Rolfdieter FRANK, Koblenz

Chirale Färbungen von Polyedern

Da der Vortragende sich nicht für einen von drei möglichen Anfängen entscheiden konnte, stellte er sie alle drei vor.

1. Anfang

Der Vortragende zeigt zwei kongruente Würfel. Jeder der beiden Würfel hat zwei blaue, zwei gelbe und zwei grüne Flächen, und Flächen mit gleicher Farbe haben stets eine Kante gemeinsam. Eine nähere Betrachtung ergibt, dass auch die Färbungen kongruent sind. Sie sind aber gegensinnig kongruent, so wie linker und rechter Schuh.

Dem Leser wird es das Verständnis des Vortrags sehr erleichtern, wenn er sich die beiden farbigen Würfel herstellt, ebenso das später beschriebene Tetraedermodell eines Aminosäuremoleküls und das Trinkhalmmodell eines Würfels.

Nach Lord Kelvin nennt man ein Objekt chiral (das bedeutet „händig“), wenn es in einer Rechtsform und einer Linksform existiert. Man sieht leicht ein, dass ein Objekt genau dann chiral ist, wenn es keine orientierungsumkehrende Symmetrie besitzt. Ein Würfel etwa ist nicht chiral, weil er Spiegelsymmetrien besitzt; die oben beschriebenen Würfelfärbungen sind jedoch chiral.

2. Anfang

Auf der Titelseite eines aktuellen Jazzmagazins ist der Sänger Thomas Quasthoff abgebildet. Im Jahr 1956 kam das Schlafmittel Contergan auf den Markt. Die Moleküle seines Wirkstoffs Thalidomid sind chiral; ihre Rechtsform hat eine beruhigende Wirkung, während ihre Linksform bei Schwangeren Wachstumsstörungen an den Gliedmaßen des ungeborenen Kindes verursachen kann. Thomas Quasthoff war eines dieser so genannten Contergankinder. Seitdem sind Rechts- und Linksformen von Molekülen ein wichtiger Forschungsgegenstand; das zugehörige Forschungsgebiet heißt Stereochemie.

Ein einfaches Beispiel eines chiralen Moleküls, das der Aminosäure Alanin, kann man sich mit einem Tetraedermodell veranschaulichen: Man denkt sich das zentrale C-Atom im Zentrum des Tetraeders und schreibt jede der vier mit diesem C-Atom verbundenen Atomgruppen H, COOH, NH_2 und CH_3 auf eine eigene Tetraederfläche.

Legt man das Modell auf die CH_3-Fläche, und sieht dann die H-, COOH- und NH_2-Flächen im Gegenuhrzeigersinn um ihre gemeinsame Ecke angeordnet, so liegt das Modell einer Linksaminosäure vor. Proteine bestehen übrigens fast ausschließlich aus Linksaminosäuren.

Im Allgemeinen ist es nicht so einfach, Rechts- und Linksform zu unterscheiden. Bei jeder der beiden vorhin gezeigten Würfelfärbungen gibt es genau zwei Ecken, an denen alle drei Farben zusammen kommen; aber wenn Blau, Gelb und Grün die eine Ecke im Uhrzeigersinn umgeben, so umgeben sie die andere Ecke im Gegenuhrzeigersinn.

3. Anfang

Im Geometrieunterricht der Grundschule werden die Symmetrien ebener Figuren behandelt, und nach dem Spiralprinzip der Didaktik sollte das Thema Symmetrie später auf höherem Niveau wieder aufgegriffen werden. Untersucht man etwa die Symmetrien von Funktionsgraphen, so ist das Niveau nur wenig höher. Eine anspruchsvollere Aufgabe, welche auch den dringend benötigten räumlichen Standpunkt fördert, ist die Bestimmung aller Symmetrien eines Würfels. (Die Symmetriegruppe des Würfels besteht aus 24 Drehungen, 9 Spiegelungen und 15 Drehspiegelungen.) Möchte man nun mit diesen Symmetrien auch etwas anfangen, so bietet sich die folgende Fragestellung an. Es gibt $3^6 = 729$ Flächenfärbungen eines Würfels mit 3 Farben; wie viele nicht kongruente Färbungen gibt es darunter, und wie viele davon sind chiral? Die Antwort kann man mit Hilfe des folgenden Satzes geben.

<u>Satz von Burnside:</u> Bei der Wirkung einer endlichen Gruppe G in einer endlichen Menge F bezeichne f(g) die Anzahl der Fixelemente des Gruppenelementes g. Dann ist die Anzahl der Bahnen gleich dem arithmetischen Mittel aller f(g), also gleich der Summe aller f(g), geteilt durch die Zahl der Elemente von G.

Diesen elementar beweisbaren Satz findet man in vielen Büchern über Kombinatorik, etwa in [1]. Bei seiner Anwendung ist G die Gruppe aller 48 Symmetrien des Würfels und F die Menge aller 729 Flächenfärbungen mit 3 Farben. Nun muss man für jede Symmetrie g die Zahl f(g) bestimmen. Zum Beispiel ist f(id) = 729 und $f(g) = 3^3 = 27$, falls g eine 90°-Drehung ist. Nach dem Satz von Burnside gibt es dann 56 Bahnen, also 56 nicht kongruente Färbungen. Wählt man für G nur die Gruppe aller 24 Drehsymmetrien des Würfels, so erhält man 57 Bahnen, also 57 nicht gleichsinnig kongruente Färbungen. Hieraus folgt, dass genau eine der 56 Färbungen chiral ist. Hätten wir diese chirale Färbung nicht schon zu Anfang kennen gelernt, könnten wir sie jetzt leicht bestimmen: Da Vertauschung der Farben nur kongruente Färbungen liefert, muss jede Farbe auf genau zwei Würfelflächen sein, und gegenüberliegende Würfelflächen dürfen nicht gleich gefärbt sein, da sonst die Färbung eine Spiegelsymmetrie hätte.

Allgemein ergeben die gleichen Überlegungen, dass es genau $(n^6 - 3n^5 - 3n^4 + 11n^3 + 2n^2 - 8n) : 48$ nicht kongruente chirale Färbungen der Flächen eines Würfels mit n Farben gibt. Während man dieses Ergebnis auch bequemer mit der Abzähltheorie von Polya erhalten könnte, ist dies im folgenden Beispiel, welches ich Helmut Emde verdanke, nicht möglich.

Baut man aus 12 gleich langen Trinkhalmen das Kantenmodell eines Würfels, wobei die Trinkhalme nur durch innen laufende Fäden verbunden sind, so ist dieses Modell nicht stabil. Man kann es jedoch stabilisieren, indem man in jede der 6 Würfelflächen einen diagonalen Trinkhalm einfügt, denn dann ist die Fachwerkbedingung $3k - s = 6$ (k = Anzahl der Knoten, s = Anzahl der Stäbe) erfüllt. Da man für jede Würfelfläche zwei mögliche Diagonalen hat, gibt es 2^6 mögliche Stabilisierungen. Das Problem, die Anzahl der nicht kongruenten Stabilisierungen zu bestimmen, ist aber nicht äquivalent zu dem der Flächenfärbungen mit zwei Farben, denn es ist z. B. $f(g) = 0$ für jede 90°-Drehung g. Wenn man alle Zahlen $f(g)$ richtig bestimmt hat, liefert der Satz von Burnside genau 7 nicht kongruente Stabilisierungen des Würfels durch Flächendiagonalen, und von diesen ist genau eine chiral. Dem Leser sei als Übung empfohlen, diese chirale Stabilisierung zu finden.

Fazit

Der Themenkreis „chirale Färbungen von Polyedern“ hat einen Bezug zu wichtigen Fragen der Stereochemie, bietet Gelegenheit, das Thema Symmetrie auf höherem Niveau zu behandeln und gibt einen Eindruck von der Schlagkraft gruppentheoretischer Methoden. Dass er darüber hinaus besonders das Raumanschauungsvermögen fördert, dürfte der Leser selbst bemerkt haben und hat sich in meinen Veranstaltungen für Studierende bestätigt.

Literatur

[1] Konrad Jacobs: Einführung in die Kombinatorik. De Gruyter, Berlin 1983

[2] Henri Brunner: Rechts oder links in der Natur und anderswo. Wiley-VCH, Weinheim 1999