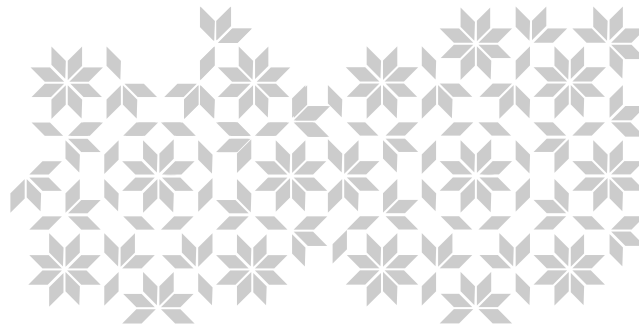




Universität Stuttgart

Bachelorarbeit

# Zur Theorie der Approximanten in Quasikristallen



Margarita Reschke

29. August 2012

Betreuer: Prof. Dr. Hans-Rainer Trebin

Institut für Theoretische und Angewandte Physik  
Universität Stuttgart



## Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Benutzung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe. Wörtlich übernommene Sätze und Satzteile sind als Zitate belegt, andere Anlehnungen hinsichtlich Aussage und Umfang unter Quellenangabe kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen und ist auch noch nicht veröffentlicht.

Margarita Reschke

Ort, Datum : Stuttgart, 29.08.2012



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Kristallographische Grundlagen</b>	<b>3</b>
1.1 Kristalle und Gitter . . . . .	3
1.2 Beugungsbilder . . . . .	4
1.2.1 Kristalle . . . . .	4
1.2.2 Quasikristalle . . . . .	5
1.3 Darstellungstheorie . . . . .	7
1.3.1 Darstellungen von Gruppen . . . . .	7
1.3.2 Methode der Projektionsoperatoren . . . . .	8
<b>2 Konstruktion von Quasigittern und ihren Approximanten</b>	<b>11</b>
2.1 Streifenprojektionsformalismus . . . . .	11
2.2 Gridmethode . . . . .	14
2.3 Methode der atomaren Hyperflächen . . . . .	14
2.4 Konstruktion der Approximanten . . . . .	15
2.4.1 Approximantenfolgen . . . . .	15
2.4.2 Periodische Approximanten . . . . .	17
2.4.3 Die Herleitung der Schermethode . . . . .	17

<b>3</b>	<b>Oktagonale Strukturen</b>	<b>21</b>
3.1	Oktagonale Quasikristalle . . . . .	21
3.2	Approximanten . . . . .	25
3.2.1	Verzerrung des Hypergitters . . . . .	25
3.2.2	Stratum . . . . .	28
3.3	Phasonen und Orthogonalraumverschiebungen . . . . .	33
3.3.1	Verschiebung des Akzeptanzbereiches . . . . .	33
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>37</b>
	<b>A Beweis von Relation (2.20)</b>	<b>39</b>
	<b>B Einschränkungen für periodische Approximanten</b>	<b>41</b>
B.1	Periodische Approximanten des Stratums $\pi_{\sigma_1\sigma_2}$ . . . . .	41
B.2	Periodische Approximanten des Stratums $\pi_{\sigma'_1\sigma'_2}$ . . . . .	43
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>43</b>

# Einleitung

Als 1982 SHECHTMANN und Mitarbeiter bei der Elektronenbeugung einer abgeschreckten Aluminium-Mangan-Legierung einen Festkörper entdeckten, dessen Beugungsmuster eine nichtkristallographische Symmetrie aufwies [1], versetzte das die Welt der Wissenschaft in den darauffolgenden Jahren in Unruhe. Denn bis dahin waren Festkörper in zwei großen Strukturklassen klassifiziert: die Klasse der Kristalle und die Klasse der amorphen Festkörper. In der Kristallographie war man der festen Meinung, dass Kristallstrukturen nichtkristallographischer Symmetrien verboten sind und nicht auftreten können.

Kristalle zeichnen sich durch eine vorhandene Fernordnung und eine Translationsperiodizität aus, wohingegen bei amorphen Festkörper nur eine Nahordnung vorliegt. Die von SHECHTMANN *et al.* entdeckte Struktur jedoch besaß trotz fehlender Translationsperiodizität eine weitreichende Ordnung. In der Tat konnte PENROSE in einer Veröffentlichung von 1974 [2] zeigen, dass eine aperiodische Parkettierung der zweidimensionalen Ebene mit zwei unterschiedlichen Bausteinen durchaus möglich ist. Die Entdeckung dieser ungewöhnlichen Struktur prägte einen neuen Begriff und eine neue Strukturklasse in der Festkörperphysik, die Klasse der Quasikristalle.

Quasikristalle besitzen im Vergleich zu bisher vertrauten Festkörpern bezüglich ihrer thermischen und elektrischen Leitfähigkeit sowie ihrer mechanischen Beschaffenheit atypische Eigenschaften. Die aperiodischen Anordnungen der Atome in den Quasikristallen lassen neue Atomfreiheitsgrade, sogenannte Phasonen, zu, die für die stabile Existenz dieser Strukturen in bestimmten Temperaturbereichen verantwortlich sind. Unterhalb dieser Temperaturbereiche finden Phasenübergänge zu kristallinen Strukturen mit teils sehr großen Einheitszellen statt, die als Approximanten bezeichnet werden. Der Begriff Approximant ist aus dem Lateinischen Wort *approximare*, „sich nähern“ abgeleitet, und deutet auf die Ähnlichkeit zwischen Approximanten und den Quasikristallen hin. Approximanten sind nämlich periodische oder quasiperiodische Strukturen, die zu Quasikristallen vergleichbare chemische Zusammensetzungen und physikalische Eigenschaften aufweisen. Insbesondere periodische Approximanten bieten aufgrund ihrer Periodizität und quasikristallin-ähnlichen Eigenschaften einen Zugang zur Untersuchung der Eigenschaften von Quasikristallen, da die periodischen Randbedingungen der Approximanten zum Beispiel für molekulardynamische Simulationen, für die diese unentbehrlich sind, ausgenutzt werden

können. Die Ausnutzung der Eigenschaften setzt jedoch ein Verständnis über die genaue Struktur der Approximanten voraus.

Die vorliegende Arbeit soll dazu dienen, einen Grundbaustein in der Diskussion von Approximanten zu legen. Sie setzt sich mit den geometrischen Aspekten der Konstruktion von Approximantenstrukturen unter Betrachtung der Symmetrien und Verwendung gruppen- und darstellungstheoretischer Hilfsmittel auseinander.

Im ersten Kapitel werden einige grundlegende Begriffe und Definitionen aus der Kristallographie und Darstellungstheorie eingeführt und eine primäre Definition einer Quasistruktur vorgestellt.

Das darauffolgende Kapitel dient dazu, drei Konstruktionsmethoden für Quasikristalle vorzustellen, aus denen anschließend Konstruktionsmethoden für Approximantenstrukturen abgeleitet werden. Begleitend zu den Konstruktionsmethoden wird eine weitere Definition eines Quasikristalls gegeben.

Im dritten Kapitel werden im Anschluss an die ersten beiden Abschnitte zweidimensionale Quasikristall- und Approximantenstrukturen des oktagonalen Tilings konstruiert. Anschließend daran wird die Konstruktion von Strukturbereichen im Bezug auf Phasonen in Approximanten für einen der zuvor konstruierten Approximanten diskutiert.



# Kapitel 1

## Kristallographische Grundlagen

In diesem Abschnitt sollen grundlegende Begriffe der Kristallographie eingeführt werden, die sowohl zur Beschreibung als auch zur Konstruktion von Quasikristallen und ihren Approximanten in darauffolgenden Kapiteln benötigt werden. Diese Begriffe werden zunächst ganz allgemein, d.h. ohne Einschränkung auf eine bestimmte Symmetrie abgehandelt. Im späteren Verlauf dieser Arbeit werden Sie dann auf oktagonale Quasikristalle angewendet.

### 1.1 Kristalle und Gitter

Den Ausgangspunkt zur Definition eines Quasikristalls bildet zunächst die Definition eines Kristalls bzw. seines Gitters. In der Kristallographie wird ein Kristallgitter über eine Gittergruppe  $\mathcal{G}$  definiert. Die Gittergruppe  $\mathcal{G}$  besteht aus der Menge aller Translationen, selbst Vektoren des  $\mathbb{R}^n$ , die sich als Linearkombination ganzzahliger Vielfacher von maximal  $n$  linear unabhängigen Vektoren  $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_n$  schreiben lassen. Ein mathematisches **Gitter**  $\Lambda$  ist die Menge aller Punkte, die man durch Anwenden aller möglichen Translationen der Gittergruppe  $\mathcal{G}$  auf einen Punkt  $\mathbf{x}$  des  $\mathbb{R}^n$  erhält

$$\Lambda = \{\mathbf{x} + \mathbf{t} \mid \mathbf{t} = \sum_i a_i \mathbf{t}_i ; a_i \in \mathbb{Z}\}. \quad (1.1)$$

Als **Einheitszelle** bezeichnet man die Zelle, die von den Basisvektoren  $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_n$  aufgespannt wird. Man beachte, dass mit dieser mathematischen Definition Kristalle unendlich ausgedehnte periodische Strukturen sind, denen Symmetriegruppen zugrunde liegen, die den Gittergruppen entsprechen. Physikalisch sind Kristalle endlich ausgedehnte Festkörper, bestehend aus einer periodischen Dichteverteilung  $\varrho(\mathbf{x})$ , z.B. einer periodischen Anordnung von Atomen, wobei die Dichteverteilung  $\varrho(\mathbf{x})$  selbst invariant unter der Gittergruppe

$\mathcal{G}$  ist. Neben der Translationssymmetrie hat das nach (1.1) definierte Gitter auch eine Punktsymmetrie, die beide unter dem Begriff der kristallographischen Punktgruppe zusammengefasst werden<sup>1</sup>. Eine kristallographische Punktgruppe  $\mathcal{G}$  ist die Menge aller Symmetrieeoperationen, die ein Gitter  $\Lambda$  auf sich selbst abbilden und einen Gitterpunkt  $\xi \in \Lambda$  invariant lassen. Es lässt sich leicht nachvollziehen, dass im dreidimensionalen Raum nur kristallographische Punktgruppen mit Drehachsen  $c_n$  der Zähligkeit  $n = 1, 2, 3, 4$  und  $6$  erlaubt sind. Eine Drehung im dreidimensionalen Raum um eine  $n$ -zählige Achse kann durch die Matrix

$$c_n = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \varphi = \frac{2\pi}{n} \quad (1.2)$$

beschrieben werden. Da die Wirkung von  $c_n$  auf einen Gittervektor wieder einen Gittervektor ergeben muss, müssen die Koeffizienten  $(c_n)_{ij}$  ganze Zahlen sein. Damit folgt für die Spur der Matrix  $c_n$ :

$$\sum_i c_{ii} = 1 + 2 \cos(\varphi) = 1 + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) \in \mathbb{Z}. \quad (1.3)$$

Diese Gleichung ist nur für  $n = 1, 2, 3, 4$  und  $6$  erfüllt. Im dreidimensionalen Raum existieren 32 kristallographische Punktgruppen [3]. Mit diesen Definitionen verstehen und gebrauchen wir den Begriff des Kristalls im weiteren Verlauf dieser Arbeit als Beschreibung periodischer Strukturen, die sich dadurch auszeichnen, dass bei Kenntnis eines Teils dieser Struktur (Einheitszelle) zugleich die gesamte Struktur des Kristalls bekannt ist.

## 1.2 Beugungsbilder

### 1.2.1 Kristalle

Die Beugung von Röntgenstrahlung an Kristallen kann Aufschluss über die Struktur des Kristalls geben. Dieser Sachverhalt rührt daher, dass die Streuintensität des Beugungsmusters mit der periodischen Dichteverteilung des Kristalls wie folgt zusammenhängt:

$$I(\mathbf{k}) \propto |A(\mathbf{k})|^2 = \left| \int_{V_P} \varrho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} dV \right|^2 = \left| \sum_{\mathbf{g} \in \tilde{\Lambda}} \tilde{\varrho}_{\mathbf{g}} \int_{V_P} e^{i(\mathbf{g}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} dV \right|^2 \quad (1.4)$$

( $V_P$ : Volumen der untersuchten Probe)

Die Streuintensität  $I(\mathbf{k})$  ist proportional zum Betragsquadrat der Streuamplitude  $A(\mathbf{k})$ ,

---

<sup>1</sup>Eine nähere Erläuterung findet sich in [3], S.85 ff. .

die der Fouriertransformierten der Dichteverteilung  $\rho(\mathbf{x})$  entspricht<sup>2</sup>. Die rechte Seite der Gleichung (1.4) erhält man, wenn man die Dichteverteilung aufgrund ihrer Periodizität in eine Fourierreihe entwickelt ( $\tilde{\rho}_{\mathbf{g}}$  sind die Entwicklungskoeffizienten). Da  $e^{i(\mathbf{g}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}$  eine oszillierende Funktion ist, ist die Fouriertransformierte der Dichteverteilung null, außer für den Fall, dass der  $\mathbf{k}$ -Vektor ein Vektor aus dem reziproken Raum ist:

$$\mathbf{g} = b_1\mathbf{g}_1 + b_2\mathbf{g}_2 + \dots + b_n\mathbf{g}_n = \mathbf{k}. \quad (1.5)$$

Das bedeutet, dass die Streuamplitude als Summe von  $\delta$ -Reflexen  $\delta(\mathbf{g} - \mathbf{k})$  dargestellt werden kann, was charakteristisch für translationsgeordnete Strukturen ist. Der reziproke Raum wird von Wellenvektoren aufgespannt, die in der Beziehung

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{t}_i = 2\pi\delta_{ij} \quad (1.6)$$

zu den Vektoren des direkten Gitters  $\Lambda$  stehen. Das Beugungsbild eines Kristalls weist daher scharfe BRAGG-Peaks auf, die auf die Symmetrie des Kristalls schließen lassen. Es lässt sich schnell zeigen, dass die Symmetriegruppe des Kristalls die Intensitätsverteilung des Beugungsbildes invariant lässt ([5], S.7), und die Symmetrie des Beugungsbildes damit eine Teilsymmetrie des Kristallgitters ist.

## 1.2.2 Quasikristalle

1982 erhielten SHECHTMAN et al. [1] Beugungsbilder einer AlMn-Legierung, die auf eine Festkörperstruktur mit einer nichtkristallographischen Beugungssymmetrie hindeuteten. Abbildung 1.1 zeigt die Beugungsbilder aus der Originalveröffentlichung von SHECHTMAN, die darauf schließen lassen, dass der untersuchte Festkörper ikosaedrische Beugungssymmetrie besitzen muss. Bis dahin war man in der Kristallographie davon ausgegangen, dass nur Kristalle (mit kristallographischer Punktgruppe) Beugungsbilder mit scharfen BRAGG-Peaks erzeugen können, sodass es darauf hinzudeuten scheint, dass man hier das Beugungsbild eines Kristalls einer Dimension höher als drei vorliegen hat. Zwar existieren bei höherdimensionalen Kristallen wie bei dreidimensionalen auch Einschränkungen für die möglichen kristallographischen Punktgruppen, jedoch sind im höherdimensionalen, z.B. ab Dimension vier auch fünf-, acht- und zehnzählige Drehachsen erlaubt. Aus der nichtkristallographischen Symmetrie des Beugungsbildes folgt, dass mehr als drei Basisvektoren des reziproken Raums benötigt werden, um jeden einzelnen Punkt des Beugungsbildes als ganzzahlige Linearkombination der Basisvektoren darzustellen. Hiermit können wir schon eine vorläufige Definition einer Quasistruktur angeben:

**Definition 1.2.1.** Eine  $d$ -dimensionale **quasiperiodische Struktur** ist eine translationsgeordnete Struktur, deren Beugungsbild von einer endlichen minimalen Anzahl  $n$  an rational linear unabhängigen Basisvektoren  $\mathbf{g}_i$  aufgespannt wird, die größer ist als die physikalische Dimension  $d$  ( $n > d$ ).

<sup>2</sup>Für eine anschauliche Herleitung siehe [4], S.81 ff.

Für jede Zähligkeit lässt sich eine minimale Einbettungsdimension angeben, d.h. eine minimale Dimension für die die Zähligkeit der Punktsymmetrie mit einer Translations-symmetrie verträglich ist. Diese Einbettungsdimension wird durch die Eulerfunktion

$$\phi(n) = |\{l | 1 \leq l \leq n, \text{ggT}(l, n) = 1\}| \quad (1.7)$$

gegeben. Es wird sich, wie man im nächsten Kapitel sehen wird, nun anbieten, bei der Konstruktion von Quasikristallstrukturen sich einer höherdimensionalen translationsperiodischen Kristallstruktur zu bedienen, die ein Beugungsbild der betrachteten Punktsymmetrie erzeugt, um darin eine Unterstruktur zu suchen, die die Symmetrie „erbt“.

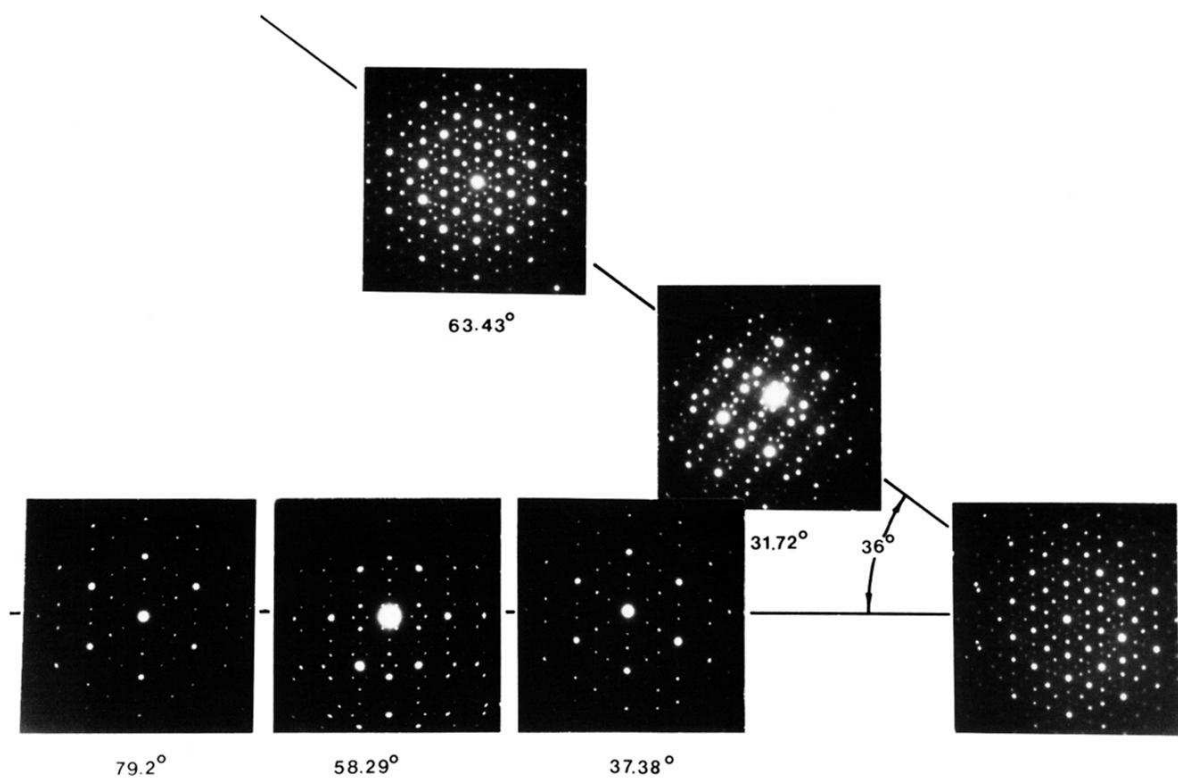


Abbildung 1.1: Beugungsbilder der Al-Mn-Legierung aus Shechtmanns Originalveröffentlichung [1] aus dem Jahre 1984.

## 1.3 Darstellungstheorie

In diesem Abschnitt werden Sätze und Definitionen aus der Gruppen- und Darstellungstheorie gegeben, welche dazu benötigt werden Symmetriebetrachtungen, die bei der Konstruktion von Quasikristallen nützlich sind, zu ermöglichen. Aufbauend auf diesen Sätzen und Definitionen wird anschließend die Methode der Projektionsoperatoren, die als Werkzeug bei der Konstruktion von Quasikristallen dient, vorgestellt. Die Auslegungen dieser Definitionen und Sätze sind an das Skript [3] angelehnt und wurden aus diesem entnommen.

### 1.3.1 Darstellungen von Gruppen

Um mit Symmetriegruppen arbeiten zu können benötigen wir zunächst eine Darstellung dieser Gruppe. Eine Darstellung der Gruppenelemente kann z.B. in Matrizenform gegeben werden, d.h. durch die Wirkung der Gruppe auf den Elementen eines Vektorraums  $V$ .

**Definition 1.3.1.** *Eine lineare Darstellung einer Gruppe  $\mathcal{G}$  auf dem Vektorraum  $V$  ist ein Gruppenhomomorphismus in den Raum der Automorphismen  $Aut(V, +, \cdot)$  auf  $V$*

$$\begin{aligned} D : \mathcal{G} &\longrightarrow Aut(V, +, \cdot) \\ g &\longmapsto D(g) \end{aligned} \tag{1.8}$$

Bei einer gegebenen Darstellung einer Gruppe wird uns interessieren, wie viele und welche Unterräume von  $V$  unter allen Darstellungsmatrizen  $D(g)$  der Gruppe invariant sind. Dazu wird die nächste Definition benötigt.

**Definition 1.3.2.** *Sei  $D$  eine endlichdimensionale Darstellung einer Gruppe  $\mathcal{G}$  auf dem Vektorraum  $V$ . Die Darstellung  $D$  nennt man **reduzibel**, wenn es einen echten invarianten Unterraum gibt, ansonsten heißt  $D$  **irreduzibel**. Ein Untervektorraum  $W \subset V$  ist invariant unter  $D \iff \forall \mathbf{w} \in W, g \in \mathcal{G} : D(g)\mathbf{w} \in W$ .*

**Definition 1.3.3.** *Sei  $D : \mathcal{G} \longrightarrow Aut(V, +, \cdot)$  eine Darstellung von  $\mathcal{G}$ . Die Abbildung*

$$\begin{aligned} \chi_D : \mathcal{G} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ g &\longmapsto Sp(D(g)) \end{aligned} \tag{1.9}$$

*heißt Charakter der Darstellung  $D$ . Der Charakter einer irreduziblen Darstellung ist irreduzibel.*

Da die Spur einer Matrix basisunabhängig ist gilt

$$\chi_D(h^{-1}gh) = \chi_D(g), \quad (1.10)$$

woraus folgt, dass der Charakter für alle Elemente einer Konjugationsklasse denselben Wert besitzt. Folgender Satz wird bei der Bestimmung der invarianten Unterräume nützlich sein:

**Satz 1.3.4 (Orthogonalitätsrelation für Charaktere).** *Seien  $\chi^\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, r$  irreduzible Charaktere, so folgt:*

$$\langle \chi^{(\alpha)}, \chi^{(\beta)} \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)}(g^{-1}) \chi^{(\beta)}(g) = \delta_{\alpha, \beta} \quad (1.11)$$

Jede reduzible Darstellung  $D$  lässt sich in eine direkte Summe aus irreduziblen Darstellungen zerlegen (ausreduzieren), d.h. es existiert eine Basiswechsellmatrix  $T$  derart, dass

$$T^{-1}D(g)T = n_1 D^{(1)}(g) \oplus n_2 D^{(2)}(g) \oplus \dots \oplus n_s D^{(s)}(g) \quad (1.12)$$

gilt. Die Vielfachheiten  $n_k$  und damit die Zerlegung (1.12) sind eindeutig. Ist eine lineare Darstellung  $D$  einer Gruppe  $\mathcal{G}$  gegeben, lässt sich mithilfe der Orthogonalitätsrelation für Charaktere (1.11) die eindeutige Zerlegung von  $D$  bestimmen. Dazu werden die Skalarprodukte der Charaktere der gegebenen Darstellung  $D$  mit denen der irreduziblen Darstellungen bestimmt:

$$\langle \chi_D, \chi^{(\alpha)} \rangle = n_1 \langle \chi^{(1)}, \chi^{(\alpha)} \rangle + n_2 \langle \chi^{(2)}, \chi^{(\alpha)} \rangle + \dots + n_\alpha \langle \chi^{(\alpha)}, \chi^{(\alpha)} \rangle \quad (1.13)$$

$$+ \dots + n_s \langle \chi^{(s)}, \chi^{(\alpha)} \rangle = n_\alpha \quad (1.14)$$

Ein Satz in der Darstellungstheorie, der hier jedoch nicht explizit gegeben und bewiesen wird, besagt, dass die Anzahl  $r$  der Konjugationsklassen einer Gruppe  $\mathcal{G}$  mit der Anzahl der irreduziblen Darstellungen  $s$  übereinstimmt. Will man also wissen, wie viele irreduzible Darstellungen einer Gruppe existieren, genügt es die Anzahl der Konjugationsklassen zu bestimmen. Die Charakterwerte der irreduziblen Darstellungen einer Gruppe werden in sogenannten Charaktertafeln (z.B. siehe Tabelle 3.1) gelistet.

### 1.3.2 Methode der Projektionsoperatoren

Es sei eine Darstellung  $D_{\text{red}}$  des betrachteten Systems mit der Symmetriegruppe  $\mathcal{G}$  auf dem Darstellungsraum  $V$  gegeben. Mit der Orthogonalitätsrelation aus dem vorherigen Abschnitt können wir angeben wie oft welche irreduzible Darstellung in  $D_{\text{red}}$  enthalten ist:

$$D_{\text{red}} = \bigoplus_{\alpha=1}^k n_\alpha D^{(\alpha)} \quad (1.15)$$



Man bezeichnet (1.18) auch als schwachen Projektionsoperator. Mit (1.21) ist der zu  $P^{(\alpha)}$  korrespondierende Unterraum  $E_\alpha$  der Dimension  $d_\alpha$ , d.h. der Bildraum des Projektionsoperators, invariant unter der Symmetriegruppe  $\mathcal{G}$  ist. Die Menge aller dieser Unterräume wird als  $\mathcal{G}$ -Stratum bezeichnet und ist durch die Menge der Projektoren

$$P_d^{\mathcal{G}} = \{P^{(\alpha)} \mid [P^{(\alpha)}, \mathcal{G}] = 0, \text{Sp}(P^{(\alpha)}) = d_\alpha\} \quad (1.22)$$

festgelegt.

## Erzeugung einer symmetriangepassten Basis

Im Folgenden wird eine Konstruktionsvorschrift zur Erzeugung einer symmetriangepassten Basis gegeben. Sind eine (i.A. reduzible) Matrixdarstellung  $D$  einer Gruppe  $\mathcal{G}$  auf dem Darstellungsraum  $V$  sowie die irreduziblen Darstellungen  $D^{(\alpha)}$  mit den Matrixelementen  $D_{lk}^{(\alpha)}(g)$  gegeben, so definieren wir den Operator

$$P_{lk}^{(\alpha)} = \frac{d_\alpha}{|\mathcal{G}|} \sum_{g \in \mathcal{G}} D_{lk}^{(\alpha)}(g) * D_{\text{red}}(g). \quad (1.23)$$

$P_{lk}^{(\alpha)}$  wird als „starker“ Projektionsoperator bezeichnet und ist für  $l \neq k$  weder idempotent noch selbstadjungiert, folglich definitionsgemäß im Allgemeinen kein Projektionsoperator. Für einen Basisvektor  $e_{ij}^{(\beta)} \in V_i^{(\beta)}$  gilt:

$$P_{lk}^{(\alpha)} e_{ij}^{(\beta)} = \delta_{\alpha,\beta} \delta_{j,k} e_{il}^{(\beta)}. \quad (1.24)$$

Das Anwenden des Operators auf einen Basisvektor  $e_{ij}^{(\beta)}$  erzeugt den Partnerbasisvektor  $e_{il}^{(\beta)}$  im Vektorraum  $V_i^{(\beta)}$ . Um nun eine symmetriangepasste Basis für den invarianten Unterraum  $V_k^{(\alpha)}$  zu erhalten, betrachten wir den Operator  $P_{11}^{(\alpha)} : V \rightarrow V$ .  $P_{11}^{(\alpha)}$  ist ein selbstadjungierter Projektionsoperator auf den Raum  $\langle e_{kj}^{(\alpha)} \mid 1 \leq k \leq n_\alpha \rangle$ , d.h. der Bildraum von  $P_{11}^{(\alpha)}$  ist  $n_\alpha$ -dimensional. Zunächst bestimmt man  $\text{Im} P_{11}^{(\alpha)}$  und wählt darin eine Orthonormalbasis  $\{e_{k1}^{(\alpha)} \mid 1 \leq k \leq n_\alpha\}$ . Die restlichen  $d_\alpha - 1$  Basisvektoren erhält man durch Anwenden des Operators  $P_{j1}^{(\alpha)}$

$$e_{kj}^{(\alpha)} = P_{j1}^{(\alpha)} e_{k1}^{(\alpha)} \quad (1.25)$$

Die Vektoren  $\{e_{k1}^{(\alpha)} \mid 1 \leq j \leq d_\alpha\}$  bilden dann eine ONB im Unterraum  $V_k^{(\alpha)}$  (Beweis siehe [3]).



# Kapitel 2

## Konstruktion von Quasigittern und ihren Approximanten

Es gibt verschiedene Methoden, quasikristalline Strukturen zu konstruieren. In diesem Kapitel wird auf drei dieser Methoden eingegangen. Diese sind der Streifenprojektionsformalismus, die Methode der atomaren Hyperflächen und die Gridmethode. Alle drei Methoden sind äquivalent zueinander. Die Ausarbeitung des Streifenprojektionsformalismus, sowie der Gridmethode, orientiert sich dabei nach [7].

### 2.1 Streifenprojektionsformalismus

Bei der Projektionsmethode, die in diesem Abschnitt erläutert wird, konstruiert man  $d$ -dimensionale quasikristalline Strukturen, indem man Gitterpunkte aus einem höheren  $n$ -dimensionalen ( $n > d$ ) Raum projiziert. Dieser Formalismus wurde von Duneau und Katz [6] eingeführt. Ausgangspunkt ist der euklidische Vektorraum  $\mathbb{R}^n$  mit der kanonischen Orthonormalbasis  $\mathbf{e}_i$  ( $i=1,\dots,n$ ). Sei  $E_d$  zunächst ein beliebiger Untervektorraum des  $\mathbb{R}^n$  der Dimension  $d$  mit  $n > d$ . Die Abbildung

$$\pi^{\parallel} : \Lambda \rightarrow E_d \tag{2.1}$$

kennzeichnet die orthogonale Projektion des  $n$ -dimensionalen Gitters  $\Lambda$  auf den Unterraum  $E_d$ . Mit  $\pi^{\perp}$  wird die orthogonale Projektion des hyperkubischen Gitters  $\Lambda$  auf den zu  $E_d$  orthogonalen  $(n - d)$ -dimensionalen Untervektorraum  $E_d^{\perp}$  bezeichnet. Wird der Unterraum  $E_d$  so gewählt, dass er außer dem Nullpunkt keine weiteren gemeinsamen Punkte mit dem  $\mathbb{Z}$ -Modul  $\Lambda$  hat ( $E_d \cap \Lambda = \{0\}$ ), so ist die Projektion des Gitters  $\mathcal{L} = \pi^{\parallel}(\Lambda)$  eine dichte Menge in  $E_d$ .  $\mathcal{L}$  wird durch die ganzzahlige Linearkombination der projizierten Einheitsvektoren  $\mathbf{l}_i = \pi^{\parallel}(\mathbf{e}_i)$  aufgespannt. Das erzeugte Gitter  $\mathcal{L}$  besitzt so allerdings noch die algebraischen Eigenschaften, mitunter die Periodizität, des Hypergitters  $\Lambda$  [7].

Betrachtet man z.B. eine Translation  $\mathbf{t}$ , die das Gitter  $\Lambda$  invariant lässt:

$$\begin{aligned} \implies \boldsymbol{\xi} + \mathbf{t} &\in \Lambda \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\xi} \in \Lambda \\ \implies \mathbf{l}_t &= \pi^\parallel(\mathbf{t}) \in \mathcal{L} \quad \text{und} \quad \mathbf{l}_\xi = \pi^\parallel(\boldsymbol{\xi}) \in \mathcal{L} \\ \implies \mathbf{l}_t + \mathbf{l}_\xi &= \pi^\parallel(\mathbf{t}) + \pi^\parallel(\boldsymbol{\xi}) = \pi^\parallel(\boldsymbol{\xi} + \mathbf{t}) \in \mathcal{L} \end{aligned}$$

Zwar liegt das Gitter  $\mathcal{L}$  dicht in  $E_d$ , besitzt jedoch noch Invarianz gegenüber einer Translation. Um eine nichtperiodische Struktur auf  $E_d$  zu erhalten projiziert man jetzt nicht mehr alle Punkte von  $\Lambda$ , sondern nur die, die innerhalb des Streifens  $S$  liegen. Dazu definiert man den offenen  $n$ -dimensionalen Einheitswürfel

$$W^n = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{e}_i ; \alpha_i \in (0, 1) ; i = 1, \dots, n \right\} \quad (2.2)$$

und bewegt diesen entlang des Raumes  $E_d$ . Es entsteht ein Streifen

$$S = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} = \mathbf{z} + \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{e}_i ; \mathbf{z} \in E_d ; \alpha_i \in (0, 1) ; i = 1, \dots, n \right\}, \quad (2.3)$$

der zusätzlich noch im  $\mathbb{R}^n$  verschoben werden kann

$$S_t = S + \mathbf{t} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} = \mathbf{z} + \mathbf{t} ; \mathbf{z} \in S ; \mathbf{t} \in \mathbb{R}^n ; i = 1, \dots, n \right\}. \quad (2.4)$$

Dieser Streifen wird, um eine richtige Abbildung der Gitterpunkte, die auf dem Rand des Streifens liegen, zu gewährleisten, halboffen gewählt.

**Definition 2.1.1.** Die Projektion  $\mathcal{T} = \pi^\parallel(\Lambda \cap S_t) \subset \mathcal{L}$  der Gitterpunkte, die im Streifen  $S_t$  liegen, ist eine diskrete Punktmenge in  $E_d$ , die nicht mehr periodisch ist. Die Menge  $\mathcal{T}$  bezeichnen wir als **Quasikristall**.

Als **Akzeptanzbereich**  $\mathcal{A}$  kennzeichnet man die Menge, die sich aus der Projektion des Streifens  $S$  bzw. des Einheitswürfels  $W^n$  in den orthogonalen Raum  $E_d^\perp$

$$\mathcal{A} = \pi^\perp(S) = \pi^\perp(W^n) \quad (2.5)$$

ergibt. Abbildung 2.1 zeigt eine geometrische Veranschaulichung der Konstruktion einer eindimensionalen Quasistruktur im zweidimensionalen Fall.

Die quasiperiodische Struktur lässt sich äquivalent zu den durch  $\pi^\parallel$  projizierten Gitterpunkten statt dieser auch über die durch  $\pi^\parallel$  zugleich projizierten Verbindungsstrecken

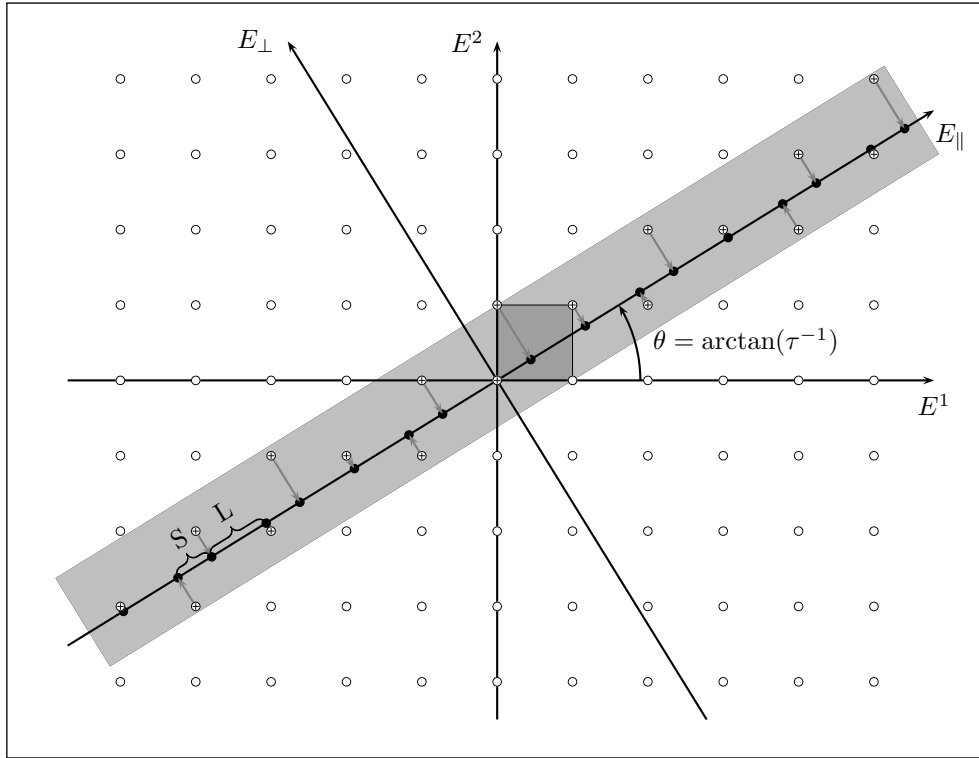


Abbildung 2.1: Konstruktion eines eindimensionalen Quasikristalls mit dem Streifenprojektionsformalismus unter Einbettung in den  $\mathbb{R}^2$  (Bild aus [8]).

zwischen Gitterpunkten oder den projizierten Gitterflächen beschreiben. Wir definieren eine  $d$ -Zelle  $\Gamma_d$  als  $d$ -dimensionales Oberflächenelement des Einheitswürfels  $W^n$ , das von  $d$  Basisvektoren aufgespannt wird

$$\Gamma_d(\mathbf{e}_{i_1}, \dots, \mathbf{e}_{i_d}) := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} = \sum_{k=1}^d \alpha_{i_k} \mathbf{e}_{i_k} ; \alpha_{i_k} \in (0, 1) ; i_k \in \{1, \dots, n\} \right\}. \quad (2.6)$$

Damit können wir eine alternative Definition des Quasikristalls geben, die zur Definition 2.1.1 äquivalent ist:

**Definition 2.1.2.** Ein  $d$ -dimensionaler **Quasikristall** ist die Projektion aller  $d$ -dimensionalen Zellen  $\Gamma_d$  des  $n$ -dimensionalen Gitters, die innerhalb des Streifens  $S_t$  liegen, auf den physikalischen Raum  $E_d$ .

Eine quasiperiodische Struktur kann damit auch als eine Pflasterung (disjunkte Überdeckung) des physikalischen Raumes  $E_d$  mit einer endlichen Anzahl unterschiedlicher Zellen, die gerade die Projektionen der  $d$ -dimensionalen Oberflächenelemente des  $n$ -dimensionalen Einheitswürfels  $W^n$  sind, verstanden werden. Die Parkettierung, das sogenannte

**Tiling**, besteht somit aus  $\binom{n}{d}$  in Orientierung und Gestalt unterschiedlichen Zellen  $\pi^\parallel(\Gamma_d)$ , die als **Tiles** bezeichnet werden.

## 2.2 Gridmethode

Die Gridmethode ist eine Alternative zum Streifenprojektionsformalismus und ermöglicht eine Konstruktion quasikristalliner Strukturen ohne in einen höherdimensionalen Raum wechseln zu müssen. Ausgangspunkt ist ein  $n$ -Stern aus den Vektoren  $\mathbf{l}_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) im  $d$ -dimensionalen physikalischen Raum  $E_d$ . Die Vektoren  $\mathbf{l}_i$  werden als Gridvektoren bezeichnet. Senkrecht zu diesen Gridvektoren zieht man eine Schar äquidistanter  $(d-1)$ -dimensionaler Hyperebenen. Die Schar der parallelen Hyperebenen wird als Grid bezeichnet. Mit den ganzen Zahlen  $k_i \in \mathbb{Z}$  werden die einzelnen Hyperebenen des  $i$ -ten Grids durchnummeriert. Man spricht von einem regulären Grid, wenn sich nie mehr als zwei Geraden in einem Punkt schneiden, ansonsten von einem singulären Grid. Die Grids liefern eine Zerlegung des physikalischen Raumes in Zellen. Da  $k_i$  auf jeder Zelle eines Grids konstant ist, kann jede Zelle der Zerlegung und damit jeder Punkt  $\mathbf{x} \in E_d$  durch ein  $n$ -Tupel  $(k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{Z}^n$  identifiziert bzw. durchnummeriert werden, wobei man z.B. für jedes Grid die Nummer der Hyperebene mit dem höchsten Index  $k_i$  angibt. Im nächsten Schritt wird jeder Zelle der Zerlegung ein Punkt im physikalischen Raum  $E_d$  nach der Vorschrift

$$\mathbf{z} = \sum_{i=1}^n k_i(\mathbf{x}) \mathbf{l}_i \in E_d \quad (2.7)$$

zugeordnet. Die sich so ergebende Punktmenge bildet einen  $d$ -dimensionalen Quasikristall. Es lässt sich beweisen, dass die Gridmethode äquivalent zur Projektionsmethode ist. Der Beweis dazu und eine Veranschaulichung zur Konstruktion des PENSROSE-Musters mit der Gridmethode findet sich in [7].

## 2.3 Methode der atomaren Hyperflächen

Bei der Methode der atomaren Hyperflächen wird zunächst analog zum Projektionsformalismus der physikalische Raum  $E_\parallel = E_d$  der Dimension  $d_\parallel$  und der dazu orthogonale Raum  $E^\perp = E_d^\perp$  der Dimension  $d_\perp$  konstruiert, wobei  $E_\parallel$  bezüglich dem Gitter  $\Lambda$  irrational orientiert ist. Im nächsten Schritt wird an jeden Gitterpunkt  $\boldsymbol{\xi} \in \Lambda$  eine  $(n-d_\parallel)$ -dimensionale atomare Hyperfläche  $\sigma$  geheftet, die eine Kopie des Akzeptanzbereiches  $\mathcal{A}$  ist. Die quasikristalline Struktur wird dann von der Schnittmenge vom Unterraum  $E_\parallel$  und den atomaren Hyperflächen  $\sigma$  erzeugt. Abbildung 2.2 zeigt eine Veranschaulichung dieser Methode für den Spezialfall  $n=2$  und  $d=1$ .

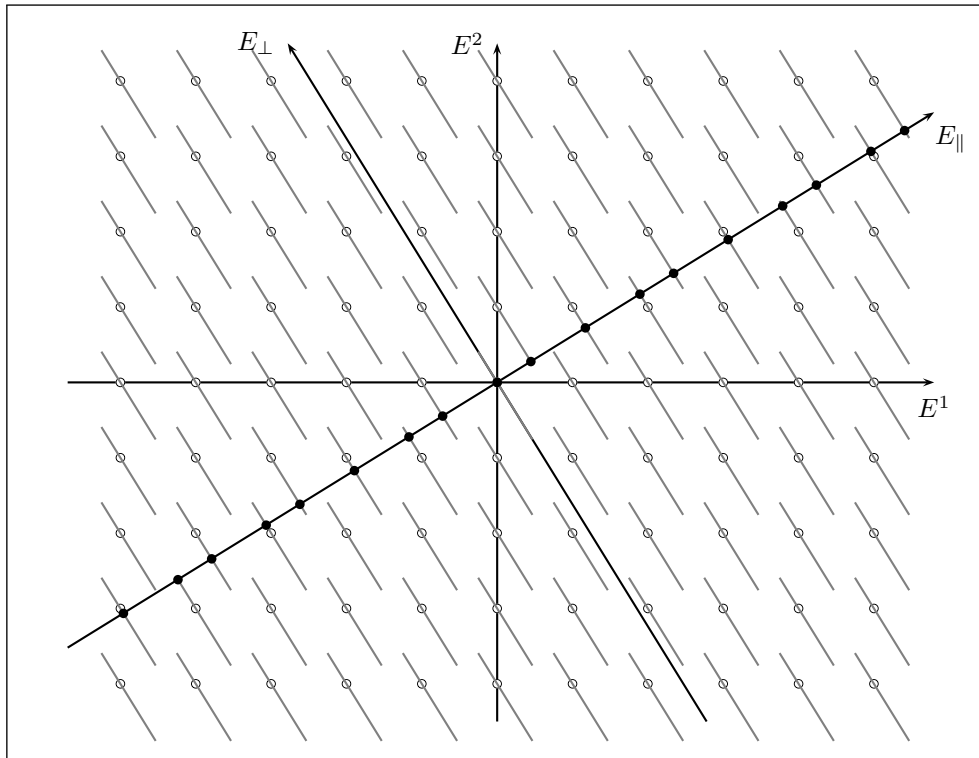


Abbildung 2.2: Konstruktion eines eindimensionalen Quasikristalls mit der Methode der atomaren Hyperflächen (Bild aus [8]).

## 2.4 Konstruktion der Approximanten

Unter dem Begriff **Approximanten** einer Quasistruktur versteht man quasiperiodische oder periodische Strukturen, die ein Beugungsbild erzeugen, das einem Beugungsbild eines gegebenen Quasikristalls sowohl in Position der Peaks als auch ihrer Intensitäten nahe kommt.

### 2.4.1 Approximantenfolgen

Jede reelle Zahl  $\alpha$  lässt sich durch eine Folge rationaler Zahlen approximieren

$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{p_n}{q_n} \quad (2.8)$$

wobei  $p_n, q_n$  ganze Zahlen sind. In diesem Unterabschnitt soll kurz auf ein Verfahren eingegangen werden (siehe auch [9], S. 283), mit dem sich eine Folge rationaler Zahlen konstruieren lässt, die gegen eine beliebige gegebene Zahl  $\alpha \in \mathbb{R}$  konvergiert. Nehmen wir nun eine reelle Zahl  $\alpha$  und zerlegen sie entsprechend

$$\alpha = a_0 + (\alpha - a_0), \quad (2.9)$$

wobei  $a_0 = \lfloor \alpha \rfloor$  der ganzzahlige (d.h.  $a_0 \in \mathbb{Z}$ ) und  $(\alpha - a_0)$  der irrationale Bestandteil, zwischen 0 und 1, von  $\alpha$  ist. Mit  $\alpha_1 = (\alpha - a_0)^{-1} > 1$  und (iterativ fortgesetzt)  $a_k = \lfloor \alpha_k \rfloor$  und  $\alpha_k = (\alpha_k - a_k)^{-1} > 1$  können wir  $\alpha$  als Kettenbruch schreiben:

$$\alpha = a_0 + \frac{1}{\alpha_1} = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{\dots + \frac{1}{a_n + \frac{1}{\alpha_{n+1}}}}}} \quad (2.10)$$

Die Folgenglieder  $\alpha^{(n)}$  erhält man, indem man in (2.10)  $1/\alpha_{n+1}$  durch 0 ersetzt. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \alpha^{(0)} &= a_0 = \frac{p_0}{q_0} \\ \alpha^{(1)} &= a_0 + \frac{1}{a_1} = \frac{a_0 a_1 + 1}{a_1} = \frac{p_1}{q_1} \\ \alpha^{(2)} &= a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2}} = \frac{a_0 a_1 a_2 + a_0 + a_2}{a_1 a_2 + 1} = \frac{p_2}{q_2} \\ &\vdots \\ \alpha^{(n)} &= a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{\dots + \frac{1}{a_n}}}} = \frac{p_n}{q_n}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

$p_n$  und  $q_n$  lassen sich damit als rekursive Folgen

$$\begin{aligned} p_0 &= a_0 & q_0 &= 1 \\ p_1 &= a_0 a_1 + 1 & q_1 &= a_1 \\ &\vdots & &\vdots \\ p_n &= a_n p_{n-1} + p_{n-2} & q_n &= a_n q_{n-1} + q_{n-2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

angeben. Eine interessante Eigenschaft von Quasikristallen ist, dass Abstände und Längen in den Quasigittern abhängig von der implizierenden Punktsymmetrie in einem Verhältnis zueinander stehen, das durch eine feste reelle Zahl  $\tau$  gegeben ist. Diese Eigenschaft lässt darauf schließen, dass periodische Approximanten erzeugt werden können, wenn das zugrundeliegende irrationale Verhältnis des Quasikristalls durch eine Folge rationaler Zahlen

approximiert wird. Im zweidimensionalen Konstruktionsbeispiel aus Abbildung 2.1 zum Beispiel findet sich das irrationale Verhältnis in der Quasistruktur darin, dass der physikalische Raum  $E_{\parallel}$  bezüglich des Gitters eine irrationale Steigung besitzt. Ändert man nun die Orientierung, also die Steigung, des physikalischen Raumes bezogen auf das Kristallgitter zu einem rationalen Wert, erhält man eine eindimensionale periodische Abfolge von kurzen und langen Segmenten (S und L). Das ist einsehbar, da der physikalische Raum  $E_{\parallel}$  das Gitter nun in periodischen Abständen unendlich oft schneidet. Periodische Approximanten haben infolgedessen eine Einheitszelle, deren Länge mit ansteigender Ordnung der Folgenglieder zunimmt und für  $n \rightarrow \infty$  ins Unendliche geht.

## 2.4.2 Periodische Approximanten

Um periodische Approximanten eines gegebenen Quasikristalls zu konstruieren, führen wir eine geringfügige Verallgemeinerung der zuvor eingeführten Methode der atomaren Hyperflächen durch. Zusätzlich zu  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$  wird noch ein (nicht notwendigerweise zu  $E_{\parallel}$  paralleler) dazwischenliegender Schnitthyperraum  $E_c$  eingeführt, der die selbe Dimension  $d_{\parallel}$  wie  $E_{\parallel}$  besitzt. Man führt nun anstatt eines Schnitts der Hyperflächen  $\sigma$  mit  $E_{\parallel}$  einen Schnitt der Hyperflächen  $\sigma$  mit  $E_c$  aus und projiziert in einem weiteren Schritt die entstandene Schnittmenge entlang des Unterraumes  $E_{\perp}$  auf den Unterraum  $E_{\parallel}$ . Bei dieser Abwandlung der Methode der atomaren Hyperflächen werden der Schnitt, der dazu dient, unabhängig vom Rest die Schnittmenge zu generieren, und die Projektion in zwei separaten Schritten durchgeführt. Hat  $E_c$  eine rationale Orientierung bezüglich des Gitters  $\Lambda$ , d.h. Gitterpunkte  $\xi \in \Lambda$  sind in  $E_c$  enthalten oder spannen diesen auf, erhält man eine periodische Struktur auf  $E_{\parallel}$ . Periodische Strukturen kann man äquivalent zur rationalen Orientierung des Schnitthyperraums  $E_c$  auch durch eine Verzerrung des  $n$ -dimensionalen Gitters erhalten. Im nächsten Abschnitt soll diese Konstruktionsmethode, die als Verzerrungs- oder Schermethode bezeichnet wird, hergeleitet und eingeführt werden. Die Herleitung stützt sich auf die Ausarbeitung von [10].

## 2.4.3 Die Herleitung der Schermethode

Die Grundidee der Schermethode besteht darin, alternativ zur Einführung einer Schnitthyperfläche  $E_c$  und der Projektion der Schnittpunkte auf den Parallelraum  $E_{\parallel}$ , eine Scherung des Gitters  $\Lambda$  parallel zum orthogonalen Raum  $E_{\perp}$  durchführen, die den Raum  $E_c$  in  $E_{\parallel}$  überführt, d.h. alle Punkte des Raumes  $E_c$  liegen nach dem Verzerren des Gitters auf dem Raum  $E_{\parallel}$ . Der Einfachheit halber wird im Folgenden angenommen, dass die atomaren Hyperflächen  $\sigma$  parallel zum Raum  $E_{\perp}$  sind, d.h. ( $E_{\sigma} = E_{\perp}$ ).

Zur mathematischen Beschreibung dieser Transformation definieren wir eine  $n \times n$  Matrix  $M_{\alpha,\beta}$ , deren Reihen die Koordinaten der Basisvektoren der Unterräume  $E_{\alpha}$  und  $E_{\beta}$  enthalten, wobei die beiden Unterräume eine direkte Zerlegung des  $\mathbb{R}^n$  sind ( $\mathbb{R}^n = E_{\alpha} \oplus E_{\beta}$ ).

Zum Beispiel hat die Matrix  $M_{\parallel,\perp}$  mit  $E_{\parallel} \oplus E_{\perp} = \mathbb{R}^n$  und Dimensionen  $d_{\parallel}$  und  $d_{\perp} = n - d_{\parallel}$  die Form

$$M_{\parallel,\perp} = \begin{pmatrix} e_{1,1}^{\parallel} & e_{2,1}^{\parallel} & \cdots & e_{n,1}^{\parallel} \\ e_{1,2}^{\parallel} & e_{2,2}^{\parallel} & \cdots & e_{n,2}^{\parallel} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1,d_{\parallel}}^{\parallel} & e_{2,d_{\parallel}}^{\parallel} & \cdots & e_{n,d_{\parallel}}^{\parallel} \\ e_{1,1}^{\perp} & e_{2,1}^{\perp} & \cdots & e_{n,1}^{\perp} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1,n-d_{\parallel}}^{\perp} & e_{2,n-d_{\parallel}}^{\perp} & \cdots & e_{n,n-d_{\parallel}}^{\perp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1^{\parallel t} \\ \mathbf{e}_2^{\parallel t} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{d_{\parallel}}^{\parallel t} \\ \mathbf{e}_1^{\perp t} \\ \vdots \\ \mathbf{e}_{n-d_{\parallel}}^{\perp t} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

wobei  $\mathbf{e}_i^{\parallel,\perp}$  die Basisvektoren der Unterräume  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$  sind. Lässt man die Matrix  $M_{\parallel,\perp}$  auf ein Element  $\boldsymbol{\xi}$  des Gitters  $\Lambda$  wirken, erhält man einen Vektor, dessen Komponenten genau die Skalarprodukte des Gittervektors mit den oben genannten Basisvektoren sind. Somit also die Projektion des Gittervektors auf die Basis der Unterräume. Die so definierte Matrix  $M_{\parallel,\perp}$  ist damit eine Basiswechsellmatrix.

$$M_{\parallel,\perp} \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \pi^{\parallel} \boldsymbol{\xi} \\ \pi^{\perp} \boldsymbol{\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{e}_1^{\parallel}, \boldsymbol{\xi} \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{e}_{d_{\parallel}}^{\parallel}, \boldsymbol{\xi} \rangle \\ \langle \mathbf{e}_1^{\perp}, \boldsymbol{\xi} \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{e}_{n-d_{\parallel}}^{\perp}, \boldsymbol{\xi} \rangle \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Bei der Schertransformation soll nun jeder Gitterpunkt  $\boldsymbol{\xi} \in \Lambda$  um Richtung und Betrag des Vektors  $-\pi^{\perp} \boldsymbol{\zeta}$  verschoben werden, wobei  $\boldsymbol{\zeta}$  der Schnittpunkt der Schnittebene  $E_c$  mit der atomaren Hyperfläche  $\sigma$  durch den Gitterpunkt  $\boldsymbol{\xi}$  ist (siehe Abbildung 2.3).

Für  $\boldsymbol{\zeta}$  gilt:

$$\pi_{c^{\perp}} \boldsymbol{\zeta} = 0 \wedge \pi^{\parallel} \boldsymbol{\zeta} = \pi^{\parallel} \boldsymbol{\xi} \quad \Rightarrow \quad M_{\parallel,c^{\perp}} \boldsymbol{\zeta} = \begin{pmatrix} \pi^{\parallel} \boldsymbol{\zeta} \\ \pi^{\perp} \boldsymbol{\zeta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi^{\parallel} \boldsymbol{\xi} \\ 0 \end{pmatrix} = M_{\parallel,\perp} \pi^{\parallel} \boldsymbol{\xi} \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{\zeta} = M_{\parallel,c^{\perp}}^{-1} M_{\parallel,\perp} \pi^{\parallel} \boldsymbol{\xi} \quad (2.16)$$

Die Schertransformation, die durch die Relation  $\Upsilon \boldsymbol{\xi} = -\pi^{\perp} \boldsymbol{\zeta}$  festgelegt wird, ist damit über die Matrix

$$\Upsilon = -\pi^{\perp} M_{\parallel,c^{\perp}}^{-1} M_{\parallel,\perp} \pi^{\parallel} \quad (2.17)$$



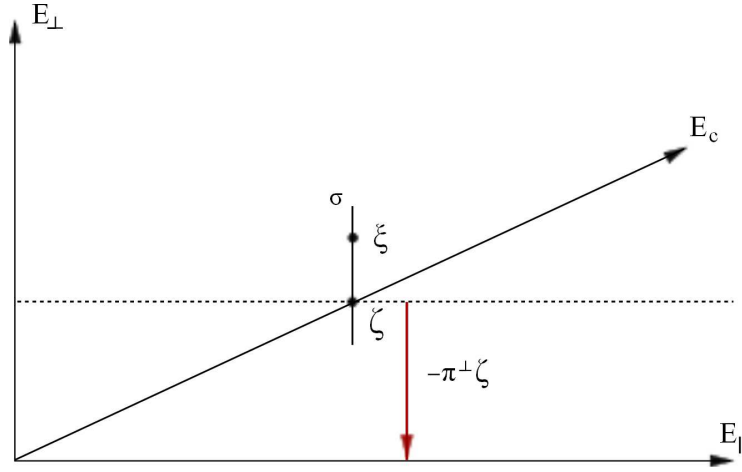


Abbildung 2.3: Veranschaulichung zur Scherung des Hypergitters. Der Gitterpunkt  $\xi$  wird um den Betrag des Vektors  $-\pi^\perp \zeta$  (rot) entlang von  $E_\perp$  verschoben.  $\zeta$  kennzeichnet den Schnittpunkt von  $E_c$  mit der atomaren Hyperfläche  $\sigma$ .

gegeben. Ausgedrückt in der symmetrieangepassten Basis  $\{B_\parallel, B_\perp\}$  der Unterräume  $E_\parallel$  und  $E_\perp$  erhält man

$$\Upsilon_{\parallel,\perp} = -M_{\parallel,\perp} \pi^\perp M_{\parallel,\perp}^{-1} \cdot M_{\parallel,c^\perp}^{-1} M_{\parallel,\perp} \cdot M_{\parallel,\perp} \pi^\parallel M_{\parallel,\perp}^{-1} \quad (2.18)$$

Nun wollen wir uns einige Gedanken über das Aussehen der Schermatrix  $\Upsilon$  machen und betrachten Gleichung (2.18) in Blöcken. Für die Blöcke  $M_{\parallel,\perp} \pi^\perp M_{\parallel,\perp}^{-1}$  und  $M_{\parallel,\perp} \pi^\parallel M_{\parallel,\perp}^{-1}$  lässt sich schnell einsehen, dass die Darstellung der Projektoren auf die Unterräume, die durch die symmetrieangepassten Basisvektoren aufgespannt werden, in dieser Basis Blockmatrixform haben, wobei die Blockmatrizen Einheitsmatrizen  $[I]_{d_\parallel \times d_\parallel}$  (bzw.  $[I]_{d_\perp \times d_\perp}$ ) entsprechender Dimensionen sind:

$$M_{\parallel,\perp} \pi^\parallel M_{\parallel,\perp}^{-1} = \begin{pmatrix} [I]_{(d_\parallel \times d_\parallel)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_{\parallel,\perp} \pi^\perp M_{\parallel,\perp}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & [I]_{(d_\perp \times d_\perp)} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Unter Ausnutzung der Relation

$$M_{\parallel,c^\perp}^{-1} = M_{c^\perp,\perp}^t \cdot A \quad (2.20)$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} [e_\parallel \cdot e_c]_{(d_\parallel \times d_\parallel)}^{-1} & 0 \\ 0 & [e_\perp \cdot e_{c^\perp}]_{(d_\perp \times d_\perp)}^{-1} \end{pmatrix},$$

die im Anhang A bewiesen wird, lässt sich für den Block  $M_{\parallel,c^\perp}^{-1} M_{\parallel,\perp}$  die Darstellung

$$M_{\parallel,c^\perp}^{-1} M_{\parallel,\perp} = \begin{pmatrix} [I]_{(d_\parallel \times d_\parallel)} & 0 \\ \varepsilon_{(d_\perp \times d_\parallel)} & \gamma_{(d_\perp \times d_\perp)} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

ableiten.  $\gamma_{(d_\perp \times d_\perp)}$  ist hierbei eine  $(d_\perp \times d_\perp)$ -Matrix, deren explizite Form für die weitere Betrachtung nicht benötigt wird. Mit (2.19) und (2.21) hat  $\Upsilon_{\parallel, \perp}$  die einfache Blockform

$$\Upsilon_{\parallel, \perp} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \varepsilon_{(d_\perp \times d_\parallel)} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ [e_\perp \cdot e_c]_{(d_\perp \times d_\parallel)}^{-1} \cdot [e_\parallel \cdot e_c]_{(d_\parallel \times d_\parallel)}^{-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

$\varepsilon_{(d_\perp \times d_\parallel)}$  wird als Schermatrix oder Verzerrungstensor bezeichnet. Ein Gitterpunkt  $\boldsymbol{\xi} = \{\mathbf{x}_\parallel, \mathbf{x}_\perp\} \in \Lambda$  dargestellt in der symmetrieangepassten Basis  $\{B_\parallel, B_\perp\}$  geht damit unter der Schertransformation in

$$S\boldsymbol{\xi} = (I + \Upsilon_{\parallel, \perp}) \boldsymbol{\xi} = S \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\parallel \\ \mathbf{x}_\perp \end{pmatrix}_B = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\parallel \\ \mathbf{x}_\perp - \varepsilon \mathbf{x}_\parallel \end{pmatrix}_B \quad (2.23)$$

über. Mit Formel (2.22) können wir nun leicht die Schermatrix  $\varepsilon$  aufstellen. Dazu wählt man  $d_\parallel$  Punkte  $\{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \dots, \boldsymbol{\alpha}_{d_\parallel}\}$ , die Gittervektoren des direkten Gitters  $\Lambda$  sind und den Schnittraum  $E_c$  definieren<sup>1</sup> und bestimmt die Darstellung dieser Vektoren in der symmetrieangepassten Basis

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \begin{pmatrix} \alpha_{i\parallel,1} \\ \vdots \\ \alpha_{i\parallel,d_\parallel} \\ \alpha_{i\perp,1} \\ \vdots \\ \alpha_{i\perp,d_\perp} \end{pmatrix}_B = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{\parallel,i} \\ \mathbf{a}_{\perp,i} \end{pmatrix}_B \quad (2.24)$$

Die  $d_\parallel$  Spaltenvektoren  $\mathbf{a}_{\parallel,i}$  bilden die  $(d_\parallel \times d_\parallel)$ -Matrix  $A = [e_\parallel \cdot e_c]_{(d_\parallel \times d_\parallel)}$  und die die  $d_\parallel$  Spaltenvektoren  $\mathbf{a}_{\perp,i}$  die  $(d_\perp \times d_\parallel)$ -Matrix  $A' = [e_\perp \cdot e_c]_{(d_\perp \times d_\parallel)}$ . Dann gilt für die Schermatrix

$$\varepsilon = A' \cdot A^{-1}. \quad (2.25)$$

---

<sup>1</sup>Da  $E_c$  wie  $E_\parallel$  die Dimension  $d_\parallel$  hat, benötigt man  $d_\parallel$  Vektoren, um diesen aufzuspannen.

# Kapitel 3

## Oktagonale Strukturen

Die in den vorherigen Kapiteln bereitgelegten Werkzeuge zur Konstruktion von Quasi- und Approximantenstrukturen sollen nun in diesem Abschnitt dazu verwendet werden, einen oktagonalen Quasikristall und seine Approximanten zu konstruieren.

### 3.1 Oktagonale Quasikristalle

Wie schon in den vorigen Abschnitten erwähnt, bedient man sich bei der Konstruktion von Quasikristallen eines höherdimensionalen translationsperiodischen Gitters, dessen Gitterpunkte auf den physikalischen Raum projiziert werden. Die minimale Einbettungsdimension für die die achtzählige Punktsymmetrie mit Translationsperiodizität verträglich ist beträgt nach der Funktion (1.7)  $n = 4$ . Somit beginnen wir mit einem vierdimensionalen kubischen Kristallgitter

$$\Lambda = \{\boldsymbol{\xi} \mid \boldsymbol{\xi} = \sum_{i=1}^4 a_i \mathbf{e}_i \ ; \ a_i \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.1)$$

Das Gitter besitzt als Punktsymmetriegruppe die Gruppe  $C_{8v}$ , welche zugleich die Symmetriegruppe eines Oktagon ist (siehe Abbildung 3.1).

Zur Konstruktion des Projektionsoperators und einer symmetrieangepassten Basis für das Oktagonale Tiling wird daher zunächst eine 4-dim. Matrixdarstellung der Gruppe  $C_{8v}$  und die Charaktertafel dieser Gruppe benötigt. Die Gruppe  $C_{8v}$  zerfällt in 7 Konjugationsklassen. Tabelle 3.1 zeigt die Charaktertafel für Gruppe  $C_{8v}$  und ihre Konjugationsklassen. Eine 4-dim. Matrixdarstellung der Gruppe  $C_{8v}$  wird durch die Elemente

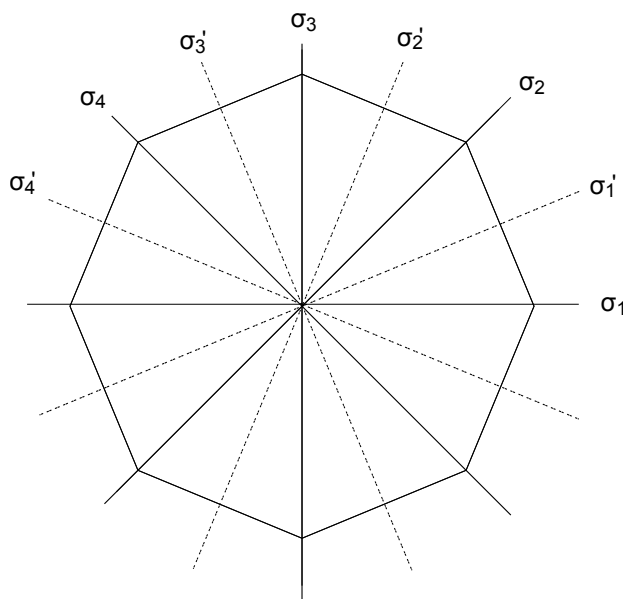


Abbildung 3.1: Oktagon mit der Symmetriegruppe  $C_{8v}$ . Zur Veranschaulichung sind die Spiegelebenen der 8 Spiegelungen von  $C_{8v}$  angegeben.

$$\Gamma_{\text{red}}(c_8) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Gamma_{\text{red}}(\sigma_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

generiert. Das Anwenden der Orthogonalitätsrelation (1.11) für Charaktere zeigt, dass die Darstellung (3.2) in zwei zweidimensionale irreduzible Darstellungen jeweils mit Vielfachheit 1 zerfällt

$$\langle \chi_{\text{red}}, \chi_7 \rangle = \langle \chi_{\text{red}}, \chi_5 \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \Gamma_{\text{red}} = \Gamma_5 \oplus \Gamma_7 \quad (3.3)$$

wobei die Generatoren der irreduziblen Darstellungen  $\Gamma_5$  und  $\Gamma_7$  durch die zweidimensionalen Matrizen

$$\Gamma_5(c_8) = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4) & -\sin(\pi/4) \\ \sin(\pi/4) & \cos(\pi/4) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$\Gamma_7(c_8) = \begin{pmatrix} \cos(3\pi/4) & -\sin(3\pi/4) \\ \sin(3\pi/4) & \cos(3\pi/4) \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$$\Gamma_5(\sigma_1) = \Gamma_7(\sigma_1) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$[16]C_{8v}$	$e$	$[2]c_8$	$[2]c_8^2$	$[2]c_8^3$	$c_8^4$	$[4]\sigma$	$[4]\sigma'$	Konjugationsklassen
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1	$[e]=\{e\}$
$\Gamma_2$	1	1	1	1	1	-1	-1	$[c_8]=\{c_8, c_8^7\}$
$\Gamma_3$	1	-1	1	-1	1	1	-1	$[c_8^2]=\{c_8^3, c_8^5\}$
$\Gamma_4$	1	-1	1	-1	1	-1	1	$[c_8^3]=\{c_8^3, c_8^5\}$
$\Gamma_5$	2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	-2	0	0	$[c_8^4]=\{c_8^4\}$
$\Gamma_6$	2	0	-2	0	2	0	0	$[\sigma]=\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4\}$
$\Gamma_7$	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	-2	0	0	$[\sigma']=\{\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \sigma'_4\}$
$D_{\text{red}}$	4	0	0	0	-4	0	0	

Tabelle 3.1: Charaktertafel der Gruppe  $C_{8v}$  und die Charaktere der reduziblen Darstellung  $D_{\text{red}}$ . Die rechte Spalte zeigt die Konjugationsklassen der Gruppe  $C_{8v}$

gegeben sind. Mit der im ersten Kapitel vorgestellten Methode der Projektionsoperatoren lassen sich nun die schwachen Projektoren bestimmen, die jeweils auf die invarianten zweidimensionalen Unterräume der irreduziblen Darstellungen projizieren. Diese ergeben sich unter Verwendung der Darstellung (3.2) zu

$$P^{(5)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} = \pi^{\parallel} \quad (3.7)$$

$$P^{(7)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} = 1 - \pi^{\parallel} = \pi^{\perp}. \quad (3.8)$$

$P^{(5)}$  wirkt hierbei als Projektor auf den Parallelraum  $E_{\parallel}$  und  $P^{(7)}$  als Projektor auf den Orthogonalraum  $E_{\perp}$ . Mit den irreduziblen Darstellungen (3.6), (3.4), (3.5) und der Darstellung (3.2) erhält man folgende starken Projektionsoperatoren

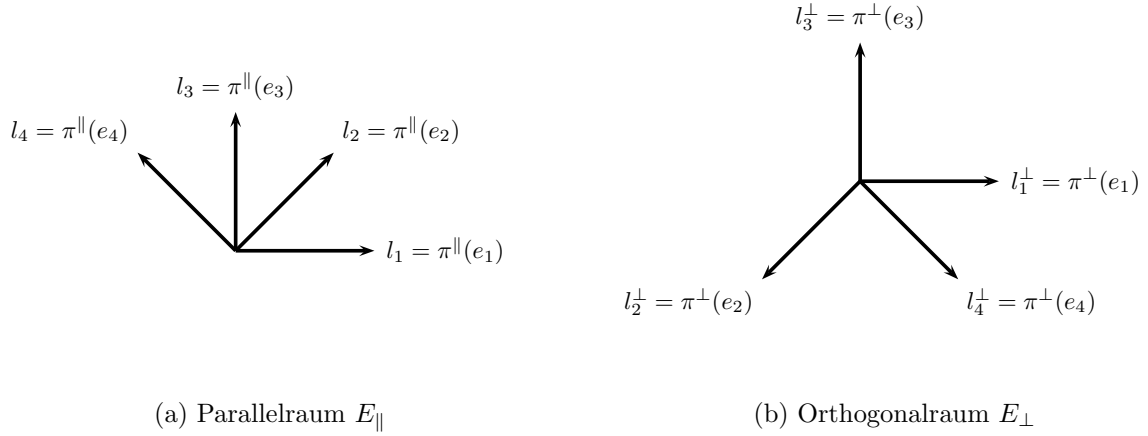


Abbildung 3.2: Projektionen der Einheitsvektoren in die jeweiligen invarianten Unterräume.

$$\begin{aligned}
 P_{11}^{(5)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & P_{21}^{(5)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
 P_{11}^{(7)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & P_{21}^{(7)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ -1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Nach Formel (1.25) lässt sich nun eine symmetrieangepasste Basis bestimmen, die in unserem Fall die Form

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_4 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

besitzt. Die Vektoren  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  bilden eine Basis für den physikalischen Raum  $E_{\parallel}$  und  $\mathbf{b}_3$  und  $\mathbf{b}_4$  eine für den Raum  $E_{\perp}$ . Abbildung 3.2 zeigt, wie die Projektionen der Einheitsvektoren  $\pi^{\parallel}(\mathbf{e}_i) = \mathbf{l}_i$  und  $\pi^{\perp}(\mathbf{e}_i) = \mathbf{l}_i^{\perp}$  auf den Parallel- bzw. Orthogonalraum aussehen. Um die Menge zu erhalten, die den Quasikristall definiert, projizieren wir alle Gitterpunkte  $\boldsymbol{\xi} \in \Lambda$ , deren Orthogonalprojektion  $\pi^{\perp}(\boldsymbol{\xi})$  im Akzeptanzbereich  $\mathcal{A}$  liegt ( $\pi^{\perp}(\boldsymbol{\xi}) \in \mathcal{A}$ ), auf den physikalischen Raum  $E_{\parallel}$ . In Abbildung 3.3 ist ein Ausschnitt des physikalischen Raumes

mit der projizierten Punktmenge zu sehen. Der Rand des Akzeptanzbereiches wird von den Orthogonalprojektionen  $\pi^\perp(\boldsymbol{\xi}_i)$  der Vektoren

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_1 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_3 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \boldsymbol{\xi}_5 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_6 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_7 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\xi}_8 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.11)$$

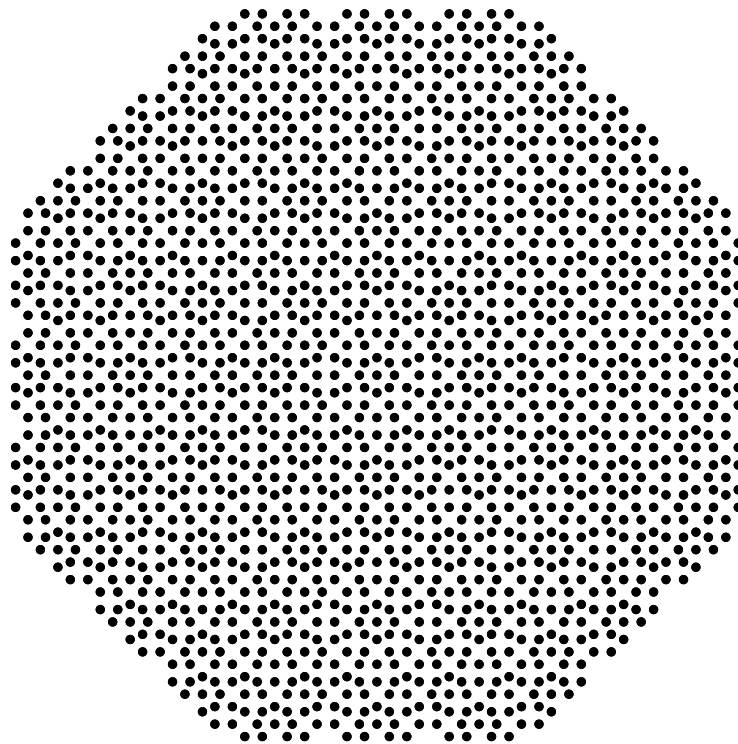
der Voronoizelle, die jeweils in die Ecken eines Oktagon zeigen, aufgespannt. Die Projektion aller Gitterpunkte  $\mathcal{L}^\perp = \pi^\perp(\boldsymbol{\xi})$ , die im Streifen  $S_i$  liegen, auf den Orthogonalraum, bildet, im Gegensatz zu Approximantenstrukturen, bei denen  $\mathcal{L}^\perp$  wiederum ein Gitter ist, eine überall dichte Menge in  $E_\perp$ . Um das Tiling des oktagonalen Quasikristalls zu erhalten projiziert man die Verbindungsstrecken zwischen den Gitterpunkten  $\boldsymbol{\xi}$ , das bedeutet man verbindet im Parallelraum diejenigen Punkte  $\pi^\parallel(\boldsymbol{\xi})$  miteinander, deren Abstand im vierdimensionalen genau eins beträgt. Das daraus resultierende Muster zeigt Abbildung 3.3 rechts. Dieses Tiling ist das bekannte Ammann-Beenker-Tiling.

## 3.2 Approximanten

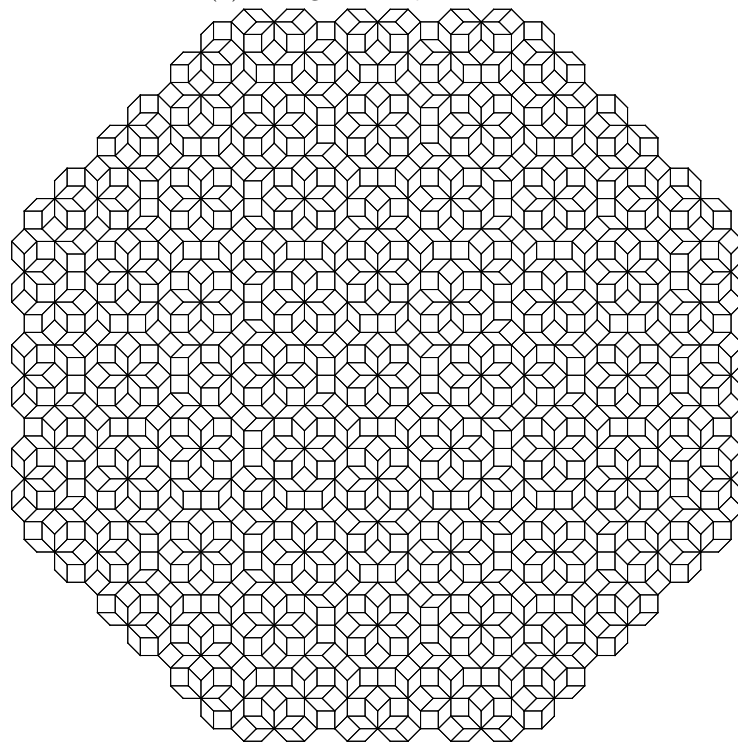
In den folgenden Abschnitten wird die Konstruktion der Approximanten des oktagonalen Tilings, die in dieser Arbeit verwendet worden sind besprochen. Hierbei werden zwei Ansätze erläutert.

### 3.2.1 Verzerrung des Hypergitters

Der erste Ansatz besteht darin, die Approximanten ausgehend von einer gewählten Verzerrung des vierdimensionalen Hypergitters mit der im Kapitel 2 eingeführten Methode zu konstruieren. Da ein zweidimensionaler Approximant konstruiert werden soll, beginnt man mit der Wahl von zwei Punkten  $\mathbf{p}_1$  und  $\mathbf{p}_2$  des Hypergitters  $\Lambda$ , die die zweidimensionale Schnittebene  $E_c$  aufspannen. Im Allgemeinen ist jede beliebige Wahl an Gitterpunkten möglich. Wir wählen jedoch die Punkte  $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_x$  und  $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_y$  so, dass ihre Projektionen im physikalischen Raum in Richtung der  $x$ - und  $y$ -Achsen von  $E_\parallel$  zeigen, d.h. parallel zu diesen sind. Betrachtet man Abbildung 3.2, so lässt sich leicht nachvollziehen, dass die



(a) Oktagonaler Quasikristall



(b) Oktagonales Tiling in  $E_{||}$

Abbildung 3.3: Mit dem Projektionsformalismus konstruierte oktagonale Quasistrukturen in  $E_{||}$ . Oben sieht man die Punktmenge, die durch Projektion der Gitterpunkte  $\xi \in \Lambda$  mit  $\pi^\perp(\xi) \in \mathcal{A}$  entsteht, u die Projektion der Verbindungsstrecken bzw. aller zweidimensionaler Oberflächenelemente.

---



Parallelprojektionen der Gittervektoren

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_x &= k\mathbf{e}_1 + l(\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_4) = \begin{pmatrix} \frac{k}{\sqrt{2}} + l \\ 0 \\ \frac{k}{\sqrt{2}} - l \\ 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}} \\ \mathbf{p}_y &= m\mathbf{e}_3 + l(\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_4) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{m}{\sqrt{2}} + n \\ 0 \\ -\frac{m}{\sqrt{2}} + n \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}\end{aligned}\quad (3.12)$$

diese Bedingung erfüllen. Die Vektordarstellung in (3.12) zeigt die Darstellung von  $\mathbf{p}_x$  und  $\mathbf{p}_y$  bezüglich der symmetrieangepassten Basis (3.10). Mit (3.12) und dem Konstruktionschema (2.25) hat der Verzerrungstensor  $\varepsilon$  die Form

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} -\frac{k}{l} + \sqrt{2} & 0 \\ \frac{k}{l} + \sqrt{2} & \frac{m}{n} - \sqrt{2} \\ 0 & \frac{m}{n} + \sqrt{2} \end{pmatrix}\quad (3.13)$$

und ist durch die spezielle Wahl (3.12) der Gittervektoren symmetrisch.  $\frac{k}{l}$  und  $\frac{m}{n}$  werden als Folgen rationaler Zahlen so gewählt, dass sie für  $n \rightarrow \infty$  gegen  $\sqrt{2}$  konvergieren. Infolgedessen gehen die Komponenten des Verzerrungstensor bei zunehmender Annäherung gegen Null und der Approximant strebt gegen die zugrundeliegende quasiperiodische Struktur. Mit dem in Abschnitt 2.4.1 vorgestellten Konstruktionschema erhält man für  $\frac{k}{l}$  und  $\frac{m}{n}$  die Folgenglieder

$$\alpha^{(1)} = \frac{1}{1}, \quad \alpha^{(2)} = \frac{3}{2}, \quad \alpha^{(3)} = \frac{7}{5}, \quad \alpha^{(4)} = \frac{17}{12}, \quad \dots, \quad \alpha^{(n)} = \frac{q_n + q_{n-1}}{q_n}\quad (3.14)$$

wobei  $q_n$  genau die Pell-Sequenz<sup>1</sup>

$$q_n = \begin{cases} 0 & \text{falls } n = 0 \\ 1 & \text{falls } n = 1 \\ 2q_{n-1} + q_{n-2} & \text{sonst} \end{cases}\quad (3.15)$$

ist. Abbildung 3.4 zeigt ein Beispiel für einen mit obigen Überlegungen konstruierten Approximanten quadratischer Symmetrie, d.h. mit der Symmetriegruppe  $C_{4v}$ , Abbildung

<sup>1</sup>Auch als Octonacci-Folge bekannt.

3.5 einen mit rechteckiger Symmetriegruppe ( $C_{2v}$ ). Einen Approximanten mit Symmetriegruppe  $C_{4v}$  erhält man für den Fall, dass  $k = m$  und  $l = n$  ist. Sind  $k, l, m, n$  verschieden führt die Verzerrung zu einem rechteckigen Approximanten mit der Symmetriegruppe  $C_{2v}$ . Die Kanten der Einheitszelle des jeweiligen Approximanten haben die Längen

$$\|\pi^{\parallel}(\mathbf{p}_x)\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (k + \sqrt{2}l) \quad (3.16)$$

$$\|\pi^{\parallel}(\mathbf{p}_y)\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (m + \sqrt{2}n). \quad (3.17)$$

Mit (3.17) und (3.16) besitzen Approximanten mit Symmetriegruppe  $C_{4v}$  ( $k = m, l = n$ ), aufgrund von  $\|\pi^{\parallel}(\mathbf{p}_x)\| = \|\pi^{\parallel}(\mathbf{p}_y)\|$  quadratische Einheitszellen, während Approximanten der Symmetriegruppe  $C_{2v}$  rechteckige Einheitszellen aufweisen.

### 3.2.2 Stratum

In einem weiteren Ansatz werden die Approximanten über die Bestimmung des  $\mathcal{H}$ -Stratums in  $\mathcal{G}$ , das durch die Bedingungen (1.19), (1.20) und (1.22) festgelegt ist, konstruiert. Bei Approximanten des oktagonalen Tiling wird das Stratum einer Untergruppe von  $\mathcal{G} = C_{8v}$  bestimmt. In dieser Arbeit sind es die Untergruppen  $C_{4v}$  und  $C_{2v}$ , die verwendet worden sind. Für Approximanten mit der Symmetriegruppe  $C_{4v}$  existieren zwei Sorten von Tilings [10]. Die Erste ist durch die Projektionsoperatoren bzw. das Stratum

$$\pi_{\sigma_1\sigma_2} = \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+a & b & 0 & -b \\ b & 1-a & b & 0 \\ 0 & b & 1-a & b \\ -b & 0 & b & 1+a \end{pmatrix} \left| \begin{array}{l} a = \sin(2\varphi), \\ b = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(2\varphi) \end{array} \right. \right\} \quad (3.18)$$

gegeben. Diesem liegen die Spiegelungen an Spiegelebenen, die entlang den Verbindungsstrecken zwischen Mittelpunkt und Eckpunkt eines Oktagon verlaufen, zugrunde und werden durch die vierdimensionale Darstellung

$$D(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

generiert.

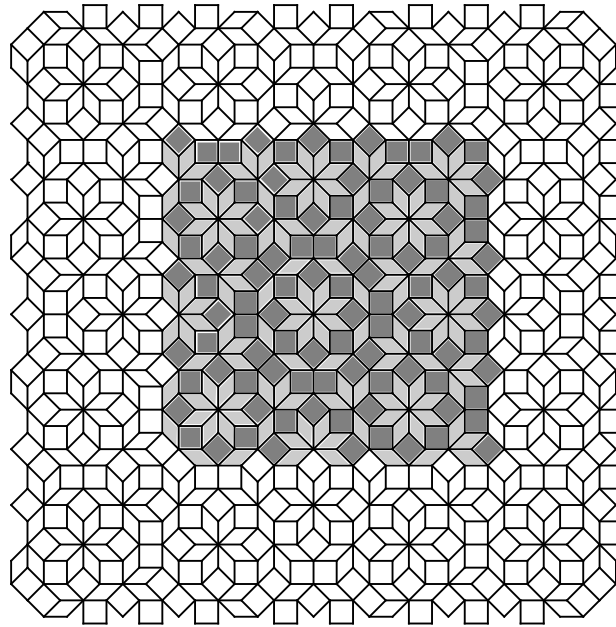
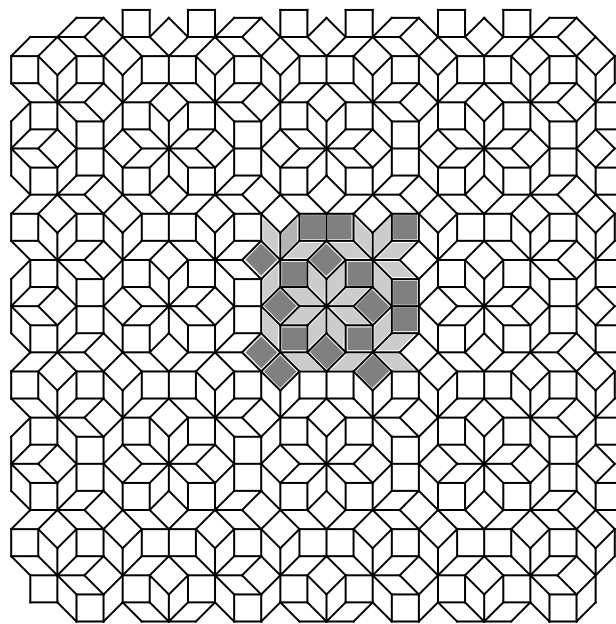
(a)  $(7,5,7,5)$ (b)  $(3,2,3,2)$ 

Abbildung 3.4: Ausschnitte aus den Approximantenstrukturen mit Symmetriegruppe  $C_{4v}$ . Eine mögliche Wahl der Einheitszelle ist farblich hervorgehoben.

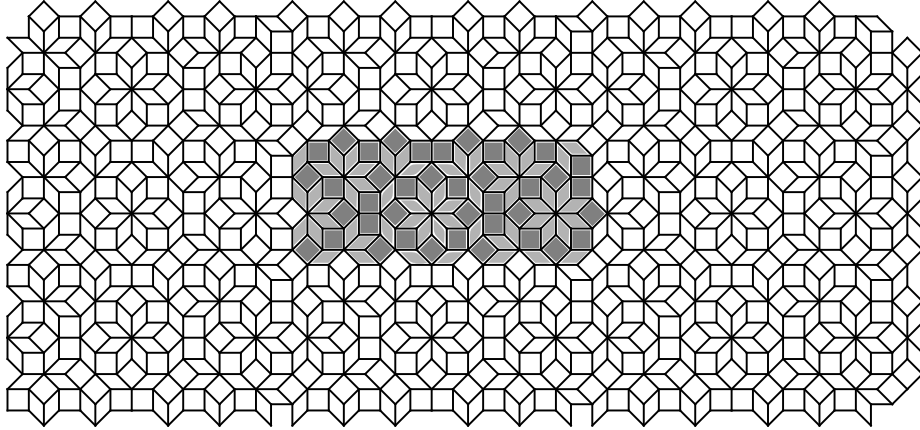


Abbildung 3.5: Ausschnitt aus der Approximantenstruktur  $(7,5,3,2)$  mit Symmetriegruppe  $C_{2v}$ . Eine mögliche Wahl der Einheitszelle ist farblich unterlegt.

Das Stratum

$$\pi_{\sigma'_1 \sigma'_2} = \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & a & 0 & -b \\ a & 1 & b & 0 \\ 0 & b & 1 & a \\ -b & 0 & a & 1 \end{pmatrix} \mid a = \cos(2\varphi + \frac{\pi}{4}), \quad b = \sin(2\varphi + \frac{\pi}{4}) \right\} \quad (3.20)$$

entspricht der Menge an Tilings der zweiten Sorte. Die Spiegelebenen verlaufen entlang der Kantenhalbierenden des Oktagon (siehe Abbildung 3.1). Eine erzeugende Darstellung dieser Spiegelungen ist

$$D(\sigma'_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Die Strata (3.18) und (3.20) sind von einem Parameter  $\varphi$  abhängig und beinhalten sowohl die periodischen als auch die quasiperiodischen Approximanten. Periodische Approximanten der ersten Sorte erhält man, falls

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{p}{2q\sqrt{2}}\right) \quad \text{und} \quad p^2 + 8q^2 = n^2 \quad (3.22)$$

mit  $p, q, n \in \mathbb{Z}$  gilt (siehe Anhang B). Die Gitterkonstante beträgt

$$g = \frac{n + p + 2q\sqrt{2}}{ggT(n + p, q)}. \quad (3.23)$$

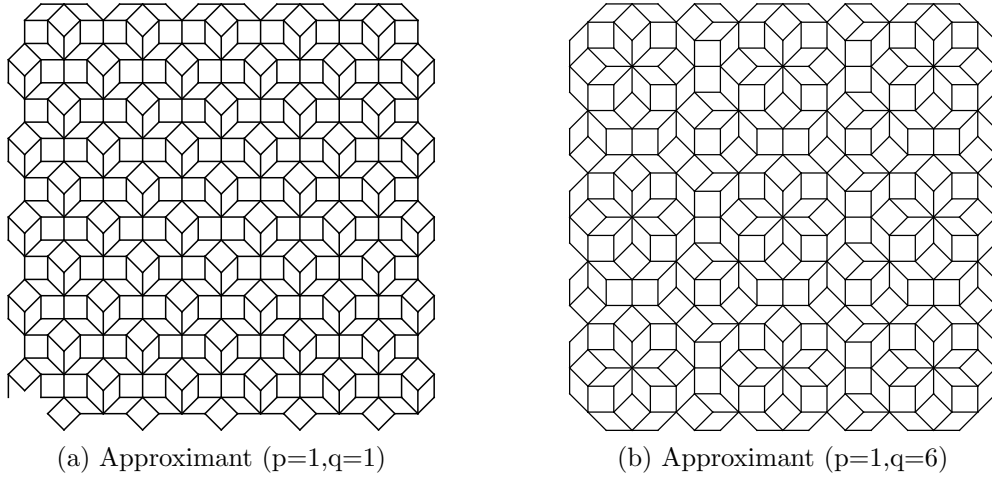


Abbildung 3.6: Ausschnitte aus Approximantenstrukturen des Stratum  $\pi_{\sigma_1\sigma_2}$  mit Symmetriegruppe  $C_{4v}$ .

Periodische Approximanten der zweiten Sorte unter den Einschränkungen:

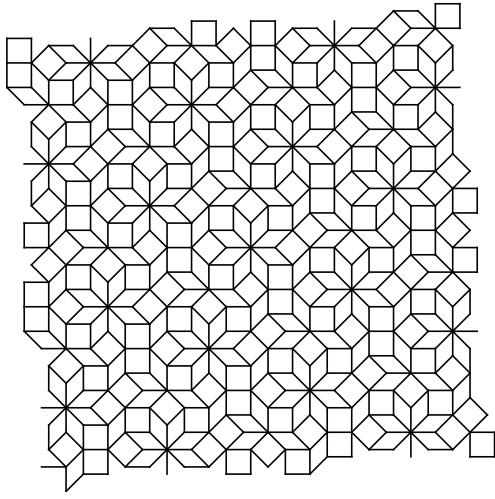
$$\varphi = \frac{1}{2}(\arctan\left(\frac{p}{q}\right) - \frac{\pi}{4}), \quad p, q, n \in \mathbb{Z}, \quad p^2 + q^2 = n^2 \quad (3.24)$$

mit der Gitterkonstanten

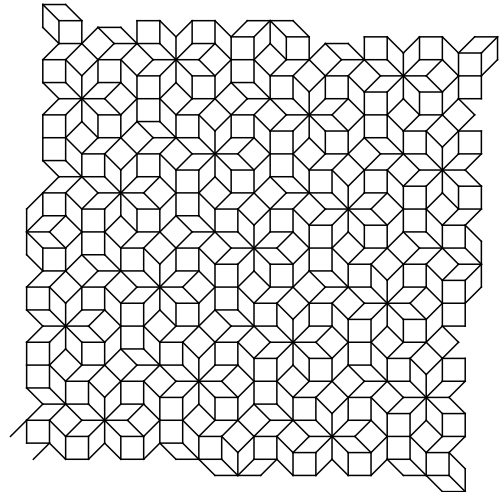
$$g = \frac{1}{2}(n - p) + \sqrt{2}q \quad . \quad (3.25)$$

Abbildung 3.6 zeigt zwei Approximantenstrukturen der ersten Sorte. Abbildung 3.7 zeigt zwei Approximantenstrukturen der zweiten Sorte von Tilings. Beide Strukturen erhält man, wenn die Punkte  $\pi_c^\perp(\boldsymbol{\xi}) = (1 - \pi_{\sigma_1\sigma_2, \sigma'_1\sigma'_2})(\boldsymbol{\xi})$ , die im Akzeptanzbereich  $\mathcal{A}_c = \pi_{\sigma_1\sigma_2, \sigma'_1\sigma'_2}^\perp(\mathcal{A})$  liegen in den Parallelraum projiziert werden ( $\pi^\parallel(\boldsymbol{\xi})$ ). In beiden Abbildungen ist der Akzeptanzbereich um den Ursprung von  $E_\perp^c$  zentriert.

In beiden Fällen erhält man für  $\varphi = 0$  die Projektionsmatrix (3.7) des oktagonalen Quasikristalls. (3.18) und (3.20) zerfallen jeweils in zwei weitere Strata der Symmetriegruppe  $C_{2v}$  mit zwei unabhängigen Parametern  $\theta$  und  $\varphi$ :



(a) Approximant (p=3,q=4)



(b) Approximant (p=4,q=3)

Abbildung 3.7: Ausschnitte aus Approximantenstrukturen des Stratum  $\pi_{\sigma'_1\sigma'_2}$  mit Symmetriegruppe  $C_{4v}$ .

$$\begin{aligned}
 \pi_{\sigma_1} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+a & b & 0 & -b \\ b & 1-c & d & e \\ 0 & d & 1-f & d \\ -b & e & d & 1-c \end{pmatrix} & \begin{aligned} a &= \sin(2\varphi) \\ b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(2\varphi) \\ c &= \frac{1}{2}(\sin(2\varphi) + \sin(2\theta)) \\ d &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(2\theta) \\ e &= \frac{1}{2}(\sin(2\varphi) - \sin(2\theta)) \\ f &= \sin(2\theta) \end{aligned} & (3.26)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \pi_{\sigma_2} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+c & b & e & -d \\ b & 1-a & b & 0 \\ e & b & 1+c & d \\ -d & 0 & d & 1-f \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \pi_{\sigma'_1} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+c & a & -d & -b \\ a & 1+c & b & d \\ -d & b & 1-c & a \\ -b & d & a & 1-c \end{pmatrix} & \begin{aligned} a &= \cos(2\theta) \cos(2\varphi + \frac{\pi}{4}) \\ b &= \cos(2\theta) \sin(2\varphi + \frac{\pi}{4}) \\ c &= \sin(2\theta) \sin(2\varphi + \frac{\pi}{4}) \\ d &= \sin(2\theta) \cos(2\varphi + \frac{\pi}{4}) \end{aligned} & (3.27)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \pi_{\sigma'_2} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+d & a & c & -b \\ a & 1-d & b & c \\ c & b & 1-d & a \\ -b & c & a & 1+d \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Periodische Approximanten erhält man unter Einschränkungen der Parameter  $\theta$  und  $\varphi$  entsprechend den Bedingungen (3.22) für Spiegelungen  $\sigma_1$ ,  $\sigma_1$  und (3.24) für Spiegelungen

$\sigma'_1, \sigma'_2$ . Im Falle  $\theta = \varphi$  gewinnt man die Strata (3.18) und (3.20) und für  $\theta = \varphi = 0$  den Projektionsoperator (3.7) des oktagonalen Tilings zurück.

### 3.3 Phasonen und Orthogonalraumverschiebungen

Quasikristalle besitzen im Gegensatz zu Kristallen neben den phononischen Freiheitsgraden zusätzliche Freiheitsgrade. Diese werden als phasonische Freiheitsgrade kennzeichnet, und sind auf Verschiebungen entlang des Orthogonalraums zurückzuführen. In der klassischen Elastizitätstheorie der Kontinuumsmechanik wird die Deformation eines Festkörpers, die als phononische Verzerrung bezeichnet wird, durch den Greenschen Verzerrungstensor

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\parallel}} + \frac{\partial u_j^{\parallel}}{\partial \xi_i^{\parallel}} \right), \quad (3.28)$$

wobei  $u_{i,j}^{\parallel}$  für die Komponenten der Verschiebung der anfänglichen Positionskoordinaten  $\xi_{i,j}^{\parallel}$  im physikalischen Raum steht, beschrieben. In einer Erweiterung der Elastizitätstheorie auf Quasikristalle [5] erhält man einen verallgemeinerten Greenschen Verzerrungstensor

$$\underline{\underline{\eta}}^{(n \times n)} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{\varepsilon}} & \underline{\underline{0}} \\ \underline{\underline{\chi}} & \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

der sich aus der von Kristallen bekannten phononischen Verzerrung  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  und der phasonischen Verzerrung  $\underline{\underline{\chi}}$ , die durch Verschiebungen mit Orthogonalraumkomponenten

$$\chi_{ij} = \frac{\partial u_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\parallel}} \quad (3.30)$$

charakterisiert ist, zusammensetzt.

#### 3.3.1 Verschiebung des Akzeptanzbereiches

Betrachtet man eine Verschiebung des Akzeptanzbereiches  $\mathcal{A}$  um eine Orthogonalraumkomponente, so entspricht diese, aufgrund der Definition des Akzeptanzbereiches, einer Verschiebung des Projektionsstreifens im Hyperraum. Die Verschiebung des Projektionsstreifens ist analog zu einer Verschiebung bzw. Translation des Hyperraumgitters entlang dem Orthogonalraum. Die Verschiebung des Akzeptanzbereiches bewirkt, dass einige Orthogonalprojektionen  $\pi^{\perp}(\boldsymbol{\xi})$  der Gitterpunkte den Akzeptanzbereich und damit die entsprechenden Hypergitterpunkte den Projektionsstreifen verlassen und andere hineingeschoben werden. Dabei werden genausoviele Punkte in den Projektionsstreifen hineingeschoben

wie ihn verlassen haben, sodass eine Umverteilung der Struktur die Folge ist. Eine Orthogonalraumverschiebung und damit eine Änderung der Phasonenvariable zeichnet sich im Gegensatz zu einer Änderung der phononischen Variablen, die eine kontinuierliche Änderung der Atomverteilung hervorruft, durch diskrete Atomsprünge aus. Diese werden Phasonenflips genannt.

In diesem Abschnitt soll am Beispiel eines Approximanten veranschaulicht werden, wie sich Verschiebungen

$$x^\perp = x_1 \mathbf{b}_3 + x_2 \mathbf{b}_4 \in E_\perp \quad (3.31)$$

des Akzeptanzbereiches  $\mathcal{A}$  auf die Struktur des Approximanten im physikalischen Raum auswirken. Dazu wird der Orthogonalraum, in dem das Gitter  $\mathcal{L}^\perp$  enthalten ist, in Bereiche, sogenannte Strukturzellen unterteilt. Diese geben an, wie groß eine Verschiebung des Akzeptanzbereiches sein muss, bis neue Gitterpunkte in den Akzeptanzbereich treten, während andere diesen verlassen. Da jeder Punkt des Akzeptanzbereiches dieselbe Verschiebung erfährt genügt es zur Vereinfachung der Betrachtung, den Mittelpunkt des Akzeptanzbereiches als Vertreter von diesem zu wählen. Sobald dieser Referenzpunkt die Kante einer Strukturzelle passiert, werden Phasonenflips im physikalischen Raum herbeigeführt. Abbildung 3.8 zeigt wie sich die Struktur des Approximanten ( $p = 1, q = 2$ ) aus dem Stratum (3.18) in Abhängigkeit von der Verschiebung des Referenzpunktes ändert. Eine Verschiebung des Referenzpunktes innerhalb der vier Strukturzellen, die einen Gitterpunkt  $\pi^\perp(\boldsymbol{\xi})$  umgeben, führt zu einer Drehung der gesamten Struktur um  $\frac{\pi}{2}$ , sodass eine Verschiebung von einer Strukturzelle des einen Gitterpunktes in eine benachbarte Strukturzelle des nächstliegenden Gitterpunktes die Orientierung der Struktur um  $\pi$  ändert.



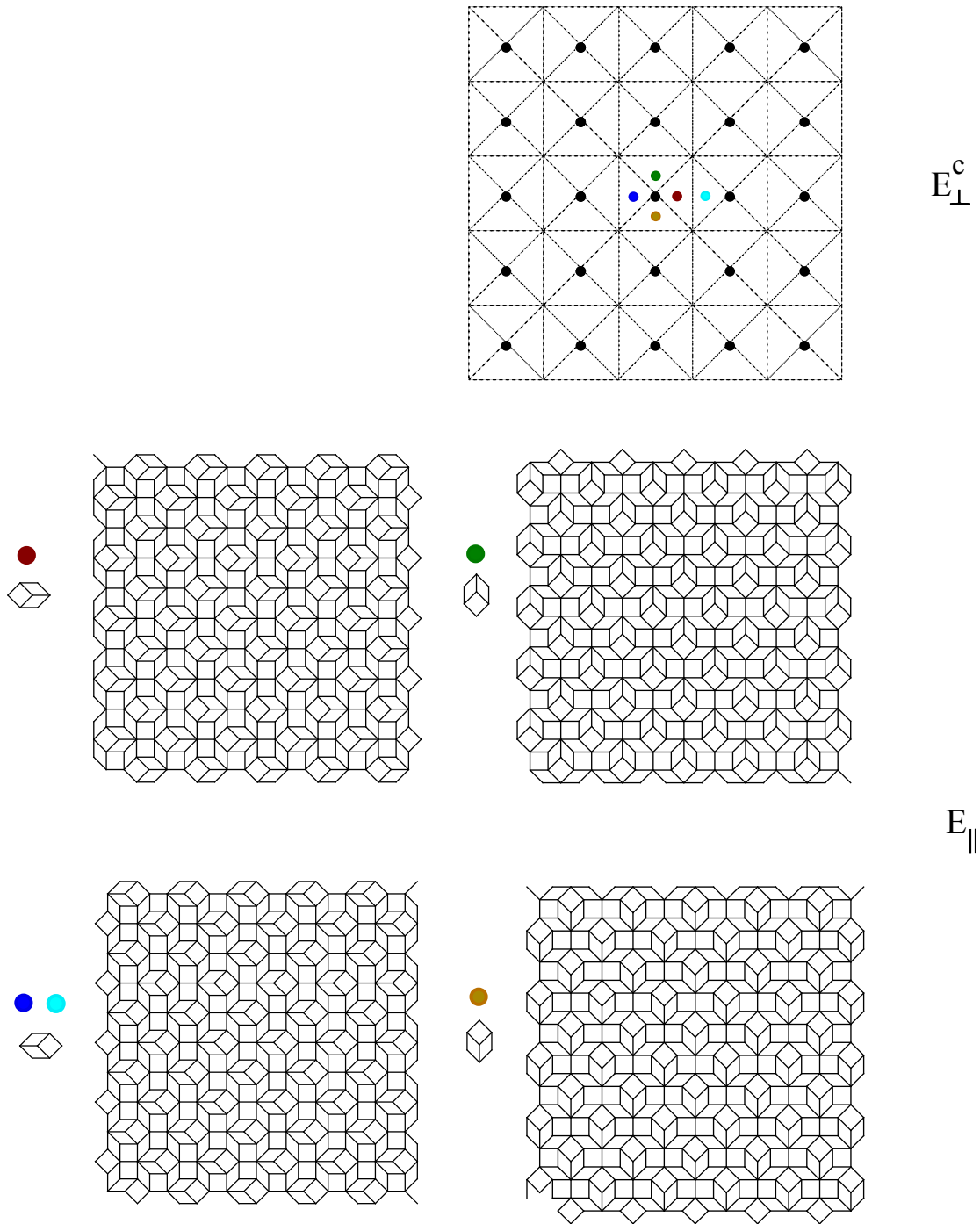


Abbildung 3.8: Approximantenstrukturen des Approximanten ( $p = 1, q = 1$ ) aus dem Stratum  $\pi_{\sigma_1\sigma_2}$  in Abhängigkeit von der Verschiebung des Akzeptanzbereiches. Oben: Der in Strukturzellen eingeteilte Raum  $E_{\perp}^c$  und das durch die Projektion  $\pi_{\sigma_1\sigma_2}^{\perp}(\xi)$  erzeugte Gitter. Unten: Approximantenstrukturen mit entsprechendem Referenzpunkt und Orientierung des Musters.



# Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, Methoden zur Konstruktion von Approximanten zu erarbeiten, mit denen eine Untersuchung der Approximantenstrukturen unter Änderung der Phasenvariable ermöglicht werden soll.

Aufbauend auf einer Charakterisierung von Quasistrukturen wurde zunächst eine Konstruktionsmethode für Approximanten abgeleitet, die aus der Scherung des Hypergitters, das ursprünglich den Ausgangspunkt bei der Konstruktion von Quasistrukturen bildet, resultiert. Hierin wurde gezeigt, wie die dazugehörigen Schermatrizen bestimmt werden können. Im weiteren Verlauf wurde dann beispielgebend am oktagonale Tiling die Konstruktion von Approximanten mithilfe dieser Schermethode diskutiert. Ferner wurden ausgehend von der Forderung, dass die Symmetriegruppen der Approximanten Untergruppen der Symmetriegruppe des ursächlichen Quasikristalls sind, Approximanten mit den Symmetriegruppen  $C_{4v}$  und  $C_{2v}$  über die sogenannten Strata konstruiert. Unverzichtbar für alle durchgeführten geometrischen Konstruktionen war hier die Wahl einer symmetrieangepassten Basis. Diese kann durch das im ersten Kapitel vorgestellte Konstruktionsverfahren realisiert werden, was im dritten Kapitel für das oktagonale Tiling vorgeführt worden ist. Im letzten Teil der Arbeit wurde anschließend die Strukturänderung für einen Approximanten aus dem  $C_{4v}$ -Stratum unter der Verschiebung des Akzeptanzbereiches betrachtet und kurz diskutiert. Aus Betrachtungen und Untersuchungen von Approximanten ist bekannt, dass diese ähnlich wie die Quasikristalle über phasonische Freiheitsgrade verfügen und in ihnen Versetzungen mit phasonischen Komponenten vorkommen können [13]. Es existieren Anhaltspunkte, die darauf Ausblick geben, dass in Zusammenhang mit den in dieser Arbeit vorgestellten Methoden Metaversetzungen in Approximanten mithilfe von geometrischen Betrachtungen bezogen auf Änderungen der Approximantenstrukturen unter Änderung der Phasonen beschrieben werden können.



# Anhang A

## Beweis von Relation (2.20)

Es soll nachgeprüft werden, dass gilt:

$$M_{\parallel, c^\perp}^{-1} = M_{c, \perp}^t \cdot A \quad (\text{A.1})$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} [e_{\parallel} \cdot e_c]_{d_{\parallel} \times d_{\parallel}}^{-1} & 0 \\ 0 & [e_{\perp} \cdot e_{c^\perp}]_{d_{\perp} \times d_{\perp}}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \left( \begin{array}{ccc} \sum_{k=1}^n e_{k,1}^{\parallel} \cdot e_{k,1}^c = e_1^{\parallel} \cdot e_1^c & \cdots & e_1^{\parallel} \cdot e_{d_{\parallel}}^c \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{d_{\parallel}}^{\parallel} \cdot e_1^c & \cdots & e_{d_{\parallel}}^{\parallel} \cdot e_{d_{\parallel}}^c \end{array} \right)^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ & 0 & \cdots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1^{\perp} \cdot e_1^{c^\perp} & \cdots & e_1^{\perp} \cdot e_{d_{\perp}}^{c^\perp} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{d_{\perp}}^{\perp} \cdot e_1^{c^\perp} & \cdots & e_{d_{\perp}}^{\perp} \cdot e_{d_{\perp}}^{c^\perp} \end{pmatrix}^{-1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Beziehung (A.1) lässt sich leicht nachvollziehen, denn mit

$$M_{\parallel, c^\perp} = \begin{pmatrix} e_{1,1}^\parallel & \cdots & e_{n,1}^\parallel \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1,d_\parallel}^\parallel & \cdots & e_{n,d_\parallel}^\parallel \\ e_{1,1}^{c^\perp} & \cdots & e_{n,1}^{c^\perp} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1,d_\perp}^{c^\perp} & \cdots & e_{n,d_\perp}^{c^\perp} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad M_{c,\perp}^t = \begin{pmatrix} e_{1,1}^c & \cdots & e_{1,d_\parallel}^c & e_{1,1}^\perp & \cdots & e_{1,d_\perp}^\perp \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{n,1}^c & \cdots & e_{n,d_\parallel}^c & e_{n,1}^\perp & \cdots & e_{n,d_\perp}^\perp \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

folgt

$$M_{\parallel, c^\perp} \cdot M_{c,\perp}^t = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

mit den Blöcken

$$A_{11} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n e_{k,1}^\parallel \cdot e_{k,1}^c = e_1^\parallel \cdot e_1^c & \cdots & e_1^\parallel \cdot e_{d_\parallel}^c \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{d_\parallel}^\parallel \cdot e_1^c & \cdots & e_{d_\parallel}^\parallel \cdot e_{d_\parallel}^c \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$A_{12} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n e_{k,1}^\parallel \cdot e_{k,1}^\perp = e_1^\parallel \cdot e_1^\perp & \cdots & e_1^\parallel \cdot e_{n-d_\parallel}^\perp \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{d_\parallel}^\parallel \cdot e_1^\perp & \cdots & e_{d_\parallel}^\parallel \cdot e_{n-d_\parallel}^\perp \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$A_{21} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n e_{k,1}^{c^\perp} \cdot e_{k,1}^c = e_1^{c^\perp} \cdot e_1^c & \cdots & e_1^{c^\perp} \cdot e_{d_\parallel}^c \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{n-d_\parallel}^{c^\perp} \cdot e_1^c & \cdots & e_{n-d_\parallel}^{c^\perp} \cdot e_{d_\parallel}^c \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$A_{22} = \begin{pmatrix} e_1^\perp \cdot e_1^{c^\perp} & \cdots & e_1^\perp \cdot e_{d_\parallel}^{c^\perp} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{d_\perp}^\perp \cdot e_1^{c^\perp} & \cdots & e_{d_\perp}^\perp \cdot e_{d_\perp}^{c^\perp} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

da  $e_j^\parallel \cdot e_i^\perp = 0$  und  $e_j^{c^\perp} \cdot e_i^c = 0 \Rightarrow A_{12} = A_{21} = (0)$   
 $\Rightarrow M_{\parallel, c^\perp} \cdot M_{c,\perp}^t = A^{-1}$   
 $\Rightarrow M_{\parallel, c^\perp}^{-1} = M_{c,\perp}^t \cdot A$

# Anhang B

## Einschränkungen für periodische Approximanten

In diesem Abschnitt soll kurz erläutert werden unter welchen Einschränkungen vom Parameter  $\varphi$  sich in (3.18) und (3.20) sich periodische Approximanten ergeben. Die Grundüberlegung besteht darin, dass im Falle eines periodischen Approximanten Gittervektoren  $\xi \in \Lambda$  in der Schnittebene  $E_c$  liegen und somit Eigenvektoren des Projektionsoperators zum Eigenwert 1 sind, d.h.

$$\exists \xi \in \Lambda \quad : \quad \pi_{\sigma_1 \sigma_2, \sigma'_1 \sigma'_2} \xi = \xi. \quad (\text{B.1})$$

### B.1 Periodische Approximanten des Stratums $\pi_{\sigma_1 \sigma_2}$

(3.18) hat die Eigenwerte  $\lambda_{1,2} = 0$  und  $\lambda_{3,4} = 1$ . Die Eigenvektoren zum Eigenwert  $\lambda_{1,2} = 0$  sind

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{a-1}{b} \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{a+1}{b} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

und

$$\mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} -\frac{a+1}{b} \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{a-1}{b} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

zum Eigenwert  $\lambda_{3,4} = 1$ . Aufgrund von (B.1) müssen alle Komponenten der Eigenvektoren  $\mathbf{v}_3$  und  $\mathbf{v}_4$  ganze Zahlen sein. Wegen der Periodizität erfüllen auch alle ganzzahligen Vielfachen  $z_0 \cdot \mathbf{v}_{3,4}$  der Eigenvektoren die Beziehung (B.1), sodass insgesamt gelten muss:

$$\frac{a+1}{b} \cdot z_0 = z_1 \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{a-1}{b} \cdot z_0 = z_2 \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.5})$$

mit  $z_0, z_1, z_2 \in \mathbb{Z}$ . Mit (B.4)-(B.5) und (B.4)+(B.5) folgt:

$$b = \frac{2z_0}{z_1 - z_2} = \frac{2q}{n} \quad (\text{B.6})$$

$$a = b \cdot \frac{z_1 + z_2}{2z_0} = \frac{z_1 + z_2}{z_1 - z_2} = \frac{p}{n} \quad (\text{B.7})$$

$$p, q, n \in \mathbb{Z}$$

und

$$a^2 + 2b^2 = (\sin(2\varphi))^2 + 2 \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(2\varphi) \right)^2 = \frac{(z_1 + z_2)^2}{(z_1 - z_2)^2} + \frac{8z_0^2}{(z_1 - z_2)^2} = 1 \quad (\text{B.8})$$

$$\implies \underbrace{(z_1 + z_2)^2}_{p^2} + 8 \underbrace{z_0^2}_{q^2} = \underbrace{(z_1 - z_2)^2}_{n^2}. \quad (\text{B.9})$$

Betrachtet man nun

$$\frac{a}{b} = \sqrt{2} \cdot \frac{\sin(2\varphi)}{\cos(2\varphi)} = \frac{pn}{n2q}, \quad (\text{B.10})$$

erhält man durch elementare Umformungen für den Winkel  $\varphi$  für periodische Approximanten:

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{p}{2q\sqrt{2}}\right) \quad (\text{B.11})$$



## B.2 Periodische Approximanten des Stratum $\pi_{\sigma'_1\sigma'_2}$

Hier erhält man analog zur obigen Rechnung nach Bestimmen der Eigenvektoren von (3.20):

$$\frac{1}{b} \cdot z_0 = z_1 \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{a}{b} \cdot z_0 = z_2 \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.13})$$

und

$$b = \frac{z_0}{z_1} = \frac{p}{n} \quad (\text{B.14})$$

$$a = b \cdot \frac{z_2}{z_0} = \frac{z_2}{z_1} = \frac{q}{n}, \quad (\text{B.15})$$

woraus

$$a^2 + b^2 = \left( \cos\left(2\varphi + \frac{\pi}{4}\right) \right)^2 + \left( \sin\left(2\varphi + \frac{\pi}{4}\right) \right)^2 = \frac{z_0^2 + z_2^2}{z_1^2} = 1 \quad (\text{B.16})$$

$$\implies \underbrace{z_0^2}_{p^2} + \underbrace{z_2^2}_{q^2} = \underbrace{z_1^2}_{n^2}. \quad (\text{B.17})$$

und aus

$$\frac{b}{a} = \frac{\sin\left(2\varphi + \frac{\pi}{4}\right)}{\cos\left(2\varphi + \frac{\pi}{4}\right)} = \frac{p}{q}, \quad (\text{B.18})$$

$$\implies \varphi = \frac{1}{2} \left( \arctan \left( \frac{p}{q} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \quad (\text{B.19})$$

folgt.



# Literaturverzeichnis

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Metallic Phase with Long-Ranged Orientational Order and No Translational Symmetry*, Phys. Rev. Lett.,**53**, 1951-1953, 1984.
- [2] R. Penrose, *The role of aesthetics in pure and applied mathematical research*, Bull. Inst. math. and its Appl.,**10**, 266-271, 1974.
- [3] H.-R. Trebin, *Skript zur Vorlesung - Gruppentheoretische Methoden in der Physik* Universität Stuttgart - Wintersemester 2011/2012.
- [4] S. Hunklinger, *Festkörperphysik*, München, 2009.
- [5] U. Koschella, *Zur Phason-Phonon-Kopplung in dekadonalen Quasikristallen - Diplomarbeit*, Universität Stuttgart, 2001.
- [6] M. Duneau, A. Katz, *Quasiperiodic Patterns*, Phys. Rev. Lett.,**54**, 2688 - 2691, 1985.
- [7] T. Zoglauer, *Methoden zur Konstruktion quasikristalliner Strukturen - Wissenschaftliche Arbeit für das Gymnasiale Lehramt*, Universität Stuttgart, 1986.
- [8] A. Kiselev, *Phasonen in quasikristallinen Strukturen des Lennard-Jones-Gauß-Systems - Diplomarbeit*, Universität Stuttgart, 2011.
- [9] F. Hippert, D. Gratias, *Lectures on Quasicrystals*, France, 1994.
- [10] D. Gratias, A. Katz, M. Quiquandon *Geometry of approximant structures in quasicrystals*, J. Phys.: Condens. matter **7** 9101-9125, 1995.
- [11] W. Steurer, S. Deloudi, *Crystallography of Quasicrystals - Concepts, Methods and Structures*, J. Phys.: Condens. matter **7** 9101-9125, 1995.
- [12] T. Janssen, G. Chapuis, M. de Boissieu, *Aperiodic Crystals - From Modulated Phases to Quasicrystals*, Oxford University Press - New York, 2007.
- [13] M. Engel, *Zur Geometrie von Phasonen und Versetzungen in Quasikristallen und ihren Approximanten - Diplomarbeit*, Universität Stuttgart, 2004.



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst bei Herrn Prof. Trebin für die Mühe, eine Aufgabenstellung im Umfang einer Bachelorarbeit zu finden, und für die anschließende Betreuung dieser Aufgabenstellung bedanken.

Den Institutsmitgliedern und den Sekretärinnen des ITAP danke ich für das freundliche Arbeitsklima und die Hilfsbereitschaft bei Fragen und Problemen.

Ganz besonders will ich mich bei Alexander Kiselev für die Hilfe und stets zuverlässige Betreuung vor allem in der Endphase dieser Bachelorarbeit bedanken.

Zum Schluß möchte ich noch meinen Eltern und einigen Freunden dafür danken, dass sie mich in so manchen Momenten der Niedergeschlagenheit aufgemuntert und bestärkt haben.