Kugelagglomerationen

1. Die Fragestellung

Es ist interessant, für eine gegebene kleine Anzahl (kleiner als 165) von Kugeln die kompaktesten Anordung im Raume zu suchen.

2. Terminologie

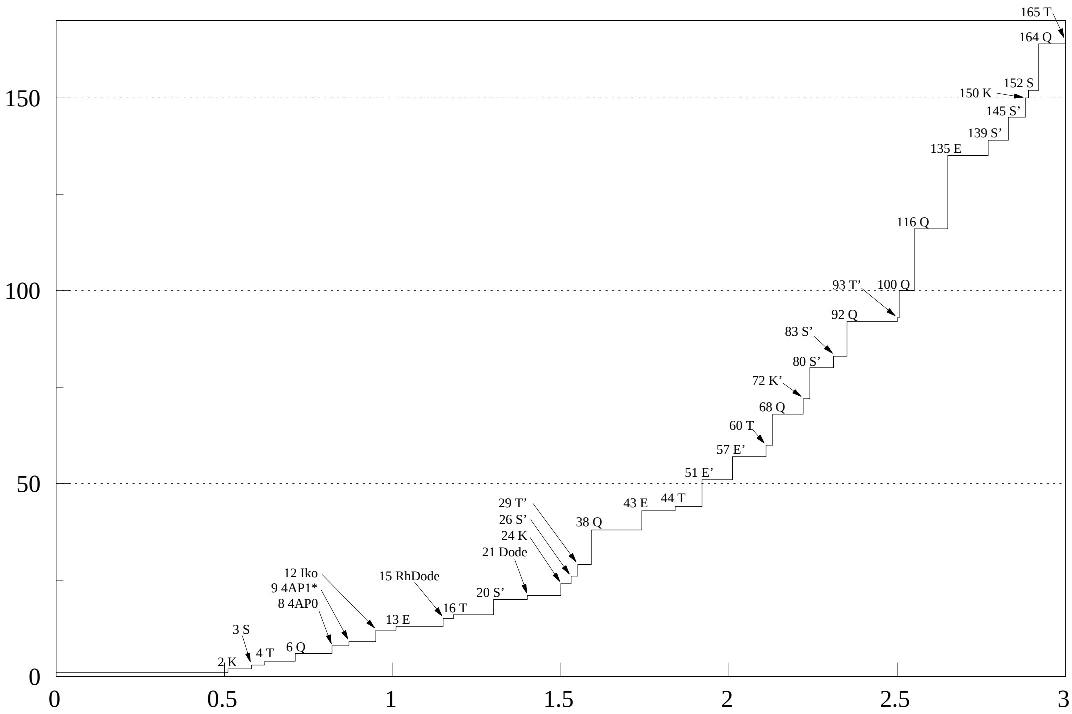
Wir wählen ein Koordinatensystem, in dem die anzuordnenden Kugeln den Durchmesser eins haben. Wenn in der Folge ein nicht näher spezifizierter Radius erwähnt wird, dann ist immer der Radius derjenigen Kugel gemeint, die alle Mittelpunkte der anzuordnenden Kugeln einschliesst. Der Radius der umschreibenden Kugel selber also ist um 0.5 grösser.

3. Die Treppenfunktion

Berechnet man in der dichtesten Kugelpackung (Typ 123, =: DKP) die Anzahl bedeckter Gitterpunkte, wenn man um eine gegebenes Zentrum eine Kugel wachsen lässt, und trägt man diese Anzahl gegen den Radius der wachsenden Kugel auf, dann ergibt sich ein interessantes Gerüst für weitere Ueberlegungen. Es sind treppenförmige Funktionen.

Es kommen 5 verschiedene Zentren in Frage.
- ein Gitterpunkt (<u>E</u>cke; bedeutet oft Kubooktaedermitte)
- die Mitte zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten (<u>K</u>antenmitte)
- die Mitte zwischen drei benachbarten Gitterpunkten (Dreiecksmitte, <u>S</u>eitenmitte)
- die Mitte zwischen vier maximal benachbarten Gitterpunkten (<u>T</u>etraedermitte)
- die Mitte zwischen vier in einer Ebene liegenden, quadratisch angeordneter Gitterpunkte (<u>Q</u>uadratmitte; bedeutet oft Oktaedermitte)

Ausschnitte der DKP sind erst ab 13 Kugeln optimale Lösungen (vom Tetraeder (4) und Oktaeder (6) abgesehen).



Man kann die verschiedenen Treppenfunktionen zu einer einzige verschmelzen, wenn man bei gleichem Radius nur je die höchste Anzahl Kugeln in der Anordnung (die höchsten Stufen) zurückbehält. Im unteren Teil der Treppe sind auch die Anordnungen eingefügt, die nicht aus der dichtesten Kugelpackung stammen, wie das Ikoseder. Diese zusammenfassende Treppe kann dazu dienen bei einer neuen Kugelanordnung sofort entscheiden zu können, ob sie einen neuen Rekord darstellt. Sie muss dazu oberhalb der Treppe zu liegen kommen. Der Treppencharakter spiegelt die Tatsache wieder, dass es bei vorgegebener Anzahl Kugeln oft keine bessere Lösung gibt, als bei einer Anordnung mit mehr Kugeln ein paar Kugeln auszulassen, ohne dass dabei das Ganze zusammenrücken könnte.

Bis zum Radius 3 hat die Treppe genau 35 Stufen.

4. Optimale Anordnungen

4.5

Man kann nachweisen, dass für den Fall von fünf Kugeln, das *Oktaeder* minus eine Kugel schon die beste Lösung ist. Zumindest liefert das Doppeltetraeder, bei dem der Aequator optimal so gespreizt wird, bis die beiden 'hereingezogenen' Spitzen gleichnahe am Zentrum wie die Aequatorpunkte sind, genau die *gleiche* Lösung, nämlich den Radius √3/2.

4.8

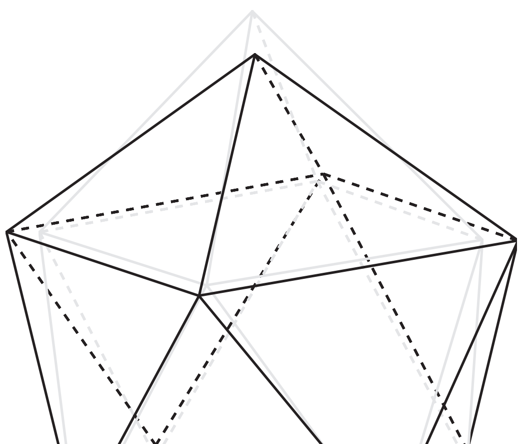
Der Kubus ist nicht optimal für 8 Kugeln! Das *Vierantiprisma* ist kompakter und hat einen Radius von 0.8227 (< 0.866 = √3/2).

4.9

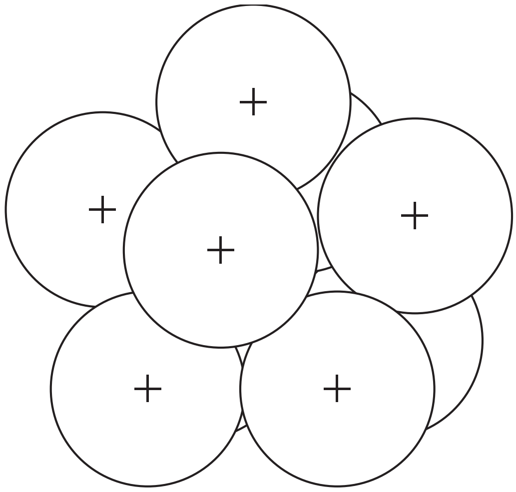
Das unveränderte Vierantiprisma mit einem Dach (4ap1) ist dem Ikosaeder, dem man drei Kugeln wegnimmt, für den Fall 9 Kugeln überlegen. Sein Radius beträgt 0.9355, währenddem das Ikosaeder einen Radius von 0.95 hat.

Durch Spreizen (Relaxieren) des mittleren 4-Ringes und ein entsprechendes Hineinziehen der übrigen Kugeln erhält man aber eine deutlich bessere Lösung (4ap1*) für den Fall von 9 Kugeln. Die Spreizung muss den Betrag 0.111*√2 haben und ergibt einen Radius von 0.871. Dies liegt nur noch ganz knapp über dem Radius des Kubus (0.866 = √3/2).

4ap1* in Polyederform:



4ap1* mit Kugeln:



4.10

Für den Fall von zehn Kugeln liefert ein Vierantiprisma (4AP2*) mit optimal gespreizten Aequatoren genau den *gleichen* Radius wie das Ikosaeder (12 Kugel Optimum), nämlich 0.95. Das ungespreizte 4AP2 hat den Radius 1.128.

4.12

Im *Ikosaeder* hat keine weitere Kugel Platz. Radius = 0.95. Es ist die optimale Lösung für 12 Kugeln.

4.13

Der erste optimale DKP-Ausschnitt ist das *Kubooktaeder* für den Fall 13 Kugeln. Radius = 1.

4.14

Die quadratmittezentrierte Treppenfunktion liefert für weniger als 20 Kugeln nur bei 14 Kugeln eine Stufe. Dieser kubisch flächenzentrierte 14er Cluster mit Radius 1.23 ist dem Cluster '16er' minus 2 Kugeln unterlegen!

4.15

Das *Rhombendodekaeder* ist optimal für 15 Kugeln. Der Radius beträgt 1.1547. Damit hat es bequem Platz für eine innere Kugel, die sogar lose bleibt. Die Konstellation '16er minus 1 Kugel' (Radius = 1.18) ist weniger kompakt.

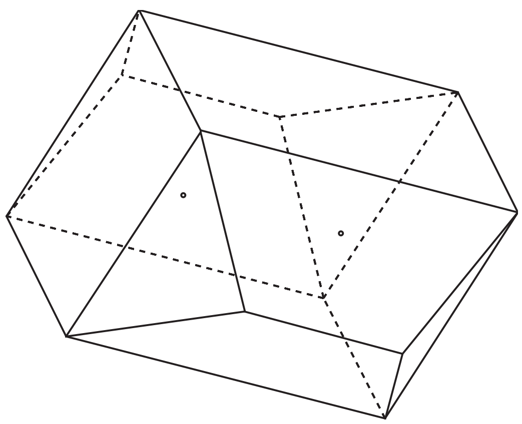
4.16

Der zweite optimale DKP-Ausschnitt (=: '16er') deckt den Fall 16 Kugeln ab. Das Gebilde ist tetraederzentriert und hat die Form eines *abgestumpften Tetraeders* (ein Gleichkanter). Der Radius beträgt 1.18.

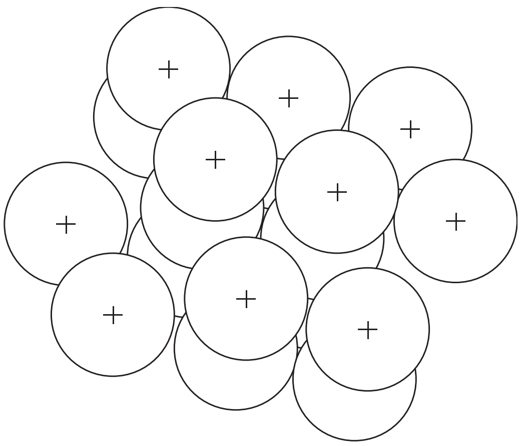
4.18

Der dritte optimale DKP-Ausschnitt (=: '18er') deckt den Fall von 18 Kugeln ab. Das Gebilde ist kantenzentriert und hat die Form eines Backsteines mit zwei Walmdächern. Der Radius beträgt 1.33. Siehe dazu den besseren '20er' weiter unten.

In Polyederform:



Mit Kugeln:

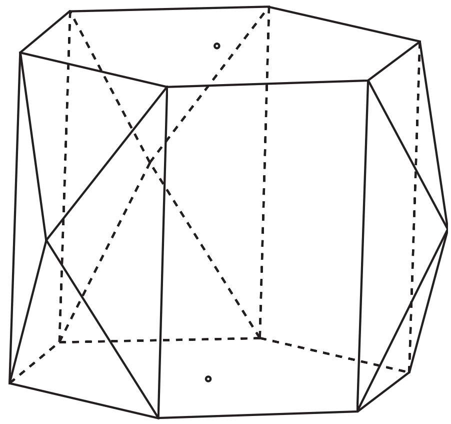


4.20

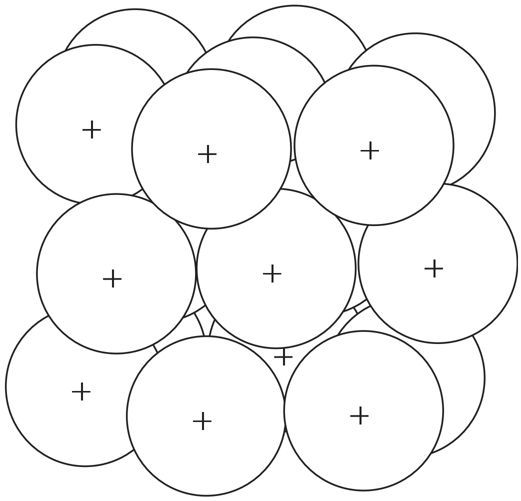
Das Durchforsten des zweiten Typs von dichtetester Kugelpackung (Typ 12) bringt vor allem den sehr kompakten '20er', der sogar dem '18er' überlegen ist! Es ist ein Sandwich aus zwei hexagonalen 7er Rosetten mit eingeklemmtem 6er Dreieck und hat den Radius 1.3. Man vergleiche damit den Radius des Dodekaeders, der 1.4 beträgt. 1.3 ist also die optimale Lösung für 17, 18, 19 und 20 Kugeln.

In der Treppe sind die dem Typ 12 entsprechenden Anordnungen mit einem Strich gekennzeichnet, z.B. E’.

Der 20er in Polyederform:



Mit Kuglen:

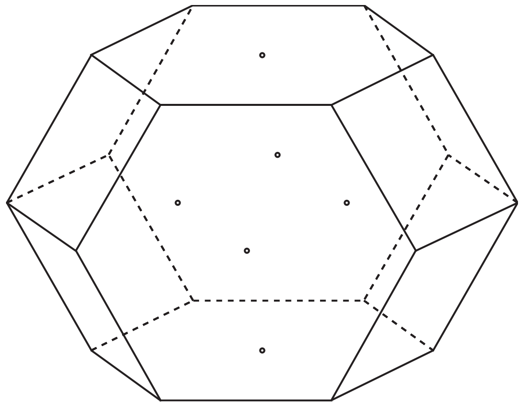


4.21

Im *Dodekaeder* bleibt eine Kugel im Innern nur lose gepackt. Radius = 1.40. Es ist also eine Lösung für 21 Kugeln.

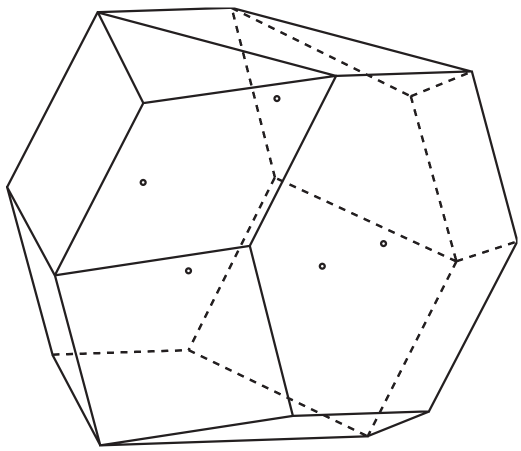
4.24

Der Radius von 24 Kugeln beträgt genau 1.50, wenn sie wie folgt angeordnet werden Das einhüllende Polyeder ist ein Gleichkanter.



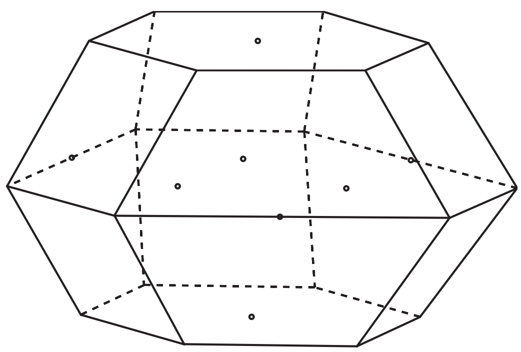
4.24 (II)

Der Radius von 24 Kugeln beträgt genau 1.50, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Zweiter Typ.



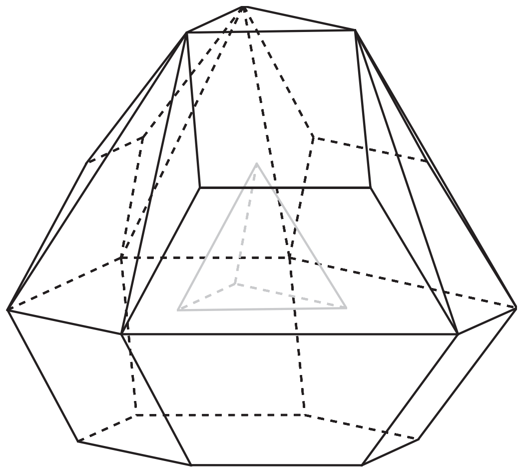
4.26

Der Radius von 26 Kugeln beträgt 1.53, wenn sie wie folgt angeordnet werden.



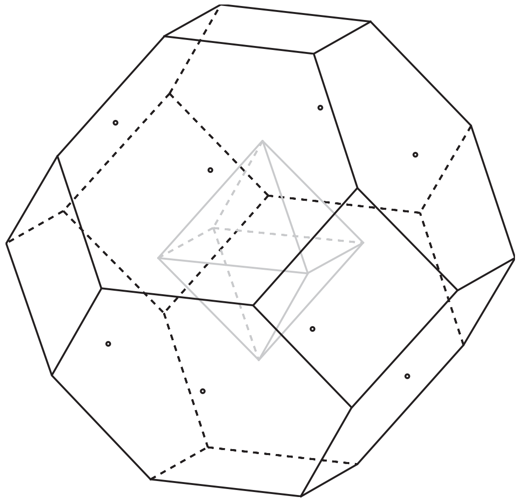
4.29

Der Radius von 29 Kugeln beträgt 1.55, wenn sie wie folgt angeordnet werden.



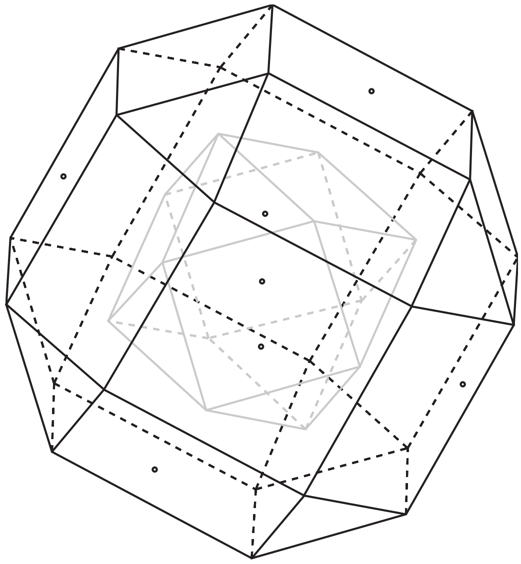
4.38

Der Radius von 38 Kugeln beträgt 1.5811 = √2.5, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Diese Anordnung hat die Dichte 0.52 und ist unter den Anordnungen mit weniger als 100 Kugeln die dichteste.



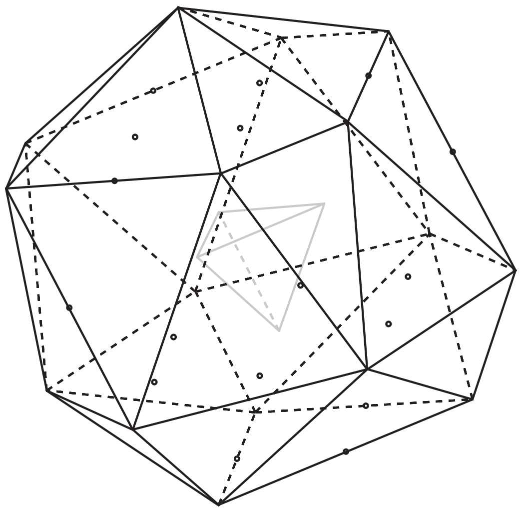
4.43

Der Radius von 43 Kugeln beträgt 1.73, wenn sie wie folgt angeordnet werden.



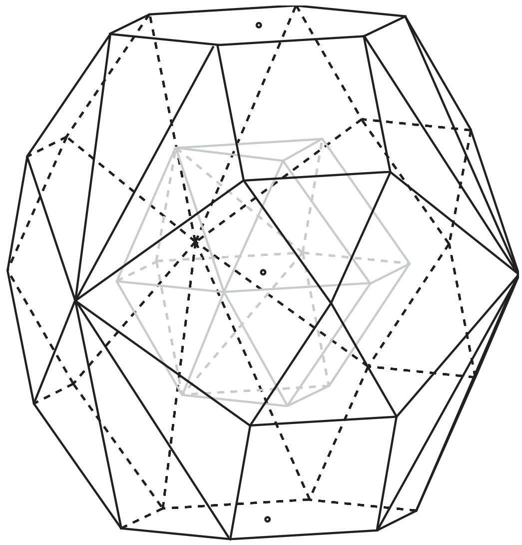
4.44

Der Radius von 44 Kugeln beträgt 1.84, wenn sie wie folgt angeordnet werden.



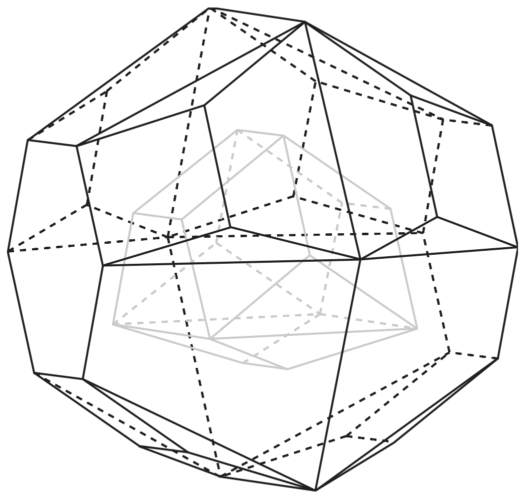
4.51

Der Radius von 51 Kugeln beträgt 1.92, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Es ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.



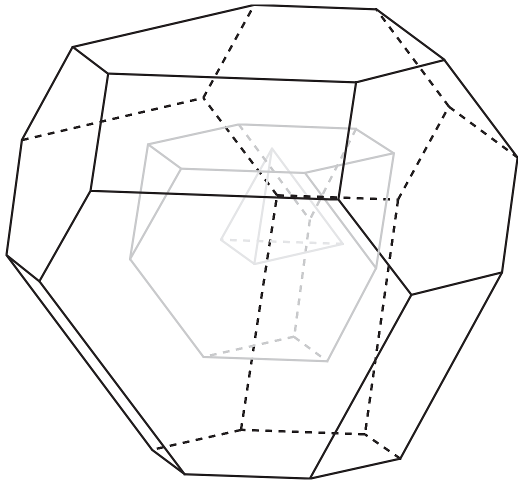
4.57

Der Radius von 57 Kugeln beträgt 2.01, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Es ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.



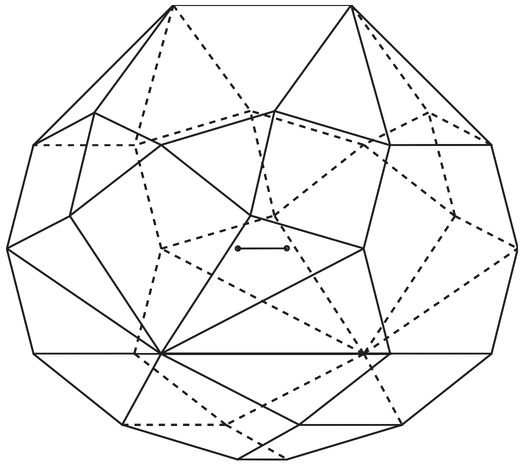
4.60

Der Radius von 60 Kugeln beträgt 2.11, wenn sie wie folgt angeordnet werden.



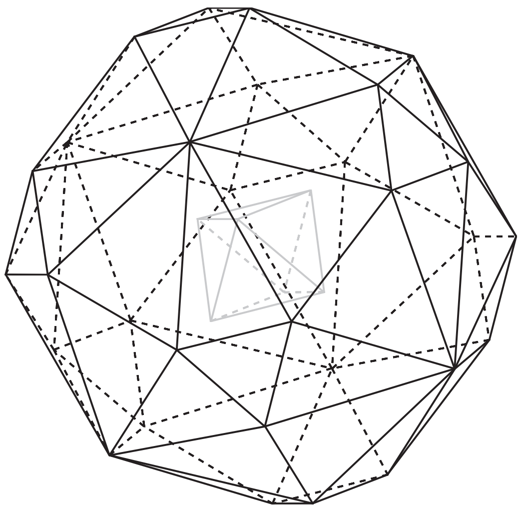
4.72

Der Radius von 72 Kugeln beträgt 2.22, wenn sie wie folgt angeordnet werden. In der Mitte liegt ein Kugelpaar.



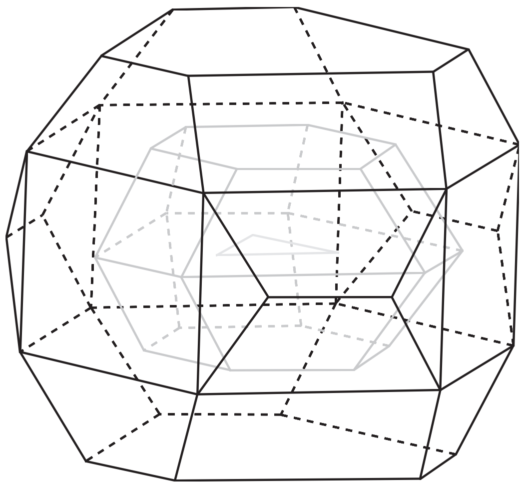
4.68

Der Radius von 68 Kugeln beträgt 2.13, wenn sie wie folgt angeordnet werden. In der Mitte haben wir ein Oktaeder.



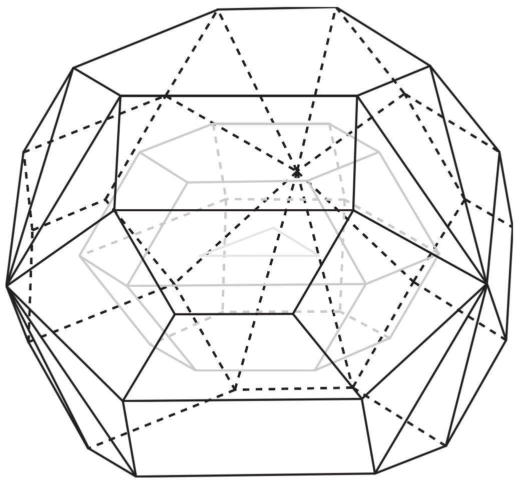
4.80

Der Radius von 80 Kugeln beträgt 2.24, wenn sie wie folgt angeordnet werden. In der Mitte liegt ein Dreieck. Es ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.



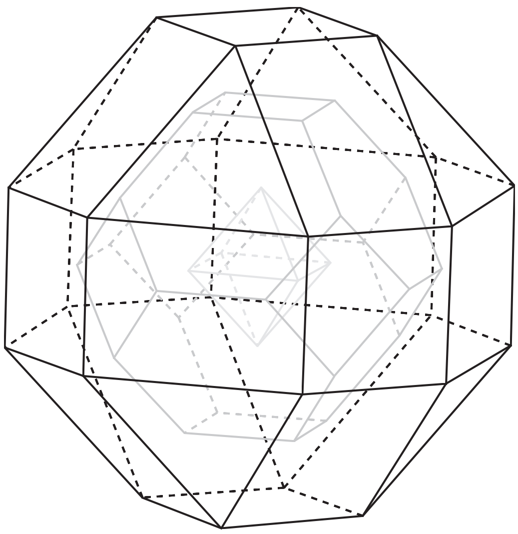
4.83

Der Radius von 83 Kugeln beträgt 2.31, wenn sie wie folgt angeordnet werden. In der Mitte liegt ein Dreieck. Es ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.



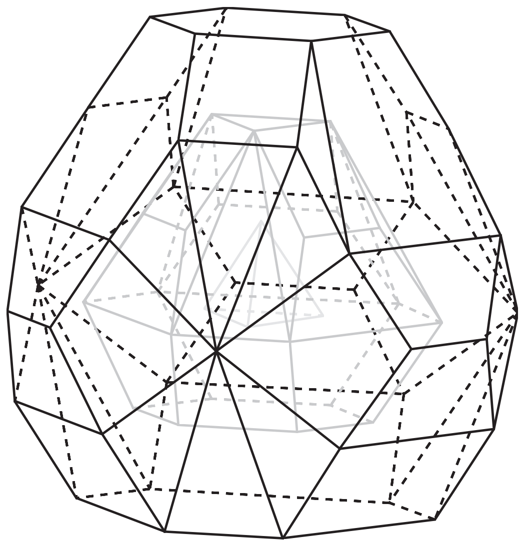
4.92

Der Radius von 92 Kugeln beträgt 2.35, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Die Anordnung hat ein Oktaeder in der Mitte.



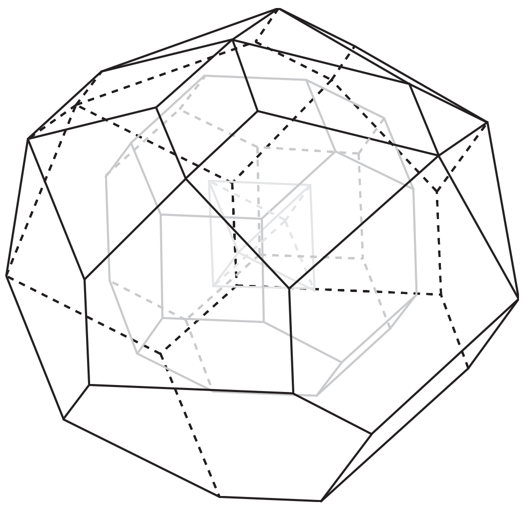
4.93

Der Radius von 93 Kugeln beträgt 2.50, wenn sie wie folgt angeordnet werden. Die Anordnung hat ein Tetraeder in der Mitte. Es ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.



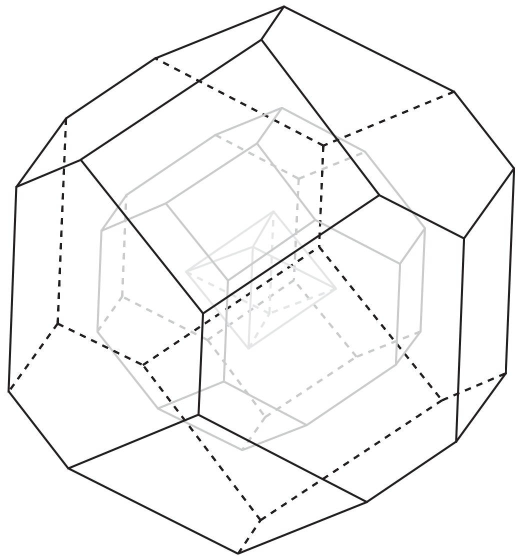
4.100

Es gibt eine etwas weniger symmetrische Anordnung mit der runden Anzahl von 100 Kugeln! Ihr Radius beträgt 2.505 und sie hat eine Oktaeder ungefähr in der Mitte. Diese Anordnung entspricht keiner Kante der 7 Treppen und wurde aus Versehen gefunden. Sie macht die 98er Stufe der Treppe 'Kantenzentriert' mit dem Radius 2.51 uninteressant.



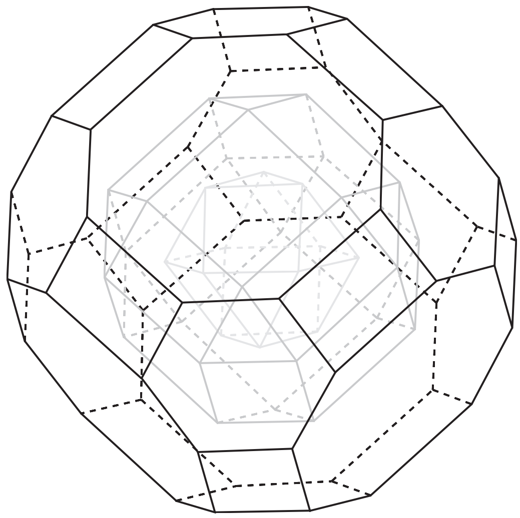
4.116

Der Radius von 116 Kugeln beträgt 2.55 und die Anordnung hat ein Oktaeder in der Mitte.



4.135

Der Radius von 135 Kugeln beträgt 2.65 und die Anordnung hat ein Kubooktaeder in der Mitte. Das die Kugelzentren umhüllende Polyeder ist nur fast ein Gleichkanter. Das Seitenverhältnis in den Vierecken beträgt √2. Die Anordnung mit 135 Kugeln ist die dichteste aller Anordnungen, die keinen grösseren Radius als 3 haben. Sie hat die Dichte 0.54. Dies natürlich abgesehen von der Anordnung mit einer Kugel, welche Dichte 1 hat. Die 135er Anordnung hat drei Schalen. Die zwei inneren haben lauter Ecken mit je 4 Kanten und die äussere Schale Ecken mit je 3 Kanten.



5. Dichte

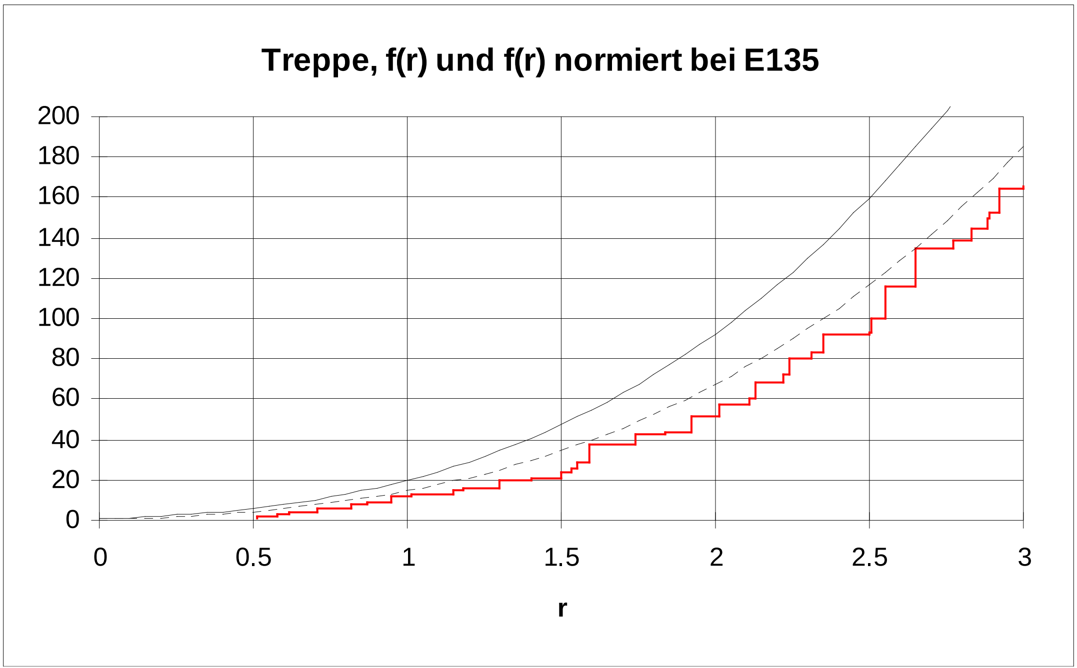
Die Treppenfunktion t(r) nähert sich asymptotisch der Funktion

$$f(r) = 0.74*N0(r)$$

worin 0.74 der Füllgrad der dichtesten Kugelpackung ist und

$$N0(r) = (r+0.5)^3/0.5^3$$

$(r+0.5)^3$ ist proportional dem Volumen der umschreibenden Kugel und 0.5^3 dem Volumen einer einzelnen



Kugel, sodass N0(r) die Anzahl Kugeln ist, die bei lückenlosem Auffüllen (auch mit Teilkugeln) in der umschreibenden Kugel Platz finden würden.

Natürlich bildet t(0)=1 eine Ausnahme und ist grösser als f(r).

Für jede unserer Kugelanordnungen kann man die *Dichte*

$$d = \text{Anzahl} / N0(r)$$

definieren.

Die dichtesten Kugelanordnungen mit $r < 3$ sind

	Anzahl	Dichte
1.	135	0.540
2.	38	0.520
3.	164	0.512
4.	116	0.511
5.	92	0.497
...		

Die dichteste Annordnung mit 135 Kugeln hat im Zentrum eine Kugel. Die vier folgenden Anordnungen haben immer ein Okateder in der Mitte.

Wenn nur Anzahlen unter 100 zugelassen werden lautet die Rangfolge

	Anzahl	Dichte
1.	38	0.520
2.	92	0.497
3.	12	0.492
4.	80	0.486
...		

Hier kommt die sehr spezielle Anordung des Ikosaeders (12) aufs Podium. Die Anordnung mit 80 Kugeln hat ein Kugeldreieck in der Mitte und ist ein Ausschnitt aus der dichtesten Kugelpackung vom Typ 12.

6. Neue Lösungen durch Wegnehmen von Kugeln

Der 100er geht aus dem 116er durch Wegnehmen von 16 Kugeln hervor. Von den 6 ganz aussen gelegenen Vierecken werden nur zwei benachbarte stehen gelassen.

Beim ebenfalls vielversprechenden 38er müssen auch mindestens drei äusserste Vierecke weggelassen werden, um das ganze in eine kleinere Kugel packen zu können, sonst bleiben immer zwei opponierende Vierecke, die für sich alleine schon die umschreibende Kugel des 38ers nötig machen. 38 minus 12 gibt aber 26, für das wir schon eine Lösung haben.

Beim 135er müssten mindestens neun von 18 äussersten Vierecke weggelassen werden, um das ganze in eine kleinere Kugel packen zu können, sonst bleiben immer zwei opponierende Vierecke, die für sich alleine schon die umschreibende Kugel des 135ers nötig machen. 135 minus 36 gibt 99, was zu einer Anordnung führt, die bestimmt von unserer 100er Lösung übertroffen wird.

Um beim Weglassen von Kugeln die neue umschreibende Kugel herauszufinden, kann der Excel Solver benutzt werden. Man muss den Schwerpunkt der verbleibenden Kugeln einer geeigneten dreidimensionalen Verschiebung unterwerfen so, dass der entfernteste Punkt zum verschobenen Schwerpunkt möglichst wenig entfernt ist.

Wenn mehr als eine Kugel weggenommen werden soll, wird die Konstellation dieser Kugeln wichtig. Diese kann nur in einer guten graphischen Darstellung wie SPIN inspiziert werden.