

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 gewonnenen Daten werden in einer Datenbank gespeichert und im Internet zur Verfügung gestellt.