

Zielgerichtetes Aufzählen von Modellen für Kristallstrukturen auf der Basis minimaler Graphdarstellungen von Polyedertopologien



Hans-Joachim Klein

Inst. f. Informatik u. Prakt. Mathematik, Universität Kiel

www.informatik.uni-kiel.de/~hjk/crystana.html

Zusammenfassung

In [1] wurde ein raumgruppenzentriertes Verfahren vorgestellt, das auf der Basis einer Graphdarstellung für Tetraedertopologien eine vollständige Aufzählung potentieller Tetraedergraphen ermöglicht, wenn Nachbarschaften von Tetraedern geeignet beschränkt werden. Wird die Nachbarschaft auf die unmittelbare Umgebung der asymmetrischen Einheit eingeschränkt, entspricht es dem in [2] angegebenen Verfahren. Durch die Graphdarstellung ergibt sich neben der flexiblen Angabe von Nachbarschaften und der Verallgemeinerbarkeit auf beliebige Polyedertopologien im Vergleich zu [2] der Vorteil, dass Algorithmen etwa zur Ketten- und Ringbestimmung auf einfache Weise integriert werden können. Damit lassen sich Filter definieren, die im Ergebnis nur Graphen mit speziellen Eigenschaften zulassen (z.B. Graphen für Gerüste mit vorgegebenen Ringgrößen).

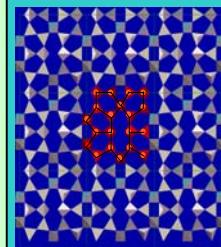
Die Effizienz des in [1] beschriebenen Verfahrens kann durch Ausnutzung aller gegebenen Symmetrieeigenschaften auf der Basis einer minimalen Graphdarstellung verbessert werden. Es wurde ein Algorithmus entworfen und implementiert, der durch eine geeignete Verwaltung symmetrieabhängiger Kanten kombinationen die Anzahl zu betrachtender Graphen stark einschränkt.

[1] H.-J. Klein: Systematic generation of models for crystal structures. Proc. 10th Int. Conf. on Mathematical and Computer Modelling and Scientific Computing, Boston, 1995. In *Mathematical Modelling and Scientific Computing* 6, 325-330, 1996.

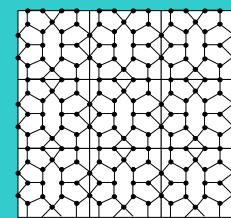
[2] M.M.J. Treacy, K.H. Randall, S. Rao, J.A. Perry und D.J. Chadi: Enumeration of periodic tetrahedral frameworks. *Zeitschrift f. Kristallographie* 212, 768-791, 1997

Minimale Graphdarstellung

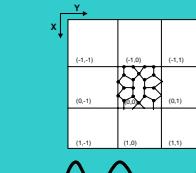
Semenovit (Tetraederschicht)



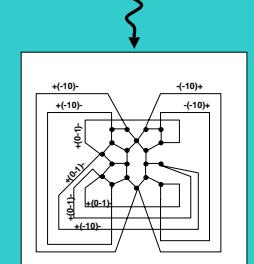
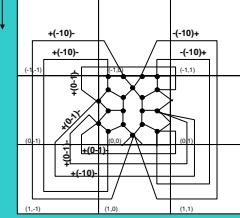
Graphabstraktion



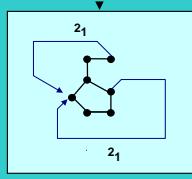
Kristallgraph Semenovit (Schicht)



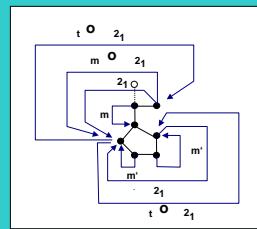
Falten auf Elementarzelle (Richtungsvektoren als Kanten)



Minimale Graphdarstellung



Entfernen redundanter Kanten (impliziert durch Symmetrien)



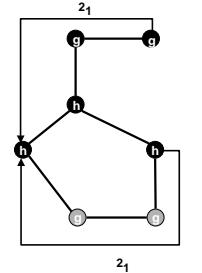
Falten auf asymmetrische Einheit (Symmetrieeoperationen als Kanten)

Reduzierter SL-Graph

DL-Graph (direction labelled)

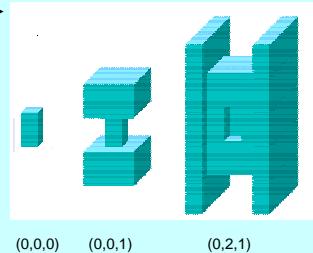
Zielgerichtetes Aufzählen:

Wyckoff-Lagen \dashrightarrow Knoten
Symmetrieeoperationen \dashrightarrow Kanten



- Raumgruppenangabe
- Nachbarschaften (x,y,z)
- Anzahl der Knoten in
 - asymmetrischer Einheit (*von-bis*)
 - Elementarzelle (*maximal*)
- erlaubte Verknüpfungsgrade (*min/max*)
- Dimensionalität
- erlaubte Wyckoff-Lagen
- Bedingungen an Ringvorkommen
-

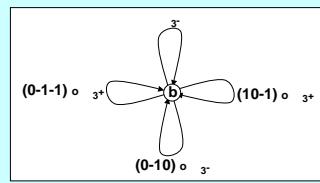
Nachbarschaftshüllen in Raumgruppe 16 (P222)



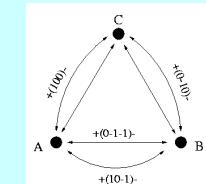
Beispiel: P3₁21 (RG 154), (1,1,2), 1-1, 3, 1-4, 3, c, (6,8)



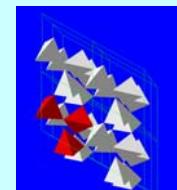
Wende Symmetrien der Raumgruppe auf Kanten an



Entfalte Graphen zu einem DL-Graphen



3D-Einbettung

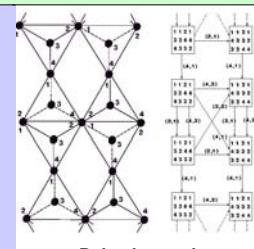


Alpha-Quarz

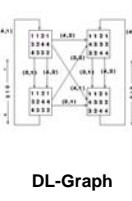
Aufzählen beliebiger Polyedergraphen

Graph für beliebige Polyedertopologien:

- Nummeriere die Ecken der Polyeder in einheitlicher Weise
- Erzeuge zu jedem Polyeder einen Knoten mit der vorgenommenen Nummerierung als Benennung
- Erzeuge für jede gemeinsame Ecke zweier Polyeder eine Kante mit den jeweiligen Nummern als Beschriftung



Falten auf Elementarzelle



Wende Aufzählungsverfahren analog unter Vorgabe der gewünschten Polyedertypen und Verknüpfungsarten.