

Zur numerischen Simulation des Bruchs von Quasikristallen

Wissenschaftliche Arbeit
für das Lehramt
an Gymnasien

Christoph Paul Rudhart
Juni 1999

Universität Stuttgart
Institut für Theoretische und Angewandte Physik
Prof. Dr. H.-R. Trebin

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	2
1 Quasikristalline Strukturen	4
2 Erzeugung von Quasigittern	6
2.1 Streifenprojektionsformalismus	6
2.2 Formalismus der atomaren Hyperflächen	8
2.3 Beispiele	9
2.3.1 Das oktagonale Ammann–Beenker–Tiling	9
2.3.2 Das Ammann–Kramer–Penrose–Tiling	11
2.4 Rationale Approximanten	14
2.5 Freiheitsgrade	15
3 Quasikristalle	17
3.1 Die US-Dekoration	17
3.2 Die TI-Dekoration	18
3.3 Das binäre ikosaedrische Modell	18
4 Flips im binären ikosaedrischen Modell	21
4.1 Konstruktion des modifizierten Tilings	21
4.2 Strukturelemente des modifizierten Tilings	24
4.3 Flips im modifizierten Tiling	26
4.4 Atomare Flips	35
5 Zusammenfassung und Ausblicke	42

Einleitung

Im November 1984 berichteten Shechtman, Blech, Gratias und Cahn [22] über eine neue Festkörperphase von Aluminiumlegierungen, die den Grundregeln der Kristallographie widersprach. Elektronenbeugungsaufnahmen ergaben Beugungsmuster mit zwei-, drei- und fünfzähligen Symmetrieachsen und scharfen Braggreflexen. Dies war mit der bis dahin üblichen Auffassung, alle Festkörper seien entweder Kristalle oder amorph, nicht vereinbar. Kristalle lassen sich durch periodisches Anordnen einer Einheitszelle aufbauen und zeigen eine weitreichende Translationsordnung. Amorphe Festkörper hingegen zeigen keinerlei Fernordnung. Eine neue Klasse von Festkörpern stellen Quasikristalle dar. Sie unterscheiden sich durch ihre weitreichende Translationsordnung von amorphen Festkörpern und durch ihre Aperiodizität von (periodischen) Kristallen.

Die meisten Erklärungen der Eigenschaften von Kristallen, wie elektrische Leitfähigkeit oder Plastizität, benutzen deren periodische Struktur. Es stellt sich daher die Frage, inwiefern sich die für Kristalle geeigneten Konzepte auf die allgemeineren, quasikristallinen Strukturen erweitern lassen.

Quasikristalle weisen neben dem von Kristallen bekannten phononischen einen weiteren, als phasonisch bezeichneten Freiheitsgrad auf. Mit dem phasonischen Freiheitsgrad verbunden sind Atomsprünge, die als phasonische Flips bezeichnet werden. Die atomaren Sprungprozesse spielen eine wichtige Rolle bei der Untersuchung der mechanischen und thermodynamischen Eigenschaften von Quasikristallen. Beispielsweise hinterlassen Versetzungsbewegungen in Quasikristallen Stapelfehlerebenen, die als Phasonenwände bezeichnet werden [5], [21]. Eine Phasonenwand besteht aus einer Ebene von phasonischen Defekten, die ungeordnete Atomkonfigurationen darstellen. Phasonenwände schwächen den Quasikristall in bezug auf die plastische Verformbarkeit.

Von Kalugin und Katz [13] wurde ein auf phasonischen Flips basierender Diffusionsmechanismus für Quasikristalle vorgeschlagen. Experimentelle Hinweise für die Existenz solcher Mechanismen lieferten Untersuchungen der Selbst- und Fremddiffusion in Quasikristallen [3]. Eine weitere Methode zur experimentellen Untersuchung von Phasonen ist die Messung der atomaren Sprungvektoren mit Hilfe von Neutronenstreuexperimenten. Aus dem inkohärenten inelastischen Anteil des dynamischen Struktur factors lassen sich die Sprungvektoren der atomaren Sprungprozesse ermitteln [4].

Neben den experimentellen Methoden eignen sich Computersimulationen zur Untersuchung der atomaren Dynamik in Quasikristallen. Untersuchungen dieser Art wurden von Wolfangel [23] und Bunz [2] an Strukturmodellen für dekadonale Quasikristalle durchgeführt. Notwendige Voraussetzung für solche Untersuchungen sind Strukturmodelle, die phasonische Flips zulassen.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die geometrische Untersuchung der phasonischen Flips im binären ikosaedrischen Modell, das von Henley und Elser [8] als Strukturmodell für die ikosaedrische Phase von $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$ vorgeschlagen wurde.

Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden die grundlegenden Definitionen und Begriffe zur Klassifizierung translationsgeordneter Strukturen zusammengestellt.

Das nächste Kapitel beschreibt Methoden zur Erzeugung von Quasigittern. An einigen Beispielen werden die Eigenschaften solcher Strukturen veranschaulicht.

Der Übergang vom Quasigitter zum Quasikristall ist Gegenstand des dritten Kapitels. Hier wird neben anderen Dekorationen das binäre ikosaedrische Modell vorgestellt.

Im vierten Kapitel werden die geometrischen Methoden zur Untersuchung der atomaren Flips im binären ikosaedrischen Modell erläutert. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse schließt die Arbeit ab.

Kapitel 1

Quasikristalline Strukturen

Quasikristalle stellen eine neue Klasse geordneter atomistischer Strukturen dar. Charakteristisch für solche Strukturen sind ihre weitreichende Translationsordnung und ihre nicht-kristallographische Symmetrie. Geordnete Strukturen, wie periodische Kristalle oder Quasikristalle, werden mit Hilfe ihrer Beugungseigenschaften definiert [12]. Deshalb sollen hier die wichtigsten Begriffe, die man zur Klassifizierung quasiperiodischer Strukturen benötigt, zusammengestellt werden.

Beugungsexperimente erlauben eine direkte Messung der Streuintensität $I(\mathbf{q})$. Sie kann durch die komplexe Streuamplitude $S(\mathbf{q})$ ausgedrückt werden:

$$I(\mathbf{q}) \equiv |S(\mathbf{q})|^2$$

$S(q)$ stellt die Fouriertransformierte einer Dichtefunktion dar:

$$S(\mathbf{q}) \equiv \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$$

Hierbei ist $\rho(\mathbf{r})$ die Dichtefunktion der Streuzentren. Wegen des direkten Zusammenhangs zwischen den charakteristischen Eigenschaften der Beugungsbilder und der Fernordnung einer geordneten Struktur eignen sich Beugungseigenschaften zur Klassifizierung. Nach [17] definiert man eine **translationsgeordnete Struktur** als eine, deren Streuamplitude $S(\mathbf{q})$ durch diskrete Braggreflexe gegeben ist. Besitzt eine translationsgeordnete Struktur mit Braggreflexen an den Punkten $\{\mathbf{q}_i\}$ eine endliche Menge von Vektoren $\{\mathbf{g}_i\}$ so, daß jedes \mathbf{q}_i sich als ganzzahlige Linearkombination der $\{\mathbf{g}_i\}$ ausdrücken läßt, dann sagt man, die Punkte $\{\mathbf{q}_i\}$ besitzen eine Basis. Die Menge der Vektoren $\{\mathbf{q}_i\}$ wird als **reziprokes Gitter** bezeichnet. Die Vektoren $\{\mathbf{g}_i\}$ spannen das reziproke Gitter auf. Eine minimale Menge von Vektoren $\{\mathbf{g}_i\}$ wird als **Basis** bezeichnet, die Anzahl dieser Vektoren heißt **Rang** des Gitters.

Die **Symmetrie** der Orientierungsordnung einer translationsgeordneten Struktur ist durch die Gruppe der Punktoperationen ¹ der Struktur gegeben, die die Streuintensität $I(\mathbf{q})$ invariant lassen.

¹Rotationen, Spiegelungen, Inversionen

Mit Hilfe der oben eingeführten Begriffe läßt sich ein d -dimensionaler Kristall definieren als eine translationsgeordnete Struktur, deren Rang gleich d ist. Ist der Rang größer als d , so spricht man von einer **quasiperiodischen Struktur**.

Eine quasiperiodische Struktur mit nichtkristallographischen Symmetrien wird als **Quasikristall** bezeichnet. Läßt man die Forderung nach nichtkristallographischen Symmetrien fallen, so erhält man eine quasiperiodische Struktur, die als **inkommensurabler Kristall** bezeichnet wird.

Wichtig für die Modellierung experimentell beobachteter Quasikristalle ist der Begriff des Quasigitters, der eng mit dem Begriff des Tilings [7] verbunden ist. Ein Tiling ist eine vollständige, überlappungsfreie Parkettierung des Raumes durch Aneinanderlegen einer endlichen Anzahl unterschiedlicher, als **Tiles** oder **Kacheln** bezeichneter Objekte. Ein gemeinsamer Eckpunkt mehrerer Tiles wird als **Vertex** bezeichnet. Periodische Kristalle entstehen, indem man jeden Gitterpunkt des Kristallgitters mit demselben Motiv aus einem oder mehreren Atomen, der sogenannten Basis, besetzt. Quasikristalle hingegen entstehen durch Dekoration eines Quasigitters. Unter einem **Quasigitter** versteht man ein Tiling, das bei der Dekoration seiner Vertizes mit δ -Distributionen eine quasikristalline Struktur ergibt.

Kapitel 2

Erzeugung von Quasigittern

2.1 Streifenprojektionsformalismus

Quasigitter besitzen als Symmetrien nichtkristallographische Punktgruppen. Diese treten als Symmetriegruppen von Gittern in höherdimensionalen Räumen auf. So weist das sechsdimensionale einfach kubische Gitter \mathbb{Z}^6 Ikosaedersymmetrie auf. Deshalb erzeugt man Quasigitter durch Projektion periodischer Hypergitter auf Unterräume, die unter den Wirkungen der Punktgruppe des Quasikristalls invariant sind. Der von Kramer und Neri [15] vorgestellte Streifenprojektionsformalismus bedient sich einer solchen Projektion und soll hier beschrieben werden.

Sei $\Gamma^n \subset \mathbb{R}^n$ ein n -dimensionales Gitter im \mathbb{R}^n mit den Basisvektoren $\{e_1, \dots, e_n\}$. Weiter sei \mathbb{E}^{\parallel} ein d -dimensionaler invarianter Unterraum des \mathbb{R}^n und \mathbb{E}^{\perp} sein orthogonales Komplement bezüglich \mathbb{R}^n . \mathbb{E}^{\parallel} wird als physikalischer Raum oder Tilingraum bezeichnet, den Raum \mathbb{E}^{\perp} nennt man Orthogonalraum. Der physikalische Raum \mathbb{E}^{\parallel} schneidet das Gitter Γ^n in genau einem Punkt. Man sagt, \mathbb{E}^{\parallel} schneidet Γ^n irrational. Würde \mathbb{E}^{\parallel} das Gitter Γ^n in mehr als einem Punkt schneiden, ergäbe sich bei der Projektion der Gitterpunkte in \mathbb{E}^{\parallel} eine periodische Struktur [25]. Alle in dieser Arbeit betrachteten Quasigitter lassen sich aus einfach kubischen Hypergittern erzeugen, so daß im folgenden $\Gamma^n = \mathbb{Z}^n$ gesetzt werden kann. Projiziert man nun alle Punkte von \mathbb{Z}^n orthogonal in die Räume \mathbb{E}^{\parallel} und \mathbb{E}^{\perp} , so entstehen zwei \mathbb{Z} -Module L^{\parallel} bzw. L^{\perp} :

$$L^{\parallel} = \pi_{\parallel}(\mathbb{Z}^n) = \left\{ \sum_{i=1}^n z_i e_i^{\parallel} \right\} \subset \mathbb{E}^{\parallel}$$

$$L^{\perp} = \pi_{\perp}(\mathbb{Z}^n) = \left\{ \sum_{i=1}^n z_i e_i^{\perp} \right\} \subset \mathbb{E}^{\perp}$$

Dabei sind $e_i^{\parallel} = \pi_{\parallel}(e_i)$ bzw. $e_i^{\perp} = \pi_{\perp}(e_i)$ die Orthogonalprojektionen der Einheitsvektoren e_i des Hypergitters \mathbb{Z}^n in die Räume \mathbb{E}^{\parallel} bzw. \mathbb{E}^{\perp} .

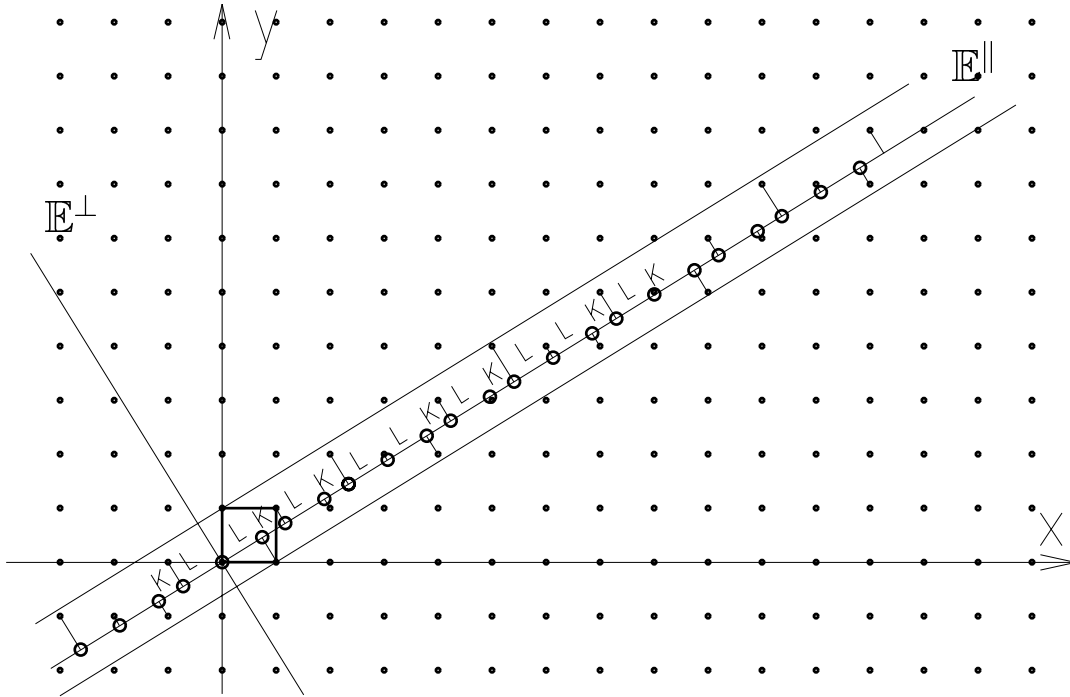


Abbildung 2.1: Streifenprojektionsformalismus für $n = 2$, $d = 1$.

In allen hier betrachteten Fällen schneiden sowohl \mathbb{E}^{\parallel} als auch \mathbb{E}^{\perp} das Hypergitter \mathbb{Z}^n irrational. Daraus folgt, daß die \mathbb{Z} -Module \mathbb{L}^{\parallel} und \mathbb{L}^{\perp} dicht in \mathbb{E}^{\parallel} bzw. \mathbb{E}^{\perp} liegen. Da die Vektoren $\{e_i^{\parallel}\}$ bzw. $\{e_i^{\perp}\}$ jeweils rational linear unabhängig sind, lassen sich alle Punkte von \mathbb{L}^{\parallel} bzw. \mathbb{L}^{\perp} eindeutig in das Hypergitter \mathbb{Z}^n heben. Durch $\varphi := \pi_{\perp} \circ \pi_{\parallel}^{-1}$ wird folglich ein Isomorphismus von \mathbb{L}^{\parallel} auf \mathbb{L}^{\perp} definiert. Um anstatt der dichten Menge von projizierten Punkten \mathbb{L}^{\parallel} eine diskrete Punktmenge zu erhalten, projiziert man nicht alle Punkte des Gitters \mathbb{Z}^n in den Parallelraum \mathbb{E}^{\parallel} . Die Punkte von \mathbb{Z}^n , die in \mathbb{E}^{\parallel} projiziert werden, wählt man mit Hilfe eines n -dimensionalen Auswahlstreifens S aus. Der Streifen S entsteht durch Parallelverschiebung eines n -dimensionalen Polytops γ^n entlang \mathbb{E}^{\parallel} :

$$S = \{x + \eta | x \in \mathbb{E}^{\parallel}, \eta \in \gamma^n\}$$

Als Polytop γ^n kann man im Fall eines hyperkubischen Gitters \mathbb{Z}^n beispielsweise den n -dimensionalen Einheitswürfel W^n wählen:

$$W^n = \left\{ \sum_{i=1, \dots, n} \xi_i e_i \mid 0 \leq \xi_i < 1 \right\}$$

Durch Orthogonalprojektion jener Gitterpunkte auf \mathbb{E}^{\parallel} , die innerhalb des Auswahlstreifens S liegen, ergibt sich ein d -dimensionales Quasigitter T :

$$T = \pi_{\parallel}(S \cap \Gamma^n)$$

Die Orthogonalprojektion des Auswahlstreifens S in den Orthogonalraum \mathbb{E}^{\perp} wird als **Akzeptanzbereich** \mathbb{A} bezeichnet:

$$\mathbb{A} = \pi_{\perp}(S) = \pi_{\perp}(\gamma^n)$$

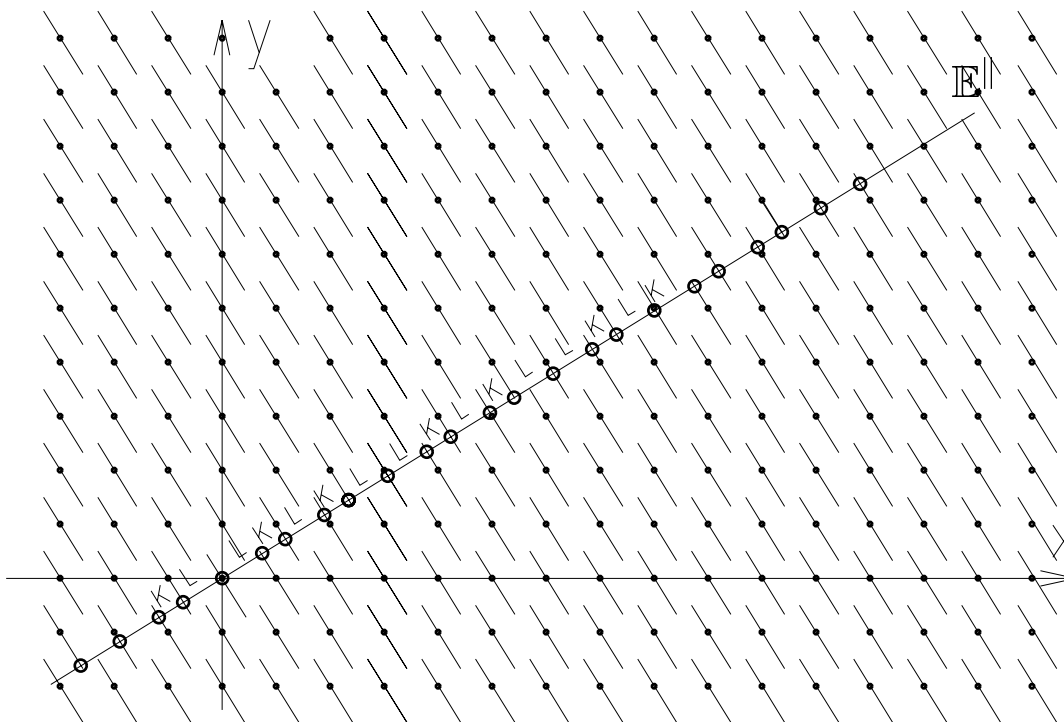
Da die Gestalt von \mathbb{A} bestimmt, welche Punkte aus Γ^n in den physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} projiziert werden, bezeichnet man \mathbb{A} auch als Auswahlfenster oder als Profil von S .

In Abb. 2.1 ist der Streifenprojektionsformalismus für den Fall $\Gamma^n = \mathbb{Z}^2$ dargestellt. Der physikalische Raum \mathbb{E}^{\parallel} und sein orthogonales Komplement \mathbb{E}^{\perp} sind in diesem Fall eindimensional. \mathbb{E}^{\parallel} und \mathbb{E}^{\perp} schneiden aufgrund ihrer irrationalen Steigungen das Hypergitter \mathbb{Z}^2 nur im Koordinatenursprung. Wäre die Steigung rational, so würde \mathbb{E}^{\parallel} das Hypergitter \mathbb{Z}^2 in unendlich vielen Punkten schneiden, und das durch Projektion erhaltene Muster wäre periodisch. Als Polytop zur Konstruktion des Auswahlstreifens S wurde das zweidimensionale Einheitsquadrat gewählt. Die Punkte des Quasigitters T bilden eine quasiperiodische Sequenz von langen und kurzen Strecken, in Abb. 2.1 mit K bzw. L bezeichnet. Sie stellen die Kacheln des eindimensionalen Tilings dar. Die Projektionen der Basisvektoren des Hypergitters $e_i^{\parallel} = \pi_{\parallel}(e_i)$ ($i = 1, 2$) bilden eine Basis des Quasigitters, d.h. jeder Gitterpunkt läßt sich eindeutig als ganzzahlige Linearkombination der e_i^{\parallel} schreiben. Wählt man die Steigung m der Ursprungsgeraden gleich dem Kehrwert der goldenen Zahl τ , d.h. $m = \tau^{-1} = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618$, so ergibt sich als Abfolge der Längen L und K die **Fibonacci-Kette**. Das Längenverhältnis der Strecken L und K ist der goldene Schnitt: $\frac{L}{K} = \tau = 1.618$.

2.2 Formalismus der atomaren Hyperflächen

Ein zum Streifenprojektionsformalismus äquivalentes Verfahren ist der Formalismus der atomaren Hyperflächen, der auch als Schnittformalismus bezeichnet wird. Den beiden Verfahren gemein ist die Erzeugung des Quasigitters im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} , der mit irrationaler Steigung in ein höherdimensionales Hypergitter Γ^n eingebettet ist. Die diskrete Punktmenge T wird mit Hilfe der **atomaren Hyperflächen** erzeugt. Hierzu invertiert man den Akzeptanzbereich \mathbb{A} durch Punktspiegelung am Ursprung und heftet das so entstandene Polytop $-\mathbb{A}$ an sämtliche Gitterpunkte des Hypergitters Γ^n . Das Quasigitter T besteht aus den Schnitten dieser atomaren Hyperflächen mit dem physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} .

In Abb. 2.2 ist das Verfahren für den Fall der eindimensionalen Fibonacci-Kette (siehe Abschnitt 2.1) dargestellt. Die atomaren Hyperflächen entstehen hier durch orthogonale Projektion des Einheitsquadrates auf \mathbb{E}^{\perp} und sind zu \mathbb{E}^{\perp} parallele eindimensionale Strecken. Während beim Streifenprojektionsformalismus die Gestalt des Akzeptanzbereichs dafür


 Abbildung 2.2: Formalismus der atomaren Hyperflächen für den Fall $n = 2$, $d = 1$

verantwortlich ist, welche Punkte des Hypergitters in \mathbb{E}^{\parallel} projiziert werden, ist bei diesem Verfahren die Gestalt der Hyperflächen entscheidend. Wählt man die Länge l der atomaren Hyperflächen so, daß $l = |e_1^{\perp}| + |e_2^{\perp}| = |\pi^{\perp}(e_1)| + |\pi^{\perp}(e_2)|$ gilt ², so entsteht als Quasigitter T die Fibonacci-Kette.

Beim Übergang vom Quasigitter zum Quasikristall unterteilt man die einzelnen Hyperflächen in verschiedene Polytope und weist ihnen unterschiedliche Atomsorten zu. Die durch den Schnitt eines Polytops mit \mathbb{E}^{\parallel} entstehenden Vertizes werden dann mit der jeweiligen Atomsorte besetzt.

2.3 Beispiele

2.3.1 Das oktagonale Ammann–Beenker–Tiling

Das oktagonale Ammann-Beenker-Tiling läßt sich als Beispiel für ein zweidimensionales Quasigitter durch den Streifenprojektionsformalismus aus dem einfach kubischen Hypergitter \mathbb{Z}^4 erzeugen. Der physikalische Raum \mathbb{E}^{\parallel} und sein orthogonales Komplement sind

²dies entspricht der Projektion des Akzeptanzbereichs \mathbb{A} in \mathbb{E}^{\perp}

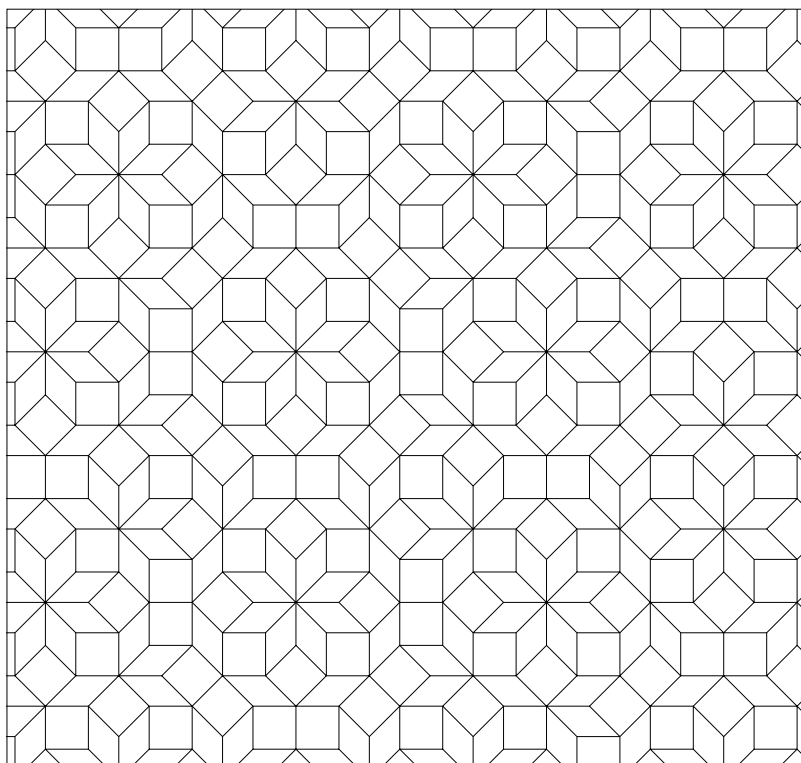


Abbildung 2.3: Ausschnitt aus dem oktagonalen Ammann-Beenker-Tiling

zweidimensionale Unterräume des \mathbb{R}^4 . In den kanonischen Basisvektoren $\{e_i\}$ des \mathbb{R}^4 sind die Einheitsvektoren für \mathbb{E}^{\parallel} bzw. \mathbb{E}^{\perp} gegeben durch:

$$E_1^{\parallel} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \lambda \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad E_2^{\parallel} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \lambda \\ 1 \end{pmatrix} \quad E_1^{\perp} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \lambda \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad E_2^{\perp} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ \lambda \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Im Basissystem $\{E_1^{\parallel}, E_2^{\parallel}\}$ bzw. $\{E_1^{\perp}, E_2^{\perp}\}$ ergeben sich folgende Projektionen $\pi_{\parallel}(e_i)$ bzw. $\pi_{\perp}(e_i)$:

$$\pi_{\parallel}(e_1) = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \pi_{\parallel}(e_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \pi_{\parallel}(e_3) = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \pi_{\parallel}(e_4) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$\pi_{\perp}(e_1) = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \pi_{\perp}(e_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \pi_{\perp}(e_3) = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \pi_{\perp}(e_4) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Hierbei ist $\lambda = \sqrt{2}$. Der Akzeptanzbereich entsteht aus der orthogonalen Projektion des vierdimensionalen Einheitswürfels W^4 in den Orthogonalraum \mathbb{E}^{\perp} und ist ein regelmäßiges

Oktagon mit Kantenlänge $\sqrt{2}$ (siehe Abb. 2.7). Wie im Fall der Fibonacci-Kette läßt sich jeder Punkt des Tilings T eindeutig als ganzzahlige Linearkombination der Vektoren e_i^{\parallel} mit $i = 1, \dots, 4$ ausdrücken. Ein Ausschnitt des oktagonalen Ammann-Beenker-Tilings ist in Abb. 2.3 dargestellt. Das Tiling besteht aus zwei verschiedenen Kacheln, einem Quadrat und einer Raute, wobei der spitze Winkel der Raute 45° beträgt. Das Quadrat tritt im Tiling in zwei, die Raute in vier verschiedenen Orientierungen auf. Die Kacheln entstehen durch Projektion derjenigen zweidimensionalen Facetten des Einheitswürfels W^4 , die den Ursprung enthalten. Ebenso entstehen die Kanten der Tiles durch Projektion der eindimensionalen Seiten von W^4 , die den Ursprung enthalten.

Allgemein gilt [14]: Sei Γ^n ein Gitter im \mathbb{R}^n mit den Erzeugenden a_1, \dots, a_n , und sei γ_n die Basiszelle des Hypergitters Γ^n :

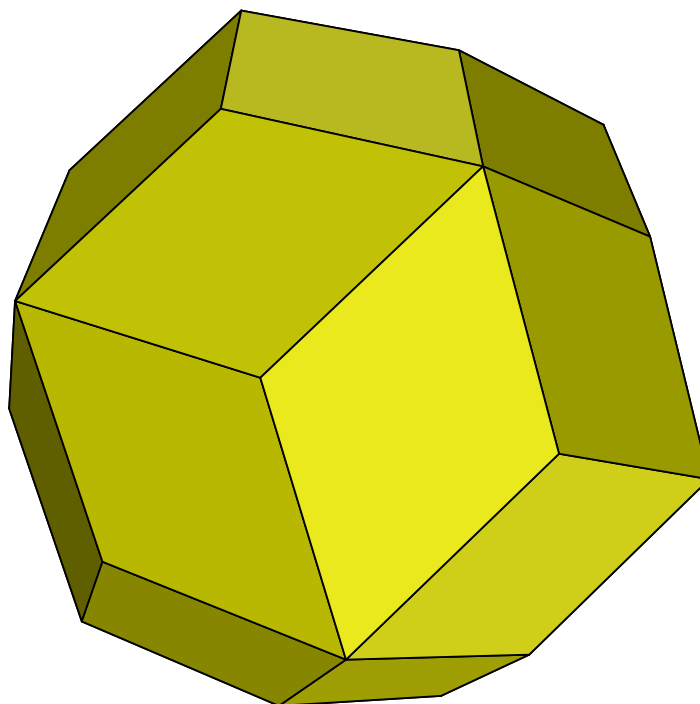
$$\gamma_n = \left\{ \sum \xi_i a_i \mid 0 \leq \xi_i < 1, \quad i = 1, \dots, n \right\}$$

Dann gibt es $\binom{n}{p}$ verschiedene p -dimensionale Fazetten $\gamma_p^{(1)}, \gamma_p^{(2)}, \dots$ von γ_n , die den Ursprung enthalten. Die Orthogonalprojektion π^{\parallel} von \mathbb{R}^n auf \mathbb{E}^{\parallel} projiziert $\gamma_p^{(1)}, \gamma_p^{(2)}, \dots$ in $\binom{n}{p}$ verschiedene p -dimensionale Polytope in \mathbb{E}^{\parallel} . Im Beispiel des oktagonalen Ammann-Beenker Tilings sind dies $\binom{4}{2} = 6$ verschiedene Polytope, die durch das Quadrat in seinen zwei und die Raute in ihren vier verschiedenen Orientierungen gegeben sind. Die Kantenlängen der Tiles sind gleich dem Betrag der projizierten Einheitsvektoren. Deshalb skaliert man das Ammann-Beenker-Tiling häufig mit dem Faktor $\sqrt{2}$, so daß die Kanten der Kacheln die Länge eins erhalten.

2.3.2 Das Ammann–Kramer–Penrose–Tiling

Das ikosaedrische Ammann-Kramer-Penrose-Tiling wurde von Duneau und Katz [14] als Modell für die von Shechtman et al. [22] entdeckte ikosaedrische AlMn-Phase vorgeschlagen. Die durch Elser [6] berechneten Beugungsbilder stimmten bezüglich der Lage der Braggreflexe weitestgehend mit den experimentellen Ergebnissen überein.

Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling, das auch dreidimensionales Penrose-Tiling genannt wird, entsteht durch Streifenprojektion oder durch den Formalismus der atomaren Hyperflächen aus dem einfach kubischen, sechsdimensionalen Hypergitter \mathbb{Z}^6 im euklidischen Raum \mathbb{R}^6 . Der physikalische und der orthogonale Raum \mathbb{E}^{\parallel} bzw. \mathbb{E}^{\perp} sind dreidimensionale Unterräume des \mathbb{R}^6 . Die Orientierung der Räume \mathbb{E}^{\parallel} und \mathbb{E}^{\perp} ist eindeutig durch Angabe der Projektionen der Einheitsvektoren des \mathbb{Z}^6 bestimmt. Die Projektionen der Basisvektoren $a_i := \pi^{\parallel}(e_i)$ auf den physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} bilden eine Basis des Quasigitters, d.h. jeder Gitterpunkt läßt sich als ganzzahlige Linearkombination der a_i schreiben. Ebenso lassen sich alle auf den Orthogonalraum projizierten Punkte als ganzzahlige Linearkombinationen

Abbildung 2.4: Rhombischer Triakontaeder der Seitenlänge a

der Vektoren $b_i := \pi^\perp(e_i)$ darstellen. Die Vektoren a_i und b_i sind gegeben durch:

$$\begin{array}{ll}
 a_1 := \alpha(1, \tau, 0) & b_1 := \alpha(\tau, -1, 0) \\
 a_2 := \alpha(\tau, 0, 1) & b_2 := \alpha(-1, 0, \tau) \\
 a_3 := \alpha(\tau, 0, -1) & b_3 := \alpha(-1, 0, -\tau) \\
 a_4 := \alpha(0, 1, -\tau) & b_4 := \alpha(0, \tau, 1) \\
 a_5 := \alpha(-1, \tau, 0) & b_5 := \alpha(-\tau, -1, 0) \\
 a_6 := \alpha(0, 1, \tau) & b_6 := \alpha(0, \tau, -1)
 \end{array}$$

mit $\alpha = a \cdot (2 + \tau)^{-\frac{1}{2}}$ und $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. Hierbei entspricht a der Gitterkonstanten des Quasigitters. Die sechs Basisvektoren a_i des Parallelraums zeigen in Richtung der Ecken eines regelmäßigen Ikosaeders. Das in dieser Arbeit verwendete Koordinatensystem ist so gewählt, daß die kanonischen Basisvektoren des physikalischen Raums \mathbb{E}^3 in zweizählige Richtungen des Quasigitters zeigen [24]. Als Akzeptanzbereich dient die Orthogonalprojektion des sechsdimensionalen Einheitswürfels W^6 . Dies entspricht der Projektion der Wigner-Seitz-Zelle des Hypergitters \mathbb{Z}^6 . Das so entstehende konvexe Polytop ist ein rhombisches Triakontaeder (Abb. 2.4) mit 32 Ecken, 30 gleichen Seiten und 60 Kanten, wo-

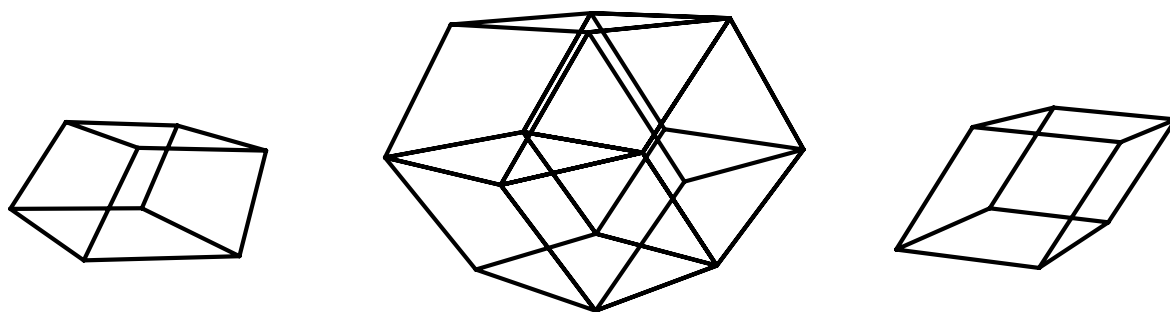


Abbildung 2.5: Strukturelemente des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings: oblates (links), prolates Rhomboeder (rechts) und Rhombendodekaeder

bei die Seiten durch Rhomben mit Kantenlänge a und Winkeln $\arctan(2) \approx 63.43^\circ$ bzw. $\pi - \arctan(2)$ gegeben sind.

Durch Orthogonalprojektion der dreidimensionalen Seiten des Einheitskubus W^6 in \mathbb{E}^{\parallel} erhält man die Kacheln des dreidimensionalen Quasigitters. Die $\binom{6}{3} = 20$ (siehe 2.3.1) dreidimensionalen Seiten des Einheitskubus W^6 , die den Ursprung enthalten, projizieren in nur zwei verschiedene Rhomboeder, (siehe Abb. 2.5), die in jeweils zehn verschiedenen Orientierungen auftreten. Beispielsweise entsteht ein prolates Rhomboeder in \mathbb{E}^{\parallel} durch Orthogonalprojektion der dreidimensionalen Seite des Würfels W^6 , die durch die Vektoren e_1, e_2 und e_3 erzeugt wird. Die Projektionen der Vektoren e_1, e_2 und e_3 bilden hierbei einen Winkel von $63,43^\circ$. Die durch die Vektoren e_1, e_3, e_5 erzeugte dreidimensionale Seite ergibt ein prolates Rhomboeder, wobei die Projektionen der e_1, e_3 und e_5 einen Winkel von $116,57^\circ$ einnehmen. Da zwischen den $\{a_i\}$ bzw. den $\{b_i\}$ kein linearer Zusammenhang mit ganzzahligen Koeffizienten besteht, lassen sich die Eckpunkte der Rhomboeder durch den Isomorphismus φ (siehe Abschnitt 2.1) eindeutig in den Orthogonalraum abbilden. Bei dieser Abbildung entsteht aus dem oblaten (bzw. prolaten) Rhomboeder im physikalischen Raum ein prolates (bzw. oblates) Rhomboeder im Orthogonalraum.

Ein wichtiges Strukturelement des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings stellt das Rhombendodekaeder dar. Diese lokale Konfiguration besteht aus zwei oblaten und zwei prolaten Rhomboedern, die einen gemeinsamen Vertex besitzen (siehe Abb. 2.5).

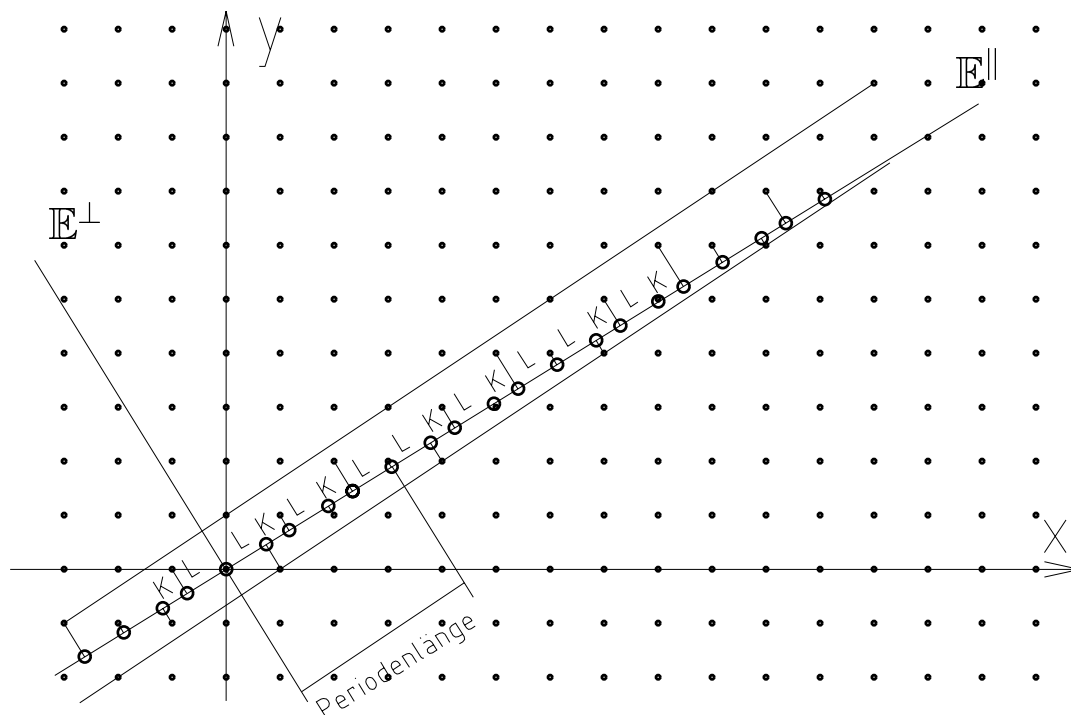


Abbildung 2.6: Streifenprojektionsformalismus zur Erzeugung eines rationalen Approximanten für den Fall $n = 2, d = 1$

2.4 Rationale Approximanten

Rationale Approximanten stellen Näherungen quasiperiodischer Strukturen durch periodische dar. Hierbei besteht die Einheitszelle der periodischen Struktur aus einem möglichst großen Ausschnitt eines Quasikristalls. Die Erzeugung rationaler Approximanten soll am Beispiel der eindimensionalen Fibonacci-Kette erläutert werden.

Zur Erzeugung der Fibonacci-Kette mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus wurde die Steigung des physikalischen Raums \mathbb{E}^{\parallel} irrational gewählt. Der Streifen S entstand durch Verschiebung der Einheitszelle in Richtung des physikalischen Raums \mathbb{E}^{\parallel} . Die Geraden, die den Streifen S beranden, schneiden das Gitter ebenfalls irrational, besitzen somit ebenfalls irrationale Steigungen und schneiden das Gitter \mathbb{Z}^2 in jeweils einem Punkt. Verkippt man nun den Auswahlstreifen S gegenüber \mathbb{E}^{\parallel} infinitesimal so, daß seine Steigung rational wird, so schneidet der Rand des Streifens \mathbb{Z}^2 in unendlich vielen Punkten. Dadurch wird die Abfolge der im Streifen befindlichen Punkte und mit ihm das Quasigitter periodisch. Der Streifenprojektionsformalismus zur Erzeugung eines rationalen Approximanten der Fibonacci-Kette ist in Abb. 2.6 dargestellt.

Irrationale Zahlen lassen sich durch rationale beliebig gut approximieren. Wählt man nun die Steigung des Streifens als rationale Folge $\{m_n\}$, die gegen den Grenzwert $m = \tau^{-1}$ konvergiert, so erhält man eine Folge von periodischen Gittern mit immer größeren Einheitszellen, deren Grenzwert die Fibonacci-Kette darstellt. Rationale Approximanten eignen sich zur Verwendung in molekulardynamischen Simulationen. Wie bei periodischen Kristallen lassen sich periodische Randbedingungen einführen, mit deren Hilfe unerwünschte Oberflächeneffekte eliminiert werden. An den Grenzflächen, an denen der rationale Approximant periodisch fortgesetzt wird, entstehen phasonische Defekte.

Phasonen treten als Folge eines zusätzlichen Freiheitsgrades von Quasikristallen auf und werden im nächsten Abschnitt besprochen.

2.5 Freiheitsgrade

Quasikristalle weisen neben dem von Kristallen bekannten phononischen Freiheitsgrad einen weiteren als phasonisch bezeichneten Freiheitsgrad auf [19]. Dieser soll mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus erläutert werden.

Phononische Verzerrungen, wie sie bei Kristallen auftreten, entsprechen bei Quasikristallen Verzerrungen des Hypergitters parallel zum physikalischen Raum. Das hat eine Deformation der Tiles im Quasigitter zufolge, die Anordnung der Tiles³ bleibt jedoch erhalten.

Komponenten der Verzerrung parallel zu \mathbb{E}^\perp entsprechen einer lokalen Verschiebung des Auswahlstreifens S parallel zu \mathbb{E}^\perp . Dies kann zur Folge haben, daß Gitterpunkte des Hypergitters \mathbb{Z}^n den Auswahlstreifen S verlassen. Für jeden Gitterpunkt $p \in \mathbb{Z}^n$, der den Auswahlstreifen S verläßt, tritt auf der gegenüberliegenden Seite des Streifens ein Gitterpunkt \tilde{p} in den Streifen ein. Im physikalischen Raum \mathbb{E}^\parallel bedeutet das den Sprung eines Vertex des Quasigitters. Dadurch werden die Kacheln im Tiling T verzerrungsfrei umgeordnet. Für die eindimensionale Fibonacci-Kette entspricht das der Umordnung einer Sequenz KL in LK (siehe Abb. 2.1). Die Bewegung des Gitterpunkts bezeichnet man als **phasonischen Flip** oder als **phasonische Verzerrung**.

Phasonische Flips lassen sich auch im Formalismus der atomaren Hyperflächen beschreiben. Die Verschiebung des Auswahlstreifens entspricht der Verschiebung des physikalischen Raums \mathbb{E}^\parallel in Richtung des Orthogonalraums \mathbb{E}^\perp . Dies soll wiederum am Beispiel der eindimensionalen Fibonacci-Kette verdeutlicht werden.

Eine Verschiebung von \mathbb{E}^\parallel in Richtung \mathbb{E}^\perp bewirkt, daß die an einen Hypergitterpunkt angeheftete atomare Hyperfläche (hier ist das eine eindimensionale Strecke) nicht mehr durch \mathbb{E}^\parallel geschnitten wird. Stattdessen schneidet \mathbb{E}^\parallel die Hyperfläche eines anderen Gitterpunktes. Im physikalischen Raum bedeutet das wieder eine verzerrungsfreie Umordnung der Kacheln des Tilings. In Abb. 2.7 ist ein phasonischer Flip im oktagonalen Ammann-Beenker-Tiling

³im Fall der eindimensionalen Fibonacci-Kette die Abfolge der langen und kurzen Strecken

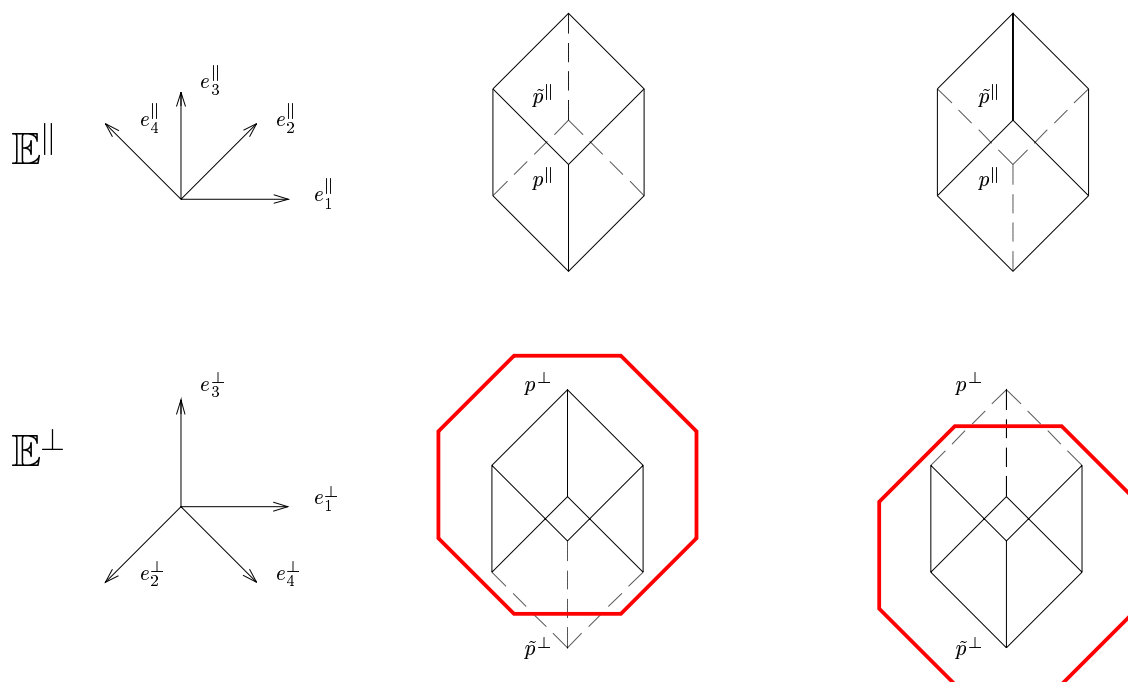


Abbildung 2.7: Flip im oktagonalen Ammann-Beenker-Tiling. Darstellung im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} (oben) und im Orthogonalraum \mathbb{E}^{\perp} (unten).

dargestellt. Durch Verschiebung des Auswahlstreifens verläßt ein Hypergitterpunkt $p \in \mathbb{Z}^n$ den Auswahlstreifen, und ein anderer Gitterpunkt \tilde{p} tritt auf der gegenüberliegenden Seite neu in den Auswahlstreifen ein. Im Orthogonalraum entspricht das der Situation, daß die Orthogonalprojektion $p^{\perp} := \pi_{\perp}(p)$ von p das Auswahlfenster \mathbb{A} verläßt und die Orthogonalprojektion $\tilde{p}^{\perp} := \pi_{\perp}(\tilde{p})$ eines ihm gegenüberliegenden Punktes \tilde{p} neu in das Auswahlfenster eintritt. Im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} äußert sich der phasonische Flip durch den Sprung des inneren Vertex eines Sechsecks, das aus zwei Rauten und einem Quadrat besteht. Dadurch ändert sich die Anordnung der Tiles im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} ohne Verzerrung der Tiles. Im dreidimensionalen Penrose-Tiling bewirkt ein phasonischer Flip den Sprung des inneren Vertex eines Rhombendodekaeders. Flips dieser Art werden in Abschnitt 4.3 ausführlich besprochen.

Kapitel 3

Quasikristalle

Um vom Quasigitter zum Quasikristall zu gelangen, besetzt man das Quasigitter mit Atomen einer oder mehrerer Sorten. Dieser Schritt wird als Dekoration bezeichnet. Im folgenden Abschnitt sollen einige Beispiele von Dekorationen des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose vorgestellt werden. Bei der US-Dekoration⁴ handelt es sich um eine monoatomare Dekoration des dreidimensionalen Penrose Tilings.

3.1 Die US-Dekoration

Ausgangspunkt für die US-Dekoration ist die sogenannte primitive Packung, bei der alle Vertices des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings mit Atomen einer Sorte besetzt werden. Die primitive Dekoration führt jedoch zu einigen sehr kleinen Abständen der Atomzentren. Die kleinen Abstände entsprechen den Längen der kurzen Raumdiagonalen der oblaten Rhomboeder und betragen bei einer Quasigitterkonstante von eins etwa 0.563. Nach Henley [8] treten die kurzen Abstände in Ketten oder Ringen mit bis zu zehn Atomen auf. Durch Elimination jedes zweiten dieser Atome eines Rings bzw. einer Kette werden solche kleinen Atomabstände vermieden. Nach dem Entfernen der Atome treten keine Atomabstände mehr auf die kleiner als eins sind. Deshalb lassen sich die Atomdurchmesser nach dem Entfernen gleich eins wählen und man erhält eine Packung mit hoher Dichte. Die US-Dekoration wird deshalb auch als unit sphere packing bezeichnet [8]. Roth [20] wies die thermische Stabilität der US-Dekoration nach. Schersimulationen von Dilger [5] zeigten jedoch, daß die US-Dekoration instabil gegenüber mechanischer Deformation ist.

Bei der von Henley und Elser [10] vorgeschlagenen TI-Dekoration handelt es sich um eine diatomare Dekoration. Im Gegensatz zur monoatomaren US-Dekoration werden die Tiles hier mit zwei verschiedenen Sorten von Atomen besetzt.

⁴wobei US für "unit sphere" steht

3.2 Die TI-Dekoration

Monoatomare Quasikristalle sind bis heute nicht bekannt, hingegen besitzen bei vielen Quasikristallen verschiedene Atomsorten sehr ähnliche Eigenschaften. Dies legt eine Modellierung mit zwei verschiedenen⁵ Sorten von Atomen nahe.

Zunächst werden die Vertizes und Kantenmitten der Tiles des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings mit Atomen der Sorte A besetzt. Die Dekoration der oblaten Rhomboeder ist damit abgeschlossen. Nun setzt man in die lange Raumdiagonale des prolaten Rhomboeders zwei Atome der Sorte B derart, daß die Raumdiagonale im Verhältnis $\tau : 1 : \tau$ geteilt wird, wobei $\tau = 1/2 + \sqrt{5}/2$ die goldene Zahl ist (siehe 3.1). Eng mit

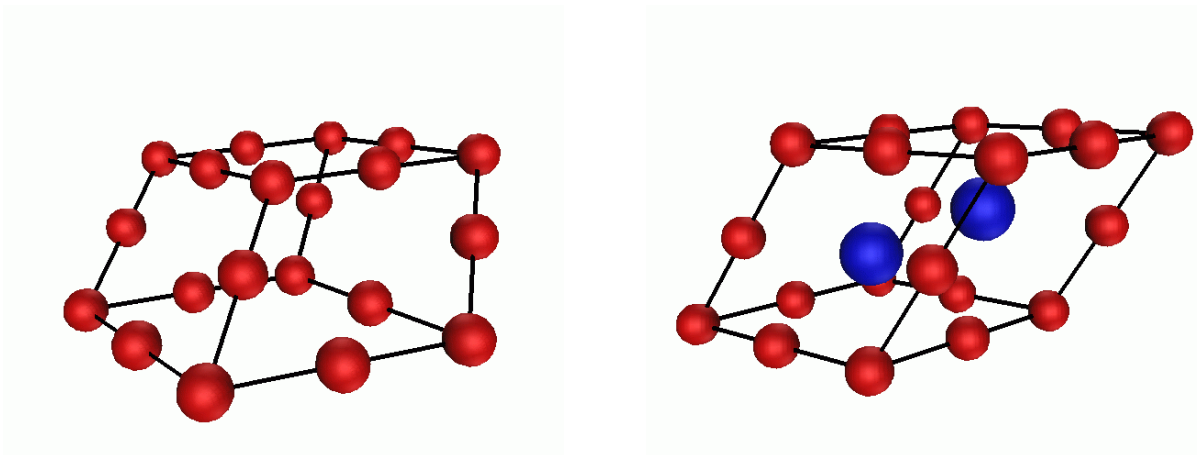


Abbildung 3.1: Dekoration des oblaten (links) und prolaten Rhomboeders im binären ikosaedrischen Modell

der TI-Dekoration verbunden ist die modifizierte TI-Dekoration, die ebenfalls von Henley und Elser [9] als Strukturmodell für die ikosaedrische Phase von $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$ vorgeschlagen wurde. Sie wird auch als binäres ikosaedrisches Modell bezeichnet und im nächsten Abschnitt besprochen.

3.3 Das binäre ikosaedrische Modell

Ausgangspunkt für das Modell ist die TI-Dekoration. Die Atome der Sorte A, die auf den Vertizes und Kantenmitten der Rhomboeder plziert sind, entsprechen hierbei den Al- bzw. Zn-Atomen, die Atome der Sorte B, die sich auf der langen Raumdiagonalen der prolaten Rhomboeder befinden, entsprechen den Mg-Atomen.

⁵im folgenden als A und B bezeichnet

Die Modifikationen gegenüber der TI-Dekoration werden im Strukturelement des rhombischen Dodekaeders (siehe Abb. 2.5) vorgenommen. Dieser besteht aus zwei oblaten und zwei prolaten Rhomboedern, die einen gemeinsamen Vertex besitzen. Für spätere Betrachtungen wichtig ist, daß bei dieser Konfiguration genau vier Rhomboederkanten einen gemeinsamen Punkt besitzen. Eine solche Konfiguration ist im dreidimensionalen Penrose-Tiling nur für den inneren Vertex eines Rhombendodekaeders gegeben. Der innere Vertex ist mit einem Atom der Sorte A besetzt. Im ersten Schritt wird das Atom der Sorte A auf dem inneren Vertex entfernt. Anschließend werden die vier benachbarten Atome auf den Kantenmitten durch Atome der Sorte B ersetzt. Im letzten Schritt verschiebt man die vier Atome auf den Kantenmitten in Richtung des zentralen Vertex derart, daß sie die jeweiligen Kanten im Verhältnis $1 : \tau$ teilen (Abb.3.2).

Eine weitere Modifikation der TI-Dekoration wurde von Audier [1] als Strukturmodell für die ikosaedrische Phase von Al_6CuLi_3 vorgeschlagen. Dabei werden nur zwei der vier Atome im Innern des Rhombendodekaeders durch Atome der Sorte B ersetzt. Die Atome der Sorte B entsprechen in diesem Strukturmodell den Lithiumatomen. A-Atome, die auf den Vertices liegen, werden mit den Aluminiumatomen, auf den Kantenmitten liegende mit den Kupferatomen identifiziert.

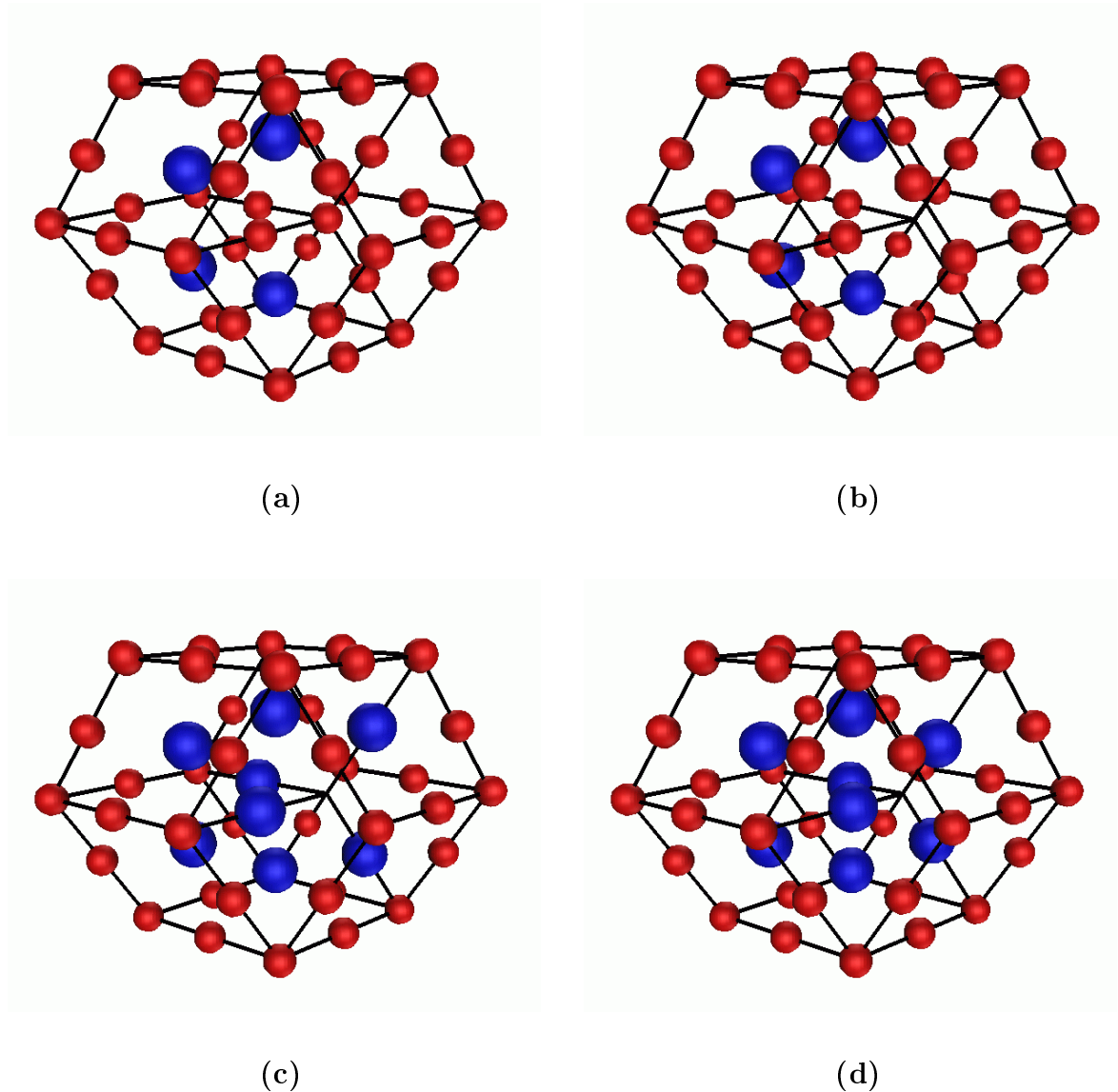


Abbildung 3.2: Übergang von der TI-Dekoration zum binären ikosaedrischen Modell: Im ersten Schritt wird das Atom der Sorte A auf dem inneren Vertex des Rhombododekaeders entfernt (a) \rightarrow (b). Anschließend werden die vier benachbarten Atome auf den Kantenmitten durch Atome der Sorte B ersetzt (b) \rightarrow (c). Im letzten Schritt verschiebt man die vier Atome auf den Kantenmitten so in Richtung des zentralen Vertex, daß sie die jeweiligen Kanten im Verhältnis $1 : \tau$ teilen (c) \rightarrow (d).

Kapitel 4

Flips im binären ikosaedrischen Modell

Der Begriff des phasonischen Flips wurde in Abschnitt 2.5 vorgestellt. Die Flips bewirken durch den Sprung eines Vertex eine Umordnung der Tilingbausteine. Speziell beim binären ikosaedrischen Modell hängt die Dekoration des Quasigitters jedoch von der lokalen Vertexkonfiguration ab (siehe Abschnitt 3.3). Da durch das Auftreten phasonischer Flips lokale Vertexkonfigurationen modifiziert werden, stellt sich die Frage, wie sich die Flips des Tilings auf die Atome der Dekoration auswirken. Ziel dieses Kapitels ist die Untersuchung der atomaren Flips im binären ikosaedrischen Modell.

4.1 Konstruktion des modifizierten Tilings

In den vorherigen Abschnitten wurde das binäre ikosaedrische Modell als Modifikation der TI-Dekoration des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings beschrieben. Bei einer solchen Vorgehensweise wird die Dekoration der Rhomboeder, die in einem rhombischen Dodekaeder enthalten sind, modifiziert. Das binäre ikosaedrische Modell entsteht demnach aus der Dekoration eines Tilings, das als Strukturelemente sowohl die oblaten und prolaten Rhomboeder als auch das Rhombendodekaeder enthält. Die Erzeugung dieses modifizierten Quasigitters erfolgt im Streifenprojektionsformalismus durch Modifikation des Akzeptanzbereichs.

Um das modifizierte Tiling zu erhalten, müssen aus dem dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tiling bestimmte Vertizes entfernt werden. Hierbei handelt es sich um die bereits in Abschnitt 3.3 erwähnten Vertizes im Innern der rhombischen Dodekaeder. Bei der Erzeugung von Quasigittern durch den Streifenprojektionsformalismus entscheidet die Gestalt des Auswahlfensters, welche Punkte des Hypergitters \mathbb{Z}^n auf den physikalischen Raum projiziert werden. Das Auswahlfenster \mathbb{A} wird nun so verändert, daß die Punkte im Innern der Dodekaeder nicht in den physikalischen Raum \mathbb{E}^3 projiziert werden und folglich das modifizierte Tiling entsteht. Der zu entfernende Vertex im Innern des Dodekaeders besitzt das charakteristische Merkmal, daß genau vier Rhomboeder, zwei oblate und zwei prolate, diesen Punkt enthalten. Notwendige Voraussetzung hierfür ist, daß zwei oblate

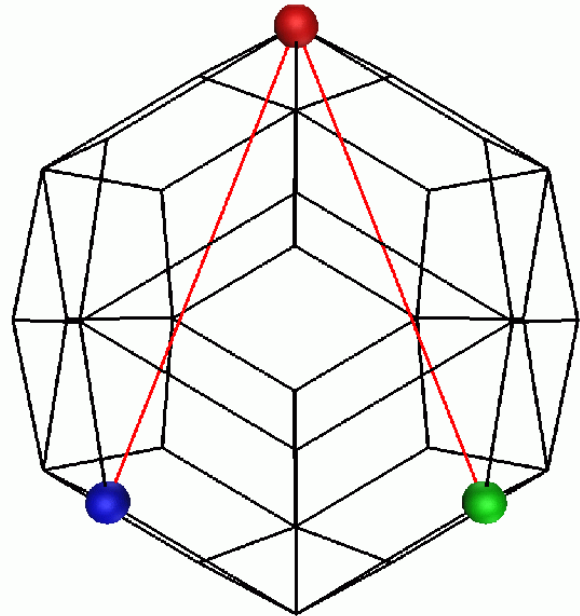


Abbildung 4.1: Das für den inneren Vertex des Dodekaeders charakteristische Zweibein im physikalischen Raum (links) und im Orthogonalraum (rechts). Die Vektoren des Dreibeins entsprechen den Verbindungsstrecken zwischen einer fünfzähligen und zwei dreizähligen Ecken des Triakontaeders.

Rhomboeder eine gemeinsame Facette besitzen. Diese Konfiguration ist eindeutig durch ein Zweibein charakterisiert, das aus dem inneren Vertex und den kurzen Raumdiagonalen der oblaten Rhomboeder besteht (siehe Abb. 4.1). Diese Vertexkonfiguration darf im modifizierten Tiling nicht auftreten. Bildet man das Zweibein mit Hilfe des Isomorphismus φ von \mathbb{L}^{\parallel} auf \mathbb{L}^{\perp} ab, so werden die beiden Vektoren des Zweibeins um den Faktor τ^3 skaliert (siehe Abb. 4.1). Das Auswahlfenster muß folglich so modifiziert werden, daß die drei Endpunkte eines solchen Zweibeins nie gleichzeitig im Inneren des Auswahlfensters zu liegen kommen. Das Auswahlfenster zur Erzeugung des dreidimensionalen Penrose-Tilings ist das rhombische Triakontaeder, dessen Kantenlänge der Quasigitterkonstanten a entspricht.

Die orthogonalen Projektionen $\{\pi_{\perp}(p)\}$ der Quasigitterpunkte in den Orthogonalraum liegen dicht im Auswahlfenster \mathbb{A} . Hierbei bestimmt die lokale Vertexumgebung eines Quasigitterpunkts $\pi_{\parallel}(p)$ im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} , in welchem Bereich von \mathbb{A} die Orthogonalprojektion $\pi_{\perp}(p)$ liegt. Umgekehrt bestimmt der Ort der Orthogonalprojektion $\pi_{\perp}(p)$ eindeutig seine Vertexumgebung im physikalischen Raum \mathbb{E}^{\parallel} . So läßt sich das Auswahlfenster \mathbb{A} in Bereiche mit jeweils gleichen lokalen Vertexkonfigurationen zerlegen [11]. Die folgenden Betrachtungen beschränken sich auf das Tetraeder mit den Ecken $p_0 := (0, 0, 0)$, $p_1 := \alpha(1, 0, \tau^2)$, $p_2 := \alpha(0, \tau, \tau^2)$, $p_3 := \alpha(0, 0, \tau^2)$. Die Gestalt des

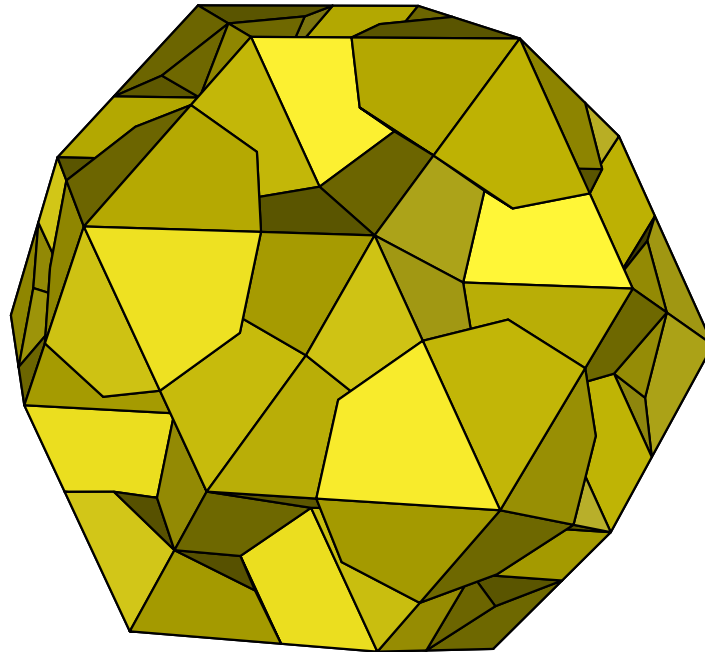


Abbildung 4.2: Das Auswahlfenster zur Erzeugung des modifizierten Tilings.

modifizierten Akzeptanzfensters ergibt sich aus diesem Sektor und der Symmetrie des Triakontaeders.

Die zu entfernenden Punkte stellen eine Untermenge jener Vertizes dar, die genau vier Nachbarn mit Abstand eins besitzen. Der Bereich, in dem diese Punkte liegen, ist ebenfalls ein Tetraeder. Die beiden Tetraeder haben eine gemeinsame Facette, die auf der Oberfläche des Triakontaeders liegt und durch die Punkte p_1, p_2 und p_3 gegeben ist. Die vierte Ecke des neuen Tetraeders ist durch den Punkt $p_4 := \alpha(0, 0, 2)$ gegeben [16]. Da die zu entfernenden Bereiche des Akzeptanzfensters in diesem Tetraeder enthalten sind, bleiben die Ecken und Kanten des Triakontaeders durch die Modifikation unverändert. Mit der Bedingung, daß die drei Endpunkte des Zweibeins nicht gleichzeitig im Innern des Auswahlfensters liegen dürfen, lassen sich die zu entfernenden Bereiche des Triakontaeders bestimmen. Bewegt man den Mittelpunkt des Zweibeins über die Kanten des Triakontaeders, so ergeben die „Spuren“ der Zweibeinvektoren die Kanten des modifizierten Akzeptanzfensters. Das so entstehende Akzeptanzfenster ist in Abb. 4.2 dargestellt. Der Fenstersektor des modifizier-

ten Akzeptanzfensters läßt sich in zwei Tetraeder mit den Eckpunkten p_0, p_1, p_2, p_4 bzw. $p_2, p_5 := \alpha(0, \tau^{-2}, \tau^2), p_6 := \alpha(\tau^{-1}, \tau^{-1}, \tau^2), p_8 := \alpha(0, \tau^{-1}, 2\tau - 1)$ zerlegen.

Das modifizierte Tiling erhält man, indem man den Akzeptanzbereich im Streifenprojektionsformalismus durch das modifizierte Auswahlfenster ersetzt. Im Schnittformalismus sind dementsprechend die atomaren Hyperflächen durch das modifizierte Fenster zu ersetzen. Das modifizierte Tiling enthält als Strukturelemente die Rhomboeder des dreidimensionalen Penrose-Tilings und den Rhombendodekaeder. Zusätzlich entsteht bei der oben beschriebenen Konstruktion ein neues Strukturelement, das aus drei oblaten und vier prolaten Rhomboedern besteht und im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

Zwischen dem modifizierten Tiling und der in Abschnitt 3.1 beschriebenen US-Dekoration des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings besteht ein enger Zusammenhang. Bei der US-Dekoration werden aus der primitiven Packung Atome entfernt, um die kleinen Atomabstände in der kurzen Raumdiagonalen des oblaten Rhomboeders zu vermeiden. Die kurzen Atom- bzw. Vertexabstände treten im dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Muster in Ringen oder Ketten mit zwei, drei, fünf, sechs, neun und zehn Atomen auf [8]. Um zur US-Dekoration zu gelangen, wird aus den Ketten jedes zweite Atom entfernt. Die Atome einer Kette mit nur zwei Atomen müssen hierbei entfernt werden. Eine solche Anordnung entspricht der Vertexkonfiguration eines einzelnen oblaten Rhomboeders. Folglich werden diese Atome im Fall des modifizierten Tilings nicht entfernt.

4.2 Strukturelemente des modifizierten Tilings

Neben den Rhomboedern und Rhombendodekaedern des Penrose-Tilings enthält das modifizierte Tiling ein viertes Strukturelement, das aus drei oblaten und vier prolaten Rhomboedern gebildet wird. Dieses neue Strukturelement spielt eine wichtige Rolle bei der Betrachtung der atomaren Flips und soll deshalb hier näher beschrieben werden.

Bei der Modifikation des dreidimensionalen Penrose-Tilings werden Vertizes am Ende der kurzen Raumdiagonalen des oblaten Rhomboeders entfernt. Ein solcher Vertex wird entfernt, wenn er in zwei oblaten Rhomboedern enthalten ist. Im dreidimensionalen Penrose-Tiling treten die oblaten Rhomboeder in Ketten aus einem, zwei, vier, fünf, acht oder zehn Rhomboedern auf. Hierbei wird im Fall eines einzelnen Rhomboeders kein Vertex entfernt. Besteht die Kette aus zwei oblaten Rhomboedern, so entfernt man einen gemeinsamen Vertex so, daß ein Rhombendodekaeder entsteht. Für die Ketten aus vier, fünf, acht und zehn Rhomboedern sind hingegen die zu entfernenden Vertizes nicht eindeutig bestimmt.

In Abschnitt 4.1 wurde das Akzeptanzfenster unter der Bedingung modifiziert, daß im modifizierten Tiling keine Ketten aus zwei oblaten Rhomboedern auftreten dürfen. Diese Bedingung läßt sich für eine Kette mit vier oblaten Rhomboedern erfüllen, indem man zwei Vertizes aus den beiden äußeren Rhomboedern so entfernt, daß zwei Rhombendode-

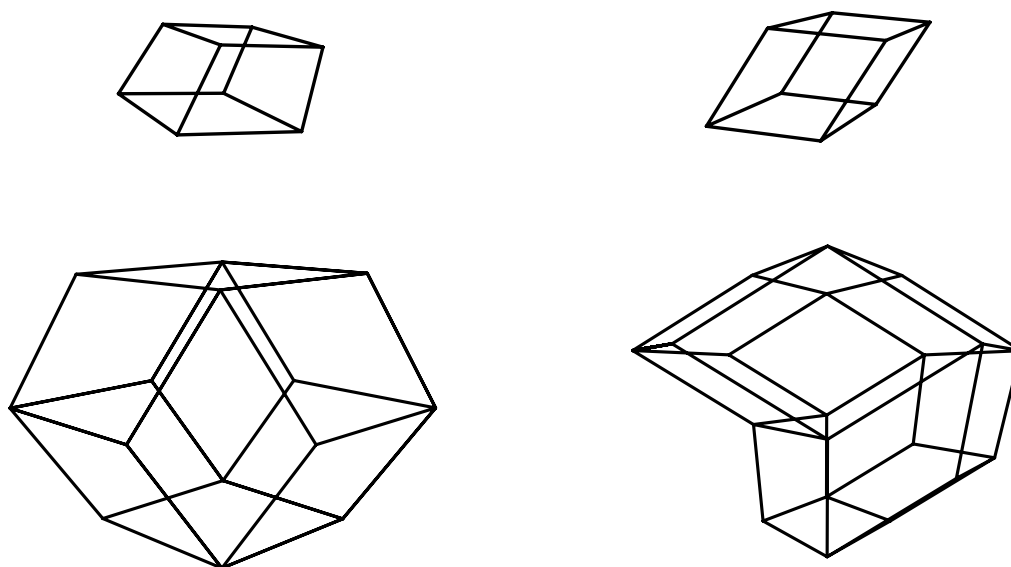


Abbildung 4.3: Strukturelemente des modifizierten Tilings: oblates und prolates Rhomboeder (oben), Rhombendodekaeder (unten links), neues Strukturelement (unten rechts)

kaeder entstehen. Andererseits ist die Bedingung ebenfalls erfüllt, wenn die zwei Vertizes der Raumdiagonalen eines der beiden inneren Rhomboeder entfernt werden. Werden zwei solche Vertizes entfernt, so entsteht statt der zwei Rhombendodekaeder das neue Strukturelement, das aus drei oblaten und vier prolaten Rhomboedern besteht. Dabei lassen sich wiederum zwei oblate und zwei prolates Rhomboeder zu einem Rhombendodekaeder zusammenfassen, so daß man das neue Strukturelement auch als Vereinigung eines Dodekaders mit einem oblaten und zwei prolaten Rhomboedern auffassen kann. Das ist insbesondere für die Dekoration des Strukturelements mit Atomen von Bedeutung.

Wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, läßt sich der Akzeptanzbereich des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings in Bereiche mit jeweils gleicher Vertexkonfiguration zerlegen. Nach Henley [8] lassen sich so auch die Vertizes innerhalb der Ketten aus oblaten Rhomboedern klassifizieren. Durch eine solche Betrachtung ist es möglich, das Akzeptanzfenster so zu modifizieren, daß das entstehende Tiling nur Rhombendodekaeder und oblate bzw. prolates Rhomboeder enthält. Die dafür notwendigen Modifikationen des Akzeptanzfensters erfordern eine feine Zerlegung des Akzeptanzbereichs in Bereiche mit gleicher Vertexkonfiguration. Eine solche Zerlegung des Akzeptanzfensters setzt jedoch eine genaue Kenntnis der im Tiling vorkommenden Vertexkonfigurationen voraus.

Das aus dieser Betrachtung resultierende Akzeptanzfenster unterscheidet sich von dem

in Abschnitt 4.1 beschrieben nur wenig. Deshalb tritt das neue Strukturelement nur an ganz bestimmten Stellen der Ringe aus acht bzw. zehn oblaten Rhomboedern auf. Da diese Stellen durch bestimmte Vertexkonfigurationen charakterisiert sind, ergibt sich die Dekoration des neuen Strukturelements aus der lokalen Vertexumgebung. Die Strukturelemente des modifizierten Tilings sind in Abb. 4.3 dargestellt.

4.3 Flips im modifizierten Tiling

Wie in Abschnitt 2.5 beschrieben, äußern sich phasonische Flips im Tiling durch Sprünge der Tilingvertizes, die eine verzerrungsfreie Umordnung der Tilingbausteine zur Folge haben. Im Streifenprojektionsformalismus treten die phasonischen Flips auf, wenn der Auswahlstreifen S in Richtung des Orthogonalraums \mathbb{E}^\perp verschoben wird und ein Gitterpunkt $p \in \mathbb{Z}$ des Hypergitters den Auswahlstreifen verläßt. Im Orthogonalraum \mathbb{E}^\perp entspricht das der Situation, daß die Orthogonalprojektion $\pi_\perp(p) \in \mathbb{E}^\perp$ von p das Auswahlfenster \mathbb{A} verläßt. Im Fall des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings ist das Auswahlfenster das in Abschnitt 2.3.2 beschriebene Triakontaeder. Verschiebungen des Triakontaeders im hier dreidimensionalen Orthogonalraum \mathbb{E}^\perp bewirken, daß unendlich viele Punkte $\pi_\perp(p)$ das Triakontaeder verlassen. Da die Punkte $\{\pi_\perp(p)\}$ dicht in \mathbb{E}^\perp liegen, tritt für jeden Punkt $\pi_\perp(p)$, der den Triakontaeder verläßt, auf der gegenüberliegenden Seite ein Punkt $\pi_\perp(\tilde{p})$ in den Triakontaeder ein. Beim Streifenprojektionsformalismus werden nur die Hypergitterpunkte $p \in \mathbb{Z}$ in den physikalischen Raum projiziert, die sich im Auswahlfenster \mathbb{A} befinden. Der phasonische Flip im Parallelraum entspricht dem „Sprung“ des Punktes $\pi_\parallel(p)$, dessen Orthogonalprojektion $\pi_\perp(p)$ das Akzeptanzfenster verläßt, auf die Position des Punktes $\pi_\parallel(\tilde{p})$, dessen Orthogonalprojektion $\pi_\perp(\tilde{p})$ in das Akzeptanzfenster eintritt. Aus dieser Betrachtung folgt, daß die möglichen Flipvektoren im Orthogonalraum durch die Verbindungsvektoren der parallelen Seiten des Akzeptanzfensters gegeben sind.

Beim rhombischen Triakontaeder sind jeweils zwei gegenüberliegende Rauten parallel. Die möglichen Flipvektoren sind hierbei die Verbindungsvektoren zwischen jeweils zwei dieser Rauten. Die Flipvektoren im Orthogonalraum besitzen die Länge $2\alpha \cdot (1 + \tau)$ und weisen in zweizählige Richtung. Mit Hilfe des Isomorphismus φ zwischen \mathbb{L}^\perp und \mathbb{L}^\parallel lassen sich die Vektoren in den physikalischen Raum übertragen. Im physikalischen Raum äußern sich die Flips des dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tilings als Sprung des inneren Vertex des aus zwei prolaten und zwei oblaten gebildeten Rhombendodekaeders. Der Sprungvektor weist hierbei in zweizählige Richtung und besitzt die Länge $2 \cdot \alpha\tau^{-1}$. Ein solcher Flip ist in Abb. 4.4 dargestellt.

Um die möglichen Flips im modifizierten Tiling zu ermitteln, bestimmt man die parallelen Flächen des modifizierten Auswahlfensters. Die möglichen Flipvektoren ergeben sich aus den Verbindungsvektoren der parallelen Flächen.

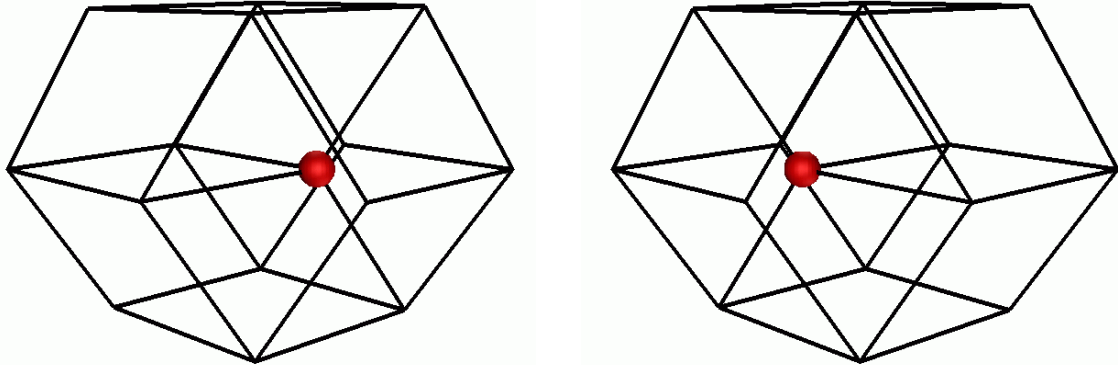


Abbildung 4.4: Flip im dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tiling. Der innere Vertex des Rhombendodekaeders „springt“ in zweizähliger Richtung, die Flipstrecke beträgt $2 \cdot \alpha\tau^{-1}$

Aus der Konstruktion des modifizierten Akzeptanzfensters ergibt sich, daß die Randflächen des neuen Fensters in 15 verschiedenen Orientierungen auftreten. Die 15 Orientierungen der Flächennormalen entsprechen den Orientierungen der zweizähligen Achsen des Triakontaeders. Deshalb genügt es, die parallelen Flächen einer Orientierung zu untersuchen. In Abb. 4.5 sind die parallelen Flächen des modifizierten Akzeptanzfensters für eine Orientierung dargestellt. Die möglichen Flipvektoren des Tilings sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Im dreidimensionalen Penrose-Tiling tritt nur ein Flipvektor auf. Dieser Flipvektor ist auch im modifizierten Tiling möglich und in Tabelle 4.1 mit f_0 bezeichnet. Die Vektoren beziehen sich auf die Flächen, deren Normalenvektor entlang der z-Achse gerichtet ist.

	f^{\parallel}	f^{\perp}	$ f^{\parallel} $	$ f^{\perp} $	Orientierung
f_0	$\alpha(0, 0, 2\tau^{-1})$	$\alpha(0, 0, 2\tau^2)$.64984	2.75276	zweizählig
f_1	$\alpha(0, 0, 2)$	$\alpha(0, 0, 2\tau)$	1.05146	1.70130	zweizählig
f_2	$\alpha(0, -1, \tau^{-2})$	$\alpha(0, -\tau, \tau^3)$.56278	2.38396	dreizählig
f_3	$\alpha(0, 1, \tau^{-2})$	$\alpha(0, \tau, \tau^3)$.56278	2.38396	dreizählig
f_4	$\alpha(0, -\tau^{-1}, 1 - 3\tau)$	$\alpha(0, \tau^2, \tau + 3)$	2.02622	2.427844	

Tabelle 4.1: Tabelle der möglichen Flipvektoren des modifizierten Tilings

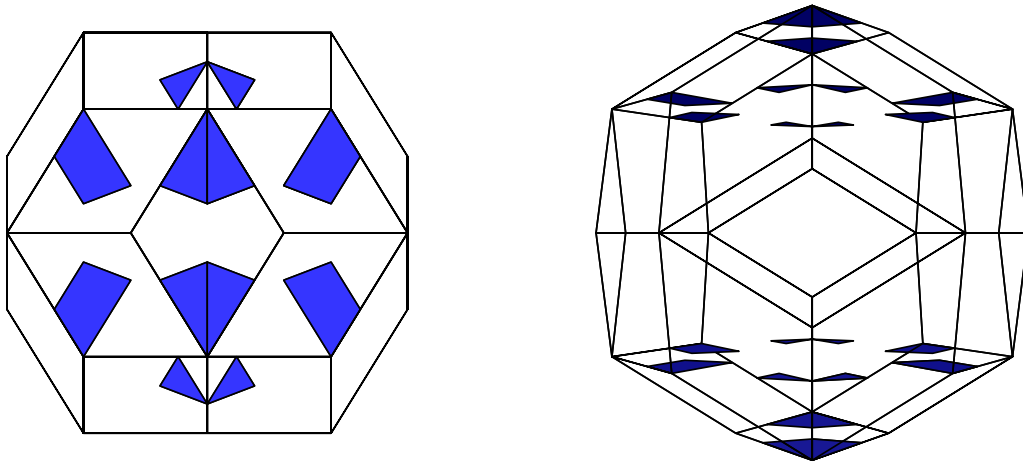


Abbildung 4.5: Darstellung der parallelen Seiten des modifizierten Fensters. Projektion in die $x-y$ - Ebene (links) und perspektivische Darstellung (rechts)

Beim Triakontaeder sind die gegenüberliegenden Rauten die einzigen parallelen Seiten. Die sinnvolle Zuordnung zwischen dem Punkt, der das Fenster verläßt, und dem Punkt, der neu in das Fenster eintritt, ist hierbei offensichtlich. Deshalb treten im dreidimensionalen Penrose-Tiling nur die oben beschriebenen Flips in zweizähliger Richtung auf.

Bei einer Verschiebung des modifizierten Akzeptanzfensters „springen“ mehrere benachbarte Vertizes des Tilings gleichzeitig. Deshalb ist eine sinnvolle Zuordnung der Vertizes in diesem Fall nicht mehr offensichtlich. Die Betrachtung der parallelen Flächen des modifizierten Akzeptanzbereichs ermöglicht daher nur die Berechnung der möglichen Flipvektoren.

Um die Flips im modifizierten Tiling zu bestimmen, wurde ein Ausschnitt des modifizierten Tilings mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus erzeugt. Nun wurde das Akzeptanzfenster im Orthogonalraum verschoben und der gleiche Ausschnitt des Tilings mit Hilfe des verschobenen Fensters erzeugt. Hierbei wurde als Verschiebungsvektor des Akzeptanzbereichs im Orthogonalraum ein möglichst kleiner Vektor in Richtung der z -Achse des \mathbb{R}^3 gewählt. Das hat zur Folge, daß die Punkte des \mathbb{Z} -Moduls \mathbb{L}^\perp im Orthogonalraum das Akzeptanzfenster nur in Richtung der z -Achse verlassen können. Die am Flip beteiligten Gitterpunkte liegen wegen der Wahl des Verschiebungsvektors in vier parallelen Ebenen,

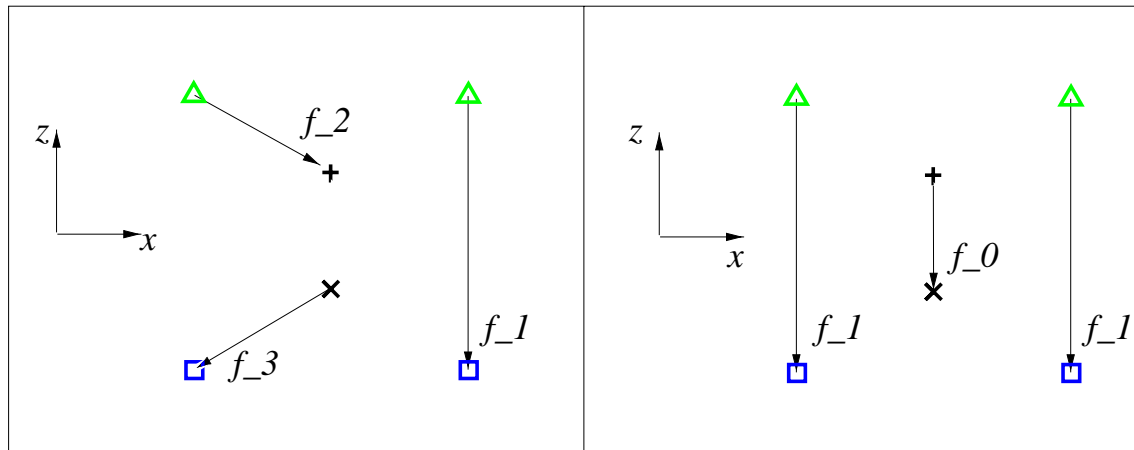


Abbildung 4.6: Darstellung eines Flips mit drei beteiligten Vertizes. Die Symbole der Verticespositionen sind entsprechend Abb. 4.7 gewählt. Hierbei sind die Flipvektoren nicht eindeutig. Im rechten Bild treten nur Flipvektoren in zweizähliger Richtung auf. Links: Realisierung mit einem Vektor in zweizähliger und zwei Vektoren in dreizähligen Richtungen.

deren Normalenvektoren in z-Richtung orientiert sind. Zur Ermittlung der Flips des modifizierten Tilings müssen dementsprechend nur solche Schichten betrachtet werden, die am Flip beteiligte Vertizes enthalten. In Abb.4.7 und 4.8 sind Ausschnitte der Schichtbilder dargestellt.

Durch den Vergleich der beiden Ausschnitte lassen sich die Sprünge der Vertizes ermitteln. Im dreidimensionalen Penrose-Tiling lassen sich die Flips des Tilings durch Sprünge einzelner Vertizes beschreiben, wobei die benachbarten Vertizes ihre Position beibehalten. Im modifizierten Tiling ist dies nicht der Fall. Hier treten drei verschiedene Flips auf, die durch Sprünge von einem, zwei oder drei Vertizes gekennzeichnet sind. Der Vergleich der Schichtbilder liefert die Positionen der Vertizes vor bzw. nach der Verschiebung des Akzeptanzfensters. Die Verbindungsvektoren der gesprungenen Vertizes vor bzw. nach der Verschiebung ergeben die Flipvektoren des Tilings.

In Abb. 4.6 ist ein Flip des modifizierten Tilings dargestellt. Da hier drei Vertizes beteiligt sind, ergeben sich durch unterschiedliche Zuordnung der Verticespositionen vor bzw. nach der Verschiebung des Akzeptanzbereichs unterschiedliche Flipvektoren. Gleiches gilt für den Flip mit zwei beteiligten Vertizes. Dieser Flip lässt sich mit Hilfe der Flipvektoren f_0 und f_1 oder mit den Vektoren f_2 und f_3 darstellen. Im Fall des Flips mit nur einem beteiligten Vertex ist hingegen der Flipvektor eindeutig durch den Vektor f_1 gegeben. Für die Betrachtung der atomaren Flips genügt es, die Vertexkonfigurationen des Gitters vor bzw. nach den Flips zu kennen. Die Zuordnung der Flipvektoren ist hierbei nicht entscheidend.

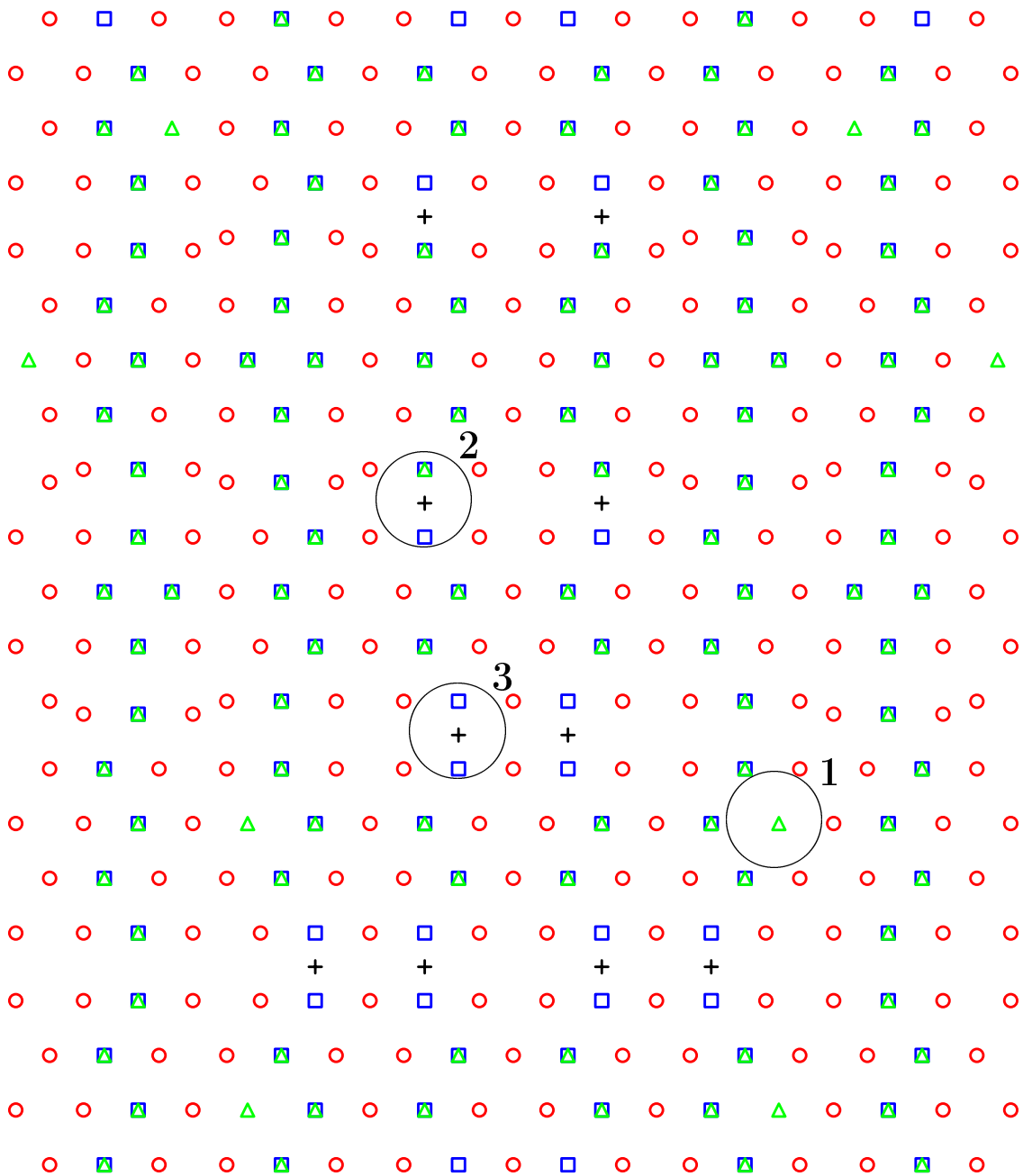


Abbildung 4.7: Ausschnitt aus einem Schichtbild des modifizierten Tilings. Gleiche Symbole entsprechen hierbei Vertizes in gleichen Schichten. Durch den Vergleich mit Abb. 4.8 lassen sich die am Flip beteiligten Vertizes ermitteln. Die Vertizes, die an den Flips beteiligt sind liegen in den durch Quadrate, Dreiecke und Kreuze gekennzeichneten Schichten. Beispiele der drei verschiedenen Flips sind durch Kreise gekennzeichnet.

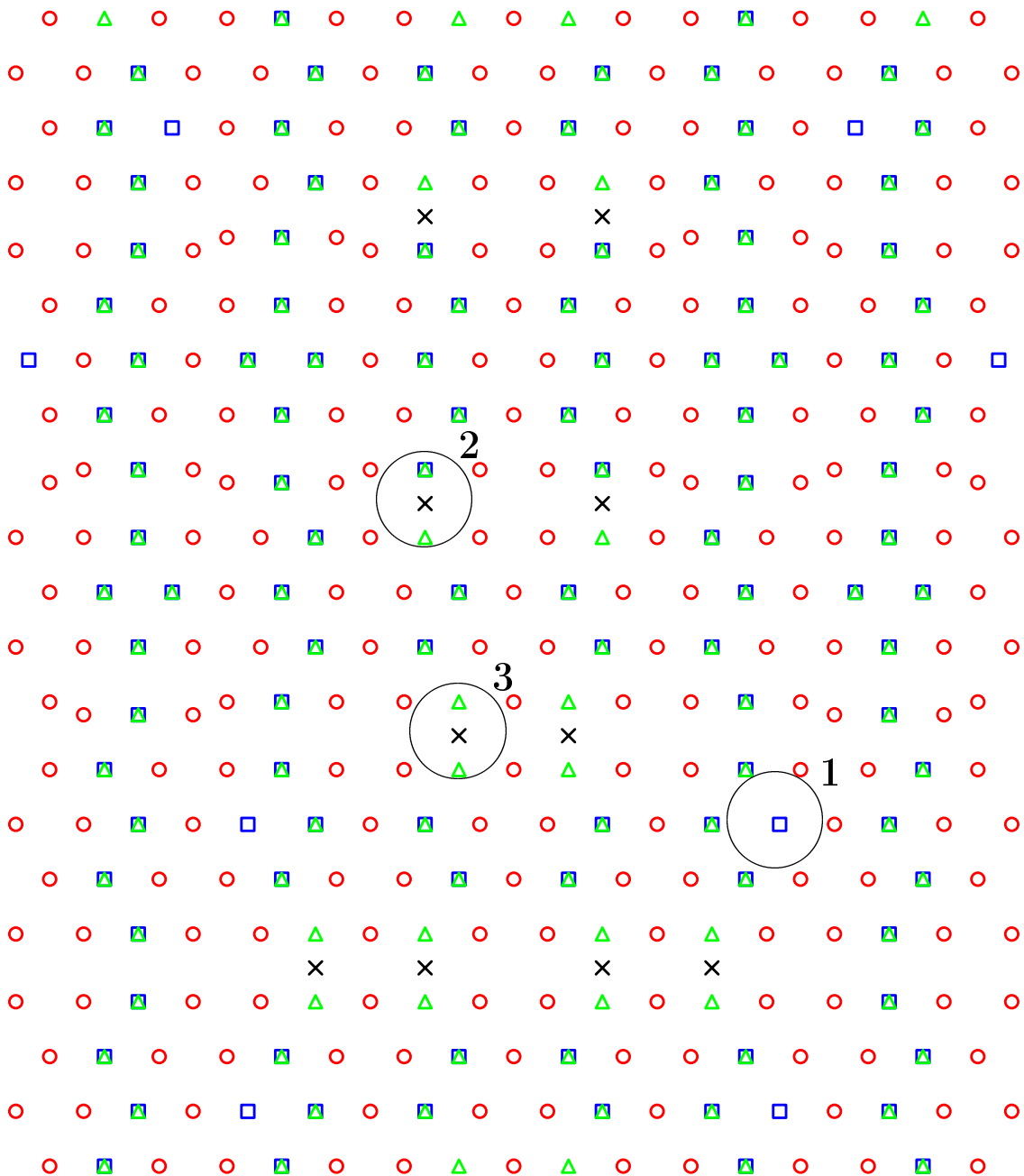


Abbildung 4.8: Ausschnitt aus einem Schichtbild des modifizierten Tilings nach der Verschiebung des Akzeptanzbereichs (vgl. Abb. 4.7). Gleiche Symbole entsprechen hierbei Vertizes in gleichen Schichten. Die Vertizes, die an den Flips beteiligt sind liegen in den durch Quadrate, Dreiecke und Kreuze gekennzeichneten Schichten

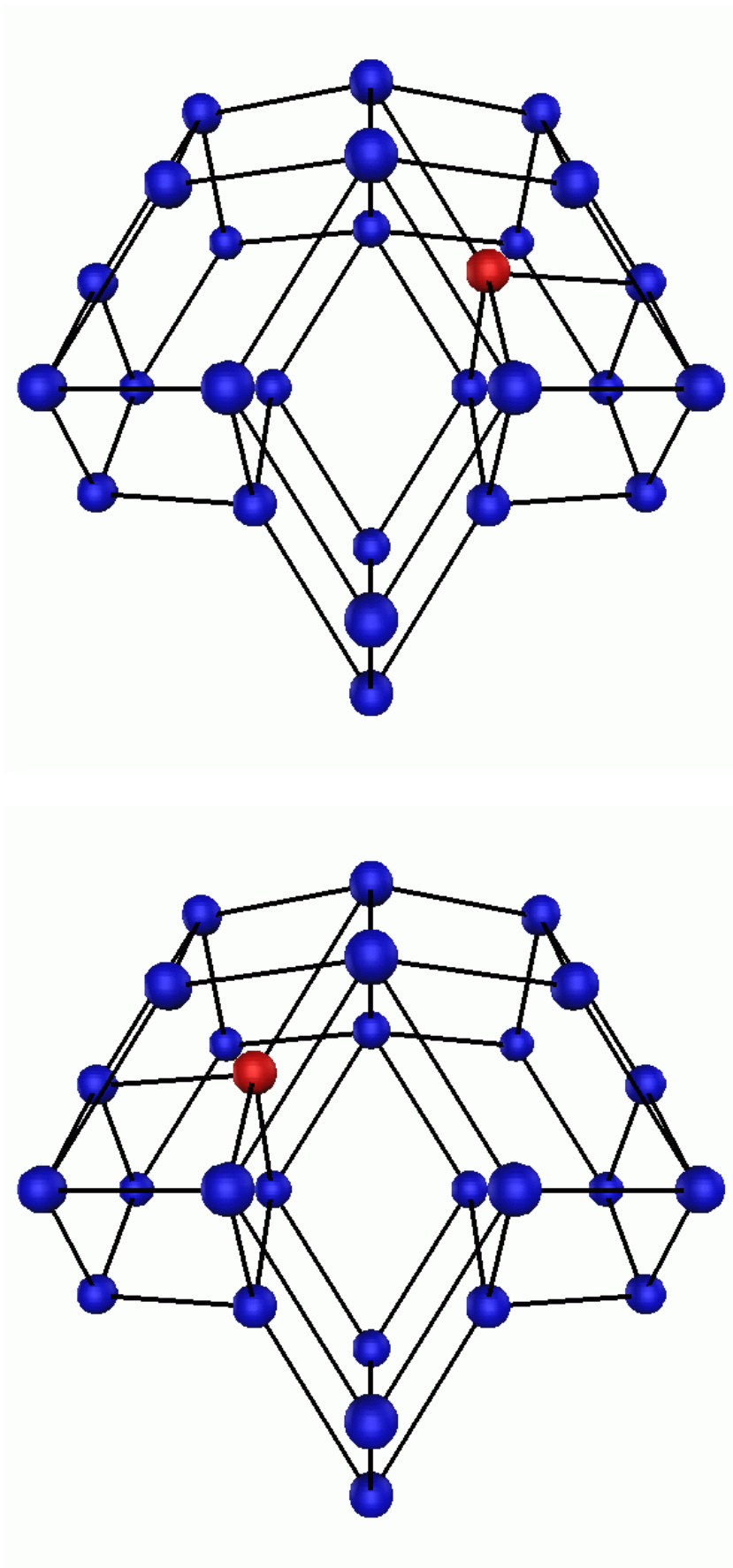


Abbildung 4.9: Flip im modifizierten Tiling mit einem beteiligten Vertex. Darstellung vor der Verschiebung des Akzeptanzbereichs (links) und nach der Verschiebung (rechts). Der springende Vertex ist durch eine rote Kugel gekennzeichnet.

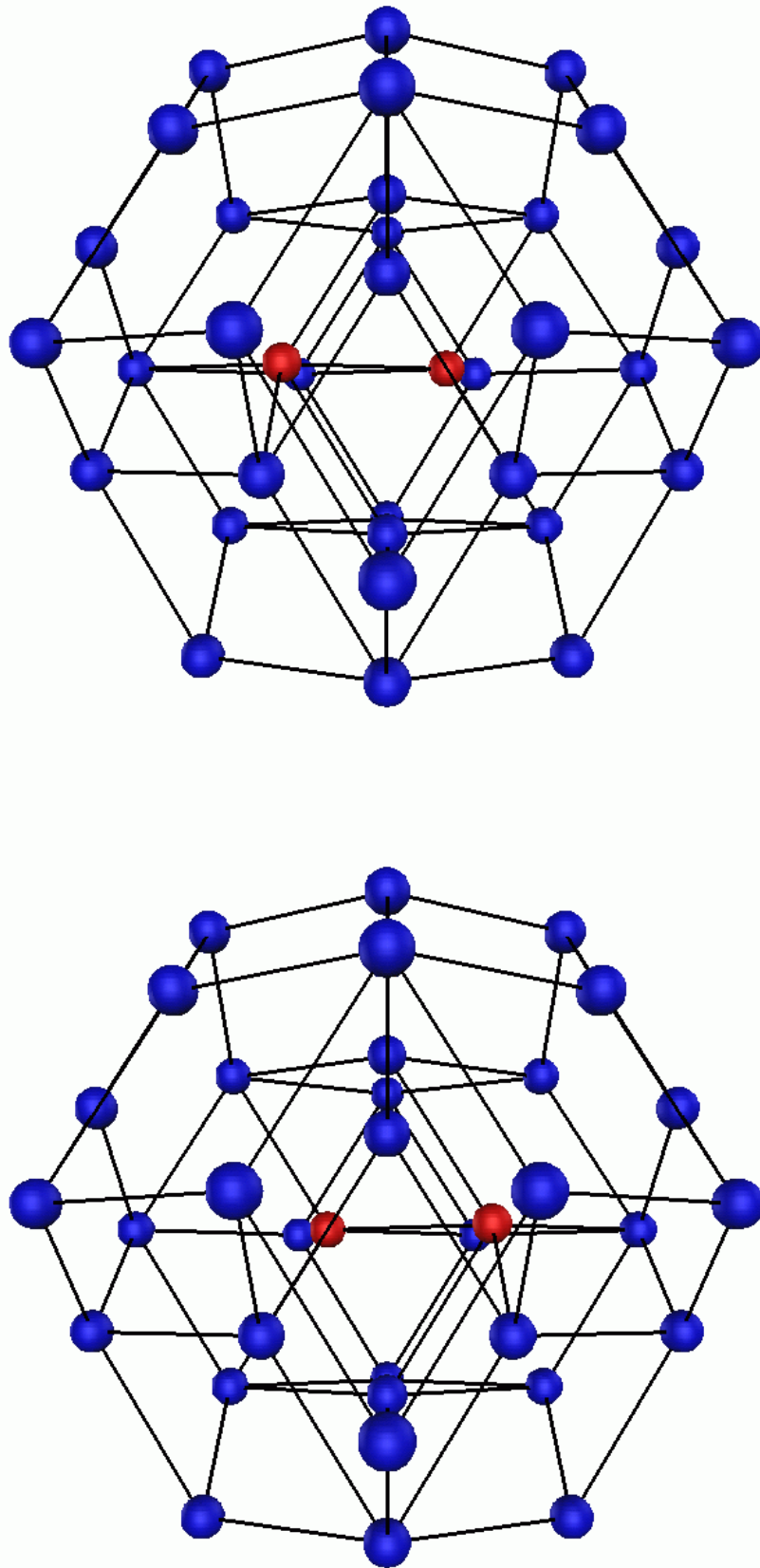


Abbildung 4.10: Flip im modifizierten Tiling mit zwei beteiligten Vertices. Darstellung vor der Verschiebung des Akzeptanzbereichs (links) und nach der Verschiebung (rechts). Die springenden Vertices sind durch rote Kugeln gekennzeichnet.

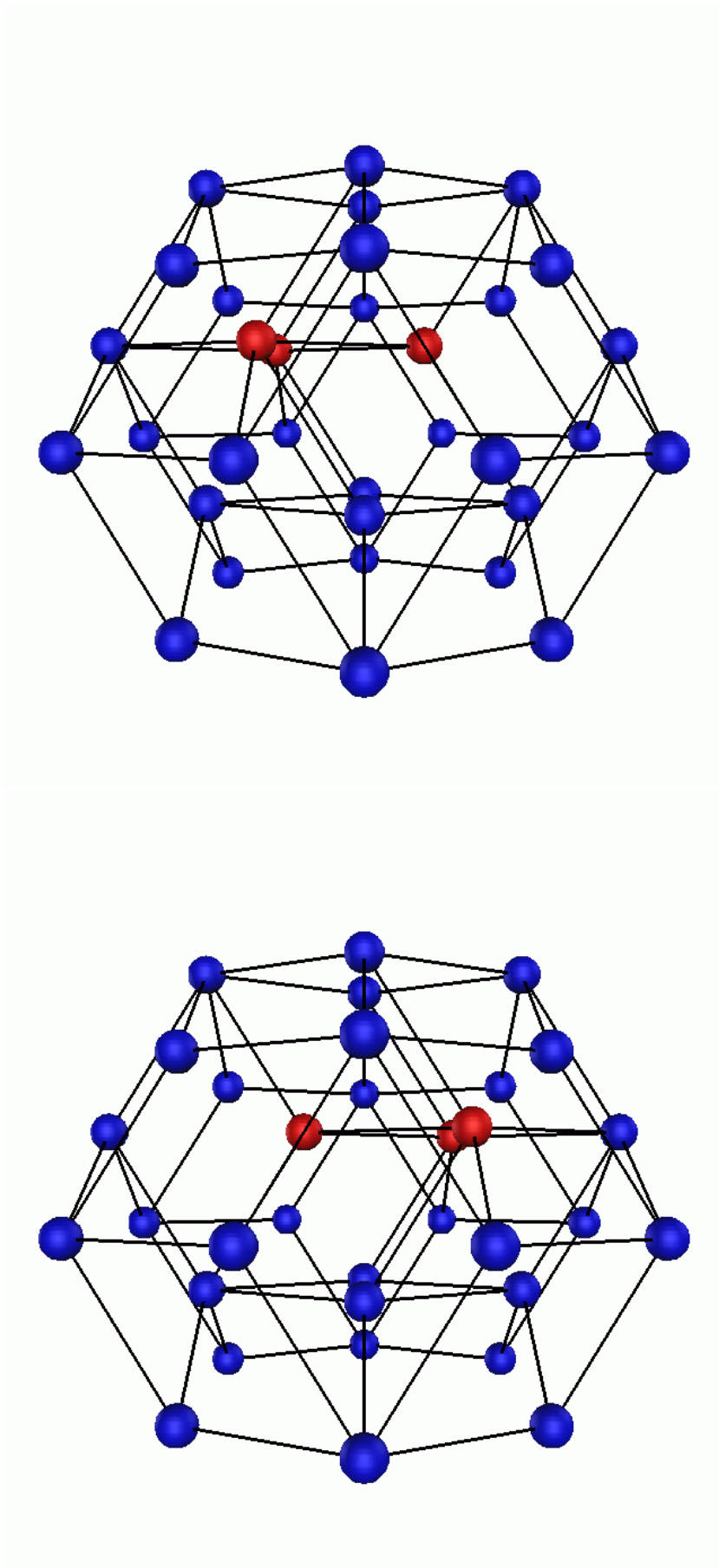


Abbildung 4.11: Flip im modifizierten Tiling mit drei beteiligten Vertices. Darstellung vor der Verschiebung des Akzeptanzbereichs (links) und nach der Verschiebung (rechts). Die springenden Vertices sind durch rote Kugeln gekennzeichnet.

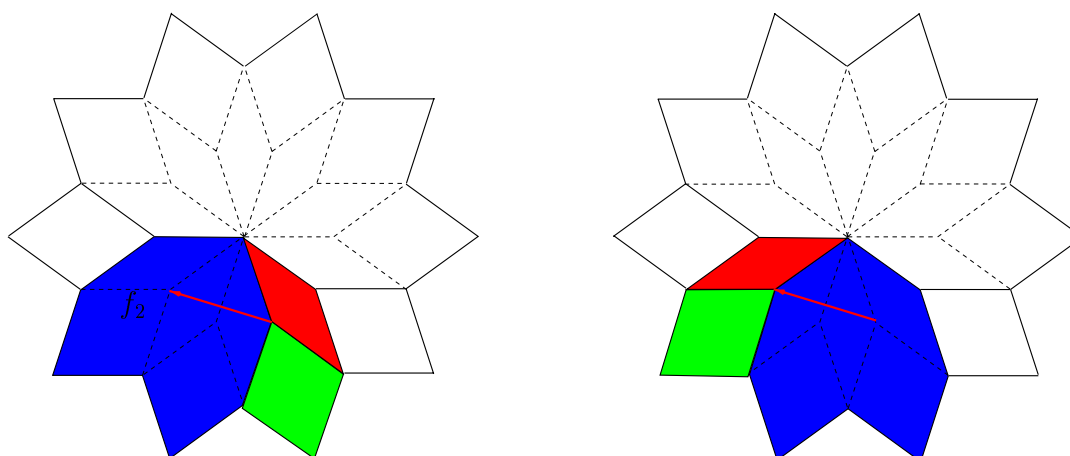


Abbildung 4.12: Projektion eines Rings aus zehn oblaten Rhomboedern. Der Flip mit einem beteiligten Vertex verursacht die Umordnung eines neuen Strukturelements (blau). Der Flipvektor f_2 ist in zweizähliger Richtung orientiert.

Wie bereits erwähnt, bewirken die Sprünge der Vertices eine Umordnung der Kacheln des Tilings. Dabei werden nur die Tiles umgeordnet, die springende Vertices enthalten. Um aus den Vertexpositionen das vollständige Tiling zu erhalten, verbindet man diejenigen Vertices miteinander, deren Abstand gleich der Gitterkonstanten a ist. Die Verbindungslinien stellen die Kanten des Tilings dar. Durch Vergleich des Tilings vor bzw. nach der Verschiebung des Akzeptanzbereichs lassen sich die Tiles ermitteln, die bei den jeweiligen Flips umgeordnet werden. In Abb. 4.9, 4.10 und 4.11 sind die drei verschiedenen Flips des modifizierten Tilings dargestellt.

Der Flip mit Beteiligung eines Vertex tritt innerhalb der Ringe aus zehn oblaten Rhomboedern auf. Eine Verschiebung des Akzeptanzbereichs verursacht die Umordnung von vier Kacheln des Tilings. Die beteiligten Kacheln sind das neue Strukturelement, zwei oblate und ein prolates Rhomboeder. In Abb. 4.12 ist die Projektion eines Rings aus zehn oblaten Rhomboedern dargestellt. Die Projektionsebene ist orthogonal zu einer dreizähligen Achse des Tilings orientiert. Die Projektionen der am Flip beteiligten Kacheln sind farbig gekennzeichnet, wobei die roten Rauten die Projektionen der oblaten, die grünen die der prolates Rhomboeder darstellen. Das am Flip beteiligte neue Strukturelement ist blau gezeichnet.

4.4 Atomare Flips

In diesem Abschnitt werden die atomaren Flips im binären ikosaedrischen Modell (siehe Abschnitt 3.3) betrachtet. Zur Ermittlung der atomaren Flips werden die Kacheln des mo-

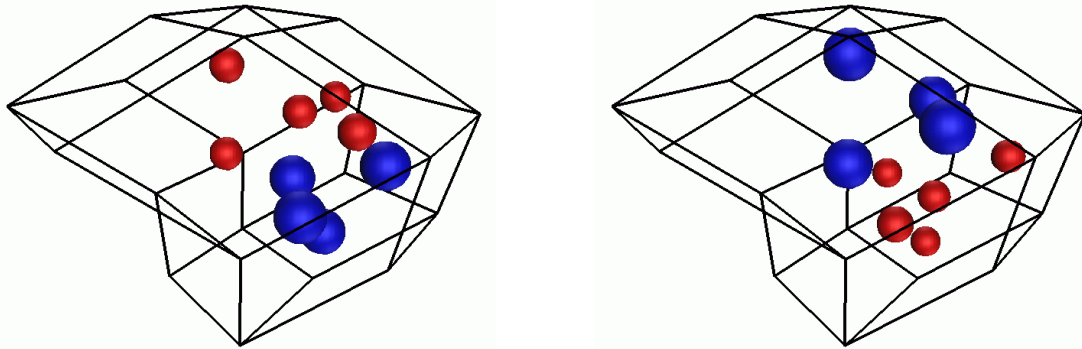


Abbildung 4.13: Zwei verschiedene Dekorationen des neuen Strukturelementes. Dargestellt sind nur die Atome, in denen sich die Dekorationen unterscheiden.

difizierten Tilings mit Atomen dekoriert. Der Vergleich der dekorierten Tilings vor bzw. nach der Ausführung eines Flips liefert die Positionen der am Flip beteiligten Atome. Wie bei den Flips des modifizierten Tilings lassen sich so nur die möglichen Flipvektoren der Atome bestimmen, da nur die Atompositionen vor und nach dem Auftreten eines Flips bekannt sind.

Bei der Dekoration des modifizierten Tilings werden die Rhombendodekaeder und die oblaten bzw. prolatten Rhomboeder wie in Abschnitt 3.3 mit Atomen besetzt. Im modifizierten Tiling tritt das neue Strukturelement (siehe Abb. 4.3) auf, das aus drei oblaten und vier prolatten Rhomboedern zusammengesetzt ist. Dabei lassen sich zwei oblate und zwei prolante Rhomboeder zu einem Rhombendodekaeder zusammenfassen, so daß man das neue Strukturelement aus einem Rhombendodekaeder, einem oblaten und zwei prolatten Rhomboedern zusammensetzen kann. Da die drei oblaten Rhomboeder eine gemeinsame Kante besitzen ist die Zerlegung des neuen Strukturelements in einen Rhombendodekaeder und drei Rhomboeder nicht eindeutig.

Abb. 4.13 zeigt zwei mögliche Dekorationen des neuen Strukturelements. Dabei sind nur die Atome dargestellt, in denen sich die beiden Dekorationen unterscheiden. Durch die verschiedenen Dekorationen des neuen Strukturelements vor bzw. nach der Ausführung eines Flips im modifizierten Gitter entstehen verschiedene atomare Flips. Da das binäre ikosaedrische Modell zwei verschiedene Atomsorten enthält, muß darauf geachtet werden, daß durch die Dekorationen keine sogenannten chemischen Flips entstehen. Darunter versteht man Flips, bei denen Atome der Sorte A in Atome der Sorte B umgewandelt werden. Die Dekorationen des neuen Strukturelements wurden so gewählt, daß möglichst wenige Atome ihre Position verändern und die Flipstrecken möglichst kurz sind.

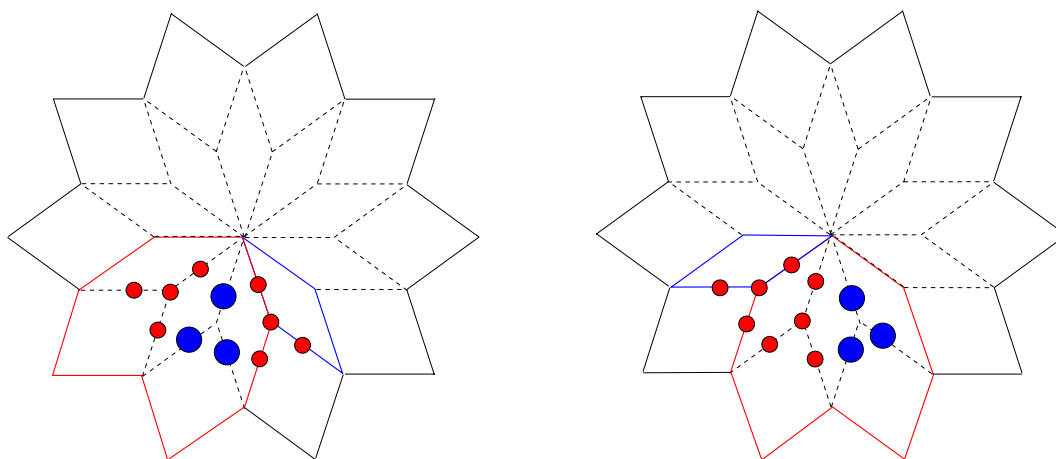


Abbildung 4.14: Projektionsdarstellung des einfachsten atomaren Flips. Der Flip entspricht einer Umordnung von Atomen im Innern des neuen Strukturelements.

In den Abbildungen 4.15, 4.16 und 4.17 sind die atomaren Flips dargestellt, die den Flips des modifizierten Gitters aus Abschnitt 4.3 entsprechen. Der einfachste atomare Flip ist in Abb. 4.15 dargestellt. Dabei ändern fünf Atome der Sorte A und vier der Sorte B ihre Position. Abb. 4.14 zeigt die Projektion des Flips mit neun beteiligten Atomen, wobei die Projektionsebene wie in Abb. 4.12 orthogonal zu einer dreizähligen Achse des Tilings orientiert ist. Der Flip entsteht aus dem Flip des modifizierten Tilings mit einem beteiligten Vertex. In der Abbildung erkennt man, daß der Flip sich durch eine Umordnung von Atomen im Innern des neuen Strukturelements realisieren läßt. Die Umordnung der Atome entspricht dem Übergang zwischen den in Abb. 4.13 rechts bzw. links dargestellten Dekorationen des neuen Strukturelements. Flips dieser Art sind unabhängig von den Sprüngen der Vertices im modifizierten Gitter. Da nur die Dekoration einer Kachel des Tilings verändert wird, muß für das Auftreten dieser Flips kein Vertex des modifizierten Tilings seine Position ändern. Das neue Strukturelement tritt im modifizierten Tiling in den Ringen aus acht bzw. zehn oblaten Rhomboedern auf. Weil die Dekoration des Strukturelements nicht eindeutig vorgegeben ist, kann hier der oben beschriebenen Flip unabhängig von den Flips des Gitters auftreten.

Wie bereits erwähnt, erhält man durch unterschiedliche Dekoration des neuen Strukturelements verschiedene atomare Flips. Das neue Strukturelement ist auch an dem in Abbildung 4.10 dargestellten Flip des modifizierten Tilings beteiligt. Dadurch ergeben sich auch hier durch unterschiedliche Dekorationen verschiedene atomare Flips. Die Dekoration vor bzw. nach dem Auftreten eines Gitterflips wurde wiederum so gewählt, daß möglichst wenige

Atome am Flip beteiligt sind. Abbildung 4.16 zeigt den atomaren Flip, an dem zehn Atome der Sorte A und sechs der Sorte B beteiligt sind.

Im modifizierten Tiling tritt der in Abb. 4.11 gezeigte Flip auf, an dem das neue Strukturelement nicht beteiligt ist. Deshalb ist die Dekoration der Kacheln in diesem Fall eindeutig. An dem atomaren Flip sind fünfzehn Atome der Sorte A und zehn der Sorte B beteiligt. Aufgrund der großen Anzahl der springenden Atome ist die Zuordnung der Atome vor bzw. nach dem Auftreten eines Flips hierbei schwer realisierbar. Wie bei den Flips des modifizierten Gitters ist die Zuordnung der Atome nicht eindeutig. Welche Flipvektoren dabei auftreten, hängt davon ab, wie man den Atomen nach dem Flip die ursprünglichen Atome zuweist.

Durch die oben beschriebenen Betrachtungen erhält man die Atome, in denen sich das dekorierte Tiling nach dem Auftreten eines Flips von dem ursprünglichen unterscheidet. Die möglichen Flipvektoren beschränken sich nicht auf die Verbindungsvektoren zwischen den in den Abbildungen 4.15, 4.16 und 4.17 dargestellten Atompositionen. Ein Sprung eines Atoms läßt sich auch realisieren, indem man ein Atom in den Flip einbezieht, das seine Position nicht zwingend ändern muß. So können die langen Flipstrecken vermieden werden, die insbesondere bei den Flips mit 16 und 25 Atomen auftretenden. Die Zahl der am Flip beteiligten Atome steigt dadurch jedoch und mit ihnen die Zahl der möglichen Flipvektoren.

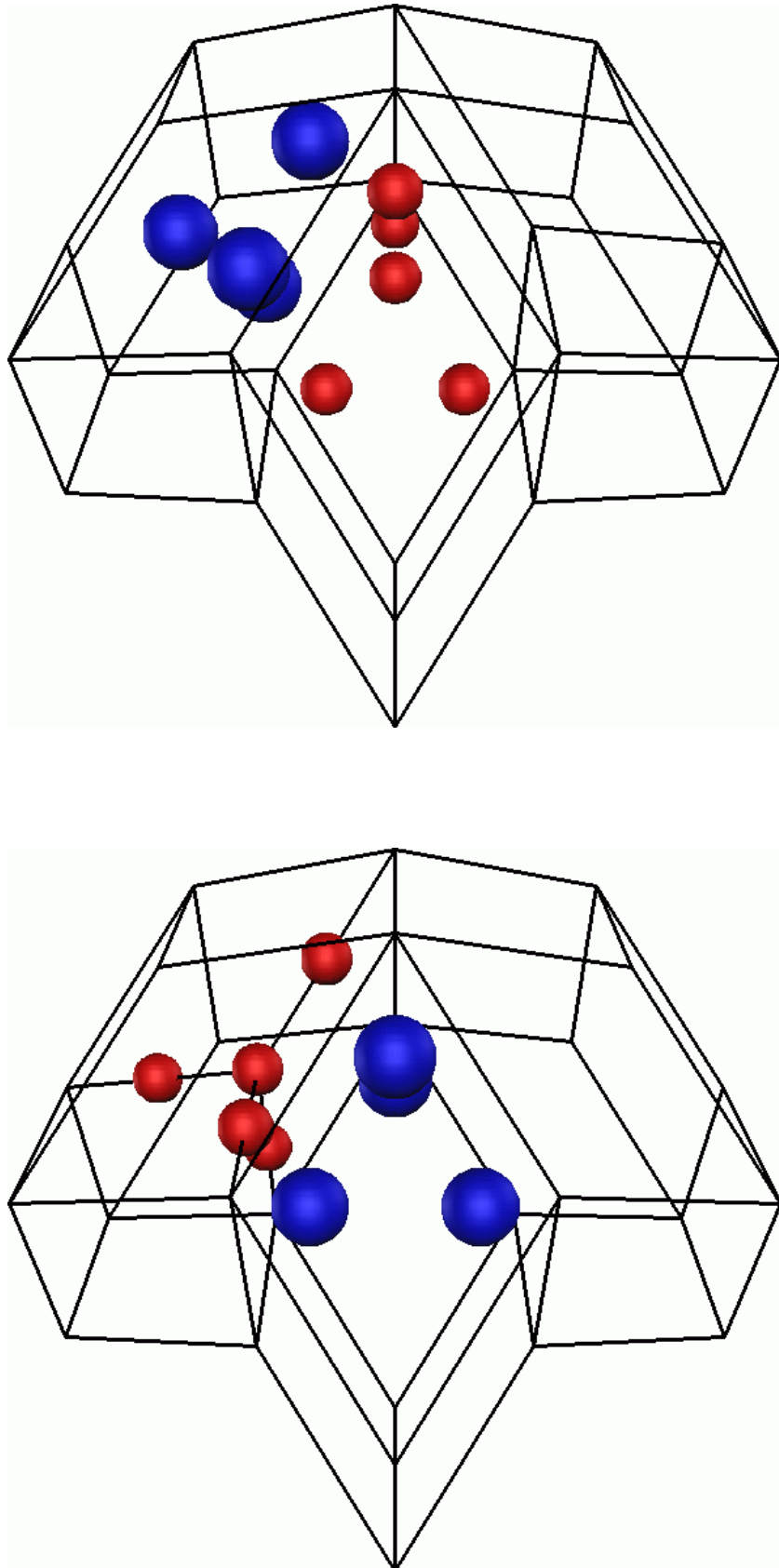


Abbildung 4.15: Perspektivische Darstellung des atomaren Flips, der dem Flip des modifizierten Gitters aus Abb. 4.9 entspricht. Beteiligt sind fünf Atome der Sorte A und vier Atome der Sorte B.

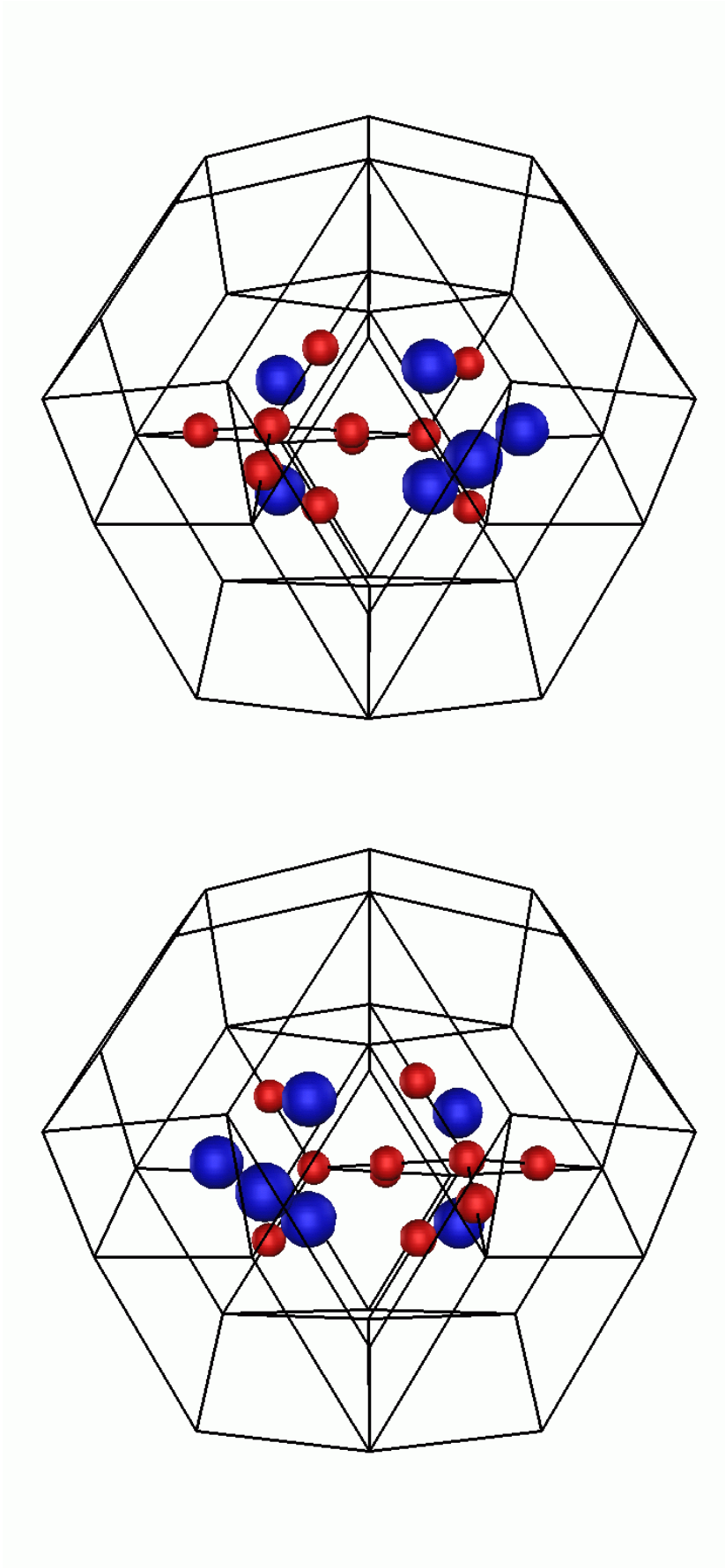


Abbildung 4.16: Perspektivische Darstellung des atomaren Flips, der dem Flip des modifizierten Gitters aus Abb. 4.10 entspricht. Beteiligt sind zehn Atome der Sorte A und sechs Atome der Sorte B.

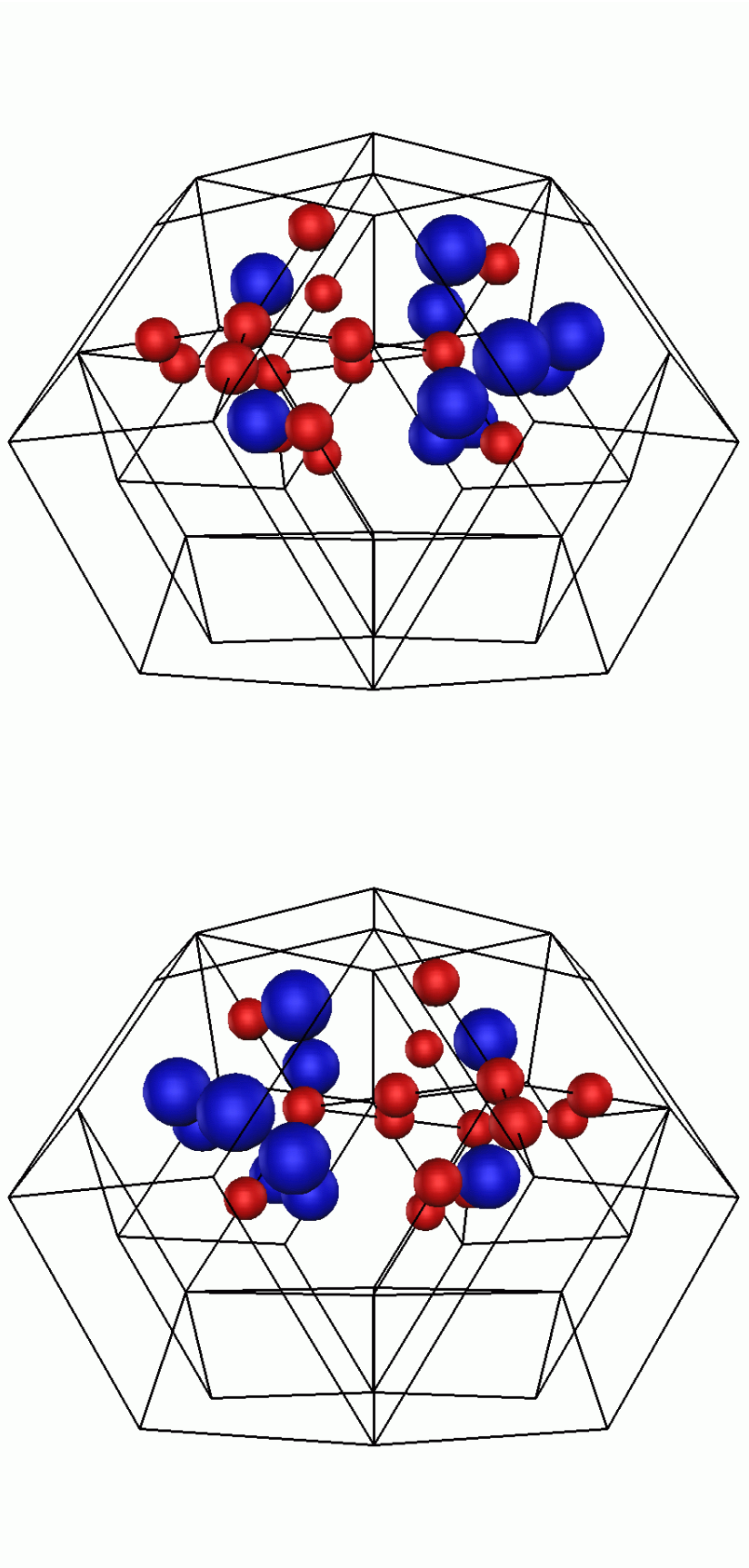


Abbildung 4.17: Perspektivische Darstellung des atomaren Flips, der dem Flip des modifizierten Gitters aus Abb. 4.11 entspricht. Beteiligt sind fünfzehn Atome der Sorte A und zehn Atome der Sorte B.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblicke

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die geometrische Untersuchung der atomaren Dynamik in Quasikristallen. Mit dem phasonischen Freiheitsgrad von Quasikristallen sind Atomsprünge verbunden, die als phasonische Flips bezeichnet werden. Untersucht wurden die phasonischen Flips im binären ikosaedrischen Modell, das ein Strukturmodell für die ikosaedrische Phase von $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$ darstellt.

Zur Ermittlung der atomaren Flips wurde mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus ein Tiling konstruiert, das gegenüber dem dreidimensionalen Ammann-Kramer-Penrose-Tiling modifiziert ist. Das modifizierte Tiling enthält außer den Rhomboedern des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings rhombische Dodekaeder. Zusätzlich tritt ein neues Strukturelement auf, das eine wichtige Rolle bei der Untersuchung der atomaren Flips spielt. Das binäre ikosaedrische Modell entsteht durch Dekoration des modifizierten Tilings mit Atomen.

Zunächst wurden die Flips des modifizierten Tilings untersucht. Die Flips äußern sich im Tiling durch Sprünge der Vertizes. Diese haben eine verzerrungsfreie Umordnung der Kacheln des Tilings zur Folge. Es treten drei verschiedene Flips auf, die durch Sprünge von einem, zwei oder drei Vertizes gekennzeichnet sind. Um aus den Flips des Tilings die atomaren Flips zu ermitteln, wurden die Kacheln des modifizierten Tilings mit Atomen besetzt. Der Vergleich der dekorierten Tilings vor bzw. nach dem Auftreten eines Flips ergab die Atome, die ihre Positionen änderten. Die drei verschiedenen Flips des modifizierten Tilings führten zu drei unterschiedlichen Flips des dekorierten Tilings. An zwei der drei Flips ist das neue Strukturelement des modifizierten Gitters beteiligt. Da die Dekoration dieser Kachel nicht eindeutig ist, sind die atomaren Flips hier ebenfalls nicht eindeutig. Durch unterschiedliche Dekoration erhält man verschiedene atomare Flips. Das neue Strukturelement wurde so mit Atomen belegt, daß möglichst wenige Atome ihre Position änderten. Daraus resultierten drei verschiedene atomare Flips, die durch Sprünge von 9, 16 und 25 Atomen realisiert werden können. Die atomaren Flips wurden in der vorliegenden Arbeit mit geometrischen Mitteln untersucht. Solche Betrachtungen liefern die im Strukturmodell zugelassenen atomaren Flips und erlauben nur sehr eingeschränkte Aussagen über die

Vorgänge in realen Quasikristallen. Aufgrund der großen Anzahl der beteiligten Atome ist die Zuordnung der Atome vor bzw. nach dem Auftreten eines Flips nur schwer möglich. Die zugelassenen Flipstrecken werden dabei teilweise durch Atome blockiert, die ihre Positionen im Verlauf eines Flips nicht ändern müssen. Bezieht man solche Atome in die Betrachtung der möglichen Flips ein, so erhöht sich die Anzahl der am Flip beteiligten Atome und dadurch die Anzahl der möglichen Flipvektoren. Lange Flipstrecken einzelner Atome, die speziell bei den Flips mit 16 und 25 beteiligten Atomen auftreten, lassen sich so in mehrere kürzere Strecken zerlegen. Durch eine solche Zerlegung steigt jedoch die Zahl der beteiligten Atome.

Ziel zukünftiger Arbeiten könnte sein, die Anzahl der an den atomaren Flips beteiligten Atome zu reduzieren. Denkbar ist eine Unterteilung der Flips in mehrere Sprungprozesse. Da die möglichen Flips von den Dekorationen der Kacheln abhängen, könnten die atomaren Flips auch in anderen Dekorationen wie dem Strukturmodell für $i\text{-Al}_3\text{CuLi}_3$ betrachtet werden. Neben den geometrischen Verfahren bieten sich Computersimulationen zur Untersuchung der atomaren Dynamik in Quasikristallen an. In molekulardynamischen Simulationen kann man die atomaren Sprünge ermitteln, indem man die Koordinaten der Atome zu unterschiedlichen Zeiten vergleicht. Molekulardynamische Untersuchungen der atomaren Flips an dekadonalen Phasen von AlCuCo wurden von Bunz [2] und Wolfangel [23] durchgeführt. Vergleichbare Molekulardynamiksimulationen für das binäre ikosaedrische Modell könnten Aufschluß über die atomare Sprungprozesse geben.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Audier, P. Sainfort, B. Dubost: *A simple construction of the AlCuLi quasicrystalline structure related to the $(Al,Zn)_{49}Mg_{32}$ cubic structure type*. Phil. Mag. B. 54 L105-L111, 1986.
- [2] D. Bunz: *Die atomare Dynamik dekadogaler Quasikristalle*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart , 1999.
- [3] R. Blüher: *Messung der Selbst- und Fremddiffusion in $Al_{70,4}Pd_{20,8}Mn_{8,8}$* . Doktorarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart , 1997.
- [4] G. Coddens, S. Lyonnard, Y. Calvayrac: *Time scales and time species in the phason dynamics of AlCuFe quasicrystals*. Phys. Rev. Lett. 78, 22: 4209-4212, 1997.
- [5] C. Dilger : *Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen*. Diplomarbeit , Institut für Theoretische und Angewandte Physik , 1995.
- [6] V. Elser: *The Diffraction Pattern of projected Structures*. Acta Cryst. Sect. A, 42 , 1986.
- [7] B. Grünbaum: *Tilings and Patterns*. W. H. Freeman and Company 1987.
- [8] C. L. Henley: *Sphere packings and local environment in Penrose tilings*. Phys. Rev. B, 34: 797-816 , 1986.
- [9] C. L. Henley, V. Elser: *Crystal and Quasicrystal Structures in Al-Mn-Si Alloys*. Phys. Rev. Lett, 55: 2883-2886 , 1985.
- [10] C. L. Henley, V. Elser: *Quasicrystal Structure of $(Al, Zn)_{49}Mg_{32}$* . Phil. Mag. B , 53: L59-L66 , 1986.
- [11] F. Hippert, D. Gratias: *Lectures on Quasicrystals*. les editions de physique , 1994.
- [12] M. V. Jaric in J. Physique, Colloque C3, Tome 47, julliet 1986.
- [13] P. A. Kalugin, A. Katz: *A mechanism for self-diffusion in quasicrystals*. Europhysics Letters, 21 , 9.: 921-926 , 1993.

- [14] A. Katz, M. Duneau: *Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry*. J. Physique, 47: 181-196, 1986
- [15] P. Kramer, R. Neri: *On Periodic and Non-periodic Space Fillings of \mathbb{E}^m Obtained by Projektion*. Acta Cryst. A 40 , 1984. 580-7
- [16] T. Ogawa: *Material Science Forum Vols. 22-24*: 187-200 , 1987.
- [17] P. J. Steinhardt, S. Ostlund: *The Physics of Quasicrystals*. World Scientific 1987
- [18] D. Levine and P. J. Steinhardt: *Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures*. Phys. Rev. Letters, 53 , 1984.
- [19] J. E. S. Socolar, T. C. Lubensky and P. Steinhardt: *Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals*. Phys. Rev. B, 34 : 3345-3360 , 1986.
- [20] J. Roth: *Stabilität von Quasikristallen*. Diplomarbeit , Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart , 1988.
- [21] G. Schaaf: *Numerische Simulation des mechanischen Verhaltens von Quasikristallen*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart , 1998.
- [22] D. Shechtman , I. Blech , D. Gratias and J. W. Cahn: Phys. Rev. Lett 53 , 1984. 1951.
- [23] D. Wolfangel: *Phasonendynamik in dekadonalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart , 1998.
- [24] A. Yamamoto: *Ideal structure of icosahedral Al-Cu-Li quasicrystals*. Phys. Rev. B, 45: 5217-5227, 1991.
- [25] T. Zoglauer: *Methoden zur Konstruktion Quasikristalliner Strukturen*. Wissenschaftliche Arbeit für das Lehramt an Gymnasien, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart , 1986.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Streifenprojektionsformalismus	7
2.2	Formalismus der atomaren Hyperflächen	9
2.3	Ausschnitt aus dem oktagonalen Ammann-Beenker-Tiling	10
2.4	Triakontaeder	12
2.5	Strukturelemente des Ammann-Kramer-Penrose-Tilings	13
2.6	Erzeugung eines rationalen Approximanten	14
2.7	Flip im oktagonalen Tiling	16
3.1	TI - Dekorationen der Tiles	18
3.2	Übergang zum binären ikosaedrischen Modell	20
4.1	Zweibein	22
4.2	Auswahlfenster	23
4.3	Strukturelemente des modifizierten Tilings	25
4.4	Flip im dreidimensionalen Penrose-Tiling	27
4.5	Parallele Seiten des modifizierten Fensters	28
4.6	Darstellung eines Flips im modifizierten Tiling	29
4.7	Schichtbild des modifizierten Tilings	30
4.8	Schichtbild	31
4.9	Flip im modifizierten Tiling mit einem beteiligten Vertex	32
4.10	Flip im modifizierten Tiling mit zwei beteiligten Vertizes	33
4.11	Flip im modifizierten Tiling mit drei beteiligten Vertizes	34
4.12	Projektion eines Rings aus zehn oblaten Rhomboedern	35
4.13	Dekorationen des neuen Strukturelementes	36
4.14	Projektionsdarstellung des einfachsten atomaren Flips.	37
4.15	Darstellung des atomaren Flips mit neun beteiligten Atomen	39
4.16	Darstellung des atomaren Flips mit 16 beteiligten Atomen	40
4.17	Darstellung des atomaren Flips mit 25 beteiligten Atomen	41

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt dabei Herrn Prof. Hans-Rainer Trebin für die freundliche Aufnahme an seinem Institut.

Johannes Roth und Franz Gähler, die die Betreuung der Arbeit zu gleichen Teilen übernommen haben danke ich für ihre freundliche Unterstützung und die geduldige Beantwortung unzähliger Fragen.

Mein Dank gilt allen Mitarbeitern und dem Sekretariat am Institut für Theoretische und Angewandte Physik für die stets freundliche Hilfsbereitschaft und die angenehme Arbeitatmosphäre.

Danken möchte ich auch allen Kommilitonen und Freunden, die mich durch mein Studium begleitet haben.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mich während meines gesamten Studiums unterstützt haben.