)$ läßt sich aus $24 = 6 \cdot 3 + 6$ Würfeln zusammensetzen (man vgl. Abb. 5 a; Abb. 5 b zeigt die Seele, auf der die Mittelpunkte der Würfel markiert sind). Für die Realisierung eines massiven Knotens $K(R_2^5, W)$ genügen $24 + 12 = 36 = 6 \cdot 5 + 6$ Würfel (man vgl. Abb. 6; die Mittelpunkte der

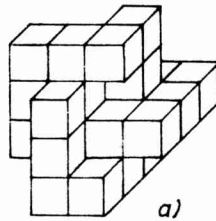


Abb. 5



b)

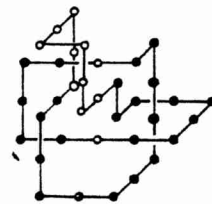


Abb. 6

hinzugekommenen Würfel sind durch kleine Kreise gekennzeichnet). Legt man das für Polygonknoten angegebene Konstruktionsprinzip zugrunde (man vgl. Abschnitt 2), so läßt sich jeder massive Knoten $K(R_2^{m+2}, W)$ aus einem massiven Knoten $K(R_2^m, W)$ ($m = 3, 5, \dots$) in der gleichen Weise gewinnen wie ein massiver Knoten $K(R_2^5, W)$ aus einem massiven Knoten $K(R_2^3, W)$, nämlich durch analoges Einfügen von 12 weiteren Würfeln. Wenn wir

$$n_0(R_2^m, W) \leq 6m + 6 \quad (m = 3, 5, \dots)$$

voraussetzen, folgt also

$$n_0(R_2^{m+2}, W) \leq 6m + 6 + 12 = 6(m + 2) + 6.$$

Durch vollständige Induktion ergibt sich somit die Richtigkeit der Aussage in Satz 1.

Folgerung. Die Abschätzungsformel (2) behält ihre Gültigkeit, wenn als kongruente Bausteine B anstelle der Würfel W die halbregulären Polyeder (3, 8, 8), (4, 6, 6), (4, 6, 8), (3, 4, 3, 4), (3, 4, 4, 4) verwendet werden.

(Das Symbol (n_1, n_2, \dots, n_4) bedeutet, daß an jeder Ecke des betreffenden Polyeders ein n_1 -Eck, ein n_2 -Eck, ..., ein n_4 -Eck in der gegebenen Reihenfolge aufeinanderfolgen.) Die Folgerung sieht man unmittelbar ein, wenn man bedenkt, daß es sich bei den genannten halbregulären Polyedern um solche handelt, die aus Würfeln durch Schnitte mit gewissen Ebenen entstanden sind, so daß von jeder Würfel­fläche ein Teilflächenstück zur Oberfläche des halbregulären Polyeders gehört.

Bemerkung. Die in Satz 1 formulierte Aussage gilt unter der Voraussetzung, daß zwei benachbarte Würfel genau eine gemeinsame Fläche haben. Es ist leicht einzusehen, daß die Abschätzungsformel (2) erst recht gilt, wenn wir diese schärfere Forderung fallenlassen und nur voraussetzen, daß zwei benachbarte Bausteine mindestens einen gemeinsamen Punkt besitzen.

Verwendet man als Bausteine Kugeln, so gilt

Satz 2. Jeder massive Knoten aus kongruenten Kugeln K_u und mit der Seele $K = R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$) kann mit $4m + 4$ Kugeln realisiert werden; es gilt also für jeden $K(R_2^m, K_u)$ die Abschätzung

$$n_0(R_2^m, K_u) \leq 4m + 4 \quad (m = 3, 5, \dots). \tag{3}$$

Beweis. Jeder massive Knoten $K(R_2^3, K_u)$ läßt sich aus $16 = 4 \cdot 3 + 4$ Kugeln aufbauen (man vgl. Abb. 7). Zur Begründung denke man sich die Mittelpunkte von acht Kugeln in einer Ebene ε gelegen; die Mittelpunkte dieser Kugeln seien $A, F, G_3,$

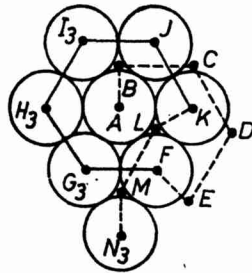


Abb. 7

H_3, I_3, J, K, N_3 (der Index bei einigen Punkten wird entsprechend dem m im R_2^m gewählt). Die Mittelpunkte von sechs weiteren Kugeln mögen in einer Ebene parallel zu ε „unter“ ε entsprechend der Abb. 7 liegen; die Mittelpunkte dieser Kugeln seien B, C, D, E und L, M , und der Abstand der beiden Ebenen sei dadurch bestimmt, daß A, I_3, J, B ein reguläres Tetraeder bilden. Mit zwei weiteren geeigneten Kugeln mit den Mittelpunkten O_3, P_3 „über“ ε kann eine Verbindung zwischen der Kugel um N_3 und der Kugel um A hergestellt werden. Der geschlossene Streckenzug $ABCDEFGHI_3JKLMN_3O_3P_3A$ ist ein Polygonknoten vom Typ R_2^3 , und bildet mit den zugehörigen Kugeln einen massiven Knoten $K(R_2^3, K_u)$.

Für die Realisierung eines massiven Knotens $K(R_2^5, K_u)$ genügen $16 + 8 = 24 = 4 \cdot 5 + 4$ Kugeln. Um dies einzusehen, ergänzen wir zunächst die Kugeln von $K(R_2^3, K_u)$ durch vier neue Kugeln, deren Mittelpunkte die Punkte G_5, H_5, I_5, T_5 in der Ebene ε seien (man vgl. Abb. 8). Der Streckenzug $G_3H_3I_3$ wird nun ersetzt durch den Streckenzug $G_3G_5H_5I_5I_3$, und der Punkt H_3 wird in Q_5 umbenannt. Danach werden die Punkte O_3 und P_3 „über“ ε in geeignete Punkte O_5 und P_5 verlagert,

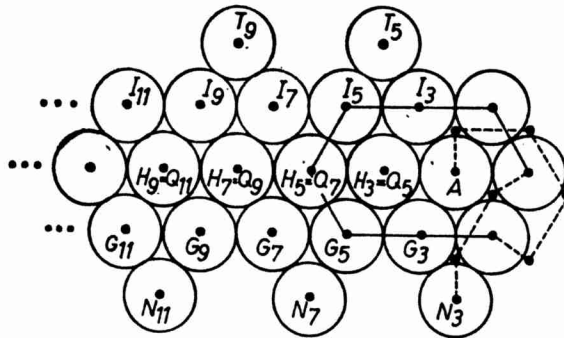


Abb. 8

so daß die Kugeln um diese Punkte zu einer Verbindung zwischen der Kugel um N_3 und der Kugel um Q_5 werden. Durch zwei weitere neue Kugeln um geeignete Punkte R_5 und S_5 „unter“ ε kann die Kugel um Q_5 mit der Kugel um T_5 verbunden werden; und nochmals durch zwei weitere neue Kugeln um geeignete Punkte U_5 und V_5 „über“ ε kann schließlich eine Verbindung zwischen der Kugel um T_5 und der Kugel um A hergestellt werden.

Legt man das für Polygonknoten vom Typ R_2^m ($m = 3, 5, \dots$) behandelte Konstruktionsprinzip zugrunde, so läßt sich jeder massive Knoten $K(R_2^{m+2}, K_u)$ aus einem massiven Knoten $K(R_2^m, K_u)$ in der gleichen Weise gewinnen wie ein massiver Knoten $K(R_2^5, K_u)$ aus einem massiven Knoten $K(R_2^3, K_u)$, nämlich durch geeignetes Hinzufügen von acht Kugeln:

a) In den Fällen $m = 3, 7, 11, \dots$ ergänzen wir zunächst die Kugeln von $K(R_2^m, K_u)$ durch vier neue Kugeln, deren Mittelpunkte die Punkte $G_{m+2}, H_{m+2}, I_{m+2}, T_{m+2}$ in der Ebene ε seien (man vgl. Abb. 8). Der Streckenzug $G_mH_mI_m$ wird nun ersetzt durch den Streckenzug $G_mG_{m+2}H_{m+2}I_{m+2}I_m$, und der Punkt H_m wird in Q_{m+2} umbenannt. Danach werden die Punkte O_m und P_m „über“ ε in geeignete Punkte O_{m+2} und P_{m+2} verlagert, so daß die Kugeln um diese Punkte zu einer Verbindung zwischen der Kugel um N_m und der Kugel um Q_{m+2} werden. Durch zwei weitere neue Kugeln um geeignete Punkte R_{m+2} und S_{m+2} „unter“ ε kann die Kugel um Q_{m+2} mit der Kugel um T_{m+2} verbunden werden; und nochmals durch zwei weitere neue Kugeln um geeignete Punkte U_{m+2} und V_{m+2} „über“ ε kann schließlich eine Verbindung zwischen der Kugel um T_{m+2} und der Kugel um Q_m hergestellt werden (es sei $Q_3 := A$).

b) In den Fällen $m = 5, 9, 13, \dots$ ergänzen wir zunächst die Kugeln von $K(R_2^m, K_u)$ durch vier neue Kugeln, deren Mittelpunkte die Punkte $G_{m+2}, H_{m+2}, I_{m+2}, N_{m+2}$ in der Ebene ε seien (man vgl. Abb. 8). Der Streckenzug $G_mH_mI_m$ wird nun ersetzt durch den Streckenzug $G_mG_{m+2}H_{m+2}I_{m+2}I_m$, und der Punkt H_m wird in den Punkt Q_{m+2} umbenannt. Danach werden die Punkte R_m und S_m „unter“ ε in geeignete Punkte R_{m+2} und S_{m+2} verlagert, so daß die Kugeln um diese Punkte zu einer Verbindung zwischen der Kugel um Q_{m+2} und der Kugel um T_m werden. Durch zwei weitere neue

Kugeln um geeignete Punkte Q_{m+2} und P_{m+2} „über“ ε kann die Kugel um N_{m+2} mit der Kugel um Q_{m+2} verbunden werden; und nochmals durch zwei weitere neue Kugeln um geeignete Punkte L_{m+2} und M_{m+2} „unter“ ε kann schließlich eine Verbindung zwischen der Kugel um Q_m und der Kugel um N_{m+2} hergestellt werden.

Wenn wir

$$n_0(R_2^m, K_u) \leq 4 \cdot m + 4 \quad (m = 3, 5, \dots)$$

voraussetzen, folgt also

$$n_0(R_2^{m+2}, K_u) \leq 4 \cdot m + 4 + 8 = 4(m + 2) + 4.$$

Durch vollständige Induktion ergibt sich somit die Richtigkeit der Aussage in Satz 2.

Von besonderer Bedeutung — gerade im Hinblick auf die Anwendung in der Chemie — ist die Untersuchung von massiven Knoten aus speziellen kongruenten Kugelteilen — sogenannten Kalotten. Diese Kugelteile werden von der Oberfläche einer Kugel K_1 mit dem Radius r_1 und zwei Ebenen ε_1 und ε_2 begrenzt; die beiden Ebenen schließen einen Winkel der Größe $\pi/3$ ein und sind Tangentialebenen einer Kugel K_2 , die mit K_1 denselben Mittelpunkt besitzt und deren Radius $r_2 = \frac{1}{3} \sqrt{3} r_1$ ist.

Derartige Kugelteile dienen der Beschreibung des Sachverhaltes, daß die Durchmesser der Wirkungssphären der Atome bei gewissen Bindungen größer sind als die Abstände der Mittelpunkte benachbarter Atome, so daß sich benachbarte Atomkugeln durchdringen. Da der Gedanke der Kalotten auf eine Durchdringung von Kugeln zurückgeht, werden wir im folgenden voraussetzen, daß je zwei benachbarte Kalotten eine Kreisfläche als Berührungsfläche besitzen. Für massive Knoten aus kongruenten Kalotten K_a der beschriebenen Art gilt

Satz 3. *Jeder massive Knoten aus kongruenten Kalotten K_a und mit der Seele $K = R_2^m$ ($m = 3, 5, \dots$) kann mit $13m + 9$ Kalotten realisiert werden; es gilt also für jeden $K(R_2^m, K_a)$ die Abschätzung*

$$n_0(R_2^m, K_a) \leq 13m + 9 \quad (m = 3, 5, \dots). \quad (4)$$

Beweis. Zur Konstruktion massiver Knoten aus kongruenten Kalotten der beschriebenen Art können massive Knoten aus kongruenten Kugeln herangezogen werden. Jeder Kugel mit dem Mittelpunkt M und mit dem Radius r werden dabei drei Kalotten zugeordnet, falls die Seele des massiven Knotens in M einen Winkel der Größe $2\pi/3$ bildet (man vgl. Abb. 9). Um eine obere Schranke für $n_0(R_2^3, K_a)$ zu erhalten, können wir nicht einfach die Anzahl der Kugeln des massiven Knotens $K(R_2^3, K_u)$ der Abb. 7 mit 3 multiplizieren, weil die Seele R_2^3 in den Eckpunkten B, E, K

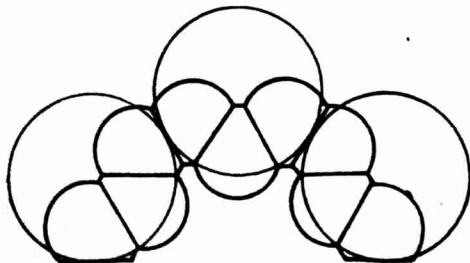


Abb. 9

und in mindestens einem der Punkte N_3, P_3, O_3, A keinen Winkel der Größe $2\pi/3$ besitzt. Wir wählen deshalb für den Polygonknoten vom Typ R_2^3 und für die zugeordneten Kugeln eine neue Anordnung entsprechend Abb. 10.

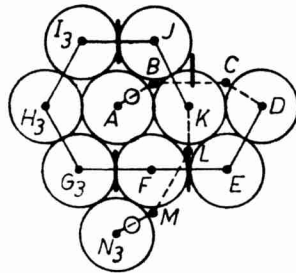


Abb. 10

Den Kugeln um J, K, L, M und B ordnen wir entsprechend Abb. 9 jeweils drei Kalotten zu; das ist möglich, weil die Winkel an den Ecken J, K, L, M und B des Polygonknotens jeweils eine Größe von $2\pi/3$ besitzen. Der Kugel um F werden vier Kalotten entsprechend Abb. 11a zugeordnet. Da die Winkelgröße des Polygonknotens bei D gleich $\pi/2$ ist, entfernen wir die Kugeln um C, D, E und ersetzen sie durch eine „Brücke“ aus neun Kalotten entsprechend Abb. 11b; das ist möglich, weil der Punkt B' (als ehemaliger Berührungspunkt der Kugel um B mit der Kugel

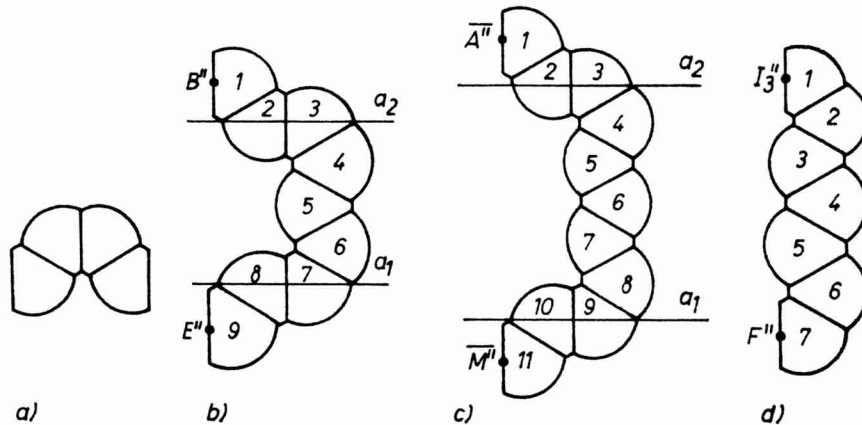


Abb. 11

um C) und der Punkt E' (als ehemaliger Berührungspunkt der Kugel um E mit der Kugel um F) einen Abstand der Größe $|B'E'| = r \cdot 2 \cdot \sqrt{2} = r \cdot 2,8 \dots$ besitzen und weil an der „Brücke“ aus neun Kalotten der Abstand der Punkte B'' und E'' durch geeignete Drehungen der Kalotten 1 und 2 um die Achse a_2 und der Kalotten 8 und 9 um die Achse a_1 jeden Wert zwischen $2 \cdot \sqrt{3} \cdot r$ und $\frac{2}{3} \cdot \sqrt{3} \cdot r$ annehmen kann.

Sodann wird an den Punkt A' (Berührungspunkt der Kugel um A mit der Kugel um B) und an den Punkt M' (Berührungspunkt der Kugel um M mit der Kugel um N_3) jeweils eine Kalotte so angesetzt, daß eine Kreisfläche jeder der beiden Kalotten parallel zur Ebene ε liegt; beide Kreisflächen liegen dann auch in einer

Ebene, und für den Abstand ihrer Mittelpunkte — der eine Mittelpunkt sei mit \bar{A}' und der andere mit \bar{M}' bezeichnet — gilt $|\bar{A}'\bar{M}'| = |AN_3| = 2r \cdot \sqrt{3} = r \cdot 3,4 \dots$ Die an A' angesetzte Kalotte und die an M' angesetzte Kalotte werden nun durch eine „Brücke“ aus elf Kalotten entsprechend Abb. 11c verbunden; das ist möglich, weil an dieser „Brücke“ der Abstand der Punkte \bar{A}'' und \bar{M}'' durch geeignete Drehungen der Kalotten 1 und 2 um die Achse a_2 und der Kalotten 10 und 11 um die Achse a_1 jeden Wert zwischen $r \cdot 4 \cdot \frac{2}{3} \cdot \sqrt{3}$ und $r \cdot 2 \cdot \frac{2}{3} \cdot \sqrt{3}$ annehmen kann.

Obwohl an den Ecken G_3, H_3, I_3 der Polygonknoten jeweils eine Winkelgröße von $2\pi/3$ besitzt und wir somit den Kugeln um G_3, H_3, I_3 jeweils drei Kalotten zuordnen könnten, entfernen wir diese drei Kugeln dennoch und ersetzen sie durch eine „Brücke“ aus sieben Kalotten entsprechend Abb. 11d. Das ist möglich, weil die Punkte F'' und I_3'' an der „Brücke“ aus sieben Kalotten einen Abstand der Größe $r \cdot 2 \cdot \sqrt{3}$ besitzen und weil der Punkt F' (als ehemaliger Berührungspunkt der Kugel um F mit der Kugel um G) und der Punkt I_3' (als ehemaliger Berührungspunkt der Kugel um I_3 mit der Kugel um J) ebenfalls einen Abstand der Größe $r \cdot 2 \cdot \sqrt{3}$ besitzt.

Wir haben mit dem angegebenen Konstruktionsverfahren also

$$5 \cdot 3 + 4 + 9 + (2 + 11) + 7 = 48 = 13 \cdot 3 + 9$$

kongruente Kalotten aneinandergereiht, und zwar so, daß jede Kalotte mit zwei weiteren Kalotten jeweils eine gemeinsame Kreisfläche besitzt. Denkt man sich nun noch den Mittelpunkt jeder Kalotte durch eine Strecke mit dem Mittelpunkt jeder der beiden Nachbarkalotten, die mit der erstgenannten Kalotte eine gemeinsame Kreisfläche besitzen, verbunden, so entsteht ein geschlossener Streckenzug aus 48 Strecken, und dieser ist ein Polygonknoten vom Typ R_2^3 . Damit ist ein massiver Knoten $K(R_2^3, K_a)$ realisiert, und es gilt $n_0(R_2^3, K_a) \leq 13 \cdot 3 + 9$.

Um aus $K(R_2^3, K_a)$ einen massiven Knoten $K(R_2^5, K_a)$ aufzubauen, fügen wir zunächst an den massiven Knoten $K(R_2^3, K_a)$ der Abb. 10 vier weitere Kugeln um die Punkte G_5, H_5, I_5, T_5 entsprechend dem Konstruktionsverfahren im Beweis zu Satz 2 hinzu. Nun werden den Kugeln um G_3 und I_3 jeweils vier Kalotten entsprechend Abb. 11a zugeordnet. Die Kugeln um G_5, H_5, I_5 werden wieder entfernt und durch eine „Brücke“ aus sieben Kalotten entsprechend Abb. 11d ersetzt. Die Kugeln um O_5, P_5, U_5, V_5 können so gelagert werden, daß der Polygonknoten vom Typ R_2^5 bei N_3, O_5, P_5, U_5, A jeweils eine Winkelgröße von $2\pi/3$ besitzt, so daß jeder dieser sechs Kugeln drei Kalotten in der gewünschten Weise zugeordnet werden können. Zur Verbindung der Kugel um Q_5 mit der Kugel um T_5 verwenden wir dieselbe „Brückenkonstruktion“ unter der Ebene ε wie bei der Verbindung der Kugel um A mit der Kugel um N_3 über der Ebene ε beim Bau des massiven Knotens $K(R_2^3, K_a)$, d. h., wir benötigen zwei Kalotten und dazu eine „Brücke“ aus elf Kalotten. Alle restlichen Kugeln von $K(R_2^5, K_a)$ werden in der gleichen Weise durch Kalotten ersetzt wie beim Bau des massiven Knotens $K(R_2^3, K_a)$. Wir haben somit zu den 48 Kalotten des massiven Knotens $K(R_2^3, K_a)$ noch $2 \cdot 4 + 6 \cdot 3$ Kalotten hinzugefügt, um einen massiven Knoten $K(R_2^5, K_a)$ zu erhalten. Wegen $48 + 2 \cdot 4 + 6 \cdot 3 = 48 + 2 \cdot 13$ gilt $n_0(R_2^5, K_a) \leq 13 \cdot 5 + 9$.

Auf Grund des Konstruktionsverfahrens im Beweis zu Satz 2 entsteht ein $K(R_2^{m+2}, K_a)$ aus einem $K(R_2^m, K_a)$ durch Hinzufügen von acht weiteren Kugeln für jedes $m = 3, 5, \dots$ Die Lage der acht hinzugefügten Kugeln ist bei jedem m so, daß beim Übergang zu massiven Knoten aus kongruenten Kalotten ein $K(R_2^{m+2}, K_a)$ aus einem

$K(R_2^m, K_a)$ durch Hinzufügen von $2 \cdot 4 + 6 \cdot 3 = 2 \cdot 13$ Kalotten entsteht, d. h., aus

$$n_0(R_2^m, K_a) \leq 13 \cdot m + 9$$

folgt

$$n_0(R_2^{m+2}, K_a) \leq 13 \cdot (m + 2) + 9$$

für jedes $m = 3, 5, \dots$ Damit ist Satz 3 bewiesen.

Für eine „massive Kleeblattschlinge“ aus kongruenten Kalotten — diesen Namen wollen wir für $K(R_2^3, K_a)$ verwenden — folgt aus Satz 3, daß 48 Kalotten zu ihrer Realisierung ausreichen. (In [1] stellen H. L. FRISCH und E. WASSERMANN fest, daß ein Zyklparaffin aus mindestens 50 Kohlenstoffatomen bestehen muß, um eine „Kleeblattschlinge“ bilden zu können. Mit dem Begriff „Kleeblattschlinge“ ist in unserer Bezeichnungsweise ein $K(R_2^3, K_a)$ gemeint. Bei den genannten 50 Kohlenstoffatomen ist an eine teilweise Durchdringung von Atomkugeln gedacht, so daß sich dabei die Idee des Kalottenmodells in der oben beschriebenen Art zur Erfassung des geometrischen Sachverhalts als zweckmäßig erweist.)

Die hier durchgeführten Überlegungen und Konstruktionsverfahren für massive Knoten aus kongruenten Bausteinen lassen sich im wesentlichen auch auf Verkettungen massiver Knoten aus kongruenten Bausteinen übertragen. Sowohl für Würfel als auch für Kugeln und für die beschriebenen Kugelteile (Kalotten) wurden solche Verkettungen untersucht, wobei als „Seele“ der Verkettungen die Rosettenverkettungen zweiter Ordnung R_2^m ($m = 2, 4, \dots$) verwendet wurden; der einfachste Vertreter R_2^2 dieser Rosettenverkettungen zweiter Ordnung wird durch zwei verkettete Kreise dargestellt. Auch für Verkettungen massiver Knoten aus kongruenten Bausteinen kann die Frage nach der Mindestanzahl der Bausteine gestellt werden, wenn als „Verkettungsseele“ ein spezieller Verkettungstyp V und kongruente Bausteine der Art B vorgegeben sind. Wir bezeichnen diese Mindestanzahl mit $n_0(V, B)$; dabei ist zu beachten, daß jede Verkettung massiver Knoten aus mehreren Komponenten besteht, die nicht alle dieselbe Anzahl von Bausteinen besitzen müssen. Ohne Beweis sei hier erwähnt, daß für $V := R_2^m$ ($m = 2, 4, \dots$), $B := W$ (Würfel), $B := K_u$ (Kugel), $B := K_a$ (Kalotte — entsprechend der oben beschriebenen Gestalt) die folgenden Abschätzungsformeln gelten:

$$n_0(R_2^m, W) \leq 6 \cdot m + 4 \quad (m = 2, 4, \dots), \quad (5)$$

$$n_0(R_2^m, K_u) \leq 4 \cdot m + 2 \quad (m = 4, 6, \dots), \quad (6)$$

$$n_0(R_2^m, K_a) \leq 13 \cdot m + 4 \quad (m = 4, 6, \dots). \quad (7)$$

(Jede der hier betrachteten Verkettungen massiver Knoten aus kongruenten Bausteinen besteht aus zwei Komponenten; bei den durchgeführten Konstruktionen wurde jeweils für eine Komponente eine besonders einfache Darstellung gewählt.)

Bemerkung 1. Im Fall $m = 2$ gilt statt der Abschätzungsformel (6) für die Mindestanzahl von Kugeln die Formel

$$n_0(R_2^2, K_u) = 12.$$

Denkt man sich nämlich fünf Kugeln so angeordnet, daß jede Kugel zwei weitere Kugeln berührt und daß die Mittelpunkte der fünf Kugeln die Eckpunkte eines regulären Fünfecks sind, so ist es nicht möglich, eine sechste Kugel so zu legen, daß

sie die Ebene, in der die fünf Mittelpunkte liegen, im Inneren des Fünfecks berührt. Für die Höhe h einer Pyramide, deren Grundfläche ein reguläres Fünfeck ist und deren Seitenflächen reguläre Dreiecke mit der Seitenlänge a sind, gilt nämlich

$$h = \frac{a}{2} \cdot \sqrt{2 \left(1 - \frac{\sqrt{5}}{5}\right)} > \frac{a}{2}.$$

Bemerkung 2. Es ist möglich, aus 18 Kalotten einen trivialen massiven Knoten (d. h. einen massiven Knoten, dessen Seele zur Kreislinie äquivalent ist) aufzubauen (man vgl. Abb. 9) und diesen mit einem zweiten gleichartigen massiven Knoten zu verketteten. In der erwähnten Arbeit [1] wird für die Verkettung zweier Ringe zu einem einfachsten Catenan (man vgl. Abb. 2) eine Mindestanzahl von 20 Kohlenstoffatomen für jeden Ring angegeben. Dazu wird erwähnt, daß es zwar möglich sei, 18gliedrige Kohlenstoffringe miteinander zu verschlingen, daß aber noch zwei Atome eingefügt werden müssen, wenn man die zwischenatomaren Abstoßungen berücksichtigt. Weiterhin wird in [1] für eine Kette aus drei Kohlenstoffringen eine Mindestanzahl von 66 ($= 20 + 26 + 20$) Kohlenstoffatomen angegeben. Denkt man sich eine solche Kette von drei trivialen massiven Knoten aus kongruenten Kalotten der oben beschriebenen Art, so ist leicht einzusehen, daß die Mindestanzahl der Kalotten nicht größer als 62 ($= 18 + 26 + 18$) ist.

4. Massive Knoten konstanter Dicke d

Wir wenden uns nun der Betrachtung massiver Knoten konstanter Dicke d zu. Eine Abschätzung für den Wert $l_0(R_2^m, d)$ erhalten wir aus den Überlegungen zu den massiven Knoten aus kongruenten Würfeln. Es ist möglich, in jeden massiven Knoten $\mathbf{K}(R_2^m, W)$, welcher nach dem Prinzip im Beweis zu Satz 1 konstruiert wurde, einen massiven Knoten konstanter Dicke d einzubetten, wobei d gleich der Kantenlänge der Würfel ist. Die Seele vom Typ R_2^m in dem konstruierten $\mathbf{K}(R_2^m, W)$ besteht aus $6m + 6$ Strecken der Länge d . Diese Seele besitzt im Fall $m = 3$ in 13 Eckpunkten einen rechten Winkel und in elf Eckpunkten einen gestreckten Winkel. Entsprechend dem verwendeten Konstruktionsverfahren wurde ein $\mathbf{K}(R_2^{m+2}, W)$ aus einem $\mathbf{K}(R_2^m, W)$ ($m = 3, 5, \dots$) aufgebaut, indem zwölf Würfel hinzugefügt wurden. Die Seele vom Typ R_2^{m+2} ergab sich dabei aus der Seele vom Typ R_2^m durch Hinzufügen von zwölf Strecken, und zwar so, daß in fünf neuen Eckpunkten rechte Winkel und in sieben neuen Eckpunkten gestreckte Winkel entstanden. Damit besitzt die Seele jedes betrachteten $\mathbf{K}(R_2^m, W)$ ($m = 3, 5, \dots$)

$$\text{in } 13 + \frac{m-3}{2} \cdot 5 \text{ Eckpunkten jeweils einen rechten Winkel}$$

und

$$\text{in } 11 + \frac{m-3}{2} \cdot 7 \text{ Eckpunkten jeweils einen gestreckten Winkel.}$$

In jedem Würfel, der zu einem Eckpunkt mit einem gestreckten Winkel gehört, behalten wir den zum Würfel gehörenden Teil der Seele unverändert bei. In jedem Würfel, der zu einem Eckpunkt mit einem rechten Winkel gehört, ersetzen wir den zum Würfel gehörenden Teil der Seele durch einen Viertelkreisbogen mit dem Radius $d/2$, und zwar so, daß der dadurch entstehende geschlossene Kurvenzug zur

Seele eines in $\mathbf{K}(R_2^m, W)$ eingebetteten massiven Knotens $\mathbf{K}(R_2^m, d)$ wird. Für jeden so konstruierten massiven Knoten konstanter Dicke d gilt

$$l_0(R_2^m, d) \leq \left(11 + \frac{m-3}{2} \cdot 7\right) \cdot d + \left(13 + \frac{m-3}{2} \cdot 5\right) \cdot \frac{\pi}{4} \cdot d$$

$(m = 3, 5, \dots)$.

Daraus folgt unmittelbar der nachstehende Satz.

Satz 4. Für jeden massiven Knoten konstanter Dicke d mit der Seele R_2^m ($m = 3, 5, \dots$) ist

$$l_0(R_2^m, d) \leq \left(\frac{1+7m}{2} + \frac{11+5m}{2} \cdot \frac{\pi}{4}\right) \cdot d. \tag{8}$$

Im Fall $m = 3$ ergibt sich für die „massive Kleeblattschlinge“ von konstanter Dicke d die Abschätzung

$$l_0(R_2^3, d) \leq \left(11 + 13 \cdot \frac{\pi}{4}\right) \cdot d,$$

d. h.

$$l_0(R_2^3, d) \leq d \cdot 21,210 \dots$$

Wir wollen im folgenden noch massive Knoten von größtmöglicher konstanter Dicke d untersuchen, die sich in einem massiven Knoten $\mathbf{K}(R_2^m, K_a)$, der entsprechend dem Konstruktionsprinzip im Beweis zu Satz 3 aufgebaut ist, einbetten lassen. Jeder solche $\mathbf{K}(R_2^m, K_a)$ besteht aus $13m + 9$ Kalotten, und die Seele vom Typ R_2^m besitzt im Mittelpunkt jeder Kalotte einen Winkel der Größe $2\pi/3$. In jeder Kalotte ersetzen wir nun den zu dieser Kalotte gehörenden Teil der Seele durch einen Sechstelkreisbogen mit dem Radius $\sqrt{3} \cdot r_2$ (die betrachteten Kalotten werden entsprechend den Festlegungen in Abschnitt 3 von der Kugel K_1 mit dem Mittelpunkt M_1 und dem Radius r_1 und von zwei Ebenen ε_1 und ε_2 begrenzt, wobei die Ebenen sich unter einem Winkel der Größe $\pi/3$ schneiden und Tangentialebenen an eine Kugel K_2 um M_1 mit dem Radius $r_2 := \frac{1}{3} \cdot \sqrt{3} \cdot r_1$ sind); der Radius $\sqrt{3} \cdot r_2$ wurde so gewählt, daß er gleich dem Abstand des Mittelpunktes einer begrenzenden Kreisfläche der Kalotte von der Schnittgeraden der Ebenen ε_1 und ε_2 ist. Wenn der Sechstelkreisbogen in jeder Kalotte so eingefügt wird, daß er senkrecht auf jede der beiden begrenzenden Kreisflächen stößt, und zwar jeweils im Mittelpunkt der Kreisfläche, erhält man mit den $13m + 9$ Sechstelkreisbögen dieser Art eine geschlossene Kurve vom Knotentyp R_2^m . Da die begrenzenden Kreisflächen jeder Kalotte den Radius $\rho = \sqrt{r_1^2 - r_2^2} = \frac{1}{3} \cdot \sqrt{6} \cdot r_1$ besitzen, haben wir somit einen massiven Knoten $\mathbf{K}(R_2^m, d)$ der konstanten Dicke $d = \frac{2}{3} \cdot \sqrt{6} \cdot r_1$ gefunden, der in $\mathbf{K}(R_2^m, K_a)$ eingebettet ist; eine größere Dicke d ist bei der geforderten Einbettung nicht möglich. Für die Länge l der Seele des so erhaltenen $\mathbf{K}(R_2^m, d)$ gilt

$$\begin{aligned} l &= (13m + 9) \cdot \frac{2\pi}{6} \cdot \sqrt{3} \cdot r_2 = (13m + 9) \cdot \frac{\pi}{3} \cdot \sqrt{3} \cdot \frac{1}{3} \sqrt{3} \cdot r_1 \\ &= (13m + 9) \cdot \frac{\pi}{3} \cdot r_1 = (13m + 9) \cdot \frac{\pi}{3} \cdot \frac{1}{4} \sqrt{6} \cdot d. \end{aligned}$$

Dieser Wert ist für $l_0(R_2^m, d)$ eine schlechtere Schranke als die, die in Satz 4 angegeben ist. Im Fall $m = 3$ ergibt sich bei der „massiven Kleeblattschlinge“ von konstanter Dicke d für die Seele die Länge

$$l = 4 \cdot \pi \cdot \sqrt{6} \cdot d = d \cdot 30,786 \dots$$

Die durchgeführten Überlegungen wurden auch auf Verkettungen massiver Knoten von konstanter Dicke d übertragen, wobei als „Seele“ der Verkettungen die Rosettenverkettungen zweiter Ordnung R_2^m ($m = 2, 4, \dots$) verwendet wurden. Ohne Beweis sei erwähnt, daß man aus der Einbettung einer Verkettung massiver Knoten $K(R_2^m, d)$ von konstanter Dicke d in eine Verkettung massiver Knoten $K(R_2^m, W)$ aus kongruenten Würfeln die Abschätzungsformel

$$l_0(R_2^m, d) \leq \left(\frac{7m}{2} + \frac{8 + 5m}{2} \cdot \frac{\pi}{4} \right) \cdot d \quad (m = 4, 6, \dots) \quad (9)$$

erhält. Im Fall $m = 2$ führen einfache Überlegungen unmittelbar zu dem Ergebnis

$$l_0(R_2^2, d) = 2 \cdot \pi \cdot d.$$

LITERATUR

- [1] FRISCH, H. L., and E. WASSERMANN: Chemical Topology. J. Amer. Chem. Soc. 83 (1961), 3789–3795.
- [2] KRÖTENHEERDT, O.: Über einen speziellen Typ alternierender Knoten. Math. Ann. 153 (1964), 270–284.
- [3] KRÖTENHEERDT, O.: Zur Lösung des Isotopieproblems der Rosettenknoten. Beiträge zur Algebra und Geometrie 1 (1971), 19–31.
- [4] KRÖTENHEERDT, O.: Probleme der Lagerung von Figuren. Mitteil. Math. Ges. DDR, Heft 3/4 (1975), 65–74.
- [5] SCHILL, G., and C. ZÜRCHER: Mechanisch verknüpfte Moleküle: Catenane und Rotaxane. Die Naturwissenschaft 58 (1971), Jan.

Manuskripteingang: 30. 12. 1974

VERFASSER:

OTTO KRÖTENHEERDT und SIGRID VEIT, Sektion Mathematik der Martin-Luther-Universität Halle–Wittenberg