

Modellieren von Microclustern

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

vorgelegt von

Dipl.-Math. Peter Scholl
aus Siegen

eingereicht beim Fachbereich Mathematik
der Universität Siegen

Siegen 2002

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 1.1 | Zusammenfassung | 4 |
| 2 | Geometrische Grundlagen | 6 |
| 2.1 | Parametrische Dichte | 6 |
| 2.2 | Gemischte Volumina und Steiner-Formel | 8 |
| 2.3 | Schranken | 10 |
| 3 | Die dichtesten Kugelpackungen | 11 |
| 3.1 | Gitterpolytope im <i>fcc</i> -Gitter mit dichtesten Facetten | 12 |
| 3.2 | Gitterpolytope mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten | 19 |
| 3.3 | <i>hcp</i> -Packungen mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten | 24 |
| 3.4 | Bipyramidale Packungen | 29 |
| 3.5 | Packungen anderen Typs | 31 |
| 3.6 | Ergebnisse | 32 |
| 3.6.1 | Cluster mit 3-14 Kugeln | 32 |
| 3.6.2 | Cluster mit 15 - 56 Kugeln | 34 |
| 3.6.3 | Cluster mit mehr als 56 Kugeln | 35 |
| 4 | Ikocluster | 37 |
| 4.1 | Einleitung | 37 |
| 4.2 | Abplattung | 38 |
| 4.2.1 | Die konvexe Hülle der Mittelpunkte | 41 |
| 4.2.2 | Volumenanteile über den Facetten | 41 |
| 4.2.3 | Volumenanteile eines Ellipsoids | 42 |
| 4.2.4 | Die Volumenanteile über den Kanten | 44 |
| 4.2.5 | Volumen der Ikosaederpackung für $\rho < 9.1$ | 45 |
| 4.3 | Vergleich mit den dichtesten Kugelpackungen | 46 |
| 5 | Packungen mit minimaler Oberfläche | 47 |
| 5.1 | Eine Ungleichung für die Oberfläche | 47 |
| 5.2 | Klassifizierung der Polytope | 49 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 6 | Energie-Potentiale | 65 |
| 6.1 | Van der Waals Bindung und Lennard-Jones Potential | 66 |
| 6.2 | Morse Potential | 66 |
| 6.3 | Murrel-Mottram Potential | 67 |
| 6.4 | Gupta Potential | 68 |
| A | Bilder ausgewählter Packungen | 70 |
| A.1 | Goldcluster im MM-Potential | 70 |
| A.2 | Bilder der Deltaederpackungen | 72 |
| A.3 | Packungen mit minimaler Oberfläche | 74 |
| A.4 | Packungen mit Dekaedersymmetrie | 75 |
| A.5 | Kugelpackungen | 75 |
| B | Tabellen | 80 |
| B.1 | Facetten der Tetraederschnitte | 80 |
| B.2 | Die dichtesten Groemerpolytope | 82 |
| B.3 | Tabelle der dichtesten hcp-Packungen | 86 |
| B.4 | Dichteste Packungen mit 15-56 Kugeln | 88 |
| | Literaturverzeichnis | 91 |

Abstract

The shape of crystals, quasicrystals and of microclusters depends on energetical optimality criteria. It is known since long, that the energetically optimal shapes are also "dense", with an intuitive idea of density. Since a couple of years it turns out, that besides the energy balance also the volume balance is optimal, i.e. besides the energy, minimal volume or maximal parametric density is an extremum property of crystals and quasicrystals.

In this thesis we consider the connection between these properties for microcluster. After introducing the basic concepts we investigate finite sphere-packings, which are subsets of the fcc-lattice or the hexagonal close packing (hcp). Thus we get a basic set of good packings. Thereby it is shown that octahedral packings, which are of minimal energy, are also dense.

We also state that deltahedral packings are energetically and geometrically optimal. Deltahedral packings do only exist for less than 13 spheres. For more than 12 spheres we determine packings which have minimal surface, like the deltahedra have. This set of packings contains a lot of optimal clusters (e.g. the so called Groemer-packings). We determine the optimal packings for other sets and shapes, like decahedral packings or bipyramidal packings. Packings with icosahedral shape are shown to be optimal if we allow ellipsoids as generalized spheres. Thereby we describe the difficulties of this approach.

All information about the packings is stored in a database which is available from the internet.

Zusammenfassung

Die Gestalt von Kristallen, Quasikristallen und auch von Microclustern wird in der Physik durch energetische Optimalitätskriterien beschrieben. Dabei ist seit langem bekannt, dass die energetisch optimalen Formen auch "dicht" sind, wobei der Dichtebegriff bisher eher intuitiv war. Seit einigen Jahren zeigt sich, dass neben der Energiebilanz auch die Volumenbilanz optimal ist, d.h. neben der Energie ist minimales Volumen, bzw. maximale Parametrische Dichte eine zweite Extremaleigenschaft von Kristallen und Quasikristallen.

In der vorliegenden Arbeit wird dieser Zusammenhang für Microcluster untersucht. Nach der Einführung der zugrundeliegenden Begriffe werden endliche Kugelpackungen, die Teilmengen des fcc-Gitters und der hexagonal dichtesten Packung sind, betrachtet. Diese bilden eine Ausgangsmenge dichter Packungen. Dabei stellt sich heraus, dass oktaederförmige Cluster gute Dichteigenschaften haben.

Ein weiteres wichtiges Ergebnis dieser Arbeit ist, dass Packungen in Deltaederform (ein klassischer Polyedertyp) sowohl energetisch als auch geometrisch optimal sind. Es gibt jedoch keine solchen Packungen für mehr als 12 Kugeln. Daher werden die Packungen, die mit den Deltaedern die Eigenschaft der minimalen Oberfläche gemeinsam haben, bestimmt. Eine Vielzahl der optimalen Cluster liegt in dieser Klasse. Neben diesen werden auch weitere kleinere Klassen von Packungen, z.B. Packungen in Dekaedergestalt oder bipyramidale Packungen, betrachtet. Es wird gezeigt, dass Packungen in ikosaedrischer Form optimal sind, wenn für die zu packenden Körper Ellipsoide zugelassen werden. Gleichzeitig werden einige Schwierigkeiten dieses Ansatzes aufgezeigt.

Alle im Laufe der Arbeit gewonnen Daten werden in einer Datenbank gespeichert und im Internet zur Verfügung gestellt.

Kapitel 1

Einleitung

Die Gestalt von Kristallen, Quasikristallen und auch von Microclustern wird durch energetische Optimalitätskriterien beschrieben. Dabei ist seit langem bekannt, dass die energetisch optimalen Formen (bezüglich der vorgegebenen Struktur) auch "dicht" sind, wobei der Dichtebegriff bisher eher intuitiv war und sich auf einzelne Phänomene bezieht (z.B. Miller-Indizes). Seit einigen Jahren zeigt sich, dass die Parametrische Dichte das geeignete geometrische Hilfsmittel ist, um für konvexe Kristalle, Quasikristalle und Cluster zu zeigen, dass neben der Energiebilanz auch die Volumenbilanz optimal ist, d.h. neben der minimalen Energie ist minimales Volumen (bzw. maximale Parametrische Dichte) eine zweite Extremaleigenschaft von Kristallen, Quasikristallen und Clustern. Thema und Aufgabe dieser Arbeit ist es, dies für Microcluster nachzuweisen.

Die Forschung auf dem Gebiet der Microcluster hat seit den späten 70er Jahren eine rasante Entwicklung erfahren. In den Jahren zuvor konzentrierte man sich auf einzelne Atome oder Partikel oder auf die Eigenschaften von Festkörpern. Der Bereich der Cluster, d.h. Atomanordnungen von weniger als einigen hundert oder vielleicht tausend Atomen blieb nahezu unbeachtet. Das Interesse an Microclustern ist vor allem dadurch gewachsen, dass die Cluster stark von den Festkörpern abweichende Eigenschaften aufweisen. Cluster treten in Kugelform oder als Mikrokrystalle mit einer Größe von ca. 1 - 50 nm auf¹. Bei den Mikrokrystallen liegt die Größenordnung der Facetten in diesem Bereich.

Gestattet die Größe der Festkörper die für ausreichend genaue Betrachtungen vereinfachende Annahme einer unendlichen Ausdehnung, so ist dies offensichtlich bei Clustern nicht zulässig. Denn ein großer Anteil der Atome eines Clusters befindet sich auf der Oberfläche, so findet man z.B. bei einem oktaedrischen Cluster aus 44 Kugeln 38 auf der Oberfläche und nur 6 im Inneren. Bei den Clustern werden viele unterschiedliche polyedrische Formen festgestellt, z.B. die schon angedeutete oktaedrische Form, die sich problemlos zu einer raumfüllenden Lagerung ausweiten lässt, aber man findet auch Cluster in ikosaedrischer Form,

¹Atomdurchmesser liegen im Bereich einiger Ångström. (1 Å = 0,1 nm = 10⁻¹⁰m)

die aufgrund ihrer 5-zähligen Symmetrie nicht für eine gitterförmige raumfüllende Anordnung geeignet sind. Diese Symmetrien stellt man auch bei Quasikristallen fest, die aber nicht die sich wiederholende Struktur von Gittern, die man normalerweise mit Kristallen verbindet, zeigen. Bei der Untersuchung von Goldclustern, einem Metall, das in einem Gitter kristallisiert, wurden dennoch 5-zählige Symmetrien der Cluster festgestellt.

Cluster sind für die Forschung interessant, weil sie zu Materialien mit neuen Eigenschaften führen. Sie zeigen unerwartete chemische Reaktionen und liefern neue Ansätze für das Verständnis der Materie, z.B. im Bezug auf Phasenübergänge, der Kristallisation oder der Katalyse.

Modelle von Microclustern basieren zumeist auf der vereinfachenden Annahme, dass man sich Atome mit dem Kern und der Elektronenhülle als Kugeln bzw. Ellipsoide vorstellen kann. Das klassische Atommodell von Bohr geht davon aus, dass die Elektronen in Bahnen mit festgelegten Abständen vom Atomkern um diesen kreisen. Dies führt zu einer kugelförmigen Gestalt. Bei einem Kristall oder einem Microcluster, also einer Anhäufung mehrerer gleicher Atome, kann man die Atome als Kugeln mit gleichem Radius annehmen. Dies ist in der Kristallografie nicht unüblich. Durch diesen Ansatz geraten Kugelpackungen ins Blickfeld der Forschung. Alle physikalischen Modelle von Microclustern basieren auf dem Energieminimierungsprinzip, d.h. dass ein Körper immer bestrebt ist, den Zustand minimaler potentieller Energie anzunehmen. Dennoch wird im Zusammenhang mit Clustern häufig der für Kugelpackungen offensichtlich nahe liegende Begriff der Dichte verwendet. Es wird in manchen Arbeiten behauptet, die geometrische Lagerung der Atome sei dicht, ohne dass auf die Definition des verwendeten Dichtebegriffs näher eingegangen wird. Beispiele aus der Kristallografie stützen diese Annahme. Hier treten besonders häufig die hexagonal-closest-packing (hcp) (z.B. bei Berillium, Magnesium und Zink) und das face-centered-cubic lattice (fcc)² (z.B. bei Gold, Kupfer und Kalzium) als Strukturen auf. Beide haben die gleiche räumliche Dichte und es wurde schon von Kepler (1611) vermutet, dass keine Kugelpackung im dreidimensionalen Raum eine größere Dichte hat. Lange Zeit fehlte ein Beweis für diese allgemein als wahr angenommene Vermutung, was zu einiger Frustration, zumindest auf Seiten der Mathematiker, führte. Thomas Hales erlöste 1997 die Wissenschaft aus diesem Dilemma und lieferte einen wahrscheinlich vollständigen Beweis der Keplervermutung [Hal].

Bei Kristallen handelt es sich bezüglich der Anzahl um sehr große Anordnungen von Atomen, d.h. dass die Randeinflüsse auf die Struktur vernachlässigt werden können. Daher ist es nicht verwunderlich, dass viele Kristalle in einer Konfiguration kristallisieren, die der dichtesten unendlichen Kugelpackung entspricht. Ausnahmen treten z.B. dann auf, wenn die Bindungseigenschaften eine andere Struktur fordern, wie dies z.B. bei den Alkalimetallen der Fall ist, die alle in der Struktur body-centered-cubic kristallisieren. Die unendliche Kugel-

²Manchmal auch mit ccp (cubic close-packed) bezeichnet

packung in diesem Gitter erreicht nur ca. 92 % der Dichte des fcc-Gitters oder der hcp-Packung.

Im Falle von Microclustern ist es aber unerlässlich, endliche Kugelpackungen zu betrachten und damit den Einfluss des Randes auf die gesamte Konfiguration zu berücksichtigen. Der physikalische Ansatz, die Form der Cluster über die potentielle Energie zu bestimmen, gerät dadurch nicht in Schwierigkeiten, da er sich problemlos auf eine kleine Zahl von Atomen anwenden lässt, aber bei der Frage nach der dichtesten Konfiguration stellt sich unmittelbar die Aufgabe, ein Maß für die Dichte zu finden. Das Problem besteht vornehmlich darin, einen angemessenen Vergleichskörper zu finden, der im unendlichen Fall durch den ganzen Raum gegeben ist. Denn dort wird das Verhältnis des von den Kugeln überdeckten Raumes zum gesamten Raum betrachtet. Ein natürlicher Ansatz für den Vergleichskörper einer endlichen Kugelpackung ist die konvexe Hülle aller Kugeln. Dieser von dem norwegischen Mathematiker A. Thue 1892 eingeführte Ansatz erlaubt die notwendige Flexibilität der Packungen, ist aber noch zu speziell, um den Einfluss des Randbereichs einer Packung angemessen zu berücksichtigen. Eine von Betke, Henk und Wills [BHW] 1994 eingeführte Verallgemeinerung dieser Idee, die Parametrische Dichte, wie sie im Kapitel über geometrische Grundlagen beschrieben wird, ist flexibel genug und ermöglicht interessante Entdeckungen in der reinen Mathematik. So konnte z.B. die von Laszlo Fejes Toth aufgestellte Wurstvermutung für Dimension größer 42 bewiesen werden. Diese Vermutung besagt, dass die dichtesten Kugelpackungen im Bezug auf die konvexe Hülle ab Dimension 5 die wurstförmige lineare Aneinanderreihung der Kugeln ist. Ebenso konnte mittels der Parametrischen Dichte eine Verbindung zwischen Wulff-shape und Kugelpackungen geschaffen werden. Die Wulff-shape beschreibt die asymptotische Form einer Kugelpackung in einem Gitter abhängig vom Parameter. Dabei ist die innere Struktur des Kristalls vorgeschrieben; im einfachsten Fall durch ein mathematisches Gitter, sonst durch die Superposition mehrerer Gitter, die mit unterschiedlich großen Kugeln besetzt sind. Dadurch lassen sich die Kugelanzahlen asymptotisch bestimmen (Erhart-Polynome). Da sich das Volumen auch durch ein Polynom (Steiner-Polynom) beschreiben lässt, lässt sich die bezüglich der Parametrischen Dichte optimale Gestalt bei vorgegebener Struktur erstaunlich gut ermitteln. Dies brachte eine erneute Verbindung zwischen Kristallografie und Kugelpackungen, da mit der Wulff-shape die Formen der Kristalle erklärt werden. Auch auf dem Gebiet der Quasikristalle konnten mit der Parametrischen Dichte Voraussagen über asymptotische Formen gemacht werden, die sich erstaunlich gut mit realen Beobachtungen decken [BS] [BSW]. Die Parametrische Dichte ist nur für konvexe Formen brauchbar, bietet also keine Möglichkeit, strukturelle Aussagen über Fullerene oder Schneeflocken zu machen.

1.1 Zusammenfassung

Einzelresultate stützen die Annahme, dass Cluster ebenso wie Kristalle und Quasikristalle ihre Form (Gestalt) nicht nur nach energetischen Optimalitätskriterien annehmen, sondern auch nach geometrischen, bei denen die "Dichte" maximiert, bzw. das von ihnen eingenommene Volumen minimiert wird.

Der verwendete Dichtebegriff, der sich als sinnvoll herausgestellt hat, also die schon erwähnte Parametrische Dichte, wird in Kapitel 2 beschrieben. Dabei wird gleichzeitig eine Vorstellung von dem Bereich vermittelt, den die Cluster einnehmen und dessen Volumen bei einer optimalen Packung minimiert wird. In diesem Kapitel werden auch einige der mächtigen Hilfsmittel der Brunn-Minkowski Theorie vorgestellt, die die mathematische Behandlung überhaupt erst möglich machen.

Kapitel 3 widmet sich den dichtesten Clustern, bzw. den angewendeten Verfahren zur Auffindung solcher Cluster. Anders als bei Kristallen ist bei Clustern a priori keine Struktur vorgegeben. Da die Zahl der Atome bzw. Kugeln klein ist, hängt die optimale Gestalt und damit auch die optimale Struktur direkt von der Anzahl ab. Dies führt dazu, dass einige Anzahlen, die "magic numbers" sich von den anderen abheben. Als Regel, zu der es aber immer Ausnahmen gibt, kann man sagen: "Je kleiner die Anzahl, desto stärker die Abhängigkeit". Z.B. ist "die" optimale Konfiguration für $n = 5$ hcp, für $n = 6$ fcc, für $n = 7$ pentagonal und für $n = 8$ keines davon (s. Abb. A.2). Dennoch werden besonders Konfigurationen betrachtet, die in den dichtesten unendlichen Packungen fcc und hcp enthalten sind. Von diesen kann eine gute Dichte erwartet werden. Die Dichte der endlichen Packungen wird dabei auch von der Qualität, d.h. der Dichte der Außenbereiche bzw. der Oberfläche beeinflusst. Hat eine fcc-Packung, wie die Dichte der unendlichen Packungen zeigt, keine Vorteile gegenüber hcp in Bezug auf Minimierung des "inneren" Volumens einer Packung, so gibt es doch bzgl. der Randflächen Vorteile. Das fcc-Gitter erlaubt volldimensionale Packungen deren Oberflächen eine dichte Struktur aufweisen, nämlich die zweidimensional dichteste: das hexagonale Gitter. Bei einer volldimensionalen hcp-Packung können dagegen nicht alle Facetten in diese Konfiguration vorliegen. Die fcc-Packungen, die die beschriebene Oberflächeneigenschaft haben, heißen, in Anlehnung an aus dem zweidimensionalen bekannte Begriffe, Groemerpackungen. Darüber hinaus werden weitere Strukturen betrachtet, die zum Teil ebenfalls dichte Oberflächenstrukturen haben können, oder die aufgrund anderer Gesichtspunkte als gute Kandidaten in Frage kommen.

Da die Fragestellung nach optimalen Clustern zu einem großen Teil physikalisch motiviert ist, ist besonders der Vergleich mit Strukturen interessant, die unter energetischen Potentialen optimal sind. Dabei sind besonders die von Wilson und Johnston [WJ] untersuchten Goldcluster im Murrel-Mottram Potential, Lennard-Jones Cluster aus der Cambridge-Cluster-Database [CCD] und Aluminium-Cluster im Gupta-Potential [TJW] zu erwähnen. Einige dieser Clu-

ster findet man unter den Dichtesten. Besonders auffallend sind die Übereinstimmung in den Potentialen untereinander und mit den dichtesten Packungen für weniger als 14 Kugeln bzw. Atome. Die physikalischen Eigenschaften und die Unterschiede der einzelnen Potentiale werden in Kapitel 6 beschrieben.

Die Ikosaederstruktur ist unter anderem für Lennard-Jones Cluster dominant [DW1]. Durch ihre nahezu kugelförmige Gestalt und ihre Symmetrie sind die Mackay-Ikosaeder potentielle Kandidaten für gute Packungen. Das Ikosaeder mit 13 Kugeln ist optimal für das Lennard-Jones Potential, das Morsepotential, das Murrel-Mottram Potential und auch andere Potentiale. Daher verwundert es, diese Konfiguration nicht unter den dichtesten Packungen bezüglich Parametrischer Dichte zu finden. In Kapitel 4 wird versucht, hierfür eine Erklärung zu finden. Das Konzept des energetischen Potentials lässt Abstände von Atommittelpunkten zu, die kleiner als der Gleichgewichtsabstand sind. Dies entspricht im Kugelmodell der Atome einer Verformung, oder so genannten "soft spheres". Diese Verformung und die Unterschreitung des Mindestabstands ist in der geometrischen Betrachtungsweise für die Parametrische Dichte nicht zulässig. Um dennoch ein vergleichbares Maß für das Ikosaeder mit 13 Kugeln zu erhalten, wird der Begriff der parametrischen Dichte modifiziert. Das Prinzip der Volumen-Minimalität bleibt natürlich unverändert. Jetzt aber werden "hard balls", also die festen Kugeln durch "soft balls" desselben Volumens ersetzt. Geometrisch sinnvoll sind volumengleiche Rotationsellipsoide, die sich berühren und daher in radialer Richtung (des Clusters) abgeplattet sind. Dies sind keine Translate voneinander und daher muss die elegante Methode der Parametrischen Dichte, die auf dem Steinerpolynom beruht, leicht modifiziert werden. Eine aufwändigere Rechnung ist nötig. Diese zeigt, dass die Ikosaederpackung unter Deformation der Kugeln einen Konkurrenten zu den dichtesten Packungen darstellt und diese sogar übertrifft.

In Kapitel 5 werden Packungen mit minimaler Oberfläche bezüglich der auf der Oberfläche befindlichen Kugeln untersucht. Dazu gehören insbesondere die Deltaeder (s. Abb. A.2), die sowohl energetisch als auch geometrisch zu den optimalen Packungen gehören. Ebenso haben die schon erwähnten Groemerpackungen unter diesem Gesichtspunkt minimale Oberfläche. Es wird gezeigt, dass es nur endlich viele Klassen dieser oberflächenminimierenden Packungen geben kann, die vollständig beschrieben werden.

Bei der Betrachtung dieser Packungen entsteht eine große Menge an Informationen über die verschiedenen Packungskonfigurationen. Diese Daten werden via Internet in der Sphere-packing Database [SPDB] zugänglich gemacht. Dort können Informationen über mehr als 3000 Packungen mit bis zu 816 Kugeln (Tetraeder mit 16 Kugeln Kantenlänge) abgerufen werden. Es stehen die Werte für die gemischten Volumina oder auch Bilder aller Packungen zur Verfügung. Mit diesem Hilfsmittel ist es leicht möglich, einen Überblick über die in dieser Arbeit betrachteten dichtesten Packungen zu gewinnen.

Kapitel 2

Geometrische Grundlagen

2.1 Parametrische Dichte

In dieser Arbeit werden Microcluster als Kugelpackungen und in einem Ausnahmefall (Kapitel 4) auch als Ellipsoidpackungen betrachtet. Bei der geometrischen Betrachtungsweise sucht man nach besonders “dichten” Packungen als Analogon zu den Energieminima bei physikalischer Sichtweise. Das Ziel ist es, die betrachteten Kugeln oder Körper möglichst dicht im 3-dimensionalen Raum anzuordnen, so dass diese sich nicht überlappen. Ohne die Komplexität der Formulierung zu steigern, kann dieses Problem auf den d -dimensionalen Raum und Translate beliebiger Körper verallgemeinert werden. Daher wird in diesem Kapitel bis zur Einführung der Steiner-Formel der d -dimensionale Raum zu Grunde gelegt. Hier stellt sich die Frage, wie die Dichte einer solchen Konfiguration bewertet werden kann. Wann ist eine Konfiguration dichter als eine andere? Eine Möglichkeit sind sicherlich physikalische Potentiale, wie z.B. Lennard-Jones oder Morse (vgl. Kapitel 6) oder der geometrische Vergleich des Volumens der konvexen Hülle der Packungen. Letzteres ist bereits in vielen klassischen Arbeiten unter anderem von Graham, Witsenhausen, Zassenhaus [GWZ] untersucht worden. Die in dieser Arbeit verwendete Parametrische Dichte ist eine von Betke, Henk und Wills ([W1], [BHW]) eingeführte Verallgemeinerung dieser naheliegenden Dichtedefinition. Diese Verallgemeinerung ermöglicht unter anderem eine Verbindung von finiten und infiniten Packungen, wie sie ohne den eingeführten Parameter nicht möglich wäre (siehe [BHW]).

Definition 2.1.1 *Eine Menge $C \subset \mathbb{R}^d$ heißt Packungskonfiguration zu einem konvexen Körper K , wenn für alle $x, y \in C$ gilt: $(x + \text{int}(K)) \cap (y + \text{int}(K)) = \emptyset$. $\mathcal{P}(K)$ sei die Menge aller Packungskonfigurationen zum Körper K und $\mathcal{P}_n(K)$ die Menge aller Packungskonfigurationen, die aus n Punkten bestehen. Die konvexe Hülle einer Packungskonfiguration heißt Packungspolytop.*

Definition 2.1.2 Sei C_n eine Packungskonfiguration zum konvexen Körper K mit n Punkten und $\rho \in \mathbb{R}, \rho > 0$. Dann ist

$$\delta(C_n, K, \rho) := \frac{nV(K)}{V(\text{conv}(C_n) + \rho K)}$$

die parametrische Dichte der Packung C_n zum Körper K für den Parameter ρ . „+“ bezeichne die Minkowskisumme der Mengen. Des Weiteren sei $\delta(K, n, \rho) = \max\{\delta(C_n, K, \rho) : C_n \in \mathcal{P}_n(K)\}$ und $\delta(K, \rho) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \delta(K, n, \rho)$.

Für festes n entspricht eine Packung mit maximaler Dichte einer Packung mit minimalem $V(\text{conv}(C_n) + \rho K)$. Dabei stellt sich für kleine ρ der (für physikalische Betrachtungen unrealistische) Entartungseffekt ein, dass lineare Arrangements, sogenannte Wurstpäckungen, optimal sind:

Definition 2.1.3 Sei der zu packende Körper die Kugel B^d und $u \in E^d, \|u\| = 1$, dann heißt $S_n = \{2iu : i = 1, \dots, n\}$ Wurstpäckungskonfiguration der Kugel und $S_n + B^d$ Wurstpäckung der Kugel.

Solche linearen Konfigurationen lassen sich auch für andere Körper finden. Dabei heißt die Richtung u (nicht notwendigerweise $\|u\| = 1$), für die die Packung am dichtesten ist, Wurstrichtung.

Wurstpäckungen liefern eine für manche Anwendungen (siehe z.B. [SW]) ausreichende untere Schranke für die maximale Dichte von Packungen. Vorteilhaft für die Verwendung als Schranke ist die Existenz einer Wurstpäckung für jede Anzahl von Kugeln. In dieser Arbeit soll eine andere untere Schranke für Packungen untersucht werden, die auf Tetraeder- bzw. Oktaederförmigen Packungen beruht. Für bestimmte Parameter ρ wird diese die Wurstpäckungsschranke verbessern, für kleine Parameter ist die Wurstpäckungsschranke allerdings immer optimal. Ab Dimension fünf besagt die Wurstvermutung, die für Dimensionen größer 42 bewiesen ist, dass die Wurstpäckung für Parameter $\rho \leq 1$ optimal ist. Somit kann die Wurstpäckungsschranke nicht verbessert werden.

Für die Betrachtung dichtester Packungen fehlt noch ein Begriff, der eine offensichtliche Eigenschaft dichtester Packungen beschreibt. Eine Packung ist sicherlich niemals optimal im Bezug auf Minimierung des von ihr eingenommenen Volumens, falls in ihrem Inneren noch Platz für einen weiteren Körper bzw. eine Kugel vorhanden ist. Denn sonst könnte ein Körper an einer Ecke der konvexen Hülle entfernt und in die Mitte verschoben werden und somit $V(\text{conv}(C_n) + \rho K)$ verkleinert werden. Packungen bei denen dies nicht möglich ist, heißen *gesättigt*:

Definition 2.1.4 Sei C eine Packungskonfiguration zum Körper K , so dass für alle $x \in \text{conv}(C)$ gilt: $\bigcup_{y \in C} (y + \text{int}(K)) \cap (x + \text{int}(K)) \neq \emptyset$, dann heißt C gesättigt.

2.2 Gemischte Volumina und Steiner-Formel

Zur Berechnung der parametrischen Dichte ist es notwendig, das Volumen des Parallelkörpers $K + \rho B^d$ eines gegebenen konvexen Körpers K zu berechnen. Die Brunn-Minkowski-Theorie liefert die nötigen Hilfsmittel ([Schn], [BF]).

Satz 2.2.1 *Seien $n \in \mathbb{N}$, K_i konvexe Körper im E^d , $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq n$, $K := \sum_{i=1}^n \lambda_i K_i$. Dann ist $V(K)$ ein homogenes Polynom der λ_i vom Grad d , d.h., es gibt nur von K_1, \dots, K_n abhängige, symmetrische Koeffizienten $V(K_{\rho_1}, \dots, K_{\rho_d}) \in \mathbb{R}$ mit*

$$V(K) = \sum_{\rho_1=1}^n \cdots \sum_{\rho_d=1}^n V(K_{\rho_1}, \dots, K_{\rho_d}) \lambda_{\rho_1} \cdots \lambda_{\rho_d}$$

Definition 2.2.2 *Die Koeffizienten $V(K_{\rho_1}, \dots, K_{\rho_d})$ heißen gemischte Volumina von $K_{\rho_1}, \dots, K_{\rho_d}$.*

Die gemischten Volumina haben nützliche Eigenschaften. Unter anderem gilt:

Satz 2.2.3 *$V(K_{\rho_1}, \dots, K_{\rho_d})$ ist additiv, d.h. für alle konvexen Körper K, K' , für die $K \cup K'$ wieder ein konvexer Körper ist, gilt*

$$\begin{aligned} V(K \cup K', K_2, \dots, K_d) + V(K \cap K', K_2, \dots, K_d) \\ = V(K, K_2, \dots, K_d) + V(K', K_2, \dots, K_d). \end{aligned}$$

*Solche Funktionale nennt man auch **Bewertungen**.*

Für unseren speziellen Fall des Volumens eines Parallelkörpers im d -dimensionalen euklidischen Raum lässt sich Satz 2.2.1 einfacher formulieren.

Satz 2.2.4 (Steiner) *Sei K ein konvexe Körper im E^d , dann gilt für das Volumen des Parallelkörpers:*

$$V(K + \rho B^d) = \sum_{i=0}^d \binom{d}{i} V_i(K, B^d) \rho^{d-i},$$

mit $V_i(K, B^d) = V(\underbrace{K, \dots, K}_i, \underbrace{B^d, \dots, B^d}_{d-i})$.

Dabei ist $V_d(K, B^d) = V(K)$ und $V_0(K, B^d) = V(B^d)$. Für $\dim(K) \leq j$ ist $V_i(K, L) = 0$ für alle $i > j$.

Im Fall von $d = 3$ ist $V(K + \rho B^3) = \frac{4}{3}\pi\rho^3 + M(K)\rho^2 + O(K)\rho + V(K)$. Dabei ist V das Volumen, O die Oberfläche und M das Integral der mittleren Krümmung (siehe z.B. [BF]). Die Bewertungseigenschaft der gemischten Volumina induziert diese auch bei den Größen V, O und M . Im folgenden wird nur noch der 3-dimensionale Raum betrachtet.

Die Größen $V_i(K, B^d)$ lassen sich mit Hilfe des *äußeren Normalenkegels* und des *äußeren Winkels* (s. [Schn]) auch geometrisch interpretieren.

Definition 2.2.5 Sei P ein Polytop und F eine Seite von P . Dann heißt

$$N(F, P) = \{u \in \mathbb{R}^d : ux \leq uy, \forall x \in P, y \in F\}$$

äußerer Normalenkegel zu F . Ferner heißt

$$\gamma(F, P) = \frac{V(B^d \cap N(F, P))}{V(B^d \cap \text{aff}(N(F, P)))}$$

äußerer Normalenwinkel von F , wobei die auftretenden Volumina in der affinen Hülle des Normalenkegels ($\text{aff}(N(F, P))$) gemessen werden.

Der Zusammenhang zwischen mittlerer Krümmung und den Kanten eines 3-dimensionalen Polytops wird durch die Zerlegung des äußeren Parallelkörpers in Volumenanteile, die in verschiedenen Potenzen mit ρ wachsen, klar (s. Abb. 2.1). Der blaue Anteil ist das zugrunde liegende Polytop, in diesem Fall ein Tetraeder. Der gelbe Anteil besteht aus Prismen auf den Facetten mit Höhe ρ . Das Volumen dieses Anteils wächst linear mit ρ . Mit ρ^2 wächst der grüne Anteil, der aus Zylinderstücken entlang der Kanten besteht, und mit ρ^3 wachsen die roten Kugelsektoren an den Ecken, die zusammengenommen bei jedem konvexen Polytop eine Vollkugel ergeben.

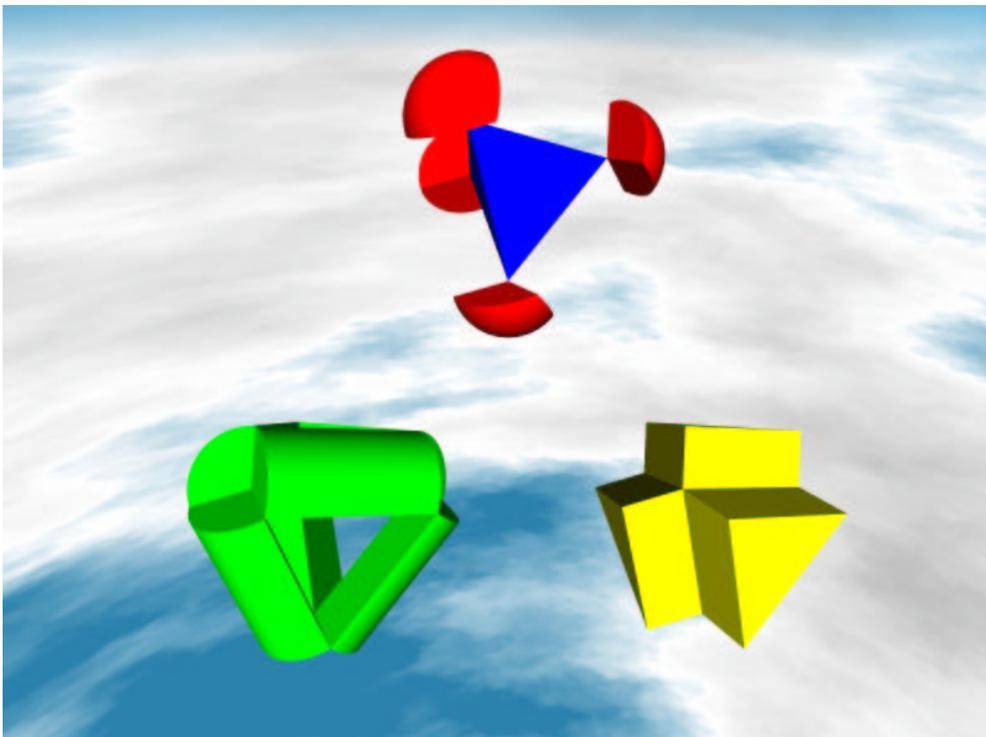


Abbildung 2.1: Der äußere Parallelkörper eines Tetraeders in Volumenanteile zerlegt, die unterschiedlich schnell mit ρ wachsen.

Für den speziellen Fall einer Wurstpäckung erhält man für das Volumen von $S_n + \rho B^3$:

$$V(S_n + \rho B^3) = \frac{4}{3}\pi\rho^3 + 2(n-1)\pi\rho^2$$

Es ergibt sich sofort, dass es für jedes $n \in \mathbb{N}$ ein $\rho_{s,n}$ gibt, so dass $V(S_n + \rho_{s,n}B^3) \leq V(C_n + \rho_{s,n}B^3)$, $\forall C_n \in \mathcal{P}_n(B^3)$. $\rho_{s,n}$ heißt **Wurst-Parameter**.

2.3 Schranken

Wie oben erwähnt, werden im Folgenden weitere Schranken für Packungskonfigurationen untersucht. Schranken sind bei der Suche nach optimalen Packungen wichtig, da sie es unter anderem erlauben, schlechte Packungen schnell auszuschließen.

Im Folgenden werden spezielle Kugelpäckungen betrachtet, die eine schalenartige Struktur aufweisen.

Definition 2.3.1 Die gesättigten Packungskonfigurationen P_i einer Menge $\{P_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ heißen Schalenpackungskonfigurationen, wenn für je zwei Packungskonfigurationen P_i, P_j der Menge gilt:

1. $i \text{conv}(P_j) = j \text{conv}(P_i)$ bis auf Translation
2. $P_i \subset P_j$ für $i \leq j$
3. Die Anzahl der gepackten Kugeln $p(i)$ ist ein Polynom dritten Grades in i mit $p(0) = 1$ und $p(1)$ gleich der Anzahl der Ecken des Packungspolytops

Eine Schalenpackungsform ist ein Dilatat eines Packungspolytops einer Schalenpackungskonfiguration.

Tetraeder und Oktaeder sind z.B. mögliche Schalenpackungsformen. Beim Tetraeder gilt $p(i) = \binom{i+3}{3}$. Für eine Schalenpackung ist $V(\text{conv}(P_i) + \rho B^3)$ ein Polynom dritten Grades in i , somit erhält man eine untere Schranke für die Dichte, in dem man die Anzahl der Kugeln von P_i als Vergleichskörper das Packungspolytop $\text{conv}(P_{i+1})$ zuordnet.

Da die Funktion $p(i)$ für $i \geq 0$ monoton ist, ist sie dort invertierbar. Somit kann man i als Funktion der Kugelanzahl n darstellen und erhält:

Satz 2.3.2 Sei P eine Schalenpackungskonfiguration dann gilt:

$$\delta(n, B^3) \geq \frac{n \cdot \kappa_3}{\kappa_3 \cdot \rho^3 + M(i(n)) \cdot \rho^2 + O(i(n)) \cdot \rho + V(i(n))}$$

Für große ρ ist eine solche Schranke schnell besser als die Wurstschanke. Die entsprechende Schranke für das Tetraeder übertrifft für $\rho = 1.2$ schon ab $n = 188$ die Wurstschanke.

Kapitel 3

Die dichtesten Kugelpackungen

Um die dichtesten Packungen zu erhalten, wurden mehrere Verfahren angewandt. Besonderer Wert wurde dabei auf die *fcc*-Gitterpackung und periodische hexagonal geschichtete Packungen gelegt, da diese die dichtesten Konfigurationen für infinite Packungen liefern und viele Kristalle sich in diesen Konfigurationen bilden. In diesem Abschnitt werden die verwendeten Verfahren erläutert und die Algorithmen beschrieben. Es wurden folgende Packungen untersucht:

1. *fcc*-Packungen mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten
2. *hcp*-Packungen mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten
3. bipyramidale Packungen
4. Packungen mit Schalenstruktur
5. Deltaeder
6. Packungen aus anderen Quellen

Dabei wurde das Computeralgebrasystem Maple und die Software *polymake* eingesetzt. *Polymake* wird von Ewgenij Gawrilow und Michael Joswig seit 1997 entwickelt und gestattet auf verschiedene Weise die konvexe Hülle einer Menge von Punkten zu berechnen. Es liefert das sich ergebende Polytop in H-Form (Menge der begrenzenden Hyperebenen) und in V-Form (Menge der Ecken). Zudem kann man auch die kombinatorische Gestalt in Form von Inzidenzen von *polymake* ermitteln lassen. Unter Verwendung von *polymake* wurde in Maple ein Algorithmus entwickelt, der aus einer gegebenen Punktmenge die konvexe Hülle bestimmt (*polymake*) und daraus dann das Volumen, die Oberfläche und die mittlere Krümmung (Maple). Dabei werden die Facetten auf Grund der von *polymake* erhaltenen Inzidenzen trianguliert, der Flächeninhalt dieser Dreiecke berechnet und dann der Flächeninhalt der einzelnen Facetten berechnet. Aus diesen kann man sofort die Oberfläche bestimmen und durch Zerlegung des Polytops in Pyramiden über den Facetten mit einem (inneren) Punkt als Spitze dann auch das

Volumen. Da die Wahl dieses Punktes beliebig ist, wird eine Ecke gewählt. Die Mittlere Krümmung wird nun für jede Kante einzeln ermittelt, indem der äußere Normalenwinkel einer jeden Kante aus den Normalenvektoren der angrenzenden Facetten berechnet wird und dieser mit der Länge der Kanten multipliziert wird. Diese Art der Berechnung kommt bei allen oben angegebenen Packungen zur Anwendung, außer bei den *fcc*-Packungen und den bipyramidalen Packungen, die eine elegantere Methode zulassen.

3.1 Gitterpolytope im *fcc*-Gitter mit dichtesten Facetten

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit Gitterpolytopen im *fcc*-Gitter, die dichteste Facetten aufweisen, d.h., dass von den Gitterpunkten, die in einer Facette liegen, ein 2-dimensionales Untergitter des *fcc*-Gitters mit minimaler Determinante aufgespannt wird. Dies ist ein hexagonales Gitter. Ein solches Polytop heiße analog zu [SW] Groemerpolytop und hat höchstens 8 und mindestens 4 Facetten mit Normalenvektoren $\pm u_1, \pm u_2, \pm u_3, \pm u_4$, die in die Richtung der Mediane der Oktantanten zeigen. Hierbei habe das *fcc*-Gitter die Basis

$$B = \left\{ \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

Die Bezeichnung Groemerpolytop bzw. Groemerpolygon wurde für Untersuchungen an Kreispackungen von Groemer und Wegner geprägt. Ein Groemerpolygon ist ein Gitterpolytop eines hexagonalen Gitters, so dass zwei benachbarte Gitterpunkte jeder Kante den Abstand 2 haben. Diese Polytope haben für Kreispackungen gewisse extremale Eigenschaften ([G],[We],[Schü]).

Im 3-dimensionalen Raum lassen sich Groemerpolytope als Schnitt aus regulären Tetraedern auffassen. Zu jedem Normalenvektor einer dichtesten Facette gibt es genau drei weitere Normalenvektoren zu dichtesten Facettenrichtungen, so dass diese vier Vektoren die Facettennormalen eines regulären Tetraeders sind. Diese Eigenschaft zerlegt die Menge der acht Vektoren $\pm u_1, \pm u_2, \pm u_3, \pm u_4$ in zwei disjunkte Mengen mit jeweils 4 Vektoren. Davon betrachte man eine Menge als Facettennormalen eines umgebenden Tetraeders und die andere führt dann zu Schnitten „erster Art“ an dessen Ecken. Grundlegend für das verwendete Verfahren ist die Eigenschaft, dass sich alle Groemerpolytope aus regulären Gittertetraedern herauschneiden lassen. Solche Tetraederschnitte (Abb. 3.1) werden nun betrachtet.

Von einem gegebenen Tetraeder mit Kantenlänge $2k$ schneidet man an dessen Ecken v_1, v_2, v_3, v_4 Tetraeder der Kantenlängen $2k_1, \dots, 2k_4$ ab. Diese Schnitte dürfen sich überlappen. Die Kante zwischen zwei Ecken v_i, v_j , $i \neq j$ wird mit

K_{ij} bezeichnet. Eine Kante des regulären Gittertetraeders mit Kantenlänge $2k$ enthält $k + 1$ Gitterpunkte.

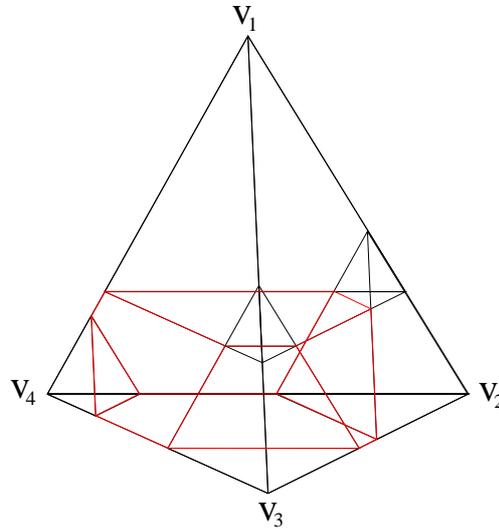


Abbildung 3.1: Tetraederschnitt

Definition 3.1.1 Seien $k, k_1, k_2, k_3, k_4 \in \mathbb{N}_0$ gegeben mit $k \geq k_1 \geq \dots \geq k_4$, dann sei T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k ein Tetraederschnitt, d.h. ein Polytop, das wie oben beschrieben aus einem regulären Tetraeder herausgeschnitten wurde. Im Falle keines Schnittes bezeichne $T^k = T_{0,0,0,0}^k$ das vollständige Tetraeder.

Bemerkung Aufgrund der Symmetrie des Tetraeders kann die Einschränkung $k \geq k_1 \geq \dots \geq k_4$ gemacht werden. Die Schnitte überlappen sich genau dann, wenn $k \leq k_i + k_j, i \neq j$ gilt. Dazu betrachte man eine Kante des Tetraeders. Es gibt 8 Fälle von Überlappungen, dabei überlappen sich die Schnitte:

1. an keiner Kante
2. nur an Kante K_{12}
3. an den Kanten K_{12} und K_{13}
4. an den Kanten K_{12}, K_{13}, K_{14}
5. an den Kanten K_{12}, K_{13}, K_{23}
6. an den Kanten $K_{12}, K_{13}, K_{14}, K_{23}$
7. an den Kanten $K_{12}, K_{13}, K_{14}, K_{23}, K_{24}$
8. an allen Kanten

Satz 3.1.2 *Das sich bei einem Tetraederschnitt ergebende Polytop $P = T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k$ lässt sich genau dann aus einem kleineren Gittertetraeder mit gleichen Facettennormalen herauserschneiden ($P = T_{l_1, l_2, l_3, l_4}^l, l < k$), wenn $k_1 + k_2 + k_3 > 2k$ gilt.*

Beweis Das Polytop P liegt genau dann in einem kleineren Tetraeder T^l mit gleichen Facettennormalen wie T^k , wenn von T^k alle Gitterpunkte, die in einer Facette liegen, abgeschnitten werden (kurz: eine Facette wird abgeschnitten). Die am stärksten beschnittene Facette ist die, an der die Schnitte k_1, k_2, k_3 aufeinander treffen. Es wird also genau dann mindestens eine Facette abgeschnitten, wenn die Facette mit den Ecken v_1, v_2, v_3 abgeschnitten wird. Diese Facette besteht aus einem regulären Dreieck mit Kantenlänge $2k$, an dessen Ecken jeweils homothetische Dreiecke mit Kantenlängen $2k_1, 2k_2, 2k_3$ abgeschnitten werden. Die Facette kann nur dann vollständig verschwinden, wenn sich alle diese Dreiecke überlappen, da sonst an den Kanten Gitterpunkte erhalten bleiben. Dabei entsteht, falls die Facette nicht abgeschnitten wird, ein Dreieck mit der Kantenlänge $4k - 2(k_1 + k_2 + k_3)$. Die Facette ist vollständig abgeschnitten für $4k - 2(k_1 + k_2 + k_3) < 0$. Daraus folgt die Behauptung. \square

Eine analoge Aussage, die die Anzahl der zu betrachtenden Tetraederschnitte weiter einschränkt, ergibt sich mit:

Definition 3.1.3 *Sei T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k ein nichtleerer Tetraederschnitt mit $k_1 + k_2 + k_3 \leq 2k$, dann ist $T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{*k} := T_{k'_1, k'_2, k'_3, k'_4}^{k'}$ mit $k' := 3k - k_1 - k_2 - k_3 - k_4$, $k'_{i_1} := 2k - k_{i_2} - k_{i_3} - k_{i_4}$ und i_1, i_2, i_3, i_4 alle verschieden, der duale Tetraederschnitt.*

Der duale Tetraederschnitt entspricht einem Schnitt aus einem Tetraeder, dessen Facettennormalen das Negative der Facettennormalen des ursprünglichen Tetraeders sind. Sei also T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k ein Schnitt aus einem Tetraeder T^k mit Facettennormalen u_1, u_2, u_3, u_4 , dann ist das kleinste Gittertetraeder mit Facettennormalen $-u_1, -u_2, -u_3, -u_4$ gesucht, das diesen Schnitt enthält. Dazu betrachte man die der Ecke v_1 gegenüberliegende Facette des Tetraeders T^k . Diese ist ein reguläres Dreieck mit Kantenlänge $2k$. Bei der Durchführung der Schnitte werden an jeder Ecke dieses Dreiecks reguläre Dreiecke der Kantenlängen $2k_2, 2k_3, 2k_4$ abgeschnitten. Durch Verlängerung der durch das Schneiden entstandenen Kanten erhält man ein reguläres Dreieck der Kantenlänge $4k - 2k_2 - 2k_3 - 2k_4$ (kleines gestricheltes Dreieck in Abb. 3.2). Betrachtet man nun die nächste parallele Gitterschicht, die Gitterpunkte des Tetraederschnitts enthält, so liegen diese in einem homothetischen Dreieck mit um 2 größerer Kantenlänge. Dies lässt sich $k - k_1$ mal wiederholen, dann sind alle Gitterpunkte des Tetraederschnitts berücksichtigt. Das Dreieck in der letzten Gitterschicht ist die Grundseite des dualen Tetraeders und hat eine Kantenlänge von $6k - 2k_1 - 2k_2 - 2k_3 - 2k_4$. Die Kantenlänge des in der v_1 gegenüberliegenden Facette von T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k betrachteten Dreiecks ist gleichzeitig die Länge $2k'_1$ als Schnitt an dem Tetraeder mit Facettennormalen

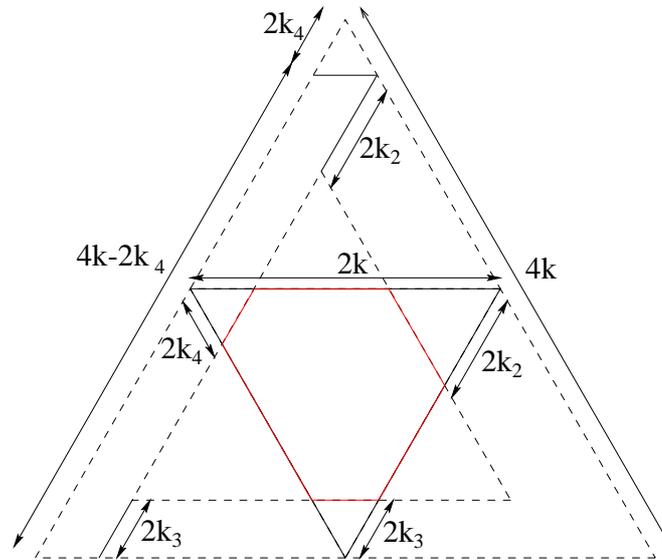


Abbildung 3.2: zum dualen Tetraederschnitt

$-u_1, -u_2, -u_3, -u_4$ interpretiert. Es gilt dann $k'_1 = 2k - k_2 - k_3 - k_4$. Da bei dieser Betrachtung die Einschränkung $k_1 \geq k_2 \geq k_3 \geq k_4$ nicht notwendig war, folgt aus der Symmetrie der Anordnung gleiches für k'_2, k'_3, k'_4 . Somit ist ein Tetraederschnitt bis auf die Lage im Raum gleich seinem dualen Tetraederschnitt. Es ergibt sich folgendes Korollar:

Korollar 3.1.4 *Das sich bei einem Tetraederschnitt ergebende Polytop $P = T^k_{k_1, k_2, k_3, k_4}$ lässt sich genau dann aus einem kleineren Gittertetraeder mit entgegengesetzt gerichteten Facettennormalen herausschneiden, wenn $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 > 2k$ ist.*

Beweis Die Einschränkung $k_1 + k_2 + k_3 \leq k$ in Def 3.1.3 ist nur für die Bestimmung der k'_i von Bedeutung. k' bleibt bei gleichzeitiger Addition von $n \in \mathbb{N}$ zu k und drei der k_i unverändert. Damit das duale Tetraeder $T^{k'}$ kleiner ist als das ursprüngliche Tetraeder T^k muss gelten: $6k - 2k_1 - 2k_2 - 2k_3 - 2k_4 < 2k$. Daraus folgt die Behauptung. □

Es ergibt sich direkt, dass Überlappungen der Art 6, 7, 8 (siehe Bemerkung zu Definition 3.1.1) nicht betrachtet werden müssen.

Zur Berechnung der Dichte ist es notwendig, die Anzahl der Gitterpunkte des Tetraederschnitts und das Volumen des äußeren Parallelkörpers $V(T^k_{k_1, k_2, k_3, k_4} + \rho B^d)$ zu bestimmen. Nach der Formel von Steiner genügt es dazu, Volumen, Oberfläche und das Integral der mittleren Krümmung des Tetraederschnitts zu bestimmen. Dazu nutzt man die Bewertungseigenschaft dieser Größen (siehe z.B. [SY]) aus.

Für die Gitterpunktanzahl L , das Volumen V , die Oberfläche O und das Integral der mittleren Krümmung M gilt (s. [GW], [Had]):

$$L(T^k) = \binom{k+3}{3} \quad (3.1)$$

$$V(T^k) = 2/3 \cdot \sqrt{2}k^3 \quad (3.2)$$

$$O(T^k) = 4 \cdot \sqrt{3}k^2 \quad (3.3)$$

$$M(T^k) = 6 \arccos(-1/3) \cdot k \quad (3.4)$$

Für die Berechnung obiger Größen für einen Tetraederschnitt $T_{k_1,0,0,0}^k$, bei dem nur an einer Ecke ein Tetraeder abgeschnitten wurde, folgt

$$X(T_{k_1,0,0,0}^k) = X(T^k) - X(T^{k_1}) + X(D_{k_1}),$$

wobei X eines der obigen Funktionale ist und D_{k_1} ein reguläres Dreieck der Kantenlänge $2k_1$.

Im Falle eines Überlappens bei einem Tetraederschnitt $T^k, k_1, k_2, 0, 0$ wird an der zweiten Ecke v_2 ein Tetraederschnitt $T_{k_1+k_2-k,0,0,0}^{k_2}$, bei dem nur an einer Ecke ein Tetraeder abgeschnitten wurde, abgetrennt. Für diesen sind die vier Funktionale bereits bestimmt, und es muss nur noch die Schnittfläche ermittelt werden, die in diesem Fall aus einem regulären Dreieck der Kantenlänge $2k_2$, an dem eine Ecke abgeschnitten wurde, besteht. Dies funktioniert analog für die beiden anderen Ecken v_3 und v_4 .

Ein Tetraederschnitt T_{k_1,k_2,k_3,k_4}^k ist genau dann zweidimensional, wenn $k = k_1$. Dieser Schnitt liegt dann in einem regulären Dreieck mit Kantenlänge $2k$. Für die zugehörige Packung folgt aus dem Beweis zu Satz 3.1.2, dass die Packung aus jeder Kante des regulären Dreiecks mindestens einen Gitterpunkt enthält, wenn sie nicht schon in einem Tetraederschnitt mit kleinerem k enthalten war.

Satz 3.1.5 *Sei $k \in \mathbb{N}_0$ fest, dann enthält ein nicht volldimensionaler Tetraederschnitt T_{k,k_2,k_3,k_4}^k mindestens $k+1$ Gitterpunkte.*

Beweis Für einen minimalen zweidimensionalen Schnitt muss $k_2 \geq k/2$ sein, da sich sonst, ohne eine Facette vollständig abzuschneiden, der Schnitt durch $k_2 \rightarrow k_2+1$ verkleinern ließe. Es folgt $k_3 = k_4 = k - k_2$ für einen kleinstmöglichen Schnitt. Für die Gitterpunktanzahl erhält man:

$$L(T_{k,k_2,k-k_2,k-k_2}^k) = \frac{1}{2}(k+2)(k+1) - \frac{k_2}{2}(k_2+1) - (k-k_2+1)(k-k_2)$$

Als Funktion von k_2 betrachtet, ist dies eine nach unten geöffnete Parabel. Das Minimum wird somit am Rand des zu untersuchenden Intervalls $k_2 \in [\frac{k}{2}, k]$ angenommen. Dies geschieht für $k \geq 2$ in $k_2 = k$ mit $L(T_{k,k,0,0}^k) = k+1$. Für $k = 0, 1$

folgt die Behauptung direkt. □

Daraus folgt dann:

Satz 3.1.6 *Jeder Tetraederschnitt T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k mit $2k > k_1 + k_2 + k_3$ enthält mindestens $k+1$ Gitterpunkte, d.h. die Wurst ist ein Gitterpolytop mit der kleinsten Gitterpunktzahl, das sich aus einem Tetraeder T^k und keinem kleineren heraus-schneiden lässt.*

Beweis Man betrachte die Facette des Tetraederschnitts $T_{k_1, 0, 0, 0}^k$, die entsteht, nachdem das erste Tetraeder (T^{k_1}) abgeschnitten wurde. Da nach dem Beweis zu Satz 3.1.2 in jeder Facette des Tetraeders T^k ein Gitterpunkt des Tetraederschnitts enthalten sein muss, ist auch in jeder Kante des entstandenen Dreiecks mit Kantenlänge $2k_1$ ein Gitterpunkt des Tetraederschnitts enthalten. Nun gilt nach dem Beweis zu Satz 3.1.5, dass dann mindestens $k_1 + 1$ Gitterpunkte in diesem Dreieck enthalten sind. „Unterhalb“ dieses Dreiecks befinden sich noch $k - k_1$ weitere parallele Gitterschichten, aus denen jeweils mindestens ein Gitterpunkt in der Packung vorhanden ist. Daraus folgt die Behauptung. □

In dem verwendeten Programm werden nun Tetraederschnitte für alle $k < k_{max}$ betrachtet. Für jeden dieser Tetraederschnitte wird das Volumen, die Oberfläche und das Integral der mittleren Krümmung berechnet. Mit diesen Werten wird die Packung mit den bisher gefundenen verglichen und, falls sie für ein bestimmtes ρ -Intervall dichter ist als die bisher gefundenen, in die Tabelle eingetragen. Das Verfahren liefert also eine Tabelle, die für die Packungen mit $n \leq k_{max}$ Kugeln die dichtesten Groemerpolytope angibt.

Für ein festes k gibt es ohne die erwähnten Einschränkungen

$$\sum_{k_1=0}^k \sum_{k_2=0}^{k_1} \sum_{k_3=0}^{k_2} (k_4 + 1) = \frac{1}{24} k^4 + \frac{5}{12} k^3 + \frac{35}{24} k^2 + \frac{25}{12} k + 1$$

Tetraederschnitte T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k , die zu berechnen sind. Die Einschränkungen reduzieren dies ungefähr auf die Hälfte. Für $k = 56$ sind dann 246600 Tetraederschnitte zu berechnen. Das verwendete Computeralgebrasystem Maple benötigt dazu etwa 8 Stunden auf einem *Intel Celeron 433 MHz Prozessor*.

Ein Lemma aus [SW] zum Beweis, dass Packungen von mehr als 3 Kugeln nicht eben sind, sagt aus, dass es zu jedem n ein volldimensionales Groemerpolytop Q_n gibt mit $L(Q_n) = n$, d.h. das Verfahren ist in der Lage, zu jedem n eine obere Schranke für $\rho_{s,n}$ zu finden.

Gandini und Wills [GW] betrachteten bei dem Beweis, dass für kein $n \geq 56$ außer für $n = 57, 58, 63, 64$ die Wurstpackung optimal ist, unter anderem ebenfalls solche Tetraederschnitte. Der generische Fall wurde dort mit der Untersuchung

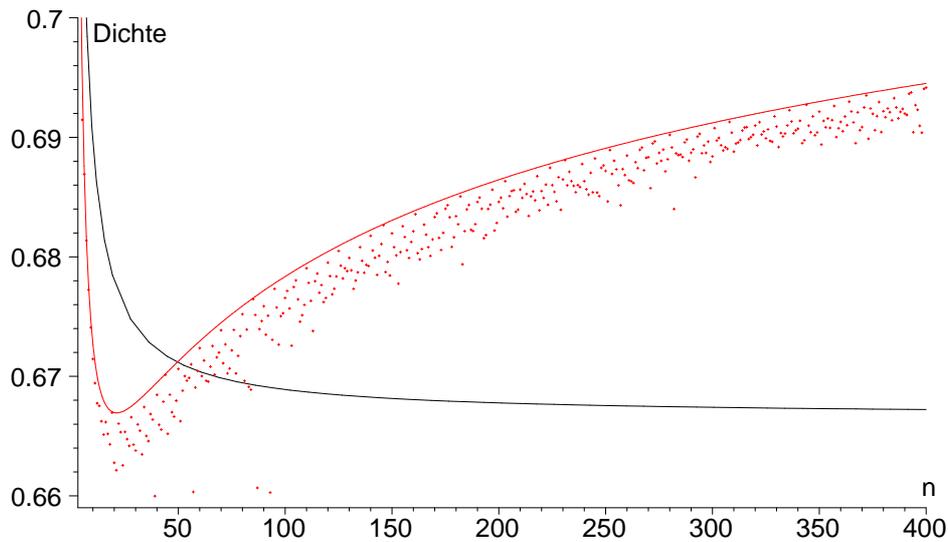


Abbildung 3.3: Dichteste Groemerpackungen für $\rho = 1$ und $n = 3, \dots, 400$

von Parallelotopen abgehandelt, und Tetraederschnitte wurden nur für die Fälle $n \in \{56, 59, 62, 65, 68, 73, 74\}$ benötigt.

In Abbildung 3.3 sind die Dichten ($\rho = 1$) der gefundenen Groemerpackungen gegen die Anzahl der Kugeln aufgetragen. Die Dichte der unendlichen Gitterpackung ist $\pi/\sqrt{18} \approx 0.74$. Diesem Wert nähern sich die Dichten der Groemerpolytope nur langsam an. Die fallende Kurve gibt die Dichte der Wurstpackung an. Die nach oben begrenzte Kurve ergibt sich aus der Dichte der Wulff-shape für alle n interpoliert. Sie stellt scheinbar eine obere Schranke für die Dichten dar. Man gewinnt nicht den Eindruck, dass den Dichten der Packungen irgendeine Systematik innewohnt. Bei der Darstellung der dichtesten Packungen für dichteste und zweitdichteste Facetten (Abb. 3.5, 3.6) wird sich dies jedoch ändern.

Betrachtet man die dichtesten Packungen für die Kugelanzahlen n , für die es Gitteroktaeder gibt, die genau n Kugeln enthalten, so findet man diese Oktaederpackungen, wie es aufgrund des Wulff-shapes vermutet werden kann, auch unter den dichtesten Groemerpackungen. Es sind dies die Kugelanzahlen 6, 19, 44 und 85. Ein Tetraederschnitt T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k hat die Form eines Oktaeders, wenn k gerade ist und $k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = k/2$ gilt. Betrachtet man die Dichten der für $\rho = 1$ dichtesten Groemerpackungen (s. Abb. 3.3 und 3.6), so findet man bei diesen Zahlen Werte, die im Gegensatz zu Dichten für andere Kugelanzahlen besonders nah an der begrenzenden Kurve liegen, d.h. sie sind sehr dicht gepackt.

3.2 Gitterpolytope mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten

Die zweitdichtesten Facetten, die bei Gitterpolytopen des *fcc*-Gitters vorkommen, sind Facetten, die in einem quadratischen Gitter liegen. Im *fcc*-Gitter gibt es nur 3 Richtungen, die diesen Facetten entsprechen, d.h. ein Gitterpolytop kann höchstens 6 Facetten dieser Art haben. Der Normalenvektor einer solchen Facette ist orthogonal zu zwei gegenüberliegenden Kanten eines regulären Gittertetraeders und zeigt in dem betrachteten *fcc*-Gitter in Richtung der Achsen. Im folgenden sollen zusätzliche Schnitte an den T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k betrachtet werden, bei denen solche Facetten entstehen. Sie werden im folgenden mit dem Begriff Schnitte zweiter Art bezeichnet. Die bei den Groemerpolytopen zugelassenen Überlappungen werden hier nicht betrachtet, da der Rechenaufwand schon ohne Überlappung sehr groß ist und für gute Packungen keine „tiefen“ Schnitte zweiter Art an den Groemerpolytopen benutzt wurden. Die von den Groemerpolytopen abgetrennten Körper haben die Form eines Keils.

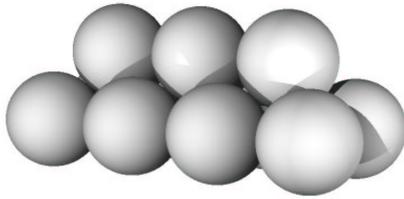


Abbildung 3.4: Packung in Form eines Keils mit $l = 1$ und $k = 2$

Ein Keil wird begrenzt durch eine rechteckige Grundfläche, zwei reguläre Dreiecke und zwei gleichschenklige Trapeze. Die Grundseite der Trapeze liegt an der rechteckigen Grundfläche des Keils an. Um diese Schnitte betrachten zu können, werden in Satz 3.2.2 die Gitterpunktanzahl, Volumen, Oberfläche und Integral der mittleren Krümmung eines Keils und der entstehenden Schnittfläche angegeben.

Falls sich zwei rechteckige Facetten, die bei Schnitten zweiter Art an Groemerpolytopen entstehen, berühren, besteht die Schnittmenge nur aus einer Ecke des Polytops. Die Schnitte berühren sich nicht an Kanten der rechteckigen Fläche. Wenn sich die Schnitte überlappen, kann ein Schnittpolytop entstehen, das im Gegensatz zu allen bisher betrachteten Polytopen eine Kante hat, auf der die enthaltenen Gitterpunkte einen Abstand größer als 2 haben.

Die Schnittmenge zweier am Schnitt beteiligter Keile ist entweder leer oder ein Simplex mit 5 Kanten der Länge $2m$, $m \in \mathbb{N}$ und einer Kante der Länge $2\sqrt{2}m$.

Definition 3.2.1 Seien $k, l \in \mathbb{N}_0$, $l \geq 1$, dann sei $Z_{l,k}$ ein wie oben beschrieben erzeugter Keil mit rechteckiger Grundfläche der Kantenlängen $2(k+l)$ und $2l$. Die gegenüberliegende Kante hat die Länge $2k$.

Satz 3.2.2 $Z_{l,k}$ hat folgende Eigenschaften:

$$V(Z_{l,k}) = \frac{4}{3}\sqrt{2}l^3 + 2\sqrt{2}kl^2 \quad (3.5)$$

$$O(Z_{l,k}) = (4\sqrt{3} + 4)(k + l)l \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} M(Z_{l,k}) &= \left[4\pi - 4 \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + 4 \arccos\left(\frac{1}{3}\right) \right] l \\ &+ \left[3\pi - 2 \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) - \arccos\left(\frac{1}{3}\right) \right] k \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$L(Z_{l,k}) = (l + 1) \left[k + 1 + (k + 2)\frac{l}{2} + (2l + 1)\frac{l}{6} \right] \quad (3.8)$$

Sei $Z'_{l,k}$ die Grundfläche von $Z_{l,k}$, dann gilt

$$O(Z'_{l,k}) = 8(l + k)l, \quad M(Z'_{l,k}) = (4l + 2k)\pi \quad (3.9)$$

für die Oberfläche O und das Integral der mittleren Krümmung M von $Z'_{l,k}$.

Zudem ist es notwendig, die Kantenlängen der Tetraederschnitte zu bestimmen, um k und die maximale Tiefe eines solchen Schnittes bestimmen zu können. Wenn sich zwei Schnitte nicht überlappen, dann beträgt die Länge des verbleibenden Kantenstücks der Kante K_{ij} : $2k - 2k_i - 2k_j$. Im Falle eines Überlappens ($k_i + k_j > k$) verschwindet die ursprüngliche Kante K_{ij} völlig, und es entsteht eine neue zur gegenüberliegenden Kante K_{st} , $\{s, t\} = \{1, 2, 3, 4\} \setminus \{i, j\}$ des ursprünglichen Tetraeders parallele Kante (s. Abb. 3.1). Diese hat die Länge $2k_i + 2k_j - 2k > 0$. k_{ij} bezeichne die halbe Länge der durch die Schnitte erster Art an der Kante K_{ij} entstehenden Kante K'_{ij} . Für die Tiefe l_{ij} des Schnittes zweiter Art an der Kante K'_{ij} bildet die halbe Länge l_{ijr} der Kante des Tetraederschnitts, die K'_{ij} und K'_{ir} , $i \neq j \neq r \neq i$ verbindet, eine obere Grenze. Es gilt $l_{ij} + l_{ir} \leq l_{ijr}$. Die l_{ijr} sind unterschiedlich zu berechnen, abhängig davon, ob ein Überlappen der Schnitte erster Art auf den Kanten K_{ij} und K_{ir} vorliegt oder nicht.

Definition 3.2.3 Ein Tetraederschnitt zweiter Art aus einem Tetraederschnitt T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k mit den Schnitttiefen l_{ij} , $\{i, j\} \subset \{1, 2, 3, 4\}$, $i < j$ wird mit

$$T_{k_1, k_2, k_3, k_4, l_{12}, l_{13}, l_{14}, l_{23}, l_{24}, l_{34}}^k$$

bezeichnet.

Das Programm untersucht einen vorliegenden Tetraederschnitt T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k , ermittelt die Art der Überlappung und berechnet daraufhin alle möglichen Schnitte zweiter Art. Sollen bei diesen Berechnungen alle Schnitte aus Tetraedern betrachtet werden, ist der Berechnungsaufwand erheblich. Daher wurde dies nur

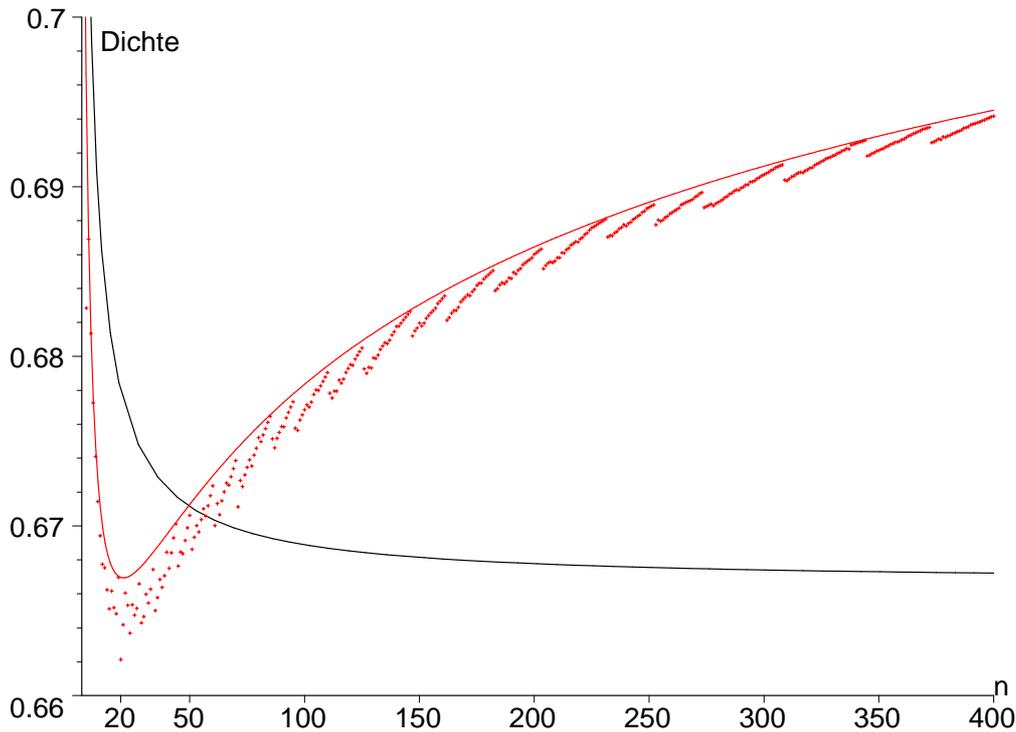


Abbildung 3.5: Dichten für Polytope mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten

für $k \leq 14$ durchgeführt. Die Ergebnisse (siehe Abb. 3.5) lassen es jedoch, um den Aufwand zu senken, sinnvoll erscheinen, nur die im ersten Verfahren erhaltenen Groemerpolytope zu betrachten, da die Polytope, deren Dichten besonders gut sind, durch Schnitte zweiter Art aus dichten Groemerpolytopen entstehen. Dieses Verfahren arbeitet die Tabelle dieser Groemerpolytope ab und versucht an den Kanten die beschriebenen Schnitte anzusetzen. Die Packungen werden dann nach dem gleichen Verfahren wie die Tetraederschnitte für den ρ -Bereich, in dem sie unter allen bisher untersuchten optimal sind, in die Tabelle eingetragen. Aus den Ergebnissen folgt:

Satz 3.2.4 *Für kein $n \geq 56$ außer 57 und $\rho = 1$ ist die Wurst optimal. In all diesen Fällen außer für $n = 61$ gibt es Gitterpolytope des fcc-Gitters die für $\rho = 1$ dichter sind als die Wurstpackung S_n .*

Beweis Nach der Arbeit von Gandini und Wills [GW] bleibt nur noch für die Fälle $n = 58, 63, 64, 67, 71, 77, 81, 83$ zu zeigen, dass es eine dichtere Gitterpackung als die Wurst gibt. In diesen Fällen wurden mit Hilfe des Algorithmus folgende Packungen gefunden:

- $n = 58$: Von der Packung $T_{4,4,3,3}^7$ mit 60 Kugeln wird zweimal eine Ecke abgeschnitten

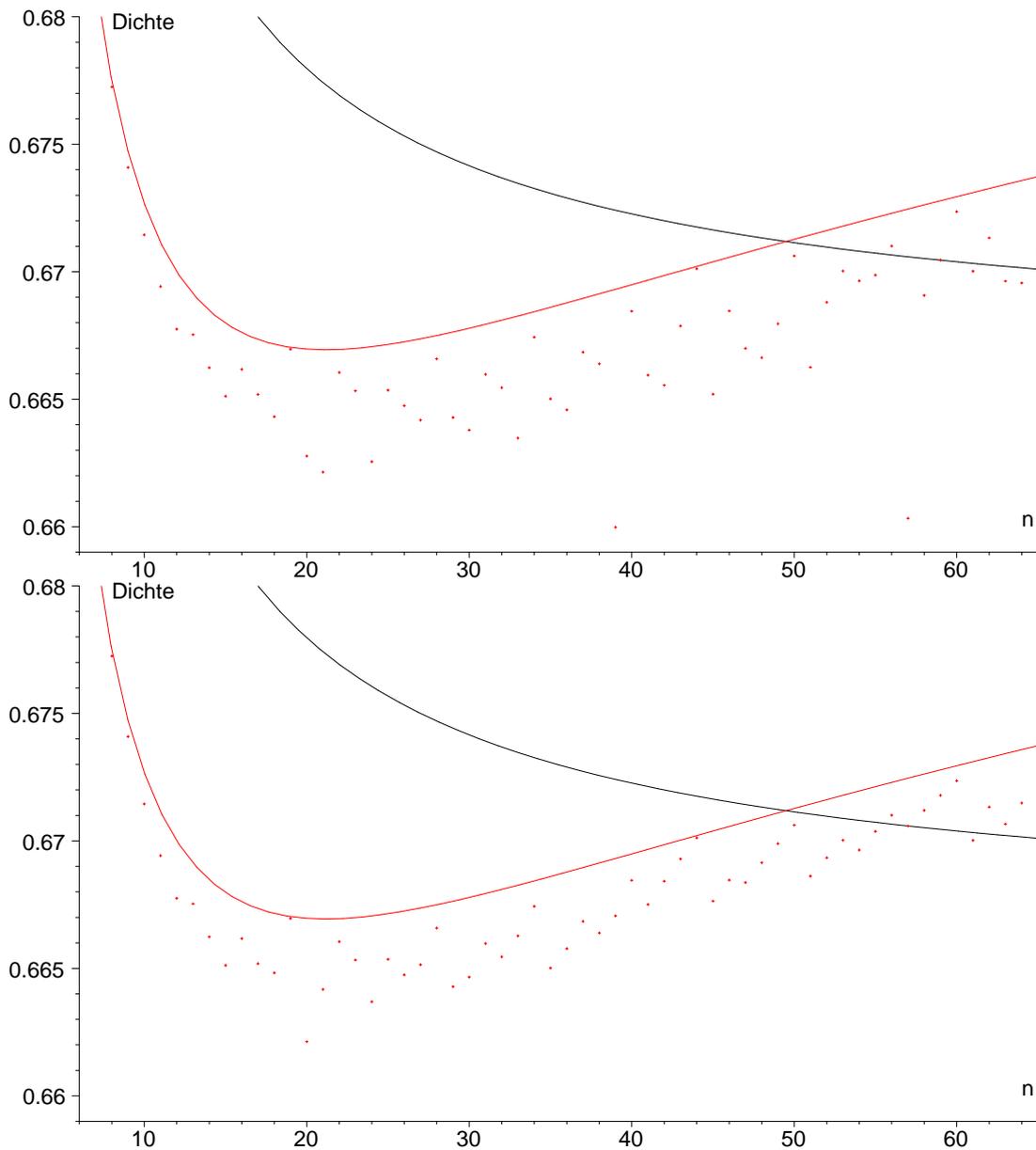


Abbildung 3.6: Dichten für Groernerpolytope (oben) und Polytope mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten (unten) für $6 \leq n \leq 65$

- $n = 63$: Von der Packung $T_{4,4,3,2}^7$ mit 66 Kugeln wird eine Kante mit zwei Kugeln und eine Ecke abgeschnitten
- $n = 64$: Von der Packung $T_{4,4,3,2}^7$ mit 66 Kugeln wird zweimal eine Ecke abgeschnitten
- $n = 67$: Die Packung $T_{5,3,2,2}^7$ mit 67 Kugeln ist dichter als die Wurst

- $n = 71$: Die Packung $T_{2,2,2,1}^6$ mit 71 Kugeln ist dichter als die Wurst
- $n = 77$: Die Packung $T_{2,1,1,1}^6$ mit 77 Kugeln ist dichter als die Wurst
- $n = 81$: Die Packung $T_{1,1,1,0}^6$ mit 81 Kugeln ist dichter als die Wurst
- $n = 83$: Von der Packung $T_{4,4,4,4}^8$ mit 85 Kugeln wird zweimal eine Ecke abgeschnitten

□

Bemerkungen Die Packung für 61 Kugeln (siehe [GW]), die für $\rho = 1$ dichter ist als die Wurst, ist eine Bipyramide auf einer dreieckigen Grundfläche (oder ein Doppeltetraeder), an deren Spitzen jeweils Tetraeder abgeschnitten sind. In diesem speziellen Fall hat die Bipyramide eine Kantenlänge von 14 und an den Spitzen wurden Tetraeder der Kantenlänge 12 bzw. 10 abgeschnitten (s. Abb A.7).

Ein ähnliches Bild wie in Abb. 3.5 ergibt sich, wenn man $\rho_{s,n}$ gegen n abträgt (s. Abb. 3.7). Hierbei werden für genügend große n nicht mehr die dichtesten Packungen für $\rho = 1$ betrachtet. So ist z.B. für $n = 400$ die Wurstpackung bis $\rho_{s,400} \approx 0.975$ optimal und dann bis $\rho \approx 0.993$ ist $T_{7,7,6,6}^{14}$ (fast ein Oktaeder) optimal, bevor die Packung $T_{8,8,7,7}^{15}$, an der vier mal ein Keil $Z_{0,0}$ und zweimal $Z_{0,1}$ abgetrennt wurde (siehe Titelbild), bestmöglich wird. Diese Packung hat Ähnlichkeit mit dem Wulff-shape, da sie aus einer Oktaederpackung besteht, bei der die sechs Kugeln an den Ecken entfernt wurden und auf zwei benachbarten ursprünglichen Facetten eine Kugelschicht aufgetragen wurde.

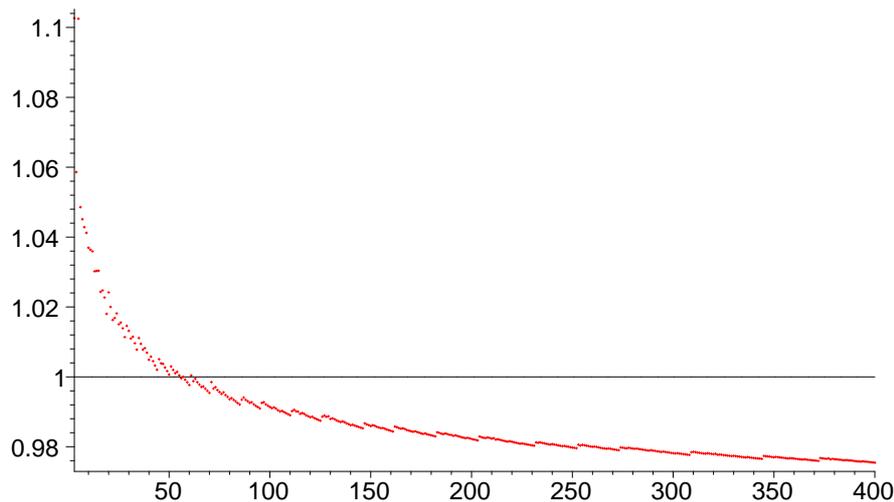


Abbildung 3.7: Obere Schranke für den Wurst-Parameter $\rho_{s,n}$

3.3 *hcp*-Packungen mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten

In diesem Kapitel wird versucht, den von den *fcc*-Packungen her bekannten Ansatz zu verfolgen. Um die Anzahl der zu betrachtenden Packungen auf ein Berechenbares Maß zu senken, sollen nur die Packungen betrachtet werden, deren Facetten eine gewisse Dichte haben. Leider lässt sich der Ansatz der Tetraederschnitte nicht ohne weiteres übernehmen, da es keinen einfachen Körper gibt, aus dem alle diese Packungen herausgeschnitten werden. Im Falle der Tetraederschnitte kann man durch Weglassen einer das Polytop beschreibenden Hyperebene eine größere Gitterpackung im *fcc*-Gitter erhalten, die weniger Facetten hat. Dies hängt auch damit zusammen, dass je drei der auftretenden Facetten die sich in genau einem Punkt schneiden, einen Gitterpunkt als Schnittpunkt haben. Bei *hcp*-Packungen ist dies nicht der Fall, da die auftretenden Hyperebenen keinen Konfigurationspunkt als gemeinsamen Schnittpunkt haben müssen. Die hier betrachteten *hcp*-Packungen werden als die Menge aller Punkte der *hcp*-Packung beschrieben, die innerhalb eines Polytops liegen, dessen Facettennormalen den Normalen der dichtesten Facetten entsprechen. Dabei bleibt es nicht aus, dass kleinere Facetten entstehen, deren Normalen nicht den berücksichtigten Facettennormalen entsprechen. Die Normalen liegen aber dennoch kollinear zu primitiven Vektoren des dualen Gitters.

Für die Berechnung der *hcp*-Packungen wird auf die ganzzahlige Beschreibung der Konfiguration aus [S1] zurückgegriffen. Die Konfigurationspunkte liegen in $L \cup (L + (0, 3, 3)^T)$, wobei L ein Gitter mit Basis $(3, 0, 3)^T, (3, 3, 0)^T, (-4, 4, 4)^T$ ist. Alle Normalenvektoren zu Facetten der *hcp*-Packung liegen im dualen Gitter L^* . Ausnahmen könnten auftreten, wenn die Facette Punkte aus L und $L + (0, 3, 3)^T$ enthält. Da sich aber der Vektor $(0, 3, 3)^T$ als gebrochen rationale Linearkombination der Basisvektoren des Gitters darstellen lässt, enthält jede Verbindungsgerade zweier Punkte aus L und L^* unendlich viele Punkte sowohl von L als auch von L^* . Somit ist der Normalenvektor einer solchen Facette ebenfalls Vielfaches eines Vektors aus L^* . Eine dichte *hcp*-Packung für 57 Kugeln im Vergleich zu dem Polytop mit Facettennormalenvektoren der dichtesten Facetten in dem die Konfigurationspunkte liegen, ist in Abb. 3.8 dargestellt. Man kann erkennen, dass das Ausschnittpolytop 14 Facetten aufweist, die konvexe Hülle der zu der Packung gehörigen Konfigurationspunkte aber 32.

In der *hcp*-Konfiguration gibt es zwei dichteste und 12 zweitdichteste Facetten, deren zugehörige Facettennormalen sind die folgenden und deren negative:

$$\begin{pmatrix} -3 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -7 \\ 7 \\ -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -7 \\ -5 \\ 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 7 \\ 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 11 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -11 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Diese sind jeweils kollinear zu einem der 14 kürzesten primitiven Vektoren des Gitters L^* mit der Basis $\{1/36(-3, 3, 3)^T, 1/36(4, -4, 8)^T, 1/36(4, 8, -4)^T\}$. Um

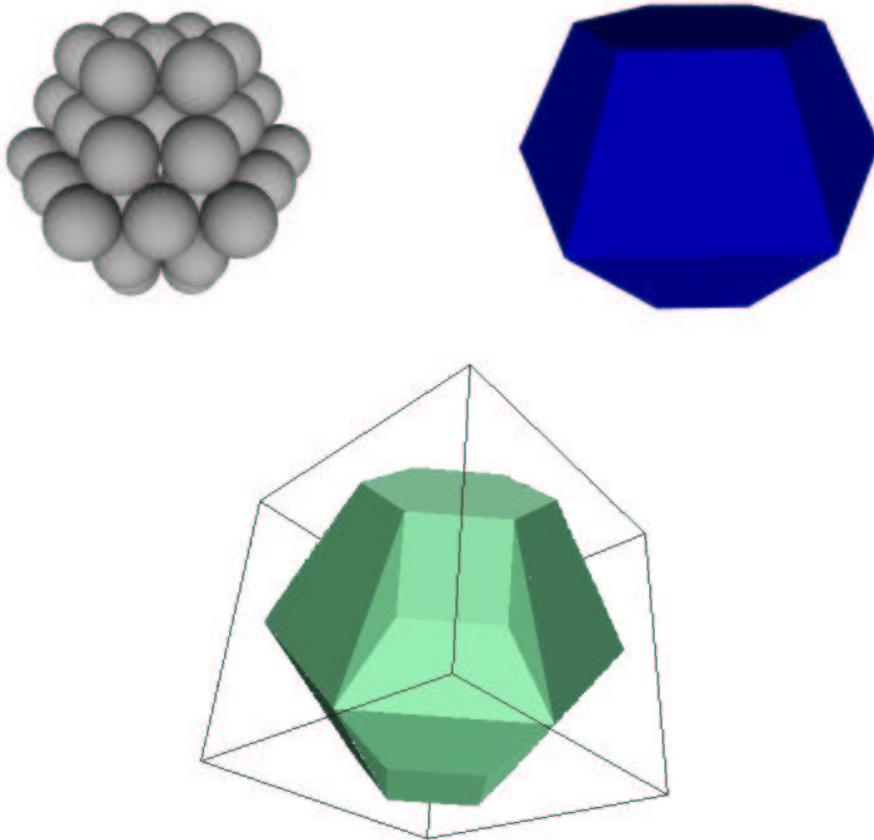


Abbildung 3.8: Packung, Ausschnittpolytop und Packungspolytop einer *hcp*-Packung

die Dichte einer Facette angeben zu können übernehmen wir folgende Notation aus [S1]. Für $x \in \mathbb{R}$ sei $\{x\} = x - [x]$ der gebrochene Anteil von x und für einen primitiven Vektor $u \in L^*$ sei

$$\varepsilon(u) = \{u \cdot (0, 3, 3)^T\}$$

Falls $\varepsilon(u) < 1/2$, so sei $\bar{\varepsilon}(u) = 1 - \varepsilon(u)$, sonst $\bar{\varepsilon}(u) = \varepsilon(u)$. Dann sei $\sigma(u) = \frac{1 - \varepsilon(u)}{2\|u\|}$ die optimale Facettendichte in Richtung von u . Sie gibt ein Maß für das Volumen der Kugeln pro Flächeneinheit der Oberfläche. Falls $\varepsilon(u) > 1/2$ ist, so enthält die Facette mit optimaler Dichte nur Punkte aus L und falls $\varepsilon(u) < 1/2$, nur Punkte aus $L + (0, 3, 3)^T$. Gleichheit tritt z.B. für den Normalenvektor $1/12(-1, 1, 1)^T$ auf. Dann sind die Facetten in L und $L + (0, 3, 3)^T$ gleich dicht.

Definition 3.3.1 Für 14 Zahlen $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14} \in \mathbb{N}_0$, heie das Polytop, das

durch folgende Ungleichungen gegeben ist, Ausschnittpolytop:

$$\begin{aligned}
 (-3, 3, 3)x^T &\leq 18\mu_1 \\
 (3, -3, -3)x^T &\leq 18\mu_2 \\
 (-7, 7, -5)x^T &\leq 6\mu_3 + 6 \\
 (7, -7, 5)x^T &\leq 6\mu_4 \\
 (-7, -5, 7)x^T &\leq 6\mu_5 + 6 \\
 (7, 5, -7)x^T &\leq 6\mu_6 \\
 (5, 7, 7)x^T &\leq 6\mu_7 + 6 \\
 (-5, -7, -7)x^T &\leq 6\mu_8 \\
 (11, 1, 1)x^T &\leq 6\mu_9 + 6 \\
 (-11, -1, -1)x^T &\leq 6\mu_{10} \\
 (-1, 1, -11)x^T &\leq 6\mu_{11} + 6 \\
 (1, -1, 11)x^T &\leq 6\mu_{12} \\
 (-1, -11, 1)x^T &\leq 6\mu_{13} + 6 \\
 (1, 11, -1)x^T &\leq 6\mu_{14}
 \end{aligned}$$

Das Polytop wird mit $AP(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})$ bezeichnet.

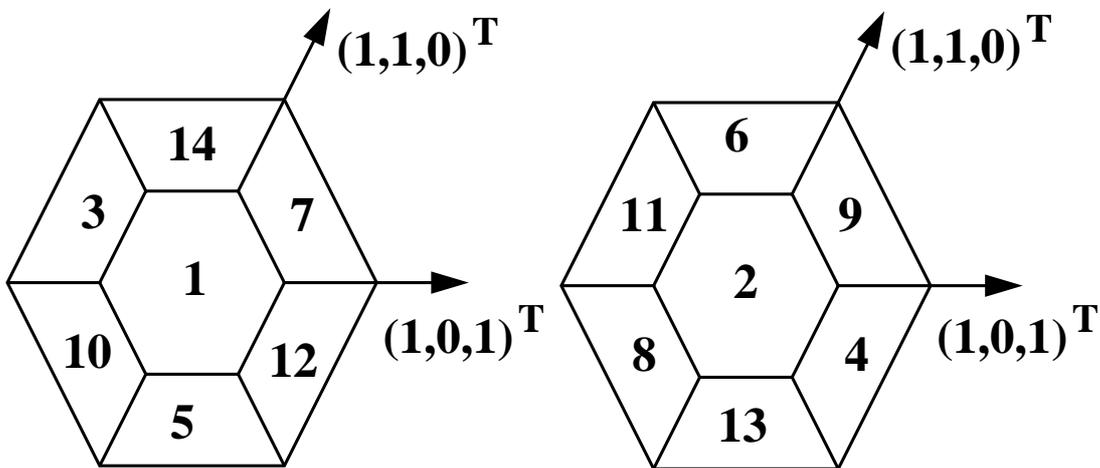


Abbildung 3.9: Dichteste Facettenrichtungen der hcp-Konfiguration

Abbildung 3.9 zeigt die Lage der Facetten, aus der Blickrichtung $(-4, 4, 4)^T$. Im linken Bild blickt man auf ein Polytop, das dem in Abbildung 3.8 oben rechts gleicht. Das rechte Bild zeigt die anderen 7 Facetten des Polytops aus dem gleichen Blickwinkel, dabei wurden die 7 Facetten aus dem linken Bild nicht dargestellt.

Zu einem Vektor $\mu \in \mathbb{N}_0^{14}$ kann man leicht die in dem Polytop $AP(\mu)$ enthaltenen Konfigurationspunkte bestimmen. Alle Konfigurationspunkte haben die Darstellung

$$a \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} -4 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix},$$

so dass sich aus den Ungleichungen der Definition 3.3.1 Schranken für die Werte $a, b, c \in \mathbb{Z}$ und $d \in [0, 1]$ bestimmen lassen. Aus den Punkten kann man dann die Werte der Quermaßintegrale der konvexen Hülle berechnen. Um die Anzahl der zu berechnenden Polytope zu minimieren, betrachten wir im folgenden die Symmetrien der *hcp*-Konfiguration. Es gibt 24 bis auf Translation verschiedene Abbildungen von *hcp* in sich. Sie lassen sich aus folgenden 4 Abbildungen erzeugen:

1. D_{120} : Drehung um 120° an der Achse $(-1, 1, 1)^T$
2. S_P : Punktspiegelung an $(0, 3/2, 3/2)^T$
3. S_1 : Spiegelung an der Ebene durch 0 mit Normalenvektor $(-4, 4, 4)^T$
4. S_2 : Spiegelung an der Ebene durch 0 mit Normalenvektor $(0, 3, -3)^T$

Da alle Abbildungen voneinander unabhängig sind und Spiegelungen die Ordnung 2 haben und die angegebene Drehung die Ordnung 3 hat, ist die Anzahl der durch Kombination entstehenden Abbildungen $2^3 \cdot 3 = 24$. Die angegebenen Abbildungen wirken sich auf ein Fensterpolytop wie folgt aus:

1. $D_{120}(AP(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})) = AP(\mu_1, \mu_2, \mu_7, \mu_8, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6, \mu_{13}, \mu_{14}, \mu_9, \mu_{10}, \mu_{11}, \mu_{12})$
2. $S_P(AP(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})) = AP(\mu_2 + 1, \mu_1 - 1, \mu_4, \mu_3, \mu_6, \mu_5, \mu_8 + 1, \mu_7 - 1, \mu_{10}, \mu_9, \mu_{12} + 1, \mu_{11} - 1, \mu_{14} + 1, \mu_{13} - 1)$
3. $S_1(AP(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})) = AP(\mu_2, \mu_1, \mu_{11}, \mu_{12}, \mu_{13}, \mu_{14}, \mu_9, \mu_{10}, \mu_7, \mu_8, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6)$
4. $S_2(AP(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})) = AP(\mu_1, \mu_2, \mu_5, \mu_6, \mu_3, \mu_4, \mu_7, \mu_8, \mu_9, \mu_{10}, \mu_{13}, \mu_{14}, \mu_{11}, \mu_{12})$

Ebenso lassen sich Fensterpolytope durch Translation um einen Gittervektor ineinander überführen.

Um zu vermeiden, dass Gitterpolytope zu oft berechnet werden, wird überprüft, ob auch tatsächlich alle Facetten zum Polytop beitragen bzw. gerade in dem Abstand sind, wo sie nicht mehr beitragen. Ein Polytop kann schon vollständig

durch 4 Facetten begrenzt sein und ein weiteres hinausschieben der anderen Facetten, d.h. Erhöhung der Distanz vom Ursprung, trägt nicht zur Veränderung des Polytops bei. Zu einem μ_i können aus den übrigen Werten verschiedene Schranken gewonnen werden. Beispielhaft soll dies hier für μ_3 dargestellt werden. Liegt der zu μ_3 gehörende Normalenvektor der begrenzenden Ebene im konvexen Kegel der Normalenvektoren anderer Ebenen, so kann aus den zugehörigen Werten μ_j eine Schranke für μ_3 bestimmt werden. Dazu sind höchstens drei Normalenvektoren bzw. Werte μ_j nötig. Da drei oder weniger Vektoren eine Basis des \mathbb{R}^3 oder eines Unterraums bilden, kann die Linearkombination dieser Vektoren, die den zu μ_3 gehörenden Vektor $\mathbf{a} := (-7, 7, -5)^T$ bildet, eindeutig bestimmt werden. Die Koeffizienten sind dabei alle positiv, da der Vektor \mathbf{a} im konvexen Kegel der aufspannenden Vektoren liegt. Aus einer entsprechenden Linearkombination der zugehörigen Ungleichungen in Definition 3.3.1 erhält man dann eine Schranke für μ_3 . Für die Vektoren aus den Ungleichungen 5, 8 und 14 gilt:

$$(-7, -5, 7)^T + 2(-5, -7, -7)^T + 3(1, 11, -1)^T = (-14, 14, -10)^T = 2(-7, 7, -5)^T$$

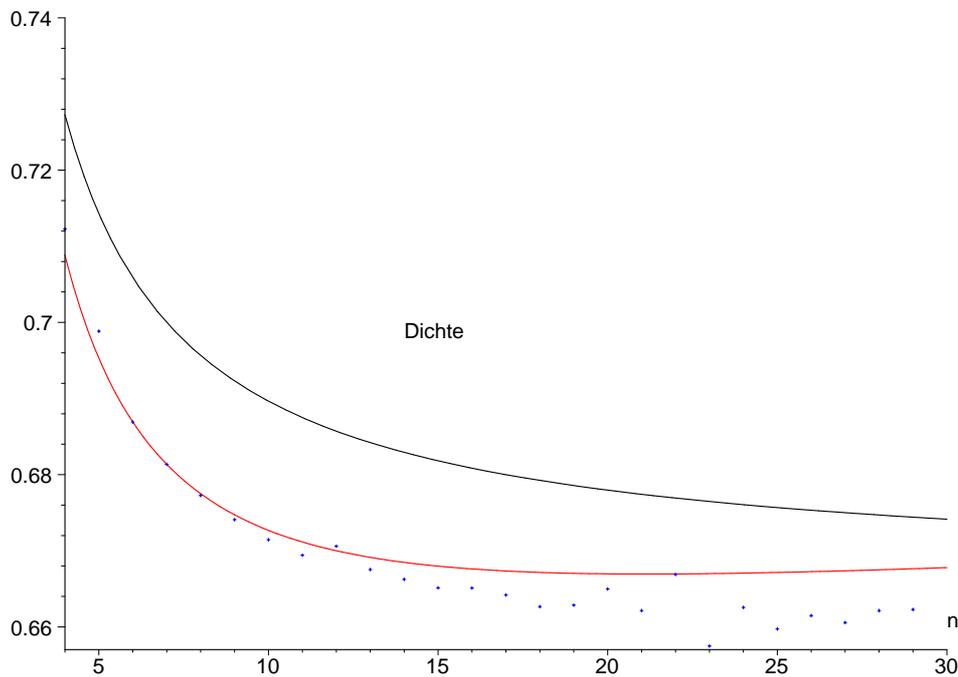
Daraus folgt durch entsprechende Kombination der Ungleichungen, dass die dritte Gleichung in Definition 3.3.1 zur Beschreibung des Ausschnittpolytops unnötig ist, wenn

$$6\mu_5 + 6 + 2(6\mu_8) + 3(6\mu_{14}) \leq 2(6\mu_3 + 6) \Leftrightarrow \mu_3 \geq (\mu_5 + 2\mu_8 + 3\mu_{14} + 1)/2 - 1$$

Auf diese Weise können viele Ungleichungen angegeben werden, die die Anzahl der zu untersuchenden Packungen erheblich einschränken.

Zu einem Vektor $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{14})^T$ sei $\Sigma(\mu) = \mu_1 + \dots + \mu_{14}$ die Komponentensumme. Zu einer festen Komponentensumme werden nun nacheinander zu den Vektoren μ in lexikographischer Reihenfolge die Ausschnittpolytope und die durch diese bestimmten Packungen berechnet. Kann durch Translation oder Symmetrie ein Ausschnittpolytop erhalten werden, dessen Vektor μ lexikographisch kleiner ist, so braucht die Packung nicht berücksichtigt zu werden. Die Komponentensumme bleibt bei den erwähnten Abbildungen konstant.

Die Ergebnisse dieses Verfahrens für $\rho = 1$ sind in Abbildung 3.10 dargestellt. Dabei stellt die durchgehende Kurve die Dichte der Wurstpäckung dar, und die gepunktete zum besseren Vergleich, die interpolierte Wulff-shape des *fcc*-Gitters wie in Abbildung 3.3. Die Punkte stehen für die parametrische Dichte der für dieses ρ dichtesten nicht wurstförmigen *hcp*-Packung. Alle mit diesem Verfahren gefundenen, für einen Parameter dichtesten *hcp*-Packungen mit Komponentensumme kleiner als 24 sind in Tabelle B.3 angegeben. Wurstpäckungen wurden dort weggelassen. Es ist nicht sinnvoll, diese Ergebnisse im Bereich großer Parameter $\rho > 1.5$ als gute Beispiele für Packungen zu betrachten, da in diesem Bereich, wie auch schon für das *fcc*-Gitter, andere Facetten eine wichtige Rolle spielen. Die Bedeutung anderer Facetten nimmt außerdem mit der Anzahl der Kugeln zu. Abbildung 3.10 ist zu entnehmen, dass die *hcp*-Packungen mit 5,12 und 22

Abbildung 3.10: Dichten der hcp-Packungen für $\rho = 1$

Kugeln durch besonders große Dichte auffallen. Alle diese Packungen liegen in nur drei hexagonalen Gitterschichten. Die Kugelmittelpunkte in der mittleren Gitterschicht bilden ein reguläres Dreieck mit 3,6 bzw. 10 Kugelmittelpunkten, an das in jeder Nachbarschicht jeweils ein reguläres Dreieck mit 1,3 bzw. 6 Kugelmittelpunkten angrenzt. Damit fallen diese Packungen auch unter den Typ der bipyramidalen Packungen, die im nächsten Abschnitt behandelt werden. Die Packung mit 20 Kugeln sticht im Vergleich mit den auf anderem Wege erhaltenen Packungen ebenfalls durch eine besonders gute Dichte hervor.

3.4 Bipyramidale Packungen

In der Arbeit von Gandini und Wills [GW] wird eine Packung in bipyramidaler Gestalt benötigt, um für 61 Kugeln eine Packung anzugeben, die die Wurstpackung für Parameter $\rho = 1$ in der Dichte übertrifft. Eine systematische Untersuchung aller Packungen dieser Form bietet sich, auch vor dem Hintergrund des letzten Abschnittes, an. Mit bipyramidalen Packungen werden in dieser Arbeit Packungen bezeichnet, die in tetragonalen Bipyramiden enthalten sind, die zwei an einer Facette übereinstimmenden regulären *fcc*-Tetraedern entsprechen.

Vollständige bipyramidale Packungen bestehen aus

$$0, 1, 5, 14, 30, 55, \dots, n(n+1)(2n+1)/6, \dots$$

Kugeln. Die Anzahl nimmt immer um eine Quadratzahl zu, wie bei den Anzahlen für Pyramiden mit quadratischer Grundfläche, deren Dichte schlechter ist. Um

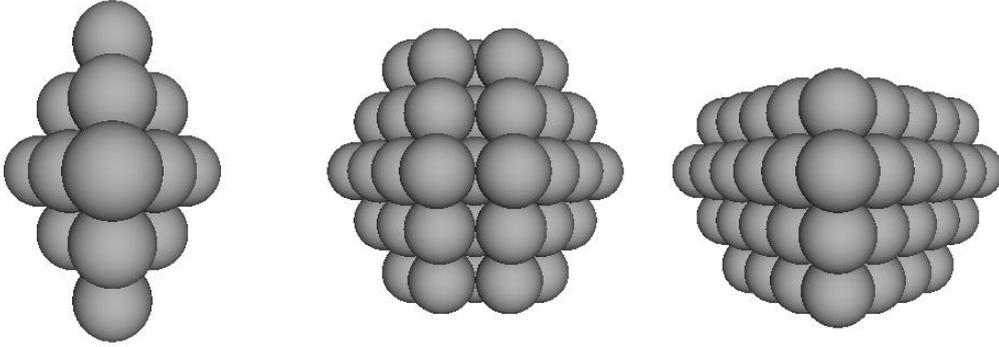


Abbildung 3.11: Bipyramidale Packungen mit 14, 56 und 61 Kugeln

diese Klasse zu erweitern werden zusätzlich Schnitte, wie in Abschnitt 3.2, an den beiden zu verklebenden Tetraedern zugelassen, so dass die Vereinigung der Tetraeder ein konvexer Körper ist. Zulässige Schnitte sind das Abschneiden der Ecken und der Kanten der Tetraeder, die nicht in der gemeinsamen Fläche liegen. Dabei werden Kanten die spiegelsymmetrisch zu der Ebene der gemeinsamen Facette liegen gleich abgeschnitten. In Abbildung 3.11 sind Beispiele mit 14, 56 und 61 Kugeln dargestellt. Im linken Bild ist eine vollständige Bipyramide zu sehen, an der man die Lage der beiden Tetraeder erkennen kann, die in allen Bildern gleich ist. Bei der gezeigten Packung mit 61 Kugeln wurden an keiner Kante Kugeln entfernt, bei der Packung mit 56 Kugeln dagegen an allen 6 möglichen Kanten.

Definition 3.4.1 $B_{k_1, k_2, k_3, k_4, k_5}^k$ mit $k_i \geq k_j$ für $i \geq j$ ist eine bipyramidale Packung. Diese enthält die Punkte $M = M_1 \cup M_2$ mit

$$M_1 = \left\{ a \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} \right. \\ \left. \mid a + b + c \leq k, c \leq k - k_1, a + b \geq k_3, a \leq k - k_4, b \leq k - k_5 \right\}$$

$$M_2 = \left\{ a \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \right. \\ \left. \mid a + b + c \leq k, c \leq k - k_2, a + b \geq k_3, a \leq k - k_4, b \leq k - k_5 \right\}$$

wobei $a, b, c \in \mathbb{N}_0$. Bei dieser ganzzahligen Beschreibung haben die Punkte einen Abstand von $\sqrt{18}$. Daher muss die Packung zur Berechnung der Dichte mit dem Faktor $\sqrt{2}/3$ normiert werden.

Bemerkung 3.4.2 Die Bedingungen $k_1 \geq k_2$ und $k_3 \geq k_4 \geq k_5$ sind aus Symmetriegründen sinnvoll. $k_2 \geq k_3$ ergibt sich aus den Bedingungen für M_2 : $a+b+c \leq k$ und $a+b \geq k_3$.

3.5 Packungen anderen Typs

In diesem Abschnitt werden Packungen behandelt, deren Dichte mit dem zu Beginn des Kapitels beschriebenen Verfahren aus der Menge ihrer Punkte berechnet wurde. Dies beinhaltet insbesondere Packungen, die unter dem Aspekt einer anderen Dichte als besonders dicht gelten, wie z.B. die dichtesten Packungen bezüglich des zweiten Moments [CDHS] und Packungen die aus einer dekaederförmigen Packung gewonnen wurden. Letztere gerieten in den Blickpunkt des Interesses, weil Packungen dieser bzw. ähnlicher Gestalt im Bereich von 15 – 23 Kugeln nicht nur bezüglich Parametrischer Dichte auffielen, sondern auch unter dem Murrell-Mottram Potential für Goldcluster in [WJ].

Zu den Goldclustern konnten die Koordinaten der Kugelmittelpunkte dem Birmingham-Cluster-Web [BCW] entnommen werden. Die Koordinaten der Mittelpunkte der Minimal-Energy Cluster aus [CDHS] werden auf den Webseiten von N.J.A. Sloane [NJAS] zur Verfügung gestellt. Eine weitere Quelle für Koordinatenlisten ist die Cambridge-Cluster-Database [CCD].

Bei den Packungen, deren Koordinaten aus physikalischen Berechnungen stammen, denen also ein physikalisches Potential zugrunde liegt, ist zu beachten, dass es sich um Soft-Sphere Packungen handelt. Das heißt, der Abstand zwischen zwei Kugelmittelpunkten kann kleiner sein als der Durchmesser der Kugeln. Da die meisten Potentiale aber einen sehr starken repulsiven Anteil haben, ist der Abstand nur geringfügig kleiner. Um diese Packungen vergleichen zu können, wurden sie mit dem doppelten Reziproken des Minimalabstandes multipliziert, so dass der Abstand zweier Punkte jeweils größer oder gleich 2 ist. Obwohl die gemischten Volumina bei einer solchen Abbildung zunehmen, sind einige dieser Packungen sehr dicht.

Zudem wurden Packungen untersucht, deren Mittelpunkte bestimmt werden konnten. Hier sind z.B. die dekaedrischen Packungen (Abb. 3.12) und die Deltaeder zu erwähnen. Da die Packungen als Punktmengen gegeben sind und die gemischten Volumina aus diesen Punkten berechnet werden, ist es ein Leichtes die Packungen durch Hinzunehmen oder Weglassen eines Punktes zu verändern. Besonders bei den dekaedrischen Packungen wurden, angeregt durch z.B. das Goldcluster für 15 Atome (s. Abb. A.1), sukzessive Eckpunkte entfernt. Diese Packungen sind unter anderem deshalb interessant, weil sie 5-zählige Symmetrien aufweisen, bzw. aus Packungen entstanden sind, die diese Symmetrien haben.

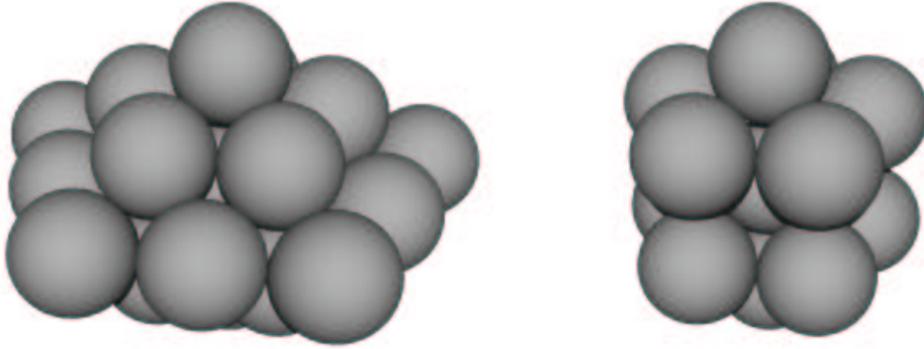


Abbildung 3.12: Vollständige und trunkeerte Dekaderpackung

Diese Symmetrien wurden bei einigen Untersuchungen realer Cluster festgestellt. Bei den Dekaedern sind zwei sinnvolle Konstruktionen denkbar. Beide basieren auf der Struktur aus 7 Kugeln, eine Bipyramide auf 5-eckiger Grundfläche. Die Grundfläche kann so gewählt werden, dass die Kantenlänge 2 ist, d.h. dass sich die Kugeln an den Ecken des 5-Ecks berühren, oder man wählt die Kantenlänge etwas größer, so dass die beiden Spitzen zu allen anderen Kugeln, besonders untereinander, den Abstand zwei haben. Der erste Ansatz ist, wie sich herausstellt, der bzgl. Parametrischer Dichte optimale. Die vollständige Packung wie in Abbildung 3.12 links, hat eine durch reguläre Dreiecke triangulierbare Oberfläche. Gute Packungen dieser Art findet man in Abb. A.5.

Mit diesem Verfahren kann zügig ein Vergleich mit Packungskandidaten, die optimal sein könnten, durchgeführt werden.

3.6 Ergebnisse

Nun werden die dichtesten Packungen, die auf verschiedene Arten ermittelt wurden, verglichen. Besonders die Cluster mit geringen Kugelzahlen sind für strukturelle Unterschiede interessant, da alle im vorigen Abschnitt beschriebenen Ansätze in diesem Bereich Ergebnisse liefern.

3.6.1 Cluster mit 3-14 Kugeln

Die dichtesten Packungen mit 3–14 Kugeln sind in Tabelle 3.1 angegeben. Dabei sind die Werte für das Integral der mittleren Krümmung (M), Oberfläche (O) und Volumen (V) normiert angegeben, um einen besseren Vergleich von Packungen mit verschiedenen Kugelanzahlen zuzulassen. Sowohl M/n als auch O/n konvergieren für $n \rightarrow \infty$ gegen 0, V/n gegen $\pi/\sqrt{18}$, die Dichte der unendlichen Packung. Dies spiegelt den Bedeutungsverlust der Randflächen mit wachsendem

n wieder. Die Spalte "Struktur" gibt an, mit welchem Verfahren die Packung erhalten wurde. Dabei ist fcc-g eine Groemerpackung aus dem fcc-Gitter, fcc-g2 eine fcc-Packung mit dichtesten und zweitdichtesten Facetten, bipyr eine Bipyramidale Packung, delta eine Packung, deren Mittelpunkte die Ecken eines Deltaeders bilden und irr eine Packung, die keinem dieser Fälle zugeordnet werden kann. Wurstpäckungen wurden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht berücksichtigt, sie sind jedoch für den nicht angegebenen Parameterbereich optimal. Die Packungen für $\rho > 2.026$ und $4 \leq n \leq 12$, dies sind für $n \neq 11$ die Deltaeder, sind in Abb. A.2 dargestellt. Diese Packungen haben also unter allen Betrachteten minimales Integral der mittleren Krümmung. Zudem haben sie auch minimale Oberfläche (siehe Kapitel 5). In Abb. A.4 sind alle anderen Packungen mit bis zu 12 Kugeln und minimaler Oberfläche dargestellt. Zudem das Tetraeder mit 10 Kugeln und

| n | M/n | O/n | V/n | Struktur | ρ_u | ρ_o |
|----|-------|-------|-------|----------|----------|----------|
| 3 | 3.141 | 1.155 | 0 | fcc-g | 1.102 | ∞ |
| 4 | 2.866 | 1.732 | 0.236 | fcc-g | 1.058 | ∞ |
| 5 | 2.7 | 2.078 | 0.377 | bipyr | 1.048 | ∞ |
| 6 | 2.462 | 2.309 | 0.628 | fcc-g | 1.048 | ∞ |
| 7 | 2.354 | 2.474 | 0.689 | delta | 1.035 | ∞ |
| 8 | 2.356 | 2.598 | 0.707 | fcc-g | 1.042 | 1.107 |
| 8 | 2.232 | 2.598 | 0.859 | delta | 1.107 | ∞ |
| 9 | 2.321 | 2.694 | 0.733 | fcc-g | 1.041 | 1.160 |
| 9 | 2.113 | 2.694 | 1.013 | delta | 1.160 | ∞ |
| 10 | 2.105 | 2.771 | 0.943 | fcc-g | 1.036 | 1.497 |
| 10 | 2.016 | 2.771 | 1.143 | delta | 1.497 | ∞ |
| 11 | 2.099 | 2.834 | 0.943 | fcc-g | 1.036 | 1.313 |
| 11 | 1.949 | 2.834 | 1.203 | irr | 1.313 | ∞ |
| 12 | 1.911 | 2.887 | 1.1 | bipyr | 1.028 | 2.026 |
| 12 | 1.824 | 2.887 | 1.454 | delta | 2.026 | ∞ |
| 13 | 1.92 | 2.931 | 1.088 | bipyr | 1.028 | 1.106 |
| 13 | 1.861 | 2.931 | 1.16 | fcc-g | 1.106 | 1.628 |
| 13 | 1.764 | 2.912 | 1.45 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ |
| 14 | 1.929 | 2.969 | 1.077 | bipyr | 1.028 | 1.106 |
| 14 | 1.874 | 2.969 | 1.145 | fcc-g | 1.106 | 1.294 |
| 14 | 1.716 | 2.913 | 1.482 | fcc-g2 | 1.294 | ∞ |

Tabelle 3.1: Dichteste Packungen mit n Kugeln $3 \leq n \leq 14$

zwei fcc-Packungen mit 12 Kugeln. Die beiden abgebildeten fcc-Packungen mit 8 Kugeln haben die gleichen gemischten Volumina, d.h. es gibt keine eindeutige dichteste Packung für 8 Kugeln und den angegebenen Parameterbereich.

Deltaeder haben die besondere Eigenschaft, dass alle Facetten reguläre Drei-

ecke sind. Es gibt keine weiteren Polytope, außer den angegebenen 8, die diese Eigenschaft erfüllen ([J]). Gleichzeitig enthalten die Deltaeder drei der fünf Platonischen Körper: das Tetraeder, das Oktaeder und das Ikosaeder.

Für diese Arbeit sind sie von besonderer Bedeutung, da sie nicht nur unter dem Gesichtspunkt der parametrischen Dichte besonders gut sind, sondern auch die optimalen Goldcluster in [WJ] diese Gestalt haben. Ebenso wird in [CDHS] gezeigt, dass die Deltaeder bis auf das Ikosaeder minimales zweites Moment haben. Dies ist ein Indiz dafür, dass dichte und energieminimale Cluster zu ähnlichen Strukturen führen.

3.6.2 Cluster mit 15 - 56 Kugeln

Dieser Bereich ist aus mathematischer Sicht interessant, weil die dichteste Packung für den Parameter $\rho = 1$ und weniger als 56 Kugeln in allen Fällen die lineare Anordnung, die sogenannte Wurstkonfiguration ist. Außerdem sind in diesem Bereich alle fcc-Packungen mit dichtesten Facetten untersucht worden, d.h. man weiß, dass es keine dichtere Packung mit fcc-Struktur und dichtesten Facetten in diesem Bereich geben kann.

Unter den Packungen mit bis zu 14 Kugeln traten bei nur zwei Packungen Facetten auf, bei denen die in ihnen enthaltenen Kugelmittelpunkte keine Teilmenge eines hexagonalen Gitters waren. Vor allem auch die Packungen mit minimaler mittlerer Krümmung wiesen bei weniger als 12 Kugeln keine solchen Facetten auf. Dies ist bei allen Packungen mit mehr als 12 Kugeln anders. Die Erwartung von weniger dichten Facetten wird durch das Wulff-shape gestützt. Mit wachsendem Parameter tritt die Minimierung des Integrals der mittleren Krümmung immer stärker in den Vordergrund vor der Minimierung der anderen Quermaßintegrale. In der zugehörigen Wulff-shape für das fcc-Gitter treten dann immer mehr Facetten auf, deren zugehörige Untergitter schlechtere Dichte haben. Konvergiert der Parameter gegen unendlich, ist die Wulff-shape die Kugel. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass für wachsenden Parameter vermutlich noch andere Konfigurationen mit schlechteren Facetten in die Liste der dichtesten Packungen aufgenommen werden müssen. Im dem in diesem Abschnitt betrachteten Bereich wird die Anzahl solcher Packungen aber noch nicht so groß sein, so dass ich zuversichtlich bin, dass die Liste nahezu vollständig ist.

Betrachtet man die volldimensionalen Packungen, die für kleinen Parameter ρ optimal sind, so bestätigt sich die durch die Wulff-shape angeregte Vermutung, dass dichteste Packungen für kleine Parameter auch dichteste Facetten haben. In allen Fällen außer für $n = 42$ und $n = 48$, in denen fcc-Packungen mit zweitdichtesten Facetten auftreten, ist dies ein Quadrat der Kantenlänge 2. In den beiden erwähnten Fälle treten zwei dieser quadratischen Facetten auf. Für alle Fälle, in denen die dichteste volldimensionale Packung für minimalen Parameter nicht ausschließlich dichteste Facetten hat, gibt es eine Groemerpackung (s. Tab. B.2), die für kleineren Parameter dichter ist. Dies kann man leicht durch Ver-

gleich der Werte für V bzw. V/n feststellen. Der Parameter, unterhalb dessen die Groemerpackung dichter ist, liegt für $15 < n < 56$ zwischen 0.94 und 1.

Zudem ist zu erwähnen, dass die Packungspolytope der dichtesten Packungen für 19 und 44 Kugeln mit kleinem Parameter ρ Oktaeder sind. Die Packungen, bei denen sukzessive die 6 Ecken dieser oktaedrischen Packungen abgeschnitten werden, zählen auch zu den dichtesten für einen gewissen Parameterbereich. Betrachtet man für die Tetraederschnitte $T_{k_1, k_2, k_3, k_4, \dots}^k$ das Verhältnis von k_1 zu k , so fällt auf, dass k_1 immer im Bereich von $k/2 \pm 1$ liegt, zumeist sogar sehr nahe bei $k/2$. Dies deutet darauf hin, dass die Tetraederschnitte besonders dicht sind, deren Gestalt nahezu oktaederförmig ist.

3.6.3 Cluster mit mehr als 56 Kugeln

Die Packungen mit mehr als 56 Kugeln werden von den fcc -Packungen dominiert. Das liegt zum Teil daran, dass andere Packungen gar nicht für diese Kugelzahlen berechnet wurden oder Konfigurationen gar nicht vorlagen (z.B. hcp oder Goldcluster). Packungen mit bipyramidaler Form erscheinen gelegentlich in der Tabelle und auch einige Lennard-Jones-Packungen ([CCD],[SPDB]). Die fcc -Packungen

| n | M/n | S/n | V/n | Struktur | ρ_u | ρ_o | Typ |
|-----|-------|-------|-------|----------|----------|----------------|-------------------|
| 61 | 0.873 | 2.839 | 2.457 | bipyr | 0.998 | 1.083 | $B_{4,3}^5$ |
| 65 | 0.754 | 2.67 | 2.843 | bipyr | 2.629 | ∞ | $B_{4,4,2,2,1}^6$ |
| 71 | 0.779 | 2.781 | 2.603 | bipyr | 0.995 | 1.123 | $B_{3,3}^5$ |
| 77 | 0.684 | 2.661 | 3.203 | LJ | 8.029 | ∞ | [CCD] |
| 85 | 0.65 | 2.562 | 2.973 | bipyr | 1.280 | ∞ | $B_{4,4,1,1,1}^6$ |
| 89 | 0.621 | 2.519 | 3.093 | bipyr | 2.277 | ∞ | $B_{5,5,2,2,2}^7$ |
| 95 | 0.603 | 2.503 | 3.146 | bipyr | 3.480 | ∞ | $B_{5,4,2,2,2}^7$ |
| 98 | 0.586 | 2.585 | 3.673 | LJ | 507.185 | ∞ | [CCD] |
| 99 | 0.59 | 2.488 | 3.124 | bipyr | 2.392 | ∞ | $B_{5,5,2,2,1}^7$ |
| 100 | 0.647 | 2.633 | 2.866 | bipyr | 0.991 | 1.010 | $B_{4,4}^6$ |
| 102 | 0.573 | 2.533 | 3.546 | LJ | 38.805 | ∞ | [CCD] |
| 103 | 0.571 | 2.533 | 3.546 | LJ | 11.623 | ∞ | [CCD] |
| 113 | 0.545 | 2.432 | 3.237 | bipyr | 3.480 | $7 \cdot 10^6$ | $B_{6,6,3,2,2}^8$ |
| 189 | 0.397 | 2.172 | 3.592 | bipyr | 1.911 | ∞ | $B_{6,6,3,2,2}^9$ |

Tabelle 3.2: dichteste Packungen mit mehr als 56 Kugeln, die nicht fcc -Packungen sind

bis 100 Kugeln findet man in Tabelle B.2. Tabelle 3.2 enthält die Packungen, die keine fcc -Packungen sind. Betrachtet man die Packungen im Parameterbereich um 1, so findet man das Oktaeder als dominierende Form. Für die Zahlen 6, 19, 44, 85, 146, 231, 344 ist die Packung oktaedrisch und für die Packungen mit bis zu 6 Kugeln weniger, sind die Packungen bei denen von der Oktaederpackung

sukzessive die 6 Ecken abgeschnitten wurden, unter den dichtesten in diesem Parameterbereich. Das diese Packungen für 79,80 und 140 Kugeln nicht in der Tabelle aufgeführt sind liegt an der Dominanz der Wurstopackung für kleine Kugelanzahlen. Der Wurstopparameter $\rho_{s,n}$ fällt gegen $\sqrt{\sqrt{8}/\pi} \approx 0.9488$ (s. Abb. 3.7). Es zeigt sich auch, dass dichte Facetten für kleine Parameter dominieren. Zwar haben viele der fcc-Packungen zweitdichteste Facetten, die aber im Verhältnis zu den dichtesten Facetten nur einen geringen Teil der Oberfläche einnehmen. Für größere Parameter nehmen diese Anteile jedoch schnell zu.

Kapitel 4

Ikocluster

4.1 Einleitung

Bei physikalischen Berechnungen und Experimenten mit Microclustern von z.B. Metallatomen nimmt die Ikosaedersymmetrie der Strukturen eine besondere Stellung ein. Experimente mit Edelgasen deuten darauf hin, dass etliche Cluster mit 13 bis ca. 1000 Atomen Ikosaedersymmetrie aufweisen, obwohl diese Gase in einem *fcc*-Gitter kristallisieren. Zudem findet man fünffache Symmetrien bei Quasikristallen oder auch durch direkte Beobachtung kleinerer Metallpartikel mittels *high-resolution electron microscopy*. Massenspektroskopische Untersuchungen liefern bei solchen Stoffen eine Häufung bei Clustern mit 13, 55, 147, 309, 561 ... Atomen. Dies sind genau die "magischen" Zahlen, bei denen die Cluster die Form von Ikosaedern haben können. Dabei entsteht das nächst größere Ikosaeder dadurch, dass auf ein Ikosaeder eine Schicht weiterer Atome aufgebracht wird. Im folgenden werden die Cluster in Form eines Ikosaeders als Ikocluster bezeichnet. ([Ma] S.222, [Ho]).

Ein Ikosaeder hat 20 Facetten, 12 Ecken und 30 Kanten. Es kann in 20 kongruente Simplizes zerlegt werden, die eine gleichseitiges Dreieck mit Kantenlänge a_1 als Grundfläche und 3 gleichschenklige Dreiecke mit Schenkeln der Länge a_2 als Seitenflächen haben. Diese werden so zusammengesetzt, dass sich alle Simplizes an der Spitze berühren. Die Simplizes entsprechen nahezu regulären Tetraedern. Dabei gilt für die Kantenlängen:

$$q := \frac{a_1}{a_2} = \sqrt{\frac{10 - 2\sqrt{5}}{5}} \approx 1.0514 \quad (4.1)$$

Betrachtet man eine Kugelpackung (Radius $r = 1$) in Form eines Ikosaeders mit einer Kugel in der Mitte und zwölf weiteren die die mittlere Kugel berühren und bei denen die konvexe Hülle der Mittelpunkte ein Ikosaeder bildet, so ist der Abstand zweier äußerer Kugeln $2\frac{a_1}{a_2} \approx 2.102$. Die äußeren Kugeln berühren sich

somit nicht. Um die parametrische Dichte dieser Packung zu berechnen benötigt man die Werte für die mittlere Krümmung $M(a)$, die Oberfläche $O(a)$ und das Volumen $V(a)$ des Ikosaeders, wobei a die Kantenlänge eines gleichseitigen Dreiecks auf der Oberfläche des Ikosaeders ist.

Es gilt:

$$V(a) = \frac{5}{12}(3 + \sqrt{5}) \cdot a^3 \quad (4.2)$$

$$O(a) = 5\sqrt{3} \cdot a^2 \quad (4.3)$$

$$M(a) = 30 \arccos\left(\frac{2}{3} \frac{(7 + 3\sqrt{5})\sqrt{3}}{(3 + \sqrt{5})(\sqrt{5} + 1)}\right) \cdot a \quad (4.4)$$

Im Falle einer Kugelpackung von 13 Kugeln hat das Ikosaeder die Kantenlänge $k = 2q = \frac{8}{\sqrt{10+2\sqrt{5}}}$. Die Packung hat dann die Dichte:

$$\delta_{Iko}(\rho) = \frac{13 \cdot 4/3 \cdot \pi}{4/3 \cdot \pi \cdot \rho^3 + M(k) \cdot \rho^2 + O(k) \cdot \rho + V(k)} \stackrel{\rho=1}{\approx} 0.635 \quad (4.5)$$

Die Ikosaederpackung ist damit für $\rho = 1$ schlechter als z.B. die Kuboktaederpackung (Sie entsteht aus der Oktaederpackung mit 19 Kugeln durch Entfernen der 6 Kugeln an den Ecken) oder als die zweischichtige Packung $T_{2,1,1,1}^3$. Interessant ist, dass für jede Zahl von Kugeln, für die es eine Ikosaederpackung gibt, auch eine Kuboktaederpackung existiert. Falls K die Anzahl der Kugeln einer Kante ist, so gilt für die Kugelanzahl n der Packung (z.B. [Ma] S.207):

$$n = \frac{10}{3}K^3 - 5K^2 + \frac{11}{3}K - 1 \quad (4.6)$$

4.2 Abplattung

Da 12 Kugeln der Ikosaederpackung nur die mittlere Kugel berühren, besteht bei den Ikoclustern die Möglichkeit der Abplattung. Das heißt, die 12 Kugeln werden durch volumengleiche Rotationsellipsoide ersetzt, wodurch die Zwischenräume zwischen den äußeren Kugeln stärker gefüllt werden und die Mittelpunkte der Ellipsoide näher an der inneren Kugel liegen. Dadurch wird die Dichte der Konfiguration verbessert. Betrachtet man die Packung als Atomcluster, macht dies Sinn, da sich die Elektronenbahnen um die Atomkerne unter Kräfteeinfluss verändern können. Das kugelförmige Modell eines Atoms entartet dann zu einem volumengleichen Rotationsellipsoid, bei dem für die Hauptachsen gilt $a = 1/b^2$. Um eine möglichst große Verbesserung der Dichte zu erreichen, werden die Ellipsoide so gewählt, dass sie jeweils fünf andere und die mittlere Kugel berühren. Auf der Rotationsachse des Ellipsoids liegt eine Halbachse mit Länge kleiner als 1. Sie geht

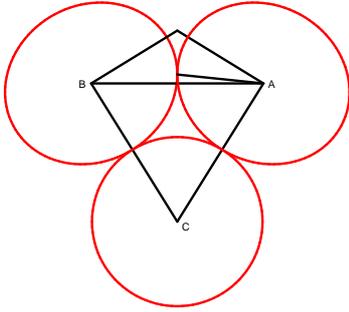


Abbildung 4.1: Abplattung

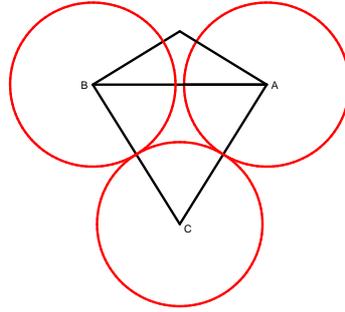


Abbildung 4.2: ohne Abplattung

durch den Mittelpunkt und eine Ecke des Ikosaeders. Die Ebene durch den Mittelpunkt und zwei benachbarte Ecken ist in in Abb. 4.1 bzw 4.2 dargestellt. Für den Vektor \mathbf{c} vom Mittelpunkt des Ikosaeders zu einer Ecke gilt: $\mathbf{c} = \overrightarrow{CA} = (c_x, c_y)^T$ und $c_y = (\sqrt{5} + 1)/2 \cdot c_x$. Seien a und b die Längen der Hauptachsen und $\hat{\mathbf{c}}$ der Einheitsvektor in Richtung von \mathbf{c} . Dann gilt $\mathbf{a} = a \cdot \hat{\mathbf{c}}$ und $\mathbf{b} = b \cdot (-\hat{c}_y, \hat{c}_x)^T$. Die Parametrisierung der Ellipse ergibt sich dann aus $\mathbf{f}(\alpha) = \sin(\alpha)\mathbf{a} + \cos(\alpha)\mathbf{b}$. Die beiden Ellipsen berühren sich dort, wo $f'_x(\alpha) = 0$. Dies gilt für

$$\alpha_t = -\arctan\left(\frac{2}{b^3(\sqrt{5} + 1)}\right).$$

Ebenso muss gelten $\|\mathbf{c}\| = 1 + a = 1 + 1/b^2$. Daraus folgt

$$c_x = \frac{\sqrt{50 - 10\sqrt{5}} (b^2 - 1)}{10b^2}.$$

b ergibt sich aus der Gleichung $f_x(\alpha_t) = -c_x$ zu

$$b = \frac{1}{2}\sqrt{3 - \sqrt{5} + \sqrt{62 - 22\sqrt{5}}} \approx 1.041939.$$

Somit gilt $a = 1/b^2 \approx 0.921$.

Auf eine solche Packung ist die Parametrische Dichte in der Form:

$$\delta_\rho(C_n) = \frac{n\kappa_d}{V(\text{conv}(C_n) + \rho B^d)}$$

nicht mehr anwendbar. Daher wird die folgende Modifizierung der Parametrischen Dichte eingeführt:

Definition 4.2.1 Sei $C_n = \{K_1, K_2, \dots, K_n\}$ eine Packung von n konvexen Körpern K_i mit Mittelpunkt $m(K_i)$, d.h. $\text{int}(K_i) \cap \text{int}(K_j) = \emptyset \quad \forall i \neq j \quad 1 \leq$

$i, j \leq n$, und $\rho > 0$, dann sei

$$\delta_\rho(C_n) = \frac{\sum_{i=1}^n V(K_i)}{V(\text{conv}(\bigcup_{i=1}^n (\rho K_i + (1-\rho)m(K_i))))}$$

die (verallgemeinerte) Parametrische Dichte der Packung C_n .

Diese Dichte hat den erheblichen Nachteil, dass der Nenner nicht ohne weiteres, wie in der ursprünglichen Definition, als Polynom von Quermaßintegralen bzw. gemischten Volumina geschrieben werden kann. Ein Beispiel in der Ebene zeigt die Schwierigkeiten dieser neuen Definition: Wir betrachten eine Packung aus 6 ebenen konvexen Körpern, 5 Ellipsen und ein Kreis. Dabei sind die Ellipsen kongruent und so gewählt, dass sie wie in Abb. 4.3, so um den Kreis angeordnet werden können, dass jede Ellipse zwei weitere berührt. Für wachsendes ρ spielen im Gegensatz zu Packungen von Translaten unterschiedliche Facetten eine Rolle. Der Begriff Facette wird hierbei für alle 1-dimensionalen konvexen Teilmengen der Randpunkte der konvexen Hülle gebraucht. Aufgrund der verschieden langen Hauptachsen und der unterschiedlichen Lage der Ellipsen treten bei wachsendem ρ zunächst die durchgezogenen Tangenten (Abb. 4.3) als Facetten in Erscheinung, dann kommen die gestrichelten Tangenten hinzu, so dass es 10 Facetten gibt. Bei weiter wachsendem ρ werden die durchgezogenen Tangenten durch die gepunkteten als Facetten ersetzt. Für $\rho \approx 3.1312$ schrumpft die Länge der durchgezogenen Tangenten auf 0, um danach wieder zu wachsen. Für dieses ρ ist die konvexe Hülle der um ρ dilatierten Körper strikt konvex und hat eine nahezu kreisförmige Gestalt (Abb. 4.4). Ab $\rho \approx 11.096$ sind nur noch die gestrichelten und gepunkteten Tangenten als Facetten vorhanden. Für diesen ρ -Bereich ergibt sich der Flächeninhalt zu $15.423\rho + 2.257\rho^2$. In diesem Polynom gibt es keinen konstanten Term. Für $\rho < 3.13$ ist dieser aber notwendig, da für $\rho = 0$ die Fläche nicht verschwindet. Somit kann es kein für alle ρ einheitliches Polynom geben, das den Flächeninhalt $V(\text{conv}(\bigcup_{i=1}^6 \rho K_i))$ beschreibt.

Wenden wir uns nun wieder der Ikosaederpackung mit Ellipsoiden zu. Es kann also nicht erwartet werden, ein Polynom zu finden, das das Volumen im Nenner der Dichte für alle ρ zutreffend beschreibt. Um das Volumen zumindest für kleine ρ zu berechnen, wird die konvexe Hülle $L_\rho = \text{conv}(\bigcup_{i=1}^6 \rho K_i)$ in 4 Teile zerlegt.

- Die konvexe Hülle der Mittelpunkte (V_1)
- Die Volumenanteile, die aus der konvexen Hülle einer Facette von L_ρ und der zugehörigen Facette des Mittelpunktsikosaeders bestehen (V_2)
- Volumenanteile der Ellipsoide K_i aus

$$\text{conv}(m(K_i) \cup (bd(K_i) \cap bd(\text{conv}(\bigcup K_i))))$$

Dies ist eine Art Kegel mit Spitze in $m(K_i)$. (V_3)

- Die restlichen Volumenanteile, die den Kanten des Mittelpunktsikosaeders zugeordnet werden können. (V_4)

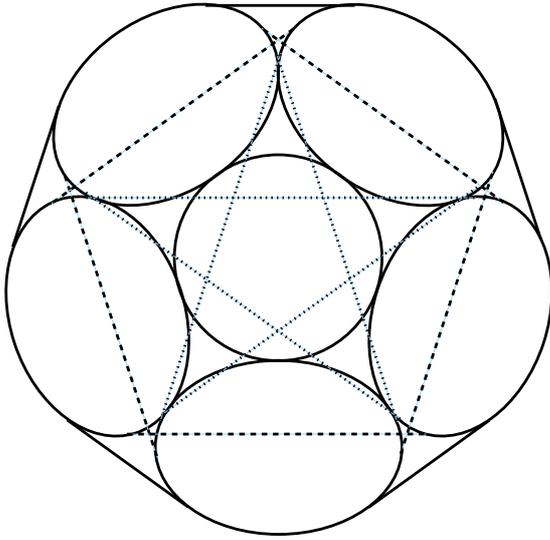


Abbildung 4.3: Ellipsenpackung

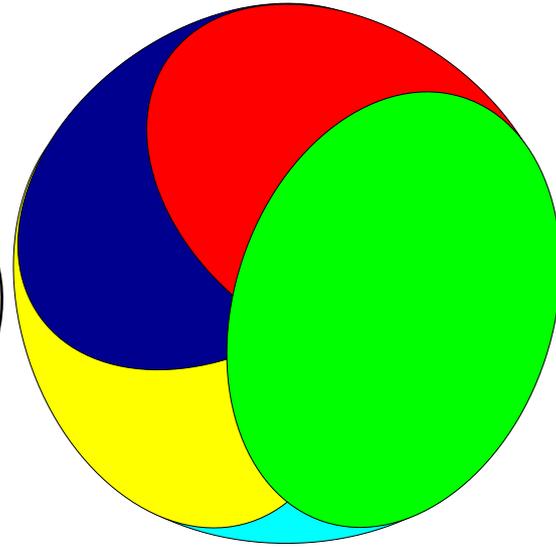


Abbildung 4.4: $\rho \approx 3.1312$

4.2.1 Die konvexe Hülle der Mittelpunkte

Aus dem bekannten Volumen V_{alt} des Icosaeders mit Abstand 2 von Mittelpunkt zur Ecke (siehe Gleichung 4.5) erhält man mittels der Feststellung, dass dieser Abstand bei der Packung mit Ellipsoiden $1 + a$ beträgt das gesuchte Volumen V_1 zu

$$V_1 = V_{alt} \cdot \left(\frac{1+a}{2}\right)^3 \approx 17,98 \quad (4.7)$$

4.2.2 Volumenanteile über den Facetten

Um diesen Volumenanteil, der aus mehreren Pyramidenstümpfen besteht, zu berechnen muss zunächst der Schnittpunkt des Ellipsoids mit einer Facette der konvexen Hülle der Ellipsoide bestimmt werden. Dazu wird das Ellipsoid auf eine Gerade parallel zu dem Normalenvektor der Facette projiziert und dann der Punkt des Ellipsoids ermittelt, dessen Projektion die maximale Länge hat.

Es genügt hierzu dies in der Ebene, die durch eine Ecke A der Facette des Mittelpunktsikosaeders, deren Mittelpunkt M_F und den Mittelpunkt M des Icosaeders gegeben ist, zu betrachten (s. Abb. 4.5). Der Winkel α ist aus der Berechnung des Icosaeders bekannt und es gilt $\alpha = \arccos\left(\frac{3+\sqrt{5}}{\sqrt{30+6\sqrt{5}}}\right) \approx 37,38^\circ$.

Für die Projektion ist es ausreichend, den Winkel α zu kennen. Die Ellipse wird so parametrisiert, dass die kurze Halbachse in z -Richtung zeigt: $\mathbf{r}(\theta) = (b \sin(\theta), 0, a \cos(\theta))^T$. Daraus geht hervor, dass wir die Projektion in der xz -Ebene betrachten.

Die Länge des projizierten Vektors $p(\theta)$ ergibt sich wie folgt: $p(\theta) = \mathbf{r}(\theta) \cdot (\sin(\alpha), 0, \cos(\alpha))^T$. Mittels Extremwertbestimmung erhält man für das Maxi-

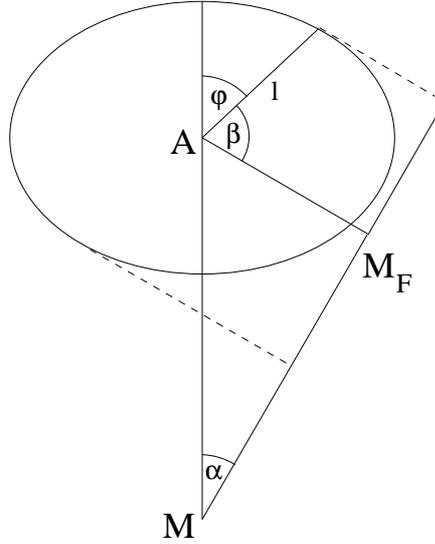


Abbildung 4.5: Projektion

zum $\theta_{max} = \arctan(-b^3\sqrt{5} + 3b^3)$. Somit gilt $l = \|\mathbf{r}(\theta_{max})\| \approx 0.9746$,

$$\varphi = \arccos\left(\frac{\mathbf{r}(\theta_{max}) \cdot (0, 0, 1)^T}{l}\right)$$

und $\beta = \pi/2 + \alpha - \varphi$. Der Pyramidenstumpf hat als Grundfläche ein gleichseitiges Dreieck der Kantenlänge $2c_x$. Mit β erhält man für die Höhe h_2 der vollständigen Pyramide: $h_2 = 2c_x/\sqrt{3} \cdot \tan \beta$ und für die Kantenlänge k_2 der übrigen Kanten: $k_2 = 2c_x(\sqrt{3} \cos \beta)^{-1}$. Der Stumpf mit der Kantenlänge l hat das Volumen

$$V_{Pyr} = \sqrt{3} c_x^2 h_2 \int_0^{l/k_2} (1 - \lambda)^2 d\lambda = \sqrt{3} c_x^2 h_2 \left(\frac{l^3}{3k_2^3} - \frac{l^2}{k_2^2} + \frac{l}{k_2} \right) \quad (4.8)$$

Mit ρ verändert sich nur der Wert für l , also genügt es in Gleichung 4.8 l durch ρl zu ersetzen. Damit erhält man für den Volumenanteil über den Facetten des Ikosaeders:

$$V_2(\rho) \approx .1643263419\rho^3 - 4.098914018\rho^2 + 34.08075236\rho \quad (4.9)$$

4.2.3 Volumenanteile eines Ellipsoids K_i aus

$$\text{conv}(m(K_i) \cup (bd(K_i) \cap bd(\text{conv}(\bigcup K_i))))$$

Dazu wird ein Ellipsoid auf eine zu einer angrenzenden Kante des Ikosaeders senkrechte Hyperebene projiziert. Die Projektion ist eine Ellipse. Seien A und B zwei benachbarte Ecken und M der Mittelpunkt des Ikosaeders (siehe Abb. 4.6). Für den Winkel γ zwischen der Projektionshyperebene und der Geraden durch AM gilt $\tan \gamma = 2/(\sqrt{5} + 1) \Rightarrow \gamma \approx 31.72^\circ$. Das Koordinatensystem werde wieder

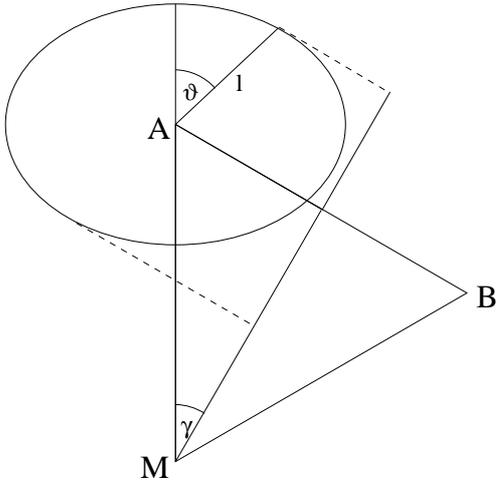


Abbildung 4.6: Projektion 2

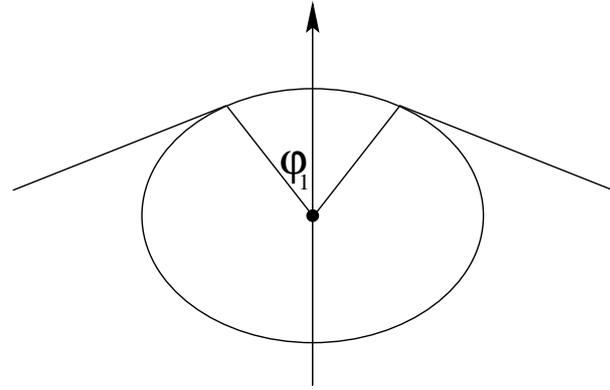


Abbildung 4.7: Projektionsebene

so gewählt, dass die z -Achse in Richtung der kurzen Halbachse des Ellipsoids zeigt, dann sei

$$\mathbf{r}(\theta, \phi) = (b \sin \theta \cos \phi, b \sin \theta \sin \phi, a \cos \theta)^T$$

die Parametrisierung der Oberfläche des Ellipsoids und die Ebene, in der A , B und M liegen, die xz -Ebene. Der Projektionsvektor ist somit

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= (\sin \gamma, 0, \cos \gamma)^T \\ &= \left(\sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{5 + \sqrt{5}}}, 0, \frac{-2}{\sqrt{10 + 2\sqrt{5}}} \right)^T \end{aligned}$$

und die Projektion ist gegeben durch $\mathbf{r}_p(\theta, \phi) = \mathbf{r}(\theta, \phi) - (\mathbf{r}(\theta, \phi) \cdot \mathbf{p})\mathbf{p}$. Durch die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -\cos \gamma & 0 & \sin \gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \gamma & 0 & -\cos \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5+2\sqrt{5}}} & 0 & \frac{3+\sqrt{5}}{2\sqrt{5+2\sqrt{5}}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{3+\sqrt{5}}{2\sqrt{5+2\sqrt{5}}} & 0 & \frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5+2\sqrt{5}}} \end{pmatrix}$$

wird die Projektion in die xy -Ebene gedreht. Die lange Halbachse der Ellipse liegt in y -Richtung mit Länge b , die Kurze in x -Richtung. Das Maximum l_x der x -Richtung erhält man für $\sin \phi = 0$ und durch Bestimmung des Extremwerts in Abhängigkeit von θ zu

$$\theta_{max} = \arctan \left(2 \frac{b^3 (\sqrt{5} + 2)}{7 + 3\sqrt{5}} \right), \quad l_x = \|\mathbf{r}_p(\theta_{max}, 0)\| \approx 0.956$$

Es gilt

$$\begin{aligned}\vartheta &= \arccos\left(\frac{\mathbf{r}(\theta_{max}, 0) \cdot (0, 0, 1)^T}{\|\mathbf{r}(\theta_{max}, 0)\|}\right) \\ &= \arccos\left(\frac{\sqrt{2}(7 + 3\sqrt{5})}{2\sqrt{18b^{12} + 8b^{12}\sqrt{5} + 47 + 21\sqrt{5}}}\right) \approx 38.337^\circ\end{aligned}$$

Wird nun das Ellipsoid an der Ecke A mittels einer linearen Abbildung L wieder in die Einheitskugel transformiert, so geht der Winkel ϑ in den Winkel $\vartheta_L = \theta_{max}$ über. Der gesuchte Volumenanteil hat das gleiche Volumen wie ein Kugelsektor der Einheitskugel, der von 5 Hyperebenen, die den Winkel ϑ_L mit der z -Achse einschließen und jeweils durch Drehung um $2\pi/5$ um die z -Achse auseinander hervorgehen, begrenzt wird. Seien $\mathbf{n}_1 = (\sin(\pi/2 - \vartheta_L), 0, \cos(\pi/2 - \vartheta_L))^T$ und $\mathbf{n}_2 = (\sin(\pi/2 - \vartheta_L) \cos(2\pi/5), \sin(\pi/2 - \vartheta_L) \sin(2\pi/5), \cos(\pi/2 - \vartheta_L))^T$ Normalenvektoren zweier solcher Ebenen. Dann ist $\mathbf{e}_1 = (e_{11}, e_{12}, e_{13})^T = \mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2$ ein Vektor in Richtung einer Kante und ebenso $\mathbf{e}_2 = (e_{11}, -e_{12}, e_{13})^T$. Mittels des Raumwinkels des durch die drei Kanten in Richtung $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, (0, 0, 1)^T$ festgelegten Sektors S erhält man das Volumen $V(S) \approx 0.084$ und somit für die gesamten Volumenanteile

$$V_3(\rho) = 5 \cdot 12 \cdot \rho^3 V(S) \approx 5.027\rho^3 \quad (4.10)$$

Dieser Wert ist wie erwartet größer als das Kugelvolumen $\frac{4}{3}\pi \approx 4.189$.

4.2.4 Die Volumenanteile über den Kanten

Betrachtet man die nicht gedrehte Projektionsebene, so bietet sich ein Bild, wie in Abb. 4.7. Um den Winkel φ_1 zu erhalten, bietet es sich an, die Ellipse auf eine Gerade parallel zum Normalenvektor der Facette zu projizieren. Dazu benötigt man den Winkel zwischen dem Normalenvektor einer Facette und dem Vektor vom Mittelpunkt des Ikosaeders zum Mittelpunkt einer Kante dieser Facette. Dieser ist $\alpha_k = \arccos\left(\frac{1}{3} \frac{(3+\sqrt{5})\sqrt{3}}{\sqrt{5+1}}\right) \approx 20.91^\circ$. Dann erhält man durch die Projektion und gleiches Verfahren wie oben:

$$\varphi_1 = \arccos\left(\frac{\sqrt{2}(7b^6 + 3b^6\sqrt{5} + 18 + 8\sqrt{5})}{2\sqrt{137b^{12} + 61b^{12}\sqrt{5} + 246b^6 + 110b^6\sqrt{5} + 322 + 144\sqrt{5}}}\right) \approx 24.4^\circ$$

Nun wählen wir eine Matrix M mit $\det(M) = 1$, die die projizierte Ellipse in einen Kreis abbildet. Dabei soll das Koordinatensystem wie folgt gewählt sein: Die x -Achse liege entlang einer Kante des Ikosaeders, die z -Achse senkrecht zur Kante, in Richtung der kurzen Halbachse und die y -Achse in Richtung der langen Halbachse. Dann hat M die folgende Gestalt:

$$M = \begin{pmatrix} bl_x & 0 & 0 \\ 0 & 1/b & 0 \\ 0 & 0 & 1/l_x \end{pmatrix}$$

Was geschieht bei dieser Transformation mit den Winkeln und der Kantenlänge? Hierbei bezeichne der Index M die Größen nach der Transformation:

1. ϑ)

Dazu betrachten wir den Winkel $\vartheta' = \vartheta - \gamma \approx 6.619^\circ$. Der entsprechende Vektor in dem Koordinatensystem ist dann $\mathbf{v}_\vartheta = (\sin \vartheta', 0, \cos \vartheta')^T$. Nach der Transformation entspricht der Winkel ϑ' dem Winkel von $M\mathbf{v}_\vartheta$ mit der z -Achse. $\vartheta'_M = \arccos\left(\frac{(M\mathbf{v}_\vartheta) \cdot (0,0,1)^T}{\|M\mathbf{v}_\vartheta\|}\right) \approx 6.307^\circ$

2. φ_1)

Analog wie oben erhält man durch Bildung des Vektors $\mathbf{v}_\varphi(0, \sin \varphi_1, \cos \varphi_1)^T$ und dessen Transformation mittels M den gesuchten Winkel als den zwischen dem transformierten Vektor und der z -Achse:

$$\varphi_{1,M} = \arccos\left(\frac{\mathbf{v}_\varphi \cdot (0, 0, 1)^T}{\|\mathbf{v}_\varphi\|}\right) \approx 22.601^\circ$$

3. k)

$$k_M = k \cdot bl_x$$

Seien nun $l(z)$ und $y(z)$ wie folgt definiert:

$$l(z) = k_M - 2z \tan \vartheta'_M, \quad y(z) = \begin{cases} 2z \tan \varphi_{1,M} & \text{für } 0 \leq z \leq \rho \cos \varphi_{1,M} \\ 2\sqrt{\rho^2 - z^2} & \text{für } \rho \cos \varphi_{1,M} \leq z \leq \rho \end{cases}$$

Dann ergibt sich das Volumen der Teilstücke an den Kanten, wie folgt:

$$V_4 = 30 \int_0^\rho l(z)y(z)dz \approx -1.698955242\rho^3 + 23.81206758\rho^2 \quad (4.11)$$

Aus $l(z) \geq 0$ erhält man $\rho \leq \frac{k_M}{2 \tan \vartheta'_M} \approx 9.103$

4.2.5 Volumen der Ikosaederpackung für $\rho < 9.1$

Fasst man die Ergebnisse aus den Gleichungen 4.7, 4.8, 4.10 und 4.11 zusammen, so erhält man für das Referenzvolumen der Ikosaederpackung mit Ellipsoiden:

$$V(\text{conv}(\bigcup_{i=1}^{13}(\rho K_i))) = \sum_{j=1}^4 V_j(\rho) \approx 3.4927\rho^3 + 19.7132\rho^2 + 34.0808\rho + 17.9820 \quad (4.12)$$

4.3 Vergleich mit den dichtesten Kugelpackungen

Nachdem nun das Referenzvolumen in einer ähnlichen Weise wie für Kugelpackungen abhängig vom Parameter ρ vorliegt, stellt sich die Frage, wie sich die Ikosaederpackung aus Ellipsoiden zu den ermittelten dichtesten Packungen verhält. Die Koeffizienten des Polynoms für das Volumen der konvexen Hülle der mit ρ dilatierten Körper sind in Tabelle 4.1 zusammengestellt. Wir betrachten hier nur den interessanten Parameterbereich $\rho < 9$. Für die Kugelpackungen in der Tabelle sind die Quermassintegrale angegeben. Für diese entspricht der Koeffizient des Polynoms für das Volumen der konvexen Hülle bei ρ^3 der Konstanten $\frac{4}{3}\pi \approx 4,19$. Bei der (einzigen) Ellipsenpackung Iko' ist dieser Koeffizient 3,49. Ohne Deformierung der Kugeln wäre die Ikosaederpackung im Dichtevergleich nicht erwähnenswert. Nach der Abplattung wird sie jedoch nur noch von der Wurstpäckung für $\rho < 0.9433$ übertroffen. Dies bestätigt die dominante Rolle der Ikosaederstruktur.

| | M | O | V | $M + O + V$ |
|--------------------|-------|-------|-------|-------------|
| Iko | 23,02 | 38,30 | 20,30 | 81,61 |
| S_{13} | 75,40 | — | — | 75,40 |
| $B_{1,0}^2$ | 24,97 | 38,11 | 14,14 | 77,21 |
| $T_{2,1,1,1}^3$ | 24,20 | 38,11 | 15,08 | 77,39 |
| $Kubokt.$ | 22,93 | 37,86 | 18,86 | 79,64 |
| $Iko'(\rho < 9.1)$ | 19,71 | 34,08 | 17,98 | 71,77 |

Tabelle 4.1: verschiedene Packungskonfigurationen von 13 Kugeln bzw. Ellipsoiden

Anlass dazu, die Deformation des Ikosaeders zu betrachten, war unter anderem das besonders häufige Auftreten der "magic number" 13 bei massenspektroskopischen Messungen. Dabei treten Cluster mit 13 Atomen häufiger auf als Cluster mit mehr oder weniger Atomen. Ein Vergleich der Dichte mit den Packungen für 14 und mehr Kugeln zeigt, dass die Ikosaederpackung mit Packungen bis zu 19 Kugeln konkurrieren kann. Von Vorteil hierfür ist besonders der niedrige Wert des Koeffizienten von ρ^3 . Dies stützt die Auffassung, dass die Ikosaederstruktur für $n = 13$ besonders dicht und anderen Strukturen überlegen ist.

Kapitel 5

Packungen mit minimaler Oberfläche

5.1 Eine Ungleichung für die Oberfläche

Das folgende Kapitel basiert auf einer gemeinsamen Arbeit [SSW] mit Achill Schürmann und Jörg M. Wills. Wir geben eine Ungleichung für die Oberfläche $F(P)$ eines Packungspolytops P abhängig von der Anzahl der Kugelmittelpunkte auf dem Rand an. Die Ungleichung ist scharf und die Gleichheitsfälle liefern interessante Packungen.

Satz 5.1.1 *1. Sei P ein volldimensionales Packungspolytop mit $n(P)$ Punkten auf dem Rand und alle äußeren Winkel (s. Def. 2.2.5) an den Ecken seien $\leq 5/12$. Dann gilt*

$$\sqrt{12}(n(P) - 2) \leq F(P) \tag{5.1}$$

und die Schranke ist scharf für alle $n \geq 4$.

2. Gleichheit gilt genau dann, wenn jede Facette von P eine Triangulierung in gleichseitige Dreiecke mit Kantenlänge 2 gestattet.

Der Beweis dieses Satzes folgt aus dem Beweis des allgemeineren Satzes 5.1.4. Für die Beweise siehe [SSW].

Aus Packungspolygonen lassen sich Beispiele erzeugen, die (5.1) nicht erfüllen: Falls man ein Packungspolytop mit Ecken aus dem hexagonalen Gitter betrachtet, wird (5.1) mit Gleichheit erfüllt, wenn Gitterpunkte im Innern des Polygons doppelt gezählt werden und die Oberfläche auf beiden Seiten berücksichtigt wird. Polygone mit einer Kante, die länger als $\sqrt{12}$ ist, können lokal so verändert werden (s. [Schü]), dass man ein Polygon erhält, welches (5.1) nicht erfüllt.

Die Gleichheitsfälle von Satz 5.1.1 sind besonders interessant aufgrund ihrer schönen und einfachen Eigenschaften:

Satz 5.1.2 Gleichheit in (5.1) impliziert folgendes:

1. Die äußeren Winkel an den Ecken sind $i/12$, $i = 1, 2, 3$.
2. P hat höchstens 12 Ecken und höchstens 20 Facetten.
3. Zu jedem n gibt es höchstens endlich viele Packungspolytope.
4. Wenn die zu P gehörige Packung eine Gitterpackung ist, so ist das Gitter das fcc-Gitter.

Um die Verallgemeinerung des Satzes 5.1.1 zu beweisen, wird noch eine Definition benötigt, die wie der Beweis auf Ideen aus [FG] und [GWZ] basiert.

Definition 5.1.3 Ein Randkomplex eines Packungspolytops $P = \text{conv}(C)$ mit $C = \{c_1, \dots, c_n\}$ Packung ist eine Menge $S = (S_0, S_1, S_2)$, wobei

1. $S_0 = C \cap \text{bd}(P)$ ist die Menge der Ecken (oder 0-Seiten) von S
2. S_1 ist eine Menge von Strecken $[uv]$ in $\text{bd}(P)$, den Kanten (oder 1-Seiten) von S . Die Kanten $[uv]$ haben positive Länge $|uv|$ und es gilt $[uv] \cap S_0 = \{u, v\}$. Weiterhin ist der Schnitt zweier Kanten entweder leer oder eine Ecke von S .
3. S_2 ist eine Menge von Dreiecken $[uvw]$, die im Rand von P enthalten sind. Sie heißen 2-Seiten. Für alle diese Dreiecke gilt: $[uvw] \cap S_0 = \{u, v, w\}$ und $[uvw] \cap S_1 = \{[uv], [uw], [vw]\}$.
4. Die Vereinigung $\text{supp}(S) = S_0 \cup S_1 \cup S_2$ heißt der Träger von S .

Die Definition lässt Kanten $[uu]$ zu, die im folgenden Loops genannt werden. Klarerweise gibt es dann auch 2-Seiten in S_2 vom Typ $[uuv]$ mit nur zwei verschiedenen Kanten, nämlich $[uu]$ und zweimal $[uv]$.

Eine Kante $[uv]$ von S ist entweder eine Kante von zwei, einer oder keiner 2-Seite. Im letzteren Fall heißt die Kante nicht-begrenzende Kante. Wenn $[uv]$ nur die Kante einer 2-Seite $[uvw]$ mit $w \notin \{u, v\}$ ist, so heißt sie begrenzende Kante.

Unter den endlich vielen Randkomplexen eines Packungspolytops P , und allen Triangulierungen der zugehörigen Oberfläche, gibt es einen nicht notwendigerweise eindeutigen Randkomplex, der

$$F(S) = \sum_{[u,v] \in S_1} |uv|$$

minimiert. Dieser heie minimaler Randkomplex von P . Ein Packungspolytop ist frei von kurzen Loops, wenn der minimale Randkomplex keinen Loop $[uu]$ der

Länge $|uu| < 2$ enthält. In diesem Fall gibt es keinen Randkomplex von P , der einen Loop $[uu]$ der Länge $|uu| < 2$ enthält.

Die Fläche $F(S)$ von S ist gegeben durch

$$F(S) = \sum_{[u,v,w] \in S_2} |uvw|,$$

der Umfang $U(S)$ durch

$$U(S) = \sum_{[u,v] \in S_1 \text{ begrenzend}} |uv| + \sum_{[u,v] \in S_1 \text{ nicht-begrenzend}} 2|uv|$$

und die Euler-Poincaré Charakteristik

$$\chi(S) = a_0(S) - a_1(S) + a_2(S),$$

wobei $a_i(S)$ die Anzahl der Elemente (i -Seiten) in S_i bezeichnet. Aufgrund der Definition hängt $a_0(S)$ nur von P und nicht von dem gewählten Randkomplex S ab. Außerdem hängen $F(S)$, $U(S)$ und $\chi(S)$ nur vom Träger und nicht von der gewählten Triangulierung ab. Des weiteren ist $F(\text{bd}(P))$ die Oberfläche und $\chi(\text{bd}(P)) = 2$.

Nach der Definition dieser Begriffe können wir die Verallgemeinerung von Satz 5.1.1 angeben:

Satz 5.1.4 1. Jeder Randkomplex S eines Packungspolytops ohne kurze Loops erfüllt die Ungleichung:

$$a_0(S) \leq \frac{1}{\sqrt{12}} F(S) + \frac{1}{4} U(S) + \chi(S). \quad (5.2)$$

2. Gleichheit gilt genau dann, wenn es einen Randkomplex S' von $\text{supp}(S)$ gibt, so dass alle Kanten in S'_1 die Länge 2 haben.

5.2 Klassifizierung der Polytope

In Satz 5.1.2 wurde festgestellt, dass es bei den betrachteten Polytopen nur drei verschiedene Typen von Ecken in Bezug auf den Außenwinkel gibt. Der Außenwinkel ist bei den Ecken gleich, an denen gleich viele reguläre Dreiecke der Triangulierung zusammentreffen. Daher gilt: Eine Ecke mit Außenwinkel $1/12$ ist 5-valent, mit Außenwinkel $2/12$ ist sie 4-valent und mit Außenwinkel $3/12$ ist sie 3-valent.

Eine n -valente Ecke, $n = 3, 4, 5$, ist durch die Außenwinkel an $n - 3$ ihrer Kanten eindeutig bestimmt. Gehen von einer n -valenten Ecke weniger als n Kanten des Polytops ab, so heißt sie entartet, d.h. zur Bestimmung der Valenz einer Ecke

werden auch die entarteten Kanten berücksichtigt. Nur eine 5-valente Ecke kann entarten, da die Außenwinkel der 3-valenten Ecke konstant sind und das Polytop im Falle einer entarteten 4-valenten Ecke niederdimensional wäre. Eine 5-valente Ecke heißt dann $5/4$ -entartet, wenn von ihr 4 Kanten ausgehen, oder $5/3$ entartet, wenn von ihr nur 3 Kanten ausgehen. Die Kanten, die nur in der Triangulierung auftreten und keine Polytopkanten sind, heißen entartet, sie haben Außenwinkel 0. $5/3$ entartete Ecken sind eindeutig, da der Außenwinkel zweier Kanten gegeben ist und, wie man leicht sieht, zwei entartete Kanten nicht benachbart sein können.

Da die Summe der Raumwinkel der Ecken eines Polytops 1 ist, kann es nur die 19 Eckenkombinationen in Tabelle 5.1 geben.

| Fall | 3-v Ecken | 4-v Ecken | 5-v Ecken | Ecken | Beispiel |
|------|-----------|-----------|-----------|-------|----------------------------------|
| 1 | 4 | - | - | 4 | Tetraeder |
| 2 | 3 | 1 | 1 | 5 | - |
| 3 | 3 | 0 | 3 | 6 | Tetraederstumpf |
| 4 | 2 | 3 | - | 5 | tetragonale Bipyramide |
| 5 | 2 | 2 | 2 | 6 | - |
| 6 | 2 | 1 | 4 | 7 | Tetraederschnitt |
| 7 | 2 | - | 6 | 8 | Tetraederschnitt |
| 8 | 1 | 4 | 1 | 6 | - |
| 9 | 1 | 3 | 3 | 7 | Oktaeder mit Spitze |
| 10 | 1 | 2 | 5 | 8 | Tetraederschnitt $T_{3,1,1,0}^4$ |
| 11 | 1 | 1 | 7 | 9 | Tetraederschnitt |
| 12 | 1 | - | 9 | 10 | Tetraederschnitt |
| 13 | - | 6 | - | 6 | Oktaeder |
| 14 | - | 5 | 2 | 7 | Boerdijk-Ring |
| 15 | - | 4 | 4 | 8 | Deltaeder |
| 16 | - | 3 | 6 | 9 | Deltaeder |
| 17 | - | 2 | 8 | 10 | Deltaeder |
| 18 | - | 1 | 10 | 11 | Tetraederschnitt |
| 19 | - | - | 12 | 12 | Ikosaeder |

Tabelle 5.1: Eckenkombinationen regulär triangulierbarer Polytope

Im folgenden heißt ein Außenwinkel, der dem Außenwinkel an einer Kante eines regulären Tetraeders entspricht, Tetraederaußenwinkel.

Lemma 5.2.1 *Der Außenwinkel einer Kante die eine 5-valente Ecke enthält ist nicht größer als der Tetraederaußenwinkel. Ist der Außenwinkel der Kante einer 5-valenten Ecke der Tetraederaußenwinkel, so ist die Ecke $5/3$ -entartet.*

Beweis: Die 5-valente Ecke sei die Ecke A_0 der Triangulierung. Das Koordinatensystem wird so gewählt, dass A_0 im Ursprung liegt. Die 5 benachbarten Ecken

werden im Uhrzeigersinn mit A_1, \dots, A_5 bezeichnet. Die Dreiecke mit den Ecken A_0, A_i, A_{i+1} mit D_i für $i = 1, \dots, 4$. Das verbleibende Dreieck mit den Ecken A_0, A_5, A_1 mit D_5 . Angenommen, die Kante $\overline{A_0A_1}$ habe einen Außenwinkel größer als der Tetraederaußenwinkel, so haben die Ecken A_2 und A_5 einen Abstand kleiner als 2. Für die Ecken A_3 und A_4 gibt es nun keine Wahl, so dass sie im Abstand 2 zu ihren jeweils benachbarten Ecken liegen und das Polytop konvex bleibt, d.h. dass sie mit den äußeren Normalenvektoren der Dreiecke D_1 und D_5 ein nicht positives Skalarprodukt bilden. Falls der Außenwinkel von $\overline{A_0A_1}$ gleich dem Tetraederaußenwinkel ist, so ist die einzige Lösung, in der alle Ecken nicht positives Skalarprodukt mit den äußeren Normalenvektoren der Dreiecke D_1, \dots, D_5 bilden, die, in der die Außenwinkel der Kanten A_2 und A_5 verschwinden. Eine Wahl in kartesischen Koordinaten: $A_0 = (0, 0, 0)^T$, $A_1 = (0, -2, 0)^T$, $A_2 = (-1, -1, -\sqrt{2})^T$, $A_3 = (-1, 1, -\sqrt{2})^T$, $A_4 = (1, 1, -\sqrt{2})^T$, $A_5 = (1, -1, -\sqrt{2})^T$ \square

Korollar 5.2.2 *Es gibt keine Kante mit einem größeren Außenwinkel als dem Tetraederaußenwinkel*

Beweis: Falls es eine solche Kante gibt so sind die Ecken an ihren Enden 4-valent. Aus diesen 4-valenten Ecken geht jeweils wieder eine andere Kante mit demselben Außenwinkel hervor. Alle diese Kanten liegen in einer Ebene. Somit muss es eine Kette aus 4-valenten Ecken in dieser Ebene geben, deren Kanten in der Ebene einen Außenwinkel größer als der Tetraederaußenwinkel haben. Diese Kette ist keine Facette und alle diese 4-valenten Ecken sind gleich. D.h. die Kette bildet ein n -Eck, das an allen Ecken den gleichen Innenwinkel hat. Ist dies ein Dreieck, so ist der Innenwinkel an jeder Ecke $\pi/3$ und es handelt sich um den Außenwinkel der tetragonalen Bipyramide, der kleiner ist als der Tetraederaußenwinkel. Bei einem Viereck ist es der Außenwinkel des Oktaeders und bei einem Fünfeck der Außenwinkel des Boerdijk-Rings. Alle diese Außenwinkel sind kleiner als der Tetraederaußenwinkel. Im Falle eines Sechsecks wäre das Polytop niederdimensional und ein Polygon mit mehr als 6 Ecken, d.h. einem Innenwinkel größer $2\pi/3$, kann nicht auftreten. \square

Zunächst werden nun alle Fälle aus Tabelle 5.1 betrachtet, die eine 3-valente Ecke enthalten.

Fall 1: Vier dreivalente Ecken hat nur das Tetraeder.

Fall 2: Drei 3-valente Ecken, eine 4-valente Ecke und eine 5-valente Ecke. Mindestens eine Nachbarecke der 5-valenten Ecke ist eine 3-valente Ecke deren Kanten alle Tetraederaußenwinkel haben, somit ist die Form der 5-valenten Ecke nach Lemma 5.2.1 eindeutig. Die beiden anderen nicht-entarteten Kanten dieser Ecke haben den gleichen Außenwinkel wie Oktaederkanten, den Oktaederaußenwinkel. Als verbleibende Ecken an diesen Kanten können keine 3-valenten Ecken auftreten, es steht aber nur eine weitere nicht 3-valente Ecke zur Wahl. Es kann also kein Polytop mit den angegebenen Ecken existieren.

Fall 3: Drei 3-valente und drei 5-valente Ecken. Jede 5-valente Ecke hat einen 3-valenten Nachbarn. Somit sind sie alle 5/3-entartet. Als weitere Nachbarn bleiben

aufgrund des Außenwinkels nur die jeweils anderen 5-valenten Ecken. Das Polytop ist ein abgeschnittenes Tetraeder vom Typ $T_{k1,0,0,0}^k$ entsprechend der Definition 3.1.1.

Bei den nächsten Fällen hilft folgendes Lemma:

Lemma 5.2.3 *Falls bei einem regulär triangulierbaren Polytop eine 3-valente und eine 4-valente Ecke benachbart sind, so ist das Polytop eine tetragonale Bipyramide, oder eine abgeschnittene tetragonale Bipyramide.*

Beweis: Betrachtet man eine der Facetten, an der die 3-valente und die 4-valente Ecke liegen, so gibt es nur die drei Möglichkeiten, dass eine weitere 4-valente, eine 5-valente oder zwei entartete 5-valente Ecken die Facette komplettieren. Im ersten Fall ergibt sich eine neue Kante mit benachbarter 3 und 4-valenter Ecke. Dann kann man die daran anschließende Facette betrachten. Angenommen, es wären zwei 5-valente Ecken, dann ist die an die 3-valente Ecke angrenzende 5-valente Ecke eindeutig festgelegt und somit auch die an diese Ecke angrenzende 5-valente Ecke in dem betrachteten Viereck. Beides müssten dann 5/3-entartete Ecken sein, dann hätten aber zwei benachbarte Kanten der 4-valenten Ecke Tetraederaußenwinkel. Dies ist ein Widerspruch. Angenommen, die Facette ist ein Dreieck und wird durch eine 5-valente Ecke komplettiert, dann ist die 5-valente Ecke durch ihren 3-valenten Nachbarn eindeutig festgelegt und das Dreieck hat eine Innenwinkelsumme größer als π . Wiederum ein Widerspruch. Es bleibt also nur, dass alle Nachbarecken der 3-valenten Ecke 4-valent sind. Das Polytop kann nun nur noch die tetragonale Bipyramide mit einer weiteren 3-valenten Ecke sein, oder die abgeschnittene tetragonale Bipyramide mit drei weiteren 5/3-entarteten Ecken. Die Möglichkeit einer weiteren 4 und einer 5-valenten Ecke scheidet aus. \square

Bemerkung 5.2.4 *Mit dem Lemma 5.2.3 kann man auch Fall 2 behandeln.*

Fall 4: zwei 3-valente und drei 4-valente Ecken. Aus dem Lemma 5.2.3 folgt, dass es sich bei diesem Polytop um die tetragonale Bipyramide handelt.

Fall 5: Zwei 3-valente, zwei 4-valente und zwei 5-valente Ecken. In unserem Fall müssen die 4-valenten Ecken eine 3-valente Nachbarecke haben. Die Wahl der Ecken erfüllt aber nicht die Anforderungen einer tetragonalen Bipyramide oder einer abgeschnittenen tetragonalen Bipyramide. Somit gibt es kein Polytop mit den für den Fall 5 geforderten Ecken.

Fall 6: Zwei 3-valente, eine 4-valente und vier 5-valente Ecken. Wegen Lemma 5.2.3 muss die 3-valente Ecke von der 4-valenten Ecke getrennt werden. Somit hat die 4-valente Ecke nur die 5-valenten Ecken als Nachbarn. Nach Lemma 5.2.1 kann eine 5-valente Ecke höchstens eine 3-valente Ecke als Nachbar haben. Daraus ergibt sich, dass die beiden 3-valenten Ecken benachbart sind und jeweils zwei verschiedene 5-valente Ecken als Nachbarn haben müssen. Somit hat jede 5-valente Ecke eine 3-valente, eine 4-valente und eine 5-valente Ecke als Nachbar. Das Polytop ist ein Tetraederschnitt vom Typ $T_{k,k,0,0}^{2k}$

Fall 7: Zwei 3-valente und sechs 5-valente Ecken. Falls die beiden 3-valenten Ecken nicht benachbart sind, so hat jede der beiden Ecken drei verschiedene 5/3-entartete Nachbarecken. Die freien Kanten der 5-valenten Ecken mit Oktaederaußenwinkel verbinden sich so, dass ein Parallelotop entsteht. Dies ist ein Tetraederschnitt vom Typ $T_{k_1, k_2, k_3, 0}^k$ mit $k_1 + k_2 + k_3 \geq 2k$ und $k_i + k_j > k$ für $i, j = 1, 2, 3$ und $i \neq j$. Falls die beiden 3-valenten Ecken benachbart sind, so gibt es nur die beiden Graphen aus Abbildung 5.1. Die gestrichelten Kanten haben Oktaederaußenwinkel und die durchgezogenen Kanten Tetraederaußenwinkel. Im

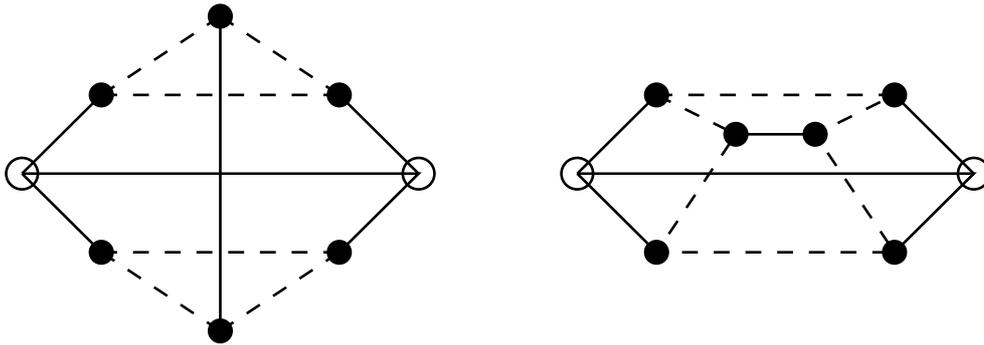


Abbildung 5.1: Mögliche Graphen mit zwei 3-valenten und sechs 5-valenten Ecken

linken Graphen gibt es zwei Dreiecke, deren Kanten alle Oktaederaußenwinkel haben. Auf eine solche Facette kann ein Tetraeder mit gleicher Kantenlänge aufgesetzt werden. Dadurch enthält man eine zusätzliche 3-valente Ecke und die drei 5-valenten Ecken dieser Facette verschwinden. Es handelt sich also um einen Tetraederschnitt vom Typ $T_{k_1, k_2, 0, 0}^k$ ohne Überlappung, also $k_1 + k_2 < k$. Im rechten Graphen gibt es zwei Trapeze, bei denen eine Kante Tetraederaußenwinkel hat und drei Kanten Oktaederaußenwinkel. Auf eine solche Facette kann ein Tetraederschnitt vom Typ $T_{k_1, 0, 0, 0}^k$ aufgesetzt werden, so dass die vier 5-valenten Ecken der Facette verschwinden und eine neue 3-valente und eine 5-valente Ecke entstehen. Das Polytop ist ein Tetraederschnitt vom Typ $T_{k_1, k_2, 0, 0}^k$ mit Überlappung, also $k_1 + k_2 > k$. Im Falle $k_1 + k_2 = k$ würde eine 4-valente Ecke entstehen.

Fall 8: eine 3-valente, vier 4-valente, und eine 5-valente Ecke. Wegen Lemma 5.2.3 existiert kein Polytop mit dieser Eckenkombination.

Fall 9: eine 3-valente, drei 4-valente und drei 5-valente Ecken. Falls die 3-valente Ecke eine 4-valente Nachbarecke hat, so handelt sich nach Lemma 5.2.3 um eine abgeschnittene tetragonale Bipyramide. Andernfalls kann die 3-valente Ecke nur 5-valente und somit entartete Nachbarn haben. Die Oktaederkanten der 5-valenten Ecken verbinden diese mit den 4-valenten Ecken, die Oktaederecken sind. Der Graph ist eindeutig. Die drei 4-valenten Ecken bilden ein reguläres Dreieck, dessen Nachbarfacetten wiederum reguläre Dreiecke sind, deren Kanten Oktaederaußenwinkel haben. Auf diese drei Dreiecke kann jeweils ein Tetraeder aufgesetzt werden, so dass ein vollständiges Tetraeder entsteht. Das Polytop ist

in diesem Fall ein Tetraederschnitt vom Typ $T_{k,k,k,0}^{2k}$.

Fall 10-12: eine 3-valente, keine bis zwei 4-valente und fünf, sieben oder neun 5-valente Ecken. Aufgrund von Lemma 5.2.3 kann die 3-valente Ecke nur 5-valente Nachbarn haben. Betrachten wir nun eine der Facetten, die die 3-valente Ecke enthalten. Diese Facette hat eine Ecke mit Innenwinkel $\pi/3$ und zwei dazu benachbarte Ecken mit Innenwinkel $2\pi/3$. Diese Facette ist somit ein Viereck oder ein Fünfeck, wie in Abb 5.2 dargestellt. Wiederum haben die gestrichelten Kanten Oktaederaußenwinkel und die durchgezogenen Tetraederaußenwinkel.

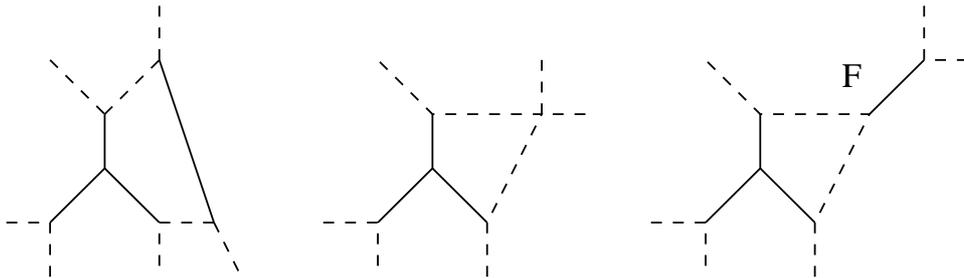


Abbildung 5.2: Mögliche Facetten an der 3-valenten Ecke in den Fällen 10-12

Im ersten der drei Fälle ist diese Facette ein Fünfeck. Somit sind alle anderen Ecken außer der 3-valenten Ecke $5/3$ -entartete Ecken. Dann gibt es eine Facette mit drei benachbarten Oktaederkanten, die entweder ein Dreieck oder ein Trapez ist. Man kann an dieser Facette ein Tetraeder bzw. ein abgeschnittenes Tetraeder wie in Fall 6 anfügen und erhält ein Polytop mit zwei 3-valenten Ecken entsprechend den Fällen 4-7.

Im zweiten Fall in Abbildung 5.2 ist die Facette ein Viereck mit einer 4-valenten Ecke. Dann erhält man wieder eine Facette, die drei benachbarte Oktaederkanten enthält und kann wie oben fortfahren.

Im letzten Fall ist die Facette ein Viereck, aber die Ecke, an der die beiden Oktaederkanten zusammentreffen, ist eine $5/3$ -entartete Ecke. Betrachtet man nun die Facette F , so können nur die in Abbildung 5.3 dargestellten Fälle auftreten. Falls die Facette F ein Fünfeck ist, so gibt es wiederum eine Facette mit drei

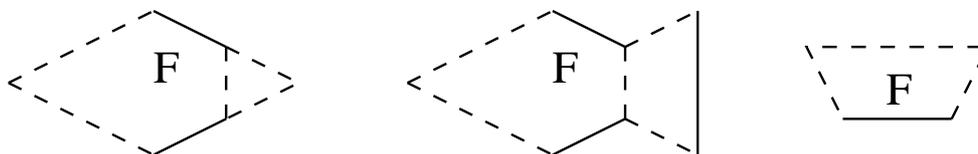


Abbildung 5.3: Mögliche Facetten F

benachbarten Kanten mit Oktaederaußenwinkel und falls die Facette ein Viereck ist, kann man direkt an F ein abgeschnittenes Tetraeder anfügen und wie oben fortfahren.

Falls man versucht, in Fall 4 eine 3-valente Ecke zu entfernen, erhält man ein Polytop aus Fall 1 oder Fall 9. In allen anderen Fällen handelt es sich um einen Tetraederschnitt. Diese sind in Tabelle 5.3 aufgeführt.

Damit sind alle regulär triangulierbaren Polytope, die eine 3-valente Ecke enthalten ermittelt. Alle diese Polytope sind Tetraederschnitte, oder die tetragonale Bipyramide bei der evtl. eine der beiden 3-valenten Ecken abgeschnitten wurde. Im nächsten Schritt sollen alle Polytope, die eine 4-valente Ecke enthalten, ermittelt werden. Dazu wird das folgende Lemma benötigt:

- Lemma 5.2.5**
- a) *Hat eine 5-valente Ecke eine Kante mit Außenwinkel 0, so haben die beiden benachbarten Kanten einen Außenwinkel größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel.*
- b) *Hält man bei einer 5-valenten Ecke den Außenwinkel an einer Kante fest und vergrößert (verkleinert) den Außenwinkel an einer Nachbarkante, so verkleinert (vergrößert) sich der Außenwinkel an den beiden anderen zu diesen Kanten benachbarten Kanten und vergrößert (verkleinert) sich an der verbleibenden Kante.*

Beweis: Betrachtet man die Ecke aus 5 regulären Dreiecken mit Kantenlänge 2 zusammengesetzt, so ergibt sich für Teil a), dass zwei nicht benachbarte Ecken einen Abstand größer als $2\sqrt{3}$ haben. Dies ist nicht möglich, da dies der maximale Abstand ist, den die gegenüberliegenden Ecken zweier an einer Kante verbundenen Dreiecke haben können. Und in Teil b) wird der Abstand zweier Dreiecksecken durch Vergrößern des Außenwinkels einer Kante verkleinert. Die beiden Dreiecke, die die zu diesen Ecken gehörigen Kanten verbinden, müssen nun an der gemeinsamen Kante einen größeren Außenwinkel und an den Klebekanten einen kleineren Außenwinkel aufweisen. \square

Der folgende Satz zeigt, dass es in regulär triangulierbaren konvexen Polytopen nur gewisse Typen von 4-valenten Ecken geben kann:

Satz 5.2.6 *Falls in einem regulär triangulierbaren konvexen Polytop eine 4-valente Ecke auftritt, so entspricht ihre Form einer der folgenden 5 Ecken:*

1. *Die 4-valente Ecke der tetragonalen Bipyramide*
2. *Die 4-valente Ecke des Oktaeders*
3. *Die 4-valente Ecke des Deltaeders mit sieben Ecken*
4. *Die 4-valente Ecke des Deltaeders mit acht Ecken*
5. *Die 4-valente Ecke des 11er Polytops*

Beweis: Man betrachte die kürzeste der von der 4-valenten Ecke ausgehenden Kanten des Polytops. Die andere Ecke dieser Kante ist entweder 3,4 oder 5-valent. Nun betrachte man die übrigen Kanten im Uhrzeigersinn und notiere die Valenz der Ecke an dieser Kante, falls die Kante gleich lang ist, sonst 6. Dann gibt es bis auf Symmetrie folgende Fälle:

1. $[3, x, y, z]$: Da die 3-valente Ecke eindeutig ist, ist auch die 4-valente Ecke eindeutig bestimmt. Es ist die Ecke der tetragonalen Bipyramide.
2. $[4, 4, x, y]$: Es sind drei 4-valente Ecken an einer dreieckigen Facette. Alle 3 Ecken sind Oktaederecken, aufgrund der Außenwinkel an den Kanten des Dreiecks.
3. $[4, 5, 4, 5]$: Die 4-valenten Ecken sind aufgrund ihrer Verbindungskanten alle vom gleich Typ. Aufgrund dessen hat jede der beiden 5-valenten Ecken drei benachbarte Kanten mit gleichem Außenwinkel, was nur für eine 5-valente Ecke vom Typ der Ikosaederecke zutrifft. Die 4-valente Ecke kann somit nur die Ecke des siebenner Deltaeders sein.
4. $[4, 5, 5, 5]$: Die Ecke ist symmetrisch zur der Ebene, die die 4-valente Nachbarecke, die gegenüberliegende 5-valente Nachbarecke und die Ecke selbst enthält (siehe Abb. 5.4). Wenn in Abbildung 5.4 der Außenwinkel α ver-

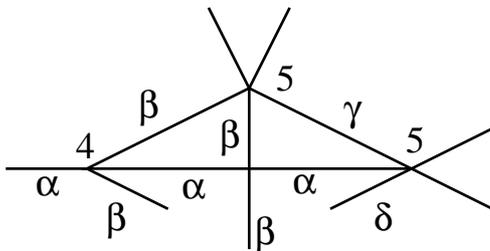


Abbildung 5.4: Typ $[4,5,5,x]$

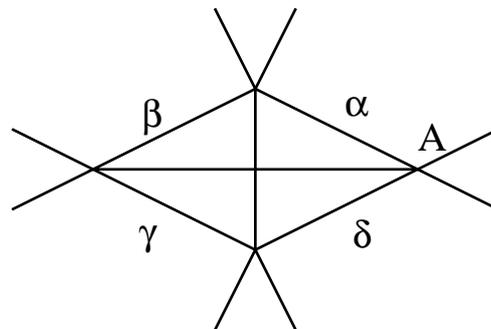


Abbildung 5.5: Typ $[5,5,5,5]$

kleinert wird, wird der Winkel β größer. Analog zu Lemma 5.2.5 wird der Winkel γ kleiner. Da γ und α kleiner werden, wird δ größer. Da sich δ monoton verändert gibt es nur einen Winkel α , so dass $\delta = \gamma$. Diese Ecke ist die 4-valente Ecke des Deltaeders mit acht Ecken.

5. $[4, 5, 6, 5]$: Die beiden 5-valenten Ecken haben zwei Kanten mit gleichem Außenwinkel und sind entartet. Also sind es 5/3-entartete Ecken. Daraus folgt, dass die 4-valenten Ecken Oktaederecken sind.

6. $[5, 5, 5, 5]$: Man betrachte die Verbindungskanten zwischen den 5-valenten Ecken (siehe Abb. 5.5). Diese haben entgegen dem Uhrzeigersinn die Außenwinkel $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Angenommen die 4-valente Ausgangsecke wäre nicht die Oktaederecke. Dann hätte sie zwei Kanten mit Winkel größer dem Oktaederaußenwinkel und zwei Kanten mit Winkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel. O.B.d.A habe die Kante zur Ecke A einen Winkel größer dem Oktaederwinkel und $\delta < \alpha$. Da der Außenwinkel an der Kante zur Ecke B kleiner dem Oktaederaußenwinkel ist, ist nach Lemma 5.2.5 $\beta > \delta$. Ebenso ist $\gamma < \alpha$ und $\delta > \beta$. Dies ist ein Widerspruch und es ist gezeigt, dass alle von der Ecke ausgehenden Kanten Oktaederaußenwinkel haben.
7. $[5, 5, 5, 6]$: Diese Ecke ist aus den gleichen Gründen wie die Ecke vom Typ $[4, 5, 5, 5]$ eindeutig und es handelt sich um die Ecke des 11er Polytops
8. $[5, 5, 6, 6]$: Die beiden 5-valenten Ecken sind aufgrund ihrer Nachbarschaft zu den 6-valenten Ecken entartet. Ihre Kanten zur betrachteten 4-valenten Ecke haben einen Außenwinkel größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel. Dies ist für zwei benachbarte Kanten einer 4-valenten Ecke nur möglich, wenn der Außenwinkel gleich dem Oktaederaußenwinkel ist. Also entspricht die 4-valente Ecke der Oktaederecke.
9. $[5, 6, 5, 6]$: Die 5-valenten Ecken sind $5/3$ -entartet, da sie zwei Kanten mit Außenwinkel 0 haben. Die Kante zu der betrachteten 4-valenten Ecke hat Tetraederaußenwinkel, also entspricht die 4-valente Ecke der Ecke einer tetragonalen Bipyramide.
10. $[5, 6, 6, 6]$: Mit der gleichen Argumentation wie für den Typ $[5, 6, 5, 6]$ entspricht diese Ecke ebenfalls der Ecke der tetragonalen Bipyramide.

Damit ist gezeigt, dass regulär triangulierbare konvexe Polytope nur die fünf im Satz erwähnten 4-valenten Ecken haben können. \square

Durch die Art der Nachbarecken einer 4-valenten Ecke wird nicht nur die Ecke, sondern auch das die Ecke enthaltende Polytop stark eingegrenzt. Betrachten wir die Fälle aus Satz 5.2.6.

In Fall 1 kann das Polytop nach Lemma 5.2.3 nur eine tetragonale Bipyramide oder eine abgeschnittene tetragonale Bipyramide sein.

In Fall 2 kann man auf das Dreieck, das die drei 4-valenten Ecken enthält, ein Tetraeder aufsetzen, da alle Kanten Oktaederaußenwinkel haben. Gesucht sind dann alle regulär triangulierbaren konvexen Polytope mit mindestens einer 3-valenten Ecke, deren Nachbarecken alle 5-valent sind und gleichen Abstand zur 3-valenten Ecke haben. Durch Abschneiden des Tetraeders erhält man dann alle Polytope vom Typ T_{k_1, k_2, k_2, k_2}^k und T_{k_1, k_1, k_1, k_2}^k mit $k_1 + k_2 = k$. Im ersten Fall, falls $k_1 > k_2$ hat das Polytop gegenüber der dreieckigen Facette mit den 4-valenten Ecken eine sechseckige Facette. Falls $k_1 = k_2$, so handelt es sich um das Oktaeder

und falls der zweite Fall mit $k_1 > k_2 > 0$ eintritt, so ist das Polytop ein Oktaeder mit aufgesetztem Tetraederstumpf.

In Fall 3 aus Satz 5.2.6 betrachte man eine der Ikosaederecken. Alle von dieser Ecke ausgehenden Kanten haben Ikosaederaußenwinkel, der kleiner als der Oktaederaußenwinkel ist. Somit sind alle Facetten, die an dieser Ecke liegen, reguläre Dreiecke mit gleicher Kantenlänge. Das Polytop ist das Deltaeder mit sieben Ecken.

In Fall 4 sind die beiden benachbarten 4-valenten Ecken identisch. Die beiden 5-valenten Ecken, die diese beiden 4-valenten Ecken als Nachbarn haben, haben zwei benachbarte Kanten mit gleichem Außenwinkel. Sie sind also symmetrisch und eindeutig. Somit entsprechen sie der 5-valenten Ecke des Deltaeders mit 8 Ecken. Die beiden anderen Kanten dieser 5-valenten Ecke mit gleichem Winkel haben einen Außenwinkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel. Also sind die Facetten, die die beiden Kanten mit Außenwinkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel enthalten, Dreiecke. Damit ist die dritte 5-valente Nachbarecke der 4-valenten Ecke ebenfalls eindeutig bestimmt und ist ebenfalls die 5-valente Ecke des Deltaeders mit 8 Ecken. Aufgrund der Außenwinkel an den Kanten kann das Polytop dann nur noch das Deltaeder mit 8 Ecken sein.

In Fall 5 kann auf das Dreieck, das die beiden 4-valenten Ecken und eine 5-valente Ecke bilden, wieder ein Tetraeder aufgesetzt werden. Analog zu Fall 2 erhält man dann die Polytope vom Typ T_{k_1, k_2, k_2, k_3}^k und vom Typ T_{k_1, k_1, k_2, k_3}^k mit $k_1 + k_2 = k$ und $k_3 < k_2$.

Die Betrachtung von Fall 6 erfordert die Unterscheidung mehrerer Fälle. Angenommen eine der Kanten, die die 5-valenten Ecken verbinden, hat Oktaederaußenwinkel, dann gibt es wieder ein reguläres Dreieck als Facette, dessen Kanten alle Oktaederaußenwinkel haben, so dass sich ein Tetraeder aufsetzen lässt. Man erhält somit alle Tetraederschnitte der Form T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k mit $k_1 + k_2 = k$ und $k_3 < k_2$. Seien also alle Kanten, die zwei 5-valente Nachbarecken der betrachteten 4-valenten Ecke verbinden, mit einem Außenwinkel versehen, der kleiner als der Oktaederwinkel, also auch größer als 0 ist. Falls die Außenwinkel γ, δ der beiden anderen Kanten der 5-valenten Ecken ebenfalls kleiner dem Oktaederaußenwinkel sind (siehe Abb. 5.6), dann sind die angrenzenden Facetten Dreiecke, da sie zwei Kanten mit Außenwinkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel haben. Die vier neuen Ecken können daher auch nur 5-valenten Ecken sein und müssen symmetrisch sein, da sie zwei Kanten mit gleichem Außenwinkel haben. Dadurch zeigt sich aber, dass alle 4 neuen 5-valenten Ecken gleich sind und somit auch $\gamma = \delta$, woraus wiederum $\alpha = \beta = \varepsilon$ folgt. Alle 5-valenten Ecken sind somit vom gleichen Typ. Die 4 noch nicht vollendeten Kanten können aufgrund der Kantenlängen und ihrem Außenwinkel nur in einer gemeinsamen 4-valenten Ecke münden und es entsteht ein bicapped square antiprism, das Deltaeder mit 10 Ecken. Sei nun einer der Außenwinkel γ, δ größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel (siehe Abb. 5.7), o.B.d.A. sei dies γ . γ ist kleiner dem Tetraederaußenwinkel, da sonst α gleich dem Oktaederaußenwinkel ist. D.h. falls die Kante mit dem Außenwinkel γ

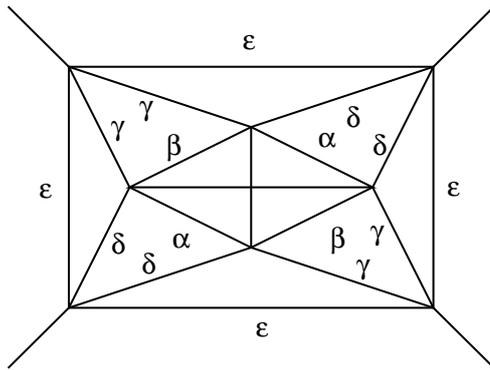


Abbildung 5.6: Typ $[5,5,5,5]$

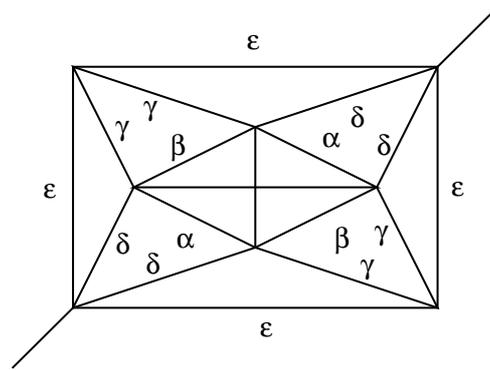


Abbildung 5.7: Typ $[5,5,5,5]$

in einer 5-valenten Ecke mündet, kann nur eine der Nachbarkanten an dieser Ecke den Außenwinkel 0 haben. Die Facette mit den Kantenaußenwinkeln α und δ ist ein Dreieck, da diese Winkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel sind. Da eine der beiden Facetten, welche die Kante mit dem Außenwinkel γ enthält, ein reguläres Dreieck ist, hat diese Kante die gleiche Länge wie die Kanten, die die 5-valenten Nachbarerecken der 4-valenten Ausgangsecke verbinden. Also sind alle Facetten an der Kante mit den Außenwinkeln γ Dreiecke und der Winkel γ ist gleich dem Oktaederaußenwinkel. Die 5-valenten Ecken, die die 4-valente Ausgangsecke als Nachbar haben, sind symmetrisch, also gilt $\alpha = \delta$. Die Ecke, in die die Kante mit Außenwinkel γ mündet, kann nicht 5-valent sein, da sie sonst entartet wäre und die Facette mit den Kanten γ und δ sind symmetrisch und es gilt $\delta = \alpha$. Daraus folgt der Graph in Abbildung 5.7 und das Polytop ist eindeutig das tricapped tetragonal prism, das Deltaeder mit neun Ecken.

In Fall 7 kann das Polytop nur das 11er Polytop sein. In Abb. 5.2 ist der Graph dieses Polytops und die Außenwinkel an den Kanten gegeben. Alle Außenwinkel außer α und η sind kleiner als der Oktaederaußenwinkel. Schon bei der Bestimmung der Ecke wurde festgestellt, dass die benachbarten 5-valenten Ecken bestimmt sind. Da eine Facette ein Dreieck ist, wenn sie mindestens zwei Kanten mit Außenwinkel kleiner dem Oktaederwinkel hat (siehe Lemma 5.2.5), kann das Polytop sukzessive bestimmt werden.

In Fall 8 sind die beiden benachbarten 5-valenten Ecken $5/3$ -entartet und es entsteht ein reguläres Dreieck, dessen Kanten alle Oktaederaußenwinkel haben. Dort kann ein Tetraeder aufgesetzt werden und man erhält eine Polytop mit einer 3-valenten Ecke. Aus den bekannten Polytopen mit 3-valenten Ecken sind nur Tetraederschnitte möglich.

In Fall 9 und 10 ist die 4-valente Ecke gleich und die Facetten an einer Kante von dieser 4-valenten Ecke zu einer entarteten 5-valenten Ecke sind Trapeze. Aufgrund der Kantenkrümmung sind die beiden spitzen Ecken eines Trapezes jeweils 4-valent und die beiden stumpfen Ecken $5/3$ -entartet. Das Polytop ist somit ein abgeschnittene tetragonale Bipyramide.

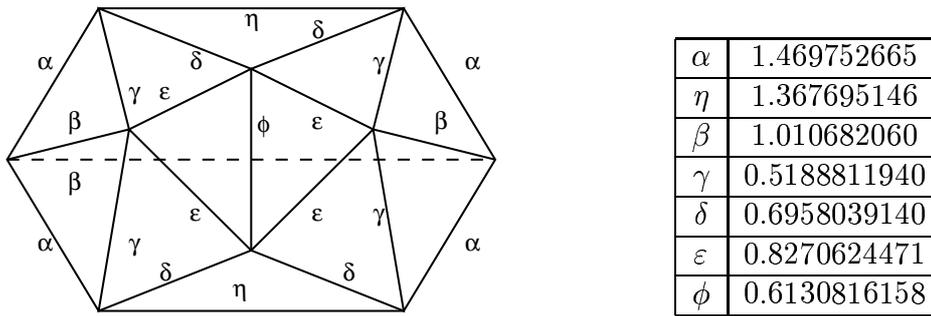


Abbildung 5.8: Das Polytop mit 11 Ecken und seine Außenwinkel

Nach dieser Betrachtung sind alle Polytope, die eine 4-valente Ecke enthalten, bekannt. Es genügt also im folgenden Polytope zu betrachten, die nur 5-valente Ecken aufweisen. Dazu werden die möglichen auftretenden Facetten betrachtet. Dies sind Sechseck, Fünfeck, Parallelogramm und Trapez. Falls das Polytop ein Sechseck enthält, sind alle Ecken dieses Sechsecks bis auf Symmetrie gleich und entweder $5/3$ oder $5/4$ -entartet. Falls alle Ecken $5/3$ -entartet sind, so ist die Facette, die an einer Kante des Sechsecks mit Oktaederaußenwinkel liegt, entweder ein reguläres Dreieck, dessen Kanten alle Oktaederaußenwinkel haben oder ein Trapez mit drei Kanten, die Oktaederaußenwinkel haben, und einer Kante die Tetraederaußenwinkel hat. In beiden Fällen lässt sich wie in der Betrachtung zu Fall 6 ein Tetraeder bzw. ein abgeschnittenes Tetraeder anfügen, so dass eine 3-valente Ecke entsteht. Das Polytop ist ein Tetraederschnitt. Falls die Ecken $5/4$ -entartet sind, sind die an das Sechseck angrenzenden Facetten alle Dreiecke, da die Außenwinkel α und β in Abb. 5.9 kleiner dem Oktaederaußenwinkel sind. Die sechs neuen 5-valenten Ecken sind ebenfalls symmetrisch und wegen der gemeinsamen Kante γ identisch. Daraus folgt $\alpha = \beta$. Also sind alle 5-valenten Ecken gleich, das Sechseck ist regulär und das Polytop ist das hexagonale Antiprisma.

Falls das Polytop eine fünfeckige Facette hat, so sind 4 Ecken stumpf und eine Ecke spitz. Die beiden Kanten der spitzen Ecke müssen einen Außenwinkel haben, der größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel ist, da sie an einer entarteten Ecke liegen. Dies ist nur möglich, wenn der Außenwinkel gleich dem Oktaederaußenwinkel ist, da die beiden Kanten an der spitzen Ecke benachbart sind. Also hat das Fünfeck 3 Kanten mit Oktaederaußenwinkel und 2 Kanten mit Tetraederaußenwinkel. An der Kante mit Oktaederaußenwinkel, die nicht an der spitzen Ecke liegt, schließt sich wie oben ein reguläres Dreieck oder ein Trapez an, so dass man ein Tetraeder oder ein abgeschnittenes Tetraeder anfügen kann, so dass man einen Tetraederschnitt erhält. Ein Parallelogramm mit ausschließlich 5-valenten Ecken kann als Facette nicht auftreten, da alle Kanten einen Außenwinkel größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel haben müssen. Aufgrund der spitzen Ecken muss Gleichheit gelten. Die stumpfe Ecke lässt aber nicht zu, dass

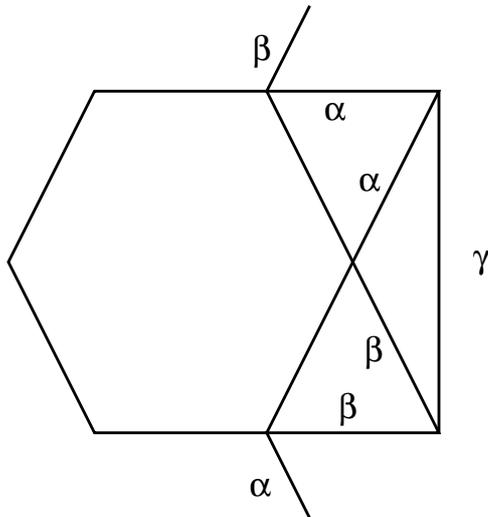


Abbildung 5.9: Eine Sechseckige Facette

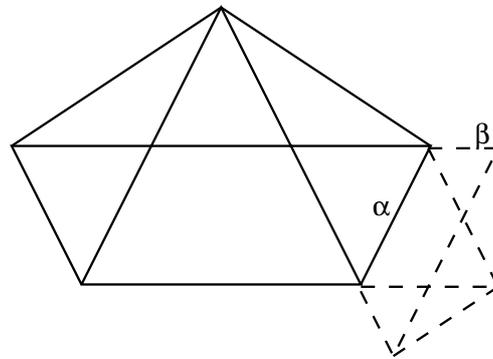


Abbildung 5.10: Trapezfacette

alle Kanten Oktaederaußenwinkel haben.

Nun kann angenommen werden, dass alle Facetten des Polytops entweder reguläre Dreiecke oder Trapeze sind. Falls eine Facette ein Trapez ist und keine der Kanten einen Außenwinkel gleich dem Oktaederaußenwinkel hat, so sind die 3 kürzeren Seiten des Trapezes gleich lang und die Nachbarfacetten an diesen Kanten reguläre Dreiecke, da mindestens zwei Außenwinkel an jedem Dreieck kleiner dem Oktaederwinkel sind (siehe Abb. 5.10 und Lemma 5.2.5). Angenommen die Nachbarfacette an der Kante α wäre wieder ein Trapez, dann wäre α die Grundseite, da α kleiner dem Oktaederaußenwinkel ist. Die an β anschließende Facette hätte zwei unterschiedlich lange Kanten, müsste also ein Trapez sein. β ist kleiner als der Oktaederaußenwinkel muss also die Grundseite des Trapezes sein, was nicht möglich ist, da β kürzer als die andere Seite ist. Also ist die an α anschließende Facette ein Dreieck.

Durch weitere Überprüfung stellt man fest, dass es kein Polytop mit ausschließlich solchen Facetten geben kann.

Angenommen es gibt eine trapezförmige Facette, bei der die Schenkel Oktaederaußenwinkel haben und die Seite gegenüber der Grundseite Tetraederaußenwinkel. Die an diese Kante angrenzende Facette ist wiederum trapezförmig. Die beiden 5-valenten Ecken können entlang der gemeinsamen Kante zusammen geschoben werden, so dass sie auf eine Oktaederecke abgebildet werden. Die Oktaederecke ist dann vom Typ $[5, 5, 5, 5]$ oder $[5, 5, 6, 6]$ aus Satz 5.2.6. Im zweiten Fall hat die Grundseite eines der beiden Tetraeder Oktaederaußenwinkel und das Polytop kann um ein abgeschnittenes Tetraeder ergänzt werden, somit handelt es sich um einen Tetraederschnitt. Es bleibt also nur noch der Fall zu betrachten, bei dem die Stauchung zu einer 4-valenten Ecke den Typ $[5, 5, 5, 5]$ ergibt. Die beiden verbleibenden Kanten der vier 5-valenten Ecken können nicht alle einen

Außenwinkel kleiner dem Oktaederaußenwinkel haben, da sonst alle Nachbarfacetten Dreiecke wären, was aufgrund der unterschiedlichen Kantenlängen nicht möglich ist. Somit hat genau eine Kante einen Außenwinkel größer gleich dem Oktaederaußenwinkel und die andere Kante hat einen Außenwinkel kleiner als der Oktaederaußenwinkel. Die spitzen Ecken der beiden Trapeze bilden ein Rechteck. Sei α der Außenwinkel der Kante, die zu der längeren Kante dieses Rechtecks benachbart ist, und β der Außenwinkel der anderen verbleibenden Kante. Falls α kleiner als der Oktaederaußenwinkel ist, so entsteht aufgrund der Außenwinkel und der Längen der Kanten der Graph in Abbildung 5.11 links. β ist gleich dem Oktaederaußenwinkel, wodurch die Ecken eindeutig sind. Falls α größer oder gleich dem Oktaederaußenwinkel ist, so ist β kleiner als der Oktaederaußenwinkel und die Facette, die zwei Kanten mit Außenwinkel β hat, ist ein Dreieck. Die Kante mit dem Außenwinkel α , der aufgrund der Konstruktion kleiner als der Tetraederaußenwinkel ist, kann nur eine entartete Nachbarkante haben. Aufgrund der Kantenlängen entsteht dann der Graph in Abbildung 5.11 rechts bis auf die gestrichelte Linie. Der Graph enthält zwölf 5-valente Ecken und die Symmetrie lässt nur drei verschiedene Kanten zu, um einen vollständigen Graphen zu erhalten. Es zeigt sich, dass die gestrichelte Kante die einzige ist, die ein zulässiges Polytop liefert. Beide Polytope sind gestreckte Versionen des neunner Deltaeders,

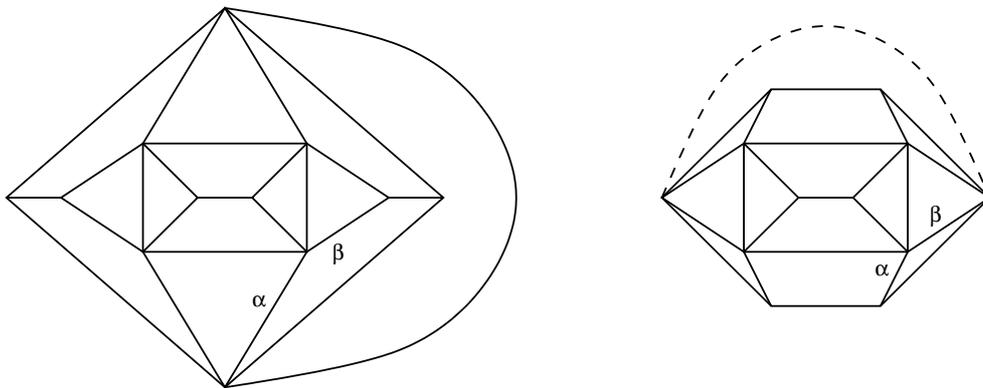


Abbildung 5.11: trapezförmige Facette

bei der die 4-valenten Ecken in zwei 5-valenten Ecken transformiert werden.

Die beiden Tabellen 5.3 und 5.2 geben einen Überblick über alle Packungspolytope mit minimaler Oberfläche und nicht zu spitzen Ecken. Deltaeder sind durch die Bezeichnung Δ_i besonders hervorgehoben, wobei i die Eckenzahl angibt. In Tabelle 5.3 sind die verschiedenen Tetraederschnitte aufgelistet. Dabei gibt die Spalte K_{ij} an, von welcher Art die Verbindungskante der Ecken i und j ist (siehe Abb. 3.1). Dabei bedeutet '0', dass die Kante an keiner Ecke beschnitten wurde, '1' an einer Ecke, '2' an zwei Ecken. 'p' steht für einen Schnitt bei dem die Kante auf einen Punkt reduziert wurde, also für $k_i + k_j = k$. 'ü' zeigt eine Überlappung der Schnitte an der Kante an, also $k_i + k_j > k$. Typ 34 ist

| Name | 3-val | 4-val | 5-val | Fall |
|--|-------|-------|-------|------|
| tetragonale Bipyramide (Δ_5) | 2 | 3 | - | 4 |
| beschnittene tetragonale Bipyramide | 1 | 3 | 3 | 9 |
| zweifach besch. tetr. Bipyramide | - | 3 | 6 | 16 |
| Boerdijk Ring (Δ_7) | - | 5 | 2 | 14 |
| Bisdisphenoid (Δ_8) | - | 4 | 4 | 15 |
| dreif. bekapptes tetragonales Prisma (Δ_9) | - | 3 | 6 | 16 |
| zweif. bekapptes quadr. Antiprisma (Δ_{10}) | - | 2 | 8 | 17 |
| 11er Polytop (Oktadekaeder) | - | 2 | 8 | 17 |
| hexagonales Antiprisma | - | - | 12 | 19 |
| gestrecktes dreif. gekapptes tetr. Prisma (Typ 1) | - | - | 12 | 19 |
| gestrecktes dreif. gekapptes tetr. Prisma (Typ 2) | - | - | 12 | 19 |
| Ikosaeder (Δ_{12}) | - | - | 12 | 19 |

Tabelle 5.2: 12 minimale Polytope ohne Tetraederschnitte

besonders, da sich die Schnitte an den Ecken 1, 2 und 3 so überlappen, dass die gemeinsame Facette dieser Ecken zu einem Punkt entartet, d.h. $k_1 + k_2 + k_3 = 2k$ (siehe Satz 3.1.2). In Tabelle B.1 sind zur genaueren Unterscheidung die Anzahlen der Facetten aufgelistet. Dadurch wird bis auf die Typenpaare (16,34), (17,32) und (18,26) der Unterschied verschiedener Tetraederschnitte deutlich, die dem gleichen Fall zugeordnet werden. Bei den drei angegebenen Typenpaaren unterscheiden sich jedoch die Graphen, bzw. die Art der Facetten. Bei Typ 34 sind alle Facetten Parallelogramme, nicht aber für Typ 16. Alle Nachbarfacetten der 3-valenten Ecken der Typen 26 und 32 sind Parallelogramme nicht aber bei den Typen 17 und 18.

Tetraederschnitte, die in dieser Tabelle nicht aufgeführt sind gibt es entweder nicht, oder sie können nach Satz 3.1.2 bzw. Definition 3.1.3 aus einem kleineren Tetraeder entsprechend einem der behandelten Fälle erzeugt werden.

| Typ | K_{12} | K_{13} | K_{14} | K_{23} | K_{24} | K_{34} | 3-val | 4-val | 5-val | Fall |
|-----|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-------|-------|-------|------|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | - | - | 1 |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 3 | - | 3 | 3 |
| 3 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 2 | - | 6 | 6 |
| 4 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | - | 9 | 12 |
| 5 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | - | - | 12 | 19 |
| 6 | p | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 2 | 1 | 4 | 5 |
| 7 | p | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 7 | 11 |
| 8 | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | - | 1 | 10 | 18 |
| 9 | p | p | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 2 | 5 | 10 |
| 10 | p | p | 2 | 2 | 2 | 2 | - | 2 | 8 | 17 |
| 11 | p | p | 1 | p | 1 | 1 | 1 | 3 | 3 | 9 |
| 12 | p | p | 2 | p | 2 | 2 | - | 3 | 6 | 16 |
| 13 | p | p | p | 2 | 2 | 2 | - | 3 | 6 | 16 |
| 14 | p | p | p | p | p | p | - | 6 | - | 13 |
| 16 | ü | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 2 | - | 6 | 6 |
| 17 | ü | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | - | 9 | 12 |
| 18 | ü | p | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 7 | 11 |
| 19 | ü | p | 1 | p | 1 | 1 | 1 | 2 | 5 | 10 |
| 20 | ü | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | - | - | 12 | 19 |
| 21 | ü | p | 2 | 2 | 2 | 2 | - | 1 | 10 | 18 |
| 22 | ü | p | 2 | p | 2 | 2 | - | 2 | 8 | 17 |
| 23 | ü | p | p | 2 | 2 | 2 | - | 2 | 8 | 17 |
| 24 | ü | p | p | p | p | 2 | - | 4 | 4 | 15 |
| 25 | ü | ü | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | - | 9 | 12 |
| 26 | ü | ü | 1 | p | 1 | 1 | 1 | 1 | 7 | 11 |
| 27 | ü | ü | 2 | 2 | 2 | 2 | - | - | 12 | 19 |
| 28 | ü | ü | p | 2 | 2 | 2 | - | 1 | 10 | 18 |
| 29 | ü | ü | 2 | p | 2 | 2 | - | 1 | 10 | 18 |
| 30 | ü | ü | p | p | 2 | 2 | - | 2 | 8 | 17 |
| 31 | ü | ü | ü | 2 | 2 | 2 | - | - | 12 | 19 |
| 32 | ü | ü | 1 | ü | 1 | 1 | 1 | - | 9 | 12 |
| 33 | ü | ü | 2 | ü | 2 | 2 | - | - | 12 | 19 |
| 34* | ü | ü | 1 | ü | 1 | 1 | 2 | - | 6 | 6 |

Tabelle 5.3: Tetraederschnitte

Kapitel 6

Energie-Potentiale

In physikalischen Untersuchungen von Festkörpern oder Microclustern beschreiben Energiepotentialen den Zustand der Atome. Eine optimale Struktur wird dadurch bestimmt, dass sie die Energie dieses Potentials minimiert. Bei der Beschreibung von Microclustern werden eine Vielzahl solcher Potentiale benutzt, wie z.B. das Lennard-Jones Potential, das Morse-Potential oder das Murrel-Mottram Potential. Die Wahl des Potentials hängt von der Art der Bindungen ab (z.B. kovalente Bindung, oder van der Waals-Bindung) aber auch von den Eigenschaften des zu untersuchenden Stoffes. Diese Potentiale lassen sich durch mehrere Parameter so variieren, dass sie eine möglichst gute Beschreibung eines Festkörpers bei einer festgelegten Temperatur ermöglichen. Dadurch wird es möglich, verschiedene Festkörperstrukturen wie z.B. hexagonal closest packing (hcp) oder face-centered cubic lattice (fcc) als optimale Strukturen zu erhalten. In den meisten interessanten Fällen genügt es, Zentralkräfte zwischen zwei Körpern zu berücksichtigen, auch wenn dies die realen Zusammenhänge nicht immer vollständig beschreibt, z.B. weil winkelabhängige Größen eine Rolle spielen oder allgemeiner drei-Körper Terme. Durch diese enorme Vereinfachung bleibt das Problem handhabbar, daher sind die meisten hier beschriebenen Potentiale von diesem Typ (Lennard-Jones, Morse). Für die Untersuchung der Minima solcher Potentiale gibt es effiziente Algorithmen wie das Simulated Annealing oder die Optimierung mittels basin-hopping, wie sie von Doye und Wales [DW1] auf Lennard-Jones Cluster angewandt wurde.

Potentiale, die nur Zentralkräfte zwischen zwei Atomen berücksichtigen, lassen sich als Summe von Wechselwirkungspotentialen $v(r)$ darstellen, die nur vom Abstand r zweier Teilchen abhängen und folgenden Eigenschaften genügen sollten [Ho]:

1. $v(r) \rightarrow 0^-$ für $r \rightarrow \infty$
2. $v(r) \rightarrow \infty$ für $r \rightarrow r_{min}$ und $r_{min} \geq 0$
3. $v'(r) = 0$ für ein eindeutiges r_0 mit $r_{min} < r_0 < \infty$

4. $v''(r_0) > 0$ und $v(r_0) < 0$

Ein Potential dieser Form ermöglicht überhaupt erst die Entstehung von Kristallen, da die Atome bestrebt sind, einen gewissen Gleichgewichtsabstand r_0 einzunehmen, an dem die potentielle Energie minimal ist. Sie nimmt schnell zu bei Verringerung des Abstands, wobei der Mindestabstand r_{min} nicht unterschritten wird.

6.1 Van der Waals Bindung und Lennard-Jones Potential

Im Gegensatz zur Ionenbindung oder kovalenten Bindung werden bei der van der Waals Bindung keine Elektronen zwischen den Bindungspartnern transferiert. Diese Bindung findet man dann, wenn die Bausteine gefüllte Elektronenschalen aufweisen, wie z.B. bei den Edelgasen. Die dann vorliegende Bindung kann so verstanden werden, dass die beiden Atome gegenseitig Dipole induzieren, die eine Anziehungskraft zwischen ihnen hervorrufen. Diese Anziehungskraft basiert auf quantenmechanischen Effekten und ist indirekt proportional zur sechsten Potenz des Abstands. Die bei kleinen Abständen dominierenden abstoßenden Kräfte, basieren ebenfalls auf Quanteneffekten (Pauli-Abstoßung) und verhalten sich bei Edelgasen laut empirischer Ermittlung umgekehrt proportional zur zwölften Potenz des Abstands. Diese Vorstellung wird durch das Lennard-Jones Potential wiedergegeben:

$$v_{LJ}(r) = \varepsilon[(r/r_0)^{-12} - 2(r/r_0)^{-6}]$$

ε gibt das Potentialminimum und r_0 den Gleichgewichtsabstand zweier Atome oder Moleküle. Der r^{-12} Term beschreibt den abstoßenden Teil der Kräfte (positives Vorzeichen), während der r^{-6} Term den anziehenden Anteil beschreibt (negatives Vorzeichen), der auf den Dipol- bzw. induzierten Dipolkräften beruht.

Zum Lennard-Jones Potential gibt es viele Untersuchungen. Eine Liste der besten Packungen kann man z.B. in der Cambridge Cluster Database [CCD] finden.

6.2 Morse Potential

Ein weiteres Zwei-Körper Potential ist das Morse Potential. Es hat die Form:

$$V_M = \varepsilon \sum_{i < j} e^{\rho_0(1-r_{ij}/r_0)} (e^{\rho_0(1-r_{ij}/r_0)} - 2) \quad (6.1)$$

Dabei gibt ε die Energie am Tiefpunkt des Potentials und r_0 den Gleichgewichtsabstand. Es bleibt nur ein variabler Parameter ρ_0 , der die Reichweite der Kräfte

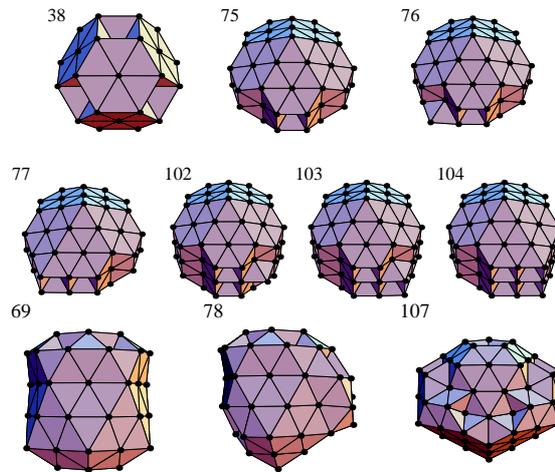


Abbildung 6.1: Einige optimale Packungen aus [DW1]

beeinflusst. Dabei fällt mit wachsendem ρ_0 die Reichweite der anziehenden Kräfte des Potentials. Für $\rho = 6$ hat das Lennard-Jones Potential die gleiche Krümmung im Potentialminimum wie das Morse Potential. Das Morse Potential wird z.B. zur Modellierung des Verhaltens von Alkalimetallen verwendet (siehe [CCD]). Für z.B. Natrium verwendet man den Wert $\rho_0 = 3.15$, bei Nickel erhält man für den Festkörper $\rho_0 = 3.96$. Für Nickel erhält man damit in Übereinstimmung mit Experimenten ikosaedrische Cluster im Bereich von 13 und 55 Atomen. Besonders interessant am Morse Potential ist, dass es abhängig von der Anzahl der Körper und dem Parameter unterschiedliche Strukturen bevorzugt. So ist die dominante Struktur für 38 Atome das beschnittene Oktaeder, für 55 Atome das Mackay-Ikosaeder und im Bereich von 75 Atomen eine dekaedrische Struktur. In allen Fällen liegen für abweichende Parameter andere Strukturen vor. Eine Vielzahl guter Cluster findet man bei Doye und Wales [DW2].

Bilder von dichten Morseclustern gibt es ebenfalls in der Cambridge Cluster Database ([CCD]).

6.3 Murrel-Mottram Potential

Das Murrel-Mottram oder auch MM-Potential wurde von John N. Murrel und Rachel E. Mottram in [MM] beschrieben. Es verwendet zwei und drei-Körper Terme und bietet im Rahmen der Parameter die Möglichkeit alle einfachen Kristallstrukturen, wie fcc, hcp, bcc, sc oder Diamantstruktur, als Optimalzustand zu erhalten. N.T. Wilson und R.L. Johnston haben in ihrer Arbeit [WJ] mit diesem Potential und an Festkörpern empirisch ermittelten Parametern die Struktur von Gold-Clustern mit 2 - 40 Atomen beschrieben. Dabei wurde für die zwei-Körper

Terme des MM-Potentials

$$V = \sum_i^{N-1} \sum_{j>i}^N V_{ij}^{(2)} + \sum_i^{N-2} \sum_{j>i}^{N-1} \sum_{k>j}^N V_{ijk}^{(3)}$$

wie in [MM] beschrieben ein Rydberg-Potential

$$V_{ij}^{(2)} = -D[(1 + a_2\rho_{ij})e^{-a_2\rho_{ij}}]$$

mit

$$\rho_{ij} = \frac{r_{ij} - r_e}{r_e}$$

gewählt. D bestimmt das Potentialminimum, r_e den Gleichgewichtsabstand und a_2 die Härte der Interaktion bzw. des Atoms. Für die Dreikörperterme wird ein kubisches Polynom in Symmetriekoordinaten Q_i , die die Symmetrie des Potentials unter Austausch gleicher Atome widerspiegelt und so die Anzahl der Parameter reduziert, verwendet. Die Q_i sind wie folgt definiert:

$$\begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1/3} & \sqrt{1/3} & \sqrt{1/3} \\ 0 & \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \\ \sqrt{2/3} & -\sqrt{1/6} & -\sqrt{1/6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{ij} \\ \rho_{jk} \\ \rho_{ik} \end{pmatrix}$$

Alle bzgl. Permutation in den Atomen symmetrischen Polynome lassen sich als Produkte und Summen der drei Funktionen Q_1 , $Q_2^2 + Q_3^2$ und $Q_3^3 - 3Q_3Q_2^2$ darstellen. Für das Potential wird ein kubisches Potential angesetzt:

$$P(Q_1, Q_2, Q_3) = c_0 + c_1 Q_1 \dots$$

Zusammen mit einer Dämpfungsfunktion $F(a_3, Q_1) = \text{sech}(a_3 Q_1)$ wird der Dreikörper-Anteil des Potentials zu

$$V_{ijk}^{(3)} = DP(Q_1, Q_2, Q_3)F(a_3, Q_1)$$

6.4 Gupta Potential

Ein weiteres Potential ist das Gupta Potential, das eine andere Funktion anbietet, um die Kräfte, die auf ein Atom in einem Verbund wirken, zu modellieren. Es bietet 5 Parameter, um den Verlauf des Potentials an die Eigenschaften des zu untersuchenden Materials anzupassen. Das Gupta Potential wurde abgeleitet von Ausdrücken für die Berechnung der Bindungsenergie eines Festkörpers. Wie auch bei zwei-Körper Potentialen kann man sich das Potential eines Teilchens aus abstoßendem und anziehendem Anteil bestehend vorstellen. Der abstoßende Anteil V^r ist von exponentieller Form:

$$V^r = A \cdot \exp\left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right)$$

wobei hier der Abstand r_{ij} genannt wurde, um eine Konsistenz mit dem Potential vieler Körper zu erhalten. Der anziehende Anteil ist ebenfalls grundsätzlich von exponentieller Form:

$$V^m = \sqrt{\zeta^2 \exp(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right))}$$

Die Schreibweise mit Wurzel wurde deshalb gewählt, weil sich das Gupta Potential von den zwei-Körper Potentialen dadurch unterscheidet, dass die abstoßenden und anziehenden Anteile der Potentiale nicht einfach addiert werden. Daher handelt es sich bei diesem Potential auch um ein viel-Körper Potential. Die potentielle Energie eines Clusters aus N Atomen wird durch den folgenden Ausdruck beschrieben:

$$V_{\text{clus}} = \sum_i^N \left\{ \sum_{j,j \neq i}^N A \exp(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)) - \sqrt{\sum_{j,j \neq i}^N \zeta^2 \exp(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right))} \right\}$$

r_{ij} bezeichnet, wie schon oben erwähnt, den Abstand zweier Atome i und j des Clusters. A , r_0 , ζ , p und q sind Parameter, mit denen das Potential an experimentelle Beobachtungen, die bei dem zu beschreibenden Material gemacht wurden, angepasst wird. In [TJW] werden mit dem Gupta Potential Aluminium-Cluster mit folgenden Parametern untersucht.

| | |
|-------------------|--------|
| A/eV | 0.1221 |
| ζ/eV | 1.316 |
| p | 8.612 |
| q | 2.516 |
| $r_0/\text{\AA}$ | 2.8637 |

Mit diesen Parametern zeigt das Potential $V^r - V^m$ den für Potentiale typischen Verlauf. Ein Maß für die Bindungsenergie eines einzelnen Atoms kann man aus dem zugehörigen i -ten Summanden des Potentials erhalten. Das Gupta Potential und andere empirisch angepasste Potentiale lassen sich gut zur Bestimmung der strukturellen Eigenschaften von Übergangsmetallen verwenden [CR].

Anhang A

Bilder ausgewählter Packungen

A.1 Goldcluster im MM-Potential

Abbildung A.1 ist eine Kopie aus der Arbeit von Wilson und Johnston S. 164 [WJ]. Sie zeigt die Strukturen der von ihnen bestimmten globalen Minima mit dem Murrel-Mottram Potential. Für die ersten 20 Minima gibt die folgende Tabelle die Struktur wieder:

| N | structure |
|----|------------------------------|
| 2 | dimer |
| 3 | trimer |
| 4 | tetrahedron |
| 5 | trigonal bipyramid |
| 6 | octahedron |
| 7 | pentagonal bipyramid |
| 8 | dodecahedron |
| 9 | tricapped trigonal prism |
| 10 | bicapped square antiprism |
| 11 | octadecahedron |
| 12 | uncentered icosahedron |
| 13 | centered icosahedron |
| 14 | bicapped hexagonal antiprism |
| 15 | capped decahedron |
| 16 | capped decahedron |
| 17 | capped decahedron |
| 18 | capped decahedron |
| 19 | capped decahedron |
| 20 | capped decahedron |

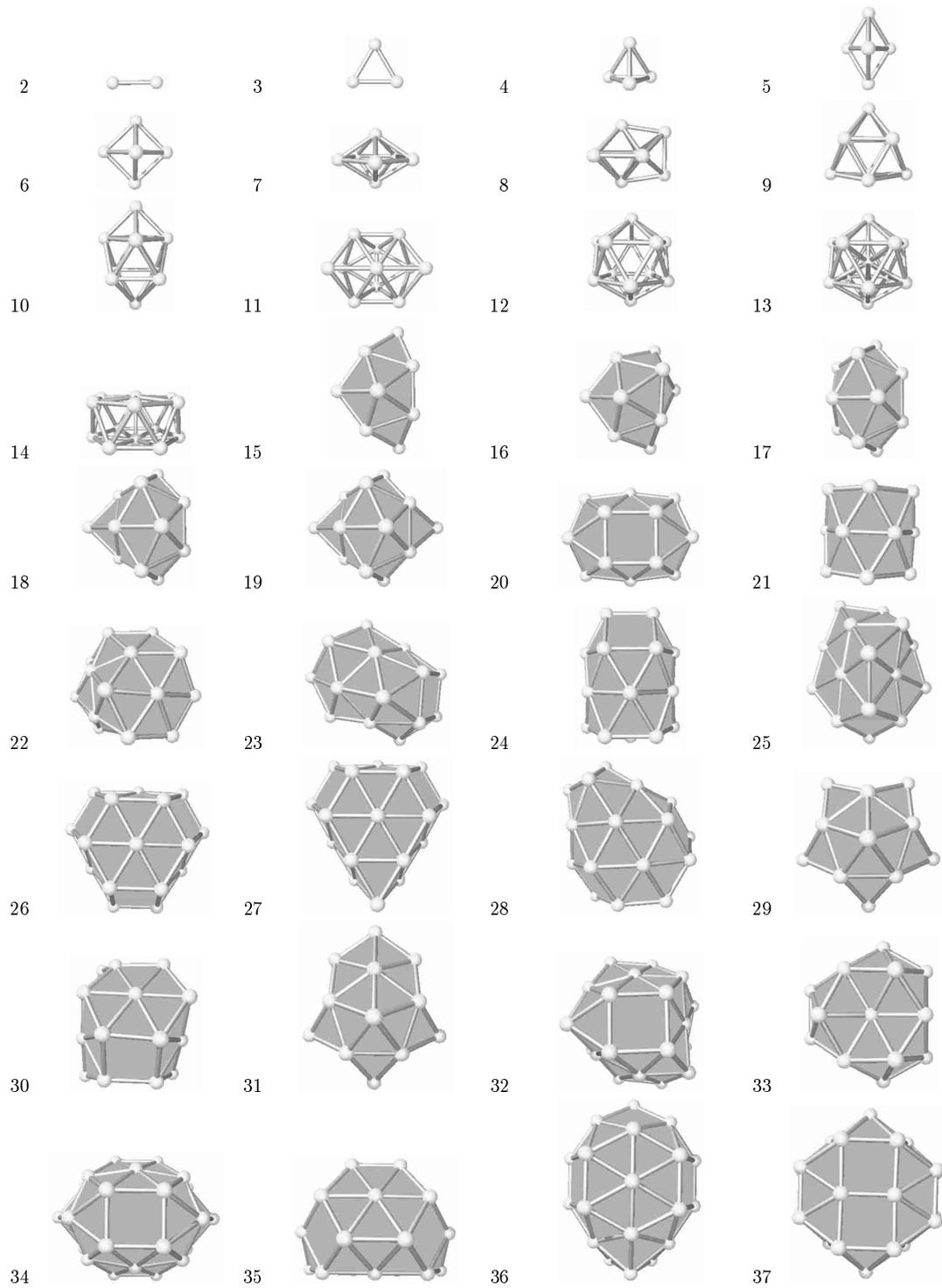


Abbildung A.1: Strukturen der berechneten globalen Minima für Au_{2-37} aus [WJ]

A.2 Bilder der Deltaederpackungen

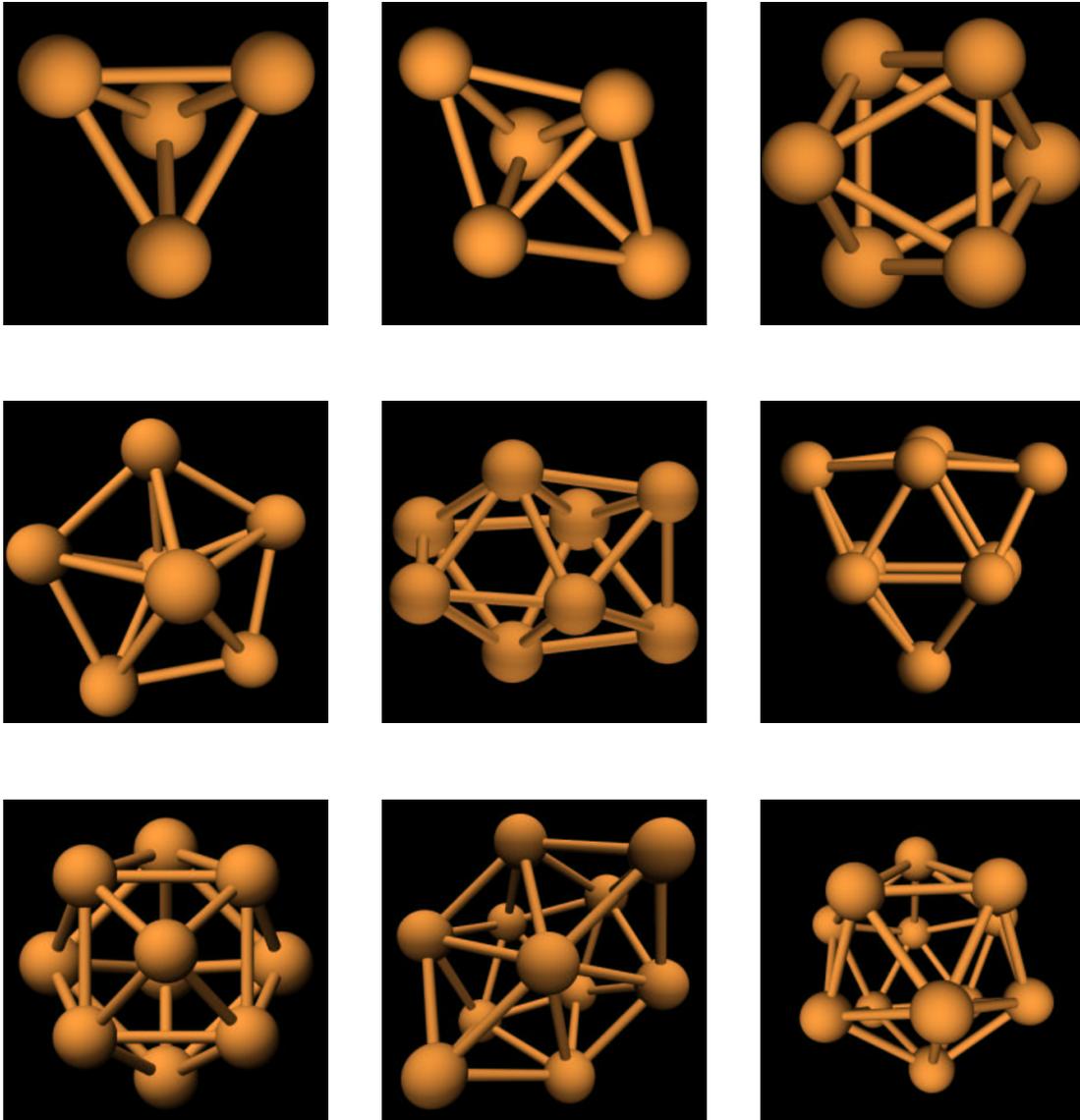


Abbildung A.2: Dichteste Packungen mit 4 bis 12 Kugeln und minimalem Integral der mittleren Krümmung

In Abbildung A.2 sind die Deltaeder mit 4-12 Kugeln (hard spheres) abgebildet. Für 11 Kugeln ist die dichteste Packung für $\rho > 1.313$ gezeigt, die kein Deltaeder ist, da zwei Facetten ein halbes Sechseck bilden. Die Oberfläche lässt sich dennoch ebenfalls in gleichseitige Dreiecke mit Kantenlänge 2 zerlegen. Unter den dichtesten Packungen sind somit alle Deltaeder vertreten (es existiert kein Deltaeder mit 11 bzw. mehr als 12 Ecken). Der in der Bildunterschrift angegebene Parameter ρ kann, wenn man das Ikosaeder nicht berücksichtigt, auf 1.497 ge-

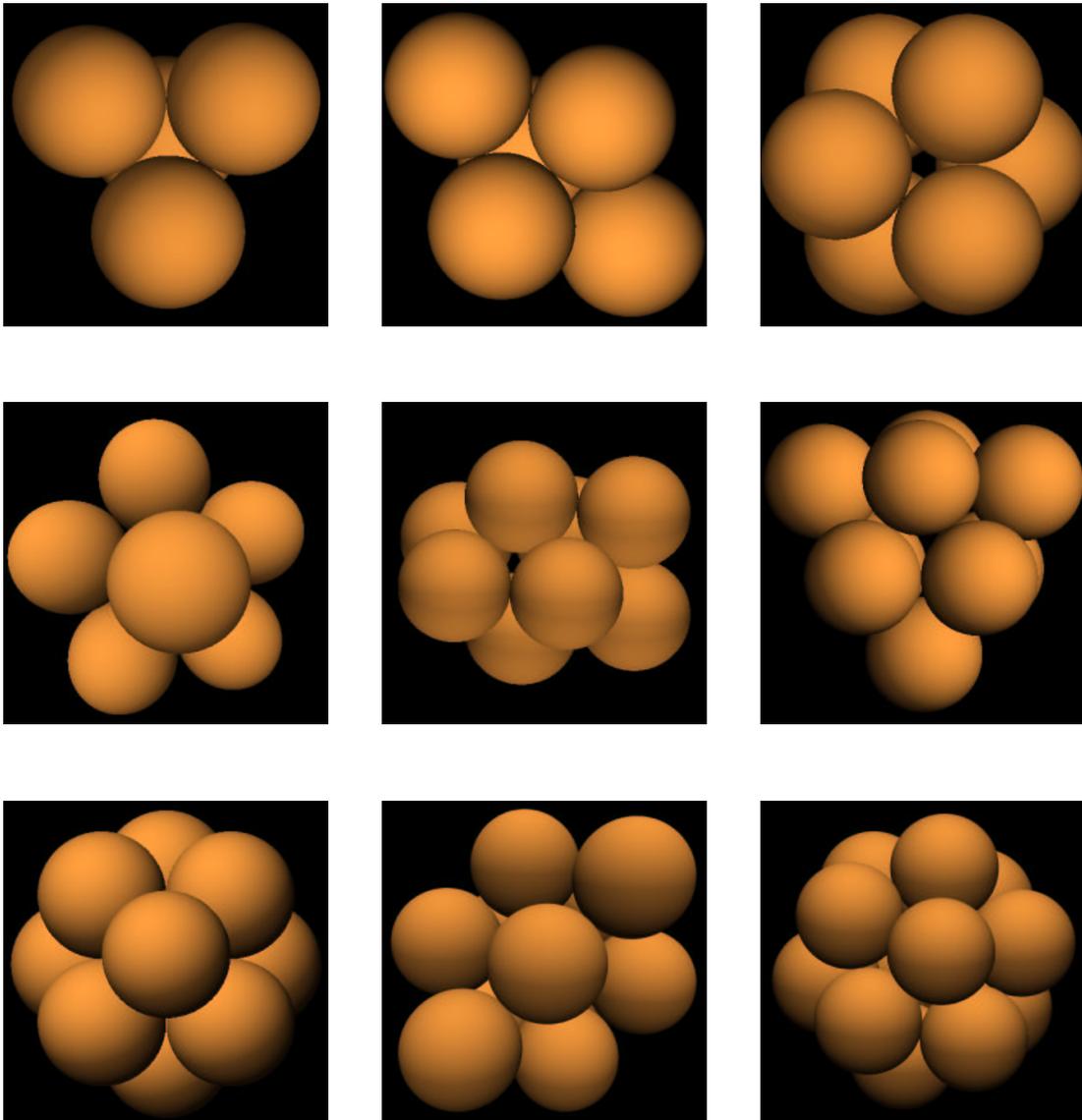


Abbildung A.3: Dichteste Packungen mit 4 bis 12 Kugeln und minimalem Integral der mittleren Krümmung (Vollkugeln)

drückt werden. Das Deltaeder mit 7 Ecken ist sogar schon für $\rho > 1.038$ optimal (s. Tab. 3.1).

A.3 Packungen mit minimaler Oberfläche

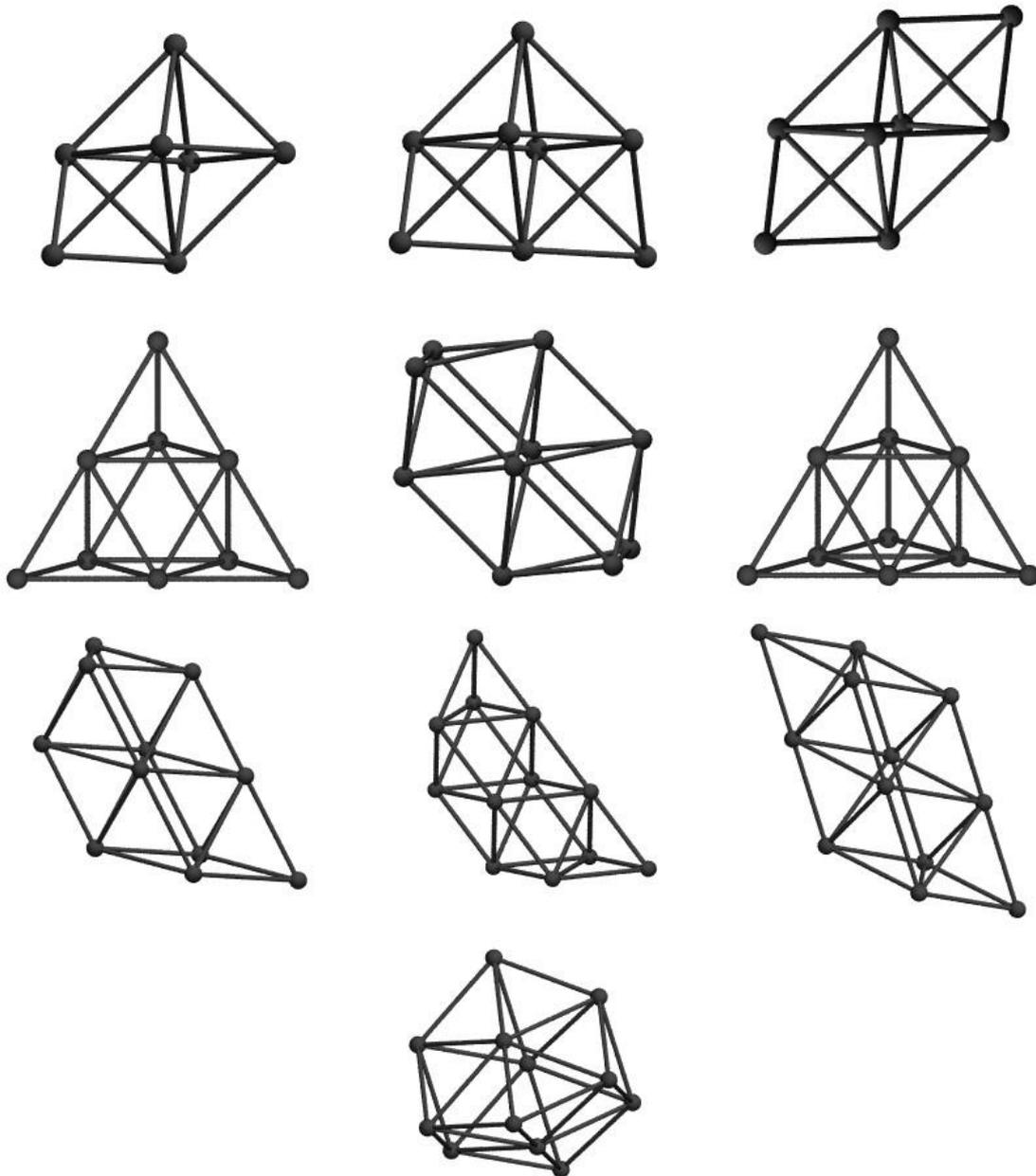


Abbildung A.4: Packungen mit minimaler Oberfläche und 7-12 Kugeln, deren Integral der mittleren Krümmung nicht minimal ist

A.4 Packungen mit Dekaedersymmetrie

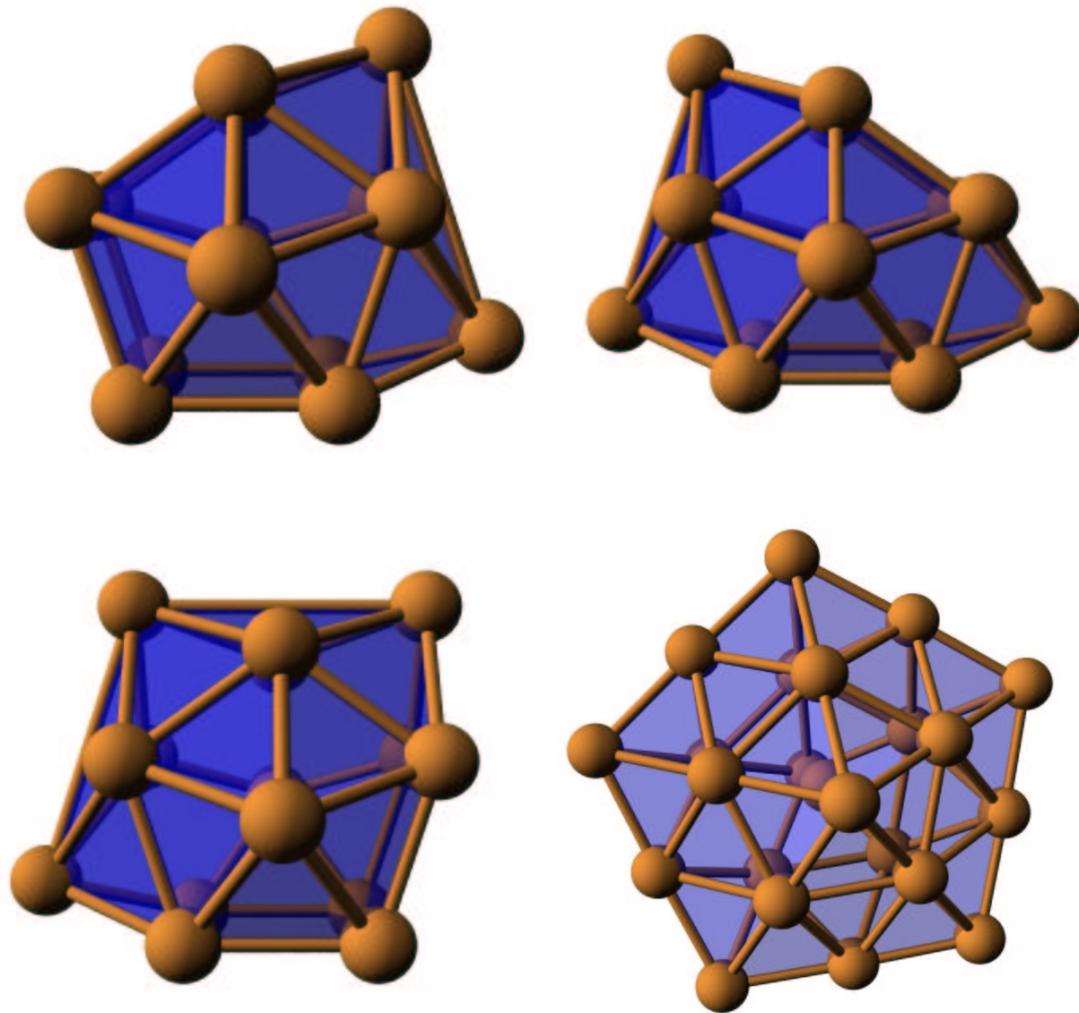


Abbildung A.5: dichteste Packungen vom Dekaedertyp

A.5 Kugelpackungen

Dieser Abschnitt enthält, zusätzlich zu den im Text eingeflochtenen, weitere Darstellungen ausgewählter Kugelpackungen, um eine Vorstellung von der Form der Packungen zu vermitteln.

Abbildung A.7 zeigt die von Gandini und Wills gefundene bis jetzt dichteste bekannte Packung für $\rho = 1$ und $n = 61$. Die Besonderheit dieser Packung ist,

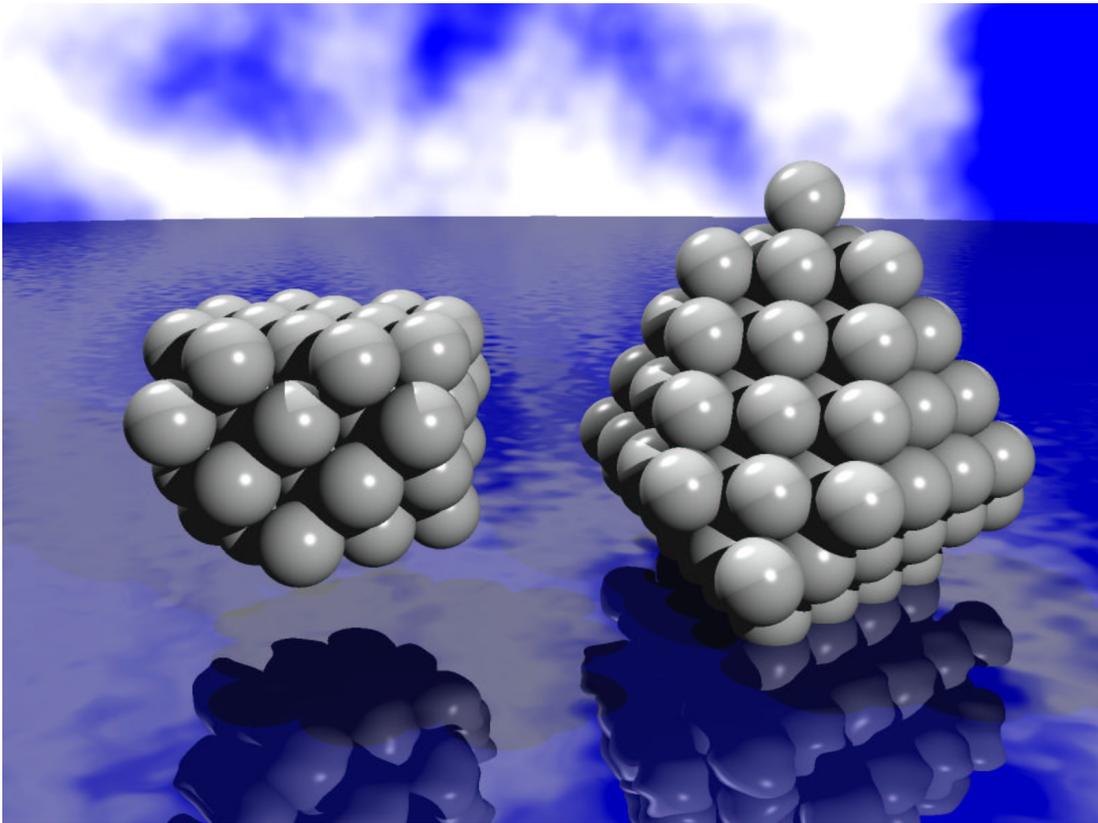


Abbildung A.6: Schnitte zweiter Art mit Überlappung

dass sie nicht in einem Gitter liegt und es vermutlich keine Gitterpackung gibt, die besser ist als die Wurstpäckung S_{61} .

In Abbildung A.8 ist die Packung für 56 Kugeln zu sehen, die von dem verwendeten Algorithmus geliefert wurde und auch in [GW] erwähnt wurde. Sie ist unter den bekannten Packungen, die für $\rho = 1$ dichter sind als S_n , die Packung mit minimalem n . Sie besteht aus einer Oktaederpackung, deren Kanten jeweils 4 Kugeln enthalten und bei der auf zwei Facetten jeweils 6 weitere Kugeln hinzugefügt wurden. Eine ebenso dichte Packung ergibt sich also auch, wenn auf zwei Facetten des Oktaeders, deren Normalenvektoren sich nur im Vorzeichen unterscheiden, diese Kugeln hinzugefügt werden. Dies sind bis auf Symmetrie die einzigen Groemerpackungen, die diese Dichte aufweisen.

Zwei nicht besonders dichte Packungen, die Kanten enthalten, auf denen sich benachbarte Kugeln nicht berühren, sind in Abb. A.6 zu sehen. Beide entstehen aus einem Tetraederschnitt, wenn sich Schnitte zweiter Art überlappen. Die linke Packung (46 Kugeln) entstand aus einer Oktaederpackung auf deren Kanten sich 5 Kugeln befanden. An 5 Ecken des Oktaeders wurden Pyramiden mit 5 Kugeln abgetrennt ($Z_{1,0}$) und an der sechsten Ecke des Oktaeders der Keil $Z_{2,0}$. Einen

Tetraederschnitt $T_{2,2,2,2}^9$, bei dem dann noch sechs Keile $Z_{1,7}$ abgetrennt wurden, stellt die rechte Packung dar.

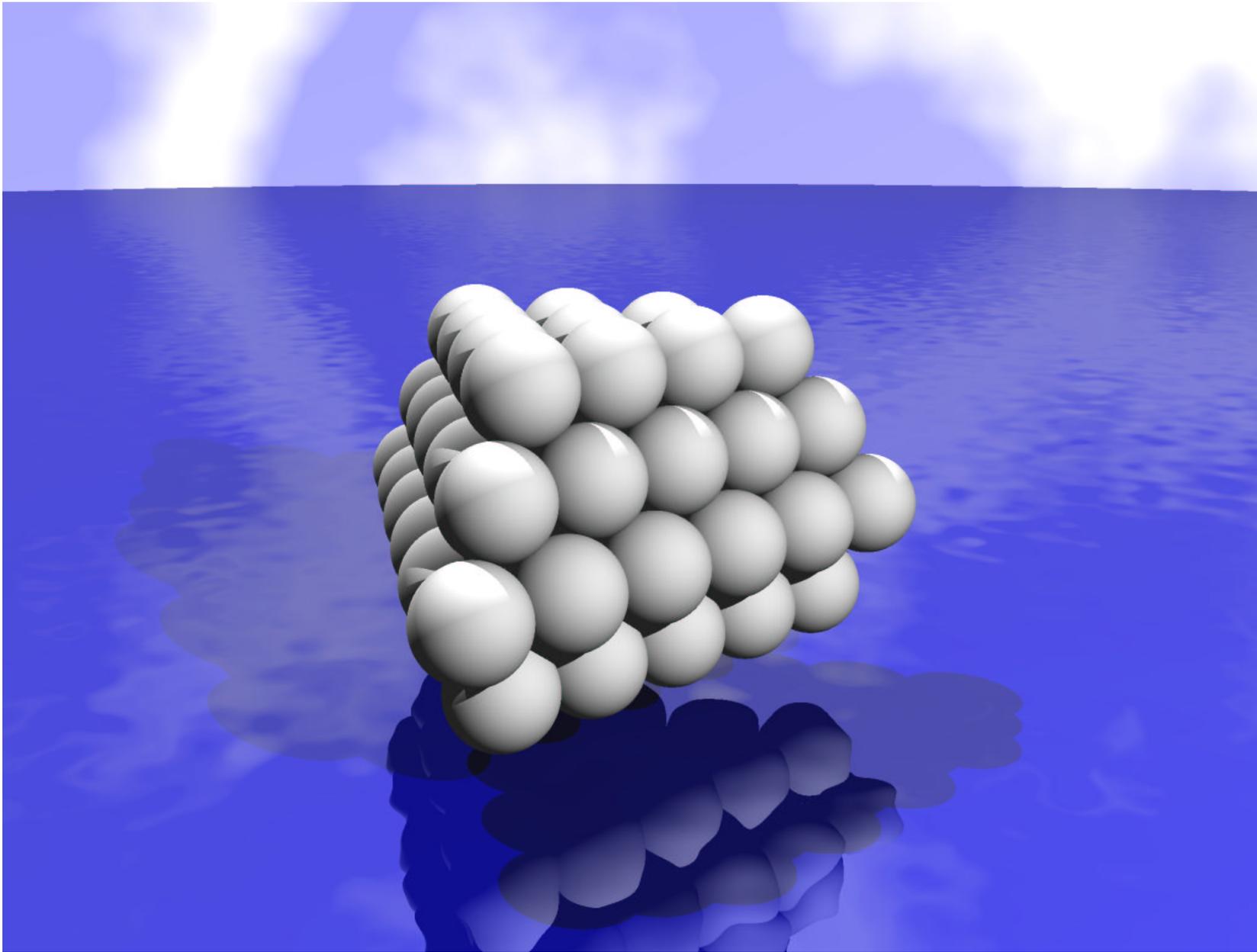


Abbildung A.7: Dichteste bekannte (nicht Gitter-)Packung für 61 Kugeln

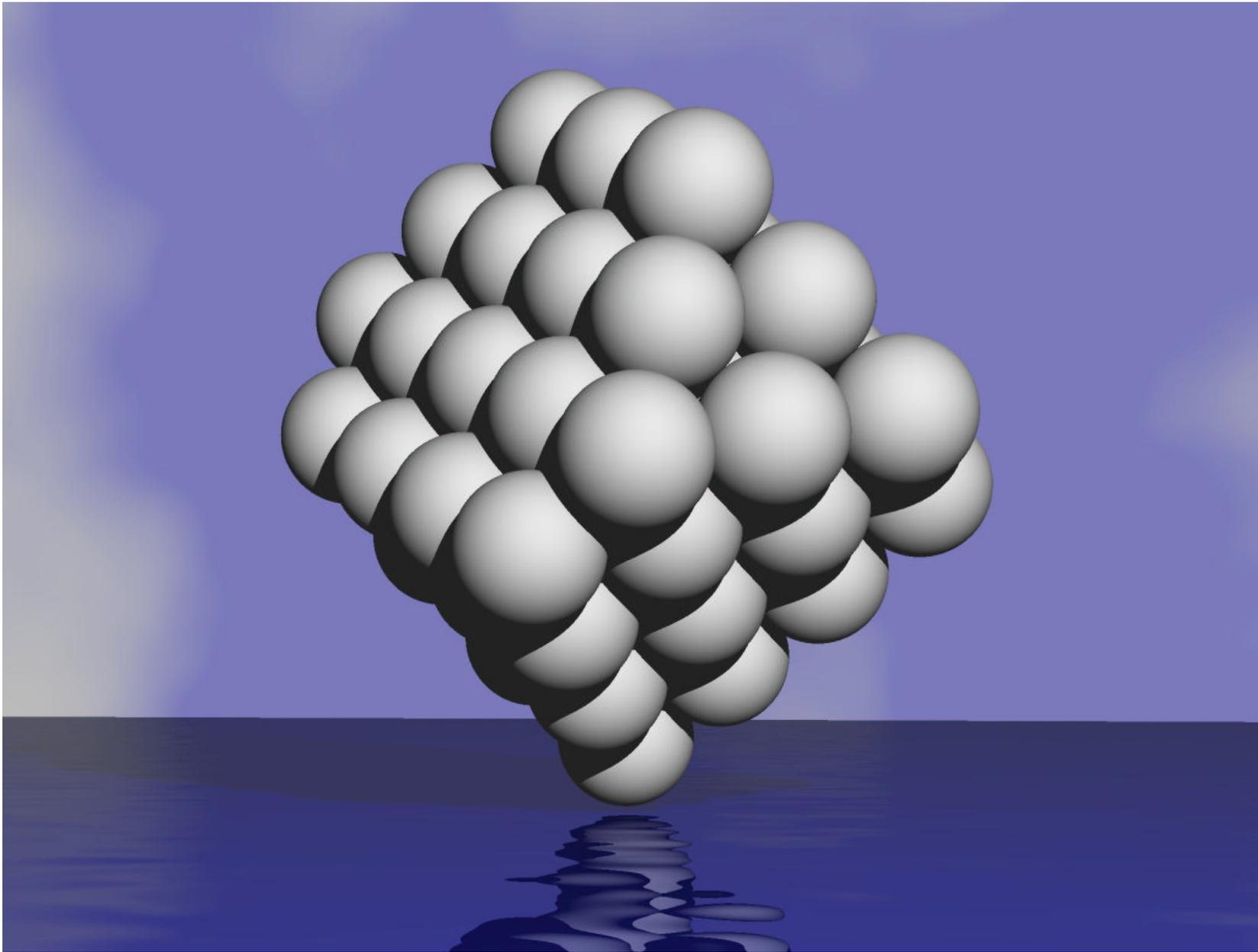


Abbildung A.8: Dichteste Packung für 56 Kugeln

Anhang B

Tabellen

B.1 Facetten der Tetraederschnitte

In diesem Abschnitt sind die Typen der Facetten der Tetraederschnitte erster Art bestimmt. Dies sind alle Groemerpackungen, und man erhält eine Klassifizierung dieser. Zusammen mit den Eckentypen und einigen zusätzlichen Bemerkungen können alle Groemerpolytope klassifiziert werden. Dies ist sehr hilfreich bei der Bestimmung aller Polytope mit minimaler Oberfläche und beschreibt den Großteil der dort betrachteten Polytope.

Für eine Erläuterung der Bezeichnungen (0 - Schnitt an keinem Ende der Kante, 1 - Schnitt an einem Ende, 2 - Schnitt an beiden Enden, p - Schnitt auf einen Punkt, ü - überlappender Schnitt) siehe 5.

| Typ | K_{12} | K_{13} | K_{14} | K_{23} | K_{24} | K_{34} | 3-Eck | 4-Eck | 5-Eck | 6-Eck |
|-----|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-------|-------|-------|-------|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | - | - | - |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 3 | - | - |
| 3 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 2 | 2 | 2 | - |
| 4 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 3 | - | 3 | 1 |
| 5 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 4 | - | - | 4 |
| 6 | p | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 2 | 4 | - | - |
| 7 | p | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 3 | 1 | 3 | - |
| 8 | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 4 | - | 2 | 2 |
| 9 | p | p | 1 | 2 | 1 | 1 | 3 | 3 | 1 | - |
| 10 | p | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 4 | 1 | 2 | 1 |
| 11 | p | p | 1 | p | 1 | 1 | 4 | 3 | - | - |
| 12 | p | p | 2 | p | 2 | 2 | 5 | - | 3 | - |
| 13 | p | p | p | 2 | 2 | 2 | 4 | 3 | - | 1 |
| 14 | p | p | p | p | p | p | 8 | - | - | - |
| 16 | ü | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | - | 6 | - | - |
| 17 | ü | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 3 | 3 | - |
| 18 | ü | p | 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 5 | 1 | - |
| 19 | ü | p | 1 | p | 1 | 1 | 2 | 5 | - | - |
| 20 | ü | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 21 | ü | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 3 | 2 | 1 |
| 22 | ü | p | 2 | p | 2 | 2 | 3 | 2 | 3 | - |
| 23 | ü | p | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 5 | - | 1 |
| 24 | ü | p | p | p | p | 2 | 4 | 4 | - | - |
| 25 | ü | ü | 1 | 2 | 1 | 1 | - | 5 | 2 | - |
| 26 | ü | ü | 1 | p | 1 | 1 | 1 | 5 | 1 | - |
| 27 | ü | ü | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 3 | 3 | 1 |
| 28 | ü | ü | p | 2 | 2 | 2 | 1 | 5 | 1 | 1 |
| 29 | ü | ü | 2 | p | 2 | 2 | 2 | 2 | 4 | - |
| 30 | ü | ü | p | p | 2 | 2 | 2 | 4 | 2 | - |
| 31 | ü | ü | ü | 2 | 2 | 2 | - | 6 | - | 2 |
| 32 | ü | ü | 1 | ü | 1 | 1 | 1 | 3 | 3 | - |
| 33 | ü | ü | 2 | ü | 2 | 2 | 2 | - | 6 | - |
| 34* | ü | ü | 1 | ü | 1 | 1 | - | 6 | - | - |

Tabelle B.1: Die Facetten der Tetraederschnitte

B.2 Die dichtesten Groemerpolytope

Die hier aufgeführte Tabelle enthält die besten gefundenen Groemerpolytope. Diese sind für $n \leq 56$ im Bereich $[\rho_u, \rho_o]$ die dichtesten Groemerpolytope. Um die Länge der Tabelle zu reduzieren wurden Wurstpäckungen außer für $n = 1, 2$ nicht berücksichtigt.

Tabelle B.2: Dichteste Groemerpolytope

| L | ρ_u | ρ_o | M | O | V | T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k |
|----|----------|----------|-----------|-----------|-----------|----------------------------|
| 1 | 0.000000 | ∞ | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | $T_{0,0,0,0}^0$ |
| 2 | 0.000000 | ∞ | 6.283185 | 0.000000 | 0.000000 | $T_{1,1,0,0}^1$ |
| 3 | 1.102658 | ∞ | 9.424778 | 3.464102 | 0.000000 | $T_{1,0,0,0}^1$ |
| 4 | 1.058632 | ∞ | 11.463799 | 6.928203 | .942809 | $T_{0,0,0,0}^1$ |
| 5 | 1.102658 | ∞ | 15.707963 | 10.392305 | 0.000000 | $T_{2,1,0,0}^2$ |
| 6 | 1.048576 | ∞ | 14.771513 | 13.856406 | 3.771236 | $T_{1,1,1,1}^2$ |
| 7 | 1.045119 | ∞ | 16.810534 | 17.320508 | 4.714045 | $T_{1,1,1,0}^2$ |
| 8 | 1.042829 | ∞ | 18.849556 | 20.784610 | 5.656854 | $T_{1,1,0,0}^2$ |
| 9 | 1.041200 | ∞ | 20.888577 | 24.248711 | 6.599663 | $T_{1,0,0,0}^2$ |
| 10 | 1.036938 | ∞ | 21.054698 | 27.712813 | 9.428090 | $T_{2,2,1,1}^3$ |
| 11 | 1.036379 | ∞ | 23.093720 | 31.176915 | 10.370899 | $T_{2,2,1,0}^3$ |
| 12 | 1.035925 | ∞ | 25.132741 | 34.641016 | 11.313709 | $T_{2,2,0,0}^3$ |
| 13 | 1.030194 | ∞ | 24.196291 | 38.105118 | 15.084945 | $T_{2,1,1,1}^3$ |
| 14 | 1.030293 | ∞ | 26.235312 | 41.569219 | 16.027754 | $T_{2,1,1,0}^3$ |
| 15 | 1.030378 | ∞ | 28.274334 | 45.033321 | 16.970563 | $T_{2,1,0,0}^3$ |
| 16 | 1.024327 | ∞ | 26.235312 | 48.497423 | 21.684608 | $T_{1,1,1,1}^3$ |
| 17 | 1.024723 | ∞ | 28.274334 | 51.961524 | 22.627417 | $T_{1,1,1,0}^3$ |
| 18 | 1.025077 | ∞ | 30.313355 | 55.425626 | 23.570226 | $T_{1,1,0,0}^3$ |
| 19 | 1.018033 | ∞ | 29.543026 | 55.425626 | 30.169889 | $T_{2,2,2,2}^4$ |
| 20 | 1.024954 | ∞ | 32.518498 | 62.353829 | 27.341462 | $T_{3,2,1,0}^4$ |
| 21 | 1.025241 | ∞ | 34.557519 | 65.817931 | 28.284271 | $T_{3,2,0,0}^4$ |
| 22 | 1.016278 | ∞ | 31.582047 | 65.817931 | 36.769553 | $T_{2,2,2,1}^4$ |
| 23 | 1.016834 | ∞ | 33.621069 | 69.282032 | 37.712362 | $T_{2,2,2,0}^4$ |
| 24 | 1.020497 | ∞ | 33.621069 | 76.210236 | 37.712362 | $T_{4,2,2,2}^5$ |
| 25 | 1.015035 | ∞ | 33.621069 | 76.210236 | 43.369216 | $T_{2,2,1,1}^4$ |
| 26 | 1.015551 | ∞ | 35.660090 | 79.674337 | 44.312025 | $T_{2,2,1,0}^4$ |

| L | ρ_u | ρ_o | M | O | V | T_{k_1,k_2,k_3,k_4}^k |
|----|-----------|-----------|-----------|------------|------------|-------------------------|
| 27 | 1.016037 | 3.035935 | 37.699112 | 83.138439 | 45.254834 | $T_{2,2,0,0}^4$ |
| 27 | 3.035935 | ∞ | 36.762662 | 86.602540 | 43.369216 | $T_{4,2,2,1}^5$ |
| 28 | 1.011375 | 20.001645 | 35.826211 | 83.138439 | 52.797306 | $T_{3,3,2,2}^5$ |
| 28 | 20.001645 | ∞ | 35.660090 | 86.602540 | 49.968879 | $T_{2,1,1,1}^4$ |
| 29 | 1.014587 | ∞ | 37.699112 | 90.066642 | 50.911688 | $T_{2,1,1,0}^4$ |
| 30 | 1.015039 | ∞ | 39.738133 | 93.530744 | 51.854497 | $T_{2,1,0,0}^4$ |
| 31 | 1.010972 | 20.001645 | 37.865233 | 93.530744 | 59.396970 | $T_{3,3,2,1}^5$ |
| 31 | 20.001645 | ∞ | 37.699112 | 96.994845 | 56.568542 | $T_{1,1,1,1}^4$ |
| 32 | 1.011468 | 20.001645 | 39.904254 | 96.994845 | 60.339779 | $T_{3,3,2,0}^5$ |
| 32 | 20.001645 | ∞ | 39.738133 | 100.458947 | 57.511352 | $T_{1,1,1,0}^4$ |
| 33 | 1.014256 | ∞ | 41.777155 | 103.923049 | 58.454161 | $T_{1,1,0,0}^4$ |
| 34 | 1.007784 | ∞ | 38.967804 | 100.458947 | 69.767869 | $T_{3,2,2,2}^5$ |
| 35 | 1.011104 | ∞ | 41.943276 | 107.387150 | 66.939442 | $T_{3,3,1,0}^5$ |
| 36 | 1.011539 | ∞ | 43.982297 | 110.851252 | 67.882251 | $T_{3,3,0,0}^5$ |
| 37 | 1.007782 | ∞ | 41.006825 | 110.851252 | 76.367532 | $T_{3,2,2,1}^5$ |
| 38 | 1.008244 | ∞ | 43.045847 | 114.315353 | 77.310341 | $T_{3,2,2,0}^5$ |
| 39 | 1.017857 | ∞ | 48.226461 | 128.171760 | 66.939442 | $T_{5,3,1,0}^6$ |
| 40 | 1.004886 | ∞ | 41.006825 | 117.779455 | 87.681241 | $T_{2,2,2,2}^5$ |
| 41 | 1.008205 | ∞ | 45.084868 | 124.707658 | 83.910005 | $T_{3,2,1,0}^5$ |
| 42 | 1.008614 | 10.316856 | 47.123890 | 128.171760 | 84.852814 | $T_{3,2,0,0}^5$ |
| 42 | 10.316856 | ∞ | 46.187440 | 138.564065 | 77.310341 | $T_{6,3,3,2}^7$ |
| 43 | 1.005100 | ∞ | 43.045847 | 128.171760 | 94.280904 | $T_{2,2,2,1}^5$ |
| 44 | 1.002042 | ∞ | 44.314539 | 124.707658 | 101.823377 | $T_{3,3,3,3}^6$ |
| 45 | 1.008552 | ∞ | 49.162911 | 138.564065 | 91.452477 | $T_{3,1,0,0}^5$ |
| 46 | 1.003863 | 20.001645 | 45.250989 | 135.099963 | 103.708995 | $T_{4,3,2,2}^6$ |
| 46 | 20.001645 | ∞ | 45.084868 | 138.564065 | 100.880567 | $T_{2,2,1,1}^5$ |
| 47 | 1.005679 | ∞ | 47.123890 | 142.028166 | 101.823377 | $T_{2,2,1,0}^5$ |
| 48 | 1.006063 | ∞ | 49.162911 | 145.492268 | 102.766186 | $T_{2,2,0,0}^5$ |
| 49 | 1.004114 | 20.001645 | 47.290011 | 145.492268 | 110.308658 | $T_{4,3,2,1}^6$ |
| 49 | 20.001645 | ∞ | 47.123890 | 148.956370 | 107.480231 | $T_{2,1,1,1}^5$ |
| 50 | 1.000636 | ∞ | 46.353560 | 142.028166 | 119.736748 | $T_{3,3,3,2}^6$ |
| 51 | 1.006170 | ∞ | 51.201933 | 155.884573 | 109.365849 | $T_{2,1,0,0}^5$ |
| 52 | 1.002676 | ∞ | 48.392582 | 152.420471 | 120.679557 | $T_{4,2,2,2}^6$ |
| 53 | 1.001048 | ∞ | 48.392582 | 152.420471 | 126.336412 | $T_{3,3,3,1}^6$ |

| L | ρ_u | ρ_o | M | O | V | T_{k_1, k_2, k_3, k_4}^k |
|----|----------|----------|-----------|------------|------------|----------------------------|
| 54 | 1.001432 | ∞ | 50.431603 | 155.884573 | 127.279221 | $T_{3,3,3,0}^6$ |
| 55 | 1.001047 | ∞ | 48.392582 | 159.348674 | 131.993266 | $T_{5,3,3,3}^7$ |
| 56 | .999577 | ∞ | 48.392582 | 159.348674 | 137.650120 | $T_{3,3,2,2}^6$ |
| 57 | 1.013623 | ∞ | 55.612218 | 190.525589 | 111.251467 | $T_{7,4,2,2}^8$ |
| 58 | 1.001765 | ∞ | 51.534175 | 169.740979 | 137.650120 | $T_{5,4,2,2}^7$ |
| 59 | .999995 | ∞ | 50.431603 | 169.740979 | 144.249783 | $T_{3,3,2,1}^6$ |
| 60 | .997679 | ∞ | 50.597724 | 166.276878 | 152.735065 | $T_{4,4,3,3}^7$ |
| 61 | 1.000371 | ∞ | 51.534175 | 176.669182 | 148.963829 | $T_{5,3,3,2}^7$ |
| 62 | .998751 | ∞ | 50.431603 | 176.669182 | 155.563492 | $T_{3,2,2,2}^6$ |
| 63 | 1.000702 | ∞ | 54.509646 | 183.597386 | 151.792256 | $T_{3,3,1,0}^6$ |
| 64 | 1.000718 | ∞ | 53.573196 | 187.061487 | 155.563492 | $T_{5,3,3,1}^7$ |
| 65 | .999163 | ∞ | 52.470625 | 187.061487 | 162.163155 | $T_{3,2,2,1}^6$ |
| 66 | .997107 | ∞ | 52.636746 | 183.597386 | 170.648437 | $T_{4,4,3,2}^7$ |
| 67 | .999828 | ∞ | 54.675767 | 193.989691 | 165.934391 | $T_{5,3,2,2}^7$ |
| 68 | .998089 | ∞ | 52.470625 | 193.989691 | 173.476864 | $T_{2,2,2,2}^6$ |
| 69 | .997559 | ∞ | 54.675767 | 193.989691 | 177.248100 | $T_{4,4,3,1}^7$ |
| 70 | .995419 | ∞ | 53.739317 | 190.525589 | 186.676190 | $T_{4,3,3,3}^7$ |
| 71 | .998489 | ∞ | 54.509646 | 204.381995 | 180.076527 | $T_{2,2,2,1}^6$ |
| 72 | .996640 | ∞ | 54.675767 | 200.917894 | 188.561808 | $T_{4,4,2,2}^7$ |
| 73 | .999382 | ∞ | 57.817360 | 211.310199 | 182.904954 | $T_{5,2,2,2}^7$ |
| 74 | .998857 | ∞ | 56.548668 | 214.774300 | 186.676190 | $T_{2,2,1,1}^6$ |
| 75 | .997071 | ∞ | 56.714789 | 211.310199 | 195.161472 | $T_{4,4,2,1}^7$ |
| 76 | .995129 | ∞ | 55.778338 | 207.846097 | 204.589562 | $T_{4,3,3,2}^7$ |
| 77 | .999197 | ∞ | 58.587689 | 225.166605 | 193.275854 | $T_{2,1,1,1}^6$ |
| 78 | .997469 | ∞ | 58.753810 | 221.702503 | 201.761135 | $T_{4,4,1,1}^7$ |
| 79 | .995587 | ∞ | 57.817360 | 218.238402 | 211.189225 | $T_{4,3,3,1}^7$ |
| 80 | .993582 | ∞ | 55.778338 | 214.774300 | 221.560125 | $T_{3,3,3,3}^7$ |
| 81 | .999769 | ∞ | 62.665732 | 239.023012 | 200.818326 | $T_{1,1,1,0}^6$ |
| 82 | .994885 | ∞ | 57.817360 | 225.166605 | 222.502934 | $T_{4,3,2,2}^7$ |
| 83 | 1.000273 | 1.106302 | 66.743775 | 245.951215 | 202.703944 | $T_{1,0,0,0}^6$ |
| 83 | 1.106302 | ∞ | 65.973446 | 245.951215 | 203.646753 | $T_{5,1,1,0}^7$ |
| 84 | 1.000519 | 1.106302 | 68.782796 | 249.415316 | 203.646753 | $T_{0,0,0,0}^6$ |
| 84 | 1.106302 | ∞ | 68.012467 | 249.415316 | 204.589562 | $T_{5,1,0,0}^7$ |
| 85 | .992079 | ∞ | 59.086052 | 221.702503 | 241.359115 | $T_{4,4,4,4}^8$ |

| L | ρ_u | ρ_o | M | O | V | $T_{k1,k2,k3,k4}^k$ |
|-----|----------|----------|-----------|------------|------------|---------------------|
| 86 | .993468 | ∞ | 57.817360 | 232.094808 | 239.473497 | $T_{3,3,3,2}^7$ |
| 87 | 1.010785 | ∞ | 68.178588 | 294.448637 | 184.790572 | $T_{9,4,3,3}^{10}$ |
| 88 | .994678 | ∞ | 59.856381 | 242.487113 | 240.416306 | $T_{4,2,2,2}^7$ |
| 89 | .993919 | ∞ | 59.856381 | 242.487113 | 246.073160 | $T_{3,3,3,1}^7$ |
| 90 | .992590 | ∞ | 60.022502 | 239.023012 | 254.558441 | $T_{5,4,3,3}^8$ |
| 91 | .995084 | ∞ | 61.895403 | 252.879418 | 247.015969 | $T_{4,2,2,1}^7$ |
| 92 | .993371 | ∞ | 59.856381 | 249.415316 | 257.386868 | $T_{3,3,2,2}^7$ |
| 93 | 1.011105 | ∞ | 74.461773 | 315.233247 | 196.104281 | $T_{10,5,5,1}^{11}$ |
| 94 | .995466 | ∞ | 63.934424 | 263.271723 | 253.615632 | $T_{4,2,1,1}^7$ |
| 95 | .990968 | ∞ | 61.125073 | 245.951215 | 276.243049 | $T_{4,4,4,3}^8$ |
| 96 | .992555 | ∞ | 62.061524 | 256.343520 | 272.471813 | $T_{5,4,3,2}^8$ |
| 97 | .995826 | 1.003389 | 65.973446 | 273.664028 | 260.215295 | $T_{4,1,1,1}^7$ |
| 97 | 1.003389 | ∞ | 64.100545 | 273.664028 | 262.100913 | $T_{7,4,3,3}^9$ |
| 98 | .993286 | ∞ | 61.895403 | 266.735824 | 275.300240 | $T_{3,2,2,2}^7$ |
| 99 | .992981 | ∞ | 64.100545 | 266.735824 | 279.071476 | $T_{5,4,3,1}^8$ |
| 100 | .991645 | ∞ | 63.164095 | 263.271723 | 288.499567 | $T_{5,3,3,3}^8$ |

B.3 Tabelle der dichtesten hcp-Packungen

Tabelle B.3 beschreibt die dichtesten hcp-Packungen. Dabei wurde auf die Beschreibung der Wurstopackung verzichtet, um die Tabelle möglichst kurz zu halten. Die letzte Spalte gibt die Koeffizienten des Vektors μ wieder, der das Ausschnittpolytop bestimmt.

Tabelle B.3: Dichteste hcp-Packungen

| n | ρ_u | ρ_o | M | O | V | μ |
|-----|----------|----------|-------|-------|-------|--|
| 5 | 1.05 | ∞ | 13.50 | 10.39 | 1.89 | (1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 0) |
| 6 | 1.05 | ∞ | 14.77 | 13.86 | 3.77 | (0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 0, 1, 1, 0, 1, 0) |
| 7 | 1.05 | ∞ | 16.81 | 17.32 | 4.71 | (0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 1, 0, 1, 0) |
| 8 | 1.04 | 2.48 | 18.85 | 20.78 | 5.66 | (0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 2, 1, 0, 1, 0) |
| 8 | 2.48 | ∞ | 18.48 | 21.32 | 6.60 | (1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 0, 2, 1, 0, 1, 0) |
| 9 | 1.04 | 1.33 | 20.89 | 24.25 | 6.60 | (0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 2, 0, 2, 0) |
| 9 | 1.33 | 3.23 | 19.95 | 24.78 | 7.54 | (0, 1, 2, 1, 1, 1, 0, 2, 0, 2, 2, 0, 1, 0) |
| 9 | 3.23 | ∞ | 19.79 | 25.32 | 7.54 | (1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 2, 0, 2, 1, 1, 1, 0) |
| 10 | 1.04 | 3.23 | 21.05 | 27.71 | 9.43 | (0, 1, 2, 1, 1, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 1, 0) |
| 10 | 3.23 | ∞ | 20.89 | 28.25 | 9.43 | (1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 2, 0, 2, 1, 1, 1, 0) |
| 11 | 1.04 | 1.53 | 23.09 | 31.18 | 10.37 | (0, 1, 2, 1, 1, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 0, 1, 0) |
| 11 | 1.53 | ∞ | 21.99 | 32.25 | 11.31 | (0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 12 | 1.03 | ∞ | 22.93 | 34.64 | 13.20 | (1, 1, 0, 2, 2, 0, 0, 2, 0, 2, 0, 2, 2, 0) |
| 13 | 1.03 | 1.63 | 24.20 | 38.11 | 15.08 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 13 | 1.63 | ∞ | 22.93 | 37.86 | 18.86 | (0, 2, 0, 2, 1, 1, 0, 2, 1, 1, 1, 1, 2, 0) |
| 14 | 1.03 | 1.29 | 26.24 | 41.57 | 16.03 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 14 | 1.29 | ∞ | 24.03 | 40.78 | 20.74 | (0, 2, 1, 1, 1, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 15 | 1.03 | 1.10 | 28.27 | 45.03 | 16.97 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 2, 0) |
| 15 | 1.10 | 1.19 | 26.24 | 45.57 | 18.86 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 0, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 15 | 1.19 | ∞ | 25.13 | 43.71 | 22.63 | (0, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 16 | 1.03 | 1.19 | 27.34 | 48.50 | 20.74 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 16 | 1.19 | 3.23 | 26.24 | 46.64 | 24.51 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 0, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 16 | 3.23 | ∞ | 26.07 | 47.18 | 24.51 | (0, 2, 1, 1, 1, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 17 | 1.03 | 1.10 | 29.38 | 51.96 | 21.68 | (0, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 17 | 1.10 | 117.34 | 27.17 | 50.11 | 26.40 | (0, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 17 | 117.34 | ∞ | 27.16 | 51.35 | 27.03 | (1, 1, 1, 2, 2, 1, 0, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 0) |

| n | ρ_u | ρ_o | M | O | V | μ |
|-----|----------|----------|-------|-------|-------|--|
| 18 | 1.03 | 4.88 | 28.27 | 53.03 | 28.28 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 0, 2, 0) |
| 18 | 4.88 | ∞ | 27.91 | 54.64 | 29.23 | (1, 1, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 0, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 19 | 1.02 | 5.48 | 29.21 | 56.50 | 30.17 | (0, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 2, 0) |
| 19 | 5.48 | ∞ | 28.83 | 58.16 | 32.37 | (0, 2, 1, 1, 1, 2, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 2, 0) |
| 20 | 1.02 | 1.98 | 30.31 | 59.43 | 32.06 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 2, 0) |
| 20 | 1.98 | 19.49 | 29.21 | 59.71 | 35.83 | (0, 2, 1, 2, 1, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 1, 2, 0) |
| 20 | 19.49 | ∞ | 29.19 | 60.06 | 37.08 | (1, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 0) |
| 21 | 1.03 | 1.10 | 34.56 | 65.82 | 28.28 | (0, 1, 3, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 4, 0, 2, 0) |
| 21 | 1.10 | 1.15 | 32.52 | 66.35 | 30.17 | (0, 1, 3, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 4, 3, 0, 2, 0) |
| 21 | 1.15 | 1.26 | 31.05 | 63.96 | 34.88 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 21 | 1.26 | 3.18 | 30.31 | 62.64 | 37.71 | (0, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 21 | 3.18 | ∞ | 29.93 | 63.35 | 39.28 | (1, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 0, 3, 2, 0, 2, 0) |
| 22 | 1.02 | 1.46 | 32.35 | 65.82 | 35.83 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 3, 0) |
| 22 | 1.46 | ∞ | 30.31 | 65.57 | 40.54 | (0, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 1, 2, 0) |
| 23 | 1.03 | ∞ | 31.42 | 68.50 | 42.43 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 24 | 1.02 | 1.10 | 33.62 | 76.21 | 37.71 | (0, 1, 2, 2, 3, 1, 0, 4, 0, 3, 2, 1, 3, 0) |
| 24 | 1.10 | 7.29 | 32.52 | 71.43 | 44.31 | (0, 2, 3, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 24 | 7.29 | 11.67 | 32.35 | 72.25 | 47.14 | (1, 1, 2, 1, 3, 0, 0, 3, 0, 3, 2, 1, 3, 0) |
| 24 | 11.67 | ∞ | 32.16 | 74.21 | 50.60 | (2, 1, 1, 2, 3, 0, 1, 2, 0, 3, 1, 2, 2, 0) |
| 25 | 1.02 | 1.93 | 33.45 | 74.89 | 46.20 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 25 | 1.93 | ∞ | 32.33 | 74.46 | 51.23 | (1, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 1, 2, 0) |
| 26 | 1.02 | 1.10 | 34.56 | 77.82 | 48.08 | (0, 2, 3, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 26 | 1.10 | ∞ | 32.35 | 75.96 | 52.80 | (0, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 1, 3, 0) |
| 27 | 1.02 | ∞ | 33.45 | 78.89 | 54.68 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 3, 0) |
| 28 | 1.02 | ∞ | 34.56 | 81.82 | 56.57 | (0, 2, 3, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 3, 0) |
| 29 | 1.02 | 2.12 | 35.49 | 85.28 | 58.45 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 3, 0, 3, 0) |
| 29 | 2.12 | ∞ | 34.36 | 85.03 | 64.11 | (1, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 2, 1, 3, 0) |
| 30 | 1.03 | 2.15 | 35.49 | 88.50 | 64.11 | (0, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 4, 1, 3, 2, 1, 3, 0) |
| 30 | 2.15 | ∞ | 35.10 | 88.31 | 66.31 | (1, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 3, 0) |
| 31 | 1.05 | ∞ | 35.66 | 92.24 | 71.97 | (1, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 3, 1, 3, 2, 1, 3, 0) |
| 32 | 1.05 | ∞ | 36.37 | 94.09 | 75.42 | (2, 2, 1, 2, 3, 0, 0, 3, 0, 3, 1, 2, 3, 0) |

B.4 Dichteste Packungen mit 15-56 Kugeln

| n | M/n | S/n | V/n | Structure | ρ_u | ρ_o | |
|----|-------|-------|-------|-----------|----------|----------|--|
| 15 | 1.885 | 3.002 | 1.131 | fcc-g | 1.030 | 1.101 | $T_{2,1,0,0}^3$ |
| 15 | 1.749 | 3.038 | 1.257 | fcc-g2 | 1.101 | 1.190 | $T_{3,2,2,1,0,0,0,1,0,0}^4$ |
| 15 | 1.675 | 2.914 | 1.508 | fcc-g2 | 1.190 | 7.734 | $T_{2,2,2,2,0,0,1,1,1,1}^4$ |
| 15 | 1.67 | 2.95 | 1.583 | deca | 7.734 | ∞ | s. Abb. A.5 |
| 16 | 1.64 | 3.031 | 1.355 | fcc-g | 1.024 | 1.523 | $T_{1,1,1,1}^3$ |
| 16 | 1.64 | 2.915 | 1.532 | fcc-g2 | 1.523 | 3.225 | $T_{2,2,2,2,0,0,0,1,1,1}^4$ |
| 16 | 1.629 | 2.948 | 1.532 | bipyr | 3.225 | 5.711 | $B_{2,2,1,1,0}^3$ |
| 16 | 1.628 | 2.943 | 1.605 | deca | 5.711 | 6.092 | s. Abb. A.5 |
| 16 | 1.625 | 2.957 | 1.642 | deca | 6.092 | 9.622 | s. Abb. A.5 |
| 16 | 1.616 | 3.026 | 1.764 | gold | 9.622 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 17 | 1.663 | 3.057 | 1.331 | fcc-g | 1.024 | 1.101 | $T_{1,1,1,0}^3$ |
| 17 | 1.608 | 2.916 | 1.553 | fcc-g2 | 1.101 | 2.611 | $T_{2,2,2,2,0,0,0,0,1,1}^4$ |
| 17 | 1.553 | 2.979 | 1.765 | gold | 2.611 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 18 | 1.58 | 2.916 | 1.571 | fcc-g2 | 1.022 | 2.992 | $T_{2,2,2,2,0,0,0,0,0,1}^4$ |
| 18 | 1.523 | 2.994 | 1.847 | gold | 2.992 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 19 | 1.555 | 2.917 | 1.588 | fcc-g | 1.018 | 1.703 | $T_{2,2,2,2}^4$ |
| 19 | 1.488 | 3.002 | 1.637 | fcc-g2 | 1.703 | ∞ | $T_{2,2,2,1,1,1,0,1,0,0}^4$ |
| 20 | 1.516 | 2.971 | 1.603 | hcpg | 1.020 | 1.329 | (0, 2, 2, 1, 2, 1, 0, 3, 1, 2, 3, 0, 2, 0) |
| 20 | 1.469 | 2.998 | 1.65 | fcc-g2 | 1.329 | 3.445 | $T_{2,2,2,1,0,1,0,1,0,0}^4$ |
| 20 | 1.461 | 2.986 | 1.791 | fcc-g2 | 3.445 | 19.489 | $T_{3,3,2,2,1,1,1,1,1,1}^5$ |
| 20 | 1.459 | 3.003 | 1.854 | hcpg | 19.489 | ∞ | (1, 2, 1, 2, 2, 1, 0, 2, 1, 2, 1, 1, 2, 0) |
| 21 | 1.451 | 2.995 | 1.661 | fcc-g2 | 1.020 | 3.295 | $T_{2,2,2,1,0,0,0,1,0,0}^4$ |
| 21 | 1.425 | 3.017 | 1.871 | hcpg | 3.295 | 4.507 | (0, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 4, 0, 3, 3, 0, 2, 0) |
| 21 | 1.418 | 3.027 | 1.982 | gold | 4.507 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 22 | 1.471 | 2.992 | 1.628 | bipyr | 1.015 | 1.10 | $B_{2,2,0,0,0}^3$ |
| 22 | 1.436 | 2.992 | 1.671 | fcc-g | 1.106 | 1.628 | $T_{2,2,2,1}^4$ |
| 22 | 1.378 | 2.98 | 1.843 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ | $T_{3,3,2,2,0,1,1,1,1,1}^5$ |
| 23 | 1.462 | 3.012 | 1.64 | fcc-g | 1.016 | 1.156 | $T_{2,2,2,0}^4$ |
| 23 | 1.433 | 3.012 | 1.678 | deca | 1.156 | 1.340 | s. Abb. A.5 |
| 23 | 1.366 | 2.978 | 1.845 | fcc-g2 | 1.340 | ∞ | $T_{3,3,2,2,0,0,1,1,1,1}^5$ |
| 24 | 1.355 | 3.053 | 1.728 | fcc-g2 | 1.018 | 1.190 | $T_{2,2,1,1,1,0,0,0,0,0}^4$ |
| 24 | 1.309 | 2.976 | 1.886 | fcc-g2 | 1.190 | ∞ | $T_{3,3,2,2,0,1,1,1,1,0}^5$ |
| 25 | 1.376 | 3.048 | 1.697 | bipyr | 1.014 | 1.106 | $B_{2,1,0,0,0}^3$ |
| 25 | 1.345 | 3.048 | 1.735 | fcc-g | 1.106 | 1.190 | $T_{2,2,1,1}^4$ |
| 25 | 1.301 | 2.974 | 1.886 | fcc-g2 | 1.190 | 3.445 | $T_{3,3,2,2,0,0,1,1,1,0}^5$ |
| 25 | 1.294 | 2.964 | 1.999 | fcc-g2 | 3.445 | ∞ | $T_{3,2,2,2,1,1,1,1,1,1}^5$ |

| n | M/n | S/n | V/n | Structure | ρ_u | ρ_o | |
|----|-------|-------|-------|-----------|----------|----------|-----------------------------|
| 26 | 1.401 | 3.064 | 1.668 | bipyr | 1.014 | 1.055 | $B_{2,0,0,0,0}^3$ |
| 26 | 1.293 | 2.972 | 1.886 | fcc-g2 | 1.055 | 1.280 | $T_{3,3,2,2,0,0,0,1,1,0}^5$ |
| 26 | 1.244 | 2.922 | 2.031 | bipyr | 1.280 | ∞ | $B_{3,3,1,1,1}^4$ |
| 27 | 1.286 | 2.971 | 1.886 | fcc-g2 | 1.013 | 1.628 | $T_{3,3,2,2,0,0,0,0,1,0}^5$ |
| 27 | 1.239 | 2.962 | 2.025 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ | $T_{3,2,2,2,1,1,1,0,1,1}^5$ |
| 28 | 1.28 | 2.969 | 1.886 | fcc-g | 1.011 | 1.628 | $T_{3,3,2,2}^5$ |
| 28 | 1.234 | 2.96 | 2.02 | fcc-g2 | 1.628 | 3.445 | $T_{3,2,2,2,0,1,1,0,1,1}^5$ |
| 28 | 1.228 | 2.951 | 2.121 | fcc-g2 | 3.445 | ∞ | $T_{2,2,2,2,1,1,1,1,1,1}^5$ |
| 29 | 1.327 | 3.106 | 1.723 | bipyr | 1.013 | 1.055 | $B_{1,0,0,0,0}^3$ |
| 29 | 1.23 | 3.023 | 1.918 | fcc-g2 | 1.055 | 1.098 | $T_{3,3,2,1,0,1,0,1,0,0}^5$ |
| 29 | 1.224 | 2.941 | 2.016 | bipyr | 1.098 | 1.329 | $B_{3,3,1,1,0}^4$ |
| 29 | 1.192 | 2.959 | 2.048 | fcc-g2 | 1.329 | 1.754 | $T_{3,2,2,2,1,1,1,0,0,1}^5$ |
| 29 | 1.186 | 2.914 | 2.146 | bipyr | 1.754 | ∞ | $B_{3,2,1,1,1}^4$ |
| 30 | 1.225 | 3.02 | 1.917 | fcc-g2 | 1.013 | 1.190 | $T_{3,3,2,1,0,0,0,1,0,0}^5$ |
| 30 | 1.189 | 2.958 | 2.043 | fcc-g2 | 1.190 | 2.936 | $T_{3,2,2,2,0,1,1,0,0,1}^5$ |
| 30 | 1.171 | 2.968 | 2.168 | fcc-g2 | 2.936 | ∞ | $T_{3,3,3,3,1,1,1,1,2,2}^6$ |
| 31 | 1.221 | 3.017 | 1.916 | fcc-g | 1.010 | 1.100 | $T_{3,3,2,1}^5$ |
| 31 | 1.15 | 2.957 | 2.068 | fcc-g2 | 1.100 | ∞ | $T_{3,2,2,2,1,1,1,0,0,0}^5$ |
| 32 | 1.247 | 3.031 | 1.886 | fcc-g | 1.011 | 1.014 | $T_{3,3,2,0}^5$ |
| 32 | 1.149 | 2.956 | 2.062 | fcc-g2 | 1.014 | 2.392 | $T_{3,2,2,2,0,1,1,0,0,0}^5$ |
| 32 | 1.138 | 2.907 | 2.239 | bipyr | 2.392 | ∞ | $B_{2,2,1,1,1}^4$ |
| 33 | 1.147 | 2.955 | 2.057 | fcc-g2 | 1.009 | 1.966 | $T_{3,2,2,2,0,0,1,0,0,0}^5$ |
| 33 | 1.137 | 2.932 | 2.143 | bipyr | 1.966 | 4.502 | $B_{3,2,1,1,0}^4$ |
| 33 | 1.126 | 2.957 | 2.257 | fcc-g2 | 4.502 | 5.691 | $T_{3,3,3,2,1,2,1,2,1,1}^6$ |
| 33 | 1.104 | 3.02 | 2.62 | gold | 5.691 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 34 | 1.146 | 2.955 | 2.052 | fcc-g | 1.007 | 1.394 | $T_{3,2,2,2}^5$ |
| 34 | 1.076 | 2.893 | 2.274 | fcc-g2 | 1.394 | ∞ | $T_{3,3,3,3,1,1,1,1,1,2}^6$ |
| 35 | 1.194 | 2.969 | 1.993 | bipyr | 1.007 | 1.171 | $B_{3,3,0,0,0}^4$ |
| 35 | 1.109 | 3 | 2.074 | fcc-g2 | 1.171 | 1.286 | $T_{3,2,2,1,1,1,1,0,0,0}^5$ |
| 35 | 1.077 | 2.894 | 2.263 | fcc-g2 | 1.286 | ∞ | $T_{3,3,3,3,0,1,1,1,1,2}^6$ |
| 36 | 1.108 | 2.998 | 2.069 | fcc-g2 | 1.009 | 1.190 | $T_{3,2,2,1,0,1,0,0,0,0}^5$ |
| 36 | 1.078 | 2.946 | 2.174 | fcc-g2 | 1.190 | 1.523 | $T_{2,2,2,2,0,0,0,0,1,1}^5$ |
| 36 | 1.078 | 2.895 | 2.252 | fcc-g2 | 1.523 | 3.225 | $T_{3,3,3,3,0,0,1,1,1,2}^6$ |
| 36 | 1.073 | 2.91 | 2.252 | bipyr | 3.225 | 12.109 | $B_{4,4,2,1,1}^5$ |
| 36 | 1.063 | 3 | 2.671 | gold | 12.109 | ∞ | s. Abb. A.1 |
| 37 | 1.108 | 2.996 | 2.064 | fcc-g | 1.007 | 1.190 | $T_{3,2,2,1}^5$ |
| 37 | 1.078 | 2.946 | 2.166 | fcc-g2 | 1.190 | 1.523 | $T_{4,3,3,2,0,0,0,1,0,1}^6$ |
| 37 | 1.078 | 2.896 | 2.242 | fcc-g2 | 1.523 | 1.628 | $T_{3,3,3,3,0,0,0,1,1,2}^6$ |
| 37 | 1.044 | 2.889 | 2.344 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ | $T_{3,3,3,2,1,1,1,2,1,1}^6$ |
| 38 | 1.133 | 3.008 | 2.034 | fcc-g | 1.008 | 1.014 | $T_{3,2,2,0}^5$ |
| 38 | 1.05 | 2.945 | 2.183 | fcc-g2 | 1.014 | 1.059 | $T_{2,2,2,2,0,0,0,0,0,1}^5$ |
| 38 | 0.992 | 2.819 | 2.382 | fcc-g2 | 1.059 | ∞ | $T_{3,3,3,3,1,1,1,1,1,1}^6$ |
| 39 | 1.051 | 2.945 | 2.176 | fcc-g2 | 1.006 | 1.059 | $T_{4,3,3,2,0,0,0,1,0,0}^6$ |
| 39 | 0.995 | 2.822 | 2.369 | fcc-g2 | 1.059 | ∞ | $T_{3,3,3,3,0,1,1,1,1,1}^6$ |
| 40 | 1.025 | 2.944 | 2.192 | fcc-g | 1.004 | 1.100 | $T_{2,2,2,2}^5$ |
| 40 | 0.998 | 2.825 | 2.357 | fcc-g2 | 1.100 | ∞ | $T_{3,3,3,3,0,0,1,1,1,1}^6$ |

| n | M/n | S/n | V/n | Structure | ρ_u | ρ_o | |
|----|-------|-------|-------|-----------|------------------|------------------|-----------------------------|
| 41 | 1.069 | 2.957 | 2.139 | bipyr | 1.004 | 1.032 | $B_{3,2,0,0,0}^4$ |
| 41 | 1 | 2.827 | 2.346 | fcc-g2 | 1.032 | 1.628 | $T_{3,3,3,3,0,0,0,1,1,1}^6$ |
| 41 | 0.969 | 2.821 | 2.437 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ | $T_{3,3,3,2,1,1,1,1,1,1}^6$ |
| 42 | 1.003 | 2.83 | 2.335 | fcc-g2 | 1.004 | 1.628 | $T_{3,3,3,3,0,0,0,0,1,1}^6$ |
| 42 | 0.972 | 2.824 | 2.424 | fcc-g2 | 1.628 | ∞ | $T_{3,3,3,2,0,1,1,1,1,1}^6$ |
| 43 | 1.005 | 2.832 | 2.324 | fcc-g2 | 1.003 | 1.358 | $T_{3,3,3,3,0,0,0,0,0,1}^6$ |
| 43 | 0.95 | 2.826 | 2.434 | fcc-g2 | 1.358 | ∞ | $T_{3,3,3,2,1,1,0,1,1,1}^6$ |
| 44 | 1.007 | 2.834 | 2.314 | fcc-g | 1.002 | 1.358 | $T_{3,3,3,3}^6$ |
| 44 | 0.953 | 2.829 | 2.421 | fcc-g2 | 1.358 | 3.445 | $T_{3,3,3,2,0,1,0,1,1,1}^6$ |
| 44 | 0.949 | 2.823 | 2.486 | fcc-g2 | 3.445 | ∞ | $T_{3,3,2,2,1,1,1,1,1,1}^6$ |
| 45 | 0.981 | 2.937 | 2.263 | fcc-g2 | 1.005 | 1.059 | $T_{4,3,2,2,0,0,1,0,0,0}^6$ |
| 45 | 0.932 | 2.831 | 2.43 | fcc-g2 | 1.059 | ∞ | $T_{3,3,3,2,1,1,0,1,0,1}^6$ |
| 46 | 0.984 | 2.937 | 2.255 | fcc-g | 1.003 | 1.059 | $T_{4,3,2,2}^6$ |
| 46 | 0.936 | 2.833 | 2.419 | fcc-g2 | 1.059 | 3.445 | $T_{3,3,3,2,0,1,0,1,0,1}^6$ |
| 46 | 0.929 | 2.822 | 2.541 | bipyr | 3.445 | ∞ | $B_{3,3,2,1,1}^5$ |
| 47 | 0.976 | 2.948 | 2.247 | bipyr | 1.002 | 1.032 | $B_{2,2,0,0,0}^4$ |
| 47 | 0.916 | 2.835 | 2.427 | fcc-g2 | 1.032 | 3.445 | $T_{3,3,3,2,1,1,0,1,0,0}^6$ |
| 47 | 0.912 | 2.83 | 2.487 | fcc-g2 | 3.445 | ∞ | $T_{3,3,2,2,1,1,1,1,1,0}^6$ |
| 48 | 0.92 | 2.837 | 2.416 | fcc-g2 | 1.002 | 1.597 | $T_{3,3,3,2,0,1,0,1,0,0}^6$ |
| 48 | 0.893 | 2.793 | 2.553 | fcc-g2 | 1.597 | ∞ | $T_{4,4,3,3,1,1,1,1,2,1}^7$ |
| 49 | 0.923 | 2.839 | 2.405 | fcc-g2 | 1.001 | 1.413 | $T_{3,3,3,2,0,0,0,1,0,0}^6$ |
| 49 | 0.894 | 2.785 | 2.54 | bipyr | 1.413 | $1.4 \cdot 10^8$ | $B_{4,3,1,1,1}^5$ |
| 49 | 0.894 | 2.813 | 2.598 | fcc-g2 | $1.4 \cdot 10^8$ | ∞ | $T_{4,3,3,3,2,2,2,1,1,1}^7$ |
| 50 | 0.927 | 2.841 | 2.395 | fcc-g | 1.000 | 1.394 | $T_{3,3,3,2}^6$ |
| 50 | 0.88 | 2.798 | 2.546 | fcc-g2 | 1.394 | ∞ | $T_{4,4,3,3,0,1,1,1,2,1}^7$ |
| 51 | 1.004 | 2.921 | 2.255 | bipyr | 1.002 | 1.010 | $B_{4,4,0,0,0}^5$ |
| 51 | 0.906 | 2.874 | 2.403 | fcc-g2 | 1.010 | 1.190 | $T_{3,3,3,1,0,1,0,1,0,0}^6$ |
| 51 | 0.884 | 2.837 | 2.477 | fcc-g2 | 1.190 | 1.523 | $T_{3,3,2,2,1,0,0,1,1,0}^6$ |
| 51 | 0.884 | 2.801 | 2.533 | fcc-g2 | 1.523 | 3.445 | $T_{4,4,3,3,0,0,1,1,2,1}^7$ |
| 51 | 0.881 | 2.796 | 2.588 | fcc-g2 | 3.445 | 7.290 | $T_{4,4,3,2,1,1,1,2,1,1}^7$ |
| 51 | 0.881 | 2.817 | 2.588 | fcc-g2 | 7.290 | ∞ | $T_{4,3,3,3,1,1,2,2,1,1}^7$ |
| 52 | 0.909 | 2.875 | 2.393 | fcc-g2 | 1.001 | 1.100 | $T_{3,3,3,1,0,0,0,1,0,0}^6$ |
| 52 | 0.846 | 2.747 | 2.611 | fcc-g2 | 1.100 | ∞ | $T_{4,4,3,3,1,1,1,1,1,1}^7$ |
| 53 | 0.913 | 2.876 | 2.384 | fcc-g | 1.001 | 1.100 | $T_{3,3,3,1}^6$ |
| 53 | 0.851 | 2.751 | 2.597 | fcc-g2 | 1.100 | 7.290 | $T_{4,4,3,3,1,0,1,1,1,1}^7$ |
| 53 | 0.848 | 2.766 | 2.651 | fcc-g2 | 7.290 | ∞ | $T_{4,3,3,3,1,2,2,1,1,1}^7$ |
| 54 | 0.934 | 2.887 | 2.357 | fcc-g | 1.001 | 1.014 | $T_{3,3,3,0}^6$ |
| 54 | 0.876 | 2.842 | 2.462 | fcc-g2 | 1.014 | 1.059 | $T_{3,3,2,2,0,0,0,0,1,0}^6$ |
| 54 | 0.835 | 2.754 | 2.601 | fcc-g2 | 1.059 | ∞ | $T_{4,4,3,3,0,1,1,1,1,1}^7$ |
| 55 | 0.86 | 2.844 | 2.468 | fcc-g2 | 1.000 | 1.100 | $T_{3,3,2,2,1,0,0,0,0,0}^6$ |
| 55 | 0.84 | 2.757 | 2.588 | fcc-g2 | 1.100 | 4.747 | $T_{4,4,3,3,0,0,1,1,1,1}^7$ |
| 55 | 0.834 | 2.753 | 2.743 | fcc-g2 | 4.747 | ∞ | $T_{4,4,4,4,2,2,2,2,2,2}^8$ |
| 56 | 0.864 | 2.846 | 2.458 | fcc-g | 0.999 | 1.059 | $T_{3,3,2,2}^6$ |
| 56 | 0.825 | 2.76 | 2.593 | fcc-g2 | 1.059 | 1.754 | $T_{4,4,3,3,0,1,1,1,1,0}^7$ |
| 56 | 0.819 | 2.713 | 2.694 | bipyr | 1.754 | ∞ | $B_{3,3,1,1,1}^5$ |

Literaturverzeichnis

- [ABB] V. Arhelger, U. Betke, K. Böröczky, Jr., 'Large finite lattice packings', erscheint.
- [BCW] 'Birmingham Cluster Web', <http://www.tc.bham.ac.uk/bcweb/> .
- [Bö] K. Böröczky, Jr., 'Packings of four and five balls', Intuitive Geometry, Bolyai Mathematical Society Budapest (1997), 265-276.
- [Br] M. Brack, 'Metallcluster und magische Zahlen', Spektrum der Wissenschaft, Februar 1998, 32-37.
- [BF] Bonessen, Fenchel, 'Theorie der konvexen Körper', Springer, Berlin 1934.
- [BH] U. Betke, M. Henk, 'Finite packings of spheres', Discrete Comput. Geom. 19, No.2, (1998), 197-227.
- [BHW] U. Betke, M. Henk, J.M. Wills, 'Finite and infinite packings' J. reine angew. Math. 453 (1994), 165-191.
- [BS] K. Böröczky, Jr., U. Schnell, 'Quasicrystals and the Wulff-shape', Discrete Comput. Geometry 21, No. 3, (1999), 421-436.
- [BSW] K. Böröczky, Jr., U. Schnell, J.M. Wills, 'Quasicrystals, Parametric Density, and Wulff-Shape', CRM Monograph Series 13, (2000), 259-275.
- [BW] K. Böröczky, Jr., J.M. Wills, 'Finite sphere packings and critical radii', Beitr. zur Algebra und Geometrie 38, No. 2, (1997), 193-211.
- [CCD] 'Cambridge Cluster Database', <http://brian.ch.cam.ac.uk/CCD.html> .
- [CDHS] J.H. Conway, T.D.S. Duff, R.H. Hardin, N.J.A. Sloane, 'Minimal-Energy clusters of Hard Spheres', Discrete Comput. Geometry 14, No. 3, (1995), 237-259.
- [CR] F. Cleri, V. Rosato, 'Tight-binding potentials for transition metals and alloys' Phys. Rev. B 48, (1993), 22-32.

- [CS1] J.H. Conway, N.J.A. Sloane, 'Sphere Packings, Lattices and Groups', Springer-Verlag, Berlin 1988
- [CS2] J.H. Conway, N.J.A. Sloane, 'What are all the best sphere packings in low dimensions', *Discrete Comput. Geometry* 13, No.3-4, (1995), 282-403.
- [D] A. Dinghas, 'Über einen geometrischen Satz von Wulff für die Gleichgewichtsform von Kristallen', *Z. Kristallogr.* 105 (1943), 304-314.
- [DR] M.A. Duncan, D.H. Rouvray, 'Microclusters', *Scientific American*, Dezember 1989.
- [DW1] D.J. Wales, J.P.K. Doye, 'Global Optimization by Basin-Hopping and the Lowest Energy Structures of Lennard-Jones Clusters Containing up to 110 Atoms', *J. Phys. Chem. A*, 101, (1997), 5111-5116.
- [DW2] J.P.K. Doye, D.J. Wales, 'Structural Consequences of the Range of the Interatomic Potential: a Menagerie of Clusters', *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 24*, (1997), 4233-4243.
- [FG] J.H. Folkman and R.L. Graham, 'A Packing Inequality for Compact Convex subsets of the Plane', *Canad. Math. Bull.*, 12 (1969), 745-752.
- [GWZ] R.L. Graham, H.S. Witsenhausen and H.J. Zassenhaus, 'On Tightest Packings in the Minkowski Plane', *Pacific J. Math.*, 41 (1972), 699-715.
- [G] H. Groemer, 'Über die Einlagerung von Kreisen in einem konvexen Bereich', *Math. Zeitschrift* 73 (1960), 285-294.
- [GL] Gruber, Lekkerkerker, 'Geometry of Numbers', North Holland, Amsterdam, 1987.
- [GW] P.M. Gandini, J.M. Wills, 'On Finite Sphere-Packings', *Mathematica Pannonica* 3/1 (1992), 19-29.
- [Had] H. Hadwiger, 'Altes und Neues über konvexe Körper', Birkhäuser Verlag, Basel (1955).
- [Hnk] M. Henk, 'Finite and infinite packings', Habilitationsschrift, Siegen, 1994.
- [Hal] T.C. Hales, 'Sphere Packings, I', *Discrete Comput. Geometry* 17, 1-51 (1997).
- [Hly] C.L. Henley, 'Sphere packings and local environments in Penrose tilings', *Phys. Rev. B*, 34 (1986).
- [Ho] M.R. Hoare, 'Structure and dynamics of simple microclusters', *Adv. Chem. Phys.* 40 (1979), 49-135.

- [J] N.W. Johnson, 'Convex polyhedra with regular faces', *Canad. J. Math.* 18 (1966), 169-200.
- [La] M. v. Laue, 'Der Wulffsche Satz für die Gleichgewichtsform von Kristallen', *Z. Kristallogr.* 105 (1943), 124-133.
- [Le] Max Leppmeier, 'Kugelpackungen', Vieweg-Verlag, Braunschweig, 1997.
- [Ma] T.P. Martin, 'Shells of atoms', *Physics Reports* 273 (1996), 199-241.
- [MM] J.N. Murrel, R.E. Mottram, 'Potential energy functions for atomic solids', *Molecular Physics* 69 (1990), 571-585.
- [OK] Z. Olamy, M. Kléman, 'A two-dimensional aperiodic dense tiling', *J. Phys. France* 50 (1989), 19-33.
- [PL] P. Paufler, D. Leuschner, 'Kristallographische Grundbegriffe der Festkörperphysik', Vieweg-Verlag, Braunschweig (1975).
- [Schn] R. Schneider, 'Convex bodies: the Brunn-Minkowski theory', Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- [Schü] A. Schürmann, 'Dichteste endliche gitterförmige Kreispackungen', Diplomarbeit, 1997.
- [S1] U. Schnell, 'FCC versus HCP via Parametric Density', *Disc. Mathematics* 211, (2000), 269-274.
- [S2] U. Schnell, 'Periodic sphere Packings and the Wulff-shape', *Beitr. zur Algebra und Geometrie* 40, No. 1, (1999) 125-140.
- [SW] Uwe Schnell, Jörg M. Wills, 'Densest Packings of more than three d -spheres are nonplanar', *Disc. Comp. Geometry* 24, (2000) 539-549.
- [SY] J.R. Sangwine-Yager, 'Mixed Volumes', Kap. 1.2 in *Handbook of Convex Geometrie*, P.M Gruber, J.M. Wills Hrg., North Holland, Amsterdam 1993.
- [Scho] P. Scholl, 'Microcluster im fcc-Gitter', Diplomarbeit Universität Gesamthochschule Siegen, 1999.
- [SSW] P. Scholl, A. Schürmann, J.M. Wills, 'A discrete isoperimetric inequality and its application to sphere packings', erscheint in *Disc. Comp. Geom.*
- [SPDB] P. Scholl, 'Sphere-packing database', <http://www.home.unix-ag.org/scholl/packungen/>.
- [NJAS] 'Neil J.A. Sloane: Home Page', <http://www.research.att.com/njas/>.

- [TJW] 'Investigation of geometric shell aluminum clusters using the Gupta many-body potential', *J. Chem. Phys.* 112 (2000), 4773-4778.
- [We] G. Wegner, 'Extremale Groemerpackungen', *Studia Sci. Math. Hung.* 19 (1984), 299-302.
- [W1] J.M. Wills, 'Finite sphere packings and sphere coverings', *Rendic. del Semin. Mat. Messina* 2 (1993), 1-7.
- [W2] J.M. Wills, 'Lattice Packings of Spheres and the Wulff-Shape', *Mathematika* 43, No. 2, (1996), 229-236.
- [W3] J.M. Wills, 'On large lattice packings of spheres', *Geometriae Dedicata* 65, (1997), 117-126.
- [W4] J.M. Wills, 'Sphere packings, densities and crystals', *Intuitive Geometry*, Bolyai Mathematical Society Budapest (1997), 223-234.
- [WJ] N.T. Wilson, R.L. Johnston, 'Modelling gold clusters with an empirical many-body potential' *Eur. Phys. J. D* 12, (2000), 161-169.